

電子論に基づく Fe-Si 合金のマクロな機械的特性の予測

阪大院基礎工 譯田 真人、君塚 肇、尾方 成信

Si は鉄鋼材料の添加元素として用いられている。Fe 結晶に Si 原子を添加することで、塑性変形の素過程である転位運動のすべり系の限定、降伏応力の変化、さらには塑性変形時の加工硬化率の増加が生じることが実験により報告されている。これらの塑性変形特性の変化は、固溶 Si 原子が Fe 結晶中の転位（特に bcc-Fe 結晶ではらせん転位）の運動に影響を与えることで生じると考えられているが、そのメカニズムの詳細については現在でも明らかではない。

我々の研究グループでは、現在までに、原子間の相互作用を経験的なモデルポテンシャルで記述した原子モデリングの枠組みを用いて、Fe 結晶中のらせん転位と Si 原子の相互作用について研究を行ってきた。これの研究から、らせん転位と Si 原子間に引力的な相互作用が働くことや、らせん転位がキンク対を形成しながら移動する際のエネルギー障壁が、らせん転位近傍に存在する Si 原子によって変化することを明らかにした。また、これらの原子論的知見によって、実験によって観察されている Fe-Si 合金の降伏応力の Si 濃度依存性、温度依存性を定性的に説明できることを示した。しかしながら、経験的なモデルポテンシャルの信頼性には未だ検討の余地があり、例えば、転位運動のすべり系の変化など、らせん転位の転位芯構造の変化の詳細が重要と考えられている現象のメカニズムを明らかにしようとする場合には、bcc 結晶から大きく乱れた転位芯構造を正確に再現する必要があるが、経験的モデルポテンシャルでは転位芯構造が精度よく再現できず定性的にも異なる結果を導く危険性がある。

そこで本研究では、まず固溶 Si 原子が Fe 結晶中のらせん転位の転位芯構造とらせん転位がキンク対を形成しながら移動する際のエネルギー障壁に与える影響を第一原理計算に基づき獲得し、Fe-Si 合金中の各すべり系の個々のらせん転位の運動特性を明らかにする。本研究で用いるらせん転位を 2 本含む bcc-Fe 結晶モデルを図 1 に示す。らせん転位と Si 原子の相互作用を適切に評価するためには、少なくとも 1000 原子程度を含む原子モデルが必要となり、この第一原理計算は従来の計算機の能力では実行が容易ではなかった。本研究では、計算コストが原子数に比例するために大規模モデルの計算に適した第一原理計算ソフトである OpenMX[1]を用いて計算を行うことによりこれを可能とする。この第一原理計算の枠組みから得られた個々の転位の運動特性を、複数の転位の運動から多結晶材料のマクロな応力-ひずみ応答を予測する計算手法の枠組みに導入することで、Fe-Si 合金のマクロな機械的特性の予測が可能な計算機解析の枠組みを構築する。

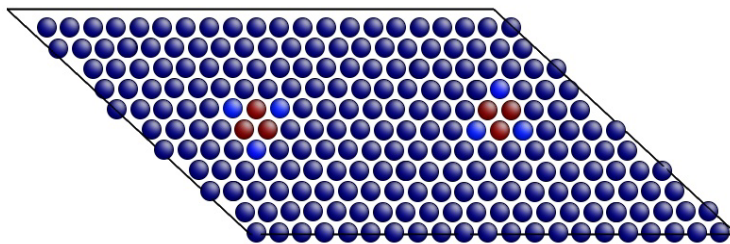


図 1. 第一原理計算によりらせん転位と Si 原子の相互作用を評価するための解析モデル。
文献

[1] <http://www.openmx-square.org/>