



Title	分子動力学法を用いた単元系アモルファス金属の変形機構と強度評価
Author(s)	中谷, 敬子
Citation	大阪大学, 1997, 博士論文
Version Type	VoR
URL	https://doi.org/10.11501/3128995
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

氏名	中谷敬子
博士の専攻分野の名称	博士(工学)
学位記番号	第13095号
学位授与年月日	平成9年3月25日
学位授与の要件	学位規則第4条第1項該当 工学研究科機械工学専攻
学位論文名	分子動力学法を用いた単元系アモルファス金属の変形機構と強度評価
論文審査委員	(主査) 教授 北川 浩 教授 城野 政弘 教授 三宅 裕 教授 稲葉 武彦 教授 香月 正司 教授 世古口言彦 教授 花崎 伸作 教授 久保 司郎 教授 馬越 佑吉

論文内容の要旨

本論文は、アモルファス金属の特性の原子レベルの発現機構に検討を加える目的で行なった、分子動力学法を用いた研究の成果をまとめたもので、 α -鉄結晶体の加熱・急冷過程シミュレーションによるアモルファス構造の生成機構、得られたモデルを用いたアモルファス金属の機械特性の評価、さらにモードI型き裂の進展特性について述べた、以下の6章から構成されている。

第1章では、アモルファス金属の材料特性、特に、結晶体とは異なる特異な構造とそれが原因となって発現する機械特性、および、その実用上の意味などについて、これまでの研究成果をまとめ、本研究の目的と意義について述べている。

第2章では、分子動力学法について、原子構造の動的変化を追求するためのシミュレーションとしての位置づけ、具体的な解析手法を示し、あわせて、解析結果より力学特性を評価するための方法について述べている。

第3章では、結晶構造からアモルファス構造を作成するための、加熱・急冷過程のシミュレーション結果について述べている。 α -鉄結晶を加熱、融解した状態から急冷し、過冷却状態を経て得られた構造に対して、構造解析とVoronoi多面体解析を行ない、アモルファス構造が得られていることを確認するとともに、微視的内部応力の分布とVoronoi多面体の体積の関連について検討を加えている。

第4章では、第3章のシミュレーションにより得られたアモルファス金属モデルに対し、単軸および二軸の引張りおよび圧縮変形を加えた下で生じる構造変化の特徴について検討した結果について述べ、原子クラスタとして集団的に生じる構造変化による変形メカニズム、非弾性変形開始点(降伏点)の応力の多軸性の影響と履歴依存性、予負荷を受けたことによる剛性の低下を明らかにしている。さらに、自由表面を持つモデルに対して単軸引張変形解析を行なって、せん断すべり形の局所変形が発生することを示し、そのメカニズムについてを考察している。

第5章では、アモルファス金属中にき裂を導入し、モードI型の荷重条件下での原子の運動、き裂先端近傍の応力、および、ひずみ分布を詳細にしらべることにより、き裂の鈍化、進展が、結晶体とは異なったメカニズムで生じることを明らかにしている。さらに、Gursonモデルを用いて行なわれた損傷力学理論に基づく解析結果と比較し、き裂先端の変形特性が定性的に一致することを示している。

第6章では、本研究で得られた主要な結果を総括し、今後の展望を述べている。

論文審査の結果の要旨

アモルファス金属が、結晶金属と異なる特有の力学特性を発現する機構については未だ不明な点が多く、材料設計上、幾多の問題が残されている。本論文は、加熱・急冷過程の分子動力学シミュレーションにより生成したアモルファス構造に対して、外荷重を荷した下での原子配置の変化を詳細に追跡することにより、材料中に出現・消滅する秩序・無秩序構造の変化と種々の力学量との関連を明らかにし、アモルファス金属に特有の力学特性と変形・破壊のメカニズムに検討を加えたもので、得られた主な成果を要約すると次の通りである。

- (1) α 鉄結晶の加熱・急冷過程における原子構造に対して、動径分布関数の検討および Voronoi 多面体解析を行い、アモルファス構造を生成する過程の詳細を明らかにしている。
- (2) 静水圧応力と Voronoi 多面体の体積との間には強い相関があり、特に、アモルファス中に多数含まれる13原子20面体構造に対する $(0, 0, 12, 0)$ Voronoi 多面体の体積が、他の種類の多面体に比べて小さく、かつ、そこでは大きな圧縮の静水圧応力を生じていることを見出している。
- (3) 単軸および二軸の、引張りおよび圧縮変形下でのアモルファスの構造変化の特徴について検討した結果より、変形の進行によってもアモルファスの基本構造は保持されるが、13原子20面体構造の崩壊と新しい5角形ピラミッドクラスタが生成することを見出し、非晶質性を保持する変形メカニズムは、このような5回対称構造の崩壊と生成によることを示している。
- (4) 種々の予荷を加えた後の弾性係数および非弾性変形開始点（降伏点）の変化と原子構造変化を調べ、アモルファス金属の力学的特性は13原子20面体構造と密接に関係しており、その構造の崩壊に伴って、系の剛性および降伏点が低下することを明らかにしている。
- (5) アモルファス金属中のモード I 型の荷重条件下でのき裂先端近傍の原子の運動、応力および、ひずみ分布の変化を詳細に調べることにより、アモルファスにおいては結晶体と比較して、異なったメカニズムでき裂の進展・鈍化を生じることを確認している。

以上のように、本論文は、アモルファス構造の生成と外荷重を荷した下での原子構造の動的変化を詳細に解析し、微視的構造変化と巨視的力学特性の関連を明らかにしており、得られている成果は材料工学ならびに計算物理学に貢献するところが大きい。よって、本論文は、博士論文として価値あるものと認める。