

令和 元年 6 月 4 日現在

機関番号：12608

研究種目：国際共同研究加速基金（国際共同研究強化）

研究期間：2017～2018

課題番号：16KK0122

研究課題名（和文）形状記憶合金のねじれたドメイン構造のダイナミクスの数理モデル（国際共同研究強化）

研究課題名（英文）Mathematical modeling of dynamics of incompatible domain structure in shape memory alloy(Fostering Joint International Research)

研究代表者

稲邑 朋也 (Inamura, Tomonari)

東京工業大学・科学技術創成研究院・教授

研究者番号：60361771

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 6,000,000円

渡航期間：12ヶ月

研究成果の概要（和文）：形状記憶合金のマルテンサイト組織が示すべき乗則について実験結果の解析と理論的研究を行った。TiNbAl形状記憶合金ではマルテンサイトプレートの長さがべき乗指数2.6の明確なpower lawを示すことが明らかになった。ねじれをわずかに含むドメイン同士が結合しており、このねじれの存在がべき乗則出現に重要な役割を担っていることが、数値シミュレーションの結果から得られた。また形状記憶合金のマルテンサイト組織の理論をマグネシウム合金の変形組織に適用し、回位の存在が本合金の変形に重要な役割を担うことを明らかにした。

研究成果の学術的意義や社会的意義

実用合金であるニチノールに代用される形状記憶合金の内部構造を支配する数学的因子を明らかにすることで、耐久性の高い形状記憶合金の設計や、高機能化を行うための原理が得られる。また同種の数学理論によって、Mg合金の変形メカニズムを明らかにすることで、輸送機器の軽量化を通じて低炭素化社会の実現に貢献する。

研究成果の概要（英文）：Mathematical analysis of experimental results of the power law microstructure of the martensitic structure of a shape memory alloy. It was revealed that the length of the martensitic plate of TiNbAl shape memory alloy shows a clear power law with a power law exponent of 2.6. It was obtained from the results of numerical simulation that the domains containing a slight incompatibility are connected to each other, and the existence of this incompatibility plays an important role in the appearance of the power law. On the other hand, the theory of martensite structure of shape memory alloy was applied to the deformation microstructure of magnesium alloy, and it was clarified that the presence of disclination plays an important role in the deformation of this alloy.

研究分野：金属組織学

キーワード：マルテンサイト変態 形状記憶合金 べき乗則

1. 研究開始当初の背景

実用合金であるニチノール (TiNi) に代表される形状記憶合金の長寿命化が実現できれば、信頼性の高いインプラントや実用レベルの熱エンジン、超強力高速アクチュエータなどの実現を通じて、安心・安全・クリーン技術の発展に貢献できるが、機能劣化・疲労の抑制法は四半世紀に渡る未解決問題である。これを達成するためには、熱弾性型マルテンサイト変態によるドメイン組織形成を支配する因子を明らかにしなくてはならない。これに対して申請者は、J. Ball 博士 (Oxford 大) が構築した幾何学理論をベースにした独自の数値解析と、電子顕微鏡による組織観察を系統的に行い、損傷の源となる「ねじれたドメイン構造」が形状記憶合金内部のドメイン組織に存在することを明らかにしている。「ねじれ」は添加元素によって格子定数を微調整することで制御することができるので、「ねじれ」、ドメイン組織の構造、力学特性の関係を明らかにすれば、合金設計指針が得られる。これを達成するためには、まず「ねじれ」が形状記憶合金のドメイン組織の構造と形成ダイナミクスにどのように関わっているのか理論と実験の両面から明らかにしなくてはならない。また変形した場合にドメイン組織がどのようにスイッチングするかを知る為には、回位などの格子欠陥とドメイン構造の関わりを明らかにする必要がある。

2. 研究の目的

これまで研究してきた TiNbAl 形状記憶合金のドメイン組織における相変態ダイナミクスと組織形成およびねじれの関係を明らかにするために、ドメイン組織の呈する「ベキ乗則」の解析を行うとともに、数理解析をおこなって、組織形成ダイナミクスとドメイン構造の関係を明らかにする。また、変形に対するドメイン構造の再配列におよぼす回位の効果を明らかにするために、単純化したドメイン構造における回位モデルを構築する。

3. 研究の方法

既に得られているドメイン組織の電子顕微鏡データをもとに、ドメイン構造の下部構造を明らかにするとともに、ドメイン同士の結合状態をモデル化する。またドメイン組織が呈するベキ乗則の解析を行い、2次元でのシミュレーション結果と比較する。

単純剪断だけを変態歪みとして有するドメイン組織における、ドメイン結合の幾何学を rank-1 接続を用いて図1のようにモデル化し、回位の存在とその消滅条件を解析する。

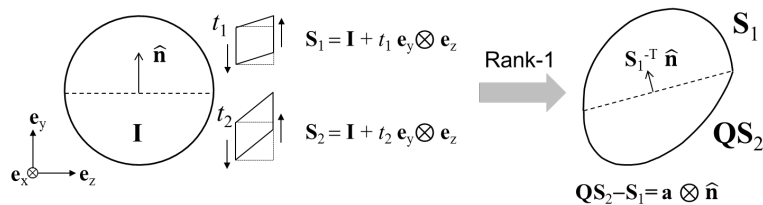


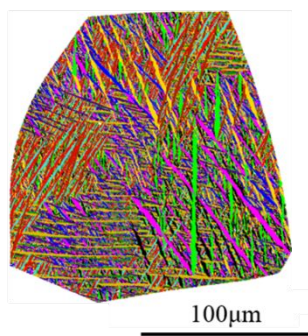
図1：2つの剪断変形の rank-1 接続

4. 研究成果

4.1 ベキ乗則

Ti-22Nb-2Al 合金をモデル材として用いた。合金の母相結晶粒径は約 200μm である。格子定数は $a_c=0.32821\text{nm}$, $a=0.31551\text{nm}$, $b=0.48207\text{nm}$, $c=0.46435\text{nm}$ である (下付 c は母相)。この合金では格子変形の固有値の一つがほぼ 1 となるのでマルテンサイトドメイン内部には内部双晶は存在せず、晶癖面バリエーションは 12 種存在する。晶癖面バリエーション同士が結合した場合、ねじ

れの大きさは、 $\{111\}$ type I twin で結合する界面では約 0.7° 、 $\langle 211 \rangle$ type II twin で結合する界面では約 0.6° である。図 2 は本合金の EBSD 像 (オイラー角マップ) であり、長さの異なる晶癖面バリエントが、偏りをもって形成していることがわかる。画像解析によって晶癖面バリエントを抽出し、バリエントごとに長さと発生数を解析した結果、図 3 に示す通り、およそ 2 decades にわたってベキ乗則が確認された。図中の青プロットは logarithmic binning によるもので、これを基にベキ乗指数 $\alpha=2.603$ と決定された。同様の解析を異なる断面をもつ結晶粒においても行ったが、ベキ乗指数はいずれも 2.6 であった。次にベキ乗則の出現メカニズムを検討するために、バリエントの分布を調べた。図 4 は各バリエント (1(+)-6(-)) のオイラーマップであり $n(+/-)$ のバリエント同士は避け合うように形成している。さらに解析したところ、 $\{111\}$ type I 双晶で結合できるバリエント同士、例えば 1(+), 3(+), 5(+) は互いに密集して形成し、コロニーを作っていることがわかった。



$\{110\}_{\text{cubic}}$ cross section

図 2

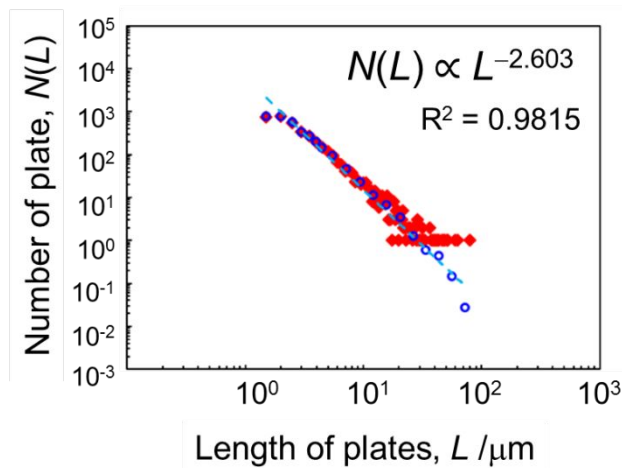


図 3

図 4 はこれらのコロニー結合を表現した 14 面体であり、三角形の面の頂点に相当するバリエント同士が、わずかなねじれをもって結合してコロニーを形成する。14 面体上で隣接するコロニー同士は、ある一つのバリエントを共有しており、成長するバリエントの分岐、衝突および反射によってコロニーからコロニーへと、共有バリエントを介して変態を連鎖させていると考えられる。即ちこれらの下部構造は晶癖面バリエントによる空間分割が一因となっている。

各バリエントを線としてとらえ、ランダム核形成によって発達させたドメイン組織の 2 次元モデルでは、本実験と同様にベキ乗則が出現する。このことは実組織のベキ乗則が、モデルと同様に空間分割によるものであると考えられ、過去の in-situ 実験で捉えられた組織形成過程の観察結果と一致している。また核形成と成長速度の比によってベキ乗指数が変化することも示唆された。また rank-1 接続界面での界面エネルギーをとり入れた convex integration による組織解析においても、入れ子状の組織が wild solution として得られており、ねじれの存在が組織形態に極めて大きな影響を与えていることがわかった。

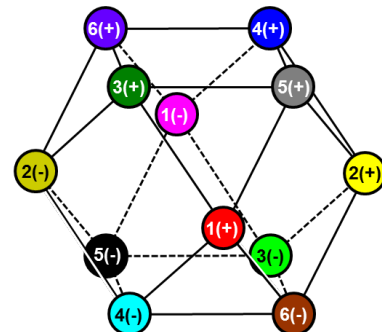


図 4

4.2 キンク変形組織

組織形成にともなって、ねじれのキャンセル (回位の対消滅や緩和) が生じる可能性を検討

するために、変態歪みを単純剪断としたモデルにおいて(図1参照)、2次元でのドメイン結合を解析した薄板状ドメインが edge to edge(上記チタン系合金の場合には、(011) compound twin による結合がこれに近い)に結合すると、結合部には強さ ω の回位双極子が不可避免的に発生する。これを2回繰り返したのが図5上図であり、回位四重極子が形成される。ここに第3のバリエーションが結合すると、回位の緩和が起り得る。第3のバリエーションの変態歪みが適切であれば、回位の対消滅によって、回位四重極子をキャンセルすることが可能である(図5下)。形状記憶合金の場合、完全な対消滅は困難だが、キック変形のように、変態歪みが単純剪断かつ剪断大きさがいかなる実数値もとれる場合には、回位が完全に消滅した組織が実現可能である。もしこういった組織が形成されれば、各バリエーションの変形(再配列)は、対消滅した回位が復活しないように各ドメインが連携的に変形せねばならず、変形抵抗となりえることが示唆された。このモデルは形状記憶合金だけでなく、Mg合金などの変形組織を理解するための基礎を与えると考えられ予想外の成果となった。

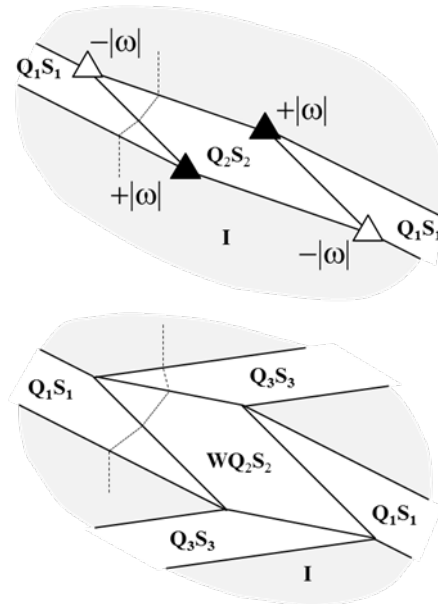


図5

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕(計1件)

(1) T. Inamura, "Geometry of kink microstructure analysed by rank-1 connection", Acta Mater. 173 (2019) 270-280. 査読有

〔学会発表〕(計7件)

(1) 稲邑朋也, Rank-1 接続で捉えたキック変形の幾何学, 日本金属学会 2019 年春期(第164回)講演大会, 20 March 2019 招待講演

(2) T. Inamura, Incompatible microstructure of martensite and kink deformation, Mathematical design of new materials: strategies and algorithms for the design of alloys and metamaterials, Edinburgh, 15 March 2019 招待講演

(3) T. Inamura, Analysis of kink deformation based on rank-1 connection, The 4th International Symposium on Long-Period Stacking Ordered Structure and Millefeuille Structure (LPSO 2018), Kumamoto, 4 December 2018 招待講演

(4) 稲邑朋也, Rank-1 接続に基づくキック変形の解析, 軽金属学会第135回秋期大会, 芝浦工業大学, 10 November 2018

(5) T. Inamura, Microscopy study on interface and dynamics of microstructure in shape memory alloy, MPI-Oberseminar, Leipzig, 26 June 2018 招待講演

(6) T. Inamura, Microscopy study on interface and dynamics of microstructure in shape memory alloy, Mathematics and Science: In honour of Sir John Ball, Oxford, 19 May 2018 招待講演

(7) T. Inamura, Effect of incompatibility on martensite microstructure in shape memory alloy, Solid Mechanics and Materials Engineering Group Seminars, Oxford, 15 January 2018 招待講演

〔図書〕(計 0件)

〔産業財産権〕

出願状況(計 0件)

名称：

発明者：

権利者：

種類：

番号：

出願年：

国内外の別：

取得状況(計0件)

名称：

発明者：

権利者：

種類：

番号：

取得年：

国内外の別：

〔その他〕

ホームページ等

6 . 研究組織

研究協力者

〔主たる渡航先の主たる海外共同研究者〕

研究協力者氏名：John Ball

ローマ字氏名：jon boru

所属研究機関名：University of Oxford

部局名：Mathematical Institute

職名：Professor

〔その他の研究協力者〕

研究協力者氏名 : Francesco Dela Porta

ローマ字氏名 : furanchesco dera poruta

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。