EAM ポテンシャルによる Ni-Al 合金における形状記憶効果の
分子動力学シミュレーション*上原拓也^{*1}, 玉井崇登^{*2}Molecular Dynamics Simulation on Shape-memory Effect
in Ni-Al Alloy by Using EAM PotentialTakuya UEHARA^{*3} and Takato TAMAI^{*3} Department of Energy Conversion Science, Kyoto University,
Yoshida Hon-machi, Sakyo-ku, Kyoto-shi, Kyoto, 606-8501 Japan

Molecular dynamics simulations on the shape memory effect are carried out by using the EAM potential for Ni-Al alloy. As a preliminary calculation, the stable crystal structures are investigated, so that both bcc and martensite phases are obtained and the temperature-dependent transformation can occur. As a result, it is revealed that 60-70% Ni models show the martensite structure at low temperature, and bcc at high temperature, and the transformation temperature depends on the Ni content. In order to simulate the shape-memory behavior, a series of loading, unloading, heating, and cooling conditions is imposed for 68% Ni model. In the loading process, the model is deformed by the motion of variant boundaries, and a large deformation is observed. The deformation does not disappear even the model is unloaded. However, the model recovers the original shape when it bears the heat treatment process incorporating the phase transformation to bcc structure.

Key Words: Molecular Dynamics, Computational Mechanics, Numerical Analysis, Shape Memory Effect, Martensite, Phase Transformation, Embedded Atom Method, Nickel-Aluminum Alloy

1. 緒 言

形状記憶効果は, Ti, Ni, Fe, Cu などを含む様々な合金系で現れることが見いだされ, 近年では機能性材料として, 多くの工学分野で用いられている。形状記憶のメカニズムは, 主にマルテンサイト変態と, その温度および応力依存性に基づいて説明がなされており, その模式図を図 1 に示す⁽¹⁾。この場合, 母相は体心立方型の構造であり, 高温ではこの相が安定であるが, 冷却するとマルテンサイト変態が起こる。このとき生成するマルテンサイト相は, いくつものバリエーションから形成され, それらの方位はランダムである。そのため, マルテンサイト構造の局所的な変形は互いに打ち消され, 全体的な変形は生じない。図 1 では 2 次元的な模式図を表しており, 図 1 (b) は異なる方位を持つバリエーション層が交互に現れ, その境界面が双晶面をなしている状態を示している。実際には, マルテンサイ

トのバリエーション晶は原子オーダーよりも大きなスケールとなるが, 本研究ではこのように数原子レベルで層状に分布した状態を考えることとする。この状態に応力を負荷すると, その負荷の方位に対して不安定な方位をもつバリエーションが, より安定な方位のバリエーションへと方位を変え, 双晶面が消失する。この現象が次々に起こることによって, モデルの巨視的な変形が生じ, 負荷を取り除いたときには, 弾性回復するのみで, 元の形状までには戻らない。図 1 (c) は, すべての双晶面がなくなり, 均一な方位となるまで負荷した状態を示している。この変形した状態から, 変態温度を越えるまで加熱すると, 体心立方構造への相変態が生じる。この構造は, 変態前のバリエーションの方位には無関係であるため, 冷却してマルテンサイト変態を起こすときには, 再びランダムな方位をとり, 巨視的な変形は生じない。このように, 負荷によって変形が生じ, 加熱, 冷却に伴う相変態によって元の形状が回復することとなる。その他のメカニズムとして, 常温では bcc 構造であり, 負荷に伴う応力誘起マルテンサイト変態によって変形が起こる場合もあるが, 変態温度と逆変態温度およびそれらの応力依存性を考慮すると, 同様な

* 原稿受付 2004 年 6 月 7 日。

^{*1} 正員, 京都大学大学院エネルギー科学研究科 [現: 名古屋大学大学院工学研究科 (〒464-8603 名古屋市中区千種区不老町)]。^{*2} 京都大学大学院エネルギー科学研究科 (〒606-8501 京都市左京区吉田本町)。

E-mail: uehara@mech.nagoya-u.ac.jp

Fig. 1 Illustration of the shape-memory effect related with martensitic transformation.

メカニズムとして考えることができる。

微視的な考察としては上述のような説明がなされる一方、実用上の問題としては、実験によって得られる応力ひずみ曲線や温度ひずみ線図、変態線図などが用いられ、力学的挙動については連続体理論を用いて議論されることが多い⁽¹⁾。しかし、近年では、ナノテクノロジーの発展とともに、ナノレベルでの材料挙動の把握が不可欠となっており、巨視的な実験データや解析手法は必ずしも適用できない。また、図1に示されるような一連の変形・変態過程を動的に直接観察することは困難であり、このメカニズムに関する詳細な考察も十分にはなされていない。

このようなナノスケールでの考察には、分子動力学シミュレーションが有効である。実際に形状記憶効果を示す合金のうち、分子動力学法による研究としては、例えば Ni-Al 合金について、Foiles, Daw⁽²⁾ や Chen, Srolovitz, Voter⁽³⁾ によって Ni_3Al の安定構造を再現する EAM ポテンシャルが提案されている。また、Rubini, Ballone⁽⁴⁾ や Farkas ら⁽⁵⁾ は、温度や Ni 含有率などに依存した bcc 構造とマルテンサイト構造の安定構造が EAM ポテンシャルによって再現できることを示している。しかし、応力負荷による変形や加熱冷却による相変態など、形状記憶効果と直接関連づけた動的な解析はほとんどなされていなかった。最近になり、著者らは Ni-Al 合金について⁽⁶⁾⁻⁽⁸⁾、また Sato らは Ni-Ti 合金について⁽⁹⁾、応力および温度変化による相変態の解析を試みているが、形状記憶効果のメカニズムについて十分な考察はできていない。そこで本研究では、まず EAM ポテンシャルを用いた Ni-Al 合金の分子動力学

学計算での安定構造を確認した後、せん断応力負荷、除荷、加熱、および冷却という一連の条件を与えることによって形状記憶効果の再現を図り、そのメカニズムについて原子レベルからの考察を行う。

2. EAM ポテンシャルと安定構造

2.1 EAM ポテンシャル 分子動力学法では、原子 i に働く力 F_i は、系全体のポテンシャルエネルギー Φ から求められる。EAM (Embedded Atom Method) ポテンシャルでは、 Φ は次のように表される^{(10),(11)}。

$$\Phi = \sum_i F(\rho_i) + \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} \phi_{ij}(r_{ij}) \quad (1)$$

ここで、 F は埋め込み関数、 ρ_i は原子 i の位置における電子密度、 ϕ_{ij} は 2 原子 i, j 間の二体間ポテンシャル、 r_{ij} は 2 原子 i, j 間の距離である。電子密度 ρ に関しては、多くの文献により詳細な検討がなされており、本研究では、Clementi, Roetti による以下の形式⁽¹²⁾を用いる。

$$\rho_i = \sum_{j \neq i} \tilde{\rho}(r_{ij}) = \sum_{j \neq i} \left\{ N^s \tilde{\rho}^s(r_{ij}) + N^d \tilde{\rho}^d(r_{ij}) \right\} \quad (2)$$

ただし、

$$\tilde{\rho}^s(r_{ij}) = \tilde{\rho}^d(r_{ij}) = \left| \sum_l C_l R_l \right|^2 / 4\pi, \quad (3)$$

$$R_l = \frac{(2\zeta_l)^{n_l+1/2}}{\{(2n_l)!\}^{1/2}} r_{ij}^{n_l-1} \exp(-\zeta_l r_{ij}) \quad (4)$$

である。ここで、 s, d は最外殻電子の軌道を表しており、 N^s, N^d, C_l, ζ_l および n_l は原子の種類に依存するパラメータである。多くの金属原子に対するこれらの値は Clementi, Roetti によって与えられており、本研究で用いる Ni および Al に対する値を表1に示す。ただし、Al については、最外殻は p 電子となるが、上記の d 電子に対する式を用いる。また、埋め込み関数 F については、Rose らによるユニバーサル関数を用いる方法が提案されており⁽¹³⁾、本研究では以下の関数形を用いる^{(6),(7)}。

$$F(\rho) = k_1 \rho^{1/2} + k_2 \rho + k_3 \rho^2 \quad (5)$$

ただし、係数 k_1, k_2, k_3 はそれぞれ Ni, Al に対して求めた値であり、表1に示した通りである。

二体項 ϕ_{ij} については、以下の形式を用いる⁽⁴⁾。

$$\phi_{ij}(r_{ij}) = Z_i(r_{ij})Z_j(r_{ij})/r_{ij}, \quad (6)$$

$$Z(r_{ij}) = Z_0(1 + \beta r_{ij}^\gamma) \exp(-\alpha r_{ij}) \quad (7)$$

Table 1 EAM parameters for Ni and Al in the units of eV for energy and Å for length.

	Ni	Al	Ni				Al			
Z_0	10	3	I	n_I	ζ_I	C_I	I	n_I	ζ_I	C_I
α	1.554	1.3	s 1	1	54.88885	-0.00389	s 1	1	26.89394	-0.00452
β	0.352	1.5	2	1	38.48431	-0.02991	2	1	20.27618	0.08395
ν	0.5	0.5	3	2	27.42703	-0.03189	3	2	9.45860	-0.11622
N^s	1.7	0.76	4	2	20.88204	0.15289	4	2	6.86435	-0.18811
N^d	8.3	2.24	5	3	10.95707	-0.20048	5	3	3.35342	0.54265
k_1	-26.883	-33.372	6	3	7.31958	-0.05423	6	3	2.09388	0.55020
k_2	-34.040	43.995	7	4	3.9265	0.49292	p 1	2	13.62535	-0.04475
k_3	-75.016	-186.75	8	4	2.15289	0.61875	2	2	6.90762	-0.14977
			d 1	3	12.67582	0.4212	3	3	3.18100	0.26788
			2	3	5.43253	0.70658	4	3	1.72743	0.80384

Fig. 2 Phase diagram obtained by MD simulations and the configuration of atoms of bcc and martensite.

ここで, Z_0 , ν , α および β は原子 i, j の種類に依存するパラメータであり, 本研究で用いる Ni, Al 各原子に対する値⁽⁴⁾を表 1 に示す. ただし, 表 1 における数値は, eV および Å を単位とした値である.

2.2 安定構造の解析モデル 合金系においては, 各元素の含有率によって安定な構造が変化し, その安定構造は温度にも依存する. そこで, 前項に示したポテンシャルによってどのような構造が安定となるかを調べるため, 温度一定の分子動力学計算を行う.

Fig. 3 Potential energy for various variant angles α with various edge ratio L_z/L_x , where $r_0=1/\sqrt{2}$ represents the ratio for bcc structure.

初期配置としては, まず体心立方格子の格子点に原子を配置し, 単位セルの頂点に Ni, 体心位置に Al 原子を配置した構造を作る. これは, NiAl の安定構造である. Ni が $x\%$ ($x > 50$) であるモデルを作成する場合, この配置から, 乱数を用いてランダムに Al 原子を選択し, それを Ni 原子に置き換える操作を, Ni が

$x\%$ となるまで繰り返す。計算モデルの x, y, z 軸には、それぞれ bcc 構造の $[110], [\bar{1}10], [001]$ 方向をとり、各方向に 6 単位セルを並べたモデルとする。このとき、計算セルの長さは、 $L_x=L_y=\sqrt{2}L_z$ となり、総原子数は 864 である。このモデルに周期境界条件を与え、圧力は $p=0$ となるように各辺の長さを制御し、設定温度 T_0 における分子動力学計算を行う。ただし、温度制御には速度スケリング法を用い、1 時間ステップを $\Delta t=1.5$ fs として、20000 step までの計算を行う。

2.3 安定構造の解析結果 最終的に得られた構造をまとめたのが図 2 である。図 2 (a) における○印の各点においては、該当する温度および Ni 含有率においてマルテンサイト構造が得られたことを表しており、●印は bcc のまま変化しなかったことを表している。また、図 2 (b), (c) は得られた bcc およびマルテンサイト構造を表しており、それぞれ 60% Ni, および 68% Ni モデルにおいて $T=10$ K で得られた構造である。ただし、淡い色で表した原子は Ni 原子、濃い色の原子は Al 原子を表している。図中に示した通り、bcc 構造では単位格子が正方形となるのに対し、マルテンサイト構造では単位格子が傾いた構造になるため、構造の判定は原子配列図から行うことができる。

この計算において、初期の合金元素の配置には乱数を用いるため、同じ Ni 含有率に対する計算でも、得られる結果は必ずしも一定とはならない。そこで、図 2 (a) の各点に対しては、それぞれ 2 回以上の計算を行ったため、マルテンサイト構造が得られる場合と得られない場合がある点が存在している。図 2 (a) を全体的に見ると、Ni が 62% より少ない場合には、温度に関わらずマルテンサイト構造は得られないのに対し、Ni が 62% を越えると低温領域でマルテンサイト構造、高温域では bcc 構造が得られ、その遷移温度は高 Ni ほど高温となることがわかる。

ここで、Ni 含有率によって安定構造が異なる要因を確認した結果が図 3 である。これは、図 1 (c) で表されるマルテンサイト構造について、バリエーションの角度 α および、単位セルの軸比 L_z/L_x を変えたときのポテンシャルエネルギーを表した図である。ただし、 $r_0=1/\sqrt{2}$ として、 $L_z/L_x=1.0 r_0$ 、 $\alpha=90^\circ$ のときが bcc 構造を表している。Ni が 50% である場合を示した図 3 (a) では、 $L_z/L_x=1.0 r_0$ 、 $\alpha=90^\circ$ のときに最もポテンシャルが低くなっており、bcc 構造が安定となることがわかる。これに対し、Ni が 68% の場合、図 3 (b) に示すように、 $L_z/L_x=1.0 r_0$ の場合は同様に $\alpha=90^\circ$ のときにポテンシャルが低くなるが、それ以外の軸比においては、 $\alpha=75\sim 85^\circ$ で極小値をとり、全体における最

Fig. 4 Initial configuration of atoms and controlling profile of strain and temperature.

小値は $L_z/L_x=0.90 r_0$ 、 $\alpha=79^\circ$ のときとなる。この構造がマルテンサイト構造に相当し、bcc よりもこの構造が安定となることを示している。

3. 形状記憶効果のシミュレーション

3.1 計算モデルと条件 前節の結果から、本研究では、マルテンサイトと bcc の変態が予測できる 68% Ni モデルを用い、形状記憶効果のシミュレーションを行う。図 4 に初期配置および計算条件を示す。図 4 (a) に示した初期構造はマルテンサイト構造であり、 x 軸に平行で向きの異なるバリエーション層が、 y 軸方向に 1 層ずつ交互に積層している。境界条件としては、全方向に周期境界条件を与え、1 時間ステップは、 $\Delta t=1.5$ fs とする。

このモデルに対し、図 4 (b) のような負荷および温度条件を与える。まず、初期条件から 2000 step の緩和計算の後、12000 step までを Stage I とし、 x 軸方向にせん断負荷を加える。せん断負荷中の温度は 200 K とする。負荷の方法としては、系全体に一定のせん断変形を与える方法とする。すなわち、系全体の 3 軸を H_x, H_y, H_z とすると、 H_y を x 方向に一定量ずつ傾けていく。このとき、 x, y, z 方向の圧力成分は 0 となるように、各軸の長さを変化させる。せん断ひずみ γ は、すべてのバリエーションの方位が揃ったときの値を考慮し、

Fig. 5 Variation of the configuration of atoms and the variant orientation.

最大で $\gamma=0.33$ となるまで負荷する。所定のひずみまで変形させた後、15000 step までの Stage II では、除荷を行う。ここでは、Parrinello-Rahman の方法で、せん断応力も含めて応力が 0 となるように設定し、永久変形の有無を調べる。その後、25000 step までを Stage III として、加熱を行う。温度制御には速度スケールリング法を用い、加熱は設定温度を 1 step 毎に変化させることによって行う。図 2 (a) から、68% Ni の変態温度は 400~600 K であることから、それよりも十分高い温度となる 1000 K まで、10000 step をかけて加熱する。1000 K に 3000 step 間保持した後、最後に Stage IV として 10000 step をかけて冷却を行い、温度、負荷状態ともに初期の状態に戻す。

3.2 せん断負荷および除荷過程 一連の過程における原子配列の変化を図 5 に示す。ただし、図中に記した折線は、バリエントの向きを明示したものである。初期配置では、バリエントは交互に左右を向いており、バリエント層の総数は 12 である。このモデルにせん断負荷を加えていくと、左向きバリエントが右向きへと変化する。図 5 (b) に示した 5000 step では左向きのバリエントは 4 層、負荷終了の 12000 step では、すべてが右向きとなる。この様子を示したのが、図 6 (a) である。これは、各バリエント層の傾きの時間変化を表したものである。ただし、縦軸は各バリエント層のせん断ひずみを表しており、全体のひずみ γ と

(a) Variation of shear strain of 12 variant layers

(b) Stress-strain curve

(c) Temperature-strain curve

Fig. 6 Variation of variant orientation, stress-strain curve and temperature-strain curve in shape-memory simulation.

区別するために γ' と表記している。このとき、左向きおよび右向きのバリエントはそれぞれ $\gamma'=-0.2$ および $+0.2$ 程度に相当し、初期状態では、それぞれ 6 層ずつがこの値をとっている。せん断負荷を加えていくと、やがて左向き ($\gamma'=-0.2$) のバリエントがほぼ瞬間的に $\gamma'=+0.2$ へと変化する。このような変化が断続的に起こり、負荷終了の 12000 step までには、すべての層が右向きに変わっていることがわかる。なお、

右向きの変形を表す γ' の値が 0.2 から 0.4 近くまで徐々に増加しているのは、バリエントが負荷によって変形しているためである。

また、図 6 (b) は応力ひずみ線図を表している。横軸はひずみであるが、一定量ずつのひずみを加えているため、負荷過程においては横軸を時間と見ることできる。負荷を開始すると、はじめは応力は直線的に増加するが、およそ 2 GPa に達したところで急激に応力が緩和される。このとき、図 6 (a) から、いくつかのバリエント層の向きが変わっていることが確認でき、それによって応力が緩和されていることを示している。その後も、バリエント層の方向が変わるたびに、この応力緩和が生じ、せん断負荷過程においては断続的に応力の上昇と緩和が繰り返される。

ここで除荷を行うと、応力は 0 になるまで緩和されるが、このときの除荷曲線は、図 6 (b) に示したように、最後の負荷曲線を逆にたどっている。除荷後の原子配列は図 5 (d) のようになっており、除荷前の図 5 (c) と比べると、弾性変形分だけ回復していることがわかる。結局、除荷後には $\gamma=0.2$ 程度のひずみに相当する変形が残留し、最初の形状への回復は起こらない。

3.3 加熱・冷却過程 変形したマルテンサイト構造に対し、引き続き加熱を行う。このとき、図 6 (a) をみると、18000 step 付近で、 γ' が 0.2 から 0.0 に一斉に変化している。図 6 (b) の応力ひずみ線図においても、全体のひずみ γ が 0.2 付近から 0 付近へと急激に変化していることがわかる。また、図 5 (e) が加熱完了時の原子配列であり、加熱過程においてマルテンサイト構造から bcc 構造への変態が起きていることが確認できる。図 6 (c) に示した温度ひずみ線図から、このときの変態温度はおよそ 500 K であることがわかる。

冷却過程においては、再びマルテンサイト構造が現れる。これは、図 5 (f) に示した冷却完了後の原子配列から確認できる。また、図 6 (a) においては、 γ' が一様に 0.0 である状態から、35000 step 付近で $\gamma'=\pm 0.2$ の 2 つの値に急激に分裂しており、このときに全体で一斉に相変態が起こったことを示している。ただし、図 6 (b), (c) の応力ひずみ線図および温度ひずみ線図においては、ひずみ γ は 0 のままであり、全体的な変形は生じていない。これは前述のように、生成したマルテンサイトのバリエントはランダムな方向を向いており、ある特定の向きへの偏りは生じないためである。

以上のように、せん断負荷によって生じた変形が、加熱、冷却によって元の形状に回復しており、形状記憶効果が再現されたということができる。

(a) Stress-strain curve

(b) Temperature-strain curve

Fig. 7 Multiple simulation results under the same conditions.

3.4 考察 分子動力学計算では、初期条件に乱数を用いるため、同じ条件の計算においても異なる結果を得ることがある。とりわけ、本研究では Ni 原子の配置に乱数を用いているため、図 2 にも示したように、その計算結果への影響は大きい。そこで、同じ条件の下で異なる Ni 配列を用いた計算を繰り返し行った。そのうちの 4 回の計算で得られた結果を図 7 に示す。ただし、Case 1 は図 6 に示した計算結果であり、Case 2~4 は、いずれも Case 1 と同じく Ni 68 % であるが、モデル内における Ni 原子の配置が異なったモデルによる計算結果である。

図 7 (a) は、負荷過程における応力ひずみ線図である。この図から、初期の負荷曲線、および、はじめの応力緩和が生じる限界応力は、いずれの計算においてもほぼ等しいことがわかる。それに対し、2 度目以降の応力緩和が起こる応力およびひずみは、個々の結果を見ると一定ではなく、4 GPa 近い値をとることもある。しかし、全体的にみると、負荷曲線は 0 から 6 と

示した 7 本の曲線上に分布しており、応力が緩和されるときに隣の曲線に移っている。応力緩和の起こる応力値は一定ではないが、全体的には右上がりとなる。

この 7 本の曲線については、以下のように考察できる。3.2 節において、初期配置では、12 のバリエーション層が存在し、そのうちの 6 層が方位を変えることによって、最終的には方位の揃った状態となることを示した。このことから、これらの曲線は、方位を変えたバリエーション層の数に相当していると考えられる。Case 1 において、1 度目と 2 度目の応力緩和では、いずれも 2 つ隣の曲線への移動が起こっているが、これは図 6 (a) において、1 度目と 2 度目には 2 本の曲線が $\gamma' = -0.2$ から $+0.2$ に移動していることからわかるように、2 つの双晶面での変形が同時に起こるためである。

加熱、冷却過程における相変態に関しては、図 7 (b) に温度ひずみ線図を示す。このように、いずれの場合にも、加熱時にマルテンサイトから bcc への相変態が起こることが確認できる。変態温度は 400~600 K とばらつきがあるが、これは図 2 (a) に見られた程度の範囲内である。冷却過程においては、いずれもマルテンサイト構造が得られるが、必ずしも全体のひずみは 0 とはならず、0.2 程度のひずみを生じる場合もある。これは、モデルが小さく、バリエーション層の総数がわずか 12 程度であるため、ランダムな方位を向く場合に、必ずしも 6 層ずつにはならないためである。この点は、より大きなモデルを用いた計算を行うことによって改善されると考えられる。

これらの挙動は、連続的になめらかな曲線で描かれるマクロな結果とは異なる挙動を示しているが、バリエーション層の多いモデルを用いると、個々のバリエーション方位の影響は相対的に小さくなることから、一度に生じる応力緩和も小さくなり、十分大きなモデルでは、マクロな応力ひずみ線図に近づくことが予測できる。

4. 結 言

本研究では、せん断負荷による変形と、加熱、冷却による形状回復のシミュレーションを行った。これは、定性的に形状記憶効果のメカニズムを再現したものということができる。用いたモデルは 864 原子、周期境界条件という制限されたものではあるが、負荷過程においては、マルテンサイトのバリエーションが方位を変えることによって変形が起こること、そのときに急激な応力緩和が起こること、またそれらは瞬間的に起こるため、応力ひずみ曲線はのこぎり状の曲線を描くことを示した。ナノスケールにおける形状記憶合金の利用

を想定すると、このような性質をとらえることは重要であるといえる。

今後の課題としては、実際の Ni-Al 合金またはその他の実材料との定性的および定量的比較、すなわち、変態温度、変態応力等に関する実験に基づく形状記憶特性やマルテンサイト構造の比較が必要となる。これに関しては、ポテンシャル関数およびパラメータの改良を行うことによって、より現実に近い現象の解析が可能となると考えられる。また、本研究では、マルテンサイトのバリエーションの分布が 2 次的に制限され、またモデルサイズと周期境界条件のために、方位も 2 種類に限定されている。実際には、3 次的により多くの方位をもつバリエーションが存在し、それらが様々な方向の負荷に対して変形するため、より大きなモデルを用いたシミュレーションを行う必要があるが、今回のモデルを改良することによって、さらに詳細なメカニズムに対する考察が可能となると考えられる。

最後に、本研究に関する数値解析に協力された京都大学大学院 真砂紀之氏（現ローム（株））、松本尚士氏（現三菱重工（株））ならびに有意義な助言を頂いた福山大学 井上達雄教授に謝意を表する。

文 献

- (1) 田中喜久昭, 戸伏壽昭, 宮崎修一, “形状記憶合金の機械的性質”, 養賢堂, (1993).
- (2) S. M. Foiles, M. S. Daw, *J. Mater. Res.*, **2** (1987), 5-15.
- (3) S. P. Chen, D. J. Srolovitz, A. F. Voter, *J. Mater. Res.*, **4** (1989), 62-77.
- (4) S. Rubini, P. Ballone, *Phys. Rev. B*, **48** (1993), 99-111.
- (5) D. Farkas, B. Mutasa, C. Vailhe, K. Ternes, *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, **3** (1995), 201-214.
- (6) 真砂紀之, “NiAl 系合金におけるマルテンサイト型相変態の分子動力学シミュレーション”, 京都大学修士論文 (2001).
- (7) 上原拓也, 真砂紀之, 井上達雄, 日本材料学会第 50 期学術講演会講演論文集 (2001), 283-284.
- (8) T. Uehara, T. Tamai, *Proc. 6th World Congress on Computational Mechanics* (2004), # 307 (CD-ROM).
- (9) T. Sato, K. Saitoh, T. Uehara, N. Shinke, *Trans. Mater. Res. Soc. Japan*, **29** (2004), 3615-3618.
- (10) M. S. Daw, M. I. Baskes, *Phys. Rev. B*, **29** (1984), 6443-6463.
- (11) S. M. Foiles, M. I. Baskes, M. S. Daw, *Phys. Rev. B*, **33** (1986), 7983-7991.
- (12) E. Clementi, C. Roetti, *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, **14** (1974), 177-478.
- (13) J. H. Rose, J. R. Smith, J. Huina, J. Ferrante, *Phys. Rev. B*, **29** (1984), 2963-2969.