

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 理工学部 ○正木佳宏（院生）， 枚本麻衣， 山本裕嘉子， 宮本誉大， 西谷滋人

【緒言】 LPSO相型Mg合金は，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構造を取ることで，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，様々なモデルのエネルギーを計算し，ZnとYが固溶した際のLPSO相の挙動について調べた．

【手法】 MgのスーパーセルのHCP構造（2*2*3）とFCC構造（2*2*2）それぞれにZnとYそれぞれと，両方を置換させたモデルを構築し，第一原理計算ソフトVASPを用いて，エネルギーを求めた．また，LPSO相構造をもつモデルを構築し，その積層欠陥部にZnとYを置換し，エネルギーを計算した．そして，MgのスーパーセルにZn，YおよびZnとY両方を置換した場合の内挿値を求め，それらと第一原理計算で求めたエネルギーとの差を算出し，ZnとYが固溶することでLPSO相が最安定構造となるのかについて検討した．

【結果】 内挿値を基準とした，エネルギー差を図1に示す．結果，内挿値のエネルギーの方がLPSO相にZnやYまたは両方を置換させたモデルのエネルギーより安定することがわかった．これはLPSO相の構造と矛盾している．単に，LPSO相の積層欠陥部に添加元素を置換するだけではないことが示唆された．この不一致については第一原理計算と平衡して，平衡モンテカルロシミュレーションを用いた積層単位でのシミュレーションを作成し，最安定構造が生成される過程を観察しながら，検討を進めている．

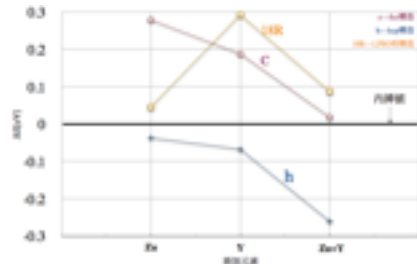


図1. 内挿値との構造エネルギー差.