

ナノ結晶分散アモルファス金属の力学特性* (分子動力学法による結晶体積分率と粒子径の影響の検討)

松本龍介*¹, 中垣通彦*¹

Mechanical Property of Amorphous Metal with Dispersed Nanocrystalline Particle (Molecular Dynamics Study on Crystal Volume Fraction and Size Effects)

Ryosuke MATSUMOTO*² and Michihiko NAKAGAKI

*² Department of Mechanical Information Science and Technology, Kyushu Institute of Technology,
680-4 Kawazu, Iizuka-shi, Fukuoka, 820-8502 Japan

In this paper, large scale molecular dynamics simulations of tensile deformation of amorphous metals with a nanocrystalline particle were performed in order to clarify the effect of particle size and crystal volume fraction on the deformation property and the strength. It became clear that the size effects of particle are very small, and the influence of the crystal volume fraction is large. The elastic modulus and the flow stress become large as the crystal volume fraction increases. After yielding of the amorphous phase, the stress of the crystal phase still increases. Thus, the flow stress of the composite increases after yielding. It prevents plastic localization and improves the ductility. When the crystal volume fraction is small, the stress distribution is homogeneous in the particle including near the amorphous-crystal interface. Therefore, chances of the originating deformation are small, the inside-particle plastic deformation hardly occurs. When the crystal volume fraction is high, the particles undergo plastic deformation even with small global deformations. After yielding of the crystal particle, the flow stress decreases, because defects are introduced into the crystal. It is expected that the ideal crystal volume fraction which improve the ductility may exist. Lennard-Jones potential which is modified to enforce the continuity at the cut off distance was used. The potential parameters were defined based on Inoue's three basic principles.

Key Words: Molecular Dynamics, Computational Mechanics, Material Design, Size Effect, Plasticity, Amorphous Metal, Deformation Mechanism, Nanocrystalline Metal, Material Modeling, Nano-Composite

1. はじめに

合金組成比の変更や熱処理を用いることで、アモルファス構造中にナノスケールの結晶粒子を分散させた材料が開発されている^{(1)~(4)}。そして、それらの材料が同組成のアモルファスに対して50%以上高い破断応力を持つこと⁽⁵⁾や、高い延性を持つこと⁽⁶⁾が示されている。さらに、力学特性の向上以外にも、優れた磁気特性や特殊な特性を有するものが多く報告されている⁽⁷⁾。

ナノ結晶分散アモルファス金属の力学特性に大きな影響を与える因子として、材料組成が同じ場合には、結晶粒子径、結晶体積分率、アモルファス-結晶界面の結合力が考えられる。これまでの研究で、アルミニ

ウム系の材料においては、結晶相の体積分率が0.05から0.25の間で破断応力、延性が最大になり、体積分率がそれ以上高いときには脆性的になることが示されている。また、結晶粒子径は5nm程度が最も良いとされている⁽⁶⁾。

しかしながら、多くの場合には、熱処理により結晶粒子径と体積分率の両方が増加し、結晶粒子の析出によって界面近傍でのアモルファスの組成が変化する。そのため、それぞれの因子がどのように力学特性に寄与しているのかを十分に切り離して議論できていない。最大強度を与える理想体積分率や理想粒径、ナノ結晶粒子の分散による強化や延性改善のメカニズムを解明することは、材料開発、応用の上で重要である。

本報では、分子動力学法⁽⁸⁾⁽⁹⁾を用いてナノ結晶分散アモルファス金属の引張りシミュレーションを実施し、力学特性に与える結晶粒子径と結晶体積分率の影響を

* 原稿受付 2004年12月20日。

*¹ 正員,九州工業大学情報工学部(☎820-8502 飯塚市川津680-4)。

E-mail: matsumoto@mse.kyutech.ac.jp

原子レベルから明らかにすることを目的とする。

2. 解析方法

2.1 分子動力学法 分子動力学法は材料内で生じる原子レベルの構造変化を考慮した力学特性評価が可能なシミュレーション手法の一つであり、その適応範囲は近年の計算機性能の向上により急速に広がりつつある。原子一個一個の位置を追跡することができるため、直視による原子構造の観察が難しいアモルファスに対しても有力な解析手段となり、様々な研究に適用されてきた^{(10)~(15)}。

本論文では応力一定下での計算を行なうために、Parrinello-Rahman の応力制御法⁽¹⁶⁾⁽¹⁷⁾を用いる。ただし、Parrinello-Rahman の方法を用いる場合には、加速度の計算式に速度項が現れるため、2次のシンプレクティック差分法の1つである速度 Verlet の方法は収束計算なしでは使えない。そこで、本論文では1次のシンプレクティック差分法を用いることとする⁽⁹⁾。温度制御には速度スケール法を用いる。また、高速化・大規模化のため、ブロック分割法、リンクセル法を用い、領域分割法による並列計算を行なう。なお、全ての計算において全方向に周期境界条件を適用する。

2.2 原子間ポテンシャル これまでに様々な高精度な原子間ポテンシャル⁽¹⁸⁾が提案されているものの、アモルファス状態や準安定構造、多元系材料に対する精度が保証されたものは未だ存在しない。本論文では構成元素を特定せず、一般的なナノ結晶分散アモルファス金属の変形・強化メカニズムを明らかにするために以下に示すように Lennard-Jones ポテンシャル ϕ_{LJ} を修正した ϕ_{MLJ} を用いる。

$$\begin{aligned}\phi_{MLJ}(r) &= \phi_{LJ}(r) - \phi_{LJ}(r_c) - \phi'_{LJ}(r_c)(r - r_c) \\ \phi_{LJ}(r) &= 4\epsilon \left\{ \left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right\} \\ \phi'_{LJ}(r) &= \frac{d\phi_{LJ}}{dr}\end{aligned}\quad (1)$$

修正項(第1式の右辺第2項と第3項)はポテンシャル、及び、その一階微分の値(2原子間の相互作用力)がカットオフ距離 r_c で連続的に0になるように付加されている。 r は原子間距離であり、 σ 、 ϵ はそれぞれ原子間距離、結合エネルギーを決定するポテンシャルパラメータである。2原子間のポテンシャルエネルギーが最小になる距離(原子半径の2倍)は、 $r_0 = 2^{1/6}\sigma$ によって与えられる。

2.3 ポテンシャルパラメータ 式(1)中のパラメータは以下に示すように決定した。バルク金属ガラ

スを得るための井上の三原則⁽¹⁹⁾

(i) 三成分以上の多元系合金であること
(ii) 主構成元素間に12%以上の原子寸法差があること
(iii) 主構成元素が互いに負の混合熱を有することを参考に、本研究では元素 a, b, c からなる3元素を対象とし、パラメータは表1に示す値に決定した。カットオフ距離は最も半径の大きい元素 c の原子半径の4倍 ($r_c \approx 0.786$ nm) に設定する。また、1原子あたりの質量 m は、元素 b の場合に 1×10^{-25} kg (原子量: 約 60.2) とし、原子体積に比例して変化させている。ここで、同種原子に対しては $\epsilon = 0.6 \times 10^{-19}$ J とし、異種原子に対しては $\epsilon = 0.65 \times 10^{-19}$ J とする。また、 σ には2原子の平均値を用いる。本ポテンシャルにおいて、構成元素が互いに負の混合熱を有することは、混合体を熔融させ十分に構造緩和させる分子動力学シミュレーションによって確認した⁽²⁰⁾。

Table 1 Potential parameters

Kind of atom	a	b	c
σ [nm]	0.25	0.3	0.35
ϵ [10^{-19} J]	0.6		
r_c [nm]	0.786		
m [10^{-25} kg]	0.5787	1.000	1.5880

2.4 アモルファスブロックの作成 アモルファス構造を持つブロック(アモルファスブロックと呼ぶことにする)は熔融凝固過程のシミュレーション⁽²¹⁾によって作成する。元素 a, b, c を同割合で含む結晶を、初期温度 300 K から 4,300 K まで加熱して熔融させ、その後、300 K までの急冷を行なう。加熱、冷却速度は、それぞれ 4×10^{14} K/s, -4×10^{14} K/s とした。また、初期状態で 4 ps、熔融状態で 1 ps、急冷後 10 ps の緩和計算を行なった。このようにして、1辺の平均寸法が約 19.4 nm, 29.1 nm, 36.4 nm, 43.7 nm の4種類のアモルファスブロックを作成した。なお、ここで作成したアモルファスのガラス遷移温度は約 1,400 K である。

2.5 ナノ結晶分散アモルファスモデルの作成 アモルファスブロックの中央に元素 b からなる一つの球状結晶粒子(fcc 構造)が含まれるモデルに対して、単軸引張シミュレーションを実施する。以下に計算モデルの作成・解析手順について説明する(図1, 表2を参照)。

1. 結晶粒子の挿入

これまでに行なったアモルファス金属の結晶化シミュレーションで、アモルファス金属中のナノ結晶粒はほとんど欠陥を含まないことが確認されている⁽¹²⁾。そこで、本研究では、前節で作成したア

モルファスブロックの中心部から半径 R の球状の領域をくりぬき、そこに元素 b からなる半径 R の完全結晶をはめ込むことで初期モデルを作成する。結晶粒子の組成として様々なものが考えられるが、本論文では、問題を単純化するために元素 b からなる結晶を用いている。結晶方位として、 $x=y$ 面に $\{1,1,1\}$ 面、 $x=y$ 方向に $\langle 1,1,0 \rangle$ 方向を取り、滑り変形を生じやすい方位を用いる (座標軸の定義は図 1 の左下参照)。

2. 近接原子の消去

人為的に結晶相を挿入したために、アモルファス-結晶界面には原子間距離が極めて近い原子の組合せが存在する。そこで、原子間距離が 2 原子間の平均半径の 0.73 倍以下の場合にはどちらか片方の原子をランダムに消去する作業を行なう。モデル作成時の界面部での不整合によって、アモルファス相と結晶相が個別に弾性的に振動するという問題を生じることがあるため注意を要する。計算セル全体の弾性振動はセルの伸縮運動に対して減衰をかけることで容易に取り除くことが可能であるが、内部での固有振動や初期応力分布を取り除くことは困難である。ここでの 0.73 という値は振動をあまり生じない値として、試行錯誤的に得たものである。

3. 緩和計算と引張シミュレーション

$T = 300$ K の一定温度下で 20 ps の緩和計算を行なった後、セルの x 方向応力 σ_{xx} と z 方向応力 σ_{zz} が -0.1 MPa になるように個別に応力制御を行ない、セル形状を直方体に保った状態で、ひずみ速度 $\dot{\epsilon}_{yy}$ で y 方向の計算セルの寸法を強制的に伸ばすことで引張シミュレーションを行なう。ここで、ひずみ速度として、その瞬間でのセル寸法 (L_y) を基準とした真ひずみ速度を用いる。なお、元素 b からなる結晶の融点は約 2,800 K である。また、時間ステップは $\Delta t = 2$ fs とし、応力制御に用いる仮想壁の質量は、 $M = 2 \times 10^{-24}$ kg とした。シミュレーション途中には、詳細なデータ解析のために、4 ps おきに 0.2 ps 間の時間平均をとった個々の原子の座標、応力、ポテンシャルエネルギーを出力しておく。

Table 2 Simulation condition

Temperature T [K]	300
Time step Δt [fs]	2
External stress σ_{xx}, σ_{zz} [MPa]	-0.1
Mass of virtual wall M [kg]	2×10^{-24}
Strain rate $\dot{\epsilon}_{yy}$ [1/s]	$2 \times 10^9, 2 \times 10^8$

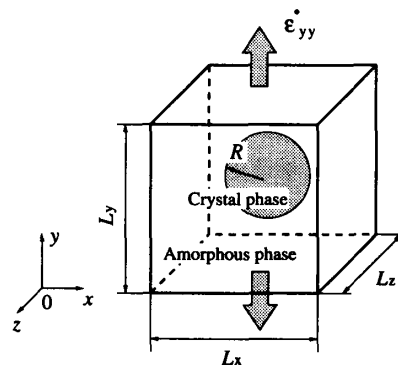


Fig. 1 Simulation model

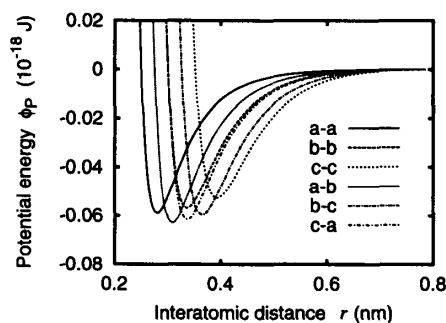


Fig. 2 Potential curve

2.6 解析条件 計算モデルの寸法を表 3 にまとめる。ここで、 N は系に含まれる全原子数であり、 N_{cry} 、 N_{amo} はそれぞれ初期状態において、結晶相、アモルファス相に含まれる原子の個数である。表 3 中に示した原子数の単位は 100 万個である。また、 L は初期状態での平均辺寸法である。結晶粒子寸法、体積分率の決定では、これまでに開発されている多くのナノ結晶分散アモルファス金属で、結晶粒子径が 3 nm から 50 nm、体積分率が 5% から 40% の範囲であることを考慮した。‘Model B’ と ‘Model C’、‘Model D’ と ‘Model E’ と ‘Model F’ は、それぞれ結晶粒子半径は同じであり、体積分率が異なるように設定してあり、‘Model A’ と ‘Model C’ と ‘Model F’、‘Model B’ と ‘Model D’ と ‘Model G’ は、それぞれ体積分率が同じで、結晶粒子半径が異なるように設定している。このように、本研究では、結晶粒子寸法と結晶体積分率の影響を個別に分離して議論できる問題設定にしている。また、‘Model H’ は結晶相を含まないアモルファス相のみのモデルである。なお、ここでは元素 b からなる結晶相を用いているため、結晶相の体積分率が高いほど系全体での元素 b の割合が増加している。同一組成の材料での比較を行なうためには、厳密には、結晶相の体積分率に応じてアモルファス相の元素 b の割合を変化させる必要がある。しかしながら、元素 b は元素 a と c の中間的

な性質を持っており、元素 a と c のみからなるアモルファスの応力-ひずみ曲線が、ここで用いているアモルファスのものとほぼ一致することを確認していることから、元素 b の割合の影響は小さいと考えられる。引張ひずみ速度は、原子数の少ない 'Model A' と 'Model B' に対しては、 $\dot{\epsilon}_{yy} = 2.0 \times 10^9$ 1/s と $\dot{\epsilon}_{yy} = 2.0 \times 10^8$ 1/s の二通りとし、比較的原子数の少ないモデルでひずみ速度の影響を検討する。それ以外のモデルに対しては、 $\dot{\epsilon}_{yy} = 2.0 \times 10^9$ 1/s とする。

なお、必要に応じてモデル名に初期状態での平均辺寸法 L 、結晶粒子半径 R 、結晶体積分率 f を簡略化して付加し、'A(L19R6f10)' などと表記することにする。この例では、'Model A' の辺寸法 $L \approx 19$ nm、結晶粒子半径 $R \approx 6$ nm、結晶体積分率 $f \approx 10$ % を意味する。

Table 3 Sizes of simulation models

Model	$N(N_{\text{cry}}/N_{\text{amo}})$ [mill.]	L [nm]	R [nm]	f [%]
A	0.258(0.029/0.230)	19.4	5.6	10
B	0.263(0.096/0.170)	19.4	8.4	34
C	0.871(0.096/0.778)	29.0	8.4	10
D	0.890(0.325/0.572)	29.0	12.6	34
E	1.714(0.325/1.396)	36.4	12.6	17
F	2.942(0.325/2.624)	43.7	12.6	10
G	3.013(1.097/1.932)	43.6	18.9	34
H	0.860(0/0.860)	29.1	0	0

3. 解析結果と考察

3.1 応力-ひずみ曲線の比較 図 3(i), (ii) は、それぞれ結晶の体積分率が 10 %、34 % の場合の応力-ひずみ曲線をまとめたものである。ここで、横軸のひずみは公称ひずみであり、縦軸の応力は真応力になっている。計算を行なった範囲では、体積分率が低い場合も高い場合も結晶粒子寸法の影響はほとんどないのわかる。体積分率が高いときには、ひずみ約 0.2 以上で応力の振動が表れるが、これは後に図 5 で示すように結晶相の変形によるものである。体積分率が低い場合 (図 3(i)) には、ひずみ約 0.05 において応力の僅かなオーバーシュートが表れ、0.1 以上ではほぼ一定になる。図 3(iii) は、結晶粒子径 $R \approx 12.6$ nm の場合の応力-ひずみ曲線をまとめたものである。

アモルファス相の縦弾性係数は $E \approx 64$ GPa、結晶相の弾性テンソルの方位平均から得られる実効縦弾性係数⁽²²⁾は $E_{\text{cry}} \approx 198$ GPa であるため、結晶の体積分率が高いほど弾性領域での傾きが大きくなる。降伏応力も顕著に上昇しており、ナノ結晶粒子を分散させることで大きな強化効果が得られることがわかる。なお、図 3(i), (ii) の結果から予想される通り、粒子径が異な

る場合の体積分率依存性も図 3(iii) と同様になる。

図 3(iv), (v) に 'F(L43R12f10)', 'G(L43R19f34)' の応力-ひずみ曲線をそれぞれ示す。図中では、全体の応力変化に加え、アモルファス相、結晶相の平均応力の変化も示している。なお、結晶粒子の成長はほとんど生じなかったため、アモルファス相、及び、結晶相の平均応力は、全ての原子に対して有限温度での原子応力⁽⁸⁾を評価し、初期状態においてそれぞれの相に含まれていた原子で平均することで求めている。図 3(iv) に示した体積分率が低い 'F(L43R12f10)' では、結晶相の応力-ひずみ曲線はアモルファス相の降伏によって鋭く折れ曲がり、その後は僅かではあるが徐々に上昇する (図中の実線矢印)。しかしながら、結晶体積分率が低いため、複合体の応力-ひずみ曲線はアモルファス相のものに非常に近くなる。一方、図 3(v) に示した結晶体積分率が高い 'G(L43R19f34)' では、アモルファス相は、ひずみ約 0.05 で降伏するが、その後も結晶相の応力はひずみ 0.2 にかけて体積分率が低い場合に比べより大きく増加する (実線矢印)。結晶粒子内の平均応力はアモルファス相の 2 倍以上に達する。図中では、結晶相の変形が始まる位置を点線で示している。結晶相の変形が始まると、結晶相の応力は振動しながら徐々に減少する (点線矢印)。

図 3(vi), (vii) に、'A(L19R6f10)', 'B(L19R6f34)' において、ひずみ速度が遅い場合 ($\dot{\epsilon}_{yy} = 2 \times 10^8$) の結果をそれぞれ示す。ここでは、公称ひずみが 0.3 までの結果を示している。ひずみ速度が一桁遅くなったことで、図 3(iv), (v) においてアモルファス相で降伏時に見られた応力のオーバーシュート (図 3(iv), (v) で円で囲んだ部分) がほぼなくなっているのがわかる。一方で、アモルファス相が降伏した後の結晶相の応力上昇が、ひずみ速度が遅い場合に比べてより顕著になっている (図 (vi), (vii) 中の実線矢印)。そのため、体積分率が高い 'B(L19R6f34)' では、材料の降伏後もひずみ 0.15 程度まで全体の平均応力が増加しているのが確認できる (図 3(vii) 中の太線矢印)。つまり、ナノ結晶粒を入れることで最大荷重点に達するまでの伸びが増加しており、マクロには変形の局所化が緩和されることが推測される。このように材料の降伏後に応力が上昇することは、アモルファス金属やナノ多結晶体等の引張伸びが著しく乏しい材料とは大きく異なる。また、体積分率が高いほど、結晶相での応力上昇が期待できるが、体積分率が高過ぎる場合には、少しの変形によって結晶粒子が塑性変形し応力上昇が期待できなくなる。換言すると図 3(v), (vii) 中で点線で示した結晶相が変形し始める位置が結晶体積分率が高いほど低

ひずみ側に移動すると言える。このことから、両者のトレードオフによって最も大きな引張伸びが得られる理想的な体積分率が存在すると考えられる。

図 3(viii) に縦弾性係数 E の体積分率依存性を示す。ここで、縦弾性係数は図 3(iii) のひずみ $0 \sim 0.001$ の範囲での曲線の傾きから計算している。縦弾性係数は、体積分率に比例して上昇するのではなく、体積分率が高くなるほどより大きく上昇する。増加の傾向は、介在相が等方性材料の場合に限られるが、等価介在物理論を用いて計算される粒子分散複合材料に対する結果と同様である^{(23)~(26)}。

図 3(ix) に流動応力の体積分率依存性を示す。ここで、流動応力はひずみ 0.1 以上での平均応力によって定義している。図中では、全体での流動応力に加え、アモルファス相、及び、結晶相のひずみ 0.1 以上での平均応力も示している。アモルファス相の流動応力は、結晶の体積分率に関わらずほぼ一定である。一方、結晶相の平均応力は体積分率が高いほど顕著に増加する。高体積分率化による流動応力の上昇は、主に結晶相での応力増加と、その体積分率の増加によって達成されていることがわかる。僅かに見られるアモルファス相の流動応力の増加は、高体積分率ではアモルファス相の平均ひずみ速度が大きくなることが原因であると考えられる。結晶体積分率が最も高い場合 ($f = 34\%$) の流動応力は、アモルファス単相の場合に比べ約 44% 高く、結晶粒子を分散させることで大きな強化効果が得られるのがわかる。なお、 $f = 34\%$ の場合には、すでに結晶相が降伏応力に達しており、より体積分率が高い場合には顕著な流動応力の増加は期待できないと思われる。

3.2 応力分布の時間変化 図 4 に断面 $z = L_z/2$ での相当応力の分布を示す。図中では、相当応力が 0 の領域を白色、 6.8 GPa 以上の領域を黒色で示している。図 4(i) には体積分率が低い場合を代表して 'F(L43R12f10)' の結果を、図 4(ii) には体積分率が高い場合を代表して 'G(L43R19f34)' の結果を示している。体積分率が低い場合には粒子内で応力がほぼ一定になる。さらに、アモルファス-結晶界面においては局所的な高応力を発生していない。これは、ナノ結晶粒子に比べて降伏応力の小さいアモルファス相において容易に変形を生じるためであると考えられる。このように、応力の分布は界面部も含めてほぼ均一であり、結晶粒子内での変形の起点は非常に生じにくいと言える。これは、結晶粒子間の拘束が強いために粒界三重点等に局所的に高い応力を発生し転位等の発生がおこるナノ多結晶とは大きく異なる。一方、図 4(ii) に示

している体積分率が高い場合には、弾性域 (図 4(ii)(a)) では粒子内に応力分布がほとんど見られないが、アモルファス相の変形が始まると、粒子内に応力が分布するようになる (図 4(ii)(b))。さらに変形が進むと、粒子内の応力分布がより顕著になり、粒子内変形が始まる (図 4(ii)(c))。これは、変形により結晶粒子の側面のアモルファス相が薄くなり隣接結晶粒子との距離が非常に近くなるために、粒子間の相互作用が強くなるためである。なお、大きな変形を受けた後もアモルファス-結晶界面での剥離は全く生じていないことがわかる。

3.3 結晶内部での構造変化 図 5 に Common Neighbor Analysis(CNA)⁽²⁸⁾を用いて結晶相に対して原子構造解析を行なった結果を示す。図中では、hcp 構造を有する原子を灰色、hcp 及び fcc 構造以外の原子を黒色とし、結晶相の $z < L_z/2$ の領域のみを示している。図 5(i) は体積分率が低い場合 'F(L43R12f10)'、図 5(ii) は高い場合 'D(L29R12f34)' であり、両者の結晶粒子径は同じである。本研究では、変形しやすい結晶方位を選んでいるにも関わらず、結晶体積分率が低い場合 (図 5(i)) には粒子内での構造変化は全く生じない。体積分率が高い場合 (図 5(ii)) には、前節で示した応力集中が原因となって、結晶粒子の側面から変形が始まる。結晶粒子径が小さいために部分転位による変形が支配的であり、粒子内に多くの積層欠陥が導入され、それらが交差する (図 5(ii)(c))。hcp 構造と fcc 構造のエネルギー差が大きい材料を用いた場合には、より顕著な流動応力の低下が見られると思われる。また、部分転位は粒子内に蓄積することなく、容易に界面に抜けることがわかる。

4. おわりに

本論文では、分子動力学法を用いてナノ結晶分散アモルファス金属の単軸引張シミュレーションを行ない以下の知見を得た。

1. 結晶粒子径依存性について

粒子半径が 5.6 nm 以上 18.9 nm 以下の場合には、体積分率 34% 以下、ひずみ 0.5 以下の範囲において流動応力の結晶粒子径依存性は見られない。つまり、解析を行なった粒子径の範囲では、ナノ結晶分散アモルファス金属の開発において結晶粒子径そのものを最適化する必要はなく、界面部の材料組成や結晶体積分率を制御するための二次的なものであると考えて良いと思われる。ただし、結晶粒が大きくなるほど粒子内に欠陥が安定して存在する可能性が高くなるため、結晶相の変形が容

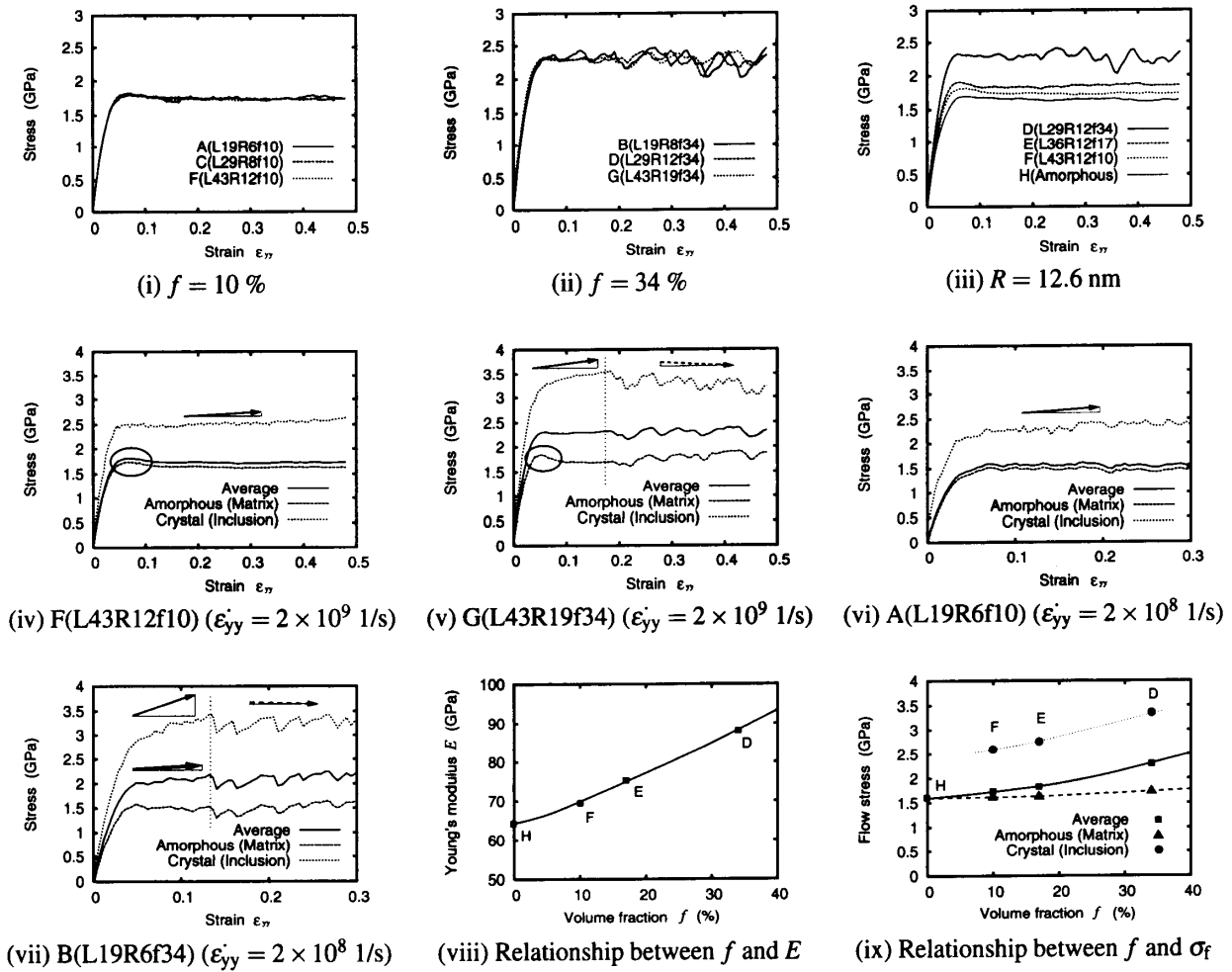


Fig. 3 (i) and (ii) the stress-strain relations of the composite with the same volume fraction and different particle radius; (iii) comparison of the influence of the crystal volume fraction while the size of the crystal particle is the same; (iv) and (v) the stress-strain relation of amorphous phase, crystal phase and averaged body of 'Model F' and 'Model G', respectively, for faster strain rate $\dot{\epsilon}_{yy} = 2 \times 10^9\text{ 1/s}$; (vi) and (vii) the stress-strain relation of 'Model A' and 'Model B', respectively, for slower strain rate $\dot{\epsilon}_{yy} = 2 \times 10^8\text{ 1/s}$; (viii) the relationship between the volume fraction f and the tensile elastic constant E ; and (ix) the relationship between f and the flow stress σ_f

易になることは考えられる。

2. 結晶体積分率依存性について

解析を行なった体積分率 $f \approx 34\%$ までの範囲では、体積分率が高いほどアモルファス単相の場合よりも流動応力と縦弾性係数が大きくなる。体積分率が低い場合や変形量が少なく粒子間の相互作用が弱い場合には、界面近傍も含め粒子内の応力分布はほぼ均一になるため、粒子内変形の起点を非常に生じにくい。一方、体積分率が高い場合には、材料の降伏後も流動応力の上昇が期待できるが、体積分率が高過ぎる場合には少しの全体変形

によって結晶粒子の塑性変形が始まり変形抵抗が低下する。これは、アモルファス相の変形によって粒子間距離が近くなり粒子間相互作用が強くなること、粒子変形によって欠陥が導入されることが原因である。このことから、引張伸びが最も大きくなる理想的な結晶体積分率が存在すると考えられる。

文 献

- (1) Kim, Y.H., Inoue, A. and Masumoto, T., *Mater. Trans. JIM*, 32-4, (1991), pp. 331-338.

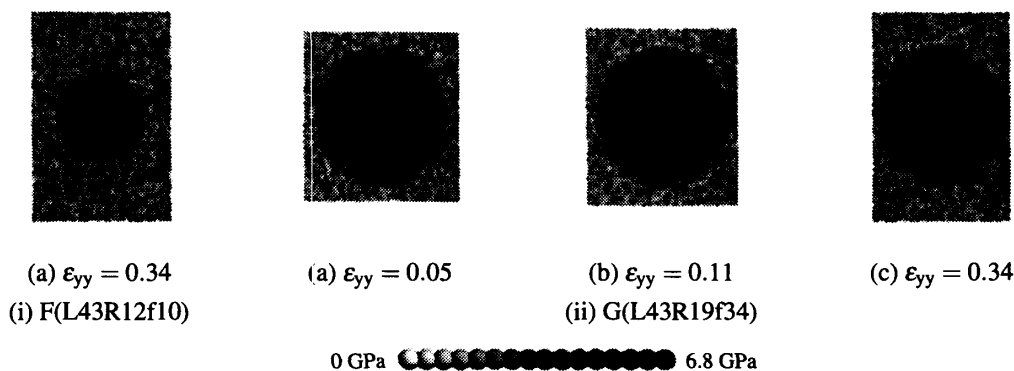


Fig. 4 Equivalent stress distribution in the cross-section $z = L_z/2$: The stress was evaluated by the use of the weighted function scheme⁽²⁷⁾.

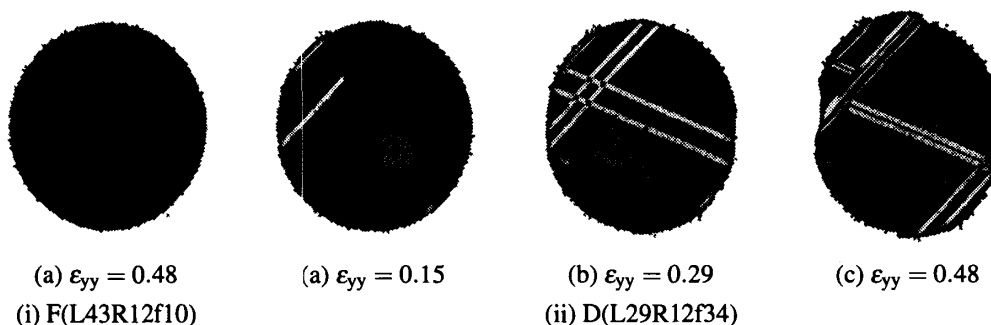


Fig. 5 Defects distribution in the crystal particle: The local structures were analyzed by common neighbor analysis(CNA). The gray atoms have the hcp structure, and the dark atoms have another structure than hcp and fcc structure.

- (2) Latuch, J., Kokoszkiwicz, A. and Matyja, H., *Mater. Sci. Eng., A*, **226-228**, (1997), pp. 809-812.
- (3) Jiang, X. Y., Zhong, Z. C. and Greer, A. L., *Mater. Sci. Eng., A*, **226-228**, (1997), pp. 789-793.
- (4) Kim, T.S., Hong, S.J. and Lee, B.T., *Mater. Sci. Eng., A*, **363**, (2003), pp. 81-85.
- (5) Kim, Y.H., Inoue, A. and Masumoto, T., *Mater. Trans. JIM*, **31-8**, (1990), pp. 747-749.
- (6) Kim, Y.H., Inoue, A. and Masumoto, T., *Mater. Trans. JIM*, **32-7**, (1991), pp. 599-608.
- (7) 例えば, Yoshizawa, Y., Oguma, S. and Yamauchi, K., *J. Appl. Phys.*, **64**, (1988), pp. 6044-6046.
- (8) 北川 浩・北村隆行・滋谷陽二・中谷彰宏, 初心者のための分子動力学法, 養賢堂, (1997).
- (9) 上田 顯, 分子シミュレーション, 裳華房, (2003).
- (10) Yamamoto, R., Matsuoka, H. and Doyama, M., *Phys. Status Solidi, A*, **51**, (1979), pp. 163-172.
- (11) Maeda, K. and Takeuchi, S., *Philos. Mag., A*, **44-3**, (1981), pp. 643-656.
- (12) 松本龍介・北川 浩・中谷彰宏, 材料, **52-3**, (2003), pp. 235-240.
- (13) Nakatani, A., Shimokawa, T., Matsumoto, R. and Kitagawa, H., *IUTAM Symposium on Mesoscopic Dynamics of Fracture Process and Materials Strength*, Edited by Kitagawa, H. and Shibutani, Y., KLUWER ACADEMIC PUBLISHERS, (2003), pp. 365-380.
- (14) 屋代如月・伊藤智啓・富田佳宏, 材料, **53-1**, (2004), pp. 114-119.
- (15) Izumi, S., Hara, S., Kumagai, T. and Sakai, S., *Thin Solid Films*, **1-2**, (2004), pp.253-260.
- (16) Parrinello, M. and Rahman, A., *Phys. Rev. Lett.*, **45-14**, (1980), pp. 1196-1199.
- (17) Parrinello, M. and Rahman, A., *J. Appl. Phys.*, **52-12**, (1981), pp. 7812-7190.
- (18) 例えば, Lee, B. J., Baskes, M. I., Kim, H. and Cho, Y. K., *Phys. Rev. B*, **64-18**, (2001), pp. 184102.
- (19) Inoue, A., *Acta Mater.*, **48**, (2000), pp. 279-306.
- (20) 松本龍介・中垣通彦, 機講論, **04-40** (2004 年度年次大会 Vol.6), (2004-9), pp. 231-232.
- (21) 中谷敬子・北川 浩・中谷彰宏, 機論 A, **62-595**, (1996), pp. 847-852.
- (22) 大南正瑛, マイクロメカニクス入門, オーム社, (1980), p.107.
- (23) Mura, T., *Micromechanics of Defects in Solids*, Kluwer Academic Publishers, (1982).
- (24) 吳亜東・中垣通彦, 機論 A, **64-622**, (1998), pp. 1646-1653.
- (25) 吳亜東・中垣通彦, 機論 A, **64-620**, (1998), pp. 1035-1042.
- (26) 吳亜東・中垣通彦, 機論 A, **65-633**, (1999), pp. 1003-1009.
- (27) 松本龍介・北川 浩・中谷敬子・中谷彰宏, 機論 A, **67-1**, (2001), pp. 23-29.
- (28) Honeycutt, J. D. and Andersen, H. C., *J. Phys. Chem.*, **91**, (1988), pp. 4950-4963.