814 原子レベルシミュレーションによる 金属疲労に及ぼす大気中酸素の影響の解析

Atomistic Simulation of Atmospheric Oxygen Effects on Metal Fatigue

○正 保川 彰夫(日立)

Akio YASUKAWA, Hitachi, Ltd., Automotive Products,
2520 Takaba, Hitachinaka, Ibaraki, 312-8503, Japan

An extended Tersoff potential enables the atomistic level simulation of the effects of atmospheric oxygen molecules on metal fatigue. The effects of air pressure on the fatigue of lead are calculated. The calculated results show good agreement with the experimental results.

Key Words: Computational Mechanics, Atomistic Simulation, Fatigue, Oxygen, Lead

1. 緒言

各種装置の長寿命化のためには、構成材料の疲労破壊メカニズムの解明、特に環境効果の解明が重要である。金属材料の疲労挙動は、通常環境においても、材料の周りに存在する大気によって大きく影響されていることが知られている。Snowden⁽¹⁾は疲労寿命が真空度(空気圧力)によって大きく変化することを実験的に明らかにし、この原因が空気中の酸素分子(O_2)にあるとした。すなわち、真空中ではき裂新生面の治癒が生じ、寿命が長くなるのに対して、空気中では O_2 の新生面への吸着によって治癒が抑制され、寿命が短くなるとした。しかし、 O_2 とき裂新生面の相互作用を直接的に考慮して、原子レベルからのシミュレーションを行い、治癒抑制メカニズムを検討した例は、見当たらない。

本報告では、異種原子間の相互作用を表すことのできる拡張 Tersoff 原子間ポテンシャル^(2,3)を用いることにより、疲労き裂新生面と O_2 との相互作用の原子レベルシミュレーションを可能とする手法について述べる。さらに鉛(Pb)についての事例計算により、疲労寿命に及ぼす真空度(空気圧)の影響を計算し、実験結果と比較する。

2. き裂新生面治癒挙動の解析

図1に示すようなき裂表面の一部を上側面と下側面を対で取り出し、図2のようにモデル化する。図2の例では、最表面の原子層の下に2層の原子層を固定層として配置し、水平方向には、周期境界条件を与えている。

計算手順を図3で説明する。まず金属のブロックと O_2 分子を準備する。 O_2 分子は金属と相互作用しない離れた位置においておく。次に金属ブロックを分離し、上下の新生面を作る。この新生面に O_2 分子を近づけ、吸着させる。この状態から、今度は、上下のき裂面を互いに近づける。この一連のプロセスにおける系のポテンシャルエネルギーの変化を計算する。エネルギー計算には、拡張 Tersoff 原子間ポテンシャル^(2,3)を用いる。

Pbを例に計算したエネルギーを O_2 分子一個あたりで表して図4に示す。図4の点A(図3の(a)の状態に対応)からスタートして、上下のき裂面の面間隔 δ を増加させることにより、初めはエネルギーが増加する。すなわち、面の間には引力が働いており、まだ分離は生じていない。さらに δ を増加させると、点B付近(図3の(b)に対応)ではエネルギーが一定になっている。これは面の間に力が働かなくなり、完全な分離が生じたことを意味している。ここで、 O_2 を新生面に近づけることなく、 δ を減少させると完全にもとの点Aにもどる。すなわち、新生面の治癒が生じることを示している。

Fig. 1. Crack surface with adsorbing O_2 molecules.

Fig. 2. Simulation model.

点Bで、 O_2 を近づけるとエネルギーが点Cに低下し、この状態から面間隔 δ を小さくすると、 δ が0.5nmのあたりからエネルギーが急激に増加し始める(図4のD)。すなわち、面の間には反発力が働き、新生面の治癒は生じないことがわかる。

Fig. 3. Simulation procedure. (a) prepare a metal block and O_2 molecules, (b) divide the Pb block and create new surfaces, (c) bring the O_2 molecules close to the surfaces, and (d) bring the surfaces close to each other.

Fig. 4. Calculated energy change in the process of opening and closing a crack.

Fig. 5. Calculated results and experimental results of the relationship between air pressure p and the normalized fatigue life $(N-N_1)/(N_0-N_1)$ of lead.

3. 寿命に及ぼす真空度の影響の解析

まず、すでに吸着している O_2 分子が、そのサイトから離脱する頻度 k_d を考える。 O_2 は図4の点Bと点Cの差で示すエネルギー障壁高さ ΔU のエネルギーを得て離脱しなければならないから、速度論から

$$k_d = \nu_o \cdot \exp(-\Delta U / (k_B T)) \quad (1)$$

ここに、 ν_o は頻度因子定数、 k_B はボルツマン定数、 T は絶対温度である。次に吸着の生じていないサイトにおいて、吸着の生じる頻度 r (速度定数 k_a)は、気体運動論から

$$r = k_a \cdot p_o = A p_o / (2 \pi m k_B T)^{1/2} \quad (2)$$

ここに、 A は吸着サイト1個当たりの面積、 p_o は O_2 の分圧である。以上の式で求まる $k_a \cdot p_o$ と k_d を用いて、新生面の O_2 による被覆率 θ が、次のLangmuirの式(4)を用いて計算できる。

$$\theta = (k_a \cdot p_o / k_d) / (1 + k_a \cdot p_o / k_d) \quad (3)$$

この θ により新生面の治癒の生じる確率に変化し、これによりき裂の進展速度 da/dn が変化すると考える。すなわち、次の式のようにする。

$$da/dn = \Delta a \cdot q \quad (4)$$

ここに、 Δa は一回の負荷により生じる新生面の寸法である。 q はこの新生面の治癒の生じない確率であり、ここでは、 q_o を1より小さな定数として、次のようにおく。

$$q = q_o + (1 - q_o) \theta \quad (5)$$

き裂長さが初期値 a_o から負荷を N 回繰り返すことにより、限界長さ a_c になったときに寿命に達するとして、式(4)を積分して、次の式が得られる。

$$\int_{a_o}^{a_c} (1/\Delta a) da / [q_o + (1 - q_o) \theta] = N \quad (6)$$

θ が1と0のときの寿命をそれぞれ N_1 と N_o とし、正規化寿命を $(N - N_1)/(N_o - N_1)$ とすれば、式(6)より

$$(N - N_1)/(N_o - N_1) = \{1/[N_1/N_o + (1 - N_1/N_o) \theta] - 1\} / (N_o/N_1 - 1) \quad (7)$$

上記の式(1)(2)(3)(7)を用いて、寿命と真空度(空気圧力 p)の関係を計算できる。Pbの場合については、 θ を各種変えたシミュレーションより $\Delta U = 1.06 \times 10^{-20} + 5.58 \times 10^{-20} \cdot \exp(-(\theta/0.615)^{5.46})$ [J]と表されることがわかった。この ΔU の値と $\nu_o = 1 \times 10^{12}$ [1/s]、 $m = 5.36 \times 10^{-26}$ [kg]、 $k_B = 1.381 \times 10^{-23}$ [J/K]、 $T = 295$ [K]、 $A = 1.061 \times 10^{-19}$ [m²]、 $N_1/N_o = 0.029$ 、 $p_o = 0.209$ pを用いて、計算した結果を図5に示す。図には実験結果⁽¹⁾も示してある。

図5より、圧力を下げてゆくと、寿命は短寿命から長寿命に、ある圧力範囲で急激に変化することがわかる。計算結果は、この実験結果の挙動をよく表していることがわかる。また、変化の生じる遷移圧力のレベルについても、よい一致が得られていることがわかる。

4. 結言

拡張 Tersoff 原子間ポテンシャルを用いることにより、金属疲労に及ぼす大気中酸素分子の影響の原子レベルシミュレーションを可能とした。Pbを例として計算した結果は、実験結果とよい一致を示した。

参考文献

- (1) Snowden, K. U., Acta Metallurgica, 12, (1964), 295.
- (2) Yasukawa, A., JSME International journal, A(1996), 313.
- (3) 保川, 機械学会茨城講演会講演論文集, (2000-9-22), 97.
- (4) 日本化学会編, 化学便覧基礎編Ⅱ(1966)