

関西学院大・理工

西谷滋人, 清原資之, 森下慎也

First principle calculations of L_{12} Cluster in Mg-Zn-Y alloy

Department of Informatics, Kwansei Gakuin Univ,

S. R. Nishitani, M. Kiyohara, 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 L_{12} 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 L_{12} 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, L_{12} クラスターから 1 層ずつ離れたそれぞれの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の違いを比較した. 系全体のエネルギーは溶質原子と L_{12} 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サイズより大きな溶質原子の集団を挿入することで再度検証をおこなった.

手法 坂本が hcp 構造に L_{12} クラスターを導入した際に, VASP による構造緩和から予測された L_{12} クラスターが 2 つに分離した small_cluster に着目した [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クラスターサイズに近い [3].

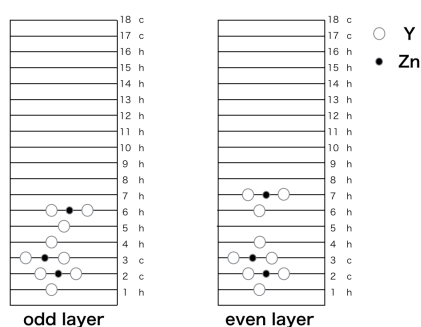


図 1: 今回使用した計算モデルの模式図.

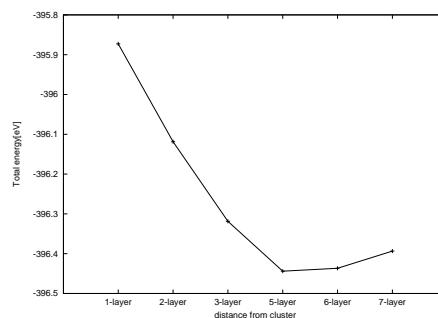


図 2: L_{12} クラスターから 1 層ずつ離れた層に溶質原子を挿入したモデルに対して第一原理計算をおこなった結果.

結果 まず, L_{12} 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際の small_cluster の生成エネルギーを比較した. その結果, 上下に分割した際の small_cluster の生成エネルギーの方が低く安定構造をとっているという結果が得られた. 上下に分割した small_cluster を積層欠陥にある L_{12} 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の値が収束せず得る事ができなかったが, 他の層の計算結果から距離が離れる毎に単調減少を示すことが推測できた.

[1] Y. Sakamoto, C. Shirayama, Y. Yamamoto, R. Kubo, M. Kiyohara, and S. R. Nishitani: Mater. Trans., 56(2015), 933.->should be PRICM

[2] should be PRICM

[3] H. Okuda, M. Yamasaki, Y. Kawamura, M. Tabuchi, H. Kimizuka: Scientific Reports 5 (2015), 14186.