

溶接・接合工学における物性評価のシミュレーション

大阪大学工学研究科マテリアル生産科学専攻 高原 渉

目的 溶接・接合における溶融池の挙動は、溶融母材に含まれる表面活性元素に大きく左右される。各種金属の表面活性元素は、周期表のある特定の族元素に属していることが多い。しかし、なぜ周期表のある特定の族元素がそのような効果をもたらすのかは不明である。そこで、化学結合性の観点から金属の表面活性元素の周期表依存性に関する分子軌道論的考察を試みた。

内容 Al, Fe, Cuのクラスターモデルに対して、置換型もしくは侵入型に異種原子があるときの電子状態の変化をDV-X α 分子軌道計算により調査した。

結果 図は、 $Al_{14}M_1$ 、 $Cu_{14}M_1$ 、 $Fe_{18}M_1$ (ただし $M = H \sim Ne$)の各クラスターモデルにおける異種原子Mの周囲の金属-金属間のBond overlap populationの値を、Mの原子番号に対してプロットしたものである。異種原子Mが存在すると、Mと母金属の間の結合性と共に、周囲の金属-金属間の結合性も変化する。表面活性元素の周期表依存性の問題を考察するには、異種原子Mの周囲の金属-金属間の結合性の変化を調べることが重要であると考えられる。

