

Mg-LPSO における $L1_2$ クラスタとスモールクラスタの相互作用

関西学院大 理工

森下 慎也, 西谷 滋人

Interaction between $L1_2$ cluster and small cluster in Mg-LPSO

Kwansei Gakuin Univ., Informatics.

Shigeto R. Nishitani, Shinya Morishita

背景 我々は Mg-LPSO 合金における LPSO 構造の生成機構について、「積層欠陥部に $L1_2$ クラスタが形成され、そこから排斥された Zn, Y が濃化して新たな積層欠陥を誘発する」という仮説を立てていた [1]。これまでの研究では、 $L1_2$ クラスタと溶質原子単体、あるいはペアとの相互作用を調べるために、 $L1_2$ クラスタから一層ずつ離れた位置に溶質原子を挿入したモデルのエネルギーを第一原理計算により求めていた。その計算結果は溶質原子が $L1_2$ クラスタから離れれば離れるほど安定するという結果となった。しかし、その結果は溶質原子が $L1_2$ クラスタから中距離で濃化するという予想に反するものであった。そこで、本研究ではより大きな溶質原子のクラスタ集合を仮定し、エネルギーの比較により $L1_2$ クラスタとの相互作用を求めた。

手法 清原らは hcp 構造に $L1_2$ クラスタを導入すると、構造緩和により上下分割されスモールクラスタが生成されると報告していた [2]。このスモールクラスタに着目し、図 1 に示すスラブモデルに挿入し系全体のエネルギーを求めた。図 1 において同じ色のスモールクラスタの配置は $L1_2$ クラスタとの近接距離が等しくなっている。それぞれの近接距離へスモールクラスタを配置したモデルについて第一原理計算をおこなった。

結果 図 2 に $L1_2$ クラスタとスモールクラスタ間の垂直距離による系全体のエネルギーの変化を示す。エネルギー値は 4-5 層離れた位置で最低値となり、6 層以上の距離で単調増加を示す事はなく、僅かではあるが中距離で溶質原子が安定する傾向を示している。エネルギー的観点から得られた中距離での安定性を認める上で、スモールクラスタの拡散機構について議論をおこなう必要がある。そこで、我々は単空孔、あるいは複空孔を利用した空孔拡散に着目し、スモールクラスタ周辺での空孔の安定性について計算をおこなう。

参考文献

- [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.

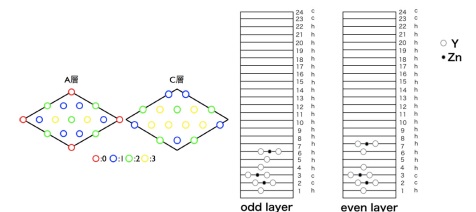


図 1 A 層と C 層における近接距離を表した図と今回使用したスラブモデルの模式図。

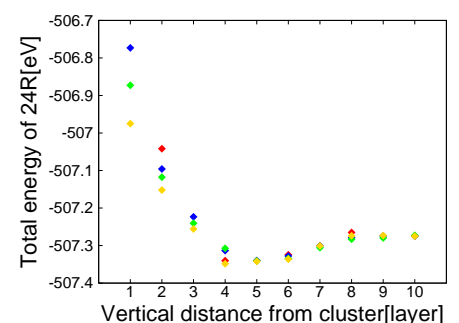


図 2 $L1_2$ クラスタと small cluster の距離によるエネルギー変化。グラフの点の色は図 1 で示した近接距離の色に対応している。