

修正原子挿入法を用いた合金系におけるマルテンサイト変態の分子動力学シミュレーション

| | |
|------|---|
| 著者 | 石田 博明 |
| 著者別名 | Ishida, Hiroaki |
| 雑誌名 | 博士学位論文要旨 論文内容の要旨および論文審査結果の要旨 / 金沢大学大学院自然科学研究科 |
| 巻 | 平成16年12月 |
| ページ | 27-29 |
| 発行年 | 2004-12-01 |
| URL | http://hdl.handle.net/2297/16597 |

| | |
|------------|--|
| 氏名 | 石田博明 |
| 生年月日 | |
| 本籍 | 富山県 |
| 学位の種類 | 博士(理学) |
| 学位記番号 | 博甲第588号 |
| 学位授与の日付 | 平成15年3月31日 |
| 学位授与の要件 | 課程博士(学位規則第4条第1項) |
| 学位授与の題目 | 修正原子挿入法を用いた合金系におけるマルテンサイト変態の分子動力学シミュレーション |
| 論文審査委員(主査) | 樋渡 保秋(自然科学研究科・教授) |
| 論文審査委員(副査) | 田子 精男(理学部・教授) 西川 清(理学部・教授) 高須 昌子(理学部・助教授) 小田 竜樹(理学部・講師) |

学位論文要旨

Abstract

The martensitic transformations in alloy systems were studied using molecular dynamics simulations. The modified embedded atom method was used with the pseudo monoatomic potentials which included angular dependence of each atoms. The thermally induced B2 to 3R martensitic and 3R to B2 reverse martensitic transformations have been obtained in the present molecular dynamics simulations of NiAl alloy for the first time with the bulk computational model. The transformation is accompanied by a twin in 3R phase which lead to a lattice-invariant deformation and minimize the transformation strain energy.

近年、材料科学分野において、コンピュータの発展に伴い、シミュレーションによる機能性材料などの研究開発が盛んになってきている。特に、これらの機能性材料として形状記憶材料が注目され、金属・高分子・強誘電体・セラミック等が挙げられるが、その中でも変位量が大きく実用材料としての応用されている形状記憶合金に大きな関心が寄せられている。一方、分子動力学においては従来、二体ポテンシャルが合金系などに応用されてきたが、対称性の高い面心立方については、かなりの成功が収められているが、多体効果を考慮していないための、困難が起こる。それに対して、多体項を埋め込み関数として取り込んだ原子挿入法によるポテンシャルが開発されてきている。さらに、各原子間の角度依存性を考慮した、修正原子挿入法が提唱され、従来の面心立方以外にも、体心立方、六方稠密構造などに応用が可能となって来ている。

本研究では、この修正原子挿入法によるポテンシャルを用い合金系におけるマルテンサイト変態のシミュレーションを行なった。従来、分子動力学シミュレーションでは、特殊

な表面を有する場合又は、切り欠が表面に在るといった特殊な境界条件の下でしか、マルテンサイト変態が観測されていない。

本研究の修正原子挿入法によるポテンシャルを用いた結果、Fe系金属材料について、温度誘起によるシミュレーションにおいて、

(1) 原子の飛躍や拡散を伴わない原子無拡散で、特定の温度で格子の協同的で一様なせん断変形が主役となって fcc 構造から bct 構造に変態する。

(2) 変態相は、母相に対してある特定の境界面（晶壁面）を持って成長し、両相の間に格子対応および特定の方位関係が存在する。

(3) 母相からの格子変形があつて、しかも両相が接続しているために緩和機構として必ず格子欠陥（双晶）が変態に付随して出現し、マクロな形状を保つ格子不変変形が発生する。

という材料実験の結果と定性的に一致するマルテンサイト変態が観測された。

NiAl 系合金系材料においても周期境界条件の下（バルク状態）において、変態温度の上下間の連続温度範囲でのシミュレーションにおいて、初めて変態および逆変態が観測された。この場合も、Fe系金属材料と同様に、

(1) 原子の飛躍や拡散を伴わない原子無拡散で、特定の温度で格子の協同的で一様なせん断変形が主役となって B2 構造から 3R 構造に変態する。

(2) 変態相は、母相に対してある特定の境界面（晶壁面）を持って成長し、両相の間に格子対応および特定の方位関係が存在する。

(3) 母相からの格子変形があつて、しかも両相が接続しているために緩和機構として必ず格子欠陥（双晶）が変態に付随して出現し、マクロな形状を保つ格子不変変形が発生する。

という材料実験の結果と定性的に一致する。しかし、変態温度が、高めに出る、変態温度のヒステリシス幅が広いなど、材料実験の結果と定量的に一致しない部分も認められた。

本研究に用いた、修正原子挿入法によるポテンシャルは、汎密度関数法を基礎とする多体ポテンシャルで、電子密度の局所的な変化を含むにもかかわらず、第一原理法などと異なり、波動関数の解法が不要なため、大規模系にも適用が容易で、合金系材料等、機能性材料への応用として非常に有効であると言える。

学位論文審査結果の要旨

平成 15 年 1 月 24 日に口答発表会を開催し、その後に論文審査会を行い以下の判定を行った。

本論文では、この修正原子挿入法 (MEAM) によるポテンシャルを用い合金系におけるマルテンサイト変態の分子動力学 (MD) シミュレーションを行った。得られた結果を要約すると

- (1) Ni の外部応力誘起による相転移についてのシミュレーションを行い、理論値と非常に良い一致を得た。この計算ではこれまで古典系 MD では計算不可能であった範囲まで、精度の高いシミュレーションが可能になっている。
- (2) Fe 系金属材料の MD シミュレーションにより、温度誘起によるマルテンサイト相変態が観測された。
- (3) NiAl 系合金材料の温度誘起によるマルテンサイト相変態及びその逆変態が、周期境界条件の下 (バルク状態) で初めて観測された。

汎密度関数法を基礎とする多体力ポテンシャルである修正原子挿入法は電子密度等の局所的な変化を含み、大規模 MD 計算を可能にする方法の一つとして非常に有効である。本研究で用いた方法は今後機能性金属材料の応用として、形状記憶合金など熱弾性型マルテンサイト相変態等のシミュレーションの一手法と大きな力を発揮すると思われる。

本論文は博士学位論文としての基準に達するものと認め、合格と判定する。