

bcc 鉄の加工硬化特性における微視的起源
Microscopic Origins of Work Hardening Characteristics in bcc Fe

京都大学大学院 エネルギー科学研究科 宮澤直己

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、bcc 鉄における転位-転位相互作用について、分子動力学解析を用いた検討を行った。転位-転位相互作用は、金属材料の加工硬化特性を支配する基礎的な素過程のひとつであり、その特性は巨視的な変形挙動に直接的な影響を及ぼす。特に、相互作用する転位が属するすべり系の組み合わせに応じて障害強度が変化することは、材料の塑性異方性の発現要因の一つとして重要である。したがって、転位-転位相互作用強度のすべり系依存性を高精度に評価することが求められている。

従来、転位-転位相互作用は主に離散転位動力学 (DDD) により解析されてきた。しかしながら、DDD は連続体力学に基づく手法であるため、転位芯構造の取り扱いにおいて経験的なローカルルールを導入が不可欠であり、その妥当性や汎用性には課題が残されている。そこで本研究では、原子レベルで転位芯構造を直接記述可能な分子動力学法を用いることで、bcc 鉄における転位-転位相互作用強度のすべり系依存性を評価した。

数値計算にはLAMMPSを用い、原子間相互作用にはEAMポテンシャルを採用した。計算はNVTアンサンブルのもとで実施し、時間刻み幅は1 fs、温度は5 Kに設定した。計算セル内には活動転位としてらせん転位、障害転位として刃状転位を導入した。セル下端を固定し、上端に一定速度の変位を付与することで活動転位を運動させ、林立転位との相互作用を生じさせた。

解析の結果、分子動力学解析においても、すべり系の組み合わせに応じて転位-転位相互作用強度が系統的に変化することが確認された。具体的には、 $\{110\}/\{110\}$ 相互作用は、 $\{112\}/\{110\}$ および $\{112\}/\{112\}$ 相互作用と比較して、より高い強度を示す傾向が得られた。さらに、得られた相互作用強度を無次元化し、結晶塑性有限要素法に組み込むことで巨視的な変形挙動への影響を検証した。その結果、本研究で得られたすべり系依存性を考慮することにより、鉄板材における面内異方性を高い精度で再現可能であることが明らかとなった。このことは、本研究で評価した転位-転位相互作用強度が、実材料の塑性挙動を記述する上で有効であることを示している。

今後は、温度条件の拡張および転位種類の組み合わせの多様化を進めるとともに、得られた知見を結晶塑性モデルへ体系的に組み込むことで、より複雑な塑性変形の予測を目指す。さらに、転位芯構造と相互作用強度の関係を詳細に解析することで、転位スケールと巨視的力学特性を結びつけるマルチスケール理解の深化を図る予定である。