形状記憶合金における超弾性のフェイズフィールド解析

浅田尚志^{*1}、加藤博之^{*2}、佐々木一彰^{*2}

Phase field analysis of superelasticity in shape memory alloy

Takashi Asada^{*1}, Hiroyuki Kato^{*2} and Kazuaki Sasaki^{*2}.Graduate school of Mechanical and Space Engineering, Hokkaido University,
N13 W8, Kita-ku, Sapporo, 060-8628 Japan

We performed a computer simulation of superelasticity in shape memory alloy by phase field method. Superelasticity occurs by martensitic transformation. We assessed the effect of the parameters; interface width (δ) and interface energy (σ), which are defined to represent the transformation interface in phase field method. We calculated the velocity of the interface and the flow stress of superelasticity.

Key Words : Shape memory alloy, phase field method, superelasticity, interfacial energy

1. 緒言

形状記憶合金が超弾性を示す時、その内部はオーステナイト相 (A 相) とマルテンサイト相 (M 相) の二相共存状態にある。フェイズフィールド法は二相共存状態を秩序変数 ϕ により評価する手法で、二相間に存在する界面の動きを直接解析することが出来る。本研究は超弾性における A 相、M 相の二相共存状態に対してフェイズフィールド法を適用した。

形状記憶合金におけるマルテンサイト変態には、温度一定で外力を加えることで起こる応力誘起変態と、温度を変化させることで起こる熱変態がある。超弾性は応力誘起変態で起こるが、熱変態のマルテンサイト成長についても解析を行った。

超弾性が起きている時の試料の表面を観察すると図 1 のような変態組織が存在する⁽¹⁾。図 1 でマルテンサイト変態は右に向かって進行する。変態界面の定義は、個々の結晶粒内に界面が存在するというミクロな視点の定義と、図 1 として見られるような試料全体をみた時、二相の境目を界面とするマクロな視点の定義が考えられる。ここでは超弾性をマクロな界面の動きとしてとらえた。超弾性は図 1 において、A 相と M 相の界面が一端から他端へと伝播することで進行する。この時、界面は同じ形状を保って移動するものと考えれば、変態組織は一次的に分布するものとみなすことが出来る。その上でフェイズフィールド法による解析から変態界面の速度及びそこから得られる変形応力を評価した。

Fig.1 Microstructure of Ni-Ti alloy under the tensile stress.

2. フェイズフィールド法

秩序変数 ϕ は、A 相で 0、M 相で 1 となる様な変数である。1 次元モデルでは x 座標のみの関数となる。

フェイズフィールド方程式は、M を易動度として以下に示す時間発展の式として与えられる。

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -M \frac{\delta G_{sys}}{\delta \phi} \quad (1)$$

ここで系の全自由エネルギー G_{sys} は、化学的自由エネルギー G_0 、秩序変数 ϕ の勾配と曲率によって定義される勾配エネルギー G_{surf} 、弾性ひずみエネルギーと外力によるエネルギー G_{str} の和で表さる。

$$G_{sys} = G_0 + G_{surf} + G_{str} \quad (2)$$

式(2)中の各項の値は秩序変数 ϕ と図 2 で定義される界面幅 δ と界面エネルギー σ 、外力、周辺温度で決定される。

化学的自由エネルギー $G_0(\phi)$ を、各相のエネルギー密度 g_A 、 g_M とそのエネルギー差 Δg 、定数 W 、 κ と以下に示す式(3)、(4)を用い、秩序変数 $\phi=0$ 、1 で極小となるような関数として仮定する。

^{*1} 学生員、北海道大学大学院工学研究科機械宇宙工学専攻課程
(〒060-8628 北海道札幌市北区北 13 条西 8 丁目)

^{*2} 正員、北海道大学大学院工学研究科

E-mail: t-asada@mech-hm.eng.hokudai.ac.jp

$$p(\phi) = \phi^3(10 - 15\phi + 6\phi^2) \quad (3)$$

$$q(\phi) = \phi^2(1 - \phi^2) \quad (4)$$

$G_\phi(\phi)$ は以下の式を体積積分して得ることが出来る。

$$g(\phi, T) = (1 - p(\phi))g_A(T) + p(\phi)\Delta g(T) + Wq(\phi) + \kappa^2\phi^2/2 \quad (5)$$

W , κ は、界面幅 δ 、界面エネルギー σ 、定数 λ を用いて以下のように表すことができる⁽²⁾。

$$b = 2 \tanh^{-1}(1 - \lambda) \quad (6)$$

$$W = 6\sigma b / \delta \quad (7)$$

$$\kappa = \sqrt{3\delta\sigma/b} \quad (8)$$

同様に G_{mf} と G_{st} を求め、以上を式(1)、(2)に代入した式をフェイズフィールド方程式とする。

Fig.2 The definition of interface width δ .

3. 数値計算

Ni-Ti 合金の格子定数が3Å、整合界面における界面エネルギーの目安が0.05-0.2J/m²程度とされている⁽³⁾ため、渡辺らは $\delta=3\sim 12\text{Å}$ 、 $\sigma=0.1\sim 0.3\text{J/m}^2$ とし、試料は一定の変形速度($v_c=0.5\sim 2.0\text{mm/s}$)で変形するものとした。その上で彼らは、フェイズフィールド方程式を陽解法による差分計算を用いて解いた⁽⁴⁾。ただし陽解法では、解の収束安定条件を満たすような時間幅をとると、計算に膨大な時間を要するため σ 、 δ 、および v_c の設定範囲に限界があった。

今回は、現実に行われる引張り試験が $v_c=0.1\text{mm/s}$ 程度であることを考え、 $v_c=0.01\sim 1.0\text{mm/s}$ とする。このため、解法として解の収束安定条件のないCrank-Nicolson法を用いて差分計算を可能とした。パラメータの範囲は $\delta=3\sim 30\text{Å}$ 、 $\sigma=0.005\sim 1.0\text{J/m}^2$ とした。本研究における $v_c=0.5\sim 1.0\text{mm/s}$ の結果は渡辺らの結果と一致した。

二相のエネルギー差 Δg は変態潜熱 H と平衡温度 T_0 から $\Delta g=H(T-T_0)/T_0$ とした。また応力誘起変態については両相が温度平衡な状態にある場合を考えたため、 $\Delta g=0$ である。そして易動度は $M=1$ とした。

フェイズフィールド方程式に代入したその他の物性値は以下の通りである。変態ひずみ $\epsilon^T=0.06$ 、ヤング率82GPa、変態潜熱30J/g、密度6.45g/cm³、比熱 $4.6\times 10^3\text{J/(g}\cdot\text{K)}$ 、平衡温度 $T_0=273\text{K}$ 。初期状態はA相とM相が半半ずつ存在する状態としたため、3%程度の超弾性ひずみで変態は終了する。

4. 結果及び考察

図3は熱変態における界面速度の時間に対する変化である。界面速度は変態開始から時間とともに減少していき、時間が十分経過すると定常速度に達した。この定常速度は平衡温度 T_0 との温度差 ΔT が大きくなるほど大きくなった。

応力誘起変態における応力ひずみ線図を図4、5に示す。これらの応力ひずみ曲線は実験から得られる応力ひずみ曲線(図6)におけるA-Bに相当する。図4にあるように界面幅を大きくすると、応力ひずみ曲線における平坦部の変形応力も小さくなる。また、図5に示すように引張速度を大きくすると、平坦部の変形応力が大きくなった。

応力誘起変態において図6のAB間における変形応力は変化しないので、図4、5における平坦部の応力値に注目する。界面エネルギー σ と平坦部の応力の関係を図7に、同じく界面幅 δ と平坦部の応力の関係を図8に示す。図のように界面エネルギー σ が微小な場合を除いては変形応力に影響を及ぼさないことがわかる。さらに、界面幅 δ が大きくなると、いずれの変形速度においても、変形応力が小さくなるという関係を得た。

5. 結言

フェイズフィールド法における界面幅、界面エネルギーと、熱変態および応力誘起変態における界面速度、変形応力の関係を得た。

熱変態において、平衡温度からの温度差と界面速度の関係求めた。また、応力誘起変態において、外力(引張速度)と、界面速度および変形応力との関係を得た。

界面幅、および界面エネルギーに適当な値を与えることで、現実に行われる引張り試験で見られる応力ひずみ曲線に近い曲線をフェイズフィールド法により得ることができた。

Fig.3 The velocity of the interface in thermal transformation ($\delta=9\text{\AA}$, $\sigma=0.1\text{J/m}^2$).

Fig.4 Stress-strain curves ($\sigma=0.1\text{J/m}^2$, $v_c=1.0\text{mm/s}$).

Fig.5 Stress-strain curves ($\delta=9\text{\AA}$, $\sigma=0.1\text{J/m}^2$).

Fig.6 Superelasticity about 50.5at.%Ni-Ti alloy ($A_f=40^\circ\text{C}$).

Fig.7 Relation of interface energy and stress ($\delta=9\text{\AA}$).

Fig.8 Relation of interface width and stress ($\sigma=0.1\text{J/m}^2$).

参考文献

- (1) Kato H, Sasaki K, Mori T, Proc. SMST2007, Tsukuba,(2008), 16.
- (2) Allen S. M, Cahn J. W, Acta metall., 27 (1979), 1085-1095.
- (3) 古原忠, 鉄と鋼, 89(2003), 497-509.
- (4) Watanabe Y, Sasaki K, Kato H, M&M2008, 講演概要集, Kusatsu, (2008).