原子弾性剛性係数によるアモルファス金属の変形挙動の評価†

西村正臣* 岩崎洋佑** 荒井政大*

Evaluation of Deformation Behavior in Amorphous Metals by Atomic Elastic Stiffness Coefficients

by

Masaomi NISHIMURA*, Yosuke IWASAKI** and Masahiro ARAI*

We have performed the indentation simulation to a Ni₅₀Al₅₀ amorphous metal by the molecular dynamics method, and discussed the plastic deformation behavior in amorphous structure by atomic strains and atomic elastic stiffness coefficients, B_{ij}^α , or the second-order derivatives of atomic energy. During the indentation, zonal regions like shear bands below the indentation point show large values of local deviatoric strains and local volume strains. The number of both positive and negative switching of positivity of $\det B_{ij}^\alpha$ increases according to the formation of shear bands. On the other hand, the “probabilistic” switching of positivity of $\det B_{ij}^\alpha$ constantly occurs due to subtle changes in local volume strains even at the equilibrium state. In order to understand the plastic deformation behavior, we should observe the switching of positivity of $\det B_{ij}^\alpha$ with the exception of small variation of local volume strains. Evaluation of the switching with a large variation of local volume strains reveals occurrence of deformation propagation and extensive rearrangements of atoms around shear bands.

Key words: Molecular dynamics simulation, Amorphous metal, Atomic elastic stiffness Coefficients, Atomic strain, Plastic deformation

1 緒言

1990 年頃から、 -0.1K/s といった低い冷却速度でも結晶化しないガラス形成能の高い合金組成が発見され、¹⁾「バルク金属ガラス」として注目されている。バルク金属ガラスの寸法は大きいもので数 cm にも達するため、これまで主に機能性材料としての用途に使用されてきたアモルファス金属の構造材料としての応用も期待されている。一方で、アモルファス金属では、塑性変形が局所的に集中するせん断帯の発生によりぜい性的な破壊が生じることが知られているが、その詳細なメカニズムについては不明な部分も多いために、せん断帯の発生機構や形成過程などの理解が求められている。アモルファス構造に基づいた塑性変形の素過程として、STZ (Shear transformation zone) モデル²⁾や自由体積理論³⁾などが提案されているものの、塑性変形にいたるためのクライテリオンやせん断帯形成との関係については明確ではない。また、アモルファス金属においては、領域ごとに局所構造が大きく異なるために、構造ごとに塑性変形にいたるための臨界応力や臨界ひずみも異なるものと考えられ、塑性変形の開始や発展に関して平均化された議論は可能であっても、個々の構造の違いを反映した議論は容易ではない。

著者らのグループでは、アモルファス金属の塑性変形メカニズムを理解するために、分子動力学法による種々の変形シミュレーションを実施し、各原子位置におけるエネルギーの 2 次導関数に相当する原子弾性剛性係数 B_{ij}^α

の正值性によって、各原子の安定性を評価する局所格子不安定性解析⁴⁾による検討を試みてきた。^{5), 6)} B_{ij}^α の値は局所の力学状態を反映しており、たとえ局所構造やポテンシャル関数が異なっているとしても、 $\det B_{ij}^\alpha$ が正か負かという同一の判断基準による議論ができるので、塑性変形メカニズムの統一的な理解が期待できる。本研究では、アモルファス金属に対して押し込みシミュレーションを行い、アモルファス内部にて生じる塑性変形領域について原子ひずみにより評価するとともに、原子弾性剛性係数 B_{ij}^α の正值性の変化を評価することで、せん断帯などの形成過程などについて議論した。

2 原子弾性剛性係数

外力下で釣り合い状態にある 2 つの状態 $\mathbf{x}$ と $\mathbf{X}$ での応力差 $\Delta\sigma_{ij} = \sigma_{ij}(\mathbf{X}) - \sigma_{ij}(\mathbf{x})$ と $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{X}$ のひずみ $\Delta\epsilon_{kl}$ とは、次の弾性剛性係数 B_{ijkl} で関係付けられる。⁷⁾

$$\frac{\Delta\sigma_{ij}}{\Delta\epsilon_{kl}} \equiv B_{ijkl} = C_{ijkl} + (\sigma_{il}\delta_{jk} + \sigma_{jl}\delta_{ik} + \sigma_{ik}\delta_{jl} + \sigma_{jk}\delta_{il} - 2\sigma_{ij}\delta_{kl})/2 \quad (1)$$

ここで σ_{ij} , C_{ijkl} は状態 $\mathbf{x}$ における応力と弾性係数であり、釣り合い状態に仮想ひずみ摂動を与えたときの内部エネルギーの 1 次、2 次変化量として定義される。また、 δ_{ij} はクロネッカーのデルタである。なお、式 (1) 中の C_{ijkl} は外力が作用した状態で求まる弾性係数なので、一般的な無負荷時の弾性係数とは異なることに注意されたい。このとき、任意の方向の変形に対して安定であるには B_{ijkl} が正定でなければならない。すなわち、正定でない場合

† 原稿受理 平成 24 年 7 月 4 日 Received July 4, 2012 ©2013 The Society of Materials Science, Japan

* 正会員 信州大学工学部 〒380-8553 長野市若里, Dept. of Mech. Systems Eng., Shinshu Univ., Wakasato, Nagano, 380-8553

** 信州大学大学院工学系研究科, Division of Sci. and Tech., Shinshu Univ., Wakasato, Nagano, 380-8553

は、応力の増加を必要とせずに変形が進行出来る経路が存在することを意味している。この安定性評価を局所に適用し、原子シミュレーション中の各原子位置において評価される原子応力 σ_{ij}^α ならびに原子弾性係数 C_{ijkl}^α (それぞれポテンシャル関数の1次および2次導関数として定義される) から、原子弾性剛性係数 B_{ijkl}^α を求めて $\det B_{ijkl}^\alpha$ の正値性を議論する。なお、以降では B_{ijkl}^α を B_{ij}^α ($i, j = 1 \sim 6$) のように独立なひずみ6つを変数とする 6×6 のマトリックスとして表記する (Voigt 表記)。

これまでの検討^{5), 6)}により、アモルファス金属では、無負荷平衡状態においても $\det B_{ij}^\alpha < 0$ となる原子が多数存在することを明らかにしている。 $\det B_{ij}^\alpha$ が負値である場合は、不安定な釣り合い状態であるので、応力の増加なしに変形できる経路が存在することを意味しているが、不均一な構造では、周囲の原子構造の拘束により、 $\det B_{ij}^\alpha < 0$ の原子を含んだ状態のまま、系全体として安定な平衡状態を築いているものと考えられる。前報⁶⁾において、無負荷時と引張変形下における $\det B_{ij}^\alpha$ の正値性変化について検討した結果、無負荷時においても熱ゆらぎなどの確率的因子により $\det B_{ij}^\alpha < 0 \Leftrightarrow \det B_{ij}^\alpha > 0$ の変化が一定量生じているが、原子構造の組み換えを伴うような変形が生じたときには、変形領域では新たな平衡状態に移移するために、 $\det B_{ij}^\alpha$ の正値化 ($\det B_{ij}^\alpha < 0 \Rightarrow \det B_{ij}^\alpha > 0$) と負値化 ($\det B_{ij}^\alpha > 0 \Rightarrow \det B_{ij}^\alpha < 0$) が同時に多数生じることを明らかにしている。

3 解析条件

Ni 原子と Al 原子を Ni₅₀Al₅₀ の合金比率にて x, y, z 軸方向に $180 \times 6 \times 180$ の fcc 結晶格子点上にランダムに配置した y 軸方向に薄いセル形状を初期構造とし、全方位周期境界条件の下で 4 000 K の液体構造から 10 K まで冷却速度 -2.0×10^{13} K/s にて急冷することによりアモルファス構造を得た。原子数は 777 600 である。原子間ポテンシャルには Lennard-Jones ポテンシャル⁸⁾を用い、分子動力学計算の積分時間ステップは 1 fs とした。得られたアモルファス構造の y 軸方向のみの周期境界条件を保ち、 x, z 軸方向のセル側面を自由表面として 200 ps 緩和した後、押し込みシミュレーションを行った。半径 $R = 40$ nm の仮想円柱状圧子を z 軸方向の表面から 1 nm 離れた状態から押し込み速度 0.01 nm/ps にて 6 nm 押し下げ、その後、押し込まれた状態で圧子を 100 ps 保持してから、圧子を押し下げ時と同速にて引き上げた。仮想圧子内に進入した原子には $V(r) = A(R - r)^3$ のポテンシャル⁹⁾に従う斥力が圧子表面の法線方向に生じるものとした。ここで、 A は斥力の大きさを与える定数、 r は仮想円柱の中心軸と原子との距離を表す。 A の値には、Au に対する押し込みに用いられた値⁹⁾を参考にして、 $A = 5.0$ nN/Å² を用いた。押し込み解析中は、押し込みを行う面の対面の厚さ 1 nm の領域内原子について、押し込み方向の原子運動を拘束することで固定端とした。温度は 10 K とし、速度スケール法により制御した。

4 解析結果および考察

4.1 ポテンシャルエネルギーと斥力の変化

押し込み時における系の平均ポテンシャルエネルギー E_{tot}/N の時間変化と仮想圧子に生じる斥力 P の時間変化を Fig. 1 に示す。ここで、斥力 P は、仮想圧子と原子間に生じる斥力の押し込み方向成分を総和した値である。図中では圧子押し下げ終了後の 100 ps 間の圧子保持期間を破線にて示しており、600 ps までは圧子が押し下げられ、700 ps 以降において圧子は引き上げられている。仮想圧子を 1 nm 離れた状態から押し下げが開始されているために、押し下げ開始からおよそ 100 ps 後に圧子がアモルファス金属表面と接触を開始して斥力 P の値は増加し始める。接触後、圧子が押し込まれることにより接触面積が増えるため、斥力 P の値は単調に増加するが、300 ps 付近からは増加が鈍化しており、内部にて塑性変形が生じていることが示唆される。600 ps ~ 700 ps において、圧子の押し下げを停止しても、 P の値はほとんど変化することなく残留しており、弾性変形による斥力が存在していることが理解できる。700 ps から圧子引き上げが始まると P の値は急減し、およそ 900 ps において 0 となったため、この時点で圧子が表面から離れたことを意味している。一方で、ポテンシャル E_{tot}/N の値は圧子の接触開始と同時に変化せず、接触後しばらくした 150 ps 付近から上昇し始めた。その後、圧子押し下げ終了点である 600 ps にて最高値を示すまで、ほぼ単調に増加するが、白矢印で示した 470 ps と 550 ps 付近においては、階段状の変化が明瞭に見られた。600 ps から、圧子の保持が始まると、 E_{tot}/N の値はわずかに低下し、一定の値に収束した。圧子引き上げが始まると E_{tot}/N の値はさらに低下した後に、圧子が完全に離れた 900 ps 付近から一定値に収束した。このときの値は初期値よりわずかに高いエネルギーであり、押し込みによって初期構造とは異なる平衡状態に変化したことを示唆している。

4.2 原子ひずみ

アモルファス金属内部における構造変化を原子ひずみにより評価した。原子ひずみは Mott ら¹⁰⁾に従い、初期平衡状態において評価される Voronoi 多面体の各頂点に

Fig. 1 Changes in potential energy and indentation force during indentation simulation.

最近接な4つの原子位置により構成される四面体要素を定義し、各要素の均一ひずみをVoronoi多面体に占める体積分率により重みづけ平均することで各原子のひずみテンソル ε_{ij} を求め、局所体積ひずみ ε_v と局所偏差ひずみ γ の2つのスカラー量を以下の式により求めた、

$$\varepsilon_v = \text{Tr } \varepsilon_{ij} \quad (2)$$

$$\gamma^2 = \frac{2}{3} \text{Tr} \left(\varepsilon_{ij} - \frac{1}{3} \varepsilon_v \delta_{ij} \right)^2 \quad (3)$$

押し込み変形下の300ps, 500ps, 700ps, 900psにおける各原子配置をFig. 2, Fig. 3に示し、それぞれ局所偏差ひずみ γ と局所体積ひずみ ε_v の値に応じて原子を着色して示した。ただし、Fig. 3の ε_v については、正と負のひずみが生じるので、カラースケールに示すように絶対値の値が大きくなるに従って濃く着色した。Fig. 2 (a)の300psでは、圧子直下付近において、 γ が大きい原子の出現を確認できる。Fig. 2 (b)の500psにおいては、300psで生じた γ が大きな領域を起点にして、交差するように γ の大きな領域が帯状に成長しており、せん断帯が形成されているものと考えられる。さらにその外側にも新たにひずみの大きな領域の形成が確認できる。Fig. 2 (c)の700psでは、(b)で見られた帯状の領域にてひずみがさらに大きくなり、より明瞭にせん断帯の形成が確認できる。圧子がほぼ離れたFig. 2 (d)の900psにおいては、(c)と大きな変化はなく、これらのせん断帯域が不可逆な変形として残留することがわかる。Fig. 3で示した局所体積ひずみ ε_v の変化は、Fig. 2で γ が大きな値を示した領域にて、絶対値の大きな原子が集中している。実際には、 ε_v が大きく増える局所構造と減少する局所構造が領域内に混在していることを確認している。ただし、今回

用いた原子ひずみは押し込み前の初期構造を基準にしてひずみを算出しているために、せん断帯域などで原子構造が大きく崩れてしまうと基準としている四面体要素の連続性は保たれず、大きなひずみ量で評価される傾向にあるので、 γ と ε_v のどちらの値も大きく変化することは、今回の原子ひずみの評価法にも起因している可能性がある。また、圧子直下に見られるせん断帯のみでなく、圧子から x 軸方向の側壁まで斜め方向の領域で数 nm レベルでのひずみが大きな領域を飛び飛びに見出すことができる。ただし、表面付近でみられる特に大きなひずみを示す原子の存在は、表面に接している原子ではVoronoi領域を正確に定義できないことが原因である。

4・3 $\det B_{ij}^\alpha$ の正值性の変化

押し込み中の各時刻の原子配置から $\det B_{ij}^\alpha$ を求め、時間間隔 $\Delta t = 1\text{ps}$ の前後 $\det B_{ij}^\alpha(t - \Delta t)$ と $\det B_{ij}^\alpha(t)$ の正值性を比較することで、負値 $\Rightarrow$ 正值へと正值化した原子数 N^{posi} と、正值 $\Rightarrow$ 負値へと負値化した原子数 N^{nega} を評価し、その時間変化をFig. 4に示す。なお、Fig. 1と比較できるように、圧子が接触している期間と600ps ~ 700psの圧子保持期間を破線にて示している。前報⁶⁾の、引張シミュレーションでの検討時と同じく、 N^{posi} と N^{nega} の変化はほぼ同数生じているために、2つの変化曲線は重なった状態で示される。また、Fig. 4の初期に示されるように、アモルファス金属においては、無負荷平衡時においても $\det B_{ij}^\alpha$ の正值性変化は常に一定数生じており、これらは、正值性の変化を評価する Δt に依存しないことから、熱ゆらぎや原子摂動による確率的な変化であると結論付けている。⁶⁾ この確率的な正值性の変化を把握するために、圧子が接触する100psまでの N^{posi} と N^{nega} の平均値を一点鎖線にて示している。押し込みを開始して、Fig. 1

Fig. 2 Visualizations of local deviatoric strains, γ .

Fig. 3 Visualizations of local volume strains, ε_v .

でポテンシャルが上昇を開始したのと同様 150ps 付近から, N^{posi} と N^{nega} の増加が開始しており, 確率的な正值性の変化に加えて, 押し込みによって生じる原子構造の組み換えに起因した正值性の変化が生じ始めたものと考えられる. その後は, 押し込みが終了するまでいくつかのピークを示しながら推移する. 押し下げが終了すると N^{posi} と N^{nega} の数は急激に低下し, 一点鎖線の値まで低下する. これは, 圧子が停止したことで, 内部の構造緩和が収束して確率的な正值性変化のみに戻ったことを意味している. 圧子引き上げ時においてもわずかに N^{posi} と N^{nega} は増加するが, 950ps 以降は一点鎖線の値よりもわずかに低い値に収束した. Fig. 1 に示したポテンシャル変化においても述べたように, 圧子引き上げ後は初期構造とは異なる平衡状態に変化したと考えられ, 確率的に生じる正值性の変化についてもわずかに異なるものと理解できる. 以上より, 押し込み時における, 一点鎖線からの増分を把握することができれば, アモルファス金属内部において生じる構造変化を評価できると考えられる. しかしながら, 増加分に比べて, 確率的に生じている正值性変化 (一点鎖線の値) の方が多いのでその把握は容易ではない.

4.4 $\det B_{ij}^{\alpha}$ の正值性変化に伴うひずみ増分

$\det B_{ij}^{\alpha}$ の正值性の変化に伴うひずみの変化量を評価するために, Fig. 4 で用いた時間間隔 $\Delta t = 1\text{ps}$ 毎のひずみの変化量を正值性の変化した原子で平均して評価した. Fig. 5 (a) に局所偏差ひずみの変化量 $\Delta\gamma$, (b) に局所体積ひずみの変化量 $\Delta\epsilon_v$ を示し, 正值性の変化した原子のみで平均した変化量を Fig. 4 と同色で示し, 系全体の原子で平均した変化量を濃灰色で着色して示した. Fig. 5 (a) の押し込み前後の平衡状態においては, いずれの $\Delta\gamma$ の値も 0 近傍にて推移しており, 局所偏差ひずみ γ は平衡時においてはほとんど変化しないと言える. 押し込みが開始されると, Fig. 2 に示したようなせん断帯領域において γ の値を大きく変化させる原子が現れるために, いずれの $\Delta\gamma$ も上昇する. 特に, 300ps 以降では, 正值性の変化に伴う $\Delta\gamma$ が系全体での平均よりも大きく上回っており, ひずみ増加が顕著なせん断帯域にて正值性の変化が多く生じていることが示唆される. 押し込み終了後は, これらの値は系全体と大きな違いはなかった. また, 圧

Fig. 4 Changes in the number of positive and negative switching of $\det B_{ij}^{\alpha}$ for each time interval $\Delta t = 1\text{ps}$.

(a) Local deviatoric strain

(b) Local volume strain

Fig. 5 Difference in atomic strains for each time interval $\Delta t = 1\text{ps}$.

子引き上げ時には $\Delta\gamma$ がわずかに減少に転じているが, これは, 初期からのひずみ量の差分を取っているために, 圧子引き上げにより弾性変形が除荷されることで, ひずみが多少回復したことが原因として考えられる. 一方, Fig. 5 (b) に示した局所体積ひずみの変化量 $\Delta\epsilon_v$ では, 系全体の平均は常に 0 付近にて推移した. ϵ_v は膨張・収縮を表すスカラー量であるが, 今回の解析条件は横方向を自由境界としていることで, 押し込みに伴う体積変化量が小さいために, 系全体で $\Delta\epsilon_v$ を平均化するとほぼ 0 にて推移したものと理解できる. しかしながら, $\det B_{ij}^{\alpha}$ の正值性の変化した原子のみで $\Delta\epsilon_v$ を平均化すると, 0 で推移しておらず, 負値化した原子は正の $\Delta\epsilon_v$, 正值化した原子は負の $\Delta\epsilon_v$ で常に推移しており, 押し込み時にはさらにそれぞれの値が大きくなった. 平衡状態においても, 正值化と負値化とで違いが $\Delta\epsilon_v$ に明確に表れたことから, 平衡時における正值性の変化は, 原子摂動や熱ゆらぎによる局所構造のわずかな膨張・収縮が主たる原因であることが示唆される. ただし, この時の $\Delta\epsilon_v$ の標準偏差 s_{ev} はどちらもおよそ 0.0045 と幅広い分布を有しているために, 正值化している原子において必ず収縮の変化が生じているとは限らないことに注意が必要である.

$\det B_{ij}^{\alpha}$ の正值性の変化について, Fig. 4 で一点鎖線で示した原子摂動や熱ゆらぎによって常に生じている確率的变化を取り去るために, 局所体積ひずみを用いた場

合分けを行った。Fig. 4 と同様に $\Delta t = 1\text{ps}$ 間隔毎に評価した $\det B_{ij}^\alpha$ の正値性変化の数を Fig. 6 に示しており、Fig. 6 中の最も上側の変化が Fig. 4 と同じ値である。ただし、Fig. 4 に示したように $\det B_{ij}^\alpha$ が正値化した原子数と、負値化した原子数はほぼ同数にて推移するので、ここでは正値化した原子数 N^{posi} のみを示している。Fig. 5 (b) の平衡時における $\Delta\epsilon_v$ の標準偏差 s_{ev} を用いて、 $\Delta\epsilon_v < s_{ev}$ 、 $\Delta\epsilon_v < 2s_{ev}$ と局所体積ひずみの変化量 $\Delta\epsilon_v$ が小さかった原子を N^{posi} から除外した場合の数を、Fig. 6 の下側に示している。それぞれの变化曲線ごとに、平衡時における平均値を一点鎖線で示しているが、 $\Delta\epsilon_v < s_{ev}$ と $\Delta\epsilon_v < 2s_{ev}$ の制限によって除外される原子の割合はそれぞれ約 75 % と約 96.4 % であり、正規分布で考えた場合での標準偏差の範囲に存在する割合と近い値となった。一方で、押し込み変形時においては、平衡時と同様の割合分が除外されるのではなく、平衡時に取り除かれた数とほぼ同数の値が取り除かれている。すなわち、元々の N^{posi} の形状がある程度保たれたまま、下側にシフトしたような形状が得られており、 $\Delta\epsilon_v$ により、微小な変化によって生じる確率的な $\det B_{ij}^\alpha$ の正値性変化をある程度除外できたことが示唆される。

4・5 $\det B_{ij}^\alpha$ による変形挙動の評価

$\det B_{ij}^\alpha$ の正値性の変化により変形挙動を検討した例を Fig. 7 に示す。Fig. 7 (a) は、Fig. 2 と同様のカラースケールで示された 290ps における局所偏差ひずみの分布図である。圧子直下におけるひずみ領域の形成過程について検討するために、図中長方形で示した領域について検討した。この領域において、282ps ~ 288ps の間の各原子の変位を、変位量で着色したベクトルにて Fig. 7 (b) に示した。図は大きさが把握しやすいように、5nm 間隔にグリッド線を書き入れている。図中白矢印で示したブロックにおいて、変位量が大きな原子が斜めに位置していることが確認できる。Fig. 7 (c) は、282ps ~ 288ps までの各 1ps 間隔毎に局所体積ひずみの変化が $\Delta\epsilon_v > 2s_{ev}$ かつ $\det B_{ij}^\alpha$ の正値性が変化した原子のみを点で示しており、内部の変化も把握できるように、それ以外の原子は示さないことで透過図として示している。(i), (ii)の間では、Fig. 7 (b) で変位量が大きかった黒丸で示す領域におい

Fig. 6 Changes in the number of positive switching of $\det B_{ij}^\alpha$ for each time interval $\Delta t = 1\text{ps}$.

Fig. 7 Evaluation of deformation behavior during 282ps~288ps under the indentation simulation.

て、 $\det B_{ij}^\alpha$ の正値性が変化する原子が密に存在しており、この部分で原子構造の組み換えが生じていることが示唆される。そして、密な部分が(iii)と(iv)にかけて右下方方向に推移して、(v), (vi)では推移した黒丸の部分で $\det B_{ij}^\alpha$ の正値性が変化する原子の集中がみられた。ここで、Fig. 7 (a)の局所偏差ひずみの分布をみると、このブロックでひずみが大きな部分が出現し始めており、せん断帯の形成過程で(c)で示した変形が伝播するような変化が存在することを示唆している。また、(c)で示した $\det B_{ij}^\alpha$ の正値性が変化する原子の集中は、数 nm の範囲であり、実験等で見積もられる STZ の大きさなど¹¹⁾とおおよそ対応することは興味深い。なお、(c)の中で、ノイズのように孤立した点が存在するが、これは $\Delta\epsilon_v > 2s_{ev}$ の場合分けによって除外しきれなかった確率的な $\det B_{ij}^\alpha$ の正値性変化と考えられる。

続いて、Fig. 1 の白矢印にて示したポテンシャルの変化について検討するために、551ps ~ 557ps の間について、Fig. 7 と同様の方法で検討した。Fig. 8 (a) は 560ps における局所偏差ひずみであり、図中の長方形領域を取り出し、Fig. 8 (b) に 551ps ~ 557ps の間の変位量をベクトルで示し、Fig. 8 (c) に各 1ps 間での $\det B_{ij}^\alpha$ の変化を Fig. 7 (c) と同じ要領で示した。Fig. 8 (b) の変位量を見ると、せん断帯に沿うように書き入れた点線の曲線よ

Fig. 8 Evaluation of deformation behavior during 551ps-557ps under the indentation simulation.

りも右下側では変位量が0にほぼ近く、ほとんど原子が動いてないことがわかる。さらに点線の左上側で大きく変位した原子を多数確認できる。すなわち、点線に沿うような領域から左側が、全体的に左下にずれ込むように変形していることが理解できる。Fig. 8 (c)を見ると、点線の右側では、 $\det B_{ij}^{\alpha}$ の正值性を変化させる原子は非常に少ないのに対して、左側では、非常に広範囲で、さらに継続して $\det B_{ij}^{\alpha}$ の正值性の変化が生じていることがわかる。これは、せん断帯の領域のみでズレを生んでいるわけではなく、非常に広範囲で原子構造を変化させながらズレが生じることでせん断帯が形成されていることを示唆している。550ps付近では、Fig. 8に示したように、広範囲で原子構造が再構築されるために、Fig. 1の白矢印で示したようなポテンシャルエネルギーの階段状の変化が生じたものと考えられる。

5 結 言

分子動力学法を用いて、 $\text{Ni}_{50}\text{Al}_{50}$ アモルファス金属に対する押し込みシミュレーションを行い、それによって生じる塑性変形挙動について、原子ひずみと原子弾性剛性係数 B_{ij}^{α} を用いて評価した。押し込み圧子の直下において、原子ひずみの大きな領域が帯状に成長しており、せん断帯の形成が確認できた。せん断帯形成に伴い、 $\det$

B_{ij}^{α} の正值性が変化する原子の割合が無負荷時と比べて増加した。 $\det B_{ij}^{\alpha}$ の正值性が変化した原子では、無負荷時においても正值性変化に伴い局所体積ひずみも変化しており、アモルファス金属内で常に一定割合で生じている確率的な $\det B_{ij}^{\alpha}$ の正值性の変化は原子摂動や熱ゆらぎにより生じるわずかな局所体積ひずみの変化に起因していることが示唆された。 $\det B_{ij}^{\alpha}$ に加えて、局所体積ひずみの変化量も評価することで、この確率的な正值性変化を除外することができ、原子構造の組み換えを $\det B_{ij}^{\alpha}$ の正值性変化から明瞭に評価することができるようになり、せん断帯形成過程において変形が伝播するような変化が生じていること、せん断帯が成長する時にはせん断帯のみではなく、その周辺部も含めて原子構造の組み換えが生じていること、などが明らかになった。

参 考 文 献

- 1) A. Inoue, "Extremely low critical cooling rates of new Pd-Cu-P base amorphous alloys", Materials Science and Engineering A, Vol.226-228, pp.401-405 (1997).
- 2) A. S. Argon, "Plastic deformation in metallic glasses", Acta Metallurgica, Vol.27, pp.47-58 (1979).
- 3) F. Spaepen, "A microscopic mechanism for steady state inhomogeneous flow in metallic glasses", Acta Metallurgica, Vol.25, pp.407-415 (1977).
- 4) 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).
- 5) K. Yashiro, M. Nishimura and Y. Tomita, "Local lattice instability of amorphous metals under tension : a molecular dynamics study", Journal of The Society of Materials Science, Japan, Vol.54, pp.1053-1059 (2005).
- 6) M. Nishimura, K. Yashiro and M. Arai, "Local lattice instability analysis on stability switching in amorphous nickel", Journal of The Society of Materials Science, Japan, Vol.59, pp.631-636 (2010).
- 7) D. C. Wallace, "Thermodynamics of crystals" (1972) Wiley, New York.
- 8) S. Ozgen and O. Adiguzel, "Molecular dynamics simulation of diffusionless phase transformation in a quenched NiAl alloy model", Journal of Physics and Chemistry of Solids, Vol.64, pp.459-464 (2003).
- 9) C. L. Kelchner, S. J. Plimpton and J. C. Hamilton, "Dislocation nucleation and defect structure during surface indentation", Physical Review B, Vol.58, pp.11085-11088 (1998).
- 10) P. H. Mott, A. S. Argon and U. W. Suter, "The atomic strain tensor", Journal of Computational Physics, Vol.101, pp.140-150 (1992).
- 11) D. Pan, A. Inoue, T. Sakurai and M. W. Chen, "Experimental characterization of shear transformation zones for plastic flow of bulk metallic glasses", Proceedings of the National Academy of Sciences, Vol.105, pp.14769-14772 (2008).