

1501 応力下における NiAl 合金のマルテンサイト変態の分子動力学シミュレーション

Molecular Dynamics Simulation of Martensitic Transformation in NiAl Alloy under Stress

○ 学 平川 香林 (岩大院) 正 西村 文仁 (岩大工)

Karin HIRAKAWA, Graduate School, Iwate University, 4-3-5 Ueda, Morioka, Iwate
Fumihito NISHIMURA, Iwate University

1. 緒言

固体-固体間の相変態現象の一つであるマルテンサイト変態は、原子の3次元的な協調性のある動きによって発生する。様々な合金で観察される形状記憶効果もマルテンサイト変態に起因しており、そのメカニズムを解明するために変態による原子配置の変化を調査しなければならない。

このような目的に対して分子動力学シミュレーションは有効な手段と考えられるが、形状記憶効果に主眼を置いたものは少ないように思われる。その中でも、NiAl 合金における変態挙動を取り扱った研究は多く、単純なポテンシャル関数を用いても、マルテンサイト変態挙動をシミュレートすることができ、温度誘起変態の圧力依存性などを再現できることが報告されている^{1,2)}。

形状記憶効果にはマルテンサイト変態そのものだけでなく、変態によって生じたマルテンサイトバリエントの再配列も重要な影響を及ぼしているため、本研究では、応力下でのマルテンサイト変態挙動を解明するために原子個々の運動に注目したバリエントの生成、成長過程を観察することを目的として、NiAl 合金に生じたマルテンサイトバリエントの応力下での再配列挙動に関するシミュレーションを行い、原子配置と巨視的挙動の関係を調査する。

2. シミュレーションモデルと計算条件

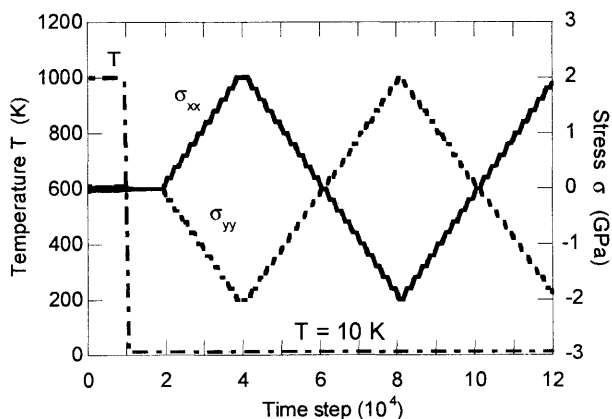


Fig. 1. Controlled temperature and stress.

本研究では、形状記憶効果を示すことが知られている Ni 62.5-Al 37.5 を考察対象とする。Ni 50-Al 50 bcc 構造において過剰な Ni 原子を Al 格子点上にランダムに配置した 1024 原子(640 Ni - 384 Al) の立方体モデルを用いる。この立方体の3方向の面に周期境界条件を適用する。原子間ポテンシャルは Lennard-Jones ポテンシャルを使用し、ポテンシャルパラメータは、S.Ozgen, O.Adiguzel らの研究^{1,2)}で用いられた値を使用する。系の温度と応力を同時に制御するために能勢法と Parrinello-Rahman 法を組み合わせた運動方程式³⁾を用いる。時間刻み $t = 1.0 \text{ fs}$ とし、運動方程式を4次の Runge-Kutta 法を用いて積分する。

まず初めに、このモデルに対し、無応力状態で 1000 K から 10 K までの焼入れを行う。その後、2 軸応力の繰り返し負荷を与える。応力振幅は $\pm 2 \text{ GPa}$ とし、x 方向と y 方向に同じ大きさで符号の異なる応力を負荷する。この応力負荷を 5 回繰り返しシミュレーションを行った。図 1 は制御された温度、応力を示す。

3. 結果と考察

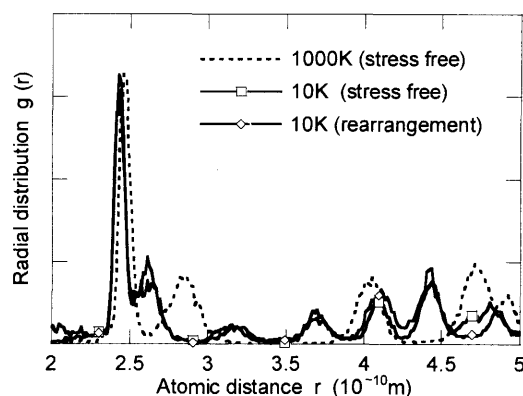


Fig. 2. Radial distribution.

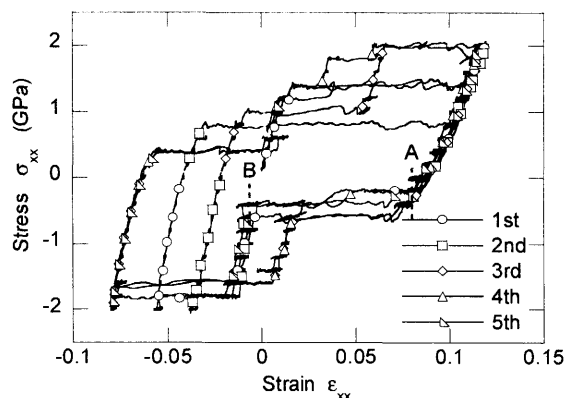


Fig. 3. Stress-strain curve.

図 2 は、焼入れ前後の動径分布を示す。1000K と 10K で最隣接原子間距離を示すピークの位置が異なることから、オーステナイト相からマルテンサイト相への結晶構造変化が確認できる。

図 3 に繰り返し応力負荷によって得られた x 方向の応力ひずみ曲線を示す。焼入れ直後の無応力、無ひずみ状態から応力の増加とともに弾性変形が生じるが、ある応力に達すると、一定応力でひずみが増加する。図 2 には、このときの動径分布も示してあるが、焼入れ直後とほぼ同じピーク位置を示していることから、この変形は相変態ではなく焼入れで生じたマルテンサイトの再配列によって生じていることがわかる。

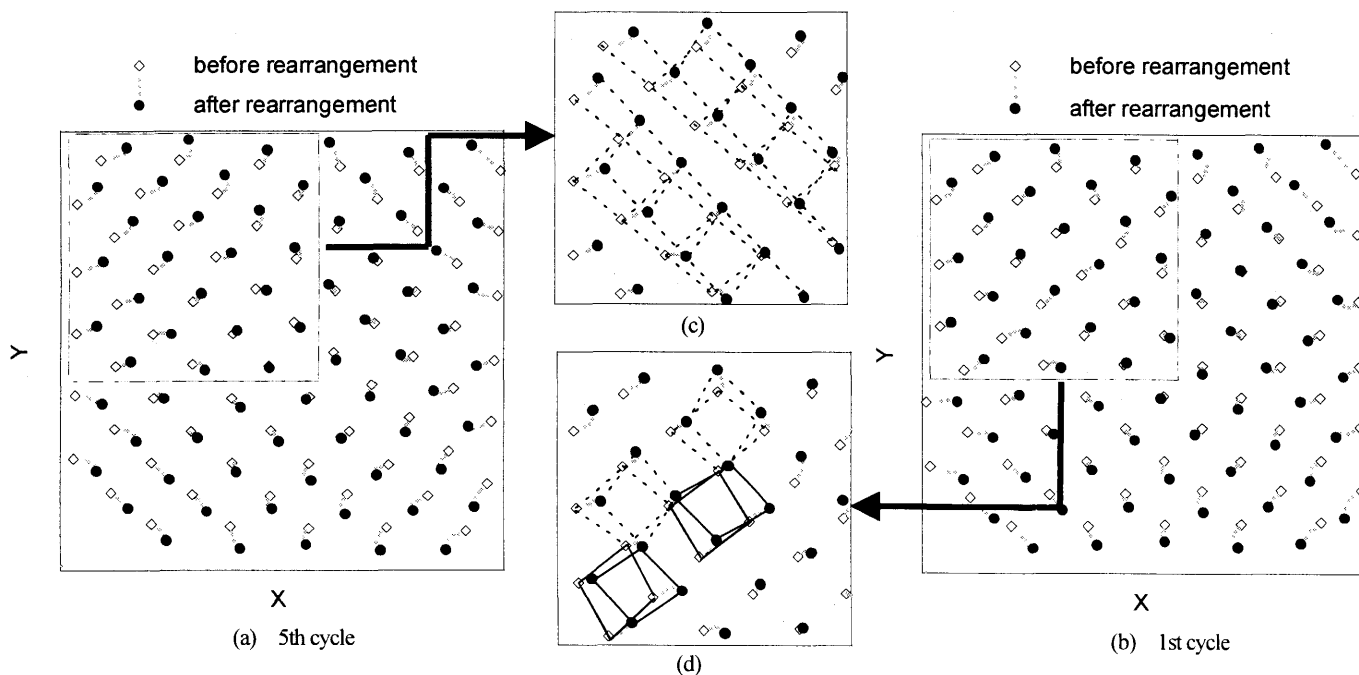


Fig.4. Motion of atomic position during rearrangement of martensite variant.

また、この応力負荷過程中のひずみ量に注目すると、引張応力負荷の場合は、最大ひずみの値が常に一定であるのに対し、圧縮応力負荷の場合は、最大ひずみの値が一定に安定するのは3サイクル目以降からとなっている。

再配列開始応力については、再配列開始時のひずみが最大ひずみに近いほど再配列開始応力は大きくなる。これは再配列開始時のひずみが最大ひずみに近いほど再配列が可能な領域が少ないため大きい応力が必要となり、逆に最大ひずみから離れているほど再配列可能な領域が多く残っていることで小さい応力で開始すると考えられる。

これまで示したように、同じ応力負荷を行ってもマルテンサイトバリエーションの再配列開始応力や、ひずみの変化量が異なっている。このことから、マルテンサイトバリエーションの再配列は、結晶構造の影響を受けていると考えられる。

次に、再配列時における原子配置を観察し、双晶境界に注目して結晶構造の変化を調査した。図4は図3のAからBにおける再配列途中の原子配置を示している。Aでは引張りによる最大ひずみを生じているので、結晶構造は、大部分がx方向に伸びたバリエーションで構成されているが、一部y方向に伸びたものも現れており、その部分で双晶境界が生じる。この状態から圧縮による再配列が生じ、Bに到達する過程においてx方向に伸びたバリエーションの方向が変化し、y方向に伸びたものに変化する。しかしB点においても、2種のバリエーションが混在するため、双晶が存在する。このとき再配列前後で双晶境界の方向が変化しないものと変化するものが現れた。図4(a)は5サイクル目の負荷過程のものであり、双晶境界の方向は変化しない、このときの原子配置の変化を観察するために図4(a)を拡大して(c)に示す。点線で示すように再配列中、双晶境界に沿った原子面が相対的にスライドすることにより、x方向に伸びたバリエーションがy方向に伸びたものに変化している。これに対して図4(b)に示すように、1サイクル目では双晶境界の方向が変化している。図4(b)を拡大した(d)に示される再配列途中の原子配置の変化は、図中に実線で示すように、バリエーションが応力負荷方向と反対に方向転

換している部分が観察された。このような再配列時の双晶境界の変化は、繰り返し応力負荷過程の初期段階である1サイクル目と2サイクル目における再配列でのみ観察されており、その後の再配列では観察されていない。このことから、セル内部の結晶構造が応力負荷の繰り返しによる影響を受けていると考えられる。

4. 結言

本研究では、NiAl合金モデルを用いて繰り返し応力負荷によるマルテンサイトバリエーションの再配列についてシミュレーションを行った。得られた応力ひずみ曲線と内部の結晶構造を調査した結果、結晶構造に関して、マルテンサイトバリエーションの状態が一定ではないことが観察され、同じ応力負荷においても再配列の開始応力やひずみの変化量が異なっていた。また、再配列による双晶境界の変化に注目すると、繰り返し応力負荷中の再配列のほとんどでは、双晶境界は同じ方向に現れているのに対し、繰り返し応力負荷の初期段階である1サイクル目と2サイクル目において双晶境界が異なる方向に現れた。しかし、今扱っているモデルでは双晶が現れた場合、周期境界部分で双晶境界が途切れてしまう。よって不自然な拘束力が発生していると考えられるため、この影響を調査する必要がある。

参考文献

- 1) S.Ozgen, O.Adiguzel, Molecular dynamics simulation of diffusionless phase transformation in a quenched NiAl alloy model, *Journal of Physics and Chemistry of Solids* **64** (2003) 459-464.
- 2) S.Kazanc, S.Ozgen, O.Adiguzel, Pressure effects on martensitic transformation under quenching process in a molecular dynamics model of NiAl alloy, *Physica B* **344** (2003) 375-381.
- 3) 北川浩, 北村隆行, 澁谷陽二, 中谷彰宏, 初心者のための分子動力学法, 養賢堂, (1997)