

分子動力学法による極微小表面き裂のメソフラクチャーメカニックス的取扱いとその評価

村田 雅人*・向井 喜彦*

Application of Meso-Fracture Mechanics to Behavior of Micro-Surface Crack via Molecular Dynamic Method

Masato MURATA and Yoshihiko MUKAI

Synopsis : The deformation and stress fields near micro surface crack tip in α -iron were simulated by molecular dynamic method. In a low stress level, the stress fields simulated by molecular dynamics were resembled to the solution of linear fracture mechanics. Dislocations were emerged from crack tip and the stress at the crack tip decreased by a shielding effect of emitted dislocation from crack tip. Then, the crack tip has shown an geometric shape by slip deformation. This variation of shape of crack tip seemed to promote the shielding effect. From these results, the micro crack, under a plastic deformation condition, might not be accompanied with a singlar-like stress field, according to such circumstances.

Key words : molecular dynamics ; iron ; crack tip ; simulation ; shielding effect ; slip ; discontinuous deformation ; dislocation ; linear fracture mechanics.

1. 緒言

実用材料では転位論的なき裂は勿論、微視的なき裂も多数存在しているが、極微小なき裂の力学的挙動は破壊力学に従わないことが言われており、欠陥ならびに強度評価を行う上で重要な支障をきたしている。微小な欠陥が破壊力学に従わない特性を有する原因として、その特異応力場が結晶粒など材料の特性寸法よりも小さく、連続体力学の仮定が成り立たなくなることが考えられる。一方、近年、均質連続体ではなく原子レベルのポテンシャル場を対象とした分子動力学 (Molecular dynamics, MD) による破壊のシミュレーションが盛んに行われ、原子間ポテンシャルやシステムサイズの関係から厳密性には問題があるものの、破壊プロセスをより明確に記述できるメソメカニックスとしての発展が期待されている^{1)~7)}。そこで本解析では、表面微小なき裂が破壊を誘導するき裂としての特性を有するかどうかについてメソメカニックス的立場からMDシミュレーションを行い、特に、き裂の転位放出にもとづく塑性鈍化と応力特異性の減少^{8)~10)}に着目し検討した。

2. 解析方法

2.1 MD基礎方程式

MDは、多数粒子から構成される系において粒子間力から、運動方程式をもとに加速度、速度、原子位置、その他諸量

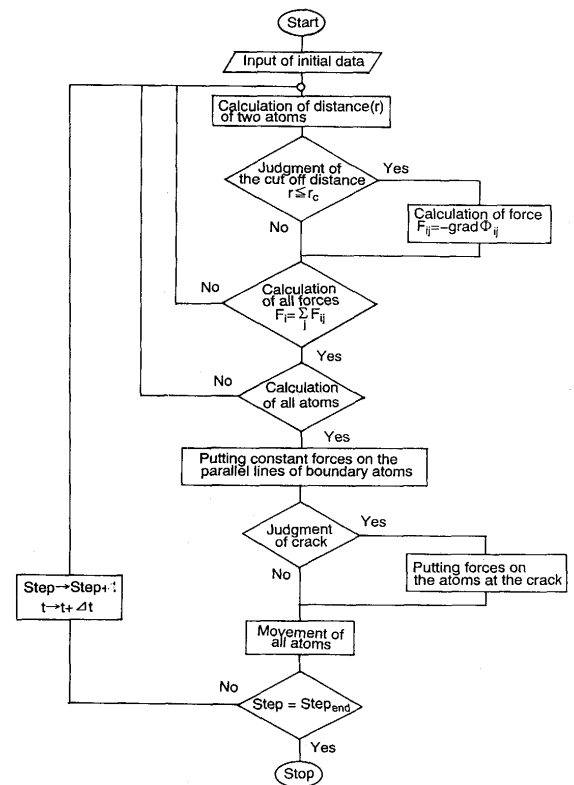


Fig. 1. Flow chart.

を求める方法¹¹⁾で、本研究で用いた計算手順をFig. 1に示す。粒子間相互作用は、粒子 i , j 間に2体中心ポテンシャル力 Φ_{ij} を仮定すると、2体間力は次式で表せる。

$$F_i = -\text{grad}\Phi_{ij} = i \frac{\partial \Phi_{ij}}{\partial x} + j \frac{\partial \Phi_{ij}}{\partial y} + k \frac{\partial \Phi_{ij}}{\partial z} \dots\dots\dots (1)$$

粒子*i*のポテンシャルエネルギーと力は

$$\Phi_i = \sum_j \Phi_{ij} \quad F_i = \sum_j F_{ij} \dots\dots\dots (2)$$

ここで粒子*i*の運動の方程式とその解は次式で表せる。

$$m_i a(t) = m_i \frac{d^2 r_i(t)}{dt^2} = \sum_j F(r_{ij}) \dots\dots\dots (3)$$

$$v(t + \Delta t) = v(t) + \int_t^{t+\Delta t} a(\tau) d\tau \dots\dots\dots (4)$$

$$r(t + \Delta t) = r(t) + \int_t^{t+\Delta t} v(\tau) d\tau \dots\dots\dots (5)$$

数値積分法には、Verlet法を用いた。

$$r_i(t + \Delta t) = r_i(t) + \Delta t \frac{dr_i(t)}{dt} + \frac{1}{2} \frac{F_i(t)}{m_i} (\Delta t)^2 \dots\dots\dots (6)$$

2・2 解析モデル

解析対象はα-Fe (bcc)でFig. 2 (a)にα-Feの格子と格子定数, 図(b)にき裂面, すべり面を示す。モデルは3面を(110), (001), (110)で構成し, [110], [001], [110]方向をx, y, z方向とし, 同図(c)のように, z方向に連続する3つの(110)面を観察面第1, 2, 3層とした。表面き裂として同図に1層目原子(○), 2層目原子(●)のxy面への投影原子配置

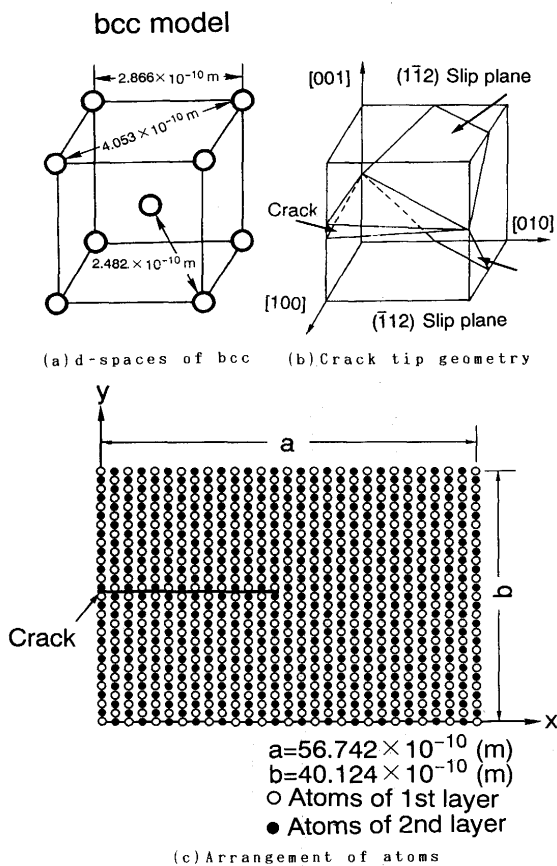


Fig. 2. MD model.

を示す。力としては, き裂面原子に $F = 5.0 \times 10^{-10}$ (N), $F = 7.5 \times 10^{-10}$ (N), $F = 1.0 \times 10^{-9}$ (N)を加えた。

3. 解析結果

3・1 温度効果に対する解の安定性

2体間ポテンシャルとして, 金属結合に対しても良好な近似を与えると同時に演算の容易性から便宜的にレナード・ジョーンズ型ポテンシャルを使用した。

$$\Phi(r) = 4\epsilon_0 \left[\left(\frac{d}{r} \right)^{12} - \left(\frac{d}{r} \right)^6 \right] \dots\dots\dots (7)$$

ここで, $\epsilon_0 = 1.0 \times 10^{-20}$

α-Feの格子定数 $d = 2.274 \times 10^{-10}$ mを再現するために, Fig. 3に示す比較的原子数の少ないbccモデルにおける*d*値と運動エネルギー, ポテンシャルエネルギー, 全エネルギーの関係をFig. 4 (a) (b) (c)に示す。運動エネルギーに関しては系の温度を0 Kに保つため, 100ステップごとに系の運動エネルギー(速度)を0に補正している。同図からいずれの*d*でも補正の繰り返しにより全運動量は安定する。しかし, $d = 2.4 \times 10^{-10}$ mでは, 初期ステップの運動量が大きく原子層の剥離を生じポテンシャルエネルギーは異なる値となる。本解析では格子の安定性が最も高い $d = 2.274 \times 10^{-10}$ mを初期ポテンシャルとした。このとき, レナード・ジョーンズのポテンシャルと2体中心力は次式で示される。

$$\Phi(r) = 4\epsilon_0 \left[\left(\frac{d}{r} \right)^{12} - \left(\frac{d}{r} \right)^6 \right] \dots\dots\dots (8)$$

$$F(r) = \frac{d\Phi(r)}{dr} = -24 \frac{\epsilon_0}{r} \left[2 \left(\frac{d}{r} \right)^{12} - \left(\frac{d}{r} \right)^6 \right] \dots\dots\dots (9)$$

ここで, $\epsilon_0 = 1.0 \times 10^{-20}$ N・m, $d = 2.274 \times 10^{-10}$ m

Fig. 5にポテンシャル, 2体中心力を示す。この式に第1近

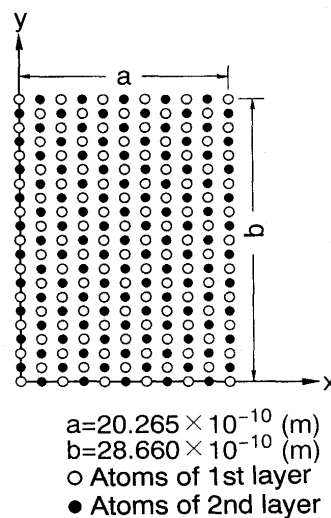


Fig. 3. Arrangement of atoms for fundamental calculation.

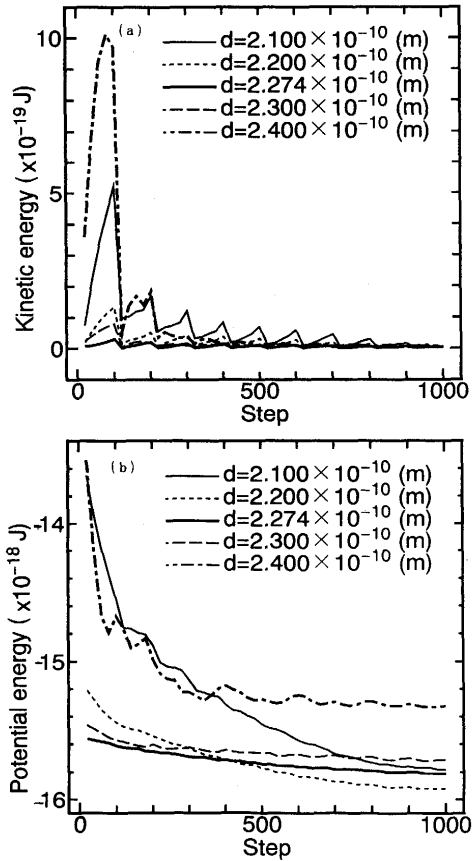


Fig. 4. Convergence of total energy in the system.

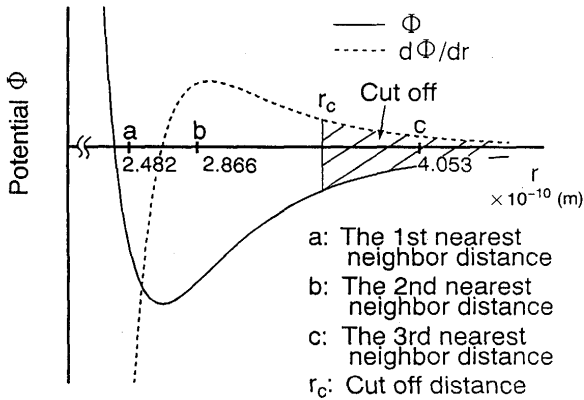
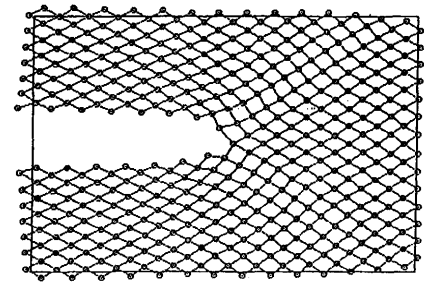


Fig. 5. Interatomic potential and force of bcc model.

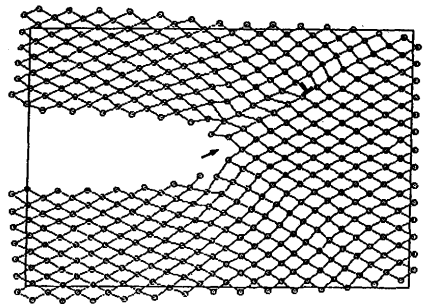
接原子間距離を代入した値 $F(r_{1st})$ と第2近接原子間距離を代入した値 $F(r_{2nd})$ には、 $|F(r_{1st})| \approx |F(r_{2nd})|$ の関係が成り立っている。これより第1近接原子から受ける斥力と第2近接原子から受ける引力がほぼ釣りあっている。また近似的に原子が互いに力を及ぼす範囲を数原子程度とみなし、ポテンシャルのテールを切り捨て、 r_c (Cut off distance) 内の粒子だけが力の計算に寄与する。ここでは、系の温度を 0 K に保つため 100 ステップごとに系の運動エネルギー (速度) を 0 に補正した。

3・2 極微小き裂先端部のメソメカニクス

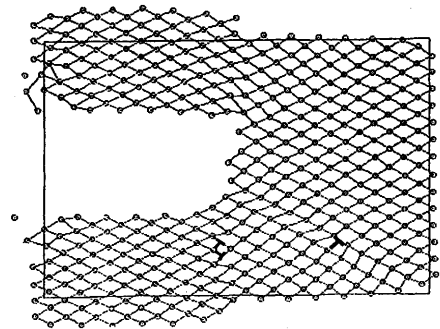
極微小き裂内部に圧縮力が働く場合のメソメカニクスの解析を行った。Fig. 6 (a) (b) (c) は 1000 ステップにおける観察面の第 2 層の格子図である。 $F = 5.0 \times 10^{-10}$ (N) では、き裂の開口と共にき裂先端部から結晶のすべり方向 $[\bar{1}11]$, $[1\bar{1}\bar{1}]$ せん断変形帯を生じ、 $F = 7.5 \times 10^{-10}$ (N) でき裂先端部から刃状転位が放出される。これは従来の仮想的き裂転位の具体的様相を示したものであるが、同時に、き裂先端部で局所的破壊が生じている。さらに、 $F = 1.0 \times 10^{-9}$ (N) では、き裂前方のすべり面に加え、き裂側面にも転位が放出される。但し、この場合は部分転位に分かれた状態で移動し、き裂先端部はすべり変形ならびに原子結合の局所的破壊により著しく鈍化する。但し、鈍化形状は楕円型ではなく幾何学的形状を示す。さて、Fig. 7 (a) (b) (c) はき裂前方の 2 体間力を応力に換算し、破壊力学的観点から両対数軸に整理したものである。200, 400 ステップでは過渡的状态にあるが、800~1000 ステップではほぼ定常状態に達する。



(a) $F = 5.0 \times 10^{-10}$ (N)



(b) $F = 7.5 \times 10^{-10}$ (N)



(c) $F = 1.0 \times 10^{-9}$ (N)

Fig. 6. Deformation of lattice in 2nd plane (1000 step, 5.0 psec).

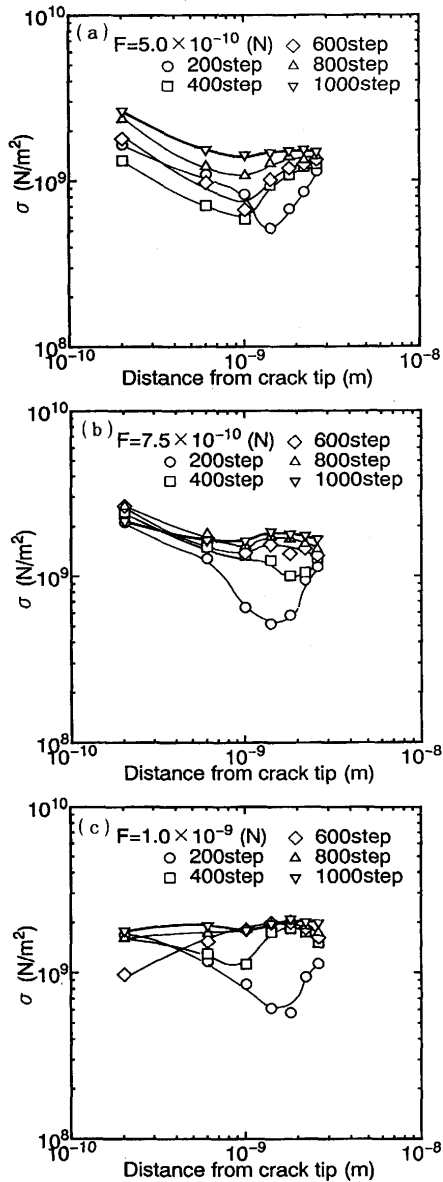


Fig. 7. Stress distribution near crack tip.

但し、き裂先端部から十分遠方で応力が上昇する場合があります。これは境界面における表面張力ならびに最近接原子以外の原子の張力による外部圧力によるものであるが、ステップ数が増加するとともにその効果は減少する。 $F=5.0 \times 10^{-10}$ (N)では、き裂先端部の応力はステップと共に上昇し、1000ステップでほぼ一定値を示すようになる。このとき、応力分布は線形破壊力学が示す特異性に近づく。一方、 $F=7.5 \times 10^{-10}$ (N)で転位放出が開始すると、荷重が増大しているにも拘らず、 $F=5.0 \times 10^{-10}$ (N)の場合とほぼ同等の応力レベルにとどまる。さらに、 $F=1.0 \times 10^{-9}$ (N)では、より激しい転位の打ち出しとすべりならびにき裂鈍化の影響が重なり、き裂先端部の特異応力場に対する応力の遮蔽効果が生じる。また、600ステップにおいてき裂先端部の応力は逆に低下している。これはき裂先端部からの放出転位がまだき裂先端近傍に存在しているためである。

4. 考察

4.1 特異応力場に及ぼす遠方原子間力の影響

微小き裂先端部の数原子間にわたって応力は上昇するが、端部境界でも僅かながら応力が増大した。一方、無き裂材では無応力状態においても材料内部で圧縮応力が働く状態で平衡した。これは次のように考察できる。

引張応力 σ を受ける格子間隔(最近接原子間距離)が a_0 の立方格子をFig. 8 (a)に示す。原子Cは他の原子と力を及ぼしあうが、その原子を最近接原子のみに限定し2体問題を考える。ここで、破面でのC-C'の1対の原子を考えると、その原子間ポテンシャル Φ ならびに原子間力はFig. 8 (b)の曲線で表せる。原子間力は次の通りである。

$$F = \frac{d\Phi}{dr} \dots\dots\dots (10)$$

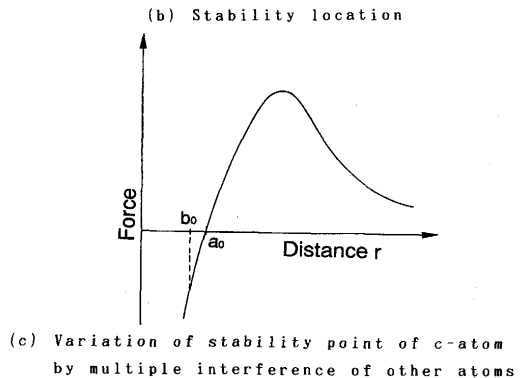
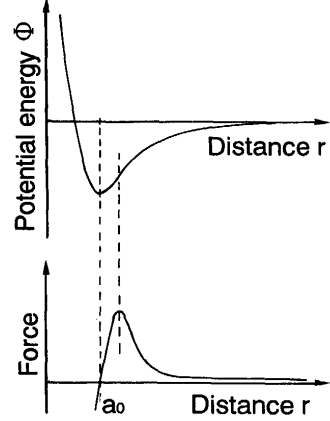
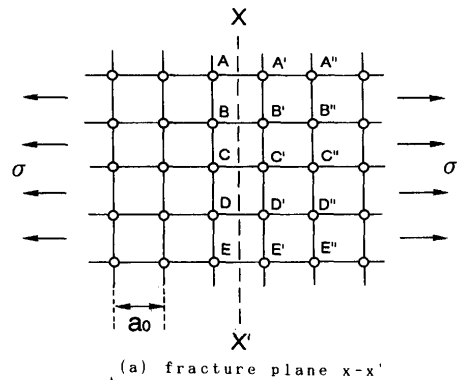


Fig. 8. Stability location of c-atom considering multiple interference of atoms.

この場合、原子間力は格子間隔 a_0 で 0 となり距離-エネルギー曲線の変曲点で最大値となる。しかし、原子Cと最近接原子の相互干渉に加え、2次、3次近接原子等の近傍原子との干渉エネルギーをも考慮すると原子Cに関して最近接原子以外の原子全てに引力が働く。このため、最近接原子は平衡位置よりも原子Cに近い位置に移動し、斥力の働く位置 b_0 ($b_0 < a_0$) で平衡状態になる。この力-変位曲線が同図(c)で示されるように、多体問題では隣接原子間には圧縮応力が働くことから圧縮内部応力が存在する。本研究では、第2近接原子まで考えているのでこの影響が表れ、外部応力によるき裂先端部への引張り応力集中はき裂先端部の原子が他の原子との相互作用による圧縮力よりも大きくならなければ生じないことを意味している。すなわち、外力が僅かであればき裂先端部に引張り応力が生じないわけである。特に、これは破壊靱性の低い材料に対しては必ずしも無視できない値となることが考えられる。

4・2 弾性き裂における応力状態

均質連続体解析におけるき裂先端部の応力は線形弾性体ならびに非線形加工硬化体の場合ともに発散し¹²⁾、僅かな外力でもき裂先端部で応力は無限大となる。従って、グリフィスクラックが示すき裂伝播に関する熱力学的限界値としての K_{Ic} の存在はき裂先端部を特異点とする連続体力学からは説明できない。さて、 $F=5.0 \times 10^{-10}$ (N) の場合、き裂先端部から転位の放出は認められず弾性き裂の状態であるが、き裂先端部の応力は有限で特異点とはならないが、応力分布はき裂先端から数原子を除いて線形破壊力学が示すのと同様の分布となる。

4・3 塑性き裂におけるき裂先端形状と応力状態

$F=7.5 \times 10^{-10}$ (N) で転位の放出が開始すると、転位によるき裂先端部に誘起される圧縮の特異応力場のため、Fig. 7 のように特異応力場が遮蔽され、き裂先端部の応力拡大係数 k はマクロ的な応力拡大係数 K から転位による遮蔽強度係数 $k_D(j)$ を引くことにより与えられる⁷⁾。

$$k_I = K_I - k_{ID} \dots\dots\dots (11)$$

$$k_{ID} = \frac{Gb_e}{2\sqrt{2}\pi r(1-\nu)} \left(3\sin\alpha \cos\frac{\alpha}{2} \right) \dots\dots\dots (12)$$

$$b_e = b_x \cos\alpha + b_y \sin\alpha \dots\dots\dots (13)$$

G : せん断弾性率, b_e : 刃状転位のバーガースベクトル
 その他のパラメータはFig. 9 に示す通りである。MDでも同様の効果が表れるが、放出転位はき裂先端部より離れたところで集積した。き裂先端部に無転位領域が存在する場合の遮蔽効果⁹⁾については原子数が少なく、境界条件の問題から再現はできなかった。また、 $F=1.0 \times 10^{-9}$ (N) の負荷において、き裂先端の開形状は転位放出に伴うすべり変形のために、楕円型ではなく僅かにき裂後方に突き出たような形状を示し¹⁰⁾¹¹⁾¹³⁾、き裂先端部の応力は低下した、これは、き裂先端後方突出部では引張り応力が働かないため、す

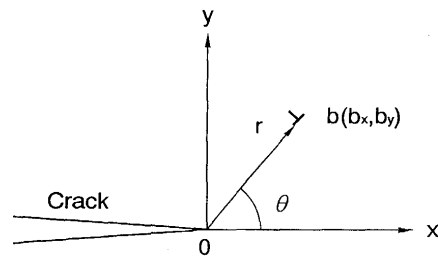
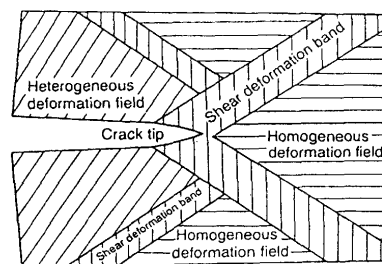


Fig. 9. Coordinate at crack tip and location of dislocation.

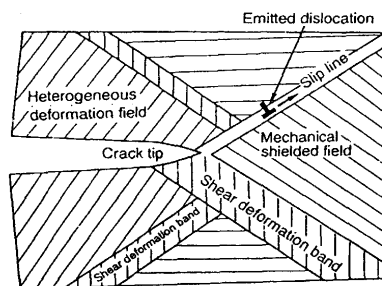
べり変形が介入する場合、き裂先端部の特異応力場は転位による応力遮蔽効果に加え、き裂先端部の形状によっても緩和される。

4・4 き裂先端部の変形の様相

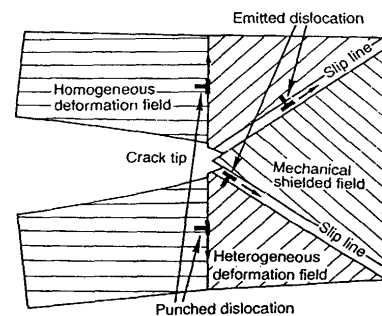
各荷重下1000ステップでのき裂先端部の原子配向をFig.10 に示す。弾性き裂(a)ではき裂先端部からせん断変形帯が均一に発生している。一方、き裂後方におけるき裂開口変位



(a) Schematic illustration (F = 5.0 x 10⁻¹⁰ N)



(b) Schematic illustration (F = 7.5 x 10⁻¹⁰ N)



(c) Schematic illustration (F = 1.0 x 10⁻⁹ N)

Fig.10. Illustration of deformation near crack tip.

は、き裂先端部のせん断変形と原子配向が僅か異なるサブグレイン化により受け持たれる。塑性き裂(b)では、き裂先端部から刃状転位の放出によりせん断変形帯はすべり線に変化し、き裂側面にも部分転位放出が見られる。サブグレイン化によりき裂後方に伸張したせん断変形帯は消滅しひずみが解放される。このように、き裂先端部の変形はすべりやサブグレインの形成など不連続な変形により受け持たれ、連続体力学で記述されるものとは異なる。また、応力の発散は抑制され、特異点は消滅する。

5. 結言

極微小き裂を有する α -Feのき裂の挙動のMDによるメソメカニックス的検討を行った解析を次に要約する。

(1) 多体問題では最近接原子に斥力が働く位置で平衡状態になるため隣接原子間に圧縮力が働き、物体は無負荷状態で常に内部圧力を有する。すなわち、外力によりき裂先端部で応力集中が生じるにはしきい値が存在する。

(2) 弾性き裂においてき裂先端部で応力は有限値となるが、少し離れた領域で線形破壊力学に従う応力分布を示す。

(3) 完全結晶における塑性変形はき裂先端部から転位が放出する事で達成される。

(4) 放出転位により特異応力場の遮蔽効果が生じる。

(5) 塑性き裂ではき裂先端部のすべり変形のために、き裂開口は幾何学的形態を示し、特異応力場は消滅する。

(6) き裂先端鈍化はすべり変形だけで受け持てず、き裂

先端部で原子間結合が破壊する場合がある。

(7) 降伏状態で微小塑性き裂は応力遮蔽効果のため、特異応力場を有さずき裂としての特性を示さない可能性がある。

以上の、解析を進めるに当たり終始積極的な御協力を頂きました阪大工学部学生(現在、東京製鉄(株)勤務)古橋学君に謝意を表します。

文 献

- 1) J.D.Dienes and A.Paskin : J.Phys. Chem. Solids, **48** (1987), p.1015
- 2) B.DeCelis, A.S.Argon and S.Yip : J.Appl.Phys., **54** (1983), p.4864
- 3) W.G.Hoover : Simulation of Brittle Fracture via Molecular Dynamics, Jacucci(ed.), Computer Simulation in Physical Metallurgy, (1986), p.145
- 4) 澤村明賢, 山本良一 : 日本金属学会会報, **31** (1992), p.19
- 5) 北川 浩, 中谷彰宏 : 日本機械学会論文集A, **59** (1993), p.256
- 6) 須賀唯知, 船橋 章, 高橋 浩 : 日本機械学会論文集A, **57** (1991), p.206
- 7) 北川 浩, 中谷彰宏 : 日本機械学会第5回計算力学講演会講演論文集, (1992), p.243
- 8) I.H.Lin and R.Thomson : Acta Meta., **34** (1986), p.187
- 9) S.M.Ohr and J.Narayan : Philosophical Magazine A, **41** (1980), p.81
- 10) 村田雅人, 向井喜彦, 茅野林造 : 日本機械学会第5回計算力学講演会講演論文集, (1992), p.49
- 11) 田中 實, 山本良一, 計算物理学と計算化学, (1988), p.6 [海文堂]
- 12) J.W.Hutchinson : Journal of Mechanics and Physics of Solids, **16** (1968), p.13
- 13) 渡辺勝彦, 佐藤 裕, 吉川暢宏 : 日本機械学会論文集 A, **54** (1988), p.1887