

γ Fe の表面融解の分子動力学シミュレーション

Molecular dynamics simulation for surface-melting of γ Fe

東工大 小嶋理恵(院) 須佐匡裕(理工)

1. 緒言

物質の融解には表面が重要な役割をはたすことが知られている。融点よりも低い温度において、固体表面には、内部よりも構造が乱れた層(表面融解層)が生成する。表面融解層は融点において物質全体が融解するときの核となる。このような表面の性質を利用することにより、合金を低温で、高速に融解できる可能性がある。製鉄においては、環境問題、省エネルギーの点から低温製鉄が求められている。このために、鉄の表面融解を利用することは有効であると考えられる。表面融解現象を製鉄に利用するためには、まず、 γ Fe の融解のダイナミクスに関する知見が必要となる。そこで、本研究では、 γ Fe について融解時の構造変化を分子動力学法によりシミュレートし、表面融解層の存在を確認することを目的とする。

2. γ Fe の表面構造の計算

表面構造を調べるために、定温アンサンブルを用いて薄膜をモデルとし、その構造を計算した。約 $26 \times 26 \times 88$ の直方体中に、(111)または(110)面方位となるように約 5000 個の Fe 原子を配置し、その上部および下部に真空領域を加えて、基本セルを作成した。これに 3 次元周期境界条件を適用すると厚さ約 88 の薄膜となり、表面が存在する。また、所定温度における結晶構造の計算は、それより低い温度における結晶構造から開始し、その各辺の長さは、各所定温度における格子定数から決定した。ポテンシャルには Tight-Binding Model¹⁾ を使用し、1000 ~ 1800 K の各温度で各原子の位置と速度を計算した。アルゴリズムには 5 次の Gear 法、温度制御には Nose 法を用いた。運動方程式の数値積分の時間刻み幅は 1 fs とし、計算時間は 200 ps 以上とした。計算は MASPHYC を用いて、東京工業大学学術国際情報センターに導入されている計算サーバ上で行った。最後に、計算結果より、内部エネルギー、表面垂直方向の原子数密度および原子の平均二乗変位を求めた。

3. 結果と考察

(111)薄膜モデルでは、1720 ~ 1730 K の間で内部エネルギーが不連続に増加し、融解した。これより、本研究における γ Fe の融点を約 1725 K と決定した。Fe の各相のギブズエネルギーから、 γ Fe の融点は 1793 K と求められる。この融点と本研究で用いたポテンシャルより求められた融点は良い一致を示している。

次に、表面と内部の構造の違いを調べるために、各温度における表面垂直方向の原子数密度 $\rho(z)$ と平均二乗変位 u^2 を計算した。Fig. 1 に(110) 薄膜モデルの 1650 K における結果を示す。表面はユニットセルの上部および下部に対称に存在するため、上部のみを示した。原子数密度の各ピークは各(110)面であり、矢印は 1000 K における最表面層を示している。表面付近では原子数密度が低く、平均二乗変位が大きい。これは、表面付近では、内部と比較して原子の熱振動が大きいことを示している。また、熱振動の大きい領域は温度上昇とともに増加した。このような領域が表面融解層であると考えられる。そこで、表面融解層の有無を判断するために、融点における内部の原子の平均二乗変位 $u^2 = 0.0487 \text{ \AA}^2$ を基準として、表面融解層の厚さを求めた。その結果を Fig. 2 に示す。横軸の温度 T は、融点 T_m を 1725 K とし規格化されている。いずれの面方位においても温度上昇とともに表面融解層が生成し、その厚さは増大している。また、(110)では、(111)よりも低温において表面融解層が生成している。熱力学計算により求められた γ Fe の融点、1793 K を T_m とした場合、現実の γ Fe は図中の灰色で示した温度範囲において存在する。この範囲においても、表面融解層が生成していることから、現実の γ Fe においても表面融解層が生成すると考えられる。

参考文献

- 1) 小嶋, 須佐: 第 131 回日本金属学会講演概要(2002), 220
- 2) M. Polcik, L. Wilde, J. Hasse: Surf. Sci., 405 (1998), 112-120
- 3) 小嶋理恵, 佐藤壮彦, 須佐匡裕: Thermophysical Properties 22 (2001), 452-455

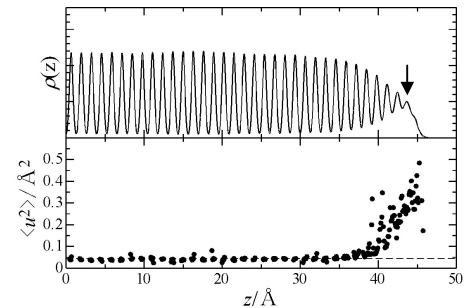


Fig. 1 Number density distribution of atoms $\rho(z)$ and mean square displacement u^2 for (110) thin film model at 1650 K.

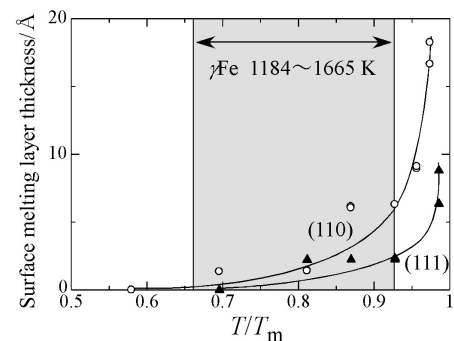


Fig. 2 Temperature dependence of surface melting layer thickness.