

アルミニウムの粒界破壊の第一原理及び分子動力学計算

A first principles and molecular dynamics study of grain boundary fracture in Al

平成 24 年度入学 ミネラルプロセッシング分野 山岡 隆央

1. 研究の目的

粒界破壊がどのような因子に支配されるかという問題は、破壊の本質にかかわる重要な問題である。へき開(脆性)粒界破壊の場合、粒界エネルギーが高く、表面エネルギーが低いと破断しやすく(破壊エネルギーが低く)なることが知られている。一方、金属材料では塑性変形が生じるため、粒界破壊現象は複雑である。金属材料の延性破壊エネルギーは、Griffithの脆性破壊理論を拡張し、(延性破壊エネルギー) = (脆性破壊の破壊エネルギー) + (塑性変形エネルギー)で表現される。脆性破壊エネルギーは原子間結合の切断に必要なエネルギーであり、塑性変形(転位生成およびその移動)に必要なエネルギーも原子結合の切断に密接に関係することから、Jokl. *et al.* (Acta met. 28(1980)1479)は、延性破壊エネルギーは脆性破壊エネルギーと正の相関があることを提案した。現在この考えが広く浸透し、水素脆性などの粒界脆化が脆性破壊エネルギーの値を使って議論されている。しかし、複雑な現象が生じる金属の粒界破壊において、このことが成立する根拠は十分ではない。そこで本研究では、アルミニウムを対象に粒界エネルギーが異なる二つの対応粒界の粒界破壊を、第一原理計算と分子動力学計算によって調べた。

2. 計算方法

$\Sigma 3(1-11)/[110]$ と $\Sigma 11(1-13)/[110]$ のAl対応粒界モデルを作製し、第一原理計算引張りシミュレーションにより粒界破壊挙動を調べた。第一原理計算引張りシミュレーションでは、粒内変形が生じない(粒界へき開破壊を想定)Y方式と粒内変形を考慮したK方式の2つの引張り方式で行った。また、分子動力学を用いてそれぞれの粒界の巨視的な破壊挙動を調べた。

3. 計算結果と考察

第一原理計算により得られた粒界エネルギーと破壊エネルギーの結果を表に示す。 $\Sigma 11$ 粒界は $\Sigma 3$ 粒界に比べ粒界エネルギーが2倍程度高かった。脆性(へき開)粒界破壊エネルギーを算出するY方式シミュレーションの結果、 $\Sigma 11$ 粒界は $\Sigma 3$ 粒界に比べ破壊エネルギーは高いものの、その差はわずかであった。一方、粒内変形を考慮できるK方式シミュレーションでは、

$\Sigma 11$ 粒界の破壊エネルギーは $\Sigma 3$ 粒界のそれより著しく高くなった。K方式シミュレーションでは、 $\Sigma 11$ 粒界近傍の粒内にマイクロクラックの生成が見られた。したがって、K方式の破壊エネルギーの大きな違いは、粒内に生成したマイクロクラックが原因と考えられる。

第一原理計算では大規模な粒内変形をシミュレーションできない。そこで、分子動力学法で引張りシミュレーションを行った。その結果、第一原理計算と同様に $\Sigma 11$ 粒界周りにマイクロクラックの生成が確認され、またマイクロクラックの成長により $\Sigma 11$ 粒界は最終的に粒内破壊することがわかった。以上の結果から、脆性破壊の場合粒界エネルギーが高いと粒界破壊が助長されやすいが、延性破壊の場合粒界エネルギーが高いと粒界周辺の塑性変形が生じやすくなり、粒界破壊が抑制されることが示唆された。

表 粒界エネルギーと破壊エネルギー

	粒界エネルギー (mJ/m ²)	破壊エネルギー (Y方式) (mJ/m ²)	破壊エネルギー (K方式) (mJ/m ²)
$\Sigma 3$	87.48	740.72	744.53
$\Sigma 11$	173.26	773.19	1003.54