

分子動力学シミュレーションによる α 鉄中のナノスケールき裂進展の評価 — ナノき裂のエネルギー解放率臨界値に及ぼすき裂サイズの依存性 —

Evolution of crack propagation in nanoscale α -iron by molecular dynamics simulation

– Dependence of crack size on the critical energy release rate of nano crack –

*阮 小勇¹, 陳 昱婷¹, 中筋 俊樹¹, 森下 和功¹

¹京都大学

本研究では、固体材料の破壊現象に対する照射欠陥の影響を調べるために、分子動力学 (MD) シミュレーションを行った。 α 鉄結晶中にナノサイズの平面状き裂の導入し、この結晶を引張変形させた。き裂が進展し始める際の応力拡大係数の臨界値 K_{IC} を求めた。また、Griffith の理論を参考に、応力拡大係数臨界値 K_{IC} からエネルギー解放率臨界値 G_{IC} を求めた。一般的な Griffith 理論ではエネルギー解放率臨界値 G_{IC} はき裂サイズによらないが、本研究で扱ったナノサイズき裂に対しては、サイズ依存性を示した。

キーワード: 破壊、 α 鉄、分子動力学法、平面状き裂、応力拡大係数、エネルギー解放率

1. 緒言

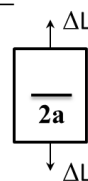
固体の破壊現象は、原子スケールでの原子間結合の切断と、より巨視的なレベルでのき裂の進展が関与するマルチスケールなプロセスである。照射材料においては、形成した照射欠陥の存在により、この現象は劇的に影響を受ける可能性がある。また、ミクロ・ナノスケール材料におけるき裂生成と進展に対しては、照射欠陥の存在により、破壊力学の古典論では理解できない部分がある^[1]。本研究では、引張変形下における、ナノサイズ平面状き裂の進展に関する MD シミュレーションを行った。き裂が進展し始める際の情報をもとに、応力拡大係数臨界値 K_{IC} やエネルギー解放率臨界値 G_{IC} を求めた。

2. 解析方法と結果

7種類のナノメートル平面状き裂のそれぞれに対して、引張変形下におけるき裂進展の様子を MD シミュレーションにより観察した。その際得られたエネルギー解放率臨界値 G_{IC} を表 1 に示す。き裂長さが減少するとともに、 G_{IC} は減少することが明らかになった。これは従来の理論とは異なる結果である。

表 1 7の異なるき裂サイズに対する G_{IC}

Model Type	Crack Length $2a$ (Å)	G_{IC} (N/m)
2p	8.076	0.991
4p	16.152	1.681
6p	24.228	2.367
8p	32.304	2.883
10p	40.380	3.240
12p	48.456	3.484
20p	80.760	4.065



3. 結論

MD シミュレーションを用いて、き裂の長さが数ナノメートルの場合、 α 鉄のエネルギー解放率臨界値 G_{IC} は材料定数ではなく、き裂サイズに依存することがわかった。今後は、き裂進展に対する照射欠陥の有無を検討し、従来の古典論の修正を考える。

参考文献

[1] A. Adnan, C.T.Sun, Journal of the Mechanics and Physics of Solids 58(7), 2010, pp. 983-1000.

*Xiaoyong Ruan¹, Yuting Chen¹, Toshiki Nakasuji¹ and Kazunori Morishita¹

¹Kyoto University