

# PeridynamicsとMDの連携によるSiCの 弾塑性・破壊シミュレーション

Peridynamics and Molecular Dynamics Simulations of Silicon Carbide in  
Elastic-plastic Deformation and Fracture

齋藤賢一<sup>1)</sup>, 太田直道<sup>2)</sup>, 西村憲治<sup>3)</sup>, 佐藤知広<sup>4)</sup>, 宅間正則<sup>5)</sup>, 高橋可昌<sup>6)</sup>

Ken-ichi Saitoh, Naomichi Ota, Kenji Nishimura, Tomohiro Sato, Masanori Takuma and Yoshimasa Takahashi

- 1) 博(工) 関西大学システム理工学部 教授 (〒564-8680 大阪府吹田市山手町3-3-35, E-mail: [saitou@kansai-u.ac.jp](mailto:saitou@kansai-u.ac.jp))  
2) 三菱電機 (株) (元・関西大学大学院 理工学研究科 院生) 3) 博(工) 産業技術総合研究所 主任研究員 (〒305-8664 茨城県つくば市並木1-2-1 つくば東事業所, E-mail: [k.nishimura@aist.go.jp](mailto:k.nishimura@aist.go.jp)) 4) 博(工) 関西大学システム理工学部  
准教授 5) 工学博士 関西大学システム理工学部 教授 6) 博(工) 関西大学システム理工学部 准教授

Because of developing needs in high-power-electric devices, silicon carbide (SiC) attracts much attention as a base material. In mechanical processing of SiC material, it responds to load in very brittle and hard manner undesirably, so more knowledge on its elastic-plastic behavior is required. In this study, multiscale framework of the numerical simulation, in which atomistic method such as molecular dynamics (MD) and macroscopic particle method are incorporated, is proposed. In particular, we try to use a novel macroscopic methodology, called peridynamics (PD) fracture mechanics. By performing nanoindentation test for SiC {111} surface by using MD, some mechanical properties such as elastic moduli and yield stress and etc. are obtained. By adopting those simulated material parameters and by applying EPS (elastic-plastic-solid) material model with modification as for strain hardening, PD simulation of macroscopic indentation test can be conducted. It is found that a “pop-in” behavior, which means the burst of plastic deformation in the case of MD, is reproduced in PD simulation. It is realized that a critical stretch, which is one of adjustable parameter for PD, largely affects the results of yielding behavior in indentation process. Interesting branching or bending of surface cracks (recognized as concentration of damage) is observed in the PD results, much alike in a similar experiment.

**Key Words :** Peridynamics, Molecular dynamics, Silicon carbide, Indentation test, Multiscale analysis

## 1. はじめに

電力の変換や制御に用いられる半導体デバイスの製造に関して、その性能はベースとなる素材開発が鍵を握っている[1]。とくに高出力が要求されるいわゆるパワー半導体デバイスへの対応として、従来から用いられているシリコン (Si) 単結晶のみならず、近年ではシリコンカーバイド (SiC) や窒化ガリウム (GaN) などが基材として用いられつつある。中でもSiCへの期待は高く、EVやハイブリット型の電気駆動による自動車への搭載が今後期待される。また、新型の新幹線車両 (N700S) では既にSiCが採用され、その駆動システム機器では20%もの軽量化が実現されている[2]。

SiCはともに第14族元素であるSiとCの化合物であるため、ダイヤモンド構造をもつSi単結晶と同様な結晶構造 (Zinc-Blende構造) の3C-SiC構造を有する。ただし、積層構造に多様性 (結晶多形) が存在するのが特徴であり、例えば、六方晶系の4H-SiC、6H-SiCなども存在し、実際にデバイス製造に利用されるSiC基材の多くは4H-SiCとなっていると言われる[3]。一般にSiC結晶は高強度・高剛性を誇るが、一方で加工性の乏しさが問題となっている。例えば、単結晶インゴットから切断、ラップ (研磨)、研削お

よび化学的機械研磨 (CMP) などの各加工過程を経るが、脆性のため加工量に制限が生じ長時間の加工が要されたり、また、加工変質層の発生が問題となっている[4]。

このようにSiCはSi以上に硬脆材料ならではの課題を抱えているが、その塑性変形能をより理解し、引き出すことができれば、より効率的かつ高精度な加工が可能となる。これまで、SiCについては欠陥や結晶構造に対する分子動力学 (MD) 法による解析[5]、また、第1原理計算によるシミュレーション的研究[6]が多く行われているが、サイズスケールの全く異なる実験結果との比較は容易ではなく、マルチスケール解析を志向するべきである。本研究では、MD法のマクロ版と呼ばれるPeridynamics (PD) 解析[7]を導入してSiC結晶の機械的特性の解析への適用方法を考察する。PD解析の特徴の一つとして、粒子間相互作用により表現される非局所性があり、ミクロなMD法との親和性が高い点が挙げられる。ただ、これまでマクロ特性 (実験値などの経験値) のみからの相互作用の設定を行っている例がほとんどである。そこで、上記のマルチスケールの取り扱い方法を今後進展させるべきであり、例えば、既にLiらはMDとPDのコンカレントな連携方法を提案している[8]。一方、マルチスケール解析の直感的な方

法として、まずマイクロな物性値をMD系で得て、それらをマクロ解析に適用する（シーケンスなマルチスケール解析と呼ばれる）ことも可能である[9]。このように固体材料のマクロスケール解析に関して様々な試行が精力的に進められている。著者らは、SiCのナノサイズ押し込み（ナノインデンテーション：NI）試験のシミュレーション[10]にその方法を適用する。そもそも、SiCのような硬脆材でのNI試験は一般的に困難を伴うため、現在の知見は限られている。本研究ではPD解析の特徴である脆性破壊現象の解析に加えて、MD計算データに基づいた弾塑性現象の組み込み方法を検討する。本研究は、今後は増して来ると考えられるSiCのナノ・マイクロスケールでの実験結果と比較し得る仮想的試験の枠組みの確立を目指している。

## 2. 計算理論・計算モデル・計算条件

### (1) 3C-SiC結晶のMDシミュレーション

SiC多形の中で最安定である3C-SiCは立方晶系（Zinc-Blende構造）であり、主要面として{100}や{111}がある。今回は六方晶系（4H,6H）における積層面にも対応するFig.1のような{111}自由表面への押し込み試験のモデルを用いる。計算モデル底面から4原子層は固定し、球形の圧子先端は初期状態においてモデル表面に接している。押し込みは一定の変位速度で最大押し込み量5nmまでを行い、その後除荷のため変位速度を反転して初期の圧子位置まで戻す。MD計算は汎用的かつ大規模計算用のLAMMPSソフトウェアを[11]使用し、Si-C系のポテンシャルにはErhartらが提案しているパラメータセット[12]を用いたTersoff型の3体間相互作用を含んだものを用いる。

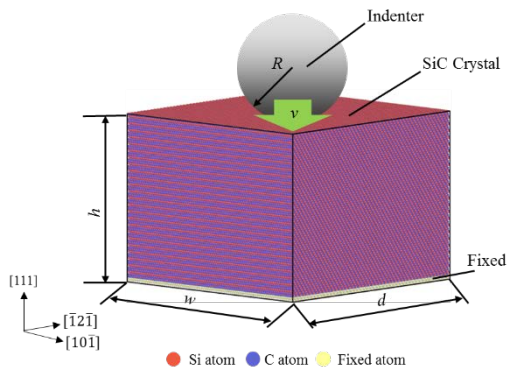


Fig.1 MD model for nano-indentation (NI) testing (Si shuffle set case)

Table 1 Nano-indentation simulation conditions by MD

The number of atoms	1152000
$d, w, h$ [nm]	24.7, 25.7, 18.9
Temperature $T$ [K]	300
Indenter radius $R$ [nm]	8.72
Pushing speed $v$ [m/s]	1.0
Crystal structure of the top surface	{111} Shuffle set plane of silicon

Fig.2に示すように3C-SiCの{111}表面の選択として[111]方向および $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ 方向の各々につき、Glide set面（狭

い間隔）とShuffle set面（広い間隔）がある。また、Glide set面で結合を切る場合でも、例えばSi原子が表面に残る場合とC原子が表面となる場合は異なる。ここでは表面に現れる元素名を冠してSi Glide set表面などと呼ぶことにする。よって、{111}表面構造としてSi Glide set表面、Si Shuffle set表面、C Glide set表面、C Shuffle set表面の計4種類の表面モデルが考え得る。

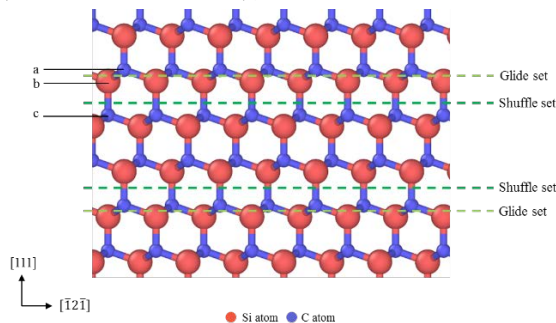


Fig.2 Crystal structure of 3C-SiC viewed from the direction perpendicular to {111} plane

確かに、圧子接触後の原子挙動において、表面元素に応じた表面エネルギーの違い、また、Shuffle set界面での結合切断による表面作成ではボン드가立つような挙動などの違いがあるが、それら最表面構造の結晶内部の塑性変形への影響は顕著でなく、本稿ではSi Shuffle set表面の結果を用いる。

なお、有限温度での使用ポテンシャルの妥当性として、3C-SiC結晶での格子定数の温度依存性を周期的MDモデル（NPTアンサンブル）で調べるとTable 2のようになり[13]、実験値と良好な一致を示す[14]。

Table 2 Temperature dependence of lattice constant in 3C-SiC single crystal obtained by NPT-MD

Temperature $T$ [K]	300	1000	2000
Lattice constant [nm]	0.437	0.440	0.445

### (2) MDシミュレーションによるPD用の材料定数の同定

MDによるNI試験から弾性特性および塑性特性を抽出する。Fig.3のように、球形領域で設定される圧子（LAMMPSコマンドの“fix indent”を利用する）と表面原子が接触する際、圧子から結晶に加わる力は粒子に付加する相互作用力、

$$F(r) = -k(r - R)^2 \quad (1)$$

から算出可能である。ここで、 $R$ は圧子の半径、 $r$ は圧子の中心から原子までの距離、 $k$ は力定数を表す。 $r > R$ のときは非接触と判断され、 $F(r)=0$ となる。ここではHertzの接触理論による算出値と整合させた力定数  $k=2.1$  nN/nm<sup>2</sup>を用いる。また、圧子との接触面積  $A_p$ は、接触している原子が存在する領域の幅  $2a$ を用いて、 $A_p = \pi a^2$ と表現できる。Hertzの接触理論では、半径  $a$ は圧子半径  $R$ と押し込み深さ  $d$ を用いて、 $a = \sqrt{Rd}$ となるので接触面積は  $A_p = \pi R d$ となる。

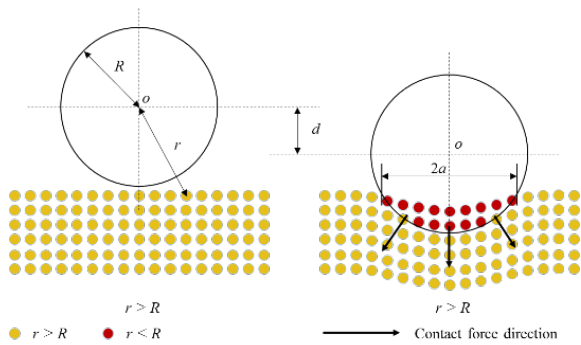


Fig.3 Influence range of indenter and interaction force

MDによる3C-SiCの{111}表面へのNI試験で得られた、荷重変位曲線[15]をFig.4に示す。

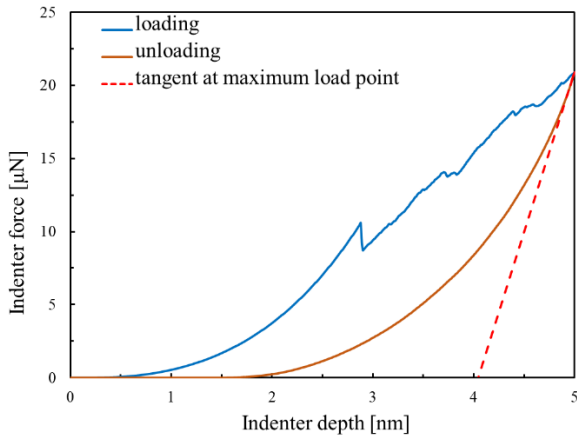


Fig.4 Force-depth curve in nanoindentation test obtained by MD simulation (both loading and unloading are included)

Fig.4から、押し込み実験において弾性率を求める方法の一つであるOliver-Pharr (O-P)法[16]に基づいてヤング率を算出する。まず、最大押し込みからの除荷時の除荷曲線(Fig.4中の破線)の接線の傾きが $S=5057$  N/mであり、原子配置から算出した最大押し込み時の接触面積 $A$ とともに式(2)に代入して複合弾性率 $E_r$ を得る。また、 $E_r$ はSiCと圧子の個々のヤング率 $E_s, E_i$ およびポアソン比 $\nu_s, \nu_i$ と式(3)のような関係がある。

$$E_r = \frac{S\sqrt{\pi}}{2\sqrt{A}} = 640 \text{ GPa} \quad (2)$$

$$\frac{1}{E_r} = \frac{(1-\nu_s^2)}{E_s} + \frac{(1-\nu_i^2)}{E_i} \quad (3)$$

よって、 $E_i \rightarrow \infty$ と仮定し、また $\nu_s=0.17$ (実験値)を用いればMD計算に基づいたSiCのヤング率 $E_s=588$  GPaが得られる。さらに塑性特性として、このMDによるNI試験で見積もられた臨界分解せん断応力( $\tau_{CRSS}=35$  GPa)[15]について単軸圧縮に対するシュミット因子を考慮すれば単軸での降伏応力値 $\sigma_y=70$  GPaが得られる。

今回はSiCのポアソン比をMD計算から求めていない点で実験値とのハイブリットな弾性特性の抽出方法となっている。また、MDでの弾性係数には結晶方位による異方性が顕在するため、限定的な評価値に過ぎない。しか

し、数値オーダー的には近いものが得られていると判断し、利用可能なものからPDへ随時反映させていき、まずは定性的な評価までを行う方針とする。もちろん、より経験値を用いない精度を上げたMDによるパラメータ取得とその反映方法を目指して、今後一層の改良が必要であることを述べておく。

### (3) Peridynamics (PD) シミュレーション

Peridynamics (PD)法はSillingにより開発され[7]、発展中のマクロ粒子法[17,18]であり、物質点を表す粒子ごとに式(1)に示す積分方程式を解く。非局所性を有する相互作用を陽に取り入れ、それゆえに特別な欠陥成長の基準を導入することなく、多数の場所で欠陥の始まりや伝播を任意経路で起こすことが可能となる。

$$\rho(\mathbf{x})\ddot{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t) = \int_{H_x} \{ \underline{\mathbf{T}}[\mathbf{x}, t](\mathbf{x}' - \mathbf{x}) - \underline{\mathbf{T}}[\mathbf{x}', t](\mathbf{x} - \mathbf{x}') \} dV_{x'} + \mathbf{b}(\mathbf{x}, t) \quad (4)$$

ここで、 $\rho$ は質量密度、 $\mathbf{u}$ は変位ベクトル、 $\mathbf{b}$ は物体力、 $\underline{\mathbf{T}}$ は力ベクトル状態、 $H_x$ は位置 $\mathbf{x}$ にある粒子の相互作用範囲である。また $H_x$ の範囲内の2粒子の相対位置ベクトル $\boldsymbol{\xi} = \mathbf{x}' - \mathbf{x}$ から、相互作用力の強さが粒子間ひずみに相当する無次元数 $s$ を通じて決定される。粒子間ひずみ $s$ が臨界伸びに対応する値 $s_0$ よりも大きくなったとき、粒子間の結合が切れ破壊が起きる。この判断には、式(5)で定義される履歴依存のスカラー関数 $\mu$ を用いる。なお、一度粒子間の結合が切れると、再び周りの粒子と相互作用することはない。よって、 $s_0$ の設定によって破壊発生挙動およびその後の粒子系の挙動に違いが生じる。

$$\mu(t, \boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\xi}) = \begin{cases} 1 & \text{if } s(t', \boldsymbol{\xi}) < s_0 \text{ for all } 0 \leq t' \leq t \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (5)$$

さらに、点 $\mathbf{x}$ での局所的な損傷(ダメージ)状態は式(6)で計算される。

$$\varphi(\mathbf{x}, t) = 1 - \frac{\int_{H_x} \mu(t, \boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\xi}) dV_{x'}}{\int_{H_x} dV_{x'}} \quad (6)$$

LAMMPSのperidynamicsへの拡張として実装されているPDLAMMPSを利用し、それに備わる材料モデルの中でも弾塑性体に対するEPS(Elastic-Plastic Solid)モデルを用いる。その構成式の一部を式(7)に示す。ここで、 $\underline{\mathbf{t}}$ はスカラー力状態、 $\underline{\mathbf{e}}^d$ は伸びスカラー状態の偏差成分、 $\underline{\mathbf{e}}^{dp}$ は $\underline{\mathbf{e}}^d$ における塑性部分、 $\underline{\mathbf{M}}$ は変形方向ベクトル状態、 $\underline{\omega}$ は影響関数と呼ばれる。また、 $\theta$ は膨張量、 $m$ は重みづけ体積、 $k$ は体積弾性率、 $\varphi$ はせん断弾性係数である。

$$\underline{\mathbf{T}} = \underline{\mathbf{tM}}, \quad \underline{\mathbf{t}} = \frac{3k\theta}{m} \underline{\omega\mathbf{x}} + \frac{15\varphi}{m} (\underline{\mathbf{e}}^d - \underline{\mathbf{e}}^{dp}) \quad (7)$$

PDの定式化で独特な「力状態」と呼ばれる有限距離離れた粒子間で計算される力の量は非局所性が担保されつつ連続体の局所理論における応力と同じ役割を担う。

PDLAMMPSにおけるオリジナルのEPSモデルは完全塑性体を想定しているが、本研究では同時に生じる塑性変形/加工硬化/破壊の各現象の関連を観察したい。そのため、Fig.5に示すように降伏後の塑性挙動にさらに加

工硬化の影響を多直線近似により表現可能とした熊谷らによる修正 EPS モデル[19]を用いて、より一般的な弾塑性・破壊解析に対応する。具体的には、MD 計算で得られた初期降伏値 $\sigma_y=70$  GPa から、5GPa ごと 5 段階で 95GPa までひずみ増加に伴い硬化が進むようにする。現段階では硬化挙動の MD または実験値へのフィッティングは行っていないため、硬化幅（実際の SiC 材料では非常に小さいと考えられる）に対する感度解析を試みている[18]（結果は割愛する）。また、MD 計算で理解されるように、SiC 単結晶では圧下方向の違いによる変形の結晶異方性が大きい、本稿の PD においてはまず弾性特性および降伏・塑性の材料特性とともに等方性を仮定した解析を行う。PD への結晶異方性の導入[20]については今後の検討課題である。

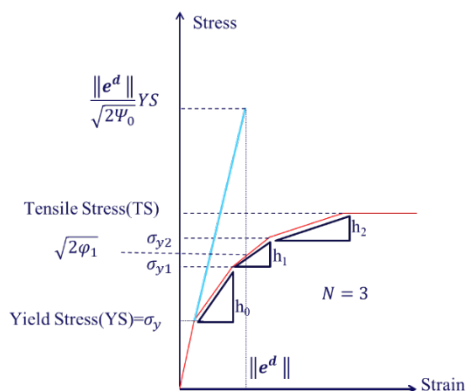


Fig.5 Schematic of difference between original EPS and modified EPS models used in elastic-plastic simulation of Peridynamics(PD)

PD シミュレーションモデルおよび計算条件を以下のように考える。SiC の表面加工時に  $\mu\text{m}$  レベルの深さまで発生すると考えられる加工変質層の発現が加工特性に大きく影響する。よってその発生挙動（ダメージ量や応力場など）を動的に観察することが重要である。よって PD に適した数百  $\mu\text{m}$  の試験体を用いて MD 同様な押し込み試験（ナノサイズでない普通の押し込み試験）を行う。圧子と試験片のサイズ比は MD とほぼ同様とする。また、PD 解析では粒子間の臨界伸び $s_0$ の選択による大幅な結果の相違が報告されているため[21]、材料の引張強度とヤング率の実験値から算出した臨界伸び  $s_0=0.0010$  を基準とし  $s_0=0.0005$ （小）、 $0.0015$ （大）との比較を行う。PD 解析に用いる SiC のモデルと計算条件をそれぞれ Fig.6 と Table 3 に示す。

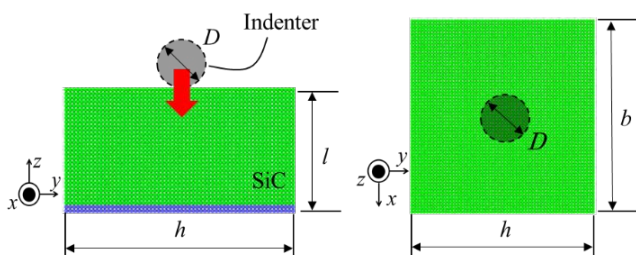


Fig.6 SiC simulation model for indentation test by using Peridynamics(PD)

Table 3 Calculation conditions for indentation of SiC by using Peridynamics (PD)

Peridynamics Model (PDLAMMPS)	Modified EPS model
The number of particles	372645
Velocity of indenter $V_z$ [m/s]	20.0
Critical stretch $s_0$ [-]	0.0005, 0.0010, 0.0015
Horizon $\delta$ [ $\mu\text{m}$ ]	10.1
Interparticle distance [ $\mu\text{m}$ ]	33
$l, h, b$ [ $\mu\text{m}$ ]	200, 400, 400
Young's modulus $E$ [GPa]	588
Poisson's ratio $\nu$ [-]	0.17
Yield stress (from CRSS) $\sigma_y$ [GPa]	70
$\sigma_{y1} \sim \sigma_{y5}$ [GPa]	75~95
Time increment [ns]	0.1
Total number of steps	15000

### 3. 計算結果・考察

PDによるSiC表面への押し込み計算により得られた荷重変位曲線をFig.7に示す。PD計算での荷重変位曲線はMDでの二次的関数な曲線での増加に比べて傾きが小さく、小さいひずみの時点から塑性の影響が強く出ていることを示している。ただし、MDと同様な変位バースト（pop-in）の現象が見出される。臨界伸び $s_0$ が大きいほど、pop-in時の荷重および変位バースト量はともに大きくなる。pop-in直後のダメージ分布とミーゼス応力分布をそれぞれFig.8とFig.9に示す。Fig.8では圧子との接触部近傍にある一部の粒子で既にダメージ量が1に達し、粒子間結合が失われている（すなわち「き裂破面」となっている）。ただ、Fig.8のミーゼス応力値は最大でも20GPa程度であり、降伏応力には達していない。よって、この計算条件では、降伏に達する前に臨界伸びを超え易い圧子接触部近傍の粒子間結合が優先的に失われていると考えられる。つまり、このPD結果での変位バーストは、材料特性が弾性から塑性に遷移したために生じたのではなく、局所的なダメージ増加により破壊が進展し、変形抵抗の急激な低下が生じたためである。

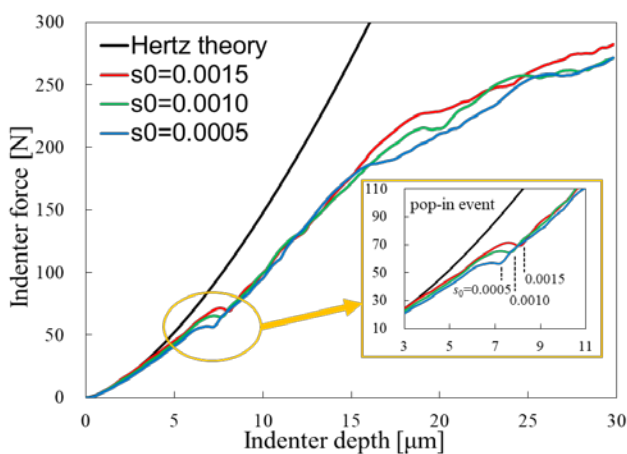


Fig.7 Force-depth curves obtained by Peridynamics(PD) simulation of SiC (comparing between critical stretch  $s_0$ )

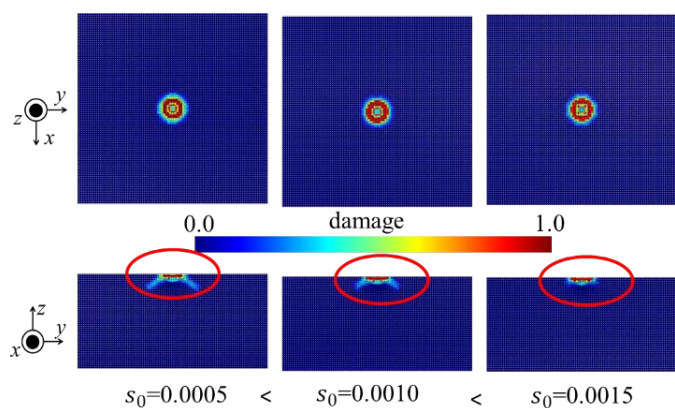


Fig.8 Deformation behavior and damage distribution at a burst of displacement in PD simulation (compared with  $s_0$  value)

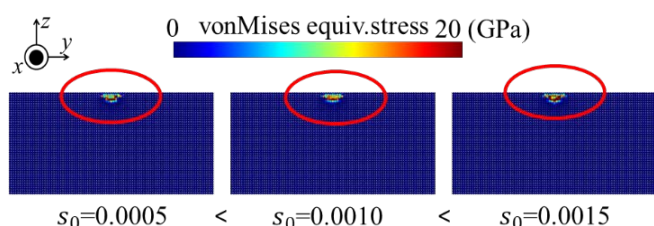


Fig.9 Distribution of Mises equivalent stress at a burst of displacement in PD simulation (compared between  $s_0$  values)

また、Fig.10 に示す臨界伸び $s_0=0.010$  および最大押し込み量  $d=30\mu\text{m}$  のときのダメージ分布をみるとダメージ領域（以降、「き裂」と表現する）は圧痕から放射状に進展しており、またその進展方向は 5 つ程度に限定される。途中でき裂が分岐したり折れ曲がったりする様子も観察される。さらに興味深いことに、 $s_0$  を 0.0015 と大きくした場合にはき裂進展方向は 4 つ程度へ減り、一方 0.0005 と小さくした場合には 7 つ程度まで増え、かつ、き裂進展量も大きい。すなわち、PD 計算ではき裂分岐や鈍化や折れ曲がりなどの複雑かつ動的な破壊メカニズムの表現が可能で、かつ粒子間の臨界伸びの設定によってそれらの表出が大きく変わる。さらに、PD シミュレーション結果でのダメージ進展と圧痕周りの粒子堆積の様子は、多結晶 SiC へ球圧子によるインデンテーション実験において同じく圧痕とき裂進展を直上から観察した結果の図[22] と酷似している。ただし定量的には、例えば硬さで比較すると、PD での最大押し込み時の硬さは 87GPa であるが、それに対応する実験値は 28GPa であるので、およそ 3 倍近くまで過大評価している。直接的な原因として、シミュレーションモデルが限定された厚さ (200 $\mu\text{m}$ ) でかつその底部に固定層があると表面 (xy) 方向に周期境界条件を用いていることにより、実際よりも強い 3 軸圧縮的な応力状態の影響によるものと推察される。

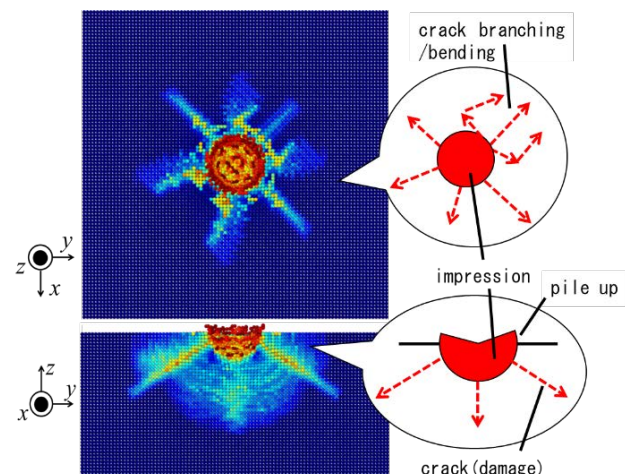


Fig.10 Deformation behavior and damage distribution during loading when indenter depth is  $d=30\mu\text{m}$  ( $s_0=0.0010$ , the middle case), together with interpretation of impression region and propagation directions of cracks

#### 4. 結論

本研究では SiC の弾塑性変形と脆性破壊の関係を考察することを目的として、分子動力学 (MD) 計算により抽出された材料物性値 (ヤング率、降伏応力など) に基づく Peridynamics (PD) 解析を試みた。PD 解析では加工硬化を含むように修正された EPS (弾塑性) モデルを用いた。臨界伸びの設定で破壊や塑性変形挙動が大きく変わること理解了。また、以下の知見や見解が得られた。

- ・ MD と PD の両解析にて、ナノインデンテーション試験の荷重変位曲線で観察される変位バースト現象 (pop-in) が再現された。しかし、PD 解析での変位バースト発生時には、圧子近傍の粒子が降伏応力に達しないままフルダメージ (き裂の状態) に達している。
- ・ MD と PD との物性値での連携について、ポアソン比、引張 (脆性材の場合には曲げ) 試験からの粒子間臨界伸びの設定が必要である。また、MD に備わる結晶異方性の発現を PD でも表現可能にすることが今後所望される。

謝辞：本研究の一部は平成29年度関西大学大学院理工学研究科高度化推進研究費および新日鐵住金 (株) の援助により行った。また、熊谷和久博士にはEPSモデルにおける加工硬化の理論およびプログラミングについて詳細にご教示いただいた。上記各位に対し、ここに謝意を記す。

#### 参考文献

- [1] 赤崎勇ほか：ワイドギャップ半導体—あけぼのから最前線へ—, 培風館, 2013.
- [2] 東海旅客鉄道(株): SiC 素子の採用による新幹線車両用駆動システムの小型軽量化について, 広報資料 (2015/6/25), pp.1-3, 2015. (URL: [http://jr-central.co.jp/news/release/\\_pdf/000027199.pdf](http://jr-central.co.jp/news/release/_pdf/000027199.pdf)) 閲覧日

- 2018/4/6)
- [3] 四戸孝: SiC パワーデバイス, 東芝レビュー, Vol.59, No.2, pp. 49-53, 2004.
- [4] 長屋正武ほか: SiC 半導体ウェハの加工技術, デンソーテクニカルレビュー, Vol.20, pp. 222-227, 2015.
- [5] 例えば, Szlufarska, I. et al.: Atomistic mechanisms of amorphization during nanoindentation of SiC: A molecular dynamics study, *Phys. Rev. B*, Vol.71, pp.174113, 2005.
- [6] 例えば, Jiang, M. et al.: Ab initio molecular dynamics simulation of the effects of stacking faults on the radiation response of 3C-SiC, *Sci. Rep.*, Vol.6, pp.20669, 2016.
- [7] Silling, S.A.: Reformulation of elasticity theory for discontinuities and long-range forces, *J. Mech. Phys. Solids*, Vol.48, pp.175-209, 2000.
- [8] Tong, Q. et al.: Multiscale coupling of molecular dynamics and peridynamics, *J. Mech. Phys. Solids*, Vol.95, pp.169-187, 2016.
- [9] Liu, W.K. et al.: Nano Mechanics and Materials—Theory, Multiscale Methods and Applications, John Wiley & Sons, pp.131-174, 2006.
- [10] Hanashiro, T. et al.: Molecular dynamics study on ductile behavior of SiC during nanoindentation, *Tribology Online*, Vol.11, No.2, pp.183-188, 2016.
- [11] Plimpton, S.: Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics, *J. Comp. Phys.*, Vol. 117, pp. 1-19 1995.
- [12] Erhart, P. et al.: Analytical potential for atomistic simulations of silicon, carbon, and silicon carbide, *Phys. Rev. B*, Vol. 71, , pp. 035211, 2005.
- [13] 花城卓也ほか: SiCの転位挙動における温度依存性のMD法による検討, 日本機械学会講演論文集 (第28回計算力学講演会), No.15-19, CD-ROM#114, 2015.
- [14] Li, Z., et al.: Thermal expansion of the cubic (3C) polytype of SiC, *J. Mater. Sci.*, Vol.21, No.12, pp 4366-4368, 1986.
- [15] 山本勇一: 分子動力学法による SiC のナノインデンテーション—塑性変形挙動における結晶方位と温度依存性の解明—, 関西大学卒業論文(システム理工学部), pp.30, 2016.
- [16] Oliver, W.C. et al.: An improved technique for determining hardness and elastic modulus using load and displacement sensing indentation experiments, *J. Mater. Res.*, Vol.7, No.6, pp.1564-1583, 1992.
- [17] 有馬大貴ほか: Peridynamics を用いた伸線加工における塑性・破壊モデルの構築, 日本機械学会講演論文集 (第28回計算力学講演会), No.15-19, CD-ROM #029, 2015.
- [18] 太田直道ほか: PeridynamicsによるSiC押込み試験の弾塑性・破壊モデル, 日本機械学会講演論文集 (第30回計算力学講演会), No.17-4, CDROM#125, pp.1-3, 2017.
- [19] 熊谷和久: Peridynamics を用いた単調荷重下の配管におけるき裂進展解析, 第2回日本材料学会マルチスケール材料力学シンポジウム, pp.O1, 2017.
- [20] Meo, D.D. et al.: Modelling of stress-corrosion cracking by using peridynamics, *Int. J. Hydro. Energy*, Vol.41, pp.6593-6609, 2016.
- [21] 柴田良一: 膜材料の引き裂き現象に関する粒子モデルによる数値解析的研究, オープン CAE シンポジウム 2014, 資料, 2014.
- [22] Datye, A. et al.: Energy analysis of spherical and Berkovich indentation contact damage in commercial polycrystalline silicon carbide, *Ceramics Int.*, Vol. 43, pp. 800-809, 2017.

---

OS28: 原子・電子モデルによる材料シミュレーション

## [B-01] 原子・電子モデルによる材料シミュレーション(1)

座長:梅野 宜崇(東京大学)

2018年6月6日(水) 10:00 ~ 11:45 会場B (11F)

---

### [B-01-01] 第一原理局所応力計算によるグラフェン上の吸着誘起応力

\*椎原 良典<sup>1</sup> (1. 豊田工業大学)

10:00 ~ 10:15

### [B-01-02] 第一原理計算に基づく単結晶の非線形弾性構成関係の評価

\*君塚 肇<sup>1</sup>、尾方 成信<sup>1,2</sup> (1. 大阪大学、2. 京都大学)

10:15 ~ 10:30

### [B-01-03] Peridynamicsと MDの連携による SiCの弾塑性・破壊シミュレーション

\*齋藤 賢一<sup>1</sup>、太田 直道<sup>3</sup>、西村 憲治<sup>2</sup>、佐藤 知広<sup>1</sup>、宅間 正則<sup>3</sup>、高橋 可昌<sup>1</sup> (1. 関西大学 システム理工学部 機械工学科、2. 国立研究開発法人 産業技術総合研究所、3. 関西大学大学院 理工学研究科 システム理工学専攻(元) )

10:30 ~ 10:45

### [B-01-04] 鉄表面への極性分子吸着性における表面吸着原子の影響

\*内山 裕貴<sup>1,2</sup>、椎原 良典<sup>1</sup> (1. 豊田工業大学、2. 日本精工株式会社)

10:45 ~ 11:00

### [B-01-05] アルミカーボンナノチューブ複合材料における転位-ナノチューブ相互作用の原子論的解析

\*森 英喜<sup>1</sup>、尾方 成信<sup>2</sup> (1. 産業技術短期大学、2. 大阪大学)

11:00 ~ 11:15

### [B-01-06] SrTiO<sub>3</sub>中のマルチフェロイック転位に関する第一原理解析

\*嶋田 隆広<sup>1</sup>、萩原 洋平<sup>1</sup>、北村 隆行<sup>1</sup> (1. 京都大学大学院工学研究科機械理工学専攻)

11:15 ~ 11:30

### [B-01-07] EAMポテンシャルにおける異種原子間相互作用の検討

\*松中 大介<sup>1</sup>、木村 文彦<sup>1</sup> (1. 信州大学)

11:30 ~ 11:45