

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?



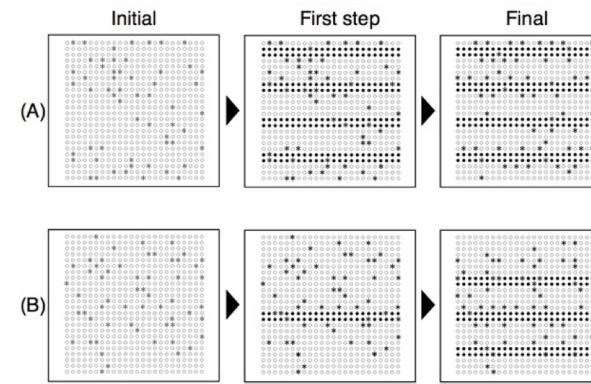
LPSO生成のシナリオ

- 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。

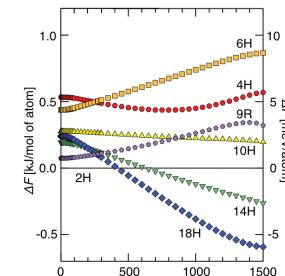
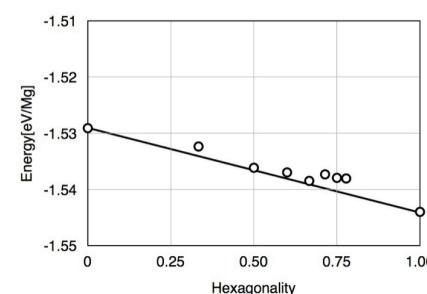
第一原理計算による検証

- 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？

生成シナリオのポンチ絵



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).

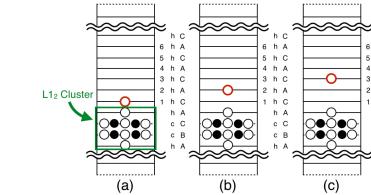
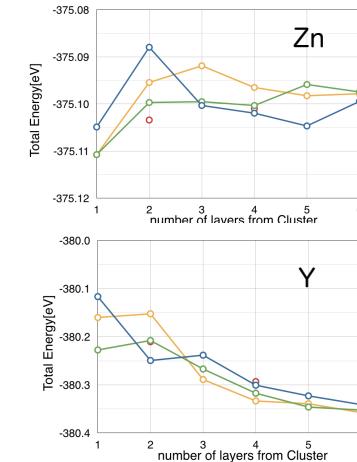


LPSO生成のシナリオ

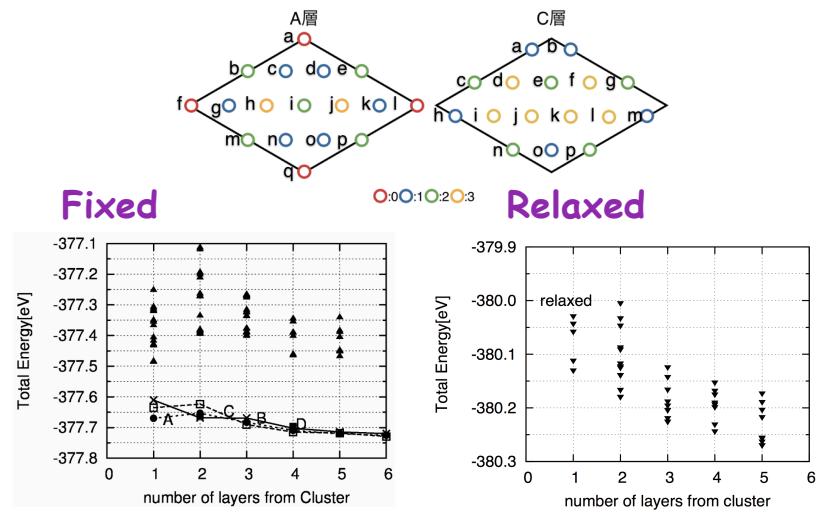
- 積層欠陥律速 :
 - hcp-Mg中に積層欠陥が中周期的に導入
 - 積層欠陥部に溶質原子が捕まる
- 溶質原子律速 :
 - Mg中の1つの積層欠陥に拡散した溶質原子が捕まる。
 - 捕まった溶質原子から4層ほど離れた層に溶質原子が集まる。
 - 集まった溶質原子が積層欠陥の導入を誘導する。
- 積層欠陥律速 :
 - Mg合金内において最初に周期的に積層欠陥が発生するか?
 - 溶質原子が積層欠陥に集まるか?
- 溶質原子律速 :
 - 積層欠陥に溶質原子であるZn, Yが捕まるか?
 - 溶質原子が捕まつた積層欠陥から4層ほど離れた層に溶質原子が濃化(中距離ordering)するか?
 - 集まつた溶質原子が積層欠陥の導入を誘導するか?

第一原理計算による検証

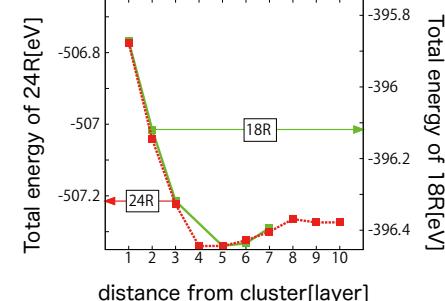
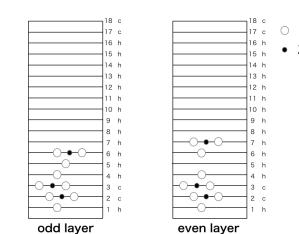
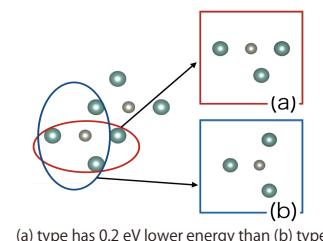
クラスターと溶質原子の相互作用



Zn-Y pairとclusterの相互作用

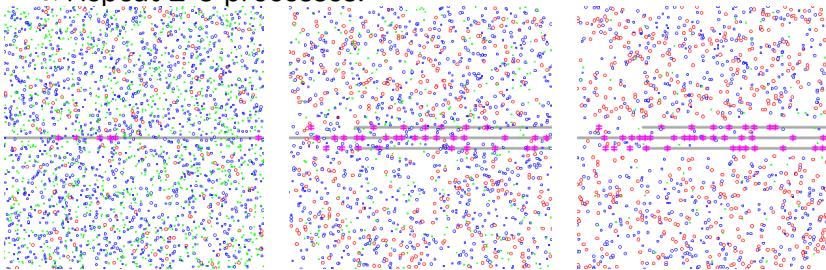


Interaction btw L1₂ Cluster and Small_Cluster(nanocluster)



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