276 不均一系の大域的・局所的安定性： ボロノイ・規則分割したナノ多結晶体の局所格子不安定性解析

Local Lattice Instability Analysis on Nano Polycrystals by Voronoi and Square Division

○ 学 樋口 昌宏 (神戸大・院) 学 西村 正臣 (神戸大・院)
正 屋代 如月 (神戸大・工) 正 富田 佳宏 (神戸大・工)

Masahiro HIGUCHI, Graduate School of Science and Technology, Kobe University, Nada-ku, Kobe, 657-8501
Masaomi NISHIMURA Graduate School of Science and Technology, Kobe University, Nada-ku, Kobe 657-8501
Kisaragi YASHIRO, Department of Mechanical Engineering, Kobe University, Nada-ku, Kobe 657-8501
Yoshihiro TOMITA, Department of Mechanical Engineering, Kobe University, Nada-ku, Kobe 657-8501

Key Words : Local Lattice Instability, Molecular Dynamics, Voronoi, Nano Polycrystals

1 緒言

著者らのグループでは、ナノ多結晶体やアモルファス等、内部不均一を有する系の大域的安定性(系の応力急減・ひずみ急増)と局所の力学状態の関係を、原子弾性剛性係数の観点から解明することに取り組んでいる(1)-(3)。前報(3)では、3次元立方体セルを格子状に分割した系とアモルファスについて様々な検討を行い、(1) ひずみ制御・横方向応力零の負荷条件では系の不安定挙動は力学的条件よりむしろ幾何学的な要請から生じる、(2) 応力制御による引張や、ひずみ制御でも横方向の変位を拘束した場合は、個々の原子弾性剛性係数の行列式 $\det B_{IJ}^{\alpha}$ の平均が零になったときに系の不安定挙動を生じる、等を明らかにした。

本研究では、ナノ多結晶体における結晶粒形状の不均一さによる影響を調べることを目的として、擬2次元セルを正方形分割・ボロノイ分割したナノ多結晶体について分子動力学シミュレーションを行い、無負荷平衡状態ならびに引張変形下における系ならびに局所の不安定性を評価した。

2 シミュレーション条件

前報と同様、解析対象はNiとして、原子間相互作用の評価には Voter らによる原子埋め込み法(EAM)⁽⁴⁾を用いた。大きさ $17.72\text{nm} \times 17.72\text{nm} \times 1.772\text{nm}$ の薄板状セルについて、全方向周期境界条件の下で2次元ボロノイ分割および正方形分割を行い、厚さ方向は[001]に固定したfcc結晶をランダムに回転させて分割領域に充填することでナノ多結晶体を作成した。セル内に含む結晶粒数を制御することで、平均結晶粒径の違う種々の多結晶体を作成した。図1に作成したナノ多結晶体の例を示す。

まず、垂直応力が零になるように各セル辺長を制御しながら5000fsの初期緩和計算を行った。温度は300Kとし、速度スケールにより制御した。得られた無負荷平衡状態において、原子弾性剛性係数の行列式 $\det B_{IJ}^{\alpha}$ を全ての原子について評価するとともに、系の弾性剛性係数の行列式 $\det B_{IJ}$ を求めた。EAMポテンシャルにおける B_{IJ}^{α} の表式については前報を参照されたい⁽³⁾。その後、y軸方向に毎ステップ微小ひずみ増分 $\Delta\epsilon_{yy} = 1.0 \times 10^{-5}$ を与え、引張シミュレーションを行った(ひずみ制御)。前報の結果を踏まえ、横方向は変位拘束とした($\epsilon_{xx} = \epsilon_{zz} = 0$)。比較のため、前報⁽²⁾と同様の手順でアモルファスを同じ薄板状セルで作成し、同様の解析で初期緩和および引張シミュレーションを行った。

Fig. 1 Polycrystals with Voronoi and regular square grains

3 シミュレーション結果及び考察

3.1 無負荷平衡状態における安定性

図2に $\det B_{IJ}^{\alpha}$ の平均値(局所の安定性)ならびに $\det B_{IJ}$ (系の安定性)の結晶粒寸法による変化を示す。系の弾性剛性係数 B_{IJ} は B_{IJ}^{α} の平均であるが行列式の平均は不均一な系では通常一致しない。3次元立方体分割の場合と同様に、結晶粒寸法が小さくなると行列式の値は低下する傾向が見られるが、その変化は比較的緩やかである。

粒径が約6nmより小さい系では分割方法による差異はほとんど見られず、結晶粒形状の影響が少ない。また粒径が6nmより大きくなるとボロノイ分割した系は同程度の粒径の正方形分割の系よりも低い安定性を示している。 $\det B_{IJ}$, $\det B_{IJ}^{\alpha}$ の平均とも、いずれの多結晶体もアモルファスのそれより明確に高い値を示している。3次元の解析では結晶粒を細分化していくと、最終的にはアモルファスのそれに一致していたが、薄板セルに周期境界をかけた本解析では「一方向凝固材」のような構造になるためこのような差を生じたものと考えられる。

3.2 引張変形下の安定性と内部構造変化

引張シミュレーションにより得られた応力-ひずみ関係の例を図3に示す。ボロノイ分割では平均粒径6.18nmの系、正方形分割では粒径6.66nmの系の結果を示している。この粒径ではアモルファスより低いひずみ・応力で不安定挙動(応力急減)を生じた。またボロノイ分割と正

Fig. 2 Change in system and local stabilities at $\varepsilon=0.0$

Fig. 3 Relationships between strain and stress

Fig. 4 Change in system and local stabilities

方形分割で差異はほとんど見られない。

図3で示した多結晶とアモルファスの系ならびに局所の安定性の変化を図4に示す。 $\det B_{II}^0$ の平均が負になったとき、系の不安定挙動が生じている。横拘束下の変形ゆえ系と局所の安定性の差は小さく、 $\det B_{II}$ も零に近い値をとっている。

図3に示したボロノイ分割、正方形分割の多結晶とアモルファスについて応力ピーク点 (多結晶では $\varepsilon_{yy} = 0.125$, アモルファスでは $\varepsilon_{yy} = 0.17$) ならびに応力急減後 ($\varepsilon_{yy} = 0.16$, $\varepsilon_{yy} = 0.21$) の原子配置を図5に示す。いずれの系においても応力ピーク点において空孔が生じ、それが拡大することにより系の応力が低下した。多結晶における空孔の発生・成長は結晶粒界を起点としており、引張軸に垂直な方向へ成長・合体している。一方アモルファスの場合、空孔は円形状に成長している。

3.3 結晶寸法のばらつきの影響

これまでの検討では、ボロノイ分割と正方形分割の安定性、ピーク応力等に差異はほとんど認められなかった。そこで各結晶寸法のばらつきによる影響を調べるため、図6右に示すように結晶寸法の偏りを強くした多結晶体を作成し、これまでの比較的一様な結晶寸法を持つVoronoi多結晶体(図6左)と比較した。ボロノイ分割の粒数20であ

Fig. 5 Snapshots of atoms between tensile without Poisson's contraction

Fig. 6 Semi-uniform and dispersed Voronoi grains

Fig. 7 Relationships between stress and strain, strain and stability

るが、左は結晶粒径の平均と標準偏差は4.42nm, 0.70nmであり、右はそれぞれ3.60nm, 2.66nmである。

多結晶体の応力-ひずみ関係を図7(a)に、系ならびに局所の安定性の変化を図7(b)に示す。ピークひずみに差を生じるもののその差は僅かでありピーク応力はほぼ等しい。安定性変化にも大きな違いは見られない。

講演会当日は厚さ方向の周期境界をはずした薄板状多結晶体について検討した結果を報告する予定である。

参考文献

- (1) 屋代如月・富田佳宏, 機論, **67A** (2001), 678.
- (2) 屋代如月・西村正臣・富田佳宏, 材料, **54-10** (2005), 1053.
- (3) 屋代如月・久馬雅彦・西村正臣・富田佳宏, 機論, A編, 投稿中 (2006).
- (4) Voter, A. F. and Chen, S. P., *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.*, **82** (1987), 175-180.