

原子弾性剛性係数による局所格子不安定性解析： マグネシウム中のモードIき裂への適用

○学 吉原 大志(岐阜大) 指導教員 正 内藤 圭史(岐阜大) 正 屋代 如月(岐阜大)

1. 緒言

マグネシウムは実用金属の中で軽量かつ高い比強度を有しており、地球上に豊富に存在しているが、反応性が高く塑性加工が困難な点が実用化の妨げとなっていた。だが、資源の枯渇や輸送機器のさらなる軽量化への要求から近年マグネシウムが注目を集めている。原子シミュレーションの検討もなされており、単結晶中のボイド成長⁽¹⁾、変形双晶⁽²⁾、くり返し変形下のき裂進展挙動⁽³⁾などが報告されている。一方、我々は局所変形抵抗を表す物理量である原子弾性剛性係数 (Atomic Elastic Stiffness, AES) の正值性に基いて局所変形の開始を統一的に議論する研究を展開してきた。本研究では AES による局所不安定性解析を hcp マグネシウムのモード I 型き裂先端に適用した結果を報告する。

2. シミュレーション方法

原子間相互作用の評価には Liu⁽⁴⁾の EAM ポテンシャルを用いた。平板状の周期セル中央に貫通き裂を配置した系を対象とする。系の大きさは $132a \times 82\sqrt{3}a \times 4.869a$ (a はマグネシウムの格子長さ 3.206 nm, $c/a = 1.623$), 原子数は 15 万である。き裂幅は $0.3lx$ (lx は方向セル長さ), き裂先端の曲率半径 ρ はグリフィスキ裂の条件を満たすようにしている。温度 1K で垂直応力が 0 となるように 2000fs 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 1.0×10^{-6} 増加させて引張シミュレーションを行った。き裂貫通方向、進展方向のセル寸法は固定している。原子弾性係数 B^{α}_{ijkl} は原子応力 σ^{α}_{ij} と原子弾性係数 C^{α}_{ijkl} から次式で評価する⁽⁵⁾。

$$B^{\alpha}_{ijkl} = C^{\alpha}_{ijkl} + (\sigma^{\alpha}_{il}\delta_{jk} + \sigma^{\alpha}_{jl}\delta_{ik} + \sigma^{\alpha}_{ik}\delta_{jl} + \sigma^{\alpha}_{jk}\delta_{il} - \sigma^{\alpha}_{ij}\delta_{kl} - \sigma^{\alpha}_{kl}\delta_{ij})/2 \quad (1)$$

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。式(1)の B^{α}_{ijkl} は Voigt 対称性を有するため、弾性係数と同様独立な成分が 21 個となる。したがって xx, yy, zz, yz, zx, xy を 1~6 とし B^{α}_{ij} のように 6×6 のマトリクスとして表すことができる。 σ^{α}_{ij} , C^{α}_{ijkl} は EAM ポテンシャルでは一次、二次導関数として定式化できる⁽⁶⁾ので、原子シミュレーションの原子配置データから各原子位置における B^{α}_{ij} を算出し、 $B^{\alpha}_{ij}\epsilon_j = \eta^{\alpha}\epsilon_j$ の 6 つの固有値 $\eta^{\alpha(k)}$ を求めた。

3. シミュレーション結果および考察

Fig.1 に応力-ひずみ線図を、Fig.2 に B^{α}_{ij} の行列式が負となった原子数、および $\eta^{\alpha(1)}$, $\eta^{\alpha(2)}$ が負となった原子数の変化を示す。また、ひずみ $\epsilon_{yy} = 0.08$ までの変化を拡大してそれぞれ Fig.3, Fig.4 に示す。応力はひずみ $\epsilon_{yy} = 0.04$ 近傍まではほぼ線形に上昇しているが、その後応力上昇が鈍化し、ひずみ $\epsilon_{yy} = 0.22$ 近傍でピーク最大応力 $\sigma = 3.5$ GPa を示した後急減した。なお、ひずみ $\epsilon_{yy} = 0.51$ 付近でセル内の原子が分離していることを確認している。また、ひずみ $\epsilon_{yy} = 0.146$ 近傍でごくわずかではあるが下向きに凸となっている。Fig.2 および Fig.4 の行列式・固有値の変化について、応力鈍化した $\epsilon_{yy} =$

0.04 近傍から $\eta^{\alpha(1)}$ が急増し、ひずみ $\epsilon_{yy} = 0.068$ で最大となっている。第二固有値が負となる原子はひずみ $\epsilon_{yy} = 0.05$ 以降に見られ、第一固有値のピークと対応した挙動を示す。第三固有値以上負になった原子は見られなかった。行列式は $\det B^{\alpha}_{ij} = \eta^{\alpha(1)}\eta^{\alpha(2)}\eta^{\alpha(3)}\eta^{\alpha(4)}\eta^{\alpha(5)}\eta^{\alpha(6)}$ なので、 $\det B^{\alpha}_{ij}$ の変化は $\eta^{\alpha(1)}$ の応答とほぼ等しい。

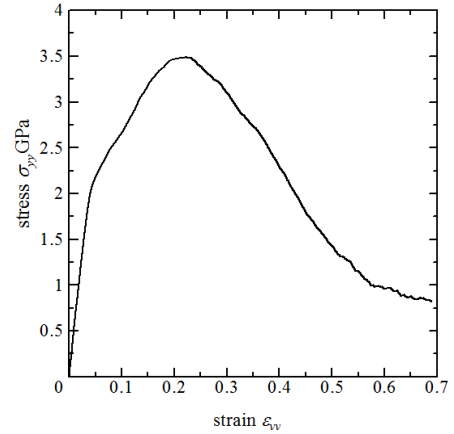


Fig.1 Stress-strain curve

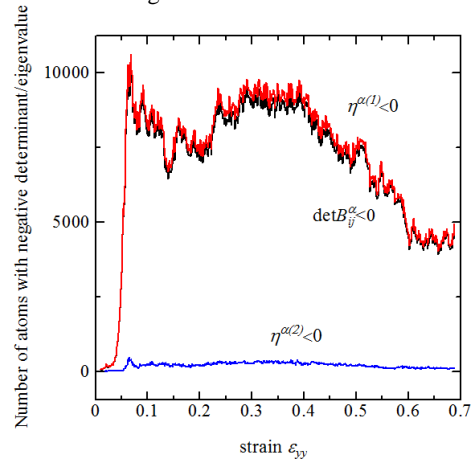


Fig.2 Number of atoms with negative determinant/eigenvalue

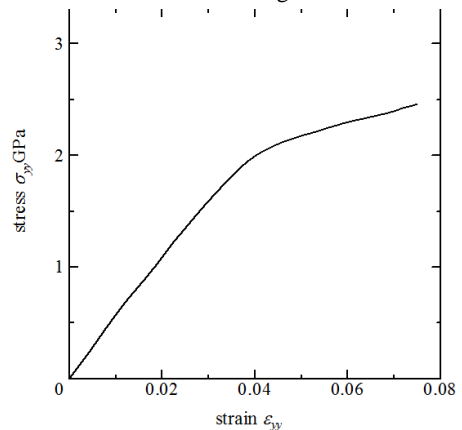


Fig.3 Magnification of Fig.1

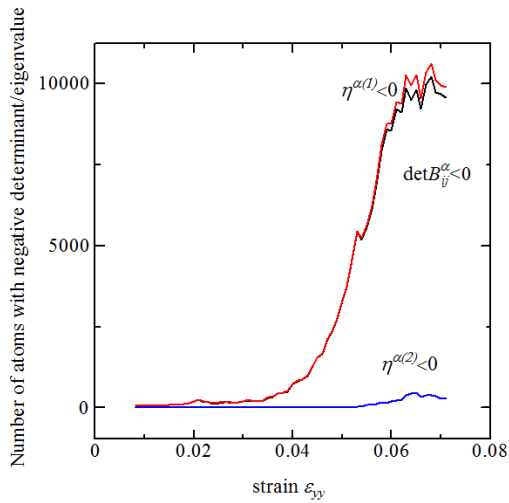


Fig. 4 Magnification of Fig. 2

Fig. 5 に $\eta^{\alpha(1)} < 0$ となる原子が出現しはじめたひずみ $\epsilon_{yy} = 0.021$ におけるき裂近傍の原子配置を、 $\eta^{\alpha(1)}$ が負の原子を濃く着色して示す。また、応力上昇が鈍化しはじめるひずみ $\epsilon_{yy} = 0.04$ におけるセル全体の原子配置を同様に $\eta^{\alpha(1)}$ の正負で着色して Fig. 6 に示す。図より $\eta^{\alpha(1)} < 0$ の原子がき裂近傍に発生した後、転位としてセル内を進展することで応力鈍化したものと結論付けられる。Fig. 7 は $\eta^{\alpha(1)} < 0$ の原子数が最大となったひずみ $\epsilon_{yy} = 0.068$ 、Fig. 8 は応力 - ひずみのピークにおけるスナップショットである。図より、応力集中部のき裂先端が開口するよりも、多数の転位射出の後、交差すべり部からボイドを形成して応力急減していることがわかる。

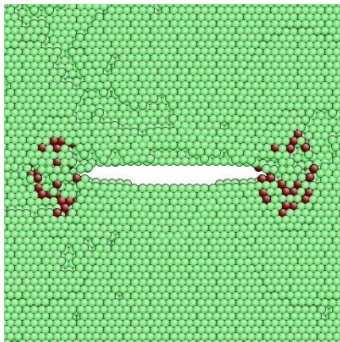


Fig. 5 Snapshot of atoms around crack ($\epsilon_{yy} = 0.021$)

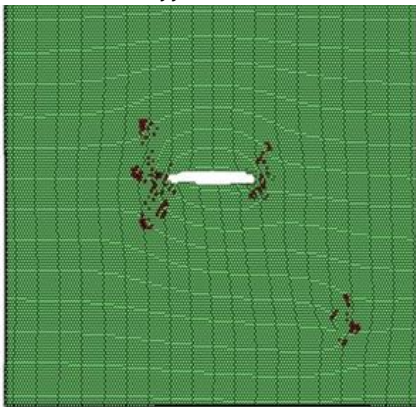


Fig. 6 Snapshot at $\epsilon_{yy} = 0.04$

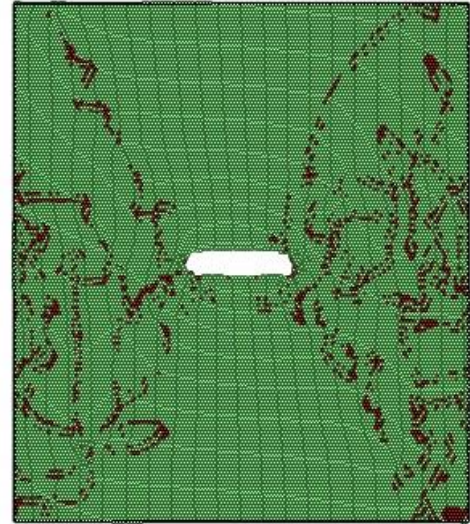


Fig. 7 Snapshot at $\epsilon_{yy} = 0.068$

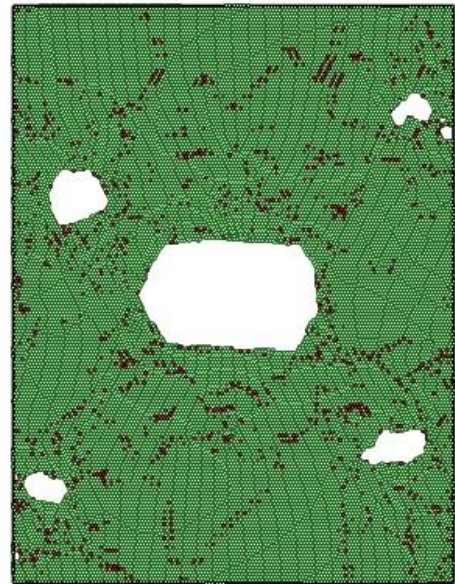


Fig. 8 Snapshot at $\epsilon_{yy} = 0.22$

参考文献

- (1) T. Tang, et al., Acta. Mater. 58, 4742-4759, (2010)
- (2) R. Aghababaei and S. P. Joshi., Acta. Mater. 69, pp. 326-342, (2014)
- (3) T. Tang, et al., Comp. Mater. 48, pp. 426-439, (2010)
- (4) X. Y. Liu, et al., Model. Simul. Mater. Sci. Eng, pp.293—303 (1996)
- (5) 屋代他, 機論, 81(824), 15-00271, (2015)