



Title	金属結晶体の破壊機構の分子動力学法による研究
Author(s)	中谷, 彰宏
Citation	大阪大学, 1993, 博士論文
Version Type	VoR
URL	https://doi.org/10.11501/3065884
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

金属結晶体の破壊機構の 分子動力学法による研究

平成4年12月

中 谷 彰 宏

金属結晶体の破壊機構の 分子動力学法による研究

平成4年12月

中 谷 彰 宏

目 次

第 1 章	序 論	1
1.1	金属結晶体の特徴とその力学モデル —研究の目的—	2
1.2	分子動力学シミュレーションの概要	3
1.2.1	歴史的背景	4
1.2.2	最近までの研究	5
1.2.3	き裂進展解析	5
1.3	論文の構成	9
	第 1 章の文献	10
第 2 章	原子集合体モデルと分子動力学法	15
2.1	緒 言	15
2.2	分子動力学法	15
2.2.1	手法の概略	15
2.2.2	巨視的性質と微視的表式	17
2.2.3	運動方程式	19
2.2.4	統計母集団と温度一定の分子動力学法	20
2.2.5	初期条件, 境界条件の一般的な取り扱い	22
2.2.6	運動方程式の数値解法	25
2.3	原子間ポテンシャル	28
2.3.1	分子動力学法で用いられるポテンシャル	29
2.3.2	弾性定数と応力の表式	35
2.3.3	結晶の静力学的安定性	37
2.3.4	有限温度の影響	43
2.4	結 言	43
	第 2 章の文献	44
第 3 章	き裂先端場の連続体モデルによる取り扱い	47
3.1	緒 言	47
3.2	き裂先端場の線形弾性論	48

3-2-1	異方性線形弾性体中のき裂先端の特異応力場	48
3-2-2	特異要素を用いた線形弾性解析	51
3-3	結晶塑性論に基づく定式化	54
3-3-1	構成関係式	54
3-3-2	仮想仕事の原理のマトリクス表示	62
3-3-3	平面問題の取り扱い	65
3-4	結晶塑性論に基づく延性き裂の解析	68
3-4-1	結晶塑性モデル	68
3-4-2	延性き裂の開口, 進展挙動の解析と考察	69
3-5	結 言	77
	第 3 章の文献	77
第 4 章	き裂先端の微視的変形の分子動力学解析	79
4-1	緒 言	79
4-2	モード I 型き裂の解析	80
4-2-1	き裂のモデル化と解析法	80
4-2-2	BCC 結晶中のモード I 型き裂の解析	82
4-2-3	FCC 結晶中のモード I 型き裂の解析	90
4-2-4	モード I 型き裂における境界条件の取り扱いの検討	99
4-3	モード II 型き裂の解析	104
4-3-1	分子動力学解析	104
4-3-2	結晶塑性論に基づく有限要素解析	107
4-3-3	分子動力学解析の結果	110
4-3-4	系のエネルギーの変化	110
4-3-5	臨界せん断応力による K_{II}^* の評価	110
4-3-6	有限要素解析の結果	114
4-3-7	転位発生に関する考察	115
4-4	モード III 型き裂の解析	125
4-4-1	き裂先端場の解析	125
4-4-2	解析結果と考察	128

4-4-3	応力値の線形弾性解との比較	138
4-5	き裂核発生機構のシミュレーション	139
4-5-1	き裂核発生機構のモデル	140
4-5-2	解析結果と考察	143
4-6	結 言	149
	第4章の文献	150
第5章	総 括	153
付録 (I)	単結晶体の単軸引張のシミュレーション	155
I-1	結晶塑性論に基づく解析	155
I-1-1	結晶塑性モデルの特性	155
I-1-2	平面ひずみブロックに生じる局所変形の解析	159
I-2	分子動力学法による解析	161
I-2-1	原子配置の変化	162
I-2-2	荷重変位関係	162
	付録 (I) の文献	166
付録 (II)	FEM-MD 結合解法とその解析例	167
II-1	等価な三角格子による結合解法	167
II-1-1	三角形定ひずみ要素による離散化	167
II-1-2	非線形ばねモデル	169
II-2	解析例	172
II-2-1	時間積分法	173
II-2-2	非線形ばねモデルの特性	175
II-2-3	FEM-MD 結合法による解析	177
II-2-4	き裂進展の解析	177
II-2-5	剛体パンチによる押し込みの解析	180
II-3	結 言	183

付録 (II) の文献	184
付録 (III) 粒界と転位の相互干渉の MD 解析	185
III-1 解析モデルおよび方法	185
III-1-1 解析モデル	185
III-1-2 解析方法	186
III-2 解析結果と考察	187
III-2-1 粒界および転位の緩和	187
III-2-2 粒界と転位の相互干渉	188
III-3 結 言	192
付録 (III) の文献	192
謝 辞	193
関連発表論文	195

第1章 序論

物質系の特性は、原理的には微視的構造のダイナミクスとして評価することが可能である。ここで微視的構造とは、考える物質系の力学(機械的)特性を評価する場合にそれ以上の分解能を要求しないであろうと思われるスケールの構造であり、電子の分布状態を介して結合する原子の配置を素構造とするさまざまなスケールの不均一な物質の分布形態を指している。

これまで、このような視点からは、通常物質系の現実の問題に対処することはできないとされてきている。なぜなら、原子間距離、原子の振動周期を基準と考えると、われわれが接する巨視的物質系の現象との間に、寸法、時間ともに $10^8 \sim 10^{10}$ 倍以上の開きが存在するからである。そこでこのような困難を克服して、物質系を力学的に取り扱うために、通常、連続体モデルが用いられる。連続体モデルでは、物質の微視的構造に起因する複雑さを材料固有の力学特性と考え、力学の枠組みの外から構成関係式として与えられるものとして取り扱う。

しかし、このような構成式を組み込んだ連続体モデルを用いて、材料の力学特性の微視的な詳細を調べることはできない。特に、破壊現象は最も微視的にはき裂先端近傍の局所的な原子配置の組み替えであると考え、このような現象が生じる微視的領域では、力学とは異なる価値観で例えば実験結果などから現象論的に持ち込まれる構成式を導入した連続体モデルではその実体に迫ることが難しい。

そこで、本研究では、分子動力学法 (Molecular Dynamics; MD) を用いて、最も微細な物質組織としての原子集合体を考えて、その動的過程の直接シミュレーションを行なう。連続体力学、主として、弾性論および結晶塑性論に基づくモデルとの比較を通じて、結晶構造体の力学モデルとしての分子動力学法の有効性を検討するとともに、結晶構造(体心立方晶(BCC)、面心立方晶(FCC))、結晶配向、き裂開口様式(モードI, II, III)の異なる金属単結晶中のき裂先端場にかかる破壊機構について実体論的検討を加える。

2 第1章 序論

1.1 金属結晶体の特徴とその力学モデル —研究の目的—

実在する材料は、結晶構造に固有な方向性だけでなく、結晶粒および結晶粒界、表面、界面、その他の構造欠陥(原子空孔、転位など)、あるいは巨視的欠陥(空洞、き裂など)などの構造を有しており、こうしたさまざまな不均一構造との関わりの中で生じる基本的変形のメカニズムのどれをとってみても、巨視的に一様で等方的に見える場合でも、微視的には方向性を持って生じており著しく不均一になっているのが普通である。材料の強さや機能の多くは、このように特定の微視的構造によって支配され、強い構造敏感性を示す。

構造敏感性を強く示す材料の力学特性は、巨視的な性質が微視的な現象の統計力学的平均より評価できるとする構造鈍感な特性と異なり、ミクロからマクロまであらゆる時・空間的スケールの階層構造のダイナミクスが深く関連し結びついている。このような特性に検討を加えるためには、現象のスケールに応じた階層的モデルを構築し、巨視的な力学場と内部の微視的構造との間の階層をこえた相互干渉を取り扱う必要がある。

巨視的力学場との相互作用の下での微視的構造に対する力学問題を完全に解くことは、概念的には可能であるが、近年の計算機能力の飛躍的向上を考え合わせても、多くの場合、現実的な意味を持たないと考えられる。

そこで、通常の連続体力学では、材料に固有な構造に関わる微視的な力学的相互作用を力学問題として意識しないで現象論的構成式として導入することにより、平均化して、微視的構造を陽に含まないまでに粗視化している。これは、細分化した部分の力学的性質が、形状や大きさに依存しない無限に分割可能な物質点を基本としていることを意味している。

このようなモデルを用いた解析では、構造敏感性が強い構造体の示す実相に肉薄できないと考えられる。そこで、本論文では、まず、金属結晶体に固有のすべり系を考えることで連続体力学に構造を持ち込んだ結晶塑性モデルを考えることにより、丸みのあるき裂先端近傍の塑性変形について検討を加える。金属結晶体に原子配置の変化を伴って生じる変形の主要なメカニズムは、転位の移動に伴うすべり、双晶変形のような形で現われる応力誘起変態、拡散などである⁽¹⁾とされる。ここでは、結晶体の変形を特徴づけている塑性挙動の主要な素過程は前2者であると考え

ている。

さらに、微視的な視点から、鋭利なき裂先端では究極的には微視的な原子配置の変化が破壊の素過程であると考え、金属結晶体を原子集合体としてモデル化し、分子動力学法を用いて異なる結晶構造、結晶配向、荷重条件で、き裂先端場に現われる原子構造の変化を調べることを通じて破壊機構のシミュレーションを行ない、現象論的に考えられてきた破壊のクライテリオンのパラメータが微視的な原子集合体の構造解析を通じて求めることができる可能性を追求し、同法が結晶構造体の破壊の実体論的考察のための有効な手段となりうることを示す。

原子集合体モデルを用いた分子動力学解析によって、物質系の特性のことごとくを解明できるわけではなく、連続体モデルによる解析を並行して行なうことによりはじめて、分子動力学解析の真価が発揮されると考える。本研究において連続体モデルのこうした意義について次の二つの視点に注目する。

一つは、現実の材料(解析対象)を原子の集合体だけでモデル化することは不可能であり、き裂先端の局所的な有限領域だけを原子集合体として扱うための境界条件が必要で、連続体モデルを用いることが有効かつ効果的であるということである。

もう一つは、シミュレーションがより厳密に第一原理に近づけば近づくほど、得られる莫大なデータから現象の本質を見抜き、工学的に有用な情報を引き出すことは難しくなるので、それを克服するためには、連続体モデルの視点による知識や解析結果と照らし合わせていくことが不可欠であるということである。

前者に対しては、境界条件の違いが解析結果に与える影響等について検討を加え、後者については、分子動力学法による解析結果を、き裂先端近傍に現われる微視的すべり変形に関して、連続体力学に結晶構造を持ち込んだ結晶塑性論に基づく解析結果、そして、き裂先端近傍の応力分布に関して、線形破壊力学による解と対応させることによって検討を加え、原子集合体モデルと連続体モデルとの相補性について追求する。

1.2 分子動力学シミュレーションの概要

最近の材料科学の最先端技術の多くは、空間的な一様性の破れでありこれまで好ましくない存在として捉えられてきた「格子欠陥」に深く関わっており、欠陥をい

4 第1章 序論

かに制御し、さらには積極的に利用するかが重要になってきている⁽²⁾。一方、微視的な世界を観測するためのいろいろな方法や計測機器が開発される背景の下で、コンピュータの高速化・大容量化を背景に分子動力学法やモンテカルロ法を初めとする数値シミュレーション法によって、現時点では実現することや観測が困難な現象を計算で予測することが可能になってきている。ここでは、物質系を力学的に取り扱うための分子動力学法の可能性をその歴史的背景から検討し、さらに、本論文の主テーマであるき裂の解析についてその有効性と問題点について考察を加える。

1.2.1 歴史的背景¹

第二次世界大戦末期に製作された大型計算機 ENIAC を皮切りに、いわゆる、Neumann 型コンピュータ時代が幕をあげ、続いて、Los Alamos で、大型計算機 MANIAC が作動しはじめると、Metropolis と Ulam によって、中性子拡散問題に対する確率過程について、いわゆる、モンテカルロ (Monte Carlo; MC) 法を用いて解く試みがなされた。そして、同じく Los Alamos 研究所の Teller 夫妻、Rosenbluth 夫妻による、Metropolis の方法を用いて行なった2次元剛体球系の MC シミュレーションの結果が発表されたのが、1953 年のことである。数年後、California 大学 Berkley 校の Alder と、Wainwright は、2次元剛体球モデルで、分子動力学法を用いて解析した結果を発表している。これが分子動力学法の最初の試みである。同じ問題を、Los Alamos の Wood が MC 法を用いて解析し、両者の結果は、詳細に比較検討され良く対応することが示された。Alder の計算は、その後、3次元に拡張され、剛体球系の液相-固相転移いわゆる Alder 転移が発見された。また、Fermi, Pasta, Ulam 等によって、等分配法則の妥当性の検討を目的として、64 個の非調和振動子のシミュレーションが行なわれたのもこの時期で、この研究は、後にソリトンの発見につながっていく。

分子動力学法は、研究の対象となる材料を構成するものを原子、分子、イオンまたは電子などとして把握し、これらの構成粒子の個々の特徴と粒子間に働く力の下での運動法則をもとにして、その材料が持つさまざまな特性を統一的に説明するために行なわれる粒子シミュレーションの一つと位置づけることができる。このよう

¹分子動力学シミュレーションが行なわれるようになった経緯については、Ciccotti らによって編集された文献 (3) の第 1 章が参考になる。

な粒子シミュレーションは、有用な方法論がなかった液体論に大きく寄与し、計算機の大規模利用が可能となるに伴い、材料科学だけでなく、統計物理学、物理化学、固体物理学、生化学、生物物理学の分野で、重要な方法論となりつつある。

さらには、実在しない粒子を仮定してその運動を同様の手法で解析する方法も含めると、土質力学、粉体工学の分野でも同様な手法が用いられる²。

1.2.2 最近までの研究

材料科学・工学への分子動力学の適用については、松宮の詳細な解説・展望⁽⁶⁾⁽⁷⁾に見られるように、MD は材料科学・工学の広い分野で応用され、有効性が認められるようになっている。本論文に直接関係のあるき裂のシミュレーションについては、次節で述べるとして、材料強度に関連する、それ以外の応用例としては、次のようなものがある³。結晶粒界の転位構造^{(10)~(13)}や原子間力と転位論との関わり⁽¹⁴⁾についてもシミュレーションにより明らかにされている。Deymier らは、粒界の溶融・すべりのシミュレーション⁽¹⁵⁾ および Lennard-Jones 系の自由エネルギー計算⁽¹⁶⁾を行なっている。また Ishida ら⁽¹⁷⁾は偏析のある粒界についてのシミュレーションを行なっている。Rabier ら⁽¹⁸⁾はイオン結晶中の転位について調べている。MD 法の要となる原子間ポテンシャルに関する議論もなされている⁽¹⁹⁾。最近では汎用計算機を使用するのではなく、より MD に適した計算機アーキテクチャやアルゴリズムが検討されている。Boyer ら⁽²⁰⁾は並列コンピュータでクラスタの MD 計算を行なっている。トランスピュータを使った解析⁽²¹⁾⁽²²⁾も行なわれている。また、MD ではないが同様な計算手法で行なう重力多体問題のシミュレーションが専用機を用いて行なわれていて⁽²³⁾、今後このような計算機の専用化、並列化が進むものと思われる。

²個別要素法などの近似解法。Cundall⁽⁴⁾は、摩擦材料を剛体球モデルで計算して好結果を与えている。Leu ら⁽⁵⁾は焼結のプロセスをシミュレートしている。ただし、こうした解法は連続体問題の近似解法であり、分子動力学法のように力学的に完結した理論体系に基づくシミュレーションとは峻別すべきものである。

³文献(8)，(9)などが参考になる。

1.2.3 き裂進展解析

き裂の発生，進展は，最も基本的には原子構造の組み換えりによって生じるものであり，原子レベルからの検討が不可欠であることから，分子動力学法の応用問題として早い時期から取り組まれてきている．そうした中で，Chang⁽²⁴⁾の解析は，それまで，主として，結晶体中の転位の芯構造や原子空孔付近の構造を調べるのに用いられていた原子スケールでのコンピュータシミュレーションを金属結晶体中のき裂に適用した先駆的研究である．

シミュレーションの対象と目的

これまでの研究では，主として， α 鉄 (BCC)，FCC 鉄，銅などの金属，および，Si などの半導体中のき裂が MD 法により取り扱われている．そのほかに，Charpenay ら⁽²⁵⁾は，Ni-Al 合金のき裂の挙動を取り扱って，破壊の温度による影響などについて調べている．また，Soules ら⁽²⁶⁾は，分子動力学計算によってナトリウムシリケートガラスのレオロジー的性質と破壊の研究を行なっている．粒界を有する材料のき裂についても調べられている．たとえば，Chang ら⁽²⁷⁾は，MC 法によって，FCC の $\Sigma = 5$ 傾角粒界の構造と不純物原子の偏析について計算し，引張負荷における粒界強度を調べている．

これらのき裂のシミュレーションは，破壊現象を実体論的に調べる視点に立って，き裂進展の微視的なメカニズムと形態（転位・双晶の発生，へき開など）の結晶方位，温度，変形モードによる影響，あるいは，水素，燐などの不純物原子，き裂面のコーティング層などによる影響を調べることを主な目的としている．たとえば，Mullins⁽²⁸⁾は，長距離相互作用を表わす Morse ポテンシャルを用いて，温度の高低や水素原子の有無などのパラメータを変えて，鉄のき裂進展解析を行ない，転位の発生・延性ぜい性転移・水素ぜい化などの現象を調べている．Daw ら⁽²⁹⁾は，Embedded Atom Method を用いて，水素ぜい化のシミュレーションを行なっている．Ishida ら⁽¹⁷⁾は，燐の偏析した鉄の小傾角粒界におけるき裂伝ばについて調べ，燐原子とその周囲の鉄原子が強固なブロックを形成し，き裂はそのブロックを避けてジグザグに進むという結果を得ている．また，Mullins⁽³⁰⁾は，モード I，II 混合モード下でのき裂の挙動について系統的に調べ，き裂先端に現われる機構が，へき

開・転位の発生・双晶変形などの6つの形態に分類できることを示している。

一方、き裂進展のエネルギー障壁の大きさ、lattice trapping⁽³¹⁾⁴の範囲、臨界応力拡大係数の評価 (Griffith の条件との比較)、ぜい性-延性転移温度の評価 (Rice-Thomson の基準⁽³²⁾との比較)、き裂進展速度の評価、などを目的として、力学的な視点に立って、シミュレーションが行なわれている。たとえば、き裂進展におけるエネルギー障壁を評価するために、McCoy ら⁽³³⁾は、ポテンシャルエネルギーの鞍点配置を計算している。Cheung ら⁽³⁴⁾⁽³⁵⁾は、き裂進展におけるさまざまな要因を考慮して、転位生成のエネルギー障壁を再評価し、ぜい性-延性転移に対する Rice-Thomson の基準⁽³²⁾を修正したものを提案している。

また、外力、温度などの諸因子が破壊の条件や形態に及ぼす影響について明らかにする目的で、理想化された2次元の正方もしくは三角格子モデル⁵を用いて調べられることがある。この場合、仮定したポテンシャルの形によっては、解析的考察が可能になるという利点もある。Weiner ら⁽³⁷⁾は理想化した2次元結晶モデルで、応力レベル・温度が、き裂進展速度に与える影響、延性・ぜい性の評価、き裂の形状変化について調べている。Ashurst ら⁽³⁸⁾は、三角格子状に粒子を配置し、動的シミュレーションを行なっている。また、有限要素法との関連についても言及し、Rayleigh 波のスピードとシミュレーションによる結果を比較している。Paskin ら⁽³⁹⁾は、Lennard-Jones 原子間相互作用で特徴付けられる三角形格子のシミュレーションを行ない、Griffith の破壊条件、Rice-Thomson の転位発生評価基準と比較している。Halicioglu ら⁽⁴⁰⁾は、同様なモデルで表面き裂の伝ぱと応力分布について調べている。Baiguzin ら⁽⁴¹⁾は、高低異なる温度条件下での2次元結晶体のき裂成長のメカニズムを調べ、破壊が転位の生成・転位芯のへき開・新しいき裂の生成の三段階からなるという結果を示している。Sieradzki ら⁽⁴²⁾は、動的なき裂の進展シミュレーションを行なっている。また、須賀ら⁽⁴³⁾は界面き裂の解析を行ない、破壊の臨界条件と、負荷モードによるき裂進展形態の違いについて調べている。

⁵ Dienes らの成果をまとめた論文⁽³⁶⁾に詳しい。

き裂のモデル化と境界条件

これらの研究では、原子系に対して緩和法 (Atomic Relaxation), 分子動力学法 (Molecular Dynamics), モンテカルロ (Monte Carlo) 法などの方法を用いて解析される。分子動力学法を緩和の目的で行なう場合には、温度一定の方法⁽⁴⁴⁾が用いられることがある。

初期き裂としては、原子空孔のシートを設けて、あるいは、原子間引力がき裂面を越えてはたらかないと仮定することによって、モデル化される。たとえば、Chang⁽²⁴⁾は、原子を取り除いてつくった空孔シートによりき裂をモデル化している。また、Ishida ら⁽¹⁷⁾は、き裂面に反発力のみを有するポテンシャルを用いている。

解析可能な原子数には制限があるので、系のモデルとして、有限長さのき裂を有する有限寸法の微小結晶に外力を負荷するモデル(あるいは、このモデルに周期境界条件を用いるモデル)と、き裂先端を含む原子領域が、連続体中に埋め込まれているとするモデルが用いられる。後者の場合、原子領域と連続体領域の結合には、さまざまな方法が提案されている。

まず、変位を基準とする方法として、fixed boundary condition, flexible boundary condition, および、連続体領域に有限要素法 (FEM) を適用する方法 (Mullins ら⁽²⁸⁾の方法, Kohlhoff ら⁽⁴⁵⁾の方法) がある。FEM を併用する方法は、非線形性を取り扱える利点がある。Kanninen ら⁽⁴⁶⁾は、 α 鉄の結晶方位異方性を考慮した線形弾性論を用いて、連続体中の原子領域の境界条件として、原子の変位を与える fixed boundary condition を用いて解析を行ない、き裂進展の臨界応力拡大係数を Griffith の値との比較を行なっている。Gehlen ら⁽⁴⁷⁾は、原子領域と連続体領域の間に、原子領域の変位に対応する応答を組み入れた緩衝領域をつくり、より厳密な解析を行なう flexible boundary condition を用いている。Sinclair ら⁽⁴⁸⁾も、flexible boundary condition を用いて Si 中のき裂進展解析をおこない、原子間ポテンシャルの選択が結果に与える影響について調べるとともに、キンク状の変形をするき裂のモデルを用いて進展のエネルギー障壁の大きさを評価している。Mullins ら⁽⁴⁹⁾は、連続体領域を有限要素法で離散化し、原子領域と結合する解法として、原子領域境界まわりの原子が連続体領域に埋め込まれ相互作用するモデルを提案し、この方法の利点をいかして、原子領域を進展に応じて移動させて動的なき裂進展のシミュレ-

ション⁽⁵⁰⁾を行なっている。Kohlhoff ら⁽⁵¹⁾は、き裂先端を含む原子の領域と、非局所弾性特性を示す連続体を有限要素に離散化した領域とを結合するために、原子と有限要素節点を同一視する遷移領域を設けたモデル化を用い、 α 鉄中のき裂進展の結晶方位依存性を調べるシミュレーションを行なっている。また、完全結晶体をこの方法でモデル化して、この結合部の応力の連続性や、動的特性の連続性を調べて、なめらかに結合されることを検証し⁽⁴⁵⁾、さらにこの方法を、金属/セラミックス複合材料の亜界面き裂 (Sub-Interface Crack) に適用している⁽⁵²⁾が、連続体モデルで予測されたき裂の屈曲は見られないという結果を得ている。このように、多くの研究は、原子の変位を基準とした境界条件を用いている。

一方、原子にはたらく力を基準とする方法として、deCelis ら⁽⁵³⁾は、stress fixed boundary condition を提案している。この方法の利点として、き裂先端の原子の変位の非線形応答が妨げられることなく変形するため、進展の臨界応力拡大係数の値が従来の変位境界条件に比べて小さく、Griffith の値にほぼ一致すること、転位が境界の拘束を受けることなく、原子領域を通過することが可能であることを挙げている。

1.3 論文の構成

金属結晶体中に生じ進行する破壊過程を解析することを通じて、原子レベルからの材料強度評価の可能性を示し、連続体モデルによる解析の実体論的な意味を検討を加えることを目的とする本論文は5章から構成され、第2章以降では次のような内容を論じる。

第2章では、分子動力学の基本的な事項について、方程式系を示し、さらに数値計算における具体的な手法を示す。シミュレーションにとって本質的な、ポテンシャルの導入と、その静力学的特性について述べ、これと関連して Born の安定性解析について述べる。

第3章では、き裂先端場の連続体モデルによる取り扱いについて述べる。特に結晶塑性モデルの構成方法と大変形大ひずみを正確に解析するための力学的諸関係式について検討を加える。

第4章では、モード I, II, III の負荷条件の異なるき裂に対して、原子集合体モ

デルによる分子動力学解析を行ない、微視的構造の変化について考察し、結晶塑性論に基づく解析との比較検討結果について述べる。また、転位の相互作用によるき裂核の形成シミュレーションの結果について述べる。

第5章は、本論文の総括である。

なお、結晶塑性論に基づいて有限要素解析を高精度で行なうための基礎的な問題の検討、ならびに分子動力学法の有効性を調べる目的で行なった研究成果を、本文の説明の補足として付録において取り上げる。

付録(I)において、結晶塑性論に基づく連続体モデルおよび原子モデルの基本的な特性を検討するために行なった、単結晶体の単軸引張のシミュレーションについて、付録(II)においては、三角形要素を用いた有限要素法と2体ポテンシャルを用いた分子動力学法の結合解法について述べ、より高精度で、より効率よく解析を行なう方法を検討する。また、付録(III)においては、転位と結晶粒界の相互作用に対する分子動力学シミュレーションについて述べる。

第1章の文献

- (1) Ashby, M.F., *Advances in Applied Mechanics*, **23**, (1983), 117, Academic Press, Inc.
- (2) 片岡俊彦, 大阪大学大学院講義ノート(私信).
- (3) Ciccotti, G., Frenkel, D., and McDonald, I.R. 編, *Simulation of Liquids and Solids —Molecular Dynamics and Monte Carlo Methods in Statistical Mechanics—* (1987), North-Holland.
- (4) Cundall, P.A., *Numerical Experiments on Localization in Frictional Materials*, *Ing.Arch.*, **59**(1989), 148-159.
- (5) Leu, H.J., Hare, T., and Scattergood, R.O., *A Computer Simulation Method for Particle Sintering*, *Acta Met.*, **36**-8(1988), 1977-1987.
- (6) 松宮徹, 材料科学・工学への分子動力学の適用に関する最近の研究動向, 鉄と鋼, **74**-5(1988), 753.
- (7) 松宮徹, 分子動力学法の材料研究への適用, 材料, **40**-452(1991), 509-518.
- (8) Vitek, V. and Srolovitz, D.J. 編, *Atomistic Simulation of Materials —Beyond Pair Potentials—*, (1988), Plenum Press.
- (9) Tersoff, J., Vanderbilt, D., and Vitek, V. 編, *Atomic Scale Calculations in Materials Science —Symposium held November 28-December 1, 1988 Boston, Massachusetts, U.S.A.—*, (1989), Materials Research Society

- (10) Serra, A., Bacon, D.J., and Pond, R.C., The Crystallography and Core Structure of Twinning Dislocations in H.C.P. Metals, *Acta Met.*, **36**-12(1988), 3183-3203.
- (11) Majid, I. and Bristowe, P.D., Dynamical Simulation of Structural Multiplicity in Grain Boundaries, *Scripta Met.*, **21**(1987), 1153-1157.
- (12) Schwartz, D., Bristowe, P.D., and Vitek, V., Dislocation Structure and Energy of High Angle [001] Twist Boundaries: A Computer Simulation Study, *Acta Met.*, **36**-3(1988), 675-687.
- (13) Vitek, V., Smith, D.A., and Pond, R.C., Structure of Tilt Grain Boundaries in B.C.C. Metals, *Philos.Mag.,A*, **41**-5(1980), 649.
- (14) Vitek, V., Interatomic Forces in Relation to the Theory of Dislocations, *Philos.Mag.,A*, **58**-1(1988), 193-212.
- (15) Deymier, P. and Kalonji, G., Effect of Grain Boundary Melting on Sliding in Bicrystals: A Molecular Dynamics Study, *Scripta Met.*, **20**(1986), 13-17.
- (16) Deymier, P. and Kalonji, G., Calculation of Free Energies of Lennard-Jones Crystals via Molecular Dynamics, *J.Chem.Phys.*, **85**-5(1986), 2937-2942.
- (17) Ishida, Y., Mori, M., and Hashimoto, M., Molecular Dynamical Calculation of Crack Propagation in Segregated Grain Boundaries of Iron, *Surf.Sci.*, **144**(1984), 253-266.
- (18) Rabier, J. and Puls, M.P., On the Core Structures of Edge Dislocation in NaCl and MgO. Consequences for the Core Configurations of Dislocation Dipoles, *Philos.Mag.,A*, **59**-4(1989), 821-842.
- (19) Doan, N.V., Molecular Dynamics and Defects in Metals in Relation to Interatomic Force Laws, *Philos.Mag.,A*, **58**-1(1988), 179-192.
- (20) Boyer, L.L. and Pawley, G.S., Molecular Dynamics of Clusters of Particles Interacting with Pairwise Forces using a Massively Parallel Computer, *J.Comput.Phys.*, **78**(1988), 405.
- (21) Alda, W. and Moscinski, J., Molecular Dynamics Simulation of Superionic Conductors on an IBM/XT Personal Computer with Transputer Board, *Philos.Mag.,A*, **64**-5(1991), 1145-1158.
- (22) Boillat, J.E., Bruge, F., and Kropf, P.G., A Dynamic Load-Balancing Algorithm for Molecular Dynamics Simulation on Multi-processor Systems, *J.Comput.Phys.*, **96**(1991), 1-14.
- (23) Sugimoto, D., Chikada, Y., Makino, J., Ito, T., Ebisuzaki, T., and Umemura, M., A Special-Purpose Computer for Gravitational Many-Body Problems, *Nature*, **345**(1990), 33-35.
- (24) Chang, R., An Atomistic Study of Fracture, *Int.J.Fract.Mech.*, **6**-2(1970), 111-125.
- (25) Charpenay, S., Clapp, P.C., Rifkin, J.A., Yu, Z.Z., and Voter, A.F., Molecu-

- lar Dynamics Study of Crack Propagation in Ni-Al, (Ed. by Tersoff, J., Vanderbilt, D., and Vitek, V., *Atomic Scale Calculations in Materials Science — Symposium held November 28- December 1, 1988, Boston, Massachusetts, U.S.A.* —), (1989), 323-329, Materials Research Society.
- (26) Soules, T.F. and Busbey, R.F., The Rheological Properties and Fracture of a Molecular Dynamic Simulation of Sodium Silicate Glass, *J.Chem.Phys.*, **78**-10(1983), 6307-6316.
 - (27) Chang, H.K., Weidman, R.S., and Lee, J.K., An Atomistic Study of Grain Boundary Segregation and Cracking, *Surf.Sci.*, **144**(1984), 224.
 - (28) Mullins, M., Computer Simulation of Fracture using Long Range Pair Potentials, *Acta Met.*, **32**-3(1984), 381-388.
 - (29) Daw, M.S. and Baskes, M.I., Semiempirical, Quantum Mechanical Calculation of Hydrogen Embrittlement in Metals, *Phys.Rev.Lett.*, **50**-17(1983), 1285-1288.
 - (30) Mullins, M., Atomic Simulation of Cracks under Mixed Mode Loading, *Int.J.Fract.*, **24**(1984), 189-196.
 - (31) Thomson, R., Hsieh, C., and Rana, V., Lattice Trapping of Fracture Cracks, *J.Appl.Phys.*, **42**-8(1971), 3154-3160.
 - (32) Rice, J.R. and Thomson, R., Ductile versus Brittle Behaviour of Crystals, *Philos.Mag.*, **29**(1974), 73-97.
 - (33) McCoy, J.K. and Markworth, A.J., Calculation of the Saddle-Point Configuration for an Atomistic Crack-Tip Model, *Scripta Met.*, **20**(1986), 905-908.
 - (34) Cheung, K.S. and Yip, S., Brittle-Ductile Transition in Intrinsic Fracture Behavior of Crystals, *Phys.Rev.Lett.*, **65**-22(1990), 2804-2807.
 - (35) Cheung, K.S., Argon, A.S., and Yip, S., Activation Analysis of Dislocation Nucleation from Crack Tip in α -Fe, *J.Appl.Phys.*, **69**-4(1991), 2088-2096.
 - (36) Dienes, G.J. and Paskin, A., Molecular Dynamic Simulations of Crack Propagation, *J.Phys.Chem.Solids*, **48**-11(1987), 1015-1033.
 - (37) Weiner, J.H. and Pear, M., Crack and Dislocation Propagation in an Idealized Crystal Model, *J.Appl.Phys.*, **46**-6(1975), 2398-2405.
 - (38) Ashurst, W.T. and Hoover, W.G., Microscopic Fracture Studies in the Two-Dimensional Triangular Lattice, *Phys.Rev.,B*, **14**-4(1976), 1465-1473.
 - (39) Paskin, A., Gohar, A., and Dienes, G.J., Computer Simulation of Crack Propagation, *Phys.Rev.Lett.*, **44**-14(1980), 940-943.
 - (40) Halicioglu, T. and Cooper, D.M., A Computer Simulation of the Crack Propagation Process, *Mater.Sci.Eng.*, **79**(1986), 157-163.
 - (41) Baiguzin, E.Y., Melker, A.I., and Mikhailin, A.I., Atomic Mechanisms of

- Fracture Nucleation and Fracture Development in Two-Dimensional Crystals in Thermodynamic Equilibrium, *Phys.Stat.Sol.(a)*, **108**(1988), 205-218.
- (42) Sieradzki, K., Dienes, G.J., Paskin, A., and Massoumzadeh, B., Atomistics of Crack Propagation, *Acta Met.*, **36-3**(1988), 651-663.
 - (43) 須賀唯知・舟橋章・高橋裕, 分子動力学的手法による界面き裂の解析, 日本機械学会論文集, **57-535**, A 編, (1991), 678-685.
 - (44) Nosé, S., A Unified Formulation of the Constant Temperature Molecular Dynamics Methods, *J.Chem.Phys.*, **81-1**(1984), 511-519.
 - (45) Kohlhoff, S., Gumbsch, P., and Fischmeister, H.F., Crack Propagation in b.c.c. Crystals Studied with a Combined Finite-Element and Atomistic Model, *Philos.Mag.,A*, **64-4**(1991), 851-878.
 - (46) Kanninen, M.F. and Gehlen, P.C., Atomic Simulation of Crack Extension in BCC Iron, *Int.J.Fract.Mech.*, **7**(1971), 471-474.
 - (47) Gehlen, P.C., Hahn, G.T., and Kanninen, M.F., Crack Extension by Bond Rupture in a Model of BCC Iron, *Scripta Met.*, **6**(1972), 1087-1090.
 - (48) Sinclair, J.E., The Influence of the Interatomic Force Law and of Kinks on the Propagation of Brittle Cracks, *Philos.Mag.*, **31**(1975), 647-671.
 - (49) Mullins, M. and Dokainish, M.A., Simulation of the(001)plane crack in Alpha-Iron Employing a New boundary Scheme, *Philos.Mag.,A*, **46-5**(1982), 771-787.
 - (50) Mullins, M., Molecular Dynamics Simulation of Propagating Cracks, *Scripta Met.*, **16**(1982), 663-666.
 - (51) Kohlhoff, S., Schmauder, S., and Gumbsch, P., A New Method for Coupled Elastic-Atomistic Modelling, (Ed. by Vitek, V. and Srolovitz, D.J., *Large Atomistic Simulation of Materials — Beyond Pair Potentials —*), (1988), 411-418, Plenum Press.
 - (52) Kohlhoff, S., Schmauder, S., and Gumbsch, P., Coupled Atomistic-Continuum Calculations of Near Interface Cracking in Metal/Ceramic Composites, *Metal-Ceramic Interface, Acta-Scripta Met.Proc.Ser.*, Vol.4(1990), 63-70, Pergamon Press.
 - (53) deCelis, B., Argon, A.S., and Yip, S., Molecular Dynamics Simulation of Crack Tip Processes in Alpha-Iron and Copper, *J.Appl.Phys.*, **54-9**(1983), 4864-4878.

第2章 原子集合体モデルと分子動力学法

2.1 緒言

金属結晶体の力学特性の評価を目的とする原子集合体モデルを用いたシミュレーションに必要な分子動力学法 (MD 法) の基礎理論について述べる。

まず、統計力学の直接シミュレーションとして、MD 計算が、微視的表式をどのように巨視的性質に反映させているのかについて、MD 法は本質的には時間的に変化する微視的量を追跡し直接的に巨視的な性質を求める方法であるということを、時間を考慮しないで同様の目的を達成する MC 法と比較し、続いて、さらに本論文でも用いる温度一定の MD 法について述べる。最後に、実際の解析における初期値、境界条件の与え方の例と運動方程式の数値解法などの計算上の技法について述べる。

後半では、ポテンシャル、静力学的安定性の評価について述べる。

2.2 分子動力学法

2.2.1 手法の概略¹

現在、分子シミュレーションと呼ばれている方法には、MC, MD, MM (分子力学法; Molecular Mechanics 法) がある。MC, MD が分子集合体の主として分子間力の計算を行なうのに対し、MM は分子そのものに対して分子内での計算を行なうことを目的として、主に有機化学の分野で分子の構造や反応性などの特徴を決定することが行なわれている。本論文では原子集合体としての金属結晶体を考えるので、MM は有効な解析法とはなり得ないが、グラフィックコンピュータを用いた計算機援用分子設計の手法が化学研究の分野で非常に重要な研究手段となっていることは注目すべきことである。

MD 法と MC 法のそれぞれの特徴をまとめると次のようになる。

まず、MC 法は入力パラメータとして粒子間のポテンシャルを用い、粒子の数密

¹分子動力学法の理論と方法論については、文献 (1)~(11) が参考になる。

度、温度、粒子の初期配置を決めて、粒子の位置を計算機で発生させた乱数を用いて、考える粒子集合体(アンサンブル)の特性から要求される確率過程にしたがって次々と変えていき、そこから構造、熱力学量などを計算する。ふつう初期配置は任意であり結果はそれに依存しない。時間の概念が含まれていないため動的挙動は調べられない。

一方、MD法は入力パラメータとして粒子間の力を用いる。この力は、通常、ポテンシャルから誘導する形で扱われる。そのほかに、粒子数、体積、粒子の質量、タイムステップ、初期配置を決めて計算を行なう。詳細については第3章以降で述べる。

同じポテンシャルを用いたMCとMDによる計算が平衡系に対して一致することが明らかにされているが²、MCとMDには一般に次のような相違点がある。

1. MCでは時間に依存する量が求められないが、MDでは求めることができる。
2. MDは古典力学にしたがって粒子の運動を追跡するのに対して、MCでは乱数を用いた確率過程にしたがって配置を決定していくので、普通はMCのほうが平衡に達するのに計算時間を必要とする。
3. MCでは温度一定の条件が、MDでは内部エネルギー一定の条件が実現しやすい。
4. MDではステップ数を重ねていくと計算誤差が蓄積するが、MCでは試行を繰返すほど精度がよくなる。

MC、MDにはそれぞれ、次のような欠点がある。

1. 用いるポテンシャルの良否によって結果の良否が大きく左右されさまざまな物性値を同時に良く再現できるようなポテンシャルを見つけることは未だに難しい(MD, MC)。
2. 粒子の数が現実の系に比べて圧倒的に少ない(MD, MC)。
3. 時間経過を追跡することができるが、せいぜいピコ秒で計算できる程度までである(MD)。

²第1章で述べたように、1957年 Wood らのグループと Alder らのグループによって発表されたものである。MC、MDの結果が一致するという事実は、エルゴード仮説に対する証明といえる。

4. 量子効果のある現象を再現することは困難であり、電子の移動を伴う化学反応現象の追跡は通常のやり方では難しい(MD)。
5. 対象を分子内の原子間レベルまで広げた場合、分子の多様性を反映して、莫大な数の分子内のみならず分子間に作用する原子間ポテンシャルパラメータを必要としてなかなか対応しきれない(MC, MD)。

最近、両者の利点を生かして、MC と MD の結合解法が検討されてきている。本研究で検討の対象とする材料の破壊現象は本質的に非平衡系として捉えられるべきものであり、MD による解析が有効であると考えられる。

2.2.2 巨視的性質と微視的表式

われわれの実験・計測で獲得できる材料特性は、巨視的・現象論的な量の関係である。そのような特性はその材料を構成する多様な微視的組織とその動的な変化に関係している。

ある対象について測定して得られる量は巨視的な性質であり、計測系に固有な空間的/時間的分解能を単位とした平均的な量である。この巨視的な性質の一つを X とする。この X に対して、対象を構成する原子や分子の基本的な属性で表わされた微視的な力学量 x が対応するとする。この微視的な量 x は時間 t の関数であって、しかも非常に短い時間スケールで複雑に変動しているから、われわれが巨視的な性質 X を測定する場合に要する時間の長さは、 $x(t)$ の変動のスケールに比べると非常に長い。仮に $x(t)$ の時間変動を正確に記述できるものとすれば、巨視的な性質 X の測定値は次式で計算される値であると考えられる。

$$X = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T x(t) dt \dots\dots\dots (2.1)$$

右辺の意味は、時刻 ($t = 0$) から十分に長い時間 ($t = T$ まで) にわたる $x(t)$ の時間平均の $T \rightarrow \infty$ の極限での値を意味する。式 (2.1) の右辺を正確に評価するためには多数の構成粒子の運動を完全に知るための膨大な量の計算が必要である。そこで、微視的な量 x から対応する巨視的な性質 X を計算する理論形式として、微視的な尺度での対象の状態の基本的な内容に関する仮定として、統計力学の方法論が考えられている。とくに、熱平衡状態にある体系の巨視的性質に関する統計力学の

理論は、統計熱力学と呼ばれ、Gibbs の母集団 (アンサンブル) による理論に代表される。

熱平衡状態にある現実の対象に対して、構成粒子と熱力学的束縛条件が全く同じであるような多数の体系を一つの集団 (アンサンブル) とみなす。この集団を構成しているどの要素 (体系) も構成粒子の微視的状态が上記の条件でとりうる状態の一つになっている。したがって、集団の要素ごとに微視的な量 x の値も一般に同じではない。しかし、どの要素も同じ数だけの膨大な構成粒子から成り立っているから、集団全体にわたる x の値のばらつきには一定の規則性 (分布) が現われる。Gibbs は巨視的な性質 X の測定値が次式で与えられるとした。

$$X = \langle x \rangle \dots\dots\dots (2.2)$$

右辺の意味は、母集団の要素一つ一つに関する x の値の母集団全体にわたる統計平均 (正確には母集団の要素数が ∞ となる極限における平均) をとることを表わしている。熱力学的な束縛条件に対し、特有の母集団が対応し特定の統計分布則を持つ。

式 (2.1) の正当性と、式 (2.1) と式 (2.2) の等価性を考察する問題は、エルゴード問題と呼ばれる。

さきに述べたように式 (2.1) の右辺の計算は非常な困難を伴う。そこで式 (2.2) で要約される Gibbs の方法を公式として計算を行なう。このやり方は理論的に簡明で計算方法も原理的には明らかである。しかしながら、現実の対象に適用して公式どおりに計算しようとするとな数学的に多くの困難 (超多重積分など) に出会う。そこで計算機を用いて要素一つ一つについて x の値を求めて母集団平均を計算する方法が考案された。要素の数が ∞ の母集団を実際に考えることは不可能だが、各要素が母集団において現われる頻度に正しくしたがって現われるような多数の微視的状态の要素の集団 (標本集団) を作りだす手法を Metropolis が考案した (Metropolis の方法)。この標本集団の作成方法に乱数を利用して作成するのでモンテカルロ法 (Monte Carlo; MC) と呼ばれる。

一方、統計力学の原点に立ち戻り、興味ある対象のひな型を考えて構成粒子の微視的な運動をできる限り正確に追跡し、式 (2.1) の右辺の積分を忠実に行なう手法が、分子動力学法 (Molecular Dynamics; MD) である。

2-2-3 運動方程式

分子動力学法は、一口でいえば微視的な量 x の理論的表式が確定している場合に、式(2-1)の右辺を計算することによって巨視的な性質 X の値を計算する方法である。最も基本的な体系として内部自由度を有しない N 個の原子からなる系を考える。個々の原子は、古典力学、すなわち Newton の運動方程式にしたがうものとする。 i 番目の原子の質量を m_i 、位置ベクトルを $\mathbf{q}_i \equiv \mathbf{q}_i(t)$ 、($i = 1, 2, \dots, N$) とすると、各原子の運動方程式は次のようになる。

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{q}_i}{dt^2} = - \frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{q}_i} \equiv \mathbf{F}_i(t) \quad (i = 1, 2, \dots, N) \quad \dots\dots\dots (2-3)$$

ここで、 Φ は体系の全ポテンシャルエネルギー、 $\mathbf{F}_i(t)$ は時刻 t において i 番目の原子が他の原子から受ける相互作用力であり、その時刻の原子の配置によって決定される。これらの式は、3次元空間においては、 $3N$ 個の連立2階常微分方程式となっている。

ここで、系全体のポテンシャルエネルギーは任意の2個の原子間にはたらく2体力ポテンシャルの和で与えられるとする対相互作用の近似、あるいは2体力近似が成り立つと考えると、 $\mathbf{F}_i(t)$ は、

$$\mathbf{F}_i(t) = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \mathbf{F}(\mathbf{q}_i(t), \mathbf{q}_j(t)) \quad \dots\dots\dots (2-4)$$

と表わせる。さらに2体力ポテンシャルが2個の原子間の距離 r だけの球対称な関数形 $\phi(r)$ によって定められるとき、

$$\Phi = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \phi(q_{ij}) \quad \dots\dots\dots (2-5)$$

であり、

$$\mathbf{F}(\mathbf{q}_i, \mathbf{q}_j) = - \frac{d\phi(r)}{dr} \bigg|_{r=q_{ij}} \frac{\mathbf{q}_{ij}}{q_{ij}} \quad \dots\dots\dots (2-6)$$

と表わされる。ここで、 $\mathbf{q}_{ij} \equiv |\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j|$ 、 $q_{ij} = |\mathbf{q}_{ij}|$ である。

2.2.4 統計母集団と温度一定の分子動力学法

ここでは、統計力学で導入されるさまざまな統計母集団 (アンサンブル) とこれらを実現するために考案された MD 法について述べ、その中で、本研究で実際に用いる温度一定の MD 法について簡単に説明する。

統計母集団 (アンサンブル)

前節の式 (2.3) を用いる MD 法では、原子の集団が外部から力学的に切り離されていて体系の体積 V が一定に保たれる場合、体系の全エネルギー E が全ての時間を通じて一定に保たれる、すなわち、 (N, V, E) が指定された条件のもとでの時系列記録を作成することになっている。このような外界との接触のない孤立系を表わす集団を統計力学では小正準集団 (マイクロカノニックアンサンブル) と呼ぶ。多数の粒子からなる体系の熱平衡状態は非常に少数の熱力学的変数 (制御変数) の値を指定することにより決まってしまう。巨視的体系の熱力学的性質を微視的な粒子に関する情報から導き出す統計母集団は制御変数のとり方によりいろいろ考えられる。

実際に測定される巨視的性質は温度 T が一定または圧力 p が一定であることが多い。これらは、それぞれ (N, T, V) が指定された正準集団 (カノニックアンサンブル) や (N, T, p) が指定された $T-p$ 集団に対応する。融解や凝縮などの相転移現象や高圧下での結晶構造の変態などの微視的な考察を行なうためには、 T 一定、あるいは p 一定の条件のもとで時系列記録を作成することが必要である。

エネルギー一定の小正準集団の MD 法では、運動エネルギーの自由度とポテンシャルエネルギーの自由度との間でエネルギーの再分配が起こり初期に与えた運動エネルギーの総和 (温度) が変化する。このため、時系列を作成する過程で全原子の速度をいっせいにある割合だけ変化させる。これを速度スケールリングと呼ぶ。この方法によって、系を目的の温度に設定することができる。しかし定常的な時系列の区間でも目的とする温度 T を平均値としてゆらぎが生じることになり、制御変数として T を導入したことにはならない。これは、圧力 p についても同様である。

これまでに、このような温度・圧力を一定とする条件のもとでの MD 解析法が種々考察されている。Andersen⁽¹²⁾によって導入された圧力一定の MD 法は Parrinello と Rahman⁽¹³⁾⁽¹⁴⁾により斜方晶形に拡張され、結晶形の相変態のシミュレーション

に用いられている。温度一定の MD 法は Woodcock⁽¹⁵⁾が提案した速度のスケーリング法を Hoover⁽¹⁶⁾らが束縛法に発展させた。これらの方法は能勢⁽¹⁷⁾によって集大成され、等温等圧のもとで結晶化のシミュレーション⁽¹⁸⁾が行なわれた。能勢により提案された温度一定の MD 法は、ここで解析する原子系に対しても有効と考えられる。

温度一定の分子動力学法

能勢による方法は、束縛 MD 法の一様であると考えられることができる。

束縛法 束縛法では、式 (2.3) の右辺に摩擦力に類似した形の項を付け加える。すなわち、

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{q}_i}{dt^2} = -\frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{q}_i} - \zeta m_i \frac{d\mathbf{q}_i}{dt} \quad \dots\dots\dots (2.7)$$

ここで、 ζ は次の束縛条件が全ての時刻で成立するように決定される変数である。

$$\sum_{i=1}^N \frac{m_i}{2} \left(\frac{d\mathbf{q}_i}{dt} \right)^2 = \frac{kT}{2} (3N - 1) \quad \dots\dots\dots (2.8)$$

式 (2.8) の両辺を時間 t で微分した結果に式 (2.7) を代入して整理すると、

$$\zeta = -\frac{d\Phi}{dt} \cdot \frac{1}{(3N - 1)kT} \quad \dots\dots\dots (2.9)$$

を得る。各時刻で式 (2.9) によって ζ を決定すると時系列は温度が一定値 T をとることになる。また、こうして得られた時系列記録は座標については正準集団での結果と一致する。

能勢の方法 一方、能勢が提案した温度一定拡張系の MD 法⁽¹⁷⁾は、一つの自由度を持つ熱浴が、考える体系と接触しているとする方法で、式 (2.7) の右辺の第二項の ζ は、この熱浴を表わす体系の運動を考慮することにより導入されるとする。 ζ は次式で表わされる。

$$\frac{d\zeta}{dt} \equiv \frac{d^2(\log_e s)}{dt^2} = \frac{1}{Q} \left(\sum_{i=1}^N m_i \left(\frac{d\mathbf{q}_i}{dt} \right)^2 - 3NkT \right) \quad \dots\dots\dots (2.10)$$

ここで、 ζ と同様に熱浴の体系の運動を表わす変数 s が導入されている。 T は指定される温度、 k は Boltzmann 定数、 Q は熱浴を表わす体系の質量に相当す

る定数である。2.2 節で述べたエネルギー一定の MD では、次に示す古典力学系の Hamiltonian H_0 (= 全エネルギー E) ,

$$H_0 = \sum_{i=1}^N \frac{m_i}{2} \left(\frac{d\mathbf{q}_i}{dt} \right)^2 + \Phi(\mathbf{q}) \dots\dots\dots (2.11)$$

が保存量であるが、この全体系では、次式の H ,

$$H = H_0 + \frac{1}{2} Q \zeta^2 + 3NkT \log_e s \dots\dots\dots (2.12)$$

が保存量となる。このようにして、 H_0 を変動させることが可能になる。

この拡張系の方法では、仮想的な熱浴を含む系全体のエネルギーが一定に保たれていて、この意味では小正準集団に対応している。しかし、 N 粒子系の部分だけを問題とした場合には、正準集団に対応する。

拡張系の方法を式 (2.9) を用いる束縛法と比較すると、束縛法では変数 ζ を束縛条件から直接決定していたのに対し、この拡張系の方法では運動方程式にしたがって時間変化する量と考えている点が異なる。拡張系の方法に全運動エネルギーが一定という条件を加えることによって束縛法に一致する。

2.2.5 初期条件、境界条件の一般的な取り扱い

MD 解析では式 (2.3) の 2 階の連立常微分方程式の初期値問題を解く。初期値は各原子に対して最初の基準時間の位置と速度を与える。初期条件の設定が妥当であれば位置と運動量の時系列記録はやがて定常になり考えている対象の熱力学的な平衡状態の微視的記録と見なすことができる。巨視的性質 X に対する微視的量 x が原子の位置と速度の関数として定式化されている場合、式 (2.1) を直接積分して X を求めることができる。

初期条件の与え方

ここで取り扱うような古典力学にしたがう N 体問題は可逆現象で、初期値とある時間経過後の値には因果関係がある。考えている対象の微視的な時系列記録はこの初期条件によって一意に決定される。このため初期条件の与え方は計算の良否を左右する。ここでは、位置と速度の初期値の与え方の一例を示す。変位の大きさ δ

と速度 v を各原子に対してランダムに与える。すなわち、 i 番目の原子の位置 q_i と速度 v_i を、

$$q_i = q_{i0} + \delta \omega_i \dots\dots\dots (2.13)$$

$$v_i = v \theta_i \dots\dots\dots (2.14)$$

とする。ただし、 q_{i0} は基準格子点の位置、 ω_i 、 θ_i はともにランダムに与えた立体角方向を表わす単位ベクトルである。 δ と v は、ここでは次式を用いることとする。

$$\delta = \sqrt{\frac{3h^2T}{m_i k \Theta}} \dots\dots\dots (2.15)$$

$$v = \sqrt{\frac{kT}{m_i}} \dots\dots\dots (2.16)$$

ここで、 h は Planck 定数、 Θ は Debye 温度である。これらの式から初期条件が定まり、 $t = 0$ の体系のエネルギーが定まる。

もう一つの方法として、初期原子配置を基準格子点の位置とし、初期速度を Maxwell の速度分布則、

$$f(u, v, w) = N \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left(\frac{-m(u^2 + v^2 + w^2)}{2kT} \right) \dots\dots\dots (2.17)$$

を満たすように、決定する方法も用いている。ここで、 f は速度分布関数、 u, v, w は、それぞれ速度の x, y, z 成分を表わす。

周期境界条件と最近接鏡像法

解析で取り扱うことができる原子数 N は、実際の材料を構成する原子数が Avogadro 数程度であることに比べて非常に小さいが、巨視的な特性の本質はある程度の数の原子からなる集団の様相から説明できると考える。

分子動力学シミュレーションによって、取り扱える原子数は、現在の最高速のスーパーコンピュータを用いても限られているので、バルク状態の特性を調べる場合次のような工夫をする。巨視的材料の内部に基本枠を想定し、この内部に N 個の原子を配置する。基本枠(基本セル)にはふつう立方体あるいは斜方体が用いられる。ここでは立方体の場合について考える。

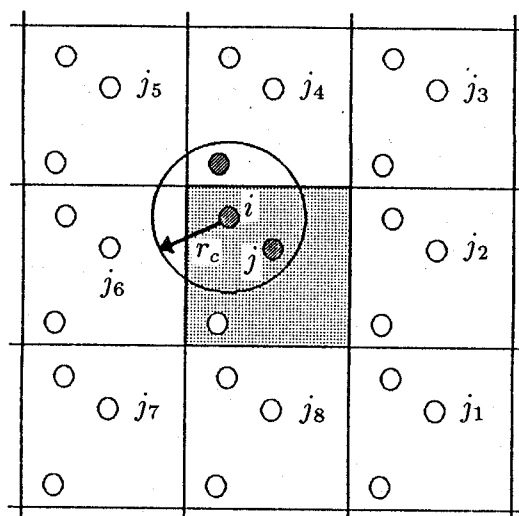


図 2.1 周期境界条件と最近接鏡像法 (2次元の例)

基本枠の表面が仮想的なものであることを表現するために周期境界条件 (periodic boundary condition) の考え方が用いられる. 図 2.1 のように立方体の各面に接して基本枠と (その形と内部の原子配置が) 全く同一の仮想的枠 (イメージセル) が計算機内部で三次元的に並んでいるものとする. そして, この基本セルと境界を接するイメージセルとの間で次の原子間相互作用を考える. 図において, i 番目の原子が j 番目の原子から受ける作用を考えるとき, ij 原子間の距離が j およびその鏡像 ($j_1, j_2, \dots, j_8$) のうちで i に対して最も近いもの (図では, j_4) で計算する方法, すなわち, 最近接鏡像法 (minimum-image-distance 法) を用いる. また, シミュレーション中に基本セルから飛び出した粒子は, 相対する壁から入ってくるものとする.

運動方程式は, 基本セル内の N 個の粒子について解くが, 粒子にはたらく力には, 基本セル, イメージセルの区別をせず, 力の切断距離 (粒子間の力がはたらかなくなる距離) r_c 以内のすべての粒子から受ける力を含める.

材料の不均質な構造を調べる場合は, このような周期境界条件によるモデル化には, 注意が必要である. たとえば, 転位の転位線の方法に周期境界条件を適用するとある程度その方向の基本セルの大きさが小さいとキンクした変形が生じにくくなる.

2.2.6 運動方程式の数値解法

MD 法に限らず重力多体問題など一般に N 体問題は、数値計算の視点からは多元の連立常微分方程式を解くことに帰着する。MD 法の場合、時間に関する 2 階の常微分方程式を解くことになるが、この問題は 1 階の連立常微分方程式を解くことに帰着させることができる。そこで、最も簡単な Euler 法をはじめとして Runge・Kutta 法、Adams の方法など一般的な常微分方程式の解法を用いることが可能である。

式 (2.7), (2.8), (2.10) で表わされる方程式系を数値積分する方法について考える。座標 q_i , 運動量 p_i , 熱浴の体系を表わす変数 ζ , $\log_e s$ をそれぞれ独立な時間の関数であるとして、次の式 (2.18)~(2.21) の連立 1 階微分方程式に置き換える。

$$\frac{dq_i}{dt} = \frac{p_i}{m_i} \dots\dots\dots (2.18)$$

$$\frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial \Phi}{\partial q_i} - \zeta p_i \dots\dots\dots (2.19)$$

$$\frac{d\zeta}{dt} = \frac{1}{Q} \left(\sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{m_i} - 3NkT \right) \dots\dots\dots (2.20)$$

$$\frac{d(\log_e s)}{dt} = \zeta \dots\dots\dots (2.21)$$

そうすると、一般的な n 元連立常微分方程式の初期値問題、

$$\left. \begin{array}{l} \frac{dx_i}{dt} = f_i(t, x_1, x_2, \dots, x_n), \\ x_i(t_0) = x_i^0 \quad (i = 1, 2, \dots, N) \end{array} \right\} \dots\dots\dots (2.22)$$

に帰着される。これを解く場合、通常の MD 計算では、右辺の関数 f_i の値の計算に時間がかかり、長時間にわたる積分を行なう場合、この計算の回数が増えることは好ましくない。例えば同じ精度の Runge・Kutta 法と Adams の方法では、前者では 1(時間) 増分あたり 4 回、後者では予測と修正を合わせて 2 回計算しなければならず計算時間の面で不利である。そこで、MD 法では、右辺の関数の計算が 1 時間増分あたり 1 回だけでよい Verlet の方法や Gear の方法がよく用いられる⁽⁵⁾。

Verlet の方法は、簡便で高精度が得られ安定なので MD 法によく用いられるが、速度の評価において、誤差が大きくなる欠点がある。小正準集団の MD 法では運動

方程式は速度を含まない座標だけの形式になるので高い精度が得られるが、温度一定の MD 法のように速度が含まれると式の簡単さが失われるうえ、速度の誤差が座標に伝播するので精度が悪くなる。そこで、本論文では、Verlet の方法とならんで、MD 法でよく用いられる次に述べる Gear の方法を用いる。

Gear の方法

Taylor 展開を用いて公式を導くいわゆる Taylor 展開法の一つである。ここでは、第4章で用いる5次精度の公式について述べる。Taylor 展開を高次の微分まで考えることによって公式の精度を上げることが可能であるがそれは必ずしも解の精度を上げることにはならない⁽¹⁹⁾。

温度一定の MD 法の場合、式(2.18)~(2.21)の解析を進めることになるが、ここでは $\log_e s$ を広義の q に含めて考えると、運動方程式は、

$$\frac{d^2 q_i}{dt^2} = F_i \left(q, \frac{dq}{dt} \right) \dots\dots\dots (2.23)$$

と表わせる。まず、次に示す、ステップ n での i 番目の原子 ($i = 1, 2, \dots, N$) についてベクトル $Y_i^{\{n\}}$ を考える。

$$Y_i^{\{n\}} = \left(q_i^{\{n\}}, \Delta t \dot{q}_i^{\{n\}}, \frac{1}{2}(\Delta t)^2 \ddot{q}_i^{\{n\}}, \frac{1}{3!}(\Delta t)^3 q_i^{(3)\{n\}}, \frac{1}{4!}(\Delta t)^4 q_i^{(4)\{n\}} \right)^T \dots\dots\dots (2.24)$$

ここで、 Δt は時間ステップを表わし、 $\dot{q}_i^{\{n\}}, \ddot{q}_i^{\{n\}}, \dots, q_i^{(k)\{n\}}$ は、それぞれ、 $q_i^{\{n\}}$ の $1, 2, \dots, k$ 階の時間微分を表わす。

$n+1$ ステップの値を次式で予測し、

$$\tilde{Y}_i^{\{n+1\}} = B Y_i^{\{n\}} \dots\dots\dots (2.25)$$

予測した値 $\tilde{Y}_i^{\{n+1\}}$ を用いて、式(2.23)右辺の F_i に代入し、次式、

$$Y_i^{\{n+1\}} = \tilde{Y}_i^{\{n+1\}} + b \frac{1}{2}(\Delta t)^2 \left(\tilde{F}_i - \ddot{q}_i^{\{n+1\}} \right) \dots\dots\dots (2.26)$$

で修正する。ここで、 $\tilde{F}_i$ は予測した $\tilde{Y}_j^{\{n+1\}}$ を用いて計算した F_i の値であり、

$$\tilde{F}_i = F_i \left(\tilde{Y}_1^{\{n+1\}}, \tilde{Y}_2^{\{n+1\}}, \dots, \tilde{Y}_N^{\{n+1\}} \right) \dots\dots\dots (2.27)$$

である。式 (2.25) で表わされるものを予測子 (predictor), 式 (2.26) で表わされるものを修正子 (corrector) という。 B は,

$$B = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 2 & 3 & 4 \\ 0 & 0 & 1 & 3 & 6 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 4 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \dots\dots\dots (2.28)$$

であり, 修正子ベクトル b は,

$$b = \left(\frac{19}{120}, \frac{3}{4}, 1, \frac{1}{2}, \frac{1}{12} \right)^T \dots\dots\dots (2.29)$$

のようにとられる。式 (2.24) 中には加速度以上の高次の時間微分 ($q_i^{(3)\{n\}}, q_i^{(4)\{n\}}$ などの項) が現われるが, 物理的にそれらの値の初期値を決定することは困難を伴う。そこで実際の計算では次のようなベクトル $X_i^{\{n\}}$ について考える。

$$X_i^{\{n\}} = \left(q_i^{\{n\}}, \Delta t \dot{q}_i^{\{n\}}, \frac{1}{2}(\Delta t)^2 \ddot{q}_i^{\{n\}}, \right. \\ \left. \frac{1}{2}(\Delta t)^2 \ddot{q}_i^{\{n-1\}}, \frac{1}{2}(\Delta t)^2 \ddot{q}_i^{\{n-2\}} \right)^T \dots\dots\dots (2.30)$$

$Y_i^{\{n\}}$ から $X_i^{\{n\}}$ へは,

$$q_i^{\{n-1\}} = q_i^{\{n\}} - \dot{q}_i^{\{n\}} \Delta t + \frac{1}{2} \ddot{q}_i^{\{n\}} (\Delta t)^2 \dots\dots\dots (2.31)$$

$$q_i^{\{n-2\}} = q_i^{\{n\}} - 2\dot{q}_i^{\{n\}} \Delta t + 2\ddot{q}_i^{\{n\}} (\Delta t)^2 \dots\dots\dots (2.32)$$

の関係から, 変換行列 T を用いて, 次式のように関係づけることができる。

$$X_i^{\{n\}} = T Y_i^{\{n\}} \dots\dots\dots (2.33)$$

ここで, T は,

$$T = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -3 & 6 \\ 0 & 0 & 1 & -3 & 24 \end{pmatrix} \dots\dots\dots (2.34)$$

同様に、 B と b に対応する行列 A と a は、

$$A = TBT^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & \frac{19}{12} & -\frac{5}{6} & \frac{1}{4} \\ 0 & 1 & \frac{23}{6} & -\frac{8}{3} & \frac{5}{6} \\ 0 & 0 & 3 & -3 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \dots\dots\dots (2.35)$$

$$a = Tb = \left(\frac{19}{120}, \frac{3}{4}, 1, 0, 0 \right)^T \dots\dots\dots (2.36)$$

となり、最終的な予測子-修正子のアルゴリズムは、

$$\tilde{X}_i^{\{n+1\}} = AX_i^{\{n\}} \dots\dots\dots (2.37)$$

$$X_i^{\{n+1\}} = \tilde{X}_i^{\{n+1\}} + a \frac{1}{2} (\Delta t)^2 \left(\tilde{F}_i - \ddot{q}_i^{\{n+1\}} \right) \dots\dots\dots (2.38)$$

ここで、

$$\tilde{F}_i = F_i \left(\tilde{X}_1^{\{n+1\}}, \tilde{X}_2^{\{n+1\}}, \dots, \tilde{X}_N^{\{n+1\}} \right) \dots\dots\dots (2.39)$$

で与えられる。

式(2.25)と式(2.26)あるいは、式(2.37)と式(2.38)を用いる方法を Gear の方法という。

2.3 原子間ポテンシャル

分子動力学シミュレーションにおいて分子間、原子間にはたらく力をどのように考えるかはたいへん重要な問題である。原子間のポテンシャルを決定すれば格子欠陥などの配列は決まってしまう。ポテンシャルをどのように仮定するかは、連続体力学で構成関係式を仮定することと同様に本質的である。この節では、シミュレーションでよく用いられるポテンシャルの実例、ポテンシャルが持つべき性質、第4章の解析で用いるポテンシャル、さらに、ポテンシャルから導かれる静力学的な諸性質について述べる。

2.3.1 分子動力学法で用いられるポテンシャル

前節で述べたように、原子に、はたらく力はポテンシャルの空間こう配として計算される。ポテンシャルとして、どのような表式のものが適切であるかについては、解析の目的に応じて検討しなければならないが、これまでに用いられてきている定式化の方法としては、ある程度、理論的に仮定した関数形を用いて、熱力学的量などの実験データをもとにパラメータのフィッティングを行なう方法と、第一原理的に量子力学計算の結果から求める方法に大別できる。これまで、前者の方法が多く用いられてきており、この研究においては、もっぱら前者に属する方法を用いる。ただし、最近では化学の分野を中心に後者の方法でポテンシャルを決定する試みも多くなされるようになっている。

Lennard-Jones ポテンシャル (LJ ポテンシャル), Born-Mayer ポテンシャル, Morse ポテンシャルは、実際によく用いられる古典的ポテンシャルである。このほかに、スケーリング則が成り立つという点で汎用性のあるソフトコアポテンシャルなどが用いられる場合もある。

これらは、全て2体ポテンシャルである。先に述べたように2体力近似が成り立つと仮定する場合は、解析上の取り扱いが簡単になる。一方、本来、原子間の相互作用は原子配置に依存する多体力であり、とくに金属は本質的に多体力を必要とする。2体力ポテンシャルの限界と多体ポテンシャルについては後述する。水、シリコン⁽²⁰⁾の場合、結合角を考慮した3体ポテンシャルが用いられる。

ポテンシャルに望ましい性質として、実際の材料の性質を再現できることのほかに、パラメータの決定が簡単なこと、汎用性があることも重要である。一方で、モデルポテンシャルで作られる仮想的な原子系を考えて、ポテンシャルの性質がどのように巨視的性質に関わっているのかを調べることが行なわれる。

2体相互ポテンシャル関数は一般に完全結晶の性質から求められる。多くの場合、弾性定数、格子定数を満足するように決められる。さらに高精度で物質特性を再現することを要求する場合には、圧縮率、凝集エネルギー、原子空孔の形成エネルギーなどの材料の基本的特性のいくつかを再現できるように決定される。

第4章に述べる解析では、Johnson ポテンシャルと多体ポテンシャルである FS ポテンシャルを用いる。以下では、これらのポテンシャルの具体的な形と特徴につ

いて述べる.

Johnson ポテンシャル

代表的な2体ポテンシャルであり, α 鉄に対して考案された Johnson ポテンシャルを示す⁽²¹⁾. これは, 原子間距離 r の無次元量の3次関数,

$$\phi(r) = -a_1(2.6166387r - a_2)^3 + a_3r - a_4 \dots\dots\dots(2.40)$$

を考え, これを近距離, 中距離, 遠距離相互作用にわけて, それらをなめらかにつないだ雲形定規状のポテンシャルである. 表 2.1 に式 (2.40) の係数の値を示す. ここで, r はポテンシャルの停留点の位置 $R_0 (= 2.6166387\text{\AA} = 2.6166387 \times 10^{-10} \text{ m})$ で, $\phi(r)$ はポテンシャルの停留値の絶対値 $\epsilon (= 0.25163806\text{eV} = 4.031719384 \times 10^{-20} \text{ J})$ で無次元化されている.

表 2.1 の係数の桁数が非常に多いが, 実際の分子動力学計算の際には, 相互作用ポテンシャルをいくつも計算しその和をとるので小さな誤差が加算されることを考えると, これらの矛盾なく決められている係数を切り捨てることはできない. 図 2.2 に原子間ポテンシャル ϕ , 図 2.3 に ϕ の r に関する導関数から得られる原子間相互作用力を示す. 第4章では, 先に示した R_0 , ϵ と原子間相互作用力の最大値 $F_{\max}$ を, それぞれ, 長さ, エネルギー, 力の無次元化のための値として用いることがある.

多体ポテンシャル

2体ポテンシャルの限界 ポテンシャルが2体原子間ポテンシャルの総和で表わされるとする対相互作用の近似を用いたモデルでは,

1. 弾性定数の間に Cauchy の関係 ($C_{12} = C_{44}$) が成り立ってしまう⁽²²⁾. 通常この関係は成立しないため, Cauchy の圧力 $(C_{12} - C_{44})/2$ が仮定の外力としてしばしば加えられる.
2. 原子空孔形成エネルギーが凝集エネルギーと等しい. 普通は, 原子空孔形成エネルギーは凝集エネルギーのおよそ 1/3 である.

などの矛盾点が生じ, より近似度の高いポテンシャルが望まれる.

表 2.1 Johnson ポテンシャルの係数

	a_1	a_2	a_3	a_4
$0.7261224 \leq r < 0.9172073$	8.7267265	3.09791	28.1179634	29.552166
$0.9172073 \leq r < 1.1465091$	2.5402761	3.115829	4.969104	6.2851
$1.1465091 \leq r < 1.3147$	4.4311084	3.066403	4.8549901	6.151563

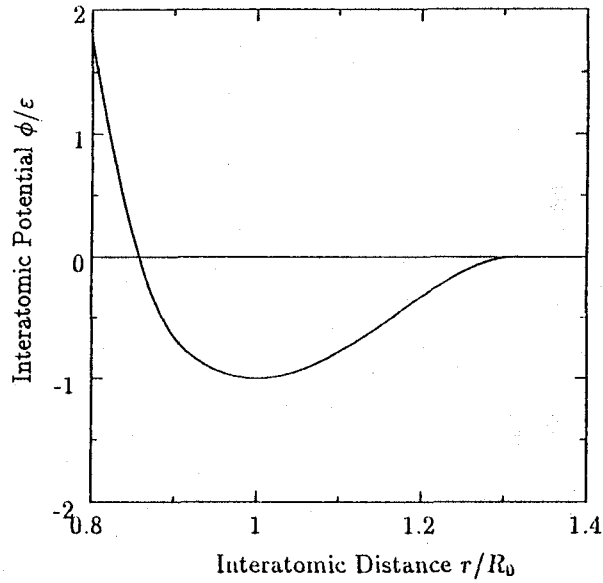


図 2.2 Johnson ポテンシャル

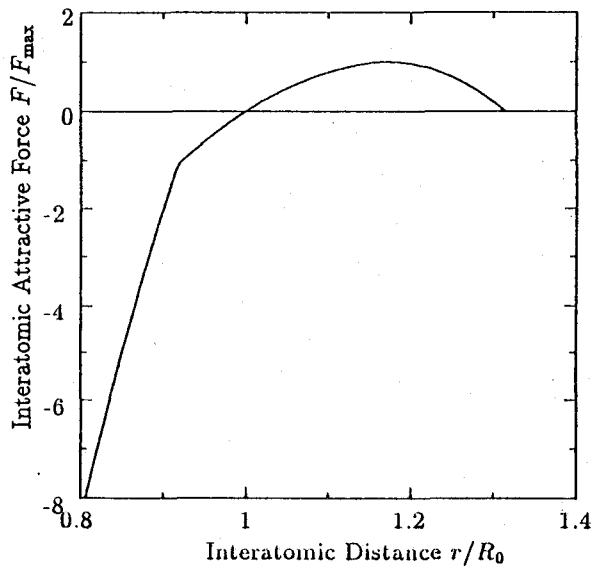


図 2.3 Johnson ポテンシャルから導かれる原子間相互作用力

N -body 項の導入 最近, 2体ポテンシャルの代わりに, 仮想的な平均的電子分布状態を考え, その中に埋め込まれた原子が多体力として, 原子間の相互作用を評価する (埋め込み原子法; Embedded Atom Method; EAM) ことから得られる, より精度の高いポテンシャルが考案されている.

その代表的なものに, Finnis と Sinclair⁽²³⁾, または, Daw と Baskes⁽²⁴⁾⁽²⁵⁾ により, 提案された多体ポテンシャルがあり, その基本的な特性について, 熱膨張, 温度依存性, フォノン散乱曲線, 安定性などの面から理論的検証がなされている. そして, このポテンシャルを用いて, 水素ぜい性 (hydrogen embrittlement) から, 破壊特性 (fracture properties), 表面 (surface, 表面エネルギーと構造), 空孔 (vacancy), 隙間原子 (interstitial atom), 粒界構造 (grain boundary structure), 合金の分晶 (segregation phenomena in alloys), フォノンスpekトル (phonon spectra), 液体金属 (liquid metals), 転位 (dislocations), 転位伝播 (dislocation propagation), 転位と粒界の相互作用 (interaction between lattice dislocations and grain boundaries), 合金特性 (properties of alloys), クラスター (cluster) などについて, MD あるいは, MC を用いた解析がなされ, 幅広く, 格子欠陥のシミュレーションに用いられるようになってきている⁽²⁶⁾. 前者は, 提案者の頭文字をとって FS (Finnis-Sinclair) ポテンシャル, 後者は EAM (Embedded Atom Method) ポテンシャルと呼ばれているが, 有効媒質理論 (Effective Medium Theory; EMT)⁽²⁷⁾⁽²⁸⁾⁽²⁹⁾ の枠組みの中での表現と考えると統一的に理解されるものである. EAM では, 全ポテンシャルエネルギーが次のように, 2体力項 Φ_P と多体 (N -Body) 力項 Φ_N の和で表わされると考える.

$$\Phi = \Phi_P + \Phi_N \quad \dots\dots\dots (2.41)$$

$$\Phi_P = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \phi(q_{ij}) \quad \dots\dots\dots (2.42)$$

$$\Phi_N = - \sum_{i=1}^N f(\rho_i) \quad \dots\dots\dots (2.43)$$

$$\rho_i = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \rho(q_{ij}) \quad \dots\dots\dots (2.44)$$

ここで, $q_{ij} = |\mathbf{q}_{ij}|$, $\mathbf{q}_{ij} = \mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j$. これらの項の物理的意味は,

FS ポテンシャル ρ_i は重なり積分の平方和であり、 ρ_i は tight-binding 理論による結果と解釈される。このとき Φ_N はバンドエネルギーを表わし Φ_P は、核間相互作用を表わす。

EAM ρ_i は、各原子 j からの電子密度の寄与 $\rho(q_{ij})$ の線形的重ね合わせによるサイト i での局所電子密度である。 $-f(\rho_i)$ は、第一近似として電子密度 ρ_i のサイト i に原子を埋めこむのに必要なエネルギーである。関数 ρ は Hartree-Fock の計算から得られる。 Φ_P は核間の 2 体間相互作用反発による項である。

と解釈される。さらに、FS ポテンシャルと EAM を区別するとすれば、後者が量子力学的計算結果をもとにして関数の形を数値的に決定しているのに対して、前者は関数形をできるだけ簡便な形で仮定しようとしていることである。これらの表式中に含まれる関数の形およびパラメータを、格子定数・弾性定数・凝集エネルギー・原子空孔形成エネルギー、そして、場合によって、積層欠陥エネルギー・FCC 相-BCC 相のエネルギーの差などが、実験結果と一致するようにして仮定された関数が決定される。このように知りたい現象をシミュレートできる関数形なりパラメータなりを決めることは、連続体力学で構成式を選ぶのと本質的に差はないように思われる。しかしながら、このようにして構成される多体ポテンシャルは、近似的にせよ第一原理計算の考えを取り入れた形となっており、天下りの関数を選んで作られたポテンシャルよりも、ミクロ事象の再現性に関して一般性が高いと考えられる。そして、こうして導入される多体ポテンシャルのもう一つの利点は、2 体ポテンシャルの計算アルゴリズムをほとんど変えることなくプログラミングできることである。これは、多体ポテンシャルを用いた場合の原子にはたらく力が、

$$\begin{aligned}
 F_i &= -\frac{\partial \Phi}{\partial q_i} \\
 &= -\left(\frac{\partial \Phi_N}{\partial q_i} + \frac{\partial \Phi_P}{\partial q_i} \right) \\
 &= -\sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \left\{ \phi'(q_{ij}) - (f'(\rho_i) + f'(\rho_j))\rho'(q_{ij}) \right\} \frac{q_{ij}}{q_{ij}} \dots\dots\dots (2.45)
 \end{aligned}$$

のように計算できることからわかる。ここで、 $f'(\rho) = df/d\rho$ である。

FS ポテンシャルの実例 第4章の解析で用いる FS ポテンシャルの基本的な表式をここに示す。FS ポテンシャルでは、埋め込み関数 $f(\rho)$ は、

$$f(\rho) = \sqrt{\rho} \dots\dots\dots (2.46)$$

のように平方根の形にとられる。第4章では、 α -Fe と Cu を対象としたシミュレーションを行なう。BCC 金属である α -Fe に対しては、Finnis と Sinclair⁽²³⁾ によって与えられた関数形は、

$$\rho(r) = \begin{cases} A^2 \{(r-d)^2 + \beta(r-d)^3/d\}, & r \leq d \\ 0, & r > d \end{cases} \dots\dots\dots (2.47)$$

$$\phi(r) = \begin{cases} (r-c)^2(c_0 + c_1r + c_2r^2), & r \leq c \\ 0, & r > c \end{cases} \dots\dots\dots (2.48)$$

ここで、

$$\begin{aligned} \beta &= 1.8, & d &= 3.569745 \text{ \AA}, & A &= 1.828905 \text{ eV}, \\ c &= 3.4 \text{ \AA}, & c_0 &= 1.2371147, & c_1 &= -0.3592185, & c_2 &= -0.0385607 \end{aligned}$$

で、これらの数値は実験結果と合うように選ばれている。一方、FCC 金属に対しては、Ackland ら⁽³⁰⁾によって、

$$\rho(r) = \sum_{k=1}^2 A_k (R_k - r)^3 H(R_k - r) \dots\dots\dots (2.49)$$

$$\phi(r) = \sum_{k=1}^6 a_k (r_k - r)^3 H(r_k - r) \dots\dots\dots (2.50)$$

で表わすことが提案されている。ここで、

$$R_1 > R_2, \quad r_1 > r_2 > r_3 > r_4 > r_5 > r_6 \dots\dots\dots (2.51)$$

であり、 $H(x)$ は Heaviside のステップ関数 ($x < 0$ で $H(x) = 0$, $x > 0$ で $H(x) = 1$) である。Cu に対しては、

$$\begin{aligned}
R_1 &= 1.2247449, & R_2 &= 1.0000000, & A_1 &= 9.806694, & A_2 &= 16.774638, \\
r_1 &= 1.2247449, & r_2 &= 1.1547054, & r_3 &= 1.1180065, \\
r_4 &= 1.0000000, & r_5 &= 0.8660254, & r_6 &= 0.7071068, \\
a_1 &= 29.059214, & a_2 &= -140.05681, & a_3 &= 130.07331, \\
a_4 &= -17.48135, & a_5 &= 31.82546, & a_6 &= 71.58749,
\end{aligned}$$

とされている。ここで、長さ R_k, r_k の単位は $a = 3.615 \text{ \AA}$ であり、 ϕ と ρ の係数は、エネルギーの単位が eV となるようにとっている。

2.3.2 弾性定数と応力の表式

弾性定数 $C^{\alpha\beta\gamma\delta}$ は、ポテンシャルから次のように求められる⁽²³⁾⁽²⁵⁾⁽³¹⁾⁽³²⁾。

原子 i の基準格子位置 q_{0i} からの変位ベクトルを $u_i = q_i - q_{0i}$ とする。一様変形の場合について、内部エネルギー Φ をひずみ $\varepsilon^{\alpha\beta} = \partial u_i^\beta / \partial q_{0i}^\alpha$ で展開すると(ここで、 $u_i^\alpha = q_{0i}^\beta \varepsilon^{\beta\alpha}$)、

$$\Phi = \Phi^0 + C^{\alpha\beta} \varepsilon^{\alpha\beta} + \frac{1}{2} C^{\alpha\beta\gamma\delta} \varepsilon^{\alpha\beta} \varepsilon^{\gamma\delta} \dots\dots\dots (2.52)$$

ここで、添字 $\alpha, \beta, \dots$ は、テンソルおよびベクトルの成分を表わす。式(2.41)~(2.44)の多体ポテンシャルの場合の具体形を示すと、

$$\Phi^0 = \frac{1}{\Omega} \left(-f(\bar{\rho}) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \phi_{ij} \right) \dots\dots\dots (2.53)$$

$$C^{\alpha\beta} = \frac{1}{\Omega} \left(D^{\alpha\beta} - f'(\bar{\rho}) G^{\alpha\beta} \right) \dots\dots\dots (2.54)$$

$$C^{\alpha\beta\gamma\delta} = \frac{1}{\Omega} \left(B^{\alpha\beta\gamma\delta} - f'(\bar{\rho}) W^{\alpha\beta\gamma\delta} - f''(\rho) G^{\alpha\beta} G^{\gamma\delta} \right) \dots\dots\dots (2.55)$$

ここで、 Ω は、原子当たりの体積であり、 $\bar{\rho}$ は、基準格子点に原子がある場合の ρ_i の値である。また、 $f''(\rho) = d^2 f / d\rho^2$ と、

$$D^{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \phi'_{ij} \frac{q_{ij}^\alpha q_{ij}^\beta}{q_{ij}}, \quad G^{\alpha\beta} = \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \rho'_{ij} \frac{q_{ij}^\alpha q_{ij}^\beta}{q_{ij}}$$

$$B^{\alpha\beta\gamma\delta} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \left(\phi''_{ij} - \frac{\phi'_{ij}}{q_{ij}} \right) \frac{q_{ij}^{\alpha} q_{ij}^{\beta} q_{ij}^{\gamma} q_{ij}^{\delta}}{q_{ij}^2}$$

$$W^{\alpha\beta\gamma\delta} = \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \left(\rho''_{ij} - \frac{\rho'_{ij}}{q_{ij}} \right) \frac{q_{ij}^{\alpha} q_{ij}^{\beta} q_{ij}^{\gamma} q_{ij}^{\delta}}{q_{ij}^2}$$

$$\phi_{ij} = \phi(q_{ij}), \quad \phi'_{ij} = \left. \frac{d\phi}{dr} \right|_{r=q_{ij}}, \quad \phi''_{ij} = \left. \frac{d^2\phi}{dr^2} \right|_{r=q_{ij}}$$

$$\rho_{ij} = \rho(q_{ij}), \quad \rho'_{ij} = \left. \frac{d\rho}{dr} \right|_{r=q_{ij}}, \quad \rho''_{ij} = \left. \frac{d^2\rho}{dr^2} \right|_{r=q_{ij}}$$

である。このようにして、弾性定数を求めることができる。

一方、微視的応力の表式は、第一近似的に次のように考えることができる。原子 i での応力テンソル $\tau_{\alpha\beta}^i$ を、

$$\tau_i^{\alpha\beta} = \frac{1}{2\Omega} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{\text{neighbours}} V'_{\text{eff}}(q_{ij}) \frac{q_{ij}^{\alpha} q_{ij}^{\beta}}{q_{ij}} \dots\dots\dots (2.56)$$

で評価する。 V_{eff} は、有効ポテンシャル、 q_{ij}^{α} は、原子間ベクトル $\mathbf{q}_{ij}$ の α 成分であり、ここで用いた、Finnis-Sinclair ポテンシャルでは、 $V_{\text{eff}}(q_{ij})$ は、次式で与えられる。

$$V_{\text{eff}}(q_{ij}) = \phi(q_{ij}) - 2f'(\rho_i)\rho(q_{ij}) \dots\dots\dots (2.57)$$

これら、弾性定数と応力の表式は、平衡状態からの均一な変形に対して、静力学的な考え方から求めたものである。

さらに、一般的には、原子の流れの密度と速度の関係を運動量保存則に代入することにより得られる表式⁽³³⁾、

$$\tau_i^{\alpha\beta} = \frac{1}{\Omega} \left(-m_i v_i^{\alpha} v_i^{\beta} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{\text{neighbours}} V'_{\text{eff}}(q_{ij}) \frac{q_{ij}^{\alpha} q_{ij}^{\beta}}{q_{ij}} \right) \dots\dots\dots (2.58)$$

で示されるように、動的な項が加わる。

Irving と Kirkwood⁽³⁴⁾が示したように、Gibbs の相空間分布関数を用いて粗視化した力学系に対して Liouville の方程式により運動量保存則を書き下すことから同様な結果が得られる。なお、Irving と Kirkwood は、アンサンブルの意味での平

均値を用いて、微視的な粒子運動と巨視的な連続体理論の密度関数を結び付けることによって、Liouville の方程式から、流体力学や弾性力学の基礎方程式を導くことができることを示している。

2.3.3 結晶の静力学的安定性

Najafabadi と Kalonji ら⁽³⁵⁾は、ポテンシャルが満足すべき最低限の基準として、

1. 安定な格子構造を再現できる。
2. 格子定数を厳密に再現できる。

の二点を挙げ、提案されているさまざまなポテンシャルがこれらの基準を満足しているかどうかを調べている。これらの基準を満足するかどうかを調べることは、Milstein, Hill, Thompson などによって行なわれている格子の静力学的安定性を調べる方法^{(36)~(41)}を用いることにほかならない。そこでは、Born の基準として知られる方法が用いられている。MD に導入するポテンシャルがこの基準を満たすかどうかは、粒子系が所期の配置を構成しうるかどうかに関わっている。

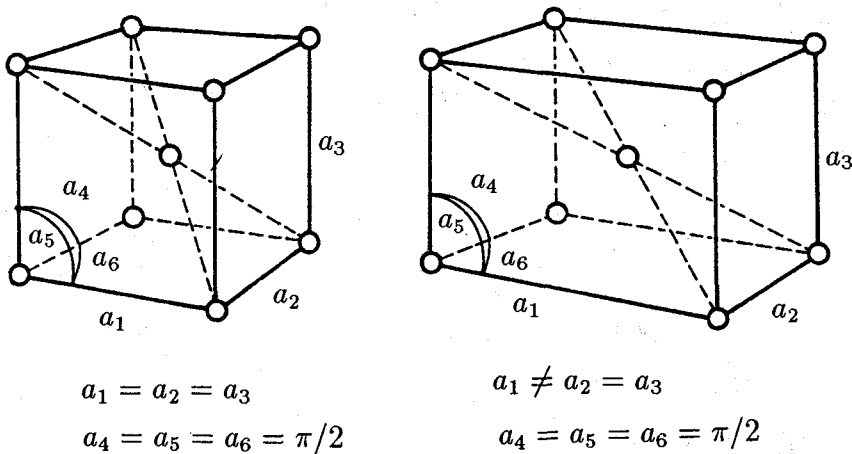


図 2.4 体心立方結晶の単位格子

外力が加えられることによって均一に変形する立方結晶において、内部エネルギーは単位格子を記述する 6 つの独立変数 (格子定数; 図 2.4) で表現できる。すなわち、

$$U(a_1, a_2, \dots, a_6) \equiv U(\{a_i\}) \dots\dots\dots (2.59)$$

ここではポテンシャルエネルギーを考えているが、静力学的計算では、ポテンシャルエネルギーが全エネルギーと一致する。状態 $\{a_i\}$ で力学的に釣り合い状態にある結晶に加えられた外力に対して結晶系の全エネルギーは最小にならなければならない。いいかえると、6つの成分 $\{a_i\}$ で特定される結晶状態が安定で釣り合い状態にあるとすると、状態 $\{a_i\}$ から別の任意の状態 $\{a'_i\}$ になるときに必要なエネルギー消費量は正でなければならない。このエネルギー消費量は状態 $\{a_i\}$ と $\{a'_i\}$ の間のポテンシャルエネルギーの差に取り囲まれた結晶によりなされた仕事を加えたものである。

状態 $\{a'_i\}$ と $\{a_i\}$ の間の内部ポテンシャルエネルギーの差は Taylor 級数展開で、次の式 (2.60) のように表わされる。

$$\begin{aligned} U(\{a'_i\}) = U(\{a_i\}) &+ \sum_{i=1}^6 \left. \frac{\partial U}{\partial a_i} \right|_{\{a_i\}} (a'_i - a_i) \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{i=1}^6 \sum_{j=1}^6 \left. \frac{\partial^2 U}{\partial a_i \partial a_j} \right|_{\{a_i\}} (a'_i - a_i)(a'_j - a_j) + \dots \dots\dots (2.60) \end{aligned}$$

ただし、変形 $a'_i - a_i$ が小さいので高次の微分項は省略できている。式 (2.60) の第2項は取り囲まれた結晶によりなされた仕事である。したがって第3項が正の場合だけエネルギー消費量が正になる。ここで、

$$B_{ij} = \left. \frac{\partial^2 U}{\partial a_i \partial a_j} \right|_{\{a_i\}} \dots\dots\dots (2.61)$$

$$F_i = \left. \frac{\partial U}{\partial a_i} \right|_{\{a_i\}} \dots\dots\dots (2.62)$$

とおく。式 (2.60) の二重和は主小行列式 $|B_{ij}|$ が全て正の場合だけ任意の変形 $a'_i - a_i$ に対して正となる。これは弾性定数行列が正の定符号 (positive definite) であるとするのと同様な基準である。

式 (2.60) を書き直して、

$$\begin{aligned} U(\{a'_i\}) = U(\{a_i\}) &+ \sum_{i=1}^6 F_i (a'_i - a_i) \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{i=1}^6 \sum_{j=1}^6 B_{ij} (a'_i - a_i)(a'_j - a_j) \dots\dots\dots (2.63) \end{aligned}$$

この式を、 a'_i で微分すると、変形した状態の値から F'_i は、

$$F'_i = \left. \frac{\partial U}{\partial a_i} \right|_{\{a'_i\}} = F_i + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^6 (B_{ij}(a'_j - a_j) + B_{ji}(a'_j - a_j)) \quad \dots\dots\dots (2.64)$$

となる。 U は状態によって決まる量なので、

$$B_{ij} = B_{ji} \quad \dots\dots\dots (2.65)$$

したがって、

$$F'_i = F_i + \sum_{j=1}^6 B_{ij}(a'_j - a_j) \quad (i = 1, 2, \dots, 6) \quad \dots\dots\dots (2.66)$$

そして、 a_1 方向に単軸力が作用し、 $a_4 = a_5 = a_6 = \pi/2$ 、 $a_2 = a_3$ が保たれると仮定される場合には、 B は次のように簡単化される。

$$[B_{ij}] = \begin{bmatrix} B_{11} & B_{12} & B_{12} & 0 & 0 & 0 \\ B_{12} & B_{22} & B_{23} & 0 & 0 & 0 \\ B_{12} & B_{23} & B_{22} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & B_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & B_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & B_{55} \end{bmatrix} \quad \dots\dots\dots (2.67)$$

安定条件は $[B_{ij}]$ が正の定符号になることであるから、

$$\begin{aligned} B_{55} > 0, \quad B_{44} > 0, \quad B_{22} > 0, \\ B_{22}^2 - B_{23}^2 > 0, \quad B_{11}(B_{22} + B_{23}) - 2B_{12}^2 > 0 \end{aligned} \quad \dots\dots\dots (2.68)$$

これらの条件は、2体中心力の場合、次の条件と等価である。

$$\begin{aligned} B_{12} > 0, \quad B_{23} > 0, \quad B_{22} - B_{23} > 0, \\ B_{11}(B_{22} + B_{23}) - 2B_{12}^2 > 0 \end{aligned} \quad \dots\dots\dots (2.69)$$

式 (2.68) を格子安定性のための Born の必要十分条件という。 Najafabadi と Kalonji はポテンシャルエネルギーが2体原子間ポテンシャルによる総和の項と材料の密度依存ポテンシャルの項の和で表わされるとし、この場合について Born の条件を導いている。さらに、ここで与えた基準で Lennard-Jones ポテンシャルをはじめとする各種のポテンシャルに適用している。ポテンシャルの中には、格子定数が実際に実験的に調べられた値から大きく異なるものや、安定な結晶構造をとること

ができないものがあり、それらの中には密度依存項を加えることで安定になるものもあるとの報告がなされている。鉄のポテンシャルとしては、Johnson ポテンシャルと Morse ポテンシャルについて調べられ、ともに体心立方構造で最も安定で格子定数は実験値とよく一致していることが示されている。

立方格子のポテンシャルが2体相互作用で表わされる場合 単位格子の任意の原子 j の位置ベクトル r_j は、

$$r_j = r_{l_1 l_2 l_3} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 l_i a_i a_i \dots\dots\dots (2.70)$$

で表わされる。ここで、 a_i は辺長 a_i の辺に平行な格子ベクトルである。 l_i は整数で BCC 結晶の場合は l_1, l_2, l_3 は全て奇数または全て偶数 (FCC の場合には $l_1 + l_2 + l_3$ は偶数) になるようにとられる。そして、

$$\begin{aligned} r^2 \equiv (r_{l_1 l_2 l_3})^2 &= \frac{1}{4} \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 l_i l_j a_i a_j (a_i \cdot a_j) \\ &= \frac{1}{4} (l_1^2 a_1^2 + l_2^2 a_2^2 + l_3^2 a_3^2 + 2l_2 l_3 a_2 a_3 \cos \alpha_4 + 2l_3 l_1 a_3 a_1 \cos \alpha_5 \\ &\quad + 2l_1 l_2 a_1 a_2 \cos \alpha_6) \dots\dots\dots (2.71) \end{aligned}$$

単位格子のポテンシャルエネルギー U は

$$U = \frac{1}{2} n \sum_{l_1} \sum_{l_2} \sum_{l_3} \phi(r_{l_1 l_2 l_3}) \dots\dots\dots (2.72)$$

ここで、 n は単位格子に含まれる原子数である。 $\partial U / \partial a_i$, $\partial^2 U / \partial a_i \partial a_j$ は、原子間ポテンシャル ϕ から直接計算される量、 $\partial \phi / \partial r^2$, $\partial^2 \phi / \partial (r^2)^2$ を用いて、次のように表わされる。

$$\frac{\partial U}{\partial a_i} = \frac{1}{2} n \sum_{l_1} \sum_{l_2} \sum_{l_3} \frac{\partial \phi(r)}{\partial (r^2)} \cdot \frac{\partial r^2}{\partial a_i} \dots\dots\dots (2.73)$$

$$\frac{\partial^2 U}{\partial a_i \partial a_j} = \frac{1}{2} \sum_{l_1} \sum_{l_2} \sum_{l_3} \frac{\partial^2 \phi(r)}{\partial (r^2)^2} \cdot \frac{\partial (r^2)}{\partial a_i} \cdot \frac{\partial (r^2)}{\partial a_j} + \frac{\partial \phi(r)}{\partial (r^2)} \cdot \frac{\partial^2 (r^2)}{\partial a_i \partial a_j} \dots\dots (2.74)$$

原子間距離の2乗と格子定数の関係、式(2.70)から、 $\partial (r^2) / \partial a_i$, $\partial^2 (r^2) / \partial a_i \partial a_j$ は、次の式(2.75)~(2.80)で与えられる。

$$\frac{\partial r^2}{\partial a_1} = \frac{1}{2}(l_1^2 a_1 + l_1 l_2 a_2 \cos a_6 + l_1 l_3 a_3 \cos a_5) \dots\dots\dots (2.75)$$

$$\frac{\partial r^2}{\partial a_4} = -\frac{1}{2} l_2 l_3 a_2 a_3 \sin a_4 \dots\dots\dots (2.76)$$

$$\frac{\partial^2 r^2}{\partial a_1^2} = \frac{1}{2} l_1^2 \dots\dots\dots (2.77)$$

$$\frac{\partial^2 r^2}{\partial a_4^2} = -\frac{1}{2} l_2 l_3 a_2 a_3 \cos a_4 \dots\dots\dots (2.78)$$

$$\frac{\partial^2 r^2}{\partial a_1 \partial a_2} = \frac{1}{2} l_1 l_2 \cos a_6 \dots\dots\dots (2.79)$$

$$\frac{\partial^2 r^2}{\partial a_1 \partial a_5} = -\frac{1}{2} l_1 l_3 a_3 \sin a_5 \dots\dots\dots (2.80)$$

以上、ここではポテンシャルエネルギーが2体原子間相互作用ポテンシャルの和で表われ、その原子間ポテンシャルが原子間の距離だけの球対称な関数で表わされる場合において静力学的解析を具体的に示した。

単位格子が単軸の引張をうける場合の例 第4章で解析に用いるポテンシャルのうち α 鉄を表現する Johnson ポテンシャルに対して、その安定性について検討を加える。図 2.4 に示した BCC 単位格子の a_1 軸に垂直な面に応力を加える場合について考える。変形は均一であるとし、 $a_2 = a_3, a_4 = a_5 = a_6 = \pi/2$ が保たれるとする。

計算は、 a_1 をパラメータとして変化させ、ある a_1 に対して単位格子のポテンシャルエネルギー U を最小にするような a_2 を求める。最適化問題の各種の解法を用いることが可能であるが、ここでは、DFP(Davidon-Fletcher-Powell)法⁽⁴²⁾を用いて行なう。

a_2 が決定されると、ポテンシャルエネルギー U , a_1 に垂直な面にはたらく荷重 F , 単位格子の体積 V が求められる。さらに、Born の安定性の条件を表わす次のパラメータ、 b_1, b_2, b_3, b_4 を求めることができる。

$$\begin{aligned} b_1 &\equiv B_{12}, & b_2 &\equiv B_{23}, & b_3 &\equiv B_{22} - B_{23}, \\ b_4 &\equiv B_{11}(B_{22} + B_{23}) - 2B_{12}^2 \dots\dots\dots (2.81) \end{aligned}$$

これらの各量と a_1 の関係を図 2.5 に示す。ここで b_1, b_2, b_3, b_4 については、符号だけを問題にするので任意単位で示す。

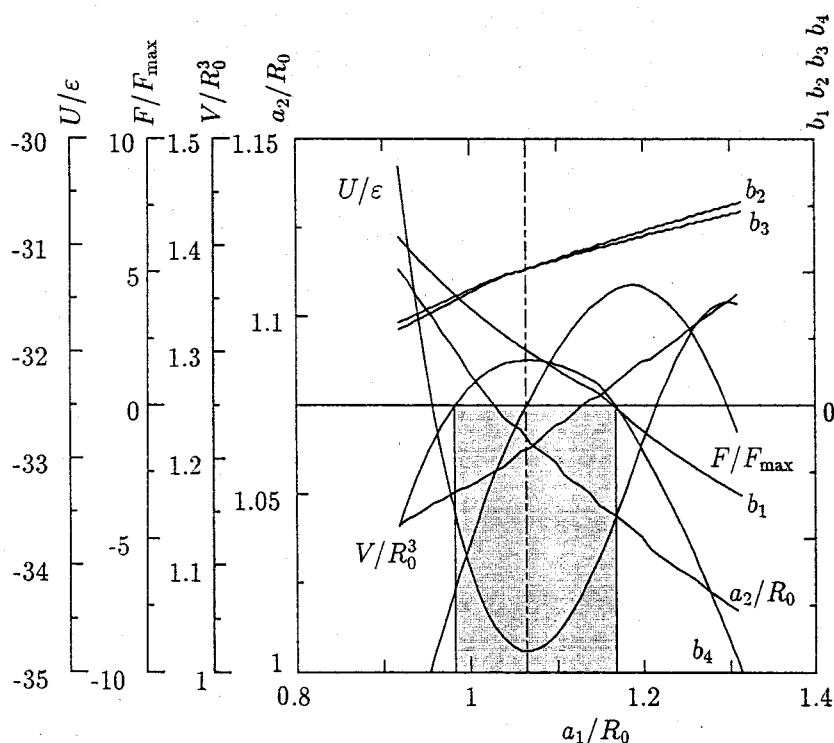


図 2.5 Johnson ポテンシャルの安定性評価

図において、各値が折れ曲がりを示すのは Johnson のポテンシャルの連続性が原子間の距離 r について 1 階の導関数までしかないからである。

格子定数 a_2 については、 $a_1 = a_2 (= 1.066)$ の時ポテンシャルエネルギー U が最小になり、Johnson ポテンシャルでは体心立方構造が最も安定であることがわかる。たとえば、

$$\frac{a_1}{a_2} = \sqrt{2} \dots\dots\dots (2.82)$$

の場合は面心立方構造を表わすことになるが、図からこの構造は安定に存在し得ないことがわかる。体積 V は a_1 に対して単調増加を示す。 a_1 方向の引張力 F は、 $a_1 = 1.17$ 付近で最高値となる。 b_1 は、 $a_1 = 1.17$ 付近で正から負に転じる。 b_2, b_3 は計算した領域では、常に正、 b_4 は、 $a_1 = 0.98$ 付近で負から正に転じ、 1.17 付近で再び正から負に転じる。したがって、安定な領域は $0.98 < a_1 < 1.17$ であるこ

とがわかる。なお、付録 (I) においては、ここで述べた安定性評価の手法によって単軸引張問題に対する MD シミュレーション結果を検討する。

2.3.4 有限温度の影響

系の温度が絶対零度でなく有限である問題では、初期条件や境界条件を与える場合に熱膨張による効果を考慮する必要がある。熱膨張はポテンシャルエネルギーの非調和項に関係している。原子の平衡位置は、Helmholtz の自由エネルギーを停留条件から求めることができる。西岡ら⁽⁴³⁾は、自己無撞着な Einstein のモデルでの Helmholtz の自由エネルギーを計算し、Gauss 型ポテンシャルに対して、熱膨張・弾性定数の変化・格子の安定性を評価している。また、Sutton⁽⁴⁴⁾ (45)は、遷移金属の N -Body FS ポテンシャルに対して、熱膨張係数および Grüneisen 数 γ を求めて、さらに、LJ ポテンシャルを用いて有限温度の金の $\Sigma = 13$ ねじれ粒界の構造を計算し実験結果と比較している。フォノン-フォノン相互作用 (3 フォノン過程)⁽⁴⁶⁾ を基礎として、熱伝導率の変化・弾性定数の変化を評価するには結晶の非調和性を表わす γ の評価が重要である。

原子間ポテンシャルは、物質のあらゆる性質がそこから計算されるべきである基本的な量である。ここで示したようなポテンシャルの決定は、経験的要素が強く、多種類の原子から構成されている場合は、いっそう困難である。これに対し、AI 的手法を用いてポテンシャル決定を行なうエキスパートシステムの構築が望まれる。分子動力学法と電子論的方法を結合した非経験的分子動力学法を適用することによって、古典ポテンシャルでは取り扱いが難しい材料や化学反応を伴う系の取り扱いが可能になるが、現在の経験的ポテンシャルをこのような方法に置き換えることによってより厳密なシミュレーションが実用化されることが期待される。

2.4 結言

本章では、第 4 章で実施するき裂の分子動力学シミュレーションのための基礎関係式と具体的な解析手法について述べた。また、仮定するポテンシャルから解析的に導かれる静力学的な特性について論じるとともに、Johnson ポテンシャルの静力学的安定性の評価を行ない BCC 構造で安定であることを示した。

第2章の文献

- (1) Ciccotti, G., Frenkel, D. and McDonald, I.R. 編, Simulation of Liquids and Solids —Molecular Dynamics and Monte Carlo Methods in Statistical Mechanics—, (1987), North-Holland.
- (2) 堂山昌男・山本良一編, 計算材料科学, (1987), 海文堂.
- (3) 田中 實・山本良一編, 計算物理学と計算化学—分子動力学法とモンテカルロ法—, (1988), 海文堂.
- (4) 固体物理 24-3(1989)(計算物理特集号).
- (5) 岡田 勲・大澤映二, 分子シミュレーション入門, (1989), 海文堂
- (6) ヘールマン, D.W.(小澤哲・篠嶋妥訳), シミュレーション物理学, (1990) シュプリンガー・フェアラーク東京.
- (7) 河村雄行, パソコン分子シミュレーション—分子動力学実験入門—, (1990), 海文堂
- (8) 上田 顯, コンピュータシミュレーション—マクロな系の中の原子運動—, (1990), 朝倉書店.
- (9) 能勢修一, 分子動力学シミュレーションの方法論の発展, 科学, 60-11, (1990), 751.
- (10) 日本物理学会編, 計算物理学—コンピューター支援による物理学の新しい展開—, (1991), 培風館.
- (11) 矢部 孝・川田重夫・福田昌宏, シミュレーション物理入門—微粒子モデルの世界—, (1991), 朝倉書店.
- (12) Andersen, H.C., Molecular Dynamics Simulations at Constant Pressure and/or Temperature, *J.Chem.Phys.*, 72-4(1980), 2384-2393.
- (13) Parrinello, M. and Rahman, A., Crystal Structure and Pair Potentials: A Molecular-Dynamics Study, *Phys.Rev.Lett.*, 45-14(1980), 1196-1199.
- (14) Parrinello, M. and Rahman, A., Polymorphic Transitions in single crystals: A New Molecular Dynamics Method, *J.Appl.Phys.*, 52-12(1981), 7182-7190.
- (15) Woodcock, L.V., Isothermal Molecular Dynamics Calculations for Liquid Salts, *Chem.Phys.Lett.*, 10-3(1971), 257-261.
- (16) Hoover, W.G., Canonical Dynamics: Equilibrium Phase-Space Distributions, *Phys.Rev.,A*, 31-3(1985), 1695.
- (17) Nosé, S., A Unified Formulation of the Constant Temperature Molecular Dynamics Methods, *J.Chem.Phys.*, 81-1(1984), 511-519.
- (18) Nosé, S. and Yonezawa, F., Isothermal-Isobaric Computer Simulations of Melting and Crystallization of a Lennard-Jones System, *J.Chem.Phys.*, 84-3(1986), 1803-1814.

- (19) 樋渡保秋, 非晶質の分子動力学, 固体物理 <計算物理> 特集号, **24**(1989), 242
- (20) Tersoff, J., New Empirical Model for the Structural Properties of Silicon, *Phys.Rev.Lett.*, **56**-6(1986), 632-635.
- (21) Johnson, R.A., Interstitials and Vacancies in α Iron, *Phys.Rev.*, **134**-5A(1964), A1329-A1336.
- (22) Kittel, C., Introduction to Solid State Physics 2nd Ed., (1975), 95, 丸善.
- (23) Finnis, M.W. and Sinclair, J.E., A Simple Empirical N-Body Potential for Transition Metals, *Philos.Mag.,A*, **50**-1(1984), 45-55. (Erratum *ibid*, 53-1(1986),161.)
- (24) Daw, M.S. and Baskes, M.I., Semiempirical, Quantum Mechanical Calculation of Hydrogen Embrittlement in Metals, *Phys.Rev.Lett.*, **50**-17(1983), 1285-1288.
- (25) Daw, M.S. and Baskes, M.I., Embedded-Atom Method: Derivation and Application to Impurities, Surfaces, and Other Defects in Metals, *Phys.Rev.,B*, **29**-12(1984), 6443-6453.
- (26) Foiles, S.M. and Daw, M.S., Application of the Embedded Atom Method to Ni_3Al , *J.Mater.Res.*, **2**-1(1987), 5-15.
- (27) Manninen, M., Interatomic Interactions in Solids: An Effective-Medium Approach, *Phys.Rev.,B*, **34**-12(1986), 8486-8495.
- (28) Raeker, T.J. and DePristo, A.E., Corrected Effective-Medium Method. IV. Bulk Cohesive and Surface Energies of Second- and Third- Row Metals and Multilayer Relaxation of Al, Fe, and Ni, *Phys.Rev.,B*, **39**-14(1989), 9967-9982.
- (29) Stoltze, P., Simulations of the Premelting of Al(110), *J.Chem.Phys.*, **92**-10(1990), 6306-6321.
- (30) Ackland, G.J., Tichy, G., Vitek, V., and Finnis, M.W., Simple N-Body Potentials for the Noble Metals and Nickel, *Philos.Mag.,A*, **56**-6(1987), 735-756.
- (31) Mathur, S.S., Sharma, Y.P., and Gupta, P.N., Lattice Theory of Second- and Third-Order Elastic Constants of Aluminum, Copper, and Nickel, *J.Appl.Phys.*, **42**-13(1971), 5335-5342.
- (32) Johnson, R.A., Relationship between Two-Body Interatomic Potentials in a Lattice Model and Elastic Constants, *Phys.Rev.*, **6**-6(1972), 2094-2100.
- (33) イーゲルスタッフ (廣池和夫・守田 徹 訳), 物理学叢書 32 液体論入門, (1971), 吉岡書店.
- (34) Irving, J.H. and Kirkwood, J.G., The Statistical Mechanical Theory of Transport Processes. IV. The Equation of Hydrodynamics, **18**-6(1950), 817-829.

- (35) Najafabadi, R. and Kalonji, G., Mechanical Stability Criteria for Interatomic Potential Functions used in Computer Simulations of Materials, *Acta Met.*, **36-4**(1988), 917-924.
- (36) Milstein, F., Theoretical Strength of a Perfect Crystal, *Phys.Rev.,B*, **3**(1971), 1130-1141.
- (37) Milstein, F. and Hill, R., Theoretical Properties of Cubic Crystals at Arbitrary Pressure-I. Density and Bulk Modulus, *J.Mech.Phys.Solids*, **25**(1977), 457-477.
- (38) Milstein, F. and Hill, R., Theoretical Properties of Cubic Crystals at Arbitrary Pressure-II. Shear Moduli, *J.Mech.Phys.Solids*, **26**(1978), 213-239.
- (39) Milstein, F. and Marschall, J., Influence of Symmetry and Bifurcation on the Uniaxial Loading Behaviour of B.C.C. Metals, *Philos.Mag.,A*, **58-2**(1987), 365-384.
- (40) Thompson, J.M.T. and Shorrock, P.A., Bifurcational Instability of an Atomic Lattice, *J.Mech.Phys.Solids*, **23**(1974), 21-37.
- (41) トムソン, J.M.T. (吉澤修治・柳田英二訳), 不安定性とカタストロフ, (1986), 94-117, 産業図書.
- (42) 嘉納秀明, コンピュータ制御機械システムシリーズ 3 システムの最適理論と最適化, (1987), 94, コロナ社.
- (43) Nishioka, K. and Lee, J.K., Temperature Dependence of the Ideal Fracture Strength of a B.C.C. Crystal, *Philos.Mag.,A*, **44-4**(1981), 779-798.
- (44) Sutton, A.P., Temperature-Dependent Interatomic Forces, *Philos.Mag.,A*, **60-2**(1989), 147-159.
- (45) Sutton, A.P., Temperature Dependence of Interatomic Forces, Atomistic Simulation of Materials — Beyond Pair Potentials —, Ed. Vitek, V. and Srolovitz, D.J., 265-278, (1989), Plenum Press.
- (46) ザイマン, J.T., (山下・長谷川訳), 固体物性論の基礎, (1976).

第3章 き裂先端場の連続体モデルによる取り扱い

3.1 緒言

本章では、き裂先端場の連続体モデルによる取り扱いについて述べる。

まず、第4章の分子動力学解析において原子モデルの境界条件として採用するき裂先端の変位場と、さらに、解析結果の検討に用いる応力場について述べる。モードI, II, IIIのき裂に対して、結晶配向による異方性を考慮した線形破壊力学に基づく厳密解を示す。また、モードIき裂に対して、結晶塑性論に基づく解析と同じ問題について直接比較するための準備として、微小変形有限要素解析を行なう。

後半では、結晶塑性論に基づく解析手法の概要と解析例について述べる。

金属結晶体はさまざまなスケールの内部構造を有している。微視的な結晶粒や転位の配置のような構造は、巨視的な塑性特性と深く関わっている。このような内部構造を有する物体の巨視的な力学的挙動の解析は、通常、数学的取り扱いを容易にするため物体を連続体と見なすことで定式化される場の方程式を用いて行なわれる。この場合、連続体モデルには、微視的構造が十分に多数集まったスケールでの材料特性は微視的構造の不均一を各々区別する必要はなく、何らかの平均的な量で代表できると考えるという意味を持たせる。したがって、そこには微視的構造をどのレベルでとらえるのか、それをどのようなプロセスで巨視的量の関係に帰着させるかということが問題となる。

構成式は、その実質的な意味で、あるスケール以下の内部構造に起因する力学的挙動は材料に固有な特性と見なし、幾何学的量と力学的量の関係を表わすものと考えることができる。そして、それ以上のスケールでの不均一性を、場の方程式の解として得ようとするのが連続体力学の体系であるが、その境目は場合に応じて解析者が選ぶべき問題として残される。しかも、材料内部の微視的事象と巨視的レベルでの現象論的観測結果を厳密に結び付けることは特別な場合を除いてできないのが普通である。したがって、構成式の定式化やその妥当性の検討には、観測-実験が重要であると考えられる。

構成式の表現の際、どのレベルでの微視的構造に着目するかは、解析の対象とする事象に応じて選択すべきものである。塑性変形の素過程としては転位の移動に伴う結晶格子のすべりが重要で、そのほかに双晶変形、拡散などがある。

弾塑性構成関係を、こうした素過程の力学的、運動学的記述から組み立てることにすれば、現象論的視点から持ち込まれる降伏関数、連合流れ則などの仮定は不必要となる。より直接的で物理的なこのような扱いは、微視的-巨視的構造の関わり合いも検討しやすく、最近では構成式研究の一つの流れとなっている^{(1)~(7)}。

ここでは、Peirce, Asaro, Needleman ら⁽⁸⁾によって組み立てられた、結晶格子のすべりのみを素過程と考えた構成式を定式化し、その妥当性を検討するために、仮想的に等方的に配置したすべり系を用いて、き裂先端に生じる局所的変形の連続体モデルによる解析を行ない、多結晶体の特性を反映できることと、それが従来からの現象論的構成式を用いた解析法に代わりうることを示す。

3.2 き裂先端場の線形弾性論

原子モデルによるき裂の実体論的な解析を行なうためには、十分な大きさの原子系を考える必要がある。しかし、実際には、解析手段による制約によって、取り扱える原子数は限られてしまう。そこで、次の第4章では、き裂先端の極近傍の微小領域を除いて、線形弾性論によって記述されると考え、き裂先端の原子モデルによる解析領域が線形弾性体中に埋め込まれているとしてモデル化する。

本節では、第4章で原子集合体モデルによるMD計算の境界条件(初期条件)として用いる変位と、原子モデルと連続体モデルの比較に用いる応力について述べる。

3.2.1 異方性線形弾性体中のき裂先端の特異応力場

応力拡大係数,

$$k_1 \equiv \frac{K_I}{\sqrt{\pi}}, \quad k_2 \equiv \frac{K_{II}}{\sqrt{\pi}}, \quad k_3 \equiv \frac{K_{III}}{\sqrt{\pi}} \quad \dots\dots\dots (3.1)$$

の外力が負荷されたき裂(図3.1)の先端近傍の応力($\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z, \tau_{yz}, \tau_{zx}, \tau_{xy}$)と変位(u, v, w)はSihらによる複素応力関数を用いた解析⁽⁹⁾⁽¹⁰⁾から次のように求められている。

線形弾性体の応力ひずみ関係とその逆関係を、

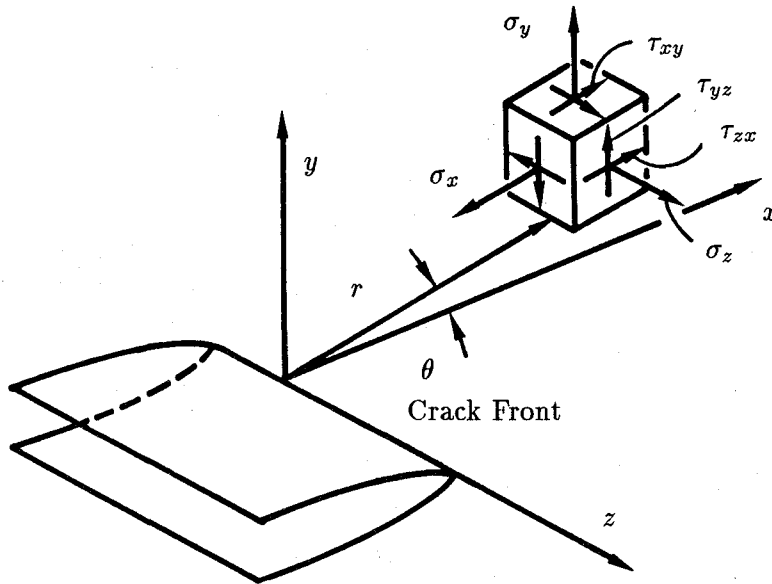


図 3.1 き裂先端の局所座標と応力成分の定義

$$\left. \begin{aligned} \varepsilon_i &= \sum_{j=1}^6 a_{ij} \sigma_j \\ \sigma_i &= \sum_{j=1}^6 c_{ij} \varepsilon_j \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (3.2)$$

とする. a_{ij} , c_{ij} は対称行列であり, $i, j = 1, 2, \dots, 6$ で, $xx \rightarrow 1$, $yy \rightarrow 2$, $zz \rightarrow 3$, $yz \rightarrow 4$, $zx \rightarrow 5$, $xy \rightarrow 6$ のように Voigt の記号で表わしている.

平面問題 (モード I, モード II き裂) の場合,

$$b_{ij} = \begin{cases} a_{ij} - \frac{a_{i3}a_{j3}}{a_{33}} & (\text{plane strain}) \\ a_{ij} & (\text{plane stress}) \end{cases} \dots\dots\dots (3.3)$$

$(i, j = 1, 2, 6)$

を係数に持つ特性方程式,

$$b_{11}\mu^4 - 2b_{16}\mu^3 + (2b_{12} + b_{66})\mu^2 - 2b_{26}\mu + b_{22} = 0 \dots\dots\dots (3.4)$$

は, 必ず, 4つの複素解を持つことが知られている. それらの解を, $\mu = \mu_1, \bar{\mu}_1, \mu_2, \bar{\mu}_2$ とする. さらに, パラメータ $p_j, q_j (j = 1, 2)$ を,

$$\left. \begin{aligned} p_j &= b_{11}\mu_j^2 + b_{12} - b_{16}\mu_j \\ q_j &= b_{12}\mu_j + \frac{b_{22}}{\mu_j} - b_{26} \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (3.5)$$

のように導入すると、モード I き裂の場合、応力と変位は、

$$\left. \begin{aligned} \sigma_x &= \frac{k_1}{\sqrt{2r}} \Re \left[\frac{\mu_1\mu_2}{\mu_1 - \mu_2} \left(\frac{\mu_2}{\sqrt{\cos\theta + \mu_2 \sin\theta}} - \frac{\mu_1}{\sqrt{\cos\theta + \mu_1 \sin\theta}} \right) \right] \\ \sigma_y &= \frac{k_1}{\sqrt{2r}} \Re \left[\frac{1}{\mu_1 - \mu_2} \left(\frac{\mu_1}{\sqrt{\cos\theta + \mu_2 \sin\theta}} - \frac{\mu_2}{\sqrt{\cos\theta + \mu_1 \sin\theta}} \right) \right] \\ \tau_{xy} &= \frac{k_1}{\sqrt{2r}} \Re \left[\frac{\mu_1\mu_2}{\mu_1 - \mu_2} \left(\frac{1}{\sqrt{\cos\theta + \mu_1 \sin\theta}} - \frac{1}{\sqrt{\cos\theta + \mu_2 \sin\theta}} \right) \right] \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (3.6)$$

$$\left. \begin{aligned} u &= k_1 \sqrt{2r} \Re \left[\frac{1}{\mu_1 - \mu_2} \left(\mu_1 p_2 \sqrt{\cos\theta + \mu_2 \sin\theta} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \mu_2 p_1 \sqrt{\cos\theta + \mu_1 \sin\theta} \right) \right] \\ v &= k_1 \sqrt{2r} \Re \left[\frac{1}{\mu_1 - \mu_2} \left(\mu_1 q_2 \sqrt{\cos\theta + \mu_2 \sin\theta} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \mu_2 q_1 \sqrt{\cos\theta + \mu_1 \sin\theta} \right) \right] \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (3.7)$$

ここで、 $\Re(z)$ は複素数 z の実部を表わす。モード II き裂の場合、応力および、変位は、

$$\left. \begin{aligned} \sigma_x &= \frac{k_2}{\sqrt{2r}} \Re \left[\frac{1}{\mu_1 - \mu_2} \left(\frac{\mu_2^2}{\sqrt{\cos\theta + \mu_2 \sin\theta}} - \frac{\mu_1^2}{\sqrt{\cos\theta + \mu_1 \sin\theta}} \right) \right] \\ \sigma_y &= \frac{k_2}{\sqrt{2r}} \Re \left[\frac{1}{\mu_1 - \mu_2} \left(\frac{1}{\sqrt{\cos\theta + \mu_2 \sin\theta}} - \frac{1}{\sqrt{\cos\theta + \mu_1 \sin\theta}} \right) \right] \\ \tau_{xy} &= \frac{k_2}{\sqrt{2r}} \Re \left[\frac{1}{\mu_1 - \mu_2} \left(\frac{\mu_1}{\sqrt{\cos\theta + \mu_1 \sin\theta}} - \frac{\mu_2}{\sqrt{\cos\theta + \mu_2 \sin\theta}} \right) \right] \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (3.8)$$

$$\left. \begin{aligned} u &= k_2 \sqrt{2r} \Re \left[\frac{1}{\mu_1 - \mu_2} \left(p_2 \sqrt{\cos \theta + \mu_2 \sin \theta} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - p_1 \sqrt{\cos \theta + \mu_1 \sin \theta} \right) \right] \\ v &= k_2 \sqrt{2r} \Re \left[\frac{1}{\mu_1 - \mu_2} \left(q_2 \sqrt{\cos \theta + \mu_2 \sin \theta} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - q_1 \sqrt{\cos \theta + \mu_1 \sin \theta} \right) \right] \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (3.9)$$

面外せん断 (モード III) 問題の場合は, 特性方程式,

$$c_{44}\mu^2 + 2c_{45}\mu + c_{55} = 0 \dots\dots\dots (3.10)$$

の解 $\mu_3, \bar{\mu}_3$ を用いて,

$$\left. \begin{aligned} \tau_{xz} &= -\frac{k_3}{\sqrt{2r}} \Re \left[\frac{\mu_3}{\sqrt{\cos \theta + \mu_3 \sin \theta}} \right] \\ \tau_{yz} &= \frac{k_3}{\sqrt{2r}} \Re \left[\frac{1}{\sqrt{\cos \theta + \mu_3 \sin \theta}} \right] \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (3.11)$$

$$w = k_3 \sqrt{2r} \Re \left[\frac{\sqrt{\cos \theta + \mu_3 \sin \theta}}{c_{45} + \mu_3 c_{44}} \right] \dots\dots\dots (3.12)$$

のように表わされる.

本論文の第4章のモード II, III の MD 解析においては, 境界条件としてこれら変位の解析解を用い, 応力の解析解を結果の検討に用いている.

3.2.2 特異要素を用いた線形弾性解析

図 3.2(a) に示すような, 中央に長さ $2a$ のき裂を有する幅 $2w$, 長さ $4w$ の単結晶のブロックを, 長手方向に一定の速度で引張る問題を考える.

MD 解析のき裂先端部に対する初期原子配置と境界条件を評価する目的で微小変形線形弾性解を求める. 問題の対称性を考慮して図 3.2(a) のハッチングを施した $1/4$ 領域を図 3.2(b) のように要素分割する. 図 3.2(c) は, 図 3.2(b) の先端のハッチングした部分を拡大したもので先端を取り囲む 8 個の要素 (半径 $r = 2.083 \times 10^{-3}w$) は Barsoum の特異要素⁽¹¹⁾(図 3.3) を用い, 残りの 196 個は 8 節点アイソパラメトリック要素を用いて, 結晶配向による異方性を考慮した材料定数を用いて有限要素解析を行なう.

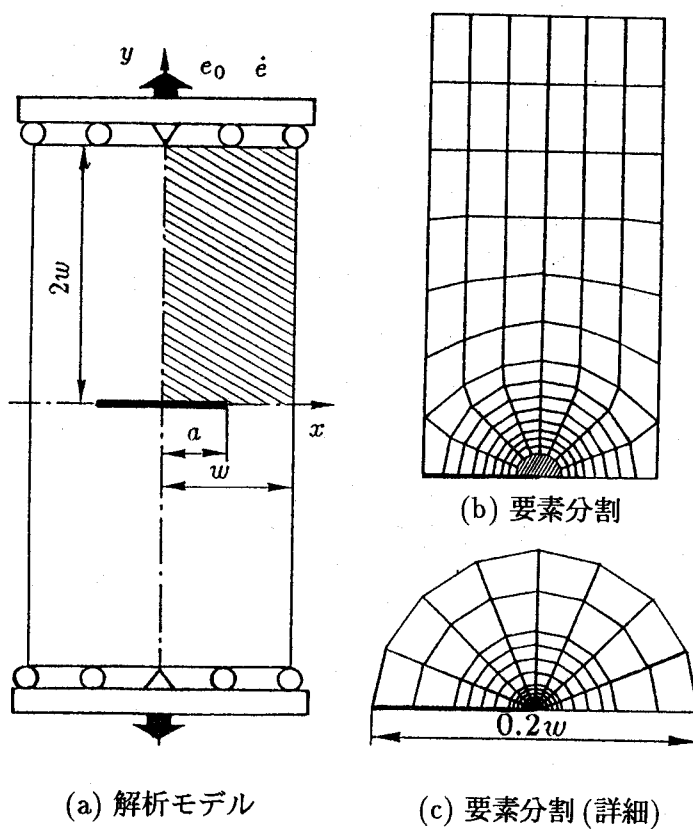


図 3-2 解析モデルと要素分割図

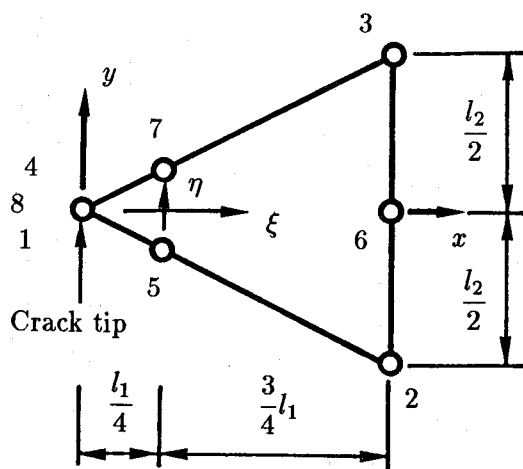


図 3-3 Barsoum の特異要素

Barsoum の特異要素では、先端近傍のひずみは、図 3.3 のき裂先端の節点 1,4,8 を一つの節点として、変位は同一の値であると自由度を限定する場合は、 $r^{-1/2}$ の特異性を示し、個々の節点を別々に扱う場合には、 $r^{-1/2}$ と r^{-1} を示す。

まず、等方性を仮定した解析結果では、図 3.4 に示したき裂先端近傍の x 軸上の相当ひずみは、き裂先端の節点の自由度を限定した場合、 $r^{-1/2}$ の特異性を有し、個々の節点を別々に扱う場合には、先端部で r^{-1} 、先端から少し離れたところで $r^{-1/2}$ の特異性を有していることがわかる。

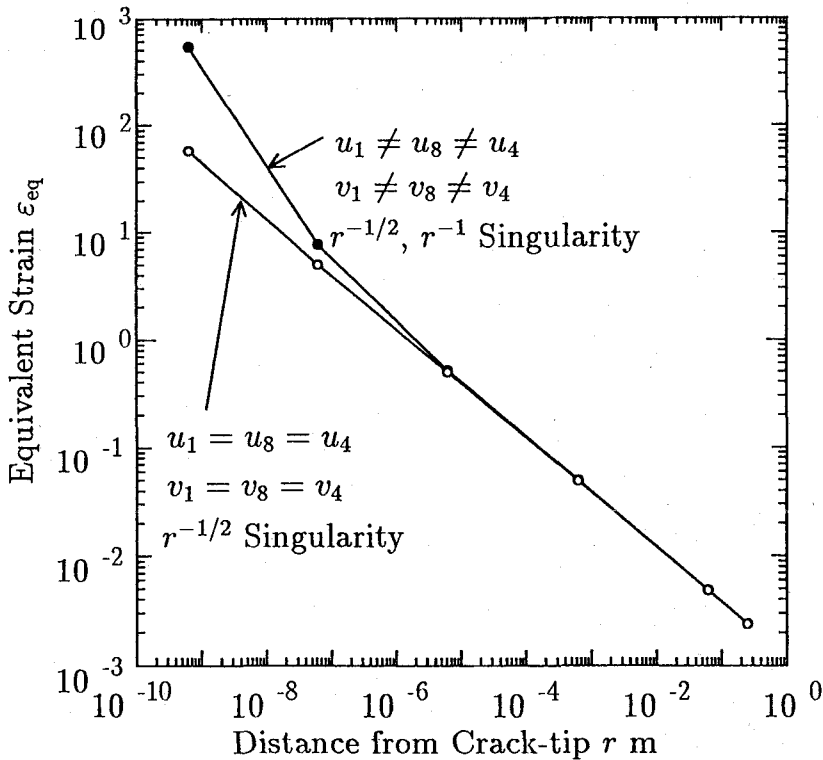


図 3.4 き裂先端の x 軸上相当ひずみ分布

また、隣接する要素間で応力値の差は小さく、先端部の周方向の応力分布はなめらかで、厳密解⁽¹²⁾とよく一致することを確認した後、MD 計算の初期条件と境界条件を決定するために、結晶の配向による異方性を考慮して解析し、き裂先端近傍の変位場を求めた。

3.3 結晶塑性論に基づく定式化

3.3.1 構成関係式

結晶構造を考慮した単結晶体の構成式

結晶内に生じる最も主要な塑性変形の様式は、材料の結晶構造によって決まる特定の結晶学的な面(すべり面)、方向(すべり方向)に沿って生じるすべり変形である。すべり面とすべり方向の組を指定すると一つのすべり系が定まる。一般に、一つの結晶中にはいくつかの等価なすべり系が存在する。

結晶が外部から力を受けたとき、それによって生じる、すべり面に沿うすべり方向のせん断応力成分である分解せん断応力がある値に達すると、そのすべり系はすべりを開始すると考える。そのときの分解せん断応力の値を臨界せん断応力と呼ぶ。この値は、すべり系によらず一定であると考え。図 3-5 に示すように、断面積 A 、引張方向とすべり面の法線方向、およびすべり方向とのなす角をそれぞれ ϕ 、 λ とするとき、軸引張力 F に対する分解せん断応力 τ は次式で計算できる。

$$\tau = \frac{F}{A} \cos \phi \cos \lambda \quad \dots\dots\dots (3.13)$$

$\cos \phi \cos \lambda$ は Schmid 因子と呼ばれ、分解せん断応力を決定する因子である。

Asaro, Needleman ら⁽⁸⁾⁽¹³⁾は、単結晶体の構成式を結晶体中に単一のすべり系の作動に対する次のような運動学的/力学的考察から検討している。

変形 1 結晶中のすべり面に沿うせん断(すべり)変形によって生じる塑性変形。

変形 2 結晶格子の変形と回転によって生じる非塑性変形。

均一な弾塑性変形を生じていると考えられる単結晶体が、ひずみ、応力が共に 0 であるような基準配置から現配置にいたる間で、変形 F を受けたとする。そして、 F は、変形 1、変形 2 に関連する変形に分解できて(それぞれ、添字 p 、 $*$ で表わすと)、変形こう配が次のように分解できるとする。すなわち、

$$F = F^* F^p \quad \dots\dots\dots (3.14)$$

と表わされると考える。図 3-6 に示すように、 F^p は結晶すべりによるもの、 F^* は結晶格子のゆがみと回転によるものである。

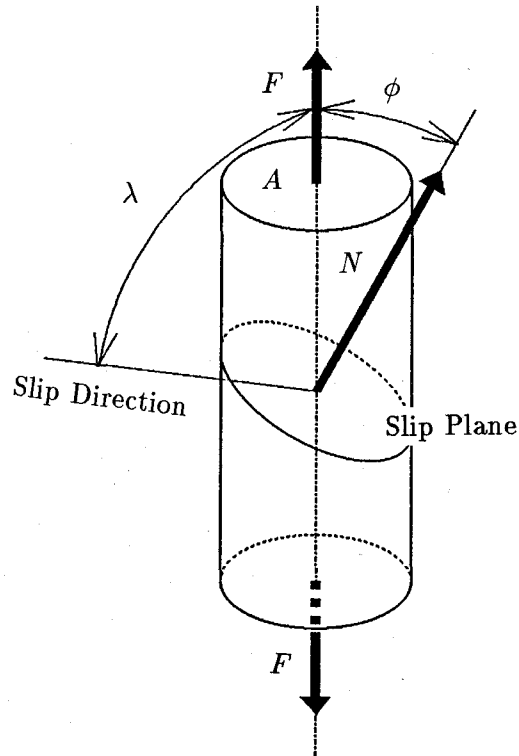


図 3.5 すべり変形における分解せん断応力

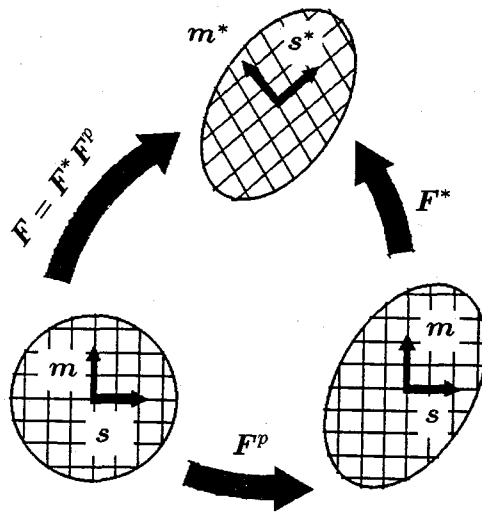


図 3.6 変形こう配の分解

式(3.14)を時間で偏微分した式を考えることから、速度こう配テンソル l は、次のように表わせる。

$$l = d + w = \dot{F}F^{-1} = \dot{F}^*F^{*-1} + F^*\dot{F}^pF^{p-1}F^{*-1} \dots\dots\dots (3.15)$$

ストレッチング d と、スピンテンソル w をそれぞれ非塑性、塑性部分に分けて、

$$\left. \begin{aligned} d &= d^* + d^p \\ w &= w^* + w^p \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (3.16)$$

とおくと、

$$\left. \begin{aligned} d^* + w^* &= \dot{F}^*F^{*-1} \\ d^p + w^p &= F^*\dot{F}^pF^{p-1}F^{*-1} \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (3.17)$$

が成り立つ。

さて、結晶のすべり方向ベクトルを s 、すべり面法線ベクトルを m とする。すべり変形 (F^p による変形1)を生じて、結晶内のすべり面に沿って相対的に原子間隔の整数倍だけずれた結果の原子配列は、変形前と等価であるので、物体点より見たときには、すべり面、すべり方向は変化しないので、 s 、 m は変化しないとする。式(3.14)は、基準状態の結晶に、まず変形 F^p が、ついで、 F^* が生じた結果、変形 F を受けた現状態にあると解釈し、変形後の、 s 、 m を s^* 、 m^* と表現する。

さて、一つのすべり系 α について、

$$m^{*(\alpha)} = m^{(\alpha)}F^{*-1} \dots\dots\dots (3.18)$$

となる。 α すべり系のせん断ひずみ速度を $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ とすると、

$$l^p = d^p + w^p = \sum_{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} s^{*(\alpha)} \otimes m^{*(\alpha)}. \dots\dots\dots (3.19)$$

そこで、テンソル $s^{*(\alpha)} \otimes m^{*(\alpha)}$ の対称部分 (Schmid 因子) $P^{(\alpha)}$ と、反対称部分 $W^{(\alpha)}$ を、

$$\left. \begin{aligned} P^{(\alpha)} &= \frac{1}{2}(s^{*(\alpha)} \otimes m^{*(\alpha)} + s^{*(\alpha)} \otimes m^{*(\alpha)}) \\ W^{(\alpha)} &= \frac{1}{2}(s^{*(\alpha)} \otimes m^{*(\alpha)} - s^{*(\alpha)} \otimes m^{*(\alpha)}) \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (3.20)$$

のように導入すると、

$$\left. \begin{aligned} d^p &= \sum_{(\alpha)} P^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \\ w^p &= \sum_{(\alpha)} W^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (3.21)$$

のように表現することができる。

材料の弾性の構成関係式を次のように置く。

$$\overset{\circ}{T}^* \equiv \overset{\circ}{T} + T \operatorname{tr} d^* = Ld \dots\dots\dots (3.22)$$

ここで、 $\overset{\circ}{T}^*$ は、格子の回転に関する Kirchhoff 応力の共回転速度であり、 L は弾性係数テンソルである。格子の回転に関する Cauchy 応力の共回転速度 $\overset{\circ}{T}^*$ は、

$$\overset{\circ}{T}^* = \dot{T} - w^* T + T w^* \dots\dots\dots (3.23)$$

と表わされる。ここで、Cauchy 応力の共回転速度 $\overset{\circ}{T}$ の関係、

$$\overset{\circ}{T} = \dot{T} - wT + Tw \dots\dots\dots (3.24)$$

および、式 (3.21)、 $\operatorname{tr} d^p = 0$ などを、式 (3.22)、(3.23) に適用し、 d^* 、 d^p を消去すれば、客観性のある Kirchhoff 応力の共回転速度について、

$$\overset{\circ}{T} \equiv \overset{\circ}{T} + T \operatorname{tr} d = Ld - \sum_{(\alpha)} R^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \dots\dots\dots (3.25)$$

が得られる。ここで、 $R^{(\alpha)}$ は、

$$R^{(\alpha)} = LP^{(\alpha)} + \beta^{(\alpha)} \dots\dots\dots (3.26)$$

とし、 $\beta^{(\alpha)}$ は、

$$\beta^{(\alpha)} = W^{(\alpha)} T + TW^{(\alpha)} \dots\dots\dots (3.27)$$

とする。

ひずみ速度依存形の定式化

ここでは、構成式を客観性のある応力速度とひずみ速度で表現するための定式化を行なうため、式 (3.25) に現われる $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ を d で表現することを考える。

ひずみ速度依存性を考慮できる定式化⁽¹³⁾を用いる。この場合の定式化では式(3.19)に現われる $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ は、各々のすべり系における現在の分解せん断応力および現在の内部構造に依存して決定されるパラメータによって決まる。

Schmid の分解せん断応力 $\tau^{(\alpha)}$ は、

$$\tau^{(\alpha)} = \mathbf{s}^{*(\alpha)}(\mathbf{T}\mathbf{m}^{*(\alpha)}) = \text{tr}(\mathbf{P}^{(\alpha)}\mathbf{T}) \quad \dots\dots\dots (3.28)$$

である。さて、すべり方向を表わすベクトル $\mathbf{s}^{(\alpha)}$ は、結晶格子に埋め込まれて変化し、また、 $\mathbf{m}^{(\alpha)}$ は変形後のすべり面に垂直で、その大きさはすべり面の面積に比例して増加すると考えると、すべり方向単位ベクトルの時間変化率 $\dot{\mathbf{s}}^{*(\alpha)}$ と、すべり面単位法線ベクトルの時間変化率 $\dot{\mathbf{m}}^{*(\alpha)}$ は、次のように定義できる。

$$\left. \begin{aligned} \dot{\mathbf{s}}^{*(\alpha)} &= (\mathbf{d}^* + \mathbf{w}^*)\mathbf{s}^{*(\alpha)} \\ \dot{\mathbf{m}}^{*(\alpha)} &= -\mathbf{m}^{*(\alpha)}(\mathbf{d}^* + \mathbf{w}^*) + \mathbf{m}^{*(\alpha)} \text{tr} \mathbf{d}^* \end{aligned} \right\} \quad \dots\dots\dots (3.29)$$

式(3.28)の時間微分をとり、式(3.23)、(3.29)などを用いると、

$$\begin{aligned} \dot{\tau}^{(\alpha)} &= \dot{\mathbf{m}}^{(\alpha)}\mathbf{T}\mathbf{s}^{(\alpha)} + \mathbf{m}^{(\alpha)}\dot{\mathbf{T}}\mathbf{s}^{(\alpha)} + \mathbf{m}^{(\alpha)}\mathbf{T}\dot{\mathbf{s}}^{(\alpha)} \\ &= \mathbf{m}^{(\alpha)} \left(\overset{\circ}{\mathbf{T}} + \mathbf{T}\text{tr}\mathbf{d}^* - \mathbf{d}^*\mathbf{T} + \mathbf{T}\mathbf{d}^* \right) \mathbf{s}^{(\alpha)} \quad \dots\dots\dots (3.30) \end{aligned}$$

式(3.22)を代入し、さらに式(3.20)、(3.26)を用いて $\mathbf{R}^{(\alpha)}$ を導入すると、

$$\begin{aligned} \dot{\tau}^{(\alpha)} &= \text{tr}(\mathbf{R}^{(\alpha)}\mathbf{d}^*) \\ &= \text{tr}(\mathbf{R}^{(\alpha)}\mathbf{d}) - \sum_{(\beta)} \text{tr}(\mathbf{R}^{(\alpha)}\mathbf{P}^{(\beta)})\dot{\gamma}^{(\beta)} \quad \dots\dots\dots (3.31) \end{aligned}$$

一方、せん断速度 $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ に対する表現として、Pan, Rice ら⁽¹⁴⁾によって用いられたべき乗則、

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} = \dot{a}^{(\alpha)} \left(\frac{\tau^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}} \right) \left| \frac{\tau^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}} \right|^{\frac{1}{m}-1} \quad \dots\dots\dots (3.32)$$

を採用する。ここで、関数 $g^{(\alpha)}$ は現在の結晶のひずみ硬化状態を特徴づける量であり、次のように単純にすべり量 γ の和に依存していると考える。

$$g^{(\alpha)} = g^{(\alpha)}(\gamma) \quad \dots\dots\dots (3.33)$$

ここで、

$$\gamma = \sum_{(\alpha)} |\gamma^{(\alpha)}| \dots\dots\dots (3.34)$$

$g^{(\alpha)}$ の物理的な意味は次のようなものと考えられる。すなわち、もし変形履歴を通して、すべり系 α におけるせん断速度が $\dot{a}^{(\alpha)}$ であるなら、 $\tau^{(\alpha)} = g^{(\alpha)}(\gamma)$ はそのすべり系での基準 τ - γ 関係を意味する。 $\dot{a}^{(\alpha)}$ は、それに対応する基準せん断速度であり、 m は速度感度指数で、速度独立な材料応答は、 $m \rightarrow 0$ とした極限の場合に対応する。

降伏前の状態 ($\gamma = 0$) における g の値を、ここでは τ_0 とし、 $g^{(\alpha)}$ の発展方程式を

$$\dot{g}^{(\alpha)} = \sum_{(\beta)} h_{\alpha\beta} |\dot{\gamma}^{(\beta)}| \dots\dots\dots (3.35)$$

で与える。硬化係数 $h_{\alpha\beta}$ については後述する。

式 (3.32) よりわかるように、この定式化においては明確な降伏現象はない。すなわち、ある系において分解せん断応力 τ の値が零でないなら、せん断すべりが生じていることになる。しかしながら、ここで用いているような速度感度指数 m ($m \leq 0.02$) においては、 τ が τ_0 より小さい時にはせん断すべりは非常に小さい。式 (3.32) のように、 $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ の符号は $\tau^{(\alpha)}$ に一致するように与えられる。

式 (3.25) を式 (3.32) とともに速度形の仮想仕事の原理式に適用する際に、解析の安定性を向上させる目的で接線係数法を導入する。これは、 $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ の時間ステップの間における変化を考慮することによって、時刻 t において、時間ステップ Δt の間の α すべり系のすべり量の増分を

$$\Delta\gamma^{(\alpha)} = \left\{ (1 - \theta) \dot{\gamma}^{(\alpha)}(t) + \theta \dot{\gamma}^{(\alpha)}(t + \Delta t) \right\} \Delta t \dots\dots\dots (3.36)$$

のように評価する。ただし、 θ の範囲は ($0 < \theta < 1$) である。上式の最後の項を近似するため、式 (3.32) を用いて Taylor 展開すると、

$$\begin{aligned} & \dot{\gamma}^{(\alpha)}(t + \Delta t) \\ &= \dot{\gamma}^{(\alpha)}(t) + \left. \frac{\partial \dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\partial \tau^{(\alpha)}} \right|_t \Delta\tau^{(\alpha)} + \left. \frac{\partial \dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\partial g^{(\alpha)}} \right|_t \Delta g^{(\alpha)} \\ &= \text{sgn}(\tau^{(\alpha)}) \dot{a}^{(\alpha)} \left| \frac{\tau^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}} \right|^{\frac{1}{m}} \left\{ 1 + \frac{1}{m} \left(\frac{\Delta\tau^{(\alpha)}}{\tau^{(\alpha)}} - \frac{\Delta g^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}} \right) \right\} \dots\dots\dots (3.37) \end{aligned}$$

ただし、 $\Delta\tau^{(\alpha)} = \dot{\tau}^{(\alpha)} \Delta t$ 、 $\Delta g^{(\alpha)} = \dot{g}^{(\alpha)} \Delta t$ である。 $\text{sgn}(a)$ は、 a の符号を与え

る。式(3.31), (3.35), (3.37)などを式(3.36)に適用することにより次式を得る。

$$\begin{aligned}\Delta\gamma^{(\alpha)} &= \dot{\gamma}_t^{(\alpha)}\Delta t + \frac{\theta\Delta t\dot{\gamma}_t^{(\alpha)}}{m\tau^{(\alpha)}}\text{tr}(\mathbf{R}^{(\alpha)}\mathbf{d}) \\ &= -\frac{\theta\Delta t\dot{\gamma}_t^{(\alpha)}}{m\tau^{(\alpha)}}\sum_{(\beta)}\text{tr}(\mathbf{R}^{(\alpha)}\mathbf{P}^{(\beta)})\dot{\gamma}^{(\beta)} \\ &\quad -\frac{\theta\Delta t\dot{\gamma}_t^{(\alpha)}}{mg^{(\alpha)}}\sum_{(\beta)}(h_{\alpha\beta})\text{sgn}(\dot{\gamma}^{(\beta)})\dot{\gamma}^{(\beta)} \dots\dots\dots (3.38)\end{aligned}$$

ここで,

$$\dot{\gamma}_t^{(\alpha)} = \dot{a}^{(\alpha)}\left(\frac{\tau^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}}\right)\left|\frac{\tau^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}}\right|^{\frac{1}{m}-1} \dots\dots\dots (3.39)$$

とされている。式(3.38)を整理して,

$$\sum_{(\beta)}N_{\alpha\beta}\Delta\gamma^{(\beta)} = \left(\dot{\gamma}_t^{(\alpha)} + \text{tr}(\mathbf{Q}^{(\alpha)}\mathbf{d})\right)\Delta t \dots\dots\dots (3.40)$$

と簡潔な形に書き表わす。ただし、上に現われる $\mathbf{Q}^{(\alpha)}$, $N_{\alpha\beta}$ は次のように定義される。

$$\mathbf{Q}^{(\alpha)} = \left(\frac{\theta\Delta t\dot{\gamma}_t^{(\alpha)}}{m\tau^{(\alpha)}}\right)\mathbf{R}^{(\alpha)} \dots\dots\dots (3.41)$$

$$N_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} + \left(\frac{\theta\Delta t\dot{\gamma}_t^{(\alpha)}}{m}\right)\left(\frac{\text{tr}(\mathbf{R}^{(\alpha)}\mathbf{P}^{(\beta)})}{\tau^{(\alpha)}} + \text{sgn}(\tau^{(\beta)})\frac{h_{\alpha\beta}}{g^{(\alpha)}}\right) \dots\dots\dots (3.42)$$

である。もし、 $N_{\alpha\beta}$ が正則ならば、 $N_{\alpha\beta}$ の逆行列 $M_{\alpha\beta}$ を考えることができ、

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} = \left(\dot{f}^{(\alpha)} + \mathbf{F}^{(\alpha)}\mathbf{d}\right) \dots\dots\dots (3.43)$$

$$\Delta\gamma^{(\alpha)} = \dot{\gamma}^{(\alpha)}\Delta t \dots\dots\dots (3.44)$$

ただし,

$$\dot{f}^{(\alpha)} = \sum_{(\beta)}M_{\alpha\beta}\dot{\gamma}_t^{(\beta)} \dots\dots\dots (3.45)$$

$$\mathbf{F}^{(\alpha)} = \sum_{(\beta)}M_{\alpha\beta}\mathbf{Q}^{(\beta)} \dots\dots\dots (3.46)$$

こうして得られた式 (3.43) を, 式 (3.25) に代入すると,

$$\begin{aligned}\overset{\circ}{T} & (= \overset{\circ}{T} + T \operatorname{tr} d) \\ & = Ld - \sum_{(\alpha)} R^{(\alpha)} (\dot{f}^{(\alpha)} + \operatorname{tr}(F^{(\alpha)} d)) \\ & = \left(L - \sum_{(\alpha)} R^{(\alpha)} \otimes F^{(\alpha)} \right) d - \sum_{(\alpha)} R^{(\alpha)} \dot{f}^{(\alpha)} \dots\dots\dots (3.47)\end{aligned}$$

が得られる. ここで,

$$D^v = L - \sum_{(\alpha)} R^{(\alpha)} \otimes F^{(\alpha)} \dots\dots\dots (3.48)$$

とすると,

$$\overset{\circ}{T} = D^v d - \sum_{(\alpha)} R^{(\alpha)} \dot{f}^{(\alpha)} \dots\dots\dots (3.49)$$

となり, これがひずみ速度依存形の定式化で用いられる構成関係式である.

硬化係数

構成式の中で最も重要な働きをするパラメータが, 硬化係数 $h_{\alpha\beta}$ である. 以下にその具体形を述べる.

いろいろな硬化係数の形が提案されており, Taylor⁽¹⁵⁾, Koiter, Budiansky と Wu, Hutchinson, Havner と Shalby, Peirce と Asaro および Needleman⁽¹⁶⁾ により提案されたものなどが挙げられる (詳細は, 文献 (1) など参照).

ここで用いる定式化においては,

$$h_{\alpha\beta} = qH + (1 - q)H\delta_{\alpha\beta} \dots\dots\dots (3.50)$$

とする. ここで, q は自己硬化と潜在硬化の比を表わすもので, 潜在硬化比と呼ぶ. さらに $H(\gamma)$ は,

$$H(\gamma) = \frac{d\tau(\gamma)}{d\gamma} \dots\dots\dots (3.51)$$

であり, 第 4 章では, 丸みのあるき裂の有限変形解析に対して Peirce らによる,

$$\tau(\gamma) = \tau_0 + (\tau_s - \tau_0) \tanh \left(\frac{H_0 \gamma}{\tau_s - \tau_0} \right) \dots\dots\dots (3.52)$$

および、鋭利なき裂の微小変形解析に対して完全塑性的な

$$\tau(\gamma) = \tau_0 \quad \dots\dots\dots (3-53)$$

を用いている。 $N_{\alpha\beta}$ が、正定値でなくなることは、速度こう配に対するすべり系の挙動が、唯一に決まらなくなることを意味するが、ひずみ速度依存形の場合、 Δt を十分に小さくすることで、必ず $N_{\alpha\beta}$ の逆行列が得られ、すべり系が唯一に決定できないことによる解析上の特異性が除かれるという利点を持つ。

3.3.2 仮想仕事の原理のマトリクス表示

有限要素解析の基礎式となる速度形の仮想仕事の原理式を変分 δv に対し、現配置において定義される量により表わし、成分表示すると次のようになる。

$$\int_V \dot{\hat{T}}_{ij} \delta l_{ij} dv = \int_{\partial V_F} \bar{t}_i \delta v_i da \quad \dots\dots\dots (3-54)$$

ここで、 $\dot{\hat{T}}$ は、公称応力速度で、 ∂V_F 上で $\bar{t}$ が規定されているとする。なお、簡単のため、物体力および変位規定境界を考えない。式(3-54)に、前節で示した構成式を代入するために客観性のある応力速度を次のように定義する¹。Jaumann の応力速度 (共回転速度) は、

$$\overset{\circ}{T} \equiv \dot{T} - wT + Tw \quad \dots\dots\dots (3-55)$$

Kirchhoff 応力の共回転速度は、

$$\overset{\circ}{\hat{T}} \equiv \overset{\circ}{T} + T \operatorname{tr} l \quad \dots\dots\dots (3-56)$$

Oldroyd の応力速度は、

$$\overset{\nabla}{T} \equiv \dot{T} - lT - Tl^T \quad \dots\dots\dots (3-57)$$

Truesdell の応力速度は、

$$\dot{T} \equiv \overset{\nabla}{T} + T \operatorname{tr} l \quad \dots\dots\dots (3-58)$$

公称応力速度は、

$$\dot{\hat{T}} \equiv \overset{\circ}{\hat{T}} - Td + wT = \overset{\circ}{T} + lT. \quad \dots\dots\dots (3-59)$$

¹ これら応力速度の呼称および定義は、北川の著書⁽¹⁷⁾による。

のように定義される。ここで、 $\dot{T}$ は Cauchy 応力の物質時間微分である。さらに、これらの定義式から、

$$\dot{T} = \overset{\circ}{T} - (dT + Td) \dots\dots\dots (3.60)$$

ここで、

$$\tilde{F}_{ijkl} = \frac{1}{2}(T_{lj}\delta_{ki} + T_{kj}\delta_{li} + T_{li}\delta_{kj} + T_{li}\delta_{lj}) \dots\dots\dots (3.61)$$

を導入すると、

$$\dot{T} = \overset{\circ}{T} - \tilde{F}d \dots\dots\dots (3.62)$$

と書き直せる。構成関係式 (3.49) を代入して

$$\dot{T} = (D^v - \tilde{F})d - \sum_{(\alpha)} R^{(\alpha)} \dot{f}^{(\alpha)} \dots\dots\dots (3.63)$$

さらに、式 (3.59) より、

$$\dot{T} = (D^v - \tilde{F})d - \sum_{(\alpha)} R^{(\alpha)} \dot{f}^{(\alpha)} + lT \dots\dots\dots (3.64)$$

これを式 (3.54) に代入して、

$$\begin{aligned} & \int_V \{ (D_{ijkl}^v - \tilde{F}_{ijkl}) d_{kl} - \sum_{(\alpha)} R_{ij}^{(\alpha)} \dot{f}^{(\alpha)} + l_{im} T_{mj} \} \delta l_{ij} dv \\ &= \int_{\partial V_F} \bar{t}_i \delta v_i da \dots\dots\dots (3.65) \end{aligned}$$

この式をマトリクスにより表示する。

以下のマトリクス表示において、添字 1, 2, 3 はそれぞれデカルト座標系の x , y , z に対応し、2 次元解析領域は $x - y$ 平面と考えている。

ストレッチング、速度こう配ベクトル、速度および表面力の変化率ベクトルを

$$\left. \begin{aligned} \{d\} &= (d_{11}, d_{22}, d_{33}, 2d_{12}, 2d_{23}, 2d_{31})^T \\ \{l\} &= (v_{1,1}, v_{2,2}, v_{3,3}, v_{1,2}, v_{1,3}, v_{2,1}, v_{2,3}, v_{3,1}, v_{3,2})^T \\ \{v\} &= (v_1, v_2, v_3)^T \\ \{\bar{t}\} &= (\bar{t}_1, \bar{t}_2, \bar{t}_3)^T \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (3.66)$$

と表わし、Cauchy 応力を

$$\{T\} = (T_{11}, T_{22}, T_{33}, T_{12}, T_{23}, T_{31})^T \dots\dots\dots (3.67)$$

と置く。各種の応力速度も同様なベクトルで表現されるものとする。また、

$$[D^v] = \begin{bmatrix} D_{11}^v & D_{12}^v & D_{13}^v & D_{14}^v & D_{15}^v & D_{16}^v \\ & D_{22}^v & D_{23}^v & D_{24}^v & D_{25}^v & D_{26}^v \\ & & D_{33}^v & D_{34}^v & D_{35}^v & D_{36}^v \\ & & & D_{44}^v & D_{45}^v & D_{46}^v \\ & & & & D_{55}^v & D_{56}^v \\ \text{Sym.} & & & & & D_{66}^v \end{bmatrix} \dots\dots\dots (3.68)$$

と表わす。 $\tilde{F}$ はマトリクス表示で次のようになる。

$$[\tilde{F}] = \begin{bmatrix} 2T_{11} & 0 & 0 & T_{12} & 0 & T_{31} \\ & 2T_{22} & 0 & T_{12} & T_{23} & 0 \\ & & 2T_{33} & 0 & T_{23} & T_{31} \\ & & & \frac{(T_{11} + T_{22})}{2} & \frac{T_{31}}{2} & \frac{T_{23}}{2} \\ & & & & \frac{(T_{22} + T_{33})}{2} & \frac{T_{12}}{2} \\ \text{Sym.} & & & & & \frac{(T_{33} + T_{11})}{2} \end{bmatrix} \dots\dots\dots (3.69)$$

また、次のマトリクス $[Q]$ を導入する。

$$[Q] = \begin{bmatrix} T_{11} & 0 & 0 & T_{12} & T_{31} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & T_{22} & 0 & 0 & 0 & T_{12} & T_{23} & 0 & 0 \\ & & T_{33} & 0 & 0 & 0 & 0 & T_{31} & T_{23} \\ & & & T_{22} & T_{23} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & & & & T_{33} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & & & & & T_{11} & T_{31} & 0 & 0 \\ & & & & & & T_{33} & 0 & 0 \\ & & & & & & & T_{11} & T_{12} \\ \text{Sym.} & & & & & & & & T_{22} \end{bmatrix} \dots\dots\dots (3.70)$$

また、 $1, 2, \dots, \nu$ までのすべり系を考察する場合、速度依存性を考慮した構成式に伴う項を次のようにマトリクス表示する。

$$[\mathbf{R}] = \begin{bmatrix} R_{11}^{(1)} & R_{11}^{(2)} & \cdots & R_{11}^{(\nu)} \\ R_{22}^{(1)} & R_{22}^{(2)} & \cdots & R_{22}^{(\nu)} \\ R_{33}^{(1)} & R_{33}^{(2)} & \cdots & R_{33}^{(\nu)} \\ R_{12}^{(1)} & R_{12}^{(2)} & \cdots & R_{12}^{(\nu)} \\ R_{23}^{(1)} & R_{23}^{(2)} & \cdots & R_{23}^{(\nu)} \\ R_{31}^{(1)} & R_{31}^{(2)} & \cdots & R_{31}^{(\nu)} \end{bmatrix} \dots\dots\dots (3.71)$$

$$\{\dot{\mathbf{f}}\} = (\dot{f}^{(1)}, \dot{f}^{(2)}, \dots, \dot{f}^{(\nu)})^T \dots\dots\dots (3.72)$$

これらのマトリクスを用いて仮想仕事の原理を表わすと次のようになる。

$$\begin{aligned} & \int_V (\delta\{\mathbf{d}\}^T [\mathbf{D}^v] \{\mathbf{d}\} + \delta\{\mathbf{l}\}^T [\mathbf{Q}] \{\mathbf{l}\}) dv \\ &= \int_{V_F} \delta\{\mathbf{v}\}^T \{\mathbf{t}\} da + \int_V \delta\{\mathbf{d}\}^T [\mathbf{R}] \{\dot{\mathbf{f}}\} dv \dots\dots\dots (3.73) \end{aligned}$$

3.3.3 平面問題の取り扱い

前節で導かれた速度依存性構成関係式 (3.49) について、式 (3.66), (3.68), (3.71), (3.72) などを用いてマトリクス表示を行なう。

$$\overset{\circ}{\{\tilde{\mathbf{T}}\}} = [\mathbf{D}^v] \{\mathbf{d}\} - [\mathbf{R}] \{\dot{\mathbf{f}}\} \dots\dots\dots (3.74)$$

$$\{\mathbf{t}\} = [\mathbf{R}] \{\dot{\mathbf{f}}\} = \{t_1, t_2, \dots, t_6\}^T \dots\dots\dots (3.75)$$

とにおいて、式 (3.74) 中のベクトルを、 z 方向成分に関係するもの (添字 I) と、そうでないもの (添字 II) とに分離する。

$$\left. \begin{aligned} \overset{\circ}{\{\tilde{\mathbf{T}}_I\}} &= (\overset{\circ}{\tilde{T}}_{11}, \overset{\circ}{\tilde{T}}_{22}, \overset{\circ}{\tilde{T}}_{12})^T, & \overset{\circ}{\{\tilde{\mathbf{T}}_{II}\}} &= (\overset{\circ}{\tilde{T}}_{33}, \overset{\circ}{\tilde{T}}_{23}, \overset{\circ}{\tilde{T}}_{31})^T \\ \{\mathbf{d}_I\} &= (d_{11}, d_{22}, 2d_{12})^T, & \{\mathbf{d}_{II}\} &= (d_{33}, 2d_{23}, 2d_{31})^T \\ \{\mathbf{t}_I\} &= (t_1, t_2, t_4)^T, & \{\mathbf{t}_{II}\} &= (t_3, t_5, t_6)^T \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (3.76)$$

また、

$$\begin{aligned} [\mathbf{D}_I^v] &= \begin{bmatrix} D_{11}^v & D_{12}^v & D_{14}^v \\ D_{21}^v & D_{22}^v & D_{24}^v \\ D_{41}^v & D_{42}^v & D_{44}^v \end{bmatrix}, & [\mathbf{D}_{II}^v] &= \begin{bmatrix} D_{13}^v & D_{15}^v & D_{16}^v \\ D_{23}^v & D_{25}^v & D_{26}^v \\ D_{43}^v & D_{45}^v & D_{46}^v \end{bmatrix} \\ [\mathbf{D}_{IV}^v] &= \begin{bmatrix} D_{33}^v & D_{35}^v & D_{36}^v \\ D_{53}^v & D_{55}^v & D_{56}^v \\ D_{63}^v & D_{65}^v & D_{66}^v \end{bmatrix} \dots\dots\dots (3.77) \end{aligned}$$

とすると、式(3.74)は、

$$\begin{Bmatrix} \overset{\circ}{\tilde{T}}_I \\ \overset{\circ}{\tilde{T}}_{II} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} [D_I^v] & [D_{II}^v] \\ [D_{II}^v]^T & [D_{IV}^v] \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \{d_I\} \\ \{d_{II}\} \end{Bmatrix} - \begin{Bmatrix} \{t_I\} \\ \{t_{II}\} \end{Bmatrix} \quad \dots\dots\dots (3.78)$$

と書ける。ここでは、2次元問題(平面ひずみ、平面応力問題)に帰着させるために、

$$\{\overset{\circ}{\tilde{T}}_I\} = [D_{2D}^v]\{d_I\} - \{t_{2D}\} \quad \dots\dots\dots (3.79)$$

の形になるように定式化を行なう。

平面ひずみ問題に対する定式化

平面ひずみ問題においては、 $\{d_{II}\} = \{0\}$ と仮定することにより、

$$\{\overset{\circ}{\tilde{T}}_I\} = [D_I^v]\{d_I\} - \{t_I\} \quad \dots\dots\dots (3.80)$$

したがって、式(3.79)の形に整理すると、

$$\left. \begin{aligned} [D_{2D}^v] &= [D_I^v] \\ \{t_{2D}\} &= \{t_I\} \end{aligned} \right\} \quad \dots\dots\dots (3.81)$$

未知の応力速度成分は、

$$\{\overset{\circ}{\tilde{T}}_{II}\} = [D_{II}^v]^T \{d_I\} - \{t_{II}\} \quad \dots\dots\dots (3.82)$$

で求めることができる。

平面応力問題に対する定式化

ここで平面応力問題の条件として、Cauchy 応力および、その物質時間微分の z 方向に関連する成分が、0 であるとする。

$$T_{33} = T_{23} = T_{31} = 0, \quad \dot{T}_{33} = \dot{T}_{23} = \dot{T}_{31} = 0 \quad \dots\dots\dots (3.83)$$

先の定義式より、Cauchy 応力の物質時間微分と、Kirchhoff 応力の共回転速度の関係は、

$$\overset{\circ}{\tilde{T}} = \dot{T} - wT + Tw + T \operatorname{tr} l \quad \dots\dots\dots (3.84)$$

となる。速度 $v_i (i=1,2,3)$ は z 方向に一様に分布すると仮定すると、 $l_{i3} = 0, (i=1,2,3)$ となる。したがって、

$$w_{31} = -w_{13} = \frac{1}{2}l_{31} = d_{31}, \quad w_{32} = -w_{23} = \frac{1}{2}l_{32} = d_{23} \quad \dots\dots\dots (3.85)$$

式 (3.85) を式 (3.84) に代入すると、 $\{\dot{T}_{II}\}$ は、

$$\begin{aligned} \{\dot{T}_{II}\} &= \{\overset{\circ}{T}_{II}\} + [D^*]\{d_{II}\} \\ &= [D_{II}^v]^T \{d_I\} + ([D_{IV}^v] + [D^*])\{d_{II}\} - \{t_{II}\} \\ &= [D_{II}^v]^T \{d_I\} + [D_{IV}^*]\{d_{II}\} - \{t_{II}\} \quad \dots\dots\dots (3.86) \end{aligned}$$

ここで、

$$[D^*] = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & T_{22} & T_{12} \\ 0 & T_{12} & T_{11} \end{bmatrix} \quad \dots\dots\dots (3.87)$$

さらに、

$$[D_{IV}^*] = [D_{IV}^v] + [D^*] \quad \dots\dots\dots (3.88)$$

としている。式 (3.83) より、 $\{\dot{T}_{II}\} = \{0\}$ とおくと、

$$\{d_{II}\} = [D_{IV}^*]^{-1} \{t_{II}\} - [D_{IV}^*]^{-1} [D_{II}^v]^T \{d_I\} \quad \dots\dots\dots (3.89)$$

となるから、

$$\begin{aligned} \{\overset{\circ}{T}_I\} &= ([D_I^v] - [D_{II}^v][D_{IV}^*]^{-1}[D_{II}^v]^T) \{d_I\} \\ &\quad - \{t_I\} + [D_{II}^v][D_{IV}^*]^{-1} \{t_{II}\} \quad \dots\dots\dots (3.90) \end{aligned}$$

したがって、式 (3.79) の形に整理すると、

$$\left. \begin{aligned} [D_{2D}^v] &= [D_I^v] - [D_{II}^v][D_{IV}^*]^{-1}[D_{II}^v]^T \\ \{t_{2D}\} &= \{t_I\} - [D_{II}^v][D_{IV}^*]^{-1} \{t_{II}\} \end{aligned} \right\} \quad \dots\dots\dots (3.91)$$

と表わせる。未知のひずみ成分は、式 (3.89) で求めることができる。

このようにして、実際の結晶をモデルとした 3 次元的なすべり系を考えた場合にも、平面問題としての取り扱いが可能になる。

3.4 結晶塑性論に基づく延性き裂の解析

3.4.1 結晶塑性モデル

2次元モデル

以上のような結晶塑性モデルの有効性を検討することを意図して、ここでは、つぎのような2次元問題の解析を行なう。

変形はすべて、 $x-y$ 面内の平面ひずみ状態で生じるとし、すべり方向、すべり面ベクトルは $x-y$ 面内のベクトルとして指定できるものとする。 $x-y$ 面に垂直なすべり面を持ち、同時に作動する $x-y$ 面に対称なすべり方向を有するすべり系の組、あるいは、同一のすべり方向に $x-y$ 面に対称な二つのすべり面で同時に作動するすべり系の組が存在する場合にこのような表現によるすべり変形が可能となる。以下の解析では図 3.7 に示すように、2, 5, 10 個のすべり系よりなっているとす。2すべりモデルは、Asaro が FCC 結晶が特定の方向をとった場合に対して提案したもの⁽¹⁸⁾、5, 10 すべりモデルは、厚さ方向に多数の結晶粒が重なっている多結晶体の平面ひずみ変形下の応答を近似するための仮想的なものである。それぞれのモデルの意味については、解析結果によって検討を加えることにする。

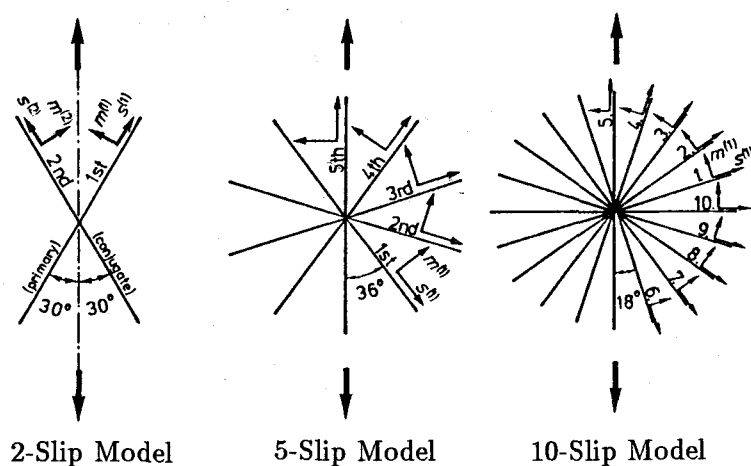


図 3.7 すべり系の配置

材料特性値

解析に用いる材料特性値は以下のとおりである.

- ・ 速度依存性パラメータ $m = 0.005, 0.02$
- ・ 硬化特性
 - ・ $q = 1, E = 200\text{GPa}, \nu = 0.3, n = 0.1$ (全モデル共通)
 - ・ $\tau(\gamma) = \tau_0(H_0\gamma/n\tau_0 + 1)^n$
 - $\tau_0 = 194.871\text{MPa}, H_0 = 3.85\text{GPa}$ (2 すべりモデル)
 - $\tau_0 = 214.005\text{MPa}, H_0 = 4.64\text{GPa}$ (5 すべりモデル)
 - $\tau_0 = 219.000\text{MPa}, H_0 = 4.65\text{GPa}$ (10 すべりモデル)

なお, τ_0 と H_0 の値を各モデルごとに変えているのは, 図 3-7 中に示している矢印の方向に引張変形を加えた場合の巨視的な応力ひずみ関係を, n 乗硬化型の式

$$\sigma = \sigma_0 \left(\frac{E}{\sigma_0} \varepsilon \right)^n, \dots\dots\dots (3.92)$$

($E = 200\text{GPa}, \sigma_0 = 400\text{MPa}, \nu = 0.3, n = 0.1$) にほぼ一致させるためである.

3.4.2 延性き裂の開口, 進展挙動の解析と考察

これまでに述べた結晶塑性モデルの特性を検討し, 可能性を調べるために, 中央き裂を有する長方形のブロックの平面ひずみ変形下での引張問題を解析する. なお, 解析プログラムまでをも含めた信頼性の確認のために行なった, 同じく平面ひずみブロックに一方向引張を加えた下で生じるせん断帯状局所変形の解析結果と, Peirce ら⁽¹⁶⁾の解の比較を付録 (I) で議論している.

解析モデル

図 3-8 に示すように, 端部に微小な丸みを持つ中央き裂が, モード I 型で開口する問題を解析する. 図中に示した 3 種類のき裂の長さについて, 図 3-9 に示した有限要素分割パターンを用いた解析を実施する. なお, 有限要素としては, 8 節点アイソパラメトリック要素を用い, 塑性非圧縮性に起因するいわゆるロッキング現象を回避するために低減積分法による要素特性の評価を行なう.

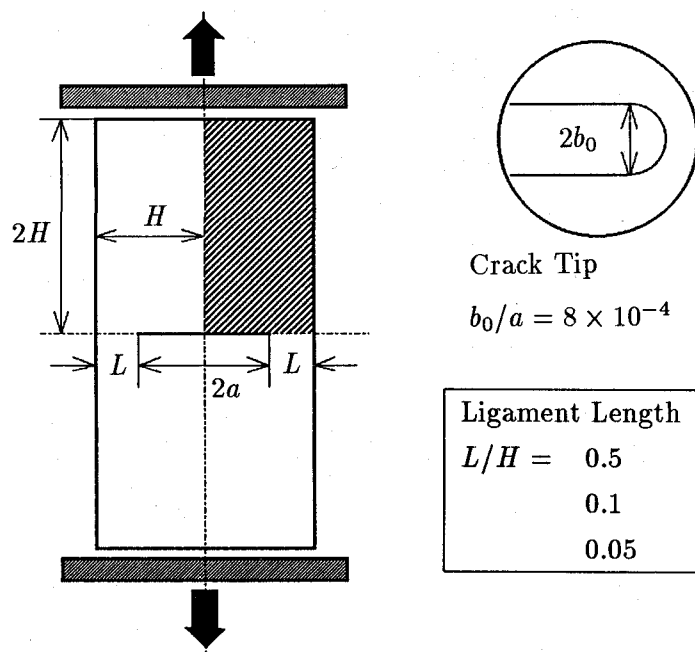


図 3-8 中央き裂を有する長方形ブロック (解析モデル)

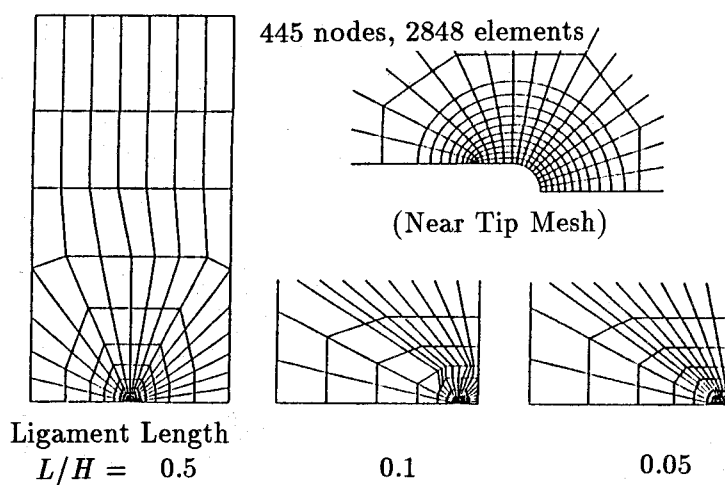


図 3-9 要素分割図

以下においては、表 3.1 に示す 6 ケースについて解析結果を示して検討を加える。なお、Case 1,3,4 は、すべり系の数の効果を調べるため、Case 1,5,6 は、すべり系が少ない場合にはき裂の先端の変形が集中してとがりが現われるが、そのような局所変形と自由縁との干渉効果を調べるため、そして、Case 1,2 は、材料のひずみ速度依存性の効果を調べるために実施するものである。

変形特性

図 3.10 に荷重と伸びの関係を示す。リガメント長さの短い Case 5,6 のみ、き裂先端の塑性域が自由縁に達するために比例関係からずれる。

き裂開口量と J 積分値の間には、結果を示していないがほぼ比例関係が成り立ち、しかも全ケースについてあまり差はない。図 3.11 に、き裂の変形に伴う進展量と開口量の関係を示す。進展量と開口量は、図中に示しているように、き裂先端の丸みの中心が移動しないとして求めている。後に示すように、すべり系の数が少ない場合には先端にとがりが現われるが、そのためにき裂進展が加速される傾向がみられ、リガメント長さが短い場合により顕著である。それに対して、すべり系の数の多い場合には直線関係が長く保たれ、 J_2 流れ理論による結果に近い挙動を示す。流れ理論による解析は、構成式として式 (3.92) を用いて行なったものである。

き裂の開口形状

き裂形状の変化を図 3.12 に示す。2 すべりモデルの場合、最初は丸みを保ったままなめらかに開口するが、やがて先端にとがりを持つようになる。そして、リガメントが長い場合には先端のとがり角は一定値に落ちつき、相似な形を保ちながら開口していくのに対して、短い場合にはリガメント部全体に塑性域が広がってしまい、自由縁の存在の影響を受けてとがり角はどんどん鋭くなっていく。すべり系の数が増えると先端のとがり角は、次第に消える。

表 3.1 解析対象とする形状と材料特性

Initial Ligament Length	2-Slip Model	5-Slip Model	10-Slip Model
$L/H =$	Case 1 ($m = 0.005$)	Case 3	Case 4
0.5	Case 2 ($m = 0.02$)	($m = 0.005$)	($m = 0.005$)
0.1	Case 5 ($m = 0.005$)	—	—
0.05	Case 6 ($m = 0.005$)	—	—

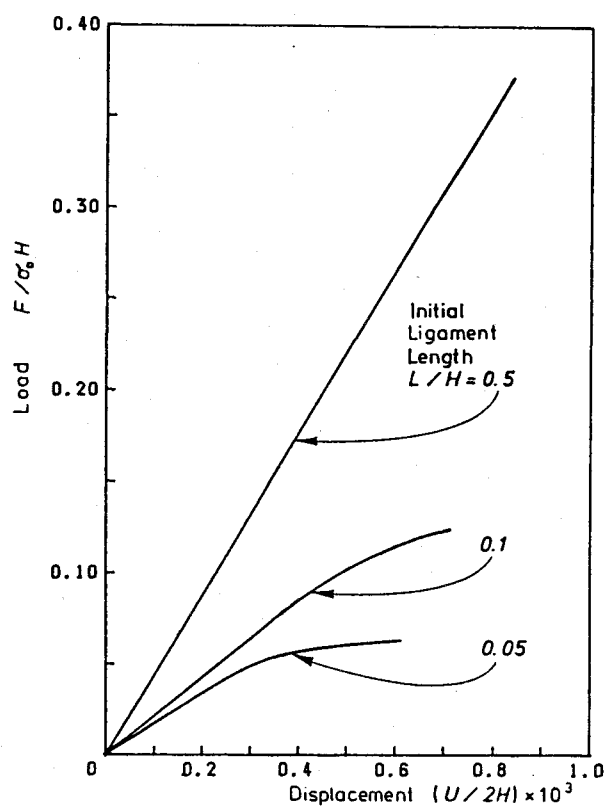


図 3.10 荷重-伸び関係

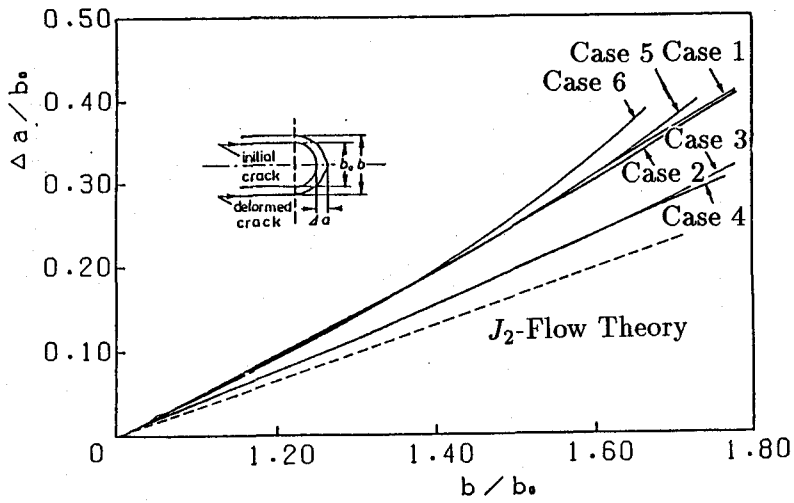


図 3-11 き裂先端の開口量と進展量の関係

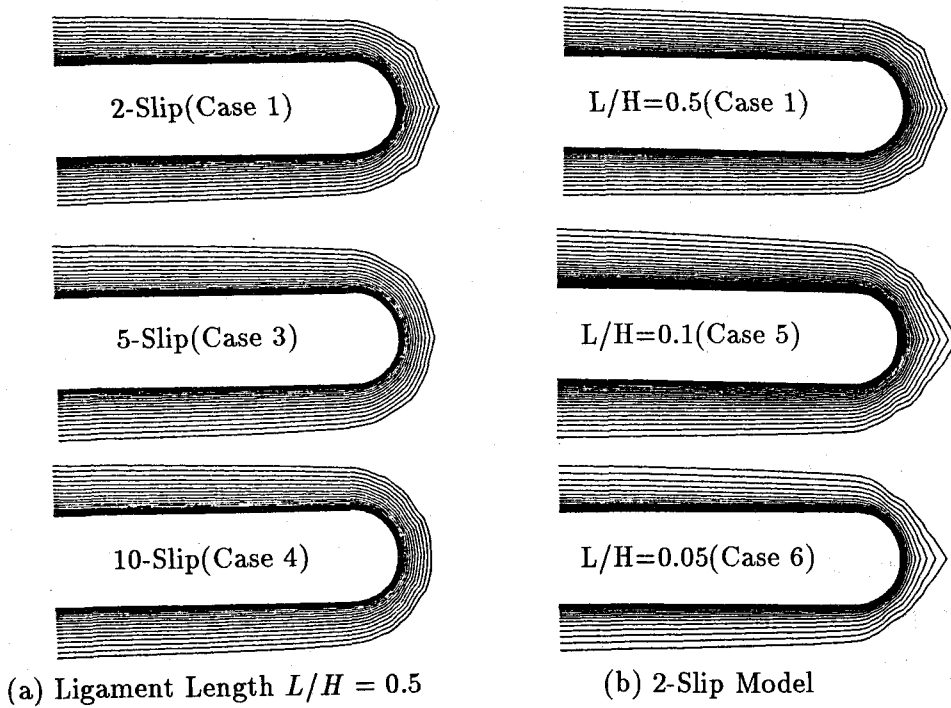


図 3-12 き裂開口形状の比較

Case 1 の場合、図 3-12 に見られるように先端にほぼ一定のとがり角を持ったき裂が開口していく。このき裂の形状は、菊川ら⁽¹⁹⁾が、面直角方向のすべり系が作動しないような方位に結晶粒を揃えた一方向性の珪素鋼板を用いて(したがって、塑性的には平面ひずみ下で)行なった、繰返し荷重下の引張サイクルの間に観測された中央き裂の開口形状とよく一致することを確認できる。2 すべりモデルによる解析は、結晶の方位から言って菊川らの実験のほぼ理想的な数値シミュレーションになっていることを考えあわせると、き裂開口形状の一致はきわめて興味深い。なお、Case 1, 2 の間での差はほとんどなく、開口形状に関してはひずみ速度感度の影響をあまり受けない。

き裂先端のひずみ場

ひずみの大きな領域は、2 すべりモデルの場合にはき裂前方約 60° 方向に領域が広がるが、すべり系の数が増えると、むしろき裂面に垂直な上方への広がりが顕著になる。

図 3-13 に、開口量がほぼ同一の状態で、5, 10 すべりモデルに現れる相当塑性ひずみの分布を、 J_2 流れ理論による結果と比較して示す。結晶塑性モデルによる等相当塑性ひずみ曲線に、特にひずみレベルの低いものに対して凹凸が見られるが、ならしてみると大きさ、形状ともに本質的な差はない。特に5, 10 すべりの結果はほとんど一致している。

しかしながら、各すべり系のすべり量が一定となる曲線を重ねて描いた図 3-14 を見れば、例えば、5 すべりモデルの第5すべり系のすべり量が0.1である曲線と10すべりモデルの第5, 10すべり系のすべり量が0.05となる曲線がほとんど一致するといった対応があり、10すべりモデルの塑性せん断ひずみが5すべりモデルでは2倍の量のせん断ひずみと回転により実現されているという、興味深い関係が存在することがわかる。なお、10すべりモデルにおいて、第5, 10すべり系のように互いに直交するすべり系のすべり量はほぼ一致している。

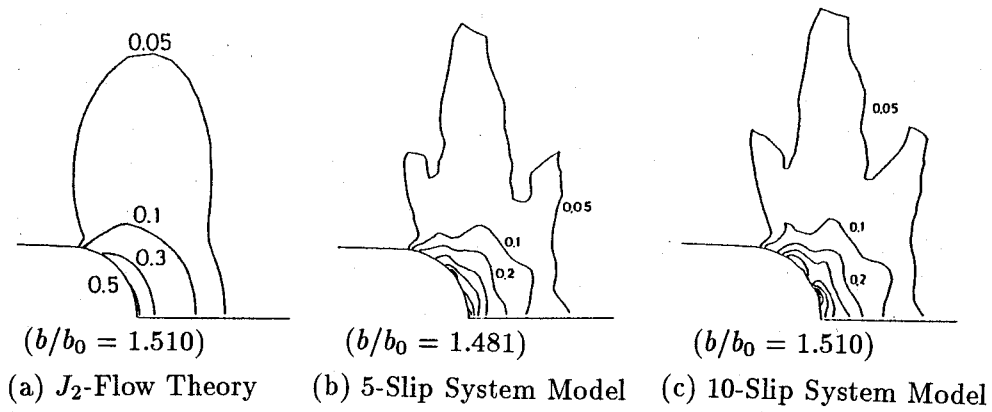


図 3-13 き裂先端近傍の等相当塑性ひずみ曲線

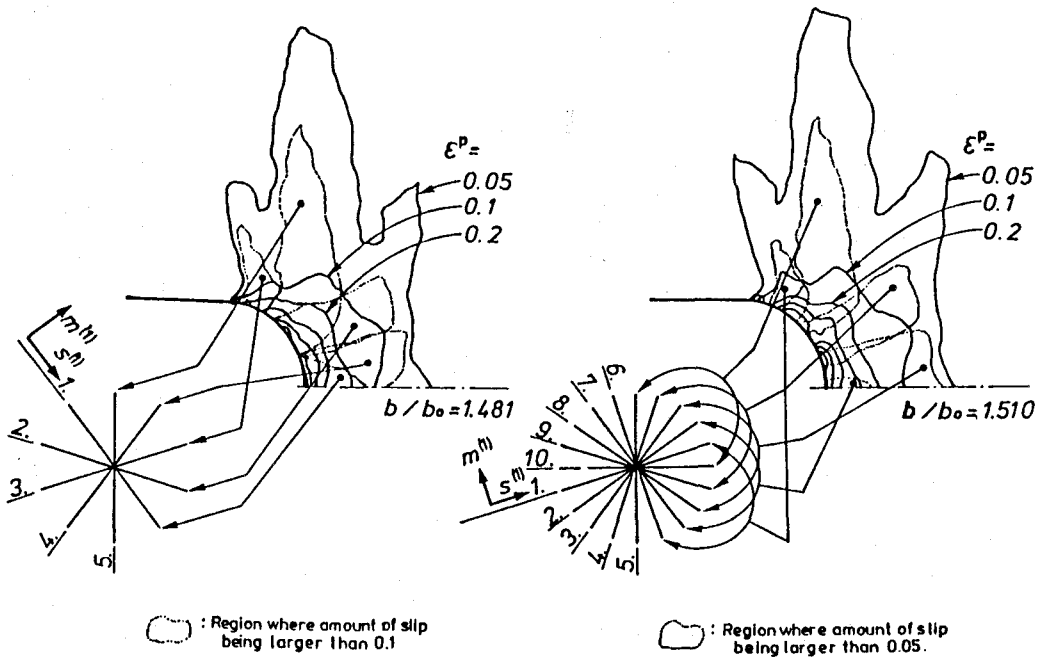


図 3-14 き裂先端の強ひずみ域における各すべり系のすべり量の比較

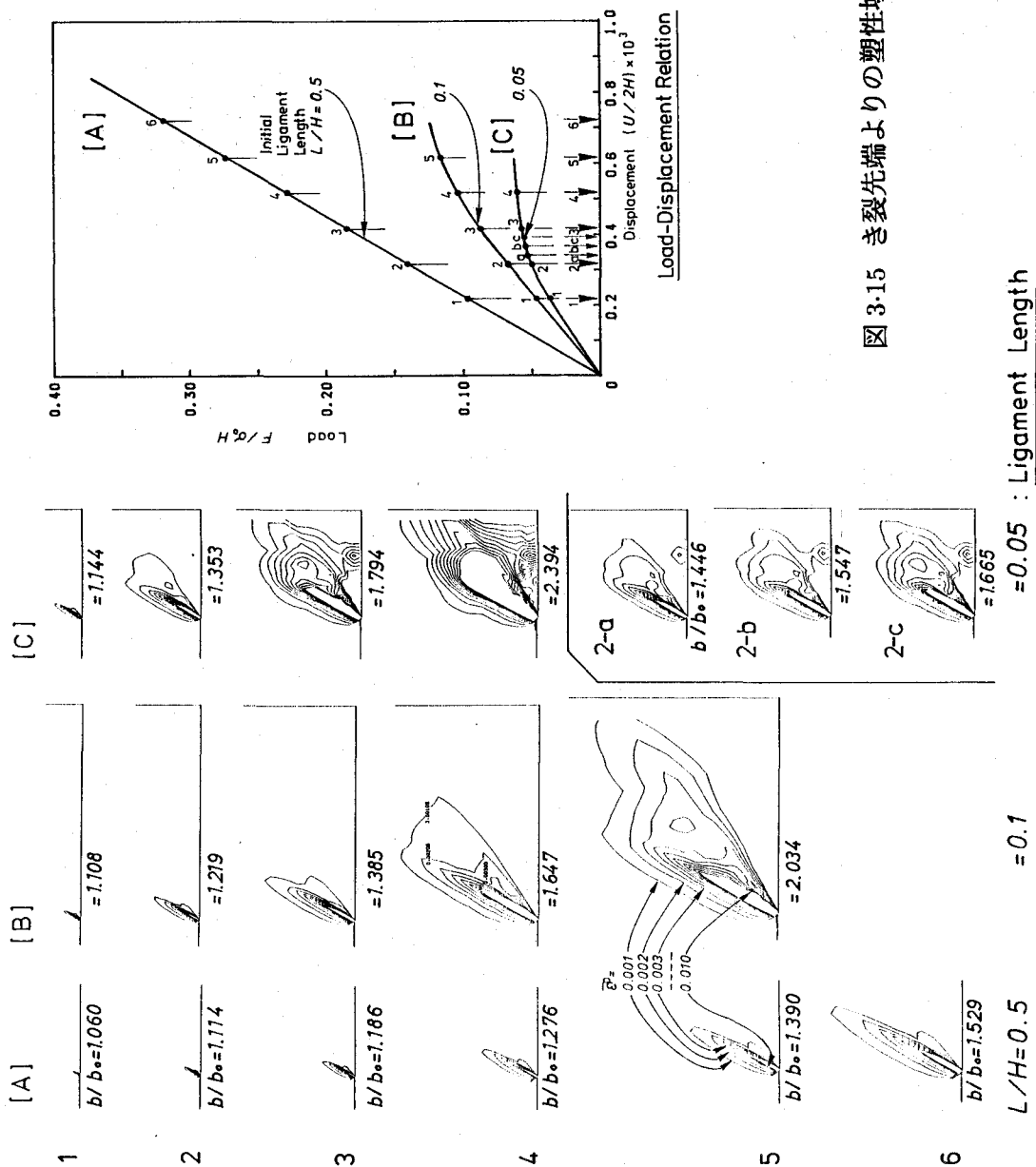


図 3-15 き裂先端よりの塑性域の発達

図 3-15 に、2 すべりモデルの場合の相当塑性ひずみの分布の変化を荷重-伸び関係上の位置と対応させて示す。各分布図の最外部に位置する曲線は相当塑性ひずみが 0.001 に対応しているが、それが自由縁に達したときに荷重-伸び関係が直線から顕著にずれることにより、その内側を実質的に塑性域と考えてよい。塑性域の拡がり方はリガメント長さが短いほど速いが、自由縁に達する以前では、き裂開口量が同じであれば塑性域の大きさはほとんど同じである。

3.5 結 言

分子動力学解析の境界条件(初期条件)および、結果の検討の基準となる線形弾性解に対して、厳密解と、有限要素解析の結果を示した。

さらに、結晶塑性論に基づくモデルについての定式化を行ない、き裂先端部に、局所的に大きなひずみを生じる弾(粘)塑性体の平面ひずみ変形解析を行なって、与える結果の妥当性を考察し、このモデルは、従来の現象論的構成式に代えて使用できる可能性があり、その上、解析結果にこれまで得られなかったような知見が含まれていることを示した。

結晶塑性論に基づくモデルには、従来の弾塑性論におけるように、“降伏条件”や“流れ則”といった巨視的・現象論的観点から便宜上持ち込まれる概念は含まれておらず、それらは力学場の解析に組み込まれた中で、一つのデータとして獲得されるものになっている。したがって、このようなモデルを用いた解析は、現象論的視点を超えて、実体論的検討に向けて一步進めたことになっていると言える。次章において、さらに微細な物質構造の力学場からの意味付けを行なうことを通じて、結晶塑性論に基づくモデル自体の、そしてこのモデルが与える結果のより実質論的な意義を検討する。

第 3 章の文献

- (1) 阿部武治, 結晶塑性解析の発展, 材料, 28-305(1979), 87-99.
- (2) Kitagawa, H., Macro-and Microaspects in Computational Mechanics, *JSME Int. J.*, 30-267(1987), 1361-1368.
- (3) 徳田正孝・飯田勉, 複雑なひずみ経路に沿う多結晶金属の塑性異方性すべり系の潜在硬化の影響) 日本機械学会論文集, 49-440 (1983), 521-529.

- (4) 大橋鉄也, FCC 双結晶に生ずる不均一多重すべりの計算機シミュレーション, 日本金属学会誌, **51-1** (1987), 37-43.
- (5) 大橋鉄也, FCC 単結晶中の変形帯の発達過程と応力場の準微視的乱れの数値解析, 日本金属学会誌, **53-3** (1989), 290-295.
- (6) Hill, R., Generalized Constitutive Relations for Incremental Deformation of Metal Crystals by Multislip, *J.Mech.Phys.Solids*, **14**(1966), 95-102.
- (7) Hill, R., On the Elasticity and Stability of Perfect Crystals at Finite Strain, *Math.Proc.Camb.Philos.Soc.*, **77**(1975), 225-240.
- (8) Asaro, R.J., Micromechanics of Crystals and Polycrystals, *Advances in Applied Mechanics*, **23**, (1983), 1, Academic Press.
- (9) Sih, G.C., Paris, P.C., and Irwin, G.R., On Cracks in Rectilinealy Anisotropic Bodies, *Int.J.Fract.Mech.*, **1** (1965), 189.
- (10) Sih, G.C. and Chen, E.P., Mechanics of Fracture 6 Cracks in composite materials, (1981), 1, Martinus Nijhoff Pub.
- (11) Barsoum, R.S., Triangular quarter-point elements as elastic and perfectly-plastic crack tip elements, *Int.J.Num.Meth.Engng.*, **11**(1977), 85-98.
- (12) 例えば, 岡村弘之, 線形破壊力学入門, (1976), 培風館.
- (13) Peirce, D., Asaro, R.J., and Needleman, A., Overview No.21 An Analysis of Nonuniform and Localized Deformation in Ductile Single Crystals, *Acta Met.*, **30**(1982), 1087-1119.
- (14) Pan, J. and Rice, J.R., Rate Sensitivity of Plastic Flow and Implications for Yield-Surface Vertices, *Int.J.Solids Struct.*, **19-11**(1983), 973-987.
- (15) Taylor, G.I., Plastic strain in metals, *J.Inst.Met.*, **62**(1938), 307-324.
- (16) Peirce, D., Asaro, R.J., and Needleman, A., Overview No.32 Material Rate Dependence and Localized Deformation in Crystalline Solids, *Acta Met.*, **31-12**(1983), 1951-1976.
- (17) 北川 浩, 弾・塑性力学—非線形解析のための基礎理論—, (1987), 106, 裳華房.
- (18) Asaro, R.J., Geometrical Effects in The Inhomogeneous Deformation of Ductile Single Crystals, *Acta Met.*, **27-1**(1979), 445-453.
- (19) 菊川 真・城野政弘・岩橋 稔・市川光秋・上杉暢彦, 電界放射形走査電子顕微鏡内疲労試験装置と疲労き裂進展の直接連続観察, 材料, **31-346**(1982), 669.

第4章 き裂先端の微視的変形の分子動力学解析

4.1 緒言

第3章では、結晶塑性理論を組み込んだ連続体モデルを用いることによって、巨視的な変形解析を結晶すべりといった内部構造の変化情報を取り出しうる状態を進めることができ、すべり系を多数配置することにより、 J_2 流れ理論による現象論的構成式を用いた結果と良く対応するシミュレーション結果が得られることを示した。しかしながら、結晶塑性理論もまた、結晶のすべりについて、現象論的仮説に基づいている。本章では、き裂先端近傍の微視的変形場の挙動に対して、最も基本的な変形の素過程と考えられる原子配置の変化を、原子集合体モデルに対して分子動力学法を用いて解析する。そして、き裂先端近傍の微視的変形場の連続体力学を基礎とした解析—線形弾性解、き裂先端の転位の発生条件、結晶塑性モデルを用いたすべり系の作動解析など—との比較を通じて、原子モデルと連続体モデルとの接点を求め、結晶構造体の階層的なモデル化の可能性について検討を加える。

4.2節では、モードI型のき裂先端近傍の微視的変形場の分子動力学解析を行ない、有限要素法シミュレーションとの比較により、すべりの原子レベルでの素過程と見なせる刃状転位の運動と巨視的な結晶すべりとのスケールを越えた対応づけを行なう。4.2.1節では、モードI型き裂のモデル化と解析方法について述べる。4.2.2節では、BCC結晶体中にモードIで開口するき裂の分子動力学解析を行ない、結晶配向とポテンシャルによる依存性を調べるとともに、結晶塑性モデルとの比較を行なう。4.2.3節では、FCC結晶体中のモードI型き裂を取り扱い、主として、その延性的挙動について、原子モデルによる分子動力学解析と、FCCの12のすべり系を配置した結晶塑性論にもとづく有限要素解析を行ない、両者の結果を比較、検討する。4.2.4節では、分子動力学法を適用する際に避けて通ることができない境界条件の取り扱いについて、変位規定と荷重規定の二つの境界条件に対して、境界条件の与え方が結果にどのような影響を及ぼすかを調べ、さらに有限要素法—分子動力学法結合解法について述べる。

4.3 節では、モード II 型で開口するき裂に対して、分子動力学シミュレーションを行ない、先端から生じる刃状転位と結晶塑性論との比較を行なう。また、転位発生に対する臨界応力拡大係数の評価、き裂先端場の応力値について論じる。

4.4 節では、面外せん断荷重下のき裂先端の微視的変形場の分子動力学シミュレーションを行ないモード III き裂より生じるらせん転位の挙動について検討を加える。

4.5 節では、分子動力学シミュレーションによる転位同士の相互作用によるき裂核の発生機構に検討を加える。

4.2 モード I 型き裂の解析

4.2.1 き裂のモデル化と解析法

第3章で示した結晶塑性論に基づく有限要素解析と同じ問題、すなわち、平面ひずみ条件のもとでモード I 型で開口する結晶中のき裂先端の変形挙動を原子レベルの構造変形から検討するために、き裂先端の微小部分のみを原子集合体としてモデル化して、その原子系が弾性体中に埋め込まれていると考える。

第3章で述べた結晶配向による異方性を考慮した微小変形有限要素解析によって得られた弾性解を用いて、初期原子配置とき裂先端部に対する境界条件を評価する。図 3.2 において解析領域の幅の実寸法を $w = 60 \times 10^{-7} \text{ m}$ とし、き裂先端近傍の微小領域 r^* の部分を原子集合体とする。外力を加える方法として、以後ことわらないかぎり、線形弾性解によって得られる各境界格子点位置での物質点の速度を原子モデルの境界条件として与える方法を用いる。ここで、解析するモデルの最も外側の境界からポテンシャルの影響範囲内 (cut off 距離以下の位置) にある原子を境界原子とする。この方法は、変形が大きくなると系の拘束が強すぎることによる影響が現われるという欠点があるものの、モデル化が単純で解析する系の原子数を多くとることが可能であり、安定して解析を進めることが可能であるという利点がある。

解析領域の両端に初期ひずみ $e_0 = \Delta w / 2w$ に対応する初期変位 Δw を与えたとき、各原子の位置に対応する物体点での微小変形弾性解による変位を各原子に与えて、初期原子配置とする。温度 T での Maxwell の速度分布にしたがうランダムな速度を各々の原子の初期速度とする。これらの位置と速度を初期条件として、第2

章で述べた能勢が提案した温度一定拡張系のMD法¹を用いて、原子の位置と速度についての時系列データを求める。

ただし、荷重増分を与える前に、領域境界の原子を拘束し t^* の間、緩和計算を行なう。 t^* は、本来は十分に原子配置が安定するまでの時間とすべきであり、初期原子配置、温度などに依存して異なる。その後、境界の原子に解析領域の両端をひずみ速度 $\dot{\epsilon} = v/2w$ に対応する一定速度 v で引張り変位を増加させていく。その際、上述のようにあらかじめ計算しておいた線形弾性解に基づき評価される変位速度を用いる。

なお、第3章で述べたように、本論文全体を通じて、き裂解析においてはき裂進展方向を x 軸、き裂面法線方向を y 軸、き裂前縁方向を z 軸にとる。また、き裂面、き裂前縁の方向を用いて、結晶の配向を表わす。そして、モードIき裂の解析では、図4.1(a)~(d)に示すような、 x, y, z 軸に関して対称な4つの配向を考え、以後Ori. 1~Ori. 4と呼ぶことにする。

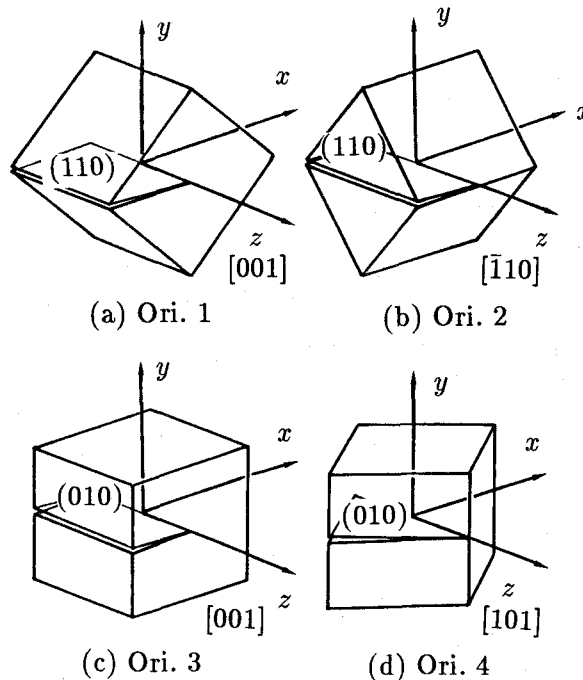


図4.1 解析するモードIき裂の結晶配向

¹モードIき裂の解析においては、全過程を温度一定のMD法を用いて解析しているが、モードII, IIIき裂の解析および、き裂核の発生の解析においては初期の緩和計算のみ温度一定のMD法を用い、外力を負荷する際には通常エネルギー一定のMD法を用いている。

4.2.2 BCC 結晶中のモード I 型き裂の解析

BCC 結晶体のモデルとして, α 鉄を考えて, き裂先端の変形挙動を調べる. 原子間の相互作用として, 第2章で述べた2体ポテンシャルである Johnson ポテンシャル, および, 多体ポテンシャルである Finnis-Sinclair ポテンシャルを用いる.

き裂進展挙動の結晶配向依存性

まず, 変形の結晶配向依存性を調べるために, Johnson ポテンシャルを用いた解析結果について検討を加える.

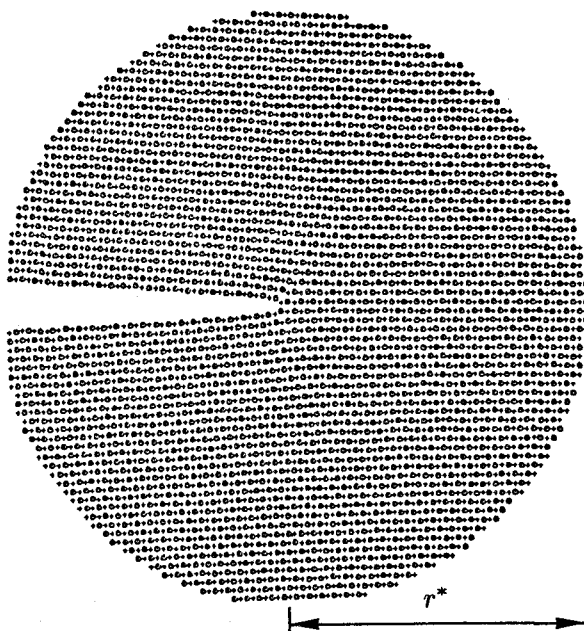


図 4.2 初期原子配置図 (Ori. 2)

図 4.1(a)~(d) に示す 4 つの配向に対して, 表 4.1 に示す Case1~Case5 について, き裂先端近傍の微小領域に, 図 4.2 のように z 方向に周期的に繰り返される 2 層の原子を配置し, 平面ひずみの仮定として, z 方向の原子間相互作用は考慮するが原子の運動は z 方向の自由度を持たない 2 次元モデルを仮定し, 分子動力学解析を行なう.

表 4.1 解析条件

Case	Orientation	T K	N	r^*/R_0	e_0	$\dot{e} \times t_0$	t^*/t_0
Case1	Ori.1	300	4640	29.62	1.04×10^{-3}	4.48×10^{-6}	10
Case2	Ori.1	800	4640	30.65	1.04×10^{-3}	4.17×10^{-6}	10
Case3	Ori.2	300	4614	24.84	1.04×10^{-3}	8.33×10^{-7}	100
Case4	Ori.3	300	4645	29.62	1.04×10^{-3}	4.17×10^{-6}	10
Case5	Ori.4	300	4614	24.84	1.04×10^{-3}	4.17×10^{-6}	100

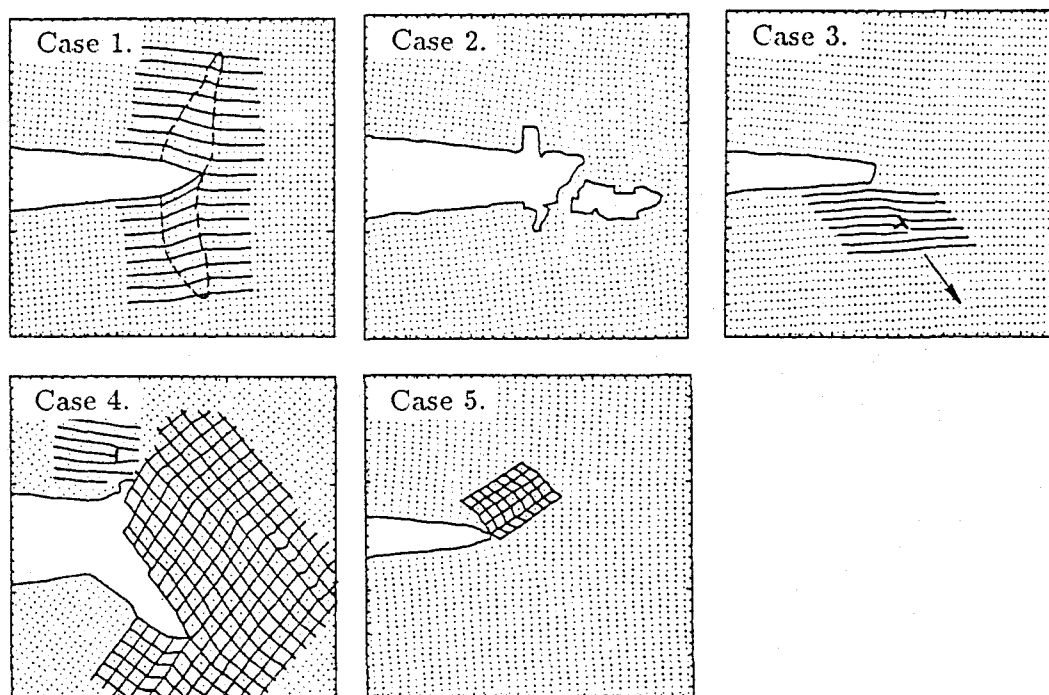


図 4.3 解析結果

Johnson ポテンシャルの停留点の原子間距離 $R_0 (= 2.6166387 \times 10^{-10} \text{m})$ と, 停留値の絶対値, $\varepsilon (= 4.0317194 \times 10^{-20} \text{J})$, 原子質量 $m (= 9.27376 \times 10^{-26} \text{kg})$ から計算される $t_0 = R_0 \sqrt{m/\varepsilon} (= 3.9685012 \times 10^{-14} \text{s})$ を時間の単位とする. まず, 初期ひずみ $e_0 = 1.04 \times 10^{-3}$ に対応する変位を各原子に与え, 次に境界原子を固定して時間 t^* の間, 緩和した後ひずみ速度 $\dot{e} \times t_0$ で引張の拘束を境界原子に加える.

図 4-3 に各 Case の典型的な解析で得られた変形パターンを示す。得られた結果をまとめると次のようになる。

- Case1 き裂先端はくさび状に開き，そこから進展方向に垂直な方向に変態領域が広がる。この領域のひずみを解放してき裂が進展し，再び，き裂先端がくさび状に開く。なお，ここでいう変態とはある 2 次元領域にわたって原子が集団で協力的に運動することによって新たな構造ができる現象を意味する。
- Case2 Case1 と同一の配向で高温の場合であるが，進展方向に垂直な $[110]$ 方向にき裂が発生する。また，き裂前方で原子空孔が現われ，著しい原子配置の乱れを生じながら大きくなっていく。
- Case3 き裂先端から $[1\bar{1}1]$ 方向に転位が発生し，続いて $[11\bar{1}]$ 方向に転位が発生する。き裂は前方には進展せず，き裂鈍化の最も基本的な機構が確認できる。
- Case4 き裂前方に進行方向に対して約 30° の方向に変態領域が伸び，その後に， $[110]$, $[1\bar{1}1]$ の 2 方向に分枝し，その後 $[1\bar{1}0]$ 方向のき裂が進展する。これと同様な変形形態が，Gehlen ら⁽¹⁾や Gehlen⁽²⁾，deCelis ら⁽³⁾によって報告されている。き裂前方の変態領域の形も変化し， $\{110\}$ 面を境にした双晶的変形が生じる。この領域の原子配置のパターンは多数の原子が協力的に運動する結果生じている。
- Case5 $(1\bar{1}2)$, $(\bar{1}12)$ 面で双晶変形を生じ，き裂進展がそれを解放するといった変形が繰返し起こる。き裂はぜい性的に進展する。

このように，結晶配向によって異なる特徴的な変形のパターンが生じることがわかる。

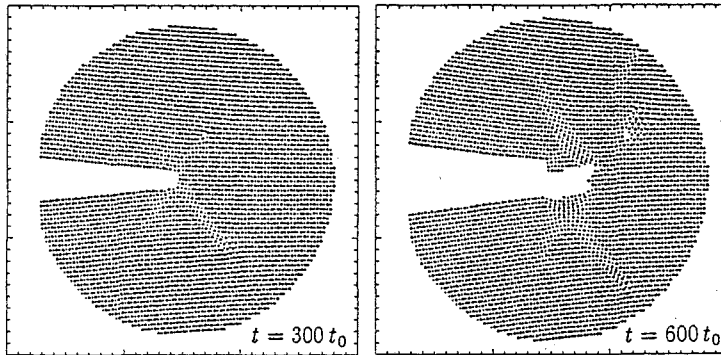
ポテンシャル依存性

次に，き裂先端から転位が発生する図 4-1(b) の配向 (Ori.2; き裂面 (110) ，き裂先端 $[110]$) について，2 体ポテンシャルとして Johnson ポテンシャルを用いた解析結果と，多体ポテンシャルとして Finnis-Sinclair ポテンシャル (以下では，FS ポテンシャルと略記する) を用いた解析結果を比較する。

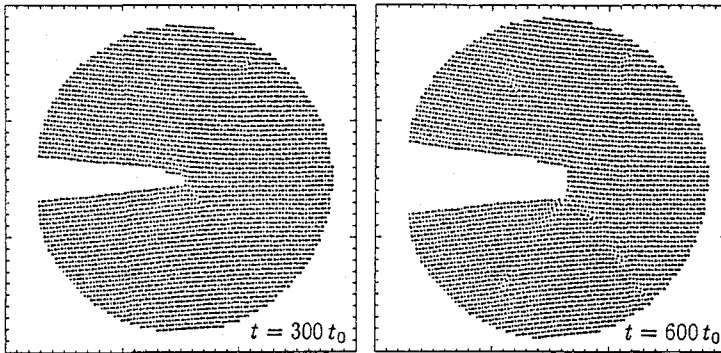
解析は、 $e_0 = 1.04 \times 10^{-3}$ の初期ひずみを与え、 $t^* = 100t_0$ の間緩和した後、 $\dot{e}t_0 = 4.17 \times 10^{-6}$ のひずみ速度で引張の拘束を加える。解析条件を表 4.2 に示している。

表 4.2 解析条件 (BCC)

The number of atoms	$N = 4540$ (2 layers)
Mass of atom	$m = 9.27376 \times 10^{-26}$ kg
Reference length	$R_0 = 2.6166387 \times 10^{-10}$ m
Radius of area	$r^* = 12a_0$
Initial Strain	$e_0 = 1.04 \times 10^{-3}$
Reference time	$t_0 = 3.9685012 \times 10^{-14}$ s
Relaxation time	$t^* = 100t_0$
Strain rate	$\dot{e}t_0 = 4.17 \times 10^{-6}$
Temperature	$T = 300$ K



(a) Johnson Potential



(b) FS Potential

図 4.4 解析結果のポテンシャル依存性

図 4-4 に Johnson ポテンシャルと FS ポテンシャルを用いた場合の $t = 300 t_0$, $600 t_0$ における原子配置を示す. どちらのポテンシャルを用いた場合にも先端からの転位発生および双晶変形とそれに伴う鈍化の機構が認められる.

原子間ポテンシャルによる結果の違いに関しては, これまで, Mullins⁽⁴⁾⁽⁵⁾は Morse 型ポテンシャルを用いた場合に比べて Johnson ポテンシャルを用いた解析では, 転位の発生による塑性鈍化は起こりにくく, き裂はぜい性的に進展するという結果を報告しているし, また, Kohlhoff ら⁽⁶⁾は, Johnson ポテンシャルを用いた解析でき裂がぜい性的な進展する配向に対して, FS ポテンシャルを用いた場合も同様なぜい性的なき裂進展が見られるという結果を報告している.

本解析においては, 先端から転位が発生し, それに伴ってき裂が鈍化する配向においてもポテンシャルの選択による大きな差は見られない. ただし, 変形が大きくなると, 境界の拘束の影響が強くなるにもかかわらず, FS ポテンシャルでは比較的安定して転位を発生し続けるのに対し, Johnson ポテンシャルはき裂がへき開的に進み, き裂形状の変化が大きくなる. また, Johnson ポテンシャルは双晶変形が起こりやすく, FS ポテンシャルは転位が発生しやすい傾向がある. しかし, 変形の初期の形態は類似しており, これまで α 鉄のシミュレーションに広く用いられている単純な 2 体ポテンシャルである Johnson ポテンシャルの有効性をあらためて示す結果といえる.

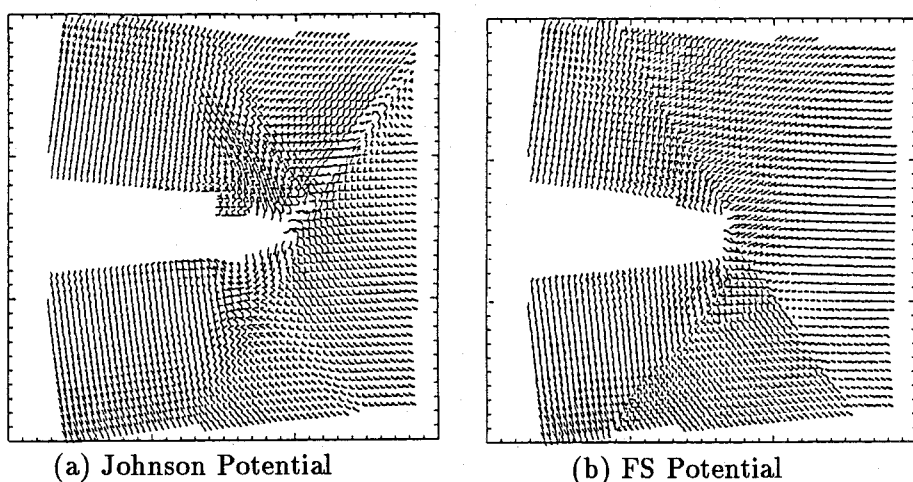


図 4.5 原子の運動の軌跡

結晶塑性論に基づく有限要素解析との比較

不連続なすべり変形 図 4.5 は、さきに述べたポテンシャル依存性を調べるために行なった解析結果で、 $t = 500 \sim 700 t_0$ の間 $20 t_0$ ごとの原子位置を結んだ原子運動の軌跡を示したものである。

変形場は、不連続面を境にして、き裂先端から拡がる比較的一様な変形を生じているいくつかの扇型領域に分かれているのがわかる。原子の配置の変化を調べることによりこの不連続面は転位の移動面または双晶面であることがわかり、原子の運動の軌跡には前者はシャープな不連続部として、後者はすべり面に対して傾きを持った有限幅の領域として現われる。以後これらの不連続面をすべり面と呼ぶことにする。

分子動力学解析結果と比較を行なうために、連続体結晶塑性論に基づく有限要素解析を行なう。結晶塑性論は、第3章で述べた方法で有限要素法に組み込む。ここでは、Ori. 2, 4 に対する BCC 結晶体に対するシミュレーションにおけるすべり系のモデル化として、平面ひずみ条件下で活動可能な $\langle 111 \rangle$ 方向、 $\{112\}$ 面の二つのすべり系だけを考える (図 4.6)。

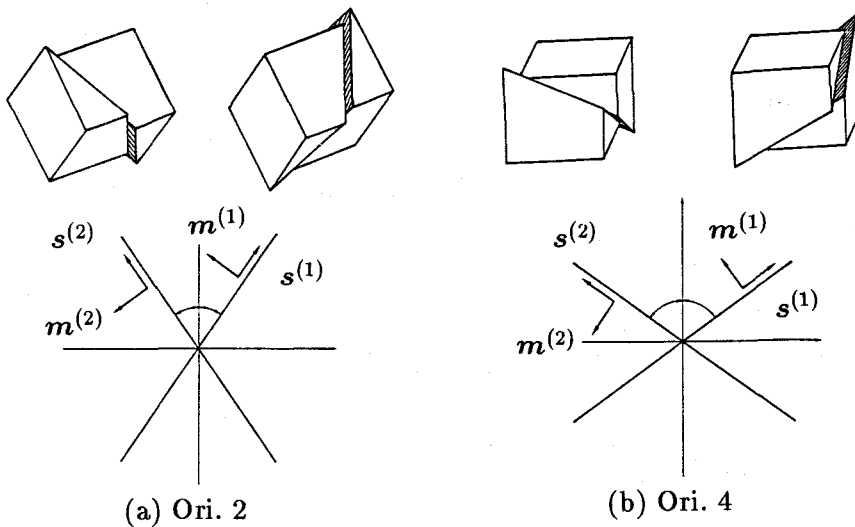


図 4.6 BCC 結晶体のすべり系のモデル化

弾性部分は等方性を仮定し、Young 率 $E = 60.84 \text{ GPa}$ 、Poisson 比 $\nu = 0.3$ とする。また、塑性部分はすべり系のせん断応力とせん断ひずみの関係は完全塑性的であるとし、すべり系の臨界分解せん断応力 τ_0 は一定とする。要素分割図を図 4.7 に示す。メッシュの最も外側の節点には、応力拡大係数 K_I に相当する線形弾性解に基づく変位を与え、対称性を考慮して 1/2 領域について微小変形有限要素解析を行なう。

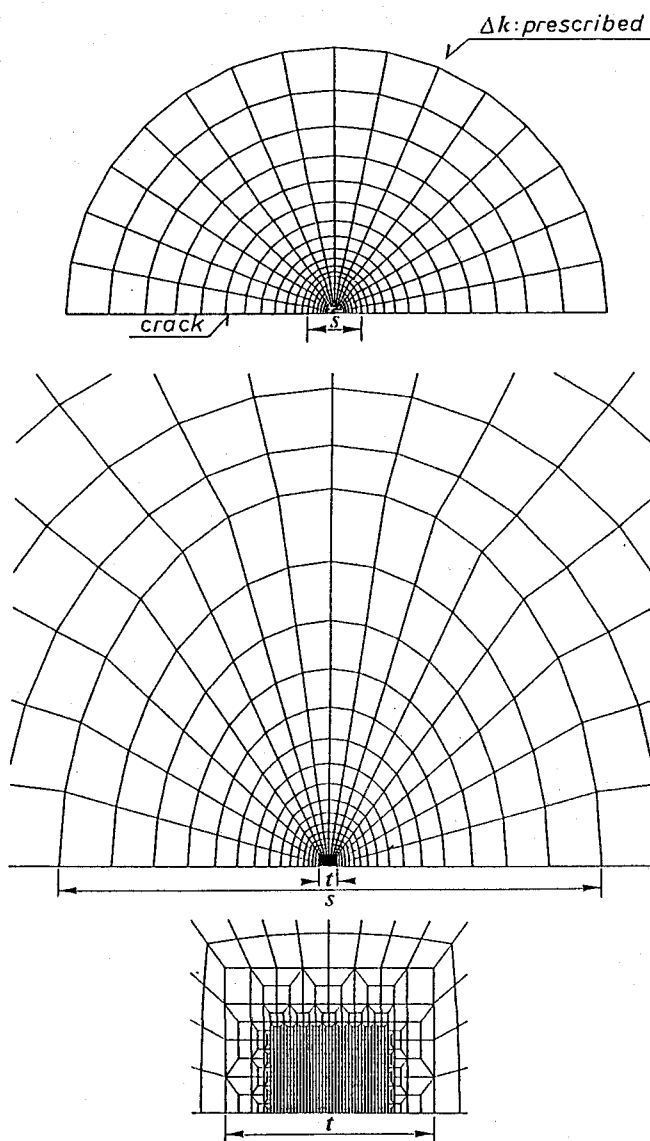


図 4.7 要素分割図

図 4-8(a) は、変形後のメッシュを変位を 20 倍に拡大して示したものである。き裂先端から発する特定方向に局所的なすべり変形を生じていることがわかる。一方、図 4-8(b) は、節点の移動の軌跡を示したものである。

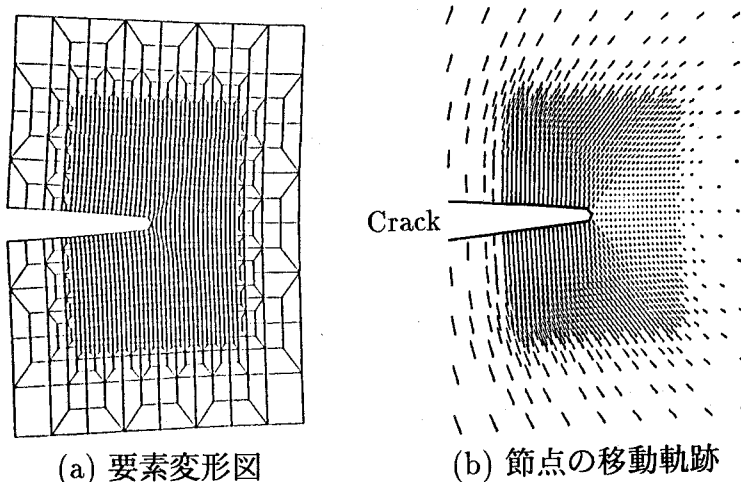


図 4-8 要素変形と節点の移動軌跡

図 4.5 と図 4-8(b) を比較すると、原子モデルの不連続なすべり面と連続体モデルの局所的すべり部分、そして、それらによって分割された一様な変形をしている扇型の領域が、非常に良く対応していることがわかる。さらにまた、Rice ら⁽⁷⁾による結晶塑性論に基づいたき裂先端の漸近解に対する解析的な検討と定性的に一致する。

ここでは、Ori. 2 の配向について原子集合体モデルと連続体モデルの解析結果を比較したが、ここで述べた要素の変形、節点の移動に関して、Ori. 2 と Ori. 4 の FEM 解析結果は完全に一致する。しかし、活動すべり系とそのすべり量は両者で全く異なっている。これに関連して Rice ら⁽⁷⁾は、巨視的に見ると同一である不連続が転位の発生 (shear mode) と kink 状の変形 (kink mode) といった二つの異なる原子配置をとることについて述べている。

Ori. 4 の変形について言えば、ここで扱っている原子モデルでは初期に存在する内部の欠陥などを考慮していないので kink mode の変形は生じないことと、さらに、原子モデルで見られるへき開的な破壊が連続体モデルでは考慮されていないという 2 つの理由から両者は一致しない。このことに関しては、4.2.3 節の FCC 結晶中のモード I き裂の解析、4.3 節のモード II き裂の解析で詳しく検討を加えることにする。

4.2.3 FCC 結晶中のモード I 型き裂の解析

FCC 結晶の原子集合体モデル

ここでは、FCC 金属について図 4-1(d)Ori. 4, (b)Ori. 2 の結晶配向で解析を行なう。FCC 金属においては 12 のすべり系があるが、ここで考えるような配向で、厚さ方向に対称な (xy -面に対称な) 結晶配置で平面ひずみ条件下で変形が生じるためには、二つのすべり系が同時に作動しなければならない。このため、 z 方向の自由度を完全に拘束した 2 次元モデルではすべり変形が生じにくくなる。そこで、 z 方向に 8 つの原子層を配置し周期境界条件を導入し、立体的なすべりを考慮した 3 次元解析を行なう。ただし、引張変位を規定し拘束する原子は面外に運動しないように z 方向成分を拘束し、それら以外の原子の z 方向の運動を許容し平面ひずみ条件を緩めることにする。

解析は、銅に対する多体ポテンシャルとして Ackland ら⁽⁸⁾が求めた N -body FS ポテンシャルを用いる。二種類の結晶配向 Ori. 4 と Ori. 2 を解析対象とし、Ori. 2 では、初期に転位を導入したモデルについても解析を進める (表 4.3)。

表 4.3 FCC 結晶の MD 解析モデル

Case	Orientation	Note
Case1	Ori. 4 [101](010)	Perfect Crystal
Case2	Ori. 2 [$\bar{1}$ 10](110)	Perfect Crystal
Case3	Ori. 2 [$\bar{1}$ 10](110)	With Initial Dislocations

FCC 結晶体のすべり

原子配置の時間変化を図 4.9~4.11 に示す。

初期に紙面手前から見て 2, 4 層目との原子と 4, 8 層目の原子にはそれぞれ異なるドットパターンでハッチングを施している。

緩和計算によってき裂はいくぶん閉じる。これは、き裂先端近傍では変位場が線形弾性特性を示さないことを意味する。引張を加えると再び開口しはじめ、1 層目の原子が 8 層目の裏にまわったり、8 層目の原子が 1 層目のおもてに現われたりし

て、厚さ方向の成分を持つ原子の運動が生じ、Case 1 の場合には、転位の発生と運動によるすべりが生じていることがわかる。

Case 2 の場合には、き裂先端から明確な転位の発生が見られず、き裂先端で原子配列の乱れが生じる。しかし、破壊は、いわゆる原子どうしの結合が切れるへき開的なものではなく、あくまで延性的である。

Case 3 の場合には、初期に転位を配置したことによって、Case 2 との違いが現われるかを調べたものである。き裂先端で原子配列に大きな乱れが生じ、異符号転位の合体によって原子空孔列が形成され、き裂進展に影響を及ぼしていると考えられる。

表 4.4 FCC 結晶 (銅) の解析条件

The number of atoms	$N = 5080$ (8 layers) (Case 1,2) $N = 4812$ (8 layers) (Case 3)
Mass of atom	$m = 1.05522 \times 10^{-25}$ kg
Lattice constant	$a_0 = 3.615 \times 10^{-10}$ m
Radius of area	$r^* = 12a_0$
Initial strain	$e_0 = 1.04 \times 10^{-3}$ (Case 1,2) $e_0 = 0.83 \times 10^{-3}$ (Case 3.)
Reference time	$t_0 = 6.816732 \times 10^{-14}$ s
Relaxation time	$t^* = 100t_0$
Strain rate	$\dot{e} t_0 = 6.816732 \times 10^{-6}$
Temperature	$T = 300$ K

結晶塑性論による解析との比較

FCC 単結晶体の、Ori. 4 と Ori. 2 に対して、連続体モデルによるより厳密な解析を行なうために、3 次元的な 12 のすべり系を考慮し、大変形有限要素解析を行なう。ここで活動可能なすべり系のすべり面と $x-y$ 面の交線は、BCC 結晶体に対して仮定した 2 次元すべり系を含んでいる。

すべりが、 $\{111\}$ 面 $\langle 110 \rangle$ 方向で起こるものとする、ここで考えている配置では、図 4.12 に示した 3 つの持続的すべりが平面ひずみの条件下で可能である。

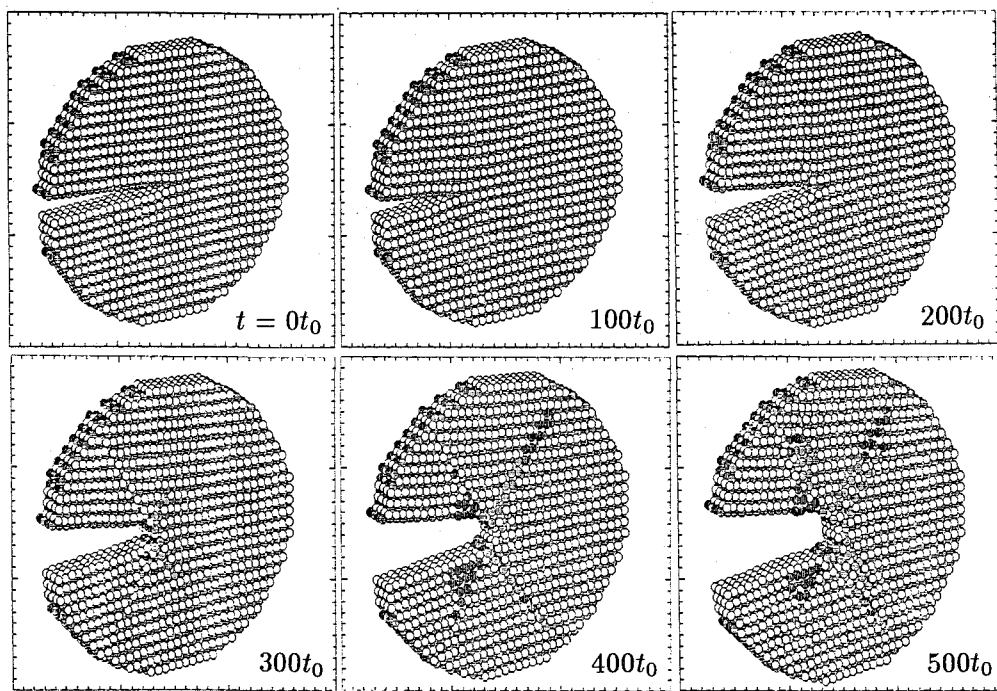


図 4-9 原子配置の変化 (Case 1)

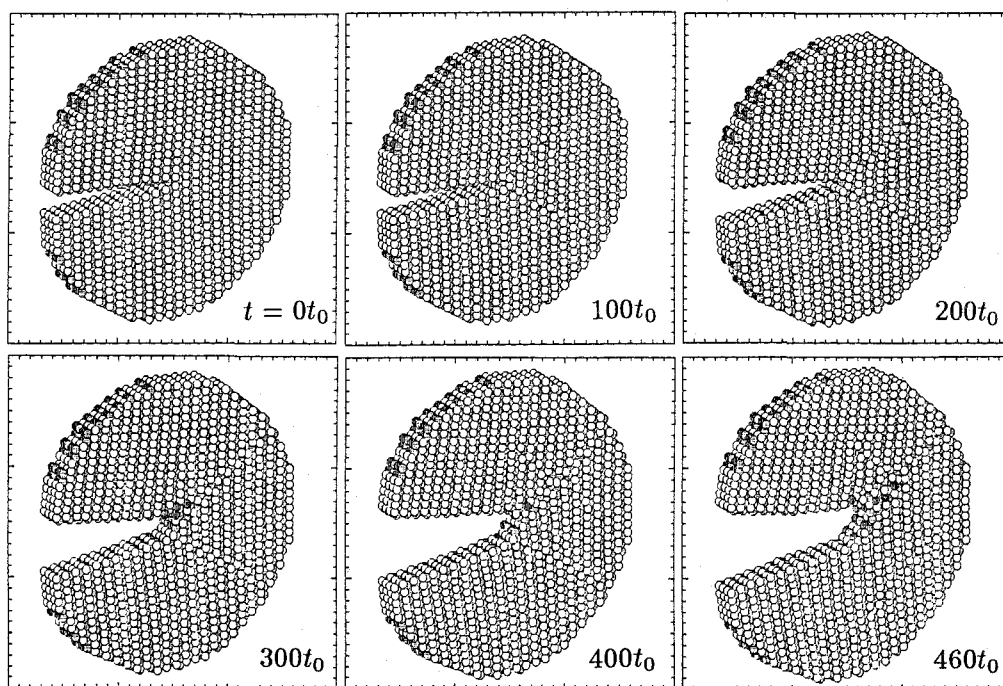


図 4-10 原子配置の変化 (Case 2)

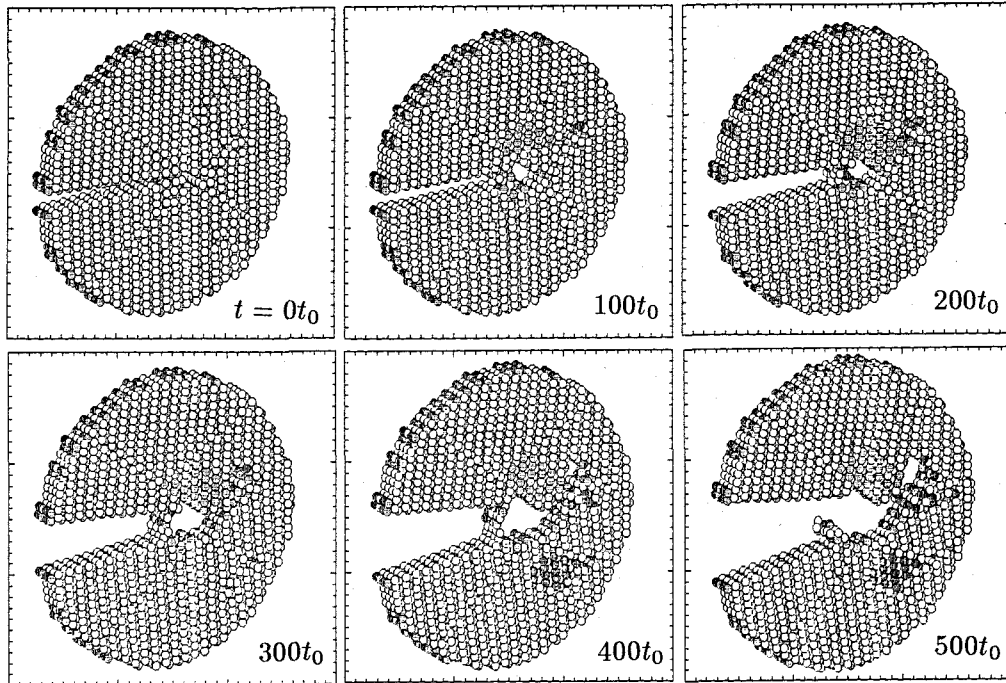


図 4-11 原子配置の変化 (Case 3)

すなわち、すべり面が同じで異なるすべり方向を持つ 2 組のすべり系、もしくは、すべり面は異なるが同じすべり方向を持つ 2 組のすべり系が同時に作動する必要がある。前者をタイプ I、後者をタイプ II と呼ぶことにすると、実質的に活動するのは、2 種類のタイプ I と 1 種類のタイプ II の合計 3 種のすべり変形が現われる⁽⁷⁾。

弾性特性は、BCC 結晶体に対する解析の時と同様、等方性を仮定し、Young 率 $E = 60.84 \text{ GPa}$ 、Poisson 比 $\nu = 0.3$ とする。すべり系の硬化則は、Peirce ら⁽⁹⁾の用いた、

$$\tau(\gamma) = \tau_0 + (\tau_s - \tau_0) \tanh \left(\frac{H_0 \gamma}{\tau_s - \tau_0} \right) \dots\dots\dots (4.1)$$

を採用する。この解析においては、 $\tau_0 = 60.84 \text{ MPa}$ 、 $H_0 = 8.9\tau_0$ 、 $\tau_s = 1.8\tau_0$ 、 $q = 1$ 、 $m = 0.005$ 、 $\dot{a} = 1.0 \times 10^{-3} / \text{s}$ とする。ここでは、初期き裂先端は丸みのあるものを考えている。図 4-13 に解析モデルと要素分割を示す。要素分割は、第 3 章で用いたものと類似したものだが、一つの 4 辺形は crossed triangle 要素であり、4 つの定ひずみ要素からなっている点が違っている。

き裂開口変位の変化を図 4-14 に示す. 変形が小さいときは ($u/2w \doteq 1.5 \times 10^{-4}$ まで) 結晶配向による差は無いが, 変形が大きくなると, 両者の差は大きくなる. き裂先端近傍のき裂形状を図 4-15 に, また, 図 4-14 の矢印で示した負荷レベルでの相当塑性ひずみの分布を図 4-16 に示す.

変形後のき裂形状と, き裂の初期丸みの数倍程度のき裂先端にごく近い部分の相当塑性ひずみの分布は, Ori. 4 と Ori. 2 で大きく異なるが, 先端から少し離れたところでの相当塑性ひずみは, Ori. 4 と Ori. 2 とともに, き裂前方に x 軸から 54.7° の方向にひずみが集中して, すべり帯を形成していて, 非常に似通った分布を示していることがわかる.

図 4-17 は, 活動すべり系のすべり量を示したものである. Ori. 4 と Ori. 2 に共通のすべり帯を生じさせているすべり系の活動には顕著な違いがあり, Ori. 4 の場合にはすべり帯に平行なすべり系, Ori. 2 の場合にはすべり帯に垂直なすべり系の作動が支配的であることがわかる. そして, 前者の場合に比べて後者の場合, すべり帯の幅は少し大きい. Rice ら⁽⁷⁾によれば, 前者はすべり転位によるすべり帯の変形モード, 後者は異符号転位対の列による kink 状の変形モードが考えられるとしている. 本論文では, Mohan ら⁽¹⁰⁾にならって, 前者を shear mode, 後者を kink mode と呼ぶことにする.

Case 1(Ori. 4) の shear mode においては, 原子モデルによる解析結果の転位の運動の軌跡と有限要素解析結果のすべり変形とは良く対応するが, Case 2(Ori. 2) の kink mode の不連続は, 原子モデルでは現われない. これは, 連続体モデルではあらゆる物体点で全てのすべり系が平等に活動可能であるのに対し原子モデルでは格子が完全であることにより kink を生じるための転位を供給する源が存在しないためであると思われる. さらに, Case 3 のように初期転位を配置しても同様の結果になるのは系の大きさが小さいために転位どうしや転位と原子領域境界との干渉の影響が大きいためと考えられる.

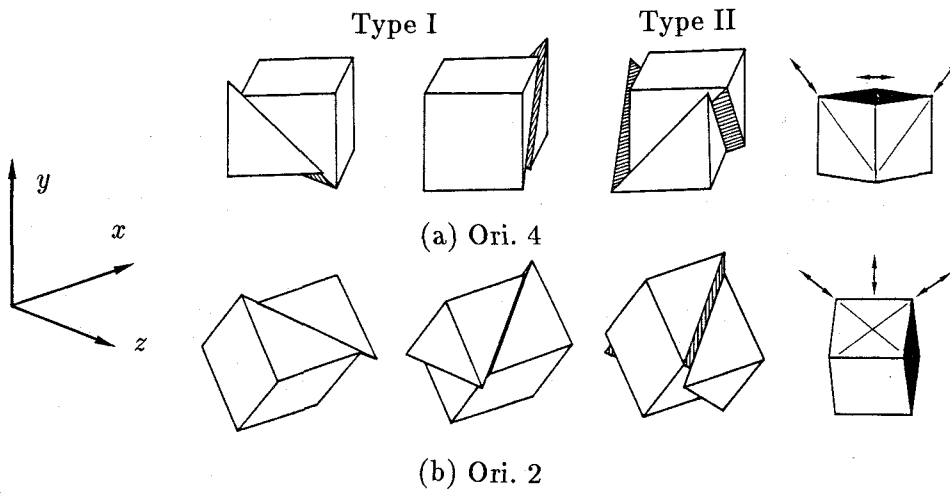


図 4.12 平面ひずみ下で持続できるすべり

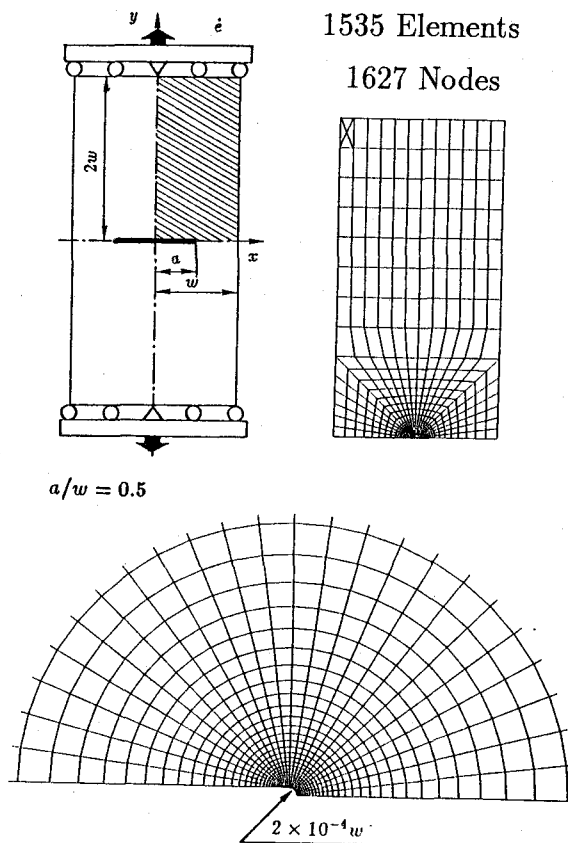


図 4.13 要素分割図

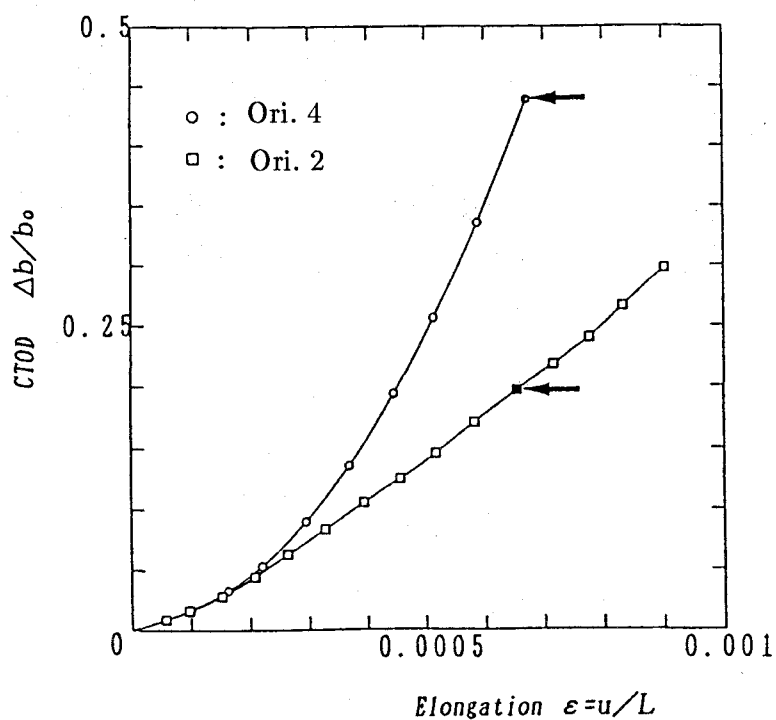


図 4-14 き裂開口変位

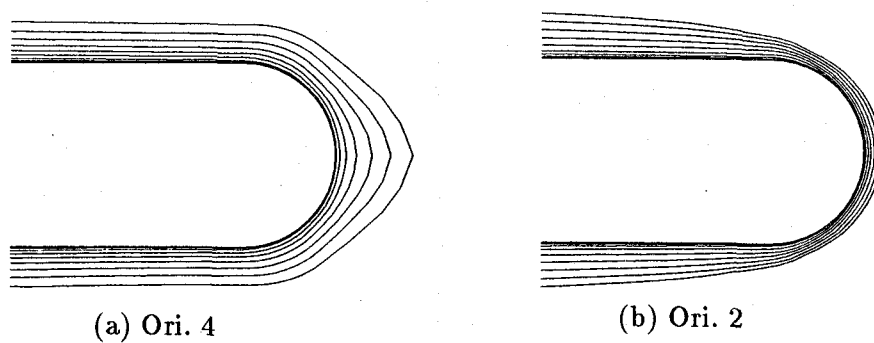
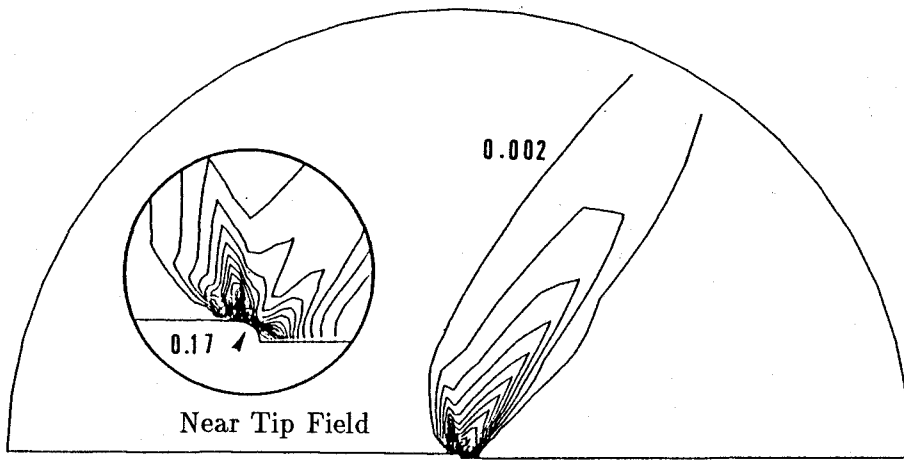
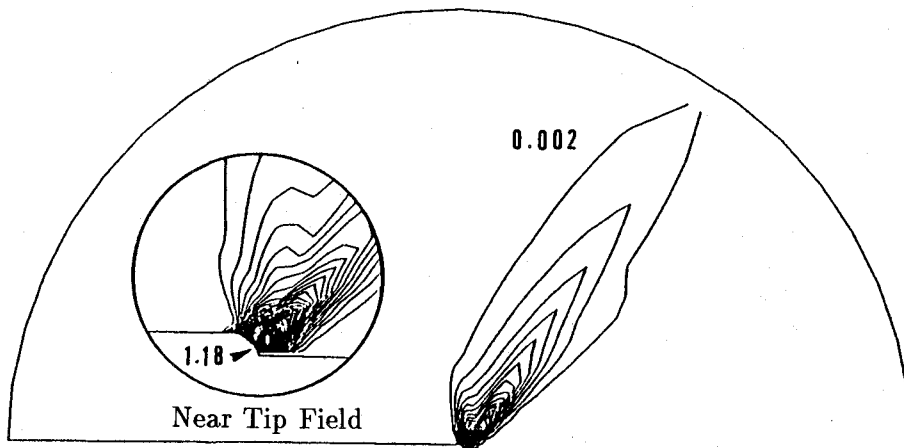


図 4-15 き裂形状の変化



(b) Ori. 2



(a) Ori. 4

図 4.16 相当塑性ひずみの分布

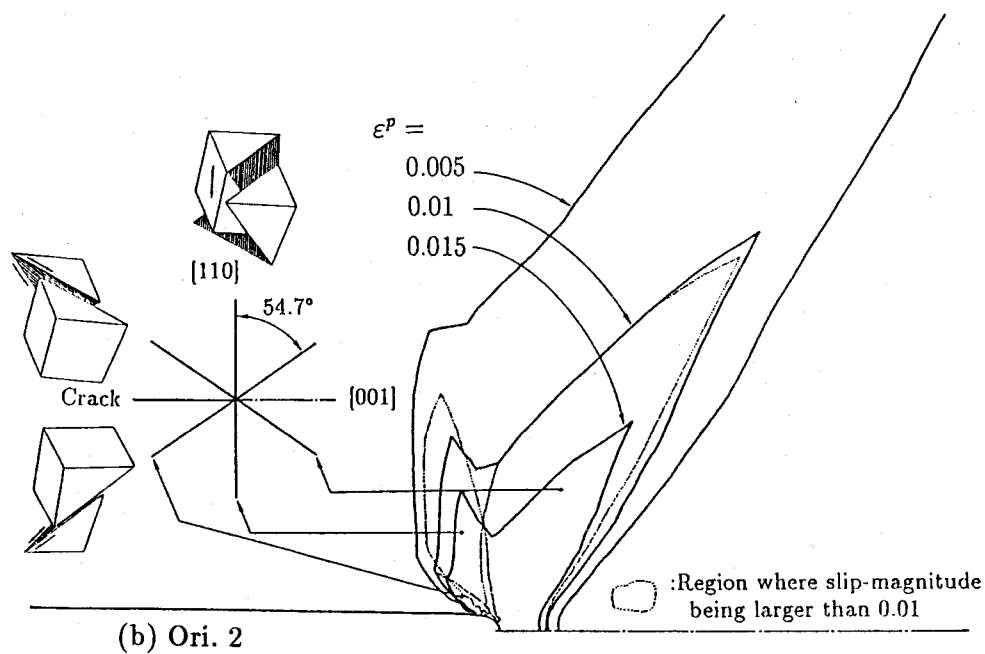
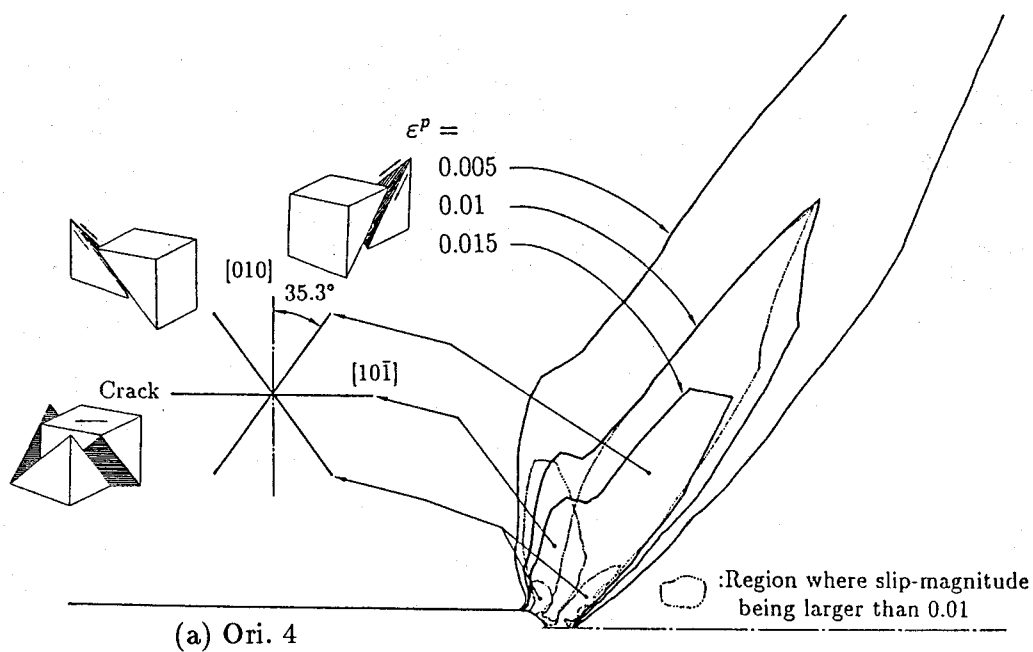


図 4.17 活動すべり系のすべり量

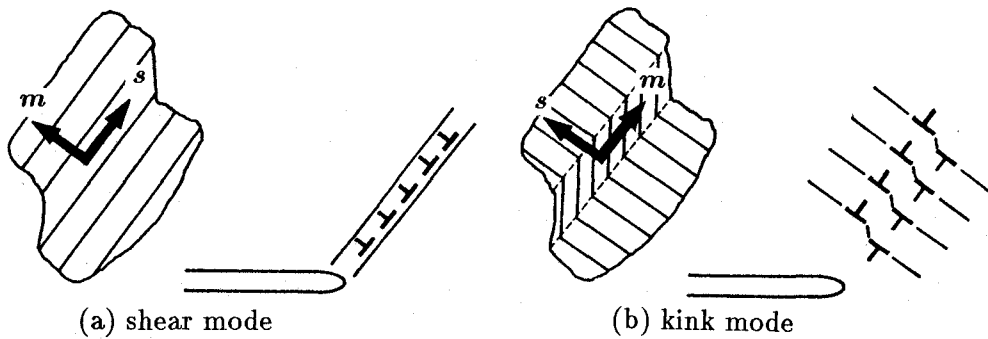


図 4-18 すべり帯に生じる変形モード

4.2.4 モード I 型き裂における境界条件の取り扱いの検討

変位・荷重境界条件

FS ポテンシャルによって特徴付けられた、中央き裂を有する BCC (α 鉄) 単結晶材料の原子モデルを考える。図 4-1 (b) Ori. 2 $[\bar{1}10](110)$, (d) Ori. 4 $[101](010)$ の、二つの異なる配向 (前節までの検討結果から、前者は転位を発生し先端が鈍化すること、後者はき裂進行方向に双晶変形を伴いながらへき開的に進展することがわかっている) について、初期に、 $K_{I0}(= 0.8\text{MPa}\sqrt{\text{m}})$ を与えてき裂を開口させた後、原子領域の境界付近の原子に対して、変形速度 $\dot{K}_I$ に相当する異方性線形弾性解にしたがい変位を規定する (変位規定)、または、それらにはたらく外力を拘束する (荷重規定) といった 2 種類の境界条件を用いてその結果を比較する。表 4-5 で示す略号を組み合わせた 8 つの異なる条件での解析結果を検討する。

8 つのケースの原子配置の変化の典型的な形態を図 4-19 に示す。

表 4-5 解析条件

D:	Displacement Boundary Condition
F:	Force Boundary Condition
1:	Ori. 2; Crack Tip Along $[\bar{1}10]$, Crack Plane (110)
2:	Ori. 4; Crack Tip Along $[101]$, Crack Plane (010)
L:	$\dot{K}_I = 0.5 \times 10^{11} \text{MPa}\sqrt{\text{m}}/\text{s}$
H:	$\dot{K}_I = 1.0 \times 10^{11} \text{MPa}\sqrt{\text{m}}/\text{s}$

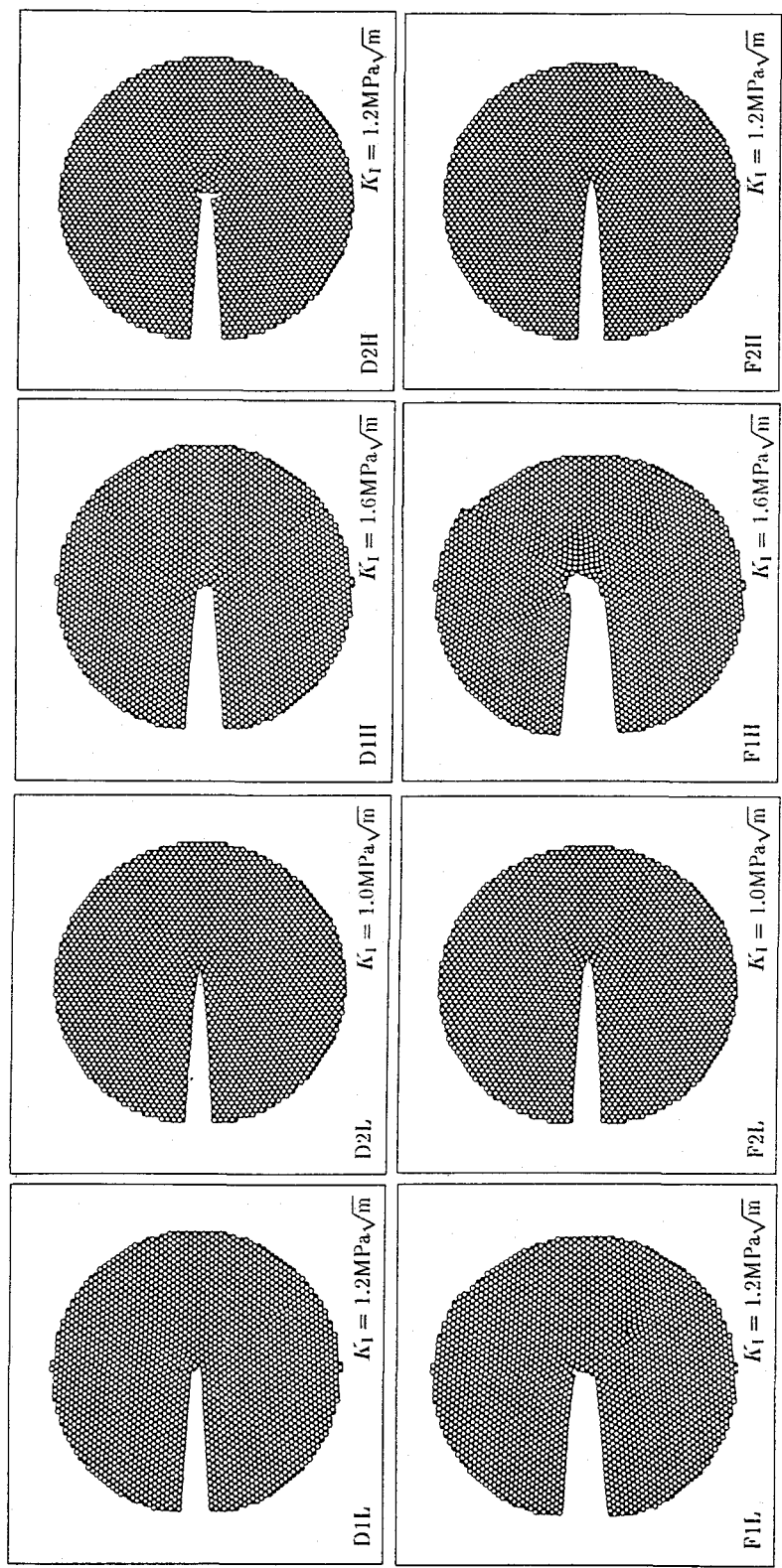
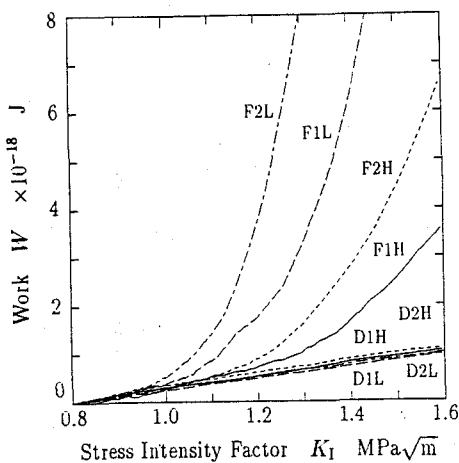
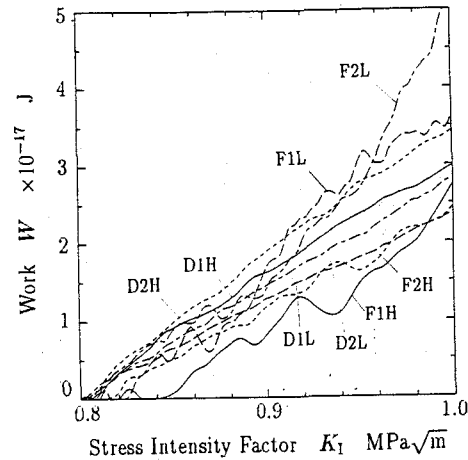


図 4-19 解析結果 (境界条件による影響)



(a) 仕事量の変化



(b) 初期立ち上がり部分の詳細

図 4-20 仕事量の変化 (境界条件による影響)

110 き裂の場合には転位が発生しき裂が鈍化する。変位規定の D1L, D1H では転位は境界を通過できないのに対し、荷重規定の F1L, F1H では転位は境界を通過するので、境界の形状が変化し、その後の系は複雑な応答をすることになる。[101](010) の配向の場合には双晶変形を伴いながらへき開的にき裂が進展する。

荷重規定の F2L, F2H では、破断するまでき裂は直進するが、変位規定の D2L, D2H では、直進後き裂は双晶面に沿って分枝する。変形形態は、ここで考えた程度の変形速度の差 (L と H) にはあまり依存しない。境界条件の影響としては、一般に、荷重規定の場合のき裂の開口量・進展量は、変位規定のそれらよりも大きい値になる。例えば、D1L と F1L を比べると荷重規定のほうが転位の発生数は多く、F2L を D2L と比べると同一の K_I に対して、き裂進展量は約 1.8 倍になっている。

図 4-20 は、系に加えた仕事 W と応力拡大係数 K_I の関係を表わしたものである。 $K_I \div 1.0 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ までは、境界条件の違いによる差はほとんど見られないが、それを越えると、荷重規定の場合、仕事が急激に増加する。このことは、境界に加える力の増分に対する変位が非常に大きくなって系の応答が完全塑性的になることを意味している。これは、ここでは K_I 値の評価に関して、外部場に線形弾性解を用い、非線形性を考えていないということのほかに、転位の発生やき裂進展にともなうエネルギーの解放、き裂先端位置の移動など非弾性的な変形によるものがあると考えられる。ただし、十分大きな領域での微小な変形を取り扱いにおいては、両境界条件は同様な結果を与える。

分子動力学法と有限要素法の結合解法

原子領域を連続体中に埋め込んだモデルを解析するために、動力的に整合性のある外部場との結合法について検討する。

動的有限要素法-分子動力学法結合モデル 有限要素領域においては対角化された集中質量マトリクスを用いて、剛性マトリクスの逆行列を求めることなく解を求めていく動的陽解法 (Dynamic Explicit Method) を用いることにより、原子領域の分子動力学計算と整合性のある解法を構成することができる。すなわち、有限要素モデルでは、

$$[M]\{\ddot{\delta}\} = \{F\} - [K]\{\delta\} \quad \dots\dots\dots (4.2)$$

ここで、 $[M]$ は集中質量マトリクス、 $[K]$ は剛性マトリクス、 $\{F\}$ は節点力ベクトル、そして、 $\{\delta\}$ は節点変位ベクトルである。一方、原子モデルでは、

$$m_i \frac{d^2 q_i}{dt^2} = F_i \quad \dots\dots\dots (4.3)$$

ここで、 m_i は原子 i の質量、 q_i は原子 i の位置ベクトル、 F_i は原子 i に作用する力である。 $[M]$ は対角行列であるから、式 (4.2), (4.3) は同一の形であり統一的に扱うことができる。

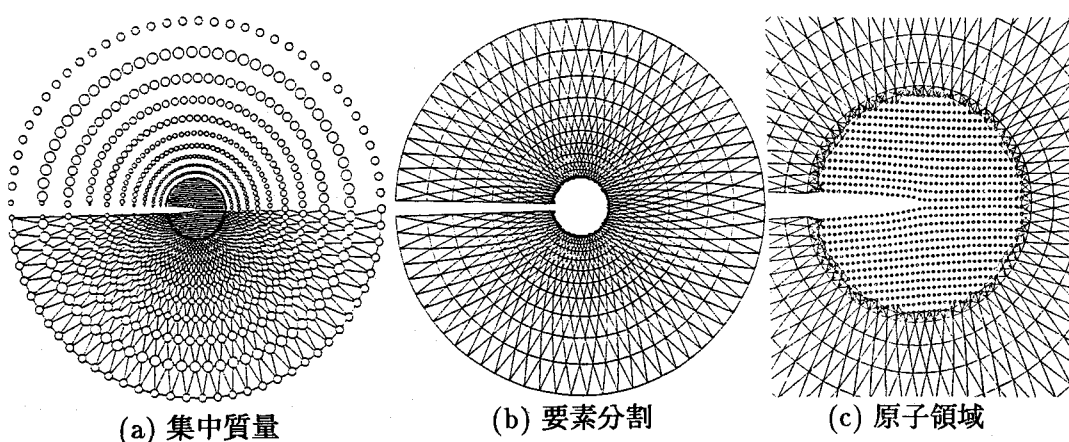


図 4.21 要素分割と原子配置 (FEM-MD 結合モデル)

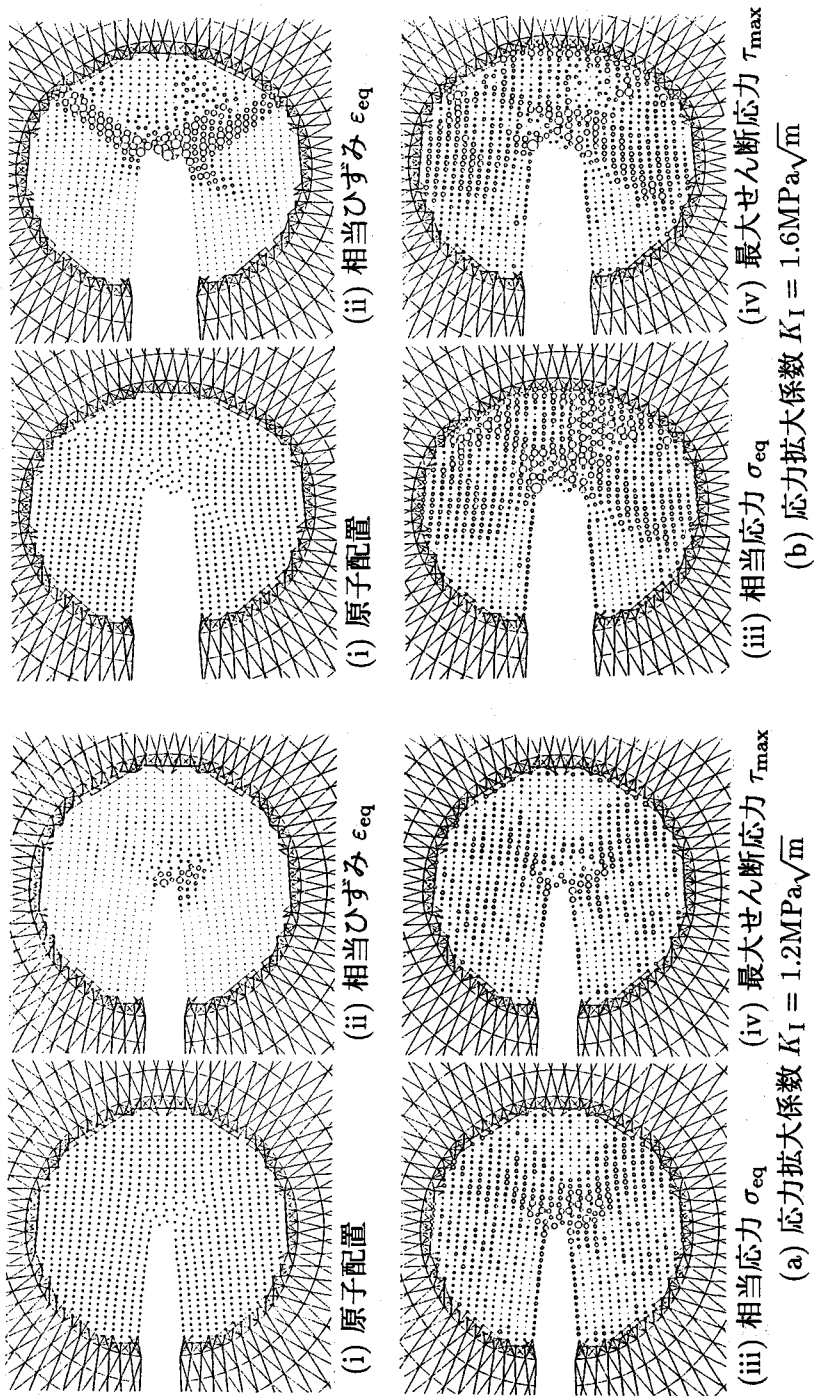


図 4-22 原子配置と応力・ひずみ

このようにして組み立てられる動力的に、変位・荷重が整合性のとれた FEM-MD 結合モデルを考える。図 4-21 に要素分割および原子配置を考え、境界の節点に応力拡大係数 K_I に対応する変位速度を与える。

解析結果を図 4-22 に示す。ここで、応力、ひずみを表わす図で円印の半径はその絶対値を表わしている。原子モデルにおける応力評価は、第 2 章で述べた方法を用い、一方、ひずみ場は、注目する原子のまわりにあるポテンシャルの影響範囲の原子の変位を空間座標に対して線形と仮定し、最小二乗法によりその係数を決定することにより得られる変位場から算出している。波動は両モデル間を伝播し、それぞれの系の応答が境界を通じて他方のモデルに伝わる意味で、より厳密に問題を捉えたモデルといえる。ここでは、有限要素領域は微小変形弾性論に基づく定式化によっているが、大変形に対しては有限変形解析を行なう必要がある。しかしそのように工夫しても、境界部での拘束は大きいので転位の通過によって格子がずれるような問題を追跡する解析は不可能であり、別な工夫が必要である。

このような集中質量マトリクスを用いた有限要素モデルで陽的解法に基づく解析を行なうことで、分子動力学法における時間積分と統一的に取り扱うことができる。けれども、系が大きくなると、外力が原子領域に到達するまでの実時間が大きくなり、実質的な解析は困難になることが予想される。したがって、領域に応じて時間ステップを変化させる Multi-time step 法⁽¹¹⁾の導入、質量を擬似的に小さくしたモデル化、確率過程を取り込んだモデル化などの工夫が必要になる。

4.3 モード II 型き裂の解析

本節では、モード II 型で開口するき裂に対して、原子集合体モデルによる分子動力学解析を実施し、結晶塑性理論に基づく有限要素解析結果との対応について検討するとともに、き裂先端からの、転位の発生条件、き裂先端の特異場と転位の応力場の相互干渉などについて検討を加える。

4.3.1 分子動力学解析

ここでは、モデル材料として FCC 結晶 (銅) を選び、Ackland ら⁽⁸⁾による Finnis-Sinclair ポテンシャルを用いる。図 4-23 のように、 x, y, z 軸を、それぞれ、き

裂進展方向, き裂面法線方向, き裂前縁方向にとる. 解析領域は, $x - y$ 面内で, $20\sqrt{2}a_0 \times 20\sqrt{2}a_0$ ($a_0 = 3.615 \times 10^{-10}$ m は, 格子定数) にとり, z 方向は周期境界条件とし, その最小周期の二層について解析を行なう.

初期き裂は, 完全結晶の原子配置に原子空孔のシートを作る方法でモデル化する. 初期設定温度 $T_0 = 40$ K の Maxwell 分布にしたがうランダムな初速度を各原子に与え, 表 4.6 に示すように, 結晶配向, 境界条件の異なる 6 種類のケースについて解析を行なう. 表中の略号は, 順に, 境界条件の種類, 結晶の配向の違いを表わしている. 荷重負荷の境界条件として, モード II の応力拡大係数 K_{II} に対応する結晶配向に依存した異方性を考慮した線形弾性解より得られる変位に基づいて, その時間変化率 $\dot{K}_{II} (= 0.005 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}/\text{ps})$ に対応する速度を境界の原子に与える変位規定 (略号 D) と, 線形弾性解より境界原子に働く力の時間変化率を与える荷重規定 (略号 F) の 2 種類を用いる. 変位規定の場合, 境界原子の z 方向変位は零とする. なお, 時間ステップは $\Delta t = 5 \times 10^{-15}$ s としている.

結晶の配向については, き裂前縁を $[110]$ (z 方向) にとり, $x - y$ 面内で格子を回転させた, $[110](001)$, $[110](\bar{1}11)$, $[110](\bar{1}10)$ の 3 種類 (ここで最初の方法はき裂前縁の方向, 続く面はき裂面を表わす) を考え, それぞれ, 略号 1, 2, 3 で表わす. Ori. 1 の原子配置を図 4.24(a) に示す. 図中で, 丸印の大小は, z 方向に異なる層の原子を表わしている. また, 実丸印は境界の原子を表わしている.

表 4.6 解析対象

Simulation	Boundary Condition	Orientation	Number of Atoms
D1	D	1 $[110](001)$	2246
D2	D	2 $[110](\bar{1}11)$	2231
D3	D	3 $[110](\bar{1}10)$	2266
F1	F	1 $[110](001)$	2246
F2	F	2 $[110](\bar{1}11)$	2185
F3	F	3 $[110](\bar{1}10)$	2266

各ケースのき裂先端の拡大図を図 4.24(b) に示す. 仮定した初期き裂面を図中に実線で示している.

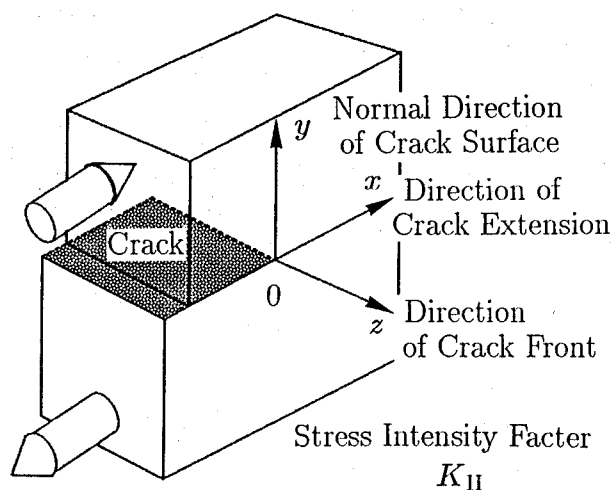


図 4-23 モード II き裂の模式図

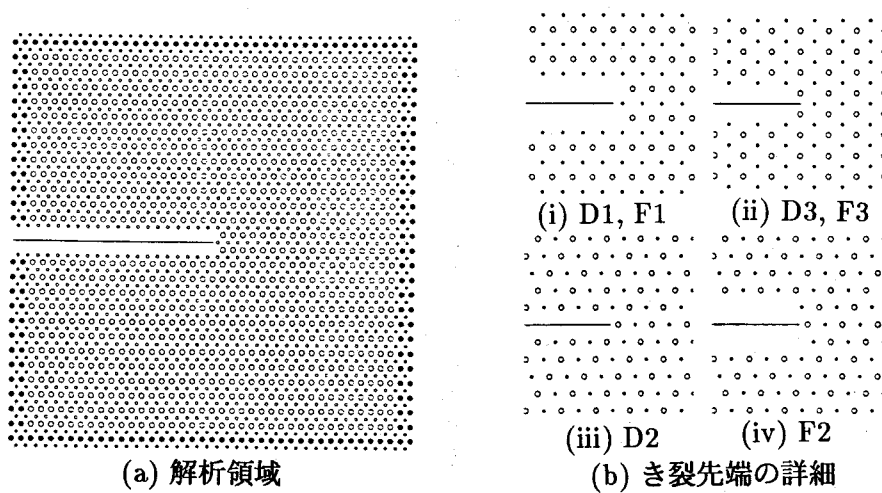


図 4-24 初期原子配置とき裂先端の詳細図

4.3.2 結晶塑性論に基づく有限要素解析

解析モデル

Asaro が考案した理論⁽¹²⁾を基礎とした結晶塑性モデルを用いたモード II き裂の有限要素解析を行なう (詳細は, 第 3 章参照). ここでは, すべり系 α の分解せん断応力 $\tau^{(\alpha)}$ とせん断すべり $\gamma^{(\alpha)}$ の関係は, 臨界せん断応力 k が一定の弾・完全塑性体として特徴付けられるとする. 解析を容易にするためにひずみ速度依存性を考慮し, 接線係数法を用いる. その際, ひずみ速度感度指数 $m = 0.005$, 基準ひずみ速度 $\dot{\alpha} = 0.001$, 接線係数法の補間パラメータ $\theta = 0.5$ とする.

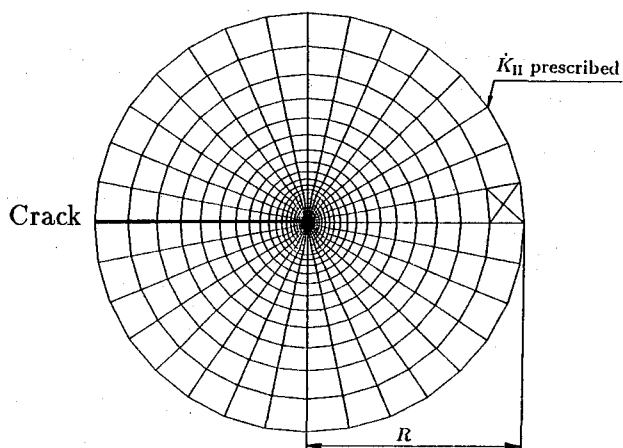
原子モデルによる結果との関連を調べるために, FCC 結晶の 3 次元的な 12 組のすべり系のすべりを考慮したモデルを用いる. 結晶の回転は無視できる程度であると考え平面ひずみ条件下で微小変形解析を行なう.

要素分割図を図 4.25 に示す. き裂先端の最小要素の一辺の長さは, 円形の解析領域の半径 R の $1/10000$ である. 要素は四角形を対角線で四つの三角形に分割した Crossed Triangles 要素を用いる. 弾性特性は等方性を仮定し, 縦弾性係数 $E = 1000k$, Poisson 比 $\nu = 0.3$ とし, 領域境界の節点に応力拡大係数 $K_{II}/(k\sqrt{R}) = 0.01$ 1/s の外力に対応する変位速度を線形弾性解により与える.

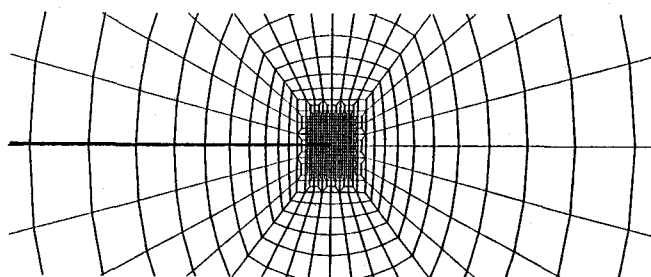
すべり系の配置のモデル化

ここで考えている $[110]$ 方向を z 方向に一致させる配向において, 平面ひずみ条件下では, 前節の図 4.12 のような, 2 種類のタイプ I と 1 種類のタイプ II の合計 3 種のすべり変形が可能である⁽⁷⁾.

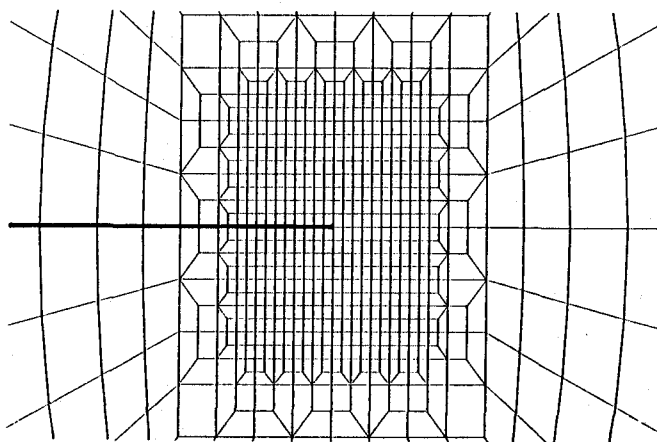
ここで考えている連続体モデルでは, 物体中のいたるところに転位が分布し, それが動くことによりすべり変形を生じることになっているが, 一方の原子モデルは初期転位を含まない完全結晶で, 転位はき裂先端もしくはき裂面から発生する以外に考えられない. さらに, 厚さ方向は最小周期の 2 原子層しか考えていないため, タイプ II の変形は起こりえない.



(a) 解析領域



(b) 図(a)を100倍に拡大した図



(c) 図(a)を444倍に拡大した図

図4.25 要素分割図

そこで、連続体モデルにこうした原子モデルの特性を反映させるために、活動できるすべり系を限定したモデルを考えることにする。すなわち、12の全てのすべり系が平等に活動できるモデル(A)から、先に述べた3種のすべり変形に關与するすべり系のうち、き裂面を横切るすべり系だけ活動できるモデル(B)、き裂先端部を通るすべり系だけ活動できるモデル(C)、二つのタイプIの変形に關わるすべり系だけが活動できるモデル(D)を考える。これらのモデルの活動可能なすべり系の模式図を図4.26に示す。なお、活動不可能なすべり系のモデル化は臨界せん断応力値を十分大きくすることにより実現する。

	(a) Ori. 1	(b) Ori. 3
(i) モデル(A)		
(ii) モデル(B)		
(iii) モデル(C)		
(iv) モデル(D)		

図 4.26 活動可能なすべり系を限定したモデル

4.3.3 分子動力学解析の結果

各ケースの典型的な変形状態を図 4.27 に示す。変形をわかりやすくするために初期配置における第 1 層の原子を [111] 方向に実線で結んである。いずれの配向、境界条件においても、本質的にはぜい性的な破壊は見られず、き裂先端から刃状転位が発生し、{111} 面上を運動する。らせん転位は Shockley の半転位に分かれる傾向にあるが(このことは、4.4 でモード III き裂の解析結果をもとにして検討を加える)、ここで発生している転位も積層欠陥を作る部分転位であり完全転位ではない。完全転位が発生するためには大きな変形を生じさせる必要があり、解析する系の原子数を大きくしなければならない。

4.3.4 系のエネルギーの変化

図 4.28 に、系のポテンシャルエネルギー、運動エネルギー、仕事の変化を示す。ポテンシャルエネルギーは初期値との差を示している。温度 T を運動エネルギー E_k により、 $T = 2E_k/(3Nk)$ (k は Boltzmann 定数) として評価してみると、緩和によりポテンシャルエネルギーと運動エネルギーの間で再分配が起こり、初期の設定温度より低くなり、40K に設定した場合約 20K に変化している。

変形が弾力的である間は系に加えた仕事は下に凸の二次関数の形で増加し、系の温度上昇はほとんど生じず、ポテンシャルエネルギー(ひずみエネルギーに対応する)が増加する。境界条件 F については系全体のエネルギー変動が大きく、この図から転位の発生時の状況を読み取るのは困難であるが、D については、図中にマーク (1) で示したように、き裂先端から転位が発生するとポテンシャルエネルギーが解放され、その散逸により急激な温度上昇がみられる。

4.3.5 臨界せん断応力による K_{II} の評価

第 2 章で述べたように線形破壊力学では、き裂先端からの距離 r 、 x 軸から反時計まわりにとった角度 θ の位置でのせん断応力 $\tau_{r\theta}$ は、

$$\tau_{r\theta}(r, \theta) = \frac{K_{II}}{\sqrt{2\pi r}} F(\theta) \dots\dots\dots (4.4)$$

で表わされる⁽¹³⁾。

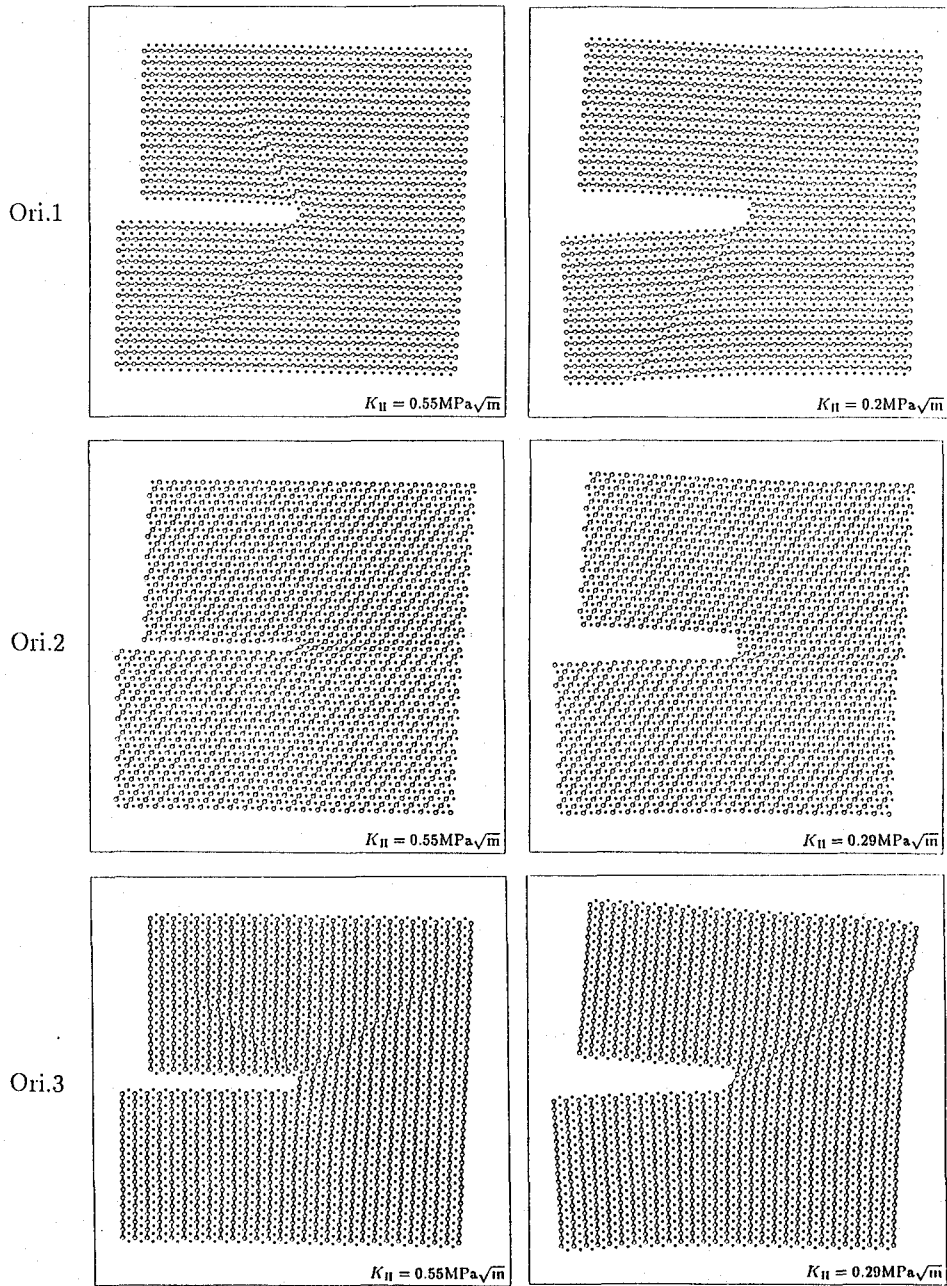


図 4.27 き裂先端に現われる原子構造

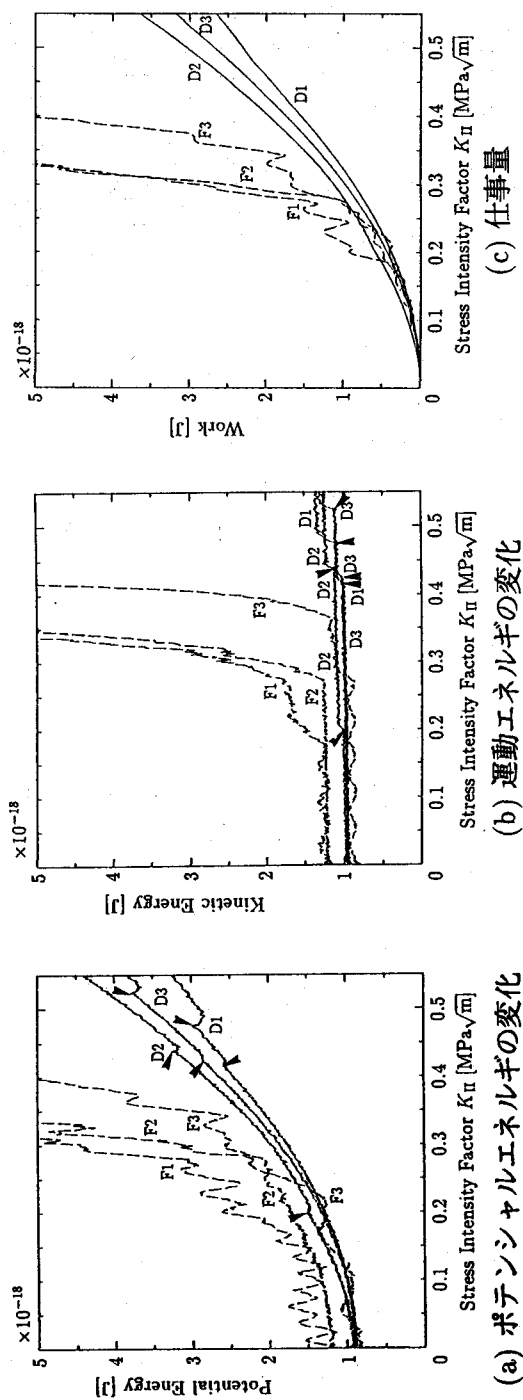


図 4.28 系のエネルギー変化

ここで、き裂先端から一定の距離 r_0 の点のせん断応力 $\tau_{r\theta}$ が、臨界せん断応力 τ_0 に達したときにき裂先端から転位が発生し、すべりが生じるものと仮定すると、その臨界応力拡大係数 K_{II}^{cr} は、

$$K_{II}^{cr} = \frac{1}{F(\theta)} \tau_0 \sqrt{2\pi r_0} \dots\dots\dots (4.5)$$

と表現され、したがって、 K_{II}^{cr} は、 $1/F(\theta)$ に比例定数 $\tau_0 \sqrt{2\pi r_0}$ で、比例することになる。そこで、線形破壊力学から得られた $1/F(\theta)$ と MD 解析の結果転位の発生する臨界応力拡大係数 K_{II}^{cr} および、これらの値から計算した $\tau_0 \sqrt{2\pi r_0}$ を表 4.7 に示す(表中、—は、明確に読み取れなかったものである)。 $1/F(\theta)$ の値が最も小さいすべり系が最初にすべることが予測できるが、図 4.27 よりほぼ予測通りの結果が得られており、この評価法は、定性的には現象を正しく反映している。 $\tau_0 \sqrt{2\pi r_0}$ の値には、0.15 ~ 0.39 とばらつきが見られるが、その理由を明らかにするには、他の応力成分の効果、き裂先端の原子配置の不均一性、有限温度を考える場合の初期条件依存性、原子間相互作用の非線形性や結晶の回転による境界条件の不正などの影響を考慮した検討が必要である。

表 4.7 線形弾性解と臨界応力拡大係数

Ori.	θ deg	$1/F(\theta)$	D		F	
			K_{II}^{cr} MPa $\sqrt{m}$	$\tau_0 \sqrt{2\pi r_0}$ MPa $\sqrt{m}$	K_{II}^{cr} MPa $\sqrt{m}$	$\tau_0 \sqrt{2\pi r_0}$ MPa $\sqrt{m}$
1	-125.26	-1.240	0.42	0.34	0.19	0.15
	54.74	9.706	—	—	—	—
	54.74	9.706	—	—	—	—
	125.26	-1.240	0.48	0.39	—	—
2	-70.53	11.163	—	—	—	—
	0.00	1.000	0.20	0.20	0.28	0.28
	109.47	-1.212	—	—	—	—
3	-144.74	-1.575	—	—	—	—
	-35.26	1.765	—	—	—	—
	35.26	1.765	0.53	0.30	0.28	0.16
	144.74	-1.575	0.43	0.27	—	—

境界条件による違いを見ると、初期き裂のための原子空孔の層の厚さが異なる Ori. 2 の場合を除いて、荷重規定の場合の臨界応力拡大係数の値は、一般に変位規定の場合に比べて小さくなっている。

4.3.6 有限要素解析の結果

図 4.29 は、12 の全てのすべり系を考えた場合 (モデル A) の有限要素法解析の結果得られた、 $K_{II} = 0.2k\sqrt{R}$ での変形とすべり系のすべり量 $\gamma^{(\alpha)}$ を表わしている。変形は 10 倍に拡大したものを、すべり量は、0.002 ~ 0.004, ..., 0.01 以上の 5 段階に線の太さを変えて示している。ここでは、解析の目的を、初期状態に原子面を取り去った形でモデル化されているき裂に対する MD 計算との比較に絞っており、き裂が閉口するような変形に際して、き裂面の接触は考慮していない。Ori. 1, 3 では、き裂先端の要素の変形や塑性域の広がり (すべり帯) に差はなく、すべり帯に現われる二つのモード⁽⁷⁾⁽¹⁰⁾、すなわち、すべり帯に平行なすべり系が活動するモード (shear mode) と垂直なすべり系が活動するモード (kink mode) が、互いに反対になって現われている。

図 4.30 は、すべり系を限定したモデルについての結果である。モデル B, C, D の順に活動可能なすべり系を限定していくことによって、kink mode のすべり帯は現われなくなり、代わりにそのすべり帯に近い角度で shear mode のすべり帯が現われる。

この結果は、第 3 章の解析結果において指摘したように、巨視的には同じに見える塑性変形が、すべり系の個数を限定し配置を変えることによって、異なるすべり系のすべりにより実現されていることに対応している。そして、最終的なモデル D のすべりは、原子モデルによる転位の移動 (図 4.27) と完全に対応している。

4.3.7 転位発生に関する考察

次に、転位の発生のメカニズムを調べるために、Ori. 2 について新たに 3205 個の原子の系を考え、荷重負荷の方法は変位境界条件とし、その他の条件は先に示した方法で MD シミュレーションを行なう。

初期配置と、典型的な変形状態を図 4.31 に示す。先の D2 の結果と同様 $K_{II} = 0.2\text{MPa}\sqrt{\text{m}}$ で x 軸方向に転位が発生し、き裂先端の特異応力場との間に生じる反発力によって高速で右方に移動する。

エネルギーの変化と温度分布

図 4.32 に各エネルギー、仕事の変化を示す。転位の発生点 (図中の / 印) において、仕事の変化を示す曲線の傾きが変化する。この傾きは一般化した外力と考えることができ、転位の発生時に現われるこの変化は、弾性限界 (降伏点) の応答を示している。

転位の発生と系の温度変化との関連については、すべりが発生している状況においては、き裂先端にピークを持つ温度分布が現われることが、佐々木ら⁽¹⁴⁾によって指摘されている。また、稲村ら⁽¹⁵⁾はポテンシャルエネルギーの変化から算出した温度から、転位発生時に急激な温度変化が生じることを指摘している。ここでも、転位の発生時に温度上昇が見られる。き裂先端近傍の図 4.31 の実線で囲まれた 52 個の原子を含む領域 (先端領域と呼ぶ) と、解析領域全体の温度変化を調べたのが図 4.33(a) である。転位の発生の瞬間は、先端領域の温度が急激に上昇するが、その後、先端領域から熱が拡散し、やがて、き裂先端の温度は下がり、上昇した全体領域の平均温度に等しくなる。

また、先端領域の運動エネルギーの各自由度の割合を調べると、転位の放出前と後ではほぼ等分配が成り立っているが、転位が放出される瞬間は原子の移動が大きい x 方向の割合が大きくなっている (図 4.33(b))。

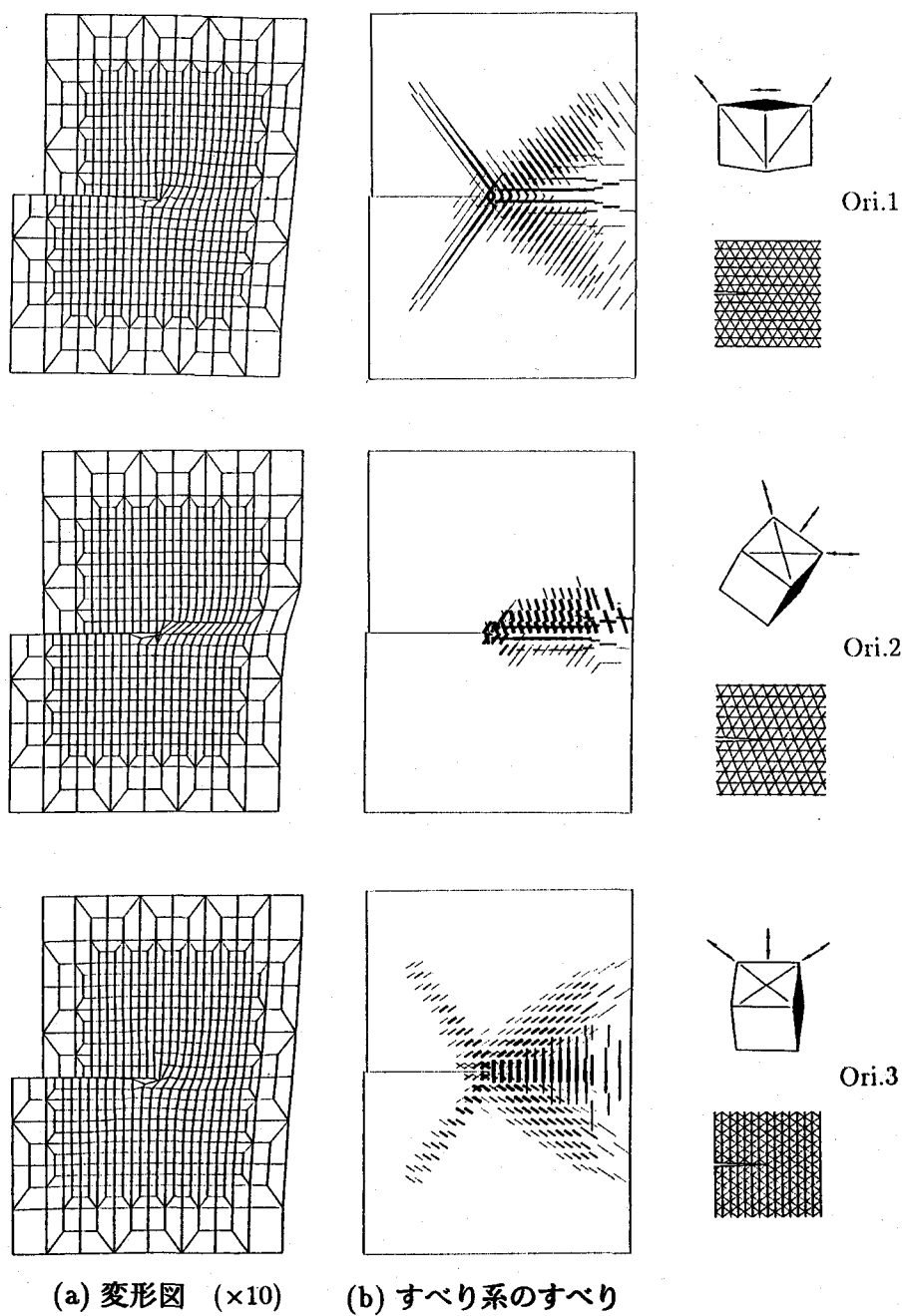


図 4-29 有限要素解析結果 (モデル A)

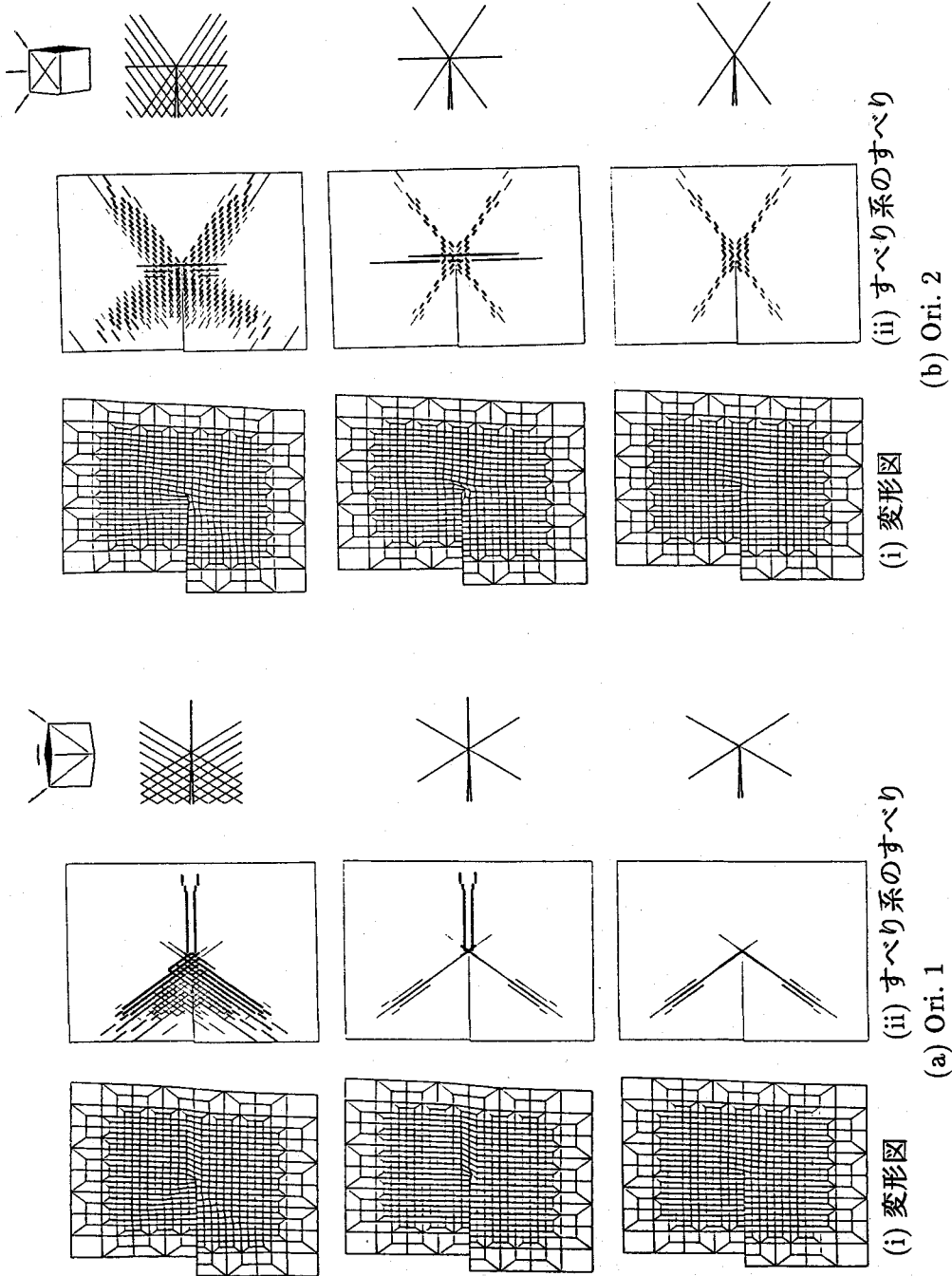
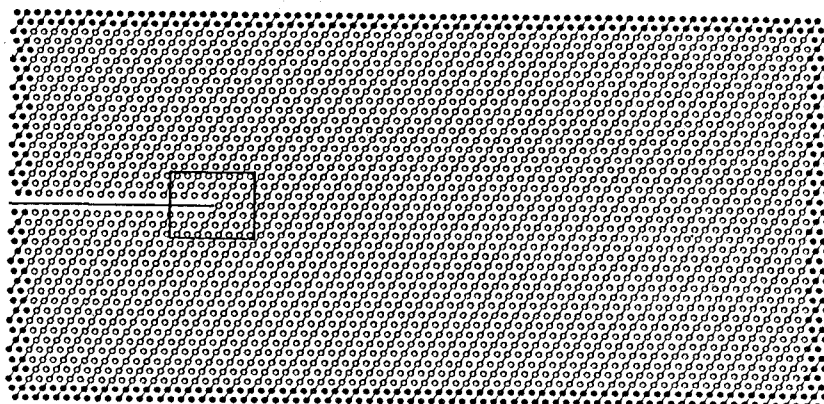


図 4.30 すべり系を限定したモデル(B, C, D)による結果



(a) 初期原子配置

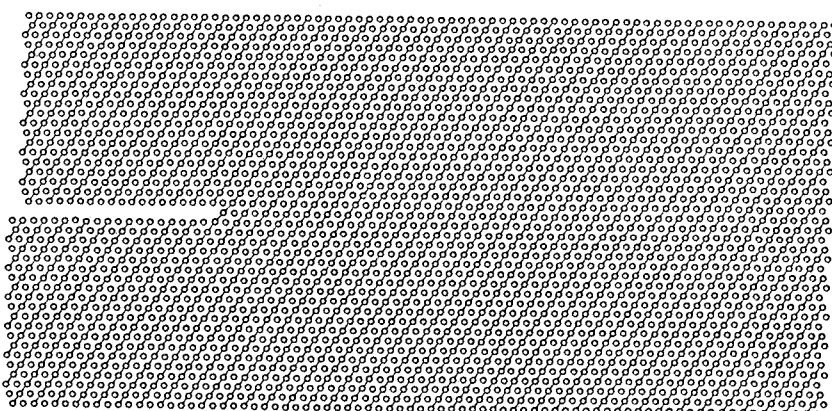
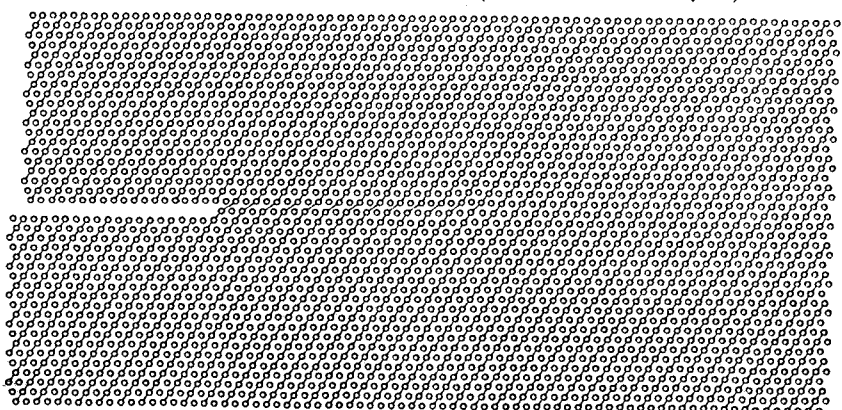
(b) 転位発生前の原子配置 ($K_{II} = 0.20 \text{MPa}\sqrt{\text{m}}$)(c) 転位発生後の原子配置 ($K_{II} = 0.22 \text{MPa}\sqrt{\text{m}}$)

図 4-31 初期原子配置図とき裂先端に現われる原子構造

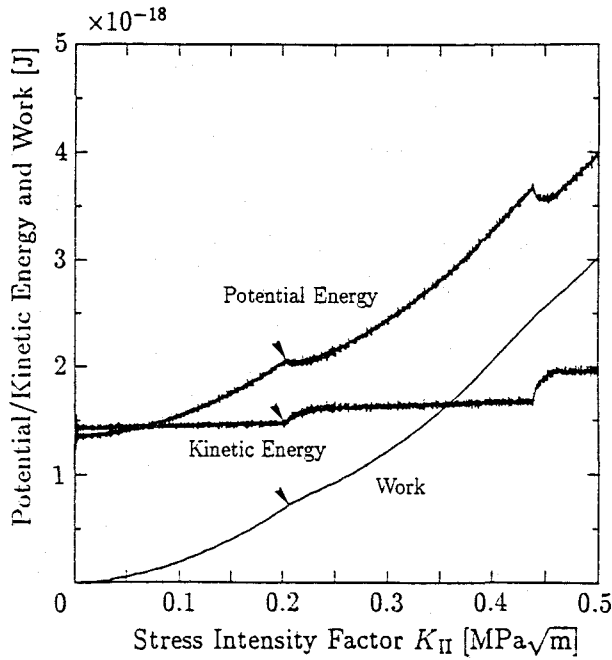


図 4.32 ポテンシャル，運動エネルギーと仕事の変化

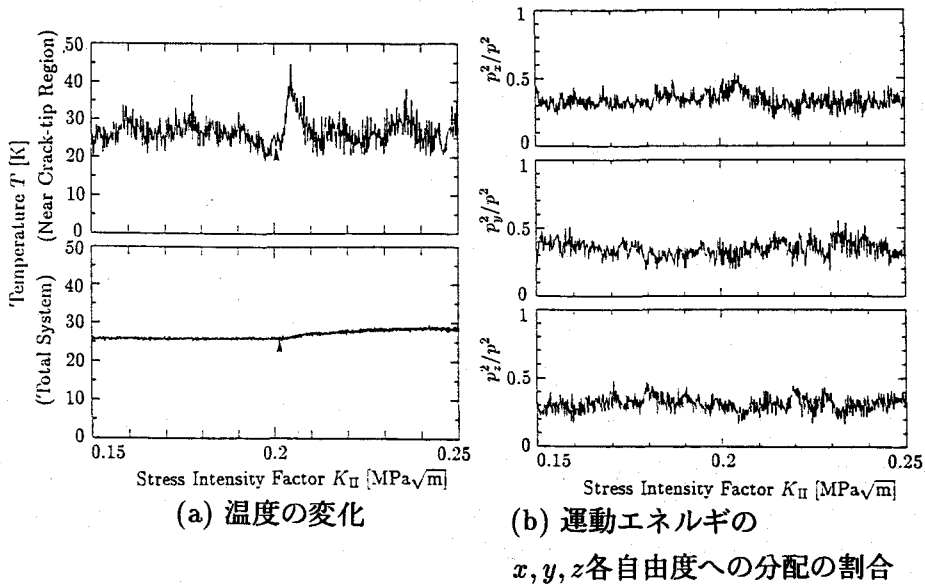


図 4.33 温度の変化と運動エネルギーの各自由度への分配の割合

臨界応力拡大係数の評価

Rice によれば、エネルギー的な考え方から、臨界応力拡大係数は、き裂面の前方に向かってき裂の前縁から転位が発生する場合について、

$$K_{II}^{cr} = \sqrt{\frac{2\mu\Gamma_{us}}{1-\nu}} \dots\dots\dots (4.6)$$

で与えられる⁽¹⁶⁾。ただし、 Γ_{us} は不安定 (積層) エネルギーと名付けられる量で、ポテンシャルの形と完全結晶の原子配置から評価することができる。いま、横弾性係数 μ をき裂面 (転位の移動面) 方向の τ_{xy} と γ_{xy} の係数 41GPa とし、Poisson 比 ν は、Voigt 平均を用いて等方化した値 0.32 を用い、FS ポテンシャルに対して計算した不安定エネルギー $\Gamma_{us} = 0.37 \text{ J}$ を代入すると、 $K_{II}^{cr} = 0.21 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ となる。表 4.7 中に示した Ori. 2 に対する変位境界条件を用いた MD 計算の結果は、 $K_{II}^{cr} = 0.2 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ であり、これは上に評価した Rice の理論とよく一致している。

応力値の評価

第2章で述べた方法で、原子レベルの応力値を評価した結果について検討を加える。 x 軸上の応力 τ_{xy} の分布を、図 4.34 に示す。実線は、線形弾性解を表わしているが、ポテンシャルの非線形性を考慮して、境界での応力値が MD 計算値と一致するように 10% 程度の補正を行なっている。転位発生までは応力分布はほぼ線形弾性解と一致している。転位の発生後のき裂先端の応力は減少する。

一方、Ori. 2、モデル A の有限要素解析により得られた応力分布 τ_{xy} を図 4.35 に示す。すべりが生じた後の応力は、き裂先端近傍で一定、それ以遠で弾性的に分布し、原子集合体モデルから得られた転位発生後の応力分布は、ここで考えた結晶塑性モデルではシミュレートできていないことを示している。

図 4.36 は、 $K_{II} = 0.3375 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ ($0.325 \sim 0.350 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ の平均) 応力分布を示したものである。き裂先端から $x = x_1$ のところに Burgers ベクトル b の刃状転位がある場合、き裂先端の特異場との相互作用によって生じるせん断応力分布は、

$$\tau_{xy} = \frac{K_{II}}{\sqrt{2\pi x}} + \frac{\mu}{2\pi(1-\nu)} \sqrt{\frac{x_1}{x}} \frac{b}{x - x_1} \dots\dots\dots (4.7)$$

で与えられる⁽¹⁷⁾。 $x_1 = 1.13 \times 10^{-8} \text{ m}$ として計算した結果を、図 4.36 中に実線で示す。転位発生面は、積層欠陥になっていて、面近傍の原子位置での厳密な応力評

価については問題があるが、き裂先端と転位芯付近を除いて転位発生後の応力分布もほぼ線形弾性論でうまく説明できるといえる。そして、転位発生後のき裂先端の応力値の減少が見られるが、これは転位による応力拡大係数の遮閉効果の一つの現われと考えることができる。

転位発生過程の応力の評価

図 4.37 に、き裂先端近傍の原子位置 (図中の g の原子) での応力値の時間変化を示す。転位を発生するまでは、応力 (の平均値) は線形的に増加するが、非常に短時間に転位の発生・移動に伴う原子再配置が生じ、急激に低下する。図 4.38 は、 $K_{II} = 0.20 \sim 0.22 \text{MPa}\sqrt{\text{m}}$ での図中の g, h 原子の原子間の x 方向の変位の差 (相対変位) と応力の変化の関係を示したものである。転位を発生してそれが新たな安定配置に移動する間、応力値はほぼ単調に減少している。

限界の応力値は、図 4.37, 4.38 によると、約 5GPa であることがわかる。この値は、一様単純せん断変形で静力学的に計算した極大応力値 4.3GPa と、完全格子のブロックを剛体的に反対方向に並進的にすべらせた計算した場合の最大応力値 8.8GPa の中間の値であり、理想せん断強度と呼べる値である。

ここで、臨界分解せん断応力 τ_0 の値を 5GPa とし、臨界応力拡大係数 K_{II}^c を $0.2 \text{MPa}\sqrt{\text{m}}$ として、式 (4.5) に代入すると、 $r_0 = 2.5 \times 10^{-10} \text{m}$ を得る。この r_0 の大きさから、き裂先端から、Burgers ベクトルのオーダーの位置での応力値が理想せん断強度に達したときに転位が発生するという評価も可能であると考えられる。

転位発生過程の原子の運動

転位発生過程の原子の運動について、図 4.39(a), (b) に、それぞれ図中の k の原子の軌跡と位置運動量の関係を示す。転位発生と移動に要する時間は原子振動周期のオーダーであることがわかる。

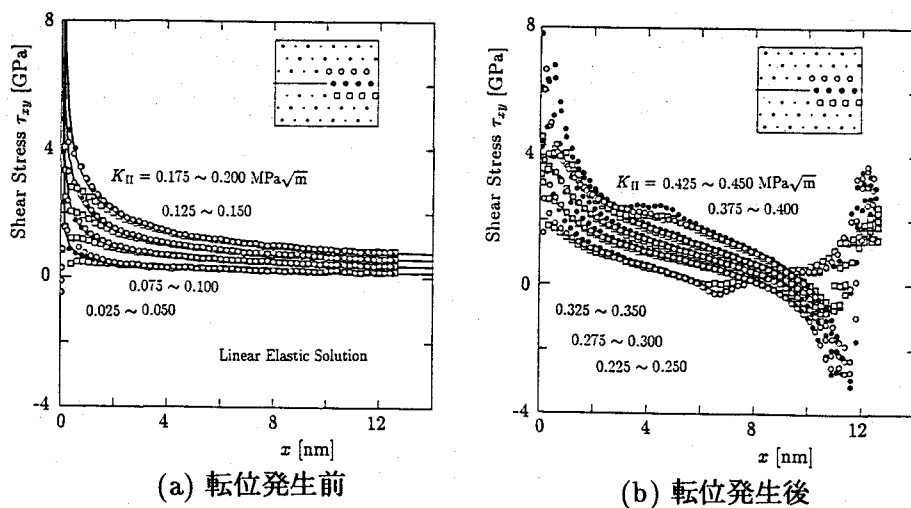


図 4-34 x 軸上のせん断応力 τ_{xy} の分布

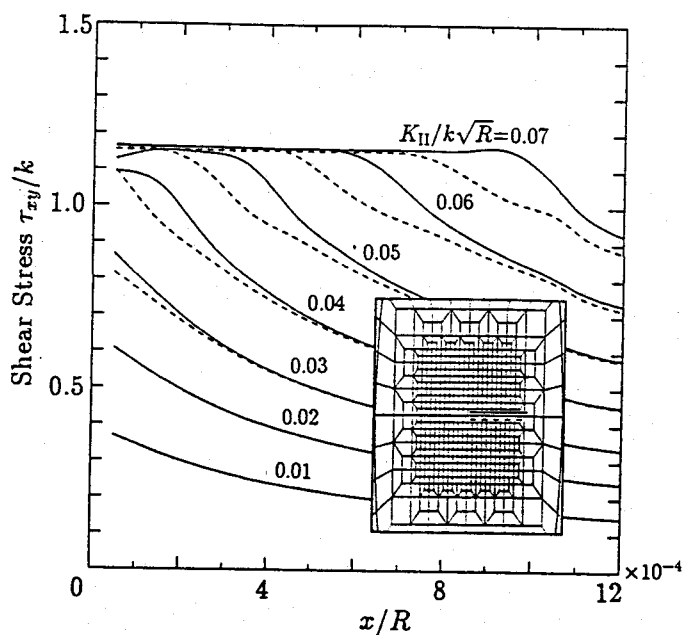


図 4-35 有限要素解析によるせん断応力 τ_{xy} の分布

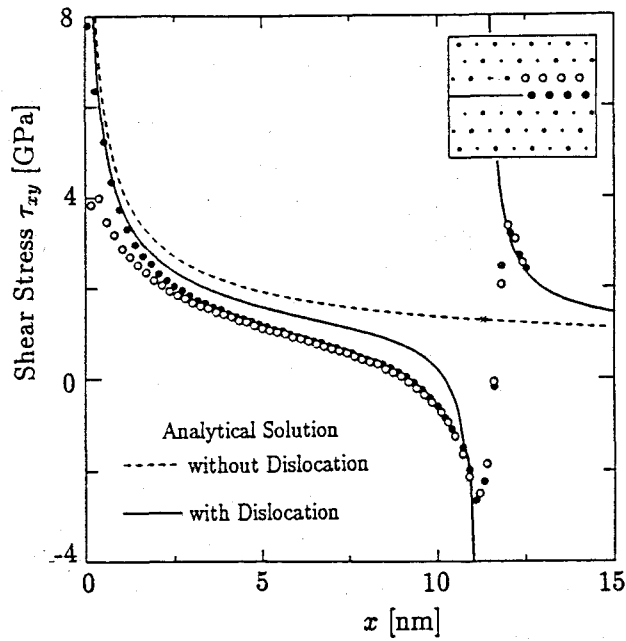


図 4-36 転位発生後のせん断応力 τ_{xy} の分布と弾性解

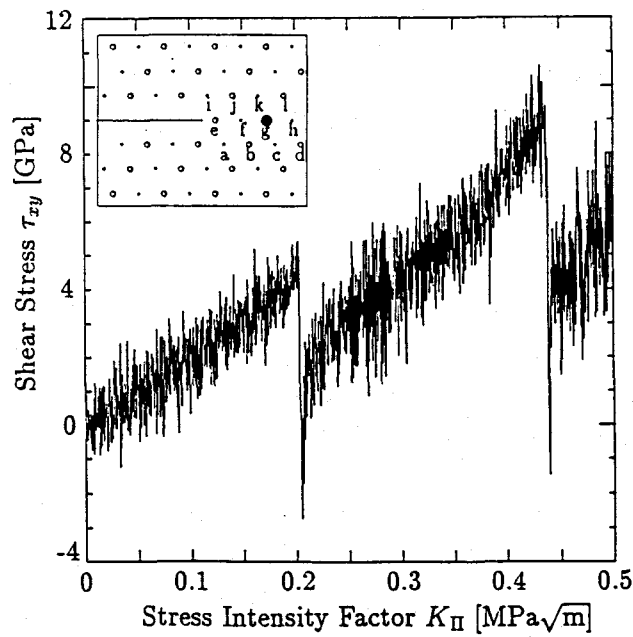


図 4-37 せん断応力 τ_{xy} の値の時間変化

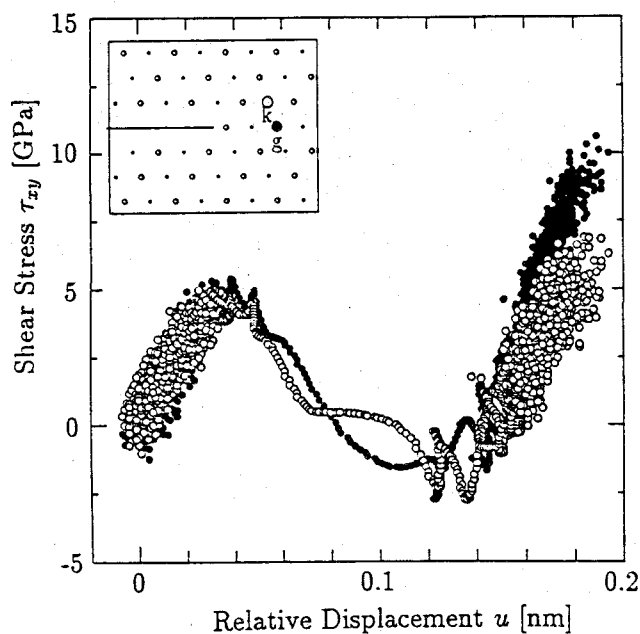


図 4-38 せん断応力 τ_{xy} の値と原子間の相対変位

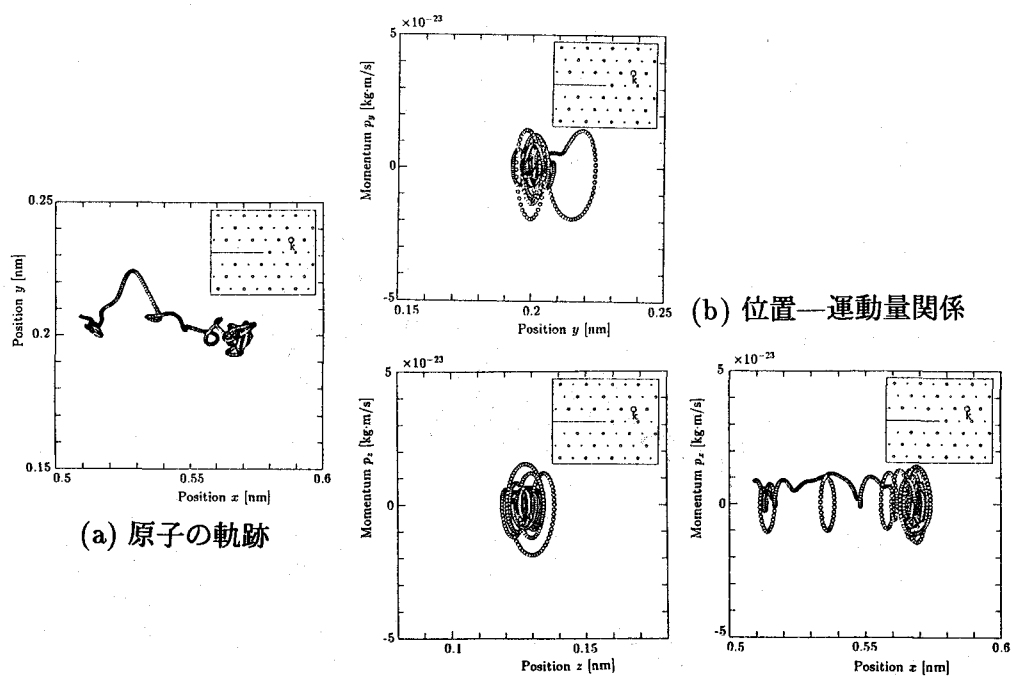


図 4-39 転位発生過程の原子の運動

4.4 モード III 型き裂の解析

この節では、面外せん断荷重下のき裂先端の微視的変形場の MD シミュレーションを行ない、モード III き裂の変形において、先端から発生するらせん転位の挙動を調べる。モード III 型き裂における主要な変形機構であるらせん転位は、刃状転位のように限定されたすべり面上を運動するのではなく交差すべりをおこすなど比較的自由的な運動が可能であり、き裂先端が転位源となって巨視的な塑性変形に結びつくさまざまな変形機構についての知見を引き出すことができると考えられる。ここでは、MD 計算の結果を、結晶塑性論に基づく Rice と Nikolic⁽¹⁸⁾(RN と略す)の解と比較し、原子モデルと連続体力学モデルとの接点を追求する。また、き裂先端近傍の応力場の線形弾性解との比較を行なう。

4.4.1 き裂先端場の解析

FCC 銅単結晶中のモード III 型のき裂先端近傍の変形挙動に対して、原子間の相互作用が、Ackland ら⁽⁸⁾による Finnis-Sinclair ポテンシャルで特徴づけられると仮定し、分子動力学法を用いて検討を加える。基本的には前節で述べた方法と同様にして解析を進める。

図 4.40 のように、 x, y, z 軸をそれぞれ、き裂進展方向、き裂面法線方向、き裂前縁方向とするモード III 形の荷重を受けるき裂を考える。解析領域は、 $x - y$ 面内で、 $40b \times 40b$ ($b = \sqrt{2}/2a_0$ は、Burgers ベクトルの大きさ、 $a_0 = 3.615 \times 10^{-10}$ m は、格子定数)にとり、 z 方向は周期境界条件を適用する。初期条件として、初期設定温度 T_0 での Maxwell 分布にしたがうランダムな初速度を各原子に与え、荷重負荷の境界条件として、結晶方位に依存した異方性を考慮した、モード III の応力拡大係数 K_{III} に対応する線形弾性解より得られる z 方向変位 (3 章参照)に基づいて、その時間変化率 $\dot{K}_{III}$ に対応する速度を境界の原子に与える。

表 4-8 解析対象

case	Crack Model		N	$\dot{K}_{III}$	T_0
				MPa $\sqrt{m}/ps$	K
I1H	[110](001)	I	2268	0.05	180
I2H	[110]($\bar{1}11$)	I	2316	0.05	180
I3H	[110]($\bar{1}10$)	I	2280	0.05	180
I1L	[110](001)	I	2308	0.005	40
I2L	[110]($\bar{1}11$)	I	2316	0.005	40
I3L	[110]($\bar{1}10$)	I	2308	0.005	40
V1L	[110](001)	V	2246	0.005	40
V2L	[110]($\bar{1}11$)	V	2231	0.005	40
V3L	[110]($\bar{1}10$)	V	2266	0.005	40

表 4-8 に示す, 結晶方位, 初期き裂のモデル化, 温度, 変形速度の異なる 9 種類のケースを解析の対象とする. 各ケースの条件を表わす略号は, 順に, き裂のモデル化の方法, 結晶配向, 初期温度および変形速度を表わす. 初期き裂のモデル化の方法として, 初期のき裂面を越えてはたらく原子間の相互作用は考えないことによりモデル化する方法 (略号 I), き裂面を原子空孔のシートとしてモデル化する方法 (略号 V) の 2 種を考える. 結晶の配向については, き裂前縁を [110], すなわち, FCC 結晶におけるすべり方向 (らせん転位の Burgers ベクトルの方向) にとり, $x-y$ 面内で格子を回転させた, 表中に示した [110](001), [110]($\bar{1}11$), [110]($\bar{1}10$) の 3 種類の配向を考え, それぞれ, 略号 1, 2, 3 で表わす. 最初の方法はき裂前縁の方向, 続く面はき裂面を表わしている. また, 初期温度, 変形速度について, $T_0 = 180K$, $\dot{K}_{III} = 0.05MPa\sqrt{m}/ps$ (略号 H) と, $T_0 = 40K$, $\dot{K}_{III} = 0.005MPa\sqrt{m}/ps$ (略号 L) の 2 種を考える.

図 4-41(a) に示すような初期原子配置を考える. 図中で, 丸の大小は, z 方向に異なる層の原子を表わし, 境界条件は, 境界拘束原子に対して z 方向変位速度拘束量に比例した半径の円 ($\odot$, $\otimes$ はそれぞれ, z 方向の拘束が正, 負であることを示す) で模式的に示している. 境界拘束原子の x, y 方向変位は零に固定され, z 方向変位のみ規定される.

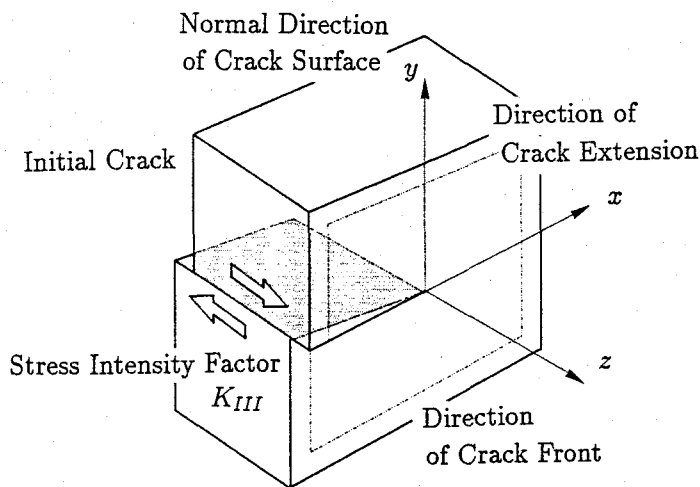


図 4.40 面外せん断荷重下のき裂の模式図

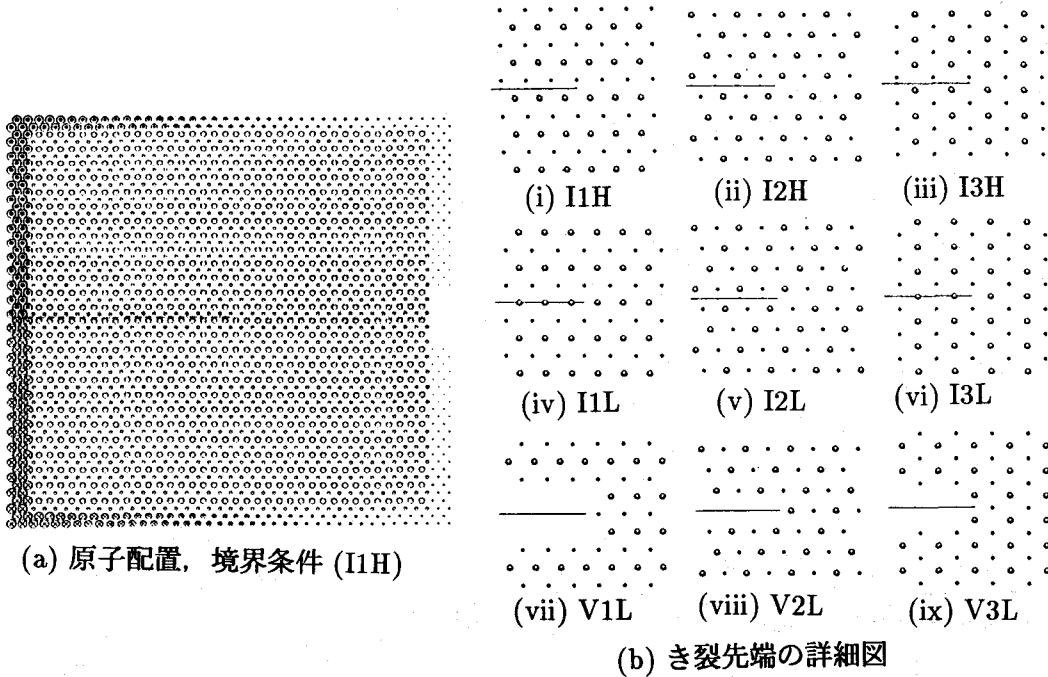


図 4.41 原子配置図, 境界条件とき裂先端拡大図

各ケースのき裂先端の拡大図を図 4-41(b) に示す. 初期き裂を実線で示す. また, I1L, I3L の場合には, き裂面と原子の位置が一致しないように, すべての原子を y の負の方向に微小量移動させている. 原子の質量は, $m = 1.05522 \times 10^{-25}$ kg であり, 時間ステップは, $\Delta t = 5 \times 10^{-15}$ s で行なう.

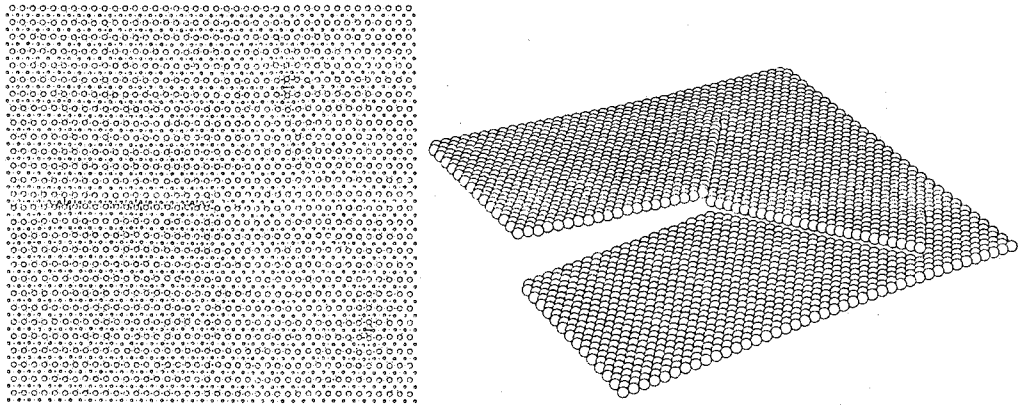
4.4.2 解析結果と考察

原子配置の変化

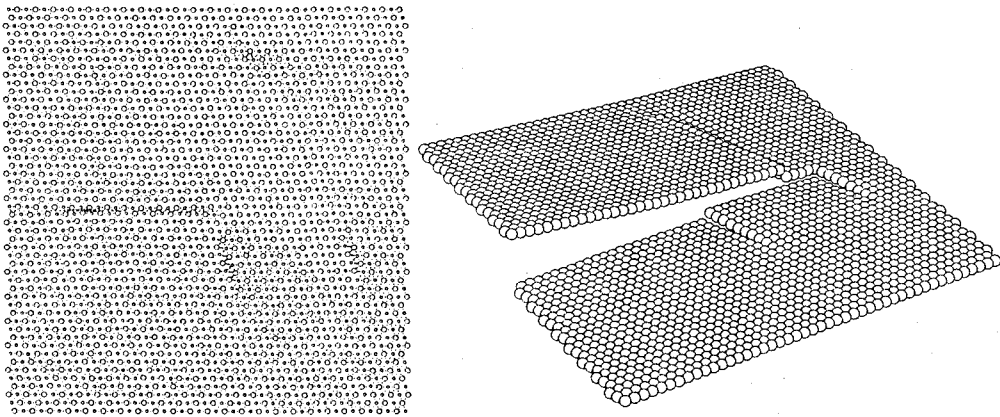
各ケースの典型的な変形状態を図 4-42~4-44 に示す. ここでは, Vitek らの原子の z 方向相対変位による表記⁽¹⁹⁾ と, 各原子 x, y 位置での z 方向の変位を示す鳥瞰図とを用いて図示している. 前者は, 隣接する原子間の z 方向の相対変位を矢印で表したもので矢印の長さは完全結晶からのずれを示すと考えてよい. 一方, 後者は変形の履歴の集積を表わしている.

I1H では, き裂先端かららせん転位が発生し, $(\bar{1}11)$ 面および, $(1\bar{1}1)$ 面ですべりが生じ, 転位はそれぞれ, $[\bar{1}12]$, $[\bar{1}12]$ 方向に動く. I2H では, 先端からき裂面 $(\bar{1}11)$ に発生したらせん転位は $[\bar{1}12]$ 方向に運動し, 少し進んだ後, 領域境界手前で $[\bar{1}12]$ 方向に向きを変え, 交差すべりを生じる. 変形が進むと, $(1\bar{1}1)$ 面 $[\bar{1}12]$ 方向, $(1\bar{1}1)$ 面 $[\bar{1}12]$ 方向にも転位の運動が見られる. I3H では, き裂先端より発生した転位が $(1\bar{1}1)$ 面 $[\bar{1}12]$ 方向と $(\bar{1}11)$ 面 $[\bar{1}12]$ 方向に運動する.

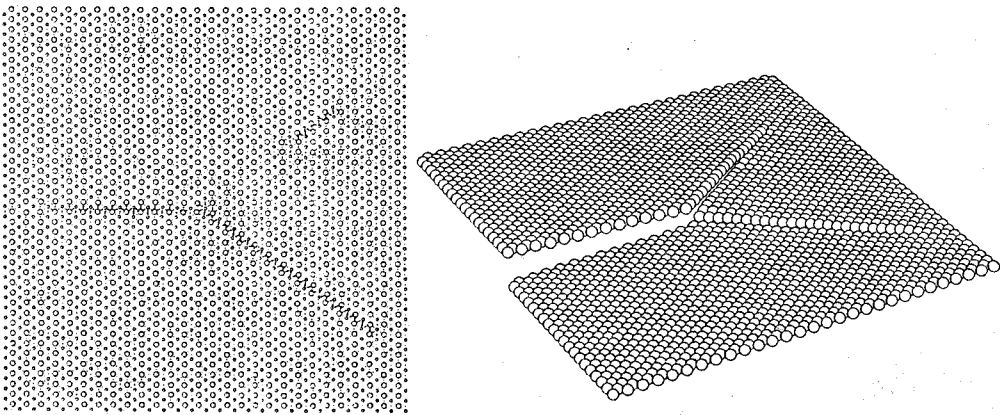
I1L~I3L, V1L~V3L においても, 定性的にほぼ同様な変形を示す. V1L では, $[\bar{1}12]$ 方向に進む転位は, き裂先端から完全に抜けず, き裂先端に部分転位を残したまま, 隣接した原子層から別の転位が同様に発達する. この変形は, き裂先端の丸みが大きく, $x-y$ 面内の変形の拘束が小さいために生じる $x-y$ 面内の原子の運動に関連していると考えられる. また, V3L においては, $(1\bar{1}1)$ 面 $[\bar{1}12]$ 方向へ転位が発生し, 境界付近まで進んだ後, 新たな転位が先の転位と同じ方向に進展するが, 途中で, $(\bar{1}11)$ 面 $[\bar{1}12]$ 方向に交差すべりが起こる. これは, 先の転位との相互作用により転位間に反発力が生じることによると考えられる.



(a) I1H ($K_{III} = 0.5\text{MPa}\sqrt{\text{m}}$)

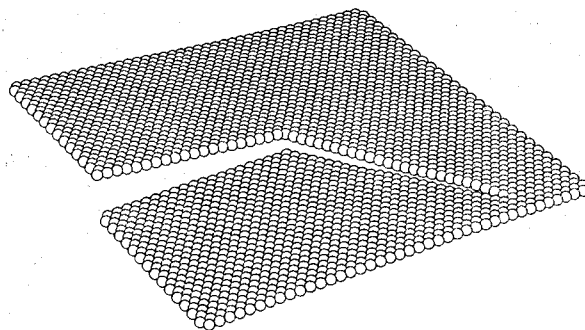
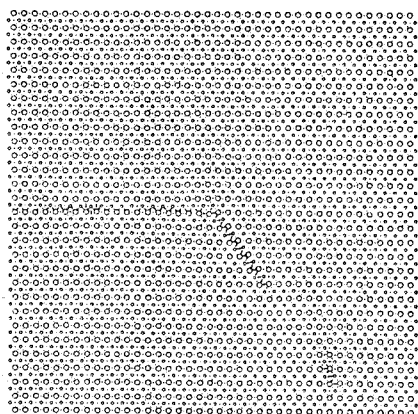


(b) I2H ($K_{III} = 0.5\text{MPa}\sqrt{\text{m}}$)

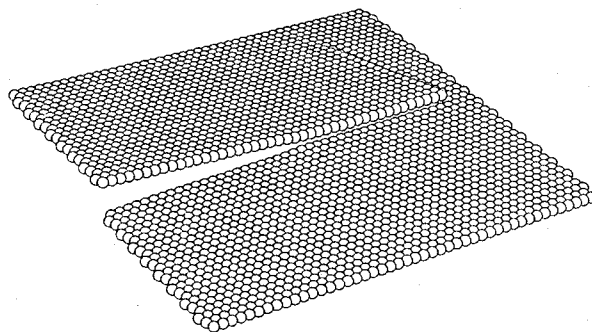
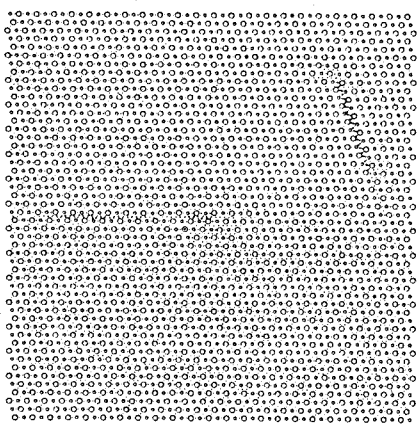


(c) I3H ($K_{III} = 0.3\text{MPa}\sqrt{\text{m}}$)

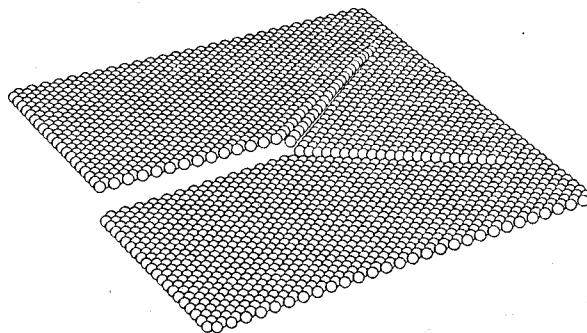
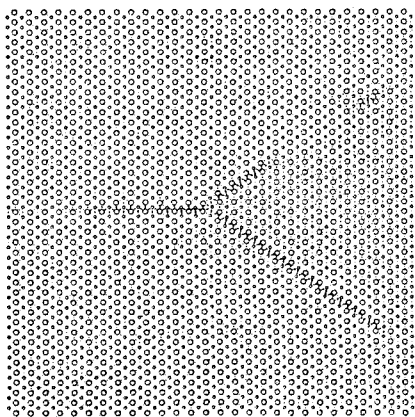
図 4.42 解析結果 (I1H~I3H)



(a) I1L ($K_{III} = 0.4\text{MPa}\sqrt{\text{m}}$)

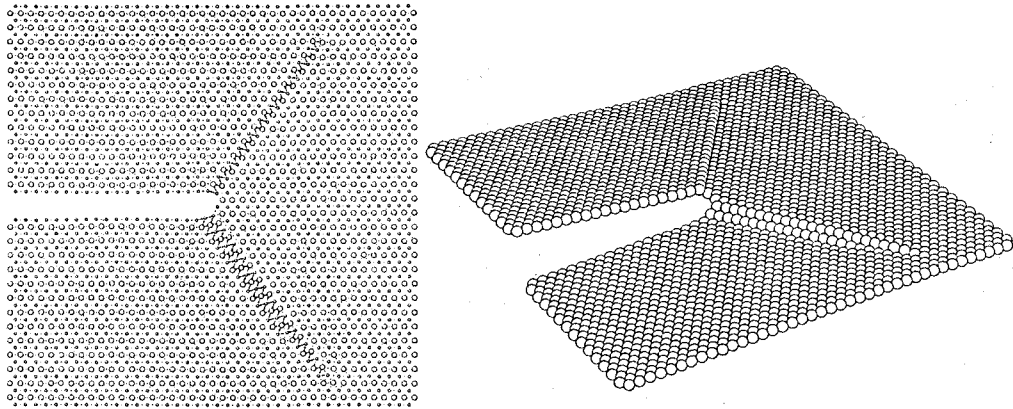


(b) I2L ($K_{III} = 0.4\text{MPa}\sqrt{\text{m}}$)

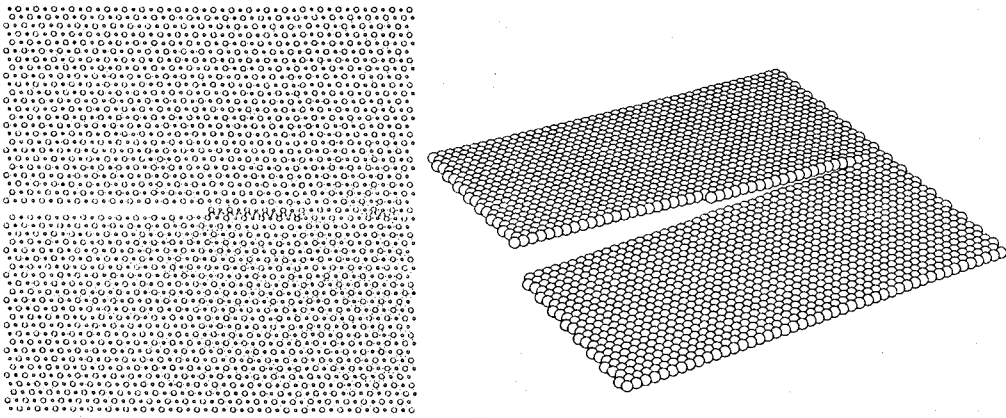


(c) I3L ($K_{III} = 0.3\text{MPa}\sqrt{\text{m}}$)

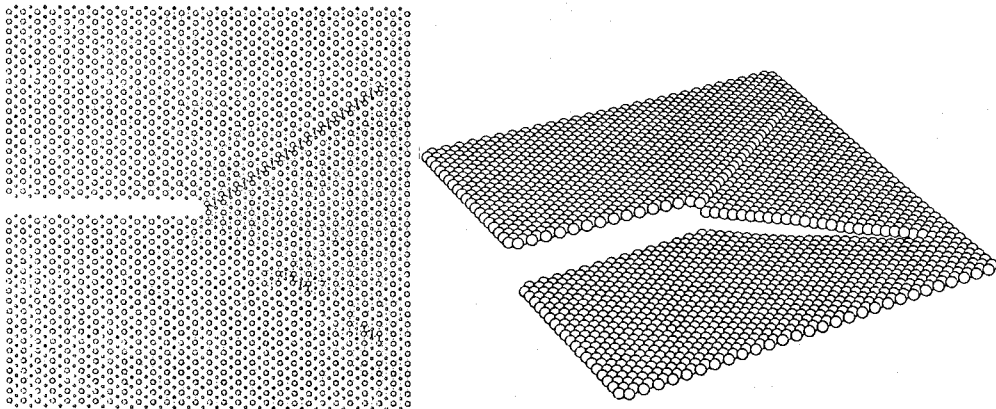
図4.43 解析結果 (I1L~I3L)



(a) V1L ($K_{III} = 0.4\text{MPa}\sqrt{\text{m}}$)



(b) V2L ($K_{III} = 0.35\text{MPa}\sqrt{\text{m}}$)



(c) V3L ($K_{III} = 0.35\text{MPa}\sqrt{\text{m}}$)

図 4.44 解析結果 (V1L~V3L)

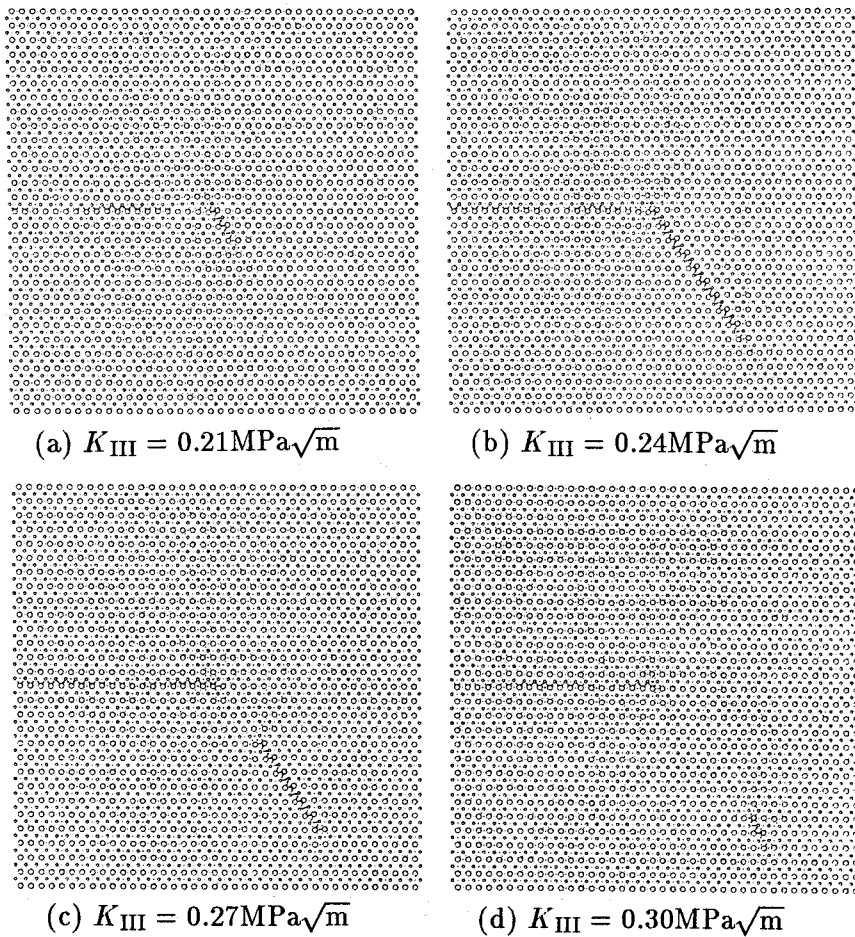


図 4.45 らせん転位の運動 (I1L)

図 4.45 は、転位の運動の典型的な例として、I1L の、 $0.21 \sim 0.30 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ における $0.03 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ ごとの相対変位図で、 $(\bar{1}11)$ 面を運動する転位が、境界にぶつかるまでを示している。各ケースにおいてこれとほぼ同様な結果が得られている。すなわち、らせん転位は最稠密面 $\{111\}$ を運動する。また、転位は、 $\langle 110 \rangle$ 方向に長さ $4a_0$ に広がり二つの Shockley の半転位に分かれ、拡張転位となる。これらの結果は、Pestman ら⁽²⁰⁾の結果と一致している。さらに、境界付近で交差すべりを生じる際に転位は収縮するなどの現象がみられる。初期き裂の位置、初期条件によって、I1L の場合のように、一方だけ転位が入るなどの非対称な変形が生じてしまうことが起こるが、き裂のモデル化(IとVの違い)、および、初期き裂の位置によるこれらの変形に本質的な差はない。

応力値の評価

図 4.46 は, I1H の, $K_{III} = 0.5 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ における相対変位図および, 相当応力分布を示したものである. 相当応力分布は, 原子 i の応力テンソルを計算し (2 章参照), その大きさに比例する半径で模式的に示したものである. このようにある瞬間の原子配置から計算される応力は, 原子の振動により大きく変動するため, 巨視的な応力にそのまま結び付けることはできないが, 相対変位図と比較すると, 変位差の大きい転位芯付近や, き裂先端付近での応力値が有限ではあるが大きくなっていることがわかる.

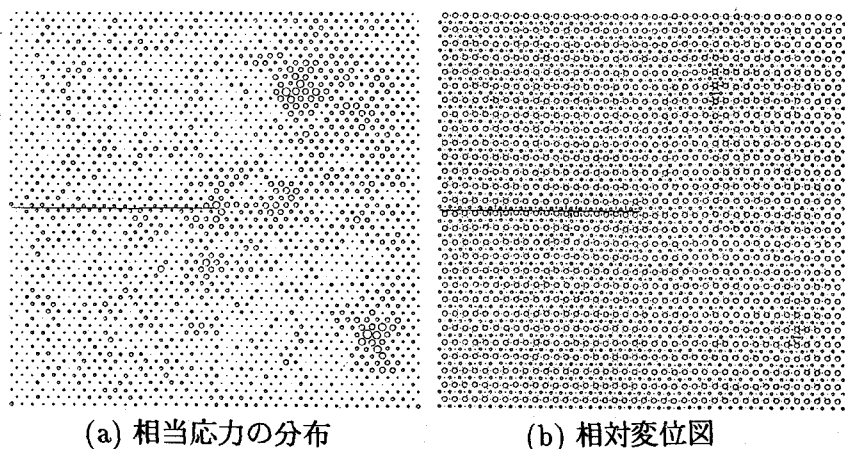


図 4.46 相当応力の分布図と相対変位図

系のエネルギーの変化

図 4.47 に, 系のポテンシャルエネルギー, 運動エネルギー, 仕事の変化を示す. ポテンシャルエネルギーは初期値との差を示している.

各原子に与えた初速度が平衡状態をあらわしていないため, 系の平衡状態への緩和が起こり, 運動エネルギーが変化し, 系の温度は 180K から約 100K, 40K から約 20K のように変化し, 初期の設定値より低くなる. ここで, 温度 T を, 運動エネルギー E_k から, $T = 2E_k / (3Nk)$ (ここで, k は, Boltzmann 定数) として求めている.

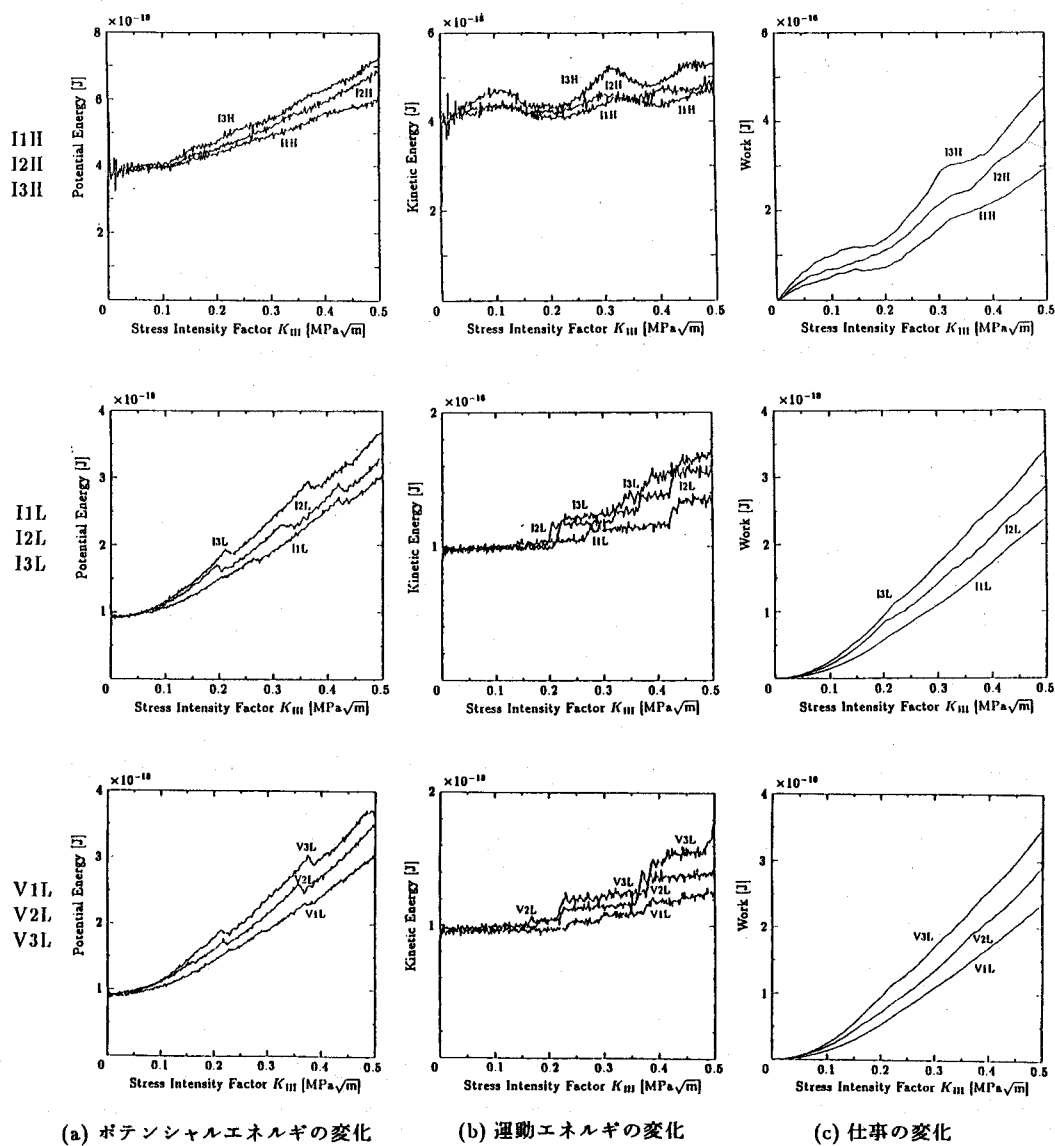


図 4-47 ポテンシャルエネルギー・運動エネルギー・仕事の変化

高温で変形速度が大きい、 $I1H \sim I3H$ については、変形が過渡的で動的な効果が大きいいため、ポテンシャルエネルギー、運動エネルギー、仕事の変化と転位の発生などの現象との対応をつけることはできない。

一方、低温で変形速度が小さい、 $I1L \sim I3L$ と、 $V1L \sim V3L$ については、変形が小さいとき、系に加えた仕事は二次関数の形で増加し、そのまま、ポテンシャルエネルギー(ひずみエネルギーに対応する)の増加に結び付くが、系の運動エネルギーの増加にはほとんど寄与しない。これは、準静的な弾性体の挙動を示していると考えられる。き裂先端から転位が発生すると、ポテンシャルエネルギーが解放され、その散逸により、系は不可逆的な挙動を示し、階段関数状に急激な温度上昇がみられる。その後、温度はほぼ一定になる。また、転位発生後ポテンシャルエネルギーは、減少し、転位発生のためのエネルギー障壁があることが認められる。転位の発生点において、仕事の変化を示す曲線の傾きが変化するが、ここでは K_{III} を変位で変化させていて、この傾きは、一般化した力に関連するから、降伏と弾塑性挙動の最も微視的な素過程の応答を示すと考えられる。

低温の場合、転位の発生する臨界応力拡大係数の値についてみると、 $V1L$ は、 $I1L$ に対し大きく、逆に、 $V2L$ では、 $I2L$ に比べて小さくなっている。これは、 $V1L$ では、先端の丸みが大きいため、先端応力値が $I1L$ に比べ小さくなっているため、また、 $V2L$ では、 $I2L$ に比べて、き裂先端表面に可能なすべり面が多くあり、 $x-y$ 面内の変形拘束が小さい効果が勝ったためと考えられる。

結晶塑性論による解との比較

Rice と Nikolic⁽¹⁸⁾ は、単結晶体の降伏条件として、すべり系の臨界せん断応力 τ_0 がそのすべり系の降伏を限界付け、すべり系の分解せん断応力とせん断ひずみとの関係が、弾・完全塑性によって特徴付けられるとするモデルで、モード III き裂先端変形を論じている。そこでは、 τ_0 と、横弾性係数 μ が、材料特性値として既知で、 K_{III} の負荷が規定されるとき、き裂先端の漸近場では、 x 軸から反時計回りにとった θ のところで、先端から放射状に線状の塑性域が延び、この塑性域で不連続な、周方向には一定の応力状態の扇形状の変形場が現われることを示し、その塑性域の長さ R と、き裂先端の z 方向の不連続変位 Δw_z を求めている。最

近, Mohan ら⁽¹⁰⁾は, 同様の問題に対して, 結晶の回転を考慮した有限変形解析を行ない, RN 解では線状に現われる塑性域が拡散し, 応力状態が一定の領域の境界が不明瞭になるといった違いを指摘しているが, ここでは, 変形は微小であるとみなしているため, Ori. 1, Ori. 2 に対して, MD 計算の結果と FCC 結晶体で 12 の $\{111\}$ 面 $\langle 110 \rangle$ 方向のすべり系を考慮した RN 解との比較を行なう. なお, 比較する MD 計算結果としては, I1H, I2H の結果を用いる. 高温で変形速度が大きい I1H, I2H の場合は, 先の考察から, 厳密な定量的な評価はできないが, 変形が過渡的である分, 解析領域の境界の影響を受けにくく, 発生した転位が先端の変形場に及ぼす効果が小さいと考えられる.

RN 解は, Ori. 1 に対して,

$$R = 0.292(K_{\text{III}}^2/\tau_0^2) \quad (\theta = \pm 54.74^\circ) \dots\dots\dots (4.8)$$

$$\Delta w_z = 0.346(K_{\text{III}}^2/\mu\tau_0) \dots\dots\dots (4.9)$$

Ori. 2 に対して,

$$\left. \begin{aligned} R_H &= 0.385(K_{\text{III}}^2/\tau_0^2) & (\theta = 0^\circ) \\ R_1 &= 0.202(K_{\text{III}}^2/\tau_0^2) & (\theta = 109.46^\circ) \\ R_2 &= 0.076(K_{\text{III}}^2/\tau_0^2) & (\theta = -70.54^\circ) \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (4.10)$$

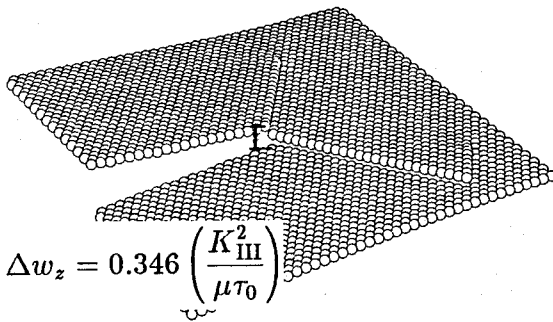
$$\Delta w_z = 0.584(K_{\text{III}}^2/\mu\tau_0) \dots\dots\dots (4.11)$$

で与えられる.

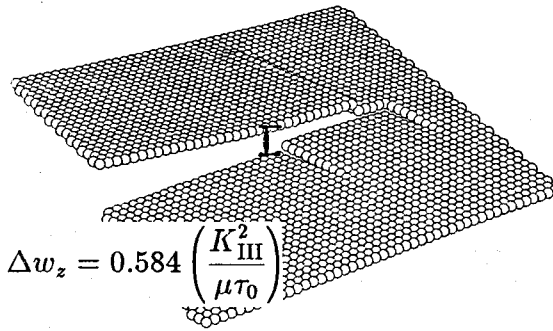
原子モデルにおいて, 微視的構造の特性を反映したマクロ量 τ_0 の意味が明確ではなく, 材料定数として定義できない. ここでは, MD 解析結果より得られた, Δw_z から, 式(4.9), (4.11)を用いて τ_0 を計算し, さらに, 式(4.8), (4.10)に代入することにより, 塑性域の長さ R を求め, この長さを RN 解による値としている. 横弾性係数 μ には Voigt 平均を用いることとする. 他方, R としては, らせん転位の運動の軌跡とする. $K_{\text{III}} = 0.5\text{MPa}\sqrt{\text{m}}$ における計算結果を表 4.9 に示し, 得られた塑性域を原子配置図に重ねて黒く塗りつぶした領域で示し, らせん転位の軌跡と比較する (図 4.48).

表 4-9 諸量および RN 解の計算値

配向		Ori. 1	Ori. 2
MD モデル		I1H	I2H
μ	GPa	54.6	54.6
Δw_z	m	6.5×10^{-10}	8.5×10^{-10}
τ_0	GPa	2.4	3.1
R	m	$R = 1.3 \times 10^{-8}$	$R_H = 1.0 \times 10^{-8}$ $R_1 = 5.3 \times 10^{-9}$ $R_2 = 2.0 \times 10^{-9}$



Displacement w_z (at $0.5 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$)
(a) Ori. 1 (I1H)



Displacement w_z (at $0.5 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$)
(b) Ori. 2 (I2H)

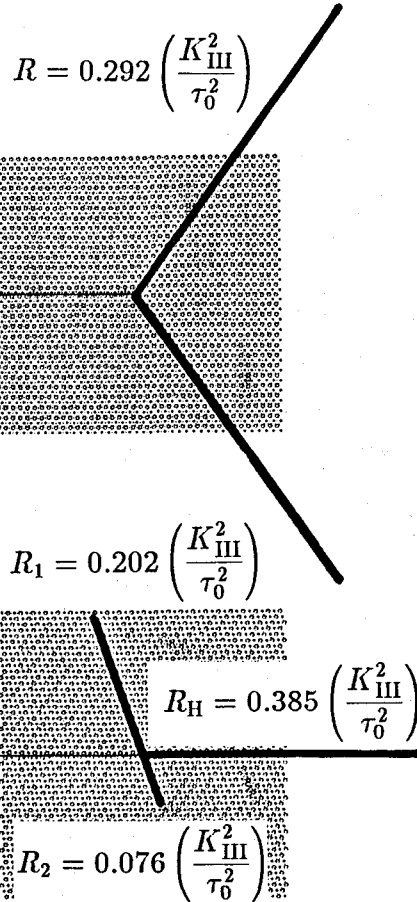


図 4-48 MD 計算の結果と RN 解との比較

RN 解の線状の塑性域は最稠密面に広がるが、その方向は、らせん転位の運動の軌跡と一致している。塑性域の大きさとらせん転位の運動の距離は必ずしも対応しないが、これは転位同士の弾性相互作用が連続結晶体理論では十分考慮されていないこと、解析領域の境界条件によって生じる鏡像力の影響があること、さらに、転位の発生が不連続に起こること、などの諸原因が考えられる。しかしながら、オーダー的には対応しており、面外せん断荷重下のき裂においてもモード I 型のき裂と同様、き裂先端が転位源となって生じる変形については、原子モデルは結晶モデルとよい一致を示すといえる。

4.4.3 応力値の線形弾性解との比較

分子動力学解析による結果と線形弾性解との対応を調べるために、I1H と同じ原子配置で、すべての原子に $K_{III} = 0.1 \text{MPa}\sqrt{\text{m}}$ に対応する変位を与えた後、境界原子を拘束し、MD 法により 10ps まで緩和計算を行なう。図 4.49 に、 $\sigma_{xz} - \sigma_{yz}$ を 1~10ps まで時間平均をとってベクトル表示した応力ベクトル図を示す。先端付近の応力が非常に大きくなっていることがわかる。次に、 y 軸上での応力 σ_{xz} 、 σ_{yz} の分布を図 4.50(a), (b) に示す。この平均応力は実線で示した線形弾性解と比較すると、き裂先端の数原子を除いてよく一致していることがわかる。このように分子動力学解析により得られるき裂先端場の応力値は、各瞬間で大きく変動するが、その時間平均をとると、線形弾性解の値とほぼ一致することがわかる。

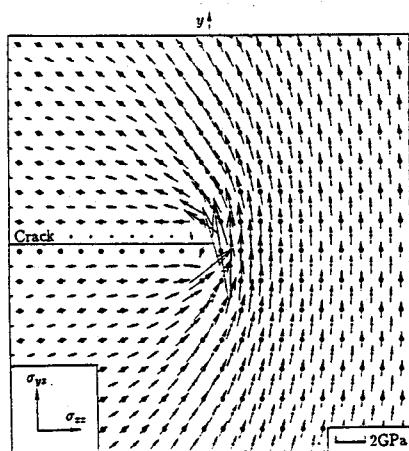
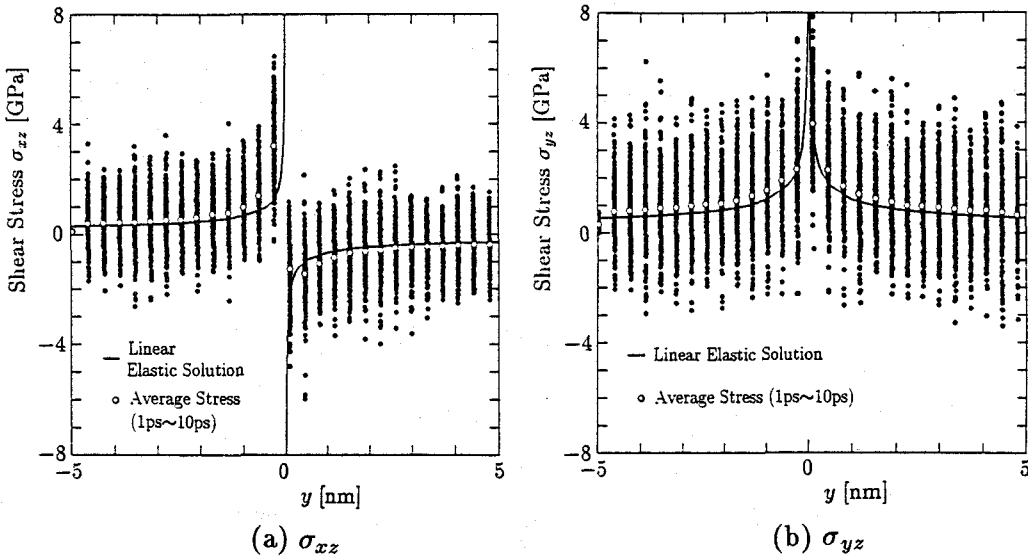


図 4.49 応力ベクトル図

図 4.50 y 軸上での応力 σ_{xz} , σ_{yz} の分布

4.5 き裂核発生機構のシミュレーション

これまで述べてきたき裂先端近傍の微視的挙動の原子レベルでのシミュレーションによる破壊の実体論的考察を行なう際のモデルでは、初期開口変位を与えたモデル、き裂面の相互作用無視したモデル、原子空孔の層を設けたモデルのように、材料内部の初期き裂を仮定してきた。

けれども、理想的な破壊強度に対して実際の材料の強度が極端に小さい理由を説明するために導入されたへき開破壊可能な潜在き裂、いわゆる Griffith Crack が最初から存在すると仮定することは、鉄などの多くの金属材料に対しては不合理で、何らかのき裂発生機構がはたらく必要がある。

本節では、分子動力学シミュレーションを用いて、転位どうしの相互作用によるき裂核の発生機構の力学的検討を試みる。

4.5.1 き裂核発生機構のモデル

き裂発生機構のモデルとしては、転位が自由表面へすべりることによる幾何学的結果(入り込み)、異符号転位の合体による空孔形成、転位相互作用による弾性ひずみエネルギー密度の局所の上昇、表面き裂の発生、転位の阻止を考える理論などさまざまなモデルが提案されている。例えば、Cottrell⁽²¹⁾は、 $\{101\}$ 面を移動するバーガスベクトル $(a/2) < \bar{1}\bar{1}1 >$ の2個の転位が、

$$\frac{a}{2}[\bar{1}\bar{1}1]_{(101)} + \frac{a}{2}[111]_{(10\bar{1})} \rightarrow a[001]_{(\bar{1}00)} \quad \dots\dots\dots (4.12)$$

のように反応し、き裂発生の第一段階となる不動転位を形成するモデル(図4.51(a))を、また、Stroh⁽²²⁾は、転位が障害で堆積することにより応力集中が起こり、局所的に大きな引張応力が生じ、き裂が発生するモデル(図4.51(b))を提案している。

ここでは、転位の阻止を考える理論のなかで、BCC結晶体の $\{001\}$ 面でのへき開割れの実験結果の説明に用いられる、双晶から発生する転位の反応によってき裂核が形成されるモデルを考えることにする⁽²³⁾。すなわち、図4.52のように、次の転位の反応により (001) 面のき裂核が形成されると考える。

$$\frac{a}{2}[\bar{1}\bar{1}1]_{(\bar{1}\bar{1}2)} + \frac{a}{2}[111]_{(\bar{1}\bar{1}2)} \rightarrow a[001]_{(\bar{1}\bar{1}0)} \quad \dots\dots\dots (4.13)$$

反応後の転位のバーガスベクトルの平方 a^2 は、反応前の二つの転位の平方の和 $3/2a^2$ に比べて小さくエネルギー的に安定であるからこの反応は可能である。

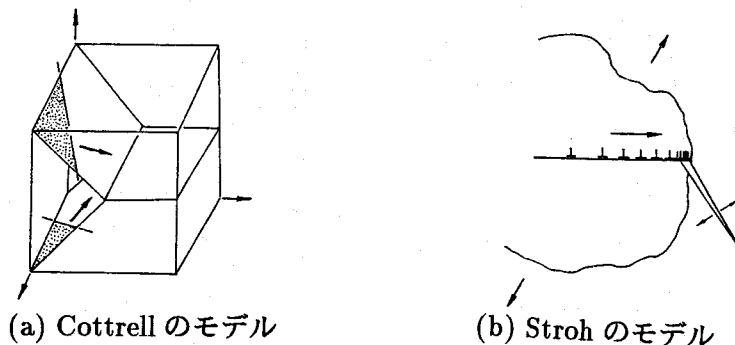


図4.51 き裂発生機構のモデル

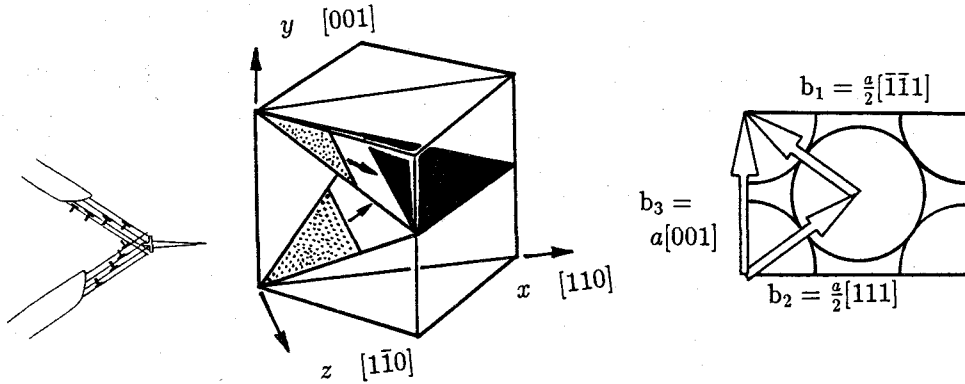


図 4.52 き裂発生機構の解析モデル

Finnis-Sinclair ポテンシャル⁽²⁴⁾によって特徴づけられる BCC 結晶 (α -鉄) を考え、 x, y, z 軸を $[110], [001], [1\bar{1}0]$ 方向とし、 z 方向に二つの原子層を周期的に配置した x, y 面内のみ運動可能な 4560 個の原子からなる系を考える。

等方弾性体中の刃状転位のまわりの点 (x, y) における変位場 $u(x, y), v(x, y)$ は、

$$\left. \begin{aligned} u &= \frac{b}{2\pi} \left[\tan^{-1} \frac{y}{x} + \frac{1}{2(1-\nu)} \frac{xy}{x^2 + y^2} \right] \\ v &= \frac{-b}{2\pi} \left[\frac{1-2\nu}{4(1-\nu)} \log(x^2 + y^2) + \frac{1}{2(1-\nu)} \frac{x^2}{x^2 + y^2} \right] \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (4.14)$$

で与えられる⁽²⁵⁾。ここで、 ν は、Poisson 比である。本研究では、 ν の値に、Voigt の平均、

$$\nu = \frac{5}{2} \frac{C_{11} + 2C_{12}}{2C_{11} + 3C_{12} + C_{44}} - 1 \dots\dots\dots (4.15)$$

を用い、転位 2 個 (Case 1) と 6 個 (Case 2) の場合について、上に示した個々の転位の変位場の重ね合わせによって初期原子配置を決定する (図 4.53)。

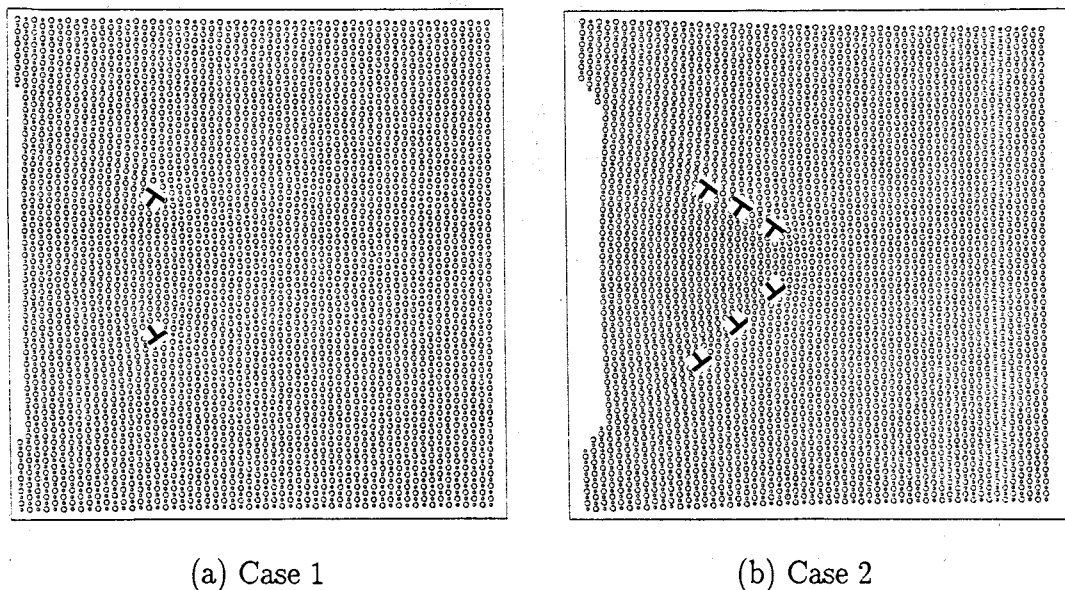


図 4.53 転位を導入した原子配置

まず、初期温度、約 100 K で完全結晶の境界を拘束し緩和した後、さらに、1.6 ps 緩和した後、外力を与え、分子動力学解析を行なう。ここで時間ステップは 2 fs とする。

境界条件として、平面ひずみ条件 ($\varepsilon_z = 0$) のもとで、 ε_y を与え、 $x-y$ 面で、単軸引張状態 ($\sigma_x = 0$) になるように外力を与える。 $\varepsilon_x, \sigma_y, \sigma_z$ を ε_y で表わすと、

$$\left. \begin{aligned} \varepsilon_x &= -\frac{D_{12}}{D_{11}}\varepsilon_y \\ \sigma_y &= \left(D_{11} - \frac{D_{12}^2}{D_{11}}\right)\varepsilon_y \\ \sigma_z &= \left(D_{23} - \frac{D_{12}D_{13}}{D_{11}}\right)\varepsilon_y \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (4.16)$$

ここで、 D_{ij} は、弾性マトリックスの ij 成分である。解析では $\varepsilon_y = \dot{\varepsilon}_y t$, $\dot{\varepsilon}_y = 10^9 1/s$ とし、 $\varepsilon_x, \varepsilon_y$ から算出した変位を境界原子に与えていく (図 4.54)。

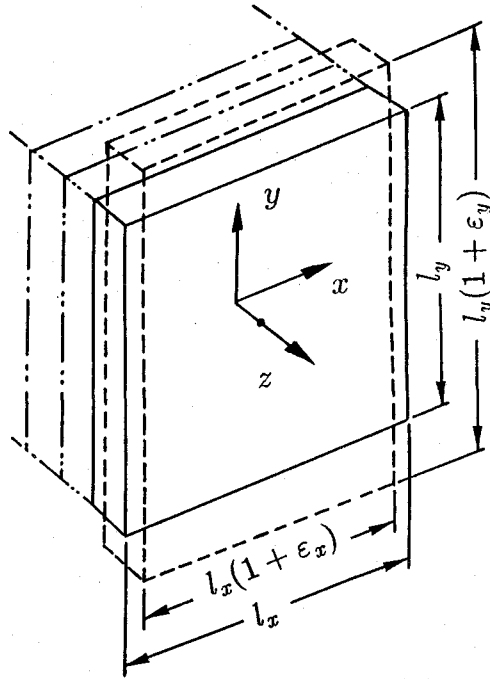


図 4.54 解析モデルの説明

4.5.2 解析結果と考察

転位の反応後の原子配置を図 4.55, 4.56 に, 原子配置と y 方向応力分布の変化を図 4.57, 4.58 に示す.

Case 1 では, 2 個の転位が式 (4.13) で表わされる反応によって転位は合体し, この転位はしばらく安定な状態で存在する. 外力を大きくする間に転位は $\pm[001]$ 方向に揺らいでいる. さらに外力が大きくなると双晶変形が生じて再び 2 個の転位に分解し (図 4.57), き裂の発生には至らない (4.2 節のモード I 型き裂の解析から, この配向では, 同様な双晶を生じながらき裂が進展することがわかっている).

Case 2 では, 最初, 4 個の転位が 2 個の転位に合体して対称な構造を作る. さらに外力の増加に伴い残りの 2 個が反応する. このとき先に合体していた転位が双晶変形を伴って再び分解する. 解析領域が有限で, 境界を固定しているので双晶は境界で折れ曲がる. Case 2 の場合もき裂の発生までには至らないが, 原子空孔状の核が形成されていることがわかる.

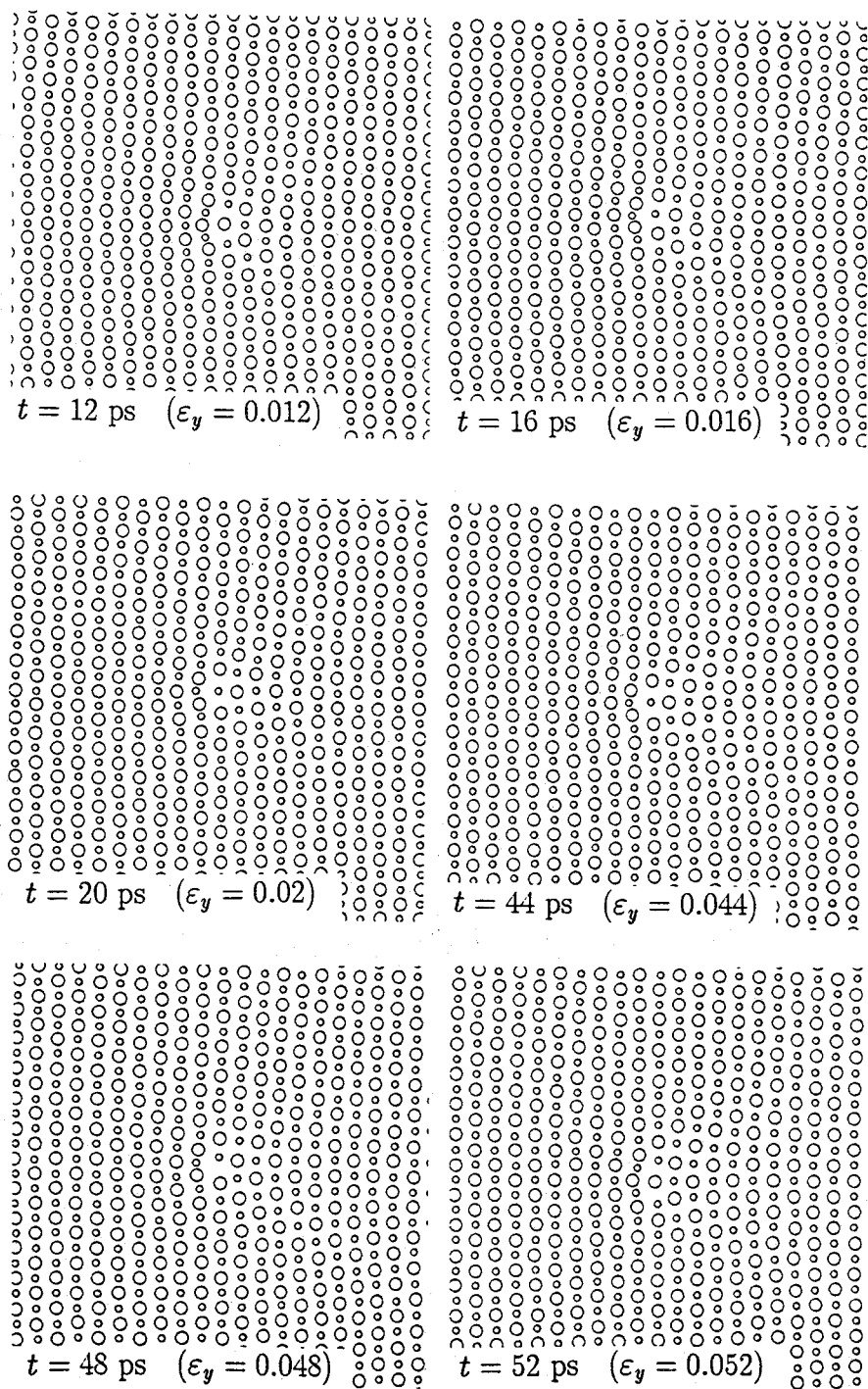


図 4-55 原子配置 (領域中央部 Case 1)

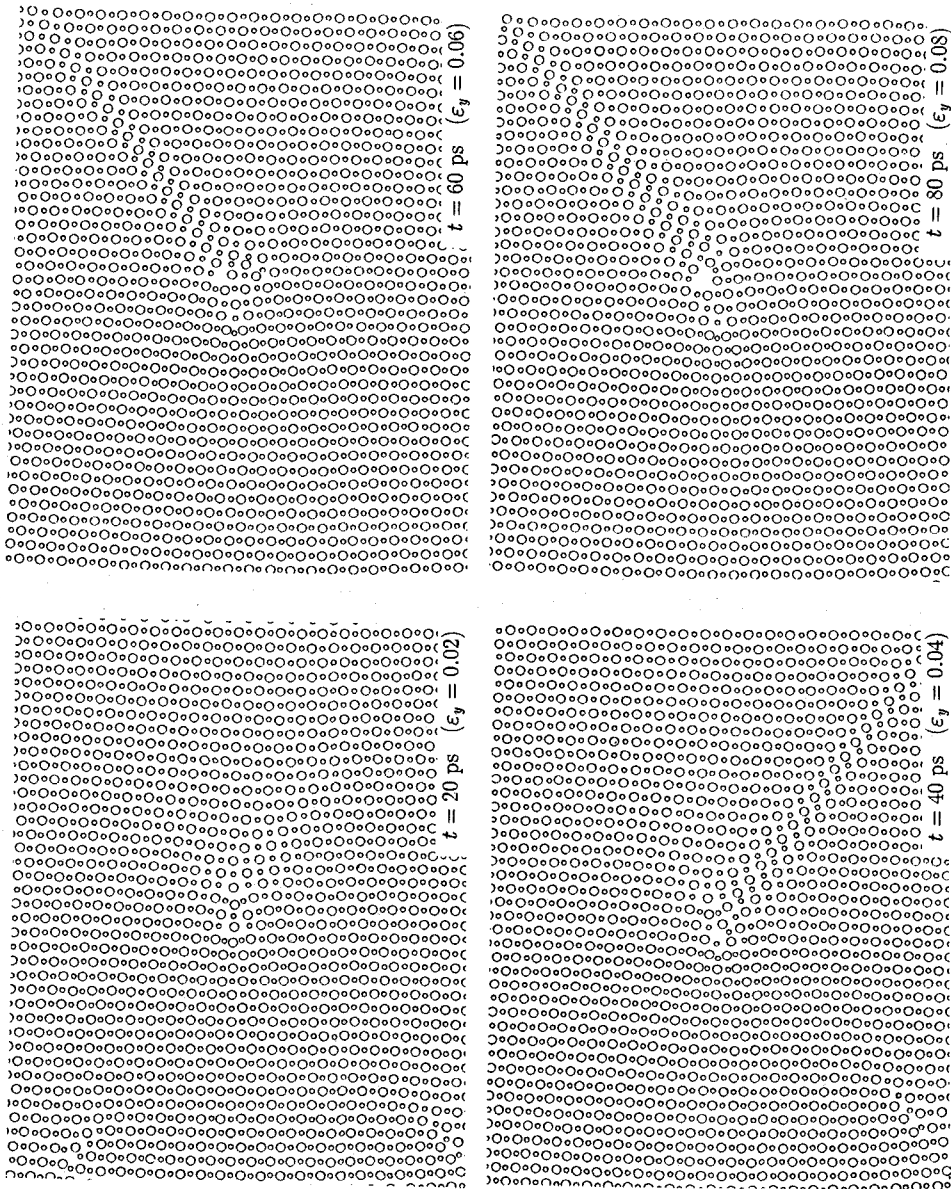


図 4-56 原子配置 (領域中央部 Case 2)

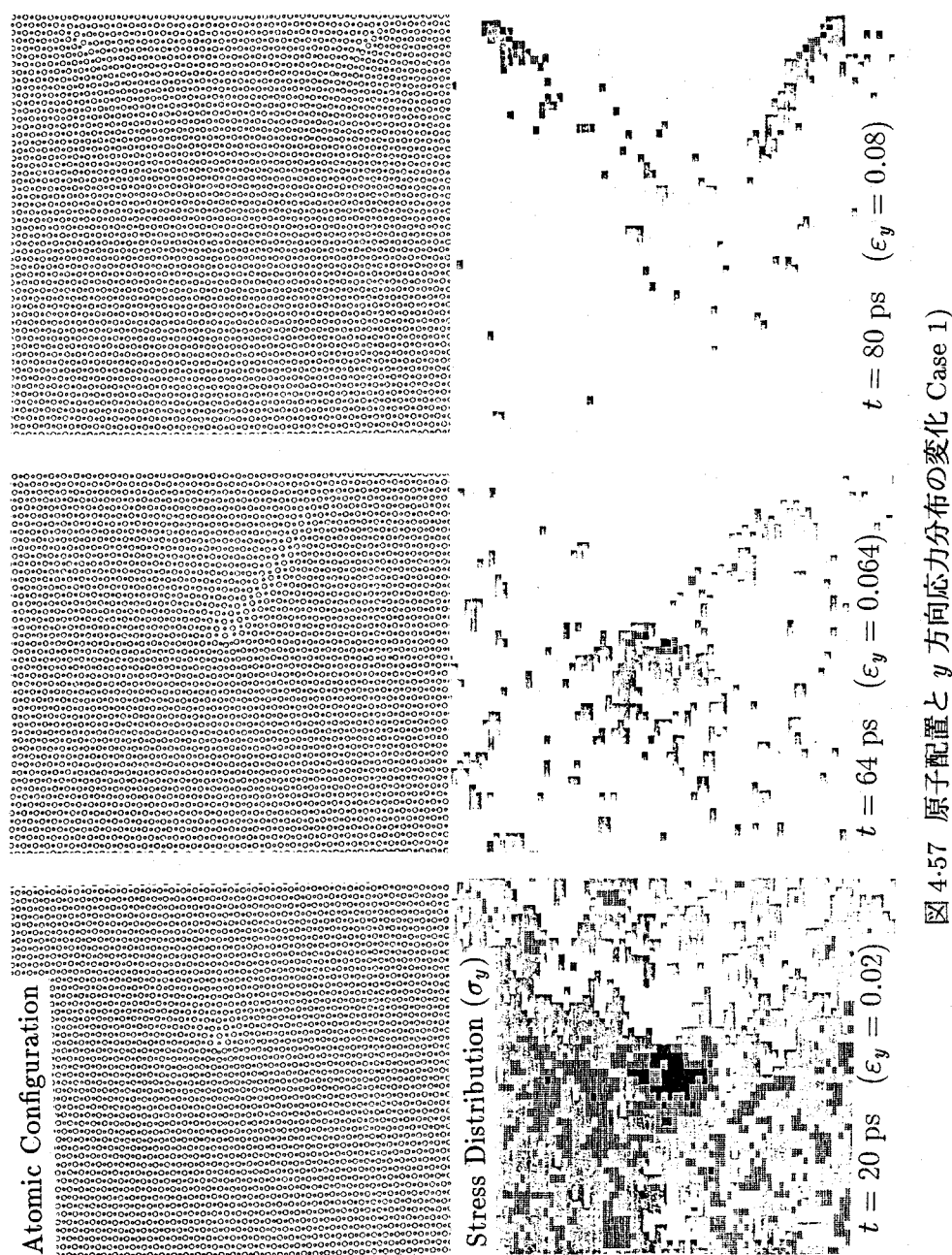


図 4-57 原子配置と y 方向応力分布の変化 (Case 1)

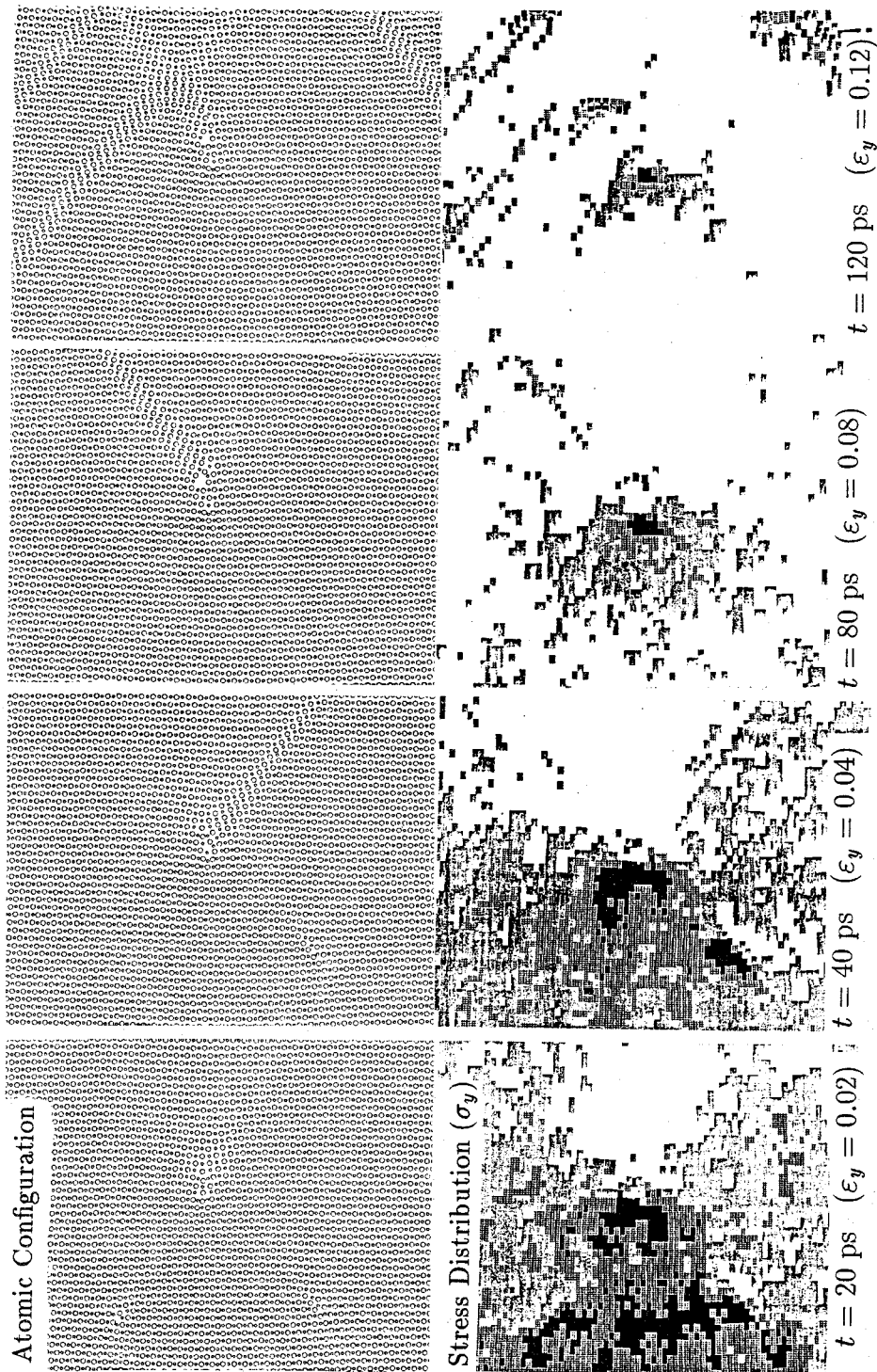
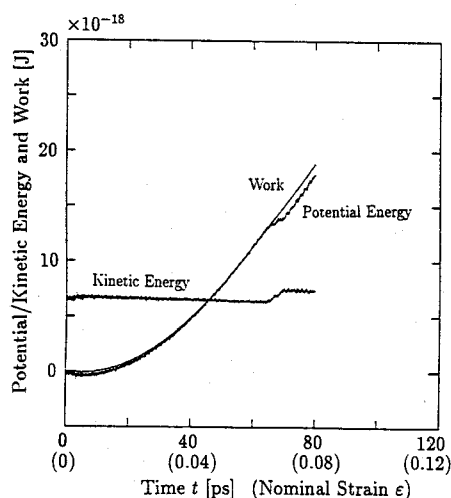
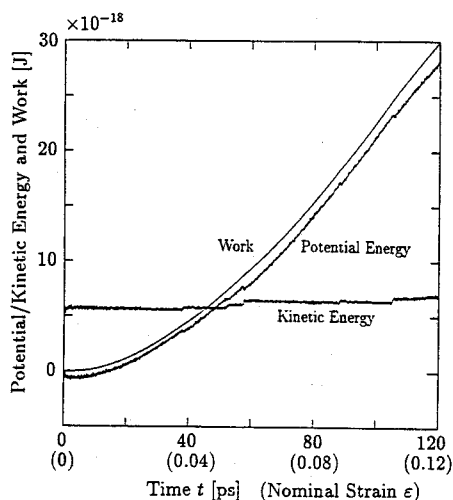


図 4-58 原子配置と y 方向応力分布の変化 (Case 2)

応力分布を見ると、Case 1, 2とも転位のすべり面を境に強い圧縮応力と引張応力が生じていて、き裂核先端部に大きな引張の応力集中を生じているのがわかる。引張応力を増加させてゆくと転位芯近傍の圧縮応力が引張の外力とつりあって相殺されたあたりで合体している転位の再分解が見られる。



(a) Case 1



(b) Case 2

図 4-59 ポテンシャル/運動エネルギーと仕事の変化

図 4-59 は、ポテンシャル ($t = 0$ の値を基準にしている)/運動エネルギーと仕事の変化の関係を表わしている。転位が合体することによってポテンシャルエネルギーが減少し、運動エネルギーが増加しているのがわかる。仕事は、通常は、ポテンシャルエネルギーを増加させるが、双晶変形が起こり転位が分解する時は運動エネルギーがステップ状に増加し、ポテンシャルエネルギーが減少している。

このように、反応に関与する転位の数を多くすることによってき裂核の形成の第一段階と考えられる原子空孔状の欠陥を生じることがわかった。

4.6 結言

き裂先端の微視的変形の分子動力学解析を行ない以下の結果を得た。

モード I き裂の解析では、

1. α 鉄結晶中のき裂の解析では、結晶配向に依存して転位を発生して鈍化する場合と、へき開的に、き裂が進展する場合が見られる。
2. FS ポテンシャルと Johnson ポテンシャルで見られる変形には本質的な差は見られない。
3. 銅結晶中のき裂の解析では、変形は基本的に最稠密面のすべりによって生じる。

モード II き裂の解析では、

1. 原子モデルによる MD 計算結果における転位の移動による変形は、すべり系を限定した結晶塑性理論に基づくモデルによる有限要素解析におけるすべり変形とよく対応する。
2. 境界条件の違いによって、き裂先端の原子配置の変化に差は見られないが、転位発生の臨界応力拡大係数の値には差が見られ、荷重条件の場合一般に、その値が小さい。
3. 転位発生時には、ポテンシャルエネルギーが解放され、き裂先端部の温度が上昇する。
4. き裂先端および転位芯から少し離れた位置での応力分布は、線形弾性解とよく一致する。
5. MD 計算の結果、転位の発生する臨界応力拡大係数は、Rice の理論によく一致する。また、き裂先端近傍の臨界分解せん断応力の値が理想強度に達すると転位が発生するとする評価方法によってもある程度説明ができる。

モード III き裂の解析では、

1. き裂先端から発生するらせん転位は、境界や、他の転位の影響を受けて交差すべりを生じ、すべり面を変えるが、必ず最稠密な $\{111\}$ 面を運動する。また、長さ約 $4a_0$ に広がり二つの Shockley の半転位に分かれる傾向にある。

2. 転位の発生によって、急激にポテンシャルエネルギーが解放され、系の温度が上昇する。これは、低温で変形速度が小さい場合に顕著である。
3. 原子モデルから計算される応力は、き裂先端付近や転位芯近傍の数原子間距離の領域を除いて、線形弾性解とよく一致する。
4. らせん転位の運動の軌跡は、Rice と Nikolic らの弾・完全塑性漸近解による線状の塑性域と対応づけられる。き裂先端が転位源となって生じる変形については、原子モデルによる結果は結晶塑性理論と対応づけられると考えられる。

転位の反応モデルによるき裂発生モデルの解析では、

1. 転位の反応の際のポテンシャルエネルギー(ひずみエネルギー)の減少・運動エネルギーの増加が確かめられる。
2. 2個の転位の場合、合体した転位は比較的安定に存在するが、き裂核とはならず、転位芯付近の圧縮応力が相殺される程度の外力が加えられたときに再び2個の転位に分離する。
3. 6個の転位による解析では、き裂核の形成の第一段階と考えられる原子空孔状の欠陥を生じる。しかし、き裂進展までには至らず、さらに多くの転位を考える必要がある。
4. 境界拘束のモデル化工夫したり、系の原子数を増やすなどの検討が必要である。
5. き裂発生メカニズムにおいて、転位同士の相互作用だけでなく、粒界やその他の障害物による転位の阻止を考えることも重要と考えられる。

第4章の文献

- (1) Gehlen, P.C., Hahn, G.T., and Kanninen, M.F., Crack Extension by Bond Rupture in a Model of BCC Iron, *Scripta Met.*, **6**(1972), 1087-1090.
- (2) Gehlen, P.C., Crack Extension in a Model of Alpha-Iron, *Scripta Met.*, **7**(1973), 1115-1118.
- (3) deCelis, B., Argon, A.S., and Yip, S., Molecular Dynamics Simulation of Crack Tip Processes in Alpha-Iron and Copper, *J. Appl. Phys.*, **54**-9(1983), 4864-4878.
- (4) Mullins, M., Computer Simulation of Fracture using Long Range Pair Potentials, *Acta Met.*, **32**-3(1984), 381-388.

- (5) Mullins, M., Atomic Simulation of Cracks under Mixed Mode Loading, *Int.J.Fract.*, **24**(1984), 189-196.
- (6) Kohlhoff, S. and Schmauder, S., A new method for coupled elastic-atomistic modelling. In: *Atomistic simulation of Materials* (Vitek, V. and Srolovitz, D.J. ed.) (1989), 411-418, Plenum Press, New York.
- (7) Rice, J.R., Hawk, D.E., and Asaro, R.J., Crack Tip Fields in Ductile Crystals, *Int.J.Fract.*, **42**(1990), 301-321.
- (8) Ackland, G.J., Tichy, G., Vitek, V., and Finnis, M.W., Simple N-Body Potentials for the Noble Metals and Nickel, *Philos.Mag., A*, **56-6**(1987), 735-756.
- (9) Peirce, D., Asaro, R.J., and Needleman, A., Material Rate Dependence and Localized Deformation in Crystalline Solids, *Acta Met.*, **31-12**(1983), 1951-1976.
- (10) Mohan, R., Ortiz, M., and Shih, C.F., An Analysis of Cracks in Ductile Single Crystals—I. Anti-Plane Shear, *J.Mech.Phys.Solids*, **40-2**(1992), 291-313.
- (11) 大坪英臣・久保田晃弘, 相関問題, (1991), 47, 培風館.
- (12) Asaro, R.J., Micromechanics of Crystals and Polycrystals, *Advances in Applied Mechanics*, Vol.23, (W.J.Hutchinson and T.Y.Wu eds.), (1983), 1-115, Academic Press.
- (13) Sih, G.C., Paris, P.C., and Irwin, G.R., On Cracks in Rectilinealy Anisotropic Bodies, *Int.J.Fract.Mech.*, **1** (1965), 189.
- (14) 佐々木直哉・岩崎富生・千葉矩正・阿部康夫・石川雄一, 温度を考慮した鉄単結晶変形の分子動力学シミュレーション, 日本機械学会論文集, **57-541**, A 編, (1991), 1992.
- (15) 稲村豊四郎・鈴木裕幸・武澤伸浩, 銅とダイヤモンドの原子配列モデルによる計算機内での切削実験, 精密工学会誌, **56-8**(1990), 1480-1486.
- (16) Rice, J.R., Dislocation Nucleation from a Crack Tip: An Analysis Based on the Peierls Concept, *J.Mech.Phys.Solids*, **40-2**(1992), 239-271.
- (17) Ohr, S.M., Dislocation-Crack Interaction, *J.Phys.Chem.Solids*, **48-11**(1987), 1007-1014.
- (18) Rice, J.R. and Nikolic, R., Anti-Plane Shear Cracks in Ideally Plastic Crystals, *J.Mech.Phys.Solids*, **33-6**(1985), 595-622.
- (19) Vitek, V., Perrin, R.C., and Bowen, D.K., The Core Structure of $\frac{1}{2}\langle 111 \rangle$ Screw Dislocation in B.C.C. Crystals, *Philos.Mag.*, **21** (1970), 1049-1073.
- (20) Pestman, B.J., DeHosson, J.Th.M., and Vitek, V., Interaction between Lattice Dislocations and Grain Boundaries in F.c.c and Ordered Compounds: A Computer Simulation, *Philos.Mag., A*, **64-4**(1991), 951-969.

- (21) Cottrell, A.H., Theory of Brittle Fracture in Steel and Similar Metals, *Trans.Met.Soc.AIME*, **212**(1958), 192-210.
- (22) Stroh, A.N., The Formation of Cracks as a Result of Plastic Flow, *Proc.R.Soc.,Ser.A*, **223**(1954), 404-414.
- (23) 寺崎富久長・高野則之, 金属材料の破壊と靱性, *材料システム*, **10**(1991), 43-51.
- (24) Finnis, M.W. and Sinclair, J.E., A Simple Empirical N -Body Potential for Transition Metals, *Philos.Mag.,A*, **50**-1(1984), 45-55. (Erratum, *ibid.***53**-1 (1986), 161).
- (25) 鈴木秀次, 転位論入門, (1989), 63, アグネ.

第5章 総括

本論文では、分子動力学法を用いて、最も微細な物質組織としての原子集合体の動的過程の直接シミュレーションにより、金属結晶体中に生じる破壊に対して検討を加えた。

第1章では、研究の目的と意義、および分子動力学法の歴史的背景、き裂問題への応用の有効性と問題点について述べた。

第2章では、分子動力学法の基本的事項について、シミュレーションにおけるその位置づけ、具体的な解析手法を示し、あわせて、第4章で用いる原子間ポテンシャルについて静力学的な特性について検討した。

第3章では、き裂先端場の連続体モデルによる取り扱いについて述べた。まず、第4章の分子動力学解析の準備としてき裂先端近傍の線形弾性場に対する解析解と特異要素を用いた有限要素解析結果を示した。続いて、連続体モデルに結晶塑性論を組み込むための定式化を行ないモードI型き裂の解析を行なった。すべり系を等方的に仮定した結晶塑性モデルによる解析結果が現象論的構成式である J_2 流れ理論の解析結果とよく対応することを示した。

第4章では、モードI, II, IIIのき裂先端場の分子動力学解析を行ない、結果を結晶塑性論に基づく解析と比較した。き裂先端場の解析を通じて転位の発生と移動、双晶変形のような結晶構造の変態など非弾性変形の最も基本的で微視的な機構を確認し、分子動力学解析における転位の発生・移動のようなき裂先端が転位源となて生じる原子構造の変化は、結晶塑性論におけるすべり変形と対応することを示した。さらに、原子集合体モデルにおいて得られる微視的応力と線形弾性解の比較を通じて原子集合体モデルと連続体モデルの対応付けを行なった。また、転位の合体によるき裂核発生機構のシミュレーション結果を示した。

連続体力学では、物質を構成する原子間の相互作用を平均化してその作用を陽に含まないまでに粗視化することによって、細分化した部分の力学的性質が形状や大きさに依存しない無限に分割可能な物質点より成り立っている連続体モデルを基本

としている。

しかし、実際の材料は結晶方位・結晶粒および粒界・表面・界面・構造欠陥(原子空孔・転位など)、あるいは巨視的な欠陥(空洞・き裂など)などの微視構造を有していて、材料全体の巨視的な力学的挙動が、特定の微視構造によって支配される、いわゆる構造敏感性を示すのが普通である。

構造敏感性の強い物質特性の理解には微視構造のオーダと、その微視構造に支配される力学現象のスケールに応じた階層的モデルの導入が不可欠であると考えられる。

分子動力学法においては、力学現象のスケールに応じた階層的モデルの時間的空間的に最も微細な組織のモデルを用いて、高次の現象論的モデルの導入を極力排し、基本原理に基づいた計算を行なうので、力学的、熱的あるいは化学的物質特性の統一的な理解が可能となる。また、計算機実験により、これまで実験できないような環境下での材料特性など新しい知見が得られる可能性があり、さらには、材料設計の基礎的研究の手段となりうる可能性があり、今後その役割に期待するところが大い。

このように、分子動力学解析を行なうことにより得られる各々の原子位置と運動量の時系列データは、材料評価に対するさまざまな情報を秘めている。しかし、一方で、こうした情報は、連続体力学に基づく適切なモデル化と照らし合わせることによってはじめて有効な形で取り出すことができる。すなわち、原子モデルと連続体モデルでは、物質の微視的構造の詳細な描像を獲得するために相補的な役割を果たすと考えられる。今後、本論文で行なったような解析が広く実施されるとともに、より詳細な検討が進むことが期待される。

付録 (I) 単結晶体の単軸引張のシミュレーション

ここでは、結晶塑性モデルと原子集合体モデルの基本的特性を検討するために行なった単軸引張のシミュレーションについて述べる。

I.1 結晶塑性論に基づく解析

I.1.1 結晶塑性モデルの特性

第4章、図4.1のOri.2の方位で、第3章で述べた結晶塑性モデルを用いて図I.1(a)に示すようなFCCの立体的なすべりを考慮した4つのCrossed Triangle要素からなるモデルに比例負荷した場合の初期降伏曲面のシミュレーション結果を図I.1(b)に示す。三次元的すべり系を考えているので、厚さ方向の応力成分 σ_z が生じ、 $\sigma_x = \sigma_y$ の等二軸応力状態でも偏差応力成分が生じ、すべり系が作動し降伏する。

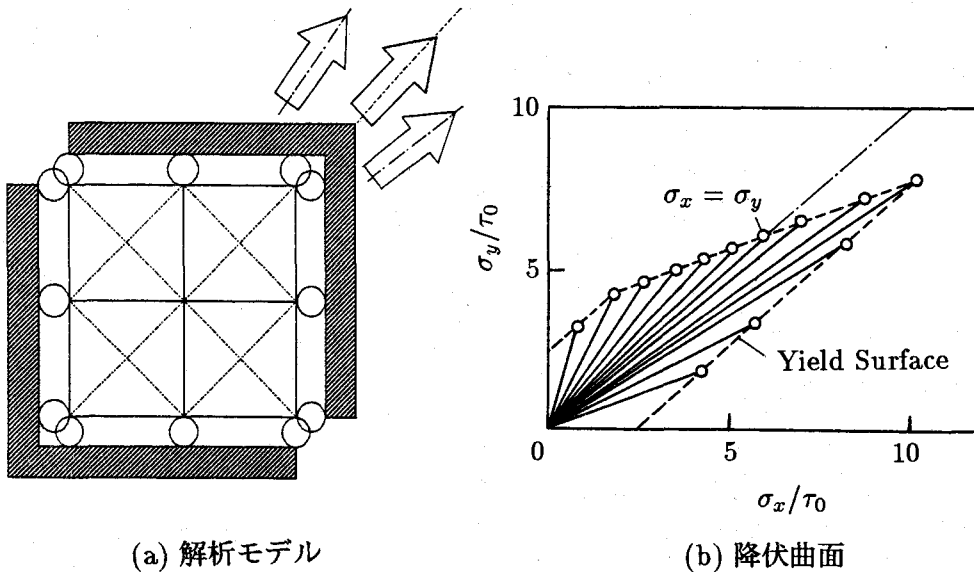


図 I-1 4つの Crossed Triangle 要素からなる降伏曲面の解析

次に図 I-2 のように, BCC 結晶を図 4-1 の Ori. 2 の配向から $x-y$ 面内で 30 度傾けた場合について, (a) Crossed Triangle 要素と, (b) 8 節点アイソパラメトリック要素を用いて, 図 I-2(c), (d) のように 2 種類の変位拘束が加えられた場合について解析を行なう. 変形形状と各積分点でのすべり系などの作動状況を調べた結果を図 I-3, I-4 に示す. 拘束条件によってはかなり複雑な挙動を示しているのがわかる. 8 節点要素では, 要素内での近似度が高いため, すべり系の挙動はより複雑になっている.

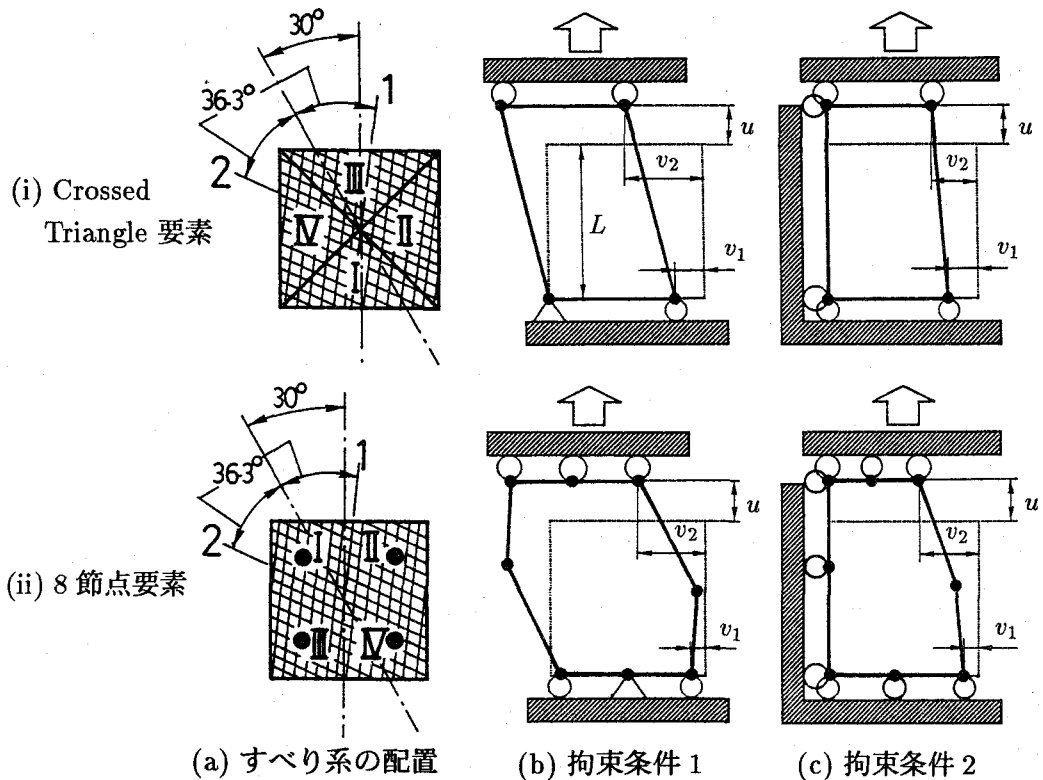


図 I-2 すべり系の配置と拘束条件

等方硬化を仮定しているが, 見掛けの変形 (形状, 相当ひずみなど) が穏やかでも, 活動すべり系が入れ替わったりして, 内部構造は, 複雑に変化している. この複雑さは, ここでは一要素に多くの拘束条件を課したため生じているので, 実際に多くの要素分割で自由度が大きくなると一般にこれほど複雑な挙動は示さないとと思われる (次節の解析結果参照). しかし, 自由度が大きくなれば, 正しい解を得るためには精度よい時間積分が要求される.

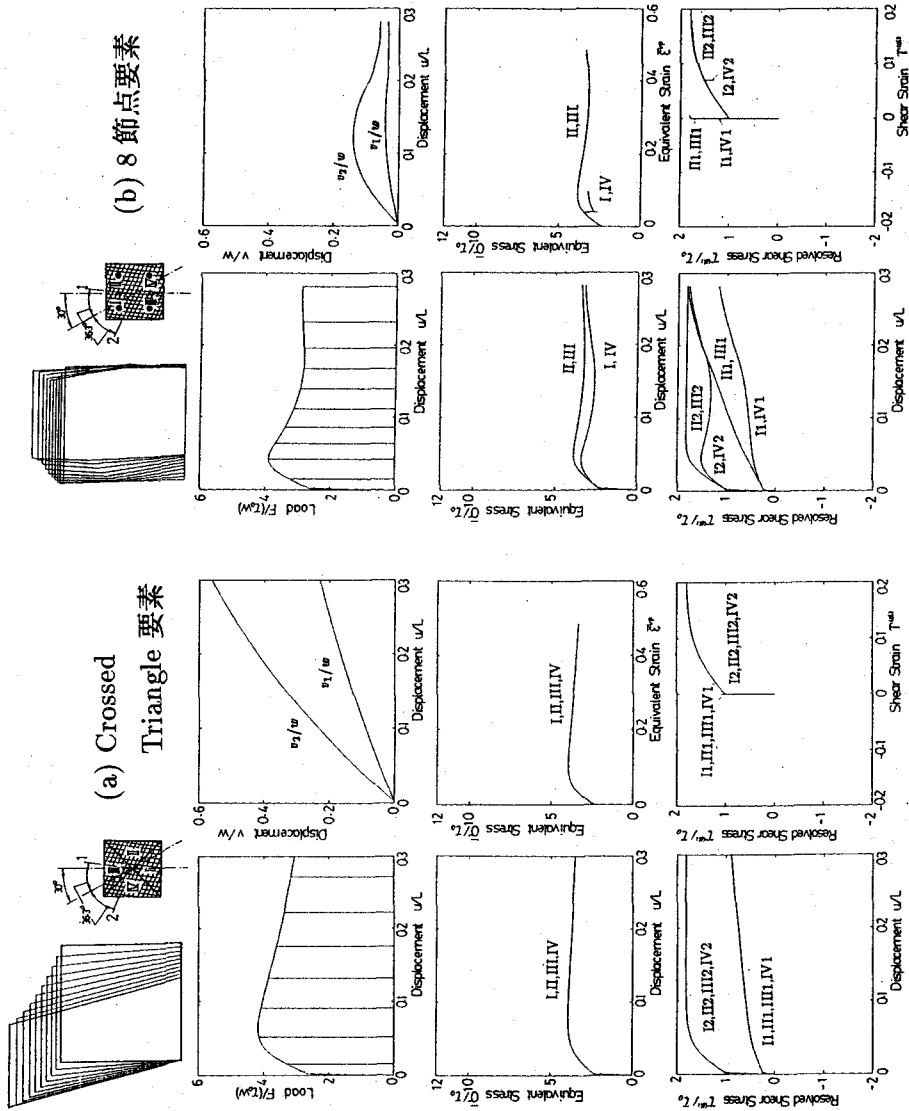


図 I-3 8 節点要素と Crossed Triangle 要素を用いた解析の比較 (拘束条件 1)

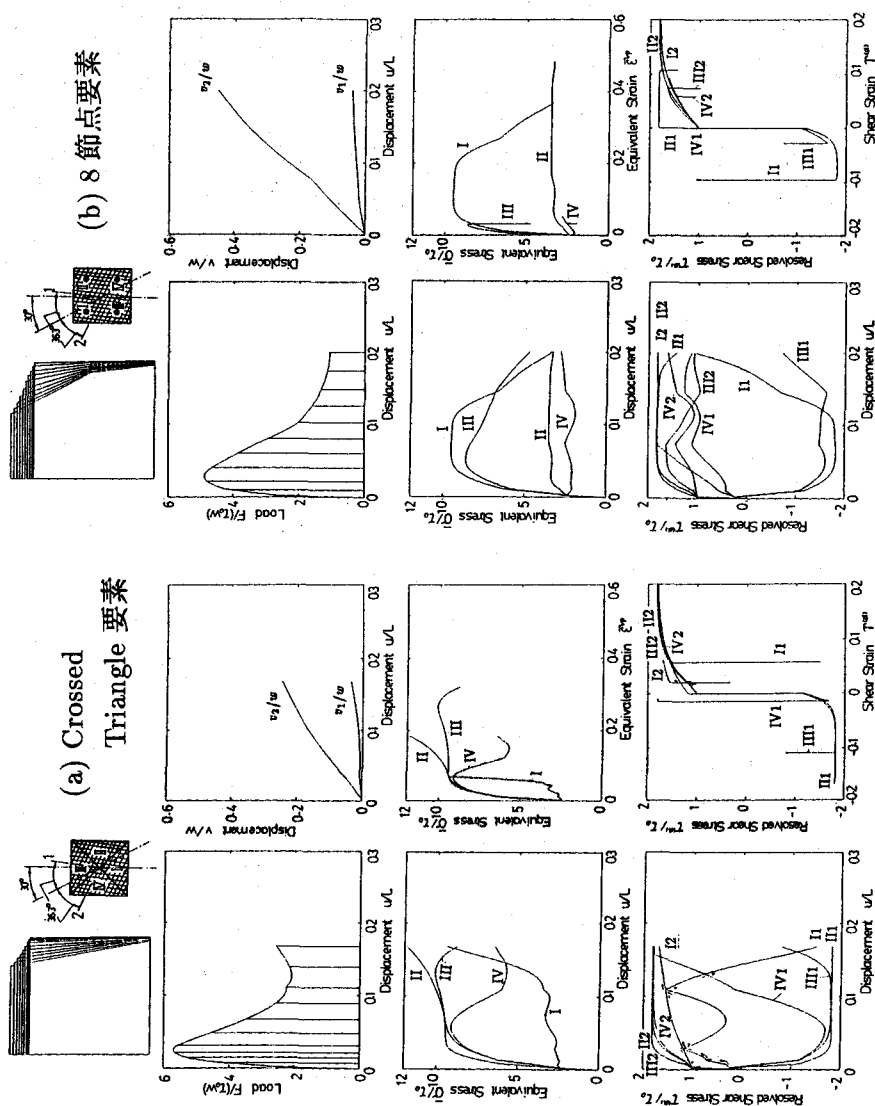


図 I-4 8 節点要素と Crossed Triangle 要素を用いた解析の比較 (拘束条件 2)

I-1.2 平面ひずみブロックに生じる局所変形の解析

8 節点アイソパラメトリック要素による解析

結晶塑性論に基づくモデルを用いた定式化だけでなく、有限要素モデルや計算プログラムまでの信頼性を確認するために行なった、平面ひずみブロックに生じるせん断帯状の局所変形の解析結果を示す。この問題の一部は、Peirce ら⁽¹⁾⁽²⁾によっても解析がなされている。

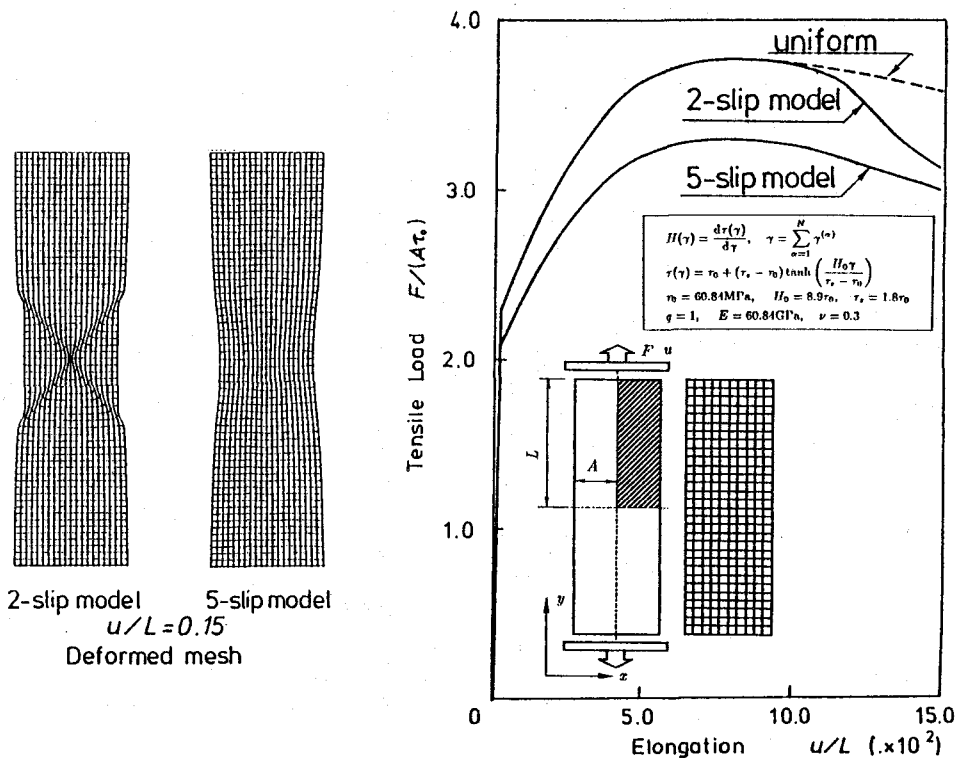
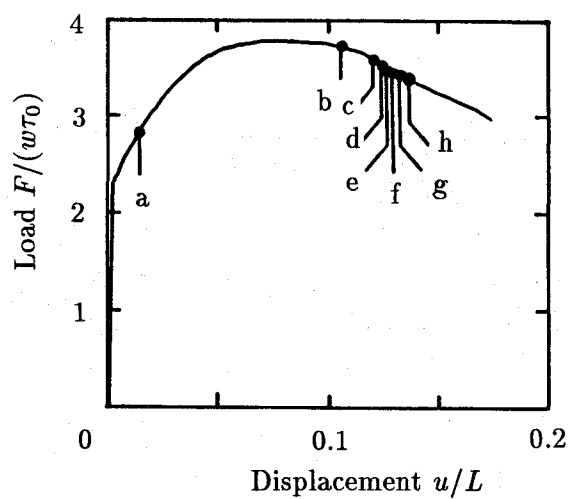
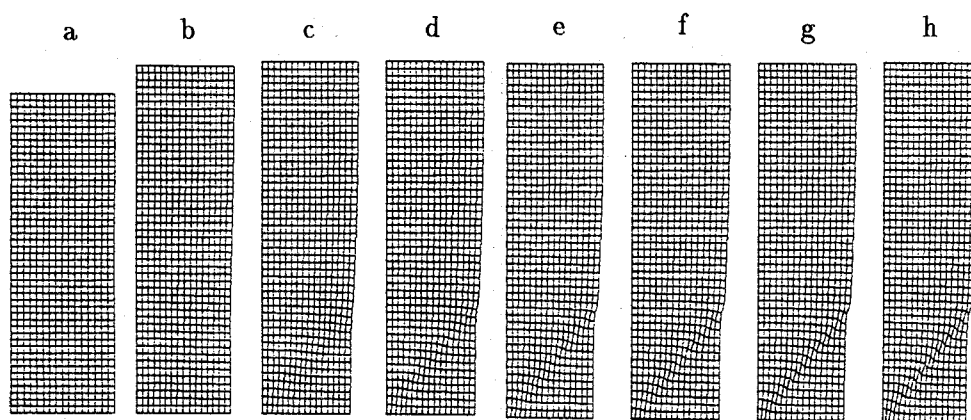


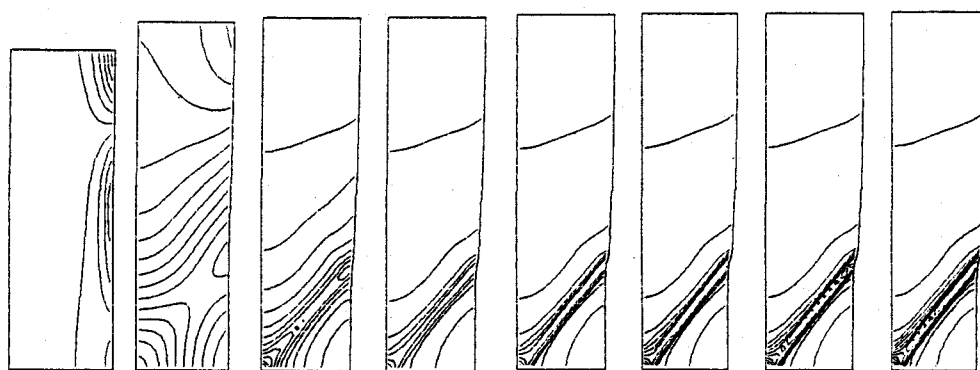
図 I-5 解析結果



(a) 荷重変位図



(b) 変形図



(c) 相当粘塑性ひずみ

図 I-6 解析結果

図 I.5 に解析モデルとともに、荷重-伸び関係、および現れる局所変形形状を示す。2 すべりモデルでは顕著なすべり帯を伴ったくびれを生じるが、5 すべりモデルでは比較的なめらかなくびれとなる。ただし、中央部のくびれ量はほぼ同じである。

2 すべりモデルの解析結果は、いわゆる Crossed Triangle 要素を用いてなされた Peirce ら⁽²⁾による解とほぼ完全に一致する。これより、8 節点アイソパラメトリック要素と低減積分を組み合わせた方法によっても、精度よく変形の局所化を伴う問題を解析できることが確認できる。

Crossed Triangle 要素による解析

同様の問題を Crossed Triangle 要素を用いて行なった解析結果を図 I.6 に示した。変形形状、荷重変位関係と、一様変形から局所変形への移行点など、8 節点要素を用いた場合と同様な結果が得られており、また、Peirce らの解析とも一致している。

I.2 分子動力学法による解析

図 I.7 のような原子数 $N = 745$ の BCC 結晶体について α -鉄を表現する FS ポテンシャルを用いて、単軸引張のシミュレーションを行なった結果を示す。

解析は、第 2.4 章に示した方法で行なう。解析条件等を表 I.1 に示す。境界条件として、A,B 端それぞれ、図 I.7 中に印を付けた原子(チャック部)に引張方向の変位拘束を与える。変位拘束は、中心線上の一原子は完全に固定し、それ以外の原子については、引張軸に垂直な方向はフリーにしている。

表 I.1 解析条件

The number of atoms	N	745
The size of specimen	$L_0 \times l_0$	$20\sqrt{2}a \times 8a$
Time step	Δt	$0.02t_0$
Reference Time	t_0	$0.3968501 \times 10^{-13} \text{ s}$
Strain rate	$\dot{\epsilon}$	$10^{10} / \text{s}$
Lattice constant	a_0	$2.867 \times 10^{-10} \text{ m}$
Total Step	k	25000 step ($500t_0$)

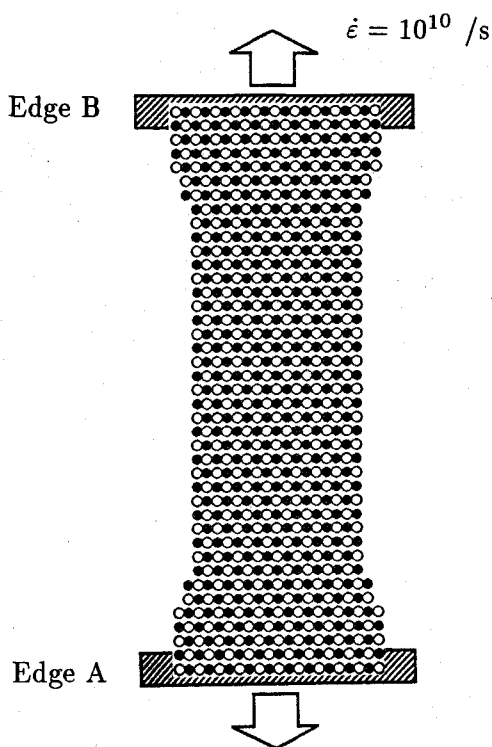


図 I-7 解析モデル

I-2-1 原子配置の変化

原子配置の時間変化を図 I-8 に示す。300 t_0 位までは、不均一なすべりなどは生じず、初期の配置からの弾性的伸びと Poisson 収縮が見られるが、310 t_0 頃から変化が現われ、330 t_0 で、表面から転位や双晶変形が生じる。しかし、一度すべりが生じて、それが大域的な原子の移動に発展することはなく、別の部分で、すべりを生じている。これには原子を拘束した条件等の影響が大きい。

I-2-2 荷重変位関係

図 I-9 に、図 I-7 の A,B 端の拘束した原子に働く力を引張方向を正にとって 0.4 t_0 (20step) ごとにプロットした荷重変位関係 (公称応力公称ひずみ関係) を示す。両端の傾向は、よく一致しており、300 t_0 付近で、一様な変形から、すべりが生じ、曲線は大きく変化する様子がわかる。

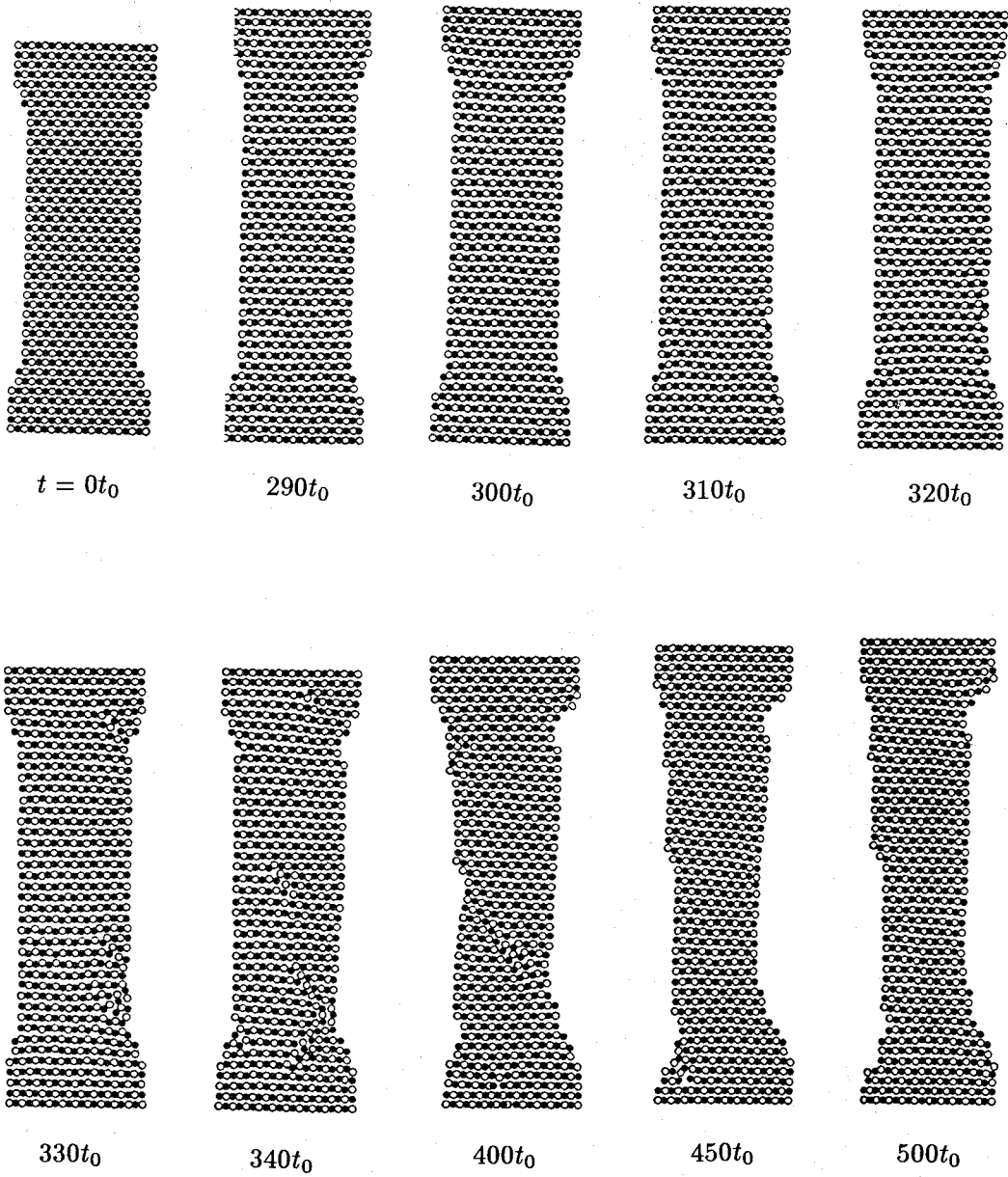


図 I-8 原子配置の変化

α -鉄の場合, Voigt 記法を用いて, $C_{11} = 1.519 \times 10^{11}$ Pa, $C_{12} = 0.862 \times 10^{11}$ Pa, $C_{44} = 0.762 \times 10^{11}$ Pa の, 3つの独立な弾性定数が存在する. この解析例の配向では引張方向 $[110]$ の弾性定数は, $C = (C_{11} + C_{22})/2 + C_{44} = 1.9525 \times 10^{11}$ Pa であり, この関係を, 計算結果の図 I-9 に重ねてみると, 変形が大きくなって局所変形が起こるまでの弾性変形においては, よく一致していることがわかる.

さらに, 一様変形から局所的な変形への移行を調べるために, 第2章で述べた静力学的安定性を評価する. 平面ひずみの条件下で, 結晶の引張方向格子間長さ $\lambda_1 (= \sqrt{2}a_0)$, 横方向長さ $\lambda_2 (= a_0)$, 格子の面内でのせん断角 $\lambda_3 (= \pi/2)$ とし, 着目する原子 i とその原子に相互作用を加える回りの原子 j との距離を r_{ij} とし, この r_{ij} が $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ の関数であると考えて, ポテンシャルエネルギー Φ の $\lambda_k (k=1, 2, 3)$ の偏導関数, 二階偏導関数の値を考えて, それによる安定性を解析する. つまり, 3×3 行列,

$$\begin{aligned}
 [B]_{kl} &= \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \lambda_k \partial \lambda_l} \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial r_{ij}^2} \frac{\partial r_{ij}}{\lambda_k} \frac{\partial r_{ij}}{\lambda_l} + \frac{\partial \phi}{\partial r_{ij}} \frac{\partial^2 r_{ij}}{\partial \lambda_k \partial \lambda_l} \right) \\
 &\quad - A \sum_{i=1}^N \left\{ -\frac{1}{4} \left(\sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \rho(r_{ij}) \right)^{-\frac{3}{2}} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{\partial \rho(r_{ij})}{\partial r_{ij}} \frac{\partial r_{ij}}{\partial \lambda_k} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{\partial \rho(r_{ij})}{\partial r_{ij}} \frac{\partial r_{ij}}{\partial \lambda_l} \right. \\
 &\quad \left. + \frac{1}{2} \left(\sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \rho(r_{ij}) \right)^{-\frac{1}{2}} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \left(\frac{\partial^2 \rho(r_{ij})}{\partial r_{ij}^2} \frac{\partial r_{ij}}{\lambda_k} \frac{\partial r_{ij}}{\lambda_l} + \frac{\partial \rho(r_{ij})}{\partial r_{ij}} \frac{\partial^2 r_{ij}}{\partial \lambda_k \partial \lambda_l} \right) \right\} \dots \dots (I-1)
 \end{aligned}$$

の小行列式の値を評価するために,

$$b_1 = B_{11}, \quad b_2 = B_{11} \times B_{22} - B_{12}^2, \quad b_3 = B_{33} \dots \dots \dots (I-2)$$

の値を調べればよい. ここでは, 引張方向の変形 λ_1 を与えたとき, 横方向の収縮に関する λ_2 は, ポテンシャルを停留させることにより求まるので, 結局, b_1, b_2, b_3 は, λ を決めることにより得られる. その結果を, 図 I-10 に示す. MD 解析の結果では, 安定性解析で得られた不安定点よりも小さいひずみレベルで, 一様変形からすべり変形に移行している. これは, MD 解析においては, 有限温度による熱揺動などの効果が大いことを示唆している.

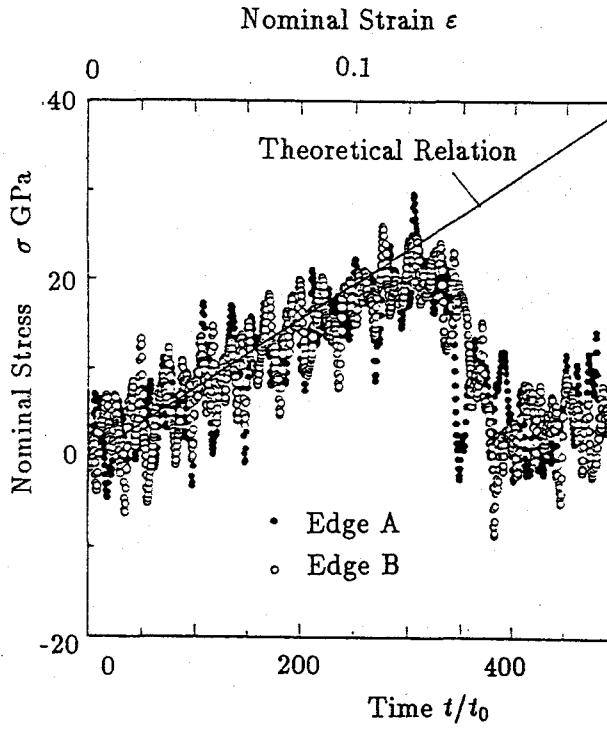


図 I-9 荷重変位関係

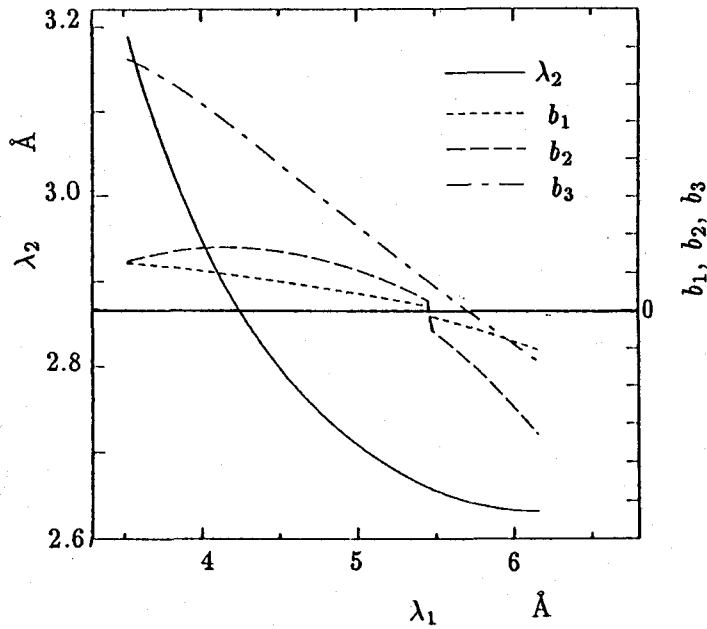


図 I-10 安定性の評価

付録 (I) の文献

- (1) Peirce,D., Asaro,R.J., and Needleman,A., Overview No.21 An Analysis of Nonuniform and Localized Deformation in Ductile Single Crystals, *Acta Met.*, **30**(1982), 1087-1119.
- (2) Peirce,D., Asaro,R.J., and Needleman,A., Overview No.32 Material Rate Dependence and Localized Deformation in Crystalline Solids, *Acta Met.*, **31-12**(1983), 1951-1976.

付録 (II) FEM-MD 結合解法とその解析例

分子動力学法を適用する際に、材料全体の領域を原子モデルで取り扱うことは困難である。そこで、これまで問題となる局所的領域を扱う原子モデルとその他の領域を扱う連続体モデルを結合する連成解法 (例えば、文献 (1)(2)(3)) が提案されている。

本論文、第4章では、モードIき裂に対してFEM-MD結合解法による解析について述べたが、ここでは少し視点を変えて、2次元三角格子に対して、集中質量マトリクスを用いて離散化した動弾性問題に対する三角形定ひずみ要素による解法と、非線形ばねをトラス状に結合したモデル、第一近接原子まで2体間の相互作用を有する原子モデルの3つのモデルが形式的に等価になることに着目し、これらのモデルを統一的に取り扱う解法を示す¹。さらに、このモデルを2次元モードIき裂に対する解析および剛体パンチの押込み問題の解析に適用した結果を示す⁽⁸⁾⁽⁹⁾。

II-1 等価な三角格子による結合解法

II-1-1 三角形定ひずみ要素による離散化⁽¹⁰⁾

ここでは、2次元線形弾性体を三角形定ひずみ要素で、集中質量マトリクスを用いて微小変形の範囲で有限要素に離散化する。要素形状が一辺の長さが L の正三角形の場合について要素剛性マトリクスを K^e を求めることを考える (図 II-1)。

ひずみ節点変位マトリクスを B 、弾性マトリクスを D とすると、

$$K^e = \frac{\sqrt{3}}{4} L^2 B^T D B \dots\dots\dots (II-1)$$

となる。いま簡単のため、正三角形の一辺が x 軸と平行であるような場合を考えると B マトリクスは、

¹なお、ここで述べた、ばねによる質点系結合モデルから導かれる音速に関連して、Hoover⁽⁴⁾らが論じている。また、さらに高次の棒要素により作られる三角形を用いた連続体の離散化については、Argyris⁽⁵⁾⁽⁶⁾⁽⁷⁾によって論じられている。

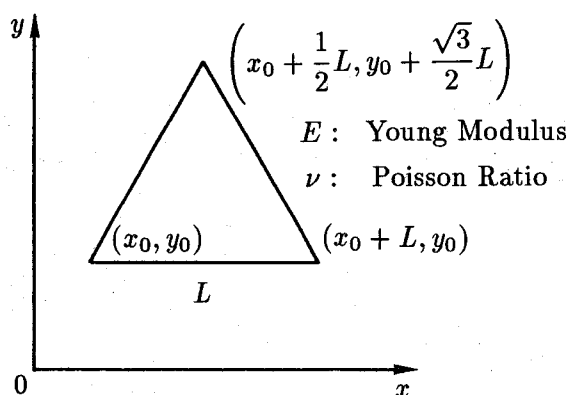


図 II.1 三角形要素

$$B = \frac{1}{\sqrt{3}L} \begin{bmatrix} -\sqrt{3} & 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & -1 & 0 & -2 \\ -1 & -\sqrt{3} & -1 & \sqrt{3} & -2 & 0 \end{bmatrix} \dots\dots\dots (II.2)$$

となる。一方、 D マトリクスは、

$$D = \frac{(1-\nu)E}{(1+\nu)(1-2\nu)} \begin{bmatrix} 1 & \frac{\nu}{1-\nu} & 0 \\ \frac{\nu}{1-\nu} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1-2\nu}{2(1-\nu)} \end{bmatrix}$$

(平面ひずみの場合) (II.3)

$$D = \frac{E}{1-\nu^2} \begin{bmatrix} 1 & \nu & 0 \\ \nu & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1-\nu}{2} \end{bmatrix}$$

(平面応力の場合) (II.4)

ここで、 E は Young 率, ν は Poisson 比である。要素剛性マトリクス K^e は、

$$K^e = \frac{E}{8\sqrt{3}(1+\nu)(1-2\nu)} \begin{bmatrix} 7-8\nu & \sqrt{3} & -5+4\nu & -\sqrt{3}(1-4\nu) & -2(1-2\nu) & -4\sqrt{3}\nu \\ & 5-8\nu & \sqrt{3}(1-4\nu) & -1+4\nu & -2\sqrt{3}(1-2\nu) & -4(1-\nu) \\ & & 7-8\nu & -\sqrt{3} & -2(1-2\nu) & 4\sqrt{3}\nu \\ & & & 5-8\nu & 2\sqrt{3}(1-2\nu) & -4(1-\nu) \\ & & & & 4(1-2\nu) & 0 \\ \text{Sym.} & & & & & 8(1-\nu) \end{bmatrix}$$

(平面ひずみの場合) (II.5)

$$K^e = \frac{E}{8\sqrt{3}(1+\nu)(1-2\nu)} \begin{bmatrix} 7-\nu & \sqrt{3}(1+\nu) & -5-\nu & -\sqrt{3}(1-3\nu) & -2(1-\nu) & -4\sqrt{3}\nu \\ & 5-3\nu & \sqrt{3}(1-3\nu) & -1+3\nu & -2\sqrt{3}(1-\nu) & -4 \\ & & 7-\nu & -\sqrt{3}(1+\nu) & -2(1-\nu) & 4\sqrt{3}\nu \\ & & & 5-3\nu & 2\sqrt{3}(1-\nu) & -4 \\ & & & & 4(1-\nu) & 0 \\ \text{Sym.} & & & & & 8 \end{bmatrix}$$

(平面応力の場合) (II.6)

となる。ここで、要素の正三角形の一辺が x 軸と平行であるとして要素剛性マトリクス K^e を求めたが、この K^e は、方向によらず常にこの形となる。

こうして、慣性力を考慮した動的な剛性方程式(運動方程式)を次のように表わす。

$$M \frac{d^2 u}{dt^2} = f - Ku \equiv F \quad \text{..... (II.7)}$$

ここで、 K は全体剛性マトリクス、 M は集中質量マトリクスで連続系の慣性項を離散化したものであり、 u は節点変位ベクトル、 f は節点力ベクトルである。集中質量を節点に置いて、その節点の慣性が他の節点におよぼす影響は無視し自由度を要素変位と一致させることにより、慣性力が粒子の質量と加速度のみで決まる粒子系の慣性力と同じ形となり、粒子の運動における粒子に加わる力と変位のように、節点力と節点変位を扱うことができ、有限要素法と分子動力学法との結合において都合がよい。

II.1.2 非線形ばねモデル

先に述べた有限要素モデルと原子モデルを結合する役割を果たす非線形ばねをトラス状に結合したモデルについて考え、それぞれのモデルとの比較によって結合のための条件を示す。

有限要素モデルとの比較

まず、非線形ばねのばね定数を k とする、ここで k は、ばねの初期長さ l と l_0 の関数で $l = l_0$ のとき $k = k_0$ とする。

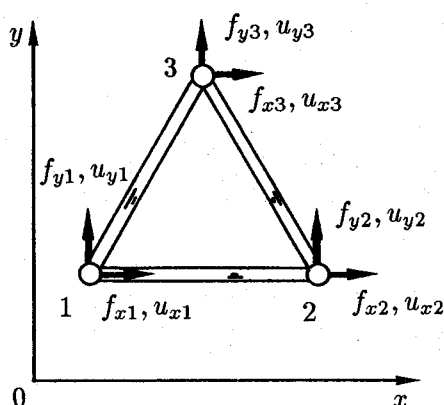


図 II-2 非線形ばね結合による三角形

初期長さの等しいばねを 3 本つなげて、図 II-2 のような x 軸と平行な辺を有する正三角形のトラスを考える、このトラスの 3 つの頂点での x 方向および y 方向変位とそこにかかる力を、それぞれ $u_{ix}, u_{iy}, f_{ix}, f_{iy}$ ($i = 1, 2, 3$) とすると、 u と f の関係は、

$$\begin{Bmatrix} f_{1x} \\ f_{1y} \\ f_{2x} \\ f_{2y} \\ f_{3x} \\ f_{3y} \end{Bmatrix} = \frac{k_0}{4} \begin{bmatrix} 5 & \sqrt{3} & -4 & 0 & -1 & -\sqrt{3} \\ & 3 & 0 & 0 & -\sqrt{3} & -3 \\ & & 5 & -\sqrt{3} & -1 & \sqrt{3} \\ & & & 3 & \sqrt{3} & -3 \\ & & & & 2 & 0 \\ \text{Sym.} & & & & & 6 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u_{1x} \\ u_{1y} \\ u_{2x} \\ u_{2y} \\ u_{3x} \\ u_{3y} \end{Bmatrix} \quad \dots (II-8)$$

とかける。この式と式 (II-5)(II-6) の要素剛性マトリクスを比較すると、

$$\left. \begin{aligned} \nu &= \frac{1}{4}, \quad k_0 = \frac{4}{5\sqrt{3}}E \quad (\text{平面ひずみの場合}) \\ \nu &= \frac{1}{3}, \quad k_0 = \frac{\sqrt{3}}{4}E \quad (\text{平面応力の場合}) \end{aligned} \right\} \dots (II-9)$$

とおくことによって、非線形ばねで作った三角形と三角形定ひずみ要素が等価になる²。

原子モデルとの比較

原子間ポテンシャルとばね定数 まず、2 体ポテンシャル $\phi(r)$ によって関係づけられる原子間のばね特性を調べる。ここで ϕ, r はポテンシャルの停留値 ε と原子の停留点の距離 R_0 で無次元化されている。

²後で述べるように、実際に正三角形に組み立てられたトラスを要素として連続した場を近似する場合には、表面を除いて、ばねは 2 本重なっていることになるから、 $2k_0$ にしなければならない。

$$\frac{\Phi}{\varepsilon} = \phi\left(\frac{R}{R_0}\right) = \phi(r) \dots\dots\dots (\text{II}\cdot 10)$$

とすると,

$$F = -\frac{d\Phi}{dR} = -\frac{\varepsilon}{R_0} \frac{d\phi(r)}{dr} \dots\dots\dots (\text{II}\cdot 11)$$

ここで, 見かけのばね定数 $\bar{k}$ は,

$$\Delta F = \bar{k} \Delta R \dots\dots\dots (\text{II}\cdot 12)$$

より,

$$\bar{k} = -\frac{\varepsilon}{R_0^2} \frac{d^2\phi(r)}{dr^2} \dots\dots\dots (\text{II}\cdot 13)$$

となる. ここで式 (II-9) のばね定数と Young 率の関係を用いるが, トラス要素が他のモデルとの境界である場合や材料の表面である場合を除いて, ばねは 2 本重なっているので, k と $\bar{k}$ の関係は $\bar{k} = 2k$ となるので,

$$E = \begin{cases} \frac{4}{\sqrt{3}} \frac{\bar{k}}{2} & (\text{平面ひずみの場合}) \\ \frac{5\sqrt{3}}{4} \frac{\bar{k}}{2} & (\text{平面応力の場合}) \end{cases} \dots\dots\dots (\text{II}\cdot 14)$$

となる. また, 密度 ρ は, 原子 1 個の質量を m とすると,

$$\rho = \frac{2}{\sqrt{3}R_0^2} m \dots\dots\dots (\text{II}\cdot 15)$$

と表わせる.

非線形ばねモデルと原子モデル 非線形ばねのばね定数 k を次のように決める.

$$k = \frac{1}{2} \varepsilon' \phi\left(\frac{l}{l_0}\right) \dots\dots\dots (\text{II}\cdot 16)$$

このようにばね定数を定義すると原子モデルと同様の手法でばね定数と Young 率の関係が求まり, 二つのモデルで Young 率が等しくなるためには,

$$\varepsilon' = \left(\frac{l_0}{R_0}\right)^2 \varepsilon \dots\dots\dots (\text{II}\cdot 17)$$

とすればよい. すなわち k が

$$k = \frac{1}{2} \left(\frac{l_0}{R_0}\right)^2 \varepsilon \phi\left(\frac{l}{l_0}\right) \dots\dots\dots (\text{II}\cdot 18)$$

であるとする、ばね要素が境界である場合を除き、 $l_0 = R_0$ のとき原子モデルと一致するので、非線形ばねモデルと他の二つのモデルはそれぞれの結合部で等価になっている。また、ばねの質量は、有限要素法で用いた集中質量マトリクスと同様の方法で節点に振り分ける。

このモデルにおける運動方程式は q_i を節点の位置、 m_i を集中質量として、

$$m_i \frac{d^2 q_i}{dt^2} = F_i \quad \dots\dots\dots (II-19)$$

ここで、 F_i は i 番目の節点と結合されたばねから受ける力の和で、 k 本のばねが結合されていて、その中の j 番目のばねの長さを l_{ij} 、 i 節点をから j 節点に向かう単位ベクトルを n で表わすと、

$$F_i = - \sum_{j=1}^k \frac{\epsilon l_0}{R_0^2} \frac{d\phi(r')}{dr'} n, \quad r' = \frac{l_{ij}}{l_0} \quad \dots\dots\dots (II-20)$$

となる。以上の議論によって今回用いた3つのモデルは条件により等しくなる。

運動方程式は各モデルによって、原子または節点という物理的解釈は異なるものの、粒子系としてその加速度、質量、はたらく力を関係づける運動方程式

$$m_i \frac{d^2 q_i}{dt^2} = F_i(q_1, q_2, \dots, q_N, t) \quad \dots\dots\dots (II-21)$$

が形式的に全く同じとなりそれぞれのモデルを別々に解くのではなく、連成して統一的に解くことができる。

II.2 解析例

まず、Gearの方法が動弾性問題の有限要素解析に適用可能であることを、通常よく用いられる Newmark- β 法との比較により示す³。また、非線形ばねモデルに関して、荷重変位関係を2次関数で仮定したモデルを用い、動的特性を調べる。最後に、FEM-MD 結合解法をモードIき裂の進展と、剛体パンチによる押し込み問題に適用した結果について述べる。

³ここで述べている方法は動的陽解法の一つといえるが、一般に、塑性体の大変形を解析する動的陽解法では、積分公式をより単純にして安定して解析することが要求される。

II-2-1 時間積分法

FEM-MD 結合解法においては、Gear の方法を用いる。有限要素法における時間積分の方法としては安定な Newmark- β 法が用いられることが多いので、まず、Gear の方法と Newmark- β 法 ($\beta = 1/4$) を用いて、ここでは、FEM モデルだけを用いて 2 次元弾性体を離散化し、縦波の伝ばのシミュレーションを行ない、その計算時間と結果について比較することによって今回用いた方程式の解法について考察を加える。

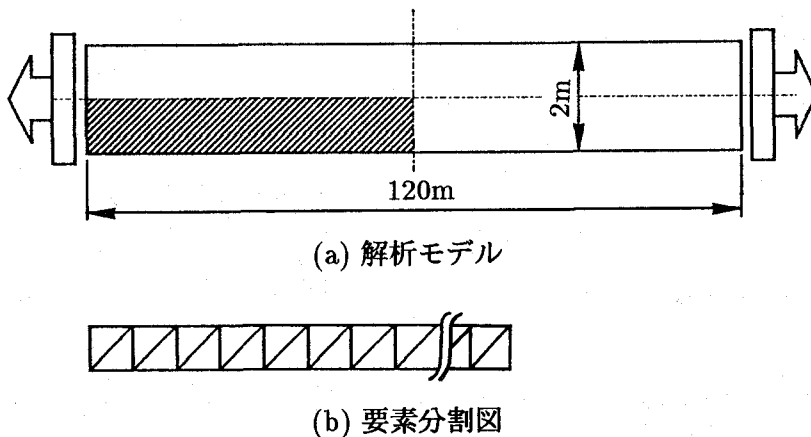


図 II-3 解析対象

図 II-3(a) に示す一方向に端部の変位が変化する拘束を受ける平面ひずみ問題を時間ステップを変えて Newmark- β 法と Gear の方法で解析する。ここでは対称性を考慮して 1/4 領域について考え、図 II-3(b) のように要素分割する。ここで、ヤング率 $E = 200\text{GPa}$ 、Poisson 比 $\nu = 1/3$ 、密度 $\rho = 7800\text{kg/m}^3$ とする。

拘束のための境界条件として端部加速度、

$$\frac{d^2 U}{dt^2} = \frac{2a_0\pi}{(t^*)^2} \sin\left(2\pi \frac{t}{t^*}\right) \dots\dots\dots (\text{II-22})$$

を与え (図 II-4(a)) 境界の変位、

$$U = \frac{a_0}{t^*} \left\{ t - \frac{t^*}{2\pi} \sin\left(2\pi \frac{t}{t^*}\right) \right\} \dots\dots\dots (\text{II-23})$$

を実現する (図 II-4(b))。ここで、 a_0, t^* は定数で $a_0 = 0.5\text{m}$ 、 $t^* = 10t_0 = 1.975 \times 10^{-3}\text{s}$ 、 $t_0 = \sqrt{\rho/E} = 1.975 \times 10^{-4}\text{s}$ で与えられる。1 ステップ当りの計算

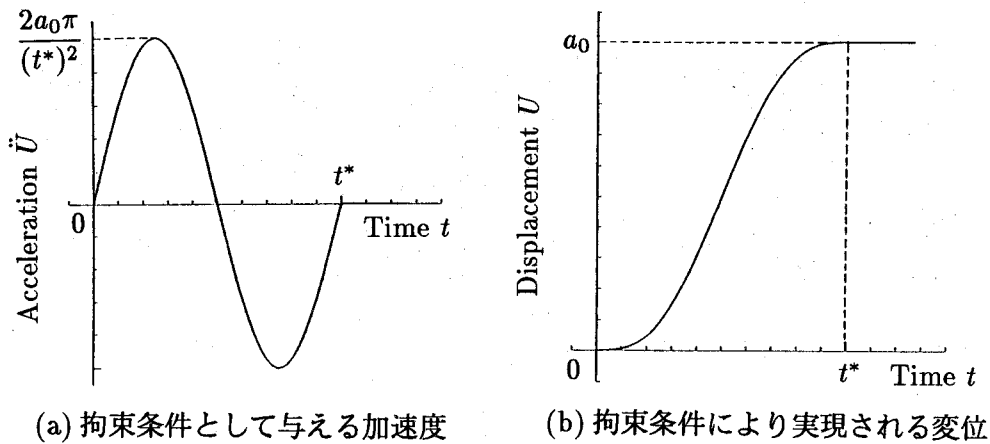


図 II-4 入力波形

表 II-1 解析解との誤差 (%)

Δt	Newmark- β Method	Gear Method
$0.10 t_0$		0.002
$0.25 t_0$	0.009	0.012
$0.50 t_0$	0.033	$\times 0.050$
$1.00 t_0$	$\times$	

時間を比較すると, Gear 法を用いた場合には, Newmark- β 法を用いた場合に比較すると, 約 $1/4$ の時間で済む. 一方, 精度のチェックのために, 図 II-3(b) の C 点での x 方向変位の結果と解析解との誤差を表 II-1 に示す (表中の $\times$ 記号は発散を表わす).

Newmark- β 法は, 大きな時間ステップでも安定であるのに対して, Gear 法では時間ステップを大きくすると発散する. しかし, 小さな時間ステップでは Newmark- β 法には劣るものの, 良好な精度が得られている. 一般に自由度が n 倍になったとき Gear の方法では, 計算時間は n 倍になるのに比べ, Newmark- β 法では n^2 倍になることが予測され, 解析規模が大きくなるにしたがい, この時間差は大きくなることを考え合わせると, 誤差の蓄積に注意して用いることにより, トータルで見れば効率よい計算が期待できる.

II-2.2 非線形ばねモデルの特性

非線形ばねモデルの特性を理解するために非線形のばねを組み合わせたモデルを用いて波動の伝達について計算を行なう。ここでは、ばねの荷重変位関係を2次関数で近似して⁴、長方形の材料の両端から弾性波を与える問題を考える。

ここで、図 II-5 のように、解析対象は $60.0\text{m} \times 4.0\text{m}$ のモデルについて対称性を考慮して $1/2$ 領域 $60.0\text{m} \times 2.0\text{m}$ を考え、半周期分の正弦波 (振幅 $a_0 = 0.1\text{m}$, 周期 $t^* = 1.975 \times 10^{-3}\text{s}$) を両端に加える。対称軸の長手方向に x 軸を取り、 x 軸上の点での x 方向変位の時間変化を表わしたのが図 II-6 で $x = 0, 15.0, 30.0, 45.0, 60.0$ の点での変位をグラフにしたのが図 II-7 である。図 II-6, II-7 をみると引張の波と圧縮の波では波形も異なることがわかる。そのうえ、引張の波と圧縮の波の衝突の際に、重ね合わせの原理は満たされているが衝突の前後で、エネルギーの授受があることがわかる。これは、引張と圧縮でポテンシャルの特性が異なる非調和性によると考えられる。

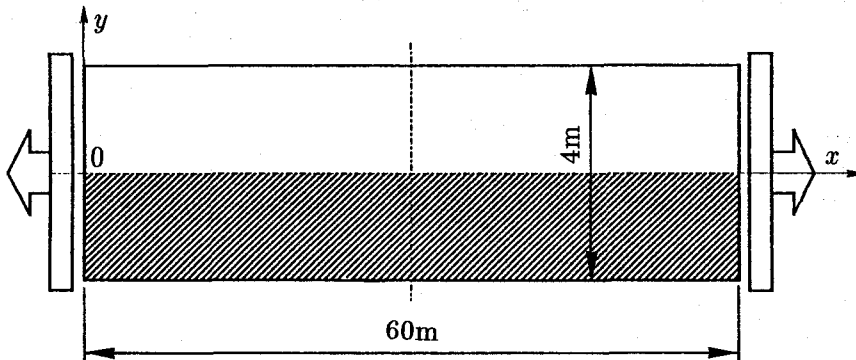


図 II-5 解析対象

⁴ポテンシャルが3次式で表わされるとし、初期長さ R_0 で釣合状態、 $R = 1.3R_0$ で再び荷重が零になり、かつ、 $R = R_0$ でのばね定数が young 率 E と対応するという条件から決定する。

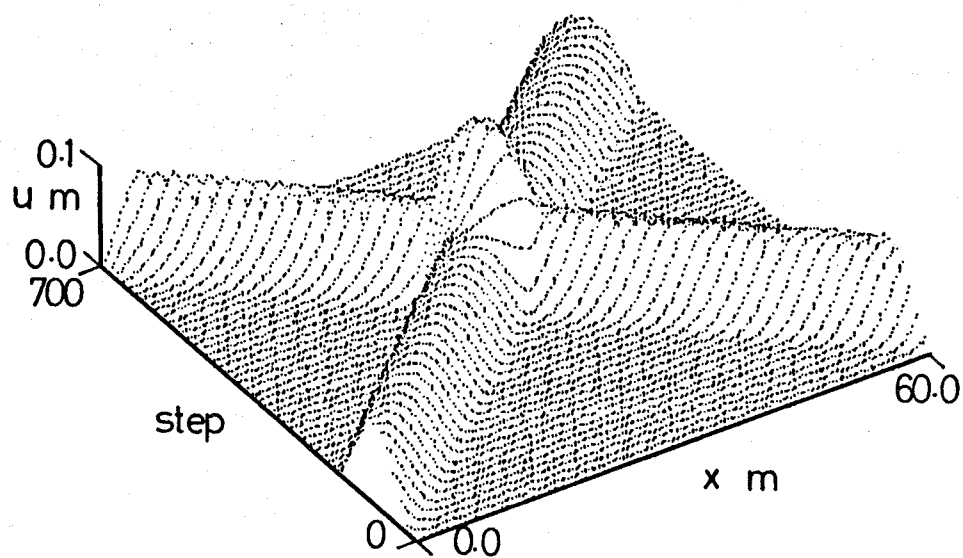


図 II-6 対称軸上の変位の時間変化

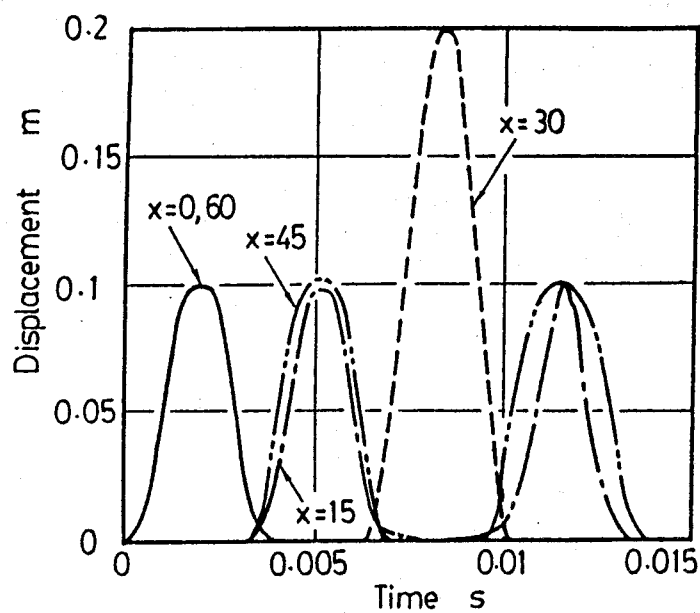


図 II-7 対称軸上の変位の時間変化 ($x = 0, 15, 30, 45, 60$)

II-2-3 FEM-MD 結合法による解析

これまでに説明した各モデルを結合して2次元の問題に対して行なった解析例を示す。解析した材料はBCC鉄で、原子間ポテンシャルとしてJohnsonポテンシャル⁽¹¹⁾を仮定する。ここで、2次元モデルでは、音速は、 $v_s = \sqrt{9E/(8\rho)}$ m/sと表わされる⁽¹²⁾。

初期速度を与えた後、外力を加えずにしばらく緩和計算を行なう。今回の解析では300Kに相当する初期速度 v_0 を各原子にランダムな方向に与える。緩和計算の時間ステップおよび計算したステップ数はそれぞれ $\Delta t = 7.937 \times 10^{-15}$ s, $n = 800$ としている。

II-2-4 き裂進展の解析

図II-8(a)に示すような、長さ $2a$ の中央き裂を有する幅 $2w$ の材料の両端を一定の引張速度 v_t で拘束することによってモードIの荷重を加えたときの材料の応答を調べる。対称性を考慮して、図II-8(a)の斜線部の1/2領域について解析する。ここで、 $w = 6.0 \times 10^{-8}$, $a/w = 0.5$ とする。

図II-8(b), (c)にこの問題の要素分割と原子の配置を示す。MD領域の原子数は469個で、節点数と合わせた総数は2216個である。同じ領域をすべて原子モデルで計算するのに必要な原子数は約15000個である。き裂の初期配置は、MDおよび非線形ばねモデル領域ではき裂に対応する結合を切断し、FEM領域では2重節点を設けることで実現する。

表II-2に示す異なる引張速度で解析したMD領域の原子配置の時間変化と、計算終了時の非線形ばねモデル領域の節点との結合の様子を図II-9に示す。

表II-2 解析条件

Case	Velocity of Tensile v_t m/s	Time Step Δt s
1	10	0.3968×10^{-14}
2	50	0.1984×10^{-14}
3	200	0.9921×10^{-15}

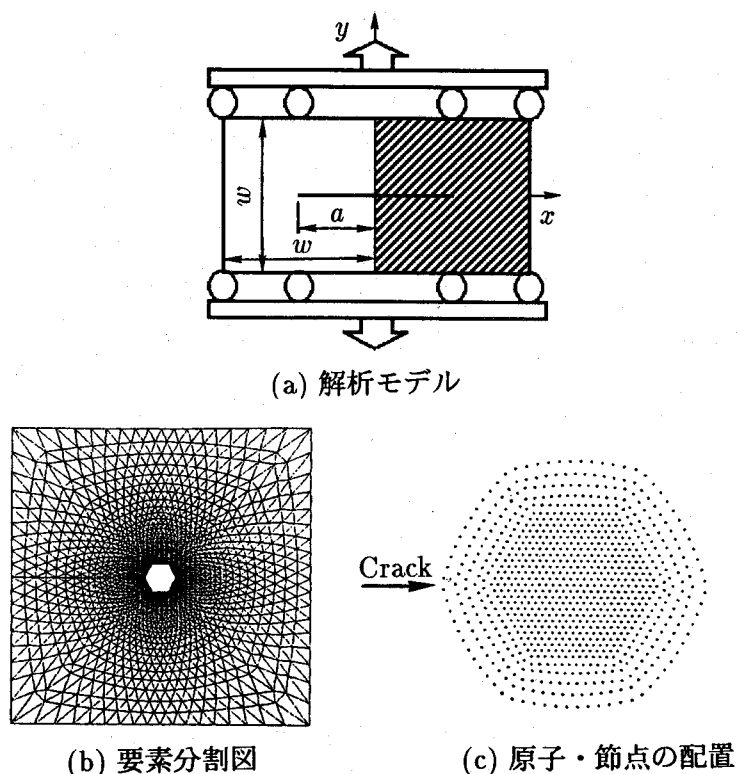


図 II-8 解析領域と要素分割, 原子配置

Case 1 では, き裂の進展はへき開的で転位の発生などは見られないこれは, 2次元格子では, Johnson ポテンシャルが第一近接原子にしか影響を与えないことに関係していると思われる。

Case 2 では, 約 $t/t_0 = 125$ で生じたき裂先端の原子配置のずれは安定で, $t/t_0 = 150$ 付近までき裂は進展せず停留する. $t/t_0 = 150$ を過ぎると停留していたき裂が再び進展し, Case 1 と同様にへき開的に破壊が進む。

Case 3 ではき裂の進展とともに転位の発生も見られるが, 結果的には, へき開的にき裂が進展する. しかし, Case1 や Case2 のときのように x 軸に平行ではなく, x 軸と約 45 度の角度をなして, ジグザグに進展している. 最後に, 一定の引張速度を与えるのではなく緩やかに拘束端の速度を速くして Case3 の速度になるように変位の加速度による拘束を行なったとき (これを, Case4 とする) の, 原子配置の変化の様子を図 II-10 に示す. この場合, 転位を放出しながらき裂が進展するのがわかる。

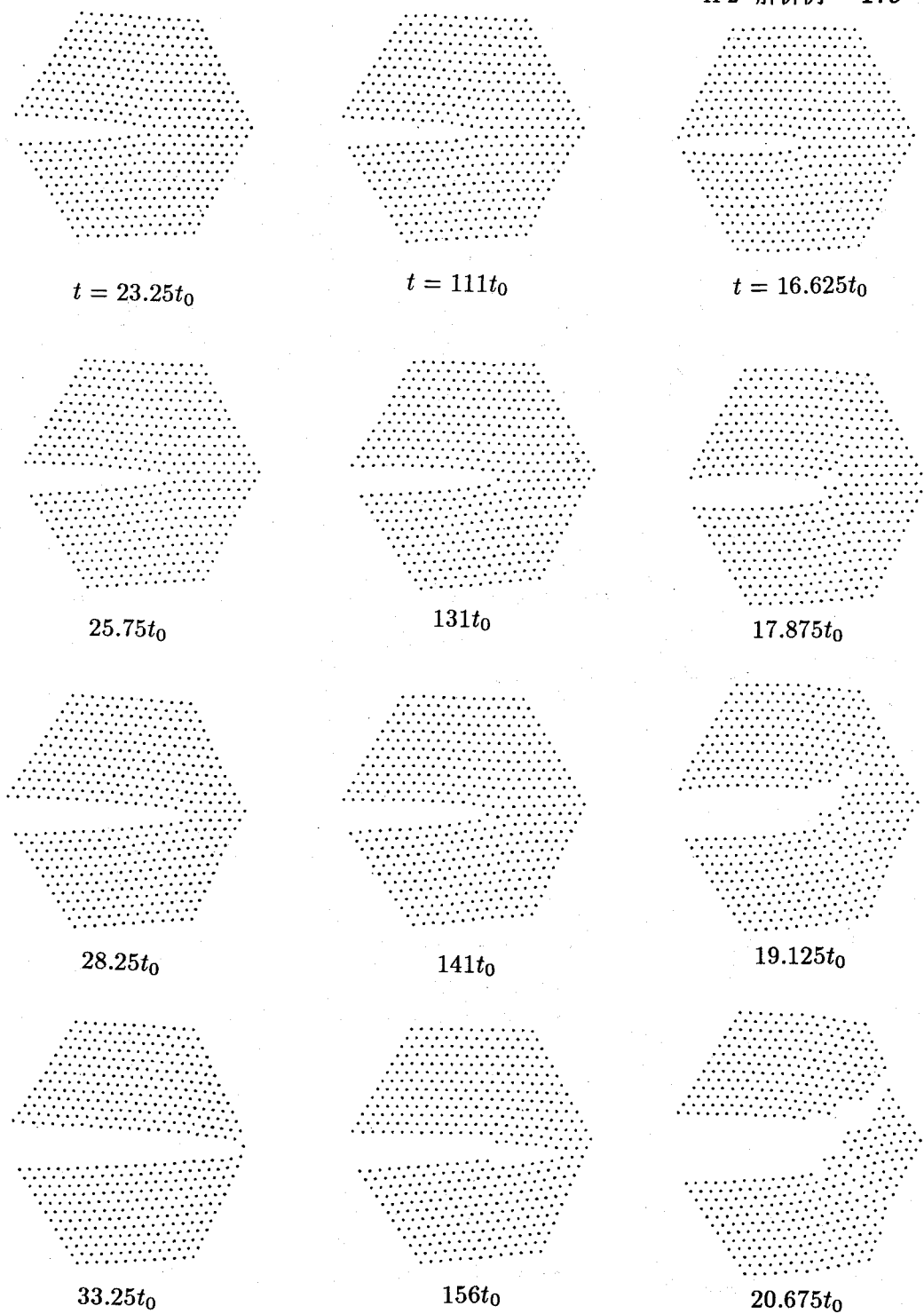


図 II.9 解析結果 (Case1~3)

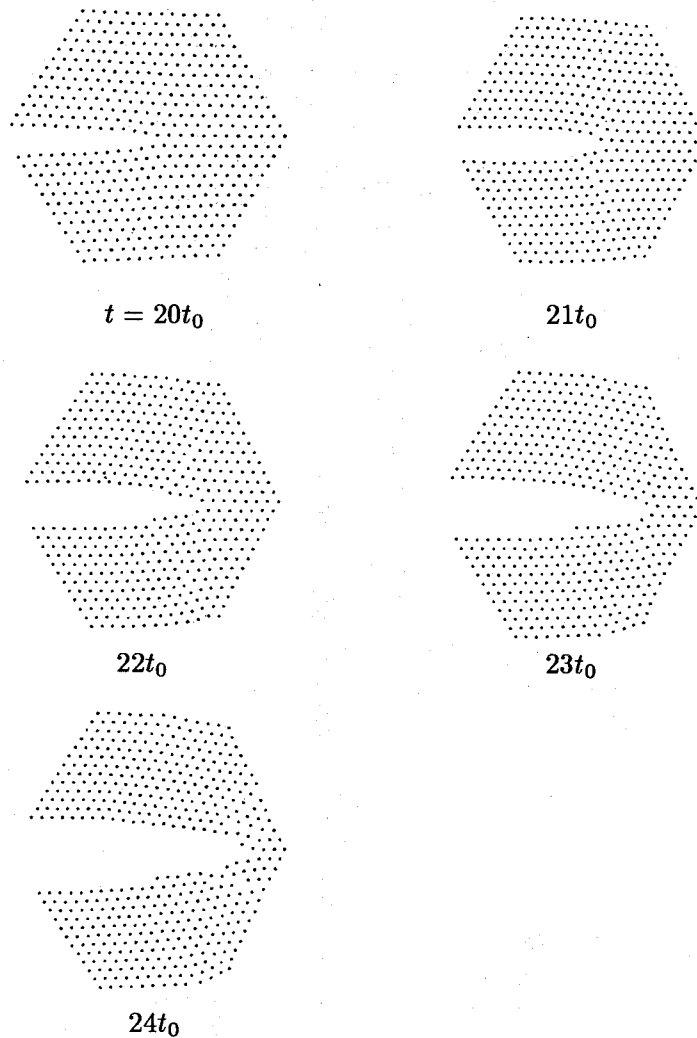


図 II-10 解析結果 (Case4)

II-2-5 剛体パンチによる押し込みの解析

図 II-11(a) に示すような剛体パンチによる押し込みの問題を解析する. 図 II-11(b) に要素分割, (c) に原子の配置について示す. パンチは, 原子モデルと同じ質量をもつ粒子で他の原子とは, 斥力は働くが引力は働かない仮想的な粒子を用いて実現する.

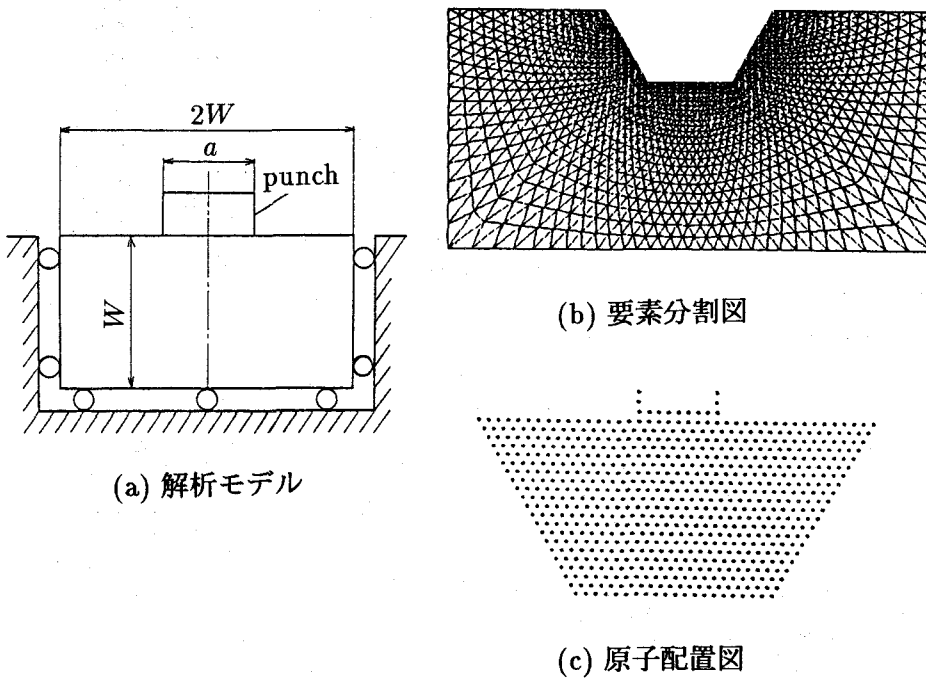


図 II-11 剛体パンチによる押し込み問題

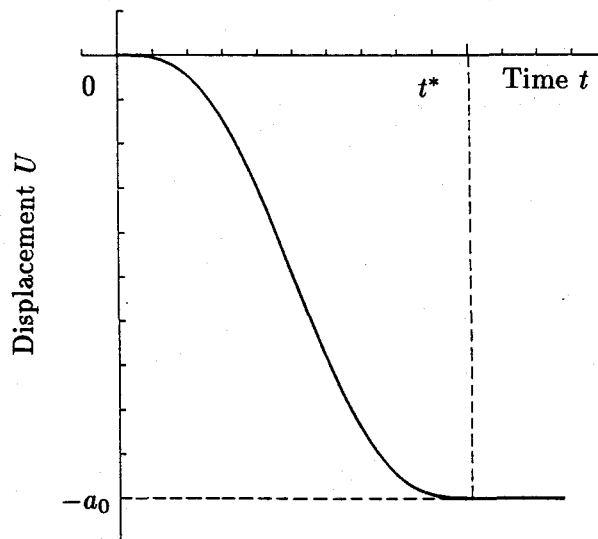
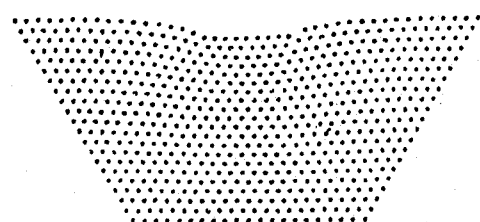
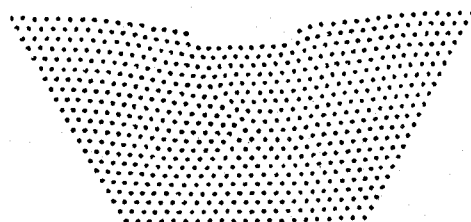


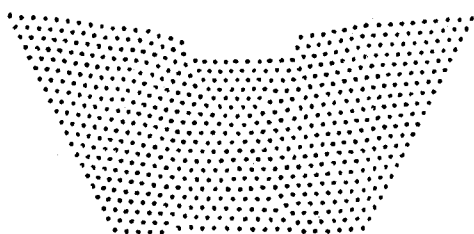
図 II-12 変位拘束



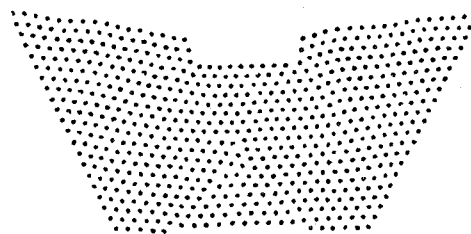
$t = 10.0t_0$



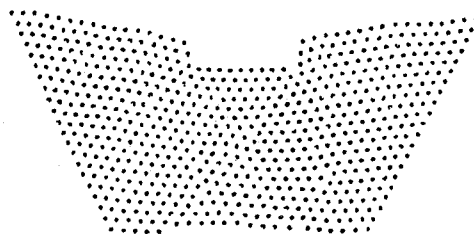
$t = 12.5t_0$



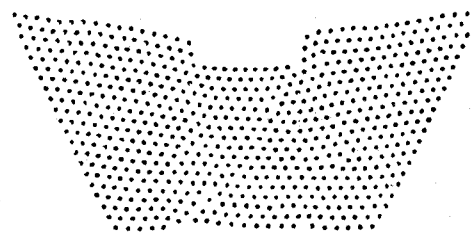
$t = 15.0t_0$



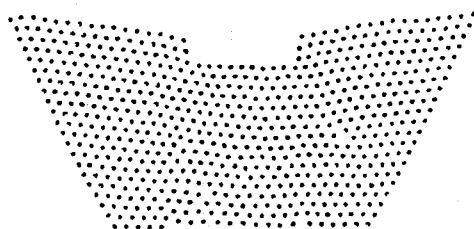
$t = 17.5t_0$



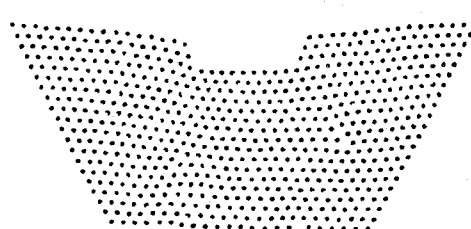
$t = 20.0t_0$



$t = 22.5t_0$



$t = 25.0t_0$



$t = 27.5t_0$

図 II.13 解析結果

解析の手法はき裂先端の解析と同じであるが、剛体パンチに与える荷重は加速度で制御するものとする。拘束加速度は、

$$\frac{d^2u}{dt^2} = -\frac{2a_0\pi}{(t^*)^2} \sin\left(2\pi\frac{t}{t^*}\right) \dots\dots\dots (\text{II}\cdot 24)$$

で与えられ、次の変位拘束を実現させる (図 II-12)。

$$u = -\frac{a_0}{t^*} \left\{ t - \frac{2\pi}{t^*} \sin\left(2\pi\frac{t}{t^*}\right) \right\} \dots\dots\dots (\text{II}\cdot 25)$$

ここでは、 $a_0 = 0.1500 \times 10^{-7}$, $\Delta t = 0.1984 \times 10^{-14} = 0.005t_0$ s, $t^* = 0.4961 \times 10^{-11} = 2500\Delta t$ s として解析を行ない、この解析では緩和計算を $400\Delta t$ 行なう。

解析によって求めた原子の時間変化の様子を図 II-13 に示す。パンチが進行するとパンチの角に接したところから転位が発生し、徐々に移動していくのがわかる。また、パンチの下の部分で、パンチと接する原子の列を一辺とする正三角形領域の原子はパンチとの相対的な位置を変えずに変形している。

II-3 結 言

ここでは、分子動力学法を用いるときに問題となる境界条件の与え方として分子動力学法と有限要素法を統一的に扱う方法と適用例を示した。

き裂の問題ではき裂の進展における転位の発生などを計算機上で再現することができ、パンチの押し込みの問題では転位の移動や転位の合体などを再現できた。これらは、定性的には妥当な結果である。

しかし、本来の目的である MD 法と有限要素法の結合という点では、問題が残されている。つまり、転位が境界付近で停留していることからわかるように MD 法と非線形ばねモデルが完全には等価になっていないことである。この問題点は、MD 領域の形状を円に近づけて非線形ばねモデルとの境界をなめらかにすることと、非線形ばねモデル領域での力の計算方法を変更することで改善されると思われる。

上に述べたような問題点は残されているが、原子モデルの境界を直接拘束する方法に比べて境界の変形の自由度は増しており、より現実に近いシミュレーションが行なえると考える。

付録(II) の文献

- (1) Mullins, M., Computer Simulation of Fracture using Long Range Pair Potentials, *Acta Met.*, **32**-3(1984), 381-388.
- (2) Mullins, M., Atomic Simulation of Cracks under Mixed Mode Loading, *Int.J.Fract.*, **24**(1984), 189-196.
- (3) Kohlhoff, S., Gumbsch, P., and Fishmeister, H.F., Crack Propagation in b.c.c Crystals Studied with a Combined Finite-Element and Atomistic Model, *Philos.Mag.,A*, **64**-4(1991), 851-878.
- (4) Ashurst, W.T. and Hoover, W.G., Microscopic Fracture Studies in the Two-Dimensional Triangular Lattice, *Phys.Rev.,B*, **14**-4(1976), 1465-1473.
- (5) Argyris, J.H. and Scharpf, D.W., A Sequel to Technical Note 13: The Curved Tetrahedronal and Triangular Elements TEC and TRIC for the Matrix Displacement Method, *Aero.J.R.Aero.Soc.*, **73**(1969), 55-65.
- (6) Argyris, J.H. and Scharpf, D.W., Some General Considerations on the Natural Mode Technique Part I. Small Displacements, *Aero.J.R.Aero.Soc.*, **73**(1969), 218-226.
- (7) Argyris, J.H. and Scharpf, D.W., Some General Considerations on the Natural Mode Technique Part II. Large Displacements, *Aero.J.R.Aero.Soc.*, **73**(1969), 361-368.
- (8) 寺本孝司, FEM-MD 結合解法のための有限要素プログラムの開発, 大阪大学工学部機械工学科特別研究, (1991).
- (9) 北川 浩・中谷彰宏・寺本孝司, FEM-MD 結合解法のための有限要素プログラムの開発, 日本機械学会関西学生会平成 2 年度卒業研究発表講演会前刷集 (1991-3), 11.
- (10) 瀬口靖幸・北川 浩・富田佳宏, 有限要素法の基礎, (1984), 日刊工業新聞社.
- (11) Johnson, R.A., Interstitials and Vacancies in Alpha Iron, *Phys.Rev.*, **134**-5A(1964), A1329-A1336.
- (12) Sieradzki, K., Dienes, G.J., Paskin, A., and Massoumzadeh, B., Atomistics of Crack Propagation, *Acta Met.*, **36**-3(1988), 651-663.

付録 (III) 粒界と転位の相互干渉の MD 解析

金属多結晶材料は異なる配向を持つ結晶粒の集合体であり、その強度評価に際しては、結晶粒界の強度評価が重要である。

粒内で生じるすべりが、粒界と交差する場合、(1) 結晶粒界をこえて伝ばする、(2) すべりによる転位が粒界に吸収され粒界すべりを助長する、(3) 転位が粒界によって妨害されてき裂核が発生する、などの現象の諸形態が考えられる。ここでは、このような現象の最も微視的な素過程と考えられる結晶粒界と転位の相互干渉作用に対して分子動力学解析を行ない検討を加える。一般に結晶粒界は複雑な構造を有していると考えられるが、ここでは、3 種類の対称傾角粒界と、らせん転位との相互作用について調べ結果について考察する^{(1)~(3)}。

III-1 解析モデルおよび方法

III-1-1 解析モデル

原子間の相互作用が N -body Finnis-Sinclair ポテンシャル⁽⁴⁾ によって特性づけられる FCC 金属 (銅) 結晶体を考える。

双晶境界である $\Sigma = 3$ 粒界と、 $\Theta = 31.59^\circ (\Sigma = 27)$ 、 $\Theta = 50.48^\circ (\Sigma = 11)$ のミスオリエンテーションを有する粒界の構造単位⁽⁵⁾となっている⁽⁶⁾ $\Sigma = 27$ 粒界と $\Sigma = 11$ 粒界を考える (対称傾角粒界と Θ については図 III-1、 Σ 値については文献⁽⁷⁾ 参照)。

計算の基本ブロックの大きさは図 III-2 のように、傾角軸 (つまり $[110]$ 方向) に垂直な面内に $40b \times 40b$ (b は Burgers ベクトルの大きさ)、平行な方向に b の領域をとる。傾角軸に沿った方向には周期境界条件を適用する。

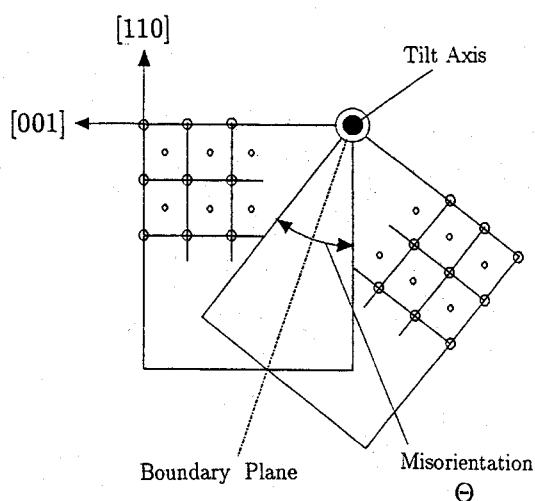


図 III-1 対称傾角粒界

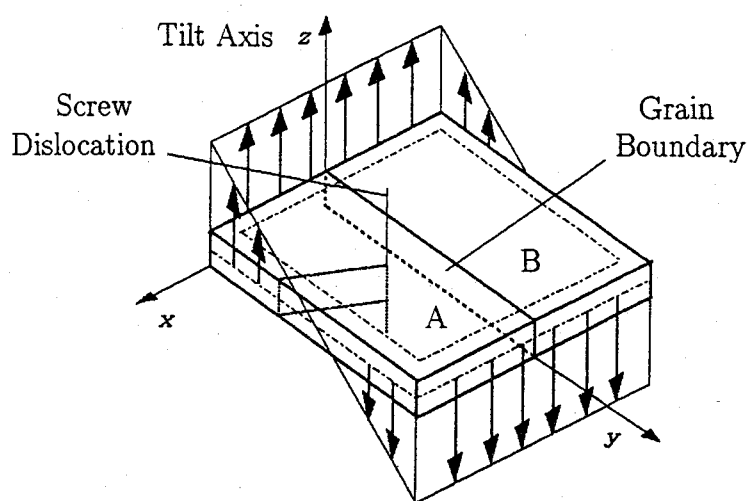


図 III-2 解析領域の図

III-1-2 解析方法

緩和計算

完全結晶とそれを対称傾角粒界のミスオリエンテーションの角度だけ回転させたものと粒界面で接合させ粒界をモデル化し、粒界の安定な構造を得るために基本ブロックの境界部分を固定し、50K を設定温度として温度一定の分子動力学解析を行なう。

このように得られた原子配置に対し、線形弾性解に基づいて原子を変位させ、Burgers ベクトル $b = \sqrt{2}/2a_0$ の大きさのらせん転位を導入する (図 III-2)．変位させた転位芯近傍の原子は、設定した初期条件によって有限温度で必ずしも安定な原子配置ではないので再び温度一定の条件 (50K) のもとで緩和を行なう．

せん断ひずみの負荷

$+z$ 方向の Burgers ベクトル $b = (0, 0, b_z)$ を持つらせん転位が、

$$P = \begin{pmatrix} \sigma_x & \tau_{xy} & \tau_{zx} \\ & \sigma_y & \tau_{yz} \\ \text{Sym.} & & \sigma_z \end{pmatrix} \dots\dots\dots (III-1)$$

で表わされるテンソル P の弾性応力場中にあるとすると、転位線に平行で転位と同じ向きを持った単位ベクトルは、 $l = (0, 0, 1)$ であるから、このらせん転位にはたらく力 f は、Peach-Koehler の式により、

$$f = (Pb) \times l = (b_z \tau_{yz}, -b_z \tau_{zx}, 0) \dots\dots\dots (III-2)$$

となる．これより、らせん転位を粒界に向けて動かすために必要なせん断応力の比およびそれをせん断ひずみに換算した値を求めることができ、さらに、せん断ひずみを1ステップあたりの変位速度 (図 III-2 の矢印に対応) に換算したものを基本ブロック中の変位を拘束する境界原子に加える．計算の諸元を表 III-1 に示す．

III-2 解析結果と考察

ここでは、解析結果に対して、らせん転位の芯付近のひずみないしは応力を調べるために、4-4 節で用いた相対変位図⁽⁸⁾と各原子の応力ベクトル図⁽⁹⁾を用いて検討する．ここで、応力ベクトル図の矢印は、格子定数 a_0 と同じ長さの場合に $1.0 \times 10^{10} \text{Pa}$ の値となるように長さを決めている．

III-2-1 粒界および転位の緩和

粒界の緩和計算においては、 $\Sigma = 3, \Sigma = 11$ では粒界での大きな変化は見られないが、 $\Sigma = 27$ 粒界では粒界を構成するユニットの中の一つの原子が z 方向に大き

表 III.1 計算の概要

		unit	Σ Value		
			$\Sigma = 3$	$\Sigma = 27$	$\Sigma = 11$
The Number of Atoms			2303	2323	2339
The Number of Atoms with Fixed Displacement	Relaxation			422	452
	Shear		399	437	469
Maximum Shear Stress Rate		Pa/s	2.5×10^{20}		
Time Step		s	2.0×10^{-15}		
Relaxation Time		s	2000×10^{-15}		
Interatomic Potential			N -body FS Potential		
Mass of Atom		kg	1.055223×10^{-25}		

く変位する。 $\Sigma = 27$ 粒界の相対変位図と応力ベクトル図を図 III.3 に示す。ユニット中に配置される 2 原子に局所的な逆向きの応力が生じているのがわかる。

一方、転位は緩和後、いずれのケースにおいても転位芯はすべり面上に伸び、積層欠陥を生じ、次式のように、Shockley の半転位に分解する⁽¹⁰⁾。

$$\frac{a_0}{2}[110] = \frac{a_0}{6}[121] + \frac{a_0}{6}[21\bar{1}] \quad \dots\dots\dots (III.3)$$

十分な緩和後、転位芯は約 $2 \sim 6a_0$ の長さに伸びる。

III.2.2 粒界と転位の相互干渉

$\Sigma = 3$ 粒界の場合には、転位芯は緩和後、 y ($[111]$) 方向に伸び、らせん転位はせん断応力 1000MPa の負荷で粒界を抜け、結晶粒 B に伝達する。粒界を抜ける際、芯の幅が $1a_0$ 以下に縮小し、結晶粒 B に再び広がる。この様子を図 III.4(a) に相対変位図で示す。 $\Sigma = 3$ 粒界を通り抜ける際の転位のまわりの原子の応力ベクトル (図 III.4(b)) は、転位が単一結晶粒を移動する際の応力ベクトルと向きや大きさなど、あまり変化がない。収縮した転位の芯の領域の原子の応力ベクトルの大きさは芯が部分転位に分かれた状態よりも大きくなっている。

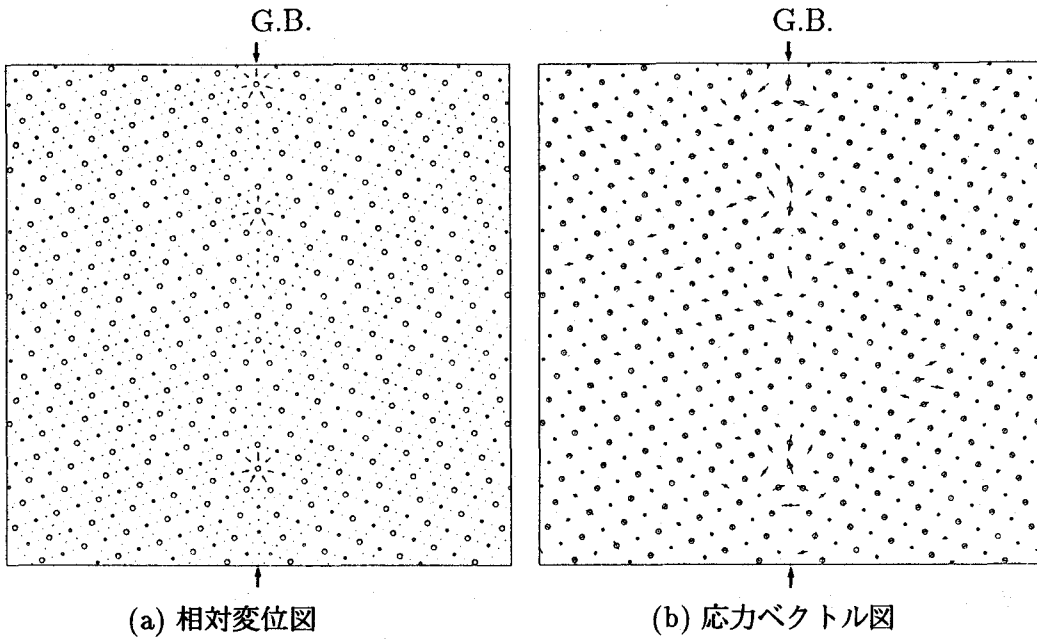


図 III-3 $\Sigma = 27$ 粒界の緩和

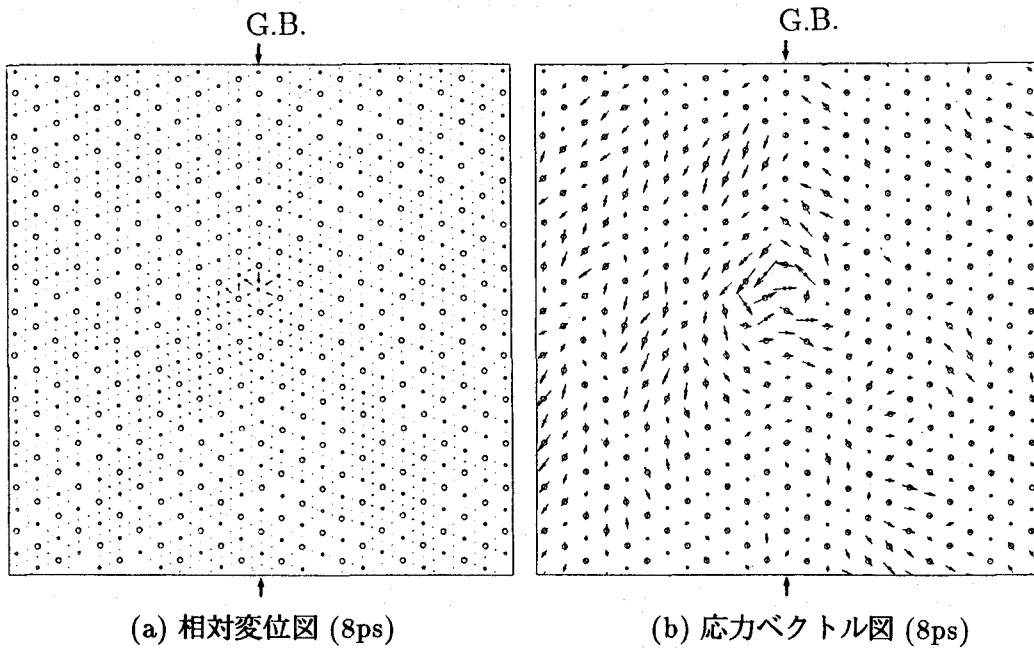


図 III-4 相対変位図と応力ベクトル図 ($\Sigma = 3$)

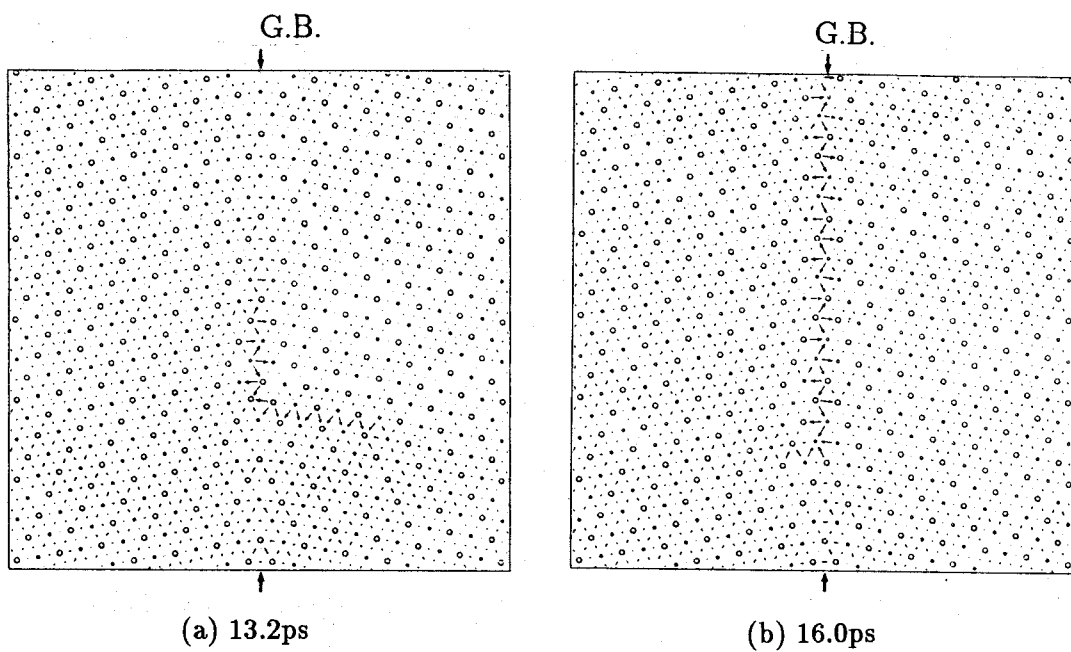


図 III-5 相対変位図 ($\Sigma = 11$)

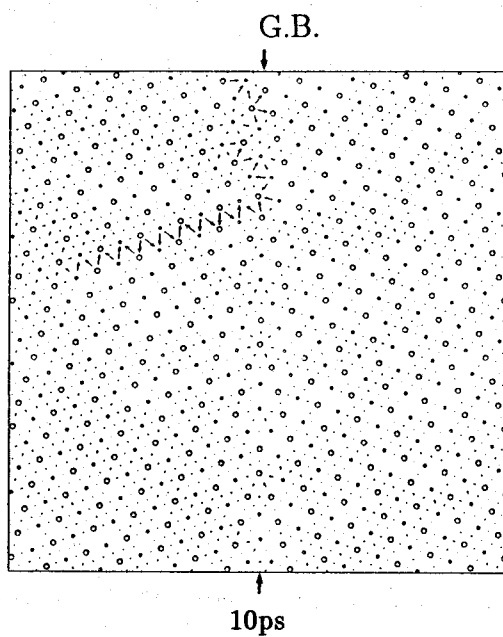


図 III-6 相対変位図 ($\Sigma = 27$)

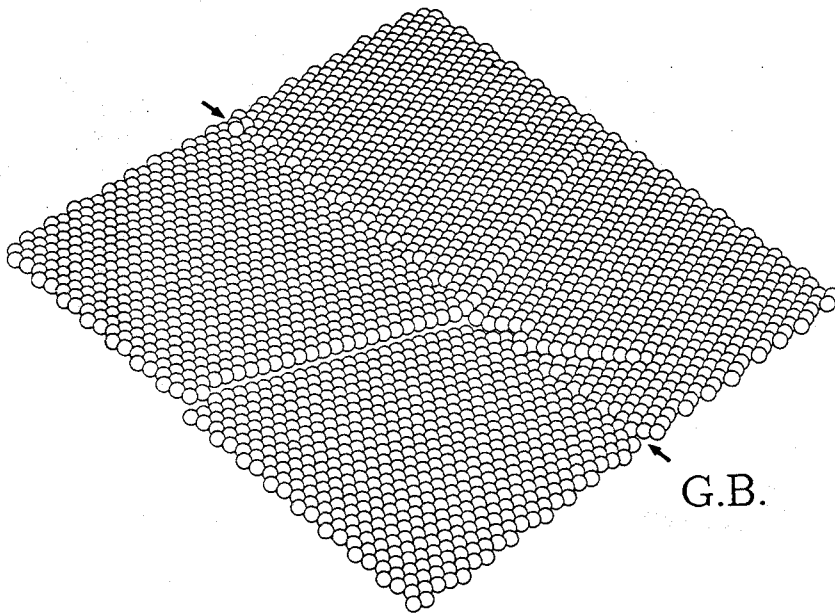


図 III-7 原子の z 方向変位 ($\Sigma = 27$)

$\Sigma = 11$ 粒界の場合に転位が粒界に衝突する様子を図 III-5 に相対変位図で示す。らせん転位は、せん断応力 1000MPa で粒界に向かって動き出し、粒界に入ることによって粒界に段が生じる (転位の吸収)。ひずみ量 0.052 までせん断を加えたところでも、転位の伝達は見られない。

図 III-6 は $\Sigma = 27$ 粒界の場合の温度 50K で緩和後の転位の挙動を示す相対変位図である。また、図 III-7 は原子の z 方向変位を三次元的に示した図である。 $\Sigma = 27$ 粒界の場合で、緩和温度 50K の場合は、粒界に粒界転位と見られる変位を生じ、その部分で大きく段を持ち、粒界内にしばらくとどまった後、いくつかの転位が異なった位置から結晶粒 B の中へ伝達する。せん断応力 2000MPa では粒界から出た転位は完全な格子転位とはならないが、粒界を端に持つ長い半転位として観察される。

III-3 結 言

結晶粒界とらせん転位の相互干渉の分子動力学解析を行ない、

1. らせん転位は緩和計算によって Shockley の半転位に分かれる。せん断ひずみを適当な方向に負荷することにより移動する。
2. らせん転位は、 $\Sigma = 3$, $\Sigma = 27$ 粒界を通り抜けるが、 $\Sigma = 11$ 粒界には吸収される。

などの結果を得た。

付録 (III) の文献

- (1) 齋藤賢一, 結晶粒界の微視的変形挙動の分子動力学シミュレーション, 大阪大学工学部機械工学科特別研究, (1992).
- (2) 北川 浩・中谷彰宏・齋藤賢一, 粒界と転位の相互作用の分子動力学シミュレーション, 日本機械学会関西学生会平成3年度卒業研究発表講演会前刷集, (1992-3), 11.
- (3) 北川 浩・中谷彰宏・齋藤賢一, 粒界と転位の相互作用の分子動力学シミュレーション, MD サマースクール'92 資料集, (1992-8), 73-78.
- (4) Ackland, G.J., Tichy, G., Vitek, V., and Finnis, M.W., Simple N -Body Potentials for the Noble Metals and Nickel, *Philos.Mag., A*, **56-6**(1987), 735-756.
- (5) Sutton, A.P. and Vitek, V., On the Structure of Tilt Grain Boundaries in Cubic Metals 1. Symmetrical Tilt Boundaries, *Philos.Trans.R.Soc.Lond., A*, **309**(1983), 1-36.
- (6) Pestman, B.J., DeHosson, J.Th.M., Vitek, V., and Schapink, F.W., Interaction Between Lattice Dislocations and Grain Boundaries in f.c.c. and Ordered Compounds :a Computer Simulation, *Philos.Mag., A*, **64-4**(1991), 951-969.
- (7) 石田洋一, コインシデンス格子とゼロ格子 (粒界・相界面規則構造の理論), 日本金属学会会報, **22-2**(1983), 80-84.
- (8) Vitek, V., Perrin, R.C., and Bowen, D.K., The Core Structure of $1/2 \langle 111 \rangle$ Screw Dislocation in B.C.C. Crystals, *Philos.Mag., A*, **21**(1970), 1049-1073.
- (9) Basinski, Z.S., Duesbery, M.S., and Taylor, R., Influence of Shear Stress on Screw Dislocations in a Model Sodium Lattice, *Can.J.Phys.*, **49**(1971), 2160-2180.
- (10) 鈴木秀次, 転位論入門, (1967), 156, アグネ.

謝 辞

本研究は著者が大阪大学大学院工学研究科に在学中に大阪大学工学部 北川 浩 教授のご指導のもと行なったものです。北川 浩 教授 には、本論文の研究テーマの設定から終始一貫して懇切丁寧なご指導を賜わり、激励いただきましたことに深い敬意と心からの謝意を表します。

本論文を作成するにあたり懇切なご教示、貴重なご助言を賜わりました大阪大学工学部 久保 司郎 教授、土屋 和雄 教授、片岡 俊彦 教授 に深く感謝いたします。

著者が所属する研究室の先生方、とくに、仲町 英治 助教授、澁谷 陽二 学内講師、井上 豊 助手(現、溶接協会) には、終始適切なご助言と激励を賜わり、深く感謝いたします。

大路 清嗣 教授、城野 政弘 教授をはじめ機械系の先生方、ならびに、大阪大学 菊川 眞 名誉教授には、ご助言と激励を賜わり、深く感謝いたします。

また、問題点の指摘、文献紹介を含む有益な助言をいただいた大学院の 劉 兵 氏に心から感謝いたします。

本研究において、第3章は 小西 晴之 氏(現、神戸製鋼所)、付録(II)は 寺本 孝司 君(現、大学院)、付録(III)は 齋藤 賢一 君(現、大学院)の研究によるところが大きく、また、定式化と計算機プログラム開発では、宇治田 寧 氏(現、鉄道総合研究所)、阪本 正悟 氏(現、神戸製鋼所)のご協力が大きく、厚く御礼申し上げます。

最後に、論文をまとめる際にご助言をいただいた大阪大学工学部 藤田 喜久雄 助手、数々の便宜をはかっていただいた 松川 理恵子 事務官に御礼申し上げますとともに、野村 昌孝 氏(現、大学院)をはじめ固体力学研究室卒業生の方々の励ましと、大学院の 尾方 成信 君 ほか研究室の皆さんのご協力のもと十分な環境で研究を進めることができましたことに感謝いたします。

関連発表論文

発表論文

- 北川 浩・小西晴之・中谷彰宏,
結晶構造体に対する計算力学モデルの検討
([I] 結晶すべりモデルを用いる延性き裂の開口挙動の解析),
日本機械学会論文集, 57 巻, 541 号, A 編 (1990), pp.1986-1991. (第 3 章)
- 北川 浩・中谷彰宏,
結晶構造体に対する計算力学モデルの検討
(第 2 報, 面外せん断荷重下のき裂先端の微視的変形場の分子動力学シミュレーション),
日本機械学会論文集, 59 巻, 557 号, A 編 (1993), 掲載予定. (第 4 章)
- 北川 浩・中谷彰宏・渋谷陽二,
結晶構造体に対する計算力学モデルの検討
(第 3 報, モード II き裂先端場の原子構造の解析),
日本機械学会論文集, A 編, 投稿中. (第 4 章)

国際会議

- Kitagawa, H. and Nakatani, A.,
"Crystal Plasticity Model and Molecular Dynamics (Numerical Simulation of Plane Strain Inhomogeneous Deformation)",
Constitutive Relations for Finite Deformation of Polycrystalline Metals
(ed. by Wang, R. and Drucker, D.C.) *Proceedings of IUTAM Symposium, Beijing, China, July 1991*, (1992), pp.220-233, Springer Verlag. (第 4 章)
- Kitagawa, H. and Nakatani, A.,
"Microstructural Aspects of Crack Extension in a Crystalline Material (A Molecular Dynamic Study)",
Mechanical Behaviour of Materials - VI (ed. by Jono, M. and Inoue, T.)
Proceedings of the Sixth International Conference, Kyoto, Japan, 29 July - 2 August 1991, (1991), pp.111 - 116, Pergamon Press. (第 4 章)
- Kitagawa, H. and Nakatani, A.,
"Crack tip field in crystalline material (Counterpart in Atomistic Simulation of Singularity Obtained by Crystal Plasticity Model)",
XVIIIth International Congress of Theoretical and Applied Mechanics, Haifa, Israel, 22-28 August 1992. (第 4 章)
- Kitagawa, H. and Nakatani, A.,
"Atomic Structure in Crack-tip Field of Crystalline Material (A Molecular Dynamics Simulation)", *ICES'92 (International Conference on Computa-*

tional Engineering Science), HongKong, 17 - 22, December 1992 ,
発表予定. (第4章)

口頭発表

- 北川 浩・仲町英治・渋谷陽二・中谷彰宏・阪本正悟,
金属結晶体の非弾性応答の分子動力学シミュレーション,
日本機械学会関西支部第65期定時総会講演会講演概要集(要旨講演), No.904-1
(1990-3), pp.120-121. (第2章)
- 中谷彰宏・北川 浩,
bcc 結晶体中のき裂進展の分子動力学シミュレーション,
日本機械学会第3回計算力学講演会講演論文集, No.900-69(1990-10),
pp.83-84. (第4章)
- 北川 浩・中谷彰宏,
面外すべりを許容する結晶モデルによる平面ひずみ解析と分子動力学シミュレーション,
第14回NCP研究会・機械の強度と形態研究懇話会シンポジウム論文集,
(1991-1), pp.156-161. (第4章)
- 北川 浩・中谷彰宏,
結晶体中のき裂先端場の微視的変形機構
(分子動力学計算と結晶すべり有限要素解析の比較),
第68期通常総会講演会講演論文集, No.910-17, Vol.A (1991-3, 4),
pp.474-476. (第4章)
- 北川 浩・中谷彰宏,
き裂先端場の分子動力学シミュレーションによる境界条件の取り扱いの検討,
日本機械学会第4回計算力学講演会講演論文集, No.910-79 (1991-11),
pp.103-104. (第4章)
- 北川 浩・中谷彰宏,
分子動力学法により得られるき裂先端場の検討,
日本機械学会関西支部第250回講演会講演論文集, No.914-3 (1991-11),
pp.75-77. (第4章)
- 北川 浩・中谷彰宏,
分子モデルと結晶連続体モデル
(き裂先端解析結果の比較),
応用力学連合講演会講演論文集, (1992-1). (第4章)
- 北川 浩・中谷彰宏,
面外せん断荷重下のき裂先端の微視的変形場の分子動力学シミュレーション,
日本機械学会関西支部第67期定時総会講演会講演論文集, No.924-1 (1992-3),
pp.175-177. (第4章)
- 北川 浩・中谷彰宏,
き裂発生機構の分子動力学シミュレーションによる検討,
第36回材料研究連合講演会前刷集, (1992-9), pp.167-168. (第4章)

- 北川 浩・中谷彰宏,
面内せん断形き裂先端のすべり変形のシミュレーション
(結晶塑性論を用いた有限要素解析と分子動力学シミュレーション),
日本機械学会第5回計算力学講演会講演論文集, No.920-92 (1992-11),
pp.243-244. (第4章)

その他参考となる口頭発表

- 北川 浩・中谷彰宏,
分子動力学と計算塑性力学
(分子動力学は塑性現象の研究手段たり得るか),
第78回NCP研究会・第35回機械の強度と形態研究懇話会資料, (1989-9).
(第1章)
- 北川 浩・中谷彰宏,
結晶構造体の力学特性評価とマイクロダイナミックス,
第139回材料力学談話会資料, (1990-6). (第2, 4章)
- 中谷彰宏,
パソコンを用いる分子動力学シミュレーションプログラムの紹介,
計算工学会資料, (1990-12). (第2章)
- 北川 浩・中谷彰宏,
分子動力学のシミュレーションについての基本的文献の紹介,
計算工学会資料, MDN-2-4.(1991-8). (第1章)
- 北川 浩・中谷彰宏,
文献紹介, 分子動力学法の破壊力学への応用,
日本機械学会, P-SC211 分科会資料, MDS-1-3.(1991-10). (第1章)
- 北川 浩・中谷彰宏,
面外せん断荷重下のき裂先端の微視的変形場の分子動力学シミュレーション,
MD サマースクール'92 資料集, (1992-8), pp.79-85. (第4章)