



# 鉄鋼材料の信頼性向上のためのシミュレーション

## —第一原理計算による析出物界面性状予測—

研究・開発機関 : 新日鐵住金(株)  
 利用施設 : スーパーコンピュータ「京」  
 計算規模 : 540ノード  
 利用ソフトウェア : 第一原理計算シミュレーションソフト OpenMX

### Before

●鉄鋼材料の強度を左右する因子の1つに、鉄鋼材料中に含まれるチタンやモリブデンなどの析出物があります。析出物による強化能(材料強度を強化する能力)は、析出物サイズによって大きく異なりますが、強化能のサイズ依存性を通常のPCクラスタによって計算するのは計算規模や計算速度の制約から困難でした。

### After

○従来のプログラムを「京」に移植し、大規模計算ができるように最適化を行いました。(東京大学尾崎泰助特任教授)  
 ○計算条件として鉄鋼材料中に微細に析出させることが可能なチタン炭化物を選び、析出物サイズによって界面性状が変化し、強度への影響が変化することを見出しました。

### ■背景と目的

自動車、ビル、橋、液化天然ガス貯蔵タンク、発電プラントなどの多岐にわたる用途に用いられる鉄鋼材料の安全性や信頼性は重要な課題です。その課題解決のためには、鉄鋼材料の最も重要な特性の1つである強度を向上させていく必要があります。

鉄鋼材料の強度を左右する因子の1つに、鉄鋼材料中に含まれる析出物があります。析出物による強度変化は、析出物の種類、性状、サイズ、分布状態、析出物と鉄の界面構造によって異なります。言い換えれば、鉄鋼材料の強度を高めるには析出物のサイズ変化などに伴う析出物と鉄との界面構造の変化を正確に把握する必要があります。

そのためには、経験的なパラメータを用いずに物理機構の解明や物性予測を行う、量子力学に基づいた第一原理計算が強力なツールとなります。これを用いると原子レベルでの鉄と析出物の界面の構造をシミュレートすることが可能ですが、計算量が膨大になるためにこれまで行われてきませんでした。

そこで「京」を用いた大規模な第一原理計算によって、析出物のサイズによって界面性状が変化する様子のシミュレーションを行いました。

### ■利用成果

鉄とチタン炭化物との界面のシミュレーションを行うことによって、チタン炭化物のサイズが大きくなった時の界面の原子構造を明らかにすることができました。図1では、鉄中にチタン炭化物が析出した時の界面の(110)面の原子構造を示しています。

鉄の格子定数(結晶軸の長さや軸間角度)とチタン炭化物の格子定数は異なるため、チタン炭化物が鉄中に析出すると鉄中に歪が生じます。チタン炭化物が大きくなると鉄中の歪を解消できず、界面を介して相対するチタン炭化物の原子列の数と鉄の原子列の数が異なる状態になります。この状態の界面を部分整合界面と呼びます。

この図から界面近傍の鉄原子がチタン炭化物の炭素原子に引き付けられるように動いて、鉄原子列が曲がっていることが分かります。また、チタン炭化物の原子列の数と鉄の原子列の数が異なるために、図1の中央部分(赤○印)には炭素原子1個に対して、鉄原子2個が結合しているように見える箇所(ミスフィット転位)があります。

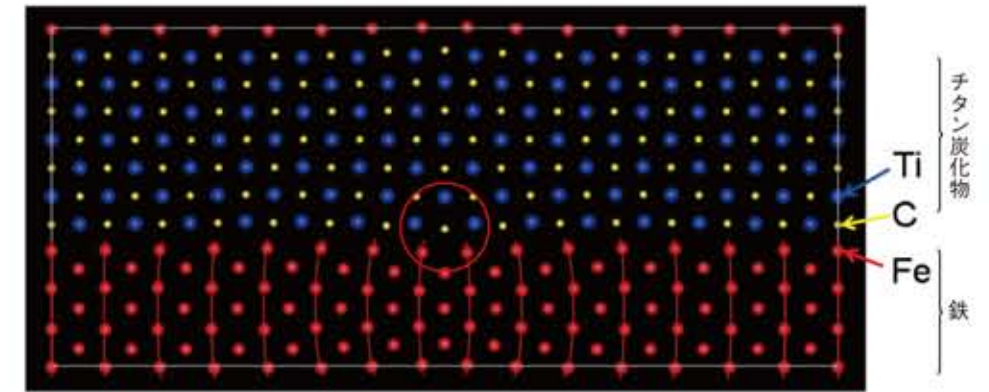


図1. 界面の原子構造

一方、析出物のサイズが小さい時には、ミスフィット転位がない界面が形成されており、その状態の界面を整合界面と呼んでいます。

これらのシミュレーションによって得られるのは、原子構造とそのエネルギー状態ですが、整合界面のエネルギー状態と部分整合界面のエネルギー状態を比較することによって、どのサイズでチタン炭化物が整合界面から部分整合界面の状態に移るかを知ることができます。

図2は、その様子を示しており、2.3nm程度の大きさで、チタン炭化物が整合界面から部分整合界面の状態に移ることが分かります。

これからもスーパーコンピュータを活用して、新たな現象の解明を進め重要な課題解決に貢献していきたいと思っております。

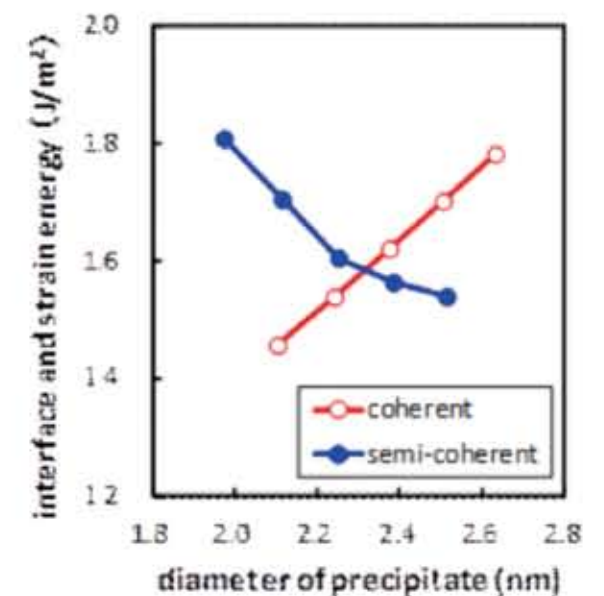


図2. 整合界面から部分整合界面の状態遷移点

本研究は、文部科学省HPCI戦略プログラム 分野2「新物質・エネルギー創成」の一環として実施したものです。