



Title	Interaction between Carbon and Extended Defects in Fe Studied by First-Principles Based Interatomic Potential
Author(s)	Pham Thi, Dung
Citation	大阪大学, 2022, 博士論文
Version Type	VoR
URL	https://doi.org/10.18910/88030
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

Abstract of Thesis

Name (PHAM DUNG THI)	
Title	Interaction between Carbon and Extended Defects in Fe Studied by First-Principles Based Interatomic Potential (第一原理計算に基づく原子間ポテンシャルを用いた炭素と鉄中拡張欠陥の相互作用の研究)
<p>Abstract of Thesis</p> <p>Body centered cubic (BCC) Fe alloy or steel is one of the most widely used structural materials in our society. It is known that the mechanical and physical properties of steel strongly depend on C content, defect structures, and other impurity atoms. Vacancy, grain boundary (GB) and dislocation are common defects in polycrystalline materials and strongly affect to the mechanical properties of the materials. In this study, the segregation of carbon is explored in α-Fe<110> symmetric tilt grain boundaries (STGBs) and several edge dislocations. Because of the limitation of number of atoms in density functional theory (DFT) calculation, in this work, the classical force-field method in conjunction with the presently constructed Tersoff/ZBL interatomic potentials have been used for performing the simulations of very large cells of STGBs and edge dislocations. Fe-C interatomic potential in the framework of Tersoff/ZBL potential has been constructed by fitting its parameters to reproduce the results of first-principles calculations of various BCC Fe systems with C and Fe vacancies.</p> <p>Firstly, I have applied classical force-field simulations using the newly developed Tersoff/ZBL potential for calculating grain boundary energies. It is found that the present potential give the most adequate results in comparison with the DFT compared to the other standard classical potentials. The segregation sites of C are determined by examining the energy landscape of the GB systems, and it is found that C mainly locates at the GB planes. It is also found that more unstable grain boundary exhibits a stronger interaction with C. By using the Voronoi construction, it is suggested that there is a close correlation between the segregation energies of C and open space around C.</p> <p>Next, in order to confirm the universality of the relation between open space around C and its segregation energy, I have calculated several edge dislocations and their interaction with C. It is found that the stability of different seven edge dislocations with <111>, <100>, and <110> Burgers vector are reasonably reproduced experimental observations and the prediction by elastic theory. By calculating the segregation energy of C as a function of distance from dislocation core of two typical <111>dislocations, it is shown that C is strongly trapped at dislocation core and dislocation exhibits as a long-range interaction with C comparing to STGBs. It is also found that the interaction between dislocations and C shows similar tendency to the case of STGBs, namely the stability of C around the dislocation is related to the Voronoi volume around C.</p> <p>I summary calculated segregation energy of C in different defects by using the Tersoff/ZBL potential. I have also calculated the interaction between C and single Fe vacancy. In general, STGBs and edge dislocations trap C strongly compared to single Fe vacancy, and more unstable defect structures attract C more strongly. Among the presently calculated extended defects, the <100> edge dislocation is the strongest trap of C. The obtained tendency might offer useful guideline to analyse atomistic distribution of C in Fe with extended defects.</p>	

論文審査の結果の要旨及び担当者

氏 名 (PHAM DUNG THI)			
論文審査担当者	(職)	氏 名	
	主 査	准教授	佐藤 和則
	副 査	教授	澁谷 陽二
	副 査	教授	森川 良忠
	副 査	特任教授	杉山 昌章

論文審査の結果の要旨

密度汎関数法(DFT)に基づく電子状態計算法の発展と普及により、量子力学に基づいた物質探索や材料設計が半導体材料や磁性材料の分野で広く行われている。一方、構造材料については、転位や粒界などの材料欠陥や材料組織のシミュレーションに要する原子数が数万から数十万程度以上となるため、DFT のみによる材料設計は現実的ではない。本論文では、DFT に基づき構築した原子間ポテンシャルを用いて大規模原子シミュレーションを実施しており、鉄鋼材料の強度制御の重要な因子となっている Fe 中の材料欠陥と C の間の相互作用エネルギー ΔE を定量的に評価し、 ΔE と C 近傍の原子配置の関係を明らかにしている。シミュレーションでは、金属結合性の強い Fe と共有結合性の強い C が混在した系を扱うことから、両方の特徴を取り入れられる Tersoff/ZBL 型のポテンシャル関数を用いており、複数の空孔と C を含む BCC Fe の DFT 計算と比較することで、ポテンシャル関数のパラメーターを決定している。構築した Tersoff/ZBL ポテンシャルを、汎用分子動力学シミュレーターLAMMPS に実装し、粒界や転位を含む BCC Fe 中の様々な位置に C をおいて構造最適化を行い、エネルギーの計算から以下の知見を得ている。

- (a) $\langle 110 \rangle$ 対称傾角粒界について、粒界エネルギーの傾角依存性を計算し DFT 計算の結果と一致することを確認している。原子間ポテンシャルとしてよく用いられる EAM や Johnson ポテンシャルに比べて DFT 計算との一致はよく、本研究で用いる Tersoff/ZBL ポテンシャルの信頼性を確認している。
- (b) 異なる傾角を持つ $\langle 110 \rangle$ 対称傾角粒界を 9 つ選び、粒界面と C の距離を変えながら ΔE を計算している。粒界面上に C が位置している時に $|\Delta E|$ は最も大きく安定となり、粒界から離れると急速に減少する。また、 $|\Delta E|$ の最大値は、相互作用する粒界が不安定なほど大きくなることを指摘している。
- (c) 4 つの刃状転位、 $\frac{1}{2}\langle 111 \rangle\{110\}$, $\frac{1}{2}\langle 111 \rangle\{112\}$, $\langle 100 \rangle\{010\}$, $\langle 100 \rangle\{011\}$ について、転位芯と C の距離を変えながら ΔE を計算している。転位芯上に C が位置している時に $|\Delta E|$ は大きく安定となる傾向があるが、その大きさと ΔE の符号はすべり面からの距離に強く依存する。転位芯から離れると $|\Delta E|$ は減少するが、その割合は粒界の場合に比べて小さく、相互作用がより長距離的であることを示している。粒界の場合と同様、不安定な転位ほど $|\Delta E|$ の最大値が大きくなる傾向があることを指摘している。
- (d) C の安定性と局所的な原子配置との関係を調べるため、C に隣接する Fe 原子で構成されるボロノイ多面体の体積を自由体積と定義し、 ΔE との関係を解析している。自由体積が大きいほど C は安定となり、 ΔE の自由体積への全体的な依存性は、粒界や転位の種類によらないことを示している。

以上のように、本論文では DFT に基づく原子間ポテンシャルを用いて大規模な原子シミュレーションを実行することで、Fe 中の材料欠陥と C の相互作用を定量的に予測し、得られた膨大なデータの解析から C の安定性と欠陥の自由体積の間にユニバーサルな関係があることを明らかにしている。C と様々な材料欠陥との相互作用が同一の計算の枠組みで評価されており、Fe 中の材料欠陥と C の挙動の実験的な解析や、多階層連結シミュレーションのためのポテンシャル開発における参照データとして価値の高い情報を提供している。

よって本論文は博士論文として価値あるものと認める。