20pAH-4

第一原理計算によるLPSO相型Mg合金の生成機構の解明

関西学院大理工 坂本雄一，西谷滋人，山本洋佑，正木佳宏

First principles calculations of LPSO type Mg alloys

Kwansei Gakuin Univ., Y.Sakamoto, S.R.Nishitani, Y.Yamamot, Y.Masaki

長周期積層欠陥構造（LPSO:Long Period Stacking Order）型Mg合金（$Mg_{97}Zn_1Y_2$）は超ジュラルミンより軽量で，高強度かつ高耐熱性を示すことが判明している．LPSO構造は，図1に示すように，母相hcp構造の[0001]方向に対して周期的に積層欠陥が導入されることで長い周期性を有する構造となる．LPSO構造の1つである18R構造では，6周期ごとに現れる積層欠陥部に溶質原子が濃化することが確認されている．本研究ではこの新奇なミクロ組織の生成機構を，原子レベルでのエネルギー計算から解明することを目的とした．

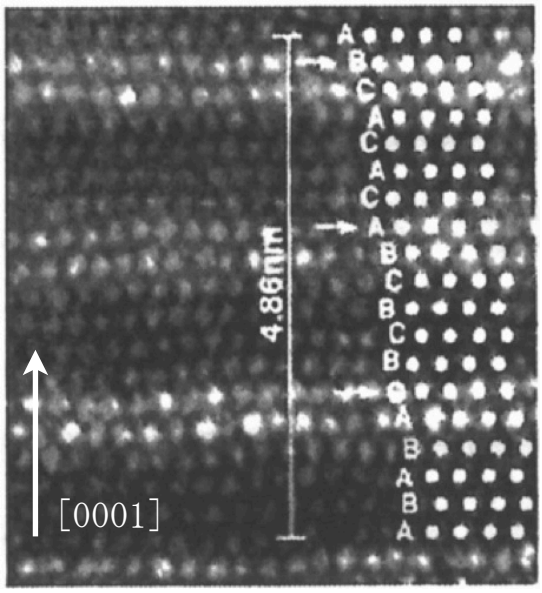

図1:HAADF-STEMで観察された$Mg_{97}Zn_1Y_2$合金中に観察されるLPSO構造[1].

18R構造形成の素過程として，(i)積層欠陥の生成，および(ii)Zn,Yペアの規則化が考えられる．そこで，積層欠陥の生成が先行するシナリオ(a)と，溶質原子の規則化が先行するシナリオ(b)が考えられる．それぞれのシナリオの妥当性を調べるため，第一原理計算ソフトVASPを用いて素過程を抽出したモデルのエネルギーを計算した．

シナリオ(a)の検証のために，hcp構造のMgモデルと，18R構造のように周期的に積層欠陥を含むいくつかの構造モデルの計算を行った．結果はhcp構造が最安定であり，18R構造は他の周期構造とのエネルギー差が小さいことから，積層欠陥が先行して生じるとは考えられない．

シナリオ(b)の検証のため，Zn，Yペアを[0001]方向に4～9周期ごとに配置したhcp構造のMg合金モデルの計算を行った．結果は6周期ごとに配置したモデルが最安定となった．このことから，溶質原子が先行して規則化することが示唆される．

[1]河村能人，「高強度かつ優れた耐熱性を有するKUMADAIマグネシウム合金の開発」，<http://kico.kumamoto-u.ac.jp/seeds/seeds/25000240/index.html>，（2012/7/10アクセス）．