Fe-Si 合金中の転位挙動の原子論的解析

新里秀平^{*1}, 譯田真人^{*2}, 君塚肇^{*2}, 尾方成信^{*2}

Atomic study of dislocation behavior in Fe-Si alloy

Shuhei SHINZATO^{*3}, Masato WAKEDA, Hajime KIMIZUKA and Shigenobu OGATA^{*3} Osaka Univ. Graduate School of Engineering Science
Machikaneyama-cho 1-3, Toyonaka city, Osaka, 560-0031, Japan

Fe-Si alloy is well known as the material which has higher strength than pure iron and generally used as high tensile strength steel. In the Fe-Si alloy, Si solute atom affects its strength. However, this mechanism has not been clarified in detail yet. In bcc crystal, plasticity is dominated by behavior of screw dislocation and screw dislocation in bcc metal glides through the thermal activation process called double kink nucleation and kink migration. In order to research the effect of Si on strength of Fe-Si alloy, we estimate the influence of Si solute on screw dislocation behavior by determining the energy barrier for double kink nucleation and migration using atomic scale simulation. We also estimate the critical resolved shear stress (CRSS), which is one of the mechanical properties to measure the mechanical strength of materials, from the analysis of kink migration process and then discuss the relation between CRSS and Si solute concentration for understanding the strengthening mechanism of Fe-Si alloy.

Key Words : Fe-Si alloy, Kink, Screw dislocation, Nudged Elastic Band method

1 緒 言

鉄鋼材料に Si を添加することで Si を含まない鋼材と比べて引張強度、疲労強度、降伏強度などの材料特性が向上することが報告されている⁽¹⁾。鉄などの bcc 結晶の塑性変形の素過程は主にらせん転位の運動によって支配されることが指摘されており、らせん転位はキンク対と呼ばれる構造の熱活性化プロセスを主な媒介として移動する。したがって、Si の添加による強度向上のメカニズムとしては、塑性変形を支配するらせん転位のキンク対に Si 原子が影響を与えていることが主として考えられ、そのメカニズムの詳細な解明が求められている。これまでにキンク対の形成に対する Si 原子の影響について原子論的解析が行われている⁽²⁾。しかし、ある程度以上の温度下における塑性変形機構では、キンク対の形成よりも移動のほうが強度に影響を与えることが指摘されており⁽³⁾、キンク対の移動に対する Si 原子の影響を評価することが求められる。本研究では、まず Fe 中の Si 原子がキンクの移動に与える影響について原子スケールシミュレーションによる解析を行った。そして、有限温度下における Fe-Si 合金の CRSS について議論する。

2 解析手法

2.1 Nudged Elastic Band(NEB)法 本研究ではエネルギー障壁を評価するために NEB 法を用いて計算を行う。NEB 法は位相空間中の 2 つの状態点を結ぶ最小のエネルギー経路 (MEP) を探索する手法である。位相空間中に配置した複数の原子モデルを仮想的なばねによりつなぎ、それらの最安定配置から最小エネルギー経路を求める⁽⁴⁾。この経路に沿ったエネルギーの最大値が遷移状態に対応し、初期配置のエネルギーとの差から活性化エネルギーを求めることができる。

2.2 原子間ポテンシャル 本研究では Si-Si 間に相互作用が生じないほど Si が希薄に存在する Fe-Si 合金を対象とする。Fe-Fe 間の相互作用に関しては Ackland らの EAM ポテンシャル⁽⁵⁾を使用し、Fe-Si 間相互作用に関しては Fe-Fe 間相互作用のポテンシャルを基に我々の研究グループで開発されたポテンシャルを用いる。

3 キンクの移動に与える Si の影響の解析

本研究で用いる解析モデルは原子数 138240 個、サイズは $112 \text{ \AA} \times 73 \text{ \AA} \times 198 \text{ \AA}$ である。境界条件は $[11\bar{2}]$ 方向に周期境界条件をとり、 $[111]$, $[\bar{1}10]$ 方向は自由境界とする。また、NEB 計算で用いるイメージ数は 21 とした。モデルの中心に $(1/2)[111]$ らせん転位を導入し、この転位がキンクの形成、移動を伴いながら $[11\bar{2}]$ 方向に 1 原子間距離分だけ移動す

^{*1} 学生員, 大阪大学大学院 基礎工学研究科 (〒 560-0031 大阪府豊中市待兼山町 1-3)

E-mail: shuhei.shinzato@tsme.me.es.osaka-u.ac.jp

^{*2} 正員, 大阪大学

る際の MEP を探索し、転位の移動のエネルギー障壁を計算する。さらに、図 1 に示す 1, 2 の位置の Fe 原子 1 個を Si 原子に置き換えて NEB 計算を行うことによりキンの移動に対する Si 原子の影響について調査する。図 1 ではらせん転位を Central symmetry parameter に基づいて可視化した。

Fig. 1 Kink model.

(a) Energy barrier for pure iron.

(b) Si effect on energy barrier for kink migration.

Fig. 2 Results of NEB analysis.

純 Fe で解析を行ったキンの形成・移動時のエネルギー変化を図 2(a) に示す。位相点 6 までのエネルギー障壁はキンク形成のエネルギー障壁であり、キンの移動は位相点 6 から位相点 16 までであると考えられる。純鉄ではキンクが移動する際に大きなエネルギー障壁は見られない。本研究ではキンク幅が $12b$ 程度のなめらかなキンクであるため、転位線方向の格子の周期性が平滑化されされたためであると考えられる。キンの移動のエネルギー障壁に及ぼす Si 原子の影響を見るために、位相点 6 から 16 までのエネルギーについて、Si を導入したモデルと純鉄のモ

デルとのエネルギーの差をとったものを図 2(b) に示す。図 2(b) より、キンクが Si 原子を通過する際にエネルギー障壁が存在し、その大きさは約 0.05 eV であることが観察された。これは、キンクと Si 原子に次のような相互作用が働いた結果であると考えられる。図 3(a) に本研究で用いたモデルで観察されたキンの概形を示す。また図 3(b) は原子体積に基づいて着色したものである。原子体積は各原子の Voronoi 多面体の体積で定義した。図 3(b) より、キンの両端では周囲の原子よりも体積の減少した原子と膨張した原子が分布していることがわかる。そのため、キンの両端では圧縮と引張の応力場が発生していると考えられる。キンクが移動し Si 原子を通過すると、Fe 原子より原子半径の小さな Si 原子が生み出す応力場とこれらの応力場が相互作用し、系のエネルギーが変化する。すなわち、Fe 中の Si 原子は圧縮の応力場においてエネルギー的に安定状態となり、逆に引張の応力場においては不安定となる。したがって、キンクが Si 原子を通過する際にはキンの持つ引張の応力場により系のエネルギーが不安定となりエネルギー障壁が形成されたと考える。

(a) Central symmetry coloring.

(b) Atomic volume coloring.

Fig. 3 Atomic view of the kink on screw dislocation.

キンの形成のエネルギー障壁は 0.7 eV 程度であり、Si を導入することでこのエネルギー障壁は低下することが報告されている⁽²⁾。キンの移動のエネルギー障壁はこれに比べると小さいが、Si を添加することでエネルギー障壁が増加することから Si はキンの移動を妨げる効果を持つ。

4 CRSS の検討

転位に基づく材料変形の塑性ひずみ速度は以下に示す Orowan の式により表わされる.

$$\dot{\epsilon} = \rho_m b v \quad (1)$$

ここで, ρ_m は転位密度, b はバーガースベクトル, v は転位の移動速度である. bcc 結晶中のらせん転位の移動はキンク対の形成・移動を媒介して起こるため, 塑性ひずみ速度はらせん転位が一回の熱活性化過程で移動する距離 λ , および移動に要する時間 t を用いて次式のように表すことができる (3).

$$\dot{\epsilon} = \frac{\rho_m b \lambda}{t} = \frac{\rho_m b \lambda}{t_{kn} + t_{km}} \quad (2)$$

上式のように t はキンク対の形成に要する時間 t_{kn} とキンクの移動に要する時間 t_{km} に分けて考えることができる. ここではキンクの形成 t_{kn} は考慮せず, キンクの移動 t_{km} による CRSS への寄与を議論する. キンクの形成・移動に要する時間は, 式 (3) に示すように各過程の熱活性化頻度の逆数から求められ, その算出にはキンクの形成・移動に関するエネルギー障壁を求める必要がある.

$$t^{-1} = \nu \exp \left(-\frac{\Delta G(\tau, c)}{k_B T} \right) \quad (3)$$

ここで, k_B は Boltzmann 定数, T は温度, c は Si 原子の濃度, ΔG はキンクの移動のエネルギー障壁であり, ν は熱活性化過程の発生頻度を表すパラメータである. キンクの移動に関するエネルギー障壁は負荷されるせん断応力の関数として次式で与えられる.

$$\Delta G_{km}(\tau, c) = \Delta G_{km}^0(c) \left(1 - \frac{\tau}{\tau_{km}(c)} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (4)$$

原子シミュレーションから各パラメータを求め, 温度とひずみ速度を与えたとき, 以上の等式を満たすような応力 τ を求めることにより CRSS を評価する. Si が Fe 中に無秩序に存在する場合でも, 確率論に基づきある大きさの Si クラスタが形成される. クラスタの大きさは Fe 中の Si 濃度の関数となっており, 本研究で見られたキンク幅 $12b$ のとき, Si クラスタの大きさは $m_0 = 25\sqrt{c}$ で近似できる (6). また, Si 原子が 1 個ある場合のキンク移動のパイエルス応力を τ_{km}^{1Si} とすると, τ_{km}^{1Si} は次式で見積もることが可能である.

$$\tau_{km}^{1Si} = \frac{\Delta G_{km}^{1Si}}{w_k \lambda b} \quad (5)$$

ここで, $w_k = 12b$ はキンクの幅, ΔG_{km}^{1Si} は Si 原子が 1 個導入された場合のキンクの移動のエネルギー障壁であり, 前節で述べたとおり 0.05 eV である. τ_{km}^{1Si} , ΔG_{km}^{1Si} を基に大きさ m_0 の Si クラスタを導入した場合のキンクの移動のエネルギー障壁とパイエルス応力を次式で表す.

$$\Delta G_{km}^0(c) = m_0 \Delta G_{km}^{1Si} \quad (6)$$

$$\tau_{km}(c) = m_0 \tau_{km}^{1Si} \quad (7)$$

$\nu_{km} = 5 \times 10^{11} \text{ s}^{-1}$ として, 本研究より得られたエネルギー障壁を基に推定したキンクの移動による

CRSS への寄与を図 4 に示す. ここで, Fe-Si 合金中の Si 原子の濃度を 3, 5, 8 at% と仮定した. 図 4 より, Si の濃度が増加するとキンク移動による CRSS も増加していくことがわかる. これは, Si の濃度が増加することによりキンクの移動の際に乗り越えなければならないエネルギー障壁の大きさが増加することにより, キンクの移動に要する時間が長くなるためである.

Fig. 4 CRSS attributed to kink migration of Fe-Si alloy.

5 結 言

本研究では, Fe-Si 合金を対象として, キンクの移動のエネルギー障壁に与える Si 原子の影響について解析を行い, キンク移動のエネルギー障壁による CRSS についての議論を行った. その結果, 1 つの Si 原子がキンクの移動のエネルギー障壁に与える影響は約 0.05 eV と観察され, キンクの移動に基づく CRSS が Si 原子の濃度の上昇に伴い向上することが分かった. 今後はキンクの形成過程も含めた CRSS について調査を行う. 加えて, Si 原子の濃度により評価を行うために得られた結果に対する統計処理を行うとともに, Si 原子の濃度や温度の影響についても調査を行う予定である.

文 献

- (1) Ushioda, K. et al., Evolution of dislocation structure and fatigue crack behavior in Fe-Si alloys during cyclic bending test, *Journal of Physics: Conference Series*, Vol. 240, 2010.
- (2) Wakeda, M. et al., *J. Japan Inst. Met. Mater.*, (submitted).
- (3) Argon A.S., *Strengthening Mechanisms in Crystal Plasticity*, Oxford University press, 2008.
- (4) Jonsson, H. et al., Nudged elastic band method for finding minimum energy paths of transitions, 1998.
- (5) Ackland, G.J. et al., Development of an inter atomic potential for phosphorus impurities in α -iron, *J. Phys.: Condens. Mater.*, Vol. 16, pp. S2629-2652, 2004.
- (6) Suzuki, H., *Dislocation in Solids*, North-Holland, Amsterdam, pp.191-217 1979.