

論文の内容の要旨

論文題目：鉄 bcc/fcc 変態における界面キネティクスの分子動力学法解析

氏名：立山 真司

鉄の異相界面構造と相変態界面キネティクスは鉄鋼材料組織制御の重要な要素であり、様々な研究を通じ多くの知識が蓄積されてきた。また、相変態や相変態時の界面構造の研究における数値シミュレーションは実験的に直接観察困難な鉄原子の運動を明らかにできることからその意義は大きく、とりわけ古典分子動力学法は原子間ポテンシャルを用いることにより計算負荷を低減でき、大規模な原子モデルにおける原子運動を直接的に解析し得る手法として有効であると考えられている。一方、この分子動力学法の解析適用範囲は原子間ポテンシャルに依存し、既存の原子間ポテンシャルを用いた場合には鉄の面心立方結晶（以下、fcc）相から体心立方結晶（以下、bcc）相への変態を定性的に再現出来るものの、逆変態を含めた双方向的な固相変態の解析が困難であるという課題が残されている。しかし、既存の代表的ポテンシャルである Finnis-Sinclair ポテンシャル（以下、FS ポテンシャル）の再現する物性を詳細に検討すれば、凝集エネルギー差が温度に依存せず常に bcc 相が安定であるにもかかわらず、fcc-bcc 変態を再現可能であることが指摘できる。すなわち、この点に着目すれば、FS ポテンシャルを用いた古典分子動力学法において鉄異相界面を高温熱緩和することにより fcc-bcc 変態を再現し、異相界面毎の原子配置に依存した変態キネティクスの比較解析も可能である。このような視点から、本研究では、FS ポテンシャルを用いた古典分子動力学法による鉄 fcc-bcc 変態の解析、双方向変態の解析が可能な新規ポテンシャルの開発、新規ポテンシャルを用いた解析を行うことにより、高温における鉄の相変態の界面キネティクスと異相界面エネルギーを検討することを目的とした。

第1章は緒論であり、本研究における位置付けとその目的を述べた。

第2章では、分子動力学法シミュレーションの計算手法について総括的に述べた。すなわち、解析対象によって異なる部分をのぞき、第3章以降で共通した分子動力学法の計算方法、FSポテンシャルの性質、鉄異相界面モデルの作成方法、計算結果として得られる原子座標データの可視化処理方法のそれぞれについて述べた。その概要は以下の通りである。分子動力学法計算方法は従来の鉄に対する解析で用いられてきた一般的な方法を選択した。FSポテンシャルでは第一原理計算に基づいた鉄の弾性定数や格子定数などの力学的物性を保証するポテンシャルパラメータが開発されているため、本研究ではこのポテンシャルパラメータを用いた。また、解析には数万原子オーダーの bcc(110)//fcc(111)界面を持つ異相界面モデルを作成し、異相界面の周期境界を厳密に作成することで無限平板を仮定したモデル系を用いた。そして、可視化手法として、変態構造を捉えるのに有効な手段である、配位数および原子応力の数値を基準として原子着色する方法を採用した。

第3章では、FSポテンシャルを用いた分子動力学法計算により、実験的に観察される bcc(110)//fcc(111)界面である Nishiyama-Wassermann 関係（以下、N-W 関係）、Kurjumov-Sachs 関係（以下、K-S 関係）及びその中間の界面について、それらを熱緩和した際に生じる fcc-bcc 変態の界面キネティクスを解析した。その結果、N-W 関係およびそれから 2° 回転させた界面では平面的な変態が進行した。一方で、N-W 関係から 4° 回転させた界面および K-S 関係では最初は平面的な変態が進行し、界面揺らぎが徐々に増大した後に針状の変態にシフトした。また、これらの fcc-bcc 変態は全て整合領域から始まる Bain の変形パスから開始していた。そして、変態過程の違いは初期界面における整合領域の分布の差異に起因することを明らかにした。また、整合領域は原子応力の小さい部分と一致し、原子応力を用いた可視化により変態開始点と進行方向が明示されることを示した。これらの結果は、鉄異相界面の原子構造による界面キネティクスの差異を解析する手段としての分子動力学法の有用性を示したと言える。

第4章では、鉄における fcc-bcc 変態および bcc-fcc 変態の双方向変態が解析可能なポ

テンシヤル関数形の開発を行った結果を述べた。ここでは、従来の FS ポテンシヤルが鉄 fcc-bcc 変態を定性的に再現可能であることから、FS ポテンシヤルを開発ポテンシヤルのベースとした。FS ポテンシヤルの関数形は bcc 結晶と fcc 結晶の最近接原子数を基準に電荷密度項の計算原子数を決定していることから、電荷密度項に影響距離とカットオフ関数を導入したモデルを構築した。この影響距離 R_c を基準に bcc 結晶と fcc 結晶の物性変化を確認した結果、 $R_c=3.20 \text{ \AA}$ 付近を境として結晶安定性が入れ替わることを確認した。また、カットオフ関数の導入は FS ポテンシヤルが保証する力学的物性値に影響を与えず、bcc/fcc 変態を定性的に再現することを確認した。さらに、N-W 関係モデルを用いて界面キネティクスを観察した結果、結晶安定性の変化に従って界面移動方向が変化し、界面の停止する平衡状態も存在することが示された。これらの結果より R_c のパラメータ値を決定し、平衡点 (1516K, 以下 A3 点) 付近での界面キネティクスの解析を可能とした。この新規ポテンシヤルは異相界面の解析に最適化されていると同時に、従来の FS ポテンシヤルの性質を包含し、FS ポテンシヤルを用いたこれまでの研究と同様の解析に適用することが可能であることを示した。

第 5 章では、前章で開発した鉄の再現する新規ポテンシヤルを用いて A3 点前後における双方向的な変態の分子動力学法解析を行った結果を述べた。ここでは、N-W 関係を 0° 、K-S 関係を 5.26° として様々な角度に回転した bcc(110)//fcc(111) 界面モデルを用いて界面キネティクスと界面エネルギーの比較を行った。全てのモデルで、A3 点より低い 1511K では fcc-bcc 変態が生じ、逆に A3 点より高い 1521K では bcc-fcc 変態が生じた。界面の回転角によって変態過程と速度は異なるが、幾何学的な対称性から 60° 周期で同等界面が現れ、 0° を挟んだ正負でほぼ同じ計算結果が得られた。また、1511K における fcc-bcc 変態過程では、まず N-W 関係から K-S 関係に至る範囲では第 3 章と基本的に同等の結果が得られた。すなわち、N-W 関係からは高速な平面的変態、K-S 関係からは平面的な変態から針状成長へのシフトが起こり、N-W 関係から K-S 関係にかけて平面的成長の速度が遅くなる傾向が見られた。

界面を回転させたモデル全体としては、K-S 関係の平面的成長速度は極小値となり、他に回転角 16° の原子関係が極大値、回転角 26° の原子関係が極小値の界面移動速度を持っていた。1521K の界面移動速度の傾向は 1511K の場合と同様で、同じ回転角に界面移動速度カuspが現れていた。変態過程は平面的成長の場合以外に、bcc-fcc 変態に伴う収縮から周期境界が途切れ、その面から bcc-fcc 変態が起こる場合も見られた。A3 点で解析した界面エネルギーは、N-W 関係で最も低く、次いで K-S 関係が低い値となった。一方で界面移動速度の場合と異なり、界面エネルギーの明確なカuspには現れず、 $\pm 30^\circ$ に近づくにつれて界面エネルギーが高くなる傾向は見られたものの、界面移動速度との相関性は見られなかった。

第 6 章では本論文の総括を述べた。

以上、本研究では分子動力学法を用いた鉄の異相界面キネティクスの解析を行い、分子動力学法シミュレーションが鉄異相界面のキネティクス解析に有効な手法であることを示した。その後、FS ポテンシャルを基にした新規ポテンシャルを開発し、分子動力学法による鉄固相変態の解析範囲を従来の fcc-bcc 変態から bcc-fcc 変態及び界面停止状態を含めた双方向的な変態の領域まで大きく拡張し、N-W 関係、K-S 関係以外の異なる変態進行界面を明らかにすることで、分子動力学法解析が異相界面解析に新たな知見をもたらすことを示した。