傾斜構造を持つ Ni/Ni₃Al 界面の弾性挙動の 分子動力学シミュレーション

相原 智康 正 朋祥[†] 川添 良幸

東北大学金属材料研究所

J. Japan Inst. Metals, Vol. 62, No. 11 (1998), pp. 978-985
Special Issue on Recent Advances in Functionally Graded Materials

Molecular Dynamics Simulation on Elastic Behavior of Ni/Ni₃Al Interface with Graded Structure

Tomoyasu Aihara, Jr., Tomoyoshi Sho[†] and Yoshiyuki Kawazoe

Institute for Materials Research, Tohoku University, Sendai 980-8577

The basic concept of the functionally graded material (FGM) is an active control of the structure of materials to be suitable for the object properties. This concept should be expanded to the atomistic level. In the present report, this idea is applied to the Ni(γ)/Ni₃Al(γ') (100) interface. Molecular dynamics simulation is performed to clarify the correlation between the atomistic structure of the interface and the microscopic elastic properties. The Ni-Al binary 64000 atom systems with the FGM and NFGM type interface structures are simulated at 298 K with Finnis-Sinclair potential. The spatial local distribution of the lattice constant, the site potential energies and the atomistic stress energies are analyzed under the strain free condition. The global and local changes of these properties are calculated for various elastic tensile conditions. The lattice constant misfit and the stress concentration at the interface is weakened by the application of the graded structure to the γ/γ' interface. Under the elastic tensile condition, the stress gap at the interface is proportional to the tensile strain for the standard (NFGM) interface. On the other hand, in the FGM structural interface, such an increase of the stress gap is not observed. The atom level graded structure is certified to be effective to reduce the stress at the interfaces under elastic deformation conditions.

(Received June 15, 1998)

Keywords: molecular dynamics, functionally graded materials, Ni₃Al, nickel, γ/γ' interface, atomistic stress

I. 緒 言

Ni 基超合金は、降伏応力が逆温度依存性を示し、高温での機械的性質に優れることから、高温用構造材料として利用されている。近年、ガスタービンなどの使用温度の高温化にともない、耐熱性能の更なる向上が求められている⁽¹⁾。Ni 基超合金のベースとなる Ni-Al 2 元合金は Ni(γ) 相と Ni₃Al(γ') 相の 2 相よりなり、両相は (100) 面で整合界面を形成している。Ni 基超合金の特性を左右する因子には、(1) γ' 相の体積分率、(2) 合金中に固溶する添加元素、不純物、(3) γ' 相の形状と大きさ、(4) γ/γ' 界面の構造と格子定数ミスフィットなどに大別される。(1)に関しては、Beardmore ら⁽²⁾によって Ni 基超合金中の γ' 相の体積分率による降伏応力の温度依存性が報告され、 γ' 相の体積分率の増加にしたがい降伏応力の逆温度依存性が大きくなることが示されている。(2)に関

しては、Mo や W, Rh などが Ni マトリックスの固溶強化をすることや、Al と結合した Cr や Y の添加が合金の酸化抵抗を向上させること、C, B, Hf, Zr などの添加により炭化物やボロン化合物が粒界に形成されることによって、結晶粒径が安定化することなどが報告されている⁽³⁾⁽⁴⁾。また、(3)に関しては、 γ' 相の形状の違いによる降伏応力温度依存性の変化が報告されている⁽⁵⁾。(4)に関しては、合金添加元素の影響が(2)と同時に調べられ、種々の合金元素の添加により γ 相と γ' 相の格子定数が変化すること⁽⁶⁾⁽⁷⁾や、強度に及ぼす格子定数ミスフィットならびに熱膨張係数の差の影響⁽⁸⁾⁽⁹⁾が明らかにされている。しかしながら、微視的な界面そのものの構造と力学的性質の関係については不明な部分が多く残されている。

ところで、異なる特性をもつ 2 つの材料を接合する際、その界面が材料の特性を低下させてしまう事例が多く見られる。これに対して、接合面の構造を連続的に変化させることによって、材料の特性を損なうことなく、複合化させたのが傾斜機能材料(FGM)である。本材料は、初め、耐熱材料に

[†] 東北大学大学院生、現在：株式会社コマツ(Graduate Student, Tohoku University, Present address: Komatsu Corp.)

おける熱応力緩和を主目的としていたが、今日では、その適用範囲が機能材料や生体材料にまで広げられている⁽¹⁰⁾。

傾斜機能材料中の傾斜構造は、目的とする機能を達成するために意図的に制御されたものでなければならない。そして、この優れた概念は、原子レベル(ナノレベル)にまで拡張されるべきものであろう。例えば、異相界面を有する複合組織の場合、界面の構造が極めてシャープに変化している場合と滑らかに変化している場合では、その特性は大きく変化することがある。特に、界面が整合界面である場合には、その界面構造の問題はナノレベルまで及ぶと考えられる。したがって、構造制御という傾斜機能材料の概念を拡張してナノレベルの問題に適用することは、材料の特性向上に極めて有効であると考えられる。そのためには、材料内の局所的な物理特性や機械的性質をナノレベルで評価し、原子レベルでの最適な構造を設計する手法の確立が必要である。しかしながら、材料のマトリックス中から局所的な特性を抽出して測定することは、実験では極めて困難であるため、材料内の不均一性に関する原子レベルでの本質的な理解は進んでいないのが現状である。

以上のような観点から、本研究においては、Ni-Al 系 2 元合金中の γ/γ' 界面に傾斜構造の概念を適用し、その構造と機械的性質との関係について理解を深めることを目的として、分子動力学シミュレーションを行う。微視的な機械的・物理的特性と、弾性変形域における γ/γ' 界面の原子レベルでの構造との関係を明らかにする。

II. シミュレーション手法

Ni-Al 系においては、通常、 γ 相中にも Al 原子が固溶し、さらには第 3 元素も固溶している。本研究では界面の構造と機械的性質との基本的な関係を明らかにするため、モデルの単純化を行った。すなわち、fcc 構造である γ 相は Ni 原子 100%、L1₂ 構造を持つ γ' 相は化学量論組成 (Ni : Al = 3 : 1) の Ni₃Al からなるとともに、空孔などの欠陥が含まれない完全結晶のモデルを用いた。また、計算機の実能力の関係から、Ni-Al 系の組織の内 γ/γ' 界面近傍の原子についてのみ扱った。

界面としては、 γ 相と γ' 相とが (100) 面で直接整合界面を形成している構造と、界面付近の γ' 相中の Al 濃度が γ' 相から γ 相にかけて連続的に変化している傾斜構造とを計算モデルに用いた。以下、本論文では、傾斜構造を Functionally Graded Material より FGM 構造、通常の整合界面を Non Functionally Graded Material より NFGM 構造と記す。

次に、NFGM 構造と FGM 構造の計算モデルを作成するための手順を記す。座標系は界面に垂直方向に y 軸を、界面に平行な方向に x ならびに z 軸をとった。 x 軸と z 軸は等価である。まず、 γ 相と γ' 相を直接 (100) 面で接合し、NFGM 構造を得る。次に、界面近傍の 4 ユニットセルにおいて、Al 原子を界面から近い方からランダムに 20, 40, 60, 80% ずつ

antisite defect として Ni 原子に置き換えることにより、10 原子層からなる傾斜界面を形成した。この時、界面の中心をシミュレーションに用いる系の中心に一致するようにとる。NFGM, FGM 構造ともにユニットセル $20 \times 40 \times 20$ で、総原子数は、64000 である。以上を原子の初期配置として分子動力学計算を行った。また、無ひずみ時の初期配置の格子定数には、Ni と Ni₃Al 単結晶の室温での実験値として報告されている値⁽¹¹⁾である 0.3523 nm と 0.3567 nm とを相加平均した 0.3545 nm を用いた。

本研究では Finnis-Sinclair ポテンシャルを用いている。関数形については Cleri と Rosato⁽¹²⁾によって Ni-Al 系に対して、フィッティングが行われているものに対して、パラメータを修正して用いた。これによれば、系全体のポテンシャルエネルギー E_{pot} は、

$$E_{\text{pot}} = \sum_{\alpha=1}^m \sum_{i_{\alpha}}^{N_{\alpha}} \left[\sum_{\beta=1}^m \sum_{j_{\beta} \neq i_{\alpha}}^{N_{\beta}} A_{\alpha\beta} \exp \left[-p_{\alpha\beta} \left(\frac{r_{i_{\alpha}j_{\beta}}}{d_{\alpha\beta}} - 1 \right) \right] - \left\{ \sum_{\beta=1}^m \sum_{j_{\beta} \neq i_{\alpha}}^{N_{\beta}} \xi_{\alpha\beta}^2 \exp \left[-2q_{\alpha\beta} \left(\frac{r_{i_{\alpha}j_{\beta}}}{d_{\alpha\beta}} - 1 \right) \right] \right\}^{1/2} \right] \quad (1)$$

と計算される。ここで、 r_{ij} は原子 i - j 間の距離、 d は最隣接原子間距離である。 p と q は空間分布に関するパラメーター、 A と ξ がエネルギーに関するパラメーターである。ポテンシャルのカットオフ半径は 1.0 nm とした。

境界条件は、 y 軸方向のみ周期境界、 x 軸と z 軸は自由表面とし、NVT アンサンブル下、温度 298 K の条件で分子動力学シミュレーションを行った。 y 軸方向の周期境界条件のために、シミュレーションを行う系中に界面は対称に 2 枚存在する。運動方程式を時間ステップ 1fs で 5 次の予測子-修正子法により数値積分した。解析は、系を 5ps 緩和させた後の 2ps 分の時系列データに対して行う。

系の引張りひずみ ε は、無ひずみ時の y 方向の分子動力学セル長 L_0 と、ひずみ導入時の y 方向の分子動力学セル長 L から、 $(L-L_0)/L_0$ で定義する。弾性変形範囲におけるシミュレーションは、系の y 方向の分子動力学セル長を強制スケーリングすることによって一定のひずみを加えた後、セル長を保持したまま内部の原子を緩和させることによって行った。ひずみとしては、引張方向に 2, 4, 6, 8, 9, 10% である。この制御方法は、通常実験で行われるような一定ひずみ速度下でひずみを徐々に加える方法とは異なり、シミュレーションに要する計算時間を大幅に減らすことができる。

III. 結果ならびに考察

1. 無ひずみ条件下

系を緩和させた後の x ならびに y 方向の格子定数の空間分布を Fig. 1 に示す。表面の効果を排除するために、表面から 5 ユニットセル以上離れた原子のみを解析の計算対象とし、縦軸には各 xz 面上での平均値を示してある。横軸には平均の格子定数を基本単位として規格化した界面からの距離を示してある。界面からの距離が、負で表わされている左側

Fig. 1 Spatial distribution of the lattice constant in parallel (x) and perpendicular (y) directions to the (100) γ/γ' interface under the non tensile strain condition. The y directional distance is normalized by the lattice constant. Negative region indicates the γ phase and positive region the γ' phase.

の領域が γ 相, 正で表わされている領域が γ' 相である. 方向別にみると, 破線で表わされる y 方向性については FGM と NFGM との間には差が見られる. NFGM 構造では, 界面付近で格子定数が急激に変化しており, 界面付近で格子定数が γ 相側で最小値, γ' 相側で最大値を示している. 一方, FGM 構造では, 界面付近の変化は NFGM 構造と同様であるが, 傾斜構造を持つ界面内部においては, 組成の変化に沿って格子定数は緩やかに変化し, 界面における格子ひずみが緩和されている. 一方, 実線で表わされる x 方向成分は, 全体を通じてなめらかに変化し, FGM と NFGM との間の差はみられない. x 方向の挙動については, x 方向ならびに z 方向の境界条件の影響によるところが大きい. なお, 界面ならびに表面から5ユニットセル以上離れた部分の格子定数は, NFGM・FGM 構造ともに γ 相は0.3515 nm, γ' 相は0.3562 nmである. γ 相と γ' 相の間には1%程度の格子定数差があり, 実験値として報告されている値を再現している.

マクロには均一に見える物理量も, 原子レベルでは材料の構造変化に応じて空間的な揺らぎを生じている. 分子動力学シミュレーションにおいては, 計算から得られる各原子の時系列データからミクロな物理量を計算し, これを個々の原子に対してマッピングすることができる. 本研究では, ミクロな力学的な物理量としてサイトポテンシャルエネルギーならびに応力エネルギーを解析した.

サイトポテンシャルエネルギー⁽¹³⁾は, 系全体のポテンシ

Fig. 2 Spatial distribution of the site potential energy under the non tensile strain condition. The sum of the site potential energy gives the total potential energy of the system.

ャルエネルギーを原子一つ一つに割り当てる, すなわち, 式(1)の大括弧内の項を各原子に対して計算する事によって得られ, 材料内の局所的なエネルギー状態を評価することができる. サイトポテンシャルエネルギーの解析結果を Fig. 2 に示す. 格子定数の場合と同様に, 表面部分の原子は除去して解析している. サイトポテンシャルエネルギーについては, 任意の xz 面上の Ni あるいは Al 原子のみの平均と, 組成による重みをつけた平均を計算している. NFGM・FGM 構造の両方で γ' 相の内部では Al, Ni 原子共に同じエネルギーをもつ. 各相の中心部の平均エネルギーは, 左側の γ 相では -7.43×10^{-19} J/atom, 右側の γ' 相では -7.56×10^{-19} J/atom であり, γ 相が γ' 相より高いエネルギー状態にある. 界面近傍では Al 原子のエネルギーは小さくなる傾向が見られ, 特に傾斜界面中に antisite defect として導入された Al 原子のエネルギーは Al 濃度が低くなるにつれて低くなり, エネルギー的に非常に安定に配置している. また, 組成平均においては, NFGM 構造では界面において急激なエネルギー変化を生じているが, FGM 構造では界面近傍のエネルギー変化が組成傾斜に応じて緩和されている.

ミクロな応力エネルギーの解析に先立ち, マクロな応力について考えてみる. 系全体に働いている応力テンソルの $\alpha\beta$ 成分 $\sigma_{\alpha\beta}^M$ は, 圧力の定義と同様に,

$$\sigma_{\alpha\beta}^M = \frac{1}{V} \sum_{i=1}^N \left[m_i v_i^\alpha v_i^\beta + \sum_{j=1}^N \frac{1}{2} F_{ij}^\alpha r_{ij}^\beta \right] \quad (2)$$

と定義される. ここで, V は系の体積, m_i は原子 i の質量,

v_i は原子 i の速度, α ならびに β は座標成分を表わしている. F_{ij} は原子 j により原子 i に作用する力であり,

$$F_{ij} = -\frac{dE_{\text{pot}}}{dr_{ij}} \frac{r_{ij}}{r_{ij}} \quad (3)$$

である. これに基づき, さらに, 局所的な応力状態を解析するために, 原子レベル応力という概念による解析を行った. 原子 i の $\alpha\beta$ 成分の原子レベルでの応力エネルギー $\sigma_i^{\alpha\beta}$ は

$$\sigma_i^{\alpha\beta} = m_i v_i^{\alpha} v_i^{\beta} + \sum_{j=1}^N \frac{1}{2} F_{ij}^{\alpha} r_{ij}^{\beta} \quad (4)$$

のように表わされる⁽¹⁴⁾. 単位は J/atom であり, 応力と原子容の積に等しい. 実際の解析にあたっては, 表面エネルギーの高い領域の影響を排除するために, 表面の 5 ユニットセル分を除いている. また, この各成分は座標系に依存する量であるため, 座標系に依存しないテンソル不変量として von Mises のエネルギーを, 各応力エネルギー成分から計算した. 元来の von Mises エネルギーは, 多結晶材料などでのマクロな降伏条件を表わす量として用いられてきたものである. 原子レベルの von Mises 応力エネルギーを

$$\sigma_{\text{VM}} = \frac{1}{\sqrt{2}} [(\sigma_{xx} - \sigma_{yy})^2 + (\sigma_{yy} - \sigma_{zz})^2 + (\sigma_{zz} - \sigma_{xx})^2 + 6(\sigma_{xy}^2 + \sigma_{yz}^2 + \sigma_{zx}^2)]^{1/2} \quad (5)$$

と定義する.

von Mises 応力エネルギーの解析結果を Fig. 3 に示す. 各相の中心部における von Mises 応力エネルギーの組成平均は, NFGM・FGM 構造ともに, γ 相に比べ γ' 相の方が 8

%程高い. これは, ポテンシャルエネルギーの安定化とは反対に, γ' 相の方が高い応力状態にあることを示している. von Mises 応力エネルギーの組成平均の最大値は FGM と NFGM 構造ではほぼ等しいが, NFGM 構造では応力エネルギーが界面において急激に変化している. 一方, FGM 構造では組成を傾斜させることによって界面が幅を持ち, その間で緩やかに応力に変化している. 詳細をみてみると, NFGM・FGM 構造共に, γ 相においては, 界面部分と内部とのエネルギー変化はほとんどない. 一方, γ' 相においては, Al 原子の応力エネルギーは内部では組成平均より小さな値を示すが, 界面に近づくに従い高くなる. NFGM 構造では界面において Al と Ni の応力エネルギーは等しく, FGM 構造では傾斜界面部分において Al 原子の方が逆に 1.5×10^{-20} J/atom 程高くなり, 界面ならびにその近傍の Al 原子は γ' 相の内部よりも高い応力状態にあることがわかる.

次に, 各成分毎の応力エネルギーについてみる. 界面に平行な垂直応力成分である xx 成分の応力エネルギーの結果を Fig. 4 に示す. 正の値が圧縮応力を, 負の値が引張応力を示す. 無ひずみ状態であるために, 系全体としての応力はほぼ 0 である. γ' 相中の Al 原子には大きな圧縮応力がかかり, Ni 原子には逆にわずかな引張応力が作用している. また, Ni と Al の組成平均は, von Mises 応力エネルギーと同様に, NFGM において界面に急激な応力差が生じている. これは, Al 原子に作用する圧縮応力に起因している. 各原子の xx 成分の応力エネルギーの xy 断面での分布を Fig. 5

Fig. 3 Spatial distribution of the atomistic von Mises stress energy defined by equations (4) and (5) under the non tensile strain condition.

Fig. 4 Spatial distribution of the xx component of atomistic normal stress energy parallel to the γ/γ' interface defined by equation (4) under non strain condition. Positive value indicates the compress stress.

Fig. 5 Snapshot of the xy cross section under the non tensile strain condition. Color of the atom indicates the xx component of atomistic normal stress energy. The energy unit is 10^{-20} J/atom. Black and white colors mean the compress and the tensile stresses.

に示す。図中の凡例に示す応力エネルギーの単位は 10^{-20} J/atom である。原子に作用する応力は圧縮応力が高い方から黒で表わされ、引張応力が高くなるに連れて色は白へと変化する。この様子からも NFGM 構造の界面の Al 原子に大きな圧縮応力がかかり、界面において急激な応力差が生じていることがわかる。一方 FGM 構造では Al 原子にかかる圧縮応力は緩和されている。界面に垂直方向の垂直応力成分である yy 成分の応力エネルギーの結果を Fig. 6 に示す。 xx 成分同様に Al 原子に大きな圧縮応力がかかり、Ni 原子には引張応力が作用している。しかしながら、応力エネルギーの組成平均は、 xx 成分のような界面における急激な変化は見られず、Al 原子にかかる圧縮応力と Ni 原子にかかる引張応力とが相殺し、NFGM・FGM 構造共にその値はほぼ 0 となっている。せん断成分の応力エネルギーの一例として xy 成分の応力エネルギーの結果を Fig. 7 に示す。これは垂直応力成分に比べて 1 桁以上低い値となっている。そして、 y 相と y' 相間の違い、 y' 相中の Ni と Al 原子間の違いはなく、NFGM・FGM 構造ともに同じ挙動を示す。 zx 成分につい

Fig. 6 Spatial distribution of the yy component of atomistic normal stress energy perpendicular to the y/y' interface.

Fig. 7 Spatial distribution of the xy component of atomistic shear stress energy defined by equation (4) under the non tensile strain condition.

ても同様の挙動を示す。これらの挙動は、界面の軸対称な構造に起因している。

2. 弾性変形条件下

系に加えたひずみに対して、格子定数ならびに巨視的な応力の変化について解析を行った。前節と同様にして、各ひずみに対して x, y 方向の格子定数を計算し、これより x, y 成分のひずみ $\varepsilon_x, \varepsilon_y$ を求め、ポワソン比 $\nu = -\varepsilon_x/\varepsilon_y$ を計算した。

Fig. 8 Macroscopic y directional normal tensile stress change with the tensile strain. The stress is defined by the equation (2).

Fig. 9 Spatial distribution of the site potential energy under various strain conditions. Only the compositional averages are indicated.

ポワソン比は NFGM・FGM 構造ともにはほぼ同じ挙動を示す。2 から 9% までの値を平均すると 0.308 となり、室温での実験値として報告されている Ni 多結晶の 0.312⁽¹⁵⁾ と Ni₃Al 多結晶の 0.305⁽¹⁶⁾ との中間の値を示す。巨視的な応力として、式(2)で計算される界面に垂直方向の系全体の垂直応力の変化について Fig. 8 に示す。引張応力は負の値で表わされる。引張応力は、8% までは弾性変形挙動を示し、ひずみに比例して応力は増加する。9% において傾きが低下し、10% では塑性変形が生じ応力自体が低下している。ひずみが 0 から 8% の範囲において、引張応力の傾きを最小自乗法を用いて求め、この系のヤング率を評価した。NFGM・FGM 構造ともに約 144 GPa となり実験値に示される Ni と Ni₃Al の 197 GPa と 201 GPa⁽¹⁵⁾ より約 30% 低い値を示す。これは、分子動力学計算に用いられる系自体が、実験に比べ非常に小さいため、比表面積が大きくなり、表面のソフトニングの効果が影響したためと考えられる。

微視的な解析として、サイトポテンシャルエネルギーの計算結果を Fig. 9 に示す。Ni 原子と Al 原子とのエネルギーの差にはひずみ依存性は見られなかったため、以下のグラフでは Ni 原子と Al 原子との組成平均のみを表示する。ひずみ 9% 以下の弾性変形の範囲では、サイトポテンシャルエネルギーは、ひずみの増加にともない系全体にわたって均一に増加する。ひずみ 10% では、塑性変形により乱れた構造が

Fig. 10 Spatial distribution of the atomistic von Mises stress energy under various strain conditions.

Fig. 11 Spatial distribution of the xx component of atomistic normal stress energy parallel to the γ/γ' interface under various strain conditions.

生じて、サイトポテンシャルエネルギーには局所的な変化が生じている。

von Mises 応力エネルギーの変化を Fig. 10 に示す。NFGM・FGM 構造とも、ひずみにつれて応力エネルギーは増大し、 γ 相の中心部において増加量が大きい。NFGM 構造においては、界面の γ' 相側における増加量が大きくなっており、界面におけるエネルギー差が増加している。一方、FGM 構造においては、界面の γ' 相側におけるエネルギー増加は小さく、界面におけるエネルギー差はひずみが増加してもほぼ一定である。このことから、界面の原子レベルでの傾斜化は応力エネルギーの低減に有効であることがわかる。また、NFGM・FGM 構造とも、ひずみ10%の塑性変形時における応力エネルギーの低下は γ 相中で大きく、すべりの発生による応力緩和が γ 相で顕著なことを示す。

各成分毎の応力エネルギーとして、 xx 成分の応力エネルギーを Fig. 11 に示す。NFGM 構造では、界面の γ 相側で引張応力、 γ' 相側で圧縮応力を常に示し、界面近傍の応力差はひずみとともに増加する。これに対して、FGM 構造では、界面の γ 相側の引張応力は、ひずみとともに圧縮応力に転じ、界面近傍の応力差はひずみが増加してもほぼ一定の値を示す。ひずみ10%では、両構造とも塑性変形に伴う局所的な応力変化を示している。 yy 成分の応力エネルギーにつ

Fig. 12 Spatial distribution of the yy component of atomistic normal stress energy perpendicular to the γ/γ' interface under various strain conditions.

いて Fig. 12 に示す。NFGM・FGM 構造で同じように振るまい、ひずみが増加しても界面付近での応力の局所的な変化は起こらず、ひずみの増加に従って系全体にわたり均一に引張応力が増加している。また、塑性変形が生じるひずみ10%においては、系全体にわたって大きく応力が低下している。最後に、せん断成分の応力エネルギーの一例として xy 成分の応力エネルギーの結果を Fig. 13 に示す。弾性変形範囲である、9%まではほとんど応力がかかっておらず、塑性変形が生じるひずみ10%において急激に応力がかかっている。これは、すべりの発生により、並進対称性が崩れたことに起因する。NFGM と FGM とで同じような挙動を示す。

IV. 結 言

Ni-Al 系 2 元合金中の γ/γ' 界面の分子動力学計算を行い、NFGM ならびに FGM 構造を持つ界面近傍における格子定数、サイトポテンシャルエネルギー、応力エネルギー分布を解析し、また、弾性変形範囲におけるこれらの物理量の変化から局所的なエネルギー状態の変化を評価し、以下の結果を得た。

- (1) γ/γ' 界面の構造(組成)を傾斜化(FGM 化)させること

Fig. 13 Spatial distribution of the xy component of atomistic shear stress energy under various strain conditions.

によって、無ひずみ状態での格子定数ミスフィットならびに界面付近の応力集中が緩和される。特に、界面に平行な成分である xx 成分においてその効果が大きい。

(2) 引張りひずみを加えて弾性変形を行った場合、通常の整合界面(NFGM)では、界面の応力差がひずみの増加とともに増加するが、傾斜界面(FGM)においては、ほとんど変化せず、傾斜化により原子レベルでの応力低減の効果がみられる。

文 献

- (1) J. H. Westbrook and R. L. Fleischer: *Intermetallic Compound Vol. 2*, John Wiley & Sons Ltd., New York, (1994).
- (2) P. Beardmore, R. G. Daies and T. L. Johnston: *Trans. Metall. Soc. AIME*, **245**(1969), 1537.
- (3) G. N. Maniar and J. F. Bridge: *Metall. Trans.*, **2**(1971), 95.
- (4) J. Takasugi and O. Izumi: *Acta Metall.*, **33**(1985), 1259.
- (5) J. K. Tien and S. M. Copley: *Metall. Trans.*, **3**(1972), 2157.
- (6) A. F. Giamei and D. L. Anton: *Metall. Trans.*, **A16**(1985), 1997.
- (7) M. V. Nathal, R. A. Mackay and R. G. Garlick: *Mater. Sci. Eng.*, **75**(1985), 195.
- (8) D. A. Grose and G. S. Ansell: *Metall. Trans.*, **A12**(1981), 1631.
- (9) J. Li and R. P. Wahi: *Acta Metall. Mater.*, **43**(1995), 507.
- (10) T. Hirai: *Mater. Sci. and Tech.*, **17B**(1996), 295.
- (11) P. Villar and L. D. Calvert, Eds.: *Paerson's Handbook of Crystallographic Data for Intermetallic Phases*, ASM, Metals Park, Ohio, (1985).
- (12) F. Cleri and V. Rosato: *Phys. Rev.*, **B48**(1993), 22.
- (13) T. Aihara, Jr., K. Aoki and T. Masumoto: *Mater. Sci. Eng.*, **A179-180**(1994), 256.
- (14) T. Aihara, Jr. and Y. Kawazoe: *Progress of Theoretical Physics Supp.*, **126**(1997), 355.
- (15) E. A. Brandes ed.: *Smithells Metals Reference Book 7 Ed.*, Butterworth-Heinemann, Oxford, (1992).
- (16) M. Nakamura: *Intermetallic Compound Vol. 1*, John Wiley & Sons Ltd., New York, (1994).