

軽金属・合金の力学特性
Mechanical properties of light metals and alloys

京都大学大学院エネルギー科学研究科 馬渕守

研究成果概要

マグネシウム(Mg)をはじめとした軽金属材料の力学特性向上に向けて、粒界への添加元素の偏析挙動を調べる事が重要となる。近年、Mg の双晶に添加元素が周期的に偏析することが実験的に明らかになった。一方で二重双晶といった複雑な粒界構造を持つ場合の偏析挙動については十分に調べられていない。本研究では、Mg の $\{10\bar{1}1\}$ 双晶及び $\{10\bar{1}2\}$ 双晶、 $\{10\bar{1}1\}$ - $\{10\bar{1}2\}$ 二重双晶へのイットリウム(Y)の偏析挙動を、分子動力学(MD)計算及びモンテカルロ(MC)計算を用いて計算した。

本研究でのMD計算には京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムの SCIGRESS を用いた。Mg の $\{10\bar{1}1\}$ - $\{10\bar{1}2\}$ 双晶モデルを作製したのち、分子動力学計算を用いて 10ps の安定化計算を行った。計算の際のアンサンブルは NVT アンサンブル(N:原子数、V:セルの体積、T:系の温度)を用いて、温度は 5K 及に制御した。原子間相互作用ポテンシャルは AMEAM ポテンシャル[1]を用いて計算を行った。その後、MC 計算によって Y の偏析挙動を計算した。MC 計算ではランダムな Mg 原子を Y に置換し、微小変位を与え、メトロポリスアルゴリズムを用いて置換の採択/棄却を判定した。これを 50MC ステップ繰り返し計算した。

MD 及び MC シミュレーションの結果、単純な双晶である $\{10\bar{1}1\}$ 双晶モデル及び $\{10\bar{1}2\}$ 双晶モデルにおいては、Y は双晶界面に周期的に偏析することが確認された。Y の原子半径は Mg よりも大きく、このため Y は粒界中の自由体積が大きいサイトに偏析することが分かった。一方で $\{10\bar{1}1\}$ - $\{10\bar{1}2\}$ 二重双晶モデルにおいては、偏析サイトの自由体積が大きいだけでなく、そのサイトの結合長のばらつき(異方性ファクタ)が小さく、最短の結合長が長く、配位数が大きいサイトに偏析しやすいことが明らかになった。以上のように、二重双晶における偏析挙動は単純な双晶に比べ複雑である事が明らかとなった。

発表論文:なし

参考文献:[1] W. Hu, B. Zhang, B. Huang, F. Gao, and D. J. Bacon, J. Phys. Condens. Mater. **13**, 1193 (2001)