

関西学院大・理工

西谷 滋人

First Principles Calculations on LPSO Formation in Mg alloy

Department of Informatics, Kwansei Gakuin Univ.,

Shigeto R. Nishitani

LPSO(Long Period Stacking Order)構造は、熊大・河村らによって2001年にMg-Zn-Y合金で発見された[1]。この新奇な構造は、その後通常凝固や、時効処理によっても生成することが確認され、その優れた機械的特性が注目されている。Mgの比重はAlに比べて2/3と軽量であるが、強度がそれほど高くなく、比強度でAl系のジュラルミンに劣っていた。LPSO構造からなるMg-Zn-Y急速凝固粉末冶金材の比降伏強さは、超々ジュラルミンの1.5倍を超える。そのほかの機械的性質も飛躍的に向上したことにより、燃費の向上が必須である自動車や飛行機の筐体等で使用する軽量構造用材料として注目されている。

しかし、その後LPSO構造が発見された他のMg系合金はすべて希土類(RE)を含んでいた。そこで、製造コストを下げるには、合金探索や組織制御の新たな指針が必要であったが、そもそもその土台となるLPSOの構造、生成機構、変形メカニズム等が未解明であった。本講演では、我々のグループで行ってきた第一原理計算によるLPSO構造生成機構の取り組みを中心に、LPSO研究の最先端の様子を紹介する。

構造 LPSOという呼称は、Mgの2H構造中に周期的に積層欠陥(SF)を含んだ構造から来ている。図1には6周期毎に積層欠陥が入る18R構造を示している。この他に、10H(5周期)、14H(7周期)、24R(8周期)の構造が確認され、熱処理によって周期が変化する。

このSF領域に溶質原子であるZnとYが濃化していることは、高分解能電顕内のZ-contrast観察によって明らかであった[2]。その詳しい原子配置は、おなじ構造を呈するMg-Al-Gd系での高分解能観察から、図2に示したような溶質原子クラスターが規則的に配列していることが判明した[4]。この構造は、放射光を用いた単結晶X線回折や小角散乱、あるいは走査型トンネル顕微鏡による直接観察で確認されている。

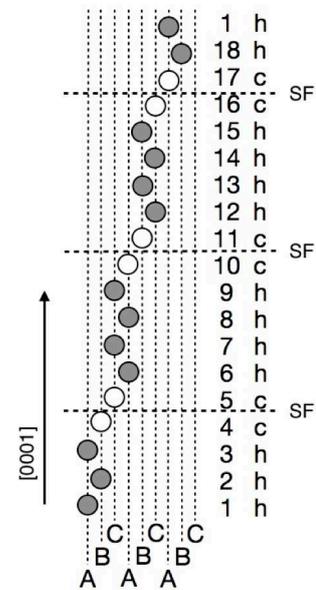


図1: 18R構造模式図。

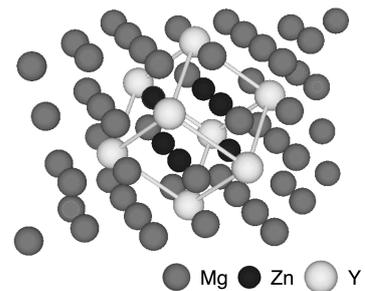


図2: クラスター構造[3]。立方格子にYが、面心にZnが配置している。

生成シナリオ このような複雑な構造が、相なのか、組織なのかの判別は難しい。いずれにしても、このような構造が均質固溶状態から生成するには、直観的に2つのシナリオが考えられる [5]。図3では、積層欠陥部を黒丸で、溶質原子 Y-Zn のペアあるいはクラスターを星印で記している。(A) はまず積層欠陥が周期的に入り、その後、溶質が拡散して積層欠陥にトラップされるモデルであり、積層欠陥誘起である。一方、(B) は溶質原子あるいはクラスターが周期的に配置された後に積層欠陥が入る規則化誘起も考えられる。これらは、マルテンサイトなどの無拡散変態、析出などの拡散変態に対応している。

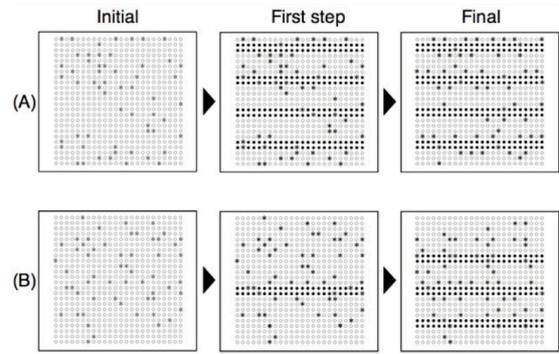


図 3: 二つの LPSO 生成シナリオ。

(A) に基づく計算例としては、飯久保らが高温までの phonon を取り入れた第一原理計算によって 18R 構造の安定化を示している [6]。一方、(B) に基づくクラスター移動のシミュレーションが君塚らによって報告されている。我々は、拡散速度がより早いと考えられる Zn-Y ペアでの移動を考え、中距離の規則化を第一原理計算から求めたが、そのようなエネルギー的傾向は見られなかった。一方、クラスターを生成した場合には、その周りからは逆に溶質原子が追い出される傾向が確認できた。

さらに、溶質原子を含んだ面では積層欠陥がしやすい傾向がある。図4にその計算結果を示した。積層欠陥の変位ベクトル ($1/3 \langle 1\bar{1}00 \rangle$) にともなうエネルギー変化を示した。積層が完全にずれた $d=1.0$ で、溶質原子が存在するとエネルギーが低下するだけでなく、活性化エネルギーの山も $1/3$ に減少しており、少しの力で積層欠陥が容易に入ることを示唆している。

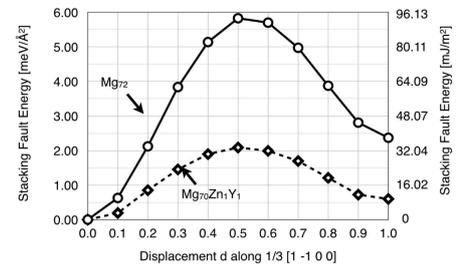


図 4: 積層欠陥導入に伴うエネルギー変化。

これらの結果から、ある面で積層欠陥が入ると、そこから押し出された溶質原子がその周囲に濃化し、さらに積層欠陥導入が誘発されるというシナリオが考えられる。

変形機構その他 この LPSO 構造を変形すると、特殊な積層構造がそのまま折れ曲がったようなキック型の形態を示す。転位や双晶あるいは粒界滑りなどとは異なった変形メカニズムが考えられる。あらたな変形メカニズム、強化機構の解明に向けて、東田、大橋、中谷らが取り組んでいる。

[1] Y Kawamura, K Hayashi, A Inoue, T Masumoto, Mater. Trans., 42 (2001) 1172.
 [2] E. Abe, A. Ono, T. Itoi, M. Yamasaki, Y. Kawamura: Philosophical Magazine Letters, 91, (2011) 690.
 [3] D. Egusa, E. Abe, Acta Mater., 60(2012), 166.
 [4] H. Yokobayashi, K. Kishida, H. Inui, M. Yamasaki, Y. Kawamura, 59(2011), 7287.
 [5] Y. Yamamoto, Y. akamoto, Y. Masaki and S. R. Nishitani, Mater. Trans. 54, (2013), 656.
 [6] S. Iikubo, K. Matsuda, and H. Ohtani, Phys. Rev. B 86, 054105(2012).