FCC金属における塑性変形と非弾性衝突

原研計算科学　波多野恭弘

hatano@sugar.tokai.jaeri.go.jp

１．前置き

最初に断っておかなければならないのだが、「動的システムの情報論」という研究会の趣旨に反して、ここでは系の動力学自体や因果関係が動的に切り替わるというような意味での「動的システム」は全く扱っていない。取り上げる現象は端的に言ってハミルトン力学系における非平衡現象、要は非弾性散乱である。しかしハミルトニアン系を考えているにも関わらず所謂力学系的なとらえ方は全くしておらず、情報論的考察もしていない。そこにあるものはただただ、不可逆的な現象である。これはひとえに講演者の怠慢によるものだが、しかしこのような系の抽象化された側面を切り出して論じることにどのような意味があるのか、まだその必然性を良く分かっていないためでもある。

ただし、もちろんハミルトニアン系のダイナミクスはカオスの研究を中心として情報論的側面は膨大な研究の蓄積がある。が、ある程度マクロな現象（熱力学極限とまでは行かなくとも例えば１００万原子程度の分子動力学シミュレーション）を考える場合には、相空間のダイナミクスの解析を中心としたカオスの情報理論的見方はあまり役立たないだろう。一方で自由度無限大ハミルトン系の諸現象については別の情報理論的な見方である熱力学（とくに第二法則）という高度に抽象化された現象論が存在する。このことについて少し考えてみよう。第二法則はもちろん熱平衡から熱平衡への遷移過程に関してある制限を課すものであり、一般に非平衡系そのものに関して何かを規定するわけではない。また熱平衡系とは記憶をもたない系であるから、（平衡）熱力学だけから記憶や履歴の情報論に関して面白いことが言えるはずもないように思える。“外部からの操作限界に関する規定”という熱力学的な構造がハミルトン系に限らず他のシステムにも存在することは大いにあり得ることだが、最も簡単な非平衡系である定常状態に関してすら熱力学構造が存在するかどうか未だ分かっていないのだから、熱力学構造を満たすより一般的な系を探す作業は非常な難問であることが予想されよう。であるから、ここで今から取り上げる摩擦や塑性変形といった類の不可逆現象について、何か熱力学のような抽象化された情報論的法則が存在するのだろうか？という問いはしばらく（しかしさほど長くはない、おそらく数年スケールで）置いておいて、まずは現象そのものについての理解を深めていくより他にはあるまい。

２．非弾性衝突

言い訳めいた前書きはこの辺にしておいて、考える現象の具体的な説明に入ろう。ここで現象として考えるのは非弾性衝突である。非弾性衝突は粉体動力学の素過程として重要であるが、ここではひとまず粉からは離れる（もちろん頭の片隅には置いている)。「離れる」と言ったのは、ここで考える粒子の大きさのスケールは通常の粉よりもだいぶ小さくなるからである。粉の場合、半径ｍｍ、小さくてもμｍオーダーなのであるが、ここでは半径が数nm程度のナノ粒子を考える。なぜこんなに小さな粒子を考えるのかというと、その動機は粒子をハミルトン系として扱いたいためである。原子数としてはだいたい数万オーダー程度であるから相空間の解析などは及びもつかないのであるが、非弾性衝突をハミルトン系のダイナミクスからみることにより、散逸の起源をより詳しく調べてみたいということである。

非弾性衝突の起源は、よく知られている通り「並進運動のエネルギーが衝突過程において内部自由度に分配され、衝突完了後も並進自由度には戻りきらない」ということである。ただし内部自由度と一口にいっても様々なものがある。たとえば格子振動（線形波動）が励起される場合と弾性波（非線形波動）が励起される場合とではその定量的な振る舞いはだいぶ異なってくるであろうし、塑性変形が起きてしまえばさらに問題は複雑になる。しかし、実は上記した３つの要因（格子振動、弾性波、塑性変形）は衝突のエネルギーレベルの高低により（出現領域は重なり合いながらも）ほぼ順々に励起される。以下見ていくように粉の文脈では格子振動が励起される程度のエネルギーレベルで衝突が起こる（らしい）のであるが、実際ここでは粉に興味があるわけではなく非弾性衝突そのものに興味があるわけだから、全ての要因を統一的に取り扱うことにする。簡単化のためまず正面衝突のみを取り扱うことにする（斜め衝突は取り扱わない)。つまり、衝突前の２物体の速度ベクトルが同一直線上に乗るということである。

まず、非弾性衝突は跳ね返り係数 e=v’/v で与えられる。ここで v, v’はそれぞれ衝突前後の２物体の相対速度の絶対値である。この e が v についての減少関数であることはよく知られているが、ある程度普遍的な振る舞いが見られる。すなわち、e の 1 からのずれは v についてベキ的に増大する。

$$1-e(v) \propto v^{0.2} \qquad (1)$$

これは Hertz による球体の弾性論（静的理論）に有限速度変形による散逸をひずみ速度の２次形式として取り入れた計算結果であり[1]、実験的にもある程度確認されているようである。また、粘弾性モデルによる計算も同様の結果を与える[2]。ただしこの 1/５乗則は[1]の導出過程からも分かるように、有限速度変形に対する最低次の効果しか入っていない。一方で文献[2]では粒子の粘弾性がその散逸の起源となっており、やや考慮の範囲は広がってはいるものの、結局粘性以外の散逸過程は考慮されていない。つまり（１）は非常に小さい速度領域でしか成り立たないことが予想される。加えて[2]の結果では

$$1-e(v) = a_1 v^{0.2} + a_2 v^{0.4} + \cdots$$

と、$v^{0.2}$ についてのベキ展開となっており、粘性だけが問題になるような場合でも 1/５乗則は極めて狭い領域でしか成り立たないことを示唆している。もちろんマクロな粉粒子の低速衝突の微視的解明を動機にするのならばそれで構わないわけだが、その場合でもその取り扱いがどの程度まで妥当なのか明らかにしておくのは粉研究の観点からも重要であろう。ナノスケール粒子まで含む非弾性衝突一般の解明ということならば、これよりはるかに広い速度領域を考えねばならない。

３．非弾性衝突における散逸の起源

前項でも触れたように非弾性衝突による散逸の起源は、その初期相対速度のスケールにより異なってくる。それを少し考察しよう。まず文献[1,2]で考えられているような低速の場合は粘性が問題となるわけだが[4]、これはどういうことだろうか。十分低速では物体の変形は接触面近傍のごくわずかな領域に限られるだろう。(「並進運動エネルギー」＝「ひずみエネルギー」となるところが最大変形であるが、一般に固体の弾性エネルギーは 0.1m/sec 程度の並進運動エネルギーよりはるかに大きいことに注意。）つまり衝突が比較的低速度の場合、その影響は表面に対する微小摂動としてとらえられる。

そして表面近傍原子への摂動は格子振動を励起する。(マクロ粒子の密度波でないことに注意。これは粒子全体にわたる変形を表し、当然はるかに高エネルギー領域である)。励起された格子振動系は当然非平衡になる。別の言葉で言えばフォノン分布がボーズ統計から外れることになる（ここでは室温程度の十分高温な系を考えるのでボーズ統計ではなくグランドカノニカル分布でよいだろう。いずれにせよこの文章では細かい部分には踏み込まないので以下では単に“平衡分布”と言及する)。衝突により乱されたフォノン分布は当然平衡分布に緩和していくから、その緩和過程で散逸が起こっていると予想される。(だからフォノン緩和がない場合、すなわち原子どうしが線形バネでつながった粒子の場合はこのような低速領域では散逸ゼロである。)

そこで少しフォノン緩和について考えよう。フォノン緩和の時間スケールをτ_{ph}と書き、衝突の時間スケール、すなわち接触時間をτ_{con}と書く。一般にいって、摂動が加わる時間スケールと乱された自由度の緩和時間スケールが同程度の場合に散逸が生じるのだから、$\tau_{ph} \approx \tau_{con}$のとき非弾性衝突において粘性が重要になるだろうし、$\tau_{ph} \ll \tau_{con}$ならば粘性による散逸はさほど利かなくなるだろう。いずれにせよ、粘性が重要になるのはτ_{con}が非常に小さくなり、なおかつ弾性変形が固体表面近傍だけにとどまるような低速領域であるということになる。(ただしこの二つの条件が指定する速度領域がどのように交差するかも調べなくてはならない。・・が時間切れ。)

さて、上記のような粘性が効く速度領域を越えると次はどうなるだろうか。まず考えられるのは弾性変形領域が増大し、弾性波の伝播が無視できなくなるような場合であろう。よって次は弾性波のもたらす散逸について考えてみよう。弾性波は密度波であり、接触による圧縮が固体内を伝わっていく過程である。これは有限振幅の波動方程式（たとえば Burgers 方程式）で記述されるが、実はそこにはすでに散逸を表す項が現れている。それらは粘性率および熱伝導率であり、その起源は前段落で考察したようにフォノン分布が局所平衡分布から乱されるなどの微視的なものである。ゆえに、ここで現れる新たな散逸はそのような微視的なものではなく、弾性波そのもののエネルギーが衝突終了後も並進運動に戻りきらないことによるものである。柱状物体の衝突の MD では衝突面で発生した圧縮波が反対側の表面まで伝わったのち反射され膨張波になりそれがまた衝突面まで戻ってきて反射され圧縮波に・・・ということを、衝突完了後も繰り返していることが観測される。つまりこの場合の散逸は、並進運動エネルギーがマクロな非線形波動に分配されていることに起因するものである。この領域における跳ね返り係数に（１）のような簡単な法則があるかどうかはまだよく分かっていない。

一方、更に衝突速度を上げていくと、固体は弾性変形だけではなく塑性変形も起こすようになる。つまり、衝突したことによる歪みが固体に残ることになり、そのエネルギーが散逸の原因となる。このような塑性変形による跳ね返り係数への影響は簡単に見積もられており、

$$e \propto v^{-0.25} \qquad (2)$$

のように与えられる[3]。この取り扱いでは弾性波などの散逸は考慮されていないが、それは塑性変形による散逸が他と比べて桁違いに大きいことによる。

さて、とりあえず非弾性衝突の原因を１．フォノン緩和、２．弾性波、３．塑性変形の三つの要因に分類してみたわけだが、実際にはこの三つが利く領域がきれいに分かれているわけでもなく、お互いに重なり合っているはずである。ただしそれぞれのエネルギーは理想的にはオーダーが違ってくるので跳ね返り係数に対する影響は主要素のみが見えるだろうと期待される。一方で２，３領域での振舞いは粉の文脈から外れるということもあってかさほど考察の対象にはなっていないようにみえる。現実的なモデルでの更なる検証が必要だろう。とりあえず以下で予備的な数値実験による結果を述べ、今後の研究方針について考えるところまでが本小文の役割である。

４．分子動力学による非弾性衝突（予備計算の段階）

出発点は可逆なハミルトン動力学である。Lennard-Jones(LJ)ポテンシャルで相互作用する固体を剛体壁に速度 v でぶつける。状況は図１のようである。

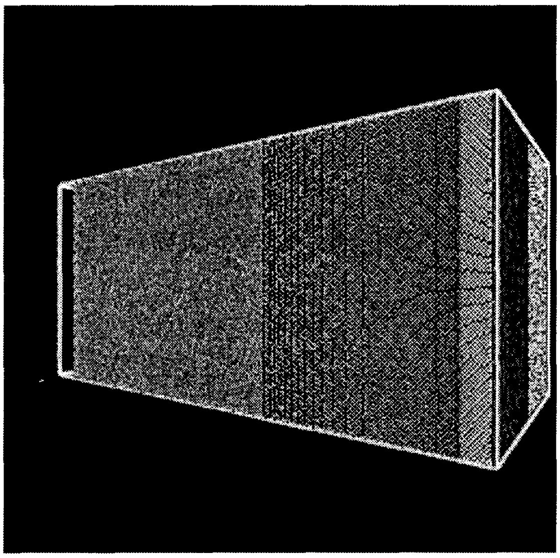

図１．　板状 LJ 粒子系が右側境界にある剛体壁に速度 v=1.0 で衝突するスナップショット。固体は単結晶で、衝突方向は<100>である。剛体壁は右端だけで他は全て周期境界条件となっている。

以下、数値は全て LJ 単位系 $(\sigma=\varepsilon=1)$ によるものとする。初期温度は一定(0.05)とし、板の厚さは 200、原子数は約 80 万である。速度 v を 0.1 から 2.5 まで変化させたときの跳ね返り係数を計算した結果を図２に示す。

数値的な状況を少々整理しておく。いま温度は 0.05 であるがこれは融点の 7%程度であり、かなりの低温である。このとき分子の熱運動の速度スケールは 0.7 程度であり、これは衝突時の相対速度と同じオーダーとなる。すなわち、図２は超高速でぶつける際の跳ね返り係数に他ならない。ちなみに 300K での熱運動は 10^3 m/sec 程度のオーダーなので、マクロな文脈で読み直すと衝突前の並進運動速度が秒速数キロメートルオーダーでの超高速衝突を見ていることになる。すなわち、前節で論じた散逸の起源のうち、粘性が効く領域は図２からは除外されている。そして v=1.7 までが弾性波に起因する散逸領域であり、それより大きな速度領域では塑性変形が起きている。一度塑性変形領域に入ると跳ね返り係数の v に関する振る舞いは違うスケーリングに従うことがみてとれる。（ただし今の場合

は完全単結晶でサイズが小さいので、生じる転位の数によって跳ね返り係数が大きく揺らいでいる)。図３参照。

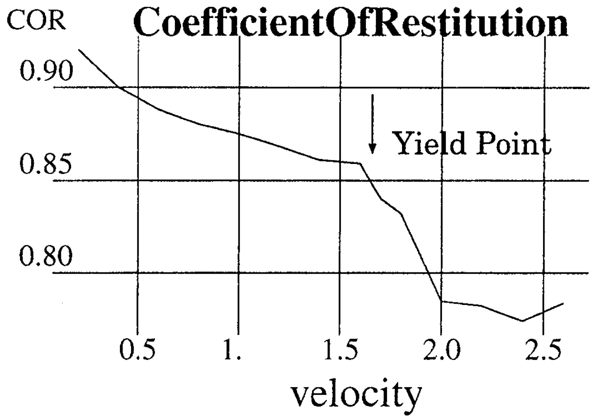

図２．跳ね返り係数の衝突前速度依存性。降伏点より前ではおよそ $v^{-0.7}$ で低下する。

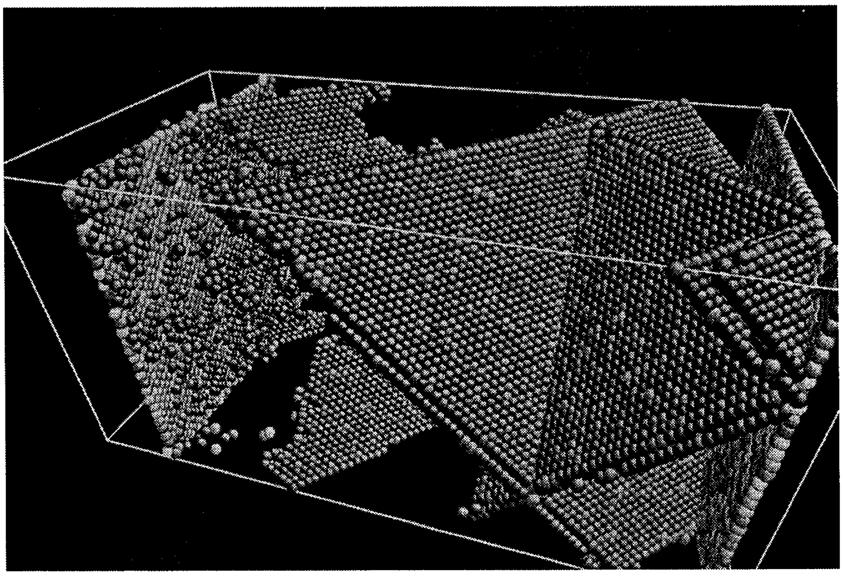

図３．塑性変形の様子。滑った面の分子だけ表示してある。

また降伏点が異常に高いことにも気づくだろうが、これは試料が完全結晶であることに起因する。以下、とりあえずの予備的シミュレーションで分かったことを、分からない点も含めて箇条書きの形でまとめておく。

- 弾性波が効くような中間領域では、跳ね返り係数はおよそ $v^{-0.4}$ に比例して低下する。
- 粒子数１００万程度では、粘性領域(v=0.01 から 0.1 程度)において跳ね返り係数に揺らぎが効いてくる。揺らぎの性質の解析は未遂行。Fluctuation theorem 的なものが成立している可能性がある。
- 領域１，２，３のクロスオーバーをきちんと出す。とくに１－２間転移を何が決めるのかを明ら

かにする。(現時点では降伏点における２−３間の転移は見えているが、それもかなり不完全)。

５．跳ね返り係数の揺らぎ

前節のシミュレーションで見たような小さい系では跳ね返り係数が揺らぐことが分かったわけだが、その性質について少しだけ考察する。まず、以下に前節のよりもかなり小さい系（粒子数４２００の球）について、跳ね返り係数の揺らぎの様子（分布関数）を示す。

ガウス型からは大きく外れ、散逸が大きい方に尾を引いた分布になっていることが見て取れる。また、跳ね返り係数が１を超える場合も稀な事象として存在していることにも注意されたい。(グラフは跳ね返り係数の１からのずれでプロットしてあるので、定義域がマイナスの部分が１を超える場合となっている)。今の場合、跳ね返り係数の平均値は 0.984 程度であるが、揺らぎが非常に大きいので平均値にはあまり意味がない。では揺らぎの性質について何かいえないかということがまず思うことだろう。

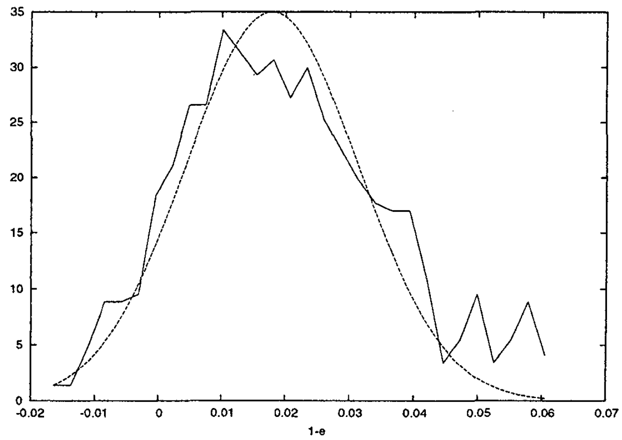

図４　跳ね返り係数ｅの１からのずれ(1-e)。原子数 4800(半径 10 の球)、初速度 0.05、初期温度 0.05。点線は平均値 0.0178 分散 0.00018 のガウス分布。(まだサンプル数が不足しているが、跳ね返り係数が１を超える場合も観測されているのが分かる)

非弾性衝突といっても全エネルギーは保存されており、なおかつ全運動量は壁との相互作用の前後では保存量となるのだから、位相空間でみれば全エネルギーと全運動量が一定である多様体間をジャンプする平衡間遷移としてとらえられる。たとえば fluctuation theorem はハミルトン系の状態遷移について物理的なことは何も言ってはくれないが、類似する揺らぎと散逸を結びつける関係がこのような系においても何かしら存在するのではないだろうか？更なる研究が必要である。

Reference

[1] G. Kuwabara and K. Kono, Jpn. J. Appl. Phys. 26, 1230 (1987)

[2] R. Ramírez, T. Pöschel, N. V. Brilliantov, and T. Schwager Phys. Rev. E 60, 4465–4472 (1999)

[3] K. Johnson, “Contact Mechanics”, (Cambridge Univ. Pr., 1985);

[4] 早川尚男「散逸粒子系の力学」(岩波書店 2003) 第２章