206

Quasicontinuum法における転位力学場の表現可能性に関する研究

金沢大学　○下川智嗣　　金沢大学（現：（株）パトライト）長澤慶和

1　はじめに

ナノメートルでの物質の力学的特性を解析していく手法の開発が盛んに行われている．一般的にこのような問題は原子シミュレーションが有効であると考えられるが，計算コストが大きいという問題がある．そこで，原子シミュレーションに連続体領域を用いる原子連続体結合モデルが提案されている．しかし連続体領域では原子個々の区別ができないため，結晶材料の塑性変形を担う転位の再現が課題となる．連続体中で転位を取り扱うように拡張した連続体モデルに，Discrete dislocation model（DD モデル）[1]，Extended finite elementmethod（XFEM）[2)3)] がある．DD モデルでは転位論の解析解により転位を扱うことができるが，一般的な DD モデルは等方性の性質を示す．一方で XFEM では転位論の解析解を用いる必要がないため，異方性の性質の下で転位の再現に成功しているが，連続体領域では構成式を用いるため，原子（原子間相互作用を用いる）・連続体結合界面で力学的に完全に滑らかな結合状態を表現することは困難である．そこで，本研究では，連続体領域を原子間ポテンシャルを用いて表現する Quasicontinuum（QC）モデル[4)]を用いて（そのため，原子・連続体領域の弾性力学場は滑らかに結合可能である），異方性の性質の下で転位を表現することを試み，転位の応力場，転位に働く力（Peach-Koehler force）の評価を行なう．

2　解析モデルと解析条件

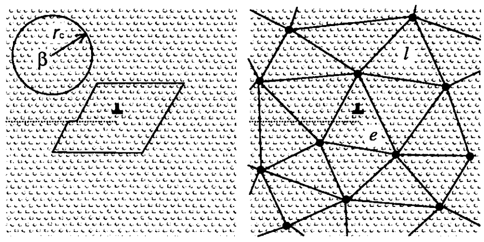
2.1　原子間ポテンシャル　解析モデルは 2 次元とし，原子間相互作用として，アルミニウムを表現する shifted-force-Morce ポテンシャルを採用する．格子定数 $a_0 = 0.2493$ nm, $c_{11} = 203.4$ GPa，$c_{12} = c_{44} = 67.8$ GPa である．

2.2　QC モデル　図 1(a) に転位を含む領域の原子モデルと図 1(b) に同じ領域の QC モデルを示す．図 1(b) の黒丸は，図 1(a) の原子を連続体近似した節点原子を示す．各要素は，節点原子の位置情報から計算される基本格子ベクトルを持ち，その基本格子ベクトルを用いて，要素内に均質な結晶構造を構築し，原子間ポテンシャルを用いてその要素のエネルギーを計算することができる．ここで，各要素内（欠陥を含まない）には Cauchy-Born 則を適用するため，要素 l のエネルギー E^l は式 (1) で示すことが可能である．

$$E^l = N^l E^{\mathrm{atom}} \quad \cdots\cdots (1)$$

E^{atom} は基本格子ベクトルにより計算できる原子一個のエネルギー，N^l は要素 l が代表する原子の数である．式 (1) のように要素 l のエネルギーに原子間ポテンシャルを利用することで，QC モデルでは原子領域と全く同じ弾性異方性や非線形弾性特性を扱うことができる．

2.3　QC モデルにおける転位の表現方法　図 1(a) は原子モデルを用いて転位を表現したものである．この図からわかるように転位のコアにはバーガースベクトルに対応する欠陥構造が存在するが，その周りは弾性的に結晶構造が歪



(a) atomic model　　(b) QC model

Fig. 1 Atomic and QC models containing a dislocation.

んでいるため，転位コア以外の領域は QC モデルで表現することが可能である．一方，図 1(b) に示すように，転位コアを含む要素 e では，バーガスベクトルに対応する欠陥構造が存在し，その領域を連続体近似する物理的な意味はないが，通常，転位の自己エネルギーは，転位コアの欠陥領域に比べて，弾性ひずみエネルギーの方が十分大きいため転位コアの影響を無視できると考えることができる．そのため，ここでは転位コアの領域を一つの要素 e に代表させ，転位コアの構造は考慮しない．QC モデルにおける転位の表現能力を検討するために，30 nm×30 nm の正方形領域の中央に刃状転位を導入し，要素分割の大きさを変えた 3 種類の QC モデル（要素の大きさが格子定数の 1 倍，2 倍，4 倍）に対して，MD 解析と比較を行なう．

2.4　Peach-Koehler 力　QC モデルで転位に働く力を算出するために，XFEM と同様に式 (2) に示す Peach-Koehler 力を転位周りの領域について計算する．

$$F_l = -\int_{\Omega_c}\left[\frac{1}{2}\sigma_{ij}u_{i,j}\delta_{kl} - \sigma_{ik}u_{i,l}\right]q_{l,k}d\Omega_c \quad \cdots\cdots (2)$$

ここで，σ_{ij}，$u_{i,j}$，q は応力，変位こう配，重み関数である．積分領域 Ω_c は，転位を中心とし，内半径 r_1，外半径 r_2 で定義する．また，重み関数 q は，$q = 0\ \{r < r_1\}$, $q = (-r + r_2)/(r_2 - r_1)\ \{r_1 < r < r_2\}$ とする．

QC モデルにおける式 (2) の妥当性を確認するため，先に述べた中央に刃状転位を含む正方形領域に対して，せん断変形させたときの式 (2) により評価できる Peach-Koehler 力と，刃状転位が無限体中に存在するときの転位論による Peach-Koehler 力の理論値（式 (3)）を比較する．また，積分領域の範囲が Peach-Koehler 力の精度に与える影響を調べる．

$$F = \tau b \quad \cdots\cdots (3)$$

2.5　転位対に作用する **Peach-Koehler** 力　次に，有限体中の転位対に働く Peach-Koehler 力を評価するために，図 2 に示す $2L$ nm × $2L$ nm の正方形領域に転位双極子を配置する．ここでは QC モデルの各要素の大きさを格子定数の 4 倍とする．中心を原点とし，転位対の初期配置を (0 nm,20 nm), (0 nm,−20 nm) とする．各転位の y 座標は固定し，x 座標を原点から表面に近づけたときの転位の位置と Peach-Koehler 力の関係を調べる．ここで，表面が転位に生じる力に与える影響を検討するために，$L = 50$ nm と $L = 100$ nm のモデルを準備し，それぞれモデル 1，2 とする．

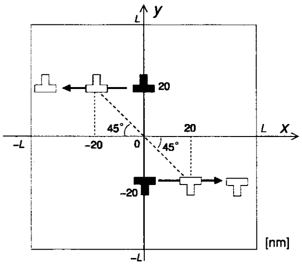
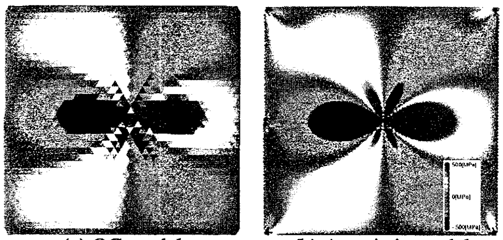


Fig. 2 Schematic of a dislocation dipole model.

3 解析結果と考察

3.1 QC モデルの転位の表現能力 図 3(a) に QC モデルから得られた転位の応力分布を，図 3(b) に原子モデルから得られる転位のせん断応力分布を示す．なお，QC モデルの要素の大きさは，格子定数の 4 倍である．これらの図から QC モデルでも転位コアから離れた領域の転位の応力場を再現できることが確認できる．QC モデルと原子モデルでの応力分布の違いは，各モデルの四隅の角に見られる．このような違いが発生するのは QC モデルでは表面エネルギが欠如しているためである．図 4 は，原子モデルと QC モデルの刃状転位について，すべり面でのせん断応力を示す．また，QC モデルでは要素の大きさを格子定数の 1 倍，2 倍，4 倍としたときの結果を示す．要素サイズが大きくなるほど，転位コア付近では，原子モデルと異なる値となるが，転位コアから離れると要素サイズに関係なく QC モデルと原子モデルの値は一致することが確認できる．また，表 1 に各モデルの系全体のポテンシャルエネルギーを示す．これより，原子モデルの表面の影響があるものの，各モデルでよい一致を示していることが確認できる．



(a) QC model (b) Atomistic model

Fig. 3 Stress distribution in QC and atomic models containing a dislocation

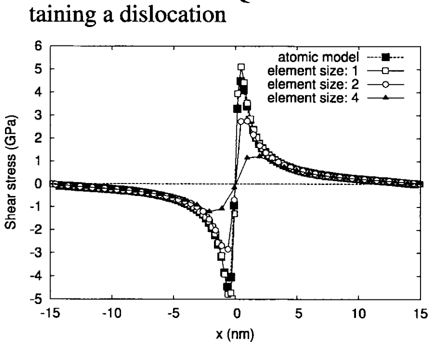


Fig. 4 Shear stress distributions on slip planes of the edge dislocation.

Table 1 Potential energies of QC models and atomic model with a dislocation.

element size	1	2	4	atomic model
energy [eV]	-25677.6	-25677.3	-25677.6	-25676.1

3.2 Peach-Koehler 力の妥当性 図 5 は，式 (2) の積分領域の大きさが Peach-Koehler 力に与える影響を示す．実践は転位論より評価できる理論値である．r_1 = 1.1 nm, r_2 = 3.2 nm の場合，理論値とよく一致していることが確認できる．一方で，積分領域が極端に狭い場合，つまり内半径 r_1 と外半径 r_2 の差が 0.2 nm になると理論値からの誤差が大きくなる．また内半径が小さい時にも Peach-Koehler 力の値は，理論値と誤差が大きくなる．これらは，積分領域に含まれる要素数が少ないことや，内半径が転位コアを含む要素サイズに近いことが原因と考えられる．これらの結果から，Peach-Koehler 力の誤差を小さくするためには，ある程度幅のある計算領域が必要であるとともに，その計算領域には転位コア周辺の要素を含めるべきでないことが理解できる．

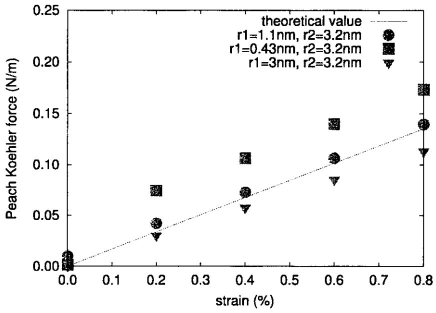


Fig. 5 Peach-Koehler force.

3.3 有限体中の転位双極子と Peach-Koehler 力 図 6 は，図 2 に示す転位コアの x 座標と Peach-Koehler 力の関係を示す．黒の実践で示すように転位論より得られる無限体領域中の転位対では，45 度の配置で Peach-Koehler 力はゼロとなり，安定配置を取ることが知られている．しかしながら，有限体中の場合，表面からイメージ力を受けるため，図 6 に示すように，転位対は常に表面に向かう力が生じていることが確認できる．このような有限体中の転位に生じる力を，DD 計算のように解析解を重ね合わせることなく算出できることが，QC モデルの利点であることが確認できる．また，モデルサイズが小さくなるほど，転位が表面に抜けようとする力が大きいことが理解できる．

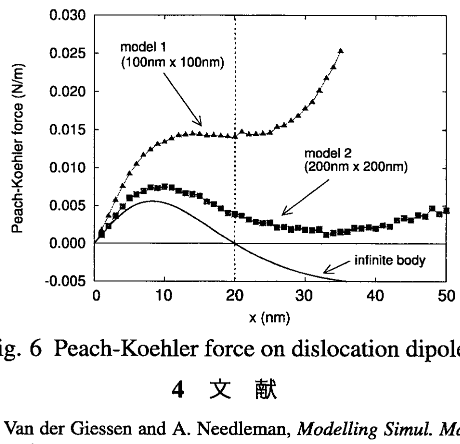


Fig. 6 Peach-Koehler force on dislocation dipole.

4 文 献

1) E. Van der Giessen and A. Needleman, *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, **3**(1995), 689.
2) T. Belytschko and R. Gracie, *Int. J. Plasticity*, **23**(7), 1721–1738.
3) R. Gracie, J. Oswald, T. Belytschko, *J. Mechanics and Physics of Solids*, **56**(2008), 200–214.
4) E. B. Tadmor, M. Oritz and R. Phillips, *Philo. Mag. A*, **73**(1996), 1529.