

ガラスの破壊挙動のシミュレーション

篠崎健二

大阪大学

1 研究

耐破壊設計に資するガラス材料のマイクロ破壊機構理解を目的に、アモルファス SiO_2 の引張下での応力応答とクラック形成過程を MD で解析する。さらに金属 (Cu) 介在時のブリッジング効果の有無と、応力指標の取り方が結果解釈に与える影響を整理する。

2 計算環境

計算資源は京都大学スパコン System B (Laurel 3) を用いた (ログインホスト: laurel.kudpc.kyoto-u.ac.jp)。OpenMP 並列を併用した。主要ソフトは LAMMPS (22 Dec 2022) および OVITO である。ReaxFF の実行にはffield.reax.cu_si_o[1]とlmp.control (制御ファイル) を用いた。

3 計算手法

本研究では、アモルファス SiO_2 モデル (約 4,500 原子) を構築し、平衡化後に一軸引張を課して応答を解析した。計算は主として ReaxFF (pair_style reax/c) を用い、電荷平衡は qeq/reax (収束条件の例として 1×10^{-6}) で実施した。単位系は real を用い、タイムステップは代表値として 0.25fs とした。変形は y 及び z 方向一軸引張とし、fix deform と temp/deform を組み合わせて変形誘起加熱の影響を抑制した。全体応力は compute pressure (基準温度を temp/deform に設定) を参照し、局所

応力は compute stress/atom を用いて可視化に供した。[2]

3.1 初期構造の作製

出発構造として結晶 SiO_2 (約 $26 \times 26 \times 78 \text{ \AA}^3$) を複製し、Vashishta ポテンシャル下で melt-quench (昇温・高温保持・室温へのクエンチ・緩和) を行うことでアモルファス化した。得られたアモルファス構造を ReaxFF 設定へ切り替え、後続の引張解析に用いた。Cu/ SiO_2 サンドイッチ構造は、上下にアモルファス SiO_2 を配置し、中央に Cu 層を挿入した後、界面アニーリングにより初期応力を低減した。

3.2 力場と電荷平行

応力破断現象の化学結合再編を捉えるため ReaxFF (reax/c) を採用し、電荷移動は qeq/reax で逐次求めた。比較参照として EAM+LJ を用いた事前アニーリングを適宜活用しつつ、引張試験自体は ReaxFF を主とした。

3.3 平衡化と変形条件

300 K 近傍での温度・体積緩和を経て、y 及び z 方向に一定の変形速度で一軸引張を付与した。変形時の見かけ温度上昇を抑えるため temp/deform を導入し、温度計算を変形に追従させた。

3.4 応力評価と可視化

全体ビリアル応力は compute pressure から取得し、初期体積・現在体積・有効断面のいずれで規格化するかを切り替え、評価指標の影響を検討

した。局所応力は `compute stress/atom` を出力して OVITO でマップ化し、クラック先端近傍の応力集中と結合切断の空間分布を確認した。

4 観察結果

4.1 SiO₂ 単体

応力-ひずみ曲線は弾性域後、ピークを示し、直後に急峻に低下。ミクロには Si-O ネットワークの切断に伴う脆性破断が進行。

4.2 Cu/SiO₂ サンドイッチ構造

クラック面に跨る Cu のブリッジング様相を可視化で確認。一方、全体応力の定義（分母の体積/断面）により、曲線形状が SiO₂ 単体と近づく場合がある。

4.3 評価指標の影響

破断後に空隙が増加する段階では、現在体積での規格化は見かけの応力低下を強調する傾向がある。初期体積による規格化や、有効断面（クラックを除いた領域）を用いた再評価により、曲線の解釈が安定化することを確認した。変形誘起加熱に対しては `temp/deform` の導入が有効であり、局所応力や配位・ボンドオーダーと組み合わせることで破壊機構の解像度が向上した。

5 まとめ

ReaxFF-MD に基づき、アモルファス SiO₂ の脆性破断挙動と Cu 介在時のブリッジング様相を確認し、応力規格化の取り方が曲線解釈に大きく影響することを示した。初期構造の作成から引張・可視化までの手順を確立し、評価指標の統一化により比較の頑健性が向上した。得られた知見は、ガラス系材料の耐破壊設計に向けたミクロ機構理解の基盤となる。

6 参考文献

[1] Psofogiannakis, G. M.; McCleerey, J. F.;

Jaramillo, E.; Van Duin, A. C. T. ReaxFF Reactive Molecular Dynamics Simulation of the Hydration of Cu-SSZ-13 Zeolite and the Formation of Cu Dimers. *J. Phys. Chem. C* **2015**, *119* (12), 6678-6686

<https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.5b00699>.
ACS Publications

[2] Urata, S.; Yoshino, H.; Ono, M.; Miyasaka, S.; Ando, R.; Hayashi, Y. Adhesion between Copper and Amorphous Silica: A Reactive Molecular Dynamics Study. *J. Phys. Chem. C* **2018**, *122* (49), 28204-28214.

<https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.8b09990>.