

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

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)のねじれ粒界と刃状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。マグネシウムの延性向上に向けてこれまでに様々な研究がなされているが、添加元素の微量添加が特に有効であることが知られている。添加元素は転位と粒界の相互作用に大きく影響することが知られているが、Mg は六方細密充填構造を有しせん転位が運動しやすいことから、これまでせん転位を中心とした解析が行われてきた。しかし Mg では刃状転位が運動することも知られており、刃状転位と粒界との相互作用を解析することも重要である。そこで本研究では、分子動力学計算を用いて種々の添加元素を偏析させた Mg のねじれ粒界と刃状転位との相互作用を解析した。

本研究では母相に対しねじれ角度 93.5° の結晶粒からなる計算モデルを用いて解析を行った。セルサイズは $8.9 \times 83.9 \times 19.8 \text{ nm}$ 、原子数は 63 万原子とした。温度は 5K で計算を行った。母相の中心に刃状転位を導入し、バーガスベクトル方向にせん断応力を載荷することで刃状転位を粒界に伝播させた。応力は一定時間ごとに 0MPa から 50MPa ずつ増加させていくことで載荷した。また、添加元素の影響を調べるため粒界に銅(Cu)、鉄(Fe)及び、アルミニウム(Al)をそれぞれ偏析させ、刃状転位との相互作用を調べた。各添加元素は Mg よりも原子半径が小さいため、粒界の圧縮サイトの Mg 原子を添加元素に置換することで偏析粒界モデルを作製した。

計算の結果、純 Mg 粒界では刃状転位が二つの部分転位となって運動し、先頭転位は粒界に到達したのち外部応力 50MPa で粒界に吸収された。後続転位も粒界に到達した後外部応力 100MPa で粒界に吸収された。その後、外部応力を 900MPa まで載荷しても吸収された転位は粒界から放出されなかった。次に、先頭転位および後続転位が粒界に吸収された後もう一つの刃状転位を母相に生成させ、外部応力を付加した。その結果、二つ目の刃状転位は二つの部分転位となって運動した後に粒界に吸収され、外部応力 500MPa で粒界から転位ループとなって放出された。各添加元素を偏析させた粒界でも同様の現象が見られた。偏析粒界では添加元素の影響によって粒界の幅が増加する現象が確認されたが、各粒界の粒界の幅が大きいほど、粒界が転位ループを放出する際の外部応力が大きいということが明らかになった。これは、粒界の幅が大きいほど刃状転位が粒界を通り抜けて放出されるまでの変位が大きくなることに起因すると考えられる。以上から、添加元素は粒界の幅を変化させ転位の放出を抑制することが明らかになった。

発表論文: なし