

破壊のシミュレーション： 種々の静的ストレスのもとでの破壊伸展速度

山口大学教育学部 古川浩

破壊は適当な条件の下では規則的なパターンを形成することが知られており、従来の破壊のイメージを変えつつある [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7]。一方、破壊そのもののメカニズムはまだ十分理解されているとはいえない [8]。ここでは簡単なばねモデルによるシミュレーションを行い、それをもとに一様な外部ストレスのもとでの破壊のメカニズムを探ってみた。以前にも同様なテーマで発表したことがあるが [4]、今回は特に使用した計算機の性能の向上もあって（ばねモデルに対する）破壊のメカニズムの全体像が浮かび上がってきた [9]。

モデル：二次元三角格子上、最近接相互作用、ばねモデル

格子定数 1 の三角格子上に質量 1 の粒子を配置し、隣り合った粒子同志をばねで結ぶ。粒子の運動方程式はニュートンの運動方程式で与えられる：

$$\frac{d\vec{r}_i}{dt} = \vec{v}_i, \quad (1)$$

$$\frac{d\vec{v}_i}{dt} = \sum_n \vec{F}(\vec{r}_i - \vec{r}_n), \quad (2)$$

ここで $\vec{F}$ はばねによる力で、次のようにばね伸びの小さいときは伸びに比例し、伸びがある値をこえるとゼロとなる（切れる）ものとする：

$$\vec{F}(\vec{r}) = -\frac{\vec{r}}{r} f(r), \quad (3)$$

$$f(r) = \begin{cases} r - 1, & \text{for } r \leq r_0, \\ 0, & \text{for } r > r_0. \end{cases} \quad (4)$$

ここで r_0 は cut-off parameter である。

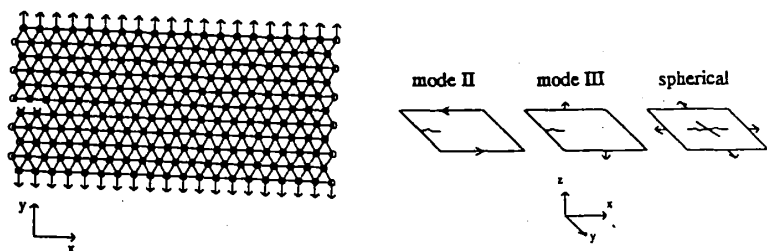


図1 ストレスモード。左の格子はモードIストレスのもとでの初期の亀裂の与え方を示す。左はその他のストレスと表わす。

シミュレーションでは、結晶軸の一つを x 軸、それと直交する格子面内の軸を y 軸とし、場合によって z 軸をそれらに直交する軸とした。x 軸に平行な系の側面に対し、周期的境界条件を付けた。外からのストレスとして、いわゆるモード I-III、及び球対称のものを用い、それらについて調べた。モード I のストレスに対しては特に詳しく調べた。

モード I ストレスにおける亀裂伸展モード I ストレス (y 軸方向に一樣な引っ張りストレス、図 1 を参照) は初期に粒子間距離を次のように与えればよい。

$$r = \begin{cases} (2 - r_e^{-1})^{-1}, & \text{for bonds parallel to x-axis,} \\ r_e, & \text{for others} \end{cases} \quad (5)$$

$(r_0 - r_e)$ はポテンシャルの深さ、 $r_e - 1$ 外部ストレスに比例する。以後、正確な外部ストレスのかわりに外部ストレスのパラメーターとして $r_e - 1$ を採用する。スケールされたポテンシャルの深さ $(r_0 - r_e)/(r_e - 1)$ は重要なパラメータでこの値によって亀裂伸展モードが以下のように分類出来る：

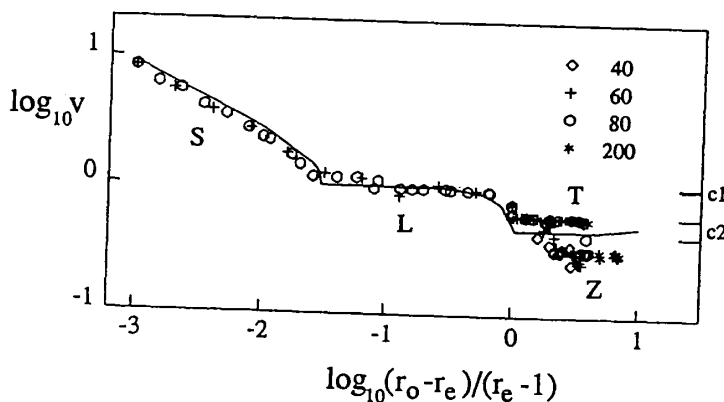
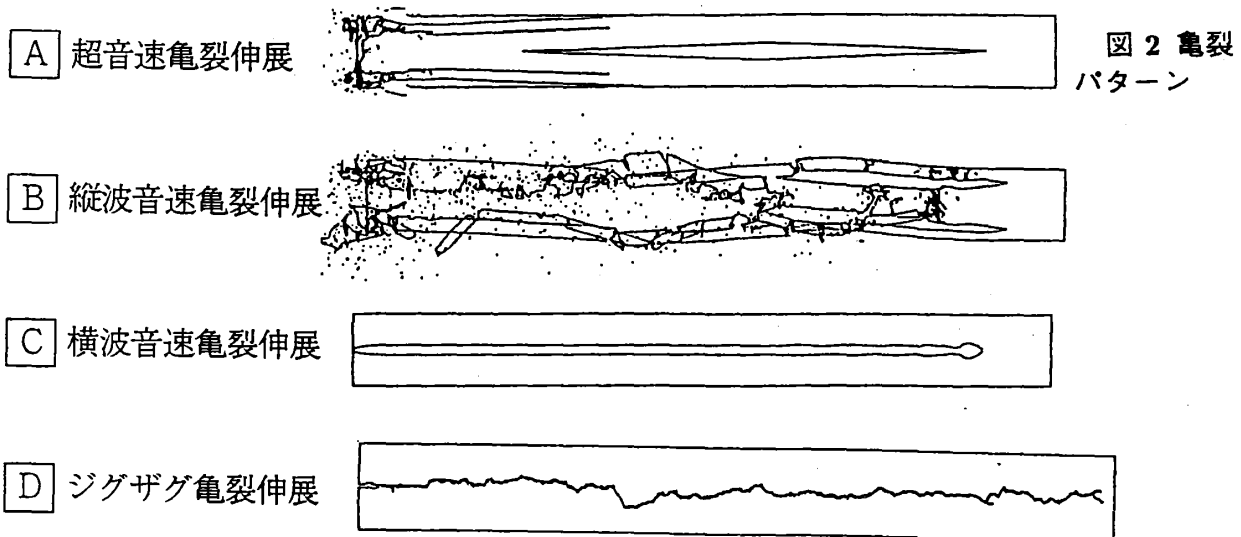


図 4 モード I ストレスの下での亀裂伸展速度 v とスケールされたストレスとの関係。シンボルの違いはシステムの幅の違いを表わす。また文字 S, L, T, Z はそれぞれ超音速、縦波、横波、ジグザグを示す。実線は大きいストレスの場合のシミュレーションの結果を示す。この場合ジグザグモードが見られない。

超音速亀裂伸展は外部ストレスに対して原子間ポテンシャルが浅すぎることから生じる構造的不安定である。他のストレスモードに対しても見られ、亀裂伸展速度とスケールされたポテンシャルの深さとはほとんどの場合指数0.5を持ったべき乗則で結び付いている：

$$v \sim (r_0 - r_e)/(r_e - 1)^{0.5} \quad (6)$$

このべき乗則は簡単な議論によって導くことが出来る。

縦波音速亀裂伸展と横波音速亀裂伸展は共に音波の振動が不安定な状態の媒体を壊すことにより生じる。亀裂伸展速度は原則として音速 c に等しい。定常な亀裂伸展に対し、これは簡単に示すことが出来る。音波伝播の先端付近の歪みを $\phi(x - ct)$ と置けば、この歪みがある値 Δr を越えたとき亀裂が生じる。したがって亀裂の先端の位置は $\phi(x - ct) = \Delta r$ によって決められる。すなわち亀裂の伸展速度は音速に等しい。

浅いポテンシャルのとき縦波音速亀裂伸展モードが出現し、ポテンシャルが深くなると $(r_0 - r_e)/(r_e - 1)$ が大きくなると横波音速亀裂伸展モードが出現する。その理由は以下の通りである。縦波と横波では横波の方が振幅が大きく、また幾何学的にも横波による振動がより効果的に結晶を壊すことが出来る。いずれにしても横波が縦波に比べてより効果的に破壊を引き起こす。一方、縦波の伝播速度は大きく、音波の伝播に伴い最初に破壊を引き起こすのは縦波である（縦横共に破壊を引き起こす場合）。この場合、亀裂伸展速度は縦波音速に等しい。大きい $(r_0 - r_e)/(r_e - 1)$ の値に対し、縦波は効果的でなくなり横波だけが破壊を引き起こす。この場合、亀裂伸展速度は横波音速に等しい。

ジグザグ亀裂伸展では亀裂伸展速度は横波音速のほぼ半分で、亀裂面はフラクタルである（荒さの指数が約0.75）。このような亀裂に対しては多くの研究が発表されているが、未だにその発生原因はよくわからない。

荒さの指数とは x を亀裂の方向に y を亀裂面の高さとするれば、フラクタルな面は次のスケール変換に対して普遍である。

$$(x, y) \rightarrow (\lambda x, \lambda^\zeta y). \quad (7)$$

したがって y のスペクトルは

$$S_k = \int \langle y(0)y(x) \rangle e^{-ikx} dx \propto k^{-1-2\zeta}. \quad (8)$$

のようにスケールされる。このときの λ を荒さの指数と呼ぶ。

亀裂伸展の上限は

$$\left(\frac{r_0 - r_e}{r_e - 1} \right)^2 < L. \quad (9)$$

で決められる。これは亀裂の周りのストレスが

$$\sigma \sim (r_e - 1) \sqrt{L/r} \quad (10)$$

のようにスケールされることを使って示すことが出来る。シミュレーションの結果はむしろ (8) 式の L を $L^{1.15}$ で置き換えるとよく合う。

モードⅡ、モードⅢ、球対称ストレスに対する亀裂伸展モード

いずれの場合も基本的にはモードⅠの場合と亀裂のメカニズムは同じであるが、細かい点ではそれぞれ特徴がある。

モードⅡ ストレス

超音速亀裂伸展では亀裂伸展速度が $(r_0 - r_e)/(r_e - 1)^{0.17}$ となる。これは他のすべてのストレスモードにおいて裂伸展速度が $(r_0 - r_e)/(r_e - 1)^{0.5}$ とあらわされることに比べて、著しく異なっている。亀裂伸展の原因となる粒子間のボンドの切断の仕方が他の場合と異なっていることによる。またこの場合には横波音波による亀裂伸展が見られなかった。

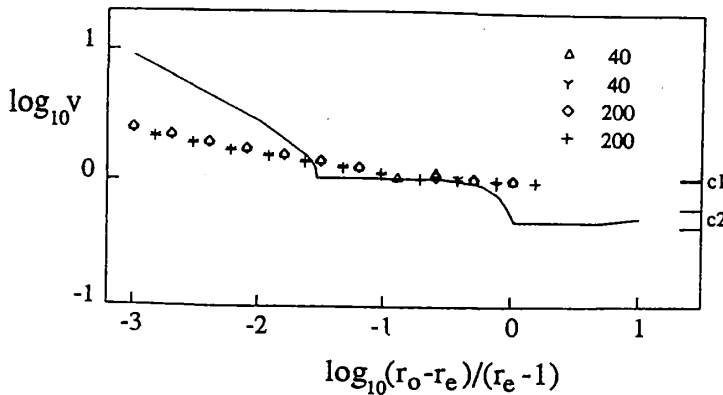


図3 モードⅡストレスの下での亀裂伸展速度 v とスケールされたストレスとの関係。シンボルの違いはストレスの大きさと共にシステムの幅の違いを表わす。実線は大きいモードⅠストレスの場合のシミュレーションの結果を示す。

モードⅢ ストレス

2次元におけるモードⅢストレスでは音速は外部ストレスの関数となり $\sqrt{3(r_e - 1)}/2$ とあらわされる。亀裂伸展速度 v をこのストレスに依存した音速でスケールしたものは他の場合と同様に一本のマスターカーブにのる。これは亀裂が音速によって運ばれることを如実にあらわすものである。

球対称ストレス

この場合亀裂伸展の様子はほぼモードⅠストレスの場合と同じである。おそらくモードⅠが主体となって亀裂を伝えているものと考えられる。

その他

(4) の粒子間ポテンシャルを少し変えたもの

$$f(r) = \begin{cases} (r - 1), & \text{for } r \leq \frac{1}{2}(r_e + r_0), \\ \frac{1}{2}(r_e + r_0) - 1, & \text{for } \frac{1}{2}(r_e + r_0) < r \leq r_0, \\ 0, & \text{for } r > r_0. \end{cases} \quad (11)$$

を用いて、モードIストレスの下での亀裂伸展を調べた。このポテンシャルは (4) において、引力の後半部分をフラットにしたものである。亀裂伸展速度に対する影響はほとんど見られなかった。

終わりに三角格子ばねモデルに対する定常亀裂伸展を、色々なストレスに対して調べた。モデルとしての重要な単純化は次の二つである。(1) 最近接格子間の相互作用のみで、かつ相互作用の相手は不変である。したがってかけら同志の衝突は考慮されていない。(2) 不連続な原子間ポテンシャル。— これらの単純化が結果にどのような影響をしたかは気になるところである。まず (1) については、亀裂先端の振る舞いに限ればほとんど影響が無いと思える。(2) は超音速亀裂伸展に対してその存在そのものを含めて決定的な影響が考えられる。分子の熱運動がある場合には特に影響が大きいと考えられる。一方、亀裂が音速によって運ばれるという明確な証拠は十分に一般的であると思える。特に音波のモードによる亀裂の伸展の違いは興味深い。またジグザグな亀裂伸展が横波亀裂伸展以後に出現することも新しい発見である。今の場合ランダムさ=ジグザグの原因は非線形なポテンシャルにあり、一種のカオスである。ジグザグな亀裂は現実の系で広く見られるが、理論的には説明がついていない。

亀裂伸展は音波の伝播と強く関連した力学的な elementary な現象であると同時に、非線形非平衡多体系特有の難しさをもち、学問的上も実用上も興味ある研究対象である。

参考文献

- [1] M. Hirata, Scient. Pap. Inst. Phys. Chem. Res. (Japan) 16 172 (1931).
- [2] A. Yuse and M. Sano, Nature 362 329 (1993).
- [3] Y-h. Taguchi, Material Science and Engineering A 176 (1994) 295.
- [4] H. Furukawa, Prog. Theor. Phys. 90 949 (1994).
- [5] Y. Hayakawa, Phys. Rev. E 49 (1994) 1804; 50 R1751 (1994).
- [6] S. Sasa, K. Sekimoto and H. Nakanishi, Phys. Rev. E 50 R1733 (1994).
- [7] M. Marder, Nature 362 295 (1993).
- [8] L. B. Freund, *Dynamical Fracture Mechanics* (Cambridge Univ. Press, New York, 1990).
- [9] H. Furukawa, Phys. Rev. E (in press). 参考文献に対する情報も含めて詳細についてはこれを参考にして頂きたい。