

破壊素過程の計算機シミュレーション

Computer Simulations of Crack Extension from an Atomistic Viewpoint

澤村 明賢*・山本 良一**

Akitaka SAWAMURA and Ryoichi YAMAMOTO

材料の破壊は微視的には原子間結合の破断や組み替えであるから、クラックの進展の原子レベルでのシミュレーションがマイクロメカニクスや有限要素法等の手法とならんできわめて重要な研究手法となっている。本稿ではクラック進展の計算機シミュレーションのレビューを行うとともに、SIC 中のクラック挙動のシミュレーション結果について述べる。

1. はじめに

材料の強度や破壊の問題は、原子レベルから構造物レベルまで広い範囲に及んでいる。しかし、現実の材料の強度や破壊の問題は非常に複雑であるため、主に Griffith¹⁾ に始まる連続体力学的な取り扱いがなされてきており、この方面の研究は転位論マイクロメカニクスなどの理論や有限要素法などの数値計算法、AE 波解析などの実験技法と結合して、多大な発展を遂げている。

その一方、材料の破壊は、微視的には原子間結合の破断や組み替えであるから、本質的な理解のためには原子レベルでの取り扱いも重要である。このため表 1 に示した目的で、原子レベルでクラックの挙動の計算機シミュレーションが行われている。そこで本報告では、これらのシミュレーションの歴史を辿るとともに、筆者らの行った研究についても述べたい。

クラックをモデル化する方法は表 2 に示したように大きく分けて 3 つある。1 つは原子構造模型で、クラック

表 2 クラックを原子レベルでモデル化する方法

(1a)	微結晶体の内部にクラックを導入。
(1b)	微結晶体の表面からクラックを導入。
(2)	格子力学に基づき、無限大の結晶中で、仮想的な原子間結合の切断によりクラックを導入。
(3)	マクロな連続体中に非常に長いクラックを考え、クラック先端のみを原子領域として扱う。

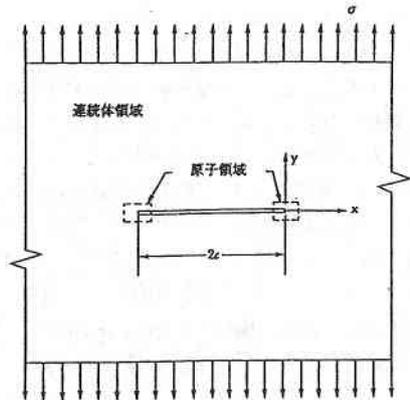


図 1 非常に大きい連続体中にマクロなクラックを考え、その先端のみを原子領域として扱うモデルの模式図。図はモード I の負荷の場合を示しており、 $2c$ はクラックの長さである。文献 4) より。

表 1 原子レベルでのクラック進展のコンピュータシミュレーションの目的

(1)	クラックが安定に存在し得る外力の範囲 (lattice trapping の範囲) の決定。
(2)	クラック進展に対するエネルギー障壁を求める。
(3)	クラック先端の近傍における有効な K 値の評価。
(4)	J 積分などの経路独立積分の評価。
(5)	対象物質が本質的に脆性-延性かの検討。
(6)	クラック先端からの転位の放出、クラック先端付近の構造の変化をシミュレートする。
(7)	伝播速度や先端の分岐などクラックの動的性質を調べる。
(8)	温度による脆性-延性転移をシミュレートする。
(9)	複数モードの負荷における破壊挙動を調べる。
(10)	クラック進展に対する不純物原子の影響を調べる。

を導入した微結晶体を取り扱う。周期的境界条件を適用する場合もある。この方法は簡単だが、境界の影響の問題があり、連続体力学で取り扱った場合との関連付けが難しい。第 2 の方法は格子力学理論²⁾ に基づく方法である。無限大の格子の原子間結合を仮想的に切断することによりクラックを導入する。クラック長は有限であるが、原子変位が解析的な形で求められることが長所である。第 3 の方法は図 1 に示したように、マクロな連続体中に平坦なクラックを考え、その先端のみを原子領域として

*住友電気工業(株)

**東京大学生産技術研究所 第 4 部

扱う方法である。原子レベルでの現象を弾性論と関連付けて考察することが容易になる。なお、実際には平面歪の場合のみが扱われている。ここではこの手法を“埋め込み法”と呼ぶことにする。連続体領域と原子領域とを接続する方法(境界条件)により、この手法は幾つかに分類される。

なお、[ABC] (DEF) クラックとは、それぞれクラックフロントが [ABC] 方向、クラック面が (DEF) 面であることを示し、(ABC) [DEF] クラックとは、それぞれクラック面が (ABC) 面、クラック進展方向が [DEF] 方向であること、[ABC] クラックとは、クラックフロントが [ABC] 方向であることを意味することにする。また特に断わらない限り、クラックはモード I、先端の形状は直線状であるとする。通常、大文字で書かれた応力拡大係数 (K 値) は小文字で書かれた k 値の $\pi^{1/2}$ 倍で、文献では両方が用いられているが、本報告では後者は前者の K 値に換算し、単位も $\text{Pam}^{1/2}$ に統一した。

2. 従来のクラック進展素過程の計算機シミュレーション

原子レベルでクラック進展の素過程を解明しようとするシミュレーションは、1970年代に入る直前に始められた。それ以降、ほぼ1970年代半ばまでがシミュレーションそれ自体の立ち上がりの時期であるといえる。そして1980年代に入り、シミュレーションが実際に何らかの問題解明のために行われるようになった。ここでは紙面の都合上、これらシミュレーションの中でも、特に破壊力学で重要なパラメータである K 値と関連付けた取り扱いの可能な、上述の埋め込み法を用いた実例の一部について概略を述べるにとどめる。なお、クラック進展のシミュレーション全般については、文献3)を参照されたい。

1970年代初頭から、Battell Memorial Institute のグループは、図1に示した手法を用いて α -Fe における一連のモード I クラックの進展のシミュレーションを行っている^{4)~11)}。方位は $\langle 100 \rangle \{100\}$ である。境界条件については、原子領域を囲む連続体中にも原子が存在すると考え、これらの原子を線形弾性論¹²⁾の解に基づいて変位させ、原子領域のみを緩和させる方法('fixed boundary condition', 固定境界条件)と、原子領域の緩和の促進のため、連続体領域をも同時に緩和させる方法^{13)~15)}('fixible boundary condition', 柔軟境界条件)とが用いられている。

まず、臨界応力拡大係数 K_C をポテンシャルエネルギーがクラック先端の位置に存在しなくなる場合の K 値として求め、 $K_C = 0.78 \text{MPam}^{1/2}$ なる結果が得られた⁴⁾。この値はポテンシャルと線形弾性論から求めた Griffith の臨界応力拡大係数 $K_G = 0.77 \text{MPam}^{1/2}$ にほぼ

近い値であった。

しかし、クラック進展を始めるのに必要な K 値に関しては、意外な結果が得られた。連続体領域を等方弾性論で記述した場合、 $K = 3.1 K_G$ で $\{110\}$ 面内のクラックの進展が⁷⁾、異方性弾性論を用いた場合 $K = 2.78 K_G$ で $\{100\}$ 面内のクラック進展が見られた⁸⁾ ののである。離散的なモデルではある K 値の範囲でクラックが進展も後退もせず安定に存在するため¹⁶⁾、 K_G の3倍の負荷でクラック進展が生じたとしても、必ずしも異常ではない。しかし意外な結果であることに変わりはなく、原因の可能性としてシミュレーションでは不純物原子がないことや熱振動の影響を考慮していないことが挙げられている⁸⁾。

このため、クラックが進展を開始するに要する負荷は原子レベルの立場から本当に K_G の3倍程度なのか否か、論争が始まった。

Battell Memorial Institute のグループからやや遅れて、Sinclair ら^{17)~20)} は一連のダイヤモンド型物質の $[0\bar{1}1]$ (111) クラック進展のシミュレーションを行った。そこではまず、ダイヤモンド、Si、Ge 中のクラックも K_G 付近の負荷で安定に存在できることが示された^{17), 18)}。

続いて独自の柔軟境界条件²²⁾により、Si 中のクラックが安定に存在できる K 値の上限と下限(それぞれ K_{\min} , K_{\max}) が求められた²⁰⁾。その結果、原子間ポテンシャルの選択により、 K_{\min} は K_G の0.34倍から0.99倍、 K_{\max} は1.2倍から2.5倍になることが示された。但し、 $K_G = 0.727 \text{MPam}^{1/2}$ である。したがって、Battell グループ^{7), 8)}の結論は、手法の不完全さに起因する誤りである可能性が高まったが、決着がつくのは1980年代であった。

1970年代半ばから、具体的な物質を念頭においてシミュレーションの空白期が続く。しかし、1980年代前期から新しい手法を取り入れたシミュレーションが行われ始めた。クラックのシミュレーションが可能であることを示すための研究から、何らかの問題解決を目的とした研究へ比重が移ってきたのもこの頃である。

その代表といえるのが、原子レベルのモデルに有限要素法を組み合わせた Mullins ら^{23)~26)} や Kohlhoff ら²⁷⁾ による一連の α -Fe 中のクラック進展のシミュレーションである。それ以前のシミュレーションでは、連続体領域は線形弾性論に従うとされ、しかもクラックのモードはモード I に限られていた。これに対し、連続体領域を有限要素法で扱うことにより、原子領域と併せてモデル全体を十分緩和することができ、結果の信頼性が向上するほか、混合モードのクラックが扱えるようになるのもこの方法の利点である。

その結果、まず $[010] (001)$ クラックが安定に存在できる K 値の下限と上限は、それぞれ $0.78 K_G$ と $1.42 K_G$,

[110] (001) クラックにおいてはそれぞれ $0.88K_G$ および $1.12K_G$ であった²³⁾。ただし, [010] (001) および [110] (001) クラックについてはそれぞれ $K_G = 0.6905MPam^{1/2}$, $K_G = 0.7070MPam^{1/2}$ である。両者の結果にある程度の差はあるものの, いずれの方位においても, クラック進展開始に要する K 値は K_G の 3 倍には及ばない値である。

この結果によって, 緩和が十分なされるならば, 少なくとも α -Fe においては K_G に近い大きさの負荷でクラックが進展を開始することが示されたため, クラック進展のシミュレーションの信頼性が確立され, 具体的な問題解決に応用する機運が盛り上がった。たとえばクラック先端からおよそ格子定数の 20 倍を越えた領域では, 緩和後の原子配置は線形弾性論に基づく変位にほとんど一致することが示された²³⁾, α -Fe 中の水素原子は脆化の作用を有すること²⁵⁾が示された。

しかし, 原子レベルのモデルに有限要素法を組み合わせた手法の利点が大いに発揮された例として, 次の 2 例を挙げねばならない。その 1 つはクラック進展速度の上限を評価するためのもので, 一定負荷のもとで [101] (010) クラック進展の動的なシミュレーションが行われた²⁴⁾。その結果, まっすぐに進展するクラックの速度は c_2 (等方性を仮定した場合の横波速さ) の $0.2 \sim 0.55$ 倍の範囲にあり, K 値が $1.8K_G$ に達した場合には図 2 のようなクラックの (101) 面への分岐が見られた。クラック進展速度が c_2 の約 0.6 倍を越える場合, 応力が最大となる方位はクラック面の法線方向でないことが, Erdogan²⁸⁾ による等方弾性論に基づいた計算から求められており, シミュレーションの結果はこれと一致している。高応力下でのクラックの分岐は実験的にも確認されている²⁹⁾。

もう 1 つはモード I とモード II との混合応力下における α -Fe の破壊のシミュレーション²⁶⁾で, クラックの方位は [101] (010) である。この場合, モード I および II

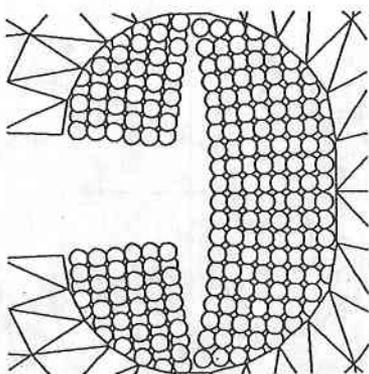


図 2 α -Fe における [101] (001) クラックの (101) 面への分岐。 $K=1.8K_G$ である。文献 24) より。

に対する臨界応力拡大係数は, それぞれ $K_{IG} = 1.7070MPam^{1/2}$ および $K_{2G} = 0.7476MPam^{1/2}$ である。負荷をさまざまに変化させてシミュレーションを行った結果, モード I の負荷が支配的である場合クラックの脆性的な進展が生ずるのに対し, モード II の成分の増加について転位または双晶が生成され, 延性破壊が生ずる傾向があることが示された。この結果を相図にしたのが図 3 である。

Kohlhoff ら²⁷⁾ も原子レベルのモデルと有限要素法を組み合わせた手法を用い, α -Fe における [001] (010), [101] (010) および [101] (101) クラックの進展のシミュレーションを行っている。臨界応力ぎりぎりの負荷から $0.5K_G/ps$ で負荷を増加させ, 原子領域を緩和することにより, クラック進展の動的なシミュレーションを行っている。最初のクラックの方位では傾いた劈開が, 次の方位では完全脆性破壊が, 最後の方位では転位の放出と (121) 双晶の発生を見ている。

さて, 今までのような変位によって境界条件を与える手法では, 原子領域内での原子のさまざまな挙動, 特に転位の生成が抑制されてしまう可能性が高い。このため, 境界上の原子に個々に一定の力を作用させることで境界条件を課する手法が MIT のグループ^{30)~32)} により開発されており (応力境界条件), α -Fe および Cu におけるクラック進展のシミュレーションに利用されている。

その結果, α -Fe のクラックは K_G/ps の 0.8 から 1.2 倍の負荷のもとで安定に存在できること, 仮に固定境界条件を用いた場合, 原子の変位が抑制され, クラック先端付近に十分な負荷が作用しないことが明らかにされ

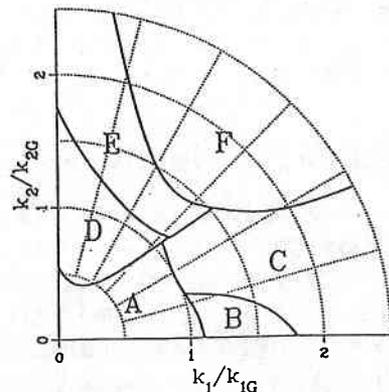


図 3 混合モードの負荷における α -Fe の [101] (010) クラックの挙動。文献 26) より。

- A : 構造の変化無し。
- B : (010) 面上の劈開。
- C : (010) 面以外の面上の劈開。
- D : 転位の発生。
- E : 転位と双晶の発生。
- F : 転位または双晶の発生とこれに続く (010) 面以外の面上のクラック進展。

た³⁰⁾. このことから α -Fe でクラックが進展し始める K 値は K_G 程度かその 3 倍前後かという論争に, 明確な決着がついたことになった. また, Cu 中のクラックでは $K=0.8K_G$ のもとで転位が放出されたため, Cu は本質的に延性物質であるとの結論も得られている³⁰⁾.

これに続いて Cheung らは α -Fe の温度による脆性-延性転移のシミュレーション³¹⁾を行い, その結果を Rice と Thomson³³⁾ のクラック先端からの転移ループ発生のモデルと関連付けて考察しており³²⁾, 脆性-延性転移が室温付近を境として生ずること, 転移放出の活性化エネルギーは 5.1eV で, Rice と Thomson のモデルに基づく値 (81eV) に比べ非常に小さく, これにはクラック先端の応力集中による局所的な弾性定数の軟化の影響が大きいことが指摘されている.

Hoagland ら^{34), 35)} は, クラックの線形弾性論を原子レベルのモデルを用いた結果と比較し, 前者がどの程度微視的な領域で成立するかを確認する基礎的な目的から, Al について 3 つの方位のクラックの進展と転位放出のシミュレーションを行い, 結果を線形弾性論の結果と比較し, Eshelby³⁶⁾ の F 積分と M 積分の経路独立性の評価を行った. クラックの方位は (010) [001], ($\bar{1}\bar{1}0$) [001], ($\bar{1}\bar{1}0$) [$11\bar{2}$] である.

その結果, $K=0.4MPam^{1/2}$ ではどのモデルのクラックも安定であった. そこでクラック先端付近の原子変位の x 成分 u_x を用いてクラック進展・後退と有効な K 値の評価を行っており, 弾性場の原点が元のクラック先端位置から 1 nm 程度後退したと有効な K 値が与えた K 値の約 70% であることを結果として述べている³⁴⁾. また, シミュレーションの結果に基づいて F 積分と M 積分を計算した結果, クラックが鋭い場合, F 積分・ M 積分とも線形弾性論の予想にほぼ一致していることが解った³⁵⁾.

3. β -SiC におけるクラック進展のシミュレーション

シミュレーションでは原子レベルのモデル化を行うため, Tersoff の多体原子間ポテンシャル⁴¹⁾を用いた. これは共有結合を扱うために結合角に対する依存性を取り入れたポテンシャルの中で, 化合物を扱えるものである.

クラックのモデル化には, 結果を K 値で示された負荷と関連させて考察するため, 図 1 のような埋め込みモデルを用いた. 原子領域と連続体領域の接続のため, 問題に応じ固定境界条件または応力境界条件を用いた. このモデルに対し K 値で示される一定の負荷を与え, 分子動力学法での緩和により, 結果を求める. なお, Tersoff ポテンシャルから求めた β -SiC の K_G 値は, [$\bar{1}\bar{1}0$] (111) および [$\bar{1}\bar{1}2$] (111) クラックについてそれぞれ $1.597 \times 10^6 Pam^{1/2}$ および $1.589 \times 10^6 Pam^{1/2}$ で, 実験で求められた (111) 面上の硬貨状クラックについての破壊

靱性値 $3.23 \times 10^6 Pam^{1/2}$ の約 1/2 である.

最初に, β -SiC 中の [$\bar{1}\bar{1}0$] (111) クラック進展の静的なシミュレーションを行った^{46), 48)}. クラックが安定に存在できる K 値の範囲を求めるとともに, 線形弾性論がどの程度クラック先端の近傍まで成立しているか確認することがその目的である. なお, 固定境界条件を用いており, 境界の影響を避けるため 4320 個という多くの原子を扱った.

その結果, K_G の 0.6~3.4 という広い負荷の範囲で, クラックが安定であることが示された. これは従来行われていた α -Fe に関するシミュレーションの結果と比べて非常に広い. また, $K=3.5K_G$ ではクラックは (111) 面上を進展せず, (001) 面上に向かった. 図 4 に, $K=3.5K_G$ における緩和後のクラック先端付近の原子構造を示す.

この結果の妥当性の確認のため, クラック進展によるポテンシャルエネルギーの変化を近似的に計算した.

その結果, $K=0.5K_G$ では, クラック先端の移動に伴うポテンシャルエネルギーの山がないのに対し, $K=0.6K_G$ では途中で山が発生しており, クラックが安定に存在できる K 値の下限について, シミュレーション

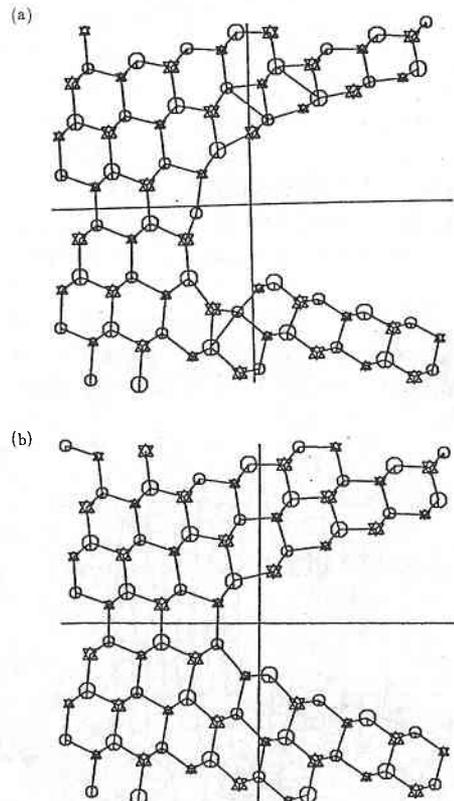


図4 $K^*=3.5$ におけるクラック先端付近の原子配置.
(a)緩和前, (b)緩和後.

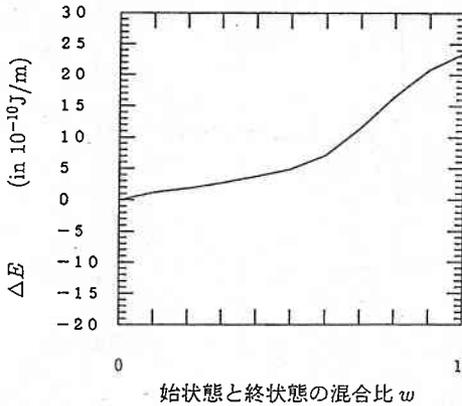


図5 $K=0.5K_G$ における理想的なクラック進展に伴うポテンシャルエネルギー変化。

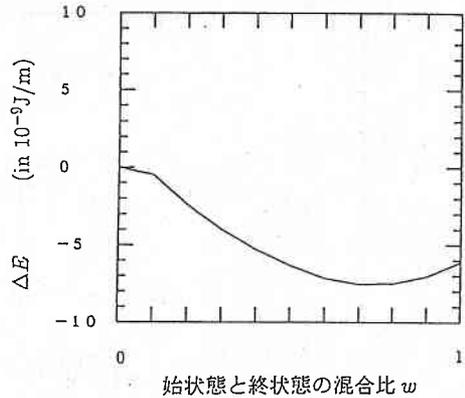


図7 $K=3.2K_G$ における理想的なクラック進展に伴うポテンシャルエネルギー変化。

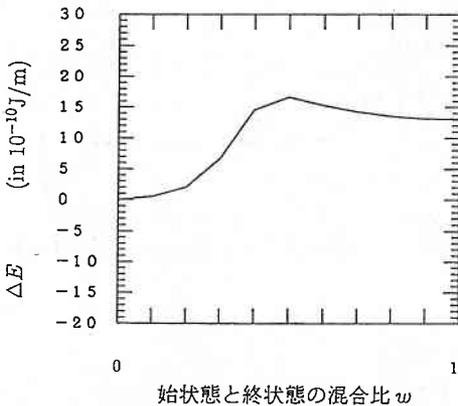


図6 $K=0.6K_G$ における理想的なクラック進展に伴うポテンシャルエネルギー変化。

の結果は妥当であることが示された（それぞれ図5および図6）。 $K=0.5K_G$ でも $K=0.6K_G$ でもクラック後退はエネルギー的には有利であるが、後者の場合クラック後退過程は 3×10^{-10} J/m のエネルギー障壁を経由する過程であることがわかる。

一方、上限に関して、図7に示したように、エネルギーの障壁は $K=3.2K_G$ で見られなくなった。この値は上のシミュレーションでの値に比べやや小さいが、 $K=3K_G$ 程度という点で一致している。さらに、 $K=3.5K_G$ で (111) 面上の進展と (001) 面へのクラックの偏向の2つの経路について、進展によるポテンシャルエネルギー変化を計算した。この結果、図4に示したように、進展の初期過程においては後者が進展の初期過程においては 5×10^{-10} J 程有利であることが示された。したがって上のシミュレーションの結果は妥当であるといえる。

また、 $K=K_G$ 前後でも同様の計算を行い、クラックの進展と後退に対し中立な負荷は K_G の1.1~1.2倍で、

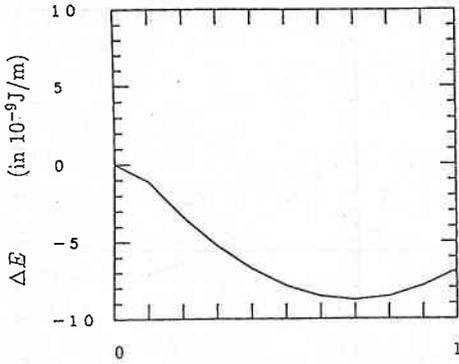
その活性化エネルギーは 1.4×10^{-9} J/m であることがわかった。この値に相当する分だけ表面エネルギーが本来の値より大きいと仮定してクラック進展に要する元の K_G の1.4倍となり、 $K=3K_G$ 程度でクラックが進展したシミュレーションの結果と一致しない。このため、破壊を議論する場合、無負荷あるいは中立な負荷を与えた系の挙動から実際の破壊挙動を予想する方法には限界があることがわかる。

線型弾性論がどの程度微視的な領域まで妥当性を有するかは、破壊の議論の基礎として興味深い問題である。そこでシミュレーションから得られた原子配置からクラック先端位置の X 方向の移動量と有効な K 値の評価を行った。シミュレーションの結果得られた原子 i の変位を \vec{u}_i 、クラック先端の x 座標が x_{adj} 、応力拡大係数が K_{adj} である場合に線型弾性論から求められる原子 i の変位を \vec{u}_{iadj} として、最小化すべき目的関数 E を

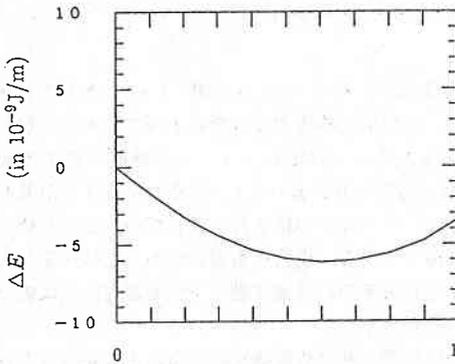
$$E = \sum_i |\vec{u}_i - \vec{u}_{iadj}|^2, \quad (1)$$

で定義する。 x_{adj} および K_{adj} を変化させることにより、目的関数 E を最小化する。 E が最小となるときの x_{adj} および K_{adj} が、それぞれクラック先端の有効な x 座標 x_{eff} および有効な K 値 K_{eff} である。この場合、 $x_{eff} > 0$ はクラック進展、 $x_{eff} < 0$ はクラック後退を意味する。また、 K_{eff} が与えた K 値を上回っていればクラック先端で線型弾性論の予測を越えた変位が発生していることになる。下回っていれば何等かの緩和機構の作用で、負荷が完全に伝達されなくなっていることが示唆される。また、有効なクラック先端位置の図で、縦軸の正の方向がクラック進展、負の方向がクラック後退を示す。同様に(b)には K_{eff} の与えた K 値からのずれ $\delta K_{eff} = K_{eff} - K$ を示す。

その結果、 $K=0.5K_G$ ではクラック先端位置が、図9に示したように、ほぼ格子の周期長程度後退している



始状態と終状態の混合比 w



始状態と終状態の混合比 w

図 8 $K=3.5K_G$ におけるクラックの挙動に伴うポテンシャルエネルギー変化。
(a)理想的なクラック進展。(b)(001)面に交差する Si-C 結合の解離(図 4)。

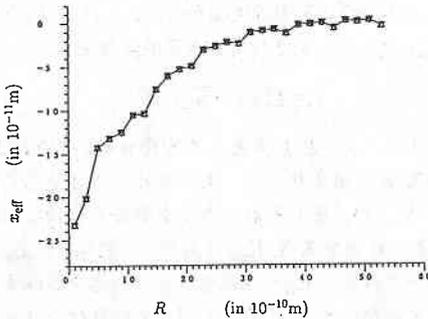


図 9 $K=0.5K_G$ におけるクラック先端位置の移動。

ことが明らかとなった。 $K=0.6K_G$ では、図10のように、クラック先端は殆ど動いていない。したがって、クラックの原子配置から $K=0.5K_G$ のクラックが後退したとした見方は正しいことが裏付けられた。また、有効な K 値に関し、クラック先端から $2 \times 10^{-9}m$ 以内の領域では有効な K 値は上昇しており、その値は負荷により K_G の 0.2~0.4 倍程度という結果が得られた。図11お

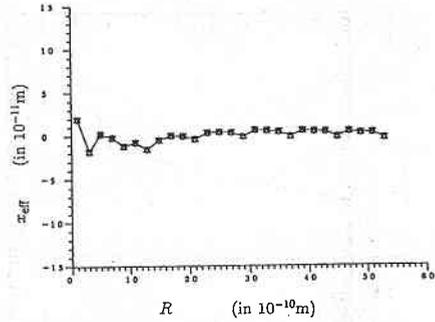


図10 $K=0.6K_G$ におけるクラック先端位置の移動。

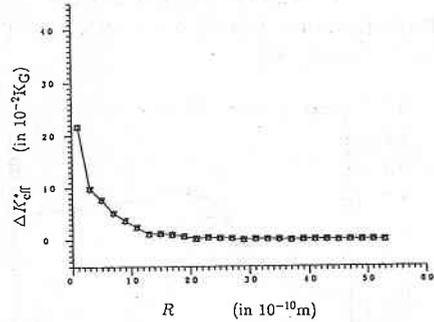


図11 $K=0.6K_G$ における有効な K 値の与えた K 値からの変化。

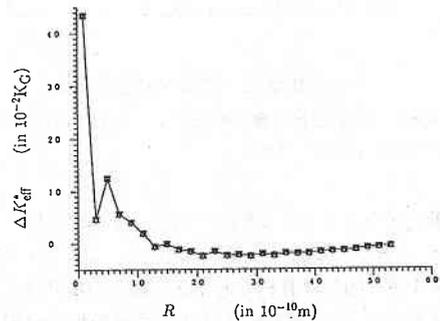


図12 $K=3.4K_G$ における有効な K 値の与えた K 値からの変化。

および12に、それぞれ $K=0.6K_G$ および $3.4K_G$ における有効な K 値の与えた K 値からの変化を示す。さて、図13のように、 $K=3.4K_G$ では、 x_{eff} は R が小さくなる程その絶対値が大きくなるような変化を示さず、むしろ R の増加にしたがってあるところでピークに達し、その後減少に転ずる傾向を示している。言い換えると、クラック先端からある程度離れた領域が、先端から非常に近い部分よりも負荷に敏感に反応している。これは以下のように解釈できる。 $K=3.4K_G$ では負荷は中立な値を上回っているため、クラック先端はポテンシャルの障壁に捕えられながらも進展しようとする。しかし、与えた負荷が大きいためクラック先端に歪が激しく集中して

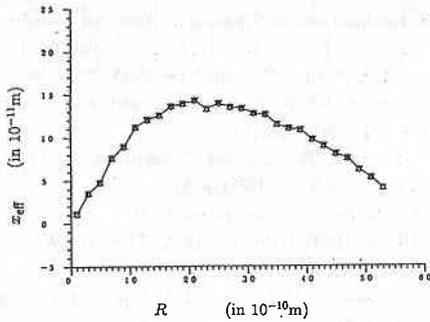


図13 $K=3.4K_G$ におけるクラック先端位置の移動。

おり、原子間の結合が浅くなることから負荷がクラック先端まで十分に伝達されない。このため、 x_{eff} からクラック先端周辺の原子配置を考える限り、クラック先端からある程度離れた領域が負荷に対して敏感に応答する。しかしこの結果は、歪の集中はクラック先端ほど激しいことを考えれば、 δK_{eff} が $R < 2 \times 10^{-9}m$ の範囲でのみ顕著に上昇していることと矛盾しない。したがって、クラック先端から $2 \times 10^{-9}m$ 以上離れた領域では線型弾性論はほぼ妥当であると言えよう。田中ら無機材研のグループが行った15R-サイアロン、Si および 6H-SiC におけるクラック先端の原子レベルでの電顕観察^{43)~45)} や、 α -Fe に関する Mullins ら²³⁾ のシミュレーション、Al に関する Hoagland ら³⁴⁾ のシミュレーションからも、クラック先端付近で線型弾性論がどの程度妥当か研究されており、クラック先端から $1 \sim 4 \times 10^{-9}m$ 以上離れた領域ではほぼ妥当であると結論されている。本研究の結果も、オーダーとしてはこれらと一致している。

続いて、 β -SiC 中の $[1\bar{1}0]$ (111) クラックの有限温度での挙動を明らかにすることを目的としたシミュレーションを、埋め込み模型と応力境界条件で行った^{46),47)}。設定温度は300K から2000K である。クラック進展に要する K 値に関し、300K では $K=3.2K_G$ 、1000K では $K=2.8K_G$ 、1000K では $K=2.4K_G$ でクラック進展が見られた。静的なシミュレーションに比べ、クラック進

展に要する K 値は低下している。 $K=2.8K_G$ におけるクラック進展のエネルギー障壁は $3.1 \times 10^{-19}J$ であるのに対し、温度1000K は1原子当り $2.1 \times 10^{-20}J$ であり、約1/15 に過ぎない。したがって、熱膨張による弾性定数の低下があると考えられる。

またクラック進展挙動に関し、温度300K で負荷 $K=3.2K_G$ の場合、クラック進展の初期過程においてはほぼ脆性的なクラックの進展が見られた。これ以外でクラックが進展した場合、一見複雑な破壊挙動が見られているが、原子の移動から、ほとんどの場合 (111) 面に交差する原子間結合の破断が見られている。負荷の緩和の機構はクラック先端における2次的なクラックあるいはボイドであり、これらが元のクラックとつながることによってクラック先端が鈍化している。 β -SiC における脆性-延性転移の機構として、先端の鈍化が挙げられる。

最後に、 β -SiC 中の $[\bar{1}\bar{1}2]$ (111) クラック進展のシミュレーションを埋め込み模型で行った。 $[1\bar{1}0]$ (111) クラックとの比較を目的として、 $[\bar{1}\bar{1}2]$ (111) クラック進展のシミュレーションを行い、また、クラック進展に対するエネルギー障壁を求めた。その結果、 $K=1.0K_G$ では、図14に示したようにクラックが進展しており、このことは図15に示したクラック進展のポテンシャルエネルギー変化の計算結果にも反映している。この結果は $[1\bar{1}0]$ (111) クラックに関する結果とは大きく異なる。実験的には β -SiC の (111) 面上に硬貨上のクラックが発生することが確認されており⁴²⁾、特に進展方向の方位依存性は報告されていない。このため、実際の進展過程におけるクラックフロントは複雑な構造になっている可能性が高い。

ここで紹介した β -SiC のクラック進展のシミュレーションを行うに当たり、日本クレイ(株)の渡辺庸一氏には、同社のコンピュータを快く利用させて頂くと共に、数値計算技法全般について適切な御教示を頂いた。ここに深く感謝する次第である。(1993年7月15日受理)

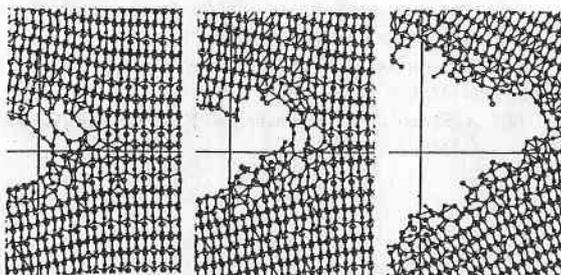


図14 $K=1.0K_G$ におけるクラックの進展挙動。
左から順に $1 \times 10^{-12}sec$ 後、 $1.2 \times 10^{-12}sec$ 後、 $3 \times 10^{-12}sec$ 後。

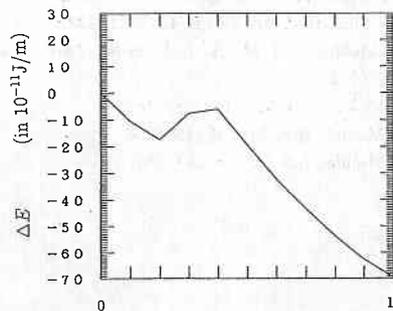


図15 $K=1.0K_G$ における理想的なクラック進展に伴うポテンシャルエネルギー変化。

参 考 文 献

- 1) A. A. Griffith; *Phil. Trans. Roy. Soc.* 221 (1920) 163.
- 2) R. Thomson; *Solid State Physics*, edited by H. Ehrenreich and D. Turnbull, (Academic Press, New York, 1986), Vol. 39, p. 1.
- 3) 澤村明賢・山本良一; 日本金属学会報 31 (1991) 19.
- 4) P. C. Gehlen and M. F. Kanninen; *Inelastic behavior of Solids*, edited by M. F. Kanninen, W. A. Alder, A. R. Rosenfeld and R. I. Jaffe, (McGraw-Hill, New York, 1970), p. 586.
- 5) M. F. Kanninen and P. C. Gehlen; *Interatomic Potentials and Simulation of Lattice Defects*, edited by P. C. Gehlen, J. R. Beder and R. J. Jaffe, (Plenum, New York, 1971), P. 713.
- 6) M. F. Kanninen and P. C. Gehlen; *Int. J. Fract. Mech.* 7 (1971) 471.
- 7) P. C. Gehlen, G. T. Hahn and M. F. Kanninen; *Scr. Met.* 6 (1972) 1087.
- 8) P. C. Gehlen; *Scr. Met.* 7 (1973) 1115.
- 9) A. J. Markworth, M. F. Kanninen and P. C. Gehlen; *Proc. Int. Conf. Stress Corrosion Cracking*, (France, June 12, 1973).
- 10) J. K. McCoy and A. J. Markworth; *Scr. Met.* 20 (1986) 905.
- 11) J. K. McCoy and A. J. Markworth; *Scr. Met.* 21 (1987) 1247.
- 12) G. C. Sih and H. Liebowitz; *Fracture—An Advanced Treatise*, edited by H. Liebowitz, (Academic Press, New York, 1968), Vol. 2, P. 67.
- 13) P. C. Gehlen, J. P. Hirth, R. G. Hoagland and M. F. Kanninen; *J. Appl. Phys.* 43 (1972) 3921.
- 14) J. P. Hirth; *Scr. Met.* 6 (1972) 535.
- 15) J. P. Hirth, R. G. Hoagland and P. C. Gehlen; *Int. J. Sol. Struct.* 10 (1974) 977.
- 16) R. Thomson, C. Hsieh and V. Rana; *J. Appl. Phys.* 42 (1971) 3154.
- 17) J. E. Sinclair and B. R. Lawn; *J. Fract. Mech.* 8 (1972) 125.
- 18) J. E. Sinclair and B. R. Lawn; *Proc. R. Soc. Lond.* A329 (1972) 83.
- 19) J. E. Sinclair; *J. Phys.* C5 (1972) L271.
- 20) J. E. Sinclair; *Phil. Mag.* 31 (1975) 647.
- 21) G. I. Barenblatt; *Adv. Appl. Mech.* 7 (1962) 55.
- 22) J. E. Sinclair; *J. Appl. Phys.* 42 (1971) 5321.
- 23) M. Mullins and M. A. Dokainishi; *Phil. Mag.* A46 (1982) 771.
- 24) M. Mullins; *Scr. Met.* 16 (1982) 663.
- 25) M. Mullins; *Acta Met.* 32 (1984) 381.
- 26) M. Mullins; *Int. J. Fract.* 24 (1984) 24.
- 27) S. Kohlhoff and S. Schmauder; *Atomistic Simulation of Materials—Beyond Pair Potentials*, edited by V. Vitek and J. Srolovitz, (Plenum, New York, 1989), Vol. 2, p. 411; S. Kohlhoff, P. Gumbsch, and F. Fichtmeister; *Phil. Mag.* A64 (1991) 851.
- 28) F. Erdogan; *Fracture*, vol. 2, edited by H. Liebowitz, (Wiley, New York, 1968), p. 519.
- 29) H. Schardin; *Fracture*, edited by B. C. Averbach, D. K. Felbeck, G. T. Hahn and D. S. Thomas, (Wiley, New York, 1959), p. 297.
- 30) B. deCelis, A. S. Argon and S. Yip; *J. Appl. Phys.* 54 (1983) 4864.
- 31) K. S. Cheung and S. Yip; *Phys. Rev. Lett.* 65 (1990) 2804.
- 32) K. S. Cheung, A. S. Argon and S. Yip; *J. Appl. Phys.* 69 (1991) 2088.
- 33) J. R. Rich and R. Thomson; *Phil. Mag.* 29 (1974) 37.
- 34) R. G. Hoagland, M. S. Daw, S. M. Foiles and M. I. Baskes; *J. Mat. Res.* 5 (1990) 313.
- 35) R. G. Hoagland, M. S. Daw, S. M. Foiles and M. I. Baskes; *Atomic Scale Calculations of Structure in Materials*, edited by M. S. Daw and M. A. Schlüter (*Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* 193, Pittsburgh, Pennsylvania, 1990), p. 283.
- 36) J. D. Eshelby; *Prog. Sol. State Phys.*, edited by F. Seitz and D. Turnbull, (Academic Press, New York, 1956), vol. 3, p. 79; *J. Elasticity* 5 (1975) 321.
- 37) 中谷彰浩・北川浩; 日本機械学会第3回計算力学講演会講演論文集 (1990) 83.
- 38) 北川浩; 第1回マリオニクス研究会予稿集 (1991) 73.
- 39) R. A. Johnson; *Phys. Rev.* 134 (1964) 1329.
- 40) M. W. Finnis and J. E. Sinclair; *Phil. Mag.* 50 (1984) 45; *Erratum ibid.* 53 (1986) 161.
- 41) J. Tersoff; *Phys. Rev.* B39 (1989) 5566; *Erratum ibid.* B41 (1990) 3248.
- 42) J. J. Petrovic and R. B. Roof; *J. Am. Ceram. Soc.* 67 (1984) C219.
- 43) H. Tanaka, Y. Bando, Y. Inomata, and M. Motomo; *J. Am. Ceram. Soc.* 71 (1988) C32.
- 44) H. Tanaka and Y. Bando; *J. Am. Ceram. Soc.* 73 (1990) 761.
- 45) 田中英彦・坂東義雄; セラミックス 27 (1992) 305.
- 46) A. Sawamura, Y. Watanabe, and R. Yamamoto; *Computational Methods in Materials Science*, edited by J. E. Glicksman, and S. P. Marsh, (*Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* 278, Pittsburgh, Pennsylvania, 1992), p. 147.
- 47) A. Sawamura, Y. Watanabe, and R. Yamamoto; *Proc. of CAMSE'92*, in press.
- 48) A. Sawamura, Y. Watanabe, and R. Yamamoto; *Proc. of CAMSE'92*, in press.