

ZrCr<sub>2</sub> Laves相の熱安定性

関西学院大理工 山本洋佑, 西谷滋人, J. Vřešťál

Vibration free energy of Cr<sub>2</sub>Zr Laves phase,  
Kwansei Gakuin University, Y.yosuke, S.R.Nishitani  
Masaryk University, J. Vřešťál

【緒言】 Laves相は、水素吸蔵材や高温での硬度を保つ析出物として重要な材料である。Laves相が取り得るMgCu<sub>2</sub>(C14)型、MgZn<sub>2</sub>(C15)型、MgNi<sub>2</sub>(C36)型という3つの構造のうち、Cr<sub>2</sub>ZrはFig. 1 に示した通り、高温になるにつれC14 → C36 → C15と最安定構造が変化することが確認されている。しかしながら、現在明らかにされているLaves相の原子モデル及び計算結果は、このような安定性を議論するには未だ不十分である。本研究では典型的なAB<sub>2</sub>型の構造を形成するCr<sub>2</sub>ZrLaves相を対象とし、有限温度における安定性を第一原理計算より検討した。

【手法】 原子を調和振動子とみなし、フォノン分散曲線からフォノン状態密度を導出し、振動効果を含んだ有限温度の自由エネルギーを求めた。Phonon-DOS計算にはMedeAを、第一原理計算にはVASPを使用した。ただし、C36に含まれる単位胞あたりの原子数が多いため、計算精度をやや低く設定しており、さらに体積変化を取り入れた計算は未だ終了していない。

【結果】 Fig.2は計算した各相の振動自由エネルギー差をC15を基準にして示している。これより、高温になるにつれC15からC14へ安定相が変化するという結果が得られた。これは実験状態図から予測される2相の相互の安定性を再現している。しかし、計算結果ではC36が低温部で最安定となっており、これは実験と一致していない。今後、熱膨張、計算精度を考慮したさらに精密な計算が必要になる。

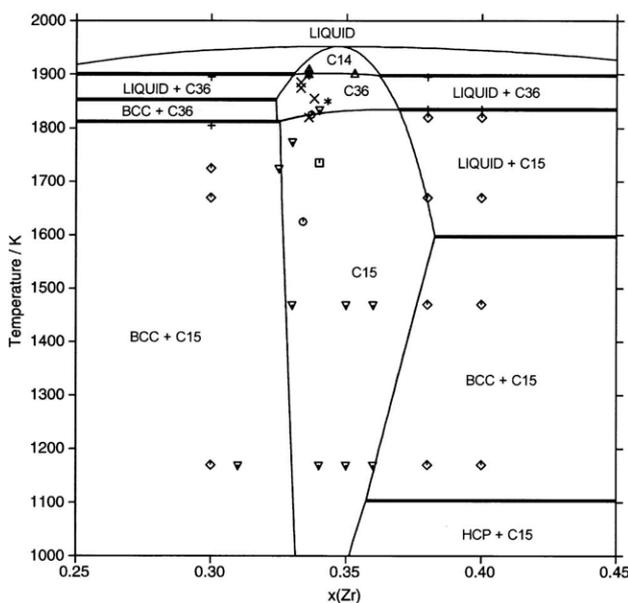
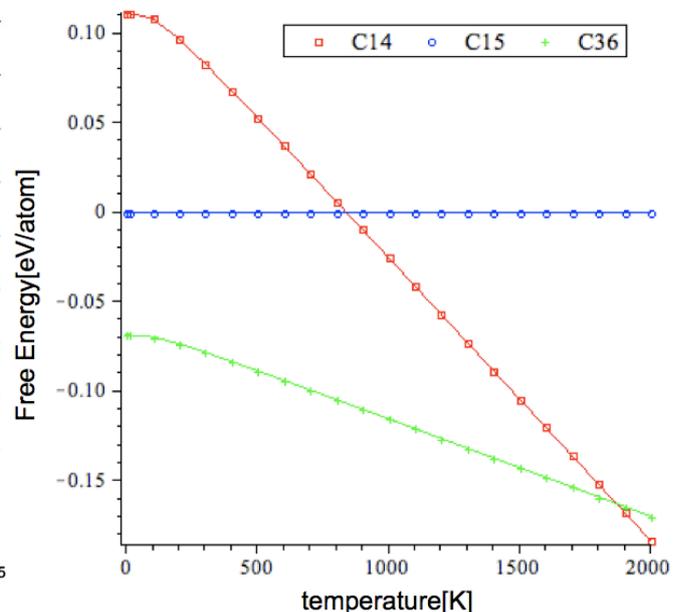
Fig.1 : Cr<sub>2</sub>Zr相の状態図.

Fig.2 : 有限温度の自由エネルギー差.