Fe-P 系アモルファス合金の熱処理による結晶化シミュレーション

Molecular Dynamics Simulation of Nano-Crystallization in Fe-P Amorphous Alloys

○島根大総合理工 [1]，島根大 NEXTA [2]　○(B) 池淵　遼平 [1]，平山　尚美 [2]

Shimane Univ. [1], Shimane Univ. NEXTA[2], °Ryohei Ikebuchi[1], Naomi Hirayama[2]

E-mail: n.hirayama@riko.shimane-u.ac.jp

Fe 系アモルファス合金は，結晶構造をもたないためヒステリシス損失が小さく，また，高強度，耐腐食性，低鉄損などの特性を有する．そのため，変圧器や電子回路部品などに応用され，近年ではモーター用コアへの活用も期待されている．Fe 基アモルファス合金のアモルファス形成能は，しばしば非金属元素の濃度に依存する．例えば，Fe–P 系では，Fe と P の配位数やアモルファス相の発生は P 濃度に支配されることが知られ[1,2]，P 原子が微視的な構造特性に深く関わっている．さらに，アニール（加熱）処理により結晶相の粒径が増加すれば，保磁力や強度などの物性にも影響する．本研究では，金属–非金属 2 元系合金である Fe–P 系に着目し，局所秩序構造や結晶相の発生メカニズムの解明にむけて，熱処理過程の分子動力学シミュレーションを行なった．

本研究では LAMMPS ソフトウェアを使用し，EAM 型の力場を用いた．まず，bcc Fe 結晶に P をランダムに置換したものを初期構造とし，melt-quench 法によりアモルファス構造を作製した．その後，複数の温度で熱処理シミュレーションを行った．結果の一例として，$Fe_{0.95}P_{0.05}$ における 800 K での構造変化を図 1 に示す．白，黄色，青の粒子は，それぞれアモルファス，icosahedral，bcc 構造に関与する原子である．図 1 から，熱処理により結晶相が発生していく様子が分かる．しかし，表 1 に示すように，結晶相の発生は P 濃度と温度に強く依存した．本発表では，Fe–P 系の動径分布関数や配位数，多面体構造に対する，P 濃度と熱処理温度の影響について報告する．

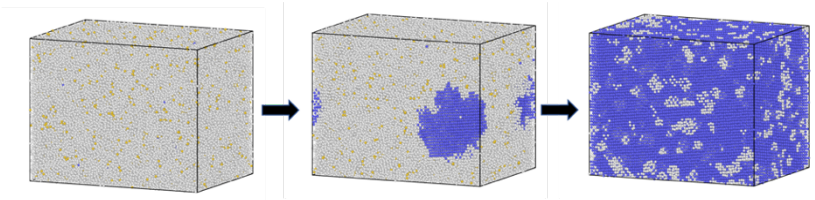

Figure 1：Time evolution of a 5% P-doped system during annealing at 800 K（0 ns→4.5 ns→10 ns）.

Table I：Ratio of each phases after annealing at 500 K or 800 K for the P concentrations of 5% or 20 %.

P 濃度/アニール温度	5% / 500 K	5% / 800 K	20% / 500 K	20% / 800 K
Base-Centered Cubic	0.1%	81.3%	0.0%	0.0%
Icosahedral	4.2%	0.0%	3.2%	3.0%
アモルファス相	95.8%	18.7%	96.8%	97.0%

[1] K. Kamei et al., J. Appl. Electrochem. **26**, 529−535 (1996).
[2] A. García−Arribas et al., Phys. Rev. B **52**, 12805 (1995).

© 2023年 応用物理学会