金属系構造材料の高性能化のためのマルチスケール組織設計・評価手法の開発

HPCI戦略プログラム 分野 2

目的

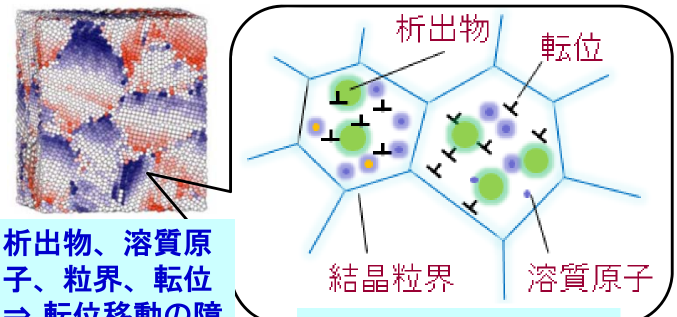
金属系構造材料は、産業や社会基盤を支える材料であり、飛躍的な高性能化のため、性能を支配する「微細組織」（異相界面、転位、粒界、合金元素等）の構造や機械的性質を原子・電子まで掘り下げて解明する。さらにミクロからメゾ・マクロまでマルチスケールで解明し設計する手法の構築を目指す。

計算科学の取組

鉄中の大規模構造（異相界面や転位）の密度汎関数理論に基づく第一原理計算を、OpenMXを用いて「京」で実行。OpenMXは、金属的な大規模系でオーダーN法計算を実行できる唯一のコード。

「京」以前

微細組織の異相界面、転位、粒界等の大規模構造の第一原理計算は不可能

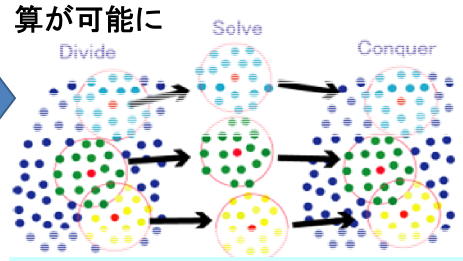


析出物、溶質原子、粒界、転位 ⇒ 転位移動の障害（強化因子）

微細組織の構成要素

「京」でブレークスルーした計算技術

OpenMX（局在基底オーダーN法計算コード、尾崎泰助ら）を高効率に並列化して実行 ⇒金属系の大規模第一原理計算が可能に

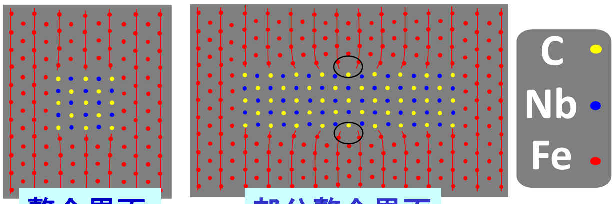


OpenMX：クラスタ毎に電子構造を計算し、繋げる → オーダーN

計算時間は原子数 N に比例、大規模構造で従来法（N^3に比例）を凌駕

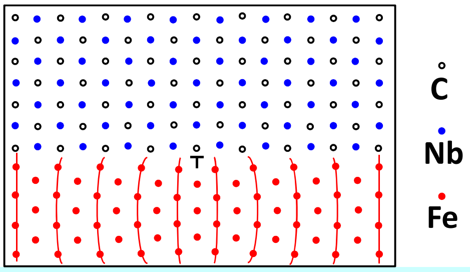
Fe/遷移金属炭化物界面の大規模第一原理計算

鉄鋼材料では遷移金属炭化物等を析出させ、転位移動の障害にして強化する。析出初期にFe/炭化物界面は整合界面だが、析出粒子が成長するとmisfit歪のため周囲の歪エネルギーが増加し、部分整合界面に遷移する。遷移の臨界サイズの解明が重要である。部分整合界面の大規模構造の第一原理計算をOpenMXで実現し、界面エネルギーと歪エネルギーから、遷移の臨界サイズの高精度計算に成功した。



整合界面　部分整合界面

遷移金属炭化物はFe中に{001}//{001}で板状析出

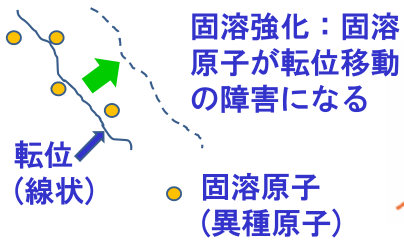


Fe/NbC部分整合界面の安定原子配列

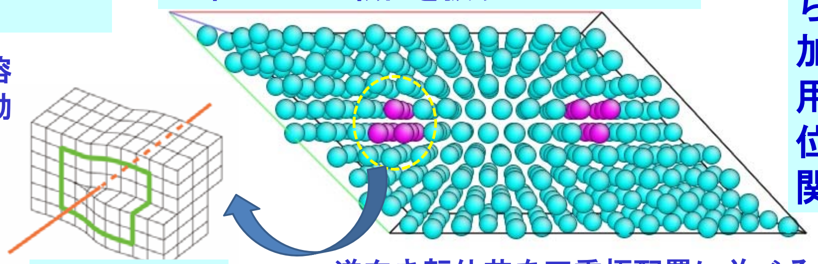
界面エネルギーとmisfit歪エネルギーの和を求め、整合→部分整合遷移の臨界サイズを解明

Fe中のらせん転位と添加元素（固溶原子）の相互作用の大規模第一原理計算

鉄鋼材料では、異種原子を固溶させ、転位移動の障害にして強化する。Feのらせん転位と一連の遷移金属や典型元素など固溶原子との相互作用をOpenMXによる大規模第一原理計算で求めた。相互作用の強さが添加元素の周期表の位置に依存する傾向が見いだされ、各元素のFeの固溶強化能の実験と合致する。転位の移動過程にも影響を及ぼすことが分かった。



Fe中のらせん転位を扱うスーパーセル



らせん転位芯　逆向き転位芯を四重極配置に並べる

らせん転位芯と添加原子との相互作用エネルギーを転位芯からの距離の関数として解明