

電子・原子論に基づくFe-Si合金の強度予測

大阪大学大学院基礎工学研究科
譯田 真人*, 君塚 肇, 尾方 成信

TSME
Theoretical Solid Mechanics
Digital Laboratory Osaka University

概要

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

鉄は構造材料・機械材料として工業的に広く利用されており、その高強度化は省資源・省エネルギーの観点からも重要である。鉄の高強度化手法の一つとして、添加元素による合金化が広く行われている。鉄合金中の添加元素は材料内部の空孔や転位、粒界などの格子欠陥と複雑に相互作用することで巨視的な機械的特性に影響を与えるが、その詳細な原子レベルのメカニズムは明らかではない。添加元素による高強度化のメカニズムを原子スケールから理解することで、より優れた機械的特性をもつ合金開発の指針を創出することが可能となる。

本研究ではFe-Si合金に注目し、固溶Siが鉄の巨視的な機械的特性に及ぼす影響を電子・原子論に基づき明らかにすることを目指している。Si原子は多くの鉄鋼材料で添加元素として用いられており、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、降伏応力、さらには塑性変形時の加工硬化率に変化が生じることが報告されている。¹⁾ これら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ない。本研究では、第一原理計算より固溶Si原子がFe結晶中のらせん転位の転位芯構造に与える影響を評価するとともに、らせん転位とSi原子の相互作用エネルギーを獲得する。この相互作用エネルギーを用いることで、Fe結晶中のキंक対の形成と移動のエネルギー障壁に与えるSi原子の影響を電子論に基づき評価することが可能となる。さらにキंक対の形成と移動のエネルギー障壁とOrowanの式より、固溶Siによる巨視的な降伏応力の変化を定量的に評価する枠組みについても述べる。

電子論に基づきらせん転位と固溶Siの相互作用とらせん転位の移動のエネルギー障壁を評価する手法

(i) Order-N第一原理計算(OpenMX)²⁾

・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ている

(ii) らせん転位を含むbcc-Fe結晶モデル

・bcc-Fe結晶

・らせん転位を2本含む

・転位線方向は (iii) 方向

・周期境界条件を全方向に適用

(iii) 純Feの転位芯周りの電子密度分布

(iv) らせん転位近傍のSi原子による電子密度分布の変化

(v) らせん転位とSiの相互作用エネルギーの評価

$$\delta\Delta E_p^{Si} = E_{(i)} + E_{(ii)} - E_{(iii)} - E_{(iv)}$$

(vi) line tension modelによるキंक対形成と移動のエネルギー障壁の評価

らせん転位のエンタルピー

$$E_{LT} = \sum_{i=1}^N \left[\frac{K}{2} (P_i - P_{i+1})^2 + \Delta E_p(P_i) + \delta\Delta E_p^{Si}(P_i) \delta_{\beta} + \{(\sigma \cdot b_i) \times l_i\} \cdot P_i \right]$$

らせん転位とSi原子の相互作用を考慮したline tension modelを解くことでキंक対の形成と移動のエネルギー障壁が得られる

らせん転位の移動のエネルギー障壁に及ぼす固溶Siの影響の原子論的評価（経験的ポテンシャル）³⁾

(i) 経験的ポテンシャル
(Embedded atom methodポテンシャル)
Fe-Fe間の相互作用⁴⁾

・らせん転位の転位芯の6回回転対称性を再現

Fe-Si間の相互作用

・第一原理計算から得られたFeの空孔形成時のエネルギー変化、体積変化、Fe中へのSiの固溶エネルギー、空孔とSiとの結合エネルギー等を再現するように構築

(ii) らせん転位と固溶Siの相互作用エネルギーの評価

らせん転位と固溶Siの間に引力相互作用が生じる

(iii) らせん転位のキंक対の形成と移動のエネルギー障壁の評価

Nudged Elastic Band (NEB) method
= 最小エネルギー経路を探索する手法 → エネルギー障壁ΔEが求まる

Pure Fe

キंक対の形成と移動プロセス

Fe-Si alloy

固溶Siがらせん転位のキंक対の形成と移動のエネルギー障壁を変化させる

らせん転位と固溶Siの相互作用に基づく強度特性の予測（経験的ポテンシャル）

$\tau_{CRSS} = \tau^* + \tau_{ath}$

τ^* : thermal stress
 τ_{ath} : athermal stress

キंक対の形成をもたないらせん転位が移動する際のエネルギー障壁に起因する抵抗応力

Siによるらせん転位の移動の抵抗応力

Fleischer/Friedel: $\tau_{ath} = \frac{\sqrt{2}F^{3/2}}{b^3} \sqrt{\frac{c}{\mu}}$

CRSSの実験値 (athemal CRSS)

1. S. Takeuchi, et al., J. Phys. Soc. Japan, 27, (1969) 929 (A).
S. Argon, "Strengthening mechanism in crystal plasticity" (Oxford University Press, 2008))
2. Y. T. Chen, et al., Acta Metallurgica, 29, (1981) 1171-1185
3. W. A. Spitzig, et al., Acta Metallurgica, 19, (1971) 1143-1152

Orowanの式

$\dot{\gamma} = b \rho_m \bar{v}(\tau)$

$\dot{\gamma}$: 塑性ひずみ速度
 b : バーガスベクトル
 ρ_m : 転位密度
 $\bar{v}$: 転位の移動速度
 τ : 臨界分解せん断応力 (CRSS)

$\dot{\gamma} = \lambda b \rho_m \left[\left\{ v_{in}(1-c) \exp\left(-\frac{\Delta G_{in}^{(1)}(\tau)}{k_B T}\right) + v_{in} \frac{c}{2} \exp\left(-\frac{\Delta G_{in}^{(2)}(\tau) - \Delta E_{Si}^{(2)}(\tau)}{k_B T}\right) + v_{in} \frac{c}{2} \exp\left(-\frac{\Delta G_{in}^{(3)}(\tau) + \Delta E_{Si}^{(3)}(\tau)}{k_B T}\right) \right\}^{-1} \right. \\ \left. + v_{in} \exp\left(-\frac{\Delta G_{in}(\tau, c)}{k_B T}\right) \right]^{-1}$

softening hardening

softening hardening

softening hardening

Y. T. Chen, D. G. Atteridge and W. W. Gerberich, Acta Metallurgica, Vol. 29(1981) pp.1171-1185.

T. Tanaka and S. Watanabe, Acta Metallurgica, Vol. 19, (1971) pp.991-1000.

Reference

1) K. Ushioda, J. Takahashi, S. Takebayashi, D. Maeda and K. Hayashi: Advanced steels, Y. Weng, H. Dong and Y. Gan (Eds.) Springer-Verlag, (2011), pp.229-240
2) http://www.openmx-square.org/
3) M. Wakeda, H. Kimizuka, S. Ogata, J. Japan Inst. Met. Mater. Vol. 77, No. 10 (2013), pp. 409-414.
4) G. J. Ackland, M. I. Mendeleev, D. J. Srolovitz, S. Han and A. V. Barashev: J. Phys.: Condens. Matter 16 (2004) S2629-S2642.