

局所格子不安定性によるき裂進展挙動解析： bcc-Fe における不安定領域の臨界寸法

学 西川涼一郎 指導教員 正 内藤圭史（岐阜大） 正 屋代如月（岐阜大）

1 緒言

我々のグループでは、局所変形抵抗を表す物理量として原子弾性剛性係数 (Atomic Elastic Stiffness, 以下 AES と称す) に着目し、その正値性によって局所変形の開始を統一的に議論することを検討してきた。(1)–(3) 前報では、bcc-Fe 中のモード I 貫通き裂の解析を行い、ぜい性的にき裂が進展した [001](110) および $[\bar{1}\bar{1}2](111)$ き裂では、セル中央にき裂を配置した単一モデル、セル四隅にも配置したダブルき裂モデルともに、き裂進展時の負の AES 原子数がほぼ一定であったことを報告している。(3) 本研究では、力学条件が異なってもこれらのき裂では進展開始時の負の AES 領域の寸法がほぼ同じであるという仮説を検証するために、周期セルのサイズを変更した検討結果を報告する。

2 解析対象および解析条件

原子間の相互作用の評価には FS ポテンシャル(4) を用いた。Fig.1 左に示すように、平板状の周期セル中央に貫通き裂を配置した系を解析対象とする。結晶方位は [001](110), $[\bar{1}\bar{1}2](111)$ の 2 つとした。系の大きさは、[001](110) き裂では $50\sqrt{2}a \times 50\sqrt{2}a \times 6a$, $[\bar{1}\bar{1}2](111)$ き裂では $70\sqrt{2}a \times 50\sqrt{3}a \times 3\sqrt{6}a$ (a は bcc 鉄の格子長さ 0.287 nm) を基準として、 x 方向に 2 倍、 y 方向に 2 倍、 x, y 方向にそれぞれ 2 倍した計 4 通りの解析を行った。き裂幅 $2c$ は $0.3L_x$ (x 方向セル長さ) としている。き裂形状の詳細は前報(3) を参照されたい。温度は極低温 (0.1K) とし、速度スケール法により制御した。10 ps の緩和計算を行った後、き裂垂直方向に引張ひずみを毎ステップ $\Delta\varepsilon_{yy} = 1.0 \times 10^{-7}$ 増加させて引張シミュレーションを行った。数値積分の時間ステップは 1 fs であるのでひずみ速度に換算すると $\dot{\varepsilon}_{yy} = 1.0 \times 10^9/s$ である。 y, z 方向の応力制御は行っていない。Table 1 にシミュレーションセルの条件をまとめて示す。

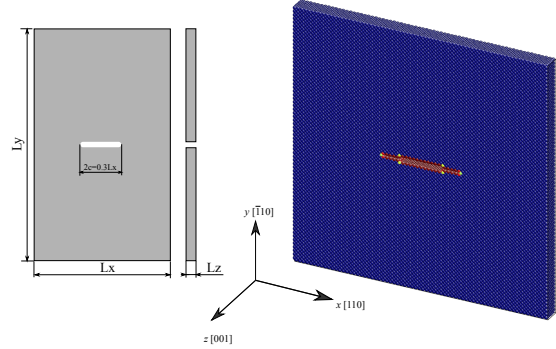


Fig. 1 Simulation model (a)

Table 1 Simulation conditions.

	model	ix	iy	iz	atoms
[001](110)	1×1	70	70	6	117,066
	2×1	140	70	6	234,126
	1×2	70	140	6	234,666
	2×2	140	140	6	469,326
$[\bar{1}\bar{1}2](111)$	1×1	70	100	3	125,385
	2×1	140	100	3	250,767
	1×2	70	200	3	251,385
	2×2	140	200	3	502,767

3 AES による局所格子不安定性解析

EAM ポテンシャルにおける定式化(1)に基づいて原子応力 σ_{ij}^α , 原子弾性係数 C_{ijkl}^α を原子配置データから評価し、以下の式に基づいて Voigt 対称性を持つ原子弾性剛性係数 B_{ijkl}^α を評価する。ここで δ はクロネッカーのデルタである。

$$B_{ijkl}^\alpha = C_{ijkl}^\alpha + (\sigma_{il}^\alpha \delta_{jk} + \sigma_{jl}^\alpha \delta_{ik} + \sigma_{ik}^\alpha \delta_{jl} + \sigma_{jk}^\alpha \delta_{il} - \sigma_{ij}^\alpha \delta_{kl} - \sigma_{kl}^\alpha \delta_{ij})/2 \quad (1)$$

式(1)は4階のテンソルであるが、Voigt 対称性を有するため弾性係数と同様に独立な成分は21個となり、 xx, yy, zz, yz, zx, xy を 1~6 とし B_{ij}^α のように 6×6 のマトリックスとして表すことができる (Voigt 表記)。 B_{ij}^α の行列式や固有値 $B_{ij}^\alpha \varepsilon_j = \eta^\alpha \varepsilon_j$ の正値性によって安定・不安定を議論する。

4 解析結果および考察

Fig.2 および 3 に、応力-ひずみ曲線とき裂長さの変化をまとめて示す。上が応力-ひずみ、下が対応するひずみにお

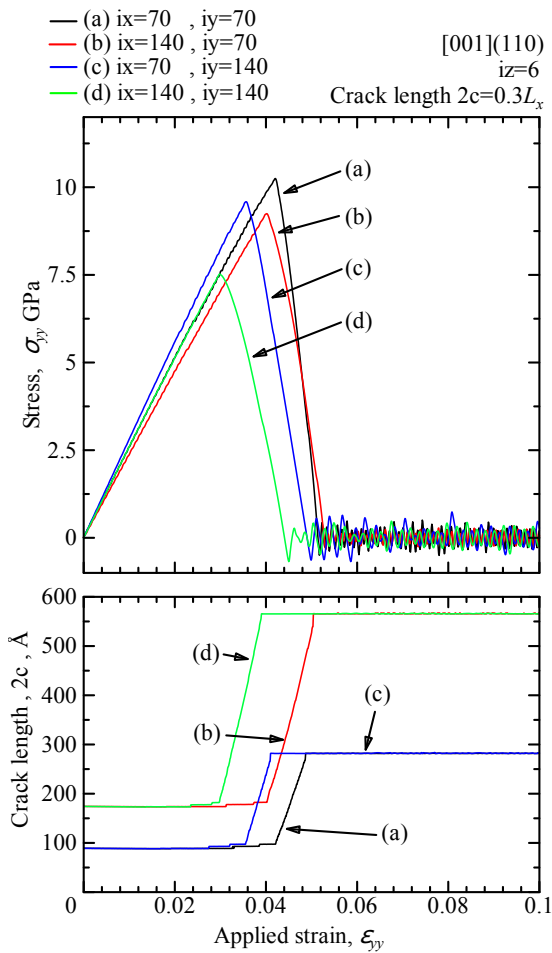


Fig. 2 Stress-strain curves and change in the crack length ([001](110) crack)

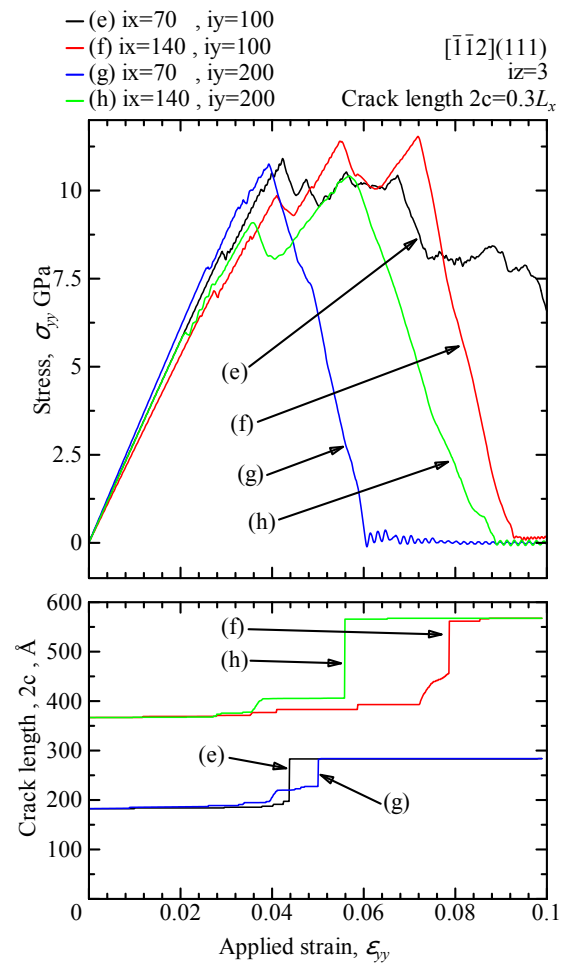


Fig. 3 Stress-strain curves and change in the crack length ($[\bar{1}\bar{1}2](111)$ crack)

けるき裂長さの変化である。[001](110) き裂では単一の応力ピークを示しており、き裂長さ変化からも極めてぜい性的に破断したことが示される。一方、 $[\bar{1}\bar{1}2](111)$ き裂は複雑な進展挙動を示し、応力-ひずみ曲線も系により異なる。Fig.4 は、[001](110) き裂が進展するひずみ近傍について、 $\det \det B_{ij}^\alpha$ が負となった原子数の変化を示したものである。図中に示した × 印は、Fig.2 の下なき裂長さ変化からき裂進展開始点を示したものである。き裂の絶対長さはセルサイズによって異なるが、[001](110) き裂ではいずれも着色した 540~640 の範囲に収まっている。また講演会当日は、 $[\bar{1}\bar{1}2](111)$ き裂の結果ならびに行列 B_{ij}^α の固有値に関する検討結果を報告予定である。

文 献

- (1) 屋代・富田, 機論, 67A(656), pp.678 - 684, (2001).
- (2) K. Yashiro and T. Yamane, Proc. of ICCM2014 (2014), ISSN 2374-3948 (online), Sciencetech Publisher.
- (3) 屋代・片山・西川・吉原, 機論, 81(829), 15-00271(2015)
- (4) M. W. Finnis and J. E. Sinclair, Phil. Mag. A, 50(1), pp.45-55(1984).

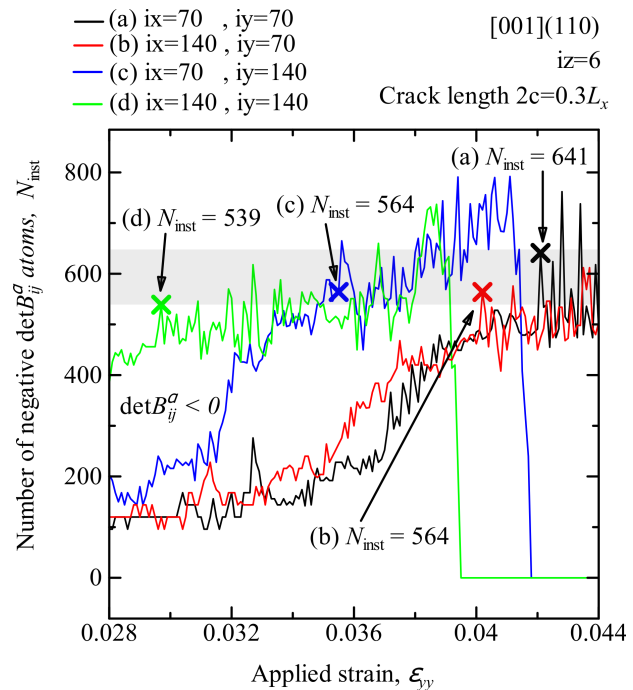


Fig. 4 Magnified figure of change in the crack length and number of atoms with $\det B_{ij}^\alpha < 0$ (110 crack)