



# 第一原理計算でひも解く合金が示す長周期積層欠陥構造の形成メカニズム

## 研究計画の背景

### 力学特性と塑性変形機構

#### Shockley部分転移-積層欠陥ユニット

変形誘起  $\gamma \rightarrow \epsilon$  変態    変形双晶    拡張転移すべり



高Mn鋼 (FeMn合金)

高層ビルのダンパー材



自動車用薄板



Shockley部分転位

高強度マグネシウム合金



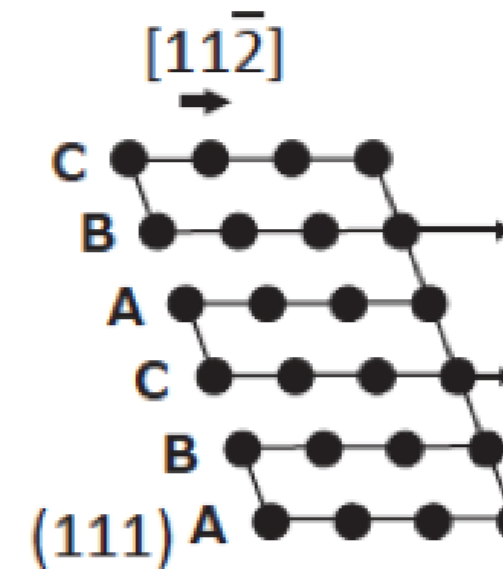
✓ 実用金属の中で最軽量

✓ 資源が豊富で安価

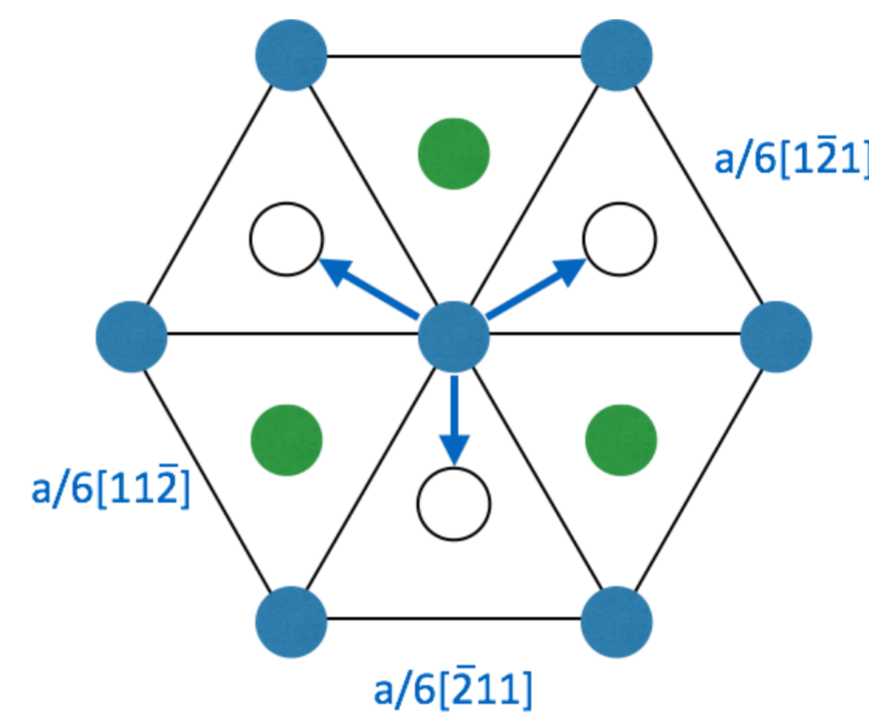
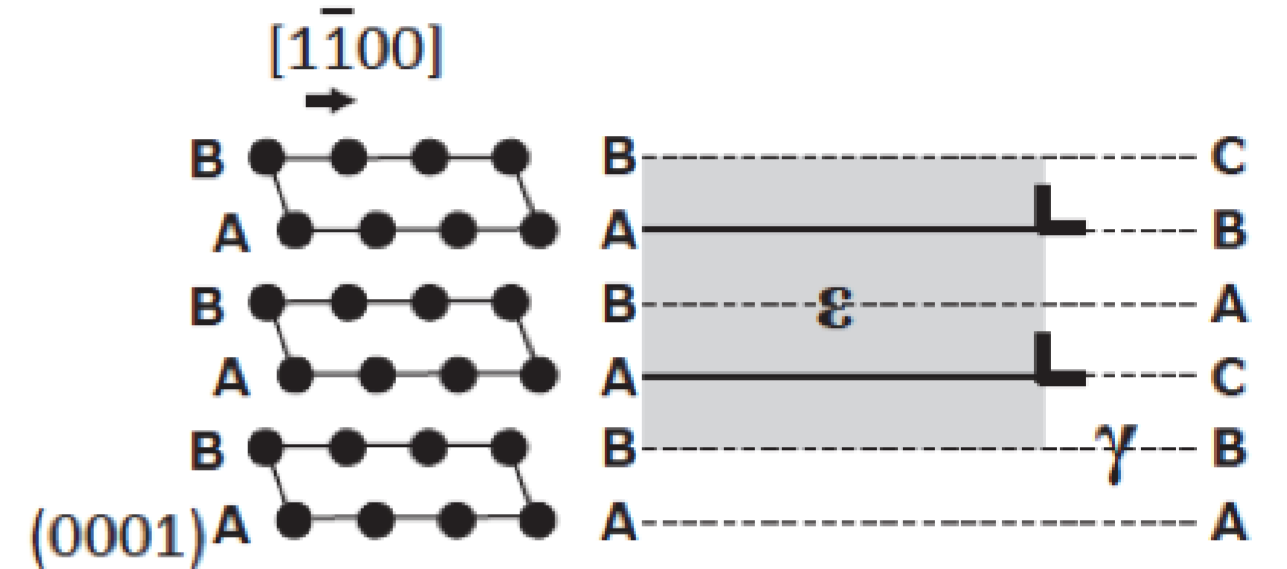
輸送機器の軽量化へ

### Shockleyの部分転位

fcc (111)



hcp (0001)

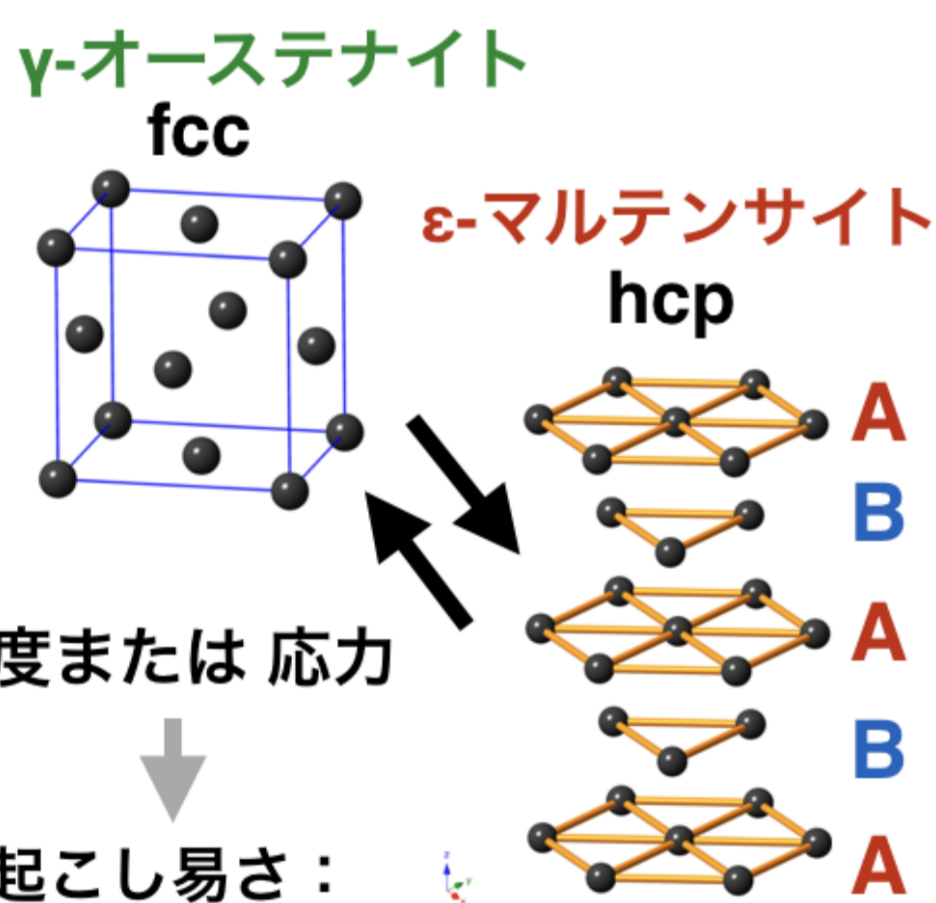


J. Bardeen, W. Shockley, and W. Brattain

## 実用材料における長周期積層構造 (Long Period Stacking Order: LPSO)の発見

### 鉄鋼材料 (Fe系形状記憶合金)

#### 応力誘起 $\gamma$ - $\epsilon$ 変態



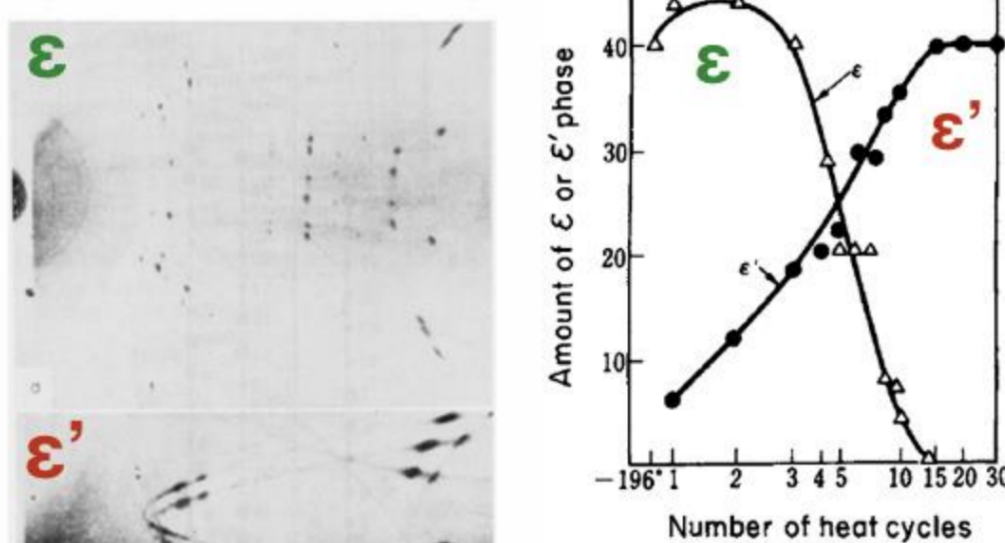
温度または 応力

起こし易さ: 2相間の相安定性

部分転位の反復運動の可逆性 => 疲労亀裂の進展を抑制

Fe-12%Mn-0.5%C (wt%)

Lysak and Nikolin (1963)



熱サイクル後 400°C ⇌ -196°C

"ε'相"

写真12 12%Mn-0.5%C 鋼の実験初期の回転結晶 X線回折

(a) 高温より室温まで冷却 (γ)

(b) それを液体窒素に冷却したもの (γ+ε')

(Lysak and Nikolin<sup>10</sup>)

- ε' 相の積層パターンは不明
- γ, ε相との相安定性も不明

目的: 第一原理計算手法により、部分転位を有する構造の相安定性を調べ、ε' 相の積層パターンおよび、γ, ε相との相安定性を解明。

- 構造安定性と電子状態
- 反強磁性スピン秩序の安定性 (ノンコリニア磁性を含む)

#### 計算手法

全電子FLAPW(Full-potential Linearized Augmented Plane Wave)法に基づく第一原理計算

E. Wimmer, H. Krakauer, M. Weinert, A. Freeman, Phys. Rev. B (1981)

スピン依存の密度汎関数理論: 一般化密度勾配近似(GGA-PBE)

$$E_{XC}^{GGA}[n^{\uparrow}, n^{\downarrow}] = \int d^3r n(\mathbf{r}) \epsilon_{xc}(n^{\uparrow}(\mathbf{r}), n^{\downarrow}(\mathbf{r}), |\nabla n^{\uparrow}|, |\nabla n^{\downarrow}|, \dots)$$

### LPSO構造を有する高強度マグネシウム合金

#### Mg-遷移金属(TM)-希土類(RE)系

TM = Co, Ni, Cu, Zn

RE = Y, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm

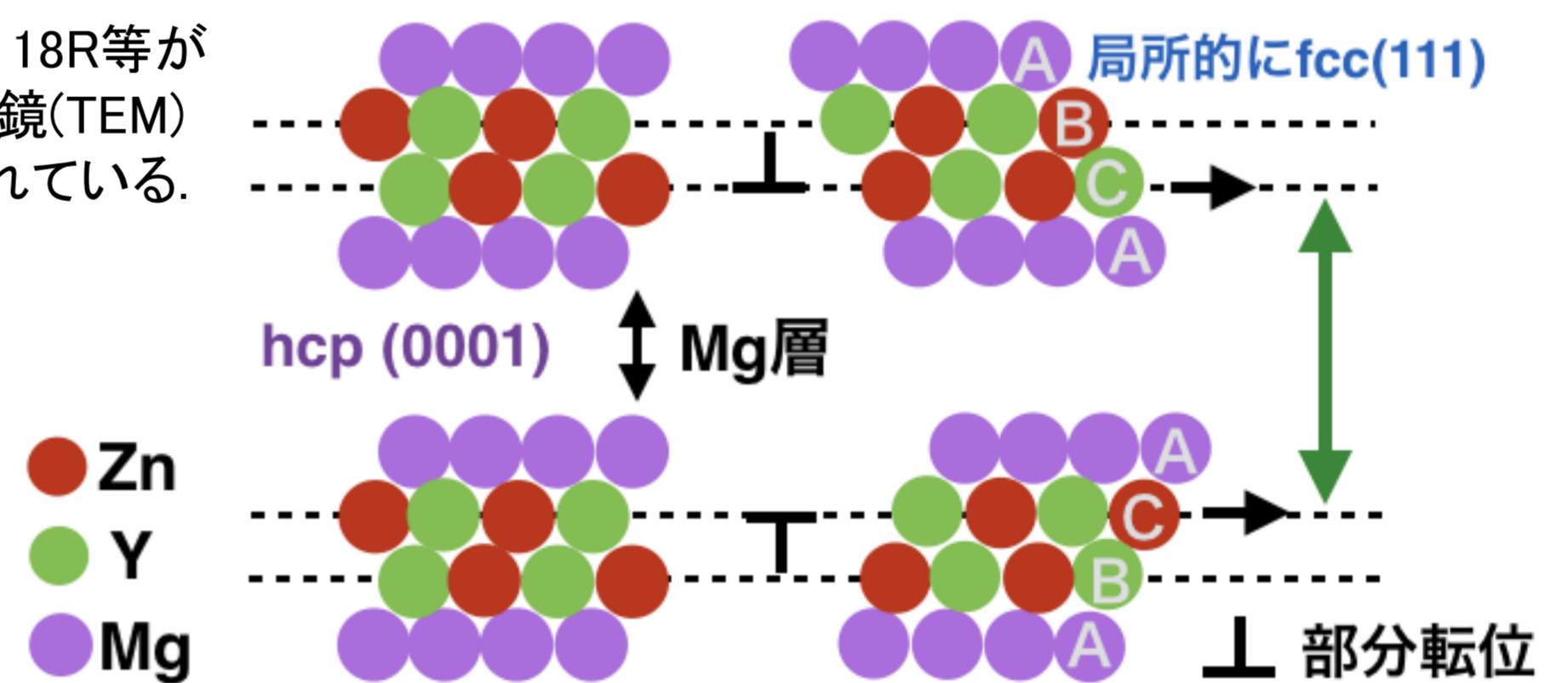
Kawamura et. al. (2001)

熊本大学で初めて開発



=> LPSO構造を形成

10H, 14H, 18R等が電子顕微鏡(TEM)で観測されている。



化学的な秩序 + 積層の秩序

目的: 長距離積層欠陥秩序構造の形成メカニズムの解明 Mg-Y-Zn合金におけるY, Znの役割を電子論的な立場から解明する

- Y, Zn, Y-Zn層間距離に最安定な点はあるのか?
- 積層欠陥を導入した場合に自由エネルギーは安定化するのか?
  - > 自由エネルギーを第一原理計算により評価
  - 安定化するメカニズムをフォノン分散から検討

#### 計算手法

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S$$

- ウルトラソフト擬ポテンシャル法に基づく第一原理計算
- 相対論的效果であるスピン軌道相互作用を考慮した計算
- 有限温度での相安定性、フォノン分散、弾性特性を評価する実空間での力定数: フローズンフォノン(直接)法