

# 構造用金属材料の微細組織の解明と設計: 第一原理計算によるアプローチ

香山正憲(産総研ユビキタス)、澤田英明、川上和人(新日鐵住金)、  
譯田真人、尾方成信(阪大基礎工)、Vikas Sharma、田中真悟(産総研ユビキタス)

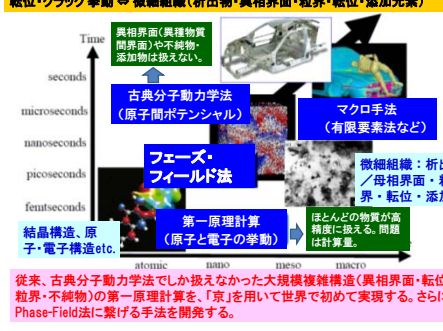
## 本研究の概要

大規模第一原理計算(オーダーN法:OpenMXコード)を用いて、金属材料中の異相界面や転位、粒界の安定構造やエネルギー、機械的挙動、それらへの合金成分・不純物の効果を高精度に解明する。これにより、金属材料の特性を支配する微細組織の構造や性質を明らかにする。さらに第一原理計算をPhase Field法に繋げることで、マルチスケールに渡る現象を解明し設計する手法を構築し、優れた構造材料の開発やレオメタル代替の研究に貢献する。

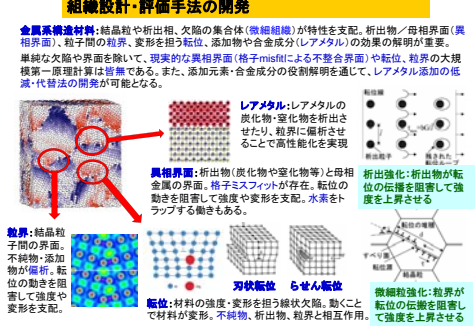
優れた強度と靱性、耐久性、耐熱性を併せ持つ構造材料の開発は、高効率のエネルギー変換、輸送機器等の軽量化による省エネルギー、安全・安心な大型構造物など、持続可能な社会を支える社会基盤技術である。レオメタルの添加量が多く、低減化の及ぼす効果は極めて大きい。金属系構造材料の特性を支配する微細組織の構造や性質を理解するには、大規模第一原理計算が不可欠である。従来、現実的な大規模構造の異相界面・粒界・転位の電子挙動まで掘り下げた第一原理計算は、皆無である。

本研究では、「京」を用いた大規模計算で、Fe/析出物界面、Fe中の転位、粒界の構造や性質、それらと合金成分・不純物との相互作用を明らかにする。また、局所エネルギー・局所応力計算法など新規解析手法も適用する。

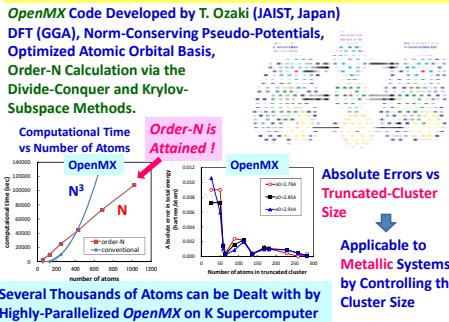
金属材料の強度・変形・破壊 → マルチスケールの現象: 原子間結合 ⇔ 転位・クラック挙動 ⇔ 微細組織(析出物・異相界面・粒界・転位・添加元素)



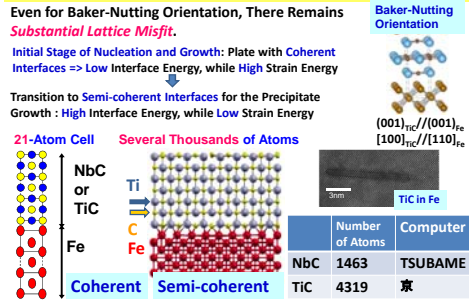
金属材料の高性能化のためのマルチスケール組織設計・評価手法の開発



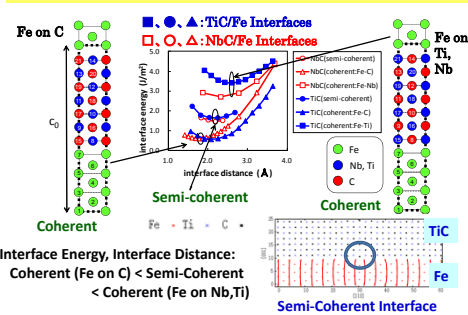
## Order-N DFT Calculations by OpenMX Code



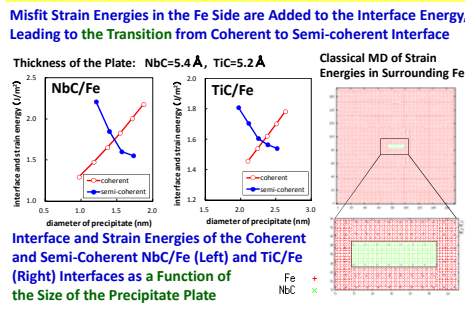
## NaCl-type Carbides; TiC, NbC and VC as Precipitates for Strengthening Steel



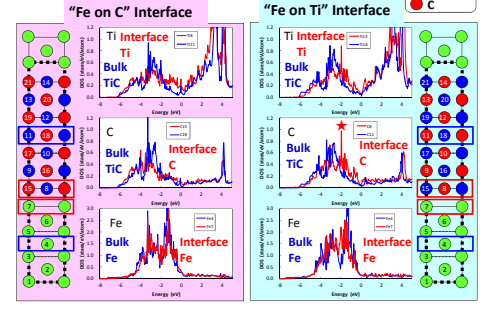
## First-Principles Results of TiC/Fe and NbC/Fe Interfaces: Coherent vs. Semi-coherent



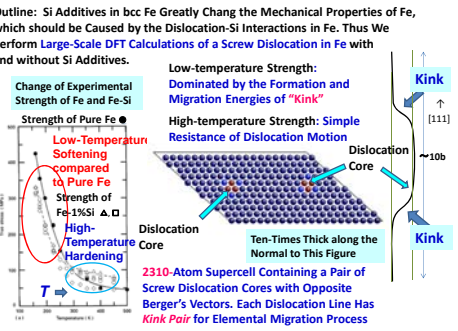
## Effects of Misfit Strain Energies of the Fe Side, depending on the Size of the Precipitate Plate



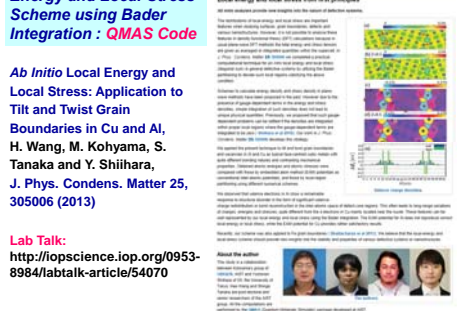
## Local Densities of States (LDOS) at the TiC/Fe Coherent Interfaces: Fe on C (Left), Fe on Ti (Right)



## Screw Dislocation in bcc Fe: Interactions with Si



## Development of Local-Energy and Local-Stress Scheme using Bader Integration: QMAS Code



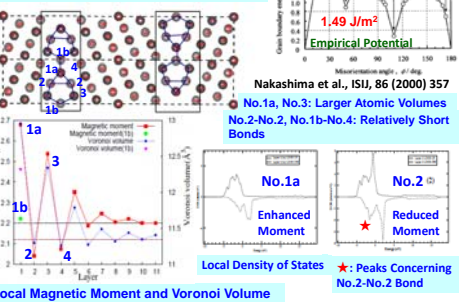
## Local Energy and Local Stress of 5Fe-5TiC (001) Interface (Optimized)

a=b=3.024 Å, c=18.074 Å

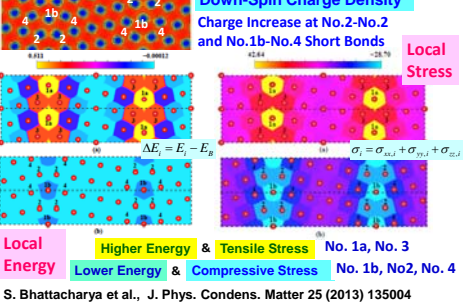
Atom	Z-coordinate	Magnetic Moment (μ <sub>B</sub> )	Local Valence Electrons	Local Energy w.r.t. bulk (eV)	Local Stress (Parallel) (GPa)	Local Volume (Bohr <sup>3</sup> )
Ti	9.0370	-0.01	16.03	0.060	-13.814	132.17291
C	9.0370	-0.003	16.05	0.190	-16.762	132.01789
Ti	6.9166	-0.01	16.05	0.190	-16.762	132.01789
C	6.8765	0.01	16.13	1.322	-24.788	138.32453
Ti	4.8311	0.04	16.13	1.322	-24.788	138.32453
C	4.6809	-0.02	16.13	1.322	-24.788	138.32453
Fe	2.7464	2.46	7.77	-0.552	★52.404	92.24539
Fe	1.4243	2.63	8.05	-0.883	3.551	85.2353
Fe	0.0000	2.67	7.97	0.444	20.129	87.53935

Analysis by QMAS Code

## Σ=11 (332) Grain Boundary in Fe: Local Magnetic Moment



## Σ=11 Grain Boundary in Fe: Local Energy and Local Stress



## まとめ

鉄鋼材料中の析出相(遷移金属炭化物)/母相界面、転位、粒界等を対象に、オーダーN法プログラムによる大規模第一原理計算を「京」パソコンを用いて実行することで、構造や性質、合金成分や不純物との相互作用を解明する研究を開始している。Fe/TiCの整合界面と部分整合界面の遷移の臨界サイズなど、大規模第一原理計算でなければ解明できない課題で顕著な進歩が得られた。

また、局所エネルギー・局所応力の新規解析手法をこうした異相界面や粒界に適用することで、掘り下げた解明が可能となることが示された。

こうした第一原理計算の取り組みをメゾ・マクロの微細組織の解明と設計に繋げるため、第一原理計算結果をPhase-Field法に繋げる方法論、手法の開発について、検討を進めている。

文献: 異相界面: H. Sawada, S. Taniguchi, K. Kawakami and T. Ozaki, *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* 21, 045012 (2013); 転位: 譯田真人, 塚塚尾, 尾方成信, *日本金属学会誌* 77, 409 (2013); 局所エネルギー・局所応力(粒界等): H. Wang, M. Kohyama, S. Tanaka and Y. Shiihara, *J. Phys.: Condens. Matter* 25, 305006 (2013); S. K. Bhattacharya, S. Tanaka, Y. Shiihara and M. Kohyama, *J. Phys.: Condens. Matter* 25, 135004 (2013).

謝辞: 共同研究者である椎原良典博士(東大生産研)、石橋章司博士(産総研ナノシステム)、S. Bhattacharya博士、H. Wang博士(産総研ユビキタス)に感謝いたします。本研究は、元素戦略プロジェクト構造材料研究拠点、及びCMSI(計算物質科学イニシアティブ)の支援を受けました。新学術領域「バルクナノメタル」、JST産学共創「ハミルトニアンからの材料強度設計」からも部分的支援を受けました。感謝申し上げます。