

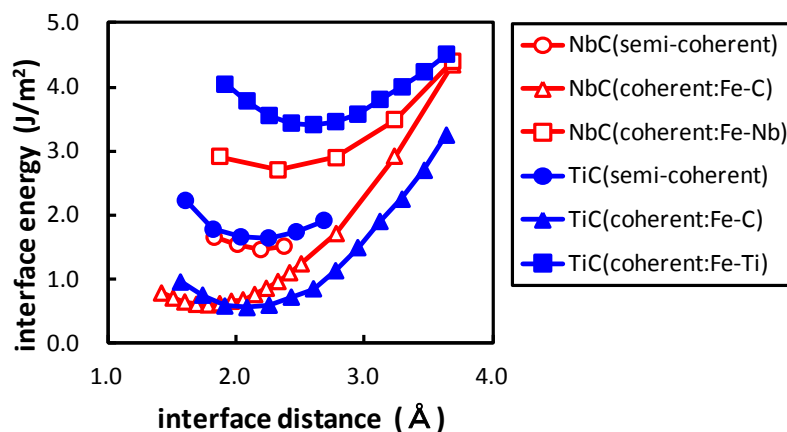
鋼中析出物界面の第一原理計算

新日鐵住金¹、北陸先端大² 澤田英明¹、谷口俊介¹、川上和人¹、尾崎泰助²

鋼の強化など諸々の特性に対して重要な役割を果たす鋼中析出物の1つである NaCl 型析出物は、析出物の成長に伴って整合界面から部分整合界面へと遷移すると考えられている。整合析出物と部分整合析出物では析出物がもたらす諸々の物性が異なる可能性があり、整合状態から部分整合状態へ遷移する大きさを知った上で制御することが重要になっている。そこで、整合界面と部分整合界面の界面エネルギーと歪エネルギーを第一原理計算のオーダーN法[1]などを用いて算出し、析出物が整合状態から部分整合状態に遷移する大きさを見積ることを考え、これまでに bcc-Fe 中の析出物 NbC に対する計算結果を報告してきた[2]。

今回、bcc-Fe 中の析出物 TiC に対して計算を行った結果について報告する。TiC と NbC では最外殻の d 電子数などの電子状態や、格子定数に違いがある。しかし、その界面エネルギーの違いや整合界面から部分整合界面に遷移するサイズの違いについては、実験的に不確かな部分があり、理論的に決定することが求められていた。図 1 に、第一原理計算によって求められた TiC の部分整合界面の界面エネルギーを示すが、NbC に比べて僅かに大きいことが分かる。これは、整合界面の計算で Ti, Nb と Fe が近接する場合の界面エネルギーが NbC に比べて TiC の場合に大きいことに起因していると考えられる。また、Ti, Nb と Fe が近接する場合の整合界面では、最外殻電子が1つ多い Nb の方が Fe 原子との結合を強固にしやすいために界面エネルギーの違いに結びついている。

更に、Fe と TiC の格子定数の違いによって生じる Fe 相の歪エネルギーの計算を実施し、上記の界面エネルギーに加えることによって、整合界面から部分整合界面に遷移する大きさを求めた。本研究会ではその結果についても議論する。



(図 1) 界面エネルギーの相間距離依存性

文献

[1] T. Ozaki, Phys. Rev. B **74**, 245101 (2006)

[2] H. Sawada *et al.*, Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. **21**, 045012 (2013)