

# アモルファス金属の分子動力学法による疲労試験シミュレーション

## 提案書

Advanced Algorithm & Systems

### 【背景】

アモルファス金属（大きなバルク状の試料としては低冷却速度の金属ガラス）は、その優れた性質のひとつとして機械的特性が注目されているが、原子レベルでのメカニズム解明のため分子動力学計算による研究が報告されている。鉄アモルファスの亀裂進展シミュレーションの例では、亀裂前縁面に沿う原子の流動によって亀裂が開口進展する様子が観測され（J. Soc. Mat. Sci., Japan, Vol. 54, No. 10, pp. 1053-1059）、Cu-Zr アモルファス金属モデルではせん断のメカニズムが検討された（Journal of the Society of Materials Science, Japan, Vol. 57, No. 2, pp. 119-125, 2008）。

最近の実験結果から、塑性変形によってアモルファス金属中にナノサイズの結晶粒が析出することがわかってきており（M. C. Gao, R. E. Hackenberg and G. J. Shiflet, Mater. Trans., 42, 1741 (2001) など）、鉄アモルファスをモデルとした分子動力学法（MD）による引張試験シミュレーションではbcc 結晶の増加がボロノイ多面体解析より確認されているが（J. Soc. Mat. Sci., Japan, Vol. 52, No. 3, pp. 235-240, Mar. 2003）、Ni-Al の2 元合金アモルファス金属をモデルとした引張試験シミュレーションではボロノイ多面体の構成比に変化は認められない（J. Soc. Mat. Sci., Japan, Vol. 54, No. 10, pp. 1053-1059）など、同じ引張試験でも結晶析出の有無はモデルに依存すると考えられる。

アモルファス金属の疲労強度は、銅基、チタン基で500~750MPa であり、クロムモリブデン鋼や工具鋼と同じかそれを上回り（社団法人日本機械工業連合会 新素材の現状とその工業化に関する調査研究[http://www.jmf.or.jp/japanese/houkokusho/kensaku/pdf/2007/18jigyo\\_11.pdf](http://www.jmf.or.jp/japanese/houkokusho/kensaku/pdf/2007/18jigyo_11.pdf)）、またZr<sub>50</sub>Cu<sub>40</sub>Al<sub>10</sub> 金属ガラスのようにPb 添加により疲労限が1GPa を超えるものも見出されている（東北大学 金属材料研究所 金属ガラス総合研究センター 横山嘉彦教授 <http://www.arcmg.imr.tohoku.ac.jp/topics/yokoyama.html>）。

アモルファス金属の疲労破壊のメカニズムは結晶金属と同様に、クラックの発生と伝播で説明されているが（T. Ogura, T. Masumoto and K. Fukushima; Script. Met. 9 (1975) 109, 979.）、上述のPb が添加されたZr<sub>50</sub>Cu<sub>40</sub>Al<sub>10</sub> 金属ガラスの疲労試験後の電子顕微鏡写真では、ナノ結晶化組織の生成が亀裂伝播を停留させることが示唆される（NEDO 平成18 年度産業技術研究助成事業成果報告書<http://www.tech.nedo.go.jp/PDF/100010502.pdf>）など、アモルファス金属の塑性変形における結晶析出の影響について興味を持たれる。疲労試験のシミュレーションを試みる場合、疲労限界を10<sup>6</sup>サイクルとしても例えば島津製作所高サイクル疲労試験機300Hzでは3333sec、短期間が見込める超音波試験の20kHz でも5sec の試験時間が必要とされ、可能なシミュレーション時間を大きく越えてしまうが、超音波試験が単に繰り返しの1 回あたりの速度を上げることで短期化を図っているとすれば、MD 計算においては急な温度上昇を回避しながら、実際の疲労

試験機を再現できるように、正弦波形の応力と速度スケーリングにより、速い応力速度をあたえることで可能かもしれない。

本提案書では、アモルファスに関する分子動力学法による疲労試験シミュレーションについて、金属あるいは金属ガラスを例としてご提案致します。

## 【シミュレーション方法】

### 1. 計算モデルと条件検討

#### ① ポテンシャル関数とパラメータ

報告されているアモルファスの MD では FS ポテンシャル、LJ ポテンシャルなどが使用されておりますが、アモルファス構成原子または原子間のポテンシャルパラメータが未知の場合は MOPAC 等による量子化学計算が必要となります。

#### ② 系のモデル

周期境界条件の場合、あらわに取り扱う粒子数を制限できますが、一様な引張り応力の再現が難しくなります。基本セルを立体に組み合わせた板状モデルの場合、疲労試験をより忠実に再現しますが、扱う粒子数は数万以上となります。ご参考までに、Pentium4 3.0GHz、RAM 1.0GB の PC で確認したところ、Fe 原子数 250 (LJ ポテンシャル、周期境界条件、カットオフ 26Å、温度制御は速度スケーリング法)、10000 ステップ (20ps) の計算時間は約 20 分となります。

#### ③ アモルファス状態の作製

4000~5000K まで温度上昇後、 $-10^{14}$ K/s 程度の速度で急冷します。報告されているシミュレーションと同様に、ボロノイ多面体の構成比と動径分布関数の第 2 ピーク分裂でアモルファス状態を確認します。

### 2. MD 計算

MD 計算プログラムにつきましては、弊社プログラムのコード改良・追加の時間が必要となります。また、既知の引張り試験シミュレーション試行など、再現性の確認が必要と思われます。結晶状態とアモルファス状態の両方を MD 計算し比較することでより信頼性が得られると考えられます。はじめに降伏応力以上・数サイクル程度で破断させ、ボロノイ多面体構成比変化のトラジェクトリを確認し、その後順次低い応力・高サイクル数でシミュレーションした結果を元に、S-N 曲線をプロットします。

ご参考までに、下の表は上述の PC で計算し、シミュレーション時間 10ps を 1 サイクルとした場合の繰返し応力のサイクル数とおおよその必要計算時間になります。

サイクル数	$10^1$	$10^2$	$10^3$	$10^4$	$10^5$	$10^6$	$10^7$
計算時間(h)	1.4	14	139	1389	13889	138889	1388889

シミュレーション時間の例としては、板状 Fe アモルファスの引張り試験では、公称ひずみ速度を考慮した強制変位速度 50 m/s で約 500ps となります。疲労限界を求める場合、 $10^6$ ~ $10^7$  サイクルの計算が必要と思われ、別途大型計算機システムなどが必要となります。ご参考として、学

術研究目的では京都大学大型計算機システムが利用可能であり、例えば並列数 32、メモリ 64GB（共有バッチ）の料金は 100,000 円/年とされています（利用負担金表：<http://www.kudpc.kyoto-u.ac.jp/hpc/futankin>）。

### 3. 結晶構造形成の確認

ボロノイ多面体は2つの原子座標点の垂直 2 等分線で作られる面、3~6 角形の個数で表示（例えば bcc では (0.6.0.8) のように表示する）されるアルゴリズムで確認します（*Journal of Computational Physics* "A Procedure for the Construction of Voronoi Polyhedra" 32, 137-143 (1979)）。