原子シミュレーションにおける粒界近傍のき裂先端から 連続転位放出する現象に対する J 積分による評価[†]

木下 恵介* 下川 智嗣** 喜成年 泰**

J -Integral Evaluation of Continuous Dislocation Emissions from the Crack Tip near Grain Boundaries in Atomic Simulations

by

Keisuke KINOSHITA*, Tomotsugu SHIMOKAWA** and Toshiyasu KINARI**

Extrinsic grain boundary dislocations (EGBDs) are often observed in ultra fine-grained metals produced by severe plastic deformation processes. The mechanical properties of such metals are different from those of coarse-grained metals, so EGBDs could be important factor to elucidate the unique mechanical properties. In this paper, in order to clarify the influence of EGBDs on the emission of dislocations from the crack tip, we evaluate the mechanical field around the crack tip using J -integral in atomic simulations. It is found that quantitative evaluations of the crack-tip shielding effect due to EGBDs can be performed by J -integral taking grain boundary structures into account.

Key words: Molecular dynamics, Grain boundary, J -integral, Extrinsic grain boundary dislocations, Crack-tip shielding effect, Stress intensity factor

1 緒 言

金属材料の結晶粒径 d をマイクロメートルオーダーへ微細化すると、降伏点が $d^{-1/2}$ に比例して上昇するため (Hall-Petch の関係^{1), 2)}、結晶粒微細化は材料の力学特性を向上させる手法として利用されている。近年、ARB (Accumulative Roll Bonding)³⁾ や ECAP (Equal Channel Angular Pressing)⁴⁾ 等の強ひずみ加工により、結晶粒径をさらに数百ナノメートルオーダーへ微細化することで、通常の粗大粒材とは異なる力学特性が得られることが報告されている。例えば、FCC 構造であるアルミニウムにおいて降伏点降下現象が生じること⁵⁾ や延性ぜい性遷移温度が低温側へ移動する現象⁶⁾ が報告されている。これらの特異な現象が生じる原因として、粒界の体積比が数百ナノメートル以下の粒径になると急激に増加することが考えられる。つまり、粒界を考慮した格子欠陥の発展が、超微細粒材料の特異な力学特性に大きく影響を与えていると考えることができる。

ここで、結晶粒微細化に伴う延性ぜい性遷移温度の低温側への移動現象について検討する。結晶性材料のぜい性的な振る舞いを考えるとき、き裂が破壊の起点になることが考えられる (例えば、表面き裂の破壊の影響を表す Joffe 効果⁷⁾)。つまり、き裂先端の力学場がき裂を進展させにくい環境にあるほど、その材料の破壊じん性値が増加する可能性が考えられる。結晶粒径が小さくなると、き裂先端と粒界までの距離が短くなり、き裂より発生した転位が粒界まで達し、その近

傍で蓄積するか、もしくは粒界に侵入した場合、その転位の背応力の影響をき裂は受けることになる。また、強ひずみ加工で作成した超微細粒材には多くの余分な粒 界 転 位 (Extrinsic Grain Boundary Dislocation : EGBD) を含む非平衡粒界の存在が報告されており、⁸⁾ そのような粒界は長距離の応力場を示すことからき裂先端の力学場に影響を与えている可能性も考えられる。このようなことから、粒界を含んだ格子欠陥の発展に影響を受けるき裂先端力学場を定量的に評価することが超微細粒材の延性ぜい性遷移現象を理解する上では重要であると考えられる。

き裂先端の力学場を評価する方法として、応力拡大係数 K が多く用いられている。例えば、き裂から放出された転位の背応力による遮へい効果を検討するために、線形弾性論に基づく欠陥応力場の重ね合わせを用いる転位動力学シミュレーションが実行され、き裂先端の局所的な応力拡大係数を、放出された転位の背応力を考慮することで評価されている。⁹⁾ しかしながら、結晶粒径が微細化されると、き裂より放出された転位は粒界に侵入し、その転位芯の構造は粒界構造に従い変化し、粒界に侵入した転位の応力場が格子転位の応力場に比べて異なる可能性もあることから、粒界構造を原子レベルで表現することが、粒界転位によるき裂先端の遮へい効果には必要である。そのため、このような問題を考えるとき、分子動力学法に代表される原子シミュレーションが有力な道具として期待できる。

[†] 原稿受理 平成 21 年 12 月 10 日 Received Dec. 10, 2009 © 2010 The Society of Materials Science, Japan

* 金沢大学大学院自然科学研究科機能機械科学専攻 〒920-1192 金沢市角間町, Graduate School of Natural Sci. & Tech., Kanazawa Univ., Kakuma-machi, Kanazawa, 920-1192

** 金沢大学理工研究域機械工学系 〒920-1192 金沢市角間町, College of Sci. & Eng., Kanazawa Univ., Kakuma-machi, Kanazawa, 920-1192

原子シミュレーションは、用いる原子間ポテンシャルの枠組みで欠陥構造を詳細に表現でき、転位と粒界の相互作用等、欠陥構造の発展を詳細に追跡できる。しかしながら、モデル内の応力場を、個々の欠陥に起因するそれぞれの応力場に分解することが困難であるため、転位動力学法で行われているような方法⁹⁾で局所応力拡大係数を原子モデルから評価することは困難である。そこで、本研究では J 積分に注目する。¹⁰⁾ J 積分はき裂先端近傍の情報からき裂先端に作用し、き裂を前進させる力を評価することができ、均質等方体の線形弾性の範囲内では、小規模降伏状態の応力拡大係数で表現できるエネルギー解放率 G と等しくなる。中谷ら¹¹⁾や松本ら¹²⁾によりアモルファス金属の原子モデル等に置いて J 積分の有効性は報告されており、粒界に侵入した転位によるき裂先端の遮へい効果を定量的に評価できると期待できる。また、近年 XFEM において、転位周りに J 積分を実行することで、その転位に働く Peach-Koehler 力¹³⁾を評価できることが報告されており、¹⁴⁾ このことは、原子モデルにおいて粒界に侵入した転位が外力を受けて結晶内に放出される時に必要な力を J 積分により評価できる可能性を示唆しており、粒界から転位を放出する現象を定量的に評価できる新しい手法を確立できる可能性を有している。

そこで本論文では、分子動力学シミュレーションにより、両側き裂を有する双結晶モデルの粒界に対して、平衡粒界と非平衡粒界（予負荷を与えることで平衡粒界に格子転位 (EGBDs) を導入した粒界）の二通りを用意し、それぞれに引張り負荷を加えることで、き裂先端の力学場の発展に対する EGBDs の影響を J 積分により評価することを目的とする。

2 解析モデルと条件

2.1 解析モデル

Fig. 1 (a) に解析モデルの概要図を示す。解析対象はアルミニウムとし、原子間相互作用として Mishin らの原子埋め込み法を使用する。解析モデルの大きさは、 $l_1 = 89.7$ nm, $l_2 = 1.48$ nm, $l_3 = 88.8$ nm である。解析モデルは粒 I と粒 II から構成され、粒 I の中央に z 軸に垂直で幅 $2a = 20$ nm, 高さ 1 nm（原子間ポテンシャルのカッ

トオフ距離以上）の両側き裂を配置し、き裂上下にき裂面と平行な二つの粒界が存在することになる。各粒の結晶方位は X^I, X^{II} 軸方向に $[11\bar{1}]$, Y^I, Y^{II} 軸方向に $[112]$, Z^I, Z^{II} 軸方向に $[1\bar{1}0]$ とし、粒 I, 粒 II に対して Fig. 1 (a) に示すように y 軸周りにそれぞれ θ_1, θ_2 回転することで、粒 I と粒 II の結晶方位を表現する。つまり、粒界は $[112]$ 軸傾角粒界となる。本研究では、 $\theta_1 = -50.8^\circ$, $\theta_2 = 50.8^\circ$ とし、Fig. 1 (b) に示すように粒界構造は $\Sigma 15$ 対称傾角粒界である。また、全方向に周期境界条件を適用し、 y 軸方向のモデルサイズが小さいため、転位線は幾何学的な拘束を受けることになるので、実際に起動できるすべり系のすべり面は Fig. 1 (a) に示す X^I, X^{II} 方向の実線となる。EGBDs のき裂先端力学場への影響を検討するために、予め引張荷重を加えてき裂先端から放出させた転位を粒界に侵入させ、その後除荷し、平衡状態において EGBDs を含むモデルも作製する。ここでは、EGBD を含まないモデルを“model A”とし、EGBDs を含むモデルを“model B”と呼ぶことにする。

2.2 解析条件

model A と model B に対して、モード I の負荷を与えることで、き裂から転位を放出させるシミュレーションを行なう。引張解析条件は各モデルに対して z 軸方向にひずみ速度 $\dot{\epsilon}_z = 2 \times 10^8$ 1/s で変形させ、速度スケール法により $T = 0.1$ K に温度制御を行なう。 x 方向にのみ応力制御を適用し、 y 方向の解析モデルの大きさは一定とすることから引張変形は、平面ひずみ条件下で行なわれることに対応する。

3 き裂先端周りの力学場の評価方法

3.1 J 積分

model A と model B のき裂先端の力学場を評価するために J 積分を用いる。均質等方体の線形弾性の範囲内では、小規模降伏状態の J 積分値はエネルギー解放率 G と等しく、平面ひずみ条件下では、

$$J = G = \frac{1-\nu^2}{E} K_I^2 \quad (1)$$

と与えられる。ここで、 K_I は応力拡大係数であり、

$$K_I = \sigma_A \sqrt{\pi a} \quad (2)$$

σ_A は負荷応力、 a はき裂長さである。ここで、原子モデルにおいて J 積分を以下の J^* のように求める方法が提案されている。¹¹⁾

$$J^* = \sum_{\alpha \text{ in } S^*} [(W^{C(\alpha)} - W^{O(\alpha)}) \delta_{1j} - (\sigma_{ij}^{C(\alpha)} - \sigma_{ij}^{O(\alpha)}) \frac{\partial u_i^{(\alpha)}}{\partial x_1}] \frac{\partial Q}{\partial x_j} V^{(\alpha)} \frac{1}{l_2} \quad (3)$$

ここで、 S^* は Fig. 1 (c) に示す領域であり、 $W^{(\alpha)}$, $\sigma_{ij}^{(\alpha)}$, $u_i^{(\alpha)}$ はそれぞれ、 α 原子のポテンシャルエネルギー、応力成分、変位成分であり、 l_2 は解析モデルの y 方向長さ

Fig. 1 (a) Schematic figure of the analysis model. (b) $\Sigma 15$ grain boundary structure. (c) Parameters of the right crack tip for J -integral.

を表わしている. $V^{(\alpha)}$ は α 原子の占有体積であるが, 本研究においても簡易的に完全結晶体の原子体積を使用する.¹¹⁾ 添え字 O, C は, 参照する model A の無負荷状態と各モデルの引張負荷を受ける状態をそれぞれ示しており, 原子の凝集エネルギーや表面エネルギー, 表面応力を取り除くことを目的としている. 本来の J 積分で実行される線積分を離散系で正確に実行することは困難であるので, 複数の原子情報を含む有限の幅の線を考え, Fig. 1(c) の S^* の領域に対して積分することで線積分を置き換えている. そのため, Q は線積分を領域積分に対応させるために導入される重み関数であり, Fig. 1(c) に示す内径 r_1 で 0, 外径 r_2 で 1 となる連続関数である. 本研究でも $Q(r)$ を以下の様に定義する. r はき裂先端からの距離である.

$$Q(r) = \frac{1}{2} \left\{ 1 - \cos \pi \frac{r - r_1}{r_2 - r_1} \right\} \quad (4)$$

変位勾配 $\partial u_i^{(\alpha)} / \partial x_1$ は以下で求めることができる.

$$\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_1} \right)^{(\alpha)} = - \sum_{\beta=1}^N u^{(\beta)} \frac{\partial w}{\partial x_1} V^{(\beta)} \quad (5)$$

本研究では β 原子は, α 原子との距離が 0.6 nm 以内に存在する原子としており, w は α 原子を原点とする 3 次元の正規分布であり, その分散値は第 1 隣接原子の距離 ($r_{1st} = 0.286$ nm) を参考にし, 0.286^2 nm² とする. このとき, 完全結晶の原子モデルにおいて均質なひずみを与えたとき, 式 (5) で評価される原子領域のひずみはほぼ同じ値を示すことを確認している. なお, 式 (3) により評価する原子モデルに対する J 積分値を今後 J^* 値とする.

3・2 き裂の応力場の理論式

モード I き裂の応力場は, き裂表面で $\sigma_z = 0$ となるように分布した上昇刃状転位列の応力場を積分することで求めることができる.¹⁵⁾ このとき, Fig. 2 に示すように長さ $2a$ の両側き裂周辺の P 点の引張応力場 σ_z^T は, 次式で表現することができる.

Fig. 2 Parameters for the evaluation of stress field around crack tips.

$$\sigma_z^T = \sigma_A \frac{r_C}{2r^*} \left\{ 2 \cos(\theta^* - \theta_C) - 2 \sin \theta_L \sin \theta^* + \sin \theta_R \sin(\theta^* + \theta_R - \theta_C) + \sin \theta_L \sin(\theta^* + \theta_L - \theta_C) \right\} \quad (6)$$

ここで σ_A は負荷応力, r と θ は Fig. 2 に示す極座標であり, 下添え字 R, L, C はそれぞれき裂右端, 左端および中央を表わしている. また, $r^* = \sqrt{r_L r_R}$ と $\theta^* = \frac{1}{2}(\theta_L + \theta_R)$ である. ここで, き裂先端近傍の領域 $r_R \ll a$ では, $r_L \rightarrow 2a$, $r_C \rightarrow a$, $\theta_L \rightarrow 0$, $\theta_C \rightarrow 0$ となり, 式 (6) は,

$$\sigma_z^T = \frac{K_I}{\sqrt{2\pi r}} \cos \frac{1}{2} \theta \left[1 + \sin \frac{1}{2} \theta \sin \frac{3}{2} \theta \right] \quad (7)$$

と簡単な形になる. ここで, $\theta = \theta_R$, $r = r_R$ である. 式 (7) は, き裂を含む線形弾性体において, 基礎関係式 (応力-ひずみ関係, ひずみ-変位関係, 応力の平衡方程式) と境界条件を考慮して, Airy の応力関数を用いて得られる応力場であり, き裂の極近傍 (き裂長さ a に対して, 十分小さな領域) についてのみ成り立つことが理解できる.

Fig. 3 (a) Stress-strain curves of model A and B. (b) Dislocation emission from the right crack tip. σ_z distributions around the right crack tip in state S^1 of (c) model A and (d) model B, and in state S^2 of (e) model A and (f) model B.

Fig. 4 Distributions of σ_z around the right crack tip. (a) Atomic model with the boundary condition of the linear elastic theory. (b) $\sigma_z^{T_2}$ with the same K in (a). (c) Atomic model with the periodic boundary condition. (d) $\sigma_z^{T_1}$ with the same applied stress in (a). (e) $\sigma_z^{T_2}$ with the same applied stress in (a).

Fig. 5 Path dependency of J -integral in the atomic model with the boundary condition of the linear elastic theory of K_I . (a) $K_I = 0.040 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$. (b) $K_I = 0.089 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$.

Fig. 6 Path dependency of J -integral of model A with periodic boundary conditions. (a) $\sigma_z = 0.14 \text{ GPa}$. (b) $\sigma_z = 0.22 \text{ GPa}$.

4 解析結果

4・1 粒界近傍のき裂先端からの連続転位放出現象

Fig. 3(a) に model A と model B の応力-ひずみ曲線を示し, Fig. 3(b) に示すように右側のき裂から転位が放出される箇所を, 黒丸と白丸でそれぞれ示す. また, 無負荷状態 S^1 と負荷状態 S^2 ($\bar{\sigma}_z = 0.5 \text{ GPa}$) の右側き裂周辺の引張応力場 (σ_z) をそれぞれ Fig. 3(c) から (f) に示す.

Fig. 3(a) の応力-ひずみ曲線を見ると, 最初の転位をき裂から放出する前の弾性域では, model A と B の間に差異はほとんど確認できない. しかしながら, き裂から最初の転位放出時の応力値は model A と B では異なっており, EGBDs を含む model B の方が model A よりも転位を放出するためには大きな外力を必要としていることがわかる. なお, model A のき裂の高さを model B と一致させて同様の解析を行った結果, 応力ひずみ曲線は model A のものとほとんど一致しており, model B の転位放出時の応力値の上昇がき裂先端の形状変化によるものではないことを確認している.

Fig. 3(c)(d) に示す無負荷状態 S^1 の model A と B の応力場を比較すると, EGBDs を含む model B はその EGBD の箇所に長距離応力場が発生していることが確認でき, き裂先端が無負荷時にも関わらず負の σ_z を示していることがわかる. Fig. 3(e)(f) に示す同じ負荷状

態 S^2 の応力場を比較すると, model B のき裂近傍の応力値は model A に対して小さく, EGBDs によるき裂先端に対する遮へい効果をき裂先端応力場の発展の違いとして確認することができる. つまり, Fig. 3(a) で確認できる転位放出に必要な外力の違いは, EGBDs によるき裂先端力学場への遮へい効果であることが理解できる. しかしながら, 原子モデルでは粒界に侵入した転位のコア構造が, 粒界構造に伴い変化することを表現できる一方で, モデルサイズが小さいため, 小規模降伏状態を表現することや個々の欠陥の応力場を分離することが困難なため, 局所応力拡大係数の視点でき裂先端の力学場を追跡することは容易ではない. そこで, 本研究では, これらのき裂先端力学場の発展をき裂先端の局所的な情報で評価することができる J 積分を用いて定量的な評価を試みる.

4・2 原子モデルにおける J 積分の妥当性

原子モデルにより表現される結晶性材料の式 (3) により評価される J^* 値の妥当性を検討するために, 式 (1) の関係を用いて評価する. J 積分は, $1/\sqrt{r}$ の特異性を示す特異点に働く力を積分する経路に依存せず与えることができるが, 本研究で用いる model A, B は周期境界条件を適用しているため, 両側き裂が周期的に並んでおり, き裂の応力場が隣接するき裂の応力場の影響を受け

るため、 S^* の領域の選定に影響を受けると考えられる。そこでまず、本研究の J^* 値の妥当性を示すため、ある応力拡大係数 K_I により与えられる線形弾性論の変位場を境界条件に持つ片側き裂モデルについて J^* 値の妥当性（経路依存性）を検討する。その後、周期境界条件を適用したmodel Aの J^* 値の有効性を検討する。

4・2・1 線形弾性論に従う境界条件に対する J 積分 Fig. 4(a)に片側き裂モデルに対して、線形弾性理論から得られる応力拡大係数 $K_I = 0.040 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ に対応する変位を全原子に与え、その後、境界原子を固定して共役勾配法によりモデル内部を緩和して得られるき裂周りの σ_z 分布を示す。またFig. 4(b)には、同じ応力拡大係数 K_I を式(7)に代入することで得られる線形弾性論に基づく解析解の応力場 σ_z^{T2} を示す。ここで、式(1)に必要な E と ν は、本解析で用いる原子間ポテンシャルで表現されるAlに対してVoigt平均した値を用いており、それぞれ77.9 GPa, 0.33となる。¹⁶⁾ Fig. 4(a)(b)より、応力場の形状は原子モデルと解析モデルは相似的であり、線形弾性論に従う境界条件により表現されたき裂の原子モデルによる応力場は、解析解の応力場 σ_z^{T2} とよく対応していることが確認できる。応力場の絶対値が完全に一致しないのは、用いている原子間ポテンシャルの異方性因子が1.25と1に近いことから結晶異方性の影響よりも、ポテンシャル関数の非線形性に起因していると考えられる。

この原子モデルに対して J^* 値を算出し、積分経路依存性を検討する。Fig. 5に r_1 と r_2 を変化させた場合の J^* 値を示す。ここでは、二つの応力拡大係数 $K_I = 0.040 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$, $0.089 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ について考える。Fig. 5から、 r_1 と r_2 を変化させても J^* 値は大きく変化しておらず、積分経路独立性が確認できる。一方で、 r_2 を大きくするほど、 J^* 値は収束していることが確認できる。式(1)で K_I を用いて評価されるエネルギー解放率 G と J^* 値は、 K_I が大きくなるほど差が開いていることが確認できる。これは、Fig. 4(a)(b)より確認できるように応力場が完全に一致しないことや、式(5)で評価する α 原子周りの変位勾配を求めるときに、隣接する β 原子の変位場が同様であるという仮定によるものと考えられる。

4・2・2 周期境界条件に対する J 積分（両側き裂：model A） Fig. 4(c)(d)(e)に、周期境界条件を適用する両側き裂を含むmodel Aと式(6)、式(7)から得られるそれぞれのき裂近傍の応力場（ σ_z , σ_z^{T1} , σ_z^{T2} ）を示す。ここで、解析解に必要な負荷応力 σ_A は、model Aの平均応力 $\bar{\sigma}_z = 1.01 \text{ GPa}$ を用い、き裂半長 $a = 10 \text{ nm}$ とする。周期境界条件を適用するmodel Aでは、評価するき裂近傍の領域とき裂長さが同じオーダーにもかかわらず、原子モデルの応力場と σ_z^{T1} により評価される応力場はよく対応していることが確認でき、原子モデルの平均応力場 $\bar{\sigma}_z$ を用いて、負荷応力 σ_A を評価できることが理解できる。一方で、 σ_z^{T2} はき裂の極近傍のみを表現するため、この応力場は、原子モデルと大きく異なることがわかる。

次に、model Aに対する J^* 値の経路依存性をFig. 6に示す。ここでエネルギー解放率 G を求めるため、 $\sigma_A = \bar{\sigma}_z$ としている。ここでは、 $\bar{\sigma}_z = 0.14 \text{ GPa}$, 0.22 GPa の2つの状態について検討する。Fig. 6から、Fig. 5とは異なり r_2 の増加に伴い J^* 値が変化していることが確認できる。特に r_2 が20 nmまでは増加し、その後減少していることが確認できる。このことは、Fig. 4(c)(d)よりmodel Aでは隣接するき裂の影響を受けているため、応力場の形状が σ_z^{T2} に対して完全な相似形ではないことから、 $1/\sqrt{r}$ の特異性が積分領域によって変化していることが原因として考えられる。また、 r_2 が20 nmを超えると、両側き裂の左先端の領域を含むことになり、左先端のき裂は左方向に進展しようとする合力が作用するため、左右のき裂をそれぞれの方向に進展させようとする力を J^* 値は表現することになり、結果として減少することになると理解できる。これらの J^* 値の積分経路依存性は、周期境界条件を適用したことによるき裂先端力学場の $1/\sqrt{r}$ の特異性が保たれていないことに起因していると考えられる。このため、 r_2 と r_1 は解析モデルサイズに注意して選定する必要がある。本研究ではこれらの結果を考慮し、 $r_1 = 5 \text{ nm}$, $r_2 = 10 \text{ nm}$ を採用し、model Aとmodel Bのき裂先端力学場の発展を評価することにする。

4・3 J 積分によるき裂先端力学場の評価

4・3・1 き裂先端から連続転位放出する現象に対する積分領域の選定 Fig. 3に示すように、model AにモードIの負荷を加えていくと、き裂から転位が連続して放出される。このときのき裂先端の力学場を J 積分を用いて評価したいが、き裂から放出される転位はFig. 7(a)に示す積分領域 S^* を通過し、すべり面に塑性ひずみが

Fig. 7 J -integral values evaluated using S^* and S^{**} , and energy release rate G .

生じることになり、式 (5) で評価される変位勾配に弾性変形のための寄与を正確に反映させることが困難である。そこで、本研究では Fig. 7 (b) に示すようにき裂から放出される転位のすべり面近傍を積分領域 S^* から取り除き、積分領域 S^{**} について J^* 値を計算することにする。本研究では取り除く幅を、式 (5) で α 原子の変位勾配を評価するために必要な隣接原子 β までの距離 (0.6 nm) を考慮して、0.8 nm とする。このとき、取り除く領域は S^* の約 1.7 % に対応する。

Fig. 7 (c) に model A の右側き裂に対する J^* 値の変化を示す。点線が S^* で評価した値であり、実線が S^{**} で評価した値である。最初の転位が放出されるまで (約ひずみ 1.9 %), S^* と S^{**} で評価される J^* 値は、ほとんど同じ値を示していることが確認できる。 S^{**} で評価される J^* 値の方が小さい原因は、積分領域が S^* の約 98.3 % であるためである。最初の転位の後続の部分転位がき裂から放出されると、 S^{**} で評価される J^* 値は減少する。一方で、 S^* で評価される J^* 値は転位放出後、急激に増加していることが確認できる。これは、放出された転位が積分領域 S^* 内を通過しているためである。その後、 S^* で評価される J^* 値は減少するが、 S^{**} で評価される J^* 値よりも大きな値を示している。これは転位が S^* を通過後に生じる塑性ひずみの影響によるものである。2 番目、3 番目の転位の放出についても同様な傾向が示されており、 S^* で評価される J^* 値の塑性ひずみによる影響は蓄積され、 S^{**} で評価される J^* 値に対して過大評価されていることが理解できる。以上の結果より、約 1.7 % の情報を失うことになるが、本研究ではき裂から発生する転位のすべり面の情報を考慮しない S^{**} の領域に対して J^* 値を算出し、連続して放出するき裂先端の力学場を評価することとする。

4・3・2 き裂先端力学場の発展に対する EGBDs の影響 Fig. 7 (c) に、式 (1) で評価できるエネルギー解放率 G を示す。ここで、応力拡大係数 K_I はモデル全体の平均応力 $\bar{\sigma}_z$ を利用して、 $K_I = \bar{\sigma}_z \sqrt{\pi a}$ としている。なお、本研究で用いる解析モデルは全方向に周期境界条件を適用しているため、両側き裂が上下左右に無限に配列している。そのため、このようなき裂配列に対する補正係数 F を用いる必要があるが、ここでは簡単な比較のため $F = 1$ として考える。 G に対して、 S^{**} で評価する J^* 値は大きいことが確認できる。これは、 $F = 1$ としていたりことや 4・2 節で述べた周期境界条件の影響によりき裂先端の $1/\sqrt{r}$ の特異性が保たれていないことが原因として考えられる。ここで、 G を最初の転位が放出される直前の J^* 値に一致するようにスケールリングして G' とすると、転位を放出する直前までの弾性域では G' と J^* 値がよく一致していることが確認できる。このことは、き裂近傍の原子情報から評価された J^* 値も応力 $\bar{\sigma}_z$ の二次関数で増加していることを意味している。また、最初の転位を放出するときの J^* 値は転位放出に対する臨界応力拡大係数に対応する値を意味していると考えられる。

2 番目、3 番目の転位を放出するために必要な J^* 値と G' は増加していることが確認できるが、その値は G' の方が大きいことがわかる。これは、 G' は常に一定の応力拡大係数 K_I に基づき評価されるのに対して、 J^* 値はき裂近傍の情報から評価されるため、き裂から放出されて粒界に侵入した EGBDs の背応力を考慮しており、 J^* 値は局所的な応力拡大係数を反映していると理解できる。つまり、EGBDs の背応力によりき裂を x_1 軸方向に進展させようとする力は、EGBDs を考慮しない場合に対して小さくなっており、 x_1 軸方向のモード I のき裂進展に対して EGBDs が遮へい効果を示していることが理解できる。

Fig. 8 に model A と予め EGBDs を含んだ model B の J^* 値を示す。最初の転位を放出するまでは、model A に対して model B の J^* 値は常に小さな値を示しており、き裂を x_1 方向に進展させる力が小さいことが確認できる。これは、予め導入した EGBDs の影響である。その後、model A においてき裂から粒界に転位が侵入すると、model B と同様に各粒界に 1 つずつ EGBD を含むことになり、それ以後、model A と model B のき裂は同じ数の EGBDs によりき裂先端が遮へいされていることにな

Fig. 8 J -integral values of model A and model B along the x_1 direction.

Fig. 9 J -integral values of model A and model B along the x_1 direction.

る。そのため、model A の 2 番目と model B の 1 番目、model A の 3 番目と model B の 2 番目の転位放出時の J^* 値がよく対応していることが理解できる。

J 積分は特異点に生じる力を評価できることから、次に、 $x_1x_2x_3$ 座標系を Fig. 9 に示す $x'_1x'_2x'_3 \rightarrow \theta = -51^\circ$ 回転させ、すべり線方向に x'_1 軸を取る場合の J^* 値を考察する。つまりここでは、き裂が転位を放出する方向にモード I とモード II の混合モード下で進展する力を評価することに对应する。Fig. 8 と同様に立ち上がりは応力の二次関数的に増加していくことが確認でき、それらの値は Fig. 8 よりも小さいことから、き裂は x_1 方向よりも x'_1 方向に働く力が同じひずみを与えた状態で小さいことが理解できる。また、 J^* 値は Fig. 8 と同様に model A に比べて model B の方が小さいことが確認でき、EGBDs による遮へい効果が生じていることが確認できる。しかしながら、転位放出時の J^* 値は、model A と model B でほぼ同じ値を示しており、このことは、き裂近傍の応力場がある環境に達すると転位を放出することを意味しており、転位放出時に必要な J^* 値はき裂固有の値であることが理解できる。なお、 J^* 値が一定値を取る物理的な意味として、3・2 節で述べた様に、き裂の応力場は転位列の応力場の重ね合わせで表現することができるため、 J^* 値は x'_1 方向に分解したバーガースベクトルの刃状転位の特異場に作用する Peach-Koehler 力を評価していると言うことが考えられるが、その詳細は今後の検討課題とする。

以上の結果をまとめると、Fig. 7 より、き裂を x_1 方向に進展させる力は、 G' により評価される遮へい効果を考慮しない場合に対して減少しており、 x_1 軸方向のモード I のき裂進展能力を EGBDs により減少させていることが理解できる。つまり、EGBDs により破壊じん性値が向上していることが理解できる。また、Fig. 9 よりき裂から転位を放出するためには常にき裂近傍を同じ力学環境にすることが必要であるが、Fig. 3 からわかるように、その状態にするためには必要な外力が増加しており、EGBDs の影響によりき裂の転位生成源としての能力は遮へいされていることが理解できる。

5 結 言

本研究では、原子シミュレーションにおける粒界近傍のき裂先端から転位を連続放出する現象に対して、粒界に侵入した転位がき裂先端力学場に及ぼす影響を J 積分を用いて評価した。まず、原子モデルにおける結晶性材料に対する J 積分の妥当性を確認するために、線形弾性論の解析解を境界条件に与えるき裂モデルについて J 積分とエネルギー解放率を比較し、 J 積分の経路独立性を確認した。その後、両側き裂を含む双結晶モデルに対して引張変形シミュレーションを実行し、 J 積分を用いることで余分な粒界転位（非平衡粒界）のき裂先端の力学場に対する遮へい効果を評価した。このような原子モデルにおいて格子欠陥が発展する場合のき裂近傍の力学環境の評価について J 積分の有効性を確認した。また今後は、 J 積分は特異点に作用する力を評価しているこ

とになるので、粒界に侵入した格子転位に対して J 積分を適用することで、粒界からその転位が放出されるときに必要な Peach-Koehler 力を、粒界構造を考慮して評価できるかについて検討を進めていく。

最後に、本研究の一部は、文部科学省科学研究費補助金特定領域研究「巨大ひずみ」と若手研究 (B) 課題番号 16760061 の補助を受けて実施したことを付記し謝意を表します。

参 考 文 献

- 1) E. O. Hall, "The deformation and ageing of mild steel : III discussion of results", Proceedings of the Physical Society, Section B, Vol.64, pp.747-753 (1951).
- 2) N. J. Petch, "The cleavage strength of polycrystals", Journal of Iron and Steel Institute, Vol.174, pp.25-28 (1953).
- 3) N. Tsuji, Y. Ito, Y. Saito and Y. Minamino, "Strength and Ductility of Ultrafine Grained Aluminum and Iron Produced by ARB and Annealing", Script Materialia, Vol.47, No.12, pp.893-899 (2002).
- 4) Z. Horita, K. Matsubara, K. Makii and T. G. Langdon, "A two-step processing route for achieving a superplastic forming capability in dilute magnesium alloys", Script Materialia, Vol.47, pp.255-260 (2002).
- 5) Y. Saito, H. Utsunomiya, N. Tsujia and T. Sakai, "Novel ultra-high straining process for bulk materials—development of the accumulative roll-bonding (ARB) process", Acta Materialia, Vol.37, No.2, pp.579-583 (1999).
- 6) M. Tanaka, K. Higashida, T. Shimokawa and T. Morikawa, "Brittle-ductile transition in low carbon steel deformed by the accumulative roll bonding process", Materials Transaction, Vol.50, No.1, pp.56-63 (2009).
- 7) A. F. Joffe, "The physics of crystals", p.62 (1928) McGraw-Hill.
- 8) J. Wang, Y. Iwahashi, Z. Horita, M. Furukawa, M. Nemoto, R. Z. Valiev and T. G. Langdon, "An investigation of microstructural stability in an Al-Mg alloy with submicrometer grain size", Acta Materialia, Vol.44, pp.2973-2982 (1996).
- 9) P. B. Hirsch and S. G. Roberts, "Comment on the brittle-to ductile transition: a cooperative dislocation generation instability; dislocation dynamics and the strain-rate dependence of the transition", Acta Materialia, Vol.44, No.6, pp.2361-2371 (1996).
- 10) J. R. Rice, "A path independent integral and the approximate analysis of strain concentration by notches and cracks", Journal of Applied Mechanics, Vol.35, pp.379-386 (1968).
- 11) K. Nakatani, A. Nakatani, Y. Sugiyama and H. Kitagawa, "Molecular dynamics study on mechanical properties and fracture in amorphous metal", AIAA Journal, Vol. 38, No. 4, pp.695-701 (2000).

- 12) N. Matsumoto, R. Matsumoto and N. Miyazaki, "Estimation of shear-banding resistance in metallic glass containing nanocrystalline particle", Journal of Non-Crystalline Solids, Vol.355, pp.29-32 (2009).
- 13) M. Peach and J. S. Koehler, "The force exerted on dislocations and the stress fields produced by them", Physical Review, Vol.80, pp.436-439 (1950).
- 14) R. Gracie, J. Oswald and T. Belytschko, "On a new extended finite element method for dislocations : core enrichment and nonlinear formulation", Journal of the Mechanics and Physics of Solids, Vol.56, pp.200-214 (2008).
- 15) J. Weertman, "Dislocation based fracture mechanics", p.49 (2000) Baihukan.
- 16) T. Shimokawa, "Mechanical properties, deformation and fracture mechanism of nanocrystalline metals by molecular dynamics simulations", Ph.D. thesis, Osaka University (2001).