平成 27 年度　　京都大学化学研究所 スーパーコンピュータシステム 利用報告書

マグネシウム合金における第一原理計算
The first principles calculations of magnesium alloys

京都大学大学院エネルギー科学研究科 エネルギー応用科学専攻 馬渕 守

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、室温成形性の優れたマグネシウム（Mg）合金開発を目的に、微量添加元素が Mg 合金の室温成形性に及ぼす影響を第一原理計算（ソフトウェア：Materials Studio CASTEP）を用いて考察した。

Mg はその hcp 構造に起因する異方性が変形のすべり系を制限し、加工性が悪いという欠点がある。すなわち、底面すべりでの変形が起こりやすい一方、柱面すべりでの変形が起こりにくく、その不均一変形のため加工の際に破断に至ってしまう。そこで、第一原理計算を用いて底面すべりと柱面すべりの Generalized Stacking Fault Energy（GSFE：すべりの起こりやすさの指標）を算出し、微量添加元素がすべりの異方性に与える影響を評価した。具体的には、Mg-Zn 合金に微量元素として Ca, Sr, Ba を添加した Mg-Zn-Ca, Mg-Zn-Sr, Mg-Zn-Ba の 3 種類の合金モデルを作成し、それぞれのモデルの底面すべり、柱面すべりの GSFE を算出した。

その結果、底面・柱面すべりの GSFE は共に、Mg-Zn-Ca > Mg-Zn-Sr > Mg-Zn-Ba の順に小さくなり、添加元素の原子番号が大きいほど、GSFE が低下することがわかった。また、すべりの異方性評価のため、底面すべりの GSFE の最大値を、柱面すべりの GSFE の最大値で除したものを「異方性の指標（値が大きいほど異方性が緩和されたことを意味）」として算出した結果、すべりの異方性は、Mg-Zn-Ca > Mg-Zn-Sr > Mg-Zn-Ba の順に小さくなり、Mg-Zn-Ca が最も異方性が緩和されるという結果となった。この原因を調べるため、電子密度分布を算出した結果、Ca, Sr, Ba は柱面すべりにおけるすべり面の電子密度を同程度に大きく低下させる一方で、底面すべりにおいては、すべり面における電子密度の低下量が元素により大きく異なることが示唆された。すなわち、Ca は底面すべりにおける電子密度をあまり低下させないため、相対的に底面すべりが起こりにくくなり、異方性が緩和されるが、Ba は柱面すべりだけではなく底面すべりにおける電子密度を大きく低下させるため、底面すべりが非常にすべりやすくなり異方性の緩和量は小さくなることが示唆された。また、実際に、Mg-Zn-Ca, Mg-Zn-Sr, Mg-Zn-Ba 合金板材作製し、室温成形性を評価した結果、室温成形性は Mg-Zn-Ca > Mg-Zn-Sr > Mg-Zn-Ba の順となり、本計算の結果は実験を再現することを確認した。

発表論文（謝辞あり）
なし

発表論文（謝辞なし）
なし