

Mg-LPSO 生成機構における small cluster の役割

関西学院大, 理工

日山太智, 岡本雄大, 森下慎也, 西谷滋人

Role of small cluster on Mg-LPSO formation

Dept. of Informatics, Kwansei Gakuin Univ.

T. Nishiyama, Y. Okamoto, S. Morishita and S. R. Nishitani

■背景 我々は Mg-LPSO 合金における LPSO 構造の生成機構において、形成過程を先導するのは積層欠陥の導入ではなく、溶質原子の中距離濃化であるとして第一原理計算に取り組んできた。その中で孤立した溶質原子と L1₂ クラスターの中周期の安定化はなく、small cluster と L1₂ クラスターの中周期の安定化を示唆した [1]。本研究では、挿入サイト毎の L1₂ クラスターと small cluster の相互作用および LPSO 構造の生成機構中での small cluster の役割を報告する。

■手法 Mg 合金の構造モデルについて、図 1左に top view で溶質原子の挿入サイトを、図 1右に side view で L1₂ クラスターと層の関係を示した。積層欠陥を含む長周期構造のスラブモデルを表している。第一原理計算には VASP を使用した。図 1のように L1₂ クラスターを積層欠陥部に、small cluster および溶質原子 Y を一層ずつ離れた位置に配置し、そのエネルギー変化を求めた。

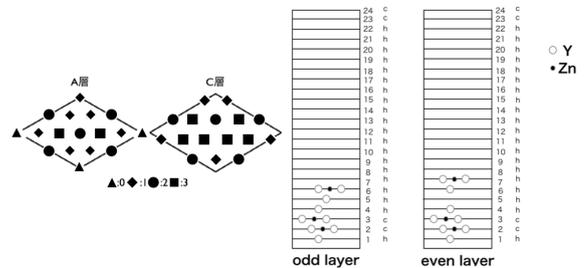


図 1 左図は hcp-Mg の A, C 面での挿入サイト。右図は L1₂ クラスターと small cluster の挿入位置を示すスラブモデルの模式図。

■結果 図 2に各近接位置での結果を示した。L1₂ クラスターと small cluster の層間距離に対してエネルギー値を表示している。エネルギー値は第 4-6 層で極小値を取り、中距離において安定化している。この結果から孤立した溶質原子が集まり small cluster として中距離で安定化し積層欠陥を誘発する役割を担っていると考えられる。また

1. 積層欠陥層に Zn, Y が貯まる。
2. 積層欠陥層から Zn, Y が掃き出される。
3. 掃き出された Zn, Y が個々に拡散する。
4. 中距離に集まって small cluster を形成する。
5. 濃化した溶質原子が積層欠陥を誘起する。
6. 1-5 のステップを繰り返し垂直方向に積層欠陥部が成長していく。

という溶質原子先導型の LPSO 構造生成シナリオが支持された。

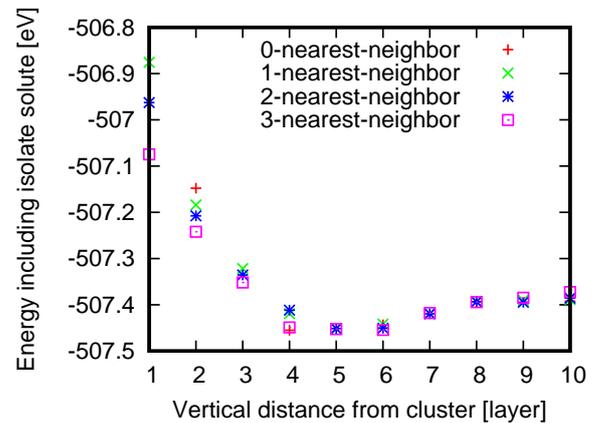


図 2 L1₂ クラスターと small cluster の相互作用エネルギーの層間距離による変化。各近接位置においての結果を示している。

[1] 日山太智, 岡本雄大, 森下慎也, 西谷滋人, 日本物理学会講演概要集, 第 75.1 巻 19aB43-6(2020).