

# Mg 双晶と転位の相互作用に関する分子動力学シミュレーション

平成 19 年度入学 資源エネルギーシステム学分野 益永 康平

## 1. 研究目的

Mg は実用金属中で最も軽く、金属材料の軽量化に寄与すべく注目されている。Fe などの立方晶金属と異なり、六方晶構造をとる Mg は、底面すべりが活性であるのに加えて 2 種類の変形双晶( $\{10\cdot11\}$ 双晶・ $\{10\cdot12\}$ 双晶)を形成しやすいという特徴があり、これらは Mg 材料の力学特性に大きく関与するものである。そこで、本研究では上記 2 種類の双晶がそれぞれ底面中の転位運動とどのような相互作用をもたらすのかを分子動力学シミュレーションを用いて解明した。

## 2. 実験方法

$\{10\cdot11\}$ 双晶面、 $\{10\cdot12\}$ 双晶面それぞれをあらかじめモデリングし、モデル左中央部よりらせん転位を導入した(図 1)。その後、モデルの奥行き方向へ 0.1%刻みで単純せん断ひずみをかけていき、導入した転位を双晶面へ運動させることで相互作用を調べた。

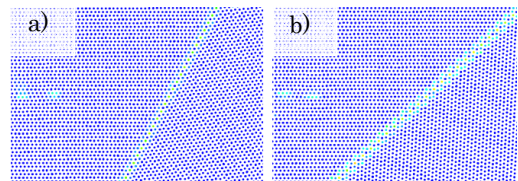


図 1 シミュレーションモデル

a)  $\{10\cdot11\}$ 双晶 b)  $\{10\cdot12\}$ 双晶

## 3. 結果

図 2 は、両モデルにそれぞれひずみ 0.8%を与えている時に、先方の部分転位(leading)が双晶面へ近づいていった時の様子である。 $\{10\cdot11\}$ 双晶面には、leading は大きな斥力が働くことなく吸収された。一方で、 $\{10\cdot12\}$ 双晶面には leading が近づくと周辺の原子のエネルギーが高くなり斥力が働いて双晶面手前で止まった。また、ひずみ 1.0%において、 $\{10\cdot11\}$ 双晶面には後方の部分転位(trailing)も吸収されたのに対し、 $\{10\cdot12\}$ 双晶面には依然として leading が反発したままだった。このように両双晶面で吸収/反発のように相互作用の違いが現れた。

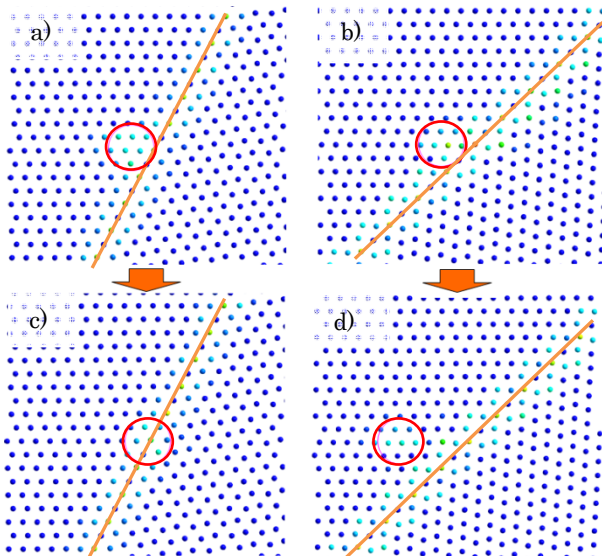


図 2 部分転位と双晶面の関係(ひずみ 0.8%)

a),c)  $\{10\cdot11\}$ 双晶面 b),d)  $\{10\cdot12\}$ 双晶面

## 4. 考察

両双晶面における相互作用の違いは、それぞれの面における粒界エネルギーの違い( $\{10\cdot11\}$ : $163\text{mJ/m}^2$ ,  $\{10\cdot12\}$ : $235\text{mJ/m}^2$ )によるものと考えられ、 $\{10\cdot12\}$ 双晶面は粒界エネルギーが高く粒界構造が複雑なため転位と反発したと思われる。また、過去の実験観察にて、 $\{10\cdot12\}$ 双晶の周辺に転位が堆積している様子が報告されている。これは、転位と双晶面の間に斥力が働いているために起こると考えられ、本研究の分子動力学によるシミュレーション結果はそのような実験事実と一致するものだった。