

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 構造の生成機構を解明するため、我々は「積層欠陥欠陥部に L_{12} クラスターが形成され、そこから Zn, Y が排斥され、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、第一原理計算による検証をおこなってきた [?][?]。従来の研究では、 L_{12} クラスターと溶質原子との相互作用を検証するために 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。

目的 孤立原子や Zn, Y ペアを挿入した計算ではエネルギーの値は溶質原子と L_{12} クラスターとの距離が遠いほどに単調減少を示した。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した結果であった。本研究では、これまで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 実験的には奥田らによって報告され、坂本が hcp 構造に L_{12} クラスターを導入し、VASP による構造緩和をおこなった事により予測された L_{12} クラスターが 2 つに分離する事で形成される small_cluster に着目し、small_cluster を挿入したモデルに対して、VASP による第一原理計算をおこなった [?]。

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。上下に分割した際の small_cluster と左右に分割した際の small_cluster の生成エネルギーを比較した結果、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。上下に分割した際の small_cluster を挿入したモデルの第一原理計算の結果は、6 層離れた位置までは単調減少を示し、7 層離れた位置でエネルギーが増加し始めるという結果が得られた。

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

[2] Y. Yamamoto, Y. Sakamoto, Y. Masaki and S. R. Nishitani: Mater. Trans., 54(2013), 656.

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