

マイクロ-ナノメカニクスによる材料強度評価に関する研究

古谷, 佳之
Graduate School of Engineering, Kyushu University

<https://doi.org/10.11501/3166761>

出版情報 : 九州大学, 1999, 博士 (工学), 課程博士
バージョン :
権利関係 :

マイクロナノメカニクスによる材料強度
評価に関する研究

吉谷佳之

①

マイクロナノメカニクスによる材料強度
評価に関する研究

平成 11 年

古谷 佳之

目次

1 序論	1
1.1 はじめに	1
1.2 材料の脆性破壊に関する過去の研究	4
1.3 本研究の目的と論文の内容	7
第1章の参考文献	8
2 分子動力学-連続体力学連結手法	12
2.1 諸言	12
2.2 分子動力学	14
2.2.1 分子動力学の基礎的な概念	14
2.2.2 原子間ポテンシャル	14
2.2.3 数値積分の方法 (Verlet のアルゴリズム)	15
2.2.4 温度の計算と温度制御	16
2.2.5 運動量補正	17
2.2.6 周期境界条件	17
2.2.7 分子動力学の特徴	17
2.3 マイクロメカニクス	19
2.3.1 異方性の弾性理論	19
2.3.2 き裂を有する無限板に一様な引張り応力が作用するときの解	20
2.3.3 転位とき裂を有する無限板の解	22
2.3.4 き裂のある無限板に集中力が働く解	25
2.4 分子動力学/マイクロメカニクス接合モデル	29
2.4.1 基本概念	29

2.4.2	準静的解析のための条件	31
2.4.3	体積力を用いたフレキシブル境界条件	32
2.4.4	分子動力学の転位から連続体の転位への変換	34
2.4.5	転位の平衡位置の計算	37
2.4.6	分子動力学領域の移動	38
2.4.7	弾性定数とパイエルス応力の計算	40
2.5	まとめ	44
	第2章の参考文献	45
3	き裂進展のシミュレーション結果および接合モデルの妥当性の検討	47
3.1	諸言	47
3.2	α -鉄を対象としたシミュレーション結果	49
3.2.1	シミュレーションの初期条件	49
3.2.2	分子動力学領域での初期き裂の導入法に対する検討	53
3.2.3	変位固定境界条件によるシミュレーション結果	55
3.2.4	体積力を用いたフレキシブル境界条件によるシミュレーション結果	62
3.2.5	MD 領域移動モデルを用いたシミュレーション結果	64
3.2.6	き裂進展のシミュレーションと Rice の解との比較	67
3.3	単結晶 NaCl を対象としたシミュレーション結果	71
3.3.1	シミュレーションの初期条件	71
3.3.2	き裂進展のシミュレーション結果	74
3.4	単結晶タングステンを対象としたシミュレーション結果	76
3.4.1	シミュレーションの初期条件	76
3.4.2	2 体間ポテンシャルと EAM ポテンシャルの比較	80
3.4.3	脆性破壊のシミュレーション結果 (1)	84
3.4.4	{121} 面に沿ったへき開割れに対する対応	88
3.4.5	脆性破壊のシミュレーション結果 (2)	90
3.5	まとめ	96

第3章の参考文献	101
4 脆性破壊と脆性延性遷移のメカニズムに対する考察	103
4.1 諸言	103
4.2 各温度における脆性破壊のシミュレーション結果	106
4.3 脆性破壊のメカニズム	114
4.4 脆性延性遷移に対する考察	118
4.5 まとめ	120
第4章の参考文献	122
5 結論	123
謝辞	127
付録 I	128
I.1 応力拡大係数と破壊靱性値	128
I.2 Dugdale モデル	128
I.3 Rice の解	132
第I章の参考文献	134

第 1 章 序論

1.1 はじめに

第二次大戦末期に弾道計算を目的として大型計算機第一号の EINAC がアメリカで開発された。それから約半世紀の間に、スーパーコンピュータの出現に象徴されるように、計算機はハードとソフトの両面において飛躍的な発展を遂げた。この計算機の飛躍的な発展を背景にコンピュータシミュレーション^{(1)~(5)} という自然科学研究の新しい方法論が出現した。シミュレーションとは「模擬する」という意味である。つまり、コンピュータシミュレーションとは計算機の中で現象を再現することにより、何らかの情報を得ようとする手法である。このコンピュータシミュレーションという言葉は様々な分野で使われており、その分野によって内容や意味合いが微妙に違うのだが、本論文では特に原子・分子系のシミュレーションに限定して話しを進める。原子・分子系のシミュレーションは近年において特に進歩した分野といえる。この進歩の端緒は化学の分野で起こった。化学の分野で分子軌道法 (MO)^{(6),(7)} が活用されるようになり、実際には存在しない分子の性質までを予測できることが示されたからである。現在では、新しい薬品の設計はコンピュータシミュレーションなしには考えられないほどであり、DNA のような巨大な分子のシミュレーションもスーパーコンピュータを駆使して行なわれている。

分子軌道法は分子の電子構造を解析するのにしばしば用いられ、半経験的手法と非経験的 (第一原理) 手法の二つがある。これに対して、対象とする系を原子や分子の集合体とみなし、原子や分子の動的な運動から系の挙動を解析する手法として分子動力学 (MD) がある。分子動力学に関しては半経験的手法である古典分子動力学が主流であったが、非経験的手法である第一原理分子動力学⁽⁸⁾ も最近考案された。古典分子動力学は基本的にはニュートンの運動方程式を解くだけの単純なものであるが、そのポテンシャル関数をあらかじめ決定しておく必要があるところに問題がある。原子間の位置関係に依存するポテンシャルを完全に記述することは事実上不可能だからである。一方、第一原理分子動力学ではこのポ

テンシャル関数の問題はないが、こちらのほうはその計算量が膨大なため最新のスーパーコンピュータを駆使しても数百個程度の原子しか扱えないことが問題となる。以上の手法は決定論的な手法である。これに対して確率論的な手法がモンテカルロ法である。モンテカルロ法は原子・分子の詳細な振舞いには目をつぶり微視的な系を時間・空間的に粗視化して系全体としての特徴を導き出そうとする手法で、より巨視的な系のより長時間の時間発展をシミュレートできる。

それではこれらの新しい手法が材料強度学の分野においてどのように貢献し得るのだろうか。材料強度の研究はその複雑さから理論よりも実験主導で行なわれてきた。その中で、材料の強度は内在する欠陥の特性によって決まることが明らかになってきた。欠陥の中でも特に転位とき裂は重要で、各々、転位論⁽⁹⁾、破壊力学⁽¹⁰⁾という学問分野を形成している。この転位の増殖や運動に関する問題やき裂先端での転位発生やへき開割れといった問題はまさに原子レベルでの話しであり、問題の本質を理解するためには原子レベルで現象を理解する必要がある。しかし、実験的な手法で原子レベルの現象を理解することは困難である。仮に透過電子顕微鏡やSTMを使ってき裂先端での原子配置や転位芯の構造を観察できたとしても、そのごく近傍での応力分布やポテンシャルエネルギーの分布を知ることは不可能である。また、薄膜や表面の観察ができたとしても厚い材料の内部の情報を得ることは極めて困難である。そこに原子系シミュレーションの利用価値がある。原子系シミュレーションを用いることにより原子レベルで現象を確認できるだけでなく、応力やポテンシャルエネルギーなど様々な情報を入手できる。また、厚い材料の内部の情報を得ることができ、内部での現象を3次的に可視化することも可能である。これらの点に期待が集まり、最近では材料強度の研究にも原子系シミュレーションの適用を試みる動きが盛んになってきた⁽¹¹⁾。

原子系シミュレーションの具体的な適用例についてしてみると、分子軌道法に関しては孤立系のシミュレーションに適しており分子構造の解析がその主たる用途なので、材料強度の研究では原子間ポテンシャルのパラメータの決定に用いる程度で直接的に問題のシミュレーションに用いることはほとんどない。しかし、その他の手法に関しては比較的盛んに適用が試みられており、特に古典分子動力学の適用例が多い。古典分子動力学は、き裂先端でのへき開割れや転位発生に関するシミュレーション^{(12)~(17)}、転位芯の構造や転位の運動に

関するシミュレーション^{(18)~(20)}, 結晶粒界に関するシミュレーション^{(21),(22)} やナノスケール試験片の強度に関するシミュレーション⁽²³⁾ などに適用されている。古典分子動力学はその精度の面では不満が残るものの, アルゴリズムが簡単な上に比較的多くの原子を取り扱えるため材料強度の研究には適用しやすい。また, き裂や転位を取り扱う際には古典分子動力学と連続体力学を組み合わせるマクロなスケールでシミュレーションを行なうという興味深い手法が用いられている^{(12)~(19)}。これに対し第一原理分子動力学は, 対応粒界の粒界エネルギーの計算^{(24),(25)} や結晶の理想強度(完全結晶の強度)の計算⁽²⁶⁾ に適用した例が報告されている。第一原理分子動力学にはポテンシャル関数の問題がないためその精度の面ではある程度期待できるが, 扱える原子の数が極めて少ないのでその適用は限られている。また, バンド計算に基づく手法なので基本セルの全方位に対して周期境界を仮定する必要があり, バルクの計算しかできないという点も適用範囲を狭める一因となっている。確率論的手法であるモンテカルロ法も比較的広範に適用が試みられている。モンテカルロ法はパターン形成のシミュレーションでその力を発揮する。材料強度の分野では, クリープの際の微小き裂の発生過程のシミュレーション^{(27),(28)} などに用いられている。これらの適用例の多くはその結果の妥当性が十分に検討されていないという問題がある。シミュレーションを行なう際には実験結果との比較などを通してその妥当性を十分に確かめる必要があるが, 現状ではそういった試みはほとんどされていない。従って, シミュレーションの妥当性や信頼性に関して疑問を抱く人が多いのも事実である。

以上のことから材料強度研究の分野における原子系シミュレーションの有用性は今だ未知数だが, その可能性は十分に期待できる。特に古典分子動力学と連続体力学の連結手法は未完成ではあるが興味深い。原子系シミュレーションを用いてマクロな解析を行なうためには周期境界条件の適用が必要不可欠になるが, 連続体との連結手法を用いれば周期境界条件なしでマクロな解析が可能となる。これによりバルクの特長評価だけでなくき裂先端や転位芯といった特異点周りの特長評価も可能となり, 原子系シミュレーションの適用範囲が飛躍的に広がることが期待できる。その際の解析の対象としてはき裂進展の問題が有意義かつ現実的である。き裂進展に伴う脆性破壊の問題はそのメカニズムの解明が切望されているにもかかわらず, き裂先端での転位発生やへき開割れなどに関して未解明な部分が

多い。また、き裂先端という明確な特異点が存在し、連結手法を用いる際にそのモデル化が容易である。従って、本研究ではき裂進展の問題を対象として古典分子動力学と連続体力学の連結手法を開発し、それを用いて脆性破壊のメカニズムの解明を目指す。その際、シミュレーションの手法と結果の妥当性には常に注意を払う必要があり、実験結果との比較等を通して妥当性を十分に検討することが重要である。

1.2 材料の脆性破壊に関する過去の研究

脆性破壊の研究の歴史は Griffith の理論⁽²⁹⁾ から始まったといつてよい。Griffith は表面エネルギーの概念を導入することにより、完全弾性体において脆性き裂進展が開始する条件を導くことに成功した。これは理想破壊靱性値とよばれ、ガラスを対象とした実験結果と一致する。その後、Irwin と Orowan によって修正が加えられ塑性仕事の項が付け加えられた^{(30),(31)}。しかし、この塑性仕事の項を定量的に評価しようとする問題が多く、実際のモデルを定式化するのは困難であった。

Irwin と Orowan がマクロな現象論的に塑性変形の影響を評価しようとしたのに対し、き裂の前方に連続的に分布させた転位群により塑性変形の影響を評価しようとした連続分布転位論 (BCS 理論)⁽³²⁾ も提案された。これは応力の釣合から連続的な転位分布を求めるものだが、この理論ではき裂先端まで塑性域が存在するのでき裂先端での局所的な応力拡大係数が $k_I=0$ となってしまういき裂が進展しない。ところが実際には、き裂先端には無転位領域-Dislocation Free Zone (DFZ)⁽³³⁾ が存在し $k_I=0$ とはならない。この事実を受けて Chang と Ohr⁽³⁴⁾ は BCS 理論を修正し、き裂先端での転位発生に対し何らかの障害が存在すれば DFZ が形成されることを示した。

このき裂先端からの転位発生に対する障害をはじめて定量的に求めたのが Rice と Thomson⁽³⁵⁾ であった。Rice-Thomson 理論ではき裂先端のごく近傍に仮想的に配置した転位を考え、この仮想転位に働く力が転位運動に対する抵抗力を越えると実際に転位が発生するとされた。その後、この理論に修正が加えられ⁽³⁶⁾、原子面間のずれに対するポテンシャルエネルギー関数を考慮することにより、より厳密な形で転位発生の基準が導かれた。Rice-Thomson 理論では、転位発生に対する基準と Griffith の理想破壊靱性値を比較することにより、fcc 金属

が絶対零度でも転位の発生が可能で本質的に延性的であることと、bcc 金属が脆性破壊を起こし得ることをうまく説明した。Rice-Thomson 理論をきっかけにき裂先端からの転位発生について議論されるようになった。その中で Zhou と Thomson⁽³⁷⁾ はき裂に段差 (ledge) がある場合を考え、その際のき裂前縁の特異点から転位が発生するモデルを提案した。このメカニズムでは Rice-Thomson 理論で与えられた基準よりも遥かに低い荷重で転位が発生する。また、リバーパターン⁽³⁸⁾ や同一すべり面上に 10 本程度しか転位が観察されない⁽³⁹⁾ などの実験事実もこのき裂の段差からうまく説明できる。

この種の理論では熱活性化に関する議論が抜けており、温度変化に伴う脆性延性遷移 (BDT) をうまく説明できなかった。ここ 10 年の研究では熱活性化のプロセスと脆性延性遷移に議論の中心が移ってきたように思われる。鉄やタングステンなどの bcc 金属では温度変化に伴う脆性延性遷移が観察され^{(40),(41)}、低温では脆く破壊靱性値が低くなるが高温では破壊靱性値が上昇し、ある臨界温度以上では脆性破壊を起こさなくなる。また、Rice-Thomson 理論では本質的に脆性であるとされた半導体⁽⁴²⁾ やイオン結晶⁽⁴³⁾ でも脆性延性遷移は観察される。現在、この脆性延性遷移のメカニズムに関しては 2 つの説がある⁽⁴⁴⁾。一つは転位の発生過程における熱活性化の影響が原因であるとする説^{(45)~(47)} である。つまり、き裂先端での転位の発生に対する難易度が温度によって変化し、それによって材料の脆性/延性の特性が変化するという主張である。もう一つは転位の易動度が温度によって変化することが原因であるという説^{(48),(49)} である。転位の易動度が温度によって変化すれば時系列的な転位分布が変化し、転位による応力遮蔽効果の様子も変わる。この応力遮蔽効果の変化が脆性延性遷移の原因であるというのが後者の主張である。前者に関する研究では、基本的に Rice-Thomson 流の考え方をもとにき裂先端からの転位発生過程に対する熱活性化の影響を計算しようとしている。後者に関する研究では、き裂先端からの転位の増殖と発生した転位の運動に関するシミュレーション⁽⁴⁸⁾ がなされている。これは、き裂先端で Rice-Thomson の基準等の適当な条件をみたと温度と無関係に転位が発生し、その転位は駆動力である分解せん断応力によって決定される速度で運動するというシミュレーションである。このシミュレーションでは転位の易動度の違いによる応力遮蔽効果の変化が調べられている。最近、このシミュレーションは 3 次元でも行なわれるようになり⁽⁵⁰⁾ 興味深い

結果が得られている。

ここで脆性破壊の研究の現状についてまとめてみると、弾塑性体の脆性破壊のプロセスでは依然として破壊靱性値を定量的に見積もることはできない。Hirschらのシミュレーション⁽⁴⁸⁾を利用すれば原理的には破壊靱性値を見積もることができるが、このシミュレーションでは仮定に基づくあいまいなパラメータが多く、それらを厳密に決定するには膨大な実験データが必要となり、事実上、破壊靱性値を見積もることはできない。また、研究の方向性としては温度の影響に関する議論が盛んで、脆性延性遷移のメカニズムに関する議論が中心となっている。従って、脆性破壊に関する研究を行なう上でのポイントは破壊靱性値の定量的な評価とそれに対する温度の影響の2点ということになる。一方、この問題における原子系シミュレーションの適用例をみてみると次のようなものがある。Kohlhofら^{(14),(15)}は古典分子動力学と有限要素法の連結手法を用いてへき開割れによるき裂進展が結晶方位によって屈曲したり、まっすぐになったりする様子をシミュレートし、転位放出を伴わない完全な脆性破壊のシミュレーションでは破壊靱性値がGriffithの理想破壊靱性値に近い値になることを示した。また、北川ら⁽⁵¹⁾はき裂先端からの転位発生に関するシミュレーションを行ない、シミュレーションでの転位発生に対する臨界応力拡大係数がRiceの基準⁽³⁶⁾と一致することを示した。その他にも転位発生に対する温度の影響を調べた例⁽⁵²⁾や3次元での大規模なシミュレーションを行ないき裂先端から放出された転位がジャンクションを作り、転位線が複雑に絡みながら運動する様子をシミュレートした例⁽⁵³⁾などがある。しかし、これらの適用例をみてみると、き裂先端での転位発生や転位放出を伴わない脆性破壊などに関する議論がほとんどで、放出された転位の易動度に関して議論された例がほとんどない。これは現在提案されている連結手法のほとんどが、き裂先端で発生した転位が古典分子動力学の領域と連続体領域の境界を通過することができないという問題を抱えているためである。従って、発生した転位が古典分子動力学と連続体の境界を通過できるような連結手法を開発し、転位の易動度を議論できるようにすることも研究の重要なポイントとなる。

1.3 本研究の目的と論文の内容

以上のような状況を踏まえて、本研究ではより完成度の高い古典分子動力学と連続体力学の連結手法を開発し、脆性破壊のメカニズムおよびそれに対する温度の影響を明らかにするとともに、破壊靱性値の定量的な評価を目指す。この研究を通して材料強度研究における原子系シミュレーションの有用性を実証し、その適用のための基礎技術を構築する。その際、次の2点について特に注意を払う。

1. き裂先端で発生した転位が古典分子動力学領域と連続体領域の境界を通過できるような連結手法を開発し、脆性破壊のプロセスに対する転位の易動度の影響も考慮できるようにする。
2. シミュレーション結果の妥当性を実験結果との比較等を通して十分に検討し、その信頼性を確認する。

なお、本論文ではこれ以降、古典分子動力学のことを単に分子動力学もしくは MD と呼ぶ。本論文は5つの章と付録から成り、その構成は次のようになっている。序論に続く第2章では、分子動力学および連続体力学として使用するマイクロメカニクスの基礎的な理論について説明した後、本研究で開発した連結手法である分子動力学/マイクロメカニクス接合モデル^{(54)~(58)}について説明する。

第3章では、き裂進展のシミュレーション結果の例を示し、シミュレーション結果の妥当性の検討を行なう。ここでは、 α -鉄^{(54)~(58)}、単結晶 NaCl、単結晶タングステン^{(59),(60),(62)}を対象として転位放出に伴うき裂の開口やへき開割れに伴う脆性き裂進展のシミュレーションを行ない、その妥当性について詳細に検討する。

第4章では、分子動力学/マイクロメカニクス接合モデルを用いて単結晶タングステンを対象として、各温度における脆性破壊のシミュレーションを行なう。そのシミュレーション結果に基づいて、脆性破壊のメカニズムと破壊靱性値の温度依存性の2点について考察を行なう^{(61),(62)}。

第5章では、結論として本研究を総括しその成果を述べる。

付録では、本研究に関係する理論の中で特に重要だと思われるものについて説明する。

第1章の参考文献

- (1) 田中實・山本良一 編, 計算物理と計算科学, (1988), 海文堂.
- (2) 河村雄行, パソコン分子シミュレーション, (1990), 海文堂.
- (3) 上田顯, コンピュータシミュレーション, (1990), 朝倉書店.
- (4) 日本機械学会編, 原子・分子モデルを用いる数値シミュレーション, (1996), コロナ社.
- (5) 川添良幸・三上益弘・大野かおる, コンピュータシミュレーションによる物質科学, (1996), 共立出版.
- (6) 時田澄男・富永信秀, BASICによる分子軌道法計算入門, (1987), 共立出版.
- (7) A. ザボ・N.S. ストランド著, 大野公男・阪井健男・望月裕志 訳, 新しい量子化学(上下), (1988), 東大出版会.
- (8) Car, R. and Parrinello, M., *Physical Review Letters*, **55**, (1985), 2471.
- (9) 鈴木秀次, 転位論入門, (1976), アグネ.
- (10) 石田誠, き裂の弾性解析と応力拡大係数, (1976), 培風館.
- (11) 北川浩, 日本機械学会誌, **97-907**, (1994), 9.
- (12) Mullins, M. and Dokanish, F., *Philosophical Magazine* **46-5**, (1982), 771.
- (13) Mullins, M., *Scripta Metallurgica* **16**, (1982), 663.
- (14) Kohlhoff, S. and Schmauder, S., V.Vitek and D.J.Srolovitz eds, *Large Atomistic Simulation of Materials - Beyond Pair Potentials -*, Plenum Press, (1988), 411.
- (15) Kohlhoff, S., Gumbsch, P. and Fichmeister, H.F., *Philosophical Magazine* **64-4**, (1991), 851.
- (16) Kitagawa, H., Nakatani, A. and Shibutani, Y., *Materials Science and Engineering*, **A176**, (1994), 263.
- (17) 中谷彰宏・北川浩・中谷敬子, 材料学会誌, **46-6**, (1997), 625.

- (18) Hoagland, R.G., Hirth, J.P. and Gehlen, P.C., *Philosophical Magazine*, **34-3**, (1976), 413.
- (19) Sinclair, J.E., Gehlen, P.C., Hoagland, R.G. and Hirth, J.P., *Journal of Applied Physics* **49-7**, (1978), 3890.
- (20) 中谷彰宏・北川浩・中谷敬子, 材料学会誌, **46-6**, (1997), 619.
- (21) Ishida, Y., Mori, M. and Hashimoto, M., *Surface Science*, **144**, (1984), 253.
- (22) 井上秀行・赤星保浩・原田昭治・長原秀健, 日本機械学会論文集, 61-588 A 編, (1995), 131.
- (23) Hu, S.Y., Ludwig, M., Kizler, P. and Schmauder, S., *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, **6**, (1998), 567.
- (24) Kohyama, M., *Materials Chemistry and Physics*, **50**, (1997), 159.
- (25) 香山正憲, まてりあ, 37-7, (1998), 569.
- (26) Sob, M., Wang, L.G. and Vitek, V., *Materials Science and Engineering*, **A234-236**, (1997), 1075.
- (27) Ohtani, R. and Kitamura, T., *JSME International Journal*, **30-269**, (1987), 1741.
- (28) Kitamura, T. and Ohtani, R., *Transactions of ASME*, **111-2**, (1989), 169.
- (29) Griffith, A.A., *Philosophical transactions of the Royal Society*, **221**, (1920), 163.
- (30) Irwin, G.R., *Fracturing of metals*, ASM, (1948), 152.
- (31) Orowan, E., *Reports on Progress in Physics*, **12**, (1949), 185.
- (32) Bilby, B.A., Cottrell, A.H. and Swinden, K.H., *Proceedings of the Royal Society of London*, **A272**, (1963), 304.
- (33) Ohr, S.M., *Materials Science and Engineering*, **72**, (1985), 1.
- (34) Chang S.J. and Ohr, S.M., *Journal of Applied Physics*, **52**, (1981), 7174.
- (35) Rice, J.R. and Thomson, R.M., *Philosophical Magazine*, **29**, (1974), 73.
- (36) Rice, J.R., *Journal of Mechanics and Physics of Solids*, **40**, (1992), 239.
- (37) Zhou, S. J. and Thomson, R., *Journal of Materials Research*, **6**, (1991), 639.
- (38) George, A. and Michot, G., *Materials Science and Engineering*, **A164**, (1993), 118.

- (39) Michot, G., Loyola de Oliveria, M.A. and George, A., *Materials Science and Engineering*, **A176**, (1994), 99.
- (40) Ha, K.F., Yang, C. and Bao, J.S., *Scripta Metallurgica*, **30-8**, (1994), 1065.
- (41) Gumbsch, P., Riedle, J., Hartmaier, A. and Fischmeister, H., *Science*, **282**, (1998), 1293.
- (42) John, C.St., *Philosophical Magazine*, **32**, (1975), 1193.
- (43) Narita, N., Higashida, K., Torii, T. and Miyaki, S., *Materials Transactions JIM*, **30**, (1989), 895.
- (44) 前田康二, まてりあ, 36-3, (1997), 206.
- (45) Rice, J.R. and Beltz, G.E., *Journal of Mechanics and Physics of Solids*, **42-2**, (1994), 333.
- (46) Xu, G. and Argon, A.S., *Philosophical Magazine*, **A72-2**, (1995), 415.
- (47) Xu, G. and Argon, A.S., *Philosophical Magazine*, **A75-2**, (1997), 341.
- (48) Hirsch, P.B. and Roberts, S.G., *Philosophical Magazine*, **A64-1**, (1991), 55.
- (49) Maeda, K., *Scripta Metallurgica*, **27-7**, (1992), 805.
- (50) Devincre, B. and Roberts, S.G., *Acta Metallurgica*, **44**, (1996), 2891.
- (51) 北川浩・中谷彰宏・渋谷陽二, 日本機械学会論文集, 59-564 A 編, (1993), 40.
- (52) Cheung, K.S., Argon, A.S. and Yip, S., *Journal of Applied Physics*, **69**, (1991), 2088.
- (53) Bulatov, V., Abraham, F.F., Kubin, L., Devincre, B. and Yip, S., *Nature*, **391-6668**, (1998), 669.
- (54) 野口博司・古谷佳之, 機論, 63-608 A 編, (1997), 69.
- (55) 古谷佳之・野口博司, 機論, 64-618 A 編, (1998), 305.
- (56) Furuya, Y. and Noguchi, H., *The Japan Society of Mechanical Engineers (JSME), Proceeding of International Conference on Materials and Mechanics '97*, (1997), 433.
- (57) Noguchi, H. and Furuya, Y., *International Journal of Fracture*, **87**, (1997), 309.
- (58) Furuya, Y. and Noguchi, H., *International Journal of Fracture*, **94**, (1998), 17.
- (59) Furuya, Y. and Noguchi, H., *Proceedings of 9th CIMTEC*, **18**, (1999), 57.
- (60) 古谷佳之・野口博司, 機論, (1999), 投稿中.

(61) 古谷佳之・野口博司, 機論, (1999), 投稿中.

(62) Furuya, Y., Noguchi, H. and Schmauder, S., *International Journal of Fracture*, (1999), submitted in November.

第 2 章 分子動力学-連続体力学連結手法

2.1 諸言

分子動力学は解析できる領域が非常に狭いという欠点を持っている。最新のスーパーコンピュータを用いても分子動力学で扱える原子の数はせいぜい 10^6 程度であり、ナノスケールの領域しか解析できない。き裂先端などの特異点近傍を解析しようとする際には、周期境界の仮定ができないためこの問題は致命的となる。この問題を克服するために分子動力学と連続体力学を組み合わせて解析を行なう連結手法の研究が行なわれ、種々の接合モデルが提案されている^{(1)~(8)}。この接合モデルはき裂先端のみを分子動力学で表現し、その周りを連続体力学を用いて表現するというもので、転位芯の解析などにも適用されている⁽⁷⁾。

連結手法研究の初期の段階では、連続体領域と分子動力学領域の間でいかにして力学的な境界条件を満足させるかが課題となっていた。分子動力学領域は非線形的な変形挙動を示すので、連続体と接続する際に境界上で mismatches が生じる。つまり、両領域の境界上で変位を連続にしようとするとかのバランスが崩れてしまい、力のバランスをとろうとすると変位場の連続性が崩れてしまう。そこで連続体領域を FEM で表現し FEM の節点と分子動力学領域の原子を連動させる方法^{(1)~(5)}やグリーン関数を用いて境界条件を修正する方法^{(6),(7)}などが提案された。しかし、これらの接合モデルではき裂先端で発生した転位が両領域の境界を通過することができないという問題をかかえていた。転位が境界を通過できるような接合モデルは、Yang らによって最初に提案された⁽⁸⁾。Yang らのモデルでは転位が境界層に進入した時点で分子動力学の転位を連続体の転位に変換し、連続体領域での転位は離散型転位動力学の運動法則に従って運動する。しかし、この接合モデルも塑性変形が進むにつれて分子動力学領域の変形が大きくなり、発生する転位の数がある程度以上多くなると解析ができなくなるという欠点をかかえていたので、脆性破壊に至るまでのプロセスをシミュレートするには不十分だった。

そこで本研究ではより完成度の高い連結手法の開発を目指して、新たに分子動力学とマ

マイクロメカニクスの接合モデルを提案した。このマイクロメカニクス^{(9)~(16)}というは連続体力学の一つで単なる線形弾性論に他ならないが、転位の応力場を考慮するため特にそのような呼び方をする。この接合モデルは分子動力学と連続体の境界で応力の釣合を考え、体積力^{(17),(18)}を使って境界条件を修正するという方法で両領域の境界上で応力場と変位場の双方が連続となるように工夫されている。また、転位の問題に対してもすべり変形による変位場を考慮することにより、転位が両領域の境界を通過できるようにしてある。それ以外にも、分子動力学領域の形状を一定に保つために分子動力学領域を逐次切り直したり、き裂先端を分子動力学領域の中に留めるためにき裂の進展に合わせて分子動力学領域を移動させるなどの新たな工夫がなされている。ただし、この接合モデルは2次元での準静的なシミュレーションを前提としていることには注意が必要である。

以下、第2章では分子動力学とマイクロメカニクスの基礎的な理論について説明した後、接合モデルの詳細について説明する。

2.2 分子動力学

2.2.1 分子動力学の基礎的な概念

分子動力学とは原子（分子）一つ一つに対して働く力を計算し、各々が古典力学の運動法則に従って運動するとして原子の時々刻々の動きを計算する手法である。その際、原子間に経験的または非経験的に求められたポテンシャル関数を仮定し、それに基づいて原子間に作用する力を求める。結局、各々の原子に対する運動方程式は原子の総数を N とすると次のようになる。

$$m_i \frac{d^2 r_i}{dt^2} = F_i \quad (i = 1, 2, \dots, N) \dots\dots\dots (2.1)$$

ここで、 m_i は i 番目の原子の質量、 r_i は i 番目の原子の位置、 t は時間、 F_i は i 番目の原子に働く力である。分子動力学ではこれらの連立常微分方程式を陽的に数値積分することにより系の時間変化を知ることができる。

具体的な分子動力学の計算手順は次に示す通りである。

1. 各々の原子に対して初期配置、初期速度を与える。
2. 原子間ポテンシャルと各原子の位置関係から各原子に働く力を求める。
3. 運動方程式を数値積分し、原子の位置を更新する。
4. 必要に応じて温度や圧力の制御を行なう。
5. 時間ステップの分だけ時間を進めて2へ戻る。
6. 2～5の操作を必要なステップ数だけ繰り返して、出力として出てくる原子の位置や速度、各原子に作用する力などから求めたい諸量を計算する。

以上のような操作を行なうことにより原子レベルでのシミュレーションを行なうことができる。

2.2.2 原子間ポテンシャル

分子動力学では系のポテンシャルエネルギーを各原子の位置関係によって表される関数によって表現する。この関数が原子間ポテンシャルと呼ばれるもので、分子動力学シミュレーションの精度はこの原子間ポテンシャルに大きく依存している。原子間ポテンシャルに

は大きく分けると 2 体間ポテンシャルと EAM (Embedded Atom Method) ポテンシャルがある。前者は質点の間を非線形のスプリングでつないだスプリングモデルに近いもので、計算負荷は非常に少ないが精度は悪く問題も多い。しばしば取り上げられる問題としてポアソン比の問題がある。これは等方性弾性体を 2 体間ポテンシャルで表現するとポアソン比が材料によらず 0.25 に決まってしまうという問題である。後者はもう少し電子論的な考えを取り入れたもので、多体間ポテンシャルのものが多くポアソン比の問題はない。EAM の基本的な考え方は、原子を最外殻の電子とそれ以外の電子と原子核から構成される剛体球にわけて、最外殻の電子が作り出す電子場の中にその剛体球を挿入するというものである。剛体球同士の相互作用は 2 体間力で表現されるが電子場と剛体球との相互作用が多体間力となる。これらの原子間ポテンシャルは適当な関数を仮定して、その係数を弾性定数などの実測値を用いて決定するという方法で導かれることが多いが、最近では第一原理的にポテンシャルを決定した例⁽¹⁹⁾もある。

各原子間に作用する力はポテンシャルの傾きから求めることができ、原子間ポテンシャルを ϕ_{ij} とすると相互作用力 F_{ij} は次式のようになる。ただし、 \vec{i} , \vec{j} , \vec{k} はそれぞれ x , y , z 軸に平行な単位ベクトルである。

$$F_{ij} = -\text{grad}\phi_{ij} = \vec{i} \frac{\partial \phi_{ij}}{\partial x} + \vec{j} \frac{\partial \phi_{ij}}{\partial y} + \vec{k} \frac{\partial \phi_{ij}}{\partial z} \dots\dots\dots (2.2)$$

2.2.3 数値積分の方法 (Verlet のアルゴリズム)

(2.1) 式を数値積分しやすいように次のような形に変換する。

$$\frac{d^2 r_i}{dt^2} = \frac{F_i}{m_i} \dots\dots\dots (2.3)$$

数値積分の方法としては、Verlet のアルゴリズム (差分法) を用いる。ここでは微小時間間隔での速度変化 (加速度) を一定として計算する。このときの速度変化は次式のようになる。

$$\Delta v(t) = \frac{\Delta r(t \rightarrow t + \Delta t) - \Delta r(t - \Delta t \rightarrow t)}{\Delta t} = a(t)\Delta t$$

ここで、

$$\Delta r(t \rightarrow t + \Delta t) \equiv \Delta r(t) = r(t + \Delta t) - r(t)$$

とおく。また,

$$F_i = m_i \frac{\Delta v(t)}{\Delta t}$$

なので,

$$r_i(t + \Delta t) = 2r_i - r_i(t - \Delta t) + (\Delta t)^2 \frac{F_i(t)}{m_i}$$

となる。しかし、この式は1項目と2項目に比べて3項目のオーダーが小さいので、計算機で計算すると桁落ちを起こしてしまう。そのため実際に計算を行なうときは、この式を二つに分けた次式を使う。

$$\begin{cases} \Delta r_i(t) &= \Delta r_i(t - \Delta t) + (\Delta t)^2 \frac{F_i}{m_i} \dots\dots\dots (2.4) \\ r_i(t + \Delta t) &= r_i(t) + \Delta r_i(t) \end{cases}$$

この時間間隔 (Δt) は、熱振動の周期に比べて十分に小さくする必要があり、1.0 ~ 6.0(fs) ぐらいにする必要がある ($1(\text{fs})=10^{-15}(\text{s})$)。

2.2.4 温度の計算と温度制御

分子動力学での温度は原子の速度 (運動エネルギー) から計算される。温度は原子の速度を用いて次式で表される。

$$T = \frac{\sum m_i v_i^2}{3Nk_B} \dots\dots\dots (2.5)$$

ここで、 k_B はボルツマン定数で、 N は原子数、 T が温度である。また、温度の制御は設定温度 (T_{set}) と各ステップにおける温度 (T) の比の平方根を係数として、各原子の速度を一律に増減することにより行なう (速度スケールリング法)。

$$v'_i = \left(\frac{T_{set}}{T}\right)^{\frac{1}{2}} v_i \dots\dots\dots (2.6)$$

温度制御を行なうときは、熱振動による温度変化を考慮して 10 ないし 100 ステップおきに行なうのが適当であり、そのときはステップ数で平均をとった温度を用いて温度制御を行なうのが妥当である。また、理論的により厳密に温度制御を行なう方法もあるが速度スケールリング法で実用上は問題ない。

2.2.5 運動量補正

温度を正確に計算し、種々の計算を行なうためには系の重心を固定する必要がある。分子動力学計算の初期状態では、全原子の運動量の和をゼロにしなければならない。演算が無限に正確であれば、この状態が永久に保たれる。しかし、計算機の演算では有効桁数が限られ切捨てによる誤差が生じるので、適当なステップごとに運動量をゼロに補正する必要がある。運動量の補正は次式にしたがって行なう。

$$v'_i = v_i - \frac{\sum m_j v_j}{Nm_i} \dots\dots\dots (2.7)$$

単精度では 10 ステップおきに、倍精度でも 100~1000 ステップおきに補正しなければならない。

2.2.6 周期境界条件

周期境界条件とは図 2.1 のように基本セルの回りに基本セルと同じ状態のイメージセルがあると仮定する境界条件である。つまり、周期境界条件をかけた状態では、基本セル内の原子に働く力を計算する際にイメージセル内の原子の影響も考慮することになり、基本セルを飛び出した原子は反対側から同じように入ってくる。この境界条件を用いることにより基本セルが無限遠方まで続いているのと同じ状態で計算できる。

2.2.7 分子動力学の特徴

序論でも述べたように分子動力学は材料強度研究においても魅力的なものである。その長所と短所について簡単にまとめてみた。

- 長所
 - 原子レベルの現象をそのままコンピュータ内に再現できる。

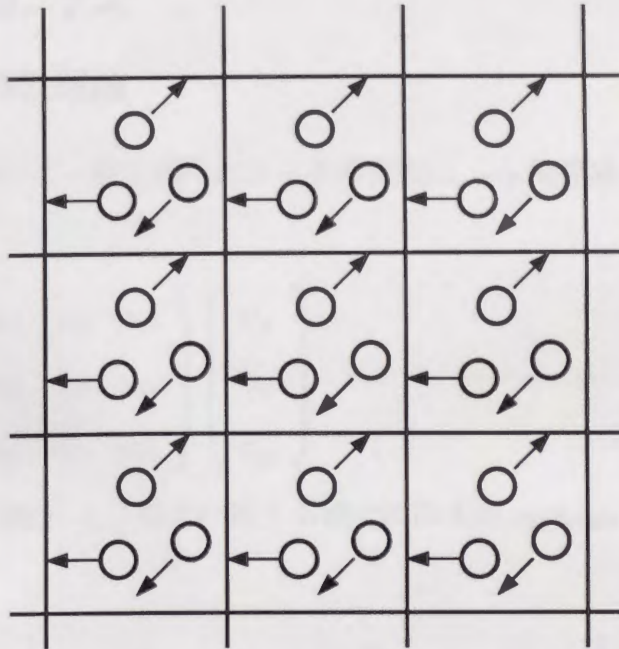


図 2.1 Periodic boundary condition.

- 温度の影響を考慮できる.
- 必要とする実験データ（材料定数）が非常に少ない（将来的には実験データを必要としなくなる可能性もある）.
- 実験では実現することのできない極限状態をシミュレートできる.
- 短所
 - 扱える領域が非常に狭い（ナノメートルのオーダー）.
 - シミュレートできる時間的な領域が非常に狭い（ナノ秒のオーダー）.
 - 原子間ポテンシャルを厳密に決定することが困難である.

2.3 マイクロメカニクス

2.3.1 異方性の弾性理論

2次元の弾性論において一般化されたフックの法則は、x-y座標系（直交座標系）において次のようになる。

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_x \\ \varepsilon_y \\ \gamma_{xy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{16} \\ a_{21} & a_{22} & a_{26} \\ a_{61} & a_{62} & a_{66} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \tau_{xy} \end{pmatrix} \dots\dots\dots (2.8)$$

直交異方性で材料主軸が x, y 軸と一致する場合には定数 $a_{11} \sim a_{66}$ は次のようになる。

$$a_{11} = \frac{1}{E_x}, \quad a_{12} = -\frac{\nu_{xy}}{E_y}, \quad a_{21} = -\frac{\nu_{yx}}{E_x}, \quad a_{22} = \frac{1}{E_y}, \quad a_{66} = \frac{1}{G_{xy}}$$

$$a_{16} = a_{26} = a_{61} = a_{62} = 0, \quad a_{12} = a_{21}$$

ここで、 E_x, E_y は材料主軸に関するヤング率、 ν_{xy}, ν_{yx} はポアソン比、 G_{xy} は横弾性係数である。また、フックの法則と釣合方程式より、エアリーの応力関数 F は次式を満たさなければならない。

$$a_{22} \frac{\partial^4 F}{\partial x^4} - 2a_{26} \frac{\partial^4 F}{\partial x^3 \partial y} + (2a_{12} + a_{66}) \frac{\partial^4 F}{\partial x^2 \partial y^2} - 2a_{16} \frac{\partial^4 F}{\partial x \partial y^3} + a_{11} \frac{\partial^4 F}{\partial y^4} = 0 \dots\dots (2.9)$$

この方程式の特性方程式は、次のようになる。

$$a_{11} \mu^4 - 2a_{16} \mu^3 + (2a_{12} + a_{66}) \mu^2 - 2a_{26} \mu + a_{22} = 0 \dots\dots\dots (2.10)$$

(2.10) 式の根は複素数または純虚数となる。これらは、 $\mu_1, \mu_2, \bar{\mu}_1, \bar{\mu}_2$ とおいて異方性の度を示すパラメータとして用いられる。

応力 $\sigma_x, \sigma_y, \tau_{xy}$ 、変位 u, v 、合力 P_x, P_y は複素応力関数 $\Phi_1(z_1), \Phi_2(z_2)$ を用いて次のように表される⁽¹⁰⁾。

$$\sigma_x = \sigma_x^0 + 2\operatorname{Re}[\mu_1^2 \Phi_1'(z_1) + \mu_2^2 \Phi_2'(z_2)] \quad \dots\dots\dots (2.11)$$

$$\sigma_y = \sigma_y^0 + 2\operatorname{Re}[\Phi_1'(z_1) + \Phi_2'(z_2)] \quad \dots\dots\dots (2.12)$$

$$\tau_{xy} = \tau_{xy}^0 - 2\operatorname{Re}[\mu_1 \Phi_1'(z_1) + \mu_2 \Phi_2'(z_2)] \quad \dots\dots\dots (2.13)$$

$$u = 2\operatorname{Re}[p_1 \Phi_1(z_1) + p_2 \Phi_2(z_2)] \quad \dots\dots\dots (2.14)$$

$$v = 2\operatorname{Re}[q_1 \Phi_1(z_1) + q_2 \Phi_2(z_2)] \quad \dots\dots\dots (2.15)$$

$$P_x = 2\operatorname{Re}[\mu_1 \Phi_1(z_1) + \mu_2 \Phi_2(z_2)] \quad \dots\dots\dots (2.16)$$

$$P_y = -2\operatorname{Re}[\Phi_1(z_1) + \Phi_2(z_2)] \quad \dots\dots\dots (2.17)$$

ここで,

$$p_1 = a_{11}\mu_1^2 + a_{12} - a_{16}\mu_1$$

$$p_2 = a_{11}\mu_2^2 + a_{12} - a_{16}\mu_2$$

$$q_1 = a_{12}\mu_1 + \frac{a_{22}}{\mu_1} - a_{26}$$

$$q_2 = a_{12}\mu_2 + \frac{a_{22}}{\mu_2} - a_{26}$$

また, 複素変数 z_1, z_2 は物理面 $z = x + iy$ をアフィン変換したもので次式で定義される.

$$\begin{cases} z_1 = x + \mu_1 y \\ z_2 = x + \mu_2 y \end{cases} \quad \dots\dots\dots (2.18)$$

2.3.2 き裂を有する無限板に一様な引張り応力が作用するときの解

楕円孔を有する無限板に x 軸と角度 ϕ を成す方向に一様な引張り応力が作用するときの解 (図 2.2) は, 次のようになる⁽¹⁰⁾.

$$\Phi_1(z_1) = \frac{\beta - \mu_2 \alpha}{\mu_1 - \mu_2} \frac{1}{\Omega_1} \quad \dots\dots\dots (2.19)$$

$$\Phi_2(z_2) = -\frac{\beta - \mu_1 \alpha}{\mu_1 - \mu_2} \frac{1}{\Omega_2} \quad \dots\dots\dots (2.20)$$

$$\sigma_x^0 = \sigma_\infty \cos^2 \phi, \quad \sigma_y^0 = \sigma_\infty \sin^2 \phi, \quad \tau_{xy}^0 = \sigma_\infty \sin \phi \cos \phi$$

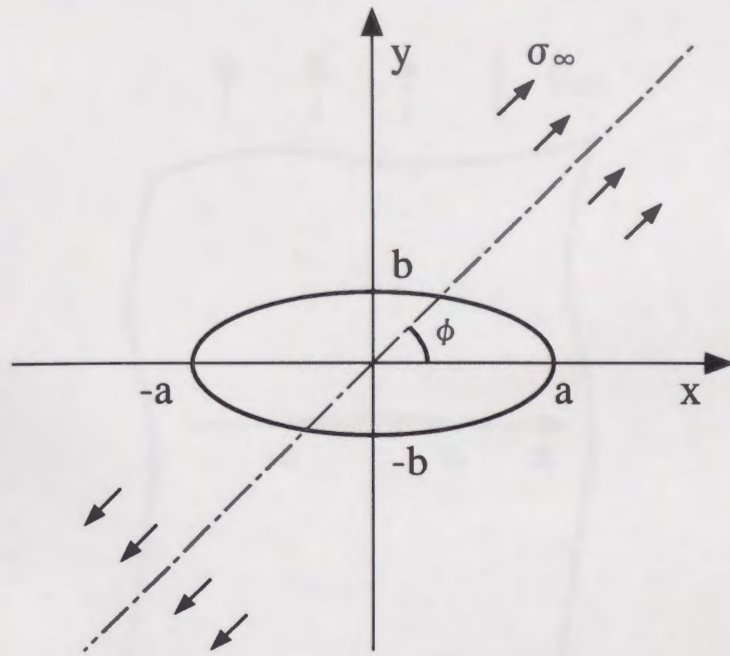


図 2.2 Plate with an elliptic hole.

$$\alpha = -\frac{\sigma_\infty \sin \phi}{2} (a \sin \phi - ib \cos \phi), \quad \beta = \frac{\sigma_\infty \cos \phi}{2} (a \sin \phi - ib \cos \phi)$$

$$\Omega_j = \frac{z_j + \sqrt{z_j^2 - a^2 - \mu_j^2 b^2}}{a - i\mu_j b} \quad (j = 1, 2)$$

ここで、 a, b は楕円の長軸と短軸である。これを図 2.3 のようなき裂の場合について考えると、

$$\phi = \frac{\pi}{2}, \quad b \rightarrow 0$$

従って、図 2.3 のようなき裂の解は次のようになる。

$$\Phi_1(z_1) = \frac{-\mu_2 \alpha}{\mu_1 - \mu_2} \frac{1}{\Omega_1} \dots \dots \dots (2.21)$$

$$\Phi_2(z_2) = \frac{\mu_1 \alpha}{\mu_1 - \mu_2} \frac{1}{\Omega_2} \dots \dots \dots (2.22)$$

$$\sigma_x^0 = 0, \quad \sigma_y^0 = \sigma_\infty, \quad \tau_{xy}^0 = 0$$

ここで、 a をき裂半長とすると、

$$\alpha = -\frac{a}{2} \sigma_\infty, \quad \beta = 0, \quad \Omega_j = \frac{z_j + \sqrt{z_j^2 - a^2}}{a} \quad (j = 1, 2)$$

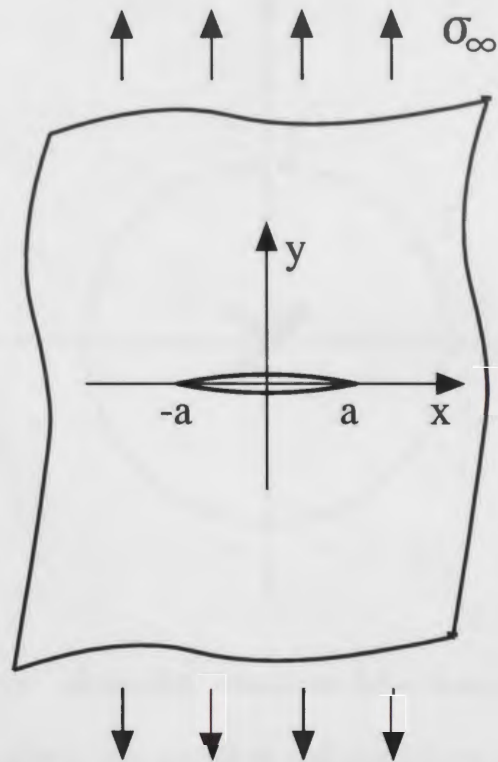


図 2.3 Plate with a crack.

2.3.3 転位とき裂を有する無限板の解

この解を導く手順としては、まず図 2.4 のように無限板に一個の転位がある場合を考え、それをもとに図 2.5 のようなき裂の解に拡張する。平面問題において基本解の一般形は次式のようなになる。

$$\Omega_j(z_j) = B_j \ln z_j + \sum_{n=-\infty}^{\infty} B_{jn} z_j^n \quad (j = 1, 2) \dots\dots\dots (2.23)$$

(B_j, B_{jn} : 複素定数)

刃状転位に対しては次のような形になる。

$$\Omega_j(z_j) = A_j \ln z_j \quad (j = 1, 2) \dots\dots\dots (2.24)$$

(A_j : 複素定数)

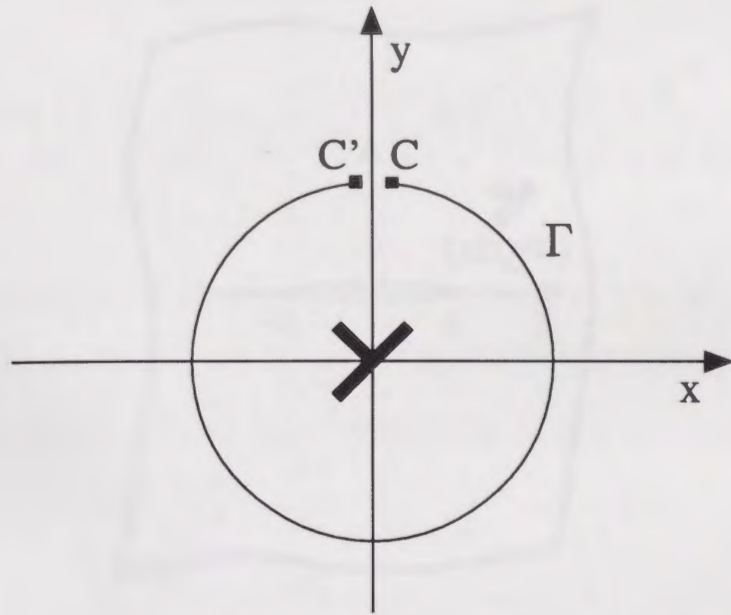


図 2.4 Boundary condition for a dislocation.

ここで、複素定数 A_j を決定するための境界条件は次のようなものである。図 2.4 の原点を中心とする軌道 Γ に沿って一周したときの合力と変位の多価性を調べてみると、刃状転位の場合は外力は働いていないので合力の食い違いはなく、変位はバーガースベクトルの分だけ食い違いが生じる。従って、境界条件は次のようになる。

$$[P_x]_C^{C'} = 0, \quad [P_y]_C^{C'} = 0, \quad [u]_C^{C'} = u^*, \quad [v]_C^{C'} = v^*$$

u^*, v^* : バーガースベクトルの x, y 成分

これらの境界条件と (2.11~2.17) 式から次式を得ることができる。

$$\left. \begin{aligned} [P_x]_C^{C'} &= 2\pi i(\mu_1 A_1 + \mu_2 A_2 - \bar{\mu}_1 \bar{A}_1 - \bar{\mu}_2 \bar{A}_2) = 0 \\ [P_y]_C^{C'} &= -2\pi i(A_1 + A_2 - \bar{A}_1 - \bar{A}_2) = 0 \\ [u]_C^{C'} &= 2\pi i(p_1 A_1 + p_2 A_2 - \bar{p}_1 \bar{A}_1 - \bar{p}_2 \bar{A}_2) = u^* \\ [v]_C^{C'} &= 2\pi i(q_1 A_1 + q_2 A_2 - \bar{q}_1 \bar{A}_1 - \bar{q}_2 \bar{A}_2) = v^* \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (2.25)$$

従って、

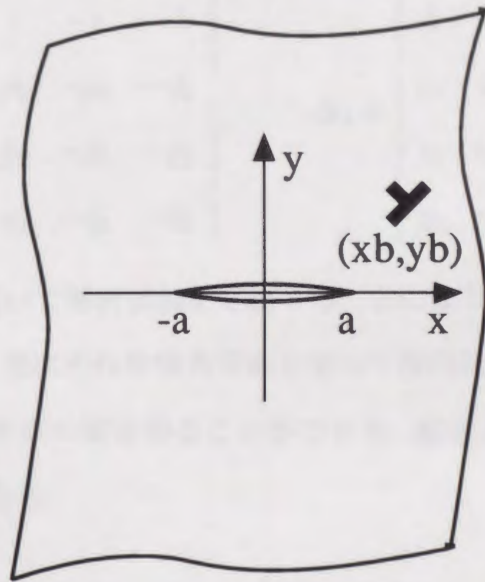


図 2.5 Plate with a crack and a dislocation.

$$2\pi i \begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 \\ \mu_1 & \mu_2 & -\bar{\mu}_1 & -\bar{\mu}_2 \\ p_1 & p_2 & -\bar{p}_1 & -\bar{p}_2 \\ q_1 & q_2 & -\bar{q}_1 & -\bar{q}_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ \bar{A}_1 \\ \bar{A}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ u^* \\ v^* \end{pmatrix} \dots\dots\dots (2.26)$$

クラメルの定理より (2.26) 式の解は次のようになる。

$$A_1 = \frac{\Delta_1}{2\pi i \Delta}, \quad A_2 = \frac{\Delta_2}{2\pi i \Delta} \dots\dots\dots (2.27)$$

ここで,

$$\Delta = \begin{vmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 \\ \mu_1 & \mu_2 & -\bar{\mu}_1 & -\bar{\mu}_2 \\ p_1 & p_2 & -\bar{p}_1 & -\bar{p}_2 \\ q_1 & q_2 & -\bar{q}_1 & -\bar{q}_2 \end{vmatrix},$$

$$\Delta_1 = \begin{vmatrix} 0 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & \mu_2 & -\bar{\mu}_1 & -\bar{\mu}_2 \\ u^* & p_2 & -\bar{p}_1 & -\bar{p}_2 \\ v^* & q_2 & -\bar{q}_1 & -\bar{q}_2 \end{vmatrix}, \quad \Delta_2 = \begin{vmatrix} 1 & 0 & -1 & -1 \\ \mu_1 & 0 & -\bar{\mu}_1 & -\bar{\mu}_2 \\ p_1 & u^* & -\bar{p}_1 & -\bar{p}_2 \\ q_1 & v^* & -\bar{q}_1 & -\bar{q}_2 \end{vmatrix}$$

ここで、鏡像の原理を用いて解析接続を定義することにより、この解を円孔のある無限板に転位のある解に拡張し、更にそれを等角写像を使って楕円孔の解に拡張する。そこで極限操作を行なうことによりき裂の解を得ることができる。結果として得られる図 2.5 の問題の基本解は次式のようになる。

$$\begin{aligned} \Phi_1(\Omega_1) = & A_1 \ln(\Omega_1 - W_1) + \phi_1 \bar{A}_1 \left\{ \ln\left(\Omega_1 - \frac{1}{\bar{W}_1}\right) - \ln \Omega_1 \right\} \\ & + \psi_1 \bar{A}_2 \left\{ \ln\left(\Omega_1 - \frac{1}{\bar{W}_2}\right) - \ln \Omega_1 \right\} \dots\dots\dots (2.28) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Phi_2(\Omega_2) = & A_2 \ln(\Omega_2 - W_2) + \phi_2 \bar{A}_1 \left\{ \ln\left(\Omega_2 - \frac{1}{\bar{W}_1}\right) - \ln \Omega_2 \right\} \\ & + \psi_2 \bar{A}_2 \left\{ \ln\left(\Omega_2 - \frac{1}{\bar{W}_2}\right) - \ln \Omega_2 \right\} \dots\dots\dots (2.29) \end{aligned}$$

ここで、

$$\begin{aligned} \Omega_j &= \frac{z_j + \sqrt{z_j^2 - a^2}}{a} \quad (j = 1, 2), \\ W_j &= \frac{\zeta_j + \sqrt{\zeta_j^2 - a^2}}{a}, \quad \zeta_j = x_b + \mu_j y_b \quad (j = 1, 2) \end{aligned}$$

$$\phi_1 = \frac{\mu_2 - \bar{\mu}_1}{\mu_1 - \mu_2}, \quad \phi_2 = \frac{\bar{\mu}_1 - \mu_1}{\mu_1 - \mu_2}, \quad \psi_1 = \frac{\mu_2 - \bar{\mu}_2}{\mu_1 - \mu_2}, \quad \psi_2 = \frac{\bar{\mu}_2 - \mu_1}{\mu_1 - \mu_2}$$

x_b, y_b : 転位の位置の x, y 座標

2.3.4 き裂のある無限板に集中力が働く解

き裂のある無限板に集中力が働くときの基本解は、前節の転位の場合と同様にして導くことができる。このときの境界条件は前節と同様に、図 2.6 に示す原点を中心とする軌道 Γ

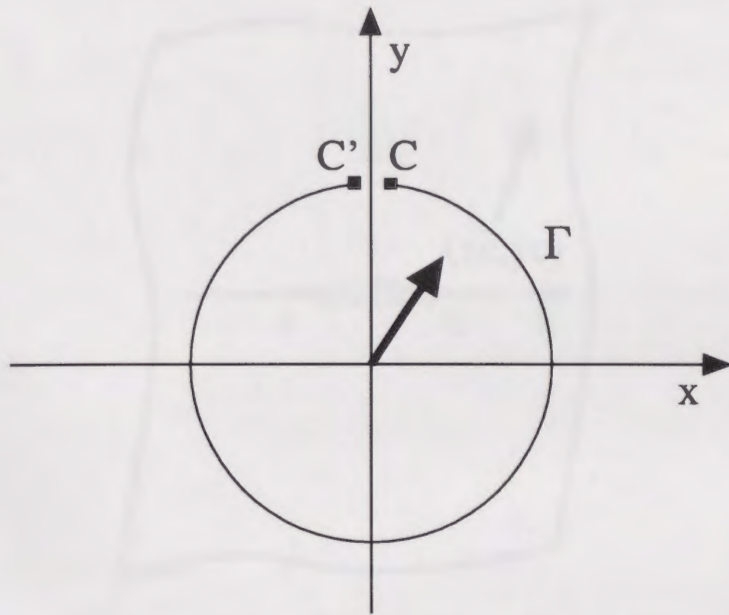


図 2.6 Boundary condition for a concentrated force.

に沿って一周した時の合力と変位の多価性を調べることによって得られる。集中力の場合には合力に食い違いが生じてその大きさは集中力の大きさに等しくなり、変位に食い違いは生じない。従って、境界条件は次のようになる。

$$[P_x]_C^{C'} = -F_x, \quad [P_y]_C^{C'} = -F_y, \quad [u]_C^{C'} = 0, \quad [v]_C^{C'} = 0$$

F_x, F_y : 集中力の x, y 成分

前節と同様に境界条件からき裂のある無限板に集中力が作用するときの基本解 (図 2.7) を導くと次式のようなになる。

$$\begin{aligned} \Phi_1(\Omega_1) = & A_1 \ln(\Omega_1 - W_1) + \phi_1 \bar{A}_1 \left\{ \ln\left(\Omega_1 - \frac{1}{\bar{W}_1}\right) - \ln \Omega_1 \right\} \\ & + \psi_1 \bar{A}_2 \left\{ \ln\left(\Omega_1 - \frac{1}{\bar{W}_2}\right) - \ln \Omega_1 \right\} \dots \dots \dots (2.30) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Phi_2(\Omega_2) = & A_2 \ln(\Omega_2 - W_2) + \phi_2 \bar{A}_1 \left\{ \ln\left(\Omega_2 - \frac{1}{\bar{W}_1}\right) - \ln \Omega_2 \right\} \\ & + \psi_2 \bar{A}_2 \left\{ \ln\left(\Omega_2 - \frac{1}{\bar{W}_2}\right) - \ln \Omega_2 \right\} \dots \dots \dots (2.31) \end{aligned}$$

ここで、

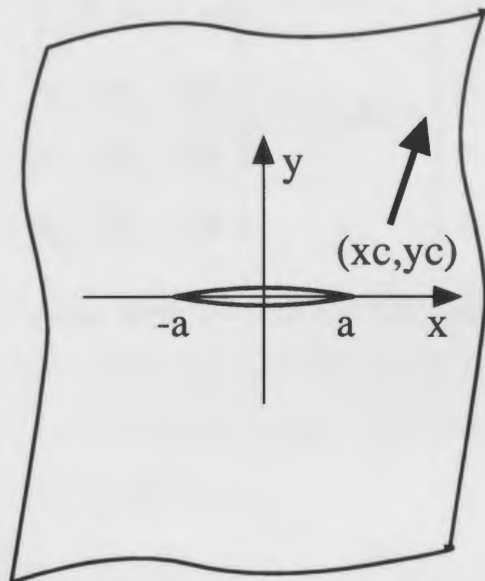


图 2.7 板中有裂纹和集中力。

$$\Omega_j = \frac{z_j + \sqrt{z_j^2 - a^2}}{a} \quad (j = 1, 2),$$

$$W_j = \frac{\zeta_j + \sqrt{\zeta_j^2 - a^2}}{a}, \quad \zeta_j = x_c + \mu_j y_c \quad (j = 1, 2)$$

$$\phi_1 = \frac{\mu_2 - \bar{\mu}_1}{\mu_1 - \mu_2}, \quad \phi_2 = \frac{\bar{\mu}_1 - \mu_1}{\mu_1 - \mu_2}, \quad \psi_1 = \frac{\mu_2 - \bar{\mu}_2}{\mu_1 - \mu_2}, \quad \psi_2 = \frac{\bar{\mu}_2 - \mu_1}{\mu_1 - \mu_2}$$

$$A_1 = \frac{\Delta_1}{2\pi i \Delta}, \quad A_2 = \frac{\Delta_2}{2\pi i \Delta}$$

$$\Delta = \begin{vmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 \\ \mu_1 & \mu_2 & -\bar{\mu}_1 & -\bar{\mu}_2 \\ p_1 & p_2 & -\bar{p}_1 & -\bar{p}_2 \\ q_1 & q_2 & -\bar{q}_1 & -\bar{q}_2 \end{vmatrix},$$

$$\Delta_1 = \begin{vmatrix} F_y & 1 & -1 & -1 \\ -F_x & \mu_2 & -\bar{\mu}_1 & -\bar{\mu}_2 \\ 0 & p_2 & -\bar{p}_1 & -\bar{p}_2 \\ 0 & q_2 & -\bar{q}_1 & -\bar{q}_2 \end{vmatrix}, \quad \Delta_2 = \begin{vmatrix} 1 & F_y & -1 & -1 \\ \mu_1 & -F_x & -\bar{\mu}_1 & -\bar{\mu}_2 \\ p_1 & 0 & -\bar{p}_1 & -\bar{p}_2 \\ q_1 & 0 & -\bar{q}_1 & -\bar{q}_2 \end{vmatrix}$$

x_c, y_c : 集中力の作用する点の座標

2.4 分子動力学／マイクロメカニクス接合モデル

2.4.1 基本概念

図 2.8 に分子動力学／マイクロメカニクス接合モデルの概略を示す。この接合モデルでは、き裂を有する無限板に一様な引張りが加わる問題を考え、図 2.8 の斜線の部分を分子動力学で表現し、その外側を連続体力学（マイクロメカニクス）を用いて表現する。分子動力学と連続体の両領域は基本的には変位場の連続性を境界条件として接続し、それに体積力を用いた修正を加えることにより応力場の連続性も満たすというフレキシブルな境界条件で接続する。このとき、分子動力学領域には紙面に垂直な方向に周期境界条件を適用し、連続体の領域は平面ひずみ問題として解析する。

図 2.9 に分子動力学領域におけるモデルを示す。ここで自由原子 (Free atom) とは分子動力学のアルゴリズムに従って熱振動をしながら動く原子で、境界原子 (Boundary atom) とは熱振動を行わず、連続体領域との境界条件に基づく変位場によって移動する原子である。つまり、境界原子から外側が連続体領域となり、両領域の境界は境界原子の層と自由原子の層の間に存在する。また、分子動力学領域内での初期き裂は原子列を 2 列取り除くことによ

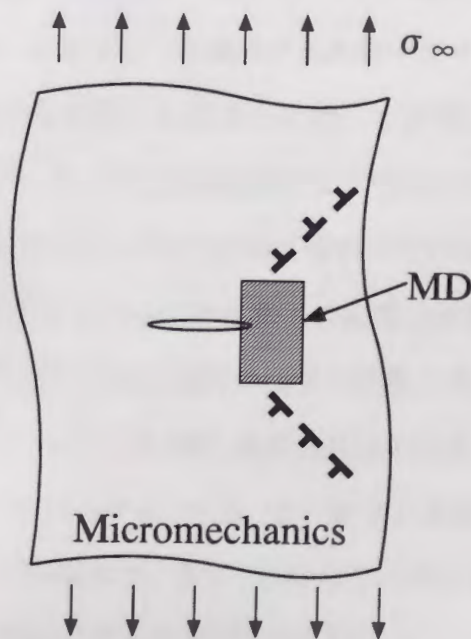
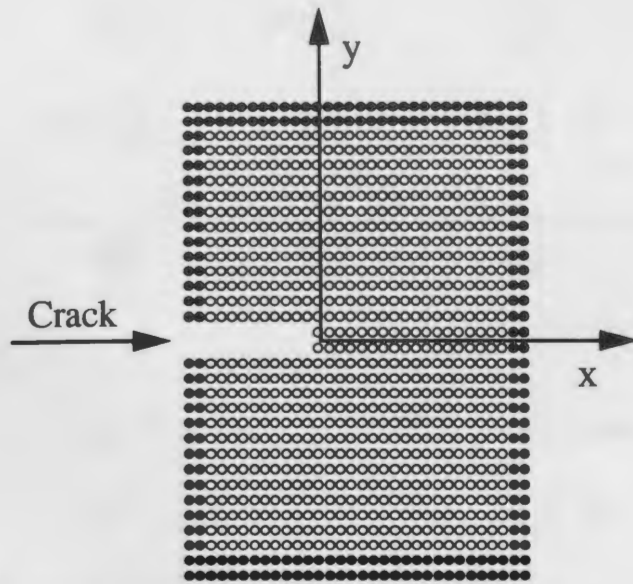


図 2.8 Combined model of molecular dynamics with micromechanics.



- : Free atom with thermal oscillation
 ●: Boundary atom without thermal oscillation

図 2.9 Model for a molecular dynamics region.

り表現する。連続体の領域では前節で説明した基本解を用いて重ね合わせを行なうことにより、転位や集中力が存在する問題を表現する。その際、き裂長さは十分に長くとり、小規模降伏の条件が成立するように注意する。連続体の基本解ではき裂の中心を原点にとってあり（図 2.3 を参照）、分子動力学領域はき裂長さに対して非常に小さいので、き裂長さを長くすると桁落ちが問題となる。そこで、座標変換によりき裂先端が原点となるようにする。また、転位や体積力の議論は、き裂の片方の先端近傍のみで行なう。き裂長さを十分に長くとることにより、他方の先端近傍での転位や体積力の影響は無視できる。

この接合モデルでは分子動力学領域と連続体領域の境界上での変位場と応力場の連続性に対して常に注意を払う必要がある。その際、連続体領域の境界上での応力は前節の基本解を利用して即座に計算することができる。一方、分子動力学領域の境界上での応力に関しては図 2.10 に示すような方法で計算する。まず、自由原子の層と境界原子の層の間に仮想的な応力計算面を考え、その面を通過する原子間力を計算する。この通過する原子間力がこの面に作用する力となるので、この力を合計して面積で割ることにより応力を計算する。

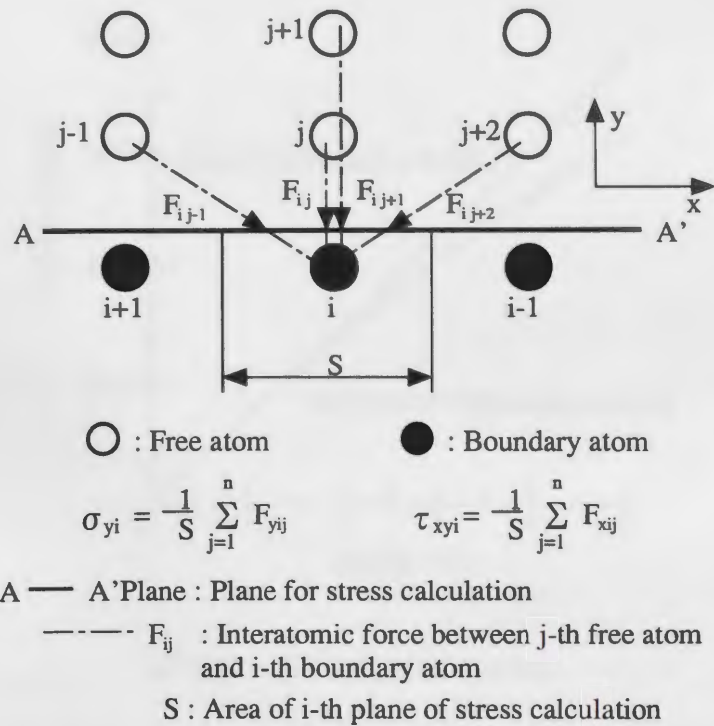


図 2.10 Stress calculation in a molecular dynamics region at the boundary.

2.4.2 準静的解析のための条件

前述のように分子動力学シミュレーションではシミュレートできる時間的な領域が非常に狭くナノ秒のオーダーしかシミュレートできない。従って、ひずみ速度の非常に速い状態しかシミュレートできないことになる。そこで、この接合モデルでは準静的な解析を行なう。準静的な解析とは動力学を用いて擬似的に静的な問題を取り扱うということである。それでは準静的解析のための条件について考えてみる。動的な解析と静的な解析の違いを考えてみると、次の3点が挙げられる。

1. 静的な解析ではき裂先端で発生した熱が熱伝導により周りの領域に放出されるので温度が一定となる。
2. 動的な解析では転位分布が非平衡となるが、静的な解析では平衡分布となる。
3. 動的な解析ではき裂先端ですべりやへき開割れが生じた際に応力波が生じるが、静的な解析ではそれらは存在しない。

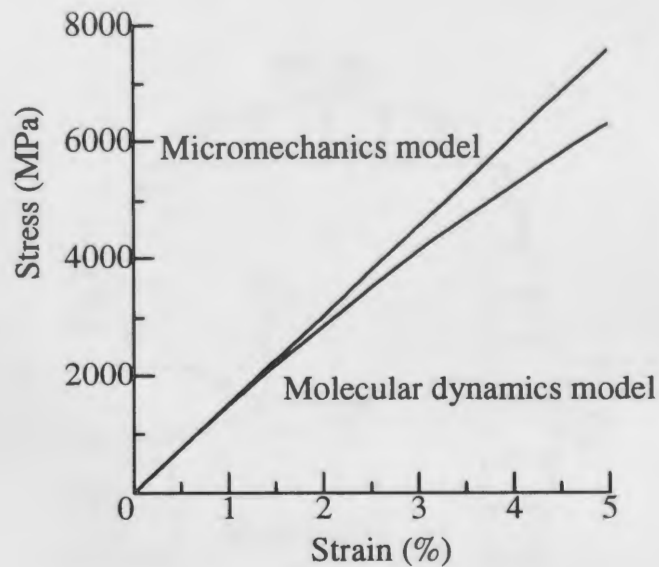


図 2.11 Stress-strain curves.

準静的な解析を行なうための条件はこれらの違いを考慮し、静的な解析と同じ状態を保つことである。まず、1.の温度に関しては分子動力学領域での温度が一定になるように温度制御を行うことにより達成される。2.の転位に関しては転位がき裂先端から発生した際に即座にその平衡位置に移動させることにより解決する。その際、分子動力学領域内での転位の運動は無視されることになる。3.に関してはシミュレーションを行なう際に応力波が減衰して消滅するように十分な緩和計算を行い、常に平衡状態を保つことにより克服できる。分子動力学領域はナノメートルのオーダーしかなく非常に狭いのでピコ秒のオーダーの緩和計算でも応力波が消滅するには十分である。以上のような点に注意してシミュレーションを行なうことにより準静的解析が可能となる。

2.4.3 体積力を用いたフレキシブル境界条件

図 2.11 に分子動力学で計算した平滑材の応力-ひずみ線図を示す。連続体で使用する線形な関係と比べると、分子動力学のほう是非線形的に変形していることがわかる。この非線形性の影響のために変位固定や応力固定の境界条件では分子動力学領域と連続体領域の境界上でミスマッチが生じてしまう。つまり、境界上で変位を連続にしようとするとうる応力の連続性が崩れてしまい、応力を連続にしようとするとうる変位の連続性が崩れてしまう。この分子

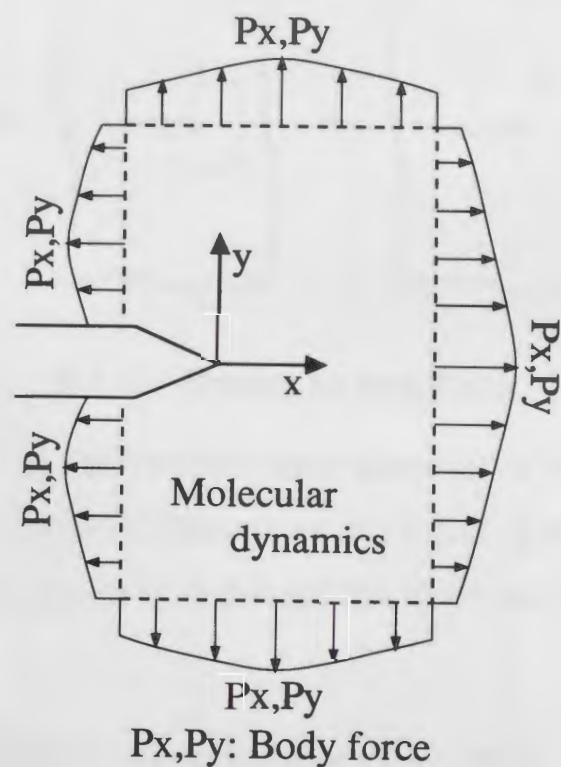


図 2.12 Correction of the boundary condition with body forces.

動力学領域の非線形性に対応するために本接合モデルでは体積力を利用したフレキシブルな境界条件を採用する。これは基本的に変位固定の境界条件で分子動力学と連続体の領域を接続し、境界上で応力の食い違いが生じた際に図 2.12 のように体積力を境界上に分布させ境界条件を修正するというものである。この体積力は変位場と応力場の双方に影響を及ぼし、その大きさは境界上での応力場の連続性を境界条件として決定される。このやり方は Sinclair ら⁽⁷⁾ が提案した Flex-II と類似している。Flex-II では境界原子に作用する原子間力の釣合を考えているのに対し、本接合モデルでは応力の釣合を考えている。また、Flex-II でグリーン関数（集中力）を用いて境界条件を修正しているのに対し、本接合モデルでは体積力を用いて修正している。この体積力による修正のための連続体の基本解は図 2.13 のように集中力の解を連続的に重ね合わせて、それらを数値的に積分することにより得られる。

それでは体積力で修正することの物理的な意味を考えてみる。今、ある点において応力の食い違いが生じているとする。力の平衡条件を考えるとその点に外力が働いてないとつじ

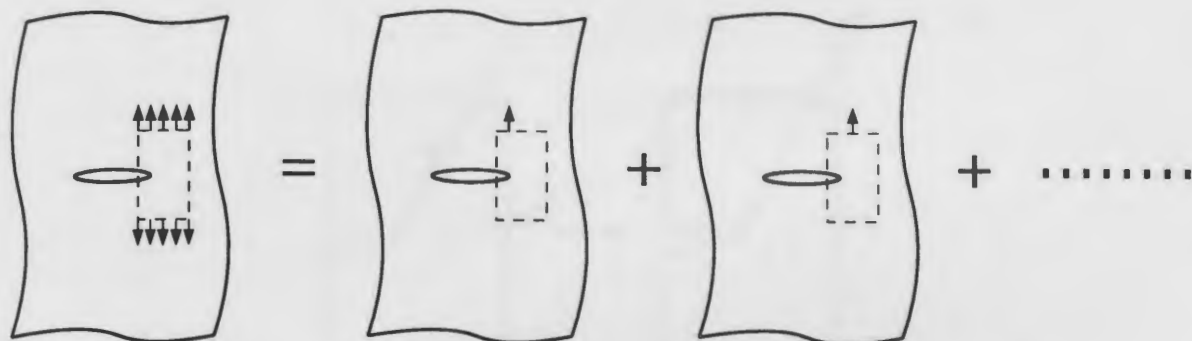


図 2.13 Solution for body forces.

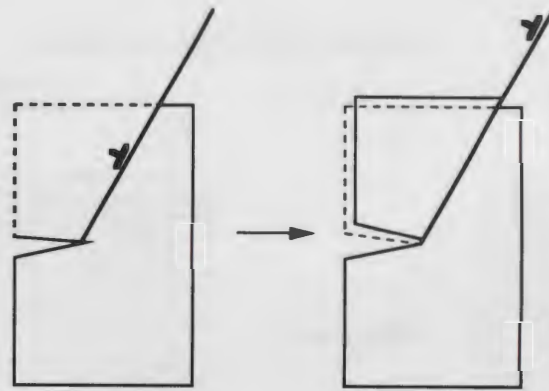
つまが合わない。つまり、分子動力学領域と連続体領域の境界上で応力の食い違いが生じているとすると、その境界上には外力が働いていることになる。しかし、実際には両領域の境界上には外力など働いていないので、その外力を打ち消すために体積力を分布させるというわけである。

2.4.4 分子動力学の転位から連続体の転位への変換

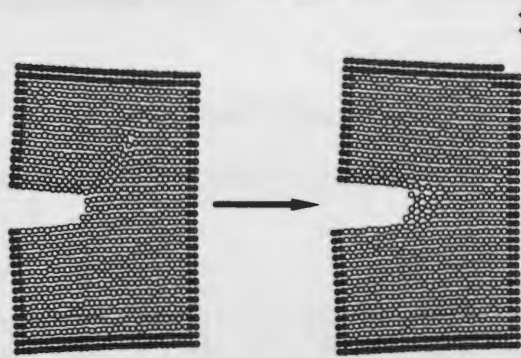
き裂先端で転位が発生した際にその転位は分子動力学領域と連続体領域の境界を越えて移動していく必要がある。さもないと、塑性域の大きさが分子動力学領域の大きさと規定されてしまう。しかし、転位が境界を通過できるようにするためには特別な工夫が必要となり、連結手法を開発する際にしばしば問題となってきた。本接合モデルでは、図 2.14, 図 2.15 に示すような方法で分子動力学の転位を連続体の転位（弾性解、2.3.3 節を参照）に変換することにより転位が境界を通過できるようにしてある。

具体的な手順は次に示す通りである。

- Step 1. 連続体領域に転位を分布させ、転位の平衡位置をもとめる。その平衡位置が連続体の領域にあれば次のステップに進み、分子動力学領域内にあれば次のステップには進まない。
- Step 2. 図 2.14 に示すように転位移動に伴うすべり変形による変位場を境界原子に与え、転位を分子動力学領域の外に出す。
- Step 3. 図 2.15 に示す Part(1) の列の自由原子を境界原子に置き換え、Part(2) の列の境



(a) Displacement field caused by slip with dislocation movement



(b) Dislocation movement from a MD region to a continuum region

図 2.14 Transformation from an atomistic dislocation to an elastic dislocation.

界原子を自由原子に置き換える。この操作により分子動力学領域の再定義を行い、分子動力学領域の形状が一定になるようにする。

ここで、ステップ 3 の操作を行なうのはすべり変形に伴い分子動力学領域が大きく変形するのを防ぐためである。分子動力学領域が大きく変形すると計算が不安定になり問題が生じる。例えば図 2.15 の丸で囲んだ部分のように応力計算面である分子動力学と連続体の境界に段差ができるとその部分での応力の計算精度が極端に落ちると問題が生じる。また、ここでは転位発生の検知とすべり面の特定を行なうために図 2.16 に示すような 2 つの自由原子列を考え、その隣り合う二つの原子間の y 方向のずれを調べる。 y 方向のずれがバーガーベクトルの y 成分に等しくなったときに転位が発生したときで、ずれた原子対の位置からすべり面を特定する。

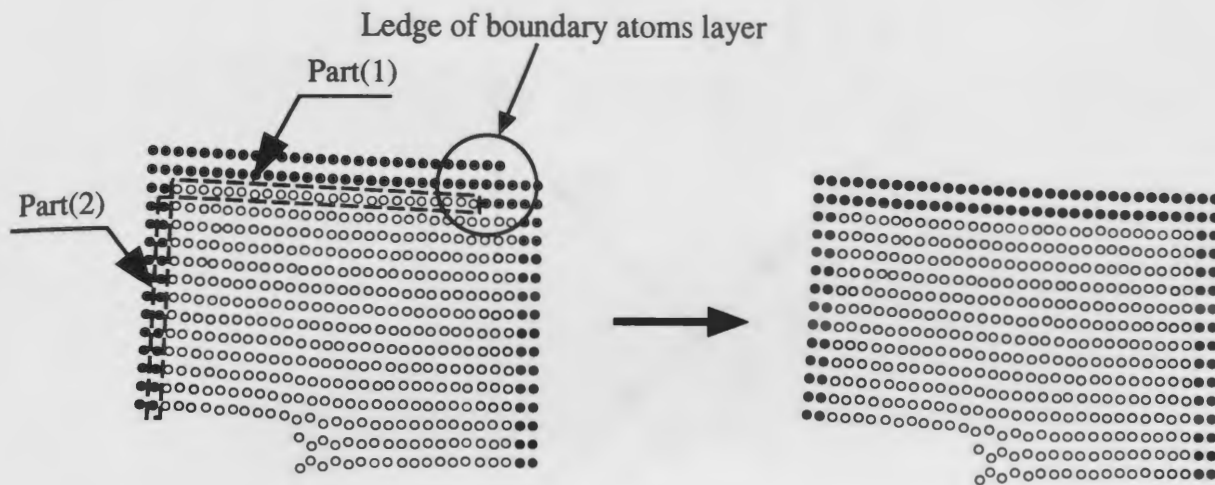


图 2.15 Re-smoothing of the molecular dynamics region. Free atoms of Part(1) are changed into boundary atoms, and boundary atoms of Part(2) into free atoms.

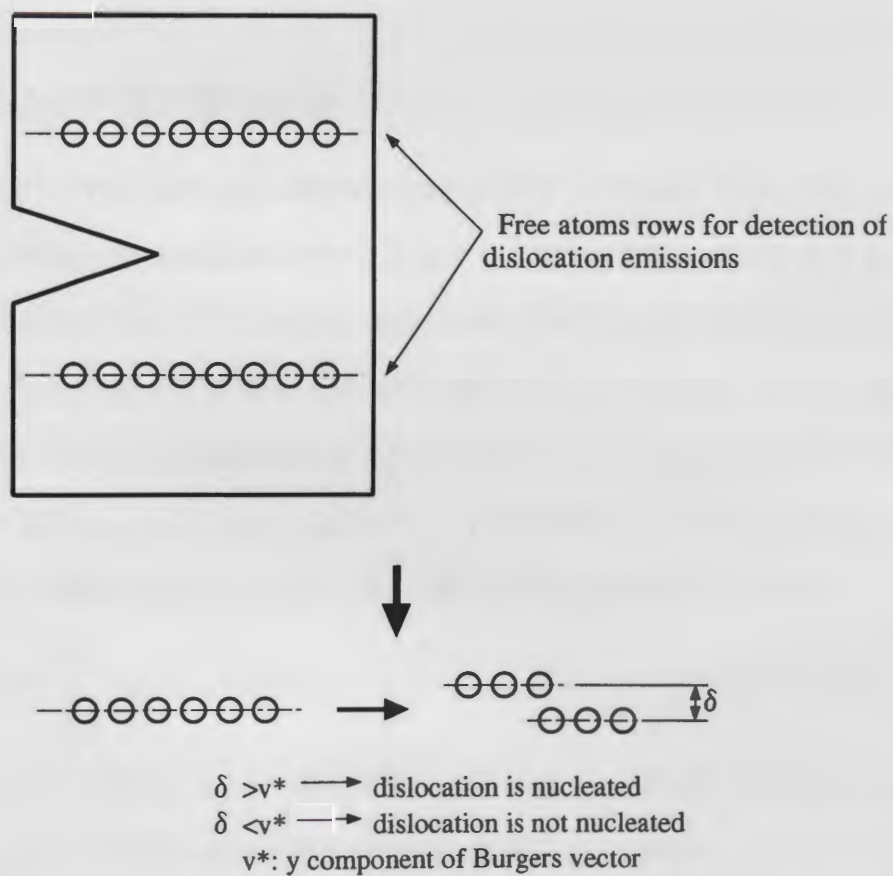


图 2.16 Detection of dislocation emissions and their slip planes.

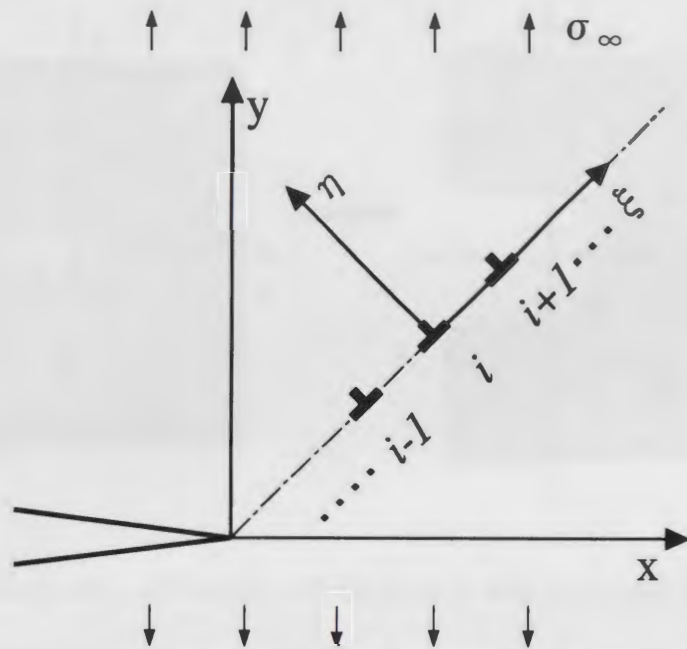


図 2.17 Dislocation array ahead of a crack.

2.4.5 転位の平衡位置の計算

この接合モデルでは前述の通り準静的な解析を行なうので転位分布は平衡分布になる。ここでは転位の平衡分布の計算法について説明する。転位の平衡分布を計算するためには、まず平衡方程式をたてなくてはならない。転位分布に対する平衡方程式は、転位を動かそうとする駆動力と転位の動きを阻害する摩擦力の釣合から求められる。ここで、図 2.17 のようにすべり面上に分布した n 個の転位について考える。 i 番目の転位に作用する駆動力は、一様な引っ張り応力 σ_∞ による力と i 以外の $n-1$ 個の転位から受ける力である。平衡状態ではこの駆動力と摩擦力が等しくなるので、平衡方程式は次式のようなになる。

$$\tau_{\infty i}(z_i) + \sum_{\substack{j=1 \\ (j \neq i)}}^n \tau_{ij}(z_i, z_j) = \tau_f \quad (i = 1, \dots, n) \dots\dots\dots (2.32)$$

ここで、 $\tau_{\infty i}$ は一様応力 σ_∞ が i 番目の転位に及ぼす $\xi-\eta$ 座標系 (図 2.17) におけるせん断応力で、 τ_{ij} は j 番目の転位が i 番目の転位に及ぼす $\xi-\eta$ 座標系 (図 2.17) におけるせん断応力、 τ_f は摩擦力、 z_i, z_j は i, j 番目の転位の座標である。完全結晶の場合は転位に作用する摩擦力 τ_f はパイエルス応力と等しくなる。しかし、一般の材料を対象とする際には臨界

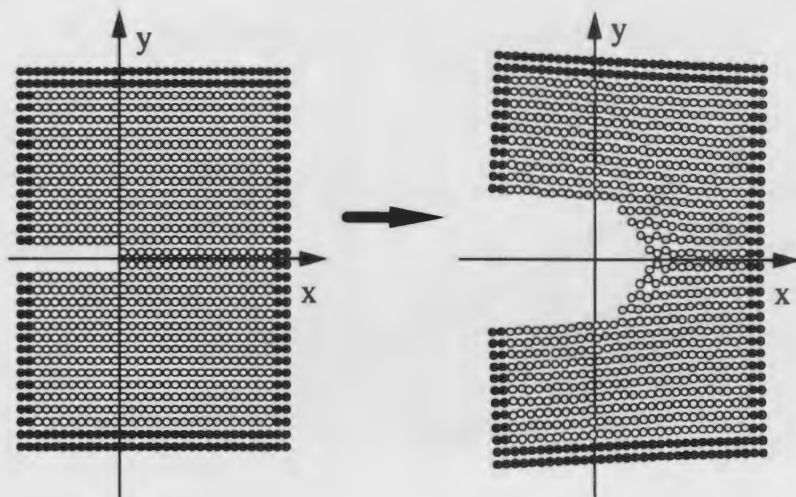


図 2.18 Crack opening and crack propagation in the molecular dynamics region.

せん断応力 (CRSS) などの実測値を用いるほうが好ましい。というのも一般の材料には初期転位や介在物などの欠陥が存在し、き裂先端から放出された転位はそれらにひっかかりながら移動していくので、平均の摩擦力はパイエルス応力より遥かに高くなりむしろ臨界せん断応力などのマクロな実測値に近くなると考えられるからである。

式 (2.32) は非線形の連立方程式となり解析的に解くことは不可能なので収束計算により解かなければならない。その際、最初に転位を適当に分布させてやる必要があるが、その転位の初期分布の仮定が適当でないと収束するのに時間がかかったり発散したりする。そこで、今回は初期分布としてその前に計算した分布を用いる。そして、新しく放出された転位はできるだけき裂先端に近い位置に配置する。つまり、計算のたびに転位の位置を少しずつ移動させるようにして計算を進めていく。このような初期分布から収束計算を行なうことにより効率的かつ確実に収束させることができる。

2.4.6 分子動力学領域の移動

図 2.18 に示しているのが転位放出に伴うき裂開口のシミュレーション結果である。このようにき裂の開口に伴い、き裂はすべり面分離により少しずつ進展していく。このままシミュレーションを進めていくと、すぐにき裂先端が分子動力学領域の端に到達してしまい、それ以後のシミュレーションができなくなる。従って、シミュレーションにおけるき裂進展

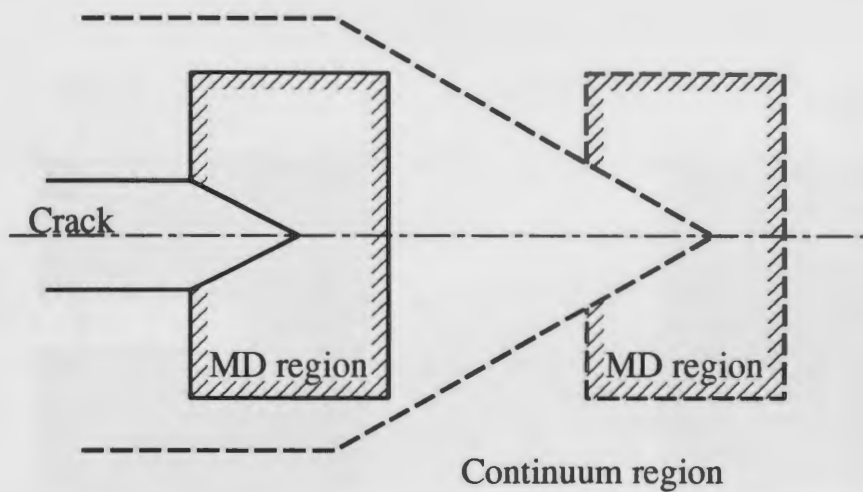


図 2.19 Movement of the molecular dynamics region with crack propagation.

量（き裂開口量）が分子動力学領域の大きさによって制限されることになり，き裂進展量の大きなプロセスをシミュレートする際にはそれを許容できる非常に大きな分子動力学領域が必要になる．そこでより効率的なシミュレーションを行なうために，本接合モデルでは図 2.19 に示すようにき裂進展に合わせて分子動力学領域を移動させる．そして，き裂先端が常に分子動力学領域の中にあるような状態を保つ．この操作によりき裂進展量が分子動力学領域の大きさによって制限されなくなり，比較的小さな分子動力学領域でき裂進展量の大きなプロセスのシミュレーションが可能となる．

分子動力学領域を移動させる方法は，図 2.20 において (1) として示してある列の自由原子を境界原子に置き換え，(2) として示してある列の境界原子を自由原子に置き換える．この操作を行なうことにより原子一個分の幅だけ分子動力学領域を移動させることができる．き裂の進展に合わせてこの操作を行なうことにより，き裂が進展しても常にき裂先端が分子動力学領域内にある状態を保つことができる．また，き裂先端はき裂に平行な方向にだけでなく，き裂に垂直な方向にもずれる可能性があるので，同様の方法で分子動力学領域がき裂に対して垂直な方向にも移動できるようにする必要がある．

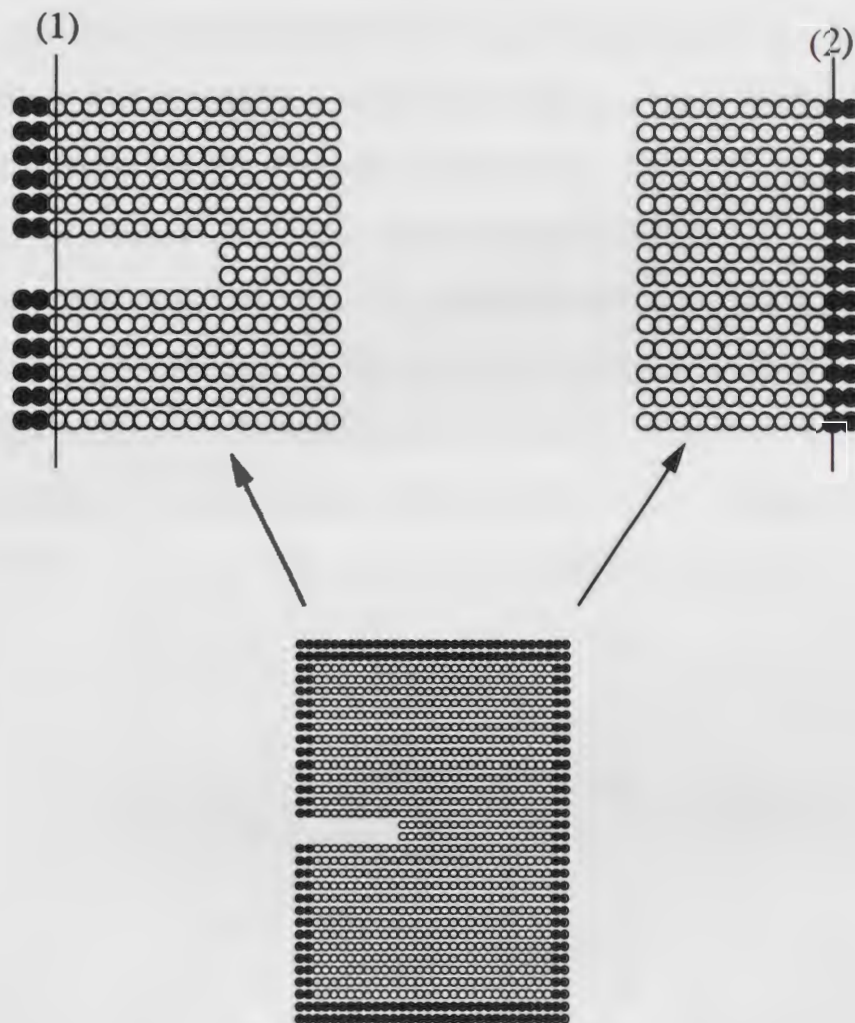


図 2.20 Method to move the molecular dynamics region. Free atoms indicated with (1) are changed into boundary atoms and boundary atoms with (2) into free atoms.

2.4.7 弾性定数とパイエルス応力の計算

弾性定数は静的な計算で一様なひずみを与え、応力を計算することにより求める。弾性定数に対する温度の影響は熱膨張による影響が若干あるだけなので、熱振動しない絶対零度の状態で計算しても問題はない。

パイエルス応力に関しては図 2.21 に示すように一個の転位を有する無限板に一様なせん断応力を加える問題を分子動力学を使ってシミュレートし、転位が動きだす限界の応力を求める。このとき、き裂の場合と同様に分子動力学と連続体力学の接合モデルを用いる。具体

的には、転位の周りの一部分だけを分子動力学で計算し、それ以外の領域を連続体力学を用いて計算する。その際の分子動力学領域のモデルとして図 2.22 のようなものを用いる。これはき裂のモデルと同様に自由原子と境界原子から成り立っていて、外力から計算された変位場をもとに境界原子の領域を变形させて計算を進める。このとき、境界上で転位による変位場を考慮しなくてはならないのだが、転位の変位場の与えかたとして連続体力学の転位の解を用いるのは適当ではない。というのも連続体力学の転位の解は転位のごく近傍では正解を与えないからである。そこで、図 2.23 のように体積力を分布させることにより転位による変位場を与える。つまり、連続体領域では転位はないものとして考え、転位から受ける内部応力は体積力として連続体領域に作用することになる。この体積力は、2.4.3 節の議論と同様に境界上での応力場が連続となるように収束計算により求める。

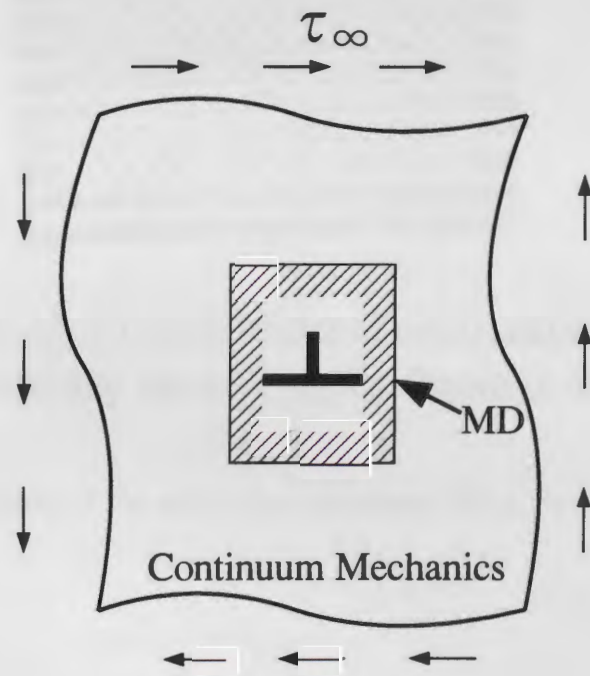
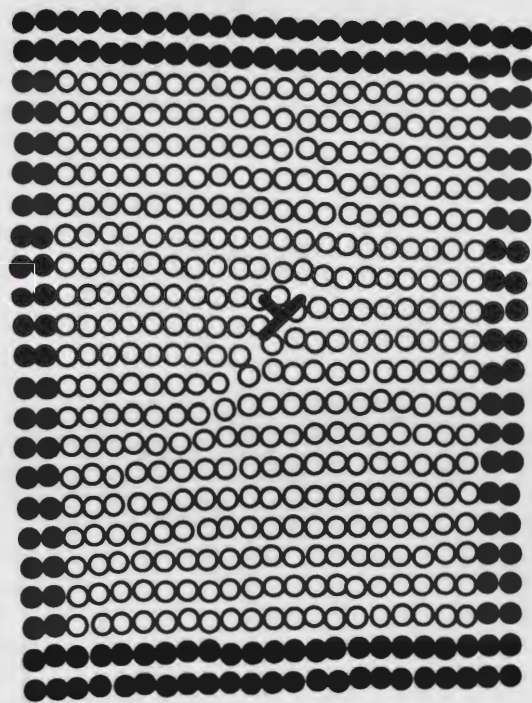


図 2.21 Model for Peierls stress calculation.



- : Free atom with thermal oscillation
- : Boundary atom without thermal oscillation

⊠ 2.22 Model of the molecular dynamics region for a dislocation.

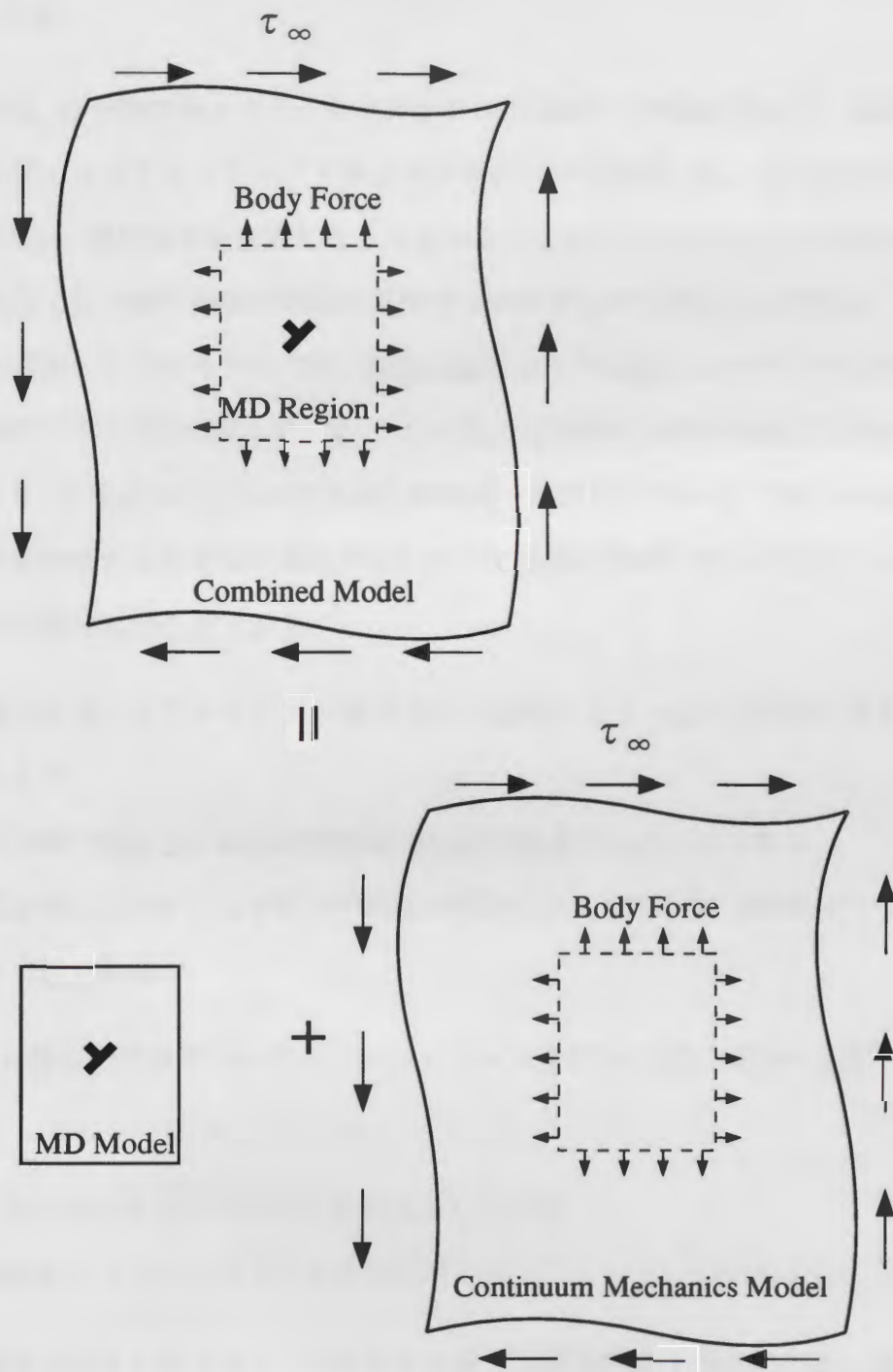


图 2.23 Combined model for a dislocation analysis.

2.5 まとめ

この章では、分子動力学とマイクロメカニクスの基礎的な理論に加えて、本研究で開発した分子動力学/マイクロメカニクス接合モデルについて説明した。分子動力学と連続体力学の連結手法は、周期境界を仮定しなくてもマクロなシミュレーションが可能であり、分子動力学の欠点である解析領域の問題を克服する決め手となり得るものである。

本研究で開発した接合モデルでは、従来の連結手法で問題となっていた転位の境界通過の問題を解決することに成功した。また、分子動力学領域をき裂の進展に合わせて移動させることにより、シミュレーションの大幅な効率向上が図られている。これらの点から本研究で開発した接合モデルは従来の連結手法に比べて格段に進歩したものだといえる。

その主な特徴は次の3点である。

1. 体積力を用いたフレキシブル境界条件の採用により、応力と変位の双方の境界条件をみだす。
2. き裂先端で発生した転位が両領域の境界を通過することができる。
3. き裂進展に合わせて分子動力学領域が移動することにより、効率的なシミュレーションが可能である。

また、この接合モデルを用いてシミュレーションを行なう際には次の2点に注意が必要である。

1. 2次元でのシミュレーションを前提としている。
2. 準静的なシミュレーションを仮定している。

従来の連結手法はき裂先端での転位発生に関する議論や完全弾性体でのへき開割れの議論に用いられる程度であったが、本接合モデルではき裂先端で塑性域が形成されていく様子などのシミュレートが可能になり、その適用範囲が飛躍的に拡大することが期待できる。

第2章の参考文献

- (1) Mullins, M. and Dokanish, F., *Philosophical Magazine* **46-5**, (1982), 771.
- (2) Mullins, M., *Scripta Metallurgica* **16**, (1982), 663.
- (3) Kohlhoff, S. and Schmauder, S., *V. Vitek and D.J. Srolovitz eds, Large Atomistic Simulation of Materials - Beyond Pair Potentials -*, Plenum Press, (1988), 411.
- (4) Kohlhoff, S., Gumbsch, P. and Fichmeister, H.F., *Philosophical Magazine* **64-4**, (1991), 851.
- (5) Kitagawa, H., Nakatani, A. and Shibutani, Y., *Materials Science and Engineering*, **A176**, (1994), 263.
- (6) Hirth, J. P., Hoagland, R. G. and Gehlen, P. C., *International Journal of Solids Structures*, **10**, (1974), 977.
- (7) Sinclair, J. E., Gehlen, P. C., Hoagland, R. G. and Hirth, J. P., *Journal of Applied Physics*, **49-7**, (1978), 3890.
- (8) Yang, W., Tan, H. and Guo, T., *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, **2**, (1994), 767.
- (9) 森口繁一, 二次元弾性論, (1957), 岩波書店.
- (10) Lekhnitski, S.G., *Anisotropic Plates*, (1968), Gordon and Breach.
- (11) 鈴木秀次, 転位論入門, (1976), アグネ.
- (12) Weertman, J. and Weertman, J.R., *Elementary Dislocation Theory*, (1964), The Macmillan Company.
- (13) 村・森, マイクロメカニクス, (1976), 培風館.
- (14) 石田, き裂の弾性解析と応力拡大係数, (1976), 培風館.
- (15) Eshelby, J.D., and Frank, F.C. and Nabarro, F.R.N., *Philosophical Magazine*, **Vol.42**, (1951), 351.

- (16) Chou, Y.T., *Journal of Applied Physics*, Vol.38, (1967), 2080.
- (17) Eshelby, J.D., *Proceedings, Royal Society London*, A241, (1957), 376.
- (18) Nisitani, H., *Mechanics of Fracture*, Vol.5, (1978), Noordhoff International Publishing, Chapter 1.
- (19) Jacobsen, K.W., Norskov, J.K. and Puska, M.J., *Physical Review*, B35-14, (1987), 7423.

第3章 き裂進展のシミュレーション結果および接合モデルの妥当性の検討

3.1 諸言

この章では、 α -鉄、単結晶 NaCl、単結晶タングステンを対象として行なったき裂進展のシミュレーション結果を示す。ここでのシミュレーションは分子動力学/マイクロメカニクス接合モデルの妥当性を検討するために行なったもので、実験結果との比較だけでなく、解析解との比較など様々な観点から接合モデルの妥当性を検討する。

この接合モデルを用いたシミュレーションではき裂開口に伴うすべり面分離によるき裂進展とへき開割れによるき裂の進展を明確に区別する。すべり面分離によるき裂進展では生成された転位の応力遮蔽効果によりき裂先端の応力が緩和され、き裂の進展は止まることができる。つまりき裂が進展することによりき裂進展に対する駆動力が増加するが、それと同時に生成された転位の影響でき裂進展に対する抵抗力も増加するのでき裂進展は安定的となる。しかし、へき開割れによるき裂進展では応力緩和の機構が存在しないために、き裂が進展した際に駆動力は増加するが抵抗力は変わらないということになりき裂進展は不安定的となる。この点を考慮してへき開割れが生じた時点で脆性破壊に至るとし、その際のマクロな応力拡大係数を破壊靱性値 K_{IC} とする。

α -鉄を対象としたシミュレーションではき裂開口のシミュレーションを行ないその妥当性を検討する。 α -鉄は室温付近で非常に軟らかく容易に塑性変形するので、き裂開口のシミュレーションを行なうのに都合がよい。NaCl およびタングステンは純度の高い単結晶が得られる上に、脆性的な材料であるため脆性破壊（へき開割れ）のシミュレーションを行なう上で都合がよい。それぞれのシミュレーションの内容は次のようなものである。

α -鉄では：

1. 分子動力学領域での初期き裂の導入法に対する検討を行なう。

2. 変位固定境界条件でシミュレーションを行ない応力場の連続性を確認するとともに、分子動力学領域の非線形性の影響について調べる。
3. 体積力を用いたフレキシブル境界条件でシミュレーションを行ない応力場の連続性を確認する。
4. 分子動力学領域を移動させた場合と移動させない場合の比較を行ない、この操作のシミュレーション結果への影響について調べる。
5. き裂先端開口変位を計算し解析解と比較することによりシミュレーション結果の妥当性を検討する。

NaCl では：

1. 脆性破壊のシミュレーションを行ない、その妥当性について検討する。

単結晶タングステンでは：

1. 2 体間ポテンシャルと EAM ポテンシャルを比較し、その妥当性を検討する。
2. 脆性破壊のシミュレーションを行ない、実験結果と比較する。
3. 分子動力学領域でのき裂のモデル化を再検討することにより、実験結果との対応を図る。
4. 再び脆性破壊のシミュレーションを行ない、実験結果と比較を行なうとともに、分子動力学領域のサイズ（原子数）の影響について調べる。

3.2 α -鉄を対象としたシミュレーション結果

3.2.1 シミュレーションの初期条件

α -鉄に対するシミュレーションでは Johnson によって導かれた 2 体間ポテンシャル⁽¹⁾を用いる。このポテンシャルは半経験的に求められた多項式型の 2 体間ポテンシャルで、計算負荷が低く非常に使いやすい。また、2 体間ポテンシャルの割には比較的よい近似ができていたので α -鉄のシミュレーションではしばしば用いられる^{(2),(3)}。Johnson ポテンシャルの詳細は表 3.1 に示す通りである。

図 3.1 に示しているのが bcc 構造の結晶格子に対する今回のシミュレーションの結晶方位である。解析面である x-y 平面が {110} 面になるようにし、き裂も {110} 面上に導入する。この結晶方位ではき裂に対して斜めの方向かつ対称な 2 つの {121} 面がすべり面として活動し、そのすべり方向は $\langle 111 \rangle$ 方向である。これらの {121} 面は x-y 平面に対して垂直であり、そのすべり方向も面内にあるため 2 次元で解析を行なう際に都合が良い。ここで、 α -鉄はこの結晶方位に対して弾性異方性をもつことに注意が必要である。分子動力学領域に対するモデルを図 3.2 に示す。板厚方向には 2 層の原子を配置し、周期境界条件を適用する。境界原子は原子間ポテンシャルの影響範囲を考慮して 2 列ずつ配置する。また、分子動力学領域での初期き裂は図 3.2 のように原子列を 2 列取り去ることにより導入する。なお、図 3.2 では、板厚方向の 2 層を区別して表示しているが、以後の図では特にことわりがない限り板厚方向の 2 層は区別せずに表示する。

表 3.1 Johnson's potential for α -iron.

Range of r (Å)	Potential: $\phi(r)$ (eV)
1.9-2.4	$-2.195976(r - 3.097910)^3 + 2.704060r - 7.436448$
2.4-3.0	$-0.639230(r - 3.115829)^3 + 0.477871r - 1.581570$
3.0-3.44	$-1.115035(r - 3.066403)^3 + 0.466892r - 1.547967$

このシミュレーションで使用する α -鉄の材料定数を表 3.2 に示す。弾性定数は原子間ポテンシャルから見積もったもので、平面ひずみ問題におけるものである。また、このシミュレーションでは転位に作用する摩擦力として分子動力学を用いて見積もったパイエルス応力を用いる。

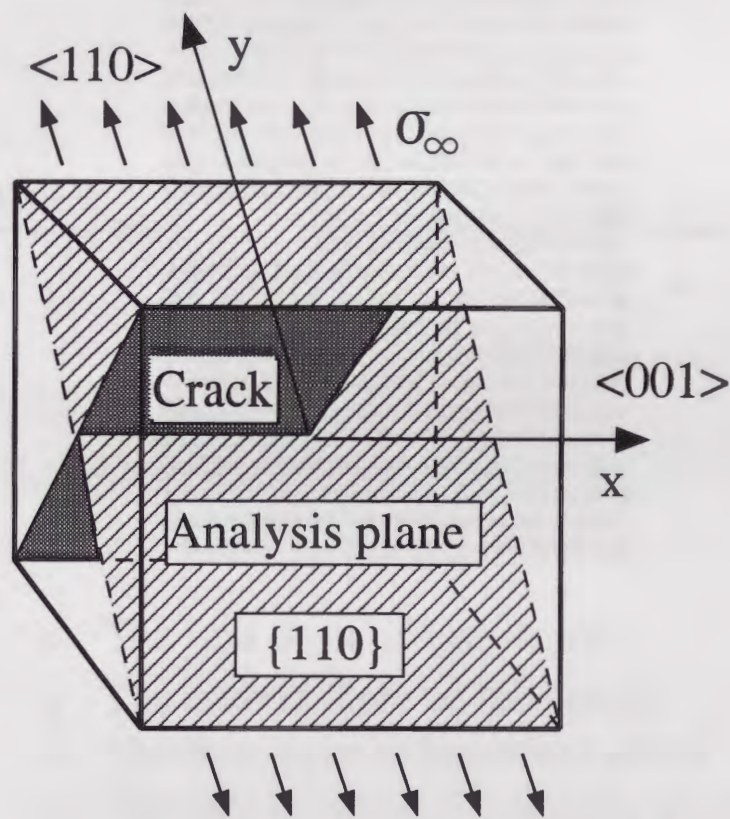
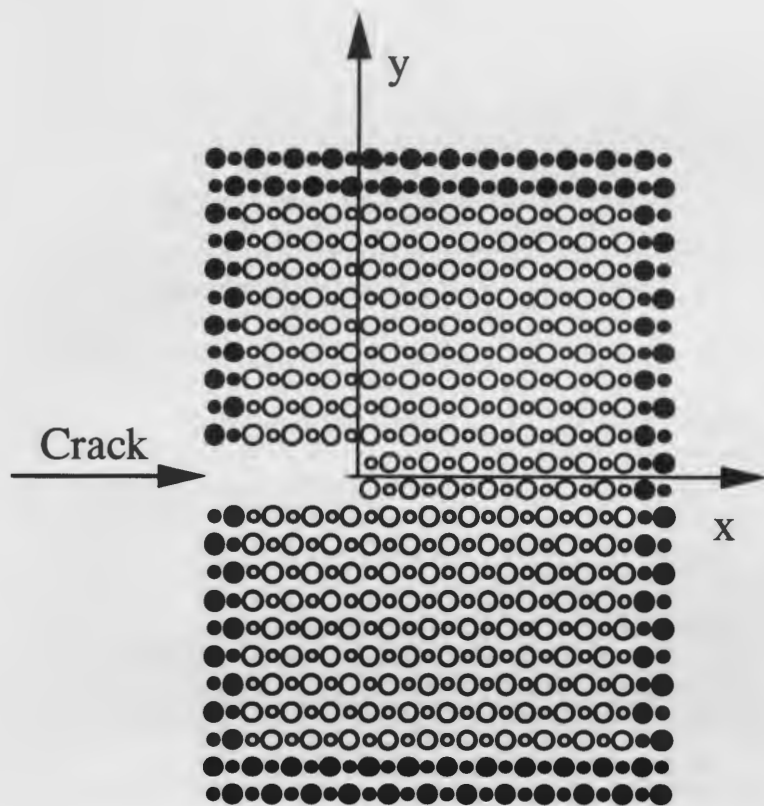


図 3.1 Crystallographic orientation.



- : The first layer of free atoms
- : The second layer of free atoms
- : The first layer of boundary atoms
- : The second layer of boundary atoms

⊗ 3.2 Molecular dynamics model for α -iron.

表 3.2 Material constants of α -iron.

Young's modulus (Plane strain) - E_x	150.96 (GPa)
Young's modulus (Plane strain) - E_y	192.32 (GPa)
Shear modulus - G	96.12 (GPa)
Poisson's ratio (Plane strain) - ν_{xy}	0.401
Poisson's ratio (Plane strain) - ν_{yx}	0.496
Peierls stress	160(GPa)
Lattice constant	2.8697 (Å)
Atomic weight	55.84

3.2.2 分子動力学領域での初期き裂の導入法に対する検討

図 3.3 に示すように分子動力学領域での初期き裂の導入法には 2 つの方法がある。一つはき裂面を通過する原子間力をカットする方法^{(2)~(5)}(Type-A)で、もう一つはき裂に相当する部分の原子を取り除いて表現する方法 (Type-B) であり、本研究では後者を採用している。ここでは、この 2 つの初期き裂導入法を用いて 290(K) におけるき裂進展のシミュレーションをそれぞれ行ない、その違いを調べる。

図 3.4 に示しているのが、荷重を負荷した際のき裂先端の変形の様子である。Type-A の初期き裂では転位の放出が起こる前にへき開割れが生じており、“完全な”脆性破壊が起こっている。この結果を背景に、deCelis ら⁽³⁾は Johnson のポテンシャルで表現された α -鉄は本質的に脆性的になると主張している。しかし、 α -鉄は室温付近では延性的で脆性破壊は起こさないことが実験的に確認されており⁽⁶⁾、この Type-A の結果は実験事実と矛盾する。一方、Type-B の初期き裂では転位が放出されている様子がシミュレートされている。従って、Type-B の初期き裂導入法の方が実験事実 に 則した結果が得られており、妥当であることがわかる。そもそも、Type-A の初期き裂は数学的なき裂のモデルには近いが物理的には不自然なものであり、現実の材料中には存在し得ない。そのような観点からも Type-B の初期き裂を導入するほうが自然である。

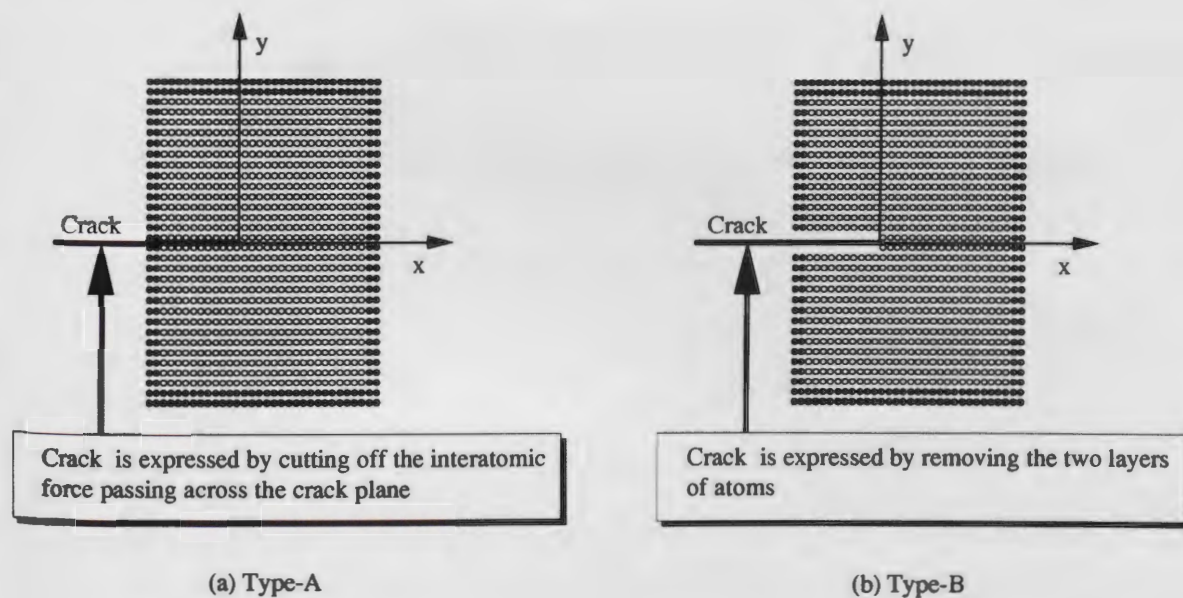
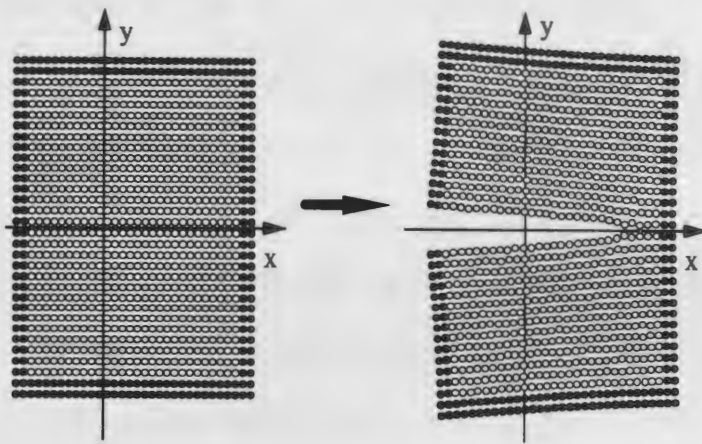
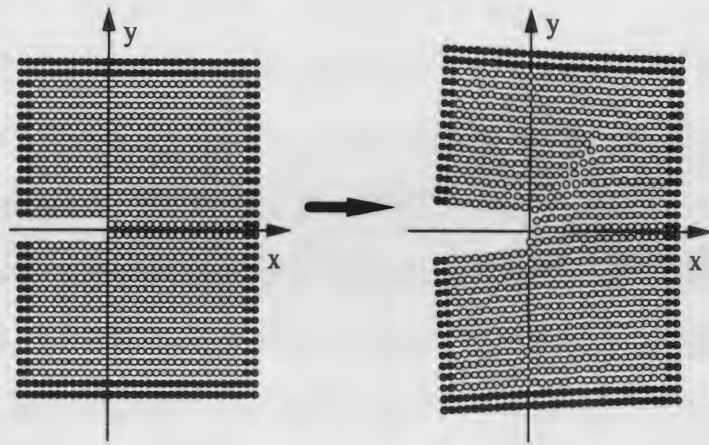


図 3.3 Crack introduction methods in a molecular dynamics region.



(a) Result of the type-A model



(b) Result of the type-B model

图 3.4 Results of simulations using the Type-A and Type-B models.

3.2.3 変位固定境界条件によるシミュレーション結果

この節では体積力による修正を行わない変位固定の境界条件でシミュレーションを行ない、境界上での応力場の連続性を確認するとともに、分子動力学領域の非線形性の影響の度合について調べる。また、このシミュレーションでは分子動力学領域の移動も行わない。分子動力学領域の移動の操作に関しては、後の 3.2.5 節でその妥当性の検討を行なう。この節でのシミュレーションの条件を表 3.3 に示す。ここでは負荷荷重の大きさを応力拡大係数 K_I で表し、 $K_I=0\sim 1.2$ ($\text{MPa}\sqrt{\text{m}}$) の範囲で荷重を徐々に上げていくプロセスのシミュレーションを行なった。このシミュレーションで得られたき裂先端の変形の様子、境界上での応力、放出された転位の数などの結果を以下に示す。ここで示す応力は分子動力学領域の右側面と下面での垂直応力（図 3.5 を参照）の計算結果である。

図 3.6～図 3.9 にき裂先端の変形の様子と境界上での応力の計算結果を示す。また、表 3.4 に放出された転位の数と塑性域長さを示す。これらの計算結果をみると、 $K_I=0.6\sim 1.0$ ($\text{MPa}\sqrt{\text{m}}$) の状態では両領域の境界上での応力はよく一致している。このシミュレーションでは、 $K_I=0.0\sim 0.6$ ($\text{MPa}\sqrt{\text{m}}$) の間は弾性変形で、 $K_I=0.6\sim 0.8$ ($\text{MPa}\sqrt{\text{m}}$) の間で塑性変形が開始し転位の放出が始まる。従って、転位の放出が開始した後も応力の連続性は保たれている。この結果から、分子動力学の転位から連続体の転位への変換の操作がうまく機能しており、妥当なシミュレーション結果が得られていることがわかる。

$K_I=1.2$ ($\text{MPa}\sqrt{\text{m}}$) の段階での計算結果（図 3.9）をみると、Plane-2 では応力場の連続性が保たれているが、Plane-1 では応力の食い違いが生じていて、応力場の連続性が崩れている。これが 2.4.3 節で説明した分子動力学領域の非線形性の影響だと考えられる。図 3.10 に x 軸方向に引張りを加えた際の平滑材の応力-ひずみ線図（図 3.10(a)）と y 軸方向の応力-ひずみ線図（図 3.10(b)）を示す。このように、この材料（ポテンシャル）では非線形性に関しても異方性があり、x 軸方向の方が非線形性が強い。従って、 $K_I=1.2$ ($\text{MPa}\sqrt{\text{m}}$) の結果で Plane-1 の方が応力の食い違いが大きくなるのは理にかなっている。

これらのシミュレーション結果を順に見ると、非常にきれいな形でき裂が開口していく様子がシミュレートされている。また、放出された転位の数と塑性域長さのデータ（表 3.4）から塑性域の成長の様子もきれいな形でシミュレートされていることがわかる。以上の結

果から、本接合モデルによるシミュレーションでは転位の境界通過の問題に関してはほぼ完全な形で解決されており、良好なシミュレーション結果が得られていることがわかる。

表 3.3 Calculation condition of the simulation with a MD-region settling model.

Number of free atoms	10000
Pre-crack length	2 (mm)
Temperature	290 (K)

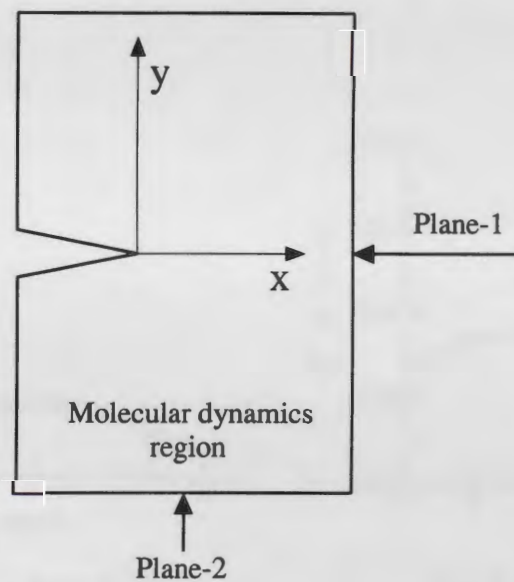
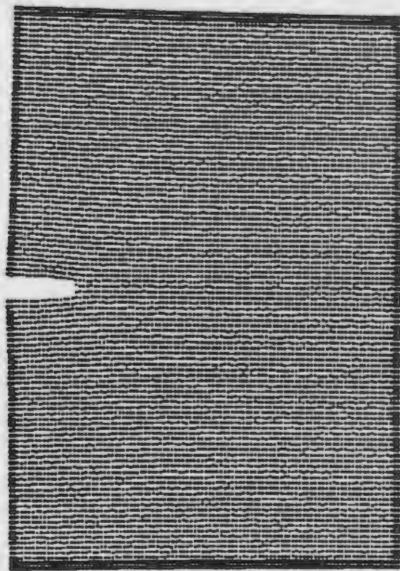
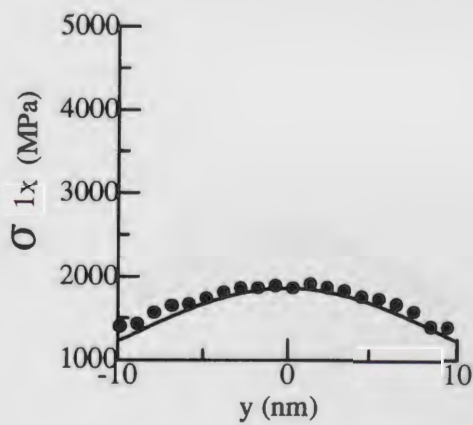


図 3.5 Stress calculation plane.

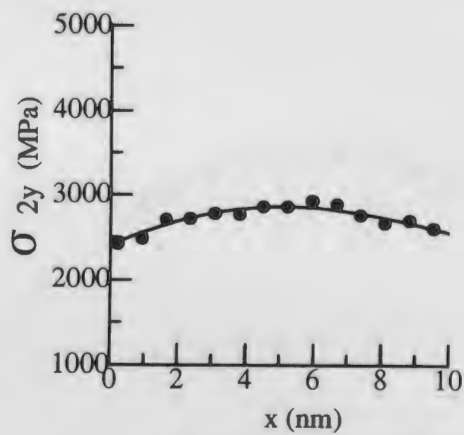


10 (nm)

(a) Deformation of crack tip



(b-1) Normal stress of Plane-1

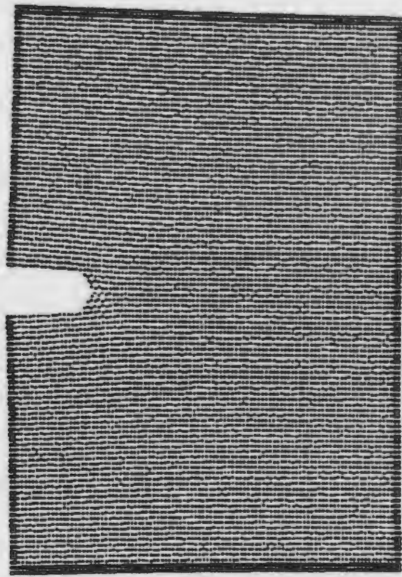


(b-2) Normal stress of Plane-2

— : Stress calculated with micromechanics
 ● : Stress calculated with molecular dynamics

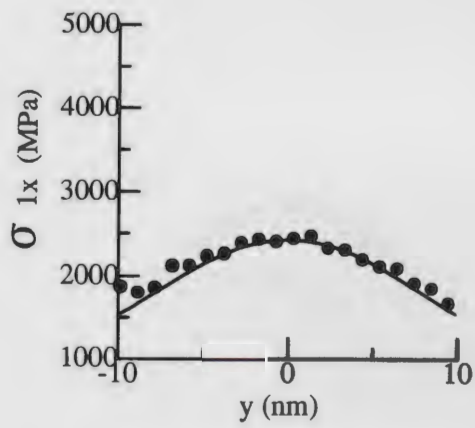
(b) Result of the calculation of stress

⊠ 3.6 Result at $K_I=0.6(\text{MPa}\sqrt{\text{m}})$.

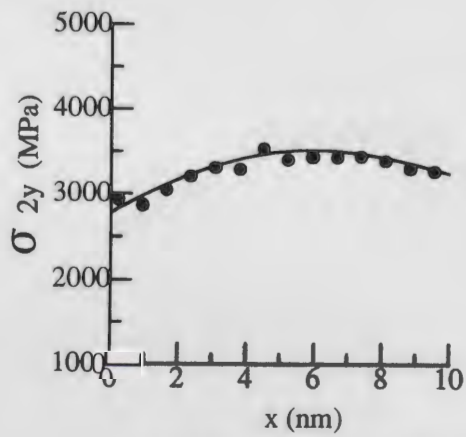


10 (nm)

(a) Deformation of crack tip



(b-1) Normal stress of Plane-1

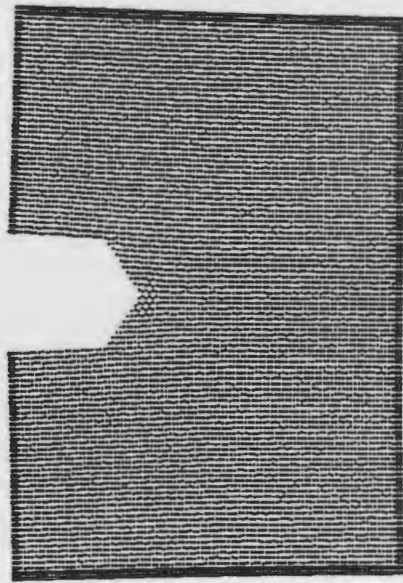


(b-2) Normal stress of Plane-2

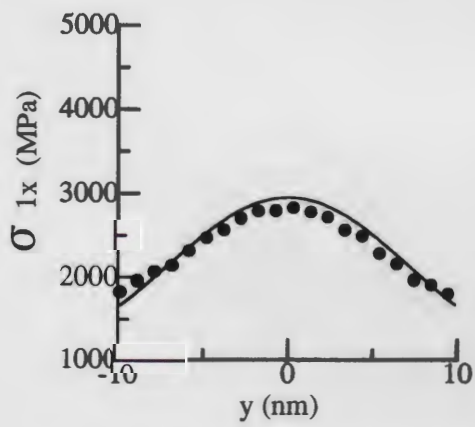
— : Stress calculated with micromechanics
 ● : Stress calculated with molecular dynamics

(b) Result of the calculation of stress

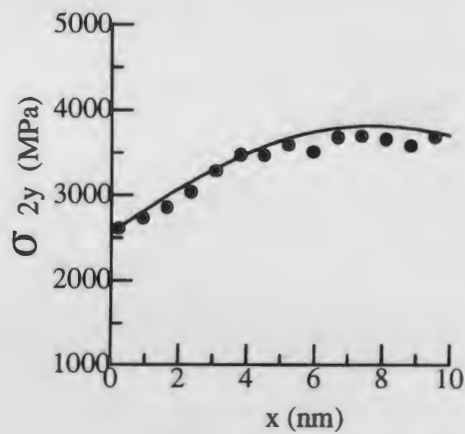
⊠ 3.7 Result at $K_I=0.8(\text{MPa}\sqrt{\text{m}})$.



(a) Deformation of crack tip



(b-1) Normal stress of Plane-1

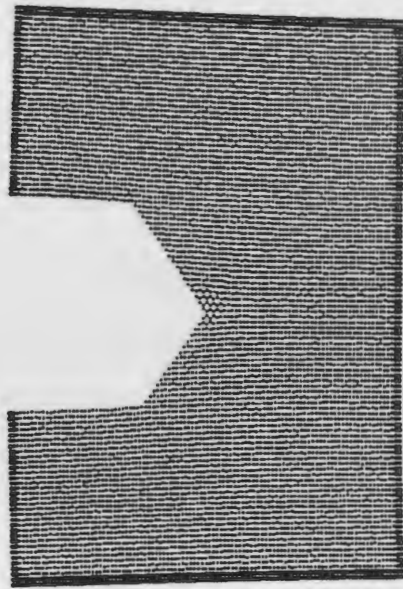


(b-2) Normal stress of Plane-2

— : Stress calculated with micromechanics
 ● : Stress calculated with molecular dynamics

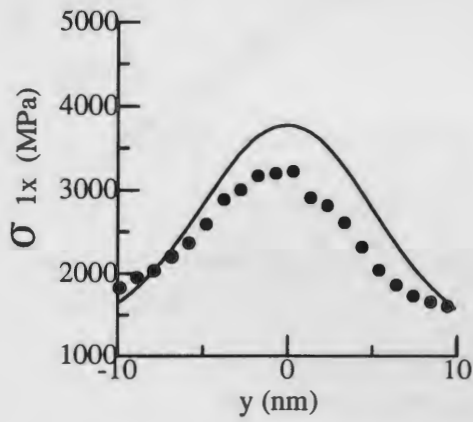
(b) Result of the calculation of stress

⊠ 3.8 Result at $K_I=1.0(\text{MPa}\sqrt{\text{m}})$.

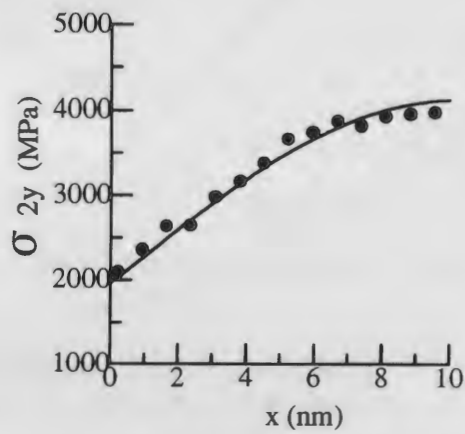


10 (nm)

(a) Deformation of crack tip



(b-1) Normal stress of Plane-1



(b-2) Normal stress of Plane-2

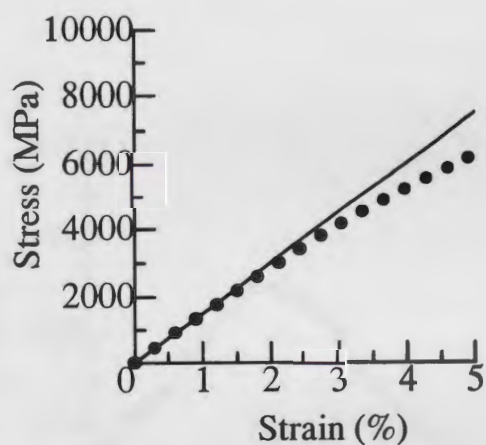
— : Stress calculated with micromechanics
 ● : Stress calculated with molecular dynamics

(b) Result of the calculation of stress

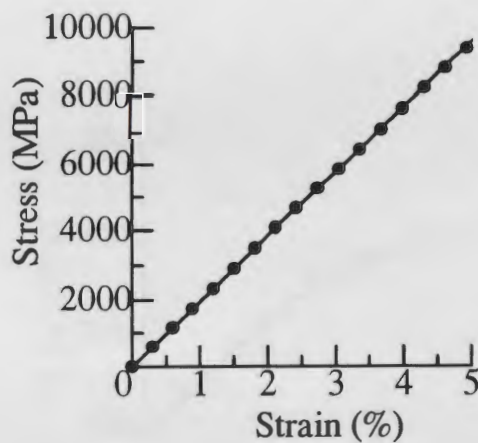
⊠ 3.9 Result at $K_I=1.2(\text{MPa}\sqrt{\text{m}})$.

表 3.4 Emitted dislocations and plastic zone length.

K_I (MPa \sqrt{m})	0.6	0.8	1.0	1.2
Number of emitted dislocations	0	4	16	33
Plastic zone length (μm)	0	0.59	1.57	3.09



(a) Stress-strain curve in a x-axis direction



(b) Stress-strain curve in a y-axis direction

— : Stress-Strain curve of continuum mechanics
 ● : Stress-Strain curve of molecular dynamics

图 3.10 Stress-strain curves in α -iron.

3.2.4 体積力を用いたフレキシブル境界条件によるシミュレーション結果

この節では前節と同様の条件で体積力による境界条件の修正を行なうフレキシブル境界条件を用いてシミュレーションを行なった。このシミュレーションでは $K_I=1.2(\text{MPa}\sqrt{\text{m}})$ の段階で37本の転位が放出されており、塑性域の長さは $4.00(\mu\text{m})$ となった。 $K_I=1.2(\text{MPa}\sqrt{\text{m}})$ における応力の計算結果を図3.11に示す。変位固定のシミュレーションでは $K_I=1.2(\text{MPa}\sqrt{\text{m}})$ の段階で応力場の連続性が崩れたのに対し、フレキシブル境界条件を採用したシミュレーションでは応力場の連続性が維持されている。従って、このフレキシブル境界条件はうまく機能しており、分子動力学領域の非線形性の問題は解決できたといえる。参考として、そのときのき裂先端の様子と転位分布の様子を図3.12に示す。

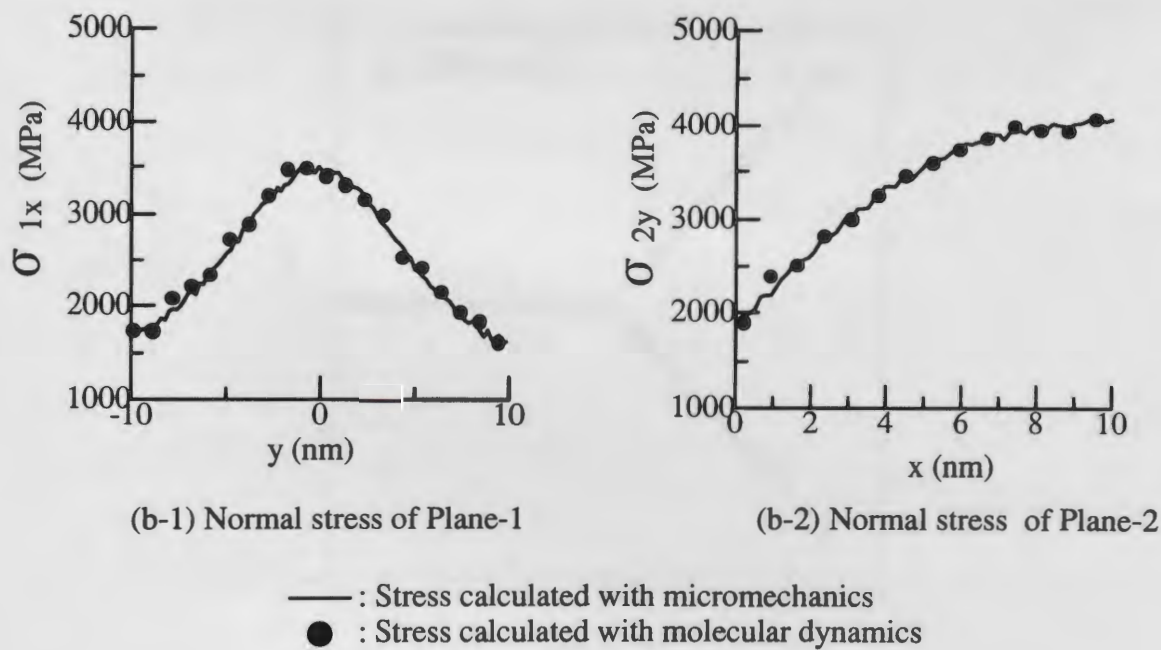
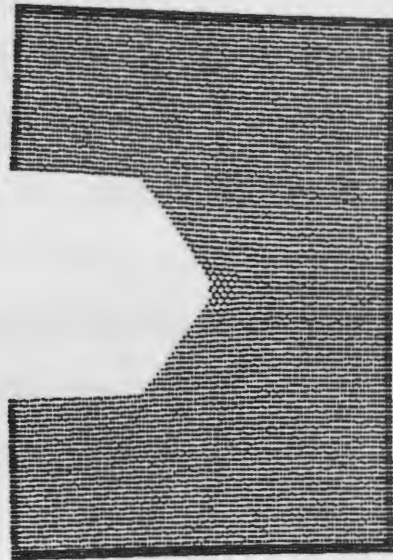
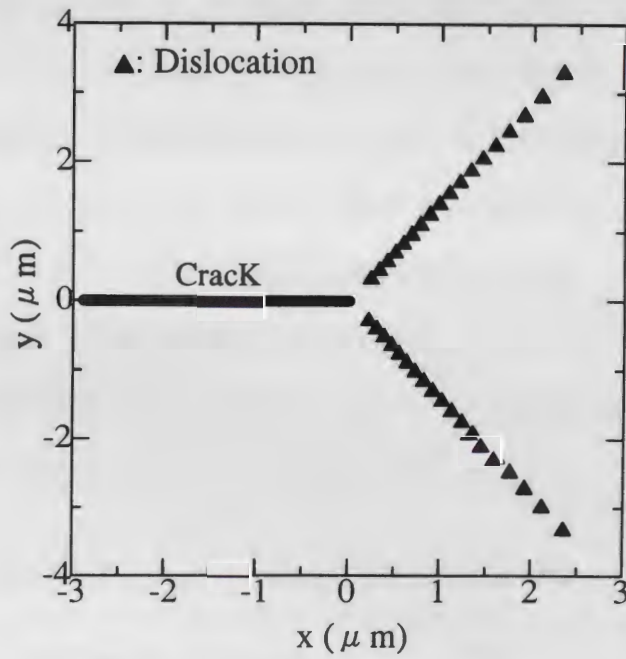


図 3.11 Stress field calculated with flexible boundary condition at $K_I=1.2(\text{MPa}\sqrt{\text{m}})$.



10 (nm)

(a) Deformation of crack tip



(b) Distribution of dislocations

☒ 3.12 Crack tip deformation and dislocation distribution at $K_I=1.2(\text{MPa}\sqrt{\text{m}})$.

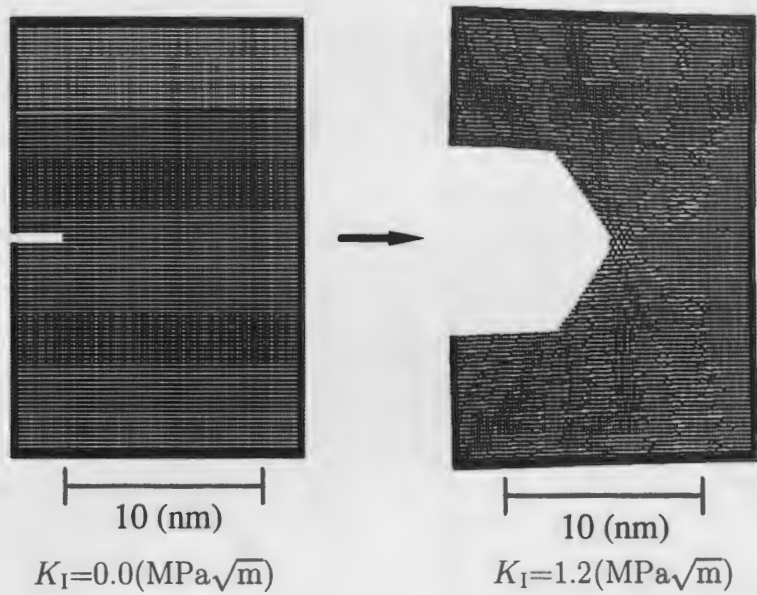
3.2.5 MD 領域移動モデルを用いたシミュレーション結果

この節では分子動力学領域をき裂進展にあわせて移動させる操作を行ないながらシミュレーションを行ないその妥当性を検討する。ここでは特に分子動力学領域を移動させるモデルを MD 領域移動モデルと呼び、前節まで用いていたような分子動力学領域が移動しないモデルを MD 領域不動モデルと呼ぶ。ここでのシミュレーションの条件は表 3.5 に示す通りで原子数が 784 と分子動力学領域が非常に小さいモデルを用いる。また、ここでは前節で得られている MD 領域不動モデルのシミュレーション結果と MD 領域移動モデルのシミュレーション結果を詳細に比較する。

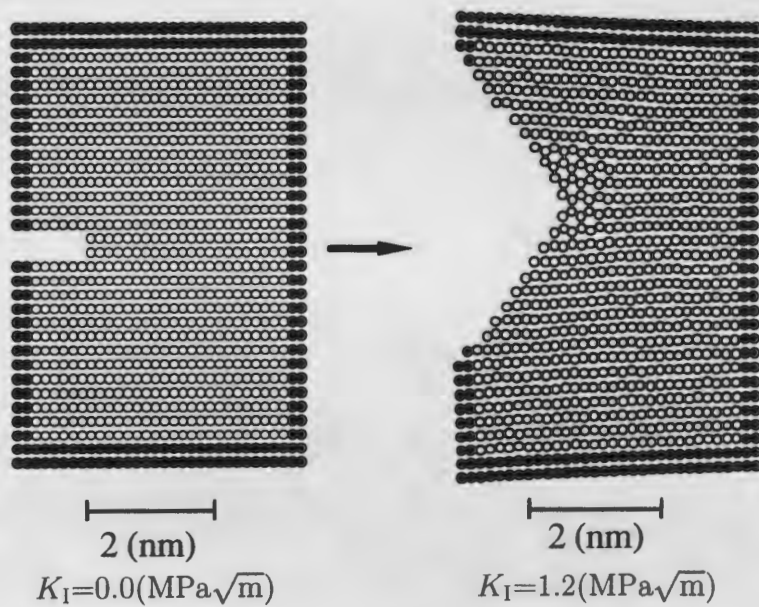
き裂先端の変形の様子を図 3.13 に示し、転位分布の様子を図 3.14 に示す。図 3.13(b) に示している MD 領域移動モデルの結果は、図 3.13(a) に示している MD 領域不動モデルのき裂先端部分を切り出してシミュレートしたものと等価になる。図 3.14 の転位分布を比べて見ると、MD 領域不動モデルと MD 領域移動モデルの結果は、ほぼ一致している。また、更に詳細に比較するために放出された転位数、き裂先端開口変位 (CTOD)、塑性域長さを比較した結果を表 3.6 に示す。この表に示すようにこれらの数値もよく一致している。従って、分子動力学領域を移動させる操作を行なっても同じ結果が得られることが示された。特筆すべきことは、MD 領域移動モデルでは原子数が 784 個と非常に小さな分子動力学領域で同じ結果が得られている点である。これにより、計算コストは $1/10$ 以下に押えられている。また、この結果から分子動力学領域の大きさの違いがシミュレーション結果に影響を及ぼさないことも同時に確認された。以上のことから MD 領域移動モデルの妥当性と有用性を確認することができた。

表 3.5 Calculation condition of the simulation with a MD-region moving model.

Number of free atoms	784
Pre-crack length	2 (mm)
Temperature	290 (K)

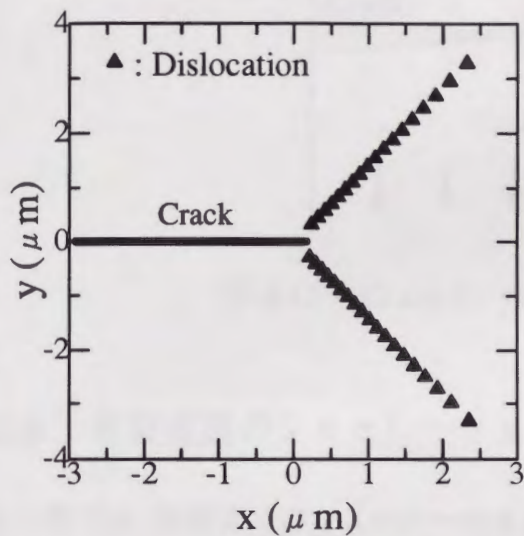


(a) MD-region settling model

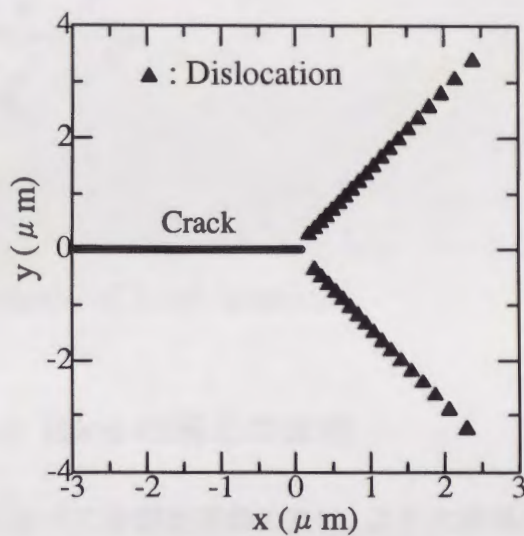


(b) MD-region moving model

图 3.13 Results of crack tip deformation in simulations.



(a) MD-region settling model



(b) MD-region moving model

图 3.14 Distribution of dislocations at $K_I=1.2(\text{MPa}\sqrt{\text{m}})$.

表 3.6 Comparison between a MD-region settling model and a MD-region moving model.

	MD-region settling model	MD-region moving model
Number of emitted dislocations	37	37
CTOD	7.508(nm)	7.508(nm)
Dimension of plastic zone	4.00(nm)	4.05(nm)

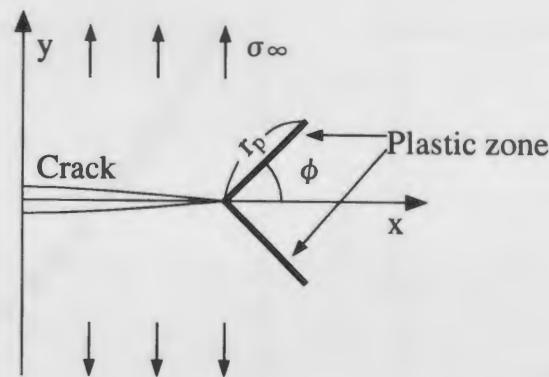


図 3.15 Crack tip yield model of Rice's solution.

3.2.6 き裂進展のシミュレーションと Rice の解との比較

この節では、前節までのシミュレーションに比べてき裂進展量の長い、より大規模なき裂進展のシミュレーションを行なう。その際、3.2.5 節の定義でいう、MD 領域移動モデルを用いる。シミュレーションの条件は 3.2.5 節と同じである。また、このシミュレーションではき裂先端開口変位 (CTOD) と塑性域長さを計算し、それを Rice の導き出した解析解⁽⁷⁾と比較する。

平面ひずみ問題では、図 3.15 のようなき裂に対して対称な斜めの 2 直線上に塑性域が広がっていく。Rice の解ではこの問題に対して Dugdale モデル⁽⁸⁾と同様に小規模降伏の条件と塑性域の中でのせん断応力が一様に降伏せん断応力に等しくなるという条件のもとで、き裂先端開口変位と塑性域長さを解析的に導いてある。その詳細については付録で説明することにし、ここではその結果だけを示す。

$$r_p = \frac{\pi}{64} \sin^2 \phi (1 + \cos \phi) \frac{K^2}{\tau_s^2} \dots\dots\dots (3.1)$$

$$\text{CTOD} = \frac{1}{4} (1 - \nu^2) \sin^3 \phi (1 + \cos \phi) \frac{K^2}{E \tau_s} \dots\dots\dots (3.2)$$

ここで、 r_p は塑性域長さ、 E はヤング率、 ν はポアソン比、 ϕ は塑性域がき裂と成す角、 τ_s は降伏せん断応力、 K は応力拡大係数である。今回の計算では E として E_y (表 3.2) を用い、 ν として ν_{yx} (表 3.2) を用いる。 ϕ はすべり面とき裂の成す角なのでこの場合は $\phi=54.7^\circ$

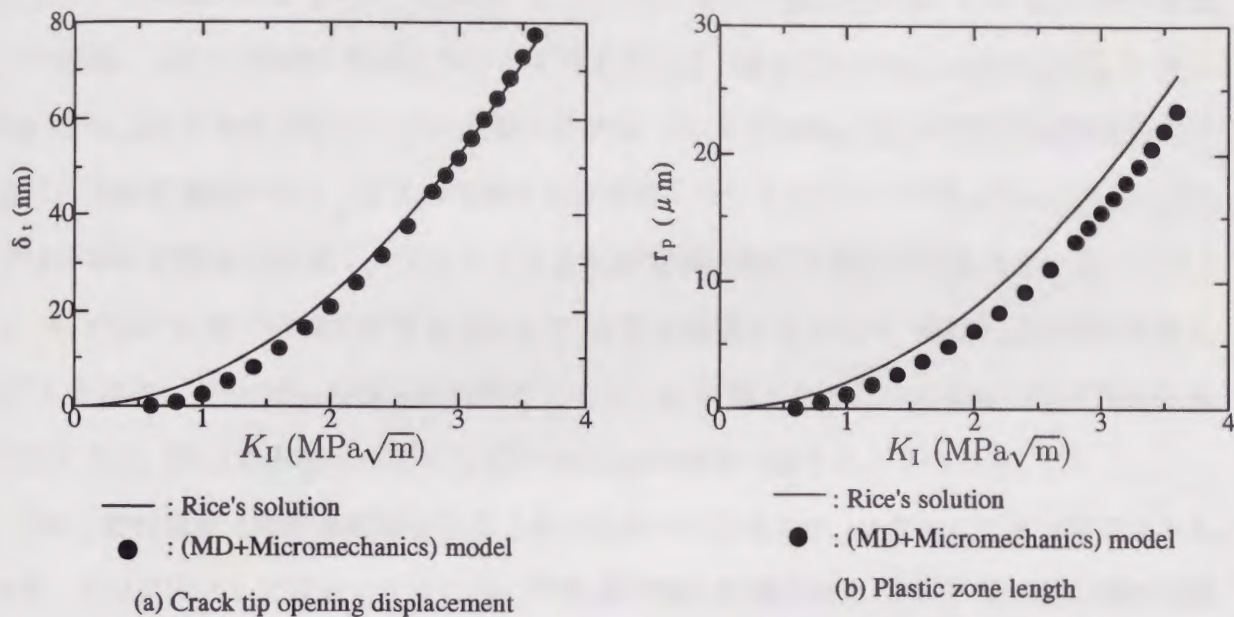


図 3.16 Crack tip opening displacements and plastic zone lengths compared with Rice's solution.

である。また、降伏せん断応力に関してはシミュレーションと条件を合わせるためにパイエルス応力 (表 3.2) を用いる。

Rice の解と接合モデルによるシミュレーション結果を比較する際には次の点に注意する必要がある。

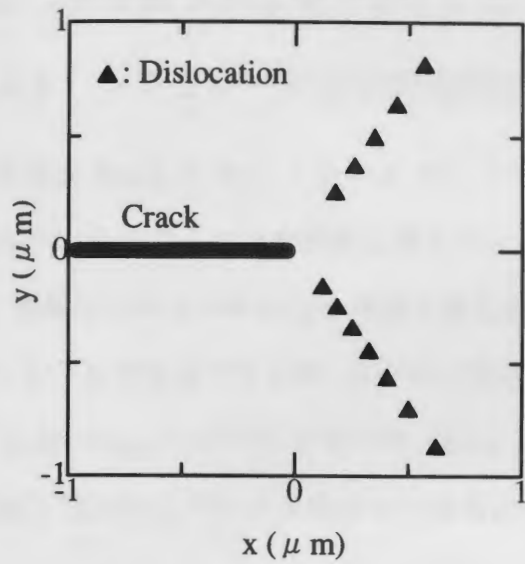
1. 接合モデルでは転位発生に対する抵抗力を考慮しているが、Rice の解ではそれを考慮していない。従って、シミュレーションでは $K_I \leq 0.6$ では塑性変形しないのに対し、Rice の解では少しでも荷重がかかると塑性変形する。
2. 1. に関連して Rice の解ではき裂の先端まで塑性域が存在し、Dislocation Free Zone (DFZ) が存在しない。
3. 接合モデルでは結晶の弾性異方性を考慮しているのに対し、Rice の解は等方性の板に対して解いてある。

以下、これらの点を念頭におきながらシミュレーション結果と Rice の解を比較する。ここでのシミュレーションは $K_I=0.0\sim 3.6(\text{MPa}\sqrt{m})$ の範囲で行なった。き裂先端開口変位と塑性域長さの計算結果を図 3.16 に示す。き裂先端開口変位の計算結果をみると、 K_I の低い状態

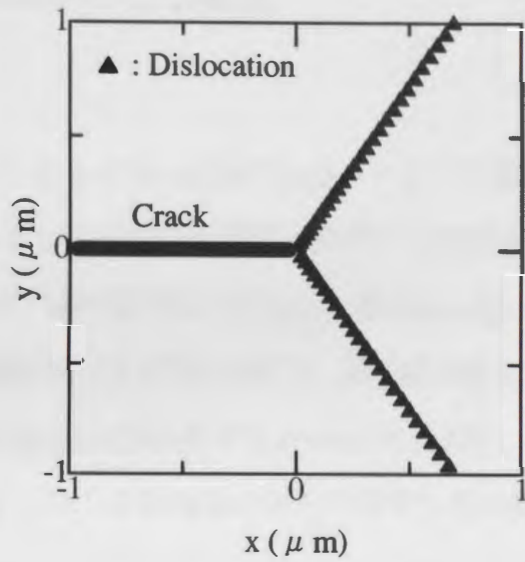
では若干の相違があるものの、全体的に Rice の解とよく一致している。この K_I の低い状態での相違は DFZ の問題に関係していると考えられる。図 3.17 に $K_I=1.0(\text{MPa}\sqrt{\text{m}})$ と $K_I=3.2(\text{MPa}\sqrt{\text{m}})$ における転位の分布の様子を示す。 $K_I=1.0(\text{MPa}\sqrt{\text{m}})$ の状態では転位分布がまばらで転位密度が低く、DFZ の大きさも塑性域に対して大きい。一方、 $K_I=3.2(\text{MPa}\sqrt{\text{m}})$ では非常に転位密度が高く、DFZ の大きさも塑性域に対して無視できるほど小さい。従って、 K_I の低い状態では転位密度もまばらで DFZ の影響もあるので、連続転位分布を仮定し DFZ の存在しない Rice の解とは相違がでるが、 K_I が高くなるにつれ転位分布が連続分布に近くなり、DFZ の影響も小さくなるので Rice の解と一致するようになる。

次に、塑性域長さの計算結果をみると傾向はあっているものの、全体として若干相違がみられる。この原因として接合モデルの持つ弾性異方性の影響が考えられる。表 3.2 の弾性定数をみても接合モデルでは、 x 軸方向より y 軸方向のほうがヤング率が大きい。Rice の解による計算では y 軸方向のヤング率を用いて等方性として計算しているので、 x 軸方向のヤング率は接合モデルのほうが低くなる。転位による内部応力は弾性定数によって変化し、ヤング率が低くなると内部応力も小さくなる。従って、接合モデルの方が転位の内部応力が小さくなり、各々の転位間に作用する相互作用力も弱くなる。結果として、き裂先端から最も遠くはなれた転位を押しやろうとする力が弱くなり、塑性域が Rice の解に比べて小さくなったと考えられる。

以上の議論から、接合モデルによるシミュレーションでは良い結果が得られており、き裂先端開口変位や塑性域長さの計算結果は Rice の解と一致する。この結果からき裂開口のプロセスのシミュレーションでは妥当な結果が得られることが確認できた。



(a) $K_I = 1.0 \text{ (MPa}\sqrt{\text{m}})$



(b) $K_I = 3.2 \text{ (MPa}\sqrt{\text{m}})$

图 3.17 Distributions of emitted dislocations.

3.3 単結晶 NaCl を対象としたシミュレーション結果

3.3.1 シミュレーションの初期条件

単結晶 NaCl は Na^+ イオンと Cl^- イオンから成るイオン結晶である。イオンは電荷をもっているのでイオンモデルに対するシミュレーションでは原子間に作用する力だけでなく、電荷同士のクーロン力も考慮する必要がある。原子間の相互作用力は Short-range のポテンシャルで表現できるが、クーロン力は広範囲に渡って影響を及ぼす。原子間力を表現する Short-range のポテンシャルは、Born-Mayer-Higgins 型のポテンシャル⁽⁹⁾を用い、その係数は Corish ら⁽¹⁰⁾が求めたものを用いる(表 3.7)。これは次のような形をしている。

$$\Phi_{ij}^{SR} = A \exp\left(\frac{-r}{\rho}\right) - \frac{C}{r_{ij}^6} - \frac{D}{r_{ij}^8} \dots\dots\dots (3.3)$$

この右辺の第 1 項は原子間に働く斥力を表し、第 2, 3 項はそれぞれ 2 重極, 4 重極に対応する。このポテンシャルでは第 2 近接原子までを考慮する。また、クーロン力に対応するポテンシャルは良く知られた次の形で表される。

$$\Phi_{ij}^C = \frac{z_i z_j e^2}{r_{ij}} \dots\dots\dots (3.4)$$

ここで、 z_i, z_j は i, j イオンの価数、 e は電気素量である。このクーロン力による相互作用は広範囲におよびその計算には工夫が必要になる。周期境界条件が適用可能であれば Ewald の方法⁽¹¹⁾を使って効率よく計算できるが、今回のシミュレーションでは全方位に対して周期境界条件を適用することはできない。そこで今回は Hoagland ら⁽¹²⁾の方法を用いて、クーロン力を計算する。これは板厚方向の周期性を利用して板厚方向に無限に並んだ点電荷列との相互作用を計算する方法である。表 3.8 に示すのが NaCl 型の結晶に対して計算したもので、点電荷列が $\langle 001 \rangle$ 方向に並んでいるときの i 番目のイオンと j 番目の点電荷列が作り出すポテンシャルを表している。なお、再度計算し直してみたところ Hoagland らの原論文では、 $0.8 \leq r_{ij} \leq 2.5$ の範囲の係数に誤植があったので修正した値を表 3.8 に示している。

NaCl の結晶構造である NaCl 型結晶格子とそれに対する今回のシミュレーションの結晶方位の関係を図 3.18 に示す。NaCl 型結晶はちょうど fcc 構造を 2 つ重ね合わせたような構造をしており、すべりは $\{110\}$ 面に沿って $\langle 110 \rangle$ 方向におきやすい。従って、今回のシミュ

表 3.7 Parameters⁽¹⁰⁾ of the short-range potential.

Type of interaction	A (eV)	ρ (Å)	C (eVÅ ⁶)	D (eVÅ ⁸)
Na ⁺ -Na ⁺	7403.82	0.2489	48.196	0
Na ⁺ -Cl ⁻	2290.14	0.2913	0	0
Cl ⁻ -Cl ⁻	708.382	0.3512	100.218	0

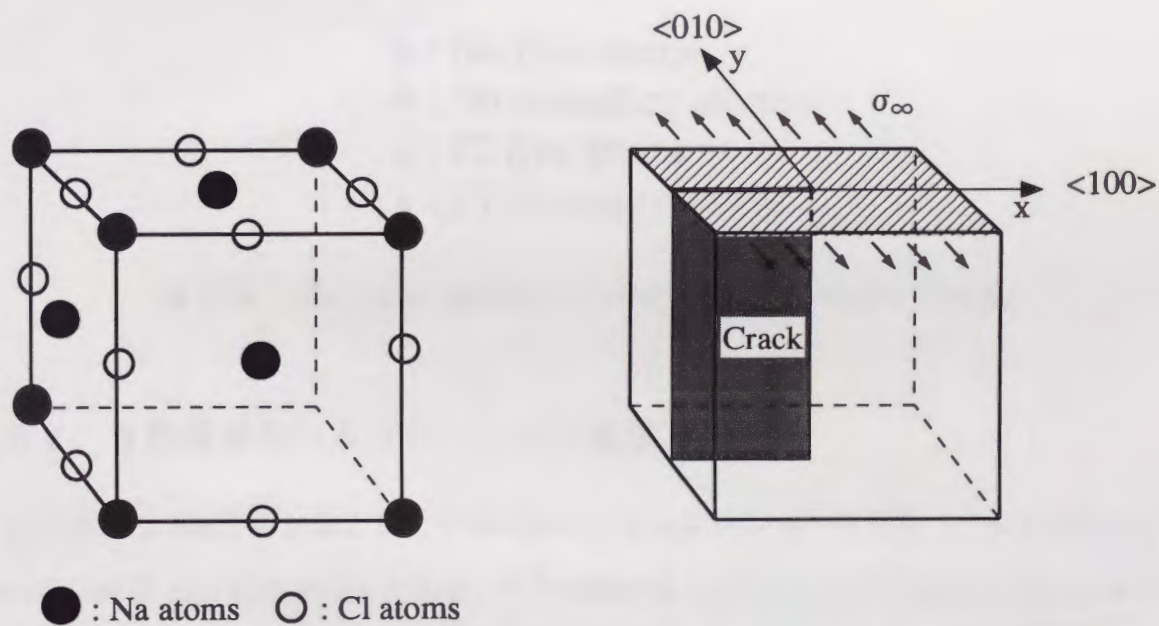
表 3.8 Interstring potential⁽¹²⁾ for the calculation of Coulombic interaction (a: lattice constant).

Range	Potential Φ_{ij}^C
$0.0 \leq r_{ij} \leq 0.8$	$\frac{z_i z_j e^2}{a} \left[-\frac{1}{r_{ij}} - 0.00984 \ln r_{ij} + 0.19546 r_{ij} - 1.55554 r_{ij}^2 + 1.26914 r_{ij}^3 - 0.427615 r_{ij}^4 + 0.051144 r_{ij}^5 + 1.348835 \right]$
$0.8 \leq r_{ij} \leq 2.5$	$\frac{z_i z_j e^2}{a} \left[-\frac{1.24568}{r_{ij}} + 0.27296 \ln r_{ij} - 1.51362 r_{ij} + 0.68462 r_{ij}^2 - 0.15204 r_{ij}^3 + 0.01366 r_{ij}^4 + 2.98853 \right]$
$2.5 \leq r_{ij} \leq 5.0$	$\frac{z_i z_j e^2}{a} \left[-\frac{0.99182}{r_{ij}} - 1.0503 \ln r_{ij} + 0.41646 r_{ij} - 0.03653 r_{ij}^2 + 0.001593 r_{ij}^3 + 0.052057 \right]$

レーションでは図 3.18(b) に示すように x-y 平面を {100} 面上にとり、き裂も {100} 面上に導入する。このような結晶方位を選ぶことにより、2次元解析でもき裂前方への交差する2つのすべり系が活動可能となり、き裂の開口が可能となる。この結晶方位に対する分子動力学領域のモデルを図 3.19 に示す。NaCl に対しては板厚方向に1層しか原子を配置せず、板厚方向の動きを完全に固定し、完全な2次元の問題として取り扱う。また、境界原子はクーロン力の影響範囲を考慮して4列ずつ配置し、初期き裂はき裂に相当する部分の原子を取り除くことにより導入する。NaCl の材料定数は表 3.9 に示す通りであり、弾性定数は原子間ポテンシャルから見積もったものを用いる。NaCl はこの結晶方位に対して弾性論的に等方性となるが、2体間ポテンシャルを使用しているのでポアソン比が 0.25 となっていることに注意が必要である。

表 3.9 Material constants of NaCl single crystal.

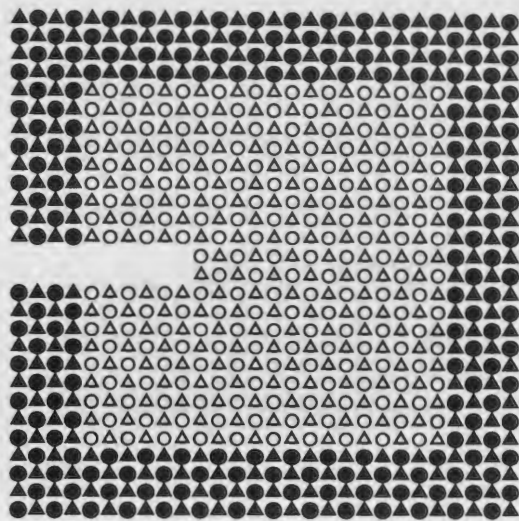
Young's modulus (Plane strain)	36.61 (GPa)
Shear modulus	13.59 (GPa)
Poisson's ratio (Plane strain)	0.25
Lattice constant	2.789 (Å)
Atomic weight (Na)	22.99
Atomic weight (Cl)	35.45



(a) NaCl type lattice cubic

(b) Crystallographic orientation

图 3.18 Lattice cubic and crystallographic orientation of the simulation.



- : Na free atoms
- : Na boundary atoms
- △ : Cl free atoms
- ▲ : Cl boundary atoms

図 3.19 Molecular dynamics model for a NaCl single crystal.

3.3.2 き裂進展のシミュレーション結果

この節では NaCl を対象としたき裂進展のシミュレーションを行なう。シミュレーションの条件は表 3.10 に示す通りである。その結果は図 3.20 に示しているが、このシミュレーションでは転位の放出を伴わない完全な脆性破壊を起こしている。NaCl は室温では非常に脆性的で破壊靱性値が低くなるが、脆性破壊を起こす前にき裂先端から転位が放出されることが実験的に確認されている^{(13),(14)}。従って、今回のシミュレーション結果は実験事実と矛盾する。以下、その原因について考察する。

まず考えられるのは 2 次元でシミュレーションを行なっている点である。今回のシミュレーションでは平面ひずみ問題を仮定しているので、厚い板の内部の様子をシミュレートしていることに対応するが、その際、段差の存在しない理想的なき裂を仮定している。ところが、実験で用いる試験片に導入してあるき裂は理想的なものとは限らず、むしろ段差があるほうが自然である。き裂に段差がある場合はき裂前縁に特異点 (ledge サイト) が現れ転位源として活動する⁽¹⁵⁾。序論でも述べたように ledge サイトからの転位発生では、それを

考慮していない Rice-Thomson の基準⁽¹⁶⁾ よりも遥かに低い荷重で転位が発生する。この点を考慮すると、シミュレーションでは ledge サイトが存在しなかったために、き裂先端での転位発生条件を満たす前にへき開割れが生じてしまったが、実験で用いた試験片には ledge サイトが存在し、へき開割れが生じる前に ledge サイトからの転位発生が起こったと考えられる。無論、精度の悪い 2 体間ポテンシャルを使用しているため、ポテンシャルが原因だとも考えられる。しかし、イオン結晶では自由原子が存在せず電子が原子の周りに密集して存在しているため 2 体間ポテンシャルでも比較的よい近似ができるというのが通説なので、原子間ポテンシャルに起因する問題よりも 2 次元のシミュレーションに起因する問題のほうが致命的のように思える。

表 3.10 Calculation condition of the simulation of NaCl.

Number of free atoms (Na+Cl)	10000
Pre-crack length	2 (nm)
Temperature	290 (K)

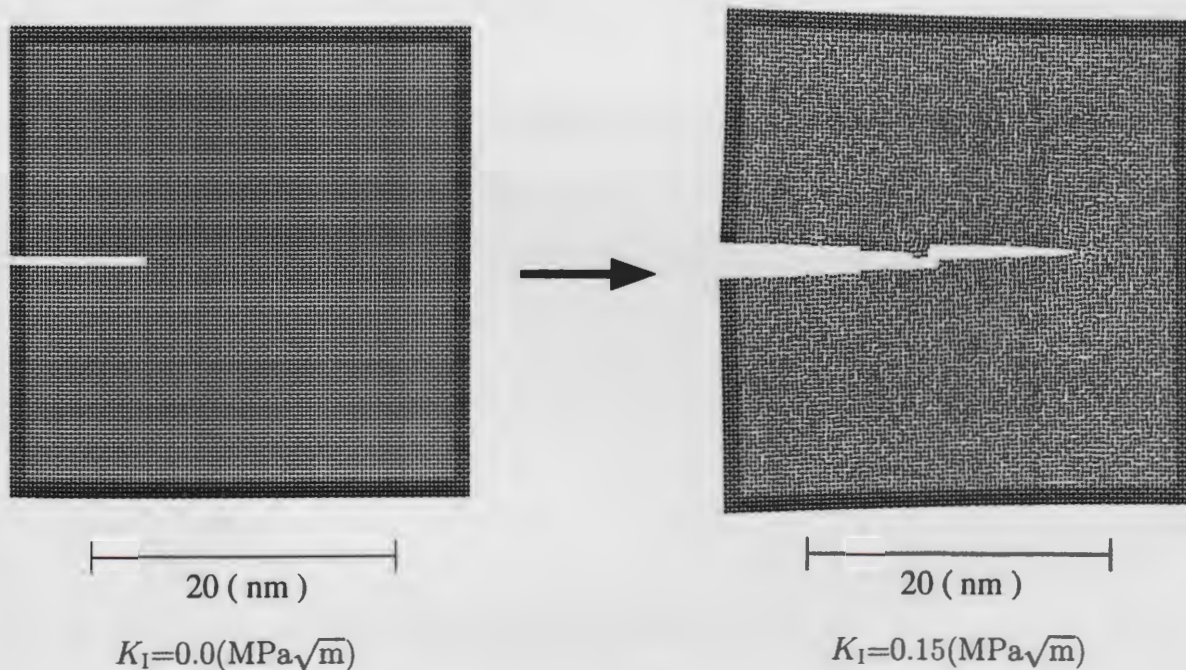


図 3.20 Result of simulation.

3.4 単結晶タングステンを対象としたシミュレーション結果

3.4.1 シミュレーションの初期条件

単結晶タングステンを対象としたシミュレーションでは、基本的には Finnis と Sinclair によって導かれた EAM ポテンシャル⁽¹⁷⁾を用いる。これは 2 体汎関数表現の多体ポテンシャルで、2 体間ポテンシャルに比べて計算負荷は大きくなるが表面エネルギーに関する考察がなされている点が評価され、bcc 金属のシミュレーションでしばしば用いられる^{(4),(5)}。このポテンシャルでは、原子同士の相互作用を 2 体間ポテンシャル ϕ_P で表現し、電子場と原子の相互作用を多体ポテンシャル ϕ_N で表現する。従って、系全体のポテンシャル ϕ は次のようになる。

$$\phi = \phi_P + \phi_N \dots\dots\dots (3.5)$$

また、 ϕ_P と ϕ_N はそれぞれ次のようになる。

$$\phi_P = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ (j \neq i)}}^N \phi(r_{ij}) \dots\dots\dots (3.6)$$

$$\phi_N = - \sum_{i=1}^N f(\rho_i) \dots\dots\dots (3.7)$$

(3.7) 式右辺の関数 $f(\rho_i)$ が埋め込み関数と呼ばれるもので、電子密度 ρ_i の場所に原子を埋め込むのに必要なエネルギーを表す。Finnis-Sinclair ポテンシャルでは埋め込み関数 $f(\rho_i)$ は次のように表現されている。

$$f(\rho_i) = \sqrt{\rho_i} \dots\dots\dots (3.8)$$

ここで、電子密度 ρ_i は、

$$\rho_i = \sum_{\substack{j=1 \\ (j \neq i)}}^N \rho(r_{ij}) \dots\dots\dots (3.9)$$

となる。関数 $\rho(r)$, $\phi(r)$ はそれぞれ次のようになっている。

表 3.11 Parameters⁽¹⁷⁾ of Finnis-Sinclair potential for tungsten.

A (eV)	1.896373
d (Å)	4.400224
β	0
c (Å)	3.25
c ₀	47.1346499
c ₁	-33.7665655
c ₂	6.2541999

$$\rho(r) = \begin{cases} A^2\{(r-d)^2 + \beta(r-d)^3/d\} & (r \leq d) \\ 0 & (r > d) \end{cases} \dots\dots\dots (3.10)$$

$$\phi(r) = \begin{cases} (r-c)^2(c_0 + c_1r + c_2r^2) & (r \leq c) \\ 0 & (r > c) \end{cases} \dots\dots\dots (3.11)$$

タングステンに対して求められた各係数の値は表 3.11 に示す通りである。この原子間ポテンシャルから各原子に作用する力を求めるためには、ポテンシャルの勾配を求める必要がある。各原子に作用する力の x 成分 F_{ix} は、

$$F_{ix} = \frac{\partial\phi_P}{\partial x} + \frac{\partial\phi_N}{\partial x} \dots\dots\dots (3.12)$$

この右辺第 1 項は 2 体間力を表し、

$$\frac{\partial\phi_P}{\partial x} = \sum_{\substack{j=1 \\ (j \neq i)}}^N \phi'(r_{ij}) \frac{r_{ijx}}{r_{ij}} \dots\dots\dots (3.13)$$

ただし、

$$r_{ij} = \sqrt{r_{ijx}^2 + r_{ijy}^2 + r_{ijz}^2}$$

となる。第 2 項は多体間力を表し、

$$\frac{\partial\phi_N}{\partial x} = \sum_{\substack{j=1 \\ (j \neq i)}}^N (f'_i + f'_j) \rho'(r_{ij}) \frac{r_{ijx}}{r_{ij}} \dots\dots\dots (3.14)$$

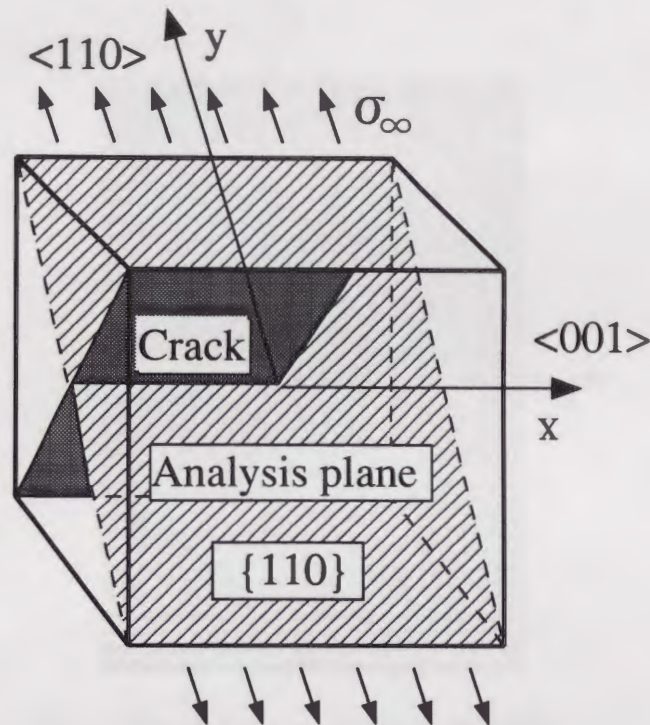


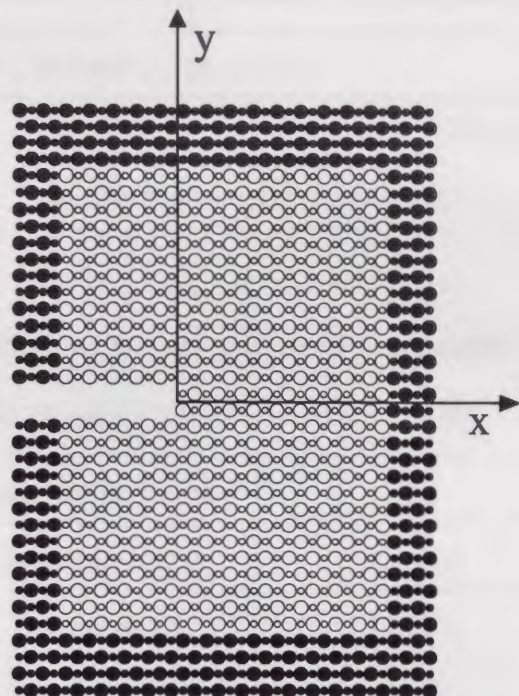
図 3.21 Crystallographic orientation.

ただし,

$$r_{ij} = \sqrt{r_{ijx}^2 + r_{ijy}^2 + r_{ijz}^2}$$

$$f'_i = \frac{d}{d\rho_i} f(\rho_i)$$

となる. y, z 成分についても同様の形となる. 単結晶タングステンに対するシミュレーションでの結晶方位は, α -鉄の場合と同様の結晶方位を選び, x - y 平面, き裂面共に $\{110\}$ となるようにする (図 3.21). その際の分子動力学領域のモデルを図 3.22 に示す. 板厚方向には 2 層の原子を配置し, 周期境界条件を適用する. 境界原子は原子間ポテンシャルの影響範囲を考慮して 4 列ずつ配置する. また, 分子動力学領域での初期き裂はき裂に相当する部分の原子を取り除くことにより導入する. 単結晶タングステンに対する材料定数は表 3.12 に示す通りであり, 弾性定数は原子間ポテンシャルから見積もったものである. 単結晶タングstenは α -鉄と異なりこの結晶方位に対して弾性論的に等方性となる. ただし, EAM ポテンシャルを使用しているのでポアソン比は正確に表現できている.



- : First layer of free atoms
- : Second layer of free atoms
- : First layer of boundary atoms
- : Second layer of free atoms

图 3.22 Molecular dynamics model for tungsten single crystals.

表 3.12 Material constants of tungsten single crystals.

Young's modulus (Plane strain)	445.7 (GPa)
Shear modulus	160.6 (GPa)
Poisson's ratio (Plane strain)	0.390
Lattice constant	3.1652 (Å)
Atomic weight	183.9

表 3.13 Pair-potential⁽¹⁸⁾ for tungsten.

Range of r (Å)	Potential: $\phi(r)$ (eV)
1.0–3.9	$-1.26599(r - 3.45503)^4 - 3.00836(r - 3.45505)^3$ $+1.40109(r - 3.45503) - 0.34277$

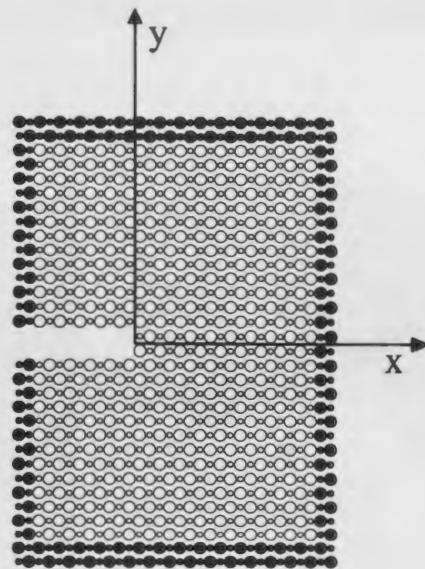
表 3.14 Calculation condition of the simulation for comparison between a pair-potential model and a EAM potential model in tungsten single crystals.

Number of free atoms	784
Pre-crack length	2 (mm)
Temperature	77 (K)

3.4.2 2 体間ポテンシャルと EAM ポテンシャルの比較.

ここでは、原子間ポテンシャルの妥当性を確認するために、今回使用する EAM ポテンシャルを用いたシミュレーション結果と 2 体間ポテンシャルのシミュレーション結果を比較する。2 体間ポテンシャルは、Johnson と White⁽¹⁸⁾ によって求められた多項式型のものを使用する。その詳細は、表 3.13 に示す通りである。また、2 体間ポテンシャルに対する分子動力学領域のモデルを図 3.23 に示す。EAM ポテンシャルのものとはほとんど同一だが、境界原子はポテンシャルの影響範囲を考慮して 2 列ずつ配置する。

この節のシミュレーションの条件を表 3.14 に示し、2 体間ポテンシャルを用いたシミュレーション結果を図 3.24 に、EAM ポテンシャルを用いた結果を図 3.25 に示す。この結果では 2 体間ポテンシャルと EAM ポテンシャルとで、全く違った結果が得られている。EAM ポテンシャルの結果は、きれいな形でき裂が開口しているのに対し、2 体間ポテンシャルのほうはき裂先端での結晶構造が崩れたような形になり、き裂の開口が妨げられている。2 体間ポテンシャルの結果のき裂先端の部分を詳細に見てみると図 3.26 のようになっている。これを良く見ると、hcp 構造になっていることがわかる。つまり、2 体間ポテンシャルを用いたシミュレーションでは bcc 構造から hcp 構造への応力誘起相変態 (Transformation Induced



- : First layer of free atoms
- ◐ : Second layer of free atoms
- : First layer of boundary atoms
- ◑ : Second layer of free atoms

図 3.23 Molecular dynamics model for tungsten single crystals described with pair-potential.

Plasticity)⁽¹⁹⁾ が起こっているのである。今回のシミュレーションでは板厚方向に 2 層配置して周期境界条件を適用している関係で構造的に fcc 構造はとれないが、板厚方向に 6 層配置してシミュレーションを行なったら bcc から fcc への相変態が起こる可能性もある。しかし、いずれの場合にせよ高純度の単結晶タングステンで応力誘起相変態が起こる可能性は低い。過去に、高純度の単結晶タングステンで応力誘起相変態が観察された例はなく、高純度のタングステンでは bcc 以外のものを作成できないからである⁽²⁰⁾。タングステンの酸化物 (WO_3) に関しては βW 型と呼ばれる特殊な結晶構造をとることが知られている⁽²¹⁾ が、純粋なタングステンがこの構造をとることはない。従って、2 体間ポテンシャルを用いたシミュレーション結果は妥当なものではなく、EAM ポテンシャルの結果の方が正解ということになる。

この結果は、不適當な原子間ポテンシャルを用いると定量的な精度が低下するばかりでなく、現実と全く違った現象をシミュレートしてしまうことを実証している。従って、シミュ

レーションを行なう際には現象論的な面にも注意を払い、慎重に原子間ポテンシャルを選択する必要がある。

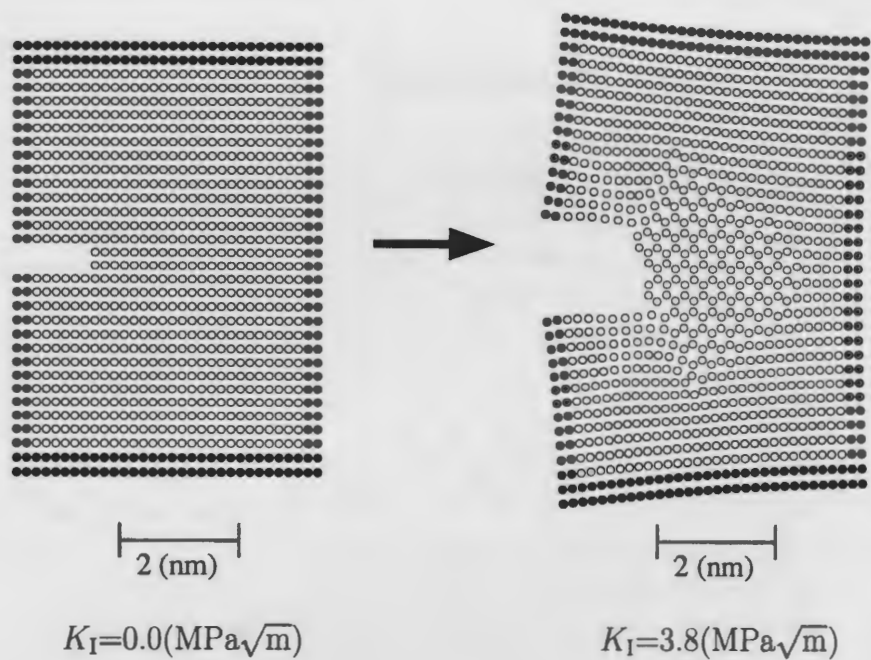


図 3.24 Simulation with pair-potential.

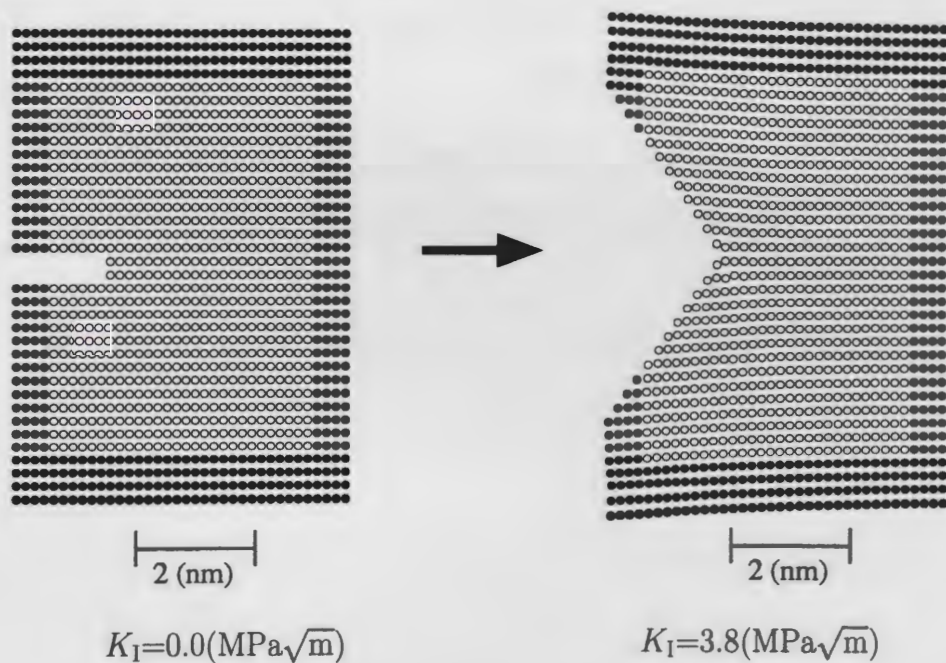
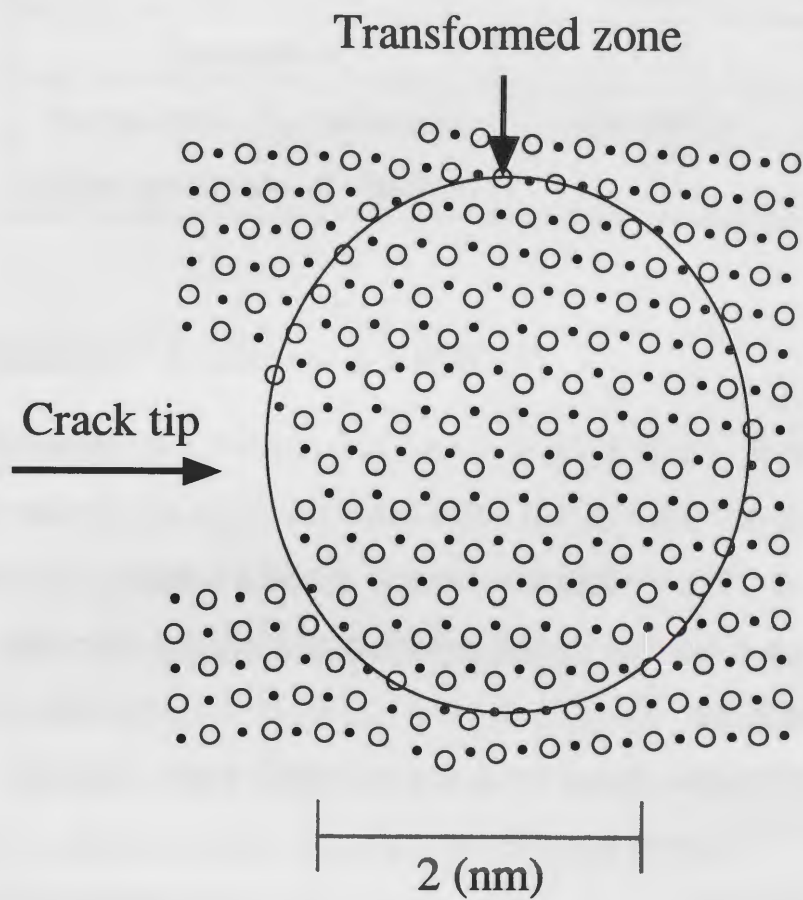


図 3.25 Simulation with EAM-potential.



- : First layer of free atoms
- : Second layer of free atoms

☒ 3.26 Detail of the crack tip of the result with pair-potential.

表 3.15 Calculation condition of fracture simulations in tungsten single crystals.

Number of free atoms	3600
Pre-crack length	2 (mm)
Temperature	77 (K)
Friction force of a dislocation (Experimental value of CRSS ⁽²²⁾)	450 (MPa)

3.4.3 脆性破壊のシミュレーション結果 (1)

この節では脆性破壊に至るプロセスのシミュレーションを行ない、その結果を実験結果と比較する。その際のシミュレーションの条件は表 3.15 に示す通りである。ここでは、転位に作用する摩擦力として臨界せん断応力 (CRSS) の実測値⁽²²⁾を用いる。2.4.5 節でも説明したように、実験で用いる材料には初期転位や介在物などの欠陥が含まれており、き裂先端から放出された転位はそれらに引っかかりながら動く。従って、脆性破壊のプロセスをシミュレートし、実験結果と比較する際には完全結晶中での転位の摩擦力であるパイエルス応力を用いるよりも臨界せん断応力の実測値を用いた方が適当である。

き裂先端の変形の様子を図 3.27 に示す。このシミュレーションではき裂の開口の様子はきれいな形でシミュレートされている。しかし、へき開割れはき裂に対して斜めの方向に生じており、その起点はき裂先端ではなく分子動力学領域と連続体領域の境界だった。このへき開割れを起こしたのは {121} 面である。また、このシミュレーションにおいて α -鉄の場合と同様にき裂先端開口変位を計算し、Rice の解と比較した結果が図 3.28 である。き裂先端開口変位の計算結果は α -鉄の場合と同様に Rice の解とよく一致しており、き裂開口のプロセスでは良い結果が得られている。

それでは、同様の結晶方位に対して行なった実験結果をみってみる。図 3.29 に示しているのは Riedle らが高純度の単結晶タングステンを用いて液体窒素中 (77K) で行なった破壊靱性試験の結果⁽²³⁾である。図 3.29(b) に示している写真は図 3.29(a) のような {110} 面上に導入された予き裂をもつ円筒形の CT 試験片の破断の様子である。この実験でもシミュ

レーションと同様の $\{121\}$ 面に沿ったへき開割れが観察されている。Riedle らの実験とは若干結晶方位が違うが Cordwell らの実験⁽²⁴⁾でも同様の $\{110\}$ 面上に導入した半楕円形の予き裂に対して斜めの方向の $\{100\}$ 面に沿ったへき開割れが観察されている。これらの実験結果から単結晶タングステンの $\{110\}$ 面は非常に割れにくく、 $\{110\}$ 面上の予き裂に対してへき開割れは $\{110\}$ 面以外の面に沿って生じるということがいえる。従って、シミュレーションで生じた $\{121\}$ 面に沿ったへき開割れは実験結果と一致し、妥当な結果だといえる。

しかし、シミュレーション結果でへき開割れの起点が分子動力学領域と連続体領域との境界というのは明らかに不自然な点である。なぜなら、分子動力学と連続体の境界は、現実の材料には存在しないからである。また、定量的な面でみると同様の Riedle らの実験⁽²⁵⁾で得られた 77(K) での破壊靱性値は $K_{IC}=2.8\pm 0.2(\text{MPa}\sqrt{\text{m}})$ であるのに対し、シミュレーションでの破壊靱性値は図 3.27 に示すように $K_{IC}=9.2(\text{MPa}\sqrt{\text{m}})$ である。従って、シミュレーションでの破壊靱性値は実験値より 3 倍以上の大きな値になっている。

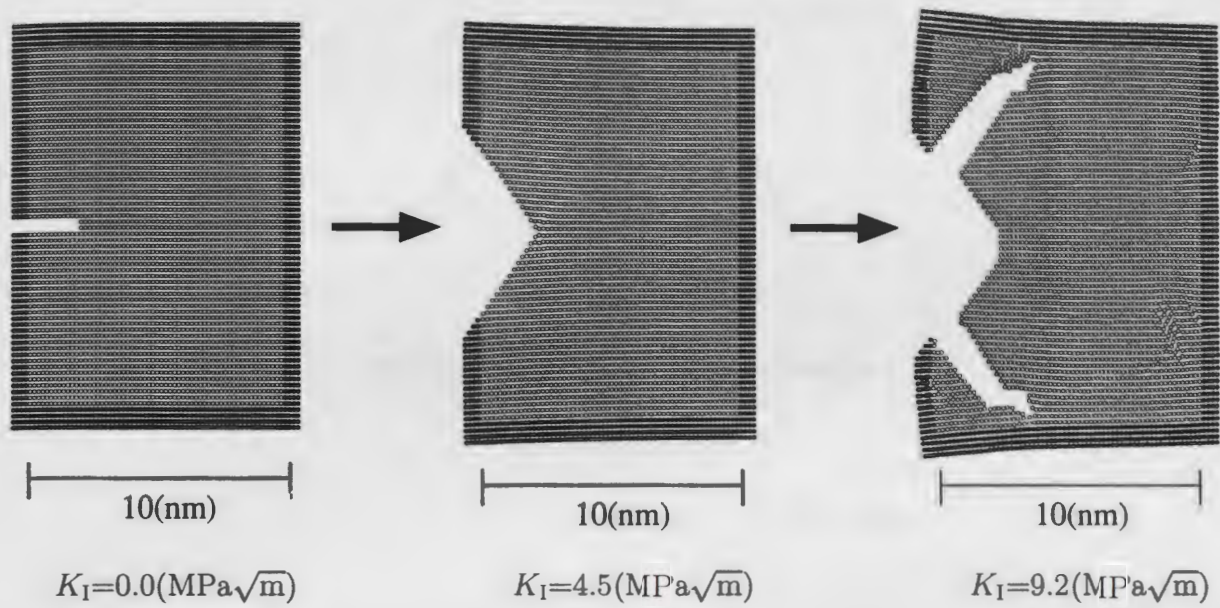


图 3.27 Result of the brittle fracture simulation (1).

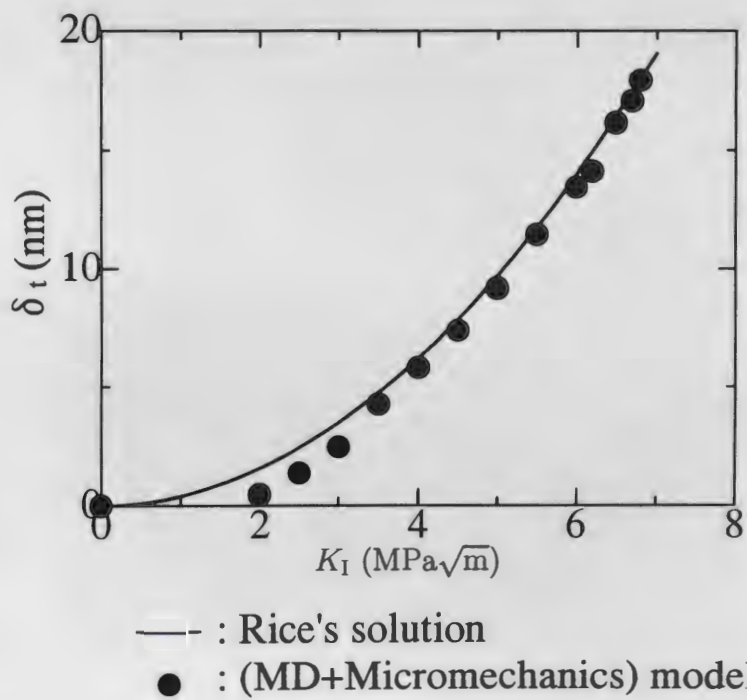
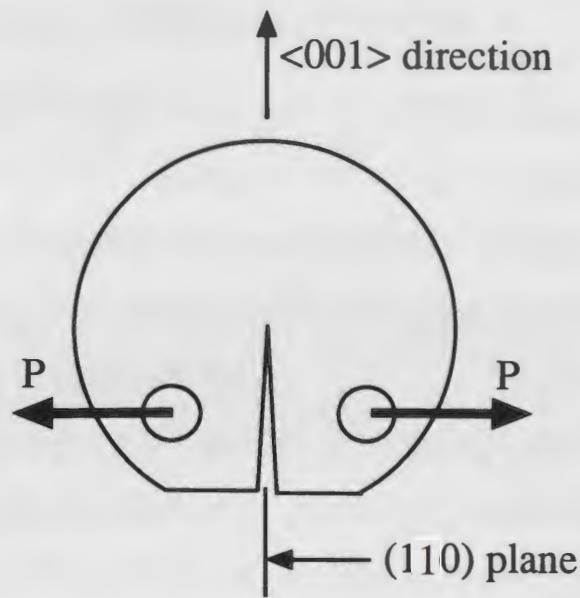
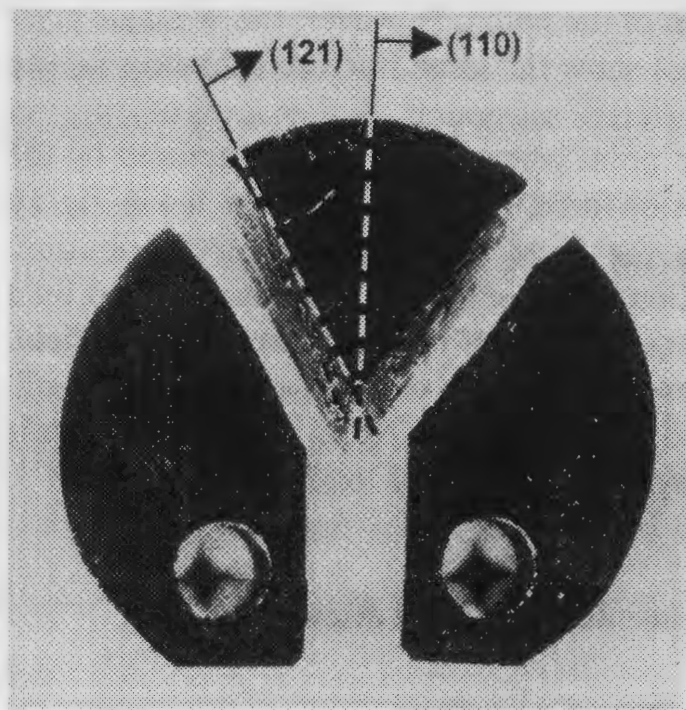


图 3.28 Crack tip opening displacements compared with Rice's solution.



(a) Geometry and orientation of the round CT-specimen



(b) Broken specimen

☒ 3.29 Broken specimen of fracture toughness test at 77(K) in a tungsten single crystal⁽²³⁾.

3.4.4 {121}面に沿ったへき開割れに対する対応

ここでは分子動力学領域でのき裂のモデル化について再検討することにより実験事実との対応を図る。前節で述べたように、単結晶タングステンの{110}面は非常に割れにくく、{110}面上の予き裂に対してへき開割れはそれ以外の面に沿って生じる。今回のシミュレーションで採用した結晶方位だと、へき開割れを起こすのは{121}面である。この節ではその際に生じる問題とそれに対する対策を説明する。

図 3.30 にき裂が開口したときのき裂先端の様子とその際の分子動力学領域の位置関係を示している。き裂に対して斜めの方向の{121}面に沿ったへき開割れが生じる際にどの部分がへき開割れの起点になるかをこの図において予想してみると、き裂先端の中心でなく矢印で示しているき裂先端の淵の部分であることが予想される(本論文では図 3.30 の矢印で示している部分をき裂先端の淵と呼ぶ)。その際、問題となるのはへき開割れの起点が分子動力学領域の中にあることである。この接合モデルではすべり変形やへき開割れが起きるかどうかの判断は分子動力学領域の解析結果に依存している。しかし、そのへき開割れの起点が分子動力学領域の中にあるのでは正確なシミュレーションができない。そのため、前節のシミュレーションでは分子動力学領域と連続体領域の境界を起点としてへき開割れが生じたと考えられる。つまり、本来へき開割れの起点となるべきき裂先端の淵の部分が分子動力学領域内になかったため、その次に弱い分子動力学と連続体の境界の部分が起点となったのである。

この問題に対する対策として図 3.31 に示すような操作を行なう。これはき裂の先端が鈍化を起こさないようにする操作である。き裂の先端ですべり変形が生じるとそれによりき裂が開口し、き裂先端が鈍化する。そのままき裂の開口とき裂先端の鈍化が進んでいくと最終的に割れの起点であるき裂先端の淵の部分が分子動力学領域の外に出てしまう。これを防ぐためにき裂先端ですべり変形が生じた際に図 3.31 に示すようにき裂の開口により生じた空間を新しい原子で埋める。この操作によりき裂の開口とき裂先端の鈍化を防ぐことができ、結果としてへき開割れの起点であるき裂先端の淵の部分が分子動力学領域の中にある状態を保つことができる。この操作は物理的な現象に沿ったものではなく、シミュレーションを行なう都合上の操作である。しかし、この操作は単に分子動力学領域でのき裂のモデル

化を変えるだけなので、この操作自体が本質的な物理現象そのものに影響を与えるとは考えにくい。また、き裂先端の鈍化の影響を考慮できないという問題もあるが、今回は鈍化の影響は無視する。単結晶タングステンという脆性材料を対象としているため、き裂先端が鈍化したとしてもき裂先端の曲率半径はせいぜいナノメートルのオーダーで、き裂長さ（2mm）に対して非常に小さい。

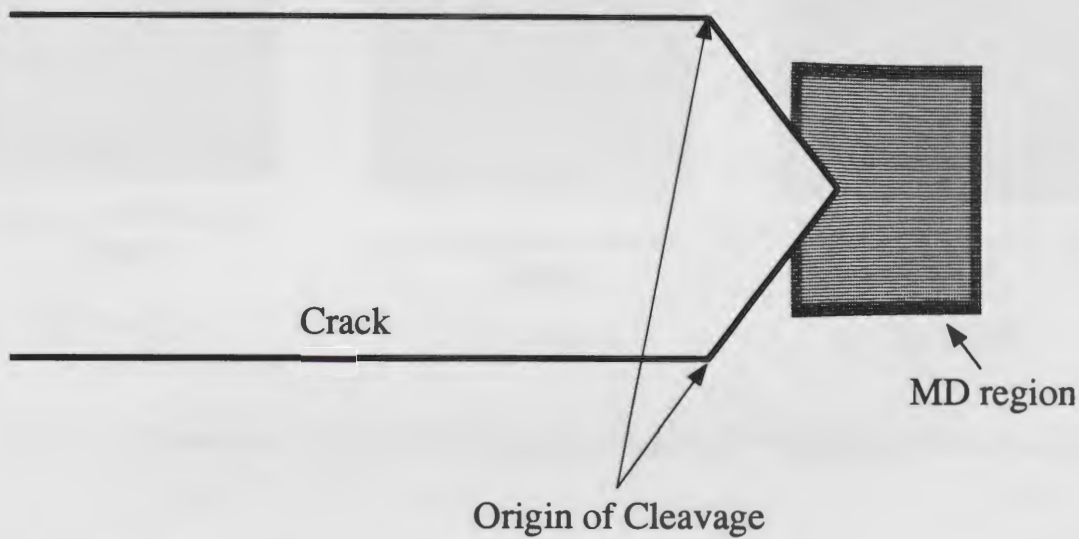


図 3.30 Origin of cleavage in case of $\{121\}$ cleavage.

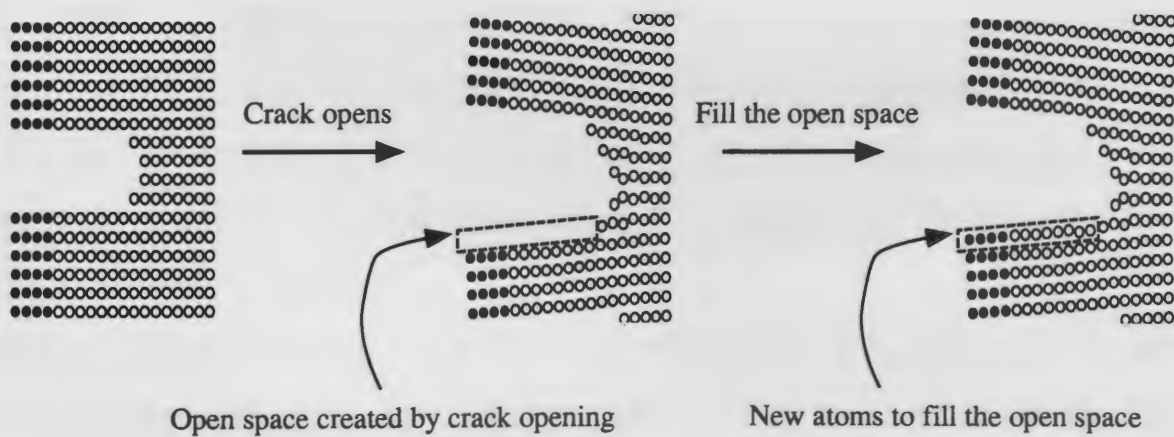


図 3.31 Method to prevent a crack from opening by filling the open space with additional atoms.

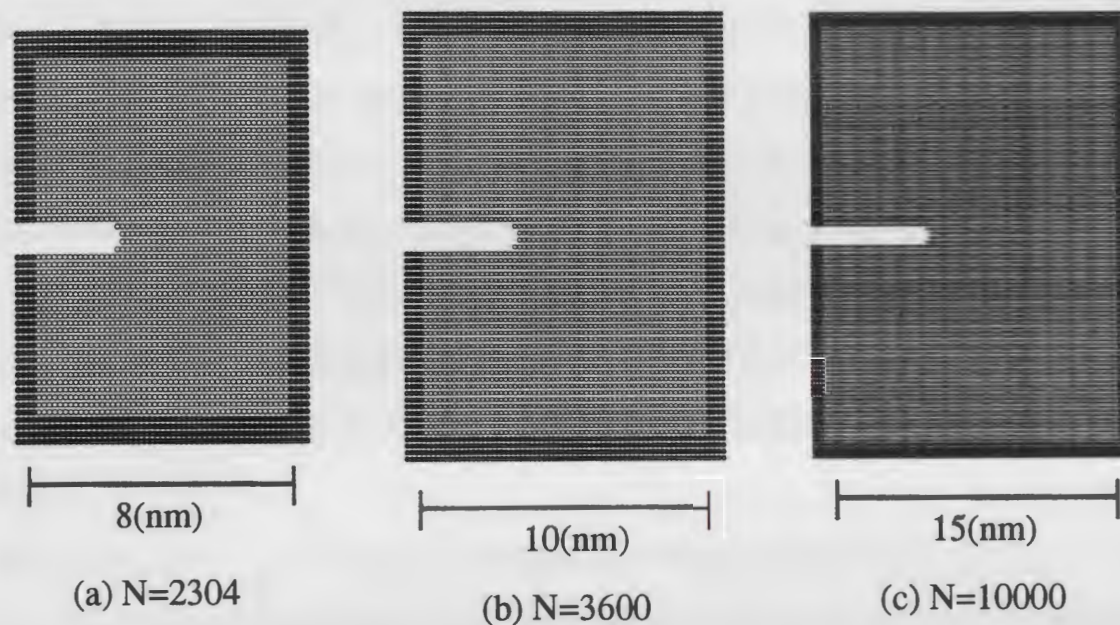


図 3.32 Three sizes of molecular dynamics regions (N: Number of free atoms).

3.4.5 脆性破壊のシミュレーション結果 (2)

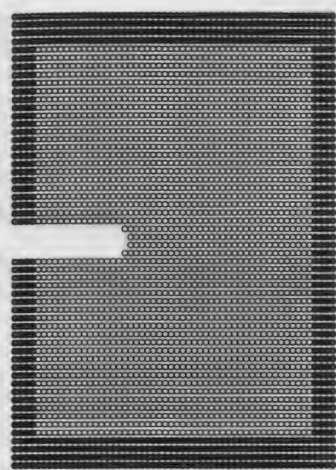
この節では、前節で説明した操作を行ない再度、脆性破壊に至るプロセスのシミュレーションを行なうとともに、分子動力学領域のサイズ（原子数）のシミュレーション結果に及ぼす影響について調べる。分子動力学領域のサイズというパラメータは現実の材料には存在しないので、シミュレーション結果が分子動力学領域のサイズに依存していたら妥当なシミュレーションとはいえない。シミュレーションの条件は原子数以外は表 3.15 と同じである。このシミュレーションでは図 3.32 に示すように自由原子数がそれぞれ 2304, 3600, 10000 の 3 つのモデルを用いる。

図 3.33~ 図 3.35 にそれぞれのシミュレーション結果を示す。また、参考としてへき開割れが生じた時点での転位分布の様子を図 3.36 に示す。この転位分布は自由原子数 3600 のモデルで得られたもので、図 3.36 に示しているのはき裂に対して上方の部分 ($y \geq 0$) のみである。また、へき開割れが生じるまでに放出された転位の総数は 155 本であった。図 3.33~ 図 3.35 のすべての結果でへき開割れはき裂先端の淵の部分の起点として、Riedle らの実験

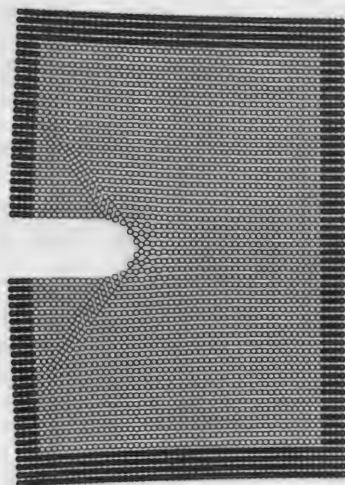
結果と同様に $\{121\}$ 面に沿って生じている。従って、前節で説明した操作を行ないき裂が開口するのを防ぐことにより、分子動力学領域と連続体領域の境界がへき開割れの起点となるという問題は解決された。また、興味深い点は各々のシミュレーション結果でへき開割れを起こす直前にき裂先端の淵の部分の起点として、双晶変形が生じている点である。これと同様の双晶変形は Kohlhoff ら⁽⁴⁾ が同じ Finnis-Sinclair の EAM ポテンシャルを用いて α -鉄を対象として行なったシミュレーションでも生じている。ただ、ここで問題となるのは今回開発した分子動力学/マイクロメカニクス接合モデルは双晶変形に対応してないので、双晶変形が両領域の境界を越えて進行していくことができない点である。双晶変形が境界でせき止められることにより、過大な応力緩和が生じて破壊靱性値が上昇している可能性がある。

各々のシミュレーションで得られた破壊靱性値の結果と実験値を表 3.16 にまとめて示す。このように破壊靱性値の計算結果は分子動力学領域のサイズの影響をほとんど受けていない。この分子動力学領域のサイズが変わってもシミュレーション結果が変わらないという点は評価でき、妥当なシミュレーションが行なえているといえる。また、3.4.3 節の結果と比べると破壊靱性値が大幅に下がっており実験値に近付いている。しかし、その値は依然として実験値より 2 倍以上大きく、妥当な結果とはいえない。

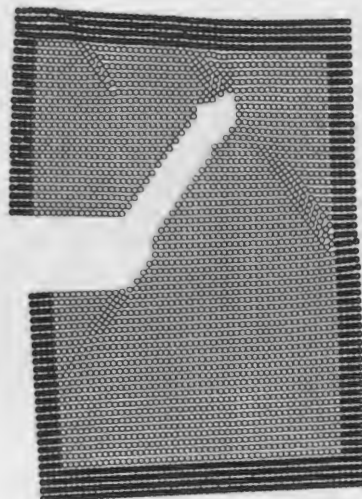
また、このシミュレーションにおける双晶変形に関する注意点を付け加えておく。前述の通りシミュレーションで生じた双晶変形は境界を越えて進行することはできない。しかし、図 3.37 に示すようにこの双晶変形はやがて転位に変わる。この転位は連続体領域へ移動させる必要がある。さもないと過大な応力緩和が生じ、破壊靱性値が大きく上昇する。図 3.38 に示しているのが自由原子数 3600 のモデルを用いて双晶変形から変化した転位を無視して行なったシミュレーションの結果である。転位を連続体の領域へ移動させた場合の破壊靱性値が表 3.16 より $K_{IC}=6.2(\text{MPa}\sqrt{\text{m}})$ であったのに対し、この場合は $K_I=10.0(\text{MPa}\sqrt{\text{m}})$ に達してもまだへき開割れが生じていない。従って、双晶変形が境界を通過できないのは仕方ないが、双晶変形から変化した転位は境界を通過して連続体の領域へ移動させる必要がある。



(a) $K_I=0.0(\text{MPa}\sqrt{\text{m}})$

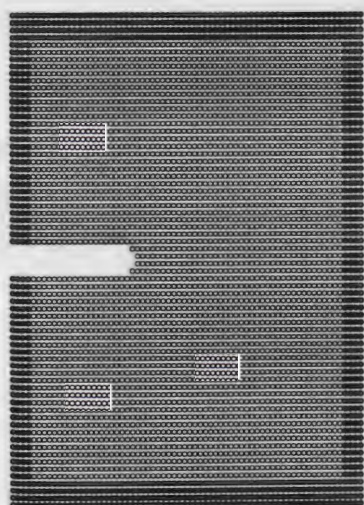


(b) $K_I=5.5(\text{MPa}\sqrt{\text{m}})$

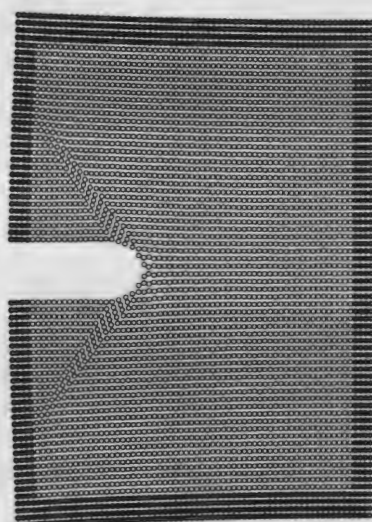


(c) $K_I=6.3(\text{MPa}\sqrt{\text{m}})$

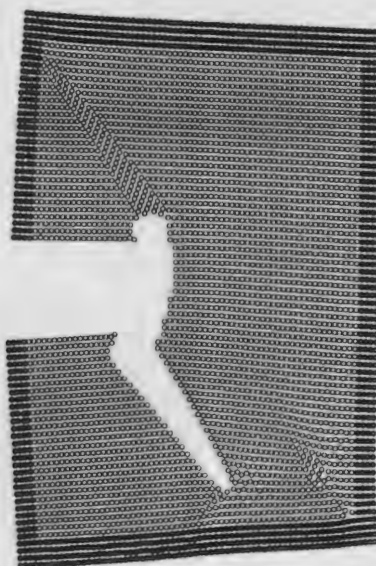
☒ 3.33 Result of the simulation with a $N=2304$ model (N : Number of free atoms).



(a) $K_I=0.0(\text{MPa}\sqrt{\text{m}})$

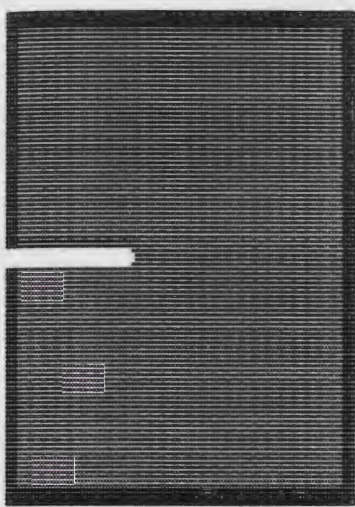


(b) $K_I=5.0(\text{MPa}\sqrt{\text{m}})$

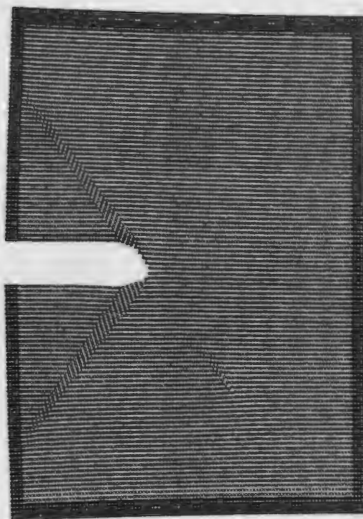


(c) $K_I=6.2(\text{MPa}\sqrt{\text{m}})$

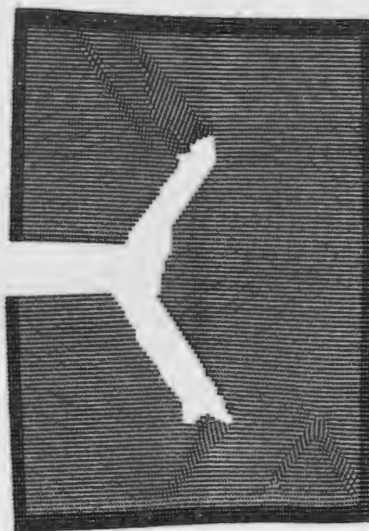
☒ 3.34 Result of the simulation with a $N=3600$ model (N : Number of free atoms).



(a) $K_I=0.0(\text{MPa}\sqrt{\text{m}})$

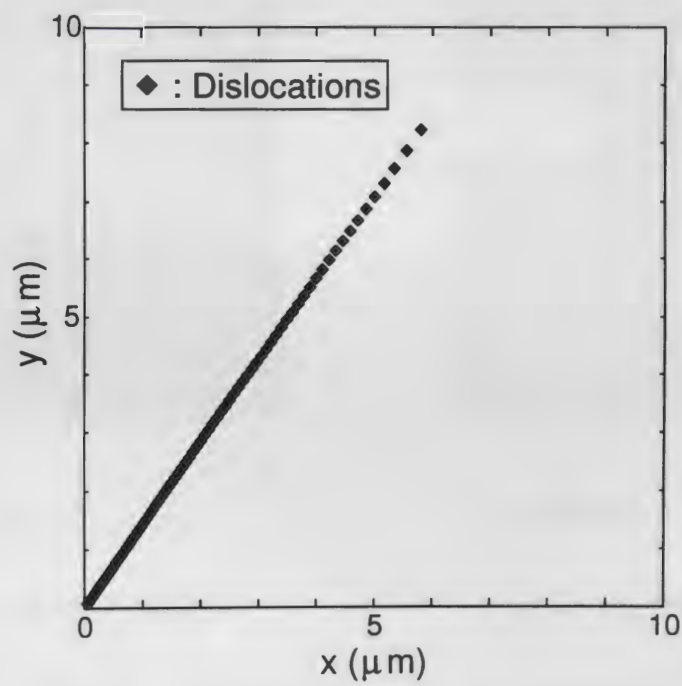


(b) $K_I=5.0(\text{MPa}\sqrt{\text{m}})$



(c) $K_I=6.2(\text{MPa}\sqrt{\text{m}})$

☒ 3.35 Result of the simulation with a $N=10000$ model (N : Number of free atoms).



☒ 3.36 Distribution of dislocations at the loading when the material was cleaved. Only the upper side is shown and the origin means a crack tip.

表 3.16 Fracture toughnesses (N: Number of free atoms).

Type of model	Fracture toughness - K_{IC}
N=2304 model	6.3 (MPa \sqrt{m})
N=3600 model	6.2 (MPa \sqrt{m})
N=10000 model	6.2 (MPa \sqrt{m})
Experiment ⁽²⁵⁾	2.8 \pm 0.2(MPa \sqrt{m})

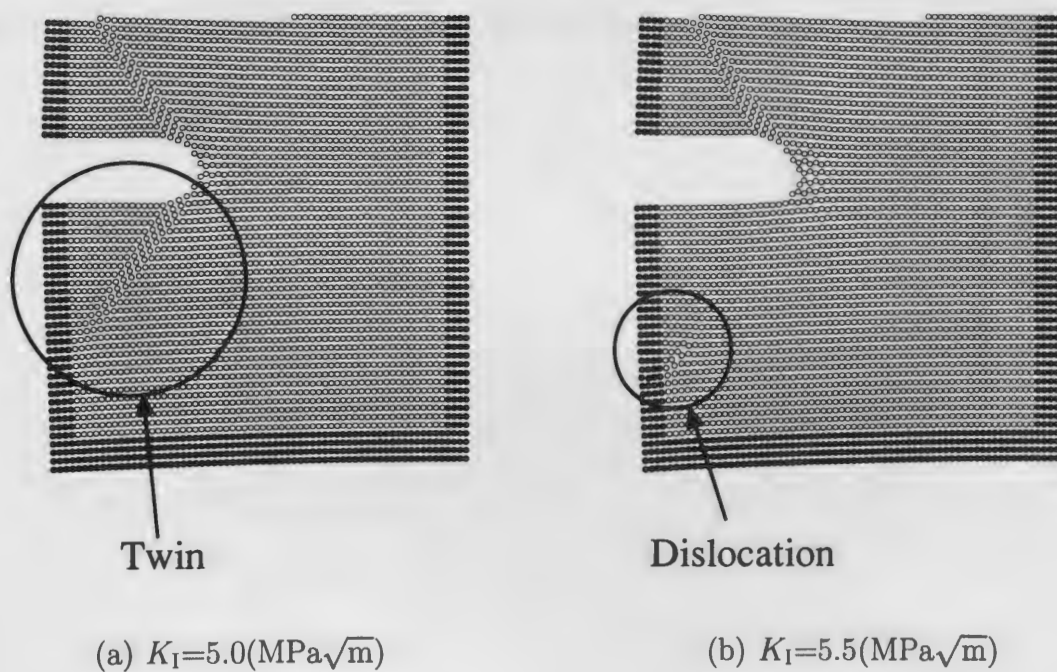
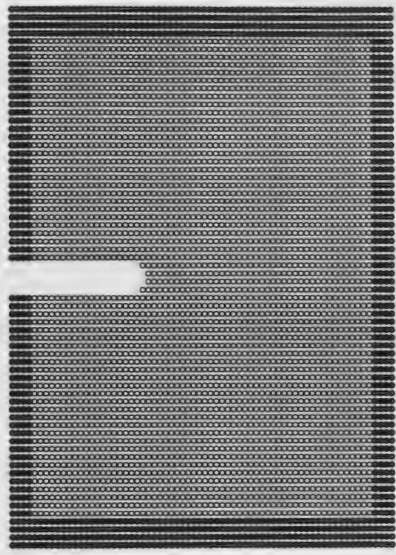
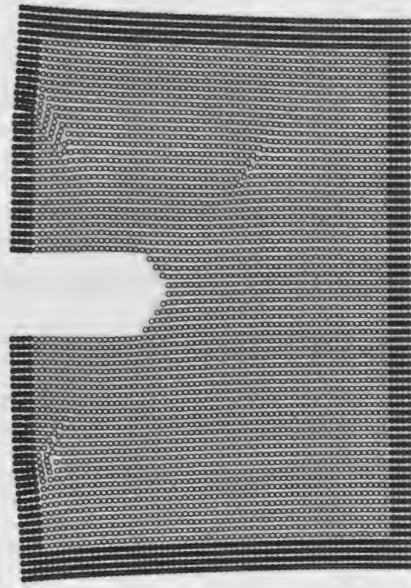


图 3.37 Twin-to-dislocation transformation.



(a) $K_I=0.0(\text{MPa}\sqrt{\text{m}})$



(b) $K_I=10.0(\text{MPa}\sqrt{\text{m}})$

图 3.38 Simulation with a $N=3600$ model in case dislocations nucleated through twinning stayed in the molecular dynamics region (N : Number of free atoms).

3.5 まとめ

この節では、第3章での結果をまとめるとともに、分子動力学/マイクロメカニクス接合モデルの妥当性の評価を行なう。前半の α -鉄のシミュレーションでは、き裂開口のシミュレーションを行ない分子動力学とマイクロメカニクスの接合法そのものの妥当性を中心に議論した。このシミュレーションでは応力場の連続性の確認やMD領域移動モデルとMD領域不動モデルの比較などを行ない非常に良い結果を得た。これらの結果から接合法自体には大きな問題はなく、理論的に矛盾のない形で接合できていることが確認できた。また、き裂先端開口変位を計算し解析解とよく一致する結果を得たことにより、き裂開口のシミュレーションに関しては妥当な結果が得られていることが確認できた。ただし、き裂先端開口変位を計算したのはあくまでも妥当性の確認のためであり、シミュレーションでき裂先端開口変位を計算すること自体は工学的にあまり意味がないことに注意が必要である。また、Riceの解では転位発生に対する障害を考慮していないので、今回の結果はき裂の開口や塑性域の形成に関しては転位発生に対する障害の影響は無視できるほど小さいということの意味している。

後半の脆性破壊のシミュレーションでは実験結果との比較を試みた。その結果、単結晶タングステンを対象としたシミュレーションでは、 $\{110\}$ 面上のき裂に対して実験結果と一致する $\{121\}$ 面に沿ったへき開割れが生じた。また、分子動力学領域のサイズ（原子数）を変えてもシミュレーション結果には影響がないことが確認できた。この2点から、脆性破壊のシミュレーションでもある程度妥当な結果が得られることが確認できた。また、シミュレーションの際には次の2点に特に注意を払う必要があることが明らかになった。

1. 不適当な原子間ポテンシャルを使用することにより、定量的な精度が落ちるだけでなく、現実と全く違う現象をシミュレートする可能性がある(3.4.2節)。
2. 本接合モデルでは、分子動力学領域を移動させる操作によりき裂先端の中心部のみに注目してシミュレートするようになっているが、今回のようにき裂先端の淵の部分が破壊起点となる可能性もあるので、問題のモデル化に対して十分に注意を払う必要がある(3.4.4節)。

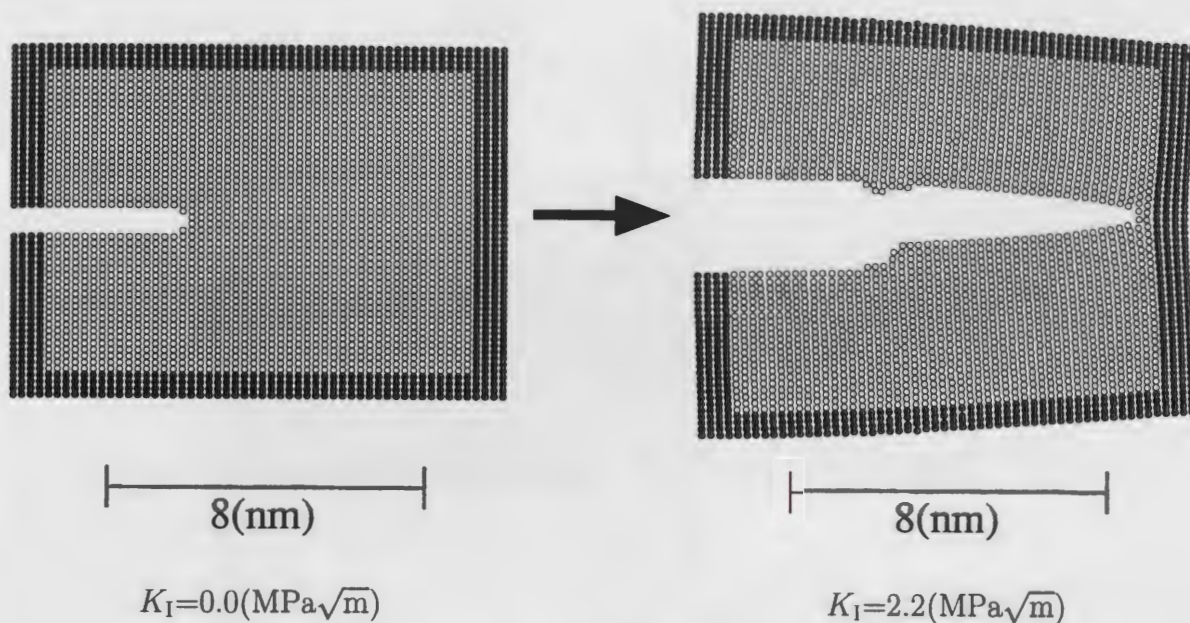


図 3.39 Simulation with a {100} crack in a tungsten single crystal.

しかし、脆性破壊のシミュレーションではいくつかの問題点も明らかとなった。それらは次の2点である。

1. 室温付近における NaCl のシミュレーションでは、転位放出をともしない完全な脆性破壊が生じた。しかし、実験⁽¹⁴⁾ではき裂先端からの転位放出が確認されているので、実験結果と矛盾する (3.3.2 節)。
2. 77 (K) でのシミュレーションで得られた破壊靱性値は実験値と比べて2倍以上高かった (3.4.5 節)。

1. に関連して単結晶タングステンに {100} 面上のき裂を導入して行なったシミュレーション結果を図 3.39 に示す。このシミュレーションは EAM ポテンシャルを用いて 77 (K) で行なったものである。また、その際の結晶方位は図 3.40 に示す通りである。この場合でも NaCl のときと同様に転位放出を伴わない完全な脆性破壊が生じている。実験⁽²⁵⁾では破面のエッチピット観察によりき裂先端から転位が放出された痕跡が確認されており、シミュレーション結果は実験結果と矛盾する。

これらの問題は 2 次元で解析を行なっているため、3 次元的なき裂の段差を考慮していないことに起因する可能性が高い。Zhou と Thomson⁽¹⁵⁾ は図 3.41 のような段差のあるき裂を考

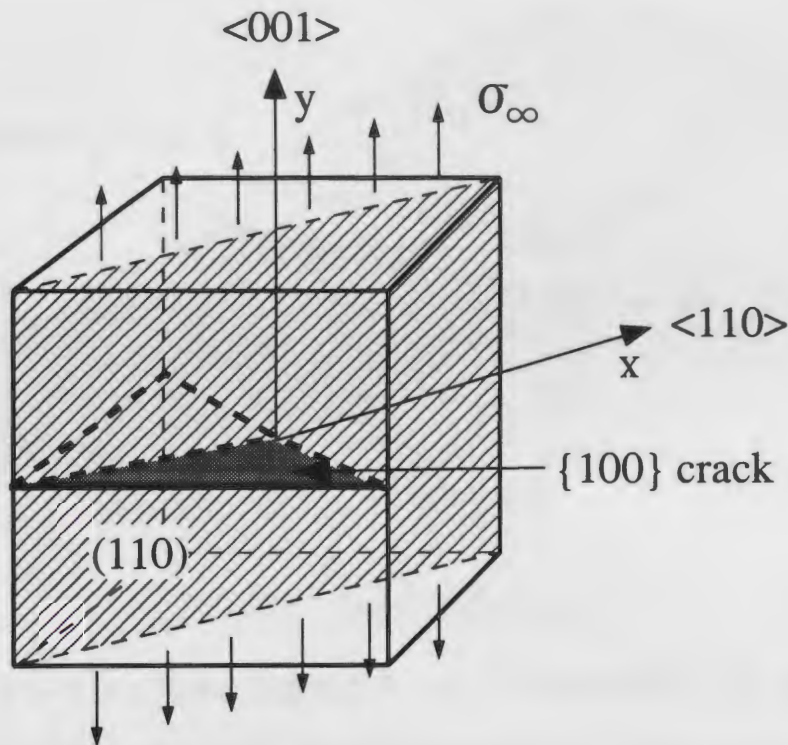


図 3.40 Crystallographic orientation.

え、その際のき裂前縁の特異点 (ledge サイト) から転位が発生するメカニズムを提案した。このメカニズムによる転位発生の際の臨界応力拡大係数 K'_e は次の通りである。

$$K'_e = \mu b \sqrt{2\pi/L} \sin(2\alpha) \dots\dots\dots (3.15)$$

ここで、 μ は剛性率、 b がバーガースベクトルの大きさを表す (L , α に関しては図 3.41 を参照)。この値は L が数原子距離以上あれば、段差の存在しない理想的なき裂を仮定して計算した Rice-Thomson の基準⁽¹⁶⁾ より遥かに小さくなる。このことを考慮すると、シミュレーションで完全な脆性破壊が起こる原因は次のようなものだと考えられる。NaCl や単結晶タングステンで {100} 面上にき裂を導入した際には、理想的なき裂からの転位発生に対する臨界応力拡大係数がへき開割れを起こす臨界応力拡大係数より大きくなり、理想的なき裂を仮定している 2次元のシミュレーションでは完全な脆性破壊が起こった。しかし、実験で用いる試験片のき裂には段差が存在し、Zhou-Thomson の機構により転位発生が可能であった。一方、単結晶タングステンで {110} 面上にき裂を導入した際には 2次元のき裂でも転位発生が可能となり、実験事実にもとじた結果が得られた。以上のように考えると、今回

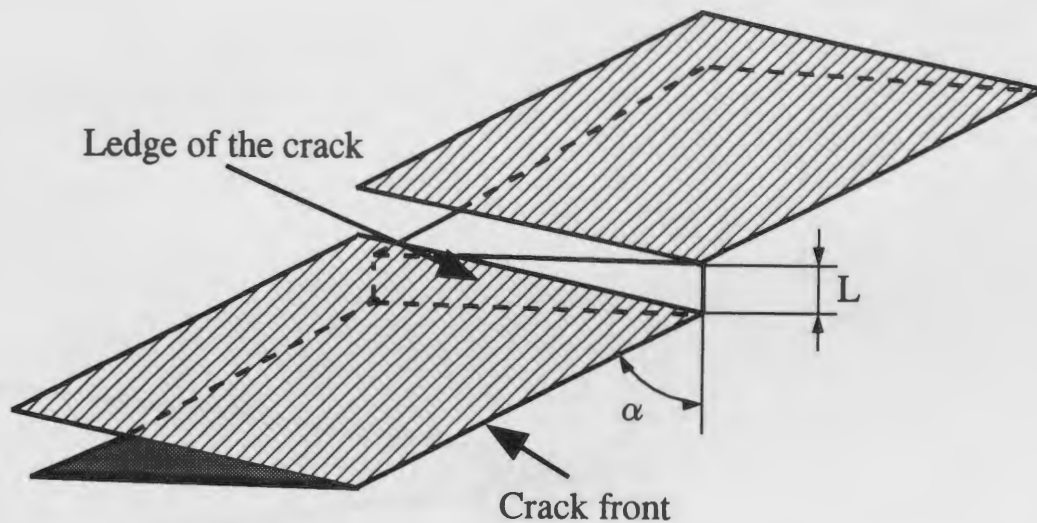


図 3.41 Ledge of the crack.

の一連のシミュレーション結果と実験事実の一致、不一致の関係がうまく説明できる。

また、2.のシミュレーション結果と実験結果が定量的によく一致しないという問題に関しては、図 3.41 のようなき裂の段差だけでなく図 3.42 のようなき裂前縁の面内の凹凸の影響も考えられる。き裂前縁に面内の凹凸があれば、局所的に応力拡大係数が大きくなる場所が現れる。そういった箇所からへき開割れによるき裂がポップインし、それを起点としてさらにへき開割れが進行していき、最終的な脆性破壊に至る。そのようなメカニズムで脆性破壊に至る際には、当然、き裂前縁がまっすぐな理想的なき裂を仮定している 2 次元のシミュレーションより低い荷重で破壊する。

このように“2次元”という制約はシミュレーションの精度の低下と実験結果との矛盾を生み出す原因となる。そもそも、2次元という制約はシミュレーションの適用範囲を大きく制限する。2次元のシミュレーションではすべり面がき裂面に対してねじれている場合やすべり方向が解析面 (x - y 平面) 内にはない場合はシミュレートできない。以上のような議論から、シミュレーションの精度の向上と適用範囲拡大のための鍵は、3次元への拡張であるといえる。しかも、ただ単に3次元に拡張するのではなく、き裂の段差やき裂前縁の凹凸を考慮した形で拡張する必要がある。そのためには今回のシミュレーションよりも遥かに大規模なシミュレーションが必要となるので、より高性能の計算機の出現を期待するとともに、ソフトの面からも計算効率を高めていくような努力を続けていく必要がある。

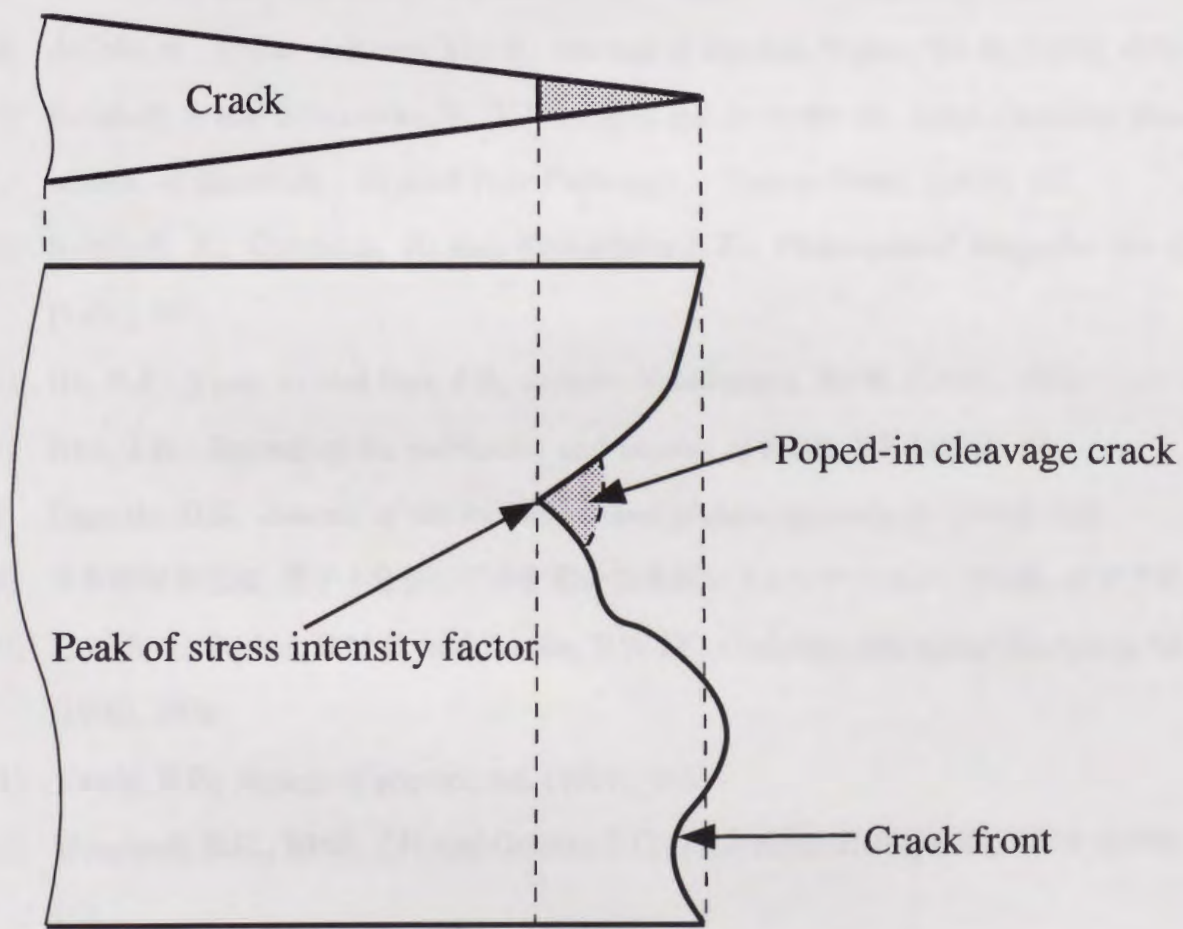


图 3.42 裂纹前缘的波动。

第3章の参考文献

- (1) Johnson, R.A., *Physical Review*, **134-5**, (1964), 1329.
- (2) Mullins, M. and Dokanish, F., *Philosophical Magazine* **46-5**, (1982), 771.
- (3) deCelis, B., Argon, A.S. and Yip, S., *Journal of Applied Physics*, **54-9**, (1983), 4864.
- (4) Kohlhoff, S. and Schmauder, S., V.Vitek and D.J.Srolovitz eds, *Large Atomistic Simulation of Materials - Beyond Pair Potentials -*, Plenum Press, (1988), 411.
- (5) Kohlhoff, S., Gumbsch, P. and Fichmeister, H.F., *Philosophical Magazine* **64-4**, (1991), 851.
- (6) Ha, K.F., Yang, C. and Bao, J.S., *Scripta Metallurgica*, **30-8**, (1994), 1065.
- (7) Rice, J.R., *Journal of the mechanics and physics of solids*, **22**, (1974), 17.
- (8) Dugdale, D.S., *Journal of the mechanics and physics of solids*, **8**, (1960), 100.
- (9) 日本機械学会編, 原子・分子モデルを用いる数値シミュレーション, (1996), コロナ社.
- (10) Corish, J., Parker, B.M.C. and Jacobs, P.W.M., *Canadian journal of chemistry*, **54**, (1976), 3839.
- (11) Ewald, P.P., *Annals of physics*, **64**, (1921), 253.
- (12) Hoagland, R.G., Hirth, J.P. and Gehlen, P.C., *Philosophical Magazine*, **34-3**, (1976), 413.
- (13) Higashida, K., Narita, N., Kamura, M., Minato, S., Matsunaga, K. and Onodera, R., *Strength of Materials. Fundamental Physical Aspects of the Strength of Crystalline Materials. ICSMA 10. Proceedings of the 10th International Conference*, bf 407-10, (1994), xix+973.
- (14) Narita, N., Higashida, K., Torii, T. and Miyaki, S., *Materials Transactions JIM*, **30**, (1989), 895.
- (15) Zhou, S. J. and Thomson, R., *Journal of Materials Research*, **6**, (1991), 639.

- (16) Rice, J.R. and Thomson, R.M., *Philosophical Magazine*, **29**, (1974), 73.
- (17) Finnis, M. W. and Sinclair, J. E., *Philosophical Magazine*, **A50-1**, (1984), 45.
- (18) Johnson, R.A. and White, P.J., *Physical Review*, **B13**, 5293.
- (19) Suresh, S., *Fatigue of Materials*, (1991), Cambridge University Press.
- (20) Nagender, S.V.N. and Rao, P.R., *Phase Diagrams of Binary Tungsten Alloys*, edited by Nagender, S.V.N and Rao, P.R., (1991), 1-3.
- (21) 藤田英一, 金属物理, (1996), アグネ技術センター.
- (22) Bucki, M., Novak, V., Savitsky, Y. M., Burkhanov, G. S. and Kirillova, V. M., *Strength of Metals and Alloys. Proceedings of the 5th International Conference*, **xxx+760**, (1979), 145.
- (23) Riedle, J., Gumbsch, P. and Fischmeister, H. F., *Materials Letters*, **20**, (1994), 311.
- (24) Cordwell, J. E. and Hull, D., *Philosophical Magazine*, **26-1**, (1972), 215.
- (25) Riedle, J., Gumbsch, P. and Fischmeister, H. F., *Physical Review Letters*, **76-19**, (1996), 3594.

第 4 章 脆性破壊と脆性延性遷移のメカニズムに対する考察

4.1 諸言

序論でも述べたように、最近の脆性破壊に対する研究の中心は熱活性化のプロセスと脆性延性遷移 (BDT) ⁽¹⁾ にあるように思われる。図 4.1 に示しているのが bcc 金属の温度と靱性の関係の模式図である。このように、bcc 金属は低温では脆性的で破壊靱性値が低いが、温度上昇に伴い破壊靱性値が上昇し、ある臨界温度以上になると脆性破壊 (へき開割れ) を起こさなくなる。この現象が脆性延性遷移であり、脆性破壊を起こさなくなる臨界の温度を脆性延性遷移温度と呼ぶ。脆性延性遷移は鉄 ⁽²⁾ やタングステン ⁽³⁾、モリブデン ⁽⁴⁾ などの bcc 金属、半導体 ^{(5),(6)} やイオン結晶 ⁽⁷⁾ などでおこることが知られている。

脆性延性遷移の様子は材料によって微妙に違う。半導体では遷移温度の近傍で急激に脆性延性遷移がおこるが、タングステンやモリブデンでは低温域から緩やかに起る。シリコンでは 0 (K) から 1000 (K) 近傍までは破壊靱性値にほとんど変化がなく、転位発生痕

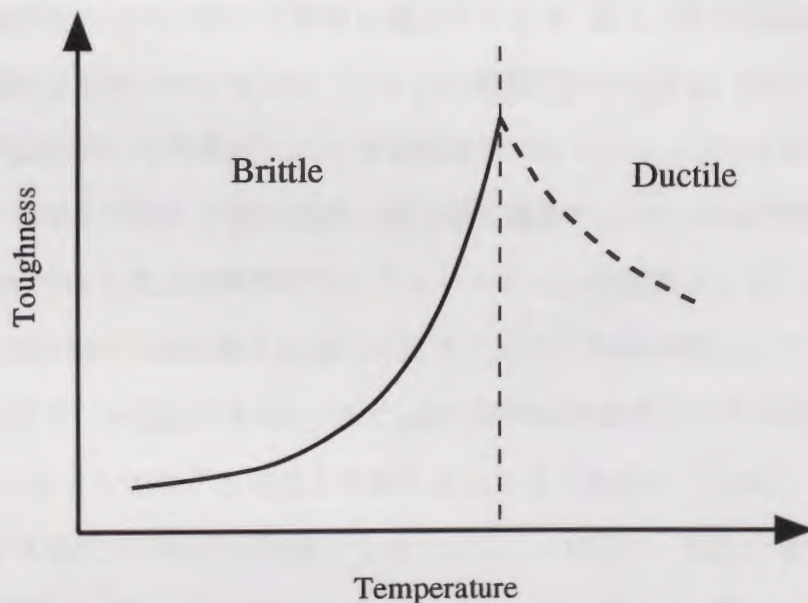


図 4.1 Brittle to ductile transition.

跡も見られない⁽⁸⁾。しかし、脆性延性遷移温度近傍では急激に破壊靱性値が上昇し、転位も爆発的に発生する。この脆性延性遷移のプロセスは10(K)前後の温度幅で完了する。一方、タングステンやモリブデンは低温域から比較的緩やかに破壊靱性値が上昇し、低温域でも転位発生の特徴が確認できる。また、脆性延性遷移の特徴として遷移温度がひずみ速度に依存することが知られている。

脆性延性遷移のメカニズムに対しては大きく分けて2つのモデルがある。一つはき裂先端での転位の発生過程における熱活性化の影響から説明しようとするモデル^{(9)~(11)}である。つまり、き裂先端での転位発生に対する難易度が温度によって変化し、それによって材料の脆性/延性の特性が変化するという主張である。もう一つは転位の易動度に対する熱活性化の影響から説明しようとするモデル^{(12),(13)}である。転位の易動度が温度によって変化すれば時系列的な転位分布が変化し、転位による応力遮蔽効果の様子も変わる。この応力遮蔽効果の変化が脆性延性遷移の原因であるというのが後者の主張である。どちらが支配的であるかという議論に対して結論はまだ出ていない。

この章では、脆性破壊と脆性延性遷移のメカニズムに関して分子動力学/マイクロメカニクス接合モデルを用いて考察を行なう。その際、脆性延性遷移に関しては、遷移温度より低温側での破壊靱性値の温度依存性について考察する。接合モデルによるシミュレーションでは発生する転位数の増大に伴い計算量も増加するので、膨大な数の転位の発生が予想される脆性延性遷移点近傍でのシミュレーションは困難だからである。研究の手順としては、最初に接合モデルを用いて各温度における脆性破壊のシミュレーションを行ない、そのシミュレーション結果を利用して脆性破壊と脆性延性遷移のメカニズムの考察を行なう。その際、接合モデルでは2次元の準静的なシミュレーションを前提としていることに注意が必要である。き裂先端での転位発生に関しては3次元での議論が盛んに行なわれているが、本研究では2次元でしか議論できない。また、脆性延性遷移温度はひずみ速度の影響を受けるが、シミュレーションでひずみ速度を考慮することはできない。しかし、準静的なシミュレーションにより転位の易動度が考慮できなくなることはない。転位の易動度に関しては転位分布の時間発展を考えるか平衡分布を用いるかの違いであり、転位に作用する摩擦力の温度依存性を考慮すれば本質的には動的な解析も静的な解析も差異はない。

また、転位による応力遮蔽効果（転位遮蔽効果）の概念がこの章では特に重要になるのでその説明を付け加えておく。転位遮蔽効果とは材料中に存在する転位の内部応力の影響でき裂先端など応力集中部での応力が緩和される効果である。転位の周りでは応力場が発生し、加工硬化した材料などで残留応力が現れる原因となる。これが転位の内部応力であり、き裂先端などの応力集中部では応力を下げる方向に作用する。この転位遮蔽効果は、き裂の進展や開口といった挙動に多大な影響を及ぼす。例えば、低温で破壊靱性値が低い材料でも高温で一旦変形させてから破壊靱性試験を行なうと低温での破壊靱性値が上昇する⁽¹⁴⁾。これは高温変形時に発生した転位による応力遮蔽効果によるものである。

第4章では、次の4.2節で温度条件を変えながら脆性破壊のシミュレーションを行ない、実験結果との比較を行なう。そのシミュレーション結果を利用して、4.3節および4.4節で脆性破壊と脆性延性遷移のメカニズムについて考察を行なう。

4.2 各温度における脆性破壊のシミュレーション結果

ここでは温度の条件を変化させて脆性破壊のシミュレーションを行ない、その結果を実験結果と比較する。材料は単結晶タングステンとし、原子間ポテンシャルは Finnis-Sinclair の EAM ポテンシャル⁽¹⁵⁾を使用する。結晶方位は図 4.2 に示す通りで $\{110\}$ 面上にき裂を導入する。この結晶方位は、第 3 章の 3.4.5 節のものと同じであり、実験事実にも則した結果が得られることが確認されている。本来なら脆性破壊を論ずる際には $\{100\}$ 面上のき裂を対象とする方が望ましい。bcc 金属では $\{100\}$ 面がへき開面となることが知られており、実験データも $\{100\}$ 面にき裂を導入して行なったもののほうが多い。しかし、今回の研究では $\{100\}$ 面上にき裂を導入すると実験結果にも則した結果が得られない (3.5 節を参照)。

図 4.3 に示しているのが単結晶タングステンのこの結晶方位に対する破壊靱性試験の実験結果⁽³⁾である。この結果を見ると高温での破壊靱性値と脆性延性遷移温度はひずみ速度の影響を受けているが、低温での破壊靱性値はあまりひずみ速度の影響を受けていない。接合モデルは準静的な解析しかできないため、ひずみ速度の影響を考慮できない上、膨大な数の転位発生が予想される高温でのシミュレーションは不可能である。従って、ひずみ速度の影響もあまりなく破壊靱性値の低い低温の領域 (77~225K) を対象としてシミュレーションを行なう。表 4.1 にシミュレーションの条件および材料定数をまとめて示す。この他にも転位に作用する摩擦力が必要だが、ここでも臨界せん断応力 (CRSS) の実験値⁽¹⁶⁾を用いる。臨界せん断応力と温度の関係は図 4.4 に示す通りである。

シミュレーションで得られた破壊靱性値の計算結果を実験値とともに図 4.5 に示す。シミュレーション結果では破壊靱性値の明確な温度依存性がみられる。しかし、定量的な面でも実験データと比べてみると全体的に相違がみられ低温になるほど相違が大きい。温度上昇に伴う破壊靱性値の上昇の傾向に関してはおおまかにはその傾向を表している。ただし、この結果からより高温の脆性延性遷移温度近傍 (350K 近傍) での急激に破壊靱性値が上昇する特徴をシミュレートし得るかどうかの判断はできない。この結果は定量的な精度の面ではやはり問題があるが、低温での破壊靱性値の温度依存性に関してはある程度表現できており、その点は評価できる。従って、定性的な破壊靱性値の温度依存性のメカニズムの検討には十分に利用できる。

参考として各温度 (77K は図 3.33 を参照) における分子動力学領域の変形の様子を図 4.6~
 図 4.9 に示し, へき開割れが生じた時点での転位分布の様子を図 4.10 に示す. また, 脆性破
 壊に至るまでに発生した転位の数とそのときの塑性域長さを表 4.2 に示す.

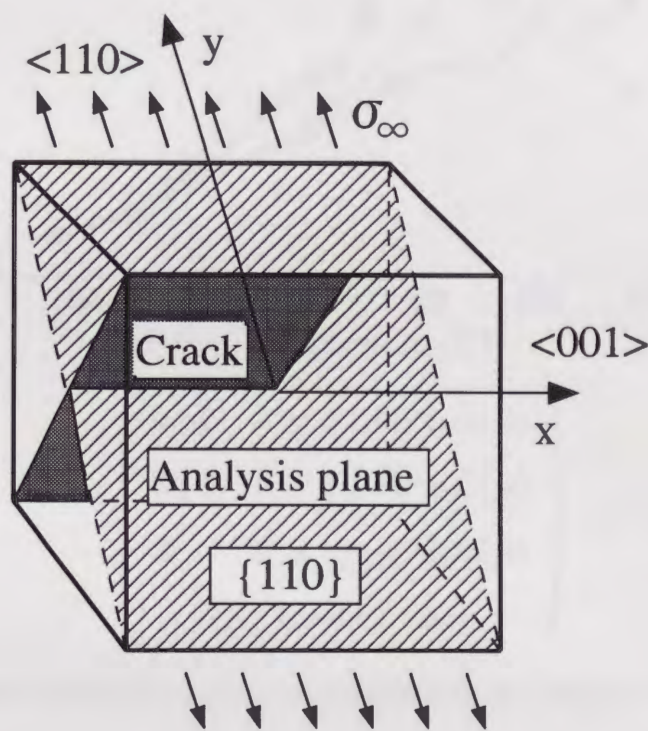


図 4.2 Crystallographic orientation.

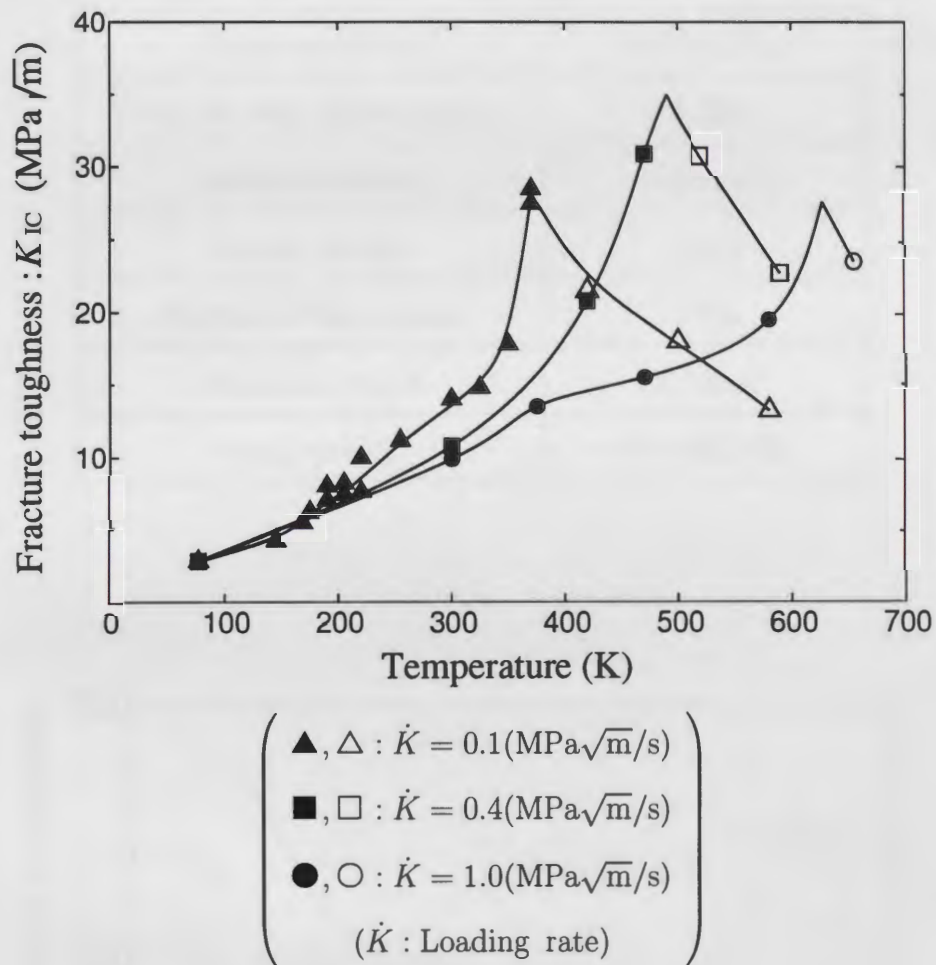


图 4.3 实验结果⁽³⁾ 的钨单晶的断裂韧性。实心符号表示断裂韧性，空心符号表示在脆性断裂方式下的应力强度因子。

表 4.1 Material constants and calculation conditions.

Young's modulus (Plane strain)	445.7 (GPa)
Shear modulus	160.6 (GPa)
Poisson's ratio (Plane strain)	0.390
Lattice constant	3.1652 (Å)
Atomic weight	183.9
Number of free atoms	2304
Pre-crack length	2 (mm)
Temperature	77~225 (K)

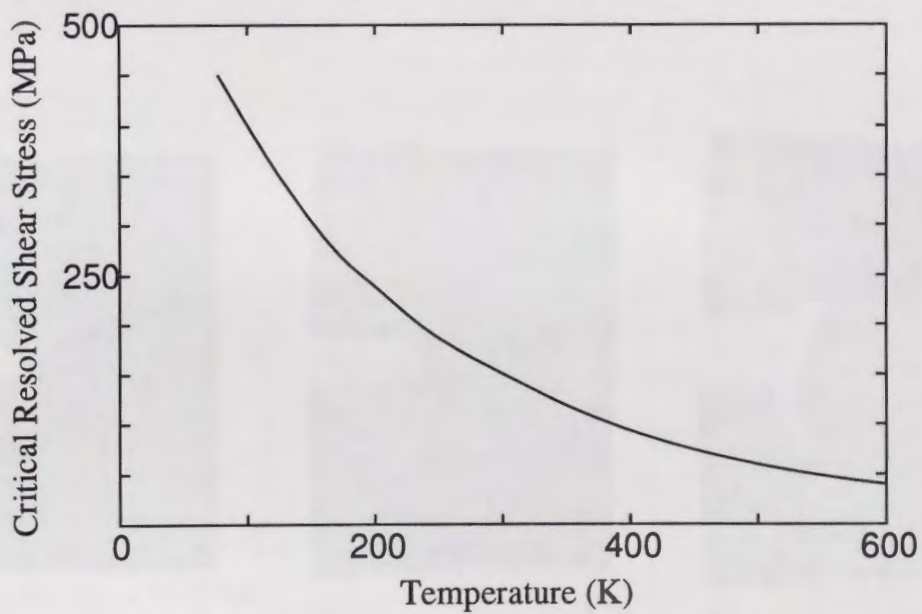


图 4.4 Temperature dependency of CRSS obtained in experiments⁽¹⁶⁾.

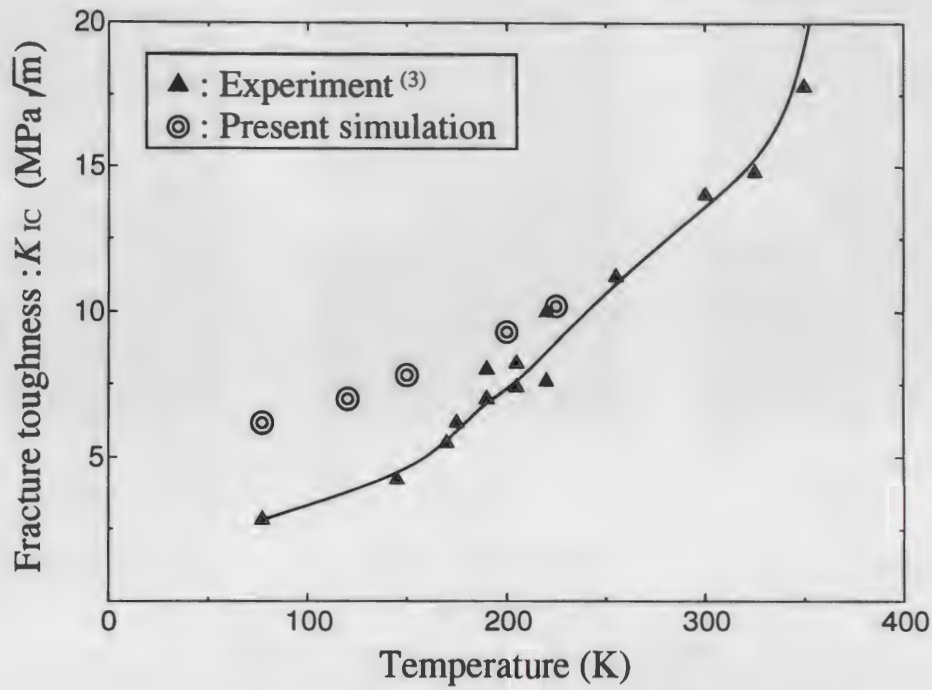


图 4.5 Comparison of fracture toughnesses between simulations and experiments.

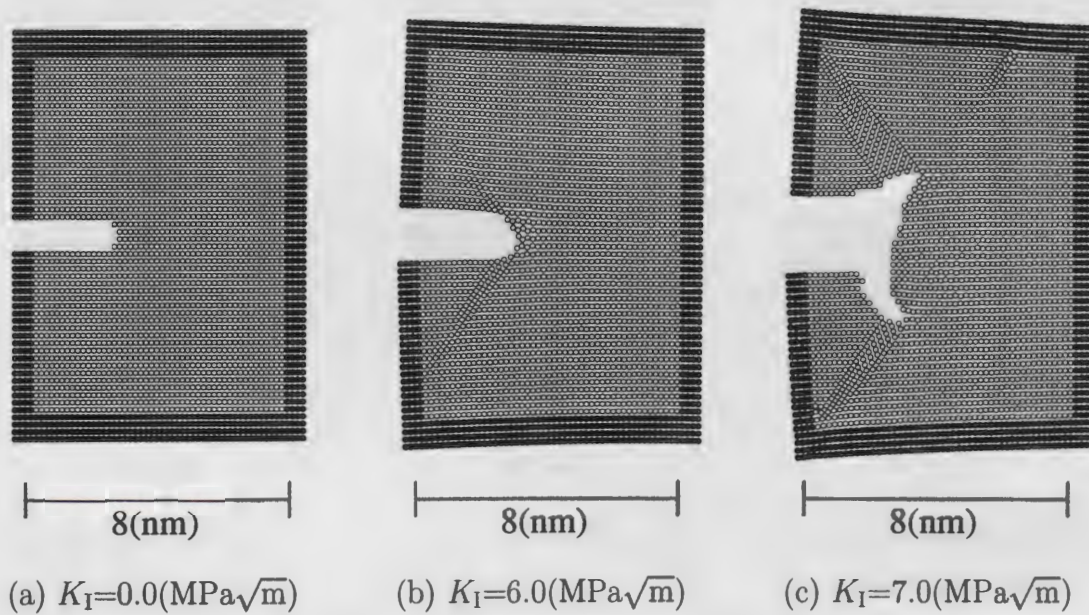
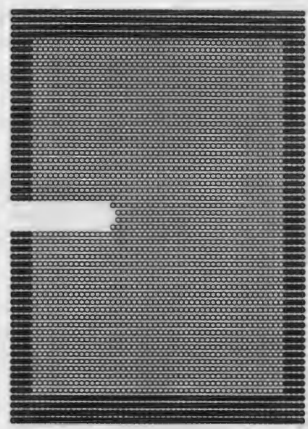
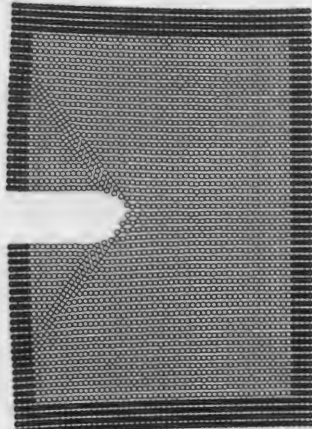


图 4.6 Simulation result at 120(K).



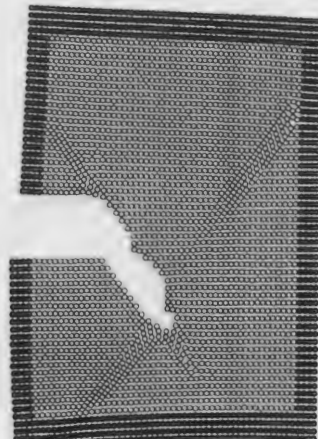
8(nm)

(a) $K_I=0.0(\text{MPa}\sqrt{\text{m}})$



8(nm)

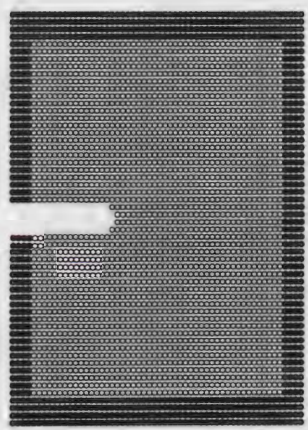
(b) $K_I=7.0(\text{MPa}\sqrt{\text{m}})$



8(nm)

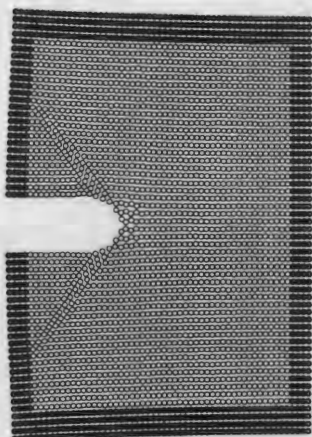
(c) $K_I=7.8(\text{MPa}\sqrt{\text{m}})$

☒ 4.7 Simulation result at 150(K).



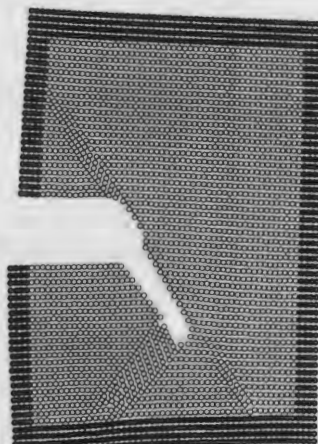
8(nm)

(a) $K_I=0.0(\text{MPa}\sqrt{\text{m}})$



8(nm)

(b) $K_I=8.0(\text{MPa}\sqrt{\text{m}})$



8(nm)

(c) $K_I=9.3(\text{MPa}\sqrt{\text{m}})$

☒ 4.8 Simulation result at 200(K).

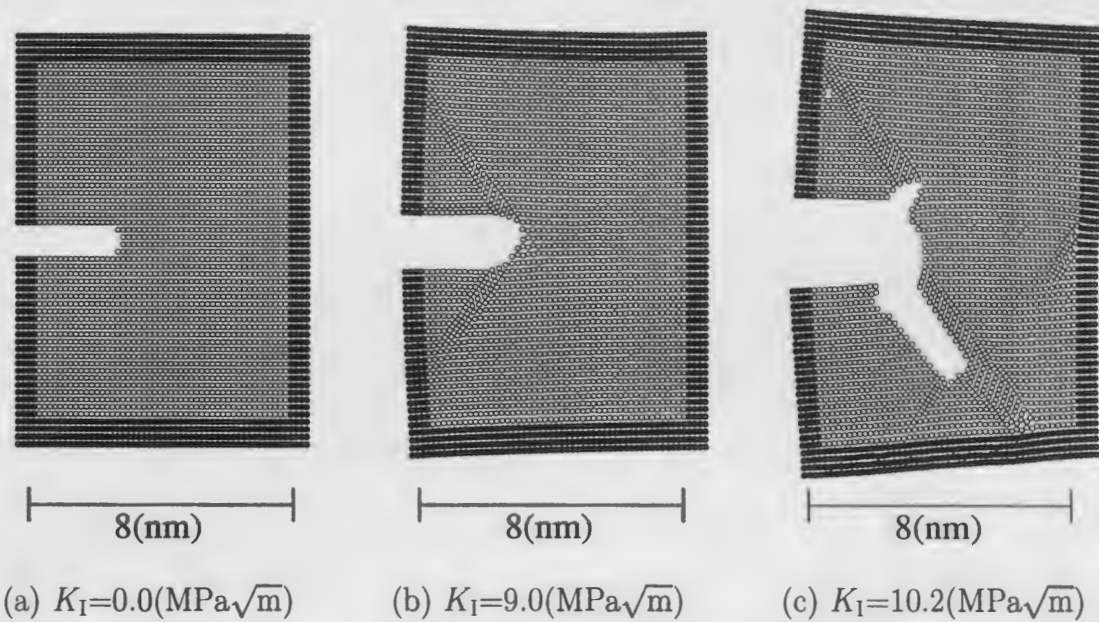
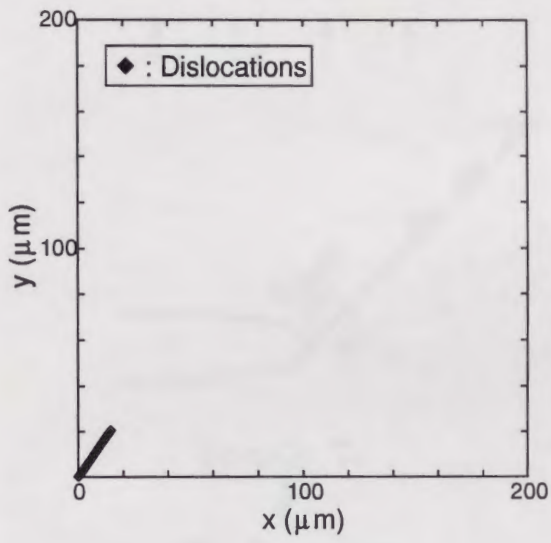


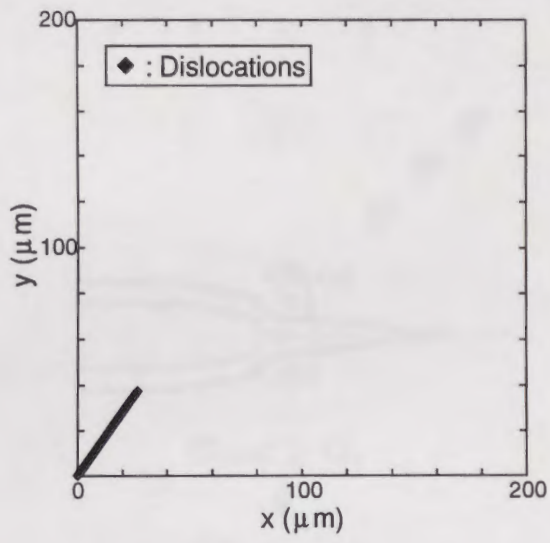
图 4.9 Simulation result at 225(K).

表 4.2 Number of emitted dislocations and lengths of plastic zones at the loading when the materials were fractured in simulations.

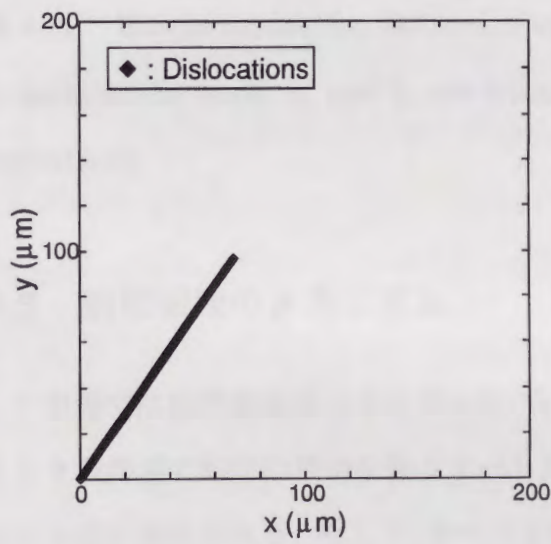
Temperature (K)	Dislocations	Plastic zones (μm)
77	155	10.0
120	298	25.4
150	452	46.3
200	907	120.9
225	1266	208.5



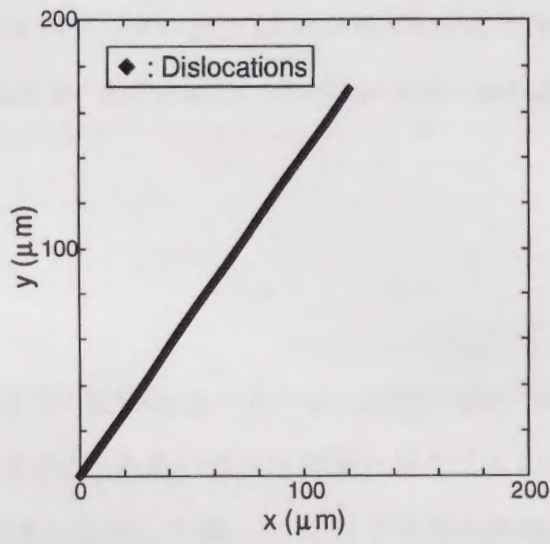
(a) 120(K)



(b) 150 (K)

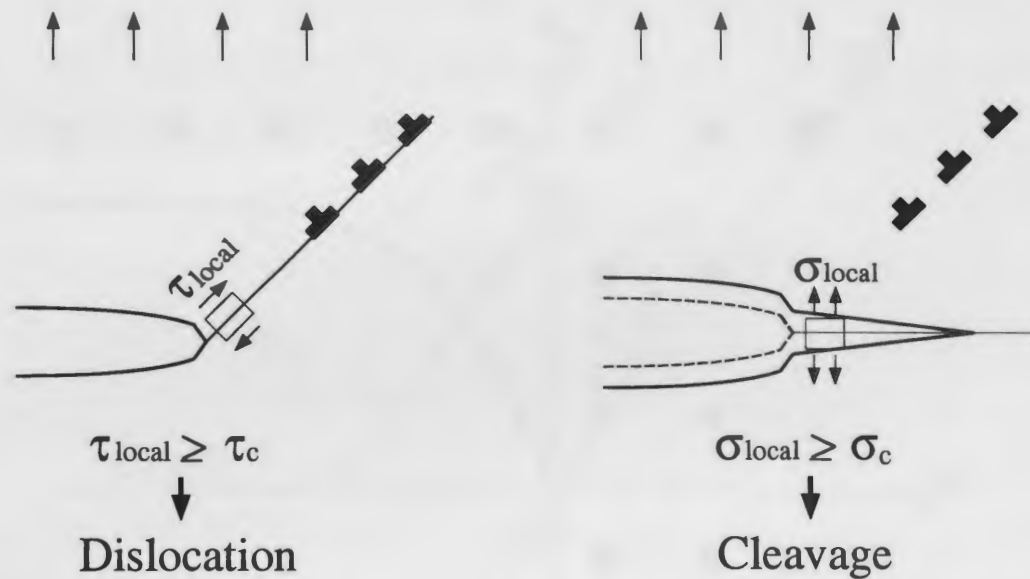


(a) 200(K)



(b) 225 (K)

⊠ 4.10 Distribution of dislocations at the loading when the material was cleaved. Only upper side is shown and the origin means a crack tip.



(a) For dislocation emissions

(b) For cleavage

図 4.11 Simple models for dislocation emissions and cleavage considering driving forces in an atomistic scale. τ_c and σ_c are critical values for dislocation emissions and cleavage, respectively.

4.3 脆性破壊のメカニズム

この節では脆性破壊のメカニズムについて考える。脆性破壊のプロセスは突き詰めていくとき裂先端で転位の放出を伴うすべりが生じるのか、あるいはへき開割れが生じるのかという点に集約される。そこで、すべりと割れの各々に対して図 4.11 に示すような非常に簡単なモデルを考えてみる。すべりに対してはすべりを誘起する駆動力である τ_{local} を考え、この τ_{local} があるしきい値である τ_c より大きくなったときにすべりが生じる。この τ_{local} はき裂先端の局所領域においてすべり面に作用する分解せん断応力であり、局所領域とは具体的にはき裂先端から原子 1 個か 2 個のナノスケールの領域である。へき開割れに対しては同様にへき開割れを誘起する駆動力 σ_{local} を考え、それがしきい値である σ_c より大きくなったときにへき開割れが生じる。局所応力の定義の仕方がき裂先端という特異点のごく近傍でありながら”原子 1 個か 2 個”と曖昧な点が問題だが、このモデルは直観的にわ

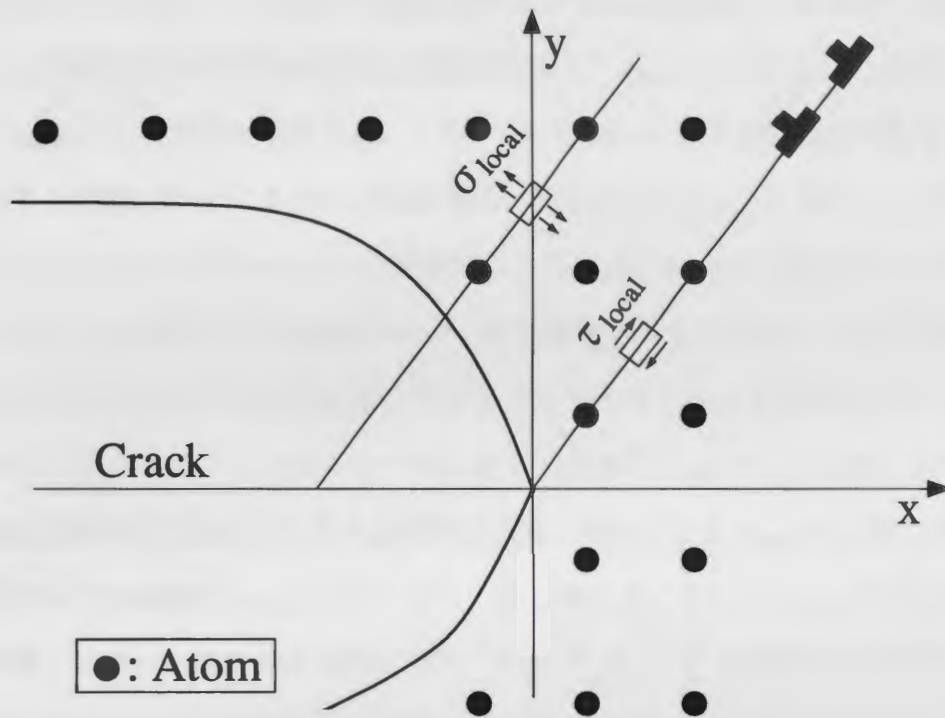


図 4.12 Continuum model for τ_{local} and σ_{local} calculations, compared with atom positions. Calculation points of τ_{local} and σ_{local} were $(\frac{1}{2}a, \frac{\sqrt{2}}{2}a)$ and $(0, \sqrt{2}a)$, respectively (a : lattice constant). A radius of the crack tip was $\rho = \sqrt{2}a$.

かりやすく現象の本質を理解するのに役立つ。実際に τ_{local} と σ_{local} を計算する際はシミュレーションで得られた転位分布の情報と負荷荷重である K_I から弾性論的に計算する。本研究での詳細な応力の計算点とき裂先端の原子との位置関係を図 4.12 に示す。{121} 面に沿ってき裂先端の淵の部分から割れが生じる点 (3.4.5 節を参照) を考慮して、 σ_{local} は {121} 面上で計算する。その際、き裂先端の曲率半径 ρ はゼロではなく、原子 2 個分の長さを持っているとする。

77 (K) のシミュレーションで得られた τ_{local} と σ_{local} の計算結果を図 4.13 に示す。表 4.1 に示しているヤング率は平面ひずみ問題の計算に用いるヤング率 E' で、 σ_{local} の無次元化に用いているヤング率 E とは $E' = E/(1-\nu^2)$ の関係にある。すべりに対する駆動力である τ_{local} の計算結果を見てみると、弾性変形の過程では K_I の上昇に伴い線形的に上昇するが、転位の放出が開始するとそれ以上上昇しなくなる。これは、 $\tau_{\text{local}} \geq \tau_c$ となった時点ですべりが

生じ転位が放出されるが、その転位の遮蔽効果によって τ_{local} が緩和されるからである。つまり、 $\tau_{\text{local}} \geq \tau_c$ の間は転位の放出が続き、遮蔽効果により $\tau_{\text{local}} < \tau_c$ となった時点で終る。結果として、 $\tau_{\text{local}} < \tau_c$ の状態が保たれる。一方、へき開割れに対する駆動力である σ_{local} の計算結果をみると同様に転位による応力遮蔽効果がみられるが、 τ_{local} と違い σ_{local} は少しずつ上昇していく。シミュレーションでへき開割れが生じた点 ($K_I=6.3 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$) で $\sigma_{\text{local}} \geq \sigma_c$ となったと考えられるので、この結果から σ_c を見積もることができる。以上の結果からこのシミュレーションにおける脆性破壊のプロセスをまとめてみると次のようになる。 K_I を 0 から徐々に上昇させていくと先にすべりに対する駆動力 τ_{local} が τ_c に達してすべりが生じ、同時に放出された転位による応力遮蔽が起こる。それにより τ_{local} は上昇しなくなるが、へき開割れに対する駆動力 σ_{local} は少しずつ上昇し続ける。そして、 σ_{local} が σ_c に達した時点でへき開割れが生じ、最終的な破壊に至る。ここで、 τ_c と σ_c の値がそれぞれ固体の理想せん断強度 ($G/2\pi$) および理想引張り強度 ($E/10$) に非常に近い値になっていることは興味深い点である。このことは、マクロな破壊強度が理想強度に比べて低くてもナノレベルでみると破壊起点では理想強度に近い値に達していることを示唆している。

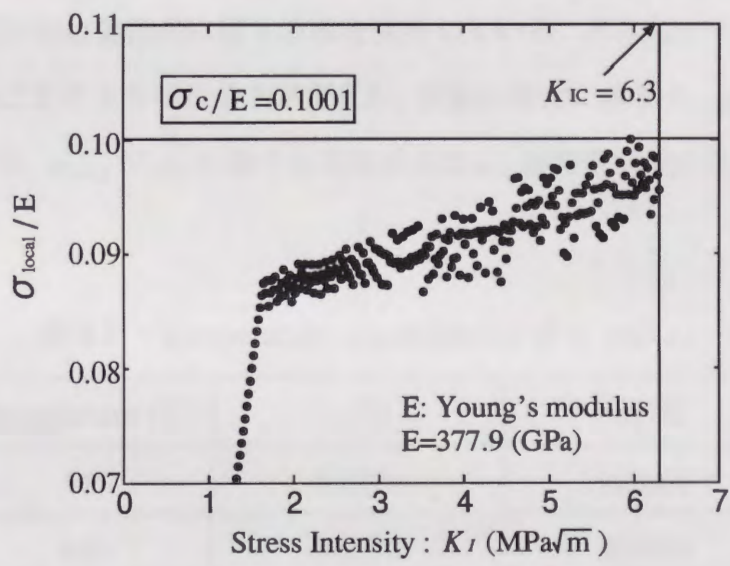
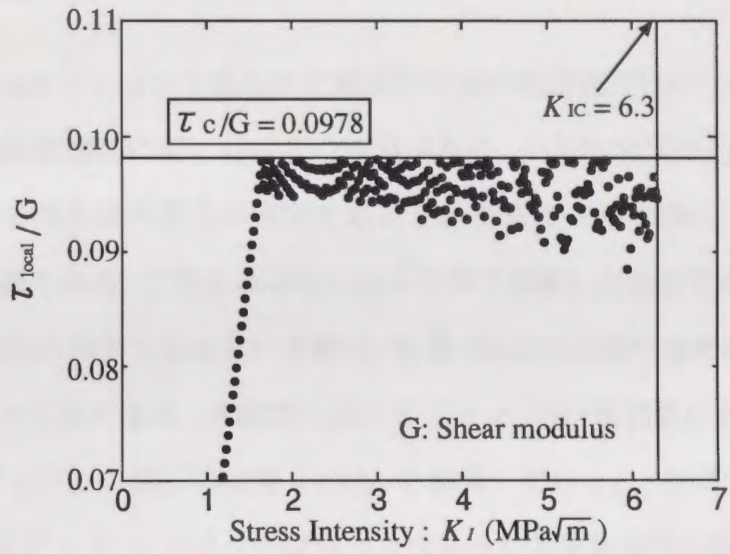


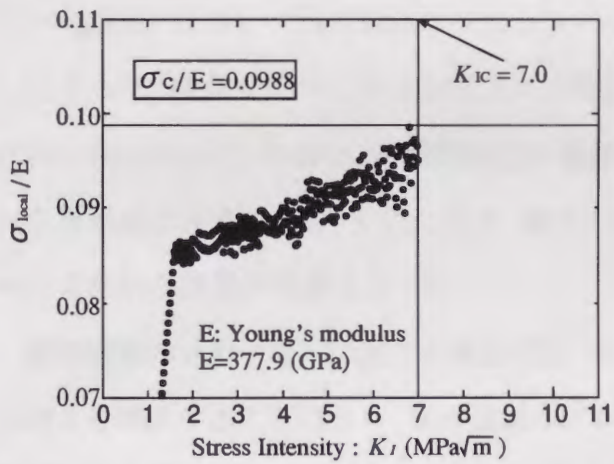
図 4.13 Calculation results of τ_{local} and σ_{local} at 77(K).

4.4 脆性延性遷移に対する考察

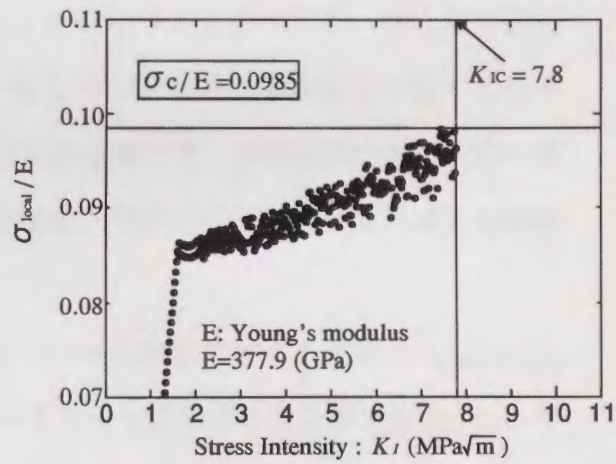
この節ではシミュレーションで得られた破壊靱性値の温度依存性について考察を行なう。前述のように脆性延性遷移に対しては2つの説がある。一方は温度変化に伴うき裂先端での転位発生に対する難易度の変化が原因であるという説で、他方は転位の易動度の変化が原因であるという説である。これを本研究に沿った形で解釈しなおしてみると、前者は温度変化に伴う τ_c の変化が原因であるという説で、後者は転位に作用する摩擦力（CRSS）の変化が原因であるという説である。各温度における τ_c と σ_c の計算結果を表4.3に示す。また、参考として各温度（77Kに関しては図4.13(b)を参照）での σ_{local} 計算結果を図4.14に示す。この結果をみると τ_c と σ_c は多少のばらつきはあるが温度依存性は確認できない。一方、転位に作用する摩擦力は温度上昇に伴い低下している（図4.4）。従って、シミュレーションでの破壊靱性値の温度依存性の原因は温度変化に伴う転位に作用する摩擦力の変化であり、本研究結果は後者の転位易動度に関する説を支持している。具体的なメカニズムは転位の易動度が増加することにより転位分布が変化し、荷重の増大に伴う σ_{local} の上昇の様子が変化する。結果として、 σ_{local} が σ_c に達する荷重が変化し、破壊靱性値が変化するというものである。

表 4.3 Temperature dependencies of τ_c and σ_c .

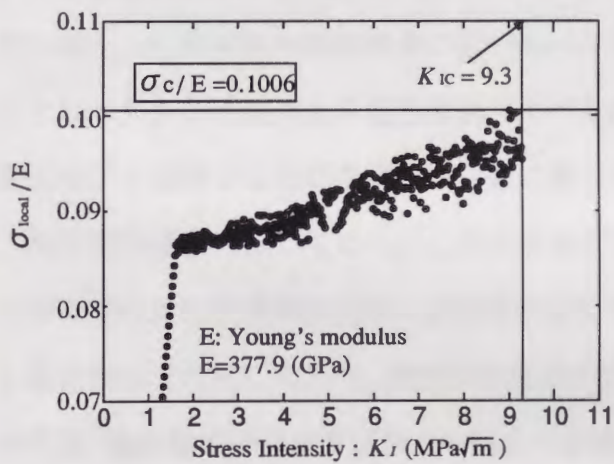
Temperature (K)	τ_c/G	σ_c/E
77	0.0979	0.1001
120	0.0972	0.0988
150	0.0969	0.0985
200	0.0975	0.1006
225	0.0968	0.0982



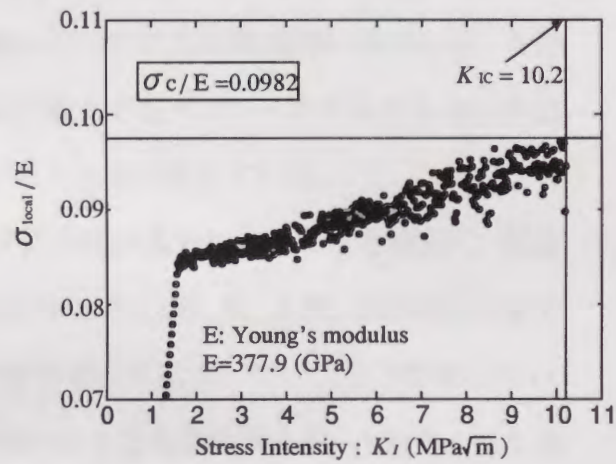
(a) 120(K)



(b) 150(K)



(c) 200(K)



(d) 225(K)

☒ 4.14 Results of σ_{local} calculations at each temperature.

4.5 まとめ

この節では第4章での結果をまとめるとともに、それに対する考察を行なう。今回のシミュレーションでは、脆性延性遷移温度近傍でのシミュレーションはできなかったが、低温(77~225K)において脆性破壊のシミュレーションを行なうことができた。第3章で説明したように、接合モデルには2次元という制約があるので定量的に実験値と一致する結果は得られなかった。しかし、破壊靱性値の温度依存性を表現でき、実験結果に比較的近い傾向を得た点は評価できる。それにより、後半の脆性破壊と脆性延性遷移のメカニズムの議論へと理論的な展開が可能となった。

脆性破壊のメカニズムに関する議論では、すべりとへき開割れに対する駆動力 τ_{local} , σ_{local} の考えを導入することにより、脆性破壊のプロセスをうまく説明することができた。ここで提案したモデルは他の研究者が3次元的な考察から転位発生のメカニズムを議論している現状^{(9),(10),(11),(17)}を考えると幼稚なものといわざるを得ない。しかし、 τ_{local} , σ_{local} に基づくモデルは直観的にわかりやすく、現象の本質を理解するの役立だった。また、 τ_{local} , σ_{local} のしきい値 τ_c , σ_c が材料の理想強度に近いレベルに達していたことは興味深い点である。このことはマクロな破壊強度が理想強度に比べて遥かに低くてもナノレベルでみると破壊起点のごく近傍では理想強度に近い値に達していることを示唆している。

脆性延性遷移に関しては τ_c , σ_c の計算値に温度依存性が見られないことを根拠に、転位の易動度の変化が破壊靱性値の温度依存性をもたらすことを示した。ただ、これはあくまでも低温領域での話しであり、脆性延性遷移のプロセスすべてにおいていえるとは限らない。例えば、脆性延性遷移温度近傍では鈍化の影響が現れてくる可能性がある。今回のような低温でのシミュレーションでは鈍化を起こしてもき裂先端の曲率半径はき裂長さに対して十分小さく、鈍化の影響を無視してもだいたいの傾向は表現できた。しかし、脆性延性遷移温度の近傍では膨大な数の転位発生が予想されるので鈍化の影響が無視できなくなる可能性がある。この問題をさらに追求し、その本質を突き止めるためには脆性延性遷移温度近傍でのシミュレーションを可能にする必要がある。そのためには、より高性能の計算機の出現が必要となるが、ソフトの面でも計算効率の向上を目指す必要がある。また、より高温でのシミュレーションではひずみ速度の問題が生じるため、動的な解析を行なう必要がある。その

際、分子動力学領域では今回と同様に準静的な解析を行ない、転位の運動のみを動的に解析するほうが好ましい。さもないと、分子動力学の時間ステップが非常に小さいことに起因するナノ秒のオーダーのシミュレーションしかできないという問題が生じてしまう。

この章の研究では、脆性破壊と破壊靱性値の温度依存性に関しては満足できる成果が得られた。しかし、遷移温度近傍でのシミュレーションができなかったため脆性延性遷移の一連のプロセスをすべて解明できたわけではない。遷移温度近傍でのメカニズムは脆性延性遷移のプロセスの中で最も重要なポイントなので、実用性という観点から脆性延性遷移に関しては必ずしも満足な結果が得られたとはいえない。

第4章の参考文献

- (1) 前田康二, まてりあ, 36-3, (1997), 206.
- (2) Ha, K.F., Yang, C. and Bao, J.S., *Scripta Metallurgica*, **30-8**, (1994), 1065.
- (3) Gumbsch, P., Riedle, J., Hartmaier, A. and Fischmeister, H., *Science*, **282**, (1998), 1293.
- (4) Beardmore, P. and Hull, D., *Refractory Metals and alloys IV, ASME Symposium*,
- (5) John, C.St., *Philosophical Magazine*, **32**, (1975), 1193.
- (6) Serbena, F.C. and Roberts, S.G., *Acta Metallurgica et materialia*, **42**, (1994), 2505.
- (7) Narita, N., Higashida, K., Torii, T. and Miyaki, S., *Materials Transactions JIM*, **30**, (1989), 895.
- (8) Chiao, Y.H. and Clarke, D.R., *Acta Metallurgica*, **37**, (1989), 203.
- (9) Rice, J.R. and Beltz, G.E., *Journal of Mechanics and Physics of Solids*, **42-2**, (1994), 333.
- (10) Xu, G. and Argon, A.S., *Philosophical Magazine*, **A72-2**, (1995), 415.
- (11) Xu, G. and Argon, A.S., *Philosophical Magazine*, **A75-2**, (1997), 341.
- (12) Hirsch, P.B. and Roberts, S.G., *Philosophical Magazine*, **A64-1**, (1991), 55.
- (13) Maeda, K., *Scripta Metallurgica*, **27-7**, (1992), 805.
- (14) Booth, A.S., Cosgrave, M. and Roberts, S.G., *Acta Metallurgica et materialia*, **39**, (1991), 191.
- (15) Finnis, M. W. and Sinclair, J. E., *Philosophical Magazine*, **A50-1**, (1984), 45.
- (16) Bucki, M., Novak, V., Savitsky, Y. M., Burkhanov, G. S. and Kirillova, V. M., *Strength of Metals and Alloys. Proceedings of the 5th International Conference*, **xxx+760**, (1979), 145.
- (17) Zhou, S. J. and Thomson, R., *Journal of Materials Research*, **6**, (1991), 639.

第 5 章 結論

本研究では、完成度の高い分子動力学と連続体力学の連結手法を開発し、それを用いて脆性破壊とそれに対する温度の影響を解明するとともに、破壊靱性値の定量的な評価を目指した。分子動力学は近年の高性能計算機の開発とともに出現した原子・分子系シミュレーション技術の一種で、本研究を通してその有用性を実証するとともに材料強度研究への適用のための基礎技術を構築することがその研究の目的であった。この章では結論として、その研究成果をまとめる。最初に各章ごとの研究成果をまとめた後で本研究の全体的な総括を行なう。

第 2 章では分子動力学とマイクロメカニクスの基礎的な理論について説明した後、本研究で開発した分子動力学/マイクロメカニクス接合モデルについて説明した。この接合モデルはき裂先端のみを分子動力学で表現し、その周りを連続体（マイクロメカニクス）を用いて表現するというものである。その独創的な点として、次の 3 つがある。

1. 体積力を用いたフレキシブル境界条件の採用により、応力と変位の双方の境界条件をみたす。
2. き裂先端で発生した転位が両領域の境界を通過することができる。
3. き裂進展に合わせて分子動力学領域が移動することにより、効率的なシミュレーションが可能である。

特に転位の境界通過と分子動力学領域の移動の技術は革新的で、これにより現実的なシミュレーションが可能となった。ただし、この接合モデルは 2 次元での準静的なシミュレーションを前提としていることには注意が必要である。

第 3 章では、分子動力学/マイクロメカニクス接合モデルを用いて、 α -鉄、単結晶 NaCl、単結晶タングステンを対象としたき裂進展のシミュレーションをそれぞれ行ない接合モデルの妥当性の検討を行なった。 α -鉄のシミュレーションでは、き裂開口のシミュレーション

を行ない接合法の細部について妥当性の検討を行なった。また、単結晶 NaCl と単結晶タングステンのシミュレーションでは脆性破壊のシミュレーションを行ない実験事実との対応を図った。第 3 章では次のような結果を得た。

1. 分子動力学と連続体の境界上での応力場の連続性の確認や MD 領域移動モデルと MD 領域不動モデルの比較から、両領域の接合法が理論的に矛盾のないものであることを示した。
2. き裂先端開口変位と塑性域長さを計算し、Rice の解と定量的に一致する結果を得た。
3. 単結晶タングステンを対象としたシミュレーションで {110} 面上のき裂に対して実験結果と一致する {121} 面に沿ったへき開割れが再現された。
4. 脆性破壊のシミュレーションで分子動力学領域のサイズを変えてもシミュレーション結果に影響がないことを示した。
5. 破壊靱性値の計算値は実験値より 2 倍ほど大きかった。
6. 単結晶 NaCl のシミュレーションでは実験事実と反して転位放出を伴わない完全な脆性破壊が生じた。

これらの結果からき裂の開口や塑性域の形成に関するシミュレーションでは非常によい結果が得られていることがわかる。また、脆性破壊に関しても定量的な精度の面では十分とはいえないが、定性的な面では実験事実と符合する結果が得られている。これらの点から、従来の連結手法の研究と比べると格段の進歩といえる。しかし、接合モデルにおける 2 次元という制約が非常に大きいことも示唆された。脆性破壊のシミュレーションでの定量的な精度の問題や単結晶 NaCl で転位放出が起きないなどの問題は 2 次元の制約に起因する可能性が高い。

第 4 章では、脆性破壊と脆性延性遷移のメカニズムに対する考察を行なった。ここでは、温度の条件を変えながら脆性破壊のシミュレーションを行ない実験結果との比較を行なった後で、そのシミュレーションで得られた情報を基にメカニズムを考察した。ここで得られた成果は次のようなものである。

1. シミュレーションで得られた破壊靱性値は定量的な面では実験結果とよい一致とはいえなかったが、定性的な傾向はある程度再現できた。

2. シミュレーションでの脆性破壊のプロセスは荷重増加に伴うすべりの駆動力とへき開割れの駆動力の増加傾向の違いから説明できることを示した.
3. き裂先端のナノレベルの領域での応力は、すべりやへき開割れが生じる直前には材料の理想強度に近いレベルに達していることを示した.
4. シミュレーションで得られた破壊靱性値の温度依存性の原因は、き裂先端での転位発生ではなく、放出された転位の易動度であることを示した.

ここでは、シミュレーションの精度には問題があったものの、脆性破壊と破壊靱性値の温度依存性に関してはうまく説明することができた。また、破壊靱性値というマクロな材料定数を材料の理想強度と関連づけることができた。しかし、今回の研究では脆性延性遷移温度近傍でのシミュレーションができなかったため、その結果は脆性延性遷移のメカニズムを説明するのに十分なものとは言えない。

以上の結果をまとめてみると、分子動力学の研究という観点でみると従来の研究より格段に進歩しており、十分な成果を得たといえる。連結手法の開発では、転位の境界通過の問題を解決し分子動力学領域の移動などの新しいアイデアを組み込むことにより、転位の発生からへき開割れまでの脆性破壊の一連のプロセスをシミュレートできる非常に完成度の高い接合モデルを開発した。また、その接合モデルの妥当性を実験結果や解析解との比較を通して詳細に分析した。実用性という観点からも脆性破壊のメカニズムを解明し、マクロな破壊靱性値と材料の理想強度を関連づけることができた点は非常に大きな成果である。また、脆性延性遷移に関してもその一連のプロセスをすべてを解明できたわけではないが、低温での破壊靱性値の温度依存性のメカニズムを十分に説明できたのである程度の成果は得たと言える。破壊靱性値の定量的評価に関してはその精度の面で必ずしも十分ではなく、第3章では実験値より2倍以上大きな値が得られている。第4章の結果をみれば、第3章での2倍という数字はあまり意味がないことがわかるが、それでも精度の面では十分とは言えない。しかし、それまでの研究で破壊靱性値の定量的な評価をできていなかったことを考えると、比較的少ない実験データから破壊靱性値を導き出した本研究の成果は十分に進歩したものといえる。また、本研究を通して“2次元”という制約が非常に大きなものであることがわかった。今後、連結手法の適用範囲をさらに広げていくためには、3次元への拡張とそれ

に必要な不可欠な計算の高速化の2点が必要だと考えられる。

本研究でのシミュレーションは平面ひずみ問題として行なった。つまり、2次元のシミュレーションとはいえ厚板の内部の様子を原子レベルでコンピュータ内に再現し、それから応力などの情報を入手することにより脆性破壊のメカニズムの解明を行なった。これらは実験的な手法では達成し得ないものであり、原子・分子系シミュレーションの魅力的な部分である。ただ、今回の研究で明らかになったように、その精度と信頼性は必ずしも満足なものではない。本質的なポテンシャルの問題もあるし、2次元と3次元などのモデル化の段階での問題もある。従って、当面の間は今回の研究のように実験事実との比較を行ない理論とモデル化に修正を加えながら、その有用性を実証していくような地道な努力が必要であろう。しかし、将来的には Frank-Read の機構や Zhou-Thomson の機構をシミュレーションで再現し、定量的に評価することも可能になるかもしれない。また、原子間ポテンシャルの理論が成熟してくれば、き裂や転位の振舞いに対する水素原子や炭素原子の影響の定量的な評価が可能になることも現実的にあり得る。そのような研究の前段階としてシミュレーションの精度と信頼性の定量的な確認、問題点の抽出、有用性の実証を行なったという観点から、本研究では大きな成果を得たといえる。また、原子・分子系シミュレーションの可能性を示すという観点からも、十分に貢献し得るものだといえる。

謝辞

本研究を遂行するにあたり、直接御指導頂いた九州大学大学院工学研究科 野口博司助教授および指導教官として様々な形で御助言、御助力を頂いた九州大学大学院工学研究科 村上敬宜教授に心より感謝の意を表します。

本論文をまとめるにあたり、貴重な御助言を頂いた九州大学大学院工学研究科 小野寺龍太教授、九州大学大学院工学研究科 宮崎則幸教授に謹んで感謝の意を表します。

ドイツ渡航の機会を与えて頂き、貴重な御助言を頂いたドイツ、シュトッツガルト大学、MPA, Prof. S.Schmauder に厚く御礼申し上げます。

さらに、卒業論文以来、九州大学大学院 工学研究科 機械科学専攻 固体力学講座、材料強度学講座および九州大学大学院 工学研究科 知能機械システム専攻 機械材料学講座 の皆様には公私にわたりたいへんお世話になりました。ありがとうございました。

平成 11 年 古谷 佳之

付録 I

I.1 応力拡大係数と破壊靱性値

き裂のある材料では、応力集中 (σ_{\max}) に対する議論から強度を評価することはできない。なぜなら、弾性論的にはき裂先端は特異点となり、 σ_{\max} は発散してしまうからである。そこで、き裂に対する負荷を評価するパラメータとして応力拡大係数⁽¹⁾が導入された。

Mode-Iの負荷がかかったとき、き裂先端での応力状態は図 I.1 のようになる。ここで、小規模降伏の条件（塑性域がき裂長さに比べて十分小さく、近似的に弾性体として応力場を計算できる条件）と $\epsilon \ll a$ という条件のもとで σ_y を ϵ で表すと、次式のようなになる。

$$\sigma_y \cong \frac{\sigma_\infty \sqrt{a}}{\sqrt{2\epsilon}} \dots\dots\dots (I.1)$$

この式から、き裂先端での応力場は $1/\sqrt{\epsilon}$ の特異性を持っていて、き裂に対する負荷の大きさは右辺の分子の大きさによって決定されることがわかる。この右辺の分子を応力拡大係数と定義し、き裂に対する負荷の大きさを評価するパラメータとして用いる。実際には慣用的に、これに $\sqrt{\pi}$ をかけて、Mode-Iの負荷に対して次式のような形で応力拡大係数を定義する。

$$K_I = \sigma_\infty \sqrt{\pi a} \dots\dots\dots (I.2)$$

そして、き裂の進展にともなう不安定破壊を起こすときの荷重を破壊靱性値と呼び、応力拡大係数 K では K_C と表す。特に平面ひずみの条件を満たすときの破壊靱性値 K_C を平面ひずみ破壊靱性値と呼び、 K_{IC} と表す。本論文では平面ひずみ破壊靱性値 K_{IC} を単に破壊靱性値と呼んでいた。

I.2 Dugdale モデル

平面応力の問題では、き裂先端の塑性域はき裂に対して平行な直線上に広がっていく。この平面応力の問題で小規模降伏の条件のもとでき裂先端開口変位 (CTOD) と塑性域の長

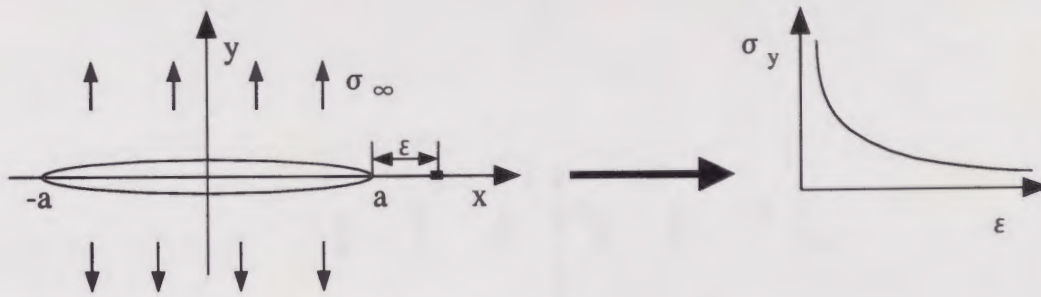


図 I.1 Stress field at a crack tip.

さを求めたのが Dugdale モデル⁽²⁾である。ここで、平面応力とは板厚方向の応力がゼロとして計算される平面問題のことで、一般に表面の状態を解析するの用にられる。

Dugdale モデルでは、塑性域の中では応力が一様に降伏応力 σ_s に等しくなるという条件で解が求められる。このとき図 I.2 に示すようにき裂の長さを $2a$ 、塑性域の長さが $r_p = c - a$ として、次の二つの場合の重ねあわせによって求められる。

- (a) 無限遠方で一様引張り応力 σ_∞ を受ける長さ $2c$ のき裂。
- (b) $|x - a| < r_p$ の範囲でき裂の上下面に一様分布力 $-\sigma_s, \sigma_s$ を受ける長さ $2c$ のき裂。

ここで、 σ_s は降伏応力である。塑性域の長さ r_p は $x=c$ の点での応力の特異性が消えるという条件から決定される。そのときの条件は、(a),(b) のそれぞれの場合の応力拡大係数 $K_I^{(a)}, K_I^{(b)}$ を用いて次式で表される。

$$K_I^{(a)} + K_I^{(b)} = 0 \dots\dots\dots (I.3)$$

このとき、 $K_I^{(a)}, K_I^{(b)}$ は次のようになる。

$$K_I^{(a)} = \sigma_\infty \sqrt{\pi a} \dots\dots\dots (I.4)$$

$$K_I^{(b)} = -2\sigma_s \sqrt{\frac{c}{\pi}} \cos^{-1}\left(\frac{a}{c}\right) \dots\dots\dots (I.5)$$

従って、I.3~I.5 より次の関係が導かれる。

$$\frac{a}{c} = \cos\left(\frac{\pi\sigma_\infty}{2\sigma_s}\right) \dots\dots\dots (I.6)$$

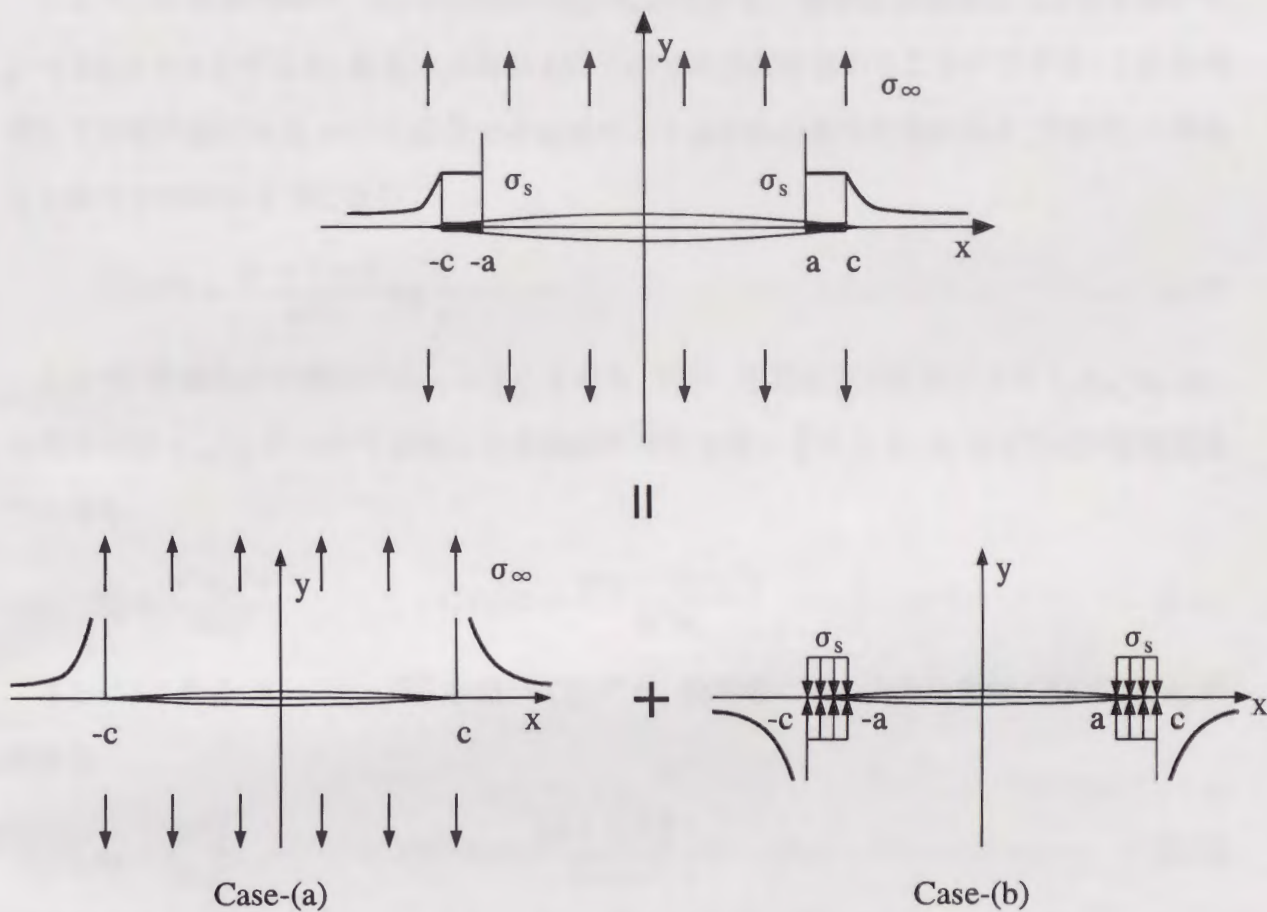


図 I.2 Dugdale model.

この式から、き裂長さ $2a$ 、引張り応力 σ_∞ が与えられたときの塑性域長さ $r_p = c - a$ を決定することができる。ここで、(a),(b) のそれぞれの場合の複素応力関数を求めると、(a) の場合は次式のようになる。

$$\phi_a(z) = \sigma_\infty \left(\frac{z}{2\sqrt{z^2 - c^2}} - \frac{1}{4} \right), \quad \Omega_a(z) = \sigma_\infty \left(\frac{z}{2\sqrt{z^2 - c^2}} + \frac{1}{4} \right) \dots\dots\dots (I.7)$$

また、(b) の場合の複素応力関数は次式のようになる。

$$\phi_b(z) = \Omega_b(z) = \frac{\sigma_s z}{\pi\sqrt{z^2 - c^2}} \int_a^c \frac{i\sqrt{c^2 - s^2}}{s^2 - z^2} ds \dots\dots\dots (I.8)$$

これらの I.7, I.8 式を重ね合わせることにより Dugdale モデルの複素応力関数を得ることができる。この複素応力関数から次式に基づいて変位を計算することができる。

$$2G(u - iv) = \kappa \int \bar{\phi}(\bar{z}) d\bar{z} - \int \bar{\Omega}(z) dz + (z - \bar{z})\phi(z) \dots\dots\dots (I.9)$$

ここで、 G は剛性率で、 u, v は変位の x, y 成分である。複素応力関数と I.9 式を用いて $y \rightarrow \pm 0, x < c$ とすると、き裂の上面および下面での変位を求めることができる。これを利用してき裂先端である $x=a$ の位置でのき裂の上下面の相対変位を求めると、CTOD を得ることができ次式のようになる。

$$\text{CTOD} = \frac{(\kappa + 1)\sigma_s a}{\pi G} \log \frac{c}{a} \dots\dots\dots (\text{I.10})$$

ここで、平面応力の場合には $\kappa = \frac{3-\nu}{1+\nu}$ となる。特に、作用応力が非常に小さく $\sigma_\infty/\sigma_s \ll 1$ の場合には σ_∞/σ_s について展開して最低次の項をとることにより、 r_p と CTOD は次のようになる。

$$r_p = \frac{\pi^2 \sigma_\infty^2 a}{8\sigma_s^2}, \quad \text{CTOD} = \frac{\pi(\kappa + 1)\sigma_\infty^2 a}{8G\sigma_s} \dots\dots\dots (\text{I.11})$$

さらに、これを $K_I = \sigma_\infty \sqrt{\pi a}$ を用いて表すと、最終的に次のような形で CTOD と r_p が求まる。

$$r_p = \frac{\pi K_I^2}{8\sigma_s^2}, \quad \text{CTOD} = \frac{(\kappa + 1)K_I^2}{8G\sigma_s} \dots\dots\dots (\text{I.12})$$

これにより、平面応力状態でのき裂の開口量と塑性域の長さを知ることができる。

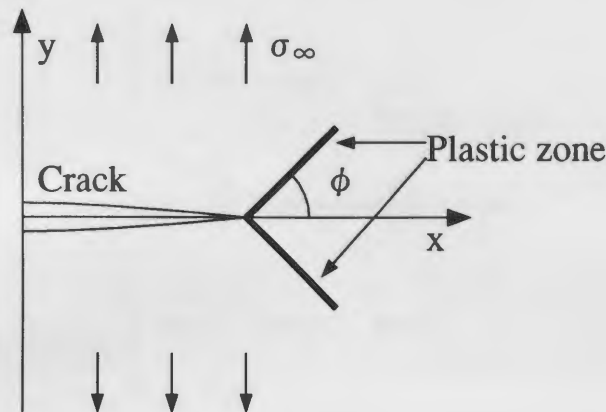


図 I.3 Crack tip yield model of plane strain.

I.3 Rice の解

2次元問題で板の表面におけるき裂の開口量は Dugdale モデルを用いて計算することができる。しかし、板の内部、つまり平面ひずみ問題では Dugdale モデルでは計算することができない。板の内部では塑性域はき裂に平行に直線上に広がっていくのではなく、図 I.3 に示すようにき裂に対して斜めの方向に広がっていくからである。この問題に対して、小規模降伏の条件のもとでき裂先端の開口量を計算したのが Rice である⁽³⁾。

この問題の考え方としては、まず図 I.4 に示すような Mode-II (面内せん断型) の負荷がかかった場合を考える。このように Mode-II の負荷がかかったときは、平面ひずみの場合でも Dugdale モデルと同様にき裂と平行な方向に塑性域が広がっていく。従って、Dugdale モデルと同様の考え方に基いてき裂の開口量 (き裂先端でずれる量) を計算することができる。Mode-II の問題に対する応力拡大係数 K_{II} は次のようになる。

$$K_{II} = \tau_{\infty} \sqrt{\pi a} \dots\dots\dots (I.13)$$

さらに、Dugdale モデルと同様の考え方に基いて CTOD^(II) と $r_p^{(II)}$ を求めると次のようになる。

$$\tau_p^{(II)} = \frac{\pi K_{II}^2}{8\tau_s^2}, \quad CTOD^{(II)} = \frac{(1-\nu^2)K_{II}^2}{E\tau_s} \dots\dots\dots (I.14)$$

ここで、 τ_s は降伏せん断応力である。また、このときき裂先端から図 I.4 の x 軸に沿ってせん断応力を計算すると次式のようになる。

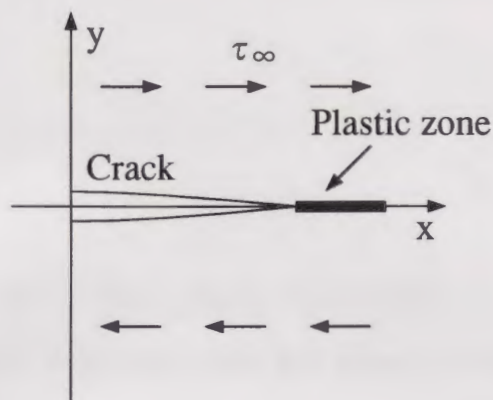


図 I.4 Crack tip yield model of mode-II loading.

$$\tau_{xy} = \frac{K_{II}}{\sqrt{2\pi r}} + \dots \dots \dots (I.15)$$

ここで、 r はき裂先端からの距離である、次に図 I.3 の場合のように、Mode-I の負荷に対して塑性域が x 軸に対して角度 ϕ を成して広がっていく場合を考える。Mode-I の負荷がかかったとき、き裂先端から x 軸と角度 ϕ を成す方向に対してせん断応力の分布を計算すると次式のようなになる。

$$\tau_{\phi r} = \frac{\sin \phi \cos(\frac{\phi}{2}) K_I}{2(\sqrt{2\pi r})} + \dots \dots \dots (I.16)$$

I.15 式と I.16 式を比べることにより、この問題における K_{II} を次式のように定義することができる。

$$K_{II} = \frac{1}{2} \sin \phi \cos(\frac{\phi}{2}) K_I \dots \dots \dots (I.17)$$

I.14 式と I.17 式より、この問題における CTOD と r_p が次のように求まる。

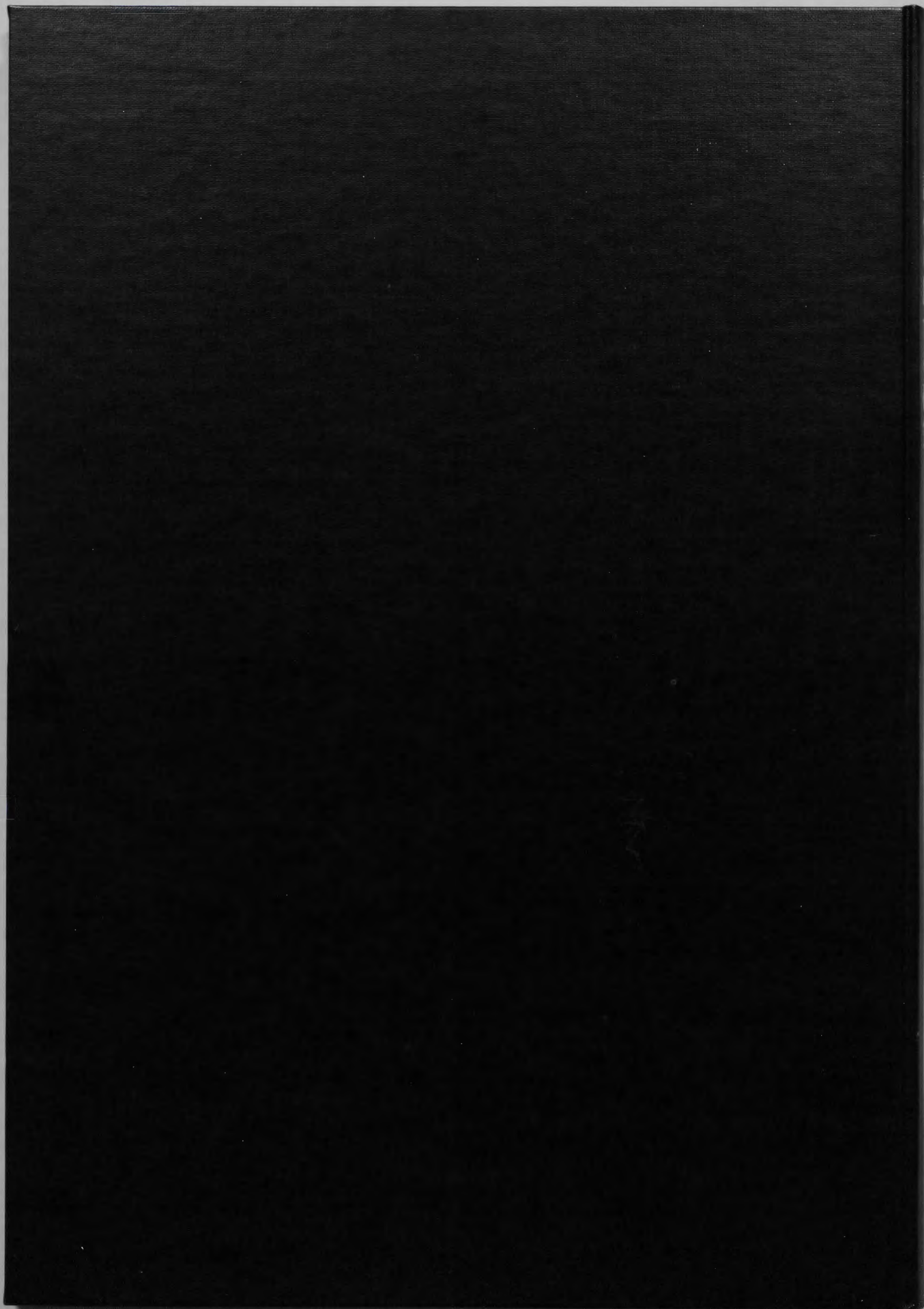
$$r_p \approx r_p^{(II)} = \frac{\pi \sin^2 \phi (1 + \cos \phi) K_I^2}{64 \tau_s^2} \dots \dots \dots (I.18)$$

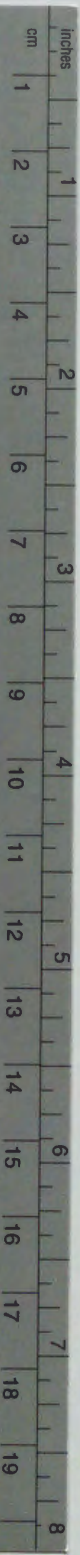
$$CTOD \approx 2CTOD^{(II)} \sin \phi = \frac{(1 - \nu^2) \sin^3 \phi (1 + \cos \phi) K_I^2}{4 E \tau_s} \dots \dots \dots (I.19)$$

この式により、Dugdale モデルと同様の条件のもとでの平面ひずみ問題におけるき裂の開口量を求めることができる。この解は、連続分布転位論 (BCS 理論) ⁽⁴⁾ と同様の解を与え、DFZ⁽⁵⁾ は考慮されていない。

第 I 章の参考文献

- (1) Irwin, G.R., *Handbuch der Physik*, **Bd.6**, (1958), 551.
- (2) Dugdale, D.S., *Journal of the mechanics and physics of solids*, **8**, (1960), 100.
- (3) Rice, J.R., *Journal of the mechanics and physics of solids*, **22**, (1974), 17.
- (4) Bilby, B.A., Cottrell, A.H. and Swinden, K.H., *Proceedings of the Royal Society of London*, **A272**, (1963), 304.
- (5) Ohr, S.M., *Materials Science and Engineering*, **72**, (1985), 1.





Kodak Color Control Patches

© Kodak, 2007 TM: Kodak

Blue	Cyan	Green	Yellow	Red	Magenta	White	3/Color	Black
[Patch]	[Patch]	[Patch]	[Patch]	[Patch]	[Patch]	[Patch]	[Patch]	[Patch]

Kodak Gray Scale



© Kodak, 2007 TM: Kodak

A 1 2 3 4 5 6 **M** 8 9 10 11 12 13 14 15 **B** 17 18 19

