

関西学院大・理工

西谷滋人, 清原資之, 森下慎也

First principle calculations of $L1_2$ Cluster in Mg-Zn-Y alloy

Department of Informatics, Kwansei Gakuin Univ,

S. R. Nishitani, M. Kiyohara, and S. Morishita

背景 LPSO 構造の生成機構について、我々は「積層欠陥部に $L1_2$ クラスターが形成され、そこから排斥された Zn, Y が、新たな $L1_2$ クラスターを形成する」というシナリオを立てた [1]。従来の研究では、 $L1_2$ クラスターから 1 層ずつ離れた位置に孤立した溶質原子、あるいは Zn-Y ペアを挿入して第一原理計算をおこない、系全体のエネルギーを比較した。系全体のエネルギーは溶質原子と $L1_2$ クラスターとの距離が遠いほど単調に減少した。しかし、それは中周期的に溶質原子が濃化するという予想に反する結果であった。本研究では、これまで考慮してきたより大きなサイズの溶質原子のクラスター集団を仮定して同様の検討をおこなった。

手法 清原らは、 $L1_2$ クラスターを hcp 構造に強引に導入すると、2 つに分裂した small cluster が生成されることを予測している [2]。このサイズは実験的には奥田らによって報告されている [3]。この small cluster を slab モデルに挿入して、VASP を持ちて第一原理計算を行い、構造緩和したエネルギーを求めた。

結果 まず、 $L1_2$ クラスターがどのように分離した時に最も安定な構造をとるかを、small cluster の生成エネルギーを比較することで確かめた。幾何学的な可能性として考えやすい上下および左右に分割した。その結果、上下に分割した際の small cluster の生成エネルギーが低く、安定構造となった。上下に分割した small cluster を、積層欠陥にある $L1_2$ クラスターから離れた位置へ図 1 に示したように挿入した。第一原理計算によって得られた系全体のエネルギーを図 2 に示した。4 層離れた位置での計算についてはエネルギー値が収束していないが、他の層の計算結果から距離が離れるに連れ単調減少を示すだけでなく、僅かではあるが中距離に安定位置がある傾向を示している。

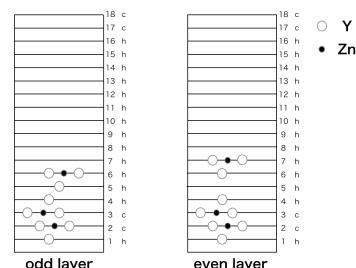


図 1: 今回使用した計算モデルの模式図。

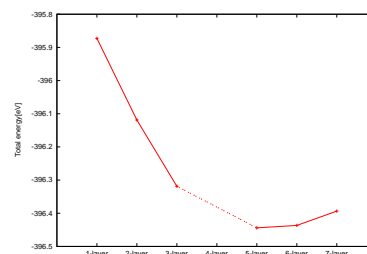


図 2: $L1_2$ クラスターと small cluster の距離によるエネルギー変化。

- [1] Y. Sakamoto, C. Shirayama, Y. Yamamoto, R. Kubo, M. Kiyohara, and S. R. Nishitani: Mater. Trans., 56(2015), 933.
- [2] M. Kiyohara, Y. Sakamoto, T. Yoshioka, S. Morishita, and S. R. Nishitani: proceedings of PRICM, (Kyoto 2016), to be published.
- [3] H. Okuda, M. Yamasaki, Y. Kawamura, M. Tabuchi, H. Kimizuka: Scientific Reports 5 (2015), 14186.