破壊き裂進展における照射効果の分子動力学評価

Molecular dynamics evaluation of the irradiation effects on nano-scale crack propagation

*豊田 達也[1]，阮 小勇[1,2]，森下 和功[1]，藪内 聖皓[1]

[1]京都大学，[2]QST（現）

照射による材料内のナノスケールの構造変化が破壊き裂進展に与える影響を定量的に明らかにするための第一段階として，き裂進展の分子動力学シミュレーションを行い，破壊力学における Griffith 条件との整合性を確認した．

キーワード：き裂進展，グリフィス理論，照射効果，分子動力学

1. 緒言

材料の破壊現象は，微視的には原子間結合の切断，巨視的にはき裂の進展によって特徴づけられる，マルチスケールな現象である．本研究では，照射材料に固有の照射欠陥の存在がき裂進展にどのような影響を与えるかを定量的に明らかにするための第一段階として，引張応力下のナノスケールき裂進展に関する MD シミュレーションを行い，連続体モデル（Griffith 理論[1]）との整合性を確認した．

2. 解析方法と結果

異なる長さのき裂を導入したα鉄結晶に対して引張応力を負荷し，き裂進展の MD 計算を行った．原子間ポテンシャルには Mendelev[2]のものを用いた．図 1 に，き裂長さを変化させた各条件での MD 計算から得たエネルギー臨界値と，Griffith 理論に基づいて算出した破断エネルギーを示す．エネルギーの臨界値は，き裂長さの長い条件では Griffith 理論による値に概ね一致したが，短い領域では理論値に達する前に破断した．これは，原子サイズに対してき裂長さが十分大きいとはいえない条件では，連続体モデルに基づく Griffith 理論が適用できないことを示唆する結果である．

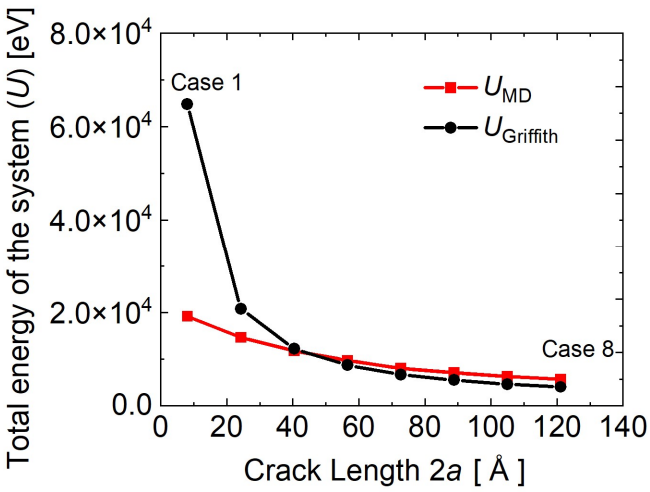

図 1　き裂長さとエネルギー臨界値

3. 結論

ナノサイズのき裂進展に関する MD シミュレーションを行い，ごく微小なき裂については従来の連続体モデルによる破壊条件（Griffith 条件）が適用できないことを明らかにした．今後は，き裂長さの短い領域での Griffith 理論の修正方法と，照射欠陥による影響を考慮する．

参考文献

[1] Griffith AA, Phil. Trans. Roy. Soc. A221, 168-198 (1920)

[2] Mendelev, Han, Srolovitz, Ackland, Sun and Asta, Phil Mag A, 83, 3977-3944 (2003)

*Tatsuya Toyoda[1], Xiaoyong Ruan[1,2], Kazunori Morishita[1] and Kiyohiro Yabuuchi[1]

[1]Kyoto Univ., [2]QST. (Currently)