

原子弾性剛性係数に基づくき裂先端の局所格子不安定性解析：Fe, Si, Ni の比較

Local lattice instability analysis on crack tip based on atomic elastic stiffness coefficient:
characteristics of Fe, Si and Ni

正 屋代 如月 (岐阜大) 学 西川 涼一郎 学 片山 寛 (神戸大院)

Kisaragi YASHIRO, Gifu University, 1-1, Yanagito, Gifu 501-1193, Japan

Ryoichiro NISHIKAWA, Gifu University, 1-1, Yanagito, Gifu 501-1193, Japan

Hiroshi KATAYAMA, Kobe University, 1-1, Rokkodai, Nada, Kobe 657-8501, Japan

1 はじめに

原子シミュレーションにより得られる微視的挙動は、ターゲットとする材料に「近い」が「同一ではない」ため、観察したメカニズムについて局所エネルギーや局所応力などの閾値を追求する定量的な議論につながりにくい。実際の材料の値ではない、ということに加えて、表面や粒界の原子構造に依存した変化など、連続体理論をよりどころにできない領域の現象は、離散的な周囲の境界条件が複雑でケースバイケースの結果となりやすいためである。そこで、変形・破壊の際には必ず局所格子の組み換えを伴うことに着目して、「局所格子不安定性」という指標で変形・破壊メカニズムを統一的に議論することを検討してきた^{(1),(2)}。嶋田らのグループ⁽³⁾は、すべての原子自由度の下で局所不安定の発生とその変形モードを議論する厳密な方法（原子数 N の系なら $3N \times 3N$ オーダーのマトリックスの固有値解析）で、シリコンのき裂進展時の局所不安定領域を明らかにしているが、著者らのグループでは、各原子位置における変形抵抗である原子弾性剛性係数 $B_{ij}^\alpha (= \Delta\sigma_i^\alpha / \Delta\varepsilon_j)$ の正值性・固有値解析（ 6×6 マトリックスの固有値解析を N 回）による検討を続けており、Fe, Si のき裂先端に適用した結果も報告している^{(4),(5)}。本原稿では、Fe, Si のき裂解析への適用結果を概説してそれぞれの違いを述べる。Ni の結果については紙面の都合から講演会当日に報告する。

2 原子弾性剛性係数による局所格子不安定性解析

結晶の熱力学では、ある状態 $\{x\}$ における応力、弾性係数はそれぞれひずみ摂動に対する系の単位体積当たりのエネルギーの一次、二次微係数と定義される⁽⁶⁾。無負荷であれば、エネルギーの一次微係数である応力は 0 となるので、二次微係数の弾性係数が正定であることが結晶が力学的に存在する条件として導かれる。一方、外力下ではエネルギーの一次微係数部分は 0 にならず、結晶の安定・不安定判定を弾性係数の正值性に帰着することができないため、非線形弾性関係における応力-ひずみ勾配を表す次の弾性剛性係数による評価が提案されている⁽⁷⁾。

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

ここで δ はクロネッカーのデルタであり、式 (1) は 4 階のテンソルである。本来の弾性剛性係数は Voigt 対称性（独立な成分が 21 個⁽⁶⁾）を有しないが、対称部分により評価することが提案されているため式 (1) では対称性を有した形で記している。 xx, yy, zz, yz, zx, xy を 1 ~ 6 と割り当てた指標を用いる Voigt 表記では、 B_{ij} のように 6×6 のマトリックスとして表すことができる。原子シミュレーションでは、系のエネルギー E_{tot} は個々の原子のエネルギー E^α の和となるので、原子応力 $\sigma_i^\alpha = (\partial E^\alpha / \partial \varepsilon_j) / \Omega$ 、原子弾性係数 $C_{ij}^\alpha = (\partial^2 E^\alpha / \partial \varepsilon_i \partial \varepsilon_j) / \Omega$ を求め（ Ω は原子体積）、式 (1) にしたがって原子弾性剛性係数 B_{ij}^α を評価しその固有値の正負によって安定・不安定を議論する。

3 FS ポテンシャルによる bcc Fe での検討結果

Fe, Si, Ni のいずれにおいても、図 1 のような薄板状の周期セルに引張を与え、モード I き裂先端における B_{ij}^α の変化を調べている。bcc Fe の場合は、図示の 3 つの結晶方位（[き裂貫通方向][き裂面]による表記）に加え、き裂長さを変えた検討、1/4 き裂を四隅に配置しセル中のき裂を 2 つとした解析、セルの寸法・縦横比を変えてき裂密度やき裂周期を変えた検討なども行っている。[001](010) き裂では、き裂先端から転位が射出し鈍化するため、これまで報告してきたように、転位部分の原子は B_{ij}^α の行列式 $\det B_{ij}^\alpha$ が負になっているということを追認するだけの結果となった。一方、ぜい性的に進展した [001](110) および [112](111) き裂では、き裂の寸法や配置等に関わらず、き裂が進展する際は $\det B_{ij}^\alpha$ が負の原子数がほぼ一定

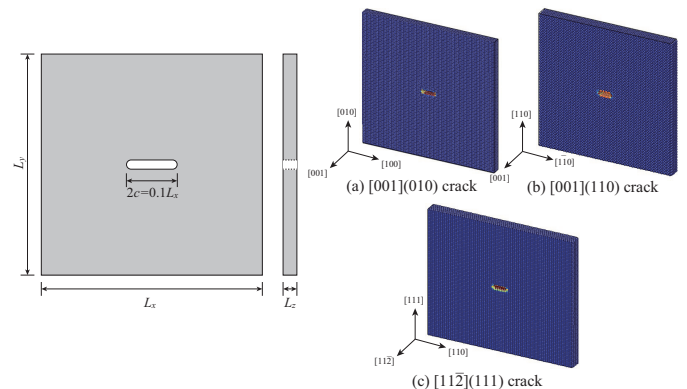


Fig. 1 Thin periodic cell with center crack

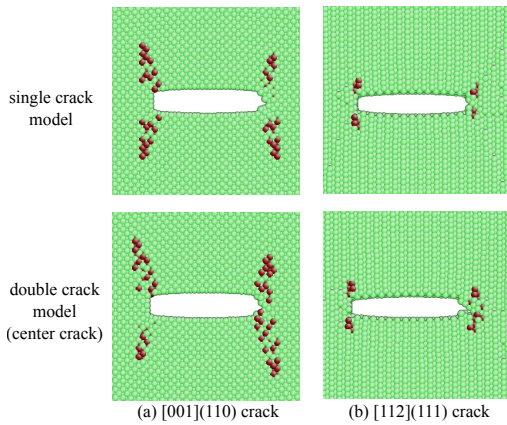


Fig. 2 Distribution of negative $\det B_{ij}^\alpha$ atoms just before crack propagation.

であることを報告している．図 2 に，進展直前のき裂近傍の原子配置を $\det B_{ij}^\alpha$ の正負で色分けして示したものを例として示す（濃い原子が負の原子）．上段がセル内き裂 1 つの系，下段は四隅にもき裂を配置した系の中央のき裂を拡大して示したもので，いずれも進展限界時には負の $\det B_{ij}^\alpha$ の原子は同じような分布形態を示している．すなわち，全体の力学状態が異なるにも関わらず，き裂進展は局所力学状態ではほぼ決定されている可能性がある．なお，bcc Fe の解析は熱による効果を切り分けるため極低温 (0.1K) での検討結果である．

4 Tersoff ポテンシャルによる Si での検討結果

ダイヤモンド構造の Si 単結晶のき裂についても，前述の 3 つの結晶方位で検討を行っている．温度は 1K, 300K, 600K の 3 つで行ったがいずれのき裂もぜい性的に進展し，むしろ 300K, 600K の方が早くき裂進展を生じたので（ひずみ制御による引張のため，1K の場合は進展をスロー再生するような条件になる），300K での結果で議論したが 1K, 600K の場合も基本的には同じである．bcc Fe と異なる点として，[112](111) き裂では無負荷平衡状態でも負の $\det B_{ij}^\alpha$ 原子が観察されたことが挙げられるが，これは (111) 表面の切断された結合に起因するものであり重要ではない．Si では $\det B_{ij}^\alpha$ の正負だけでなく B_{ij}^α の固有値解析を行い，き裂進展の前には第一固有値が大きな負の値を持つ原子が出現することを見出している．図 3 はき裂進展直前の，き裂長さ（右軸）と B_{ij}^α の第一，第二固有値の最小値の変化（左軸，全原子の中から計算しているので特定の原子の固有値をモニターしたものではない）の例である．縦の破線で示したひずみからき裂長さが変化（進展）しているが，その直前に第一固有値が急激に大きな負値を示しており，これがトリガーになったものと結論づけられる．き裂進展の少し前にパルス的に大きな負値が出現・消滅しているのは，既にき裂進展の臨界状態に近く，熱振動による確率的な要因も含むことを示唆している．前駆的な挙動を示した原子の，対応

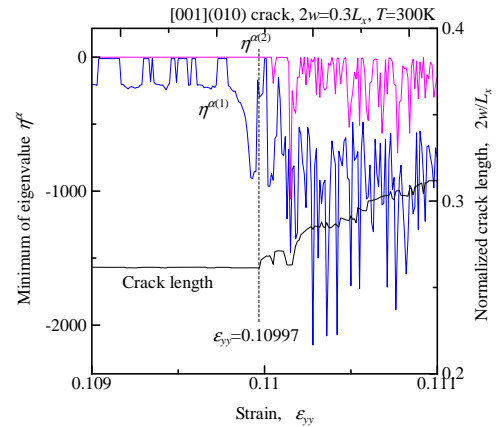


Fig. 3 Change in crack length and min.-eigen value

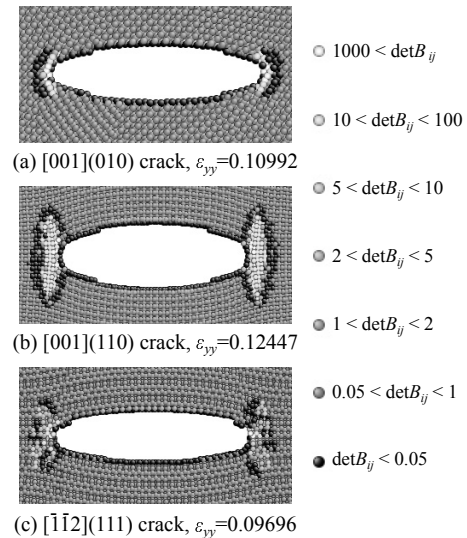


Fig. 4 Distribution of high positive $\det B_{ij}^\alpha$

する固有ベクトルを調べた結果 [001](010) き裂は $\Delta\epsilon_2$ 方向 (yy 成分，モード I)，[001](110) き裂は $\Delta\epsilon_1$ 方向 (xx 成分，モード II)，[112](111) き裂は $\Delta\epsilon_3$ 方向 (zx 成分，モード III) の不安定モードが支配的であることが示されている．他，Si の解析で特筆すべきこととして，引張後期に著しく大きな正の $\det B_{ij}^\alpha$ がき裂先端に観察されたことが挙げられる．図 4 はき裂進展直前のき裂近傍の原子配置を，完全結晶の値で無次元化した $\det B_{ij}^\alpha$ の値で色分けして示したものである．き裂先端の応力集中領域に，極めて大きな正値を示す原子が存在している．Fe や Ni など，金属ではこのような現象は観察されていない．このき裂先端の「硬化挙動」が，先端からの転位射出を阻害し Si のぜい性的な特性に寄与している可能性がある．

文 献

- (1) 屋代・富田，機論，67A(656)，pp.678 - 684 (2001)．
- (2) 屋代・藤原，材料，60(11)，pp.968-975 (2011)．
- (3) T. Shimada, et al., Scientific Reports, doi: <http://dx.doi.org/10.1038/srep08596> (2015)．
- (4) 屋代他，機論，81(829)，15-00271 (2015)
- (5) K. Yashiro, Comp. Mater. Sci., 112, pp.120-127 (2016)
- (6) D. C. Wallace, Thermodynamics of Crystals (1972)．
- (7) J. Wang, et al., Phys. Rev. Lett. 71, 4182-4185 (1993)．