

## 907 形状記憶合金の変形・変態挙動に関する分子動力学シミュレーション

## Molecular Dynamics Simulation on the Deformation and Transformation Behavior of Shape Memory Alloy

○ 正 平川香林 (岩大院) 正 西村文仁 (岩大工)

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

## 1. 緒言

形状記憶合金の持つ形状記憶効果、超弾性などの性質はマルテンサイト変態に起因する。このマルテンサイト変態は、高温、低応力で安定な母相と、低温、高応力で安定なマルテンサイト相の間の相変態現象の一つであり、原子の三次元的な協調性のある動きによって発生する。したがって、温度と応力による結晶構造変化が可逆的に生じ、形状記憶効果が現れる。母相とマルテンサイト相の結晶学的関係から、生成するマルテンサイト相は複数のバリエントから構成され、バリエントは局所的な応力に依存して選択される。近年、形状記憶合金の温度と6つの応力成分の7つの制御パラメータにより複雑な挙動を示すナノデバイスとしての利用が期待されており、それに伴い熱・力学的負荷のもとでの形状記憶合金の変形挙動を支配するバリエントの生成メカニズム解明が求められている。このような原子レベルでの微視的挙動を解析する方法として分子動力学法が挙げられる。

本研究では、NiAl 形状記憶合金に熱・力学的負荷を与えた際に生じるマルテンサイト変態挙動を分子動力学法を用いてシミュレートし、バリエントの生成、成長過程と双晶の生成、消滅機構を調査し、微視領域で生じる変態挙動と巨視的応力ひずみ挙動の関連について考察する。また、周期境界条件の有無やモデルサイズが変態・変形挙動に及ぼす影響を調査し、適切なシミュレーション条件を明らかにする。

## 2. シミュレーションモデルと計算条件

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立方体モデルを用いる。このとき bcc 単位格子 [100], [010], [001] 方向がシミュレーションセルの x, y, z 軸と一致するように立方体モデルを構築する。このとき、変態・変形挙動に及ぼすモデルサイズの影響を調査するため、1024 原子 (640 Ni - 384 Al) と 8192 原子 (5120 Ni - 3072 Al) の立方体を用いる。さらに周期境界条件の影響を調査するため、それぞれのモデルに対し、周期境界条件を立方体の3方向の面に適用した場合と、図1に示すように応力負荷方向 [100] のみに周期境界条件を適用した場合を考える。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、文献から引用する<sup>1)</sup>。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を用いる。時間刻み  $t=1.0fs$  とし、運動方程式を4次の Runge-Kutta 法を用いて積分する。

各モデルに対し、無応力状態で 10000 ステップの緩和計算後、100 K から 700 K まで温度制御を行う。このとき、温度増分を 100 K とし、温度を変化させたあと 4000 ステップの緩和を行う。周期境界条件を適用した 1024 原子モデルにおいて、オーステナイト相が安定であることが確認された 700K に制御した状態で、引張応力の負荷、除荷による、応力誘起マルテンサイト変態、逆変態シミュレーションを行う。応力増分は 0.1 GPa とし、応力を変化させた後 4000 ステップの緩和を行う。

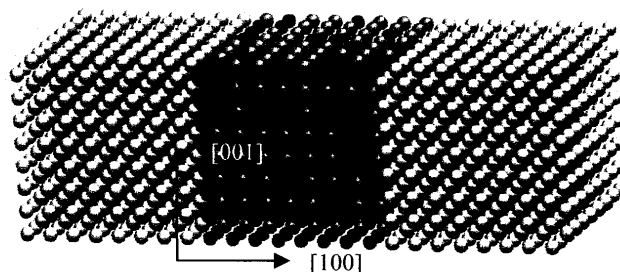


Fig. 1 Simulation model (1024 atoms).

## 3. 結果と考察

各モデルに対し、700 K において [100] 方向に引張応力を負荷、除荷したときの応力ひずみ曲線を図2に示す。周期境界条件を適用した場合、モデルサイズに関係なく応力ひずみ挙動がほぼ一致している。また、応力除荷過程において、応力負荷時の応力ひずみ曲線とほぼ同じ曲線をたどりヒステリシスが生じない。これに対し、周期境界条件を適用しない場合は、変態応力と逆変態応力が異なりヒステリシスループが描かれている。また、変態開始終了応力と逆変態開始終了応力が共に周期境界条件を適用した場合と比べて大きく、変態後の弾性挙動におけるヤング率が小さい。周期境界条件を適用しない場合、1024 原子モデルと比べて 8192 原子モデルは、変態開始終了応力、逆変態開始終了応力が小さく、ヒステリシスループの幅が狭い、さらに変態後の弾性挙動におけるヤング率が大きいことから、モデルサイズが大きくなるにつれて、周期境界条件を適用した場合の結果に近づくと考えられる。

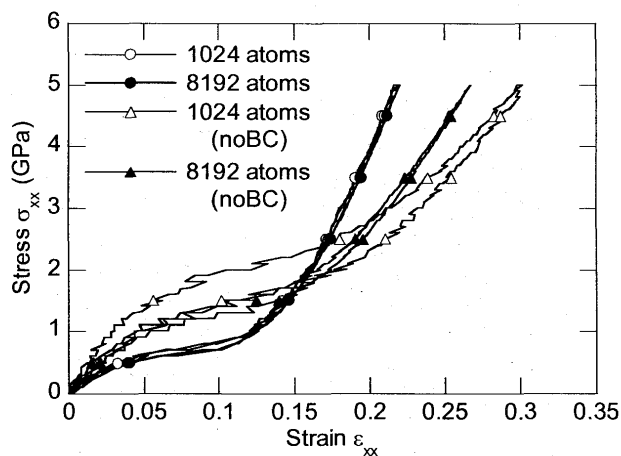


Fig. 2 Stress-strain curve at 700K.

各モデルについてマルテンサイト変態、逆変態過程の結晶構造の変化をbcc単位格子の変形に注目して調査する。一般的にNiAl合金では、変態によってB2型規則格子から長周期積層構造(3R)

を持つマルテンサイト相へ構造変化し、その積層面が変態シア平面  $(110)_{bcc}$  となる。また、 $(110)_{bcc}$  に対しシア方向は  $\pm[\bar{1}10]$  の2方向であり、そのシア方向によって双晶の有無が決まる。変態シア平面は bcc 単位格子において  $(110)_{bcc}$  と等価な6つの面の中から1つ決定される<sup>2)</sup>。図3に示すように、bcc 単位格子を基本格子として、 $(110)_{bcc}$  と等価なすべての原子面の  $\theta_1, \theta_2$  を調査し、変態シア平面を特定する。さらに、変態シア平面と直交する原子面に含まれる3つの原子からなる2平面 OAC, OBD の法線  $n_1, n_2$  の成す角  $\phi$  に注目することで、双晶を形成する場合の変態シア平面を特定することができる。そこで、マルテンサイトを変態シア平面の方向からそれぞれ  $m(110), m(\bar{1}\bar{1}0), m(011), m(0\bar{1}\bar{1}), m(101), m(\bar{1}01)$  と表記する。しかし、双晶を形成しないマルテンサイト相は、bcc 単位格子の2辺が縮み、1辺が伸びた直方体となり、変態シア平面と同じ形状を示す等価な面が複数存在するため、その方向を1つに特定することができない。このようなマルテンサイトは直方体の長軸の方向で分類し、 $m[100], m[010], m[001]$  と表示する。

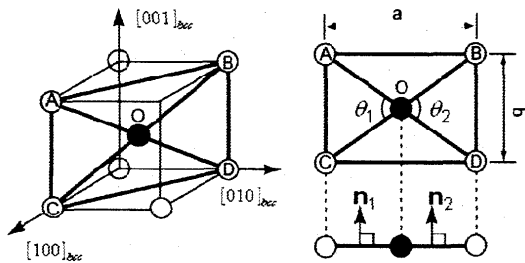


Fig.3 Transformation shear plane of B2-type ordered lattice.

図4に  $[100]$  方向に 5 GPa の引張応力が負荷された状態における各モデルの原子配置を示す。ただし、周期境界条件を適用していない面に関しては、変態シア平面の特定が出来ない、表面から2個分の原子を排除している。ここで、 $[100]$  引張応力負荷に対し負荷方向への変形が大きく、応力緩和に最も有効なバリエントであると考えられる  $m[100]$  を白色、その他のバリエントを灰色、オーステナイトを黒色で示す。周期境界条件を適用しているモデル ((a), (c)) と比べて、適用していないモデル ((b), (d)) は、応力緩和に有効な  $m[100]$  の割合が少なく、代わりにその他のバリエントとオーステナ

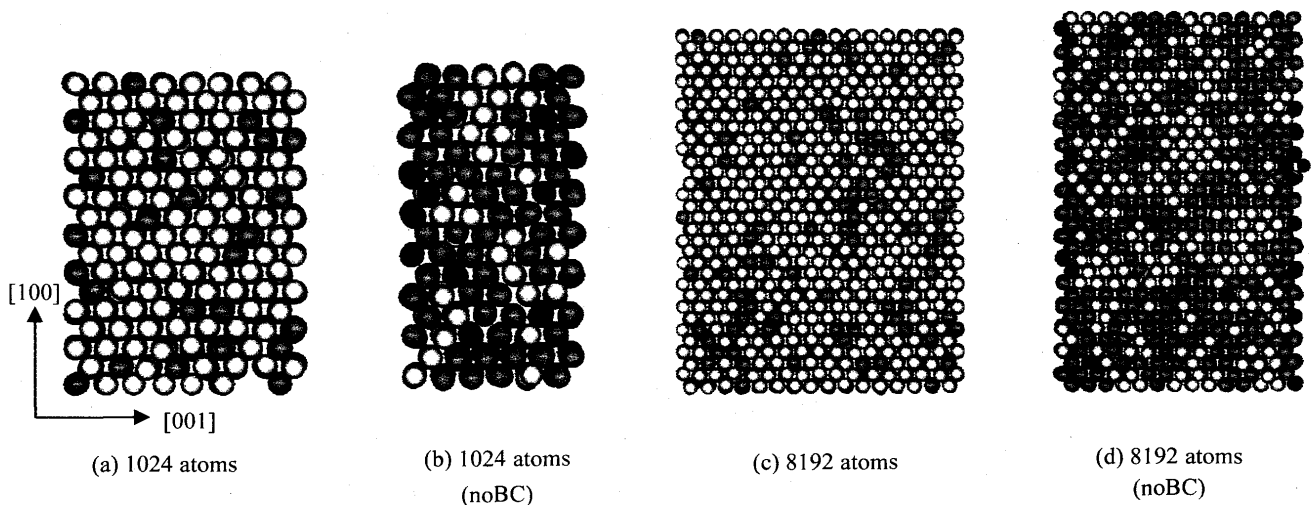


Fig.4 Atomic configuration and distribution of martensite at  $\sigma_{xx}=5\text{GPa}$ .

イトが現れている。このように、周期境界条件の有無によるモデル内の結晶構造の違いが、図2の応力ひずみ曲線の変態後の弾性挙動において、ヤング率が異なる原因であると考えられる。

図5は、周期境界条件を適用した 1024 原子モデルにおいて、応力負荷、除荷によって生じたマルテンサイトバリエントの生成消滅過程である。応力負荷に伴い  $m(101), m(\bar{1}01)$  の増加が見られるが、0.9 GPa 程度から新たに  $m[100]$  が現れ、 $m[100]$  の増加に伴い  $m(101), m(\bar{1}01)$  が減少している。これは、負荷応力の影響を受け変態シア平面がずれることで双晶がなくなり均一なマルテンサイト相へ変化したことを示す。逆変態については、2 GPa 程度から  $m[100]$  の減少に伴い  $m(101), m(\bar{1}01)$  が増加している。その後、0.7 GPa 程度から応力の減少と共に  $m(101), m(\bar{1}01)$  は減少し、オーステナイトに逆変態している。

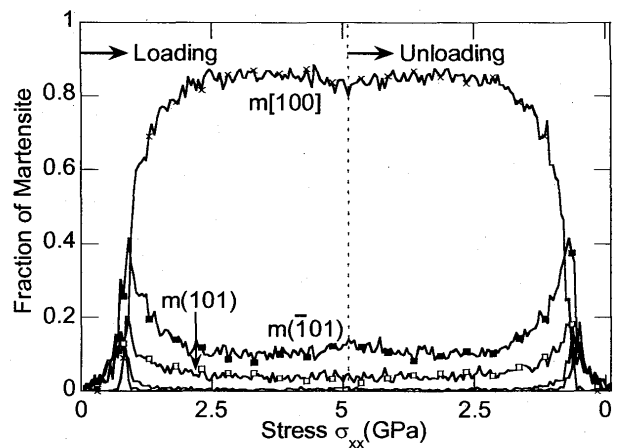


Fig. 5 Evolution of martensite fraction during loading / unloading.

参考文献

- 1) S.Ozgen, O.Adiguzel, *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, **64** (2003), 459-464.
- 2) 田中喜久昭, 戸伏壽昭, 宮崎修一, "形状記憶合金の機械的性質", 養賢堂, (1997)