Ni/Ni₃Al 界面ミスフィット転位の構造および運動： 分子動力学による検討[†]

屋代 如月* J. R. Pangestu** 富田 佳宏***

Structure and Motion of Misfit Dislocations at Ni/Ni₃Al Interface : Molecular Dynamics Study

by

Kisaragi YASHIRO*, Joy Rizki PANGESTU** and Yoshihiro TOMITA***

For a new insight on the misfit dislocation networks in Ni-based superalloys, we investigate the structure and motion of misfit dislocations on two different semi-coherent interfaces between Ni and Ni₃Al, Interface 1 and 2, by using molecular dynamics simulations. The former does not have Al atoms at the interface in the Ni₃Al side, while the later does. Misfit dislocation networks are actually found on the interfaces along the <110> and < $\bar{1}10$ > directions, as observed in experiments. Detail observation of the dislocation cores reveals that the network is basically composed of the edge dislocation; however, Interface 1 also shows screw character at the intersections of the network. By applying the tension normal to the interfaces, many partial dislocation loops nucleate and propagate from the network on Interface 1, first in the Ni side then in the Ni₃Al side. Partial loops are also originated from the network of Interface 2 into the Ni₃Al side; however, they make dislocation locking with another partial on the conjugate slip plane, showing wedge-like stacking faults parallel to the network. Partial loops also nucleate and expand from the networks on both interfaces, only into the Ni₃Al side under the compression normal to the interfaces. The dislocation locking is not found under the compression, while the partials originate a little faster from the network on Interface 1 than that of Interface 2.

Key words : Molecular dynamics, Misfit dislocation, Interfacial dislocation network, Ni-Based superalloys

1 緒 言

著者らのグループでは、Ni 基単結晶超合金の γ/γ' 析出構造における転位挙動について、原子レベルからの知見を得るため、分子動力学による種々の変形シミュレーション、ならびに、第一原理解析による APB エネルギー等の物性評価・格子不安定性に基づく力学特性評価など種々の検討を行ってきた。^{1)~6)}さらに、第一原理解析で求めた APB エネルギーを用いて、離散転位動力学シミュレーションにおける γ' 相のカッティング条件を提案し、実際の寸法 (0.5 μm 程度) の立方体 γ' 相周囲における転位挙動や、界面転位網のシミュレーションなど、上位スケールにおける現象への計算力学的アプローチも試みている。^{7),8)}

界面転位網は、ラフト化した γ' 相表面に観察され、その間隔がクリープ寿命と密接に関連していることが示されている。^{9)~11)}著者らの離散転位動力学シミュレーションにおいても、転位網の間隔が狭くなると転位の張り出しに大きな力が必要となり、カッティング抵抗が増加することを示した。⁸⁾しかしながら、 γ 相中の転位を用いて界面転位をモデル化しており、転位芯同士の相互作用は γ 相と γ' 相の結晶構造の違いを考慮したものではない。ミスフィット転位は界面における格子のひずみ場として確かに存在するが、半整合界面をはさんだそれぞれの相に

において、結晶構造には余分もしくは不足な原子面があるわけではない。転位芯が界面上を運動する限りは、転位論が適用可能であるが、どちらかの相への侵入や、相内を進行し界面に到達した転位芯との相互作用は、界面における原子構造を陽に考えなければならず、連続体近似に基づく従来の転位論は適用できない。

著者らの研究も含め、 γ/γ' 界面についてこれまで行われてきた分子動力学解析¹²⁾は整合界面についてのものであり、異なる数の格子を接合した半整合界面のミスフィット転位を直接扱ったものはない。これは、実材料における γ 相と γ' 相の格子ミスフィットが非常に小さく (10^{-3} のオーダー)、平衡状態の格子長さで 1 格子分の差を生じるためには 1 辺が 1000 格子以上の膨大なシミュレーションセルが必要となるからである。したがって、現時点では計算機能力の制限から、系全体のひずみエネルギーが最小となるような条件下で、半整合界面のミスフィット転位の分子動力学シミュレーションを行うことはできない。しかしながら、半整合界面を直接扱わなければ界面転位網の転位芯構造ならびに運動に必要な知見を得ることは出来ない。そこで本研究では、格子数の異なる Ni および Ni₃Al 単結晶平板を積層したシミュレーションセルを用い、半整合界面のミスフィット転位をモデル化し

[†] 原稿受理 平成 18 年 6 月 28 日 Received June 28, 2006 ©2007 The Society of Materials Science, Japan

* 正 会 員 神戸大学工学部機械工学科 〒657-8501 神戸市灘区六甲台町, Faculty of Eng., Kobe Univ., Nada-ku, Kobe, 657-8501

** 神戸大学大学院 〒657-8501 神戸市灘区六甲台町, Graduate Student, Kobe Univ., Nada-ku, Kobe, 657-8501

*** 正 会 員 神戸大学大学院自然科学研究科 〒657-8501 神戸市灘区六甲台町, Graduate School of Sci. and Tech., Kobe Univ., Nada-ku, Kobe, 657-8501

たシミュレーションを行う。設定した格子数での釣り合いのものではあるが、無負荷平衡状態における転位芯の構造を詳細に議論する。ついで、界面垂直方向に引張ならびに圧縮を与えたときのミスフィット転位の挙動について検討する。

2 シミュレーション方法

これまでと同様、Voter らによりパラメータフィットされた原子埋め込み法 (EAM) ポテンシャル^{13), 14)}を用いて原子間相互作用を評価した。Fig. 1 に示すように、 $L1_2$ 構造の単位格子を $49 \times 49 \times 25$ 並べた Ni_3Al 単結晶 (γ' 相) の上に、fcc の単位格子を $50 \times 50 \times 25$ 並べた Ni 単結晶 (γ 相) を接合してシミュレーションセルとし、全方向に周期境界を適用した。原子数は 490100 である。なお、図の γ' 相 x 断面には Ni のみの (100) 原子面が現れている。境界部分にミスフィットが集中しないように、初期配置作成時の γ' 相、 γ 相の格子長さ $a_{\gamma'}$, a_{γ} が $49a_{\gamma'} = 50a_{\gamma}$ となるよう、それぞれ 0.357nm, 0.350nm に設定した。格子ミスフィット $\delta = (a_{\gamma'} - a_{\gamma})/a_{\gamma}$ は 0.02 となり、実際の Ni 基超合金中のそれに比べると 1 桁大きい条件となっている。

まず、垂直方向応力を零とするようにセルの x , y , z 方向の長さをそれぞれ制御しながら 15000fs の初期緩和計算を行った。本研究では熱揺動の影響を排除して転位の構造ならびに運動を議論するために、温度は 10K とし速度スケールにより制御した。その後、界面垂直方向 (z 方向) に引張および圧縮を行う変形シミュレーションを行った。引張および圧縮はひずみ制御で行い、毎ステップ $\Delta\epsilon = 1.0 \times 10^{-5}$ の微小ひずみでセル内の原子座標をアフィン変形させた。本ひずみ増分は十分小さく、系は内部構造緩和しながら変形するので、変形後期の内部構造は初期構造をアフィン変形させたものとは異なる。さらに、応力が急激な変化 (絶対値 $|\sigma|$ が急減) を生じた際にはひずみ増加を停止し、内部構造を十分に緩和させた。したがって、本負荷条件は準静的な引張・圧縮と考えることができる。なお、引張・圧縮軸に対して垂直方向については変位拘束 ($\epsilon' = 0$) としている。いずれのシミュレーションも温度は 10K とした。

3 シミュレーション結果および考察

3・1 無負荷平衡状態における界面転位構造

Fig. 2 に初期緩和計算後の原子配置ならびに Common Neighbor Analysis (CNA)¹⁵⁾ により可視化した転位芯を示す。図 (a) は [001] 方向から全ての原子を透過して表示したものであり、セルに内接するように $\langle 110 \rangle$ および

$\langle \bar{1}10 \rangle$ 方向のひずみが認められる。図 (b) は Ni_3Al 部分の原子と、CNA で欠陥と判断された原子のみを表示したものである。界面上の濃く着色された原子は、fcc, hcp (積層欠陥に対応) のいずれにも該当しないと判断された原子であり転位芯に相当する。なお、fcc 中の転位と異なり、hcp と判断された原子は境界部分にある転位の交点にのみわずかに認められ (黒い転位芯中の白色)、界面転位は拡張していないことがわかる。界面転位の間隔はセルの寸法と半整合界面を作成する際の格子数によって決まり、48 個の Ni_3Al 格子と 50 個の Ni 格子の組み合わせでは Fig. 2 (b) の半分の周期で転位網が構成されることを別のシミュレーションで確認している。なお、初期緩和シミュレーション後のセルの寸法は x , y 方向が 17.60nm, z 方向が 17.78nm であった。 x , y 方向の寸法より計算される γ , γ' 相の格子長さはそれぞれ 0.352nm, 0.359nm となり、これを用いて z 方向のセル寸法を逆算すると $0.352 \times 25 + 0.359 \times 25 = 17.78nm$ となり一致する。なお、本ポテンシャルにおける Ni , Ni_3Al の平衡格子長さはそれぞれ 0.352nm, 0.357nm である。

γ' 相上下の γ/γ' 界面の原子構造の詳細を示すために、緩和計算後の原子位置ならびに初期配置からの移動量および方向を、(001) 面について 1 原子層毎に分けて表示したものが Fig. 3 である。全体を表示すると詳細が見えにくくなるので 4 分の 1 の領域のみ表示している。また、移動方向・量を示すベクトルはセル辺長で規格化した座標 ($0 \leq \bar{x}, \bar{y}, \bar{z} < 1$) で評価しており、矢印の大きさおよび色でベクトルの大きさを示している。ベクトルではなく点

Fig. 1 Simulation model.

(a) [001] view of all atoms at initial equilibrium

Fig. 2 Dislocation structure at initial equilibrium under $\sigma_m = 0$.

Fig. 3 Change in atom position on the layers just above and below Interface 1 and 2 under the equilibrium, with respect to the initial configuration.

となるため見にくいですが、青色が移動の少ない原子であり、緑→黄色→赤の順で移動量が大きくなる。初期配置作成の際には原始単位セル (Primitive Unit Cell) の4原子を含むセルを並べているので、模式 Fig. 4 に示したように板状の γ' 相の上下で界面の原子構造が異なる。上側は Al を含まない (001) 面が界面を形成し、下側では Al を含む (001) 面が界面となる。その違いも議論するため、それぞれ Interface 1, Interface 2 として Fig. 3 に表示した。最も明白な「溝」が認められるのは Interface 1 の 2nd layer (γ' 相側の Al を含まない (001) 面) である。Al を含む (001) 面が界面の Interface 2 では「溝」の開口が抑えられ、転位の交差部分近くのみ $[110]$ 方向の拡張が認められる。これらの γ' 相側の変化に比べ、 γ 相側の原子配置の変化は小さい。しかしながら、Interface 1 の 3rd layer (図 (c)) では、転位の交差部分近傍において、図右下付近では $[\bar{1}\bar{1}0]$ 方向、図左上付近では $[\bar{1}10]$ 方向の、転位線に沿った方向の原子移動が認められる。表示していない他の部分でも同様の原子移動が認められ、転位網全体としては時計回りとなっている。これらの原子構造を総合すると、界面転位は基本的には $[\bar{1}10]$ の転位線に対して垂直方向 ($[110]$) にずれを生じているので刃状転位であることがわかる。Interface 1 の転位の交差部分だけは、平行方向 ($[\bar{1}10]$) のずれも生じているのでらせん転位の性質を有することが示唆される。

3・2 引張シミュレーション

Fig. 5 に応力-ひずみ曲線を示す。図中には、界面平行方向 (x 方向) に引っ張った場合の結果も破線で示したが、界面転位網には変化を生じずに相変態を生じたので割愛する。一方、界面垂直方向の引張では、上に凸の非線形曲線となり、 $\varepsilon_{zz} = 0.117$ でピーク応力 $\sigma_{zz} = 18.5\text{GPa}$

Fig. 4 Schematic of atom configuration at the upper and lower interfaces.

を示した後応力が急減し 0 となった。Ni と Ni₃Al の材料特性は非常に近く、本ポテンシャルより得られる弾性係数 C_{11} はそれぞれ 244GPa および 246GPa¹⁴⁾ であるため、ピーク点の位置を除き応力-ひずみ曲線は Ni 単結晶の場合¹⁶⁾ とほぼ一致している。ただし、本シミュレーションでは横方向の変位を拘束しているため、弾性係数より求まるヤング率よりも応力-ひずみ曲線の勾配は大きくなる。著者らによる第一原理計算結果⁶⁾ でも、Ni, Ni₃Al 単結晶の弾性係数 C_{11} はそれぞれ 248GPa, 235GPa であるが、横方向変位拘束下の応力-ひずみ曲線はほぼ同一である。

界面垂直方向の引張変形下における、CNA 解析による転位挙動ならびに原子配置変化を Fig. 6 に示す。図中左の CNA 解析では fcc または L1₂ 以外と判定された原子を表示している。なお、 $t = 11700\text{fs}$ ($\varepsilon_{zz} = 0.117$) で応力急減を生じるまでは、原子配置には大きな変化が見られないので、図中右の原子配置は主として $\varepsilon_{zz} = 0.117$ の応力急減時の変化を示しており、左の CNA 解析と時間は対応していない点に注意されたい。ひずみ 0.075 までは、初

Fig. 5 Stress-strain curves (tension).

期の転位構造を保っているが、引張によって転位芯が界面に沿って板状に幅広くなる (図 (b)). その後、図 (c) 中に矢印で示したように界面転位を起点として γ , γ' 相中へ転位が発生し、応力-ひずみ曲線の非線形性が強くなる (応力上昇が鈍化する). アーチ状の転位線の後ろには積層欠陥 (黄色の原子) が残されており、アーチが leading partial であることがわかる. ここで、Interface 1 の界面転位からは γ 相側、Interface 2 のそれからは γ' 相側に転位が発生している点に注目されたい. その後、応力急減時には界面からの転位発生・拡張の“バースト”を生じる. 図 (d) でも確認できるように、Interface 1 から γ 相中に生じた転位は γ' 相中に発生した転位より速く拡張し、 $t=16000\text{fs}$ 近傍で Interface 2 に到達した. 図 (d) を詳細に観察すると、Interface 1 からの転位バーストは大きくループ状に成長しているのに比べて、Interface 2 では最初の界面転位近傍にのみ欠陥原子が存在する. $t=12500\text{fs}$ における Interface 1, 2 それぞれの CNA 解析結果を拡大して Fig. 7, 8 に示した. Interface 1 では、転位は γ' 相側にもループ状に成長しているのがわかる. このループは同一すべり面に発生した trailing partial により一本の「完全な」super partial を形成している. 一方、Interface 2 では、界面転位と平行にくさび状の積層欠陥が現れている. これは共役すべり面の部分転位が交差したために生じたものと考えられ、SFT (stacking fault tetrahedra) と本質的には同じである. そのため前縁が成長できなくなり、Interface 1 に比べて転位バーストが抑えられたものと結論づけられる. このように、 γ' 相の Al 原子が界面に存在するかどうかの違いで界面近傍の転位挙動が著しく変化することは特筆すべき点である.

Fig. 6 中右の原子配置変化を見ると、 $t > 15000\text{fs}$ 以降は多数のすべり線 (積層欠陥) が認められ、Interface 2 近傍の $L1_2$ 格子が乱れている. その後、多数の転位が Interface 2 に到達した結果、界面でのへき開を生じた (図 (h)). へき開面を拡大して、斜め上方から俯瞰したものを Fig. 9 に示す. 図中の太線は上側の γ' 相の端を、破線は初期の界面転位の位置を示している. 界面転位があったところには Al 原子が残っておらず、きれいにへき開している. Ni 単結晶のへき開¹⁶⁾では、すべりの交差部分からへき開が発生したが、本シミュレーションでも γ 相中を進行してきた転位と界面転位が交差した部分でへき開を生じたものと結論づけられる.

Fig. 6 Change in the morphology of dislocations on Interface 1 and 2 (left) and side views of the simulation cell (right) under z-tension.

Fig. 7 Magnified view of dislocation nucleation from Interface 1 ($t=12500\text{fs}$, $\epsilon_{zz}=0.117$).

3・3 圧縮シミュレーション

Fig. 10 に応力-ひずみ関係を示す. 比較のために、Fig. 5 で示した引張側の応力-ひずみ曲線も合わせて示している. また、界面平行方向 (x 方向) への圧縮を行った場合の応力-ひずみ曲線も破線で示したが、引張の時と同様、界面転位網には変化が見られずに相変態を生じたので割愛する. 界面垂直方向への圧縮では応力は単調に減少し、ひずみ $\epsilon_{zz}=-0.3$ で -130GPa にも達した.

Fig. 11 に z 方向圧縮変形下の転位ならびに原子配置変化を示す. 図中左の CNA 解析は $t \leq 7000\text{fs}$ ($|\epsilon_{zz}| < 0.07$), 右の原子配置変化は $t \geq 7000\text{fs}$ ($|\epsilon_{zz}| > 0.07$) の範囲を表示

Fig. 8 Magnified view of dislocation nucleation from Interface 2 ($t = 12500\text{fs}$, $\epsilon_{zz} = 0.117$).

Fig. 9 Magnified view of cleavage surface at Interface 2.

していることに注意されたい。図 (a) に矢印で示したように、 $\epsilon_{zz} = -0.03$ において、Interface 1 の界面転位を起点として γ' 相中に部分転位が発生する。その後、Interface 2 の界面転位からも転位が発生するが、 $t \leq 5000\text{fs}$ の範囲では γ 相中には転位は認められず、非弾性変形は主として γ' 相内に生じていることが示唆される (図 (b))。その後、転位は γ' 相中を成長し互いに交差するが、 $t = 7000\text{fs}$ 近傍から γ 相中にも、fcc, L1₂, hcp のいずれでもない判断される原子がいたる所に現れるようになる (図 (c))。Fig. 12 に示すように、 $t = 10000\text{fs}$ では γ 相中のほとんどすべての原子が中心対称性を失い、CNA 解析において「欠陥」と判断される。これは、fcc 構造において点対称な最近接原子の位置が、圧縮のアフィン変形によってつぶれた球体状になるためである。引張では転位の発生・運動が γ , γ' 相両方に生じて系全体の伸びが吸収される。一方、圧縮では転位は γ' 相にしか発生しないため、 γ 相の変形が吸収されず、 γ 相中のほとんどすべての原子が、初期の位置関係を保ったまま、圧縮のアフィン変形によって fcc でも hcp でもない「欠陥」となる。 $t = 20000\text{fs}$ ($\epsilon_{zz} = -0.2$) では、Fig. 11 (f) に見られるように γ'

Fig. 10 Stress-strain curves.

Fig. 11 Change in the morphology of dislocations on Interface 1 and 2 (left) and side views of the simulation cell (right) under z-compression.

相中にさらに多く転位を生じているが、やはり圧縮アフィン変形の割合が大きくなり γ' 相中の原子もすべて L1₂ でも hcp でもない「欠陥原子」と判断される。

4 結 言

Ni 基超合金の γ/γ' 界面におけるミスフィット転位の構造ならびに変形挙動を明らかにすることを目的として、格子数の異なる Ni および Ni₃Al 単結晶平板を接合したセルを用い、半整合界面を模擬した種々の分子動力学シミュレーションを行った。このとき、Ni₃Al 相側の原子構造について、Al 原子がない (001) 面が界面を形成する場合 (Interface 1) と、Al 原子がある (001) 面が形成する場合 (Interface 2) を区別して詳細に検討した。得られた結果を要約して以下に示す。

(1) 実験により観察されているように、 $\langle 110 \rangle$ および $\langle \bar{1}10 \rangle$ に網目状に配向したミスフィット転位を得た。

(2) 転位芯の原子構造を詳細に観察し、バーガースベ

Fig. 12 Snapshot of atoms which lose the central symmetry in the fcc or $L1_2$ structure ($\epsilon_{zz} = -0.1$, $t = 10000fs$).

クトルは基本的に転位線に垂直（刃状転位）であること、Interface 1 の場合のみ、転位の交差部近くで転位線に平行（らせん転位）となること、を明らかにした。

(3) 界面垂直方向に引張を与えた場合、界面転位を起点として部分転位が発生した。Interface 1 ではまず γ 相側に部分転位を生じ、その後 γ' 相側にも転位ループが発生・拡張した。

(4) Interface 2 ではまず γ' 相側に部分転位が発生したが、共役すべり面の他の部分転位と交差し、界面転位に平行なくさび状の積層欠陥を形成した。SFT (stacking fault tetrahedra) と本質的に同じであるこの構造は拡張することができず、Interface 2 に発生した部分転位は Interface 1 のそれに比べて拡張しなかった。

(5) 界面垂直方向に圧縮を与えた場合も、界面転位を起点とした部分転位の発生が認められた。引張の場合と異なり、部分転位の発生は γ' 相側にのみ生じた。Interface 1の方が Interface 2 より先に部分転位を生じるという差はあったが、引張時に見られた転位のロッキングは圧縮では生じなかった。

最後に、本研究の一部は平成 18 年度科学研究費補助金若手研究 B、特定領域研究ならびに基盤研究 B2 の援助を受けた。ここに記して謝意を表する。

参 考 文 献

- 1) K. Yashiro, M. Naito and Y. Tomita, "Molecular dynamics simulation on dislocation nucleation and motion at an apex of cuboidal γ' precipitate in Ni-based superalloy", Transaction of the Japan Society of Mechanical Engineers, series A, Vol.68, pp.573-579 (2002).
- 2) K. Yashiro, M. Naito and Y. Tomita, "Molecular dynamics simulation of dislocation nucleation and motion at γ/γ' interface in Ni-Based superalloy", International Journal of Mechanical Sciences, Vol.44, pp.1845-1860 (2002).
- 3) K. Yashiro, M. Naito and Y. Tomita, "Molecular dynamics simulation of edge dislocation piled at cuboidal precipitate in Ni-based superalloy", Transaction of the Japan Society of Mechanical Engineers, series A, Vol.69, pp.210-217 (2003).
- 4) K. Yashiro, Y. Tabata and Y. Tomita, "Different behavior between edge and screw dislocations at the γ/γ' interface of Ni-based superalloy : a molecular dynamics study", Transaction of the Japan Society of Mechanical Engineers,

series A, Vol.70, pp.690-695 (2004).

- 5) K. Yashiro, Y. Tabata and Y. Tomita, "Molecular dynamics study on the characteristics of edge and screw dislocations in gamma/gamma-prime microstructure in Ni-based superalloy", Solid Mechanics and Its Applications, Vol.115, IUTAM Symposium on Mesoscopic Dynamics of Fracture Process and Materials Strength, pp.59-68 (2004) Kluwer Academic Publishers.
- 6) K. Yashiro, K. Yamagami, K. Kubo and Y. Tomita, "Ab-initio lattice instability analysis on Ni and Ni_3Al single crystals", JSME International Journal, Vol.49, pp.100-106 (2006).
- 7) K. Yashiro, F. Kurose, Y. Nakashima, K. Kubo, Y. Tomita and H. M. Zbib, "Discrete dislocation dynamics simulation of cutting of γ' precipitate and interfacial dislocation network in Ni-based superalloys", International Journal of Plasticity, Vol.22, pp.713-723 (2006).
- 8) K. Yashiro, Y. Nakashima and Y. Tomita, "Discrete dislocation dynamics simulation of interfacial dislocation network in gamma/gamma-prime microstructure of Ni-based superalloys", Computer Modeling in Engineering and Sciences, Vol.11, pp.73-80 (2006).
- 9) J. X. Zhang, T. Murakumo, H. Harada and Y. Koizumi, "Dependence of creep strength on the interfacial dislocations in a fourth generation SC superalloy TMS-138", Scripta Materialia, Vol.48, pp.287-293 (2003).
- 10) J. X. Zhang, T. Murakumo, Y. Koizumi and H. Harada, "The influence of interfacial dislocation arrangements in a fourth generation single crystal TMS-138 superalloy on creep properties", Journal of Materials Science, Vol.38, pp.4883-4888 (2003).
- 11) J. X. Zhang, T. Murakumo, Y. Koizumi, T. Kobayashi, H. Harada and S. Masaki, Jr., "Interfacial dislocation networks strengthening a fourth-generation single-crystal TMS-138 superalloy", Metallurgical and Materials Transactions A, Vol.33, pp.3741-3746 (2003).
- 12) T. Aihara, Jr., T. Sho and Y. Kawazoe, "Molecular dynamics simulation on elastic behavior of Ni/ Ni_3Al interface with graded structure", Journal of the Japan Institute of Metals, Vol.62, pp.978-985 (1998).
- 13) A. F. Voter and S. P. Chen, "Accurate interatomic potentials for Ni, Al and Ni_3Al ", Materials Research Society Symposium Proceedings, Vol.82, pp.175-180 (1987).
- 14) Eds. J. H. Westbrook and R. L. Fleischer, "Intermetallic Compounds : Vol.1, Principles", pp.77-90 (1994) John Wiley & Sons.
- 15) J. D. Honeycutt and H. C. Andersen, "Molecular dynamics study of melting and freezing of small Lennard-Jones clusters", Journal of Physical Chemistry, Vol.91, pp.4950-4963 (1987).
- 16) K. Yashiro, T. Kitamura and R. Ohtani, "Atomic analysis of cleavage fracture in nickel crystal under tension with transverse constraint", Transaction of the Japan Society of Mechanical Engineers, series A, Vol.63, pp.2380-2386 (1997).