

マグネシウムにおける H, Si 粒界偏析の第一原理計算による解析

平成 18 年度入学 ミネラルプロセッシング分野 西原 大輝

1. 研究目的

マグネシウム(Mg)合金は実用金属中で最も密度が小さく、自動車等の輸送機器の軽量化のための利用が期待されている。Mg 合金の実用化を促進するためには力学特性の改善が必要である。他の金属では、粒界に偏析した元素がその近傍の電子状態に変化をもたらし、それが力学特性に大きく影響することが知られている。しかし、Mg 粒界における偏析元素を研究した例はない。そこで本研究では、Mg 粒界偏析元素が周囲の電子状態に与える影響を検討した。ここで、分析結果から Mg の粒界に多く偏析している元素が H と Si であることがわかっている。これに基づき、本研究では H と Si が Mg 粒界の電子状態に及ぼす影響を第一原理計算により明らかにした。さらに H については、解析結果が実際の破断挙動に反映されているかどうかを実験的に確かめた。

2. 計算方法

Mg 粒界をモデリング(clean 粒界)し、この粒界に H を侵入型(H 偏析粒界)、Si を置換型(Si 粒界偏析)として偏析させた。これらのセルを構造最適化し、電子密度分布及び電子状態密度(DOS)を求めた。

3. 計算結果

図 1 の電子密度分布図から、clean 粒界に比べて H 偏析粒界では H 原子と Mg 原子の間の電子密度が高く、それと対照的に粒界を挟む Mg-Mg 原子間の電子密度は低くなっていることがわかった。また DOS の計算結果から、H 原子は Mg 原子と共有結合し、価電子を奪うことで Mg 原子の価電子数を減少させていることがわかった。よって H 偏析粒界では、H 原子が最近接 Mg 原子と共有結合して価電子を奪うことで、粒界を挟む Mg-Mg 原子間の電子密度を低下させたと言える。それにより粒界を支える Mg-Mg 原子間の凝集力が低下し、結合が切れやすくなるのでクラック生成のサイトとなり脆化がおこるのではないかと考えられる。また、Si 偏析粒界でも同様の結果が得られた。

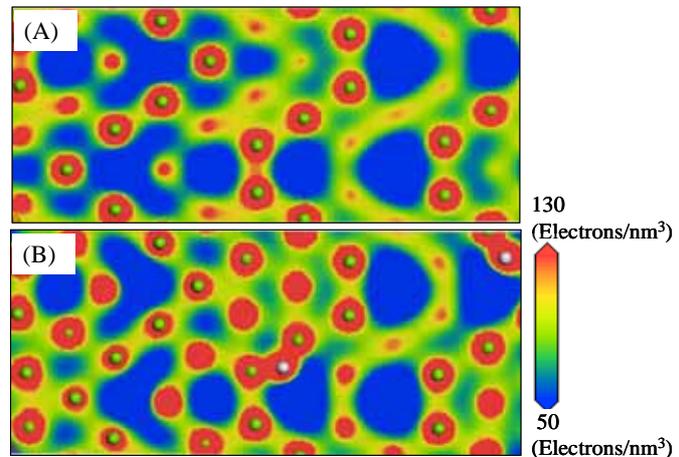


図 1 (A) clean 粒界および(B) H 偏析粒界の電子密度状態図

4. 実験方法

純 Mg の鋳造材から平行部が 2.5×10 mm の試験片を作製した(通常材)。また、同様の方法で作製された試験片から水素の脱ガスを行った(脱ガス材)。これらをひずみ速度 1.0×10^{-3} /s で引張試験した。

5. 実験結果

引張試験片の破断面を組織観察した結果、通常材においては破断面の凹凸が著しく、また、粒界において多数のクラックが見られた。一方の脱ガス材では、通常材に見られたような大きなクラックは見られなかった。これらは、第一原理計算の解析結果を裏付ける結果である。