

Mg-Zn-Y 系合金の LPSO 構造における $L1_2$ クラスターと溶質原子ペアの相互作用の第一原理計算

情報科学科 27015448 日山太智

1 目的

LPSO(Long Period Stacking Order) 構造をもつ Mg は比降伏強度で超々ジュラルミン (アルミニウム合金) を上回る特性を持ったため次世代の航空機の構造材料として注目を集めている。しかし、LPSO 構造の生成機構は未だ解明されていない。西谷研究室では「積層欠陥部に $L1_2$ クラスターが形成され、そこから排斥された Zn, Y が中周期的に濃化して新たな積層欠陥を誘発する」という溶質原子先導型のシナリオを立て、Mg-LPSO 合金の溶質原子の単原子構造の計算がおこなわれてきた。

2018 年に栃木が行った「溶質原子の単原子構造の長距離位置での計算結果」から、図 1 のように真上位置、第 3 近接位置ともにほぼ単調な減少を示すというものが得られた。この結果は「中周期的に溶質原子が濃化し、安定化する」というシナリオを否定するものである [1]。

図 2 のように、2018 年に森下がおこなった small cluster を使用した計算結果は、4, 5 層離れた位置で極小値を示し、「排斥された溶質原子が small cluster を形成し中距離で安定する」という仮説を支持する [2]。しかし、栃木の行った計算は可能性の高いと期待される配置だけを調べたため、溶質原子が「単体あるいはペアで中距離で最安定を取る」、つまり「中距離に規則化する」という作業仮説を完全に棄却するものではない [1]。

本研究では栃木の研究では取り組んでいない、単原子においての奇数層での第 2 近接距離、偶数層での第 1, 第 2 近接距離での計算、また同条件下において pair での計算について検証する。

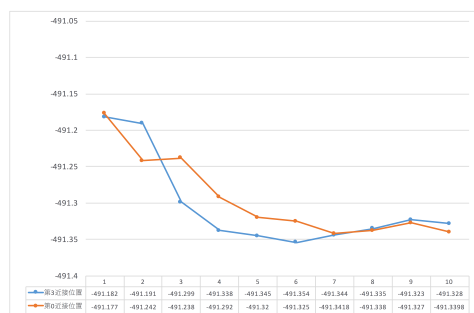


図 1 第 0 近接位置と第 3 近接位置のグラフ結果の比較 [1]。

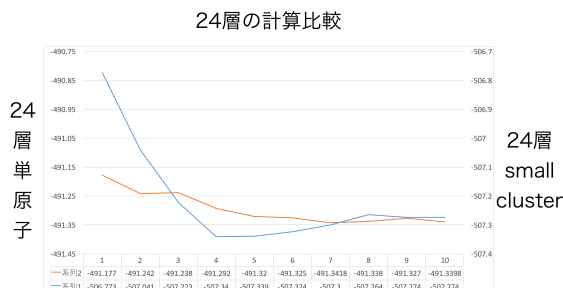


図 2 small cluster と単原子による計算結果 [1]。

2 手法

本研究では第一原理計算を行い、構造緩和した系全体のエネルギーを求める。第一原理計算はシュレディンガー方程式を解いて、原子の種類だけから精密にエネルギーを求め、様々な物性を予測することができる計算である。

また第一原理計算パッケージとして、密度汎関数理論による平面波、擬ポテンシャル法を用いた VASP(Vienna Ab-initio Simulation Package) を用いる。擬ポテンシャル法とは原子の内殻電子を除いた価電子だけを考慮する手法である。全電子を計算するフルポテンシャル法に比べ比較的高速な計算、また十分な精度を持って計算を行うことができるとされている。

3 進行状況

現在、栃木および森下が行った計算を 1-layer から順に再度計算をかけて単調減少の傾向を示すのか、また最安定値が導き出せるのか確認を行っている。奇数層での第 2 近接距離、偶数層での第 1, 第 2 近接距離に溶質原子を挿入したモデルを挿入し、順次計算を進めていく。また、ペア原子の挿入を自動化するモデル構築プログラムを開発する。

参考文献

- [1] 「Mg-LPSO の $L1_2$ cluster と溶質原子の長距離相互作用の第一原理計算」 栃木琢治, 関西学院大学部論文, (2018)。
- [2] 「Mg-Zn-Y 系合金の LPSO 構造における $L1_2$ クラスターとスモールクラスターの相互作用の第一原理計算」 森下慎也, 関西学院大修士論文, (2018)。