Fe 単結晶におけるモード I 貫通き裂の局所格子不安定性解析 (周期境界下のき裂配置の影響)

屋代 如月^{*1}, 片山 寛^{*2}, 西川 涼一郎^{*3}, 吉原 大志^{*3}

Local lattice instability analysis on mode I through cracks in single crystalline Fe (Effect of crack array under periodic boundary condition)

Kisaragi YASHIRO^{*1}, Hiroshi KATAYAMA^{*2}, Ryoichiro NISHIKAWA^{*3}
and Taishi YOSHIHARA^{*3}

^{*1} Faculty of Engineering, Gifu University
1-1 Yanagito, Gifu-shi, Gifu 501-1193, Japan

^{*2} Graduate School of Engineering, Kobe University
1-1 Rokkodai, Nada-ku, Kobe 657-8501, Japan

^{*3} Faculty of Engineering, Gifu University
1-1 Yanagito, Gifu-shi, Gifu 501-1193, Japan

Received 15 May 2015

Abstract

As a series study which clarify the local stability at crack tip based on the positiveness of atomic elastic stiffness (AES), mode I type loading is applied on the periodic slab cell of bcc-Fe with single center crack and double cracks at the center and corner, by using molecular dynamics simulation. All the [001](010), [001](110) and $[\bar{1}\bar{1}2](111)$ cracks shows propagation with cleavage cracking, under the condition of fixing the periodic cell length except in the loading direction. The [001](110) and $[\bar{1}\bar{1}2](111)$ cracks show immediate fracture without remarkable plastic deformation, and it is found that the number of negative AES atoms at the stress-strain peak or the limit of crack propagation is almost constant despite of the different mechanical condition of crack array. The critical domain of negative AES for crack propagation is evaluated as about 40 and 25 atomic lines per crack tip, for the [001](110) and $[\bar{1}\bar{1}2](111)$ cracks, respectively. The [001](010) cracks show dislocation emission and twin formation before cleavage cracking, and we can't distinguish the negative AES at the twin boundary and cleavage cracking, so that we can't define simple criteria as mentioned above. Finally we evaluate the eigenvalue of the AES as the further investigation of the unstable mode of the negative AES. It is natural that the emergence of negative 1st eigenvalue reflects the loss of positiveness of AES determinant; however, the $[\bar{1}\bar{1}2](111)$ cracks show negative 2nd eigenvalue just after the stress-strain peak (single crack model) and just before it (double crack model). The atoms with negative 2nd eigenvalue are observed just at the tip of cleavage cracking as 1 or 2 atomic line in the first stage of unstable cracking; however, they are also observed in the various position, *e.g.* boundary of the local phase transformation, in the later stage toward the final fracture.

Key words : Local lattice instability, Atomic elastic stiffness coefficient, Crack, Bcc-Fe, FS potential

1. 緒 言

著者らのグループでは、Wang らにより提案された有限変形・温度下の結晶の安定性基準 (*B* クライテリア) (Wang, et al., 1993) に着想を得て、ナノメートル領域における変形・破壊メカニズムを原子弾性剛性係数 (Atomic Elastic Stiffness; AES) の正值性 (局所格子不安定性) で統一的に議論することを検討してきた (屋代, 富田, 2001) (Yashiro, et al., 2006) (屋代, 藤原, 2011)。その最大の動機は解説記事 (屋代, 2008) にも記載しているが、真の材料特性を再現できる (と証明できる) 原子間ポテンシャルが存在しない現状においては (時間スケールの隔たりを考えると第一原理分子動力学も例外ではない), 見出した局所変形メカニズムの開始条件を普遍的・定量的な議論に結びつける有力な指標がないためである。応力拡大係数などの連続体理論をよりどころにしようとすれば、き裂先端の原子構造に起因したわずかな違いなどは議論できず、連続体理論の有効性を追認する、または、モデル材料における適用限界を示すのみとなる。一方、局所応力やひずみ、ポテンシャルエネルギー等、原子レベルでの物理量で局所変形の開始条件を議論しても、実際の材料とは異なるモデル材料のケースバイケースの結果に終始してしまう可能性がある。そこで、各原子位置における AES の正值性をひとつの明確な基準として、変形メカニズムを統一的に議論することで、モデル材料のシミュレーション結果から普遍的な支配力学法則の解明につなげることを目的としてきた。fcc の Ni をはじめとして、アモルファス金属、bcc-Fe、そしてダイヤモンド構造の Si など多くの検討を行ってきた結果、ぜい性材料の Si では負の AES 原子の発生が系全体の不安定挙動 (応力急減) のトリガーになるなど (屋代, 藤原, 2011)、「負の AES 原子の発生 = 不安定挙動の開始」と解釈できる場合もあるが、金属の場合は欠陥 (転位や変形双晶) の発生・伝ばの際には確かに負の AES 原子が観察されるものの、負の AES 原子の出現 = 局所変形の開始とは限らないケースも多い、などを明らかにしている。特にひずみ制御で bcc-Fe に [001] 方向への引張りを行った場合は、すべての原子の AES が負、すなわち系全体の不安定条件 (Wang の *B* クライテリア) に達しても非弾性変形を生じず、正弦波のような滑らかな応力-ひずみ曲線を示した後に内部に原子配置の乱れを生じて応力が急減することを報告している (Yashiro and Yamane, 2014)。これは、応力制御で引張りを行えば、転位などの局所変形の開始よりも先に相変態のような全体的な構造変化を生じて変形抵抗を喪失することを意味する。このような系と局所の不安定条件の関係を理解すると、この bcc-Fe の引張りでは *B* クライテリアが先に現れるため、その後に観察した局所変形メカニズムを議論しても意味がないことに気づく。

これまでは系の不安定挙動と局所不安定の関係を明らかにすることに重きを置いていたため、バルク完全結晶の議論をメインに、表面や粒界などの構造不均一を取り入れた解析を順次行ってきた。前報 (Yashiro, et al. 2015) では初めて bcc-Fe のモード I 型貫通き裂に本 AES 解析を適用し、[001](010), [001](110), $\bar{1}\bar{1}2$ (111) の結晶方位 ([き裂軸方向][き裂面]) で、薄板状周期セル中でき裂長さを変えた検討を行った。分子動力学シミュレーションによるき裂進展挙動の解明は古くから試みられており、限られた計算資源の中でモデル化すべく周囲を弾性体とリンクした解析 (Mullins, 1982) をはじめとして、大規模計算による動的進展挙動 (Abraham, et al., 1994) など広範多岐にわたる。また、第一原理計算によって、き裂先端の格子の開口・トラッピングという視点からシリコンのき裂進展を検討した研究 (Pérez and Gumbsch, 2000) や、同じくシリコンの [001](110) き裂について、き裂先端形状を 1 格子分とした極めて理想化した条件ではあるが、き裂寸法・外部負荷条件の違いにかかわらず、き裂進展時にはいずれも先端 0.4~0.6 nm 程度の領域 (1 格子程度) のみ不安定となっていることを、原子自由度による不安定解析 (並進・回転運動を除いた全自由度でエネルギーのヘッシアンを評価する解析) で示した研究もある (Shimada, et al., 2015)。ただし、原子レベルでのき裂先端がどのような形状・力学状態にあるのか、現時点では我々には知る手立てはなく、様々な材料における破壊の複雑なプロセスを考えると、原子シミュレーションでの検討が網羅されつくしたとは言えない。例えば Shimada らの研究は、き裂進展条件を格子不安定性で特定した決定的な報告と考えられるが、き裂が鈍化した場合や有限温度下での適用可能性には議論の余地が残されている。著者らの AES 解析は、通常の原子シミュレーション中で容易に評価できるので、非常に乱れた構造・有限温度下でのき裂先端の力学状態に新しい知見を与えるものと考えられる。このような動機の下で行ったのが前報 (Yashiro, et al., 2015) であり、ぜい性的なき裂進展を示した [001](110), $\bar{1}\bar{1}2$ (111) では、進展開始時の特徴的な点として、前者はき裂先端の負の AES 原子分布形状がき裂長さが異なる系で互いに相似であること、後者は AES の第二固有値も負になった原子がき裂前縁に観察されたこと、などが明らかとなっている。き裂を含む系の不安定挙動を議論するためには、無限体中の単一き裂の解析が望ましいが、弾性連続体-原子系界面など別の問題を生じる可能性があるため、本報では

周期境界下でのき裂配置を変えた解析を行い、周期構造によらないき裂進展条件を AES の観点から明らかにすることを目的とする。なお、前報ではき裂進展方向の垂直応力を 0 に制御したのに対し、本報ではセル長さを固定としたため、特に [001](010) き裂の挙動が前報とは大きく異なることを注記しておく。

2. 解 析 条 件

原子間ポテンシャルの評価には FS ポテンシャルを用いた。FS ポテンシャルでは系のエネルギーは以下のように個々の原子のエネルギー寄与 E^α の和で表される (Finnis and Sinclair, 1984)。

$$E_{\text{tot}} = \sum_{\alpha} E^{\alpha} = \sum_{\alpha} \left\{ \frac{1}{2} \sum_{\beta \neq \alpha} V(r^{\alpha\beta}) - A f(\rho^{\alpha}) \right\} \quad (1)$$

$r^{\alpha\beta}$ は原子 α と β の間の距離、 $V(r^{\alpha\beta})$ は 2 体間項、 $f(\rho^{\alpha})$ は密度 ρ^{α} の位置における多体項である。各パラメータの値および関数の詳細については原論文を参照されたい。

原子エネルギー寄与のひずみ摂動に対する 1 次、2 次導関数をそれぞれ原子応力、原子弾性係数として以下のように定義する (屋代, 富田, 2001)。

$$\sigma_{ij}^{\alpha} = \frac{1}{\Omega} \frac{\partial E^{\alpha}}{\partial \varepsilon_{ij}} = \frac{1}{\Omega} \sum_{\beta \neq \alpha} \left\{ \frac{1}{2} V'(r^{\alpha\beta}) - A f'(\rho^{\alpha}) \phi'(r^{\alpha\beta}) \right\} \frac{r_i^{\alpha\beta} r_j^{\alpha\beta}}{r^{\alpha\beta}} \quad (2)$$

$$C_{ijkl}^{\alpha} = \left[\frac{1}{2} \sum_{\beta \neq \alpha} \left\{ V''(r^{\alpha\beta}) - \frac{V'(r^{\alpha\beta})}{r^{\alpha\beta}} \right\} \frac{r_i^{\alpha\beta} r_j^{\alpha\beta} r_k^{\alpha\beta} r_l^{\alpha\beta}}{(r^{\alpha\beta})^2} - A f'(\rho) \sum_{\beta \neq \alpha} \left\{ \phi''(r^{\alpha\beta}) - \frac{\phi'(r^{\alpha\beta})}{r^{\alpha\beta}} \right\} \frac{r_i^{\alpha\beta} r_j^{\alpha\beta} r_k^{\alpha\beta} r_l^{\alpha\beta}}{(r^{\alpha\beta})^2} - A f''(\rho) \left\{ \sum_{\beta \neq \alpha} \phi'(r^{\alpha\beta}) \frac{r_i^{\alpha\beta} r_j^{\alpha\beta}}{r^{\alpha\beta}} \right\} \left\{ \sum_{\beta \neq \alpha} \phi'(r^{\alpha\beta}) \frac{r_k^{\alpha\beta} r_l^{\alpha\beta}}{r^{\alpha\beta}} \right\} \right] / \Omega \quad (3)$$

ここで $'$ は微分を表し、下付き文字 $i \sim l$ は直交座標における自由指標、 $r_i^{\alpha\beta}$ はベクトル $\mathbf{r}^{\alpha\beta}$ の i 方向成分、 Ω は原子体積である。結晶の熱力学関係より、弾性係数 C_{ijkl} が応力-ひずみ関係の係数となるのは無負荷平衡状態または線形弾性の範囲内に限られ、無負荷でない場合の $\Delta\sigma_{ij}/\Delta\varepsilon_{kl}$ 関係を表すのは弾性剛性係数である (Wallace, 1972)。本研究では、Voigt 対称性を持たせた次の式で原子弾性剛性係数を評価する。

$$B_{ijkl}^{\alpha} = C_{ijkl}^{\alpha} + (\sigma_{il}^{\alpha} \delta_{jk} + \sigma_{ji}^{\alpha} \delta_{ik} + \sigma_{ik}^{\alpha} \delta_{jl} + \sigma_{jk}^{\alpha} \delta_{il} - \sigma_{ij}^{\alpha} \delta_{kl} - \sigma_{kl}^{\alpha} \delta_{ij}) / 2 \quad (4)$$

ここで δ_{ij} はクロネッカーのデルタである。直交座標の自由指標の組 (xx, yy, zz, yz, zx, xy) を (1, 2, 3, 4, 5, 6) と割り当てると、4 階のテンソル B_{ijkl}^{α} は 6×6 のマトリックス B_{ij}^{α} ($i, j = 1 \sim 6$) で表すことができる。前報と同じく、 B_{ij}^{α} の正值性を行列式 $\det B_{ij}^{\alpha}$ の正負で判定するとともに、さらに $B_{ij}^{\alpha} \varepsilon_j = \eta^{\alpha} \varepsilon_j$ の固有方程式の解 $\eta^{\alpha(k)}$ ($k = 1 \sim 6$) を各原子について求めた。なお、原子体積 Ω は、表面や粒界等では厳密な定義に議論の余地があるが、行列式の正負や固有値の正負には影響しないので、ここでは 0K バルクの平均体積 ($\Omega = a^3/2$, a は格子長さ) としている。

図 1 に示すように、前報と同じく薄板状周期セルの中央に貫通き裂を配置した系 (単一き裂モデル) と、セルの四隅に 1/4 貫通き裂を配置した系 (ダブルき裂モデル) を解析対象とする。 x, y, z 方向のセルの寸法は、[001](010), [001](110), $[\bar{1}\bar{1}2](111)$ それぞれで $100a \times 100a \times 6a$, $70\sqrt{2}a \times 70\sqrt{2}a \times 6a$, $70\sqrt{2}a \times 50\sqrt{3}a \times 3\sqrt{6}a$ (a は Fe の格子長さ 0.287 nm) であり、原子数は約 12 万である。き裂長さ $2c$ はセルの x 辺長 L_x に対して $2c = 0.2L_x$ に統一している。き裂変位 h とき裂先端の曲率半径 R は $h = 2R = 0.6$ nm としており、原子間ポテンシャルのカットオフ距離 0.357 nm より h は大きく、 R はグリフィスキ裂の条件 $R < \sqrt{8a/\pi}$ を満たしている。ただし、 R が小さいため、離散格子点から原子を取り除いた後のき裂先端形状はほぼ矩形である。

いずれも、全方向周期境界の元で垂直応力が 0 となるようにセル辺長を調整しながら 10000 fs の緩和計算を行った後、 x, z 方向のセル辺長を固定して y 方向にひずみ増分 $\Delta\varepsilon_{yy} = 1.0 \times 10^{-7}$ を毎ステップ与えることにより引張シミュレーションを行った。温度は 0.1K とし、速度スケールにより制御している。応力-ひずみ曲線、ならびに、き裂進展挙動を観察するとともに、1000 fs ($\Delta\varepsilon_{yy} = 0.0001$) 毎に記録した原子配置データから各原子位置における B_{ij}^{α} を評価し、 $\det B_{ij}^{\alpha}$ および固有値 $\eta^{\alpha(k)}$ (固有値は 5000 fs 毎のデータ) を調べた。

Fig. 1 Simulation models.

Fig. 2 Stress – strain curves.

3. 解析結果および考察

3.1 応力-ひずみ曲線，き裂進展挙動

図2に応力-ひずみ曲線を示す．いずれも，き裂の数が多い(b)の方が(a)に比べて応力ピークのひずみが大きくなっており，き裂配置・密度による応力遮蔽効果と考えられる．後述するように大きく塑性変形を生じる[001](010)ではその差が顕著である．き裂進展方向の応力を0に制御した前報では，[001](010)のき裂は塑性変形により鈍化しき裂が進展することはなかったが，本解析ではいずれもへき開を生じて応力急減を示した．[001](110)と $\bar{1}\bar{1}2$ (111)き裂は，前報と同様に結晶方位が異なるにもかかわらずほぼ同じような応答を示している．

図3および図4に，変形の様子をAtomEye(Li, 2003)のMises ひずみで色分けして示す．Mises ひずみは0～0.2の範囲で色分けしており，ひずみが大きいほど暖色となる．[001](010)き裂では，き裂先端からの転位射出 変形双晶の形成により Mises ひずみが高い帯状領域が観察され，単一き裂モデル(図3(a))では，これが周期境界条件

Fig. 3 Snapshots of atoms colored with Mises strain in AtomEye (single crack model).

下でセルを横断するひずみ約 0.06 近傍で応力-ひずみ応答に小さな変化が現れる (図 2(a))。ひずみ 0.0742 の最初のピークは、変形双晶の帯がセル上下端の中央で接続しており、き裂両端から発生した双晶帯が周期境界下で会合した点に相当する。その後、応力は再び上昇し始めるものの、ひずみ 0.078 でへき開き裂を生じ応力が急減した。この時、はじめは双晶帯方向に沿うようにき裂が進展したが、その後、双晶帯が互いにずれるように 90° 方向に進展し、その前縁に双晶帯が観察される (図 3(a)(v))。一方、ダブルき裂モデルでは複数の変形双晶帯が形成されており、ピーク前の応力-ひずみ応答の変化は明確でなくなる (図 4(a))。ピーク後すぐに $(10\bar{1})$ 面でへき開き裂が発生し、双晶帯が互いにずれるように進展している (図 4(a)(v))。[001](110) き裂は、単一モデルでは前報 (Yashiro, et al. 2015) で報告したように中央のき裂面 (110) に沿ったき裂進展・破断を示した。ダブルき裂モデルでは、まずセル中央き裂の右側と、セル上下端のき裂の左側に同時に進展し始め、途中からセル上下端のき裂成長が支配的になり破断は上下端のき裂面で生じた。 $[\bar{1}\bar{1}2](111)$ き裂は、 x 軸から約 $\pm 23^\circ$ 傾いた方向にへき開き裂が進展しているが、詳細に観察すると約 30° のへき開面が階段状に形成されており、複数のへき開面で生じていることが示唆される。へき開面の結晶構造については固有値に関する節で述べる。単一、ダブルき裂とも進展したき裂方向が周期境界下では連結しないため、ごく一部でつながった、 23° 方向のスリットが並んだ構造でき裂進展が停止し、一定の応力で引張り方向に延伸し続ける。

3.2 AES 行列式の正值性による検討

図 5 に $\det B_{ij}^a$ が負となった原子数の変化を示す。いずれも、引張り前には負の原子は存在しない。初めて AES が負の原子が現れるのは単一、ダブルき裂モデルでほとんど差がなく、[001](010)、[001](110) き裂はひずみ 0.022 ~ 0.024、

Fig. 4 Snapshots of atoms colored with Mises strain in AtomEye (double crack model).

Fig. 5 Change in the number of negative $\det B_{ij}^\alpha$ atoms.

Fig. 6 Snapshots of atoms at emerging point of negative AES atoms (red circles).

Table 1 Number of negative AES atoms at stress-strain peak.

	[001](010) crack	[001](110) crack	$[\bar{1}\bar{1}2](111)$ crack
single crack model	3692(3008)	426	131
double crack model	4465	984	311

$[\bar{1}\bar{1}2](111)$ き裂は約 0.032 である．そのときの負の AES 原子数は，[001](010) き裂では単一・ダブルモデルに関わらず一箇所のき裂先端に 12 個，[001](110)， $[\bar{1}\bar{1}2](111)$ き裂では，単一モデルでは片側のき裂先端に 6 個，ダブルモデルではひとつのき裂の両側の先端に 6 個ずつ生じていた．図 6 に単一き裂において負の AES 原子が初めて現れたときのき裂近傍のスナップショットを，AES が負の原子を赤く着色して示す．[001](010)，[001](110) き裂はいずれもき裂先端の [001] 方向の原子列が負の AES となっている． $[\bar{1}\bar{1}2](111)$ き裂は，平らになったき裂先端とき裂表面の角部において，模式図 (d) の O-O' に対応する $[\bar{1}\bar{1}2]$ 方向の原子列が負になっている．

図 5 中に示した矢印は応力-ひずみのピーク点に対応する．各点における負の AES 原子の数を表 1 にまとめて示す．ただし，単一モデルの [001](010) き裂については，へき開き裂が発生した第 2 ピークの値を記し，第 1 ピークでの値は括弧の中に記載している．き裂進展前にほとんど塑性変形（転位射出等の非弾性変形）を生じない [001](110)， $[\bar{1}\bar{1}2](111)$ き裂では，応力ピーク = 引張限界における負の AES 原子の数はダブルき裂モデルは単一き裂モデルのほぼ倍となっており，き裂配置により異なる力学状態となっているにもかかわらず，き裂進展直前の負の AES 原子数はほぼ一定であることが示唆される．単一・ダブルき裂モデルでの値の合計を，き裂先端の数 6 で割って平均した臨界原子数は [001](110) き裂は 235， $[\bar{1}\bar{1}2](111)$ き裂は 74 となる．図 7 に，ピーク点における [001](110)， $[\bar{1}\bar{1}2](111)$ き裂近傍の負の AES 原子の分布を，AtomEye の central symmetry parameter (以下 CSP と略記) で欠陥のみ可視化した図とあわせて示す．AtomEye の default 値 0.01(FCC/HCP の intrinsic 積層欠陥の可視化に用いられる値) では欠陥構造が判別できず，閾値を 0.001-0.4 と設定すると右列の図のように欠陥構造が確認できる．このように，局所構造の対称性による可視化では閾値の与え方に任意性があるが，AES の場合は正負のため閾値によって変わることはない．ダブルき裂モデルでは中心き裂のみ拡大して表示しているが，四隅に配置したき裂もほぼ同じ分布を示している．[001](110) き裂では，CSP でもき裂先端からループ状の転位が形成されはじめていることが確認できる．これが一定の大きさになったときにき裂進展することが，き裂先端の AES 分布・欠陥形状が単一・ダブルモデルでほとんど同じであることから示唆される．この臨界寸法は先述の負の AES 原子 235 個に対応する．一方， $[\bar{1}\bar{1}2](111)$ き裂の場合，CSP では閾値を変えてもき裂表面の原子とほとんど区別がつかない．一方，負の AES 分布を見ると，き裂先端の上下に負の原子列が存在することが明確に示される．先の図 6(c) で示したように一原子列には 3 個の原子が存在するので， $74 \div 3 \approx 25$ ，すなわち一箇所の不安定原子群は $25 \div 2$ (き裂先端上下) ≈ 13 原子列程度と見積もられる．[001](110) き裂と同様に，単一・ダブルモデルと異なる力学状態にも関わらず，負の AES 原子群はほとんど同じ分布を示している．

[001](010) き裂は塑性変形を含むため単純ではなく，負の原子数は倍とはならない．図 8 に [001](010) 単一き裂モデルの第 1, 第 2 ピーク時のスナップショットを，AES の正負および CSP で示す．単一き裂モデルでは，第 1 ピークは変形双晶の前縁（転位）が会合する直前，第 2 ピークは変形双晶帯が周期境界下でひとつになったとき

Fig. 7 Snapshots of atoms colored by AES and defect visualization by central parameter of AtomEye.

であることが示唆される．ダブルき裂モデルでは中心き裂の双晶帯と四隅のき裂からのそれが会合した点に対応する．この時点ではへき開は発生していないため，さらに詳細に AES による観察を続けると図 9 に示すようにへき開直前に負の AES が発生しているのが確認できた．図中丸で囲ったように，ピークから 3000~4000 fs 後ぐらいにき裂先端表面に負の AES 原子列が生じ，その直後にへき開き裂が発生している．

3.3 固有値による検討

すべての原子の B_{ij}^{α} マトリックスの固有値の変化を調べた結果，前節で示した負の AES が出現するひずみは負の第一固有値を有する原子が出現する点と完全に対応している．第二固有値については，き裂進展方向の応力制御をしていない今回の結果では， $[001](010)$ き裂はへき開により進展したが，前報と同様に $[\bar{1}\bar{1}2](111)$ き裂以外では第一固有値以外が負になることはなかった．図 10 に $[\bar{1}\bar{1}2](111)$ き裂における負の第二固有値を持つ原子数の変化を示す．前報で報告したように，単一き裂モデルでは負の第二固有値が現れるのは応力-ひずみのピーク直後である（ピークひずみ点では 0）．一方，ダブルき裂モデルではピーク点よりごくわずかに前のひずみで負の第二固有値を持つ原子が出現している．

Fig. 8 Snapshots of atoms colored by AES and defect visualization by central symmetry parameter of AtomEye ([001](010) crack).

Fig. 9 Detail of negative AES atoms at the onset cleavage cracking. ([001](010) crack).

図 11 に、 $[\bar{1}\bar{1}2](111)$ き裂の応力ピーク直後のき裂進展の様子を、第一固有値が負になった原子を橙色、第二固有値が負になった原子を赤で着色して示す．原子構造を透過して構造変化をわかりやすくするため、これまでの図より半径の小さな円で描いている．中心のき裂は、き裂部分の原子を切り出す際に左端では切り出し前縁が (110) 原子面に接した条件であったため、引張下でも矩形が保たれ底部はひとつの (110) 面で構成されている．一方、右端は切り出し前縁が (110) 原子面にかかり原子列が取り除かれているため、き裂前縁がよりとがった形状となっている．このため、単一き裂モデルでは右側のき裂からへき開を生じるが、図 (a)(ii) に小さな丸で囲ったように、へ

Fig. 10 Change in the number of negative $\eta^{\alpha(2)}$ atoms ($[\bar{1}\bar{1}2](111)$ crack). Fig. 11 Snapshots of atoms colored by positiveness of eigenvalue $\eta^{\alpha(1)}$ and $\eta^{\alpha(2)}$.

き開き裂の前縁と、破線で囲った相変態領域の一部に第二固有値が負になった原子列（図 6(d) の O-O' 方向の 3 原子）が確認できる．その後，図 (a)(iii) に示したように相変態領域が移動してき裂が進展するが，この動的な過程においては常にき裂先端に $\eta^{\alpha(2)} < 0$ の原子列が観察されるとは限らず，相変態の界面などに観察されている．図 (a)(iii) のへき開面が x 軸となす角度は，下側は約 18° ，上側は約 30° である．図 12 は $[\bar{1}\bar{1}2]$ 面上の原子の位置関係を示したもので，bcc 単位格子の底面をひし形で示し，対角線上の頂点原子と，奥側の格子の中心原子のみ表示している．原点の原子から $(1.5a, -0.5a, 0.5a)$ の原子へのベクトルが x 軸となす角度は $\cos^{-1} \theta = 4/\sqrt{22} = 31.5^\circ$ ， $(2.5a, -1.5a, 0.5a)$ の原子へのベクトルがなす角度は $\cos^{-1} \theta = 8/\sqrt{70} = 17.0^\circ$ であることから（図 12），これらのベクトルと $[\bar{1}\bar{1}2]$ の外積より新しいき裂表面は上側が $(5\ 11\ 8)$ ，下側が $(1\ 7\ 4)$ と算出される．

ダブルき裂モデルでは，四隅に配置したき裂はほぼ対称な形状をしており，ピーク直後はまず右側のき裂で $\eta^{\alpha(2)} < 0$ の原子列と相変態領域が観察される（図 (b)(i)）．しかしながら，き裂底に 1 原子列残った形状となったた

Fig. 12 Schematic of cleavage surface line on the $[\bar{1}\bar{1}2]$ plane.

めか、その後左側のき裂に $\eta^{\alpha(2)} < 0$ の原子列が発生して上述のような $(1\ 7\ 4)-(5\ 11\ 8)$ 面でのへき開き裂が発生し、このき裂進展が支配的になった。中央のき裂は、応力-ピーク直前には右側がすでに進展し始めており、応力急減時の複雑な動的過程においてき裂先端での $\eta^{\alpha(2)} < 0$ 原子列も観察されるが（図 (c)(ii)）、前述の図 (b)(iii) の左のき裂が支配的になり、変形後期にはき裂が閉口している。

負の固有値は、 $\{\Delta\sigma_i\} = [B_{ij}^{\alpha}]\{\Delta\varepsilon_j\} = \eta^{\alpha}\{\Delta\varepsilon_i\}$ となる固有ベクトル $\{\Delta\varepsilon_i\}$ によって、変形増加に対して応力が減少する経路の存在を意味する。今回は固有値にのみ着目したが、第一、第二固有値の物理的意味を明らかにするためには固有ベクトルの詳細を検討する必要がある、今後の検討課題としたい。

4. 結 言

原子弾性剛性係数 (AES) の正值性に基づいて bcc-Fe のモード I 貫通き裂の進展挙動を議論するため、薄板状周期セル中央に貫通き裂を有する単一き裂モデル、中央および四隅に $1/4$ 貫通き裂を有するダブルき裂モデルの引張シミュレーションを行った。得られた結果をまとめて以下に記す。

- (1) き裂進展方向の応力を 0 に制御しない条件では、 $[001](010)$, $[001](110)$, $[\bar{1}\bar{1}2](111)$ き裂のいずれもへき開によるき裂進展挙動を示した。
- (2) ほとんど塑性変形を生じずにへき開き裂が進展した $[001](110)$, $[\bar{1}\bar{1}2](111)$ では、応力-ピーク = き裂進展限界における負の AES 原子数は、ダブルき裂モデルは単一き裂のほぼ倍となり、き裂あたりに換算するとほぼ一定値となることが示された。
- (3) (2) の臨界原子数（き裂先端数あたり）は、 $[001](110)$ き裂が 235, $[\bar{1}\bar{1}2](111)$ き裂は 74 である。き裂軸方向の原子列に換算するとそれぞれ 40, 25 となる。前者はき裂先端から発生した転位ループが一定の大きさ (15 nm 程度) になったときに対応していたが、後者は明確な欠陥は認められず、AES 以外での判定は困難である。
- (4) へき開前にき裂先端からの転位射出 変形双晶を生じる $[001](010)$ き裂では、双晶境界の負の AES 原子と、き裂進展時に観察された負の AES 原子群の区別ができず、現時点では (2), (3) のような明確なき裂進展クライテリアは導出できない。
- (5) 全原子の AES の固有値を調べた結果、第二固有値も負となったのは $[\bar{1}\bar{1}2](111)$ き裂のみであり、(4) における塑性変形とへき開等の不安定モードを固有値で判定することはできなかった。
- (6) $[\bar{1}\bar{1}2](111)$ き裂において負の第二固有値が出現する点は、単一き裂モデルの場合は応力-ひずみのピーク直後に厳密に一致していたが、ダブルき裂モデルではピークよりわずかに前に出現していた。また、応力急減時にはへき開部分の前縁に負の第二固有値原子列が観察されたが、その後の非平衡動的過程ではそれ以外の場所でも出現しており、複雑な非平衡過程における AES についてはさらなる検討が必要である。

最後に、本研究の一部は平成 27 年度科学研究費補助金基盤研究 (C) の援助を受けた。ここに記して謝意を表する。

文 献

Abraham, F. F., Brodbeck, D., Rafey, R. A. and Rudge W. E., Instability dynamics of fracture: a computer simulation investigation, Physical Review Letters, Vol.73, No.2(1994), pp.272-276.

- Finnis, M. W. and Sinclair, J. E., A simple empirical N-body potential for transition metals, *Philosophical Magazine A*, Vol.50, No.1(1984), pp.45–55. Erratum, *Philosophical Magazine A*, Vol.53, No.1(1986), p.161.
- Li, J., AtomEye: an efficient atomistic configuration viewer *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, Vol.11(2003), pp.173–177.
- Mullins, M., Molecular dynamics simulation of propagating cracks, *Scripta Metallurgica*, Vol.16, No.6(1982), pp.663–666.
- Pérez, R. and Gumbsch, P., Directional anisotropy in the cleavage fracture of silicon, *Physical Review Letters*, Vol.84(2000), p.5347.
- Shimada, T., Ouchi, K., Chihara, Y. and Kitamura, T., Breakdown of continuum fracture mechanics at the nanoscale, *Scientific Reports*, No.5(2015), p.8596.
- 屋代如月, 富田佳宏, 転位の発生および運動時の局所格子不安定性に関する分子動力学的研究, *日本機械学会論文集, A 編*, Vol.67, No.656(2001), pp.678–684.
- Yashiro, K., Nishimura, M. and Tomita, Y., Deformation analysis of amorphous metals based on atomic elastic stiffness coefficients, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, Vol.14(2006), pp.597–605.
- 屋代如月, 局所格子不安定性に基づく変形挙動解析, *機械の研究*, 養賢堂, Vol.60, No.7(2008), pp.743–753.
- 屋代如月, 藤原正大, Tersoff ポテンシャルによるシリコンの局所格子不安定性解析, *材料*, Vol.60, No.11(2011), pp.968–975.
- Yashiro, K. and Yamane, T., Global vs. local instabilities of pure bcc iron, *Proceedings of ICCM2014*, ISSN2374-3948(online), Sientech Publisher (2014).
- Yashiro, K., Tsugawa, Y. and Katayama, H., Molecular dynamics simulations on local lattice instability at mode I crack tip in bcc iron, *From Creep Damage Mechanics to Homogenization Methods*, *Advanced Structured Materials* 64, H. Altenbach et al. (eds.), Springer International Publishing Switzerland (2015).
- Wallace, D. C.: *Thermodynamics of crystals*, Wiley, Newyork (1972).
- Wang, J., Yip, S., Phillpot, S. R. and Wolf, D., Crystal instabilities at finite strain, *Physical Review Letters*, Vol.71, No.25(1993), pp.4182–4185.

References

- Abraham, F. F., Brodbeck, D., Rafey, R. A. and Rudge W. E., Instability dynamics of fracture: a computer simulation investigation, *Physical Review Letters*, Vol.73, No.2(1994), pp.272–276.
- Finnis, M. W. and Sinclair, J. E., A simple empirical N-body potential for transition metals, *Philosophical Magazine A*, Vol.50, No.1(1984), pp.45–55. Erratum, *Philosophical Magazine A*, Vol.53, No.1(1986), p.161.
- Li, J., AtomEye: an efficient atomistic configuration viewer *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, Vol.11(2003), pp.173–177.
- Mullins, M., Molecular dynamics simulation of propagating cracks, *Scripta Metallurgica*, Vol.16, No.6(1982), pp.663–666.
- Pérez, R. and Gumbsch, P., Directional anisotropy in the cleavage fracture of silicon, *Physical Review Letters*, Vol.84(2000), p.5347.
- Shimada, T., Ouchi, K., Chihara, Y. and Kitamura, T., Breakdown of continuum fracture mechanics at the nanoscale, *Scientific Reports*, No.5(2015), p.8596.
- Yashiro, K. and Tomita, Y., A molecular dynamics study on local lattice instability at a dislocation nucleation and motion, *Transactions of the Japan Society of Mechanical Engineers, Series A*, Vol.67, No.656(2001), pp.678–684 (in Japanese).
- Yashiro, K., Nishimura, M. and Tomita, Y., Deformation analysis of amorphous metals based on atomic elastic stiffness coefficients, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, Vol.14(2006), pp.597–605.
- Yashiro, K., Deformation analysis based on local lattice instability, *Kikai-no Kenkyu*, Yokendo, Vol.60, No.7(2008), pp.743–753(in Japanese).

- Yashiro, K. and Fujihara, M., Local lattice instability analysis on silicon by tersoff potential, Journal of the Society of Materials Science Japan, Vol.60, No.11(2011), pp.968–975(in Japanese).
- Yashiro, K. and Yamane, T., Global vs. local instabilities of pure bcc iron, Proceedings of ICCM2014, ISSN2374-3948(online), Sientech Publisher(2014).
- Yashiro, K., Tsugawa, Y. and Katayama, H., Molecular dynamics simulations on local lattice instability at mode I crack tip in bcc iron, From Creep Damage Mechanics to Homogenization Methods, Advanced Structured Materials 64, H. Altenbach et al. (eds.), Springer International Publishing Switzerland(2015).
- Wallace, D. C.: Thermodynamics of crystals, Wiley, Newyork(1972).
- Wang, J., Yip, S., Phillpot, S. R. and Wolf, D., Crystal instabilities at finite strain, Physical Review Letters, Vol.71, No.25(1993), pp.4182–4185.