分子動力学法援用による破壊記述パラメータ*

井上 秀行^{*1}, 赤星 保浩^{*2}, 原田 昭治^{*2}Evaluation of MD-Aided Parameter
in Fracture Mechanics

Hideyuki INOUE, Yasuhiro AKAHOSHI and Shoji HARADA

A molecular dynamics parameter (MDP), which J -integral is expanded to, is proposed for a molecular dynamics (MD) fracture simulation and is applied to a two-dimensional α -iron problem under simple tension. For this model a pair potential described by a polynomial expression is chosen as an interatomic potential. Closely packed lattice structures are assumed in the present calculation. The edge crack arranged in the middle of the analysis body is perpendicular to the tensile loading direction. The brittle fracture is analyzed under the fixed displacement boundary condition in the tensile deformation process. MDP_I is calculated on several paths similarly to J -integral. MDP_I increases slowly before fracture and decreases steeply after that in any path. In order to investigate the validity of MDP_I the critical stress intensity factor K_{IC}^{MDP} is calculated. K_{IC}^{MDP} corresponds well with the decelis and Mullins K_{IC} . MDP value can be applied to an estimation of the initial stage of macroscopic fracture phenomenon with high reliability.

Key Words: Molecular Dynamics, Fracture Mechanics, α -Iron, Crack Propagation, J -integral, Griffith's Crack, Fracture Toughness, Stress Intensity Factor

1. 緒言

近年, 破壊力学の分野では原子スケールで議論することが可能な分子動力学 (Molecular Dynamics: MD) 法を用いて, 幾何学的, 力学的, 熱的な拘束を受ける金属の超微視的破壊機構の解析が試みられている^{(1)・(5)}. MD法を導入する利点は, ニュートンの運動方程式という簡単な表示式によって系の原子運動を捉えることができ, 原子レベルまで遡った不連続現象のシミュレーションが可能になるというところにある. しかし, 周知のようにそのようなスケールと工学で現れる巨視系との間には時間的, 空間的に 10^8 程度のオーダーの開きが存在し, MD法により得られた結果の巨視系への適用については, さらなる検討の積重ねが必要である. また, MD法の出力結果は有限要素解析と同様に膨大で, 物体の破壊現象を簡便に捉えるためには, 連続体力学モデルで用いられる破壊力学パラメータのようなワンパラメータが必要である. すでに辻, 野田ら⁽⁶⁾は分子動力学の計算結果から直接的に K_{IC} の導出を試みているが, K_{IC} は小規模降伏下のみで有効であり, 降伏域を無視できなくなるような条件下での分子

動力学解析では, Riceの J 積分⁽⁷⁾のような弾塑性体に適用できるパラメータを導出することが好ましい. そこで著者らは, 先に J 積分を原子モデルに拡張した分子動力学パラメータ (Molecular Dynamics Parameters; MDP) を提案し, MDPが9%以下の誤差で経路独立性を有することを示した⁽⁸⁾.

本研究では, MDPの適用として単純引張下における極低温 α 鉄MD解析の結果から臨界 MDP_I (MDP_{IC}) と臨界応力拡大係数 K_{IC}^{MDP} を算出を行った. そして既に報告されている K_{IC} 値^{(3),(4)}との比較を行い, パラメータ MDP_I の妥当性を明らかにした.

2. 分子動力学法の概要

分子動力学法では一般に内部自由度を持たない N 個の原子からなる系を考える. それぞれの原子はニュートンの運動方程式に従うものとし, 原子の質量を m_i , ある時刻 t における位置ベクトルを r_i , この原子に働く力を F_i とすると, 運動方程式は次式のように表現される.

* 平成4年11月12日 第5回計算力学講演会において講演, 原稿受付 平成6年3月18日.

^{*1} 正員, 九州工業大学大学院 (〒804 北九州市戸畑区仙水町1-1).

^{*2} 正員, 九州工業大学工学部.

$$m_i \frac{d^2 r_i}{dt^2} = F_i \left(\equiv -\frac{\partial \Phi}{\partial r_i} \right) \dots \dots \dots (1)$$

ただし、 $i=1, 2, \dots, N$ である。式(1)をVerletの方法により数値積分することによって、時々刻々の全原子の位置と速度を追跡することができる。 F_i は系の全ポテンシャル Φ を r_i に関して偏微分することにより求められる。本論文では Φ は2体ポテンシャルからなると仮定すると

$$\Phi = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \phi(r_{ij}) \dots \dots \dots (2)$$

で表され、また F_i は次式

$$F_i = -\frac{\partial \Phi}{\partial r_i} = -\sum_{j=1}^N \phi'(r_{ij}) \hat{r}_{ij} \dots \dots \dots (3)$$

で与えられる。ここで、 $r_{ij} = |r_{ij}|$, $r_{ij} = r_i - r_j$ で、また $\hat{r}$ は単位ベクトルを意味する。

3. MDによる破壊力学パラメータの表示式

巨視破壊力学では、弾塑性状態のき裂先端近傍の力学的特性を表現するパラメータとして J 積分が用いられている⁽⁷⁾。図1にき裂先端を含む領域および用いた座標系と記号を示す。 J 積分は、き裂先端を含む領域 Ω の境界 Γ に沿って行う線積分であり、き裂先端が θ_0 方向に単位長さ移動するときの表示式は次式として与えられる。

$$J = J_1 \cos \theta_0 + J_2 \sin \theta_0 \dots \dots \dots (4)$$

ただし、

$$J_k = \int_{\Gamma} \left(W n_k - \sum_{i=1}^3 T_i u_{i,k} \right) ds \dots \dots \dots (5)$$

ここで、 W はひずみエネルギー密度、 T_i は表面力である。

図1 き裂先端を囲む任意の積分経路

分子動力学シミュレーションにおける解析対象としては図2のような片側縁き裂を入れた2次元原子モデルを考える。式(5)における境界 Γ 上の積分を図中に示す黒丸の M 個の原子総和に置き換えてMD解析用に拡張すると、

$$MDP_k = \sum_{p=1}^M \left(W^p n_k^p - \sum_{i=1}^3 T_i^p u_{i,k}^p \right) A^p \dots \dots \dots (6)$$

が得られる⁽⁸⁾。ここで、 p は積分経路上に位置する原子に与えた通し番号である。また A^p はそれぞれ p 番目の原子が持つ断面積を示す。式(6)の $u_{i,k}^p$ は図3に示すように原子 p の隣接原子との原子中心間距離の初期原子中心間距離に対する k 方向変化量の平均とし、

$$u_{i,k}^p \equiv \frac{1}{M} \left\{ \sum_{q=1}^M \frac{X_k^{pq}(t) - X_k^{pq}(t=0)}{X_k^{pq}(t=0)} \right\} \dots \dots \dots (7)$$

と定義する。ここで X_k^{pq} は原子 p, q 間の原子中心間距離の k 方向成分である。 W^p は原子 p が持つ等価ひず

図2 MDPを導出するための原子配置と総和経路

図3 局所ひずみの決定

みエネルギーであり、解析対象は変位拘束で変形させているのでポテンシャルエネルギーの初期状態からの変化量として、

$$W^p = P.E.^p(t) - P.E.^p(t=0) \dots\dots\dots (8)$$

で与えられる。 T_i^p は境界 Γ 上の表面力であり、

$$T_i^p = \sum_{j=1}^3 \sigma_{ij}^p n_j^p \dots\dots\dots (9)$$

と表わされる。ここで σ_{ij}^p は、

$$\sigma_{ij}^p \equiv \frac{1}{2V^p} \sum_{\substack{q=1 \\ q \neq p}}^N F_i^{pq} r_j^{pq} \dots\dots\dots (10)$$

と定義される。 n_j^p は図4に示すように、隣接する2個の原子と原子中心で結んだ直線の外向き法線ベクト

図4 法線方向の決定

ルの和を規格化したものである。式(10)の V^p には、

$$V^p = \frac{4\pi}{3} (a^p)^3 \dots\dots\dots (11)$$

を用いる。ここで a^p は、

$$a^p = \frac{\sum_{\substack{q=1 \\ q \neq p}}^N (r^{pq})^{-1}}{2 \sum_{\substack{q=1 \\ q \neq p}}^N (r^{pq})^{-2}} \dots\dots\dots (12)$$

で与えられる⁽⁹⁾。また F_i^{pq} は原子 p, q 間の原子間力の i 方向成分であり、 r_j^{pq} は原子 p, q 間の距離の j 方向成分である。

4. 分子動力学パラメータの計算

4.1 解析対象および解析条件 解析対象を図5に示す。deCelisら⁽³⁾とMullins⁽⁴⁾の K_{IC} および解析結果

図5 解析対象と総和経路

図6 ポテンシャルエネルギーの形状

と比較するため、本研究では0.001 Kの極低温状態の定温解析とし、緩和計算することによって原子の速度をほぼ0.0 m/sにした。定温解析の手法としては、速度スケール法を用い、解析温度を一定に保つようにした。時間積分における時間刻み幅 Δt を0.5 psに選ん

表1 解析条件

Number of atoms	a (nm)	b (nm)	$\Delta\epsilon_2$
841	5.24	9.07	5.00×10^{-4}
Mass (kg)	Δt (ps)	Temp. (K)	
9.28×10^{-26}	0.5	0.001	

で(極低温のシミュレーションのため普通の解析よりも大きく選ぶことが可能である), 全ひずみが5.5%になるまで解析対象の最上層と最下層の原子にそれぞれ $\Delta\epsilon_2=0.05\%$ で引張の拘束を与えた. ひずみ増加過程においては, 増加毎に100回の緩和計算を行い, 各ひずみ量で準静的状態に保つようにした. また α 鉄のポテンシャルは次式で定義される $\phi(r_{ij})$ を用いた.

$$\phi(r_{ij}) = a_1(r_{ij} - a_2)^4 + a_3(r_{ij} - a_4)^2 + a_5 \dots \dots (13)$$

ここで, $a_1 = -1.88917 \times 10^3 \text{ eV/nm}^4$, $a_2 = 0.182709 \text{ nm}$, $a_3 = 1.70192 \times 10^2 \text{ eV/nm}^2$, $a_4 = 0.250849 \text{ nm}$, $a_5 = -0.198294 \text{ eV}$ であり, カットオフ距離は0.344 nmであ

(a) $\epsilon_2 = 4.4\%$ (b) $\epsilon_2 = 4.9\%$ (c) $\epsilon_2 = 5.1\%$ (d) $\epsilon_2 = 5.5\%$

図7 き裂伝ば後の変形状態

る⁽¹⁰⁾. 図6にポテンシャルの形状を示す. なお本解析で用いた解析条件を表1にまとめる.

4. 2解析結果および考察 図7に本シミュレーションにおけるき裂発生から破断までの変形状態を示す. その結果, き裂はひずみが4.4%に達した状態で予き裂先端部分から発生し, 破断に至る5.5%まで, き裂先端での鈍化を伴わず直線的に進展していることが明らかになった. 図7で示すように, き裂は X_1 方向のみに伝ばするので以下では MDP_1 は X_1 方向のき裂の伝ばに対して算出し, MDP_1 と表示する.

図8に図2で設定した経路で算出した MDP_1 の全ひ

図8 引張過程におけるひずみに対する MDP_1 の変化 図9 MDP_1 値に対するの各項の変化

ずみに対する変化を示す。き裂発生直前まで MDP_1 値はひずみに対して緩やかに増加し、その後、き裂発生から破断に至るまで減少を続けるという結果が得られた。

式(6)の各項の絶対値の全ひずみに対する変化を図9に示す。ポテンシャルエネルギー項である第1項は、き裂の伝ばに対してほとんど影響を受けず初期状態から緩やかに単調増加している。表面力とひずみの積の項である第2項は、第1項よりもかなり急速に増加し、き裂発生後は急速に減少している。このように第2項は、ひずみに対する MDP_1 の特徴を表す因子であることが分かる。本解析では極低温レベルを取り扱い、図8や図9のような傾向が解析された。今後 MDP_1 の温度依存性を調べることによって、興味ある

解析対象問題の一つである金属の脆性-延性遷移を定量的に解明することができると考えられる。

次に経路の変化によってどの程度 MDP_1 が変動しているかを調べるために、図10に示すようにき裂伝ば後の引張り過程における各経路で算出された MDP_1 を8つの経路で算出された MDP_{1c} の平均で無次元化した MDP_1^* の比較を行った。その結果、それぞれのひずみに対して各経路の MDP_1^* は、き裂発生前では値にはほとんど変化はなく、き裂発生後では変動はしているものの特に著しく大きな変動はない。

最後に MDP_1 が妥当な値であるかを調べるために MDP_{1c} から、臨界応力拡大係数 K_{IC}^{MDP} を算出した。

K_{IC}^{MDP} はき裂先端部の原子の応力 σ_2 とひずみ ϵ_2 を用いて、

$$K_{IC}^{MDP} \equiv \sqrt{\frac{MDP_c \times \sigma_2}{d \times \epsilon_2}} \dots \dots \dots (14)$$

と定義する。ここで、 d (原子直径)による割算は、原子の一層分の一定の厚みを考慮して3次元で MDP_c の計算をしているので、算出された MDP_c を2次元値に変換するための手続きである。本解析により算出された表面エネルギー γ_s 、Griffithの臨界応力拡大係数⁽¹²⁾を K_G^{MDP} とし、 K_{IC}^{MDP} を K_G^{MDP} で無次元化した値を K_{IC}^{MDP*} とする。ここで K_G^{MDP} は次式

$$K_G^{MDP} \equiv \frac{1}{(1-\nu^2)} \sqrt{\frac{2\gamma_s \sigma_s}{\epsilon_s}} \dots \dots \dots (15)$$

で定義され、 σ_s は K_{IC}^{MDP} 時の最上層の y 方向応力の平均、 ϵ_s はその時の全ひずみを示す。また ν (≈ 0.11 ⁽¹¹⁾)はポアソン比を表す。表3に本計算結果と既にdeCelisら⁽³⁾、Mullins⁽⁴⁾によって報告されている結果((010)面上のき裂の解析結果)を示す。本解析において山本らのポテンシャル⁽⁹⁾を用いて算出した表面エネルギー γ_s は 2.25J/m^2 となり、Johnsonポテンシャルを使ったdeCelisらの結果($\gamma_s=1.30\text{J/m}^2$)と比較して大きな値となった。これは2つのポテンシャル形状がほぼ同一であるということから、deCelisらが用いた体心立方構造に比べて本解析では、解析対象が2次元的であり破壊し

(a) き裂発生前

(b) き裂発生後

図10 経路による MDP_1 の変化

表3 応力拡大係数の比較

	Present Study	deCelis ^{(3)†}	Mullins ^{(4)†}
Potential	Yamamoto	Johnson	Morse
γ_s (J/m ²)	2.25	1.30	4.65
K_G (MPa·m ^{1/2})	0.917	0.730	0.748
K_{IC}^*	1.17	1.00 – 1.20	1.05 – 1.20

† Analysis of the crack on the (010) plane.

にくい構造であるためと考えられる。この点を考慮すると、deCelisらの結果より高く算出されたのは妥当であると考えられる。一方Mullinsの結果はMorseポテンシャルを使用しているために本結果に比べてかなり大きな値となっている。これは山本らとJohnsonのポテンシャルが比較的似た曲線形状であるのに対し、Morseポテンシャルがこれら2つのポテンシャルよりも最小ポテンシャル値が深いためである。また K_G^{MDP} は、 $K_G^{MDP} = 0.917 \text{ MPa} \cdot \text{m}^{1/2}$ と算出され、deCelisらの結果、Mullinsの結果よりも大きい値となった。このように算出されたのは、前述したように本解析で用いた解析対象が細密構造であり、体心立方構造よりも頑丈な構造であることが原因であると考えられる。最後に、本解析がぜい性破壊をうまくシミュレートしているかについて調べるために無次元応力拡大係数 K_{IC}^{MDP*} を算出した。その結果 $K_{IC}^{MDP*} = 1.17$ となり、Mullinsの K_{IC}^* の結果、deCelisらの結果の範囲内で計算されていることが分かった。すなわち、両者の報告と同様に本解析は、良好にぜい性破壊を捉えていると考えられる。

以上の解析結果および考察から本研究で導出した MDP_1 が定量的に十分妥当性を有していると考えられる。

5. 結言

本研究では、 J 積分を原子モデルに拡張した分子動力学パラメータ(MDP_k)を提案し、極低温における α 鉄の単純引張問題に対して MDP_k の算出を行った。その結果より、

(1) 単純引張過程において、ひずみ増加に伴い MDP_1 の値は緩やかに増加し、き裂伝ば後は急速に減少することを示した。

さらに MDP_k の妥当性を明らかにするために、表面エネルギー γ_s 、Griffithの臨界応力拡大係数 K_G^{MDP} を求め、き裂発生直前の MDP_1 値(MDP_{1c})から臨界応力拡大係数 K_{IC}^{MDP} を算出した。その結果より、

(2) 表面エネルギー γ_s はJohnsonポテンシャルを用いたdeCelisらの結果⁽³⁾より大きい、Morseポテンシャルを用いたMullinsの結果⁽⁴⁾に対してはかなり小さい値となった。

(3) K_G^{MDP} は $K_G^{MDP} = 0.917 \text{ MPa} \cdot \text{m}^{1/2}$ と計算され、deCelisらの結果、Mullinsの結果よりも大きい値となった。

(4) MDP_{1c} を K_G^{MDP} で無次元化した K_{IC}^{MDP*} は $K_{IC}^{MDP*} = 1.17$ となり、deCelisらの結果およびMullinsの結果と比較してよく一致した値となった。

本報では、 J 積分を原子モデルに拡張したパラメータ MDP が原子レベルにおける局所一応力ひずみ場および破壊を良好に評価することを示した。さらに MDP_{1c} からは妥当な臨界応力拡大係数を導き出すことができた。今後、ワンパラメータに関する研究をさらに発展させるためには、連続体力学的観点からだけではなく、MD独自の破壊記述パラメータの構築も必要であると考えられる。

文献

- (1) 北川・中谷・渋谷, 機論, 59-564, A (1993), 1834.
- (2) Kohlhoff, S., Gumbsch, P. and Fischmeister, H. F., *Philos. Mag.*, A, 64, (1991), 851.
- (3) deCelis, B., Argon, A. S. and Yips, S., *J. Appl. Phys.*, 54 (1983), 4864.
- (4) Mullins, M., *Acta Met.*, 32 (1984), 381.
- (5) 一柳・辻・野田, 機講論, No. 930-73, (1993), 381.
- (6) 辻・野田, 機論, 57-544, A (1991), 2936.
- (7) Rice, J. R., *J. Appl. Mech.*, 35 (1968), 379.
- (8) Inoue, H., Akahoshi, Y. and Harada, S., *Int. J. Fract., Rep. Curr. Res.*, in press.
- (9) Srolovitz, D., Maeda, K., Vitek, V. and Egami, T., *Philos. Mag.*, A, 44-4, (1981), 847.
- (10) 例えば, 田中・山本, 計算物理と計算科学, (1988).
- (11) 井上・赤星・原田, 機講論, No. 930-73, (1993), 365.
- (12) Griffith, A. A., *Philos. Trans. R. Soc.*, 221, A (1920), 163.