

機関番号：54401

研究種目：基盤研究 (C)

研究期間：2008～2010

課題番号：20560095

研究課題名 (和文)

金属ガラスとアモルファス合金の熱・力学特性の差異発現機構に関する原子構造論的研究  
研究課題名 (英文)Atomistic study on the difference in thermo-mechanical properties of metal glass  
and amorphous alloy

研究代表者

中谷 敬子 (NAKATANI KEIKO)

大阪府立大学工業高等専門学校・総合工学システム学科・准教授 )

研究者番号：60295714

研究成果の概要 (和文)：

コンピューターシミュレーションによる仮想材料試験を行ない、応力ひずみ曲線のひずみ速度依存性・温度依存性について調べ実験結果と比較し、変形メカニズムを調べることや、荷重の負荷/除荷を繰り返すによる、アモルファス合金の損傷の蓄積から破壊にいたる過程における内部構造変化のメカニズムを解明から、Cu-Zr 系と Ni-Zr 系の本質的な違いが何であるのかを明らかにする。

研究成果の概要 (英文)：

To examine the fundamental characteristics of the geometric and mechanical structure of amorphous material on an atomic scale, molecular dynamics simulations for deformation process of a single-component atomic system are carried out under the constant-pressure condition. Voronoi polyhedron analysis and calculation of the radial distribution function and the mean square displacement are performed to study the transition of characteristic features of the atomic structure in the process. It is proven that the obtained quasi-stable atomic structures have a radial distribution with the second peak separated into two apexes and are almost the Voronoi polyhedron which contains more than 5 pentagonal planes. Strong correlation between the volume of the polyhedron and the first invariant of the stress is recognized and the atom which has the (0 0 12 0)-type polyhedron.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
平成 20 年度	1,300,000	390,000	1,690,000
平成 21 年度	1,100,000	330,000	1,430,000
平成 22 年度	1,100,000	330,000	1,430,000
年度			
年度			
総計	3,500,000	1,050,000	4,550,000

研究分野：工学

科研費の分科・細目：機械工学・機械材料・材料力学

キーワード：

①計算科学 ②アモルファス ③ガラス ④分子動力学法 ⑤力学特性

1. 研究開始当初の背景

ガラス転移現象の有無で、金属ガラスと

アモルファスが区別される。加熱・超急冷プロセスを経てしか作成することができない、熱的に不安定なアモルファスの場合、室温のアモルファス状態を加熱していくと、ある温度で結晶化を開始する。一方、金属ガラスは室温から加熱しても、すぐには結晶化せず、結晶化前に、固体のアモルファス状態から過冷却液体状態に転移する。この現象をガラス転移現象と呼ぶ。金属ガラスは、このガラス転移を示した後、結晶化する。すなわち、熱分析などの通常の観測で、明瞭なガラス転移を示すアモルファス金属は、金属ガラスと呼ばれている。

## 2. 研究の目的

金属ガラスの場合、基本的には、周期表の金属元素が主成分であり、金属結合を主要な結合形態としている。金属結合を主要な結合形態としながら、なぜ、共有結合のみで構成される酸化ガラスのような高い構造安定性が実現できているのかが、金属ガラスにおいて解明しなければならない大きな問題のひとつである。本研究では、従来型アモルファスである Ni-Zr 合金と、金属ガラスである Cu-Zr 合金の特性の違いを、独自に提案した構成元素に相関のある相互作用の異方性を考慮したポテンシャルを使った原子レベルシミュレーションを行ない、その局所構造、特に、クラスタ構造の挙動に着目して、金属ガラスの高安定性の発現の解明をめざした。

## 3. 研究の方法

まず、応募者らが既に提案している Cu-Zr 合金系の結晶相を表現する原子間ポテンシャルを用いて、Cu-Zr 系アモルファス合金の生成過程の分子動力学法シミュレーションを行なった。既に非晶質的なランダム構造が得られているが、こうして生成されたアモルファス構造の微視的構造について CNA 解析およびボロノイ多面体解析を実施して、その幾何学的な微視的原子構造のパターンを系統的に抽出しデータベース化を目指した。さらに、無負荷の平衡状態における材料物性、自己拡散係数の評価、および、原子レベルの固有残留応力と原子レベルの局所弾性定数評価を試みた。

## 4. 研究成果

金属ガラスと従来型アモルファスの安定性、構造特性の差異発現のメカニズムの解明を目指す研究により得られる成果は、非晶質合金の特性発現のメカニズムを踏まえた材料の健全性の定量的評価を可能とし、材料設計による高性能の材料開発、および、構造健全性評価において、工学的に大きな寄与をもたらすことが期待できる。

## 5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 0 件)

[学会発表] (計 4 件)

- ・大原和斗、中谷敬子他、”アモルファス金属の材料特性の分子動力学シミュレーション”、日本高専学会第 15 回年会・講演会(2009)。
- ・中谷敬子、野村栞里、”非晶質金属の力学特性発現メカニズムの解明”、日本機械学会関西支部強度と形態懇話会、第 6 回 NCP フォーラム講演概要集(2010)。
- ・野村栞里、中谷敬子、”非晶質金属のき裂先端場近傍の変形メカニズムの解明”、地域交流メッセ(2011)。
- ・大原和斗、中谷敬子、”アモルファス材料のボロノイ多面体解析による構造評価”、地域交流メッセ(2011)。

[図書] (計 0 件)

[産業財産権]

○出願状況 (計 0 件)

名称：  
発明者：  
権利者：  
種類：  
番号：  
出願年月日：  
国内外の別：

○取得状況 (計 0 件)

名称：  
発明者：  
権利者：  
種類：  
番号：  
取得年月日：  
国内外の別：

[その他]  
ホームページ等

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

中谷 敬子 (NAKATANI KEIKO)  
大阪府立大学工業高等専門学校・  
総合工学システム学科・准教授  
研究者番号：60295714

(2) 研究分担者 なし

(3) 連携研究者 なし