粒界構造に起因する微視的応力と局所弾性係数*

北村 隆行^{*1}, 梅野 宜崇^{*1}, 辻 長知^{*2}Atomic Stress and Elastic Coefficient
Caused by Grain Boundary StructureTakayuki KITAMURA^{*3}, Yoshitaka UMEMO and Nagatomo TSUJI^{*3} Department of Engineering Physics and Mechanics, Kyoto University,
Yoshidahonmachi, Sakyo-ku, Kyoto-shi, Kyoto, 606-8501 Japan

Mechanical property of materials is intensively dependent on their atomic structures. In regions with disarranged atomic structures such as grain boundaries, the property can be much different from that in the single crystal. In this study, atomic simulations of a $\Sigma 5$ tilt grain boundary in aluminum are conducted to elucidate distribution of residual stress and local elastic coefficient near the grain boundary. Local stress and elastic coefficient within the range of 0.7 nm from the grain boundary differ from those in grain. The grain boundary consists of two kinds of atomic layers with different elastic coefficient, and this causes the characteristic local stresses.

Key Words: Molecular Dynamics, Numerical Analysis, Tensile Properties, Grain Boundary, Atomic Structure, Mechanical Property, Stress, Elastic Coefficient

1 緒 言

一般に、金属は多くの結晶で構成されている。結晶粒内では原子は規則正しく配列しているが、粒界ではその配列が乱れている。この原子構造については高倍率の透過型顕微鏡による実験観察⁽¹⁾⁻⁽⁴⁾の他、原子系の数値解析⁽⁵⁾⁻⁽⁷⁾が行われてきている。最近では、計算機の性能向上を背景に、第一原理に基づく精密な解析⁽⁸⁾⁻⁽¹²⁾も行われている。

一方、材料の機械的特性は、原子構造に強く依存している。とくに、粒界のように原子配列が乱れている局所においては、その特性は粒内のそれとは大きく異なることが予想される。

応力や弾性係数は、本来は連続体に対して定義された物理量である。連続体近似が成り立たない原子構造体においても、系全体の物理量として定義することができる。しかし、そのままでは粒界のように不均質な部分の局所的な特性値として評価することができない。泉らは、シリコンの粒界を含む系に対して、その系全体の応力や弾性係数を局所的な不均一変位を考慮して評価することに成功している⁽¹³⁾。また、局所応力の定義についても原子系への拡張方法が提案されている⁽¹⁴⁾⁻⁽¹⁷⁾。これを用いて構造体の局

所応力分布を原子レベルから評価する試みも行われている。たとえば、北川ら⁽¹⁸⁾⁻⁽²⁰⁾は、き裂を有する鉄単結晶における分子動力学シミュレーションを行い、き裂先端近傍の局所応力の分布が、連続体力学解析によって導かれているき裂先端近傍の応力場とよく一致することを報告している。しかし、粒界のように原子レベルの構造の乱れを有する系における機械的特性の不均一性や、構造に起因する局所残留応力の分布について詳細に検討した例は見当たらない。

そこで、本研究では、アルミニウムの $\Sigma 5$ 傾角粒界を対象として原子シミュレーションを行い、粒界近傍の残留応力分布を求めるとともに、局所的弾性特性を明らかにする。

2 原子系の応力および弾性係数

原子数 N の系を考える。系のポテンシャルエネルギー E_{tot} は原子の位置ベクトル $\mathbf{r}$ を用いて

$$E_{\text{tot}} = E_{\text{tot}}(\mathbf{r}) \dots\dots\dots (1)$$

と表される多体問題である。すなわち、系のエネルギーに対する原子一個あたりの寄与は厳密には評価できない。一方、原子系の解析では、そのポテンシャルエネルギーを適切な関数で表すことが多い。通常は、

$$E_{\text{tot}} = \sum_{\alpha}^N E^{\alpha} \dots\dots\dots (2)$$

とする。ここで、 E^{α} は原子 α のエネルギーである。以前より用いられている経験的 2 体間ポテン

* 原稿受付 2001 年 8 月 31 日。

^{*1} 正員、京都大学大学院工学研究科 (〒 606-8501 京都市左京区吉田本町)。^{*2} 正員、京都大学大学院。

E-mail: kitamura@kues.kyoto-u.ac.jp

シャルのみならず、有効媒質理論 (Effective Medium Theory: EMT)⁽²¹⁾⁽²²⁾ や原子埋め込み法 (Embedded Atom Method: EAM)⁽²³⁾⁽²⁴⁾ 等の多体ポテンシャルもこの形式となっている。EMT や EAM は粒界等の不均質部位に対しても良い結果を与えることが報告されている⁽²³⁾⁽²⁵⁾⁽²⁶⁾。すなわち、不均質部位を有する場合においても、(2) 式が多体間の相互作用を良い近似で表すことを示している。

一方、系全体の応力は、

$$\sigma_{ij} = \frac{1}{V} \frac{\partial E_{\text{tot}}}{\partial \varepsilon_{ij}} \quad \dots\dots\dots (3)$$

ように、エネルギーのひずみ ε_{ij} に対する微分によって定義される。ここで、 V は系の体積である。泉⁽¹³⁾ は、式 (2) の近似の下で、Martin の内部変位に対する考え方⁽²⁷⁾ を基に、原子 α の位置における局所ひずみが $\varepsilon_{ij} + \xi^\alpha$ で表されるとき、

$$\begin{aligned} \sigma_{ij} &= \frac{1}{V} \sum_{\alpha} \left(\frac{\partial E^{\alpha}}{\partial \varepsilon_{ij}} + \frac{\partial E^{\alpha}}{\partial \xi^{\alpha}} \frac{\partial \xi^{\alpha}}{\partial \varepsilon_{ij}} \right) \\ &= \frac{1}{V} \sum_{\alpha} \left(\frac{\partial E^{\alpha}}{\partial \varepsilon_{ij}} \right) \quad \dots\dots\dots (4) \end{aligned}$$

となることを導いている。ここで、 ε_{ij} は系全体の平均ひずみ、 ξ^α は原子 α のサイトにおけるひずみと平均ひずみとの偏差である。ここで、原子 α の応力を

$$\sigma_{ij}^{\alpha} = \frac{N}{V} \frac{\partial E^{\alpha}}{\partial \varepsilon_{ij}} \quad \dots\dots\dots (5)$$

と定義する。系全体の応力は σ^α を全原子について平均したもの ($\sigma_{ij} = \frac{1}{N} \sum_{\alpha} \sigma_{ij}^{\alpha}$) となっている。

弾性係数 C_{ijkl} は、応力のひずみに対する変化分

$$C_{ijkl} = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial \varepsilon_{kl}} \quad \dots\dots\dots (6)$$

と定義される。泉⁽¹³⁾ の解析に従って、応力と同様に展開すると、

$$C_{ijkl} = C_{ijkl}^0 + C'_{ijkl} \quad \dots\dots\dots (7)$$

$$C_{ijkl}^0 = \frac{1}{V} \sum_{\alpha} \left(\frac{\partial^2 E^{\alpha}}{\partial \varepsilon_{kl} \partial \varepsilon_{ij}} \right) \quad \dots\dots\dots (8)$$

$$C'_{ijkl} = \frac{1}{V} \sum_{\alpha} \left(\frac{\partial^2 E^{\alpha}}{\partial \xi \partial \varepsilon_{ij}} \frac{\partial \xi}{\partial \varepsilon_{kl}} + \frac{\partial^2 E^{\alpha}}{\partial \xi \partial \varepsilon_{kl}} \frac{\partial \xi}{\partial \varepsilon_{ij}} \right) \quad (9)$$

となる。応力の場合と異なり不均質ひずみに関する項 (C'_{ijkl}) がゼロとならないが、これをポテンシャル関数から解析的に求めることは難しい。本解析では粒界近傍の材料特性について検討することを目的としているため、定性的な評価として、均質変形に対する項 C_{ijkl}^0 を対象として検討を進める。

原子 α の弾性係数を

$$C_{ijkl}^{\alpha 0} = \frac{N}{V} \left(\frac{\partial^2 E^{\alpha}}{\partial \varepsilon_{kl} \partial \varepsilon_{ij}} \right) \quad \dots\dots\dots (10)$$

と定義する。系全体の均一変形に対する弾性係数

$$C_{ijkl}^0 \text{ は各原子のその平均 } (C_{ijkl}^0 = \frac{1}{N} \sum_{\alpha} C_{ijkl}^{\alpha 0})$$

となっている。

3 EMT ポテンシャルを用いた場合の局所応力と局所弾性係数

有効媒質理論 (EMT) ポテンシャル⁽²¹⁾⁽²²⁾ は、

$$E_{\text{tot}} = \sum_{\alpha} E^{\alpha} = \sum_{\alpha} E^{\alpha} \{ \zeta_1^{\alpha}, \zeta_2^{\alpha} \} \quad \dots\dots\dots (11)$$

と表される。 ζ_1, ζ_2 は原子 α のサイトにおける電子密度に関する項であり、

$$\zeta_1^{\alpha} = \sum_{\beta \neq \alpha} \phi_1(r^{\alpha\beta}) \quad \dots\dots\dots (12)$$

$$\zeta_2^{\alpha} = \sum_{\beta \neq \alpha} \phi_2(r^{\alpha\beta}) \quad \dots\dots\dots (13)$$

のように、原子 α と β の距離 $r^{\alpha\beta}$ の関数より求められる (具体的な関数形は付録に示す)。EMT は電子密度の影響を考慮した多体ポテンシャルであるが、形式的にはポテンシャルエネルギーは 2 体間の原子間相互作用の総和として記述されているため、各原子についての微視的応力および弾性係数は下記のように求められる。原子に対する応力 (式 (5)) は

$$\begin{aligned} \sigma_{ij}^{\alpha} &= \frac{N}{V} \sum_{\beta \neq \alpha} \frac{\partial E^{\alpha}}{\partial r^{\alpha\beta}} \frac{\partial r^{\alpha\beta}}{\partial \varepsilon_{ij}} \\ &= \frac{N}{V} \sum_{\beta \neq \alpha} \frac{\partial E^{\alpha}}{\partial r^{\alpha\beta}} \frac{r_i^{\alpha\beta} r_j^{\alpha\beta}}{r^{\alpha\beta}} \\ &= \frac{N}{V} \sum_{\beta \neq \alpha} \left(\frac{\partial E^{\alpha}}{\partial \zeta_1^{\alpha}} \frac{\partial \zeta_1^{\alpha}}{\partial r^{\alpha\beta}} + \frac{\partial E^{\alpha}}{\partial \zeta_2^{\alpha}} \frac{\partial \zeta_2^{\alpha}}{\partial r^{\alpha\beta}} \right) \frac{r_i^{\alpha\beta} r_j^{\alpha\beta}}{r^{\alpha\beta}} \\ &\quad \dots\dots\dots (14) \end{aligned}$$

より求められる。一方、原子に対する弾性係数 (式 (10)) も同様に

$$\begin{aligned} C_{ijkl}^{\alpha 0} &= \frac{N}{V} \sum_{\gamma \neq \alpha} \frac{\partial}{\partial r^{\alpha\gamma}} \\ &\quad \times \left\{ \sum_{\beta \neq \alpha} \left(\frac{\partial E^{\alpha}}{\partial \zeta_1^{\alpha}} \frac{\partial \zeta_1^{\alpha}}{\partial r^{\alpha\beta}} + \frac{\partial E^{\alpha}}{\partial \zeta_2^{\alpha}} \frac{\partial \zeta_2^{\alpha}}{\partial r^{\alpha\beta}} \right) \right. \\ &\quad \times \left. \frac{r_i^{\alpha\beta} r_j^{\alpha\beta}}{r^{\alpha\beta}} \right\} \frac{r_k^{\alpha\gamma} r_l^{\alpha\gamma}}{r^{\alpha\gamma}} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{N}{V} \left[\sum_{\gamma \neq \alpha}^N \left\{ \frac{\partial E^\alpha}{\partial \zeta_1^\alpha} \left(\frac{\partial^2 \zeta_1^\alpha}{(\partial r^{\alpha\gamma})^2} - \frac{1}{r^{\alpha\gamma}} \frac{\partial \zeta_1^\alpha}{\partial r^{\alpha\gamma}} \right) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \frac{\partial E^\alpha}{\partial \zeta_2^\alpha} \left(\frac{\partial^2 \zeta_2^\alpha}{(\partial r^{\alpha\gamma})^2} - \frac{1}{r^{\alpha\gamma}} \frac{\partial \zeta_2^\alpha}{\partial r^{\alpha\gamma}} \right) \right\} \right. \\
&\quad \left. \times \frac{r_i^{\alpha\gamma} r_j^{\alpha\gamma} r_k^{\alpha\gamma} r_l^{\alpha\gamma}}{(r^{\alpha\gamma})^2} \right. \\
&\quad \left. + \frac{\partial^2 E^\alpha}{(\partial \zeta_1^\alpha)^2} \left\{ \sum_{\beta \neq \alpha}^N \frac{\partial \zeta_1^\alpha}{\partial r^{\alpha\beta}} \frac{r_i^{\alpha\beta} r_j^{\alpha\beta}}{r^{\alpha\beta}} \right\} \right. \\
&\quad \left. \times \left\{ \sum_{\gamma \neq \alpha}^N \frac{\partial \zeta_1^\alpha}{\partial r^{\alpha\gamma}} \frac{r_k^{\alpha\gamma} r_l^{\alpha\gamma}}{r^{\alpha\gamma}} \right\} \right] \dots (15)
\end{aligned}$$

と求められる。

4 アルミニウム $\Sigma 5$ 傾角粒界近傍の 残留応力と弾性係数

4.1 解析方法 図 1(a) に示すように、中央部に $\Sigma 5$ -(013) 対称傾角粒界を有するセルをシミュレーションモデルとした。粒界構造については、第一原理解析の結果⁽²⁸⁾ を参考に決定した。基本セル内の原子数 N は 312 であり、 x , y , z 方向に周期境界条件を適用した。このため、基本セルの上下端面も $\Sigma 5$ 傾角粒界となる。すなわち、 z 軸に垂直な粒界面が周期的に配列する構造になっている。また、 $\Sigma 5$ 傾角粒界の構造を詳細に調べると、図 1(c) に模式的に示すように、 yz 平面に平行な面上に原子が配列している。また、その平面上の原子配列は、図中に示す Layer A と Layer B の 2 種類だけである。すなわち、粒界面と垂直な Layer A と Layer B が交互に積み重なった形の構造となっている。

Layer A では、基本セル内の同一 z 座標値上に 2 個の原子がある。そこで、図 2 に示すように、セル中央の粒界面からの距離 (すなわち、 z 座標値) ごとに原子をグループ分けし、セル中央に近い方から順に A-1, A-2, ..., A-20 とする。同様に、Layer B に着目すると、セル中央の粒界面からの距離に応じて B-1, B-2, ..., B-19 とグループ分けすることができる。基本セル内には各 Layer が 2 面ずつ含まれているため、基本セル内の各グループの原子数は 4 個である。すなわち、Layer A と Layer B が粒界面に垂直な面群であったのに対して、これらのグループは粒界面に平行な面群となっている。Layers A と Layers B を重ねると、A-1 と B-1 が粒界面となり、 z 軸正方向に A-2, B-2, A-3, ..., A-20, B-20, A-21 と原子面が並ぶ。B-20 と A-21 が基本セル端の粒界面である。

まず、原子間ポテンシャルとして有効媒質理論

Fig. 1 Simulation model of $\Sigma 5$ tilt grain boundary.

Fig. 2 Schematic illustrations explaining atomic planes.

(EMT) を用いて分子動力学解析によって構造緩和を行った。なお、EMT ポテンシャルの粒界構造シミュレーションに対する有効性は、第一原理解析よ

Fig. 3 Distribution of stress, σ_{zz}^{α} , under $\bar{\sigma}_{zz} = 0$ GPa.

Fig. 4 Distance between atomic planes.

り確認している⁽¹¹⁾。分子動力学解析における時間ステップは 3fs とし、毎ステップ原子の運動エネルギーを取り除いた。原子構造は、十分に緩和計算が行われたのを確認した後のものを解析に用いた。また、緩和計算中の粒界を含む系全体の応力 $\bar{\sigma}_{ij}$ は、Parrinello-Rahman 法⁽²⁹⁾⁽³⁰⁾により制御した。さらに、無負荷 $\bar{\sigma}_{ij}=0$ GPa で解析した後、粒界面に垂直な応力 $\bar{\sigma}_{zz}=1$ GPa ($\bar{\sigma}_{ij}$ ($i, j \neq zz$) = 0 GPa) を負荷した条件でも計算した。

4.2 解析結果および考察 系全体に応力が負荷されていない場合 ($\bar{\sigma}_{zz}=0$ GPa) の粒界近傍の局所 (粒界面に対する) 垂直応力 σ_{zz}^{α} を図 3 に示す。横軸は粒界面からの距離であり、基本セル内の同一横断面 (A-l, または, B-m) に属する 4 個の原子における平均とした。 $r=0$ nm がシミュレーションセルの中央の粒界位置であり、 $r=2.54$ nm がセル上端の粒界である。また、応力値も基本セル内の同一横断面の平

Fig. 5 Distribution of stress components under $\bar{\sigma}_{zz} = 0$ GPa.

Fig. 6 Distribution of elastic coefficient, $C_{zzz}^{\alpha 0}$, under $\bar{\sigma}_{zz} = 0$ GPa.

均としてプロットした。参考のため、図の上端には原子グループを示した。図より、 $0.7\text{nm} < r < 1.8\text{nm}$ では $\sigma_{zz}^{\alpha} = 0$ GPa であり、結晶粒内は無負荷となっている。一方、 $r < 0.7\text{nm}$ の粒界近傍では応力は零ではなく、粒界における構造の乱れが応力に影響している。粒界の影響域は粒内に向かって 0.7nm 程度であり、かなり狭い。

粒界面上では 10GPa を越える応力が認められ、構造のなしか寄せが集約されて、高応力となっている。また、興味深いことは、粒界近傍 Layer A 上では圧縮応力となっているのに対して、Layer B 上では引張応力となっていることである。セル全体が無応力であることを考えると、両者が相殺するような残留応力が働いているとみることができ。すなわち、粒界近傍に限っては、初期寸法の異なる 2 つの独立な層 (原子面) に双方の寸法が同じになるような予ひずみを与えた上で、2 層を張り合わせたときに現れるような残留応力分布となっている。

図 4 は、A- l と A- $(l+1)$ の原子面間隔 d_l および B- m と B- $(m+1)$ の原子面間隔 d_m の分布を示す。図より、原子面間隔の分布は、 σ_{zz}^{α} の分布 (図 3) に対応している。つまり、Layer A 上では、 z 軸方向に原子面間隔が狭く、Layer B は原子面の間隔が広い。このことは、上述の予ひずみを与えて張り合わせたひずみ状況と定性的に対応している。

図 5 に σ_{zz} 以外の応力成分を示す。せん断応力成分は、粒界近傍でも小さい。一方、垂直応力成分は粒界近傍で大きな値となっている。本粒界の場合には、その構造の乱れは垂直応力に大きな影響を及ぼしている。

図 6 は、粒界近傍の局所弾性係数 $C_{zzz}^{\alpha 0}$ の分布を

示す。応力と同様に、粒界面から 0.7nm 以上離れた粒内では、弾性係数は一定となっている。また、Layer A と Layer B の差もない。逆に、粒界面から 0.7nm 以内では、粒界による構造の乱れが弾性係数に影響している。この結果からも、粒界が機械的特性に影響を及ぼすのは、 1nm 以下の狭い領域であることがわかる。また、その粒界近傍では、Layer A の弾性係数が大きく、Layer B のそれは小さい。すなわち、粒界近傍では各 Layer があたかも異なる材料のような特性を示している。局所的には、剛な薄膜 Layer A と柔な薄膜 Layer B を交互に積層した複合材料のような構造となっている。図 3 の応力分布の結果と考え合わせると、粒界近傍は機械的特性 (変形抵抗) の異なる Layer A と Layer B に独立に予ひずみを負荷してから張り合わせた複合材料となっていると結論できる。

図 7 に $C_{zzz}^{\alpha 0}$ 以外の主な弾性係数を示す。垂直応力と垂直ひずみの関係を示す $C_{xxx}^{\alpha 0}$ と $C_{yyy}^{\alpha 0}$ は、 $C_{zzz}^{\alpha 0}$ と同様に粒界の影響を強く受けている。一方、せん断応力とせん断ひずみの関係を示す $C_{xyy}^{\alpha 0}$ 、 $C_{yzy}^{\alpha 0}$ 、 $C_{zxx}^{\alpha 0}$ に対するその影響は比較的小さい。

基本セル全体に $\bar{\sigma}_{zz} = 1\text{GPa}$ を負荷したときの、Layers A, B における z 方向垂直応力 σ_{zz}^{α} の分布を実線で図 8 に示す。ただし、図中の破線は図 3 に示した $\sigma_{zz} = 0\text{GPa}$ における σ_{zz}^{α} の分布である。粒内における σ_{zz}^{α} は、外部引張応力の負荷にしたがって 1GPa 程度に増加している。すなわち、粒内には一様な応力が負荷されている。また、粒界の影響域の大きさにも変化がない。一方、粒界近傍においては、Layer A では無負荷の時と比べて σ_{zz}^{α} が 1GPa 以上増加している。これに対して、Layer B では σ_{zz}^{α} がほとんど変化していない。図 9 に模式的に示すような、弾性係数の異なるマクロな積層複合板に引張応力を負荷すると、高弾性係数の層が応力の大半を受け持つことになる。図 6 に示したように、Layer A は粒界近傍において Layer B より高弾性係数となっており、外部応力を負荷した際に、Layer A がその増加分の大半を受け持つ図 8 の結果は、このマクロな複合材料における特性と一致している。これらの結果より、アルミニウム原子のみから構成されているにもかかわらず、粒界近傍は局所的に予ひずみを受けた複合材料と同様の機械的特性となっていることが明らかになった。

5 結 言

結晶粒界の持つ機械的特性を評価することを目的として、アルミニウム $\Sigma 5$ 傾角粒界の原子シミュレー

Fig. 7 Distribution of elastic coefficients.

Fig. 8 Change in distribution of stress, σ_{zz} .

Fig. 9 Schematic illustration explaining composite structure of atomic planes near the grain boundary.

シオンを行い、粒界近傍の残留応力分布および局所的弾性特性を明らかにした。得られた結果は以下のように要約される。

- (1) 外部応力を負荷しない(無負荷)状態において、粒界における原子構造の乱れにより、粒界近傍の原子に残留応力が存在する。その存在範囲は粒界面から 0.7nm 程度である。
- (2) $\Sigma 5$ -(013) 傾角粒界では、粒界面に垂直な方向に 2 種類の原子面が構造に積層している。粒界近傍の残留応力は、一方の原子面(A)では圧縮応力、他方の原子面(B)では引張り応力となる。
- (3) 上記の残留応力は、各原子面での局所的ひずみと対応している。すなわち、本粒界は圧縮と引張りの予ひずみを持った原子層を張り合わせたような構造となっている。
- (4) 局所弾性係数についても、粒界構造の影響を受け、粒界面から 0.7nm 以内で、粒内とは異なる

弾性係数分布となる。粒界近傍の局所弾性係数は、原子面 (A) では高く、原子面 (B) では低い。

- (5) 粒界面に垂直に外部引張り応力を負荷すると、粒界近傍では、原子面 (A) の応力の上昇が顕著であり、原子面 (B) の応力はほとんど増加しない。これは、各層が粒界近傍で異なる局所弾性係数を有することと対応している。
- (6) 上記の特性は、弾性係数の異なるマクロな積層複合版に引張り応力を負荷した場合に、高弾性係数の層が応力の大半を受け持つことと対応している。すなわち、アルミニウム原子のみから構成されているにもかかわらず、粒界近傍は複合材料と同様の機械的特性となっている。

なお、本研究は科学研究費補助金 (萌芽的研究:課題番号 11875027) の援助のもとに行った。

付 録

式 (11)~(13) の EMT の関数形について、アルミニウムに対しては以下のように構築されている⁽²¹⁾⁽²²⁾。

$$E^{\alpha} \{ \zeta_1^{\alpha}, \zeta_2^{\alpha} \} \\ = \tau_0 + \tau_2 \left(\frac{\zeta_1^{\alpha}}{\omega} - 1 \right)^2 + \tau_3 \left(\frac{\zeta_1^{\alpha}}{\omega} - 1 \right)^3 \\ + \xi \zeta_1^{\alpha} - \xi \zeta_2^{\alpha} \dots \dots \dots (16)$$

($\tau_0, \tau_2, \tau_3, \omega, \xi$ はパラメータ) であり、電子密度項 $\zeta_1^{\alpha}, \zeta_2^{\alpha}$ は

$$\zeta_1^{\alpha} = \sum_{\beta \neq \alpha}^N \phi_1(r^{\alpha\beta}) \\ = \sum_{\beta \neq \alpha}^N \exp(-\eta_1 r^{\alpha\beta}) \theta(r^{\alpha\beta}) \dots \dots \dots (17) \\ \zeta_2^{\alpha} = \sum_{\beta \neq \alpha}^N \phi_2(r^{\alpha\beta}) \\ = \sum_{\beta \neq \alpha}^N \exp(-\eta_2 r^{\alpha\beta}) \theta(r^{\alpha\beta}) \dots \dots \dots (18)$$

(η_1, η_2 はパラメータ) である。 θ はカットオフ関数

$$\theta(r) = \frac{1}{1 + \exp\{\nu(r_c - r)\}} \dots \dots \dots (19)$$

ν はカットオフの滑らかさを決める定数、 r_c はカットオフ距離である。なお、各パラメータについては第一原理計算に基づいて求められている。

文 献

- (1) Shamsuzzoha, M., Smith, D.J. and Deymier, P.A., *Scr. Metall. Mater.*, **24**(1990), 1611-1615.

- (2) Krakow, W., *J. Mater. Res.*, **5**(1990), 2658-2662.
- (3) Thibault, J., Putaux, J.L., Jacques, A., George, A., Michaud, H.M. and Baillin, X., *Mater. Sci. Eng., A*, **164**(1993), 93-100.
- (4) Merkle, K.L., *J. Phys. Chem. Solids*, **55**(1994), 991-1005.
- (5) Wolf, D., *Acta. Metall. Mater.*, **38**(1990), 791-798.
- (6) Bishop, G.H., Harrison, R.J., Kwok, T. and Yip, S., *J. Appl. Phys.*, **53**(1982), 5596-5608.
- (7) Kwok, T. and Ho, P.S., *Phys. Rev., B*, **29**(1984), 5354-5362.
- (8) Needels, M., Rappe, A.M., Bristowe, P.D. and Joannopoulos, J.D., *Phys. Rev., B*, **46**(1992), 9768-9771.
- (9) Wright, A.F. and Atlas, S.R., *Phys. Rev., B*, **50**(1994), 15248-15260.
- (10) Ogata, S., Kitagawa, H., Maegawa, Y. and Saitoh, K., *Computational Materials Science*, **7**(1997), 271-278.
- (11) 北村隆行・梅野宜崇, 日本機械学会論文集, **A**, **64**(1998), 2463-2470.
- (12) Kohyama, M. and Hoekstra, J., In Kitagawa, H., Aihara, T. and Kawazoe, Y., editors, *Mesoscopic dynamics of fracture*, 166-175. Springer-Verlag, (1998).
- (13) 泉聡志, 東京大学学位論文, (1999), 55.
- (14) Egami, T., Maeda, K. and Vitek, V., *Phil. Mag., A*, **41**(1980), 883-901.
- (15) Vitek, V. and Egami, T., *Phys. Status Solidi, B*, **144**(1987), 145-156.
- (16) Tsai, D.H., *J. Chem. Phys.*, **70**(1979), 1375-1382.
- (17) Cheung, K.S. and Yip, S., *J. Appl. Phys.*, **70**(1991), 5688-5690.
- (18) 北川浩・中谷彰宏, 日本機械学会論文集, **A**, **59**(1993), 256-262.
- (19) 北川浩・中谷彰宏・渋谷陽二, 日本機械学会論文集, **A**, **59**(1993), 1834-1841.
- (20) Kitagawa, H., Nakatani, A. and Shibutani, Y., *Mater. Sci. Eng., A*, **176**(1994), 263-269.
- (21) Jacobsen, K.W., Nørskov, J.K. and Puska, M.J., *Phys. Rev., B*, **35**(1987), 7423-7442.
- (22) Stoltze, P., *J. Chem. Phys.*, **92**(1990), 6306-6321.
- (23) Daw, M.S. and Baskes, M.I., *Phys. Rev., B*, **29**(1984), 6443-6452.
- (24) Foiles, S.M., Daw, M.S. and Baskes, M.I., *Phys. Rev., B*, **33**(1986), 7983-7991.
- (25) 尾方成信, 大阪大学学位論文, (1998), 168.
- (26) Stoltze, P., *J. Phys. Condens. Matter*, **6**(1994), 9495-9517.
- (27) Martin, J.W., *J. Phys., C*, **8**(1975), 2858-2868.
- (28) 尾方成信・北川浩・中谷彰宏・齋藤賢一・前川幸弘, 日本材料学会第1回分子動力学シンポジウム講演論文集, (1995), 39-44.
- (29) Parrinello, M. and Rahman, A., *J. Appl. Phys.*, **52**(1981), 7182-7190.
- (30) Parrinello, M. and Rahman, A., *Phys. Rev. Lett.*, **45**(1980), 1196-1199.