

分子軌道計算法によるマグネシウム合金の引張強さの推定

Estimation of the Tensile Strength of Magnesium Alloy by Molecular Orbital Calculation Method

○中野達也¹, 板倉勇氣¹, 吉田洋明²Tatsuya Nakano¹, Yuki Itakura¹, Hiroaki Yoshida²

Abstract: Currently, alloy development is dependent on personal experience and trial and error. Therefore, research of the alloy design using a computer simulation has been promoted. The molecular calculation method is applied to an alloy design. In this study, we estimated the tensile strength of magnesium alloy using the molecular orbital calculation method.

1. はじめに

現在,合金開発は試行錯誤や個人レベルの経験や勘に頼って行われている.しかし,それでは多大な費用と時間を費やす必要がある.そこで,より客観的な立場で合金を設計するために,コンピュータ上でのシミュレーションから合金を設計する研究が進められている^{[1][2]}.本研究では物質の電子状態の違いから合金設計を行う可能性を検討する.なお,電子状態はDV-X α 分子軌道法により計算を行う^{[3][4]}.

2. 合金の引張強さの推定方法

DV-X α 分子軌道計算法とはクラスターモデルを作成すれば原子番号と原子の座標だけで理論的計算を行える計算方法である.このDV-X α 分子軌道計算法を用いて合金元素の電子エネルギーレベルから, Mk レベルを求める.ここでは,合金元素1種類のみが含まれている場合の Mk レベルを求め,合金に含まれる元素のモル分率を重みとして,これらの線形結合から合金の \overline{Mk} レベルを算出し,引張強さとの関係を調べる.

3. マグネシウム合金

マグネシウムの合金元素である Al, Y, Zn, Si, Re, Zr, Li, Fe, Cu および Ni をそれぞれクラスターモデルの中心に配置し,これらの Mk レベルを算出する^[5].例としてFig.1にアルミニウムを合金元素とした時のクラスターモデルを示す.

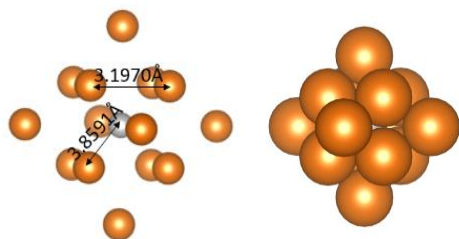


Figure 1. Cluster model of aluminum

合金の \overline{Mk} レベルの算出は(1)式の様各合金元素のモル分率を Mk レベルの重みとして線形結合して算出する.

$$\overline{Mk} = \sum X_i Mk_i \quad (1)$$

X_i :合金元素 i のモル分率

Mk_i :合金元素 i の Mk レベル

Table1 に示す8種類のマグネシウム合金に対して算出した \overline{Mk} レベルと引張強さの関係をFig.2に示す.

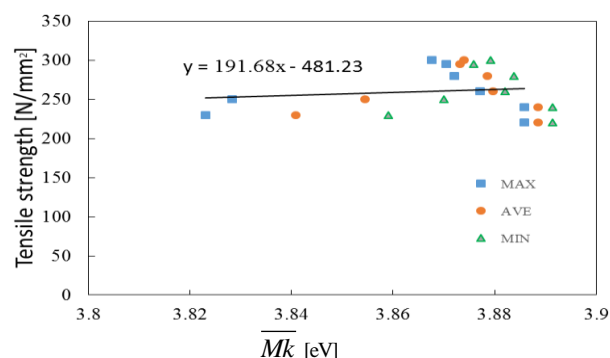
Figure 2. \overline{Mk} level and the tensile strength

Fig.2に示すMAX,AVEおよびMINはTable1に示す各成分元素の含まれる値の範囲で最大の値,最小の値および平均の値の3つの場合に場合分けをしてそれぞれ計算したものである.

Fig.2より合金の \overline{Mk} レベルと引張強さの間には線形に近い関係があることが分かる.

次に各合金元素の Mk レベルが引張強さに及ぼす影響を考慮するために,(1)式へ直接引張強さが表されるような重みを加えて(2)式の様にする.この式から最小二乗法によって重みを求める.

$$\text{引張強さ} = \sum A_i X_i Mk_i \quad (2)$$

A_i :合金元素 i の重み

Table1. Chemical composition table of magnesium alloy [6]

| Alloy number | Mg | Al | Zn | Re | Zr | Y | Li | Fe | Si | Cu | Ni | Tensile strength (N/mm2) |
|--------------|-----------|---------|-------------|---------|----------|----------|-------------|---------------|--------------|---------------|---------------|--------------------------|
| MS1B | Remaining | 2.4~3.6 | 0.5~1.5 | | | | | 0.005 or less | 0.1 or less | 0.05 or less | 0.05 or less | 220 |
| MS1C | Remaining | 2.4~3.6 | 0.5~1.5 | | | | | 0.005 or less | 0.1 or less | 0.05 or less | 0.05 or less | 240 |
| MS2 | Remaining | 5.5~6.6 | 0.5~1.5 | | | | | 0.005 or less | 0.1 or less | 0.05 or less | 0.05 or less | 260 |
| MS3 | Remaining | 7.8~9.2 | 0.2~0.8 | | | | | 0.005 or less | 0.1 or less | 0.05 or less | 0.05 or less | 295 |
| MS5 | Remaining | | 2.5~4.0 | | 0.45~0.8 | | | | | | | 280 |
| MS6 | Remaining | | 4.8~6.2 | | 0.45~0.8 | | | | | | | 300 |
| MS11 | Remaining | | 0.2 or less | 1.5~4.0 | 0.4~1.0 | 4.75~5.5 | 0.2 or less | 0.010 or less | 0.01 or less | 0.005 or less | 0.005 or less | 250 |
| MS12 | Remaining | | 0.2 or less | 2.4~4.4 | 0.4~1.0 | 3.7~4.3 | 0.2 or less | 0.010 or less | 0.01 or less | 0.005 or less | 0.005 or less | 230 |

(2)式より,各合金元素の重みが次の(3)式のように求められた。

$$\begin{bmatrix} A_{Al} \\ A_{Zn} \\ A_{Re} \\ A_{Zr} \\ A_Y \\ A_{Li} \\ A_{Fe} \\ A_{Si} \\ A_{Cu} \\ A_{Ni} \\ A_{Mg} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 393.086 \\ 273.073 \\ -754.089 \\ 6697.450 \\ 382.783 \\ -33.232 \\ -14.731 \\ -334.309 \\ -153.958 \\ -146.260 \\ 44.541 \end{bmatrix} \quad (3)$$

Li から Ni までの重みが負となっていることから,これらの元素は,引張強さを弱める効果を持つことが推定される.そして,これらの元素は,Table1 の成分表より,含有率を少なくすることが求められている元素に一致する.また,Re も負の重みを打つが Re は耐熱性の向上のために加えられているものである。

(3)式の重みを用いて計算し直した引張強さと JIS 規格による引張強さとの関係を Fig.3 に示す。

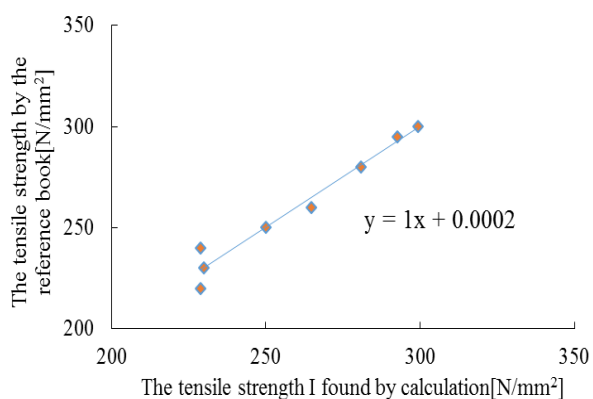


Figure 3. The reference tensile strength vs. calculated results.

重みを加えたため,当然の事ながら引張強さが非常によく推定されている。

4. おわりに

合金元素に重みを考慮した分子軌道計算による引張強さが JIS 規格による引張強さと非常に良く一致した.また,成分表で含まれることが望ましくないとされる元素に負の重みが表れた.つまり, \overline{Mk} レベルを用いた引張強さの推定に元素の重みを考慮することは妥当であると考えられる。

以上のことから合金元素に重みを考慮すれば,マグネシウム合金の組成成分比率から引張強さを推定できることが分かった.これらのことから,引張強さを与え,これを満たす合金元素のモル分率を決定する合金設計が分子軌道計算法によって可能であると考えられる。

5. 参考文献

- [1] 足立裕彦,森永正彦,那須三郎:「金属材料の量子化学と量子合金設計」,三共出版.
- [2] 森永正彦,湯川夏夫,足立裕彦:「d 電子合金設計理論」,日本鉄鋼協会,鉄と鋼,Vol.71,No.11,1985.
- [3] 足立裕彦 監修,小和田善之,田中功,中松博英,水野正隆:「はじめての電子状態計算」三共出版.
- [4] 森永正彦,湯川夏夫,足立裕彦:「チタン合金の電子構造と相安定性」,日本鉄鋼協会,鉄と鋼,Vol.72,No.6,1986.
- [5] 都甲雄樹,橘木惇:「最適化手法を用いた材料設計に関する研究」,日本大学理工学部精密機械工学科卒業論文,平成 27 年.
- [6] 日本規格協会:「JIS ハンドブック 金属分析(非鉄)」,日本規格協会,2013.