単元系アモルファスにおける不安定原子の役割[†]

屋代 如月* 西村 正臣** 富田 佳宏*

Role of Unstable Atoms in Monatomic Amorphous System

by

Kisaragi YASHIRO*, Masaomi NISHIMURA** and Yoshihiro TOMITA*

We have so far discussed the deformation behavior of inhomogeneous systems, *e.g.* nano-polycrystalline and amorphous metals, from the unique viewpoint of “local lattice stability” or the positive definiteness of atomic elastic stiffness coefficients, B_{ij}^a . In the present study, the physical meaning of the “unstable atoms”, or the atoms of $\det B_{ij}^a < 0$, is clarified in the molecular dynamics simulations of a monatomic bulk amorphous of nickel. The criterion of $\det B_{ij}^a < 0$ definitely points out the existence of “defects” in the *homogeneous* random structure. They show hydrostatic compression at the initial equilibrium under $\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \sigma_{zz} = 0$; that is, they find more surrounding atoms than the stable ones. In other words, the unstable atoms have less free volume than stable ones. The ratio of unstable atoms doesn't change in the linear stress-strain response at the early stage of uniaxial tension and compression. The initial negative stress on unstable atoms works as deformation buffer under the early stage of uniaxial tension; the unstable atoms show higher stress increase than the stable ones. The onset of blunting and plateau region in the stress-strain curve coincides with the point where the stress difference between the stable and unstable atoms vanishes in the tensile direction, and the ratio of unstable atoms begins to increase. Here, the unstable atoms always feel compressive stress in the lateral direction while the stable ones almost zero stress in the plateau region. Thus we can deduce that the stable local configuration crushes in the lateral direction to absorb the elongation in the plateau or steady flow deformation. This mechanism corresponds to the conventional picture of the free volume. It is also true for compression that the ratio of unstable atoms begins to increase at the point where the stress-strain curve deviate from the initial linearity. In the case of compression, the local configuration crushes in the loading direction by the stable $\rightarrow$ unstable transition, since the unstable atoms always feel higher compression than the stable ones despite of the increase in the number of unstable atoms.

Key words: Molecular dynamics, Local lattice instability analysis, Amorphous metals, Residual stress, Free volume

1 緒 言

単位格子が無限に並んだ理想均一結晶（温度 0K）の弾性限界は、系のヘッシアンを直接求めることで評価できる。^{1), 2)}有限温度下の結晶についても、「欠陥のない」単結晶であれば、非線形弾性体の応力-ひずみ曲面の勾配である弾性剛性係数³⁾の正值性に基いて、系全体の不安定挙動としての相変態の開始^{4), 5)}や、部分転位の発生⁶⁾を予測できることが示されている。一方、内部不均一を有するナノ多結晶体やアモルファスの変形挙動については、分子動力学シミュレーションによる研究が多数なされているものの、引張シミュレーションにおいて応力上昇-鈍化-一定常流動変形へと、系の応力-ひずみ応答における遷移の支配因子をつきとめるには至っていない。

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}^a の正值性（局所格子安定性⁹⁾）という独自の視点から、ナノ多結晶体およびアモルファス金属の応力-ひずみ挙動を統一的に議論することを試みてきた。^{7)~9)}最大応力を生じるピークひずみなど、系全体の力学応答を

予測するような統一的な基準を得ることはやはり困難であったが、 $\det B_{ij}^a < 0$ である「不安定原子」に生じている応力と、他の安定原子のそれには明確な差があることを報告した。⁹⁾すなわち、系全体の応力を零に制御した無負荷平衡状態においても、ナノ多結晶体中の不安定原子には正の静水圧応力が、アモルファス中のそれには負の応力が生じている。したがって、不安定原子は安定原子より周囲の原子構造が大きく変形した「弱い部分」である。その初期応力の正負が逆であることからナノ多結晶体とアモルファスでは変形における不安定原子の役割は異なるものと考えられる。なぜなら、不安定原子の初期応力が相殺される変形方向が、ナノ多結晶体とアモルファスで異なるからである。ナノ多結晶体中の不安定原子は粒界原子であり、結晶部分に比べて局所密度が疎であることから正の静水圧応力となる。一方、 $\det B_{ij}^a < 0$ の基準を用いて初めて見えてくるアモルファス中の「欠陥原子」は、圧縮状態にあることから自由体積（free volume）が他に比べて小さい部分である。アモルファスの変形メカ

本報を「アモルファス金属の局所格子不安定性解析（第1報）」（Local Lattice Instability Analysis on Amorphous Metals, I）とする。

[†] 原稿受理 平成 19 年 12 月 6 日 Received Dec. 6, 2007 ©2008 The Society of Materials Science, Japan

* 正 会 員 神戸大学大学院工学研究科 〒657-8501 神戸市灘区六甲台町, Graduate School of Eng., Kobe Univ., Nada-ku, Kobe, 657-8501

** 神戸大学大学院工学研究科博士後期課程 〒657-8501 神戸市灘区六甲台町, Graduate School of Eng., Kobe Univ., Nada-ku, Kobe, 657-8501

ニズムにおける従来の自由体積の概念と、ここで見出した不安定原子の役割がリンクするのかどうか興味深い。

本論文では、アモルファス金属中の不安定原子の役割を明確にするために、これまで解析対象としてきたNi単元系のモデルアモルファスについてより詳細に検討する。引張変形だけでなく圧縮変形のシミュレーションも行うことで、不安定原子の初期応力の寄与を明確にする。Ni単元系での検討を第1報として、続く第2報ではNi-Al二元合金系モデルアモルファスについて検討し、NiとAlの本質的違い、ならびに混合による局所安定性の変化について考察する。

2 解析条件

これまでの解析⁷⁻⁹⁾と同様、1辺約10.6nmの立方体セルに作成したNi単元系バルクアモルファスを解析対象とする(模式Fig. 1)。原子数は108000である。アモルファス構造の作成は、①3000Kで10000fsの分子動力学(MD)計算を行って溶融させる、②毎ステップ0.05Kずつ制御温度を下げて10Kまで冷却する(59800fsのMD計算)、③10Kにおいて20000fsの緩和計算を行う、の順序により行っている。温度の制御は速度スケーリング法により毎ステップ行い、垂直応力が零になるように各セル辺長もスケーリングしている。⁸⁾得られた初期構造において各原子位置の格子安定性を後述する手法で評価した後、ひずみ速度 $\dot{\varepsilon}_{zz} = 1.0 \times 10^{-7}/\text{fs}$ での z 方向への単軸引張シミュレーション(前報⁹⁾の解析)、ならびに単軸圧縮シミュレーション($-\dot{\varepsilon}_{zz} = 1.0 \times 10^{-7}/\text{fs}$)を行い、応力-ひずみ関係を求めるとともに、5000fs(ひずみ 5×10^{-4})毎に保存した原子配置データを用いて格子不安定解析を行った。ひずみは初期セル辺長を基準とした工学ひずみである。温度はこれまでの検討と同様、熱揺動の影響を排除しひずみによる変化のみを抽出するため、いずれのシミュレーションも10Kに制御している。なお、単軸引張シミュレーションにおいては、変形の可逆性を調べるために種々の引張ひずみからの除荷および再負荷シミュレーションも併せて行ったが、いずれもひずみ速度の大きさは $|\dot{\varepsilon}_{zz}| = 1.0 \times 10^{-7}/\text{fs}$ としている。

原子間ポテンシャルにはVoterら¹⁰⁾の原子埋め込み法(EAM)を用いた。EAMでは、各原子のエネルギー寄与 E^α は次式のように表現される。

$$E^\alpha = \frac{1}{2} \sum_{\beta \neq \alpha} \phi(r^{\alpha\beta}) + F(\rho^\alpha) \quad (1)$$

$$\rho^\alpha = \sum_{\beta \neq \alpha} \bar{\rho}(r^{\alpha\beta}) \quad (2)$$

Fig. 1 Simulation model.

ここで、 $\phi(r^{\alpha\beta})$ は距離 $r^{\alpha\beta}$ 離れた原子 α と β の間の2体間ポテンシャル、 $F(\rho^\alpha)$ は原子 α の位置における多体効果を表現する「埋め込みエネルギー」であり、別の2体間ポテンシャル $\bar{\rho}(r^{\alpha\beta})$ の重ね合わせで得られる局所密度 ρ^α の汎関数として表現される。

結晶の熱力学関係から、系の応力、弾性係数は、ひずみ摂動に対する単位体積当たりの内部エネルギーの1次、2次導関数

$$\sigma_{ij} = \frac{1}{V} \frac{\partial E}{\partial \varepsilon_{ij}}, \quad C_{ijkl} = \frac{1}{V} \frac{\partial^2 E}{\partial \varepsilon_{ij} \partial \varepsilon_{kl}} \quad (3)$$

と定義される。³⁾これを局所に適用し、各原子位置における局所ひずみ摂動を考慮すれば、 $r^{\alpha\beta}$ の変化から次の原子応力、原子弾性係数が導出できる。⁶⁾

$$\sigma_{ij}^\alpha = \sum_{\beta \neq \alpha} \left\{ \frac{1}{2} \phi'_{\alpha\beta} + F_\alpha \bar{\rho}'_{\alpha\beta} \right\} S_{ij} / \Omega \quad (4)$$

$$C_{ijkl}^\alpha = \sum_{\beta \neq \alpha} \left\{ \left(\frac{1}{2} \phi''_{\alpha\beta} - \frac{\phi'_{\alpha\beta}}{r^{\alpha\beta}} \right) + F'_\alpha \left(\bar{\rho}''_{\alpha\beta} - \frac{\bar{\rho}'_{\alpha\beta}}{r^{\alpha\beta}} \right) \right\} Q_{ijkl} + F''_\alpha \left[\sum_{\beta \neq \alpha} \bar{\rho}'_{\alpha\beta} S_{ij} \right] \left[\sum_{\gamma \neq \alpha} \bar{\rho}'_{\alpha\gamma} T_{kl} \right] / \Omega \quad (5)$$

$$S_{ij} = \frac{r_i^{\alpha\beta} r_j^{\alpha\beta}}{r^{\alpha\beta}}, \quad T_{kl} = \frac{r_k^{\alpha\gamma} r_l^{\alpha\gamma}}{r^{\alpha\gamma}}, \quad Q_{ijkl} = \frac{r_i^{\alpha\beta} r_j^{\alpha\beta} r_k^{\alpha\beta} r_l^{\alpha\beta}}{\Omega (r^{\alpha\beta})^2}$$

ここで、 Ω は原子体積、 $r_i^{\alpha\beta}$ は原子 α から β へ向かうベクトルの i 方向成分である。 F_α 、 $\bar{\rho}_{\alpha\beta}$ 、 $\phi_{\alpha\beta}$ はそれぞれ $F(\rho^\alpha)$ 、 $\bar{\rho}(r^{\alpha\beta})$ 、 $\phi(r^{\alpha\beta})$ を略記したものであり、'はそれぞれの微分係数を表す。式中の総和は原子 α への作用が無視できるとみなせる距離 r_c 以内の原子 β すべてについて行われる。本研究では、 $r_c = 0.556\text{nm}$ の条件で各原子について σ_{ij}^α 、 C_{ijkl}^α を評価し、Voigt対称性³⁾を持たせた次の弾性剛性係数 B_{ijkl}^α を各原子位置において算出する。

$$B_{ijkl}^\alpha = C_{ijkl}^\alpha + (\sigma_{ij}^\alpha \delta_{jk} + \sigma_{jk}^\alpha \delta_{il} + \sigma_{ik}^\alpha \delta_{jl} + \sigma_{il}^\alpha \delta_{jk} - \sigma_{ij}^\alpha \delta_{kl} - \sigma_{kl}^\alpha \delta_{ij}) / 2 \quad (6)$$

ここで δ はクロネッカーのデルタである。 B_{ijkl}^α の独立な成分は21であり、Cartesian座標における自由指標の6つの組み合わせ $ij = 11, 22, 33, 23, 31, 12$ により、 B_{ij}^α ($i, j = 1 \sim 6$)のように 6×6 行列として表すことができる(Voigt表記)。本研究では、各原子の安定性を行列式 $\det B_{ij}^\alpha$ の正負により判定する。

3 単軸引張の解析結果

3.1 応力-ひずみ関係と不安定原子の割合変化

Fig. 2に単軸引張下の応力-ひずみ関係、ならびに、 $\det B_{ij}^\alpha < 0$ の原子の割合変化を示す。応力は式(4)を全原子について平均した真応力である。図中太い実線が応力-ひずみ関係であり、右軸にそのスケールを示す。細い実線は、ひずみ $\varepsilon_{zz} = 5 \times 10^{-4}$ 毎に評価した不安定原子の数 N^{inst} の変化であり、引張り前の不安定原子の数 $N_0^{\text{inst}} = 13839$ からの差を、系全体の原子数で除して示している。引張り前の不安定原子の割合は13%程度である。引張りごく初期において、不安定原子は瞬間的に0.1%程度増加しているが、その後振動しながら収束しており、図中①で示したひずみまでは、不安定原子はほとんど増加して

Fig. 2 Stress-strain curve and change in the ratio of unstable atoms (uniaxial tension).

いない。応力-ひずみ曲線の勾配がわずかに変化するの
はこの①のひずみであり、この点から不安定原子の割合
が増加する。ただし、②で示したひずみにおいて、一度
小さなピークを示して不安定原子の増加は一時的に停滞
する。このとき、応力-ひずみ曲線は②のひずみでわず
かに下に凸を示した後、③で示したひずみで顕著な折れ
曲がり（ピーク）を示すなど、複雑な応答を示している。
応力-ひずみ曲線と不安定原子の割合変化がもっとも明
確な対応を示したのは④で示したひずみである。それ以
降は、不安定原子の割合は鋸歯状に振動しながら増加す
るのに対し、応力-ひずみ関係はほぼ一定の応力で変形
が進行する plateau 領域となっており、両者の対応は不
明確となる。

3・2 不安定原子に生じる応力とその役割

$\det B_{ij}^a > 0$ の安定な原子、 $\det B_{ij}^a < 0$ の不安定な原子
それぞれで分けた評価した垂直応力の変化を Fig. 3 に示
す。前報⁹⁾では引張方向の応力のみ議論していたが、垂
直方向 (x, y 方向) の応力変化も示すことで、以下で考
察するように $\det B_{ij}^a < 0$ の不安定原子の役割が明らかと
なる。なお、図中の①～④で示したひずみは、Fig. 2 の

Fig. 3 Change in normal stresses on stable and unstable atoms (uniaxial tension).

それと対応している。図の $\epsilon_{zz} = 0.0$ における値を見てわ
かるように、Ni 単元系アモルファスでは、不安定原子は
約 0.3GPa の静水圧縮応力状態にあり、引張りに対し
て「相殺可能な」初期応力を有している。一方、不安定
原子の数は約 13% と、系全体に対して無視できない割合
であるため、安定原子の平均応力はわずかに引張り側を
示している。図中に基準として 0GPa と -0.3GPa の応力
値を一点鎖線の水平線で示した。前報で述べたように、
引張初期 (①のひずみまで) では、 $\det B_{ij}^a < 0$ の不安定
原子の応力増加の方が安定原子より大きく、ひずみ①に
おいて、安定原子と不安定原子に生じる引張方向の応力
に差がなくなる。一方、横方向応力については、安定原
子にはほとんど変化がないのに対し、不安定原子では、
 σ_{xx}^a はほぼ 0 であるが、 σ_{yy}^a はより圧縮側に変化してい
る。①のひずみまでは、不安定原子の数が増えていないこ
と、不安定原子の引張方向ならびに横方向の応力変化が
大きいこと、などからこの領域は不安定原子近傍の局所
構造が大きく変形する「変形バッファ」として機能して
いると結論づけられる。

不安定原子の圧縮応力は、 $\epsilon_{zz} = 0$ では差がないのに対
し、先述のように引張りによって③のひずみまでは横方
向応力 σ_{xx}^a と σ_{yy}^a の差が拡大する。すなわち、不安定原
子近傍の局所構造は、③のひずみまでは x 方向に変化が
なく、 z 方向に引っ張られて y 方向に圧縮するという異
方性を示している。一方、③のひずみ以降は σ_{xx}^a も圧縮
側に変化しはじめ、最大応力を示すひずみ④では両者が
一致している。①～③における不安定原子の増加→一時
的な停滞は、この「 y 方向に圧縮しやすい」異方性を保
つような変形下で不安定原子が増加した上で、変形限界
に達して別の変形経路（等方収縮）へと遷移したものと
解釈できる。③のひずみにおける応力-ひずみ曲線の顕
著な折れ曲がりはこちらに対応する。

引張りによる、不安定原子の横方向平均応力の差は、
大きなばらつき（分布）を有する σ_{xx}^a , σ_{yy}^a のわずかな差
に起因し、分布のヒストグラムを調べてもその違いを見
出すことはできない。しかも、その異方性は変形を与え
て初めて現れたもの（ $\det B_{ij}^a$ の正値性を用いなければ全
く見えない）であり、系が有する「欠陥」の「変形抵抗」
を、全体で平均したものといえるだろう。系が無限に大
きければ、原理的にはこの異方性は現れないはずである
が、有限の系に周期境界を適用したアモルファス構造で
は本解析のように「弱い方向」が存在し、これまで示し
てきたように遷移領域の応力-ひずみ応答を複雑にする
ものと考えられる。

最大応力を示したひずみ④以降では、引張方向の応力
には安定、不安定原子に差がなく、不安定原子の横方向
応力は常にほぼ一定の圧縮応力値を示している。一方で、
Fig. 2 からは plateau 領域では安定→不安定の遷移が多
数生じていることが示されている。このことは、安定か
ら不安定へと変わった原子の応力は、引張方向には変わ
らず、横方向応力が正から圧縮状態へと変化しているこ
とを示唆している。すなわち、引張軸に対して垂直方向

に、安定原子近傍の局所構造が「つぶれる」ことで変形を吸収していることを意味し、自由体積を消費して変形が進行するという従来の描像に符合する。

Fig. 4 は単軸引張下の、安定、不安定原子を中心としたカットオフ距離 (0.556nm) 以内の平均原子数の変化である。図中の①～④は Fig. 2, 3 で示したひずみに対応する。原子数が少ない、すなわち図中で下側にグラフがある方が「自由体積」が大きいことを意味する。一定のカットオフ球内の原子数を評価しているの、引張りによる延伸で極方向の原子がカットオフ距離から外に出るため、最大応力を生じるひずみ④までは安定、不安定原子ともに周囲の平均原子数が減っているが、これをそのまま「自由体積の増加」と解釈すべきかどうかは現時点では不明である。一方、④のひずみ以降、不安定原子の周囲の原子数は一定で、安定原子のそれは変形が進むにつれ徐々に増加している（自由体積が減少している）。先述のように、plateau 領域では横方向に局所構造がつぶれることで安定→不安定の遷移を多数生じているが、Fig. 4 においては下側の $\det B_{ij}^a > 0$ のグラフから上側のグラフにジャンプすることに対応する。この遷移が数多く生じることで、安定原子の自由体積が減少していく、とみなすことができる。ただし、安定、不安定原子の周囲の原子数の差がわずか 0.5 原子程度であることは、自由体積による議論の困難さを物語っている。なお、①～③で示したひずみで顕著な変化が見られず、不安定原子の横方向応力の異方性がなくなる④のひずみで周囲の原子数、言い換えれば局所密度に変化が現れたのは、カットオフ半径による等方的な局所構造評価の限界を意味しているとも言える。

3・3 不安定原子と変形の可逆性

様々な引張りひずみからひずみを反転させて除荷した際の応力-ひずみ応答を Fig. 5 に示す。これまで通り、図中の①～④のひずみは Fig. 2～4 に対応しているが、横軸のひずみの範囲は 0.06 までとして拡大して示している。引張りごく初期のひずみ 0.005 で除荷した場合、応力-ひずみ曲線は引張り時のそれに一致する（可逆変形）。一

Fig. 4 Change in number of neighbor atoms in cutoff radius (uniaxial tension).

Fig. 5 Stress-strain curves in the unloading and reloading process (uniaxial tension).

方、不安定原子が増加し始めるひずみ①から除荷した場合でも、永久ひずみが残留する。この永久ひずみは約 0.002 であり、①のひずみが 0.2% 耐力に対応しているのが興味深い。ひずみ①、②とも除荷時の応力-ひずみ関係はほぼ線形であるのに対して、ひずみ④および $\varepsilon_{zz} = 0.052$ (⑤) から除荷した場合はひずみ反転時に非線形な応答を示す。最大応力を示したひずみ④を「最大静摩擦力」と考えると、その後は動的な内部構造変化（流動変形）を生じるので、④、⑤でひずみを反転させたときは応答の遅れが生じて除荷初期に非線形性を示したものと推測される。⑤からの除荷については、応力 0 となってから再度引張りを行った結果も示すが、再引張り時は除荷時の応力-ひずみ経路よりわずかに高応力側を示し、②のひずみで応力上昇が鈍化した。このひずみについては後述する。

Fig. 6 に除荷時の不安定原子の割合変化を示す。Fig. 5 で示した除荷過程の全てを同一曲線上にプロットすると煩雑になるので、ひずみ④および⑤から除荷した際の変化を Fig. 6 (a) に、 $\varepsilon_{zz} = 0.005$ 、ならびに①および②から除荷した際のそれを拡大して Fig. 6 (b) に示す。黒矢印は除荷の開始点を、④、⑤のひずみからの除荷については除荷終了時（応力がゼロとなったひずみ）の点を白抜き矢印で示している。細線は Fig. 2 で示した引張り時の不安定原子の割合変化である。全体的には引張り時の曲線に沿って不安定原子の割合が減少している。ただし、⑤のひずみからの除荷では、除荷終了時においても初期状態より 0.4% 程度不安定原子が多い状態となっている。すなわち、再引張過程は、初期状態の異なるアモルファス構造の引張りで見なすことができるので、Fig. 6 (a) の白抜き矢印の値 ($\varepsilon_{zz} = 0.029$, 不安定原子の割合 0.4%) を Fig. 2 の原点に一致させて表示させると Fig. 7 のようになる。図中太線が原点をシフトさせた再引張り時の不安定原子割合の変化であり、細線が Fig. 2 のそれである。再引張り時は $\varepsilon_{zz} = 0.007$ 近傍（初期セルをひずみの基準とすると 0.037）から増加しており、不安定原子が増加し始めるひずみは最初の引張りに対応しないものの、不

(a) Unloading from Strains ④ and ⑤

(b) Unloading from $\varepsilon_{zz} = 0.005$, Strains ① and ②

Fig. 6 Change in the ratio of unstable atoms in the unloading process (uniaxial tension).

Fig. 7 Change in the ratio of unstable atoms in the 1st and 2nd loading process (uniaxial tension).

安定原子の増加が最初のピークを示すひずみ②が一致するなど、興味深い傾向が認められる。このひずみは、Fig. 5で示したように、再引張り時に応力-ひずみ応答が鈍化する点②である。

4 単軸圧縮の解析結果

4・1 応力-ひずみ関係と不安定原子の割合変化

Fig. 8に単軸圧縮下の応力-ひずみ関係を黒い実線で示す。単軸引張の結果（灰色の実線）と比較するため、圧縮ひずみ、応力を正として表示している。図中の記号①～④については後述する。単軸引張ほど顕著ではないが、④で示したひずみ近傍から応力増加が鈍化していることが、最小二乗近似により求めた $\varepsilon_{zz} = 0.0 \sim 0.005$ の平均勾配（破線）からのずれとしてわかる。その後、引張り時と同様に小さな応力ピークを示しながら応力鈍化一定常流動変形（plateau 領域）へと遷移する。一定常流動変形時の応力には引張り時と圧縮の間に大きな差はない。

Fig. 9に単軸圧縮下の不安定原子の割合変化を黒い実線で示す。灰色の実線は単軸引張における変化である。両者は比較的似た変化を示している。図中の記号はFig. 8で示したひずみに対応しており、①までは不安定原子がほとんど増加しない領域、②～④はその後不安定原子の割合変化に見られるピークを示している。Fig. 9を再度見ると、②～④のひずみ近傍では応力-ひずみにも小さなピークを生じていることがわかる。ただし、単軸

Fig. 8 Relationship between compressive stress and strain (uniaxial compression).

Fig. 9 Change in the ratio of unstable atoms (uniaxial compression).

引張の場合に比べてピークは顕著でなく、ひずみ 0.1 までの全体的な変化を見れば不安定原子は単調に増加しているとも見える。

4・2 不安定原子に生じる応力とその役割

前節と同様に、安定、不安定原子毎に分けて評価した垂直応力の変化を Fig. 10 に示す。圧縮ひずみを正として横軸にとり、縦軸は通常のように引張応力を正として表示している。また、Fig. 3 と同様に 0GPa と -0.3GPa の応力値を、一点鎖線の水平線で示している。変形方向の応力 (σ_{zz}) を見ると、変形中常に不安定原子が高応力 (絶対値の大きい) 側を示している。注意深く観察すると、①のひずみにおいて不安定原子の σ_{zz}^a の勾配が変化 (応力増加の鈍化) しているのに対して、安定原子のそれには大きな変化がない。不安定原子の横方向の応力変化を見ると、①のひずみから σ_{xx}^a の圧縮応力が回復することで異方性を生じている。その後、引張りのときと同様に最大応力を示すひずみ④で横方向応力の異方性が消える。したがって、応力-ひずみ曲線が鈍化→plateau 領域へと遷移する際の複雑な応答は、3・2 節で考察したように全体として「y 方向に圧縮しやすい」初期構造の異方性に起因するものと考えられる。

最大圧縮応力を示すひずみ④以降は、引張りの場合と同様に安定→不安定の変化が生じているにも関わらず、安定、不安定原子の横方向応力はほぼ一定である。したがって、横方向応力がほぼ 0 で z 方向に圧縮した状態から、x, y 方向にも圧縮状態で、z 方向にさらに圧縮した状態へと体積収縮に近い変化をすることで安定→不安定となっていることが推測される。すなわち、引張りの時と同様に、定常流動変形時では安定原子の自由体積を消費して変形を吸収しているが、塑性変形の結果として「欠陥」が増加していることが、局所格子不安定解析により明らかとなる。

Fig. 10 Change in normal stresses on stable and unstable atoms (uniaxial compression).

5 結 言

内部不均一を有する系の変形挙動を、原子弾性剛性係数 B_{ij}^a の正値性 (局所格子安定性) の観点から解明する研究の一環として、Ni 単元系モデルアモルファスの単軸引張、引張り-除荷-再引張り、単軸圧縮の分子動力学シミュレーションを行い、 $\det B_{ij}^a < 0$ の不安定原子の役割を詳細に検討した。 $\det B_{ij}^a < 0$ の基準を用いて初めて、無負荷平衡状態のアモルファス構造に「欠陥」の存在が確認でき、転位の芯構造ともいえるべきそれらは初期状態で 3 軸圧縮応力状態にあること、単軸引張、圧縮のいずれにおいても、応力-ひずみ曲線が初期の線形応答からずれ始めるひずみ近傍から $\det B_{ij}^a < 0$ の不安定原子の割合が増加し始めること、応力一定で流動変形する plateau 領域では安定→不安定遷移を多数生じることで変形を吸収していること、等を明らかにした。

最後に、本研究の一部は平成 19 年度科学研究費補助金若手研究 B、特定領域研究ならびに基盤研究 B2 の援助を受けた。ここに記して謝意を表する。

参 考 文 献

- 1) M. Born and K. Huang, "Dynamical theory of crystal lattices", (1954) Oxford UP.
- 2) F. Milstein, "Theoretical strength of a perfect crystal", Physical Review, B, Vol.3, pp.1130-1141 (1971).
- 3) D. C. Wallace, "Thermodynamics of crystals", (1972) Wiley, Newyork.
- 4) J. Wang, S. Yip, S. R. Phillpot and D. Wolf, "Crystal instabilities at finite strain", Physical Review Letters, Vol.71, pp.4182-4185 (1993).
- 5) J. Wang, J. Li, S. Yip, S. R. Phillpot and D. Wolf, "Mechanical instabilities of homogeneous crystals", Physical Review, B, Vol.52, pp.12627-12635 (1995).
- 6) K. Yashiro and Y. Tomita, "A molecular dynamics study on local lattice instability at dislocation nucleation and motion", Transaction of the Japan Society of Mechanical Engineers, series A, Vol.67, pp.678-684 (2001).
- 7) K. Yashiro, M. Nishimura and Y. Tomita, "Global vs. local stability of disordered system : local lattice instability analysis on nano-polycrystalline and amorphous metals", Transaction of the Japan Society of Mechanical Engineers, series A, Vol.73, pp.216-223 (2007).
- 8) K. Yashiro, M. Nishimura and Y. Tomita, "Global vs. local instability of disordered systems : local lattice instability analysis on external loading conditions", Transaction of the Japan Society of Mechanical Engineers, series A, Vol.73, pp.66-72 (2007).
- 9) K. Yashiro, M. Nishimura and Y. Tomita, "Unstable Behavior of Nano-Polycrystalline and Amorphous Metals under Uniaxial Tension : Local Lattice Instability Analysis", Journal of the Society of Materials Science, Japan, Vol.57, pp.112-118 (2008).
- 10) A. F. Voter and S. P. Chen, "Accurate interatomic potentials for Ni, Al and Ni₃Al", Materials Research Society Symposium Proceedings, Vol.82, pp.175-180 (1987).