

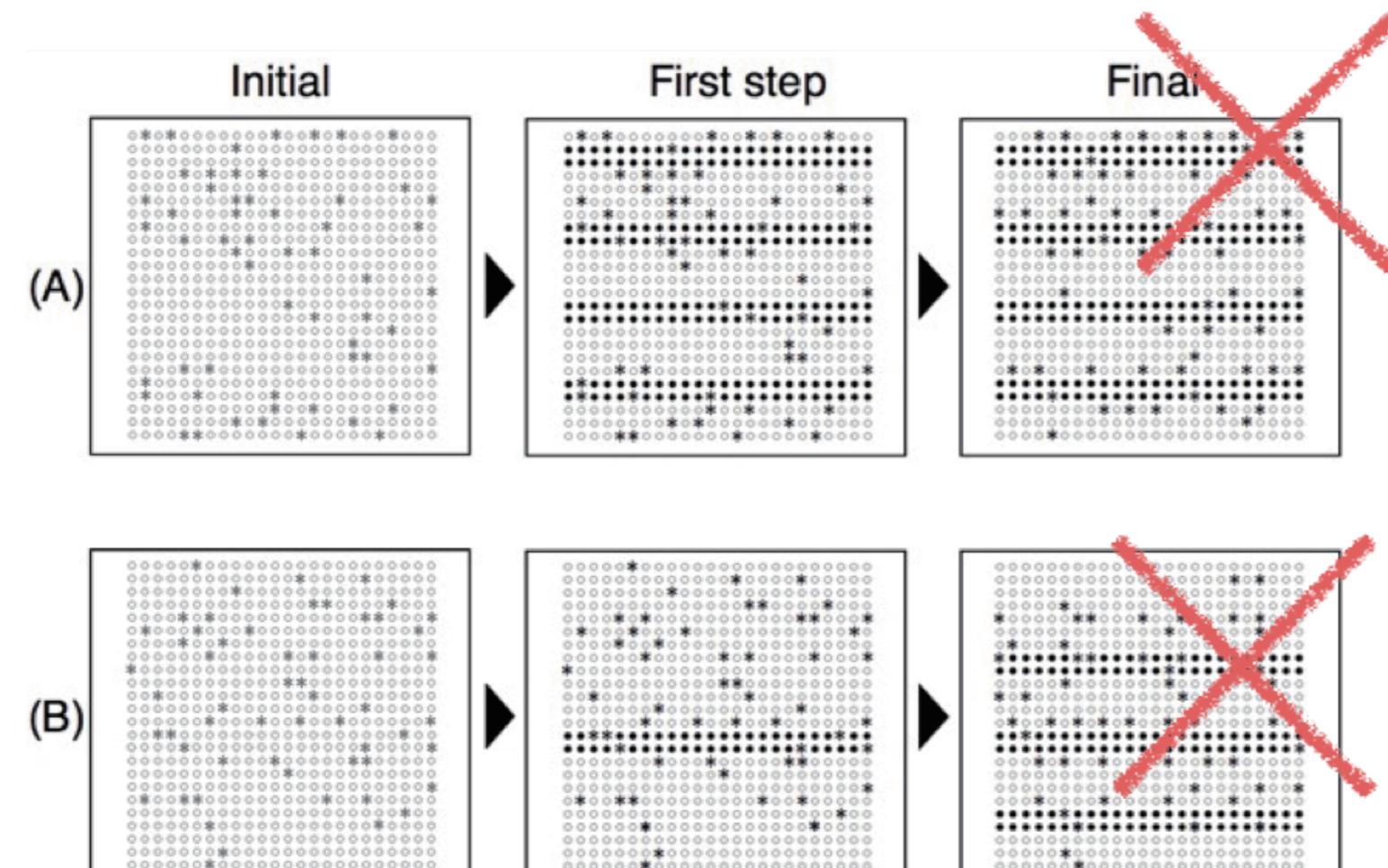
# Mg-LPSOのL1<sub>2</sub>クラスターの第一原理計算

西谷滋人, 清原資之, 森下慎也  
関学大・理工.

日本物理学会2016年秋季大会(金沢大学), 16/9/13--9/16



## LPSO構造生成シナリオ



## LPSO構造の生成シナリオ

- 積層欠陥先行型
  - hcp構造のMgにおいて、周期的に積層欠陥が導入される。
  - 積層欠陥に溶質原子が捕まる。
- 溶質原子先行型
  - 積層欠陥が溶質原子を捕まえる。
  - 積層欠陥から4層ほど離れた位置で溶質原子が濃化する。
  - 濃化した溶質原子が新たな積層欠陥を誘起する。

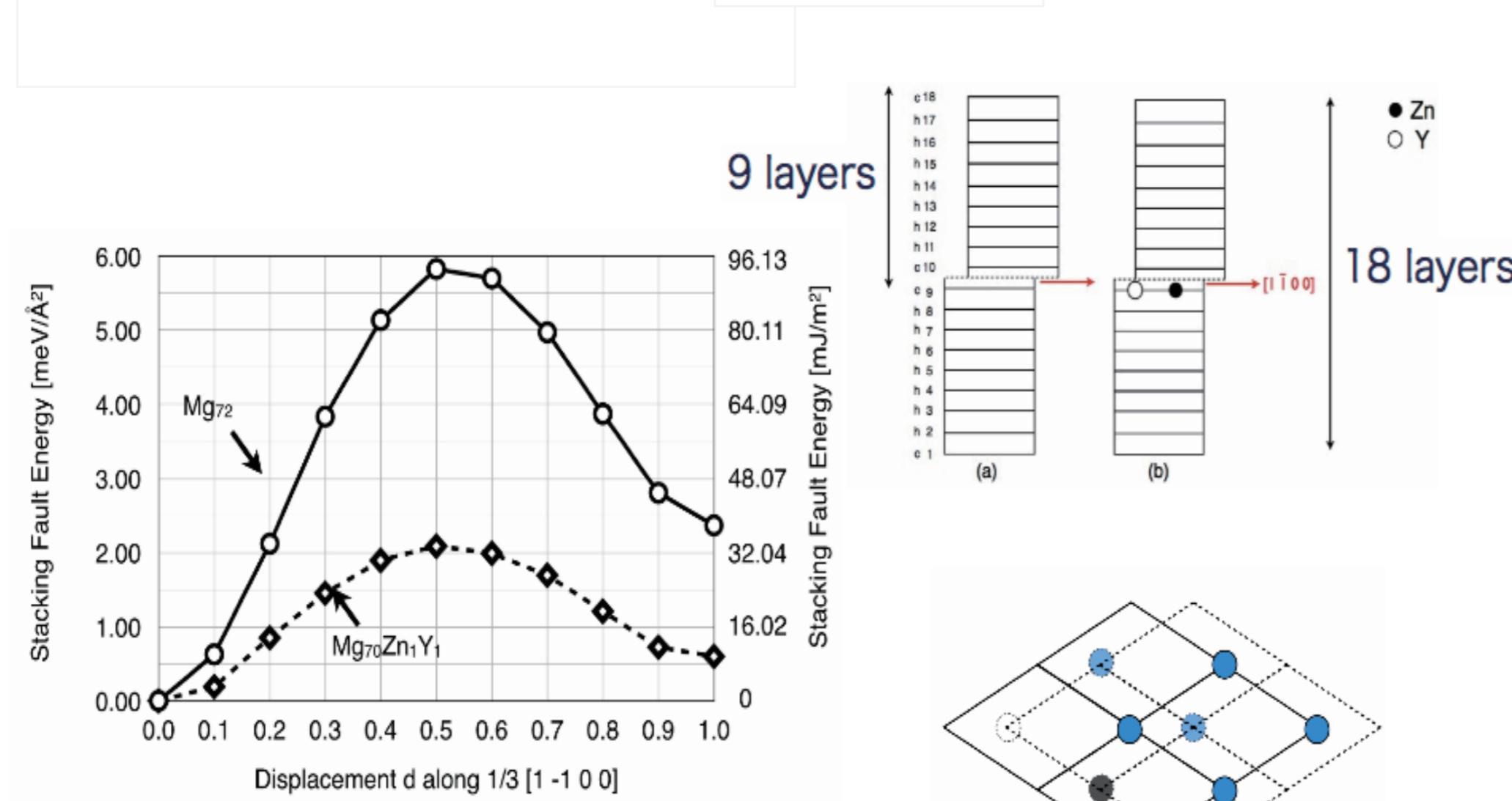
## VASPを用いた第一原理計算による検証

- 積層欠陥先行型
  - Mg結晶内の積層欠陥が安定するか?
  - 溶質原子は積層欠陥中で安定するか?
- 溶質原子先行型
  - 実際に積層欠陥が溶質原子を捕まえるか?
  - 溶質原子が積層欠陥から中距離離れた位置で安定するか?
- 本当に濃化した溶質原子が新たな積層欠陥を誘起するのか?

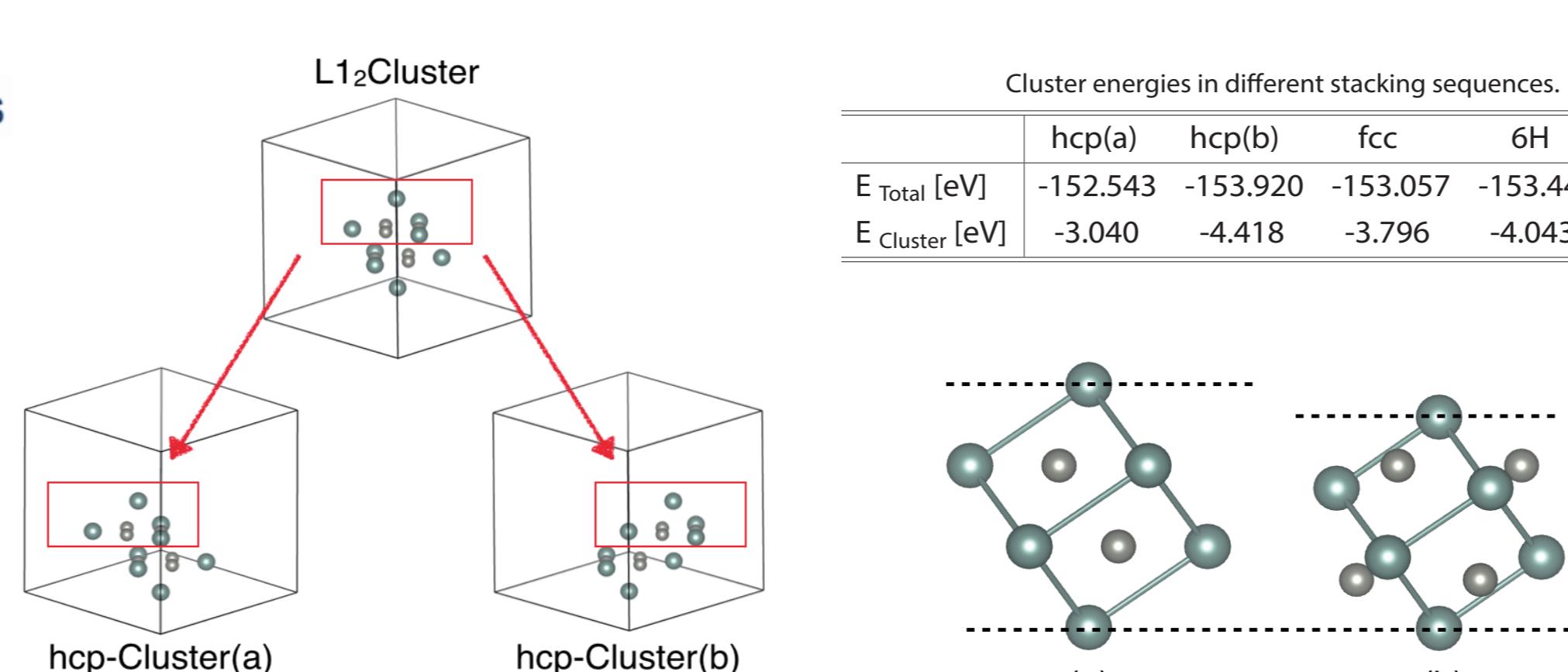
## クラスターについての検証

- hcp構造及びfcc構造の
- 積層欠陥をもつMg結晶中のクラスターの安定性。
- 積層欠陥中のクラスターについて。
- クラスター同士の相互作用。
- クラスターと溶質原子間の相互作用。

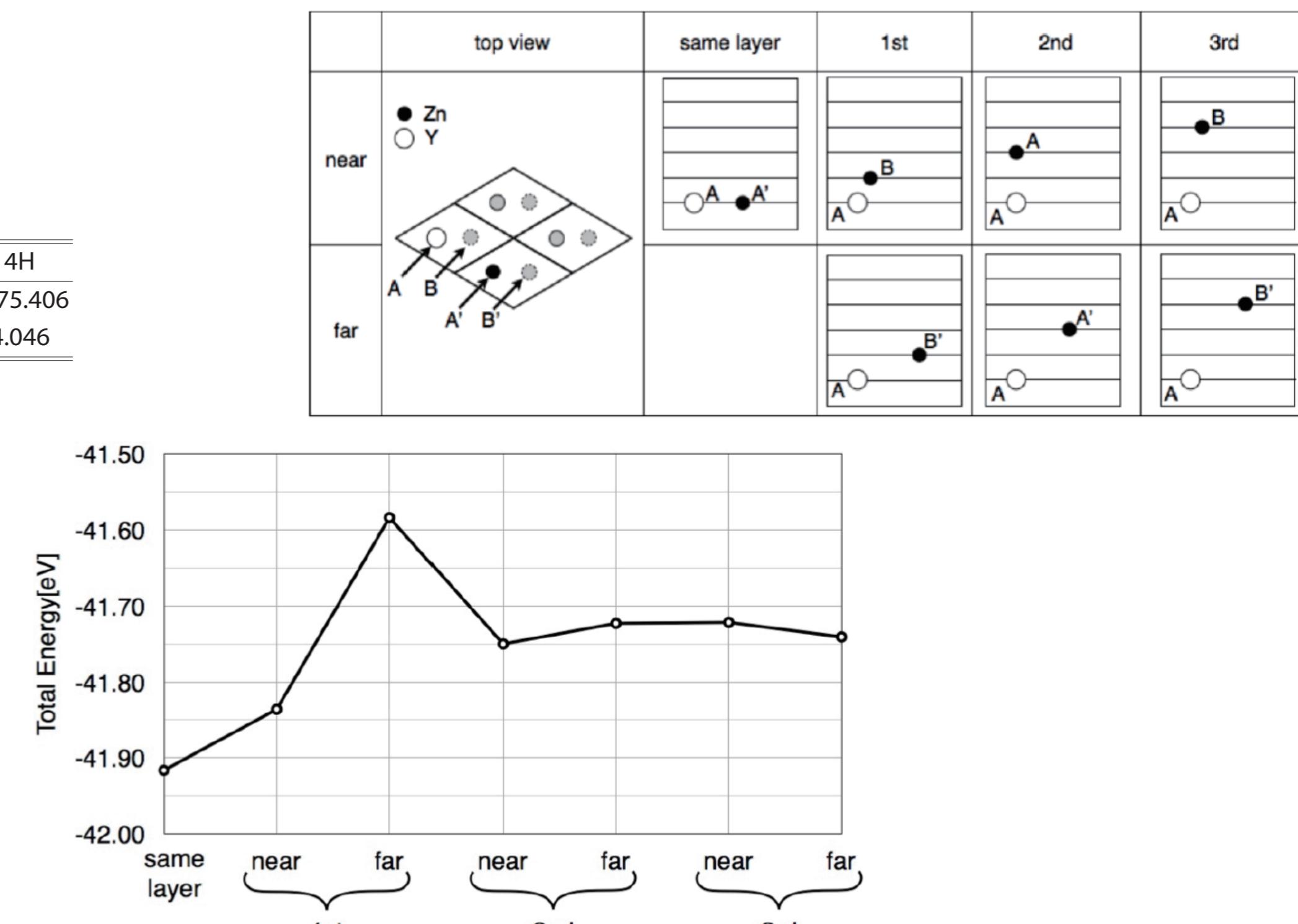
## 溶質原子による積層欠陥の誘起



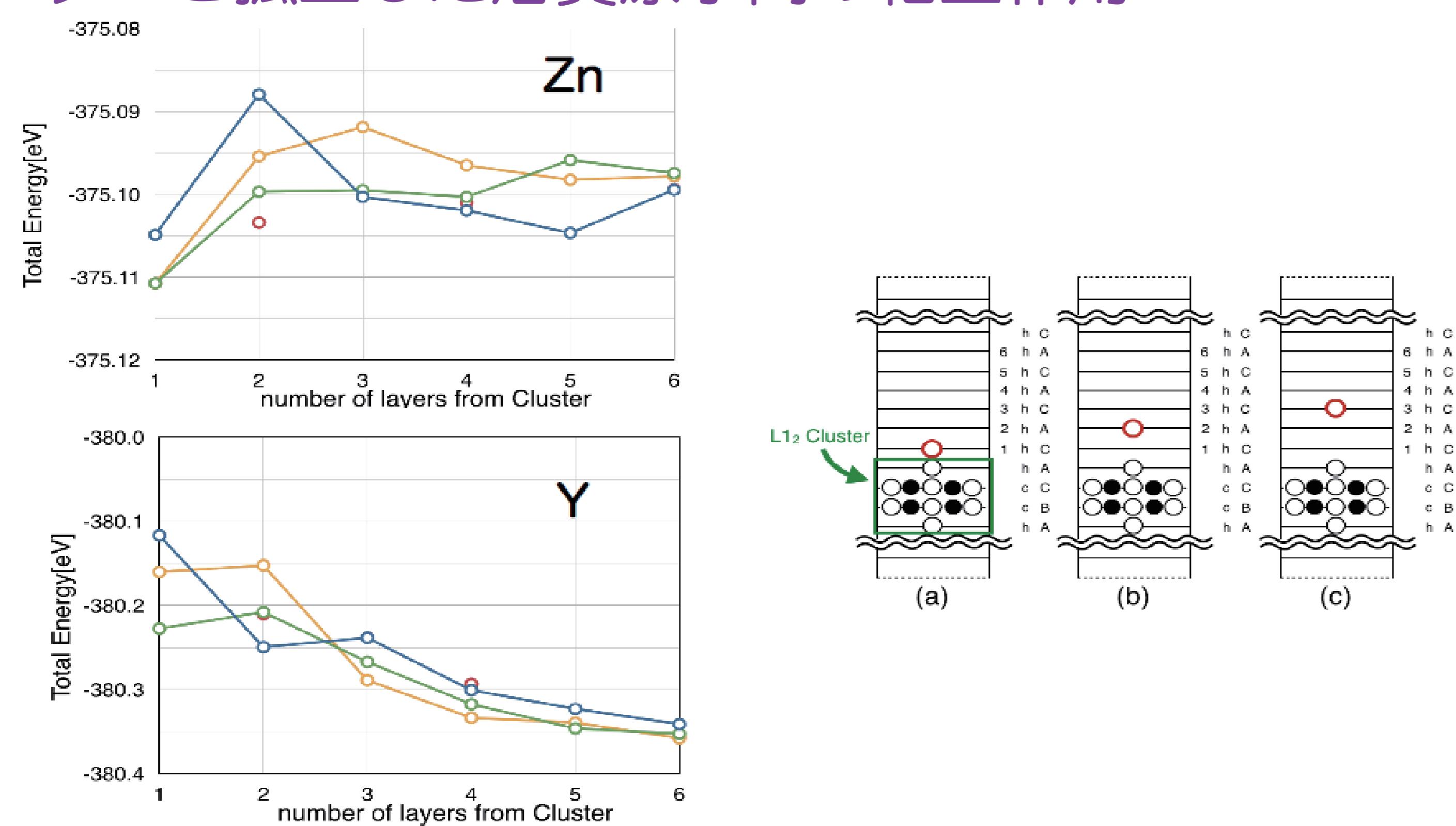
## クラスターの安定性



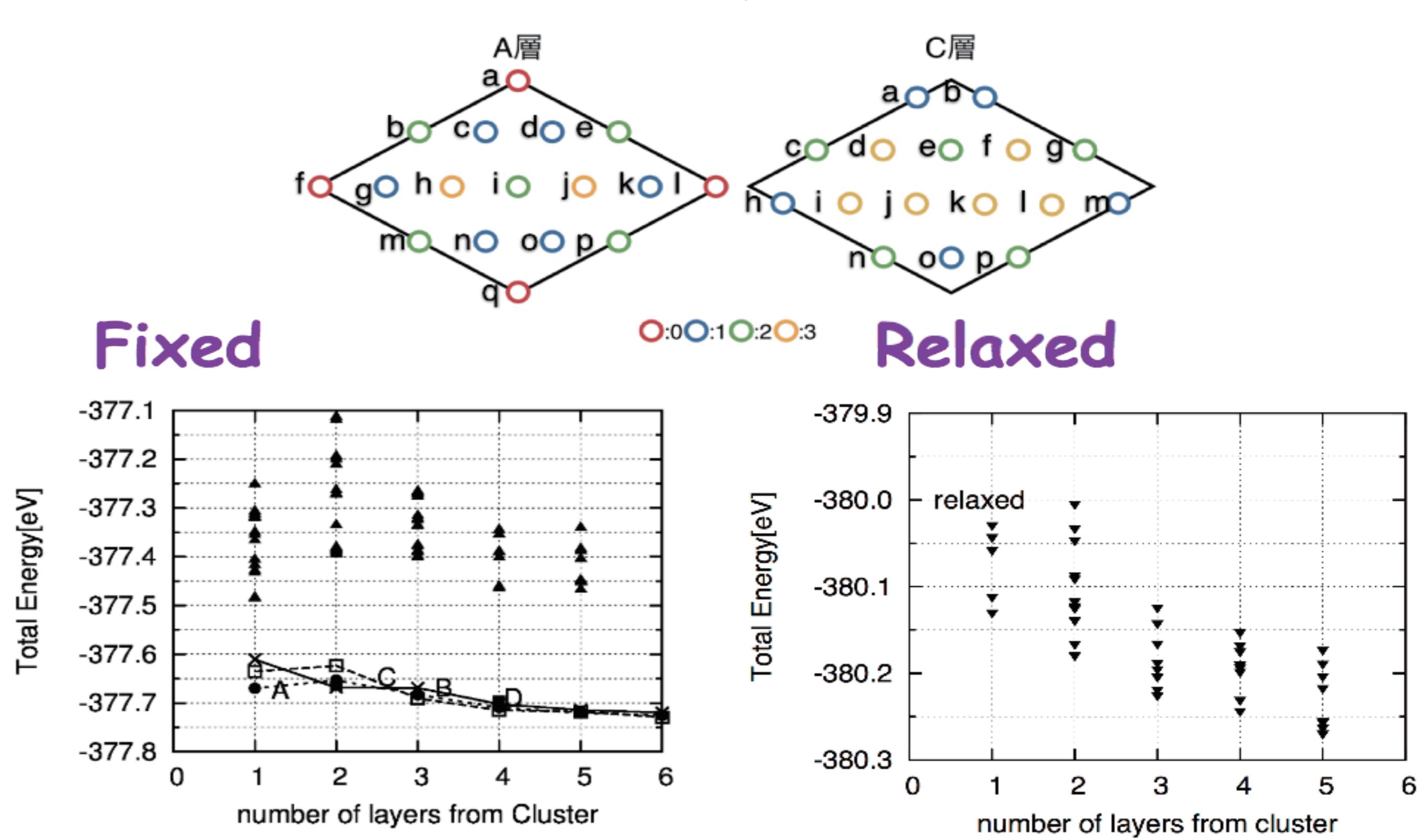
## 溶質原子同士の相互作用



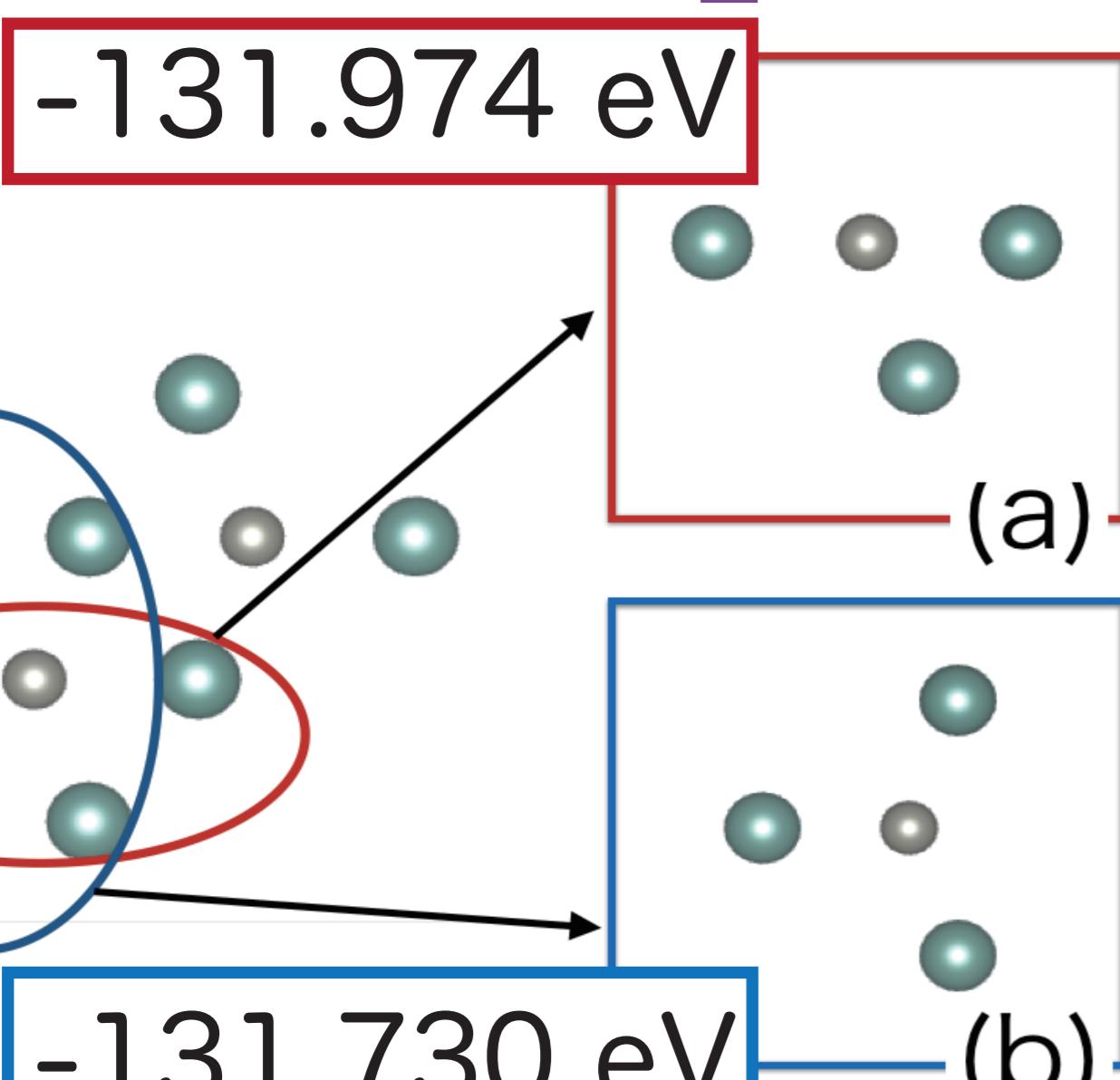
## クラスターと孤立した溶質原子間の相互作用



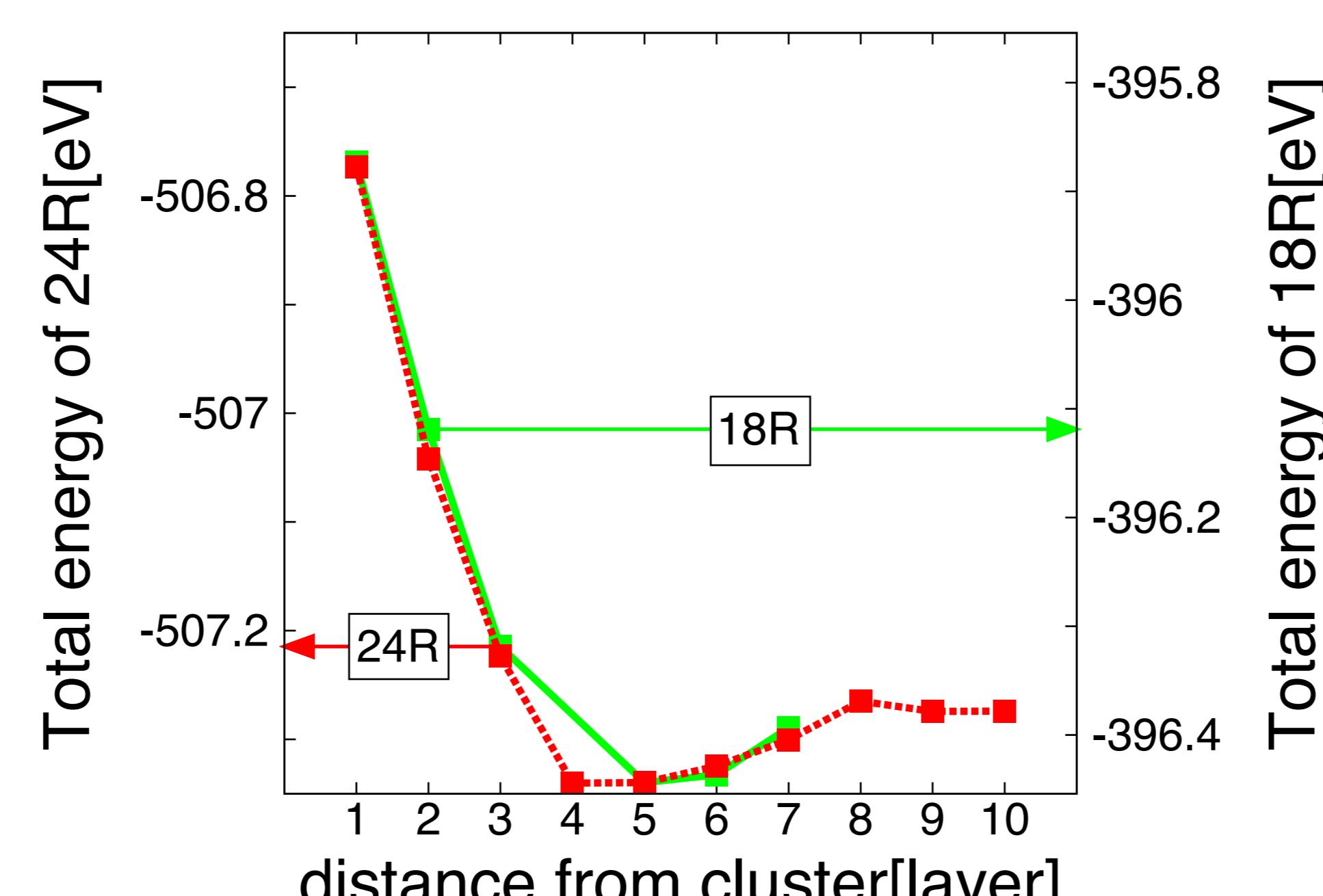
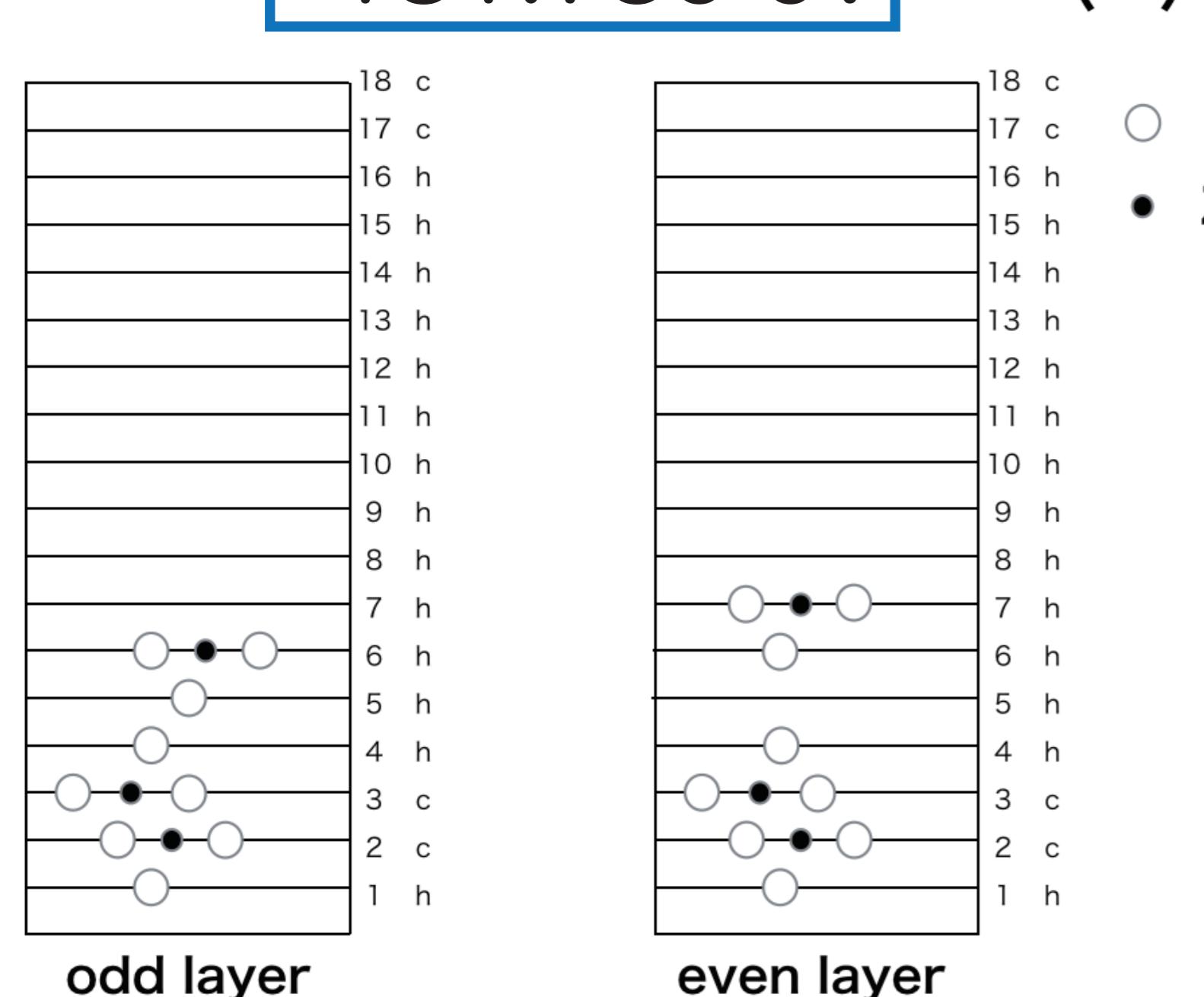
## クラスターとZn-Yペア間の相互作用



## クラスターとSmall\_Cluster間の相互作用



クラスターの分割について、左図の(a), (b)のように、縦方向と横方向に分割したそれぞれの集団を6R構造に導入したモデルについて検証した。系全体のエネルギーを第一原理計算により求めた結果、(a)のモデルが安定という結果が得られた。(a)を本研究では Small\_Cluster とした。



## 修正後のシナリオ

1. Zn-Yペアが積層欠陥が導入されている同層に捕まる。
2. 濃化した溶質原子が積層欠陥を誘起する。
3. 積層欠陥が溶質原子を捕まえる。
4. 積層欠陥ができた層でクラスターが形成される。
5. ZnとYの両原子が共に積層欠陥から掃き出される。
6. 4層程度離れた位置で溶質原子が濃化する。
7. 2-6の行程を繰り返す。

