原子－連続体連立解析による単結晶解析

株式会社横河技術情報 正員 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. まえがき

鋼の強度は結晶粒の大きさに影響を受け，いわゆるHall-Petch則に従い結晶粒の大きさに反比例して強度が増大することが知られている．近年，結晶が1μm程度の超微細粒からなるスーパーメタルのような新材料の開発が可能になりつつある[1)]．しかしながら，新材料の開発では，完成までにかなりの試作，実験の試行錯誤を要する．そこで，原子レベルの挙動から多結晶体の材料特性を推定する計算手法の構築が望まれている．

金属材料の塑性変形は微視的に観察すると，転位の移動に起因する結晶格子のすべりや，多結晶体の粒界におけるすべりによって生じている．現在では分子動力学によって固体の塑性変形を原子レベルからシミュレートすることが原理的には可能となっているが，結晶粒の大きさが数μmの多結晶体をモデル化する場合，粒子数が膨大となり計算は事実上不可能となる．そのため，多結晶体の材料特性を原子モデルの力学特性から推定することは非常に困難である．

原子モデルの力学特性からマクロ構造の挙動を求める研究として，Chung[2)]が動的に連続体－原子モデル間の連立解析を行っている．動的に原子の挙動を求める場合，10^{-15}sから10^{-12}sオーダーの非常に短時間の原子の挙動を求めるため，ミクロ構造の時間スケールとマクロ構造の時間スケールが整合しない．そこで，本研究では静的にミクロスケール解析を行い，原子－連続体間の連立解析を行う．本研究では原子レベルの微視構造における力学応答と，結晶レベルの力学応答を結びつけるために，非線形均質化理論によって原子－連続体連立解析の定式化を行う．著者らはミクロ構造の静的解析結果の検討を行っており[3)]，本研究では構築された原子－連続体連立解析を単結晶の1軸引張試験に適用を試みる．

2. 定式化

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$\epsilon\Omega^1$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，$\Gamma$は領域$\Omega^\epsilon$の境界，$\boldsymbol{X}$は物質座標を表す．仮定した超弾性体のひずみエネルギ$\mathcal{W}^\epsilon$を用いれば，構成関係は

$$\boldsymbol{P}^\epsilon = \frac{\partial \mathcal{W}^\epsilon}{\partial \boldsymbol{F}^\epsilon}, \quad \boldsymbol{F}^\epsilon := \boldsymbol{1} + \nabla_{X^0} \boldsymbol{u}^\epsilon \tag{3}$$

と表される．ここに$\boldsymbol{F}^\epsilon$は変形勾配である．非線形均質化理論を用いるとこの境界値問題からマクロ，ミクロスケールでの弱形式の釣合式

$$\left\langle \boldsymbol{P}^0 : \nabla_{X^1} \boldsymbol{\eta}^1 \right\rangle_{\mathcal{D}} = 0 \tag{4}$$

$$\int_\Omega \nabla_{X^0} \boldsymbol{\eta}^0 : \tilde{\boldsymbol{P}} \,\mathrm{d}v - \int_{\Gamma_\sigma} \underline{\boldsymbol{t}} \cdot \boldsymbol{\eta}^0 \,\mathrm{d}s = 0 \tag{5}$$

が得られる．ここに，$\boldsymbol{X}^0$はマクロスケールを示し，$\boldsymbol{X}^1 := \boldsymbol{X}^0/\epsilon$はミクロスケールである．ここに，$\boldsymbol{\eta}^0$，$\boldsymbol{\eta}^1$はマクロ，ミクロスケールの許容変分である．$\mathcal{D}$は$N \times N$個のユニットセルを有する代表体積要素の領域を示す．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

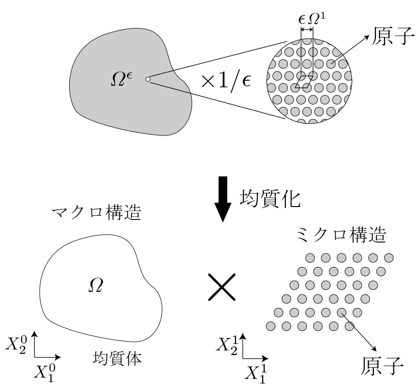
$$\begin{gathered} \boldsymbol{P}^0 := \frac{\partial \mathcal{W}}{\partial \boldsymbol{F}^0} \\ \boldsymbol{F}^0 := \boldsymbol{1} + \nabla_{X^0} \boldsymbol{u}^0 + \nabla_{X^1} \boldsymbol{u}^1, \quad \tilde{\boldsymbol{P}} := \left\langle \boldsymbol{P}^0 \right\rangle_{\mathcal{D}} \end{gathered} \tag{6}$$

により定義した．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

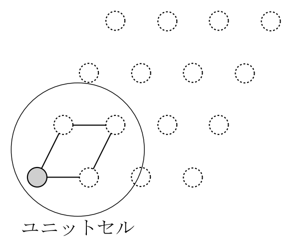
$$\boldsymbol{w}(\boldsymbol{X}^0, \boldsymbol{X}^1) = \nabla_{X^0} \boldsymbol{u}^0(\boldsymbol{X}^0) \cdot \boldsymbol{X}^1 + \boldsymbol{u}^1(\boldsymbol{X}^0, \boldsymbol{X}^1) \tag{7}$$

により与えられる．またミクロスケール問題は，マクロ変形を受ける代表体積要素の自己釣合問題であり，マクロスケール問題の陰的構成関係となっている．

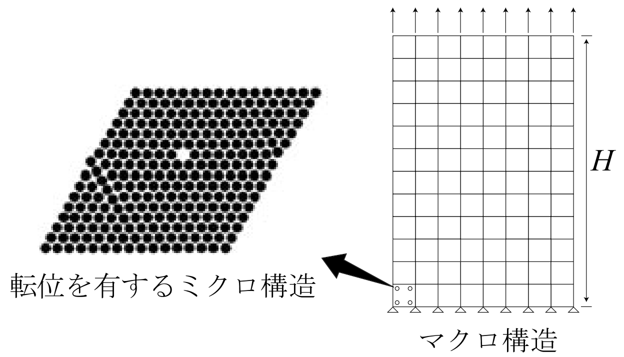
Key Words: *Atomic–continuum model simultaneous analysis, Molecular dynamics, homogenization theory*
〒273-0026 千葉県船橋市山野町47-1 横河第二テクノビル



図–1　マクロ – ミクロスケール概念図



図–2　ユニットセル

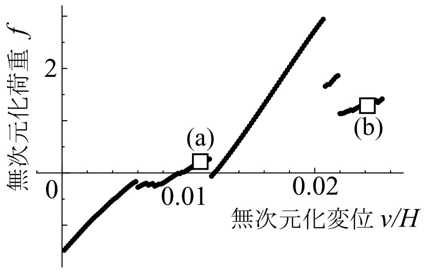


図–3　マクロ構造とミクロ構造

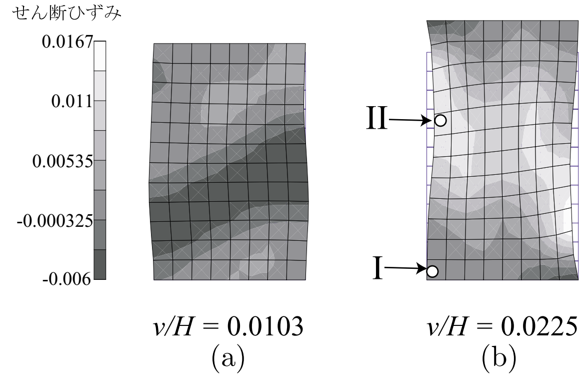
3.　単結晶モデルの解析結果

図–3 に示すマクロ，ミクロ構造に対して解析を行う．ミクロ構造は 16×16 の粒子を含み，マクロ構造の転位を有する代表体積要素とした．1 要素内の Gauss 点は 4 点とし，全 384Gauss 点においてミクロ構造を定義した．**図–3** に示すように，マクロ構造の底辺を完全固定し鉛直上方向に引張を与えた．

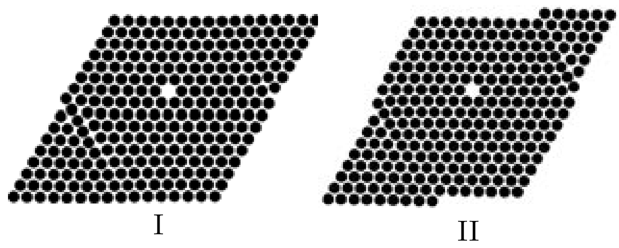
このとき，マクロ構造の載荷点における変位 v をマクロ構造の高さ H で無次元化した変位 v/H と荷重の関係を**図–4** に示す．**図–4** において初期状態では圧縮荷重が生じており，$v/H = 0.0118$ においては外力がほぼゼロとなる．さらに，$v/H = 0.0208$ において荷重が減少しマクロ構造の一部に塑性変形が生じる．**図–4** 中 (a)，(b) の□は**図–5** に示すマクロ構造の変形 (a)，(b) と対応しており，図中の濃淡はせん断ひずみ分布を示す．また $v/H = 0.0225$ での，マクロ構造の I 点と II 点におけるミクロ構造の変形を**図–6** に示す．$v/H = 0.0103$ においてマクロ構造の中央部に負のせん断ひずみが生じ，無荷重域である $v/H = 0.0118$ から圧縮を与えた場合**図–5** (a) に示す変形が生じると考えられる．$v/H = 0.0225$ ではマクロ構造にくびれが生じている．せん断ひずみがほぼゼロの I 点におけるミクロ構造は初期配置と同様の形状を示しているのに対し，II 点ではミクロ構造にすべりが生じており，マクロ構造の塑性変形をミクロ構造のすべりによって表すことができ，原子 – 連続体連立解析のモデル化を行うことができた．



図–4　変位 – 力関係



図–5　マクロ構造の変形図



図–6　$v/H = 0.0225$ のときのミクロ構造の変形

参考文献

1) Niikura, M., Fujioka, M., Adachi, Y., Matsukura, A., Yokota, T., Shirota, Y. and Hagiwara, Y.: New concepts for ultra refinement of grain size in super metal project. *Journal of Materials Processing Technology*, Vol.117,pp.341-346, 2001.

2) Chung, P. W. and Namburu, R. R.: On a formulation for a multiscale atomistic-continuum homogenization method. *Int. J. Solids Struc.*, Vol.40, pp.2563-2588, 2003.

3) 斉木　功，菅家茂理，中島章典，寺田賢二郎：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一考察．応用力学論文集, Vol.6, pp.123-130, 2003.