「材料」(Journal of the Society of Materials Science, Japan), Vol. 57, No. 12, pp. 1217-1223, Dec. 2008
論　文

多結晶モデルによる形状記憶合金の変形挙動に関する分子動力学シミュレーション†

上　原　拓　也*　浅　井　千　尋**　大　野　信　忠***

Molecular Dynamics Simulations on the Deformation Behavior of Shape Memory Alloy using Multi-Grain Models

by

Takuya UEHARA*, Chihiro ASAI** and Nobutada OHNO***

Deformation mechanism of a shape memory alloy is investigated by molecular dynamics simulations using several multi-grain models. An EAM potential for Ni-Al alloy is applied, and a set of conditions with loading, unloading, heating and cooling is imposed. As a result, the stress-strain relation obtained by a multi-grain model revealed to draw a loop consisting of smooth curves which resembles experimentally obtained one, while previously-simulated single-crystal model produced a zigzag diagram. From the observation of the configuration of atoms and local structure during the deformation, it revealed that local deformation of martensite variants is initiated at grain boundaries, and also that the propagation of the deformed region is obstructed by the boundaries. The influence of the grain shape and distribution, as well as the crystal orientation of each grain, on the deformation behavior is then discussed : Qualitatively common features in deformation mechanism and stress-strain relation are observed despite different grain distributions, while quantitative values such as critical stresses are dependent on the crystal orientations of each grain and of the neighbors.

Key words : Molecular dynamics, Shape memory alloy, Phase transformation, Martensite, Deformation behavior, Numerical analysis

1　緒　　言

形状記憶合金は，代表的な機能性材料のひとつであり，新素材の開発および工学，医学など様々な分野への応用が進められている.[1]その力学的な挙動に関する研究としては，巨視的には，変態・熱・力学的な連成を考慮した構成式に基づく連続体力学的モデリングが挙げられる.[2]しかし，近年，開発が進められている微小なデバイスでは，その微視組織や微細構造の影響が相対的に大きくなり，従来の現象論的構成式では十分な精度が得られないため，微視スケールからのアプローチが不可欠となっている．形状記憶合金の変形および形状回復に関する結晶構造スケールでのメカニズムは，マルテンサイト変態と逆変態，およびバリアントの方位変化に基づき，Fig. 1 に示す模式図のように説明されている.[2]すなわち，ランダムな方位のバリアント（兄弟晶）をもつマルテンサイト構造 (Fig. 1 (b)) に対し，せん断負荷を加えるとバリアントの方位が変化することによって巨視的な変形が得られる (Fig. 1 (c))．この変形は除荷しても元には戻らないが，加熱すると bcc 構造 (Fig. 1 (a)) への逆変態が起こり，それを冷却するとマルテンサイト変態が生じて元の状態に戻る．このとき，バリアントの方位は高温の構造で一旦消去され，マルテンサイト変態時には再びランダムな方位をもつ，すなわち方向性に偏りがなく巨視的には変形していない状態に回復する．形状記憶合金に関するこのような結晶構造の変化については，直接の観察は困難であるため，分子動力学法による計算機シミュレーションに基づく研究が進められている.[3)~8)]上原らは，これまでに，Ni-Al 合金系に対する EAM ポテンシャル[9), 10)]を用いた分子動力学シミュレーションを行い，Fig. 1 に相当する変形および形状回復過程を再現している[6)~8)]が，そこで示された応力ひずみ関係は，Fig. 2 に示すような鋸歯状の線図であり，実験的に知られた巨視的な応力ひずみ線図とは大きく異なるものであった．このような挙動は数 nm という微小なスケールに特有のものであり，モデルサイズを大きくするにつれて滑らかになる傾向は示されたものの,[8]弾性変形後に大きな応力の緩和がくり返されるのが特徴的であった．これは，モデルの寸法だけでなく，モデルが完全単結晶であり，せん断変形負荷の方位が双晶面に平行であるという，極度に単純化されたものであることに原因があると考えられる．そこで本研究では，モデルを多結晶体として形状記憶過程の解析を行い，特に変形過程における応力変化について考察する．また，結晶粒の形状および結晶方位の影響についても考察する．

†　原稿受理　平成 20 年 4 月 24 日　Received Apr. 24, 2008 ©2008 The Society of Materials Science, Japan
*　正 会 員　山形大学大学院理工学研究科　〒992-8510　米沢市城南，Graduate School of Sci. and Eng., Yamagata Univ., Jonan, Yonezawa, 992-8510
**　名古屋大学大学院工学研究科（現在　トヨタ自動車㈱）　〒464-8603　名古屋市千種区不老町，Graduate School of Eng., Nagoya Univ., Chikusa-ku, Nagoya, 464-8603
***　正 会 員　名古屋大学大学院工学研究科　〒464-8603　名古屋市千種区不老町，Graduate School of Eng., Nagoya Univ., Chikusa-ku, Nagoya, 464-8603

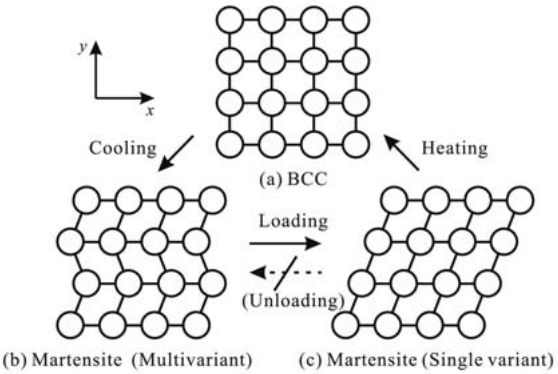

Fig. 1　Illustration of a shape-memeory behavior.

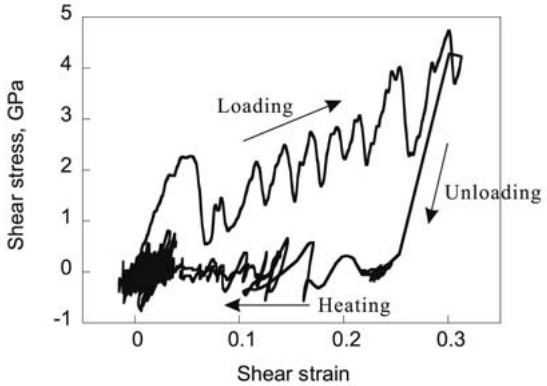

Fig. 2　Stress-strain relation obtained by a single-crystal model.[8)]

2　解析モデルと条件

2・1　結晶構造

本研究では，前報[6), 7)]と同じく，Ni-Al 系合金に対する EAM ポテンシャルに基づく分子動力学解析を行う．ポテンシャル関数およびパラメータについては，前報に示した通りであり，ここでは省略する．このポテンシャルでは，68%Ni において形状記憶効果が再現できており，本報でも 68%Ni モデルを用いる．このときに得られる構造を，Fig. 1 (a)～(c)に対応させて描くと Fig. 3 のようになる．ただし，x，y，z 軸をそれぞれ bcc 構造の [110], [$\bar{1}$10], [001]方位に設定しており，Fig. 3 (ii)（x-y 平面）の白い枠で描いたセルが，Fig. 1 に対応している．また，Fig. 3 (b), (c)はそれぞれ，バリアント層が交互に積層したマルテンサイト，およびすべてのバリアント層が同じ方向にそろった状態のマルテンサイト構造を表しており，以下ではこれらを M1，M2 構造と区別して表記する．

2・2　解析モデル

多結晶体モデルは以下の手順で作成する．初期構造は，1 層ずつ交互に反対方向を向くマルテンサイト構造（M1 構造）とし，その格子点上に Ni，Al 原子を交互に規則的に配置した後，68%Ni になるように，乱数を用いて選択した Al 原子を Ni 原子に置き換える．多結晶モデルの初期配置については，まず，各結晶粒の形状を，Fig. 4 に示すように設定する．次に，先に作成したマルテンサイト構造の原子を，x-y 平面内で角度 θ だけ回転し，各結晶粒領域内に配置する．ただし，このときの回転角 θ は結晶粒毎に異なる値を設定する．この操作によって，結晶粒界付近に，極端に接近した原子対が現れた場合は，一方を消去する．ここでは，平衡状態での最近接原子間距離がおよそ 0.26nm となることをふまえ，d_c = 0.22nm をしきい値とする．また，z 軸方向には 5 単位セルのみを考え，全方位に周期境界条件を与える．したがって，Fig. 4 に示した Model A は，2 つの正方形と 2 つの八角形の粒，Model B は 4 つの六角形の粒から構成されるモデルとなっている．このとき，いずれのモデルも，x，y，z 方向の大きさは，およそ 16.6nm × 16.6nm × 1.5nm であり，原子数はいずれも約 31000 である．

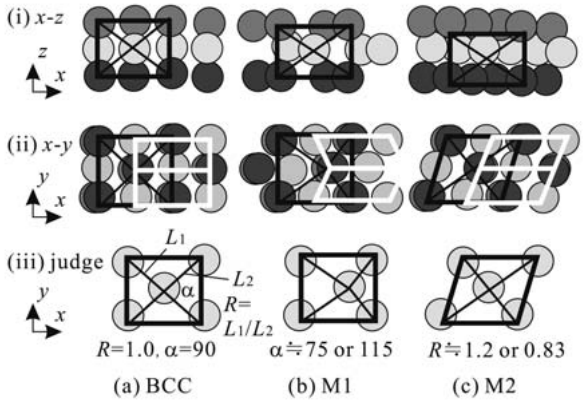

Fig. 3　Illustration of (a) bcc-type, (b) sequentially-layered martensite (M1), and (c) uniformly-layered martensite (M2) structures.

本研究では，まず Model A を用いて形状記憶過程の解析を行い，その後，結晶粒配置や結晶方位の影響を調べるため，Model B を用いた解析を行う．

2・3　解析条件

前報と同様に，Fig. 5 に示すような負荷，除荷，加熱，冷却の 4 過程から成る一連の解析条件を与える．まず，前節に示した初期配置から，3000step の間，Parrinello-Rahman の方法[11)]で応力を 0 に保つ緩和計算を行う．その後，負荷過程においては，モデルの y 軸を x 軸方向に一定量ずつ傾けることによってせん断変形を加える．このとき，y 軸方向には，x 軸，z 軸方向とともに，圧力成分が 0 となるように，軸長を調整しながら計算を進める．13000step までに γ_{xy} = 0.3 に達するように変形を与えた後，除荷を行う．除荷過程においては，せん断応力 τ_{xy} = 0 となるまで，負荷時と反対方向に変形を戻した後，

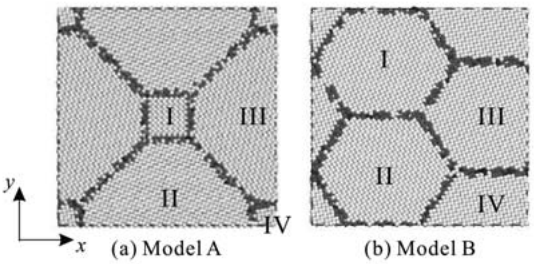

Fig. 4　Multi-grain models.

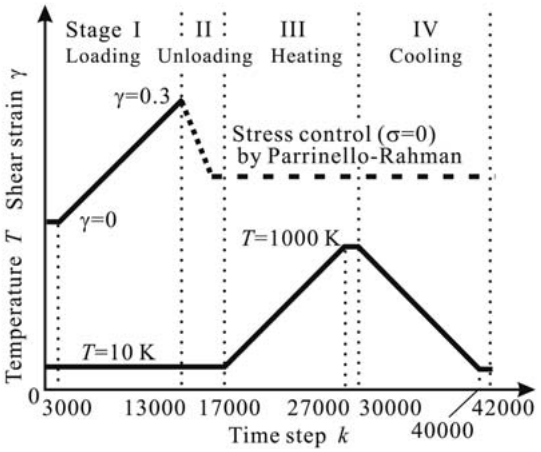

Fig. 5　Applied conditions for deformation and temperature.

Parrinello-Rahman の方法で 17000step まで応力の全成分が 0 となるように保持する．計算開始から除荷過程までは，温度は T = 10K で一定とする．その後，温度を T = 1000K になるまで，10000step をかけて加熱し，さらに 10000step をかけて T = 10K まで冷却する．加熱，冷却過程においては Parrinello-Rahman の方法で応力の全成分を 0 に保つ．

2・4　結晶構造の判別

ここで，結晶構造を判別する方法について述べる．本研究では，z 軸方向には 5 単位セルのみを考え，周期境界条件を与えているため，この方向には，圧力制御のための伸縮を除き，構造上の変化はほとんど生じない．そのため，主に x-y 平面内での構造に着目し，以下の通りの判別を行う．Fig. 3 (iii)に示した通り，x-y 面内における単位セルの対角線の長さを L_1，L_2，その比を R，L_1，L_2 のなす角を α とおくと，bcc では R = 1.0，α = 90° となるのに対し，M1 構造では R = 1.0 であるが $\alpha \fallingdotseq 75$ または 115°，M2 構造では $R \fallingdotseq 1.2$ または 0.83 となる．したがって，まず着目原子 i のまわりにある x-y 面内の隣接原子 4 つを取り出し，それらで形成される R および α の値を算出することによって，原子 i まわりの局所的な構造が判別される．

3　シミュレーション結果

3・1　負荷・除荷過程の原子配列変化

まず，Model A によるせん断負荷による変形過程の結果を示す．Fig. 6 (a)～(g)は負荷過程の原子配列を表しており，Fig. (h)は除荷後の状態を表している．このとき，原子の濃淡は前節に示した構造判別の結果を示しており，淡いグレーが変形前でバリアント方位が交互に積層しているマルテンサイト (M1)，濃いグレーが変形後でバリアント方位の揃ったマルテンサイト (M2) を示している．なお，初期配置は Fig. 4 (a)であり，粒界以外は M1 構造となっている．

Fig. 6 (a) に示した 3200step の図は，初期配置から圧力一定で緩和計算を行った後の状態である．結晶粒を配置した際，粒界に生じた局所的な不整合を緩和するため，原子の再配列が生じるとともに，Parrinello-Rahman の方法によって全体の応力が緩和されるように，解析モデル全体がせん断方向にわずかに変形した状態となる．また，主に粒界近傍に，M2 構造と判別された領域が生じているが，全体的には M1 構造を保っている．この後，せん断負荷を加えると，全体の変形が進むが，Fig. (b)に示す 4000step までは，原子配列や構造には大きな変化は見られず，Fig. (a)とほぼ同じ状態を示す．しかし，Fig. (c)に示す 4800step にかかる前から，濃いグレーで示された M2 領域が広がり始め，5600step から 7200step にかけて，M2 領域が一つの結晶粒を貫くような明確な層を形成する．このとき，変形層と未変形層の比は粒ごとに大きく異なり，粒 II と III（Fig. 4 (a)参照）を比べると，粒 III の方が早く変形が進行していることがわか

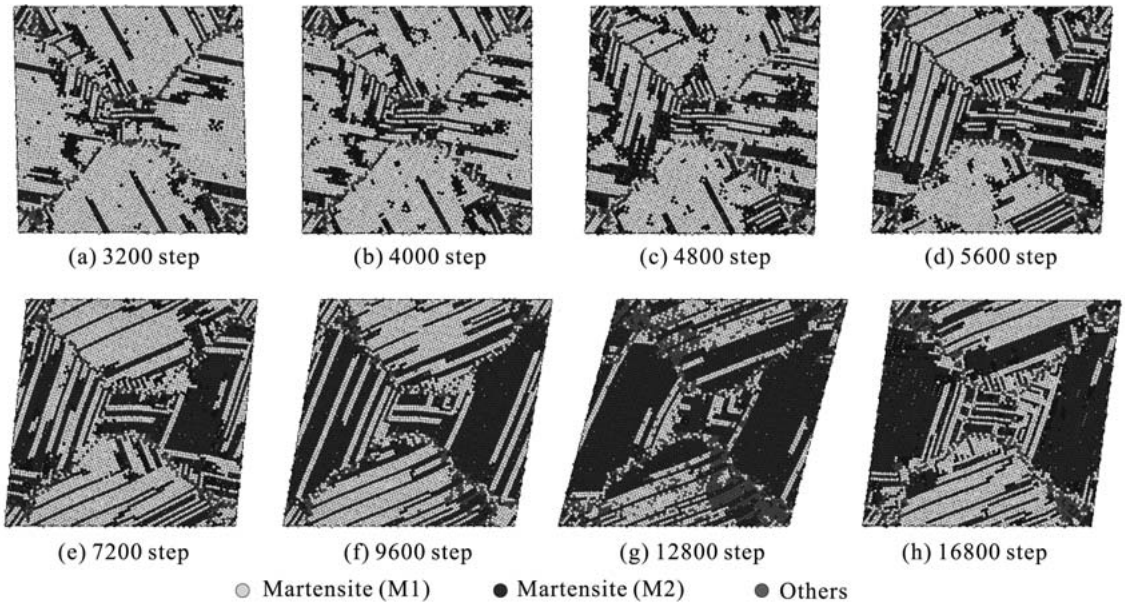

Fig. 6　Variation of the atomic configuration depicted with local crystal structure during (a) - (g) loading and (h) unloading processes by Model A.

る．その後は徐々にM2層が広がっていき，変形過程終了のFig. (g)に至る．

この後，全体の応力が0となるように除荷した状態がFig. (h)である．解析モデル全体の変形はやや回復しているが，結晶構造の分布はほとんど変化せず，Fig. (g)とほぼ同じ状態が維持されていることから，この回復は弾性変形分の回復であるといえる．

3・2　加熱・冷却過程の原子配列変化

続いて，加熱・冷却を行ったときの原子配列をFig. 7に示す．Fig. (a)は加熱過程終了後である30000step の状態であり，原子の熱揺動が激しいため，構造判別が明確ではないが，マルテンサイト領域がなくなり，全体がbcc構造へと変態している．また，それに伴い，解析モデル全体のせん断変形が解消され，x-y平面内ではほぼ正方形のモデル形状となっている．なお，変態後も粒界は初期の分布を保持している．

その後，冷却を行うとマルテンサイト変態が生じ，Fig. 7 (b)のような状態となる．このとき，粒界付近の原子以外はすべてM1またはM2構造となっている．ここで，M1，M2構造はいずれもマルテンサイト構造であり，両者の違いは，異なる方位をもつバリアント層の積層順を区別するものであった．またその判別は，その積層を意図的に交互に配置した初期配置を基準にしたものである．高温から冷却して変態が起こるとき，この積層順はランダムになるため，初期配置を基準とした判別は意味がなく，ここでは両者がともにマルテンサイト構造であることだけに注意すると，粒界以外の結晶構造はマルテンサイトであり，計算モデル全体はせん断変形を受けていないという，初期状態が回復されたと見なすことができる．

3・3　応力ーひずみ関係

次に，一連の過程における応力ひずみ曲線をFig. 8に示す．横軸はせん断ひずみγ_{xy}，縦軸はせん断応力τ_{xy}であるが，負荷過程においては，せん断ひずみを一定量ずつ増加させているため，対応する時間ステップを横軸上側に記している．また，曲線の始点が原点に一致していないのは，Fig. 6 (a)に示したように，初期の緩和計算によって，全体に傾きが生じたためであり，$\gamma = -0.03$程度の初期ひずみから開始している．

まず変形初期において，応力は，4000step程度に相当する$\gamma = 0.01$あたりまでは単調に増加した後，6000stepに相当する$\gamma = 0.06$あたりにかけて，ほぼ一定となり，その後，再び上昇する．負荷終了後，除荷を行うと，ひずみは緩やかに回復し，応力が0となった段階で$\gamma = 0.13$程度の残留ひずみを示している．その後，加熱・冷却時には応力は0に保たれたまま，加熱中の相変態によってひずみがほぼ0となり，冷却によるマルテンサイト変態でも，ひずみはほぼ0に保たれる．ただし，冷却時のマルテンサイト変態では，Fig. 7 (b)に示したように，解析モデル全体がわずかにゆがむため，最終的なひずみは，Fig. 8中に•印で示した値 ($\gamma = 0.012$) となる．なお，図中で負荷開始点に到達して見えるのは，高温保持中の熱揺動のため，ひずみがやや大きく変動している際に一時的に到達したものである．

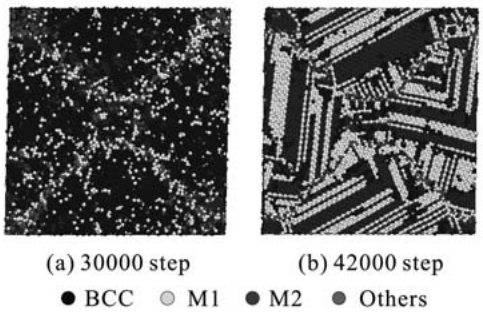

Fig. 7　Configuration of atoms depicted with local crystal structure after (a) heating and (b) cooling processes by Model A.

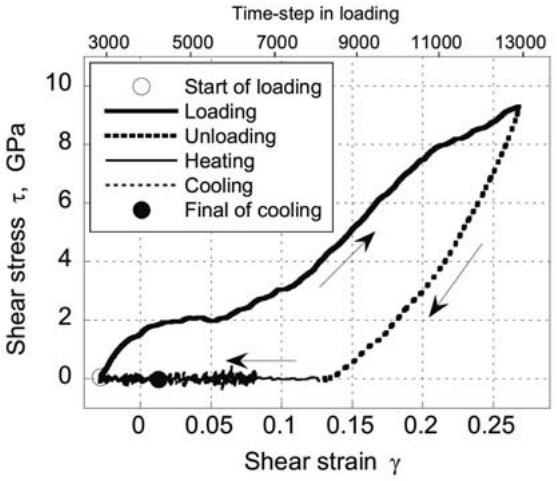

Fig. 8　Stress-strain relation in loading, unloading, heating and cooling processes by Model A.

以上のように，一連の過程によって，完全な初期点に回復するわけではないが，全体的には，形状記憶過程における応力ひずみループをよく再現できているといえる．

4　考　　察

4・1　負荷過程における変形と応力

Fig. 8に示した応力ひずみ関係を，Fig. 2に示した単結晶モデルの場合と比較すると，負荷過程において大きな相違が見られる．すなわち，単結晶モデルでは鋸歯状に現れた応力上昇と急激な応力緩和が，多結晶モデルでは全く見られず，応力上昇，一定応力，応力再上昇の3段階からなる滑らかな曲線となるのが大きな特徴である．

この過程を原子配列と対応させて考察する．また，変形領域が広がる様子をグラフで表したのがFig. 9であり，全原子中で，M2構造と判別された原子の割合の時間変化を表している．まず，第1段階は，Fig. 6 (a)から(b)に対応し，Fig. 9にも示すように，M2領域の割合はほとんど変化せず，一定である．すなわち，局所的な構造は変化せずに全体が変形しており，弾性変形領域であるといえる．また，第2段階は，Fig. 6 (b)から(e)に対応し，局所的な構造変化を伴う変形が開始する段階である．このことは，Fig. 9においてM2領域の割合が増加し始めることからも確認できる．また，Fig. 6 (c)に示す

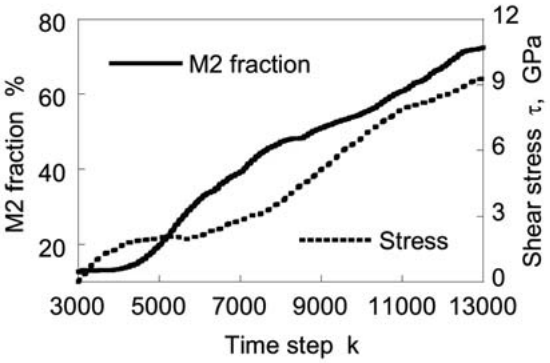

Fig. 9　Variation of the atomic fraction of M2 structure in loading process.

4800step あたりでは特徴的なパターンは観察されないが，Fig. (e)に示した 7200step になると，結晶粒を貫く層状の変形領域が形成されている．その後，層状に分布した M2 領域が徐々に広がっていく段階が第 3 段階である．このとき，Fig. 9 に示すように，M2 構造の領域は，ほぼ一定の割合で増加していく．

前報の単結晶モデルでは，バリアント方位が揃った単結晶モデルであったため，変形が層状に現れると，周期境界のかかった領域内で一斉に変形が完了し，応力が 0 に緩和された．それに対し，今回のモデルでは，層状の変化が起ころうとするとき，粒界で変形が阻まれるため，層内で徐々に変形が進行する．そのため，応力は緩和されず，ほぼ一定の応力下で変形が進行する状態が生じたものと考えられる．

また，初期の応力上昇は，Fig. 2 ではほぼ直線的であったのに対し，Fig. 8 では次第に傾きが緩やかになる．これについては次のように考えられる．前報のモデルは欠陥のない完全結晶であったのに対し，本研究のモデルは粒界が存在する．そのため，既に負荷前の緩和計算においてもわずかに変形領域が現れたことからもわかるように，変形開始の起点が粒界に存在することになる．これによって，完全な変形領域が現れ始める前に，特に粒界近傍での構造緩和が起こり，応力上昇が鈍化すると推察される．

4・2　結晶粒配置の影響

前節に示した通り，多結晶モデルを用いることによって，応力ひずみ関係が滑らかな曲線となった．このことについて，結晶粒配置の影響をみるため，Fig. 4 (b)に示した Model B を用いて同様なシミュレーションを行う．なお，変形後の加熱・冷却による形状回復過程においては，単結晶モデルとも明確な違いは見られなかったことから，ここでは負荷による変形過程のみの解析を行う．

Fig. 10 は Model B における変形過程の原子配列変化であり，原子の濃淡は結晶構造を示している．まず，Fig. (a)に示すように，先程と同様に，初期の緩和計算によって，全体的なわずかな変形と，粒界周辺での若干の構造変化が生じる．その後，4000step あたりまでの変形では，構造はほとんど変わらず，弾性的な変化を示す．その後，Fig. (c)に示す 6000step あたりまでに，結晶粒内を横断的に貫く層状の変形領域が現れた後，その変形領域層が徐々に広がっていく．このことは，Model A による結果と同様な傾向を示しており，定性的には，結晶粒の配置に依らず，共通な傾向であるといえる．

4・3　結晶方位の影響

次に，各結晶粒の方位の影響を調べるため，Fig. 4 (b)に示した粒 I ～ IV について，Table 1 に示す方位を設定したモデルによる解析を行う．ただし，表中の θ_{I} ～ θ_{IV} はそれぞれ，結晶粒 I ～ IV の結晶方位を示している．なお，Table 1 には，参考のため，前節に示した Model A の方位も同時に示す．また，**4・2** 節に示した結果は Model B3 によるものである．

Fig. 11 (a), (b)はそれぞれ，Model B1, B2 における変形過程（7000step）の原子配列を示している．いずれの場合においても，Model A の結果と同様に，変形領域が層状に現れており，定性的には前節までと同様であるといえる．

また，Fig. 12 は，Model B1 ～ B6 における変形過程の応力ひずみ曲線を表している．ただし，初期の緩和計算で生じる初期ひずみ分は補正し，原点を一致させている．まず全体的な曲線の形状をみると，いずれのモデル

Table 1　Crystal orientations in grains I-IV.

Model	θ_{I} [°]	θ_{II} [°]	θ_{III} [°]	θ_{IV} [°]
A	0	63.4	11.3	33.7
B1	18.4	11.3	26.6	33.7
B2	-18.4	11.3	26.6	-33.7
B3	63.4	56.3	71.6	78.7
B4	-63.4	56.3	71.6	-78.7
B5	63.4	11.3	18.4	78.7
B6	-63.4	11.3	18.4	-78.7

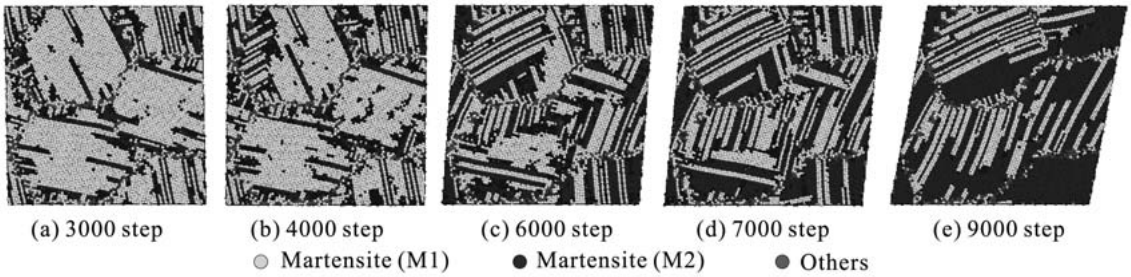

Fig. 10　Variation of atomic configuration depicted with local crystal structure in loading process by Model B.

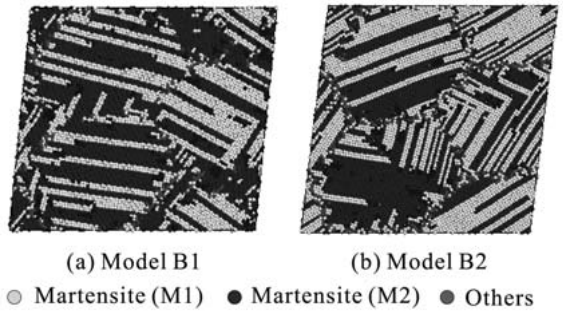

Fig. 11　Configuration of atoms at the 7000th time step by Models B1 and B2.

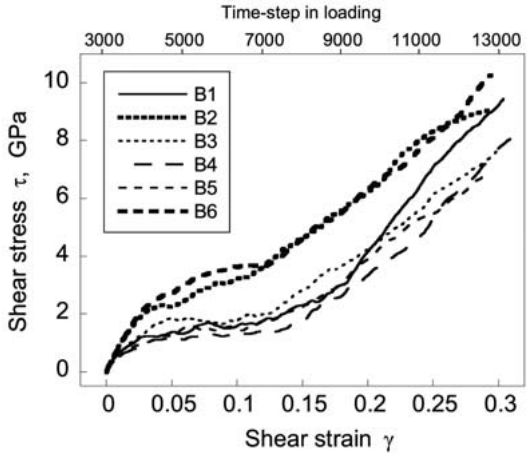

Fig. 12　Stress-strain relation in loading processes by Models B1-B6

においても，前節と同様に，弾性的な初期領域と，応力がほぼ一定，または緩やかな上昇となる第2段階，および応力が再上昇する第3段階にわけることができる．これに対し，応力の値に着目すると，Fig. 12に示した中では，太線で示したB2，B6と，細線で示したそれ以外の4つに大別でき，前者は後者に比べ，初期の応力増加率が高く，第2段階の応力値も大きいという特徴がみられる．

この点について，Fig. 11とTable 2を用いて考察する．ここで，Table 2は，Model B1～B6について，それぞれの結晶粒I～IV内でM2領域が占める割合を示している．ただし，これらは7000stepの時点での値である．また，Δと記した欄は，結晶粒I-IVのうち，最大値と最小値の差を表している．

Fig. 11をみると，B1では，各結晶粒で層状の変形領域がほぼ均等に現れているのに対し，B2では結晶粒毎の変形率にばらつきが大きく，特に粒I, IV（Fig. 4 (b)参照）における未変形領域が比較的大きい．このことは，Table 2の数値からも明らかである．また，他のモデルについても，応力が高い値を示したB2とB6はばらつきがそれぞれ0.278，0.366と，他のモデルに比べて大きくなっている．変形率の低い結晶粒は，負荷に対して変形抵抗が大きいということができるが，このような結晶粒が存在することで，初期の応力増加率が増加するとともに，層状の変形層が現れる第2段階の応力値も上昇していると考えられる．

Table 2　Atomic fractions of M2 structure in grains I-IV of models B1-B6 at the 7000th time step.

	B1	B2	B3	B4	B5	B6
I	0.549	0.473	0.441	0.381	0.507	0.299
II	0.568	0.596	0.394	0.462	0.469	0.360
III	0.376	0.414	0.450	0.598	0.642	0.665
IV	0.562	0.318	0.526	0.482	0.600	0.480
Δ	0.192	0.278	0.132	0.217	0.173	0.366

この他，Model B2の結晶粒II，IIIでは，粒内に異なる方位をもつ変形層が現れており，これも応力値が高くなる要因となっていると考えられる．ただし，Table 1に示した通り，Model B1とB2ではこれらの結晶粒II，IIIは同じ方位であることから，各結晶粒自体の方位だけでなく，隣接する結晶粒との方位関係，または結晶粒界の構造などについて，より詳細な検討が必要である．

5　結　　言

本研究では，多結晶モデルを用いた形状記憶過程の分子動力学シミュレーションを行い，特に単結晶モデルによる結果との比較から，以下の結論を得た．(1) 多結晶モデルでも形状記憶効果が再現できる．(2) 変形過程において，多結晶モデルでは滑らかな応力ひずみ曲線が得られる．(3) 結晶粒界が変形の起点となるとともに，変形の抵抗にもなり，応力ひずみ曲線を滑らかにする要因となっていると考えられる．(4) 応力ひずみ関係は，定性的には結晶粒の配置や方位には依らない．(5) 変形応力など，定量的には，個々の結晶粒の方位だけでなく，隣接する結晶粒との関係などに依存して，大きく異なる値を示す．

本研究では，x-y平面を (001) 面に固定し，周期境界条件を与えるという制限の下でのモデル解析を行った．実際の多結晶体ではこのような制限はなく，3次元的な広がりをもつ，より複雑な多結晶構造となる．また，今回のモデルの粒径は数nmオーダであり，ナノ多結晶体特有の変形挙動が報告されている[12]通り，本研究のモデルで多結晶形状記憶合金の性質を完全に再現できたとはいいきれない．結晶粒界における挙動や，各結晶粒の結晶方位の影響について，粒界の構造や粒界エネルギーなどと関連付けた，より詳細な研究が今後の課題である．

参　考　文　献

1）J. S. Miyazaki, T. Sakuma and T. Shibuya, Eds., “Characteristics and applications of shape memory alloys” (2001) CMC Publishing.

2）H. Tobushi, K. Tanaka, H. Horikawa and M. Matsumoto, “Shape memory materials and their applications” (2004) Corona Publishing.

3）T. Uehara, N. Masago and T. Inoue, “An atomistic study on temperature-incorporated phase transformation in Ni-Al alloy”, Proceedings of the 50th JSMS Annual Meetings, pp.283-284 (2001).

4) S. Ozgen and O. Adiguzel, "Molecular dynamics simulation of diffusionless phasetransformation in a quenched NiAl alloy model", Journal of Physics and Chemistry of Solids, Vol.64, pp.459-464 (2003).

5) T. Sato, K. Saitoh and N. Shinke, "Observation of phase transformation and structuralanalysis for Ni-Ti alloy by molecular dynamics simulation", Journal of the Society of Materials Science, Japan, Vol.54, pp.193-200 (2005).

6) T. Uehara and T. Tamai, "Molecular dynamics simulation on shape-memory effect in Ni-Al alloy by using EAM potential", Transactions of the Japan Society of Mechanical Engineers, Series A, Vol.71, pp.717-723 (2005).

7) T. Uehara and T. Tamai, "An atomistic study on shape-memory effect by shear deformation and phase transformation", Mechanics of Advanced Materials and Structures, Vol.13, pp.197-204 (2006).

8) T. Uehara, T. Tamai and N. Ohno, "Molecular dynamics simulations of the shape-memory behavior based on martensite transformation and shear deformation", JSME International Journal, Series A, Vol.49, pp.300-306 (2006).

9) S. Rubini and P. Ballone, "Quasiharmonic and molecular-dynamics study of the martensitic transformation in Ni-Al alloys", Physical Review B, Vol.48, pp.99-111 (1993).

10) D. Farkas, B. Mutasa, C. Vailhe and K. Ternes, "Interatomic potentials for B2 NiAl and martensitic phases", Modelling and Simulation in Materials Scienceand Engineering, Vol.3, pp.201-214 (1995).

11) M. Parrinello and A. Rahman, "Polymorphic transitions in single crystals : a new molecular dynamics method", Journal of Applied Physics, Vol.52, pp.7182-7190 (1981).

12) T. Shimokawa, T. Kinari, S. Shintaku, A. Nakatani and H. Kitagawa, "Deformation and localized necking mechanism of nanocrystalline materials by molecular dynamics simulation", Journal of the Society of Materials Science, Japan, Vol.54, pp.399-406 (2005).