

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 馬淵 守

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、マグネシウム(Mg)の偏析二重双晶とらせん転位の相互作用の分子動力学シミュレーションを行った。

Mg は次世代の軽量金属構造材料として注目を集めているが、延性が低く加工性に乏しいという欠点がある。Mg は塑性変形の過程において、 $\{10\bar{1}1\}$ - $\{10\bar{1}2\}$ 二重双晶における粒界三重点に転位が堆積し、破壊の起点になることが知られている。Mg の延性向上にはアルミニウム(Al)やイットリウム(Y)などの添加元素を固溶させることが有効であるが、そのメカニズムには不明な点が多い。以上から二重双晶での破壊における添加元素の影響を調べることは重要であると言える。本研究では Mg の $\{10\bar{1}1\}$ - $\{10\bar{1}2\}$ 二重双晶に Al 及び Y を偏析させ、粒界三重点への転位の堆積挙動を分子動力学シミュレーションによって解析した。

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 Mg-Y においては AMEAM ポテンシャル[1]、Mg-Al においては MEAM ポテンシャル[2]を用いて計算を行った。その後、MC 計算によって添加元素の偏析挙動を計算した。MC 計算ではランダムな Mg 原子を添加元素に置換し、それらに微小変位を与え、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。偏析二重双晶にらせん転位を導入し、セル全体にせん断ひずみを与えることでらせん転位を二重双晶に向かって伝搬させた。

計算の結果、二重双晶に偏析した Y は双晶転位を放出させ、Al は部分転位の移動を抑制させることによって、いずれの場合も粒界三重点への転位の堆積を妨げることが分かった。Y と Al の双晶転位との相互作用の違いは、Mg-Y はひずみ効果、Mg-Al は化学結合効果が支配的であることに起因すると考えられる。以上から、添加元素は粒界三重点への転位の堆積を妨げることで延性向上に寄与すると考えられる。

発表論文: N. Miyazawa, S. Suzuki, M. Mabuchi, and Y. Chino, *J. Appl. Phys.*, 165103 (2017).

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

[2] B. Jelinek, S. Groh, M. F. Horstemeyer, J. Houze, S. G. Kim, G. J. Wagner, A. Poitra, and M. I. Bask, *Phys. Rev. B* 85(1), 245102 (2012).