



離散転位動力学による結晶体の力学特性評価

研究ノート

中谷 彰 宏*

Estimation of Mechanical Properties of Crystalline Material by Discrete Dislocation Dynamics

Key Words : discrete dislocation dynamics, molecular dynamics, meso-mechanics, stress intensity factor, shielding

1. はじめに - 駆動力と抵抗力の天秤 -

機械系の学部の講義で、ある制約条件のもとで壊れずに目的の機能を果たすための強度設計について学ぶ。そこではまず、様々な壊れ方があること、次に、各々の壊れ方に対して現象を支配するパラメータ(駆動力)は何か、そして、実働時に想定される駆動力の値と固有の限界値(抵抗力, 強度)とを比べることにより設計すると教わる。

従来のマクロな強度設計の多くは、連続体力学を用いてこの実働時の駆動力をつとめて正確に評価し、実験によって先験的に得られる抵抗力と比較することによってなされてきた。ところが、近年、構成要素をナノメートルサイズにまで微細化した人工物の登場によって、このような取扱いが困難なマイクロ領域での強度設計の必要性が認識されてきている。

マイクロ領域では、分子動力学(Molecular Dynamics; MD)シミュレーションなどによって、材料の構造と性質をかなり正確に予測することができるようになってきている。これは、理想

的な条件下での抵抗力を正確に獲得できることを意味している。したがって、残るは、実働状態での駆動力を正確に評価できれば、原理的にはコンピュータ上で閉じた強度設計が行なえるはずである。

しかしながら、このことは容易ではない。構成要素が如何に微小であるとはいえ、対象とそれを取巻く環境の全てを原子レベルから解析するのは困難であり、シミュレーションの常として部分系を取扱うことが宿命づけられている。つまり、駆動力の評価はどのように実働状態に近い状態で部分系を取出すかにかかっており、それは、多くの場合、マイクロ問題の境界条件を規定する問題と密接に関わっている。

例えば、破壊現象について考える。現実の多くの材料では、巨視的な破壊の様式は、き裂先端近傍場で形成される転位・双晶・マイクロクラックなどの欠陥の分布構造によって特徴づけられる塑性域や損傷領域の伝ばの可能性の是非によって決まる。そして、これら欠陥構造がフィルターとなって、き裂先端場は力学的に外場から孤立し、いわゆる応力拡大係数の遮蔽(あるいは増幅)が起るので、たとえ原子の組変わりに対する抵抗力が原子レベルのシミュレーションによって正確に評価できていたとしても、対応する駆動力を正確に評価することができず、結果として見かけ上の材料の抵抗力(破壊じん性値)の定量的評価は困難なものになる。

このような問題に対しては、マイクロとマクロの橋渡しを担う中間領域を適切にモデル化する

*Akihiro NAKATANI

1965年9月11日生

1993年大阪大学大学院工学研究科
機械工学専攻博士後期課程修了

現在、大阪大学大学院工学研究科
知能・機能創成工学専攻、助教授、
博士(工学)、固体力学

TEL 06-879-7245

FAX 06-879-7246

E-Mail nakatani@ams.eng.
osaka-u.ac.jp



必要性があると考えられる。本稿では、このような背景で筆者が最近研究をスタートした結晶構造体のマクロなすべり変形とミクロな原子の組変わりとの中間スケールを扱うメゾメカニクス的手法の一つである離散転位動力学(Discrete Dislocation Dynamics; DDD)シミュレーション¹⁾について簡単に説明し、そのき裂先端近傍場への適用例について述べる。

2. 離散転位動力学法

DDD法では、連続体中の多数の転位(2次元では点, 3次元では線としてモデル化される)を考え、各時刻の転位間の相互作用と境界条件を考慮し応力場を求め、個々の転位に働く力を評価し、その運動の時間発展を追跡する²⁾。

まず、各瞬間の応力・変形状態を知るために、 S_f で表面力、 S_u で変位が規定された境界条件の下で、 N 個の転位を持つ有限体の解を求める問題(図1(a))を、 N 個の転位が無限体中に存在するときの解を求める問題A(図1(b))と、転位を持たない有限体に相補的な境界条件を課した解を求める問題B(図1(c))の2つに分ける。無限体中に存在する1つの転位が作る応力場、変位場は解析的に与えられるので³⁾、問題Aの解は、これらの重ね合わせにより求めることができる。問題Bの解は、有限要素法等を用いて求める。そして、考えているオリジナルの問題の解は、問題A、Bの2つの問題の解の重ね合わせにより求めることができる。

次に、求めた応力場から個々の転位に作用するPeach-Koehler力と転位の運動を支配する分解せん断応力を評価する。そして、図2のようにMD法によって、あらかじめ求めてお

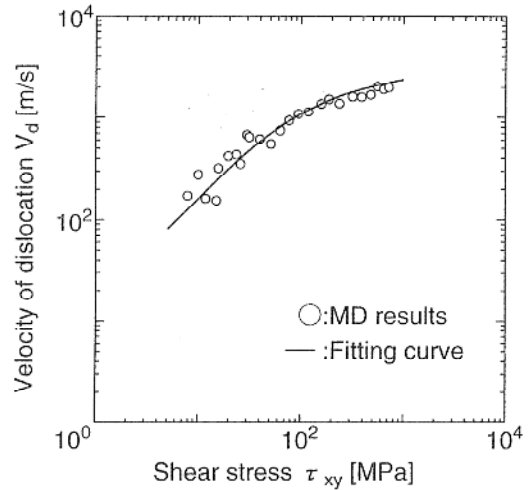


図2 分解せん断応力と転位速度の関係

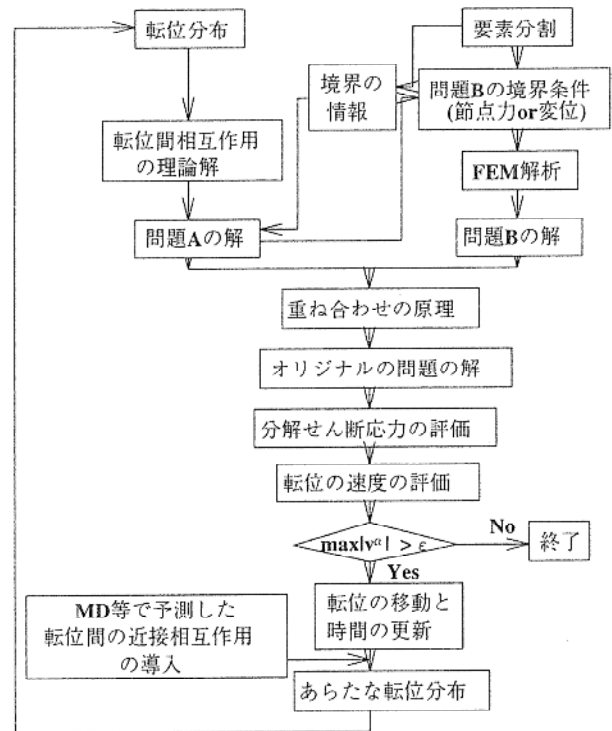


図3 シミュレーションの流れ

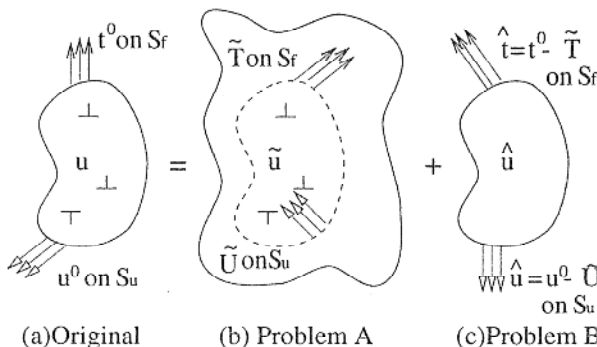


図1 問題の分解と重ね合わせ

た分解せん断応力と転位速度の関係⁴⁾などを用いることにより、転位運動を追跡できる。

シミュレーションの流れを図3に示す。上で述べた以外に、転位の近接相互作用などの転位動力学の素過程のいくつかを導入する必要があり、MD法との連成手法が考えられる。

3. き裂先端場への適用例

以下では、見かけ上の駆動力がき裂先端近傍

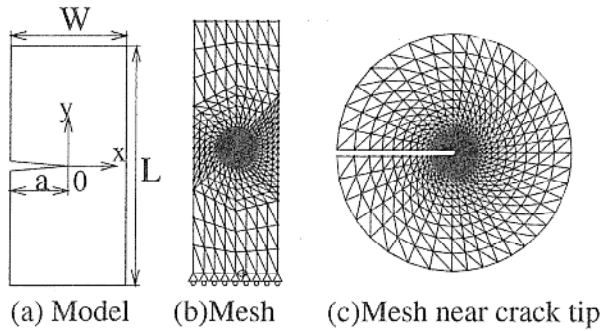


図4 き裂先端場のモデル

の転位構造による応力拡大係数の遮蔽効果の例を示す。解析対象として、図4(a)に示すような引張を受けるき裂を有する材料のモデルを考える。用いる要素分割図とそのき裂先端部の詳細をそれぞれ図4(b)と(c)に示す。

3.1 一直線上の転位例の堆積

まず、図5に示すようなき裂先端から発生した複数の刃状転位の堆積を考える。1番目の転位(図中に矢印で示す)を固定し、モードI荷重を荷重下でき裂先端から同一すべり面上に $N-1$ 個の転位が放出されるものとして計算を行なう。ここでは、 $N=1\sim 8$ について解析する。

図6は $N=8$ の場合についてDDD計算の結果得られた転位の配置と相当応力分布を示している。堆積した転位により、き裂先端近傍の x 軸に対する応力の対称性が乱れているのが分かる。また、図7(a), (b)は応力拡大係数と転位数の関係を示したものである。転位数の増加に

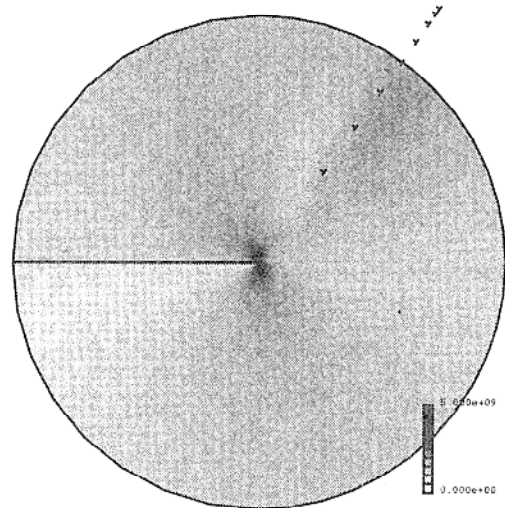


図6 転位配置と相当応力分布(転位数8)

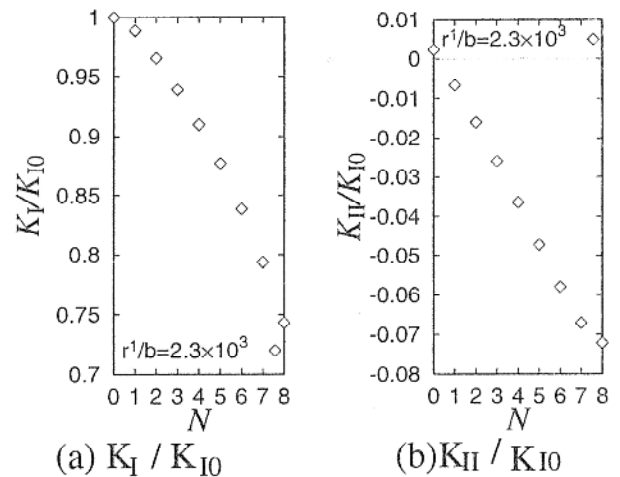


図7 応力拡大係数と転位数の関係

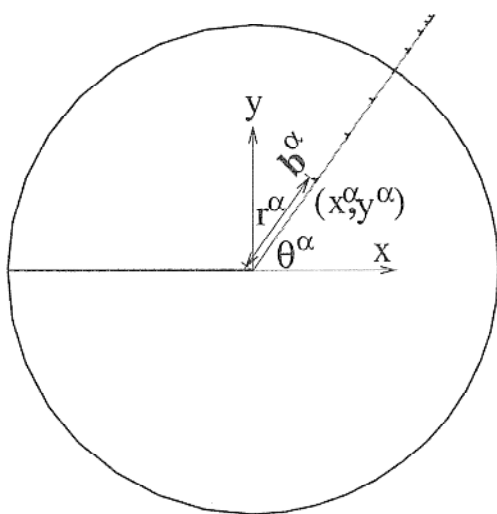


図5 一直線上の転位の堆積

伴い応力拡大係数の値が減少し、応力拡大係数の遮蔽が起こっていることがわかる。また、モードII成分が現れていることがわかる。

3.2 転位壁の形成

次に、図8に示すような初期に $y > -x/\sqrt{2}$ の領域に、ランダムに配置した転位を考える。ただし、バーガスベクトルの方向は、 $b/b = (\pm\sqrt{2}/3, \mp\sqrt{1}/3)$ とし、無荷重で緩和計算を行ない安定配置を得た後、モードI荷重を荷重する。

図9は、無荷重時の転位配置および相当応力分布である。異符号どうしの転位は 45° の角度を保ち、同符号どうしの転位は直線上に並び、 $\theta = \text{Tan}^{-1}\sqrt{2}$ の方向に転位壁の形成がみられ

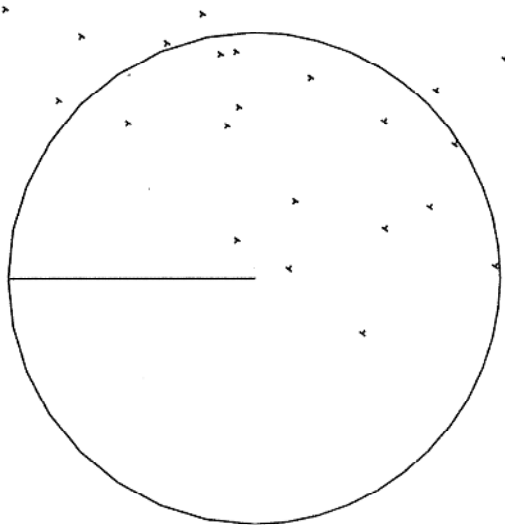


図8 ランダムに配置したモデル

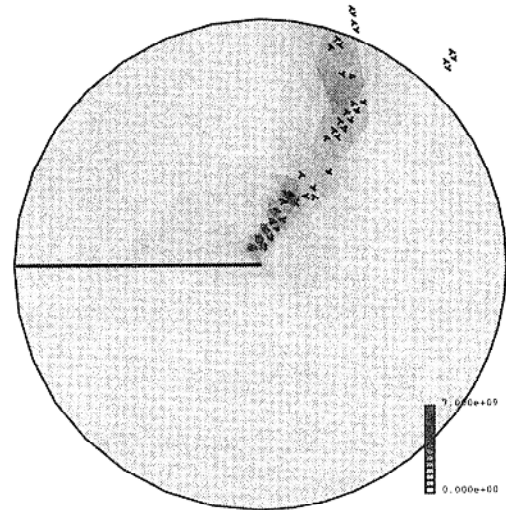


図9 転位配置と相当応力分布(緩和後の配置)

る。モード I 荷重を荷重した結果(図10), 転位壁の符号の異なる部分が同一符号からなる転位壁に分離する。この分布に対しては応力拡大係数が増幅されているという結果が得られている。

4. おわりに

ここで示した例は、解析的アプローチでも予測できる簡単なものであるが、き裂先端での転位の存在による無転位領域の形成機構、および、転位によるき裂先端の応力緩和現象の解明に対する基礎的な知見を与えているものと思われる。

離散転位動力学法は、ミクロとマクロの解析を巧妙に分離し、従来の連続体力学が不得意とする転位の運動に関連するさまざまな素過程を分子動力学法等を用いて詳細に検討し、個別に扱った転位のつくる弾性場と境界条件による力学的な場のもとでの転位の運動を扱うことによって、スケールの大きな解析を実施するための、いわば“ミクロ・メゾ・マクロ領域に跨る CAE システム”のひとつの試みであり、今後、メカニズムが十分にわかっていない材料特性に与える転位分布構造の役割の解明などに応用できるものと期待している。

最後に、本稿執筆の機会を与えて下さいました工学研究科 久保司郎 教授、ならびに、北川浩 教授に謝意を表します。また、ここで述べた研究の一部は、科研費、および、(財)渡辺

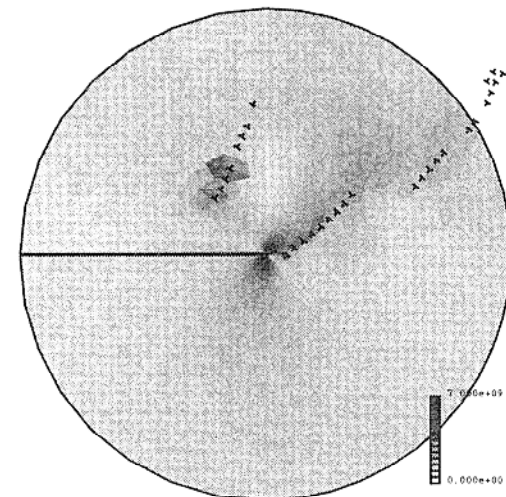


図10 転位配置と相当応力分布 (モード I 荷重負荷時)

記念学術奨励会からの奨学金の援助のもとに行なったことを記し謝意を表します。

参 考 文 献

- 1) 例えば, Lubarda, V., Blume, J. A., & Needleman, A., *Acta Metall. Mater.*, 41, (1993), 625.
- 2) 中谷彰宏, 日本機械学会講演論文集(V), No.96-15, (1996), 148-149.
- 3) 例えば, 鈴木秀次, 転位論入門, (1967), アグネ.
- 4) 中谷彰宏・北川 浩・中谷敬子, 材料, Vol.46, No.6(1997), 619-624.