

## 分子動力学法を用いた鉄中での刃状転位-炭素・窒素 間相互作用の解析

兵頭, 克敏

<https://hdl.handle.net/2324/4475070>

---

出版情報 : Kyushu University, 2020, 博士 (工学), 課程博士  
バージョン :  
権利関係 :

氏 名 : 兵頭 克敏

論 文 名 : 分子動力学法を用いた鉄中での刃状転位・炭素・窒素間相互作用の解析

区 分 : 甲

## 論 文 内 容 の 要 旨

鉄鋼材料において炭素・窒素は侵入型固溶体として存在し、大きな固溶強化能を有することが知られている。特にフェライト鋼でのそれらの強化能については、低炭素・窒素鋼において摩擦力に対する炭素・窒素の影響が同等であったことから固溶強化能も同等であると考えられてきたが、近年の研究で、極低炭素・窒素鋼の引張試験を行った結果、炭素鋼でより大きな上降伏応力を示したことから、炭素は窒素よりも大きな強化能を有することが示唆された。しかしながら、上記の結果は炭素・窒素の固溶状態や転位への偏析量などを考慮した結果では無いため、実際に炭素・窒素による転位のピン止め力の差を示しているとは限らない。そこで本論文では、実験では観察できない転位と炭素・窒素原子との相互作用を分子動力学法により再現し、炭素・窒素1原子による転位のピン止め力を調査することとした。そのために、分子動力学法において最も重要な原子間相互作用を表す関数である原子間ポテンシャルを作成し、それらを用いて炭素・窒素原子による刃状転位のピン止め力や相互作用範囲を調査した。

第1章では、本研究の研究背景及び目的について述べた。

第2章では、Fe-N 二元系ポテンシャル作成時のフィッティングターゲットとした  $\alpha''\text{-Fe}_{16}\text{N}_2$ 、 $\gamma'\text{-Fe}_4\text{N}$ 、 $\varepsilon\text{-Fe}_3\text{N}$ 、 $\text{ZnS-FeN}$  の格子定数、凝集エネルギー、磁気モーメント、体積弾性率を第一原理計算により算出した。過去に報告されている実験値やその他の第一原理計算値と比較した結果、各窒化物の格子定数、体積弾性率、磁気モーメントは同様の結果が得られた。従って、本研究で得られた凝集エネルギーについても妥当であると考えられる。

第3章では、第2章で算出した  $\alpha''\text{-Fe}_{16}\text{N}_2$ 、 $\gamma'\text{-Fe}_4\text{N}$ 、 $\varepsilon\text{-Fe}_3\text{N}$ 、 $\text{ZnS-FeN}$  の1原子あたりの凝集エネルギーと体積の関係を再現できるように、FSポテンシャルに基づいてFe-N二元系ポテンシャルを作成した。また、そのポテンシャルの再現性を調査するために、フィッティングターゲットである上記4つの窒化物を含めて計7つの鉄窒化物の物性値を分子動力学法により算出し、実験値や第一原理計算値と比較した。その結果、全ての窒化物がよく再現できていた。さらに、鉄窒化物だけでなく、bcc鉄及びfcc鉄中での窒素の固溶状態の再現性も調査した結果、拡散障壁エネルギーやbcc鉄中の固溶窒素の周りの鉄原子の歪量について実験値や第一原理計算値と同様の結果が得られた。最後に、作成したポテンシャルの有限温度での再現性を調査するために、分子動力学シミュレーションにより  $\gamma'\text{-Fe}_4\text{N}$  のフォノン状態密度を調査し、有限温度でのシミュレーションでも再現性が良いことを示した。

第4章では、過去に報告されている第一原理計算で算出された  $\gamma'\text{-Fe}_4\text{C}$ 、 $\theta\text{-Fe}_3\text{C}$ 、 $\chi\text{-Fe}_5\text{C}_2$ 、 $\text{o-Fe}_7\text{C}_3$ 、 $\text{NaCl-FeC}$  の物性値とbcc鉄中での炭素の拡散障壁エネルギーの実験値をフィッティングターゲットとしてFe-C二元系ポテンシャルを作成し、再現性を調査した。その結果、14種類の炭化物を再現できていることが分かった。次にbcc鉄及びfcc鉄中での固溶炭素に関するシミュレーションを行

い、実験値や第一原理計算結果と比較した。その結果、拡散障壁エネルギーや、bcc 鉄中での固溶炭素同士の相互作用については良く再現できていたが、bcc 鉄中での固溶炭素周りの鉄原子の歪量や固溶炭素と原子空孔との相互作用については、第一原理計算結果と異なる結果が得られた。最後に、Fe-C 二元系ポテンシャルの有限温度での再現性を調査するために、 $\theta$ -Fe<sub>3</sub>C と h-Fe<sub>7</sub>C<sub>3</sub> のフォノン状態密度や高温域での拡散係数を分子動力学シミュレーションにより算出した。その結果、どちらも実験結果と同様の結果を示し、有限温度でのシミュレーションにも適していると考えられる。

第5章では、第3章で作成した Fe-N 二元系ポテンシャルを用いて、刃状転位と窒素原子との相互作用を分子動力学シミュレーションにより調査した。その結果、相互作用範囲は約 0.2 nm であったことから、窒素原子による転位のピン止めは窒素原子と転位の応力場との相互作用というよりも、窒素原子と転位芯構造との直接的な相互作用により生じていると考えられる。またピン止め力はピン止め強化機構と同様に窒素の偏析間隔と反比例しており、そこから得られる転位のピン止め時の張り出し角は実験値から推測される張り出し角と同様の値を示したことから転位論とも一致していると考えられる。

第6章では、第4章で作成した FS ポテンシャルに基づく Fe-C ポテンシャルと過去に提案された EAM ポテンシャルに基づく Fe-C ポテンシャルを用いて、刃状転位と炭素原子との相互作用を分子動力学シミュレーションにより調査・比較を行った。その結果、FS ポテンシャルによる炭素のピン止め力は第5章の窒素によるピン止め力よりも小さな値を示し、過去の知見と一致しなかった。そこで、EAM ポテンシャルを用いて同様のシミュレーションを行った結果、炭素のピン止め力は窒素のピン止め力と一致し、固溶強化能は同じであるという過去の知見と一致した。

最後に、第7章で各章の研究成果を総括した。

〔作成要領〕

1. 用紙はA4判上質紙を使用すること。
2. 原則として、文字サイズ10.5ポイントとする。
3. 左右2センチ，上下2.5センチ程度をあげ，ページ数は記入しないこと。
4. 要旨は2,000字程度にまとめること。  
(英文の場合は，2ページ以内にまとめること。)
5. 図表・図式等は随意に使用のこと。
6. ワープロ浄書すること（手書きする場合は楷書体）。  
この様式で提出された書類は，「九州大学博士学位論文内容の要旨及び審査結果の要旨」  
の原稿として写真印刷するので，鮮明な原稿をクリップ止めで提出すること。