第1部(23)分子動力学法によるき裂先端近傍の塑性変形解析

Molecular Dynamics Study on Plastic Deformation near Crack Tip

〇正 西村憲治(産総研) 正 宮崎則幸(九大)

Kenji NISHIMURA, AIST, Center 2 Umezono, Tsukuba, Ibaraki 305-8568

Noriyuki MIYAZAKI, Kyushu University, 6-10-1 Hakozaki, Higasi-ku, Fukuoka 812-8581

The mechanical behaviors around a crack tip for a system including both a crack and two tilt grain boundaries under cyclic loading are examined using a molecular dynamics simulation. The grain boundary has the lowest grain boundary energy among all tilt grain boundaries. A structural transition from bcc to hcp occurs around the crack tip during the first loading in order to relax stress concentration. Edge dislocations emitted from the crack tip move to the slip direction of α -Fe. Then, two dislocation pile-ups near the grain boundaries are formed after the edge dislocations reach the grain boundaries, because they cannot move beyond the grain boundaries. During the first unloading, the edge dislocations emitted from the crack tip return to the crack tip and disappear in the system. We observe that not only the crack does not propagate in the cleavage plane of α -Fe but also several vacancies are generated along the slip direction from the crack tip during cyclic loading. Conclusively, we suggest the fatigue crack growth mechanism for the initial phase of the fatigue fracture. That is, the fatigue crack propagates due to coalescence between the crack and vacancies which are caused by the emission and absorption of the dislocations.

Key Words: Molecular dynamics, Fatigue crack growth, Grain boundary, Dislocation, α-Fe

1 緒 言

近年、マイクロスケールにおける材料の機械的特性評価に 関する研究が盛んに行われている.き裂や粒界は金属材料の 力学的特性に大きな影響を与える主要な要因であり、これら を含む系の変形と破壊について原子スケールで評価するため に分子動力学法が利用されている.引張り荷重を負荷したと きのき裂進展やき裂先端からの転位の放出および転位の運動 に関する多くの研究成果が報告されている(1)-(2). さらに,分 子動力学法を用いて、き裂と粒界の両方を含む系の機械的特 性の解析も行われている. Zhangらは、Cu にモード I 型荷重 を負荷して、き裂先端から放出された転位列と粒界との相互 作用について検討した⁽³⁾. また,西村らは,α-Feにモード [型荷重を負荷し、脆性き裂進展に及ぼす粒界の影響について 報告している⁽⁴⁾. これらの研究が示すように,分子動力学法 を用いた材料の機械的特性解析は、単調な荷重を負荷する場 合においては有効な方法であることが確認されている.一方, 疲労き裂の進展過程を原子スケールで理解するために、分子 動力学法を用いた解析が試みられている. 久保らは, α-Feを 用いて応力拡大係数の振幅が非常に小さい下限界近傍のモー ドⅠ型繰り返し荷重を負荷したときの疲労き裂進展解析を 行った⁶. しかし、これまでの研究では、疲労破壊における 塑性変形過程の影響が十分に検討されておらず、また、粒界 を含む系の解析もなされていない. そこで、本研究ではき裂 と粒界の両方を含む系に繰り返し荷重を負荷し、き裂先端近 傍での塑性変形過程およびき裂進展メカニズムを考察する. 解析に用いた材料は体心立方構造を有する α-Fe である.

2 解析方法

2・1 分子動力学法 分子動力学法では、物質を古典力学 に従う多粒子系としてモデル化する. 粒子(原子)は他の原 子から受ける原子間力によって運動し、原子の運動はNewton の運動の法則によって表される.α-Feの原子間力を記述する ために、二体間ポテンシャルである Johnson ポテンシャル⁽⁰⁾ を用いる. Johnson ポテンシャルは、第2近接原子までが含 まれるカットオフ距離を有する短距離型ポテンシャルである. また、ひずみを負荷および除荷した後は、系の体積と温度を 一定とするカノニカルアンサンプルを適用する. 一定温度を 実現する最も簡便な方法として、一定時間ステップごとに原 子の速度に定数をかけて設定温度にスケールする速度スケー リング法を用いる.

2・2 解析モデルと計算条件 図1に結晶格子方位とき裂 面およびき裂先端方向の関係を示す.体心立方構造の最稠密 面は[110] 面で,すべり面およびすべり方向は,それぞれ [112] 面およびく111>方向である.図1に太線で示すようなす べり方向を面内に含みすべり面に垂直な(101) 面を観察面とす る.分子動力学シミュレーションの解析結果はこの観察面上 に示される.また,図に示すようにき裂先端方向は[010] 方 向,き裂面は(101) 面である.x軸をき裂先端方向にy軸をき 裂面に垂直方向に, z軸を観察面に垂直方向にとる.

図2に本研究で解析する系を示す. x軸に垂直な境界は自 由表面とする. y軸に垂直な境界では,系にモード「型の荷 重を負荷するために解析領域の上下に4原子層の固定層をお いて系を固定する.また,2軸に垂直な方向は6原子層で周 期境界条件を与える.き裂長さは20a (a は格子定数で 0.286nm)で原子を取り除いてき裂を導入する.系の大きさは x軸方向が200a, y軸方向が600aである.粒界は図に示すよ うにき裂を取り囲むように2箇所に導入する.系内の原子数 は100万個である.

初期条件として、体心立方構造の格子位置に各原子を配置 し、設定温度300KでMaxwell分布に従う速度を与える。図3 に系に負荷する荷重の履歴を示す。図に示すように、系に矩 形の片振り繰り返し荷重を12回負荷する。まずはじめに、ひ ずみ0%で緩和計算を行った後、系は急速に引張られる。最大

日本機械学会 [Na03-06] 材料力学部門2003年春のシンポジウム講演論文集('03.3.28~29 東京)



Fig. 1. Crystallographic orientation and crack plane.



ひずみは6.0%である.系にひずみを負荷した後,系の体積と 温度を一定に保ち200000時間ステップの緩和計算を行う.そ の後,ひずみを0%に戻し再び一定体積一定温度の条件下で 200000時間ステップの緩和計算を行う.これを1サイクルと し,このサイクルを12回繰り返して,系内の応力分布の時間 変化および繰り返し荷重負荷後のき裂先端近傍の原子配置の 変化を観察する.全時間ステップ数は480万時間ステップで ある.1時間ステップは0.354fsであり,全計算時間は 1.7nsecである.系内の応力分布を求める際の局所応力テン ソルの評価は以下の方法を用いる.まず,物理空間を200x200 の小ブロックに分割する.局所応力テンソルは各ブロックご とに1000時間ステップのビリアルの平均から計算される.

2・3 対称傾角粒界 粒界は粒界面を境とした結晶粒間の 相対的な方位関係で特徴づけられる多結晶材料特有の内部構 造である. 粒界を系統的に扱うためのモデルは現在のところ 確立されていないが,比較的取り扱いが容易な傾角粒界とね じり粒界に関する研究は行われている. その中でも,対称傾 角粒界は最も研究が進んでおり,粒界周辺の原子配置が報告 されている. α-Feの対称傾角粒界に関しては,Wolfら[®]が, 傾角を変化させて粒界エネルギーを計算している. また、中 Fig. 2. Schematic diagram for simulated system.

600a



Fig.4 Atom configuration around the <110>{112} grain boundary at strain $\varepsilon =0\%$ after relaxation.

島ら®は粒界構造に関する考察を行っている. これらの研究 では、傾角軸の方位はく110>方向で、ポテンシャルは本研究 と同じ Johnson ポテンシャルが用いられている。傾角の変化 に伴って、粒界エネルギーが局部的に低くなる谷間(カスプ) が存在することが報告されている. 粒界エネルギーが最小に なるのは傾角が約110度のときで、その値は0.267J/m2であ る. この粒界の粒界面は [112] 面で, Σ値は3である. 本研究 では、この粒界を解析対象し、 <110>(112) 粒界と呼ぶ、図4 にひずみ0%における緩和計算後の<110>(112) 粒界周辺の原子 配置を示す. 図中には、2原子層示しており、黒塗りの原子 と白塗りの原子では存在する層が異なることを表している. また、中島ら®によって示された粒界の周期構造を記述する 構造ユニットを実線で表示している. <110>(112) 粒界は、体 心立方構造の整合双晶界面で、粒界近傍の原子配列は乱れが 少なく、格子面の湾曲なども見られない、さらに、結晶粒界 周辺の原子のポテンシャルエネルギーは完全結晶内の原子と ほぼ同じである.

3 解析結果と考察

3・1 1 サイクル荷重負荷時 図 5 は系に 1 サイクル目の 荷重を負荷して 11000 時間ステップ経過後のき裂先端近傍の



Fig.5 Atom configuration around a crack tip at strain $\varepsilon_y = 6.0\%$ immedietely after loading is applied to the system.

原子配置である. き裂先端から菱形に体心立方構造とは異な る結晶構造の領域が広がっており、この領域内では、三角格 子を積層したような六角形の原子配置が観察される. 2 方向 の積層構造はABABABとなっていることを別の観察で確認して いる. これはき裂先端の応力集中による応力誘起相変化が起 こり,体心立方構造から最密六方構造への相変化が起こった 結果と考えられる.この現象は、西村らによる α-Feの脆性破 壊過程の分子動力学解析でも観察されている4.図6にき裂 先端と結晶粒界間の局所応力σ。の分布の時間変化を示す.σ。 の最小値は-5GPa, 最大値は10GPaである. 図6 (a)では, き 裂先端付近に前述の相変化領域が観察される. さらに, き裂 先端から右上方向([111]方向)に相変化領域の角部から放出 された刃状転位が観察される. この刃状転位のすべり面およ びすべり方向はそれぞれ (121) 面および [111] 方向であり, α-Feのすべり系と一致している.図6(b)に示すように、刃状 転位はα-Feのすべり系に沿って運動し、粒界の到達した後、 粒界に吸収される. その結果として、粒界上に原子空孔のよ うなボイドが残る⁽⁹⁾.図6(c)では,き裂先端からの刃状転位 の放出は続き、き裂先端から右上方向には3個の刃状転位が 観察される.また、刃状転位の放出によって相変化領域が縮 小すること、および、刃状転位が粒界に到達した後、粒界を 越えて運動できないために粒界を起点とした堆積転位列が形 成されることが確認される. <110>(112) 粒界は、粒界エネル ギーが低く安定であるため粒界破壊等は観察されない. 最終 的に,図6(d)に示すように、粒界を起点とした安定的な堆積

転位列が形成され、相変化領域は消滅する.また、き裂先端 の相変化領域は安定な相ではなく、十分時間が経過すると逆 相変化が起こり元の体心立方構造に戻るので、相変化領域の 最密六方構造を実験的に観察するのは困難であると考えられ る.

次に、1 サイクル目の荷重を除荷した時の局所応力 G_yの分 布の時間変化を図7に示す、G_yの最小値は-12GPa,最大値は 3GPaである.図に示すように、粒界を起点とする堆積転位列 を形成していた刃状転位は、転位間の相互作用によって駆動 され除荷後急速にき裂先端に戻り、き裂先端に吸収される. 図7 (d)では、すべての刃状転位はき裂先端に吸収され、系内 から消滅する.

3・2 12 サイクル荷重負荷後 荷重の負荷と除荷を繰り返 すと、1サイクル目で観察されたき裂先端における刃状転位 の放出と吸収が繰り返される.図6では、き裂先端から右上 方向に刃状転位が放出されているが,他のサイクルではき裂 先端から右下方向([11]]方向)に放出されたり、右上方向と 右下方向の両方向に放出される場合も観察されている.また, 荷重負荷時の最終状態として、双晶変形が生成する場合があ ることも観察されている、図8および図9では、荷重負荷前 と12サイクル終了後のき裂先端付近の状態を比較する.図8 にはき裂先端付近のエネルギー分布を示している.エネル ギーの最小値は-3.0eV, 最大値は-2.5eVである.図9はき裂 先端極近傍の原子配置である.図8(b)では,き裂先端付近に エネルギーの高い領域が複数点在しているのが観察される. この高エネルギー領域は、図9(b)との比較から明らかなよう に原子空孔であり, 原子空孔はすべり方向に沿って生成して いる. 図9(a)および図9(b)中の実線は初期のき裂位置を表 しており、図9(b)中の点線は12サイクル終了後のき裂先端 位置を示している.図9より,繰り返し荷重負荷に伴うき裂 進展が観察される.き裂進展方向はき裂先端方向である[010] 方向ではなく、すべり方向である[111]方向である. き裂進展 量は 2nm で1 サイクル当たりでは 0.17nm である.

3・3 疲労破壊初期過程のき裂進展メカニズム 以上の解 析結果から、本研究では、疲労破壊の初期過程における疲労 き裂進展メカニズムを提案する.第二段階の疲労き裂伝播に おける低速度域(ステージIIa)では、疲労き裂進展速度は 非常に遅く、その進展メカニズムは解明されていない.実際、 低速度域でのき裂進展速度は1サイクル当たり0.1~1m2程 度で、原子スケールとほぼ同等である.本研究における解析



Fig.6 Time evolution of distribution of stress σ_v between the crack and the <110>{112} grain boundary under the first loading.

-111-









(a) Before loading

(b) After the twelfth cycle

Fig.8 Energy contours around the crack tip not only before loading but also after the twelfth cycle.

より,繰り返し荷重負荷に伴うき裂先端からの転位の放出お よびき裂先端での転位の吸収の繰り返し等の塑性変形過程に より,き裂先端付近にすべり方向に沿っていくつかの原子空 孔が生成することが観察された.荷重の繰り返し数の増加に 伴って,すべり方向に沿った原子空孔の密度が増加するとと もに,原子空孔とき裂先端が合体することにより,き裂はす べり方向に沿って進展すると考えられる.

4 結 言

繰り返し荷重を負荷した時の材料の破壊特性をミクロス ケールで評価するために、α-Feを用いた分子動力学シミュ レーションを行った.本解析では、き裂と粒界の両方を含む 系を扱った. 粒界は傾角粒界の中で粒界エネルギーが最小で ある<110>(112) 粒界を用いた.原子間ポテンシャルとしては, α-Fe の原子間力を記述する二体間ポテンシャルである Johnson ポテンシャルを利用した.系の設定温度は300K,系 内の原子数は100万個である. 系にはモード 1型荷重を繰り 返し12回負荷した.1サイクル目の荷重を負荷した時,き裂 先端での応力集中により、き裂先端近傍では体心立方構造か ら最密六方構造への相変化が起こること、および、き裂先端 から刃状転位が放出されることが観察された.その後,き裂 先端から放出された刃状転位はα-Feのすべり系に沿って運動 するが、粒界を越えて運動できないため粒界を起点とする堆 積転位群が形成された.また,時間の経過に伴って,き裂先 端近傍の相変化領域は消滅した.1サイクル目の荷重を除荷 した時には、き裂先端から放出された刃状転位はき裂先端に 戻り、き裂先端に吸収され系内から消滅する.12サイクル終 (a) Before loading

(b) After the twelfth cycle

Fig.9 Atom configurations around the crack tip not only before loading but also after the twelfth cycle.

了後には、き裂先端付近に多数の原子空孔が観察された.ま た、繰り返し荷重負荷に伴うき裂進展も観察された.き裂進 展方向はき裂先端方向である [010] 方向ではなく、すべり方向 である [11]] 方向である.き裂進展速度は1サイクル当たり 0.17mmであり、第二段階の疲労き裂伝播における低速度域に 相当することが示された.以上より、疲労破壊の初期過程に おけるき裂進展メカニズムを提案した.すなわち、き裂と原 子空孔の合体により、疲労き裂はすべり方向に沿って進展す る.原子空孔は、繰り返し荷重を負荷したことによるき裂先 端での転位の放出および吸収等の塑性変形過程により生成す ると考えられる.

参考文献

- (1) F.F. Abraham and J.Q. Broughton, Computational Materials Science, 10, (1998), 1.
- (2) S. Zhou, P. Lomdahl, A. Voter and B. Holian, Engineering Fracture Mechanics, 61, (1998), 173.
- (3) Y.W. Zhang and T.C. Wang, Modeling and Simulation in Materials Science and Engineering, 4, (1996), 231.
- (4) 西村憲治・宮崎則幸,機論, 67-657, A, (2001), 893.
- (5) 久保司郎・吉川正盛,機論, 65-631, A, (1999), 582.
- (6) R.A. Johnson, Phys. Rev. A., 134, (1964), 1329.
- (7) D. Wolf and and K.L. Merkle, Materials interface, Chap.3 (1992) Chapman & Hall.
- (8) 中島英治, 竹内宗孝, 鉄と鋼, 86, (2000), 357.
- (9) 西村憲治, 宮崎則幸, 機構論, (2000), 635.

NII-Electronic Library Service