

## Mg-Zn-Y 合金における溶質元素の中距離規則化の可能性

関西学院大・理工学部 山本洋佑, 西谷滋人

### 1. 目的

LPSO 構造は長周期の積層構造と溶質原子の規則化によって、その複雑な構造が安定化している。しかし、どのような順序で複雑な構造が生成していくかの過程は解明されていない。そこで 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、溶質原子の集まった層に積層欠陥が導入される。

これらのシナリオが成り立つためには、それぞれの律速機構のエネルギー的な安定性を調べる必要がある。本発表では、溶質原子の中距離規則化シナリオがなぜ不適であったかを報告する。

### 2. 計算方法

本研究では、第一原理計算には、平面波基底の擬ポテンシャル法を実装したソフト 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<sup>-5</sup>eV,
- ・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,
- ・

### 3. 結果および考察

溶質原子の初期配置を考える必要がある。Pure Mg (2H) 構造中に Zn と Y 原子を配置し、どのような配置が安定かを調べた。2x2x3 の hcp セルのなかに、図 1 に模式的に示したとおり Zn と Y 原子を配置した。エネルギー計算の結果を図 2 に示した。それぞれの原子種の数と同じであるため、トータルのエネルギーで示している。Zn と Y は離れた位置に配置するよりも、近づいた方が安定である。さらに、basal 面に 2 原子が配置したときは、prism 面に配置するよりも安定であった。basal 面に近接して配置した場合、ほかの配置よりも 0.2eV 程度安定化している。

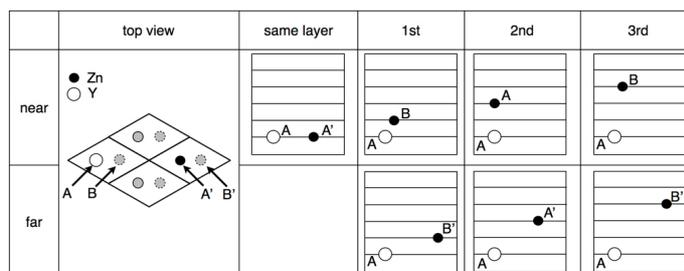


図 1 2H Mg 母相中の Zn, Y サイト位置の模式図。

次に、Zn-Y はペアとして存在すると仮定して、Zn-Y ペア同士の相互作用エネルギーを求めた。これは、溶質原子が中距離の規則化を起こす可能性を確かめるためである。ここでは、もっとも配置の場合の数が少なくてすむように prism 配置のペア同士の相互作用を計算した。図 3 にその様子を示した。Y-Zn 同士の向きによって YZn-YZn の並びと、YZn-ZnY の並びが考えられる。図 4 にこれらの計算結果をまとめた。

YZn-ZnY の系列を観ると、1 層離れが最も安定であるが、3 層のあたりにも極小値をとる傾向が見られる。一方、YZn-YZn の並びでは、2 層離れたところで極小値を示している。当初、中距規則化の傾向と考えたが、実際の原子配置では、YZn-YZn と YZn-ZnY の並びは相互に交換が容易である。その場合、エネルギーの低い配置を取っていくことで相互作用エネルギーは 1 層離れまで単調に減少している。したがって、期待したような中距離規則化は観られなかった。

#### 4. まとめ

積層欠陥の生成と、溶質原子の規則化という素過程の前後関係で構成される単純な生成シナリオから期待される溶質原子の規則化先行のエネルギー的な証拠は得られなかった。しかし、積層欠陥部に溶質原子がトラップされると、その他の溶質原子をさらに引きつける傾向が見られる。この影響によって積層欠陥に溶質原子が集まる傾向が加速されるメカニズムの存在が期待できる。

#### 参考文献

[1] Y. Yamamoto et al., Mater. Trans., 54 (2013): 656-660.

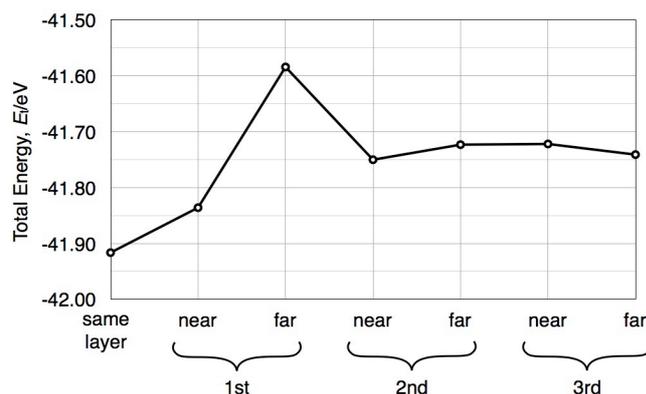


図 2 2H Mg 母相中の Zn, Y 相互作用エネルギー。

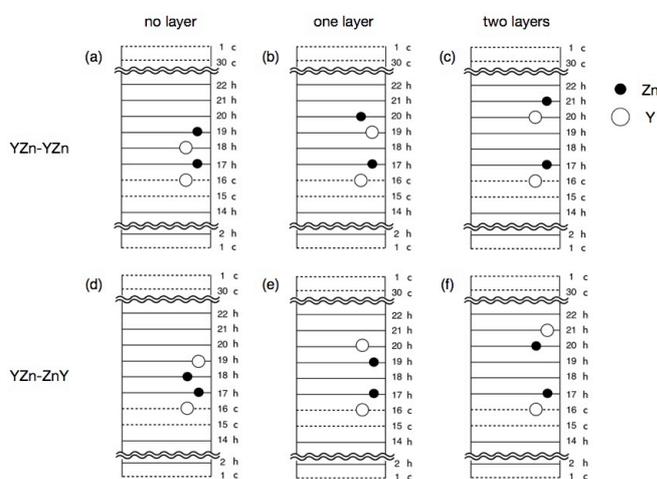


図 3 18R 構造中の 2 つの Zn-Y ペアの配置を示す模式図。

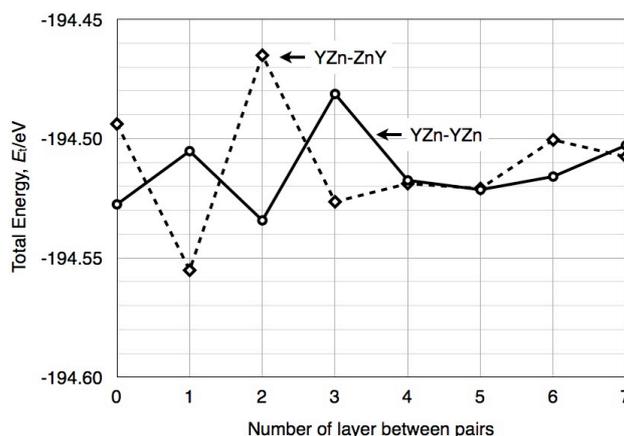


図 4 18R 構造中の 2 つの Zn-Y ペアの層間距離依存性。

