

はじめに：面欠陥と溶質原子の相互作用

関西学院大・理工 西谷 滋人

Interactions between planar defects and solute atoms

Department of Informatics, Kwansei Gakuin Univ.

Shigeto R. Nishitani

エネルギーの高効率利用として、輸送機で使用可能な新規の軽量構造材料の開発が切望されている。なかでも Mg 基合金は、その比重から潜在的な候補材料として、諸外国において自動車をはじめとする輸送機への適用を目指して具体的な開発・製造が顕著に進んでいる。しかし、強度や加工性、耐食性の面で Ti や Al 系合金に対抗できずにいた。ごく最近、新たに発見された長周期積層 (Long period stacking order:LPSO) 構造という特殊な組織を有する一連の合金系において、比強度で超々ジュラルミンを凌駕する材料群が注目を集めている。この LPSO 構造は、面欠陥と溶質原子の相互作用によって強度が発現することが確かめられている。しかし、その原子レベルの構造や、生成機構には未だに未解明な点が多く存在する。

半導体や誘電体などの機能性材料においては、界面とそこに存在する溶質原子との相互作用によって、必要な機能を発現する事象が多く知られ、格子欠陥の研究対象として長年の知識と技術の蓄積がなされ、それら機能性材料の性能向上に寄与してきた。領域 10 において蓄えられてきた格子欠陥に関する知見と、この新たに発見され

た Mg 材料について、その生成機構や強度へ与える影響について関連分野との情報交換、議論を深めることを目的として、本シンポジウムを企画する。

はじめに、Mg 基 LPSO 合金を最初に開発した熊大・河村能人から発見の経緯や、研究の最前線を紹介していただく。次に、高輝度光科学研究センター・木村滋に放射光で得られた Mg 基 LPSO 構造の知見を総括してもらおう。また、東北大金研・井上耕治には、格子欠陥観察の強力な手法である、陽電子消滅法およびアトムプローブを用いて、原子レベルで見る LPSO 中の積層欠陥と溶質原子相互作用を報告していただく。

前半の実験を中心とした発表に引き続いて、後半は第一原理計算で得られた知見を報告してもらおう。まず、特殊な計算手法である第一原理局所エネルギーを開発・活用している東大生研・椎原良典に積層欠陥に適用した結果を報告していただく。さらに、阪大基礎工・君塚肇には、第一原理計算で、Mg 基 LPSO 構造における溶質原子の相互作用を報告していただく。