原子レベルの傾斜機能材料の分子動力学シミュレーション*

(材料組成を銅からニッケルへ線形に変化させた傾斜機能材料)

牧野正樹^{*1}, 辻 知章^{*2}, 野田直剛^{*2}

Molecular Dynamics Simulations of Atom-order Functionally Gradient Materials (Functionally Gradient Materials with linearly Changing Mixture Ratio from Copper to Nickel)

Masaki MAKINO, Tomoaki TSUJI and Naotake NODA

In order to analyze the atom-order functionally gradient materials (FGM), the molecular dynamics (MD) simulations are proceeded. Two kinds of FGM models, which are constructed with nickel and copper atoms, are made by putting the atoms at lattice points with respect to the mixture ratio. Firstly, the uniform lattice constant, that is the average value of the lattice constant of Ni and Cu, is used. The elastic constants are very different from those calculated by the mixture formulations for macro model, because the lattice constant of Ni and Cu is different each other. Secondly, the changing lattice constant, that is the lattice constant changes with respect to the mixture ratio, is used. By this model, the distribution of elastic constants along the gradient direction is in good agreement with that derived from the mixture formulations. Not only the elastic constants but also the stress distributions are obtained, and the difference between these two models are discussed.

Key Words: Molecular Dynamics, Functionally Gradient Materials, Elasticity, Computational Mechanics, Embedded Atom Method, Elastic Constants, Mixture Formulations, Copper, Nickel

1. 緒言

傾斜機能材料 (Functionally Gradient Materials, 以後 FGM と略記) は, その概念が生れた当初の目的である耐熱材料のみならず, 生体・医療分野における生体機能材料, 電子材料等に見られるエレクトロニクス材料など, 多分野にわたる応用が期待されている⁽¹⁾⁽²⁾. 現在の傾斜機能材料の解析では, 熱応力緩和型傾斜機能材料が主対象であり, 実用化に向けての広範な研究がなされている. 一方, ナノマシンやマイクロマニファクチャリング等に関連するミクロな傾斜機能材料を考える上で, 原子・分子レベルで形成される傾斜機能材料についての検討は必要不可欠である. 著者らはこれまでに, 原子・分子レベルの傾斜機能材料の解析手法の開発を目的として, 分子動力学法 (Molecular Dynamics, 以後 MD と略記) によるニッケル・銅原子からなる傾斜機能材料の物性値推定を行ってきた. 無

限平板モデルを用いて行われたヤング率推定⁽³⁾においては, 使用した 2 体原子間ポテンシャルが, 2 種原子を乱数的に配置した合金の性質を十分に表現し得ないこと, モデルを構成する原子総数が少なかったことにより, 意味のある結果は得られていない. 無限平板モデルの結果を基に提案した固定境界モデルによる物性値推定⁽⁴⁾では, 原子間ポテンシャルとして多体ポテンシャルである Embedded Atom Method (以下 EAM と略記)⁽⁵⁾⁽⁶⁾を使用したことにより, 精度面の問題が改善されると共に, 固定境界モデルにおける傾斜機能材料の物性値は, 材料の混合率変化を基に推測可能であることが分かった. これらのシミュレーションにおいては, 弾性定数等の物性値の推定が可能であるかどうかを確かめることを主目的としていたため, モデルの妥当性については, ほとんど検討されていない.

そこで, 本論文では, より精密なシミュレーションを行うとともに, 応力等の弾性定数以外のパラメータを用いて, 上記の 2 つのシミュレーションモデルの比較検討を行う. 無限平板モデルについては, 原子間ポテンシャルとして 2 体ポテンシャルに代わり EAM を用いてシミュレーションを行い, 弾性定数・応力の傾斜方向分

* 原稿受付 1998 年 6 月 19 日.

^{*1} 正員, 静岡大学大学院 (〒432-8561 浜松市城北 3-5-1).

^{*2} 正員, 静岡大学工学部.

E-mail: tgmmaki@eng.shizuoka.ac.jp
t-tsuji@eng.shizuoka.ac.jp

Fig. 1 The simulation model of Ni-Cu alloy with Ni-20%/Cu-80%. The black and white balls denote the Ni and Cu atoms, respectively.

Table 1 Comparison between the elastic constants obtained by the experiments at 0K and those obtained by the MD simulations at 1K.

Material	MD Simulations		Experiments ⁽¹⁰⁾	
	Ni	Cu	Ni	Cu
Young's modulus[GPa]	111	62.3	151	72.5
Poisson's ratio	0.398	0.425	0.366	0.415

布を求める。固定境界モデルについては、新たに、応力の傾斜方向分布および原子層の変位を示す。これらを基に、両モデルの有する特徴・問題点について検討する。また、原子レベルの傾斜機能材料を考える上での問題点、留意点に関して言及する。

2. 原子レベルにおける物性値混合則

マクロの傾斜機能材料の解析では、一般的に、以下の合金の性質を表す物性値混合則⁽⁷⁾⁽⁸⁾を用いてヤング率やポアソン比などの各種物性値の傾斜方向分布を設定している。

$$E = \frac{E_{Cu}[E_{Cu} + (E_{Ni} - E_{Cu})V_{Ni}^{2/3}]}{E_{Cu} + (E_{Ni} - E_{Cu})(V_{Ni}^{2/3} - V_{Ni})} \dots (1)$$

$$v = v_{Ni}V_{Ni} + v_{Cu}V_{Cu} \dots (2)$$

ここで、添字は各材料を表す。式(1),(2)を、原子レベルのFGMに適用するため、NiとCuの混合率 V_{Ni} , V_{Cu} を、NiとCuの1原子が占有する体積 Ω_{Ni} , Ω_{Cu} と原子の個数 N_{Ni} , N_{Cu} から、以下のように与える。

$$V_{Ni} = \frac{\Omega_{Ni}N_{Ni}}{\Omega_{Ni}N_{Ni} + \Omega_{Cu}N_{Cu}}, V_{Cu} = 1 - V_{Ni} \dots (3)$$

これらの混合則は巨視系の合金を対象としたものであり、原子レベルの合金の性質を表し得るかどうかは不明である。著者らは、原子レベルにおける合金の物性値混合則の妥当性について、Ni-Cu合金モデルを用いて検討している⁽¹⁾。ここでは、さらに詳細に検討を行う。

Fig. 2 The distribution of Young's modulus for Ni-Cu alloy model.

Fig. 3 The distribution of Poisson's ratio for Ni-Cu alloy model.

図1に示す x , y , z 方向に周期境界を与えたNi-Cu合金モデルを用いる。原子総数は864である。各格子位置における原子の種類を、NiとCuの混合率の設定値(Niの混合率: 0, 20, 40, 60, 80, 100%)を満足するように乱数を用いて決定することにより合金を作製する。また、Ni-Cu合金の平均格子定数 $a_{average}$ は、ニッケルと銅の格子定数 a_{Ni} , a_{Cu} および混合率 V_{Ni} , V_{Cu} を用いて以下のように設定する。

$$a_{average} = a_{Ni}V_{Ni} + a_{Cu}V_{Cu} \dots (4)$$

ここで、ニッケルと銅の格子定数 a_{Ni} , a_{Cu} はそれぞれ3.52 Å, 3.615 Åとする。シミュレーションの流れを以下に示す。

- 1) モデルを温度1Kで温度制御、緩和。
- 2) 緩和後、ひずみ0%における応力(10000時間ステップ分の平均値)を求める。
- 3) x 方向に垂直な周期境界の一つを移動させ、0.1%の引張りの垂直ひずみを与える。
- 4) モデルを温度1Kで温度制御、緩和。(40000時間ステップ以上)
- 5) ひずみ0.1%における応力(10000時間ステップ分の平均値)を求める。
- 6) ひずみ0%および0.1%における応力を基に、弾

Fig. 4 The simulation model of Ni-Cu FGM infinite plate of which the mixture ratio changes linearly. The black and white balls denote the Ni and Cu atoms, respectively.

性定数を求める。

分子動力学計算における時間ステップは1.0fsとした。温度制御は200ステップ毎に、速度スケールリングにより行う。また、統計力学的アンサンブルとしては、温度制御時にNVTカノニカルアンサンブル、緩和時にNVEカノニカルアンサンブルとなる。ひずみは、各方向についての周期境界間距離を基に求める。モデルの応力は、モデルを構成している全ての原子に生じる応力の平均とする。各原子に生じる応力は次式を用いて求めている⁽⁹⁾。

$$\sigma_{i(\alpha\beta)} = \frac{1}{2\Omega_i} \sum_{j(i \neq j)}^N f_{ij(\alpha)} r_{ij(\beta)} \quad (5)$$

ここで、 $\sigma_{i(\alpha\beta)}$ は*i*番目の原子に生じる応力テンソル、 Ω_i は*i*番目の原子の原子体積、 $f_{ij(\alpha)}$ は*i*番目の原子が*j*番目の原子から受ける力の α 方向成分、 $r_{ij(\beta)}$ は*i*番目の原子と*j*番目の原子の距離の β 方向成分、 N は*i*番目の原子の近接原子の数である。ヤング率とポアソン比は、等方性均質弾性体の構成式から求める。モデルの*y*、*z*方向の変位を拘束すると、ひずみの各成分のうち、 ε_{22} 、 ε_{33} 、 ε_{12} 、 ε_{23} 、 ε_{31} は零となる。このとき、弾性コンプライアンス C_{11} 、 C_{12} は、

$$C_{11} = \sigma_{11} / \varepsilon_{11}, C_{12} = \sigma_{22} / \varepsilon_{11} \quad (6)$$

となり、シミュレーションによる σ_{11} 、 σ_{22} 、 ε_{11} から得られる。ヤング率*E*とポアソン比 ν は、弾性コンプライアンス C_{11} 、 C_{12} から、以下のように求められる。

$$E = \frac{(C_{11} - C_{12})(C_{11} + 2C_{12})}{(C_{11} + C_{12})}, \nu = \frac{C_{12}}{C_{11} + C_{12}} \quad (7)$$

表1に、NiおよびCu単体からなるモデルによるMDシミュレーションの結果と実験値の比較を示す。ポテンシャル決定のために使用した物性値等の違いのため、実験値とシミュレーション結果にはずれがある。そこ

Fig. 5 The distribution of the mixture ratio of Ni in the FGM infinite plate model. The circles denote the mixture ratio which was obtained by counting the number of Ni atoms in each layer. The solid line denotes the expected value.

で、以下、式(1)、(2)の混合則から弾性定数分布を求める際に必要となるNiとCuの弾性定数 E_{Ni} 、 E_{Cu} 、 ν_{Ni} 、 ν_{Cu} には、表1のシミュレーション結果を用いる。Ni-Cu合金モデルにおけるNiの混合率に対するヤング率、ポアソン比の分布を、それぞれ、図2、図3に示す。図中の実線は、式(1)、(2)に表される混合則から得た値である。原子レベルのシミュレーションより得られたヤング率、ポアソン比は、マクロの混合則と極めてよく一致している。従って、2種原子を乱数的に配置することにより、均質合金の弾性定数を十分に表すことが出来ると言える。

3. 無限平板モデル

図4に示すように、*x*方向を傾斜方向とし、*y*、*z*方向に対し周期境界を与えた傾斜機能無限平板モデルを考える。著者らによる2体原子間ポテンシャルを用いたシミュレーション⁽³⁾では、モデルの原子総数が、千個程度と少なかったことと、ポテンシャル自体の欠陥のため、有意義な結果が得られなかった。ここでは、原子間ポテンシャルとしてEAMを使うとともに、扱う原子総数を数万個に増やし、精密なシミュレーションを行う。平均格子定数をモデル全体において一定とし、*x*、*y*、*z*方向は、それぞれFCC結晶の[100]、[010]、[001]方向とする。*x*方向については、FGM領域を原子層にして41層とし、Ni、Cuの領域はそれぞれ3層とする。*y*、*z*方向については、格子数14（原子層28層）とする。モデルの原子総数は、18424個である。各原子はFCCの格子点に配置され、格子欠陥は存在しない。原子を配置する際の平均格子定数は、NiとCuの格子定数（Ni：3.52 Å，Cu：3.615 Å）の平均値3.5675 Åとする。Niの混合率を平板の厚さ方向に、0%から100%まで線形に変化させることにより、材料組成に傾斜を与える。この混合率の設定が各原子層（*yz*平面）において満足されるよ

Fig. 6 The distribution of Young's modulus for FGM infinite plate model. The rough dotted lines denote the Young's modulus obtained by Ni-100% and Cu-100% infinite plate models with the average lattice constant $a_{\text{average}} = 3.5675\text{\AA}$.

Fig. 7 The distribution of Poisson's ratio for FGM infinite plate model. The rough dotted lines denote the Poisson's ratio obtained by Ni-100% and Cu-100% infinite plate models with the average lattice constant $a_{\text{average}} = 3.5675\text{\AA}$.

Fig. 8 The relationship between the average lattice constant and the elastic constants for Ni and Cu infinite plate model.

Fig. 9 Initial strain for FGM infinite plate model.

うに、各格子点上の原子の種類を乱数を用いて決定する。実際に作製したシミュレーションモデルのNiの混合率分布およびその設定値を図5に示す。シミュレーションモデルの混合率分布は、ほぼ設定通りに線形となっている。シミュレーションの流れを以下に示す。

- 1) 平板表面を形成する原子を拘束せず自由表面とし、温度 1K で温度制御、緩和。
- 2) 緩和後、ひずみ 0% における各原子層の応力、傾斜方向の原子層間距離を求める。(10000 時間ステップ分の平均値)
- 3) 平板の両表面を形成する 1 原子層を x 方向に移動させ、モデルに 0.1% の引張りひずみを与える。
- 4) モデルを温度 1K で温度制御、緩和。(40000 時間ステップ以上)
- 5) ひずみ 0.1% における各原子層の応力、傾斜方向の原子層間距離を求める。(10000 時間ステップ分の平均値)
- 6) ひずみ 0%, 0.1% における各原子層の応力、ひずみを基に、弾性定数の傾斜方向分布を求める。

各原子層に生じる応力は、その層を構成している全ての原子に生じる応力の平均とする。また、各原子層の傾斜方向のひずみは以下のように求める。まず、各原子層の位置を、その層を構成している全原子の位置の平均として求める。次に、各層について、その層の両側に隣接する原子層（傾斜方向について i 番目の原子層の場合、 $i-1$ 番目と $i+1$ 番目の 2 層）の層間距離を求める。この原子層間距離の変形前後の変化を基に、各原子層におけるひずみを求める。また、周期境界が、シミュレーションの全過程において固定されているため、 y, z 方向のひずみは、常に零となる。

ヤング率、ポアソン比の傾斜方向分布をそれぞれ、図 6、図 7 に示す。図中の実線は、式(1)、(2)の混合則から得た値である。シミュレーションによるヤング率の分布は、Ni の混合率に対しほぼ線形に増加しており、混合則と変化の傾向は相似であるが、Cu 配分の多い領域ではヤング率が大きく、Ni 配分の多い領域では小さく、全体としては、混合則と比較し混合率に対するヤング率の変化がかなり小さい。さらに、ポアソン比は、混合

Fig. 10 The distribution of stresses for the FGM infinite plate model. (The number of lattices in FGM, Ni and Cu regions along the x direction is five.)

Fig. 11 The surface restrained FGM model. The average lattice constant changes linearly along the x direction. The black and white balls denote the Ni and Cu atoms, respectively.

則に比べ、完全に逆転した傾向を示している。これらの理由として、原子を配置する際の平均格子定数を、モデル全領域において一定としたことが考えられる。そこで、Ni および Cu 単体からなる無限平板モデルを作成し、平均格子定数 3.52, 3.54375, 3.5675, 3.59125, 3.615 Å それぞれについて、弾性定数とポアソン比を求めた結果を図 8 に示す。EAM では、高圧縮領域において、ヤング率は増加、ポアソン比は減少する。逆に高引張領域においては、ヤング率は減少、ポアソン比は増加する。この現象は、第一原理に基づいた FCC 金属の体積弾性率の計算結果とも一致する⁽¹¹⁾。すなわち、無限平板モデルでは、平均格子定数を 3.5675 Å で一定としているため、図 9 に示すように、Cu 配分の多い領域では圧縮ひずみが、Ni 配分の多い領域では引張ひずみが生じる。これにより、高圧縮となる Cu 配分の多い領域では、ヤング率は増加、ポアソン比は減少し、高引張となる Ni 配分の多い領域では、その逆となる。その結果、マクロの混合則と無限平板モデルによるシミュレーション結果の不一致が生じると考えられる。また、上記

Fig. 12 The distribution of the mixture ratio of Ni and the average lattice constant for the surface restrained FGM model. The circles denote the mixture ratio which was obtained by counting the number of Ni atoms in each layer. The solid line denotes the expected value.

Fig. 13 The boundary condition of the surface restrained FGM model. The atoms shown by black balls are fixed along the normal direction to the surface.

の初期ひずみの存在が、混合則とシミュレーション結果の不一致の原因であるならば、図 8 に示した、平均格子定数を 3.5675 Å とした Cu, Ni 単体の無限平板モデルにおける弾性定数と、FGM 無限平板モデル (平均格子定数 : 3.5675 Å) の Cu-100%, Ni-100% における弾性定数は一致するはずである。そこで、図 6, 図 7 に、平均格子定数を 3.5675 Å とした Ni および Cu 単体の無限平板モデルによる弾性定数を破線で示す。これらの値は、FGM モデルの Cu-100%, Ni-100% における値に近く、この点からも、初期ひずみが主要原因であることが確認される。

さらに、平均格子定数の応力分布に対する影響を調べるために、図 10 に無限平板モデルにおける、各原子層 (yz 平面) の平均応力の傾斜方向分布を示す。FGM 領域と共に Ni, Cu 領域の応力状態についても検討対象となるため、Ni, Cu, FGM 領域の厚さをそれぞれ x 方向に 5 格子とし、Ni, Cu 領域を拡大したモデルを使用している。無限平板モデルでは、上記のモデル構造に起因して、Ni, Cu 領域では、 y, z 方向に大きな引張お

Fig. 14 The distribution of Young's modulus for the surface restrained FGM model.

Fig. 15 The distribution of Poisson's ratio for the surface restrained FGM model.

よび圧縮応力が生じている。また、FGM領域において応力は、Niの混合率分布に応じて線形に変化している。

4. 平均格子定数を傾斜方向に線形に変化させた

固定境界モデル

無限平板モデルにおけるシミュレーション結果と混合則の相違は、モデルの構造から生じる初期ひずみによるものである。そのため、この初期ひずみが生じない構造のモデルであれば、混合則とシミュレーション結果は一致すると思われる。著者らは、図11に示す、 y 、 z 方向に周期境界を与えず、材料組成の変化に従って平均格子定数を線形に変化させたモデルを考案し、弾性定数推定を行った⁽⁴⁾。このシミュレーションにより、初期ひずみが生じない場合の弾性定数の傾斜方向分布は、マクロの物性値混合則と同様の分布となることが確認された。ここでは、弾性定数の傾斜方向分布と共に、新たに応力の傾斜方向分布および原子層の変位を示し、固定境界モデルの構造について詳細に検討する。

固定境界モデルの x 、 y 、 z 方向は、それぞれFCC結晶の $[100]$ 、 $[010]$ 、 $[001]$ 方向とする。 x 方向については、Ni、Cu領域は原子層にして5層、FGM領域は原子層にして21層とし、 y 、 z 方向の格子数は13（原子層27

Fig. 16 The distribution of stresses for the surface restrained FGM model. (The number of lattices in FGM, Ni and Cu regions along the x direction is five.)

層)とする。モデルの原子総数は、11300個である。各原子はFCCの格子点に配置され、格子欠陥は存在しない。図12に、シミュレーションモデルのNiの混合率分布およびその設定値と、各原子層(yz 平面)の平均格子定数の傾斜方向分布の設定値を示す。Niの混合率を、 x 方向に0%から100%まで線形に変化させることにより材料組成に傾斜を与える。この混合率の設定が各原子層(yz 平面)において満足されるように、原子の種類を乱数により決定する。ここで、固定境界モデルでは、初期ひずみが生じないように、原子を配置する際の平均格子定数を傾斜方向に変化させる。 i 番目の原子層(yz 平面)の平均格子定数 $a_{average}^i$ は、2章のNi-Cu合金の場合と同様に、NiとCuの混合率を基に次式を用いて設定する。

$$a_{average}^i = a_{Ni} V_{Ni}^i + a_{Cu} V_{Cu}^i \dots \dots \dots (8)$$

ここで、 a_{Ni} 、 a_{Cu} はニッケルと銅の格子定数、 V_{Ni}^i 、 V_{Cu}^i は i 番目の原子層におけるNiとCuの混合率である。図12に、破線で平均格子定数の傾斜方向分布を示す。この平均格子定数の傾斜方向分布を保持するために、図13のモデル断面図に示すように、表面から3層分の原子層を形成する原子については、表面に対し垂直方向の運動を拘束する。シミュレーションの流れを以下に示す。

- 1) 温度1Kで温度制御、緩和。
- 2) 緩和後、ひずみ0%における各原子層の応力、傾斜方向の原子層間距離を求める。(10000時間ステップ分の平均値)
- 3) (100)表面を形成する拘束された原子(両表面から各3層)を移動させ、 x 方向に0.1%の引張りひずみを与える。
- 4) モデルを温度1Kで温度制御、緩和。(40000時間ステップ以上)

Fig. 17 The displacement of the atoms for the surface restrained FGM model. (The number of lattices in FGM, Ni and Cu regions along the x direction is five.) The horizontal axis denotes the displacement in the x direction of the atoms from the initial position.

5) ひずみ0.1%における各原子層の応力, 傾斜方向の原子層間距離を求める。(10000時間ステップ分の平均値)

6) ひずみ0%, 0.1%における各原子層の応力, ひずみを基に, 弾性定数の傾斜方向分布を求める。

各原子層に生じる応力は, その層を構成している拘束されていない原子に生じる応力の平均として求める。各原子層の傾斜方向のひずみは無限平板モデルと同様に求める。また, y , z 方向に垂直な表面が全シミュレーション過程において拘束されているため, y , z 方向のひずみは, 無限平板モデルと同じく常に零となる。

ヤング率とポアソン比の傾斜方向分布を, 図14, 図15に示す。図中の実線は, 式(1), (2)の混合則から求めた値である。図6, 図7に示す無限平板モデルと異なり, 固定境界モデルでは初期ひずみが生じないため, FGM領域の全体において混合則と良く一致している。従って, 図2, 図3に示される合金モデルの結果とも一致する。以上より, 初期ひずみが生じないようなFGM構造を構成すれば, 原子レベルのNi-Cu傾斜機能材料の弾性定数は, 合金と同様に材料組成によってほぼ決定されることが分かる。

図16に, 固定境界モデルにおける各原子層 (yz 平面)の平均応力の傾斜方向分布を示す。無限平板モデル

Fig. 18 The curvature of FGM region. (n , t , ρ and δ denote the number of lattices in circumferential direction, the thickness of FGM region, the radius of curvature and the maximum deflection at the inner surface of shell, respectively.)

Fig. 19 The circular ring of FGM. (t and ρ denote the thickness of FGM region and the radius at the inner surface, respectively.)

と同じく, Cu, Ni, FGM領域の厚さはそれぞれ x 方向に5格子としている。無限平板モデルでは, Ni領域において最大引張応力, Cu領域において最大圧縮応力が生じ, その応力差は約4GPaである。固定境界モデルでは, Ni-FGM境界において引張, Cu-FGM境界において圧縮の最大応力が生じ, その応力差は約2GPaである。無限平板モデルと比較し, 固定境界モデルに生じる応力差は半減している。また, 無限平板モデルでは, Ni, Cu領域に生じる応力は一定であるが, 固定境界モデルの場合, FGM領域から離れるに従い, 応力は減少する傾向を示している。

次に, 上記の応力の発生原因について, 原子の位置を基に検討する。図17に, Ni-FGM境界およびCu-FGM境界を形成し, z 方向についてモデル中央に位置する原子(図17において黒点で表された原子)の x 方向変位を示す。応力分布を求めたモデルと同様に, Cu, Ni, FGM領域の厚さは, それぞれ x 方向に5格子としている。Ni-FGM境界およびCu-FGM境界に位置する原子の列は, x 軸に対して負の方向に(Ni領域からCu領域に向けて)凸形状を成すことが分かる。この原子列のたわみは, 原子層(yz 平面)としては, 球面状の彎曲として観察される。Ni-FGM境界およびCu-FGM境界以外の原子層においても同様の彎曲が生じており, FGM領域全体としては, 球殻を形成する。図18に示すように, FGM領域のみで球殻構造を成す場合, FGM領域の

平均格子定数の傾斜方向分布から予想されるNi-FGM境界の曲率半径 ρ および最大たわみ量 δ は次式で表される。

$$\rho = \frac{a_{Ni}}{a_{Cu} - a_{Ni}} t \dots \dots \dots (9)$$

$$\delta = \frac{a_{Ni}}{a_{Cu} - a_{Ni}} t \left[1 - \cos \frac{n}{2t} (a_{Cu} - a_{Ni}) \right] \dots \dots \dots (10)$$

ここで、 t はFGM領域の厚さ、 n は円周方向の格子数である。FGM領域の厚さを5格子分とすると、Ni-FGM境界において曲率半径 $\rho = 661 \text{ \AA}$ 、最大たわみ量 $\delta = 0.396 \text{ \AA}$ となる。また、図17を基に、最小2乗法によりNi-FGM境界の曲率半径および最大たわみ量を求めると、それぞれ $\rho = 1923 \text{ \AA}$ 、 $\delta = 0.12 \text{ \AA}$ となる。予想値と比較し、シミュレーションから得られた曲率半径は大きく、最大たわみ量が小さいのは、FGM領域の彎曲が、その両側に接合されたNi、Cu領域により抑制されているためと考えられる。つまり、曲面を形成しようとするFGM領域と、平面を保持しようとするNi、Cu領域が接合されているために、その境界において応力が発生する。この場合、球殻の内側に相当するNi-FGM境界では引張、外側となるCu-FGM境界では圧縮応力が生じると考えられ、図16の応力の傾斜方向分布と一致する。

完全結晶からなるFGMが彎曲するという性質を考慮すると、初期応力を最小とすることを目的としたモデルの形状としては、図19に示す、半径方向に材料組成が線形に変化するFGM領域のみで形成される円環が考えられる。同様に曲面からなる形状として円筒、球殻が考えられるが、円筒は、軸方向に周期境界を与えるため、無限平板と同じく軸方向に初期ひずみが生じる。球殻は、半径の異なる複数の円環を積み重ねた形状であり、その接合部において何らかの格子欠陥の導入が必要となる。このように格子欠陥を持たず、なおかつ初期応力の発生を抑制することができるFGMの形成は、極めて困難である。

5. 結言

原子レベルの傾斜機能材料を構成するために、NiとCu原子を用いたFCC結晶構造を有する2つの典型的モデルを提案し、それぞれについて、弾性定数、応力分布等を求め比較検討を行った。以下に、両モデルの特徴、問題点をまとめる。

1) 無限平板モデル (格子定数一定)

- ・Cu、Ni配分の多い領域において、大きな初期ひずみ、応力が発生。

- ・弾性定数の傾斜方向分布は、初期ひずみの存在により、マクロの物性値混合則と異なる傾向を示す。

2) 固定境界モデル (格子定数を傾斜方向に変化)

- ・弾性定数の傾斜方向分布は、マクロの混合則とよく一致。
- ・FGM領域の原子層の彎曲により、主にNi-FGM、Cu-FGM境界において応力が生じるが、無限平板モデルと比べ、その大きさは半減。

無限平板モデルに生じる初期応力を緩和することができる固定境界モデルにおいても、初期応力を無くすることはできず、また、傾斜方向に垂直な面が球面状に彎曲することが分かった。言い換えれば、完全な結晶構造を有するFGM構造モデルを初期応力が生じないように形成することは、極めて困難である。従って、初期応力を低減し、かつ、原子層が平面に近い状態を保つ安定な構造を得るためには、転位等の格子欠陥の導入が必要である。

文献

- (1) 宮本, 金属, 67 (1997), 105-116.
- (2) 新野・若松, 新素材, 4-1 (1993), 64-70.
- (3) Tsuji, T., Noda, N. and Fukazawa, M., Computational Mech., 2 (1995), 2371-2376.
- (4) Makino, M., Tsuji, T. and Noda, N., Proceeding of the second International Symposium of Thermal Stresses and Related Topics, (1997), 319-322.
- (5) Baskes, M. I. and Daw, M. S., Phys. Rev. B, 29 (1984), 6443-6453.
- (6) Foiles, S. M., Baskes, M. I. and Daw, M. S., Phys. Rev. B, 33 (1986), 7983-7991.
- (7) Kingery, W. D., Bowen, H. H. and Uhlmann, D. R. (小松ほか共訳), セラミックス材料科学入門応用編, (1989), 614, 内田老鶴圃出版.
- (8) 近藤, 多孔材料, (1986), 169-177, 技報堂.
- (9) Hashimoto, M., Ishida, Y., Yamamoto, R. and Doyama, M., Acta Metal., (1984), 32, 1.
- (10) Simmons, G. and Wang, H., Single Elastic Constants and Calculated Aggregate Properties, (1971), MIT Press.
- (11) T. Asada and K. Terakura, Phys. Rev. B, 46 (1992), 13599-13602.