

# 鉄鋼材料の強度設計への転位－固溶元素間相互作用の大規模第一原理計算の適用 ～電子論による構造材料の力学特性設計に向けて～

阪大院基工<sup>1</sup>、京大 ESISM<sup>2</sup> 譯田真人<sup>1</sup>、尾方成信<sup>1,2</sup>

wakeda@me.es.osaka-u.ac.jp

鉄鋼材料の強度や塑性変形特性などの力学特性は、変形の主たる素過程である転位の運動によって支配されている。鉄鋼材料に含まれる固溶元素は点欠陥でありそれそのものがマクロな力学特性に与える影響は少ないが、線欠陥である転位と相互作用することでその影響を大きく拡大し、低濃度であっても鉄鋼材料のマクロな力学特性を大きく変化させる。したがって、鉄鋼材料の強度設計にはこの転位－固溶元素間の相互作用をいかに精度良く求めるかが重要である。この相互作用の詳細が明らかになれば、的確な力学特性設計指針の構築が可能となる。しかしながら実験では材料内部の原子スケール相互作用を直接的かつ定量的に評価するのが困難なことや、第一原理に基づく理論計算では転位と固溶元素をともに含む大規模モデルに対する計算コストが大きいことから、これまでに相互作用の定量的な評価はほとんど行われていなかった。ところがスパコン京の登場によりその状況が一変し、転位と固溶元素を含むモデルの第一原理計算が容易に実現できるようになった。第一原理計算により転位－固溶元素間相互作用の詳細を電子・原子論的に明らかにすることができれば、従来の経験的かつ帰納的な力学特性設計から非経験的かつ演繹的な力学特性設計へのパラダイムシフトをもたらすことができる。本研究では具体的に、鉄中のらせん転位と種々の固溶元素との電子・原子論的相互作用を大規模第一原理計算により獲得することで、非経験的な鉄鋼材料の力学特性設計指針の構築を目指す。

体心立方構造（BCC）をもつ鉄ではらせん転位の運動が力学特性を支配する。本研究ではらせん転位を含む BCC 鉄の原子モデルを作製し、モデル中の鉄原子を種々の固溶元素に置換したモデルのエネルギーを第一原理計算により求め、らせん転位と固溶元素との相互作用エネルギーを系統的に評価した。一例として置換型固溶元素である Si, Cr, Mn, Co, Ni に対する計算では、Si, Mn, Ni は転位と引力的な相互作用をし、相互作用は転位芯から離れるにつれて小さくなる一方、Cr, Co は転位とほとんど相互作用しないことがわかった。例えば鉄の降伏強度は、応力下でのらせん転位の運動速度によって決まる。つまり固溶元素によりらせん転位の速度が増加すると固溶軟化が、速度が減少すると固溶硬化が生じる。第一原理計算から、Si, Mn, Ni は転位と相互作用することで転位の運動を阻害し鉄の降伏強度を向上させる一方、Cr, Co は相互作用が小さいために降伏強度にほとんど影響を与えないことが予測できた。実際に実験でも、Si, Mn, Ni は降伏強度を増加させ、Cr, Co は降伏強度をほとんど変化させないことが報告されており、本研究で得られた予測と一致する。本研究成果は、電子論による力学特性設計の可能性を強く示唆するものである。

固溶元素	相互作用エネルギー (meV)
Si	-170
Cr	-21
Mn	-219
Co	-8
Ni	-183

(負の値は引力相互作用)

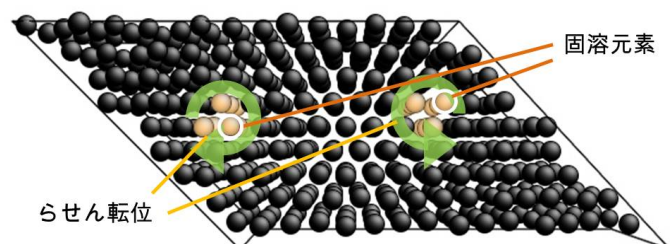


図 1 転位と固溶元素相互作用の大規模第一原理計算