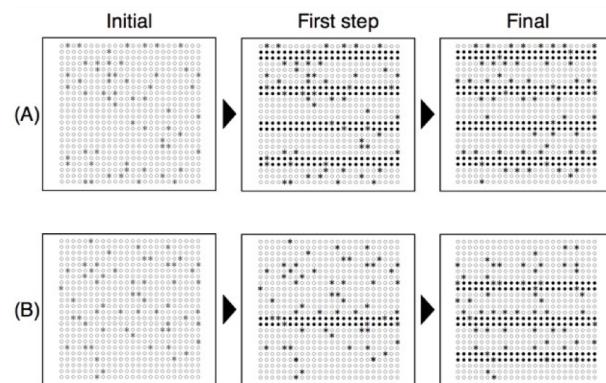


LPSO formation mechanism based on the middle range ordering of small clusters

- Two scenarios (2012)
 - Stacking Fault initiates
 - Solute Ordering initiates
- cluster-solute atom interaction
 - monotonous decrease
- nanoclusters first (Okuda et al.)
 - middle range ordering
- cluster diffusion?

生成シナリオのポンチ絵



LPSO from scenarios

- Stacking Fault initiates
 - Stacking Faults are introduced periodically in hcp-Mg.
 - Solute atoms are trapped there.
- Solute Ordering initiates
 - A SF traps the solute atoms.
 - Solute atoms are condensed at 4-6 layers off from the SF.
 - Condensed solute atoms initiate the SF?

First principles calcs.

- Stacking Fault initiates
 - Periodic SF??
 - Solute atoms are stable in SF??
- Solute Ordering initiates
 - Does SF trap the solute atoms??
 - Do solute atoms show middle range ordering?
 - Condensed solute atoms initiate the SF??

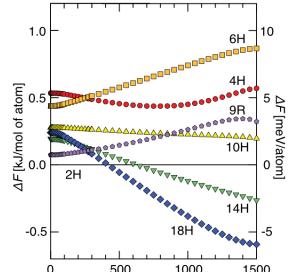
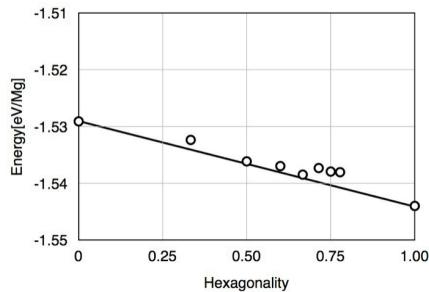
LPSO生成のシナリオ

- 積層欠陥律速：
 - hcp-Mg中に積層欠陥が中周期的に導入
 - 積層欠陥部に溶質原子が捕まる
- 溶質原子律速：
 - Mg中のある1つの積層欠陥に拡散した溶質原子が捕まる。
 - 捕まった溶質原子から4層ほど離れた層に溶質原子が集まる。
 - 集まった溶質原子が積層欠陥の導入を誘導する。

第一原理計算による検証

- 積層欠陥律速：
 - Mg合金内において最初に周期的に積層欠陥が発生するか？
 - 溶質原子が積層欠陥に集まるか？
- 溶質原子律速：
 - 積層欠陥に溶質原子であるZn, Yが捕まるか？
 - 溶質原子が捕まつた積層欠陥から4層ほど離れた層に溶質原子が濃化（中距離ordering）するか？
 - 集まつた溶質原子が積層欠陥の導入を誘導するか？

周期的な積層欠陥？

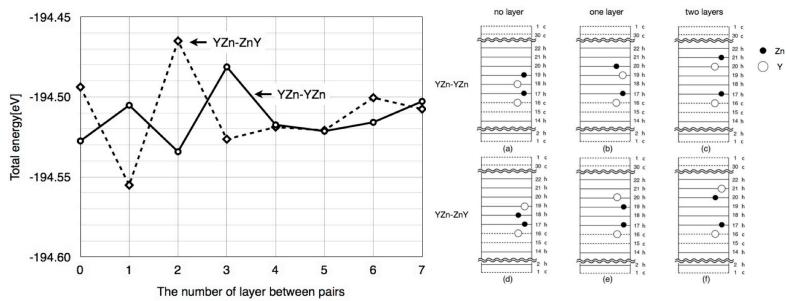


phonon計算による
有限温度の安定性

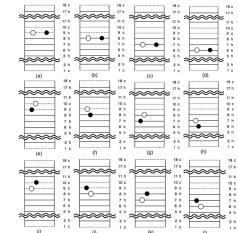
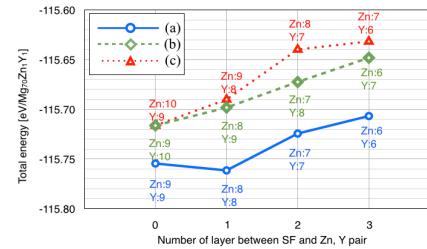
S. Ilikubo, K. Matsuda and H Ohtani: Phys. Rev. B, 86, 054105(2012).



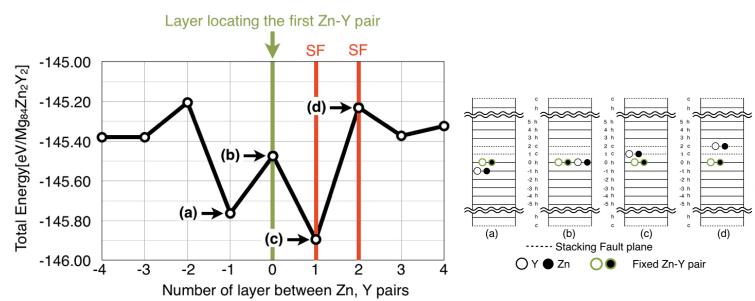
溶質原子の中距離ordering[I]



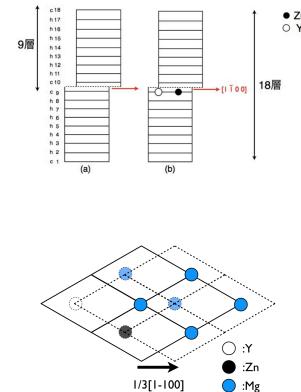
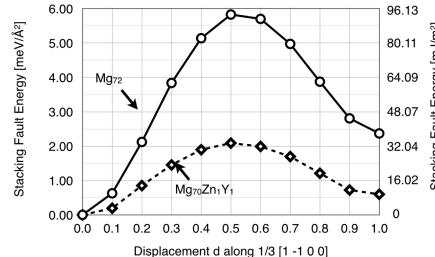
溶質原子が積層欠陥に集まるか



溶質原子の中距離ordering[II]



集まった溶質原子が積層欠陥の誘因となるか？



LPSO生成のシナリオ

- 積層欠陥律速：
■ hcp-Mg中に積層欠陥が中周期的に導入
■ 積層欠陥部に溶質原子が捕まる
- 溶質原子律速：
■ Mg中のある1つの積層欠陥に拡散した溶質原子が捕まる。
■ 捕まつた溶質原子から4層ほど離れた層に溶質原子が集まる。
■ 集まつた溶質原子が積層欠陥の導入を誘導する。

クラスター？

- hcp, fcc, 積層欠陥でのクラスターの安定性
- クラスター同士の相互作用
- クラスターの積層欠陥
- クラスターと溶質原子
- 溶質原子が積層欠陥に集まるか？



LPSO生成のシナリオ

第一原理計算による検証

■ 積層欠陥律速：

hcp-Mg中に積層欠陥が中周期的に導入

■ 積層欠陥部に溶質原子が捕まる

■ 溶質原子律速：

Mg中のある1つの積層欠陥に拡散した溶質原子が捕まる。

■ 捕まつた溶質原子から4層ほど離れた層に溶質原子が集まる。

■ 集まつた溶質原子が積層欠陥の導入を誘導する。

■ 積層欠陥律速：

Mg合金内において最初に周期的に積層欠陥が発生するか？

溶質原子が積層欠陥に集まるか？

■ 溶質原子律速：

積層欠陥に溶質原子であるZn, Yが捕まるか？

溶質原子が捕まつた積層欠陥から4層ほど離れた層に溶質原子が濃化（中距離ordering）するか？

集まつた溶質原子が積層欠陥の導入を誘導するか？

クラスターの安定性[I]

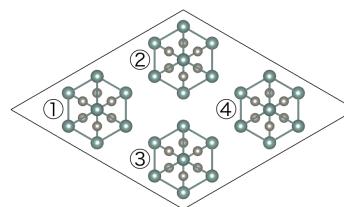


表 3.1: 図 2.5 を参考に作成したモデルの計算結果。

	$\text{Mg}_{58}\text{Zn}_6\text{Y}_8$	$\text{Mg}_{202}\text{Zn}_6\text{Y}_8$
$E_{\text{Total}}[\text{eV}]$	-153.441	-375.406
$E_{\text{Cluster}}[\text{eV}]$	-4.043	-4.046

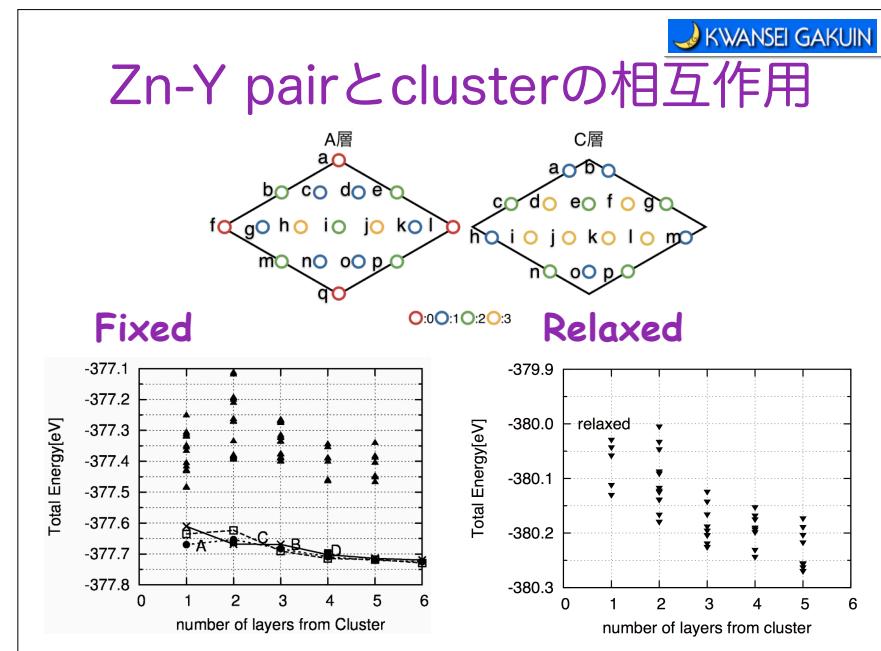
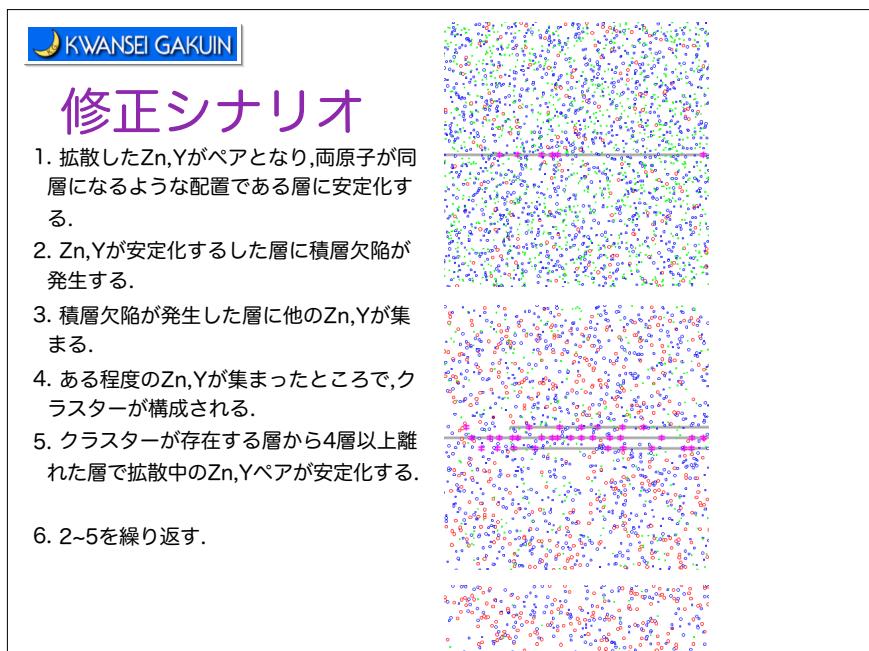
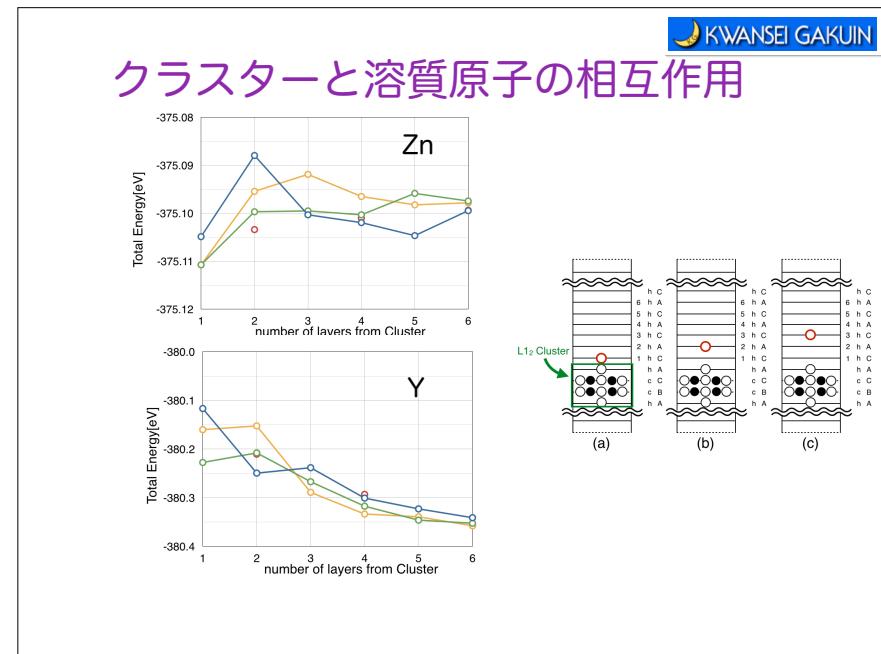
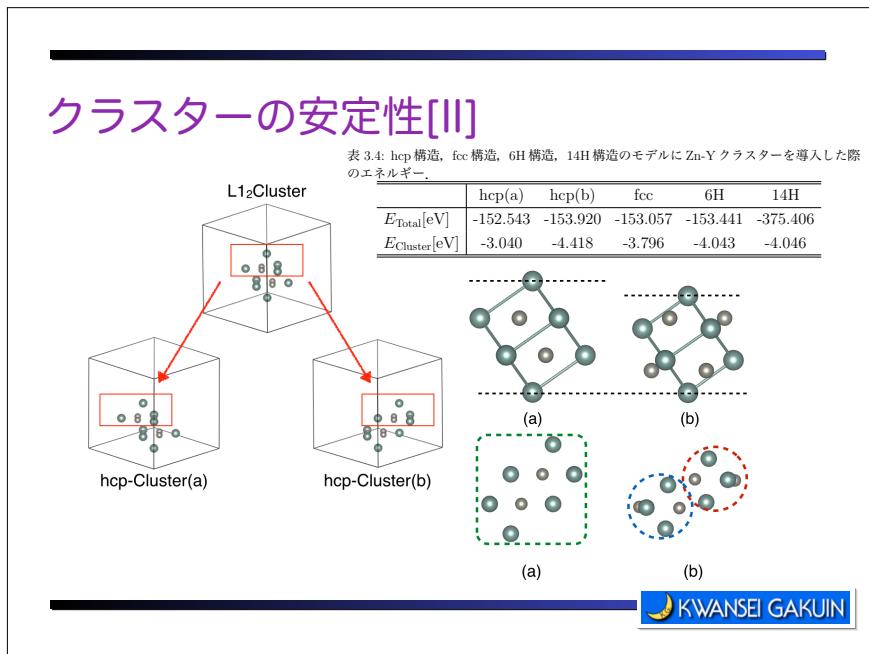
表 3.2: クラスターを1~4つ導入する際の配置方法。

クラスターの数	1	2	3	4
クラスターの配置場所	①	①, ②	①, ②, ③	①, ②, ③, ④

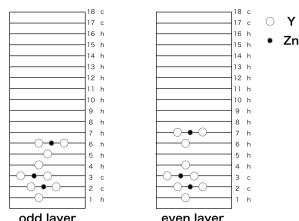
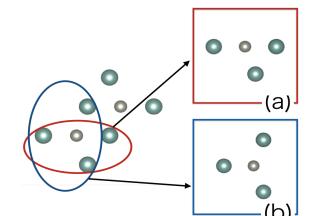
表 3.3: 同構内のクラスターを複数導入した際の TotalEnergy とクラスターエネルギー。

クラスターの数	1	2	3	4
$E_{\text{Total}}[\text{eV}]$	-484.567	-527.695	-570.764	-613.773
$E_{\text{Cluster}}[\text{eV}]$	-4.059	-4.080	-4.067	-4.046





Interaction btw L1₂ Cluster and Small_Cluster(nanocluster)



Article | OPEN

Nanoclusters first: a hierarchical phase transformation in a novel Mg alloy

Hiroshi Okuda , Michiaki Yamasaki, Yoshihito Kawamura, Masao Tabuchi & Hajime Kimizuka

Scientific Reports 5,

Article number: 14186 (2015)

doi:10.1038/srep14186

Download Citation

Metals and alloys

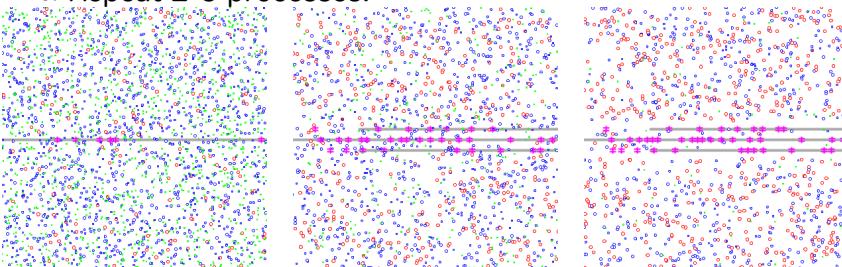
Received: 28 May 2015

Accepted: 18 August 2015

Published online: 21 September 2015

Modified scenario

1. Zn and Y pairs stayed in the same stacking layer.
2. Zn and Y condensed layer induces SF easily.
3. SF traps Zn and Y.
4. L1₂ Clusters are formed there.
5. Further Zn and Y are swept out and forms small clusters on 4-6 layers off from SF with L1₂ clusters.
6. Repeat 2-5 processes.



LPSO2016
(2016/12/06 Tue Meilparque Kyoto)

LPSO formation mechanism based on the middle range ordering of small clusters

- Two scenarios(2012)
 - Stacking Fault initiates
 - Solute Ordering initiates
 - cluster-solute atom interaction
 - monotonous decrease
 - nanoclusters first (Okuda et al.)
 - middle range ordering
 - cluster diffusion?

Four Actors?
Stacking fault,
solute atoms,
L1₂ cluster,
nano cluster