

Mg合金の長周期積層欠陥構造の第一原理計算

関西学院大理工 正木佳宏, 西谷滋人

First principles calculations of long period stacking ordered structure of Mg alloys

Kwansei Gakuin University, Yoshihiro Masaki, Shigeto.R.Nishitani

【緒言】LPSO 相型 Mg 合金 ($Mg_{97}Zn_1Y_2$) は、優れた機械的性質をもつことが明らかとなっており、その生成メカニズムの解明は新規材料開発に有用な指針を与えることが期待される。LPSO 相は HCP 構造の c 軸方向に比較的長い周期性を有する 18R 構造を取ること、また添加元素(Zn,Yなど)が周期的に積層欠陥部に濃化していることが知られている。本研究は第一原理計算を用いて、様々な系のエネルギーを計算し、Zn と Y を固溶した際の挙動について調べた。

【手法】本研究では、原子モデル構築ソフトである Medea、構造エネルギーを求めるための第一原理計算ソフトである VASP (Vienna Ab-initio Simulation Package) を使用した。計算条件としてカットオフエネルギーは 600[eV]、k-point mesh は系のサイズに応じて適切なパラメータに設定した。

【結果】図1 に示したように 2H と 3C の積層周期比における構造エネルギーと 18R 構造のエネルギーの間で線形依存性を示した。これより、18R 構造が安定な原因は、不純物元素との相互作用に起因していると考えられる。更に、Zn と Y を異なる系に置換した FCC 構造と HCP 構造とのエネルギー差を 図2 に示す。殆どの系の構造エネルギー差は、線形依存性を示したが、Y または Y+Zn を 24 原子のモデルに置換した場合は線形依存性を示さなかった。これは Y が孤立状態で c サイトに出現し易くなる事が示唆される。

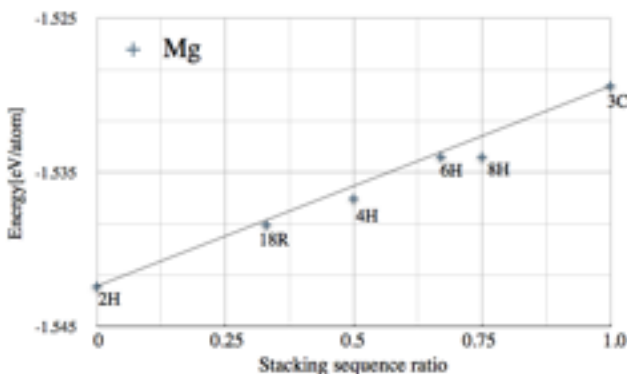


図1. 積層周期比による 2H から 3C、および18R構造の構造エネルギー。

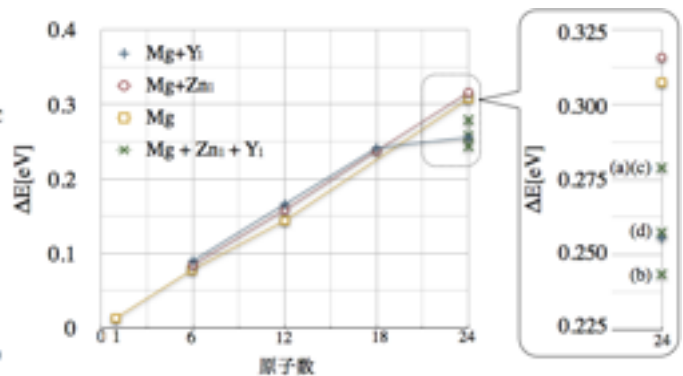


図2. 長周期積層構造の Zn ,Y の添加効果による構造エネルギー差。