

ZrCr₂ 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 Cr₂Zr Laves phase,
 Kwansai 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MgCu₂(C14)型, MgZn₂(C15)型, MgNi₂(C36)型という3つの構造のうち, Cr₂Zr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AB₂型の構造を形成するCr₂ZrLaves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。

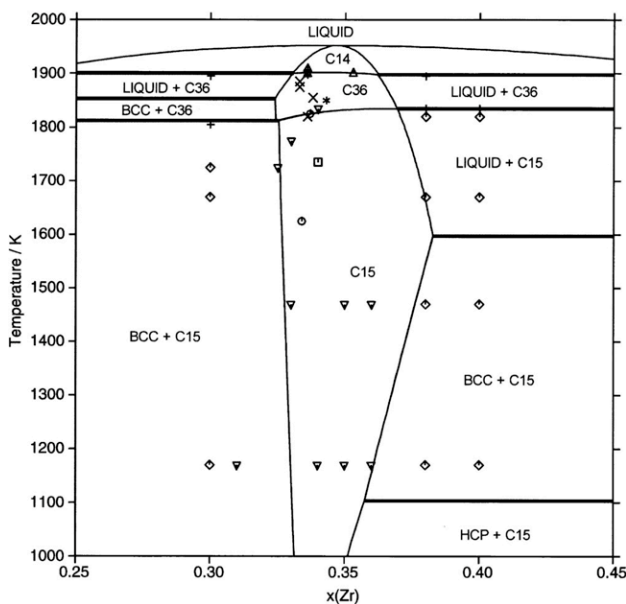
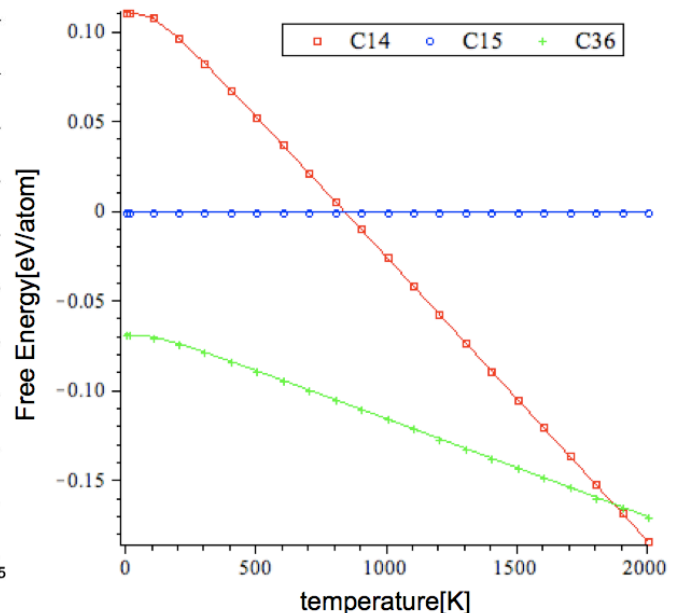
Fig.1 : Cr₂Zr相の状態図.

Fig.2 : 有限温度の自由エネルギー差.