

Mg合金における積層欠陥エネルギーの第一原理計算

関西学院大理工 坂本雄一, 山本洋佑, 正木佳宏,
白山知穂里, 西谷滋人

First principles calculations of stacking fault energy of Mg-Zn-Y
Kwansei Gakuin Univ., Y. Sakamoto, Y. Yamamoto, Y. Masaki,
C. Shirayama, S. R. Nishitani

長周期積層欠陥構造 (LPSO: Long Period Stacking Order) 型Mg合金 ($Mg_{97}Zn_1Y_2$) 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構造は、図1に示すように、母相hcp構造の[0001]方向に対して周期的に積層欠陥が導入されることで長い周期性を有する構造となる。LPSO構造の1つである18R構造では、6周期ごとに現れる積層欠陥部に溶質原子が濃化することが確認されている[1]。本研究ではこの新奇なマイクロ組織の生成機構を、原子レベルでのエネルギー計算から解明することを目的とした。

LPSO構造生成の素過程として、積層欠陥の生成と溶質原子の規則化が考えられる。本研究では、溶質原子であるZn, Yが積層欠陥に及ぼす影響を調査した。本計算では、 $2 \times 2 \times 9$ の2H構造を基本とした Mg_{72} と $Mg_{70}Zn_1Y_1$ のモデルを使用した。 $Mg_{70}Zn_1Y_1$ 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。

結果を図2に示した。 Mg_{72} に比べ $Mg_{70}Zn_1Y_1$ の積層欠陥の活性化エネルギーのピークが1/3ほどの大きさになった。この結果から、Zn, Yペアが濃化している層において、積層欠陥が生じやすいと考えられる。

[1] E.Abe *et al.*, *Phil. Mag. Lett.* **91**, 690-696 (2011).

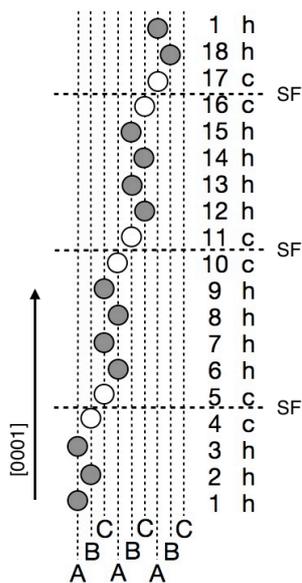


図1: 18R構造の模式図.

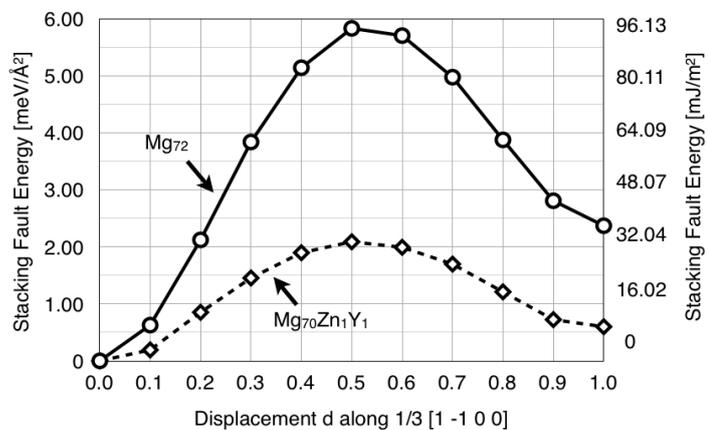


図2: Mg_{72} と $Mg_{70}Zn_1Y_1$ の積層欠陥エネルギー.