Statistical Evaluation on Unstable Atoms in Amorphous Metals:
Local Lattice Instability Analysis正 西村 正臣 (神戸大・院)
正 富田 佳宏 (神戸大・院)

正 屋代 如月 (神戸大・院)

Masaomi NISHIMURA, Graduate School of Science and Technology, Kobe University, Nada-ku, Kobe

Kisaragi YASHIRO, Graduate School of Engineering, Kobe University, Nada-ku, Kobe

Yoshihiro TOMITA, Graduate School of Engineering, Kobe University, Nada-ku, Kobe

1 結 言

著者らのグループでは、各原子位置における原子弾性剛性係数 B_{ij}^{α} の正值性に基づいて、局所の安定性を議論する局所格子不安定性解析 (Local Lattice Instability Analysis; LLIA) を提案している⁽¹⁾。前報⁽²⁾で、Ni と Al の二つの単元系アモルファスについて、変形下での $\det B_{ij}^{\alpha} < 0$ と評価される不安定原子の割合変化および応力状態を検討し、二つのアモルファスの変形メカニズムが異なることを明らかにした。

これまでの LLIA では、各ひずみ点における瞬間の原子配置から原子弾性剛性係数 B_{ij}^{α} を求め、 $\det B_{ij}^{\alpha} < 0$ の不安定原子について議論している。本報では、原子摂動による B_{ij}^{α} のノイズの影響を明らかにするために、緩和計算中に $\det B_{ij}^{\alpha} < 0$ であり続けた原子に着目して議論を進める。

2 シミュレーション方法

前報⁽²⁾と同様に、周期境界条件下の立方体セルに作成したバルクアモルファス構造を解析対象とする。解析セル内の原子数は Ni, Al のいずれも 108000 である。アモルファス構造は、溶融・急冷シミュレーションにより作成した。その後、単軸引張シミュレーションを行った。ひずみは毎ステップ増加させており、ひずみ速度に換算すると $1.0 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$ となる。引張中は速度スケールにより 10K 一定に制御した。原子間ポテンシャルには Voter らの原子埋め込み法 (EAM) を用いている。

3 シミュレーション結果および考察

図 1 に引張前の無負荷状態における、1000 ステップ (= 1000fs) の緩和計算中の不安定原子の変化を示す。破線が各ステップの原子配置において $\det B_{ij}^{\alpha} < 0$ である原子の割合、実線が 0 ステップにおいて $\det B_{ij}^{\alpha} < 0$ であった原子の中で、その後の各ステップの原子配置においても継続して $\det B_{ij}^{\alpha} < 0$ である原子の割合を示している。Ni, Al いずれにおいても各時刻の瞬間で見れば、破線のように不安定原子の割合はほぼ一定である。一方、継続して $\det B_{ij}^{\alpha} < 0$ であり続ける原子の割合は観測時間が長くなるにつれ減少する。Ni アモルファスでは、1000fs 観測すると、瞬間的に不安定となった原子のうち約 50% が 1000fs の間 $\det B_{ij}^{\alpha} < 0$ であったのに対して、Al アモルファスでは 10% に低下し、 $t = 1000\text{fs}$ でもさらに減少している。すなわち、Al の不安定原子の方があちこちで「出たり消えたり」する確率が高い。図 2 に、緩和計算中の不安定原子に生じる原子応力の平均値の変化を示す。既に報告したように、 $\det B_{ij}^{\alpha} < 0$ の原子に生じる平均応力は Ni で圧縮応力、Al は引張応力である。Al においては、各瞬間の不安定原子で平均した応力 (破線) と、つねに不安定であり続けた原子に生じる応力 (実線) に大きな違いはない。一方、Ni では不安定であり続け

Fig. 1 Ratios of unstable atoms under initial relaxation.

Fig. 2 Change in the stress on unstable atoms under initial relaxation.

Fig. 3 Changes in the ratio of unstable atoms under tension.

Fig. 4 Ratios of unstable atoms under relaxation at $\epsilon_{zz} = 0.1$.

た原子の応力 (実線) がさらに大きく圧縮側の値を示しており、力学的に明確に違う状態の可能性がある。

図 3 に単軸引張シミュレーションの間、ひずみ 0.001 毎の各瞬間の原子配置において $\det B_{ij}^{\alpha} < 0$ である原子の割合変化を示す。初期の割合 (図 1 の破線に対応) を一点鎖線にて示している。引張りによって、Ni では不安定原子が増加するのに対して、Al では $\epsilon_{zz} > 0.06$ の変形後期に不安定原子が減少する。ここで引張は毎ステップ増加させている為、各ひずみで長時間平均をとったものではない。そこで、 $\epsilon_{zz} = 0.1$ (図 3 の右端のひずみ) における原子配置を起点として、図 1 と同様に各セル辺長を固定した緩和計算を 1000fs 行い、不安定原子の変化を見たのが図 4 である。図 1 の結果についても薄くして併記した。 $\epsilon_{zz} = 0.1$ で 1000fs の計算を継続しても、各時刻の瞬間で判定した不安定原子の割合は変化せず、ほぼ一定である。また、継続して $\det B_{ij}^{\alpha} < 0$ であり続ける原子の割合は $\epsilon_{zz} = 0.0$ の時の値に収束している。このことは、引張りにより「静止した」不安定原子が増減しているのではなく、移動している不安定原子の割合が Ni では増え、Al では減少していることを意味する。

参考文献

- (1) 屋代・富田, 日本機械学会論文集, A 編, 67-656 (2001), 678-684.
- (2) 西村・屋代・富田, 材料, 58-1 (2009), 76-81.