

Mg-Zn-Y 合金における溶質元素と積層欠陥との相互作用

関西学院大学理工学部 坂本雄一，西谷滋人

1. 目的

長周期積層欠陥構造 (LPSO: Long Period Stacking Order) 型 Mg 合金 (Mg₉₇Zn₁Y₂) は超ジュラルミンより軽量で、高比強度かつ高耐熱性を示す。LPSO 構造の生成機構は現状では解明されていない。そこで以前、西谷研究室では LPSO 構造の生成機構として以下のようなシナリオを仮定し、その検証を行った [1]。

A. Mg₂H 構造中に積層欠陥が導入され、溶質原子が積層欠陥部に濃化する。

B. 2H 構造中で溶質原子が規則的に配置され、溶質原子が集まった層に積層欠陥が導入される。

シナリオ A の検証のために基底状態における Mg 多形の第一原理計算を行った。結果は 18R、14H 構造に比べ 2H 構造がエネルギー的に一番安定であった。そのため、pure な Mg 中に積層欠陥が導入されることがないと考えられる。また、シナリオ B の検証のために溶質原子である Zn, Y ペアを Mg 合金中に 2 つ導入したモデルの計算を行った。結果は、Zn, Y ペアが集まるほど安定となり、18R 構造で見られるような周期的な配置での安定化は確認できなかった。

本研究では LPSO 構造の生成機構として仮定したシナリオのさらなる検証を行う。そのために第一原理計算を用いて、(i) Zn, Y が積層欠陥に与える影響、および(ii) Mg 合金中における Zn, Y の挙動の調査を行った。

2. 計算手法

本研究では、平面波基底の第一原理計算ソフト VASP (Vienna Ab Initio Simulation Package) を用いて系のエネルギー計算を行った。計算条件は以下のとおりである。

- ・交換相関相互作用：GGA-PBE,
- ・擬ポテンシャル法：PAW 法,
- ・エネルギーの収束条件：10⁻⁵eV,
- ・力の収束条件：0.02eV/Å,
- ・平面波基底の cut-off-energy：300eV,
- ・k 点のサンプリング：Monkhorst-Pack 法,
- ・k-mesh：9x9x1.

3. 結果および考察

(i) Zn, Y が積層欠陥エネルギーに与える影響

本計算では Zn, Y が積層欠陥に及ぼす影響を調査した。計算では、2x2x9 の 2H 構造を基本とした Mg₇₂ と Mg₇₀Zn₁Y₁ のモデルを使用した。図 1 に示したように Mg₇₀Zn₁Y₁ のモデルではペアにした Zn, Y をそれぞれ 9 層目に配置した。これらのモデルの 10~18 層目をブロックとして [1-100] 方向にずらしたモデルのエネルギー計算を行った。

