欠陥を有する原子モデルによる塑性のマルチスケールモデリングに関する考察

宇都宮大学 ○学生員 菅家 茂理 宇都宮大学 正 員 斉木 功
宇都宮大学 正 員 中島 章典 東北大学 正 員 寺田 賢二郎

1. はじめに

原子レベルの微視構造から材料の特性を予測する手法としては，近年，急速に発展を遂げてきた分子動力学によるシミュレーションが有力な方法の一つである．金属等の塑性変形は，微視的に考えると原子配置の変化によることが知られており，分子動力学や転位動力学による塑性変形のシミュレーションが試みられている．そこで，著者らは原子レベルの微視構造の変形と巨視的な材料特性を結びつけるために，原子モデルを微視問題とする均質化理論に基づくマルチスケール解析法の定式化を行った[1)]．本論文ではマルチスケール解析手法を用い，代表体積要素に欠陥を導入することで，静力学的な観点から結晶格子のずれに起因する塑性変形のモデル化の可能性について検討する．

2. 離散体のマルチスケール解析

図–1 のように，非常に小さい ϵ によって規定される大きさ ϵY の微小なユニットセルにより，周期的に埋め尽くされた領域 Ω^ϵ を解析対象とする．ここで ϵ に依存する変数には Ω^ϵ のように上付きの ϵ を付すものとする．物体力がないものとすると，大変形超弾性体の境界値問題は

$$\nabla_X \cdot \boldsymbol{P}^\epsilon = \boldsymbol{0} \tag{1}$$

$$\boldsymbol{u}^\epsilon = \underline{\boldsymbol{u}} \quad \text{on } \Gamma_u, \quad \boldsymbol{P}^{\epsilon\mathrm{T}} \cdot \boldsymbol{N} = \underline{\boldsymbol{t}} \quad \text{on } \Gamma_\sigma \tag{2}$$

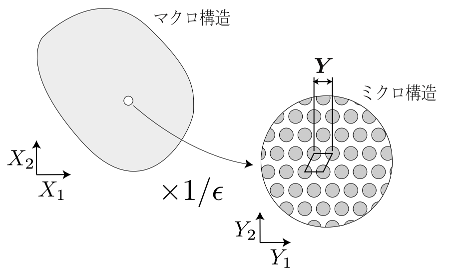
と表される．ここに，$\boldsymbol{P}^\epsilon$ は第 1 Piola-Kirchhoff 応力，$\underline{\boldsymbol{u}}$, $\underline{\boldsymbol{t}}$ は与えられる幾何学的および力学的境界条件，$\boldsymbol{N}$ は初期配置における単位外向き法線ベクトル，Γ は領域 Ω の境界，$\boldsymbol{X}$ は物質座標を表す．この境界値問題からミクロ，マクロ，両スケールでの弱形式の釣合式

$$\left\langle \boldsymbol{P}^0 : \nabla_Y \boldsymbol{\eta}^1 \right\rangle_{NY} = 0 \tag{3}$$

$$\int_\Omega \nabla_X \boldsymbol{\eta}^0 : \tilde{\boldsymbol{P}}\,\mathrm{d}v - \int_{\Gamma_\sigma} \underline{\boldsymbol{t}} \cdot \boldsymbol{\eta}^0\,\mathrm{d}s = 0 \tag{4}$$

を得る．ここに，$\boldsymbol{u}^0$, $\boldsymbol{\eta}^0$ はマクロスケール変位およびその許容変分，$\boldsymbol{u}^1$, $\boldsymbol{\eta}^1$ は NY 周期性を有するミクロスケール変位およびその許容変分である．また，$\boldsymbol{P}^0$ は全応力，$\boldsymbol{F}^0$ は全変形勾配，$\tilde{\boldsymbol{P}}$ は平均応力であり，それぞれ

$$\boldsymbol{F}^0 := \boldsymbol{1} + \nabla_X \boldsymbol{u}^0 + \nabla_Y \boldsymbol{u}^1, \quad \tilde{\boldsymbol{P}} := \left\langle \boldsymbol{P}^0 \right\rangle_{NY} \tag{5}$$



図–1 マルチスケール法の概念図

により定義した．ここで注目すべきことは，ミクロ問題の対象となる代表体積要素として N 個の単位周期構造を考えなくてはならないことである．また，このとき代表体積要素内の全変形に起因する実変位 $\boldsymbol{w}$ は，一様変形に起因する成分と周期成分 $\boldsymbol{u}^1$ の和として

$$\boldsymbol{w}(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{Y}) = \nabla_X \boldsymbol{u}^0(\boldsymbol{X}) \cdot \boldsymbol{Y} + \boldsymbol{u}^1(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{Y}) \tag{6}$$

により与えられる．ここに $\boldsymbol{Y}$ はミクロスケール $\boldsymbol{Y} = \boldsymbol{X}/\epsilon$ を表している．またミクロスケール問題は，マクロスケール問題を解いて得られるマクロ変形を受けたときのミクロ構造の自己釣合問題であり，陰的構成関係を与えている．

ミクロスケール粒子群の弱形式釣合式は

$$\sum_{i=1}^{n} -\frac{\partial \mathcal{U}}{\partial \boldsymbol{w}_i} \cdot \delta \boldsymbol{w}_i = 0 \tag{7}$$

となり，ここに n は代表体積要素内の粒子の総数，$\boldsymbol{w}_i$ は粒子 i の実変位である．ここで，ミクロスケール $\boldsymbol{Y}$ の原点が属する境界上のある粒子の実変位を $\boldsymbol{w}_\mathrm{i}$，周期境界によりこの粒子に対応する粒子，すなわちこの粒子を $N\boldsymbol{r}_i$ 並進させた位置の粒子の実変位を $\boldsymbol{w}_\mathrm{d}$ とする．ここに $\boldsymbol{r}_i$ は**図–2** に実線で示す単位周期構造を規定する基本並進ベクトルである．このとき，マクロ変形 $\nabla_X \boldsymbol{u}^0$ に起因する両粒子間の相対変位 $\boldsymbol{d}$ は

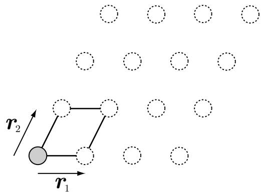
$$\boldsymbol{d} := \boldsymbol{w}_\mathrm{d} - \boldsymbol{w}_\mathrm{i} = \left\{ \nabla_X \boldsymbol{u}^0(\boldsymbol{X}) \right\} \cdot N\boldsymbol{r}_i \tag{8}$$

により与えられ，非線形釣合式 (7) を周囲境界条件 (8) のもとで解析する．

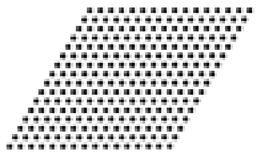
3. 解析例

前節で述べた離散体のマルチスケール解析手法を用いて，弾塑性材料特性に影響を及ぼすと考えられる，代表体積要

Key Words: マルチスケールモデリング，分子動力学，塑性変形
〒 321-8585 宇都宮市陽東 7-1-2 宇都宮大学工学部建設学科 Tel.028-689-6208 Fax.028-689-6230



図–2 単位周期構造

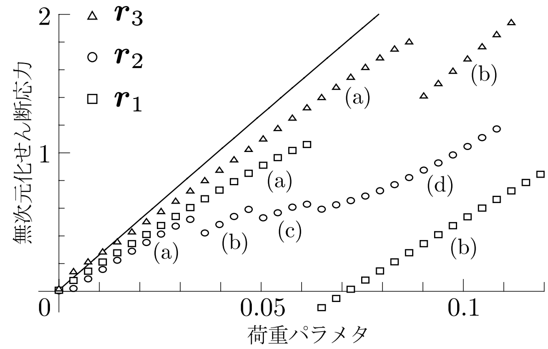


図–3 完全系の代表体積要素

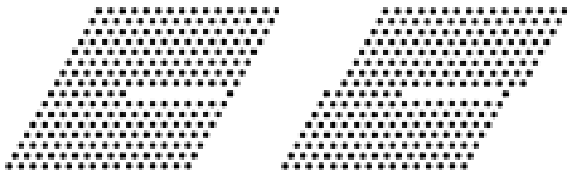
素 (RVE) の結晶欠陥について検討する．単位周期構造は**図–2** に示すものを用い，基本周期ベクトルは初期配置の応力がほぼゼロとなるように設定した．荷重条件は単純せん断を仮定し $\partial u_1^0/\partial y_2$ 成分のみ漸増しミクロスケール解析を行った．ただし，繰り返し計算が収束しない場合に限り，当該ステップ分のマクロ変形増分を動的な効果が表れない程度の低い速度で与え，仮想的な減衰を与えつつ動的に解析し，最終的に静的釣合状態を求めた．

図–3 に示す 16×16 の単位周期構造を含む完全系の RVE に対し 8 粒子の結晶欠陥を導入し，結晶欠陥の方向を $\boldsymbol{r}_1$，$\boldsymbol{r}_2$，$\boldsymbol{r}_3 := \boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2$ と変化させ解析を行なった．各方向の結晶欠陥に対する無次元化応力 $\tilde{\sigma}_{12}\sigma^2/\varepsilon$- 平均変位勾配成分 $\partial u_1^0/\partial X_2 (=$ 荷重パラメタ $f)$ 関係 (以後，せん断応力 - ひずみ関係と呼ぶ) を**図–4** に示す．図中における (b)，(c) などの記号は，RVE の変形が**図–5∼7** における (b)，(c) で示すような形状になっていることを意味する．図中，実線は完全系，□，○，△の順に $\boldsymbol{r}_1$，$\boldsymbol{r}_2$，$\boldsymbol{r}_3$ 方向に欠陥を有する RVE の結果を示している．

結晶欠陥が $\boldsymbol{r}_1$，$\boldsymbol{r}_3$ 方向の RVE では，荷重パラメタがそれぞれ 0.063，0.088 付近でせん断応力 - ひずみ関係が不連続になっている．この点において，静的繰り返し計算において発散が生じ，動的過程を経て欠陥に沿う方向にすべりが生じた変形形状が得られたためである．結晶欠陥が $\boldsymbol{r}_1$ 方向の RVE では，せん断方向とすべり方向が一致しているので，すべり変形を生じた直後は，荷重パラメタが 0.0722 だけシフトしただけで，すべりを生じる以前とまったく同様のせん断応力 - ひずみ関係を示す．結晶欠陥が $\boldsymbol{r}_3$ 方向の RVE では，生じたすべりは欠陥に沿う方向であるが，せん断方向とすべり方向が一致しないために，すべりを生じた後のせん断応力 - ひずみ関係は，すべりを生じる以前の関係と異なっている．結晶欠陥が $\boldsymbol{r}_2$ 方向の RVE では，荷重パラメタが 0.034，0.050，0.064 でせん断応力 - ひずみ関係が不連続になっており，最初の不連続点を除き，動的過程を経ている．最初の不連続点で**図–7** に示すように，欠陥の間隔が若干狭まる．次の不連続点では，両端の 2 粒子分を除き，欠陥が消失する．次の不連続点以後は，すべりが生じているが，すべり面に属するすべての粒子が一様に変位しているわけではない．

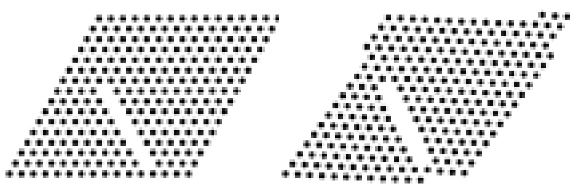


図–4 結晶欠陥の方向の影響



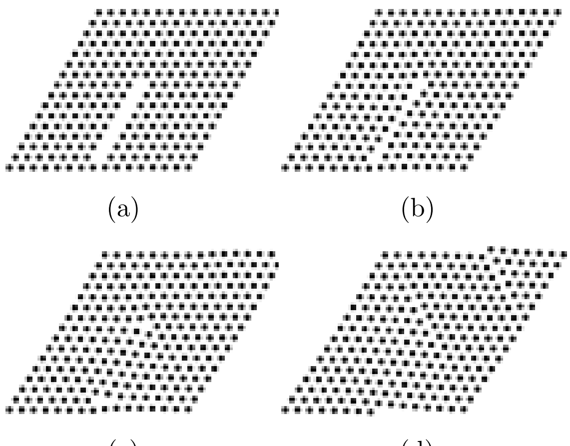
(a) (b)

図–5 r_1 方向に欠陥を有する RVE の変形



(a) (b)

図–6 r_3 方向に欠陥を有する RVE の変形



(a) (b)

(c) (d)

図–7 r_2 方向に欠陥を有する RVE の変形

参考文献

1) 菅家茂理，斉木　功，中島章典，寺田賢二郎: ポテンシャルを有する離散体のマルチスケールモデリング，応用力学論文集，Vol.5, pp.167-173, 2002.