

# 卒業論文

## Mg-LPSO 合金中の層内溶質原子のエネルギー傾向

関西学院大学理工学部

情報科学科 西谷研究室

2566 吉岡 達朗

2016 年 3 月

## 概 要

2001 年に Mg-Zn-Y 合金で発見された LPSO(Long Period Stacking Order) 型 Mg 合金は軽量で、強度、耐熱性に優れているため、自動車や航空機の車体などに使用する材料として注目されている。

LPSO 構造 (長周期積層構造) とは、Mg 合金中に一定の周期で積層欠陥を含んだ構造であり、積層欠陥部には溶質原子である Zn,Y が濃化することが分かっている。Mg 合金中に Zn, Y が fcc(面心立方格子) 構造状に塊状態となって形成される  $L1_2$  クラスタが確認されている。

しかしこの LPSO 型 Mg 合金は、その生成機構が現状では解明されていない。

西谷研の坂本、山本は Mg 合金中に  $L1_2$  クラスタを挿入した結晶モデルを作成し、Zn,Y を個々に挿入した際のクラスタと溶質原子の位置とエネルギーの観点からの関係を調べた、その結果、Y がクラスタから遠ざかるほど安定するという仮説を立てた。また、坂本は、Zn, Y は Mg 合金中において同一層内で安定することを確認した。そこで昨年久保は Zn,Y を同時に挿入した際のエネルギー変化を調べた。しかし、原子配置の組み合わせは全部で 926 通り存在し、1 つの計算に約 1 週間必要とするため、現状ではすべての原子配置を調べておらず仮説を証明できていない。

本研究では、すべての原子配置をしらみつぶしに調べていくのではなく、久保が考案した原子配置パターンを利用し面内やクラスタとの位置関係などによるエネルギー変化の傾向を探し出すことで計算すべき配置を減らすことを目的とした。

その結果、クラスタから 1 層目である C 層では 8 種類、2 層目である A 層では 9 種類のエネルギーパターンに分類できることが分かった。この結果から溶質原子を配置した際のエネルギーはその溶質原子のクラスタからの距離によって決まるということが分かった。この傾向は構造緩和した場合や、Zn,Y を入れ替えた場合にも見られたが、緩和後と入れ替え後ではエネルギーパターンにおけるエネルギーの大小関係が異なっていることも分かった。

# 目次

第1章	序論	2
1.1	Mg-LPSO 構造	2
1.2	溶質原子の相互作用と LPSO 構造の生成シナリオ	3
1.3	研究目的	5
第2章	手法	7
2.1	VASP	7
2.2	溶質原子の挿入方法 (A 層, C 層)	7
2.3	周期的境界条件	9
2.3.1	周期的境界条件を考慮した A 層, C 層	9
2.4	構造緩和による構造的影響	10
第3章	結果及び考察	12
3.1	クラスターから 1 層離れた層 (C 層)	12
3.2	クラスターから 2 層離れた層 (A 層)	14
3.3	Zn,Y を入れ替えた場合,full relax の場合	18
3.4	配置パターンごとのエネルギーの大小関係	19
3.4.1	Zn,Y の入れ替え前後のエネルギー	19
3.4.2	fix と full relax でのエネルギー	20
第4章	総括	22

# 第1章 序論

## 1.1 Mg-LPSO 構造

マグネシウム (Mg) は、実用金属材料の中で最も軽く、かつ振動吸収性も優れているため、コンピュータや携帯電話、輸送機器などの適用が進められている。また海水中にも多く含まれるため日本国内においても十分に自給できる金属であるため様々な Mg 合金の研究開発も進められている、しかし、Mg は 低温で発火する燃焼性、身近な物質である水やアルコールとよく反応する腐食性をもつ。それゆえ、軽量金属であるアルミニウム (Al) 合金に比べて実用が進んでいないのが現状である。

しかし、2001 年、熊本大学の河村教授によって LPSO 構造 (長周期積層構造)Mg 合金が開発され、これまで到達不可能であると考えられていた機械的性質が室温と高温の両方で得られるようになった [1]。LPSO 構造 Mg 合金は、既存 Mg 合金のみならず、高強度 Al 合金である超々ジュラルミンを上回る比降伏強度を持ち、さらにこれまで問題とされていた耐熱強度は従来の耐熱 Mg 合金や耐熱 Al 合金を上回るため重要な構造材料として注目されている。

LPSO 構造は、図 1.1 のような構造をしており、積層欠陥が周期的に導入され、その積層欠陥部に黒色の丸で示した溶質原子である Zn, Y が濃化している構造をしている。図 1.1 の原子は、下から A, B, A, B と積み重なっているが、SF(Stacking Fault)で示された以降は C, A, C, A となっている。このように、完全結晶を原子面が周期的に積み重なっているとき、この積み重ねの順序に乱れが生じることを積層欠陥という。図 1.1 では、18R 構造を示したが、18R 構造とは、18 層を 1 周期とした構造をいう。LPSO 構造には、18R 構造以外にも、10H, 18R, 14H, 24R などの構造がある。



ある [3].

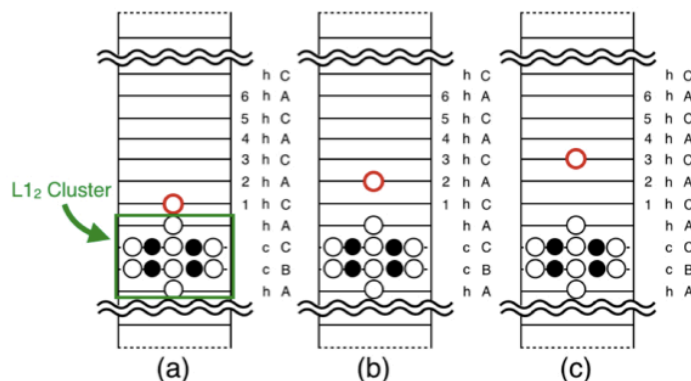


図 1.3:  $Z_n, Y$  を 1 層ずつ離して挿入した図 [3].

グラフから,  $Zn$  を挿入した際は, 1 層目から 6 層目にかけてエネルギーの変動が最大でも  $0.02\text{eV}$  と小さいが,  $Y$  を挿入した際は, 1 層目から 6 層目にかけて値が右下がりとなりエネルギーの変動も最大  $0.2\text{eV}$  と非常に大きいことが分かる, この結果から  $Zn$  に比べて  $Y$  の方がクラスターに対する影響が大きいと考えられる. また,  $Zn$  と  $Y$  は近い距離で安定となることもわかっており, 「クラスターから溶質原子が遠ざかるほど大きく安定する」ということが分かった [3].

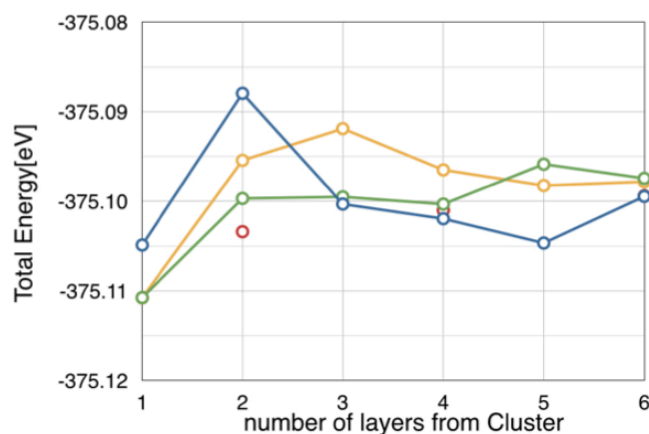


図 1.4:  $Zn$  を挿入した際のエネルギー変化 (横軸はクラスターからの層数, 縦軸はエネルギーを示す)[3].

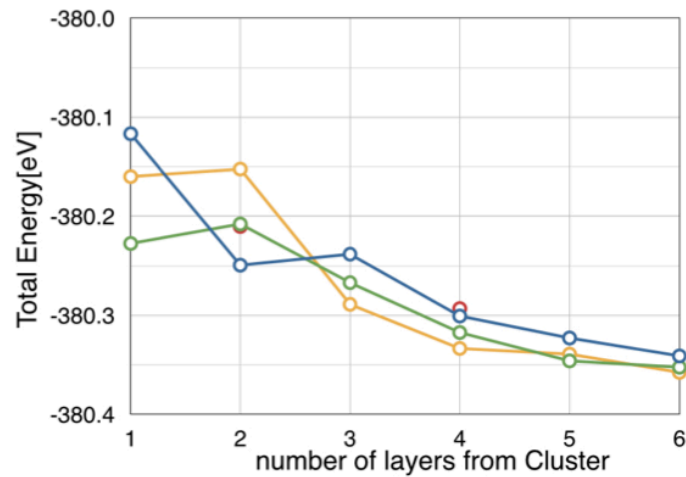


図 1.5: Y を挿入した際のエネルギー変化 (横軸はクラスターからの層数, 縦軸はエネルギーを示す)[3].

この結果から, 坂本は以下のような LPSO 構造の生成シナリオを提案した,

1. Mg 合金中において溶質原子  $Zn, Y$  が安定化した層で積層欠陥を発生させる.
2. その積層欠陥部に  $Zn, Y$  が集まり, クラスターが形成される.
3. そのクラスターから  $Zn, Y$  が掃き出される.
4. 掃き出された  $Zn, Y$  が拡散し, 4 層ほど離れた層で新たな安定化し積層欠陥を発生させる.

このようなループを繰り返すというものである

### 1.3 研究目的

以上の坂本の研究では, Y を孤立した状態で挿入させたときに, Y がクラスターから遠ざかるほど安定することが確認でき, また  $Zn, Y$  は近い距離で安定することも分かった.

そこで  $Zn, Y$  を実際に同時添加した際のエネルギーの変化を調べるため久保は同層に  $Zn, Y$  を配置した際にも同じような結果が得られるかを調べた. その結果, 図 1.6 で示すように同時点化した際にもクラスターから 2 層目から 5 層目にかけてエネルギーが低下していることが確認できた [4].

しかし, 久保の研究においては構造緩和した場合や  $Zn, Y$  の配置位置を入れ替えた際の計算が行われていないため坂本の提案したシナリオを立証することはできていない. さら

に計算すべき配置は構造緩和した場合, Zn, Y 入れ替えた場合それぞれ 1000 近くあり 1 つの計算に約 1 週間かかるためすべてを網羅するためには膨大な時間が必要となる.

そこで, 本研究では, 久保の計算結果をもとに約 1000 ある配置をエネルギーの値によって分類し, 配置ごとのエネルギー的な傾向を調べ, 計算すべき配置を減らすことを目的とする.

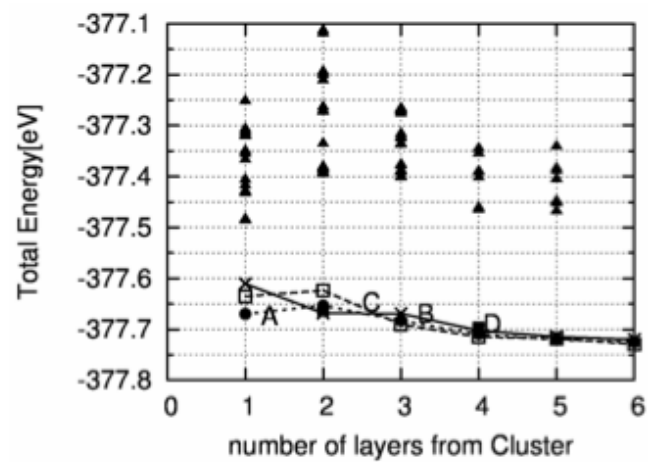


図 1.6: Zn,Y を同時に挿入した際のエネルギー (上方) と, Zn, Y をそれぞれ挿入した際の平均グラフ (下方)[4].



## 第2章 手法

### 2.1 VASP

本研究では、第一原理計算ソフトの VASP (Vienna Ab-initio Simulation Package) を用いる。第一原理計算とは量子力学を支配するシュレディンガー方程式を解いて、原子の種類だけから電子構造を求め、様々な物性を予測する計算である。

VASP の計算には、計算条件が記述された INCAR, 系すなわち計算モデルの初期構造が記述された POSCAR, 原子情報, ポテンシャルが記述された POTCAR, メッシュの細かさを意味する KPOINTS の 4 種類の入力ファイルを使用する。上記の入力ファイルから計算を行い、計算モデル内における原子の安定位置やフォース, 系の全体エネルギー等が記述された OUTCAR 等を入力する [5]。

### 2.2 溶質原子の挿入方法 (A 層, C 層)

エネルギーの等しい配置を視覚化するために配置パターンについて説明する。本研究では、Mg 合金の  $\text{Mg}_{202}\text{Zn}_6\text{Y}_8$  のモデルを使用しているが、このモデルは図 2.1 のようにクラスターから 1 層から 5 層に C 層と A 層が交互に積み重なった構造をしており、図 2.2 が A 層と C 層の模式図である。そして調べる配置を分かりやすくするために原子位置をアルファベットで示している。久保の研究では、クラスターから 1 層離れた C 層では、

- 1 と 2(青と緑)
- 1 と 3(青と黄)
- 2 と 3(緑と黄)

また A 層では

- 0 と 1(赤と青)
- 0 と 2(赤と緑)
- 0 と 3(赤と黄)
- 1 と 2(青と緑)
- 1 と 3(青と黄)
- 2 と 3(緑と黄)

つまり, 例えば, 1 と 2(青と緑) に  $Zn, Y$  を挿入するときには 1 の青に  $Zn$ , 2 の緑に  $Y$  を置換して計算を行なった [4].

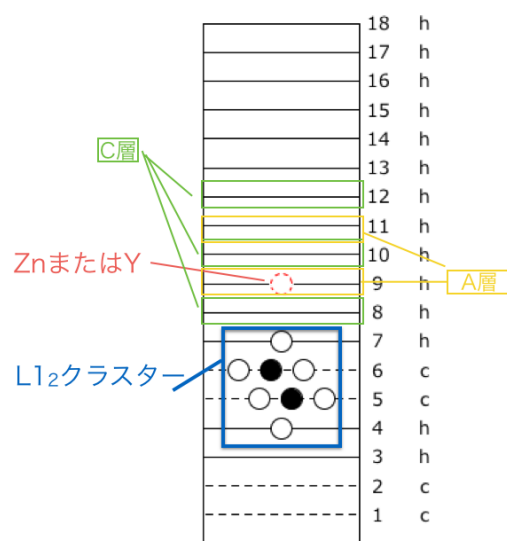


図 2.1: クラスタを導入したモデルに溶質原子を加えた模式図.

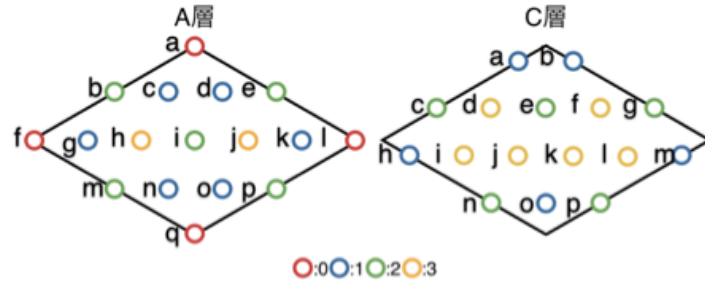


図 2.2:  $\text{Mg}_{202}\text{Zn}_6\text{Y}_8$  のモデルの (0001) 面である A 層と C 層の模式図である. クラスターの中心は菱型の角であり, 赤, 青, 緑, 黄枠の丸はそれぞれクラスターからの第 0 から 3 近接の原子を表している.[4].

## 2.3 周期的境界条件

本研究では, 等しい原子配置を調べる上で周期的境界条件を考慮する必要があるため, 周期的境界条件について説明する.

VASP では平面波を用いた第一原理計算が行われる. 平面波を考えるためには無限周期の固体を考えなければならないという条件があるが, 計算モデル内の原子が増えるにしたがって計算時間が伸びるため, 無限周期のモデルの計算を行うことはできない. そのため, 無限周期の固体ではなく対象物質の構造的特徴を表す一部を取り出し, その部分を計算モデルとして計算を行う [3].

### 2.3.1 周期的境界条件を考慮した A 層, C 層

先に示した A 層, C 層は無限周期的にある物質の中の構造的特徴を示すためのスラブモデルにすぎない, そのため等しいエネルギー配置を正確に見つけることはできない. そこで本研究では, 周期的境界条件を考慮し, A 層, C 層を 3 倍に拡張したモデルによってエネルギーの等しい配置を表記する. そうすることによって, 例えば ac と ak のエネルギーが等しくなった場合スラブモデルでは図 2.3 をみて分かるように配置的に等しいとは考えられないが, 3 倍に拡張したモデルでは灰色で示された ak の配置を見つけることができる. また周期的環境を考慮すると図 2.3 の a の配置は f, l, q と同じ配置を意味し, b の配置は e, m, p と同じであることが分かる.

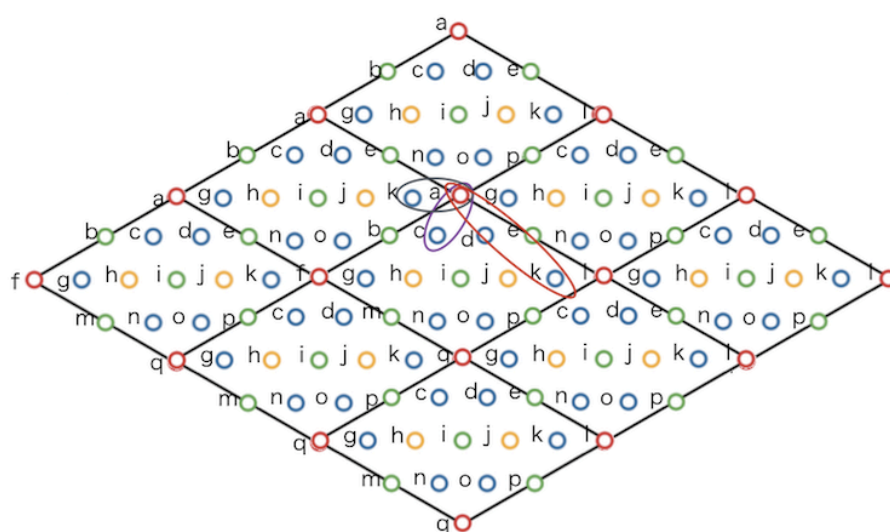


図 2.3: 3 倍に拡張した A 層の模式図.

## 2.4 構造緩和による構造的影響

本研究で, A 層, C 層においてエネルギー的な傾向が確認できた場合, その傾向が, 原子配置の緩和を許した状態でも成り立つかどうかを調べる必要がある. そこで構造緩和について説明する.

VASP を使って原子モデルを計算する際, 原子の構造を緩和するかしないかでエネルギーの値が異なる. まず, fix とは緩和させずに計算することである. 図 2.1 は, クラスタを配置したモデルで, (a) が緩和前の様子で, (b) が緩和後の様子である.

まず, fix とは緩和させずに計算することである. 次に, fullrelax とは緩和させて計算することを意味する. 緩和するとは構造最適化をすることによって原子の安定な位置を求めることである. また, 緩和には, 内部緩和と外部緩和があり, 内部緩和は原子の位置を変えることで, 外部緩和は格子定数を変えることをいう. INCAR で fix か fullrelax かを指定して, 計算をおこなう. 図 2.4 を見てわかるように, 緩和前に比べ, 緩和後は収縮している. よって, 緩和前 (fix) のエネルギーより, 緩和後 (fullrelax) のエネルギーの方が, 値が低くなる.

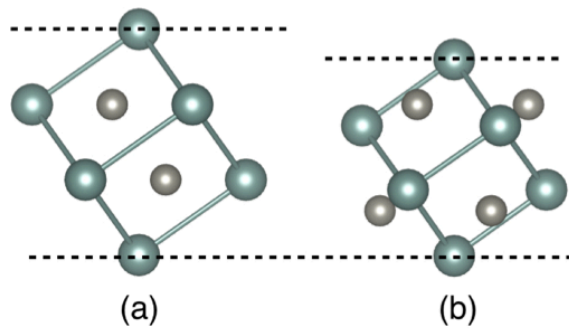


図 2.4: Mg 合金中における (a) 緩和前, (b) 緩和後の  $L_{12}$  クラスタ [3].

## 第3章 結果及び考察

先ほど示した A 層, C 層の拡張モデルと久保の計算結果を用いてエネルギーが等しい配置の分類を行った. クラスタから 1 層はなれた C 層と 2 層目の A 層で Zn, Y を配置した値, Zn, Y を入れ替えた値, full relax での値を調べた.

### 3.1 クラスタから 1 層離れた層 (C 層)

例えば, クラスタから 1 層離れた C 層 1-2 に Zn, Y を配置するパターンは 25 パターンであるそのうちエネルギーの等しい値で分類すると大きく 2 パターンに分類できる. 図 3.1 と図 3.2 でエネルギーが等しい配置を赤丸で示した.

また, 1 と 2 (青と緑) の配置パターンの中で, エネルギーが同じもの以下に列挙した.

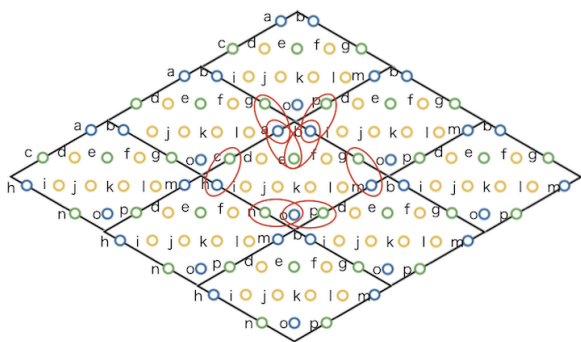


図 3.1: C 層 1-2 (青と緑) のパターン 1.

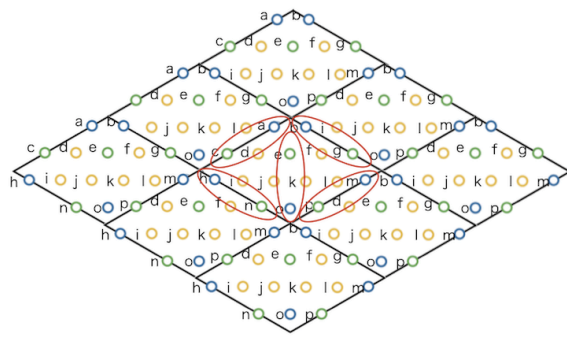


図 3.2: C 層 1-2 (青と緑) のパターン 2.

C 層 1-2 のエネルギーが等しい配置パターン 1 において同じエネルギーの配置は 16 種類でありエネルギーが等しい配置とその値は

ae, ag, an, bc, be, bp, hc, he, hp, me, mg, mn, oc, og, on, op = -377.486125eV

図 3.1 から第 1 近接である青と緑で等しくなること, 図 3.2 から第 2 近接である青と緑で等しくなることが分かる. このようにエネルギーが等しい配置を見つけていくことにより

配置ごとのエネルギー傾向を見つけていく。以下にエネルギーが等しい配置パターンとエネルギーを示す。

C 層 1-2(青と緑) のエネルギーが等しい配置

パターン 1(第 1 近接): ae, ag, an, bc, be, bp, hc, he, hp, me, mg, mn, oc, og, on, op=  
-377.486125eV

パターン 2(第 2 近接); ac, ap, bg, bn, hg, hn, mc, mp, oe= -377.432833eV

以下も同様に示していく

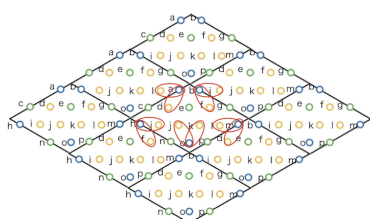


図 3.3: C 層 1-3(青と黄) のパターン 1.

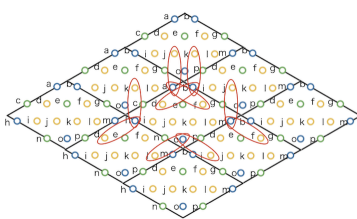


図 3.4: C 層 1-3(青と黄) のパターン 2.

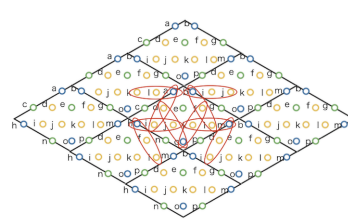


図 3.5: C 層 1-3(青と黄) のパターン 3.

C 層 1-3(青と黄) のエネルギーが等しい配置

パターン 1(第 1 近接): ad, al, bf, bi, hf, hi, md, ml, oj, ok= -377.428609eV

パターン 2(第 2 近接): af, aj, bd, bk, hd, hk, mf, mj, oi, ol= -377.355388eV

パターン 3(第 3 近接):ai, ak, bj, bl ,hj, hl, mi, mk, od, of= -377.317585eV

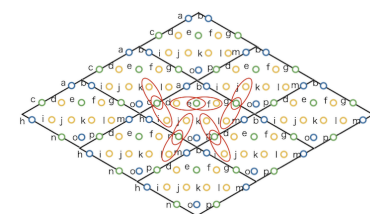


図 3.6: C 層 2-3(緑と黄) のパターン 1.

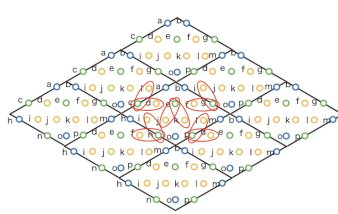


図 3.7: C 層 2-3(緑と黄) のパターン 2.

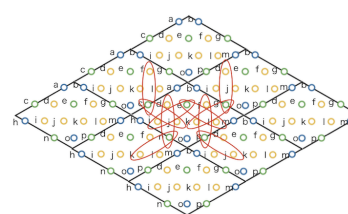


図 3.8: C 層 2-3(緑と緑) のパターン 3.

C 層 2-3(緑と黄) のエネルギーが等しい配置

パターン 1(第 1 近接): ci, ck, ed, ef, gj, gl, nj, nl, pi, pk= -377.321053eV

パターン 2(第 1 近接): cd, cl, ej, ek, gi, gf, nf, ni, pd, pl= -377.312214eV

パターン 3(第 2 近接): cj, cf, el, gd, ei, gk, nd, nk, pf, pj= -377.251700eV

ここで、パターン 1 とパターン 2 で同じ第 1 近接である緑と黄であるにもかかわらずエネルギーがわずかに異なるのは、溶質原子を配置した位置の周りの原子が関係していると考えられる。例えば、図 3.9 でパターン 1 の配置である ci とパターン 2 の配置である cd の位置関係を見てみると、ci を結ぶ線上には黄と青の原子があるが cd を結ぶ線上には黄と黄の原子となっている。先に示したようにこの色分けはクラスターからの距離で分類されている。つまり層内に配置された溶質原子はクラスターからの力を受けているためこのようなエネルギーの差が生まれたと考えられる。

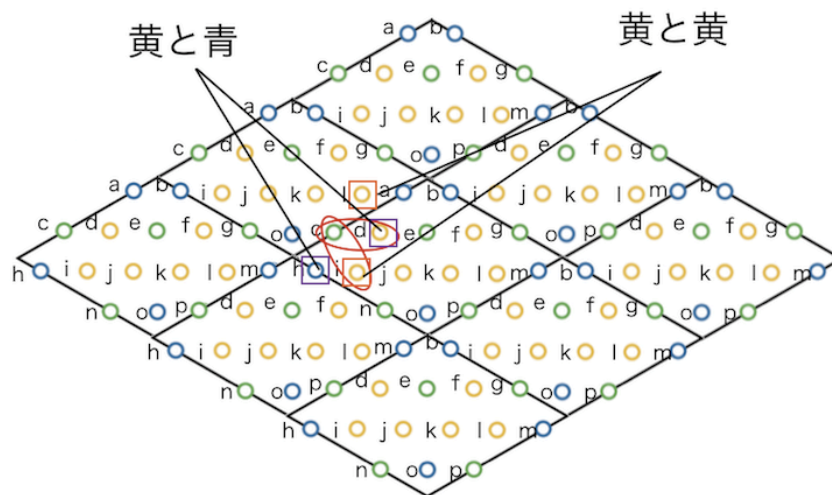


図 3.9: C 層 2-3 のパターン 1 とパターン 2 の原子の位置関係.

## 3.2 クラスターから 2 層離れた層 (A 層)

クラスターから 2 層目である A 層においても C 層と同様にエネルギーが等しい配置パターンとエネルギーを図 3.10 から図 3.19 で示す。



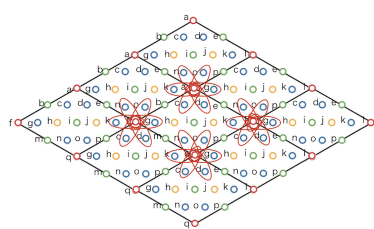


図 3.10: A 層 0-1(赤と青) のパターン 1.

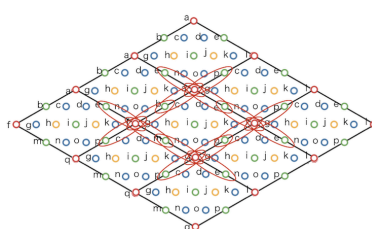


図 3.11: A 層 0-2(赤と緑) のパターン 1.

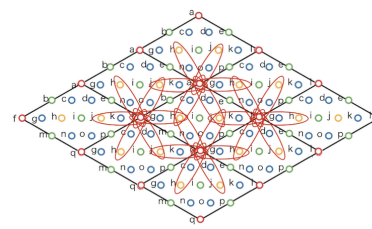


図 3.12: A 層 0-3(赤と黄) のパターン 1.

A 層 0-1(赤と青) のエネルギーが等しい配置

パターン 1(第 1 近接): ac, ad, ag, ak, an, ao, fc, fd, fg, fk, fn, fo, lc, ld, lg, lk, ln, lo, qc, qd, qg, qk, qn, qo = -377.394883eV

A 層 0-2(赤と緑) のエネルギーが等しい配置

パターン 1(第 2 近接): ab, ae, ai, am, ap, fb, fe, fi, fm, fp, lb, le, li, lm, lp, qb, qe, qi, qm, qp = -377.335672eV

A 層 0-3(赤と黄) のエネルギーが等しい配置

パターン 1(第 3 近接): ah, aj, fh, fj, lh, lj, qh, qj = -377.092261eV

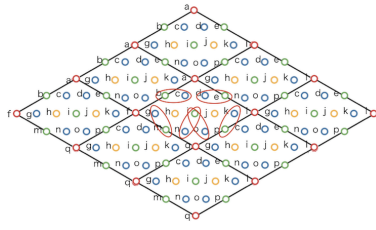


図 3.13: A 層 1-2(青と緑) の  
パターン 1.

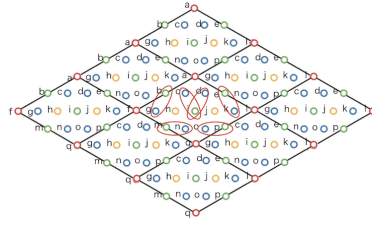


図 3.14: A 層 1-2(青と緑) の  
パターン 2.

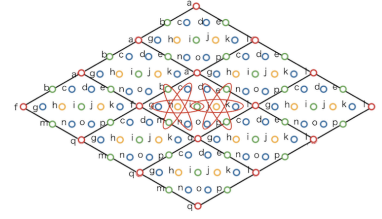


図 3.15: A 層 1-2(青と緑) の  
パターン 3.

A 層 1-2(青と緑) のエネルギーが等しい配置

パターン 1(第 1 近接): cb, cp, de, dm, ge, gm, kb, kp, ni, oi= -377.383658eV

パターン 2(第 1 近接): ci, di, gb, gp, ke, km, ne, nm, ob, op= -377.383566eV

パターン 3(第 3 近接): ce, cm, db, dp, gi, ki, nb, np, oe, om= -377.272980eV

ここで、パターン 1 とパターン 2 で同じ第 1 近接である青と緑であるにもかかわらずエネルギーがわずかであるが異なっている。しかし先ほどの C 層 2-3 の場合と異なり配置した溶質原子のまわり原子には違いが見られない。

そこで図 3.16 のように A 層 (赤) と C 層 (青) を重ねた模式図を使い違いを調べてみた。先に述べたように Mg 結晶中の A 層と C 層は交互に重なっているため Mg 結晶を上から見ると図 3.16 のように見える。

ここで、例えばパターン 1 の ni とパターン 2 の ci を見てみると、ni の間には j が配置されており、ci の間には e が配置されていることが分かる。このことから、平面幾何においては ni と ci は等価な配置と考えられるが、クラスターの中心である A 層の a と q との関係を見てみると qj が第 3 近接、ae が第 2 近接と距離が違ってくるつまり j と e がクラスターから受ける力が異なるため ni と ci においてエネルギーの差が生まれたと考えられる。

このように平面幾何で等価と考えられる配置にもクラスターとの関係を考慮することによって違いが見られた。

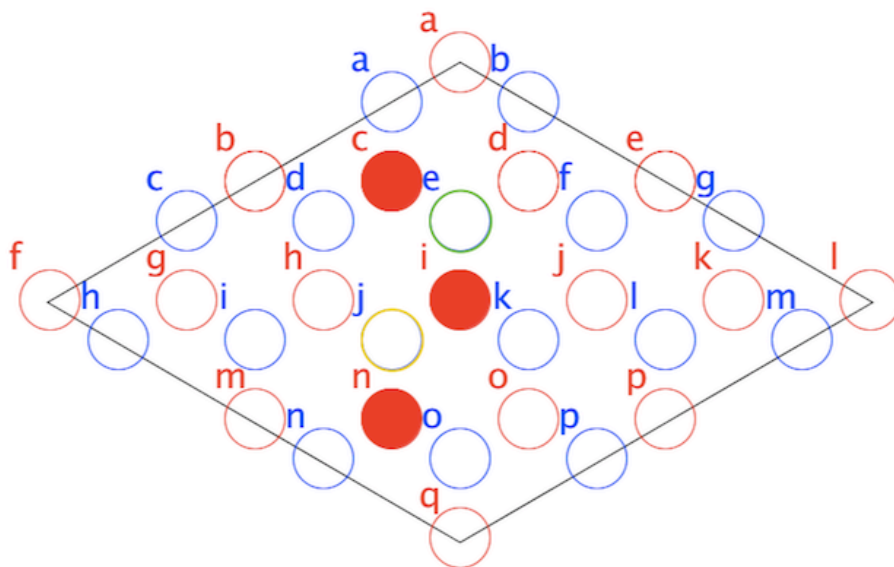


図 3.16: A 層 (赤)C 層 (青) を重ねた模式図.

A 層 1-3, 2-3 のエネルギーが等しい配置パターンにおいて, 図 3.17 から第 1 近接である青と黄で等しくなること, 図 3.18 から第 2 近接である青と黄で等しくなること, 3.19 から第 1 近接である緑と黄で等しくなることが分かる.

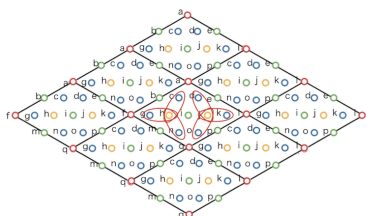


図 3.17: A 層 1-3(緑と黄) のパターン 1.

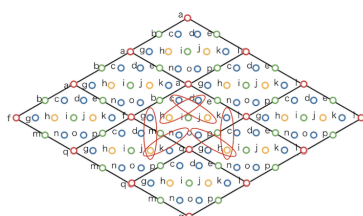


図 3.18: A 層 1-3(緑と黄) のパターン 2.

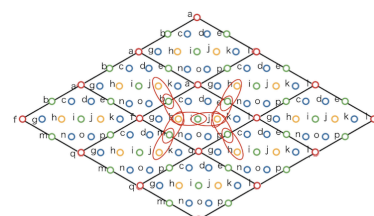


図 3.19: A 層 2-3(緑と黄) のパターン 1.

A 層 1-3(青と黄) のエネルギーが等しい配置

パターン 1(第 1 近接): ch, dj, gh, kj, nh, oj= -377.195299eV

パターン 2(第 2 近接): cj, dh, gj, nj, oh, kh= -377.119162eV

A 層 2-3(緑と黄) のエネルギーが等しい配置

パターン 1(第 1 近接): bh, eh, ej, ih, bj, mh, mj, ph, pj, ij= -377.195299eV

### 3.3 Zn,Y を入れ替えた場合,full relax の場合

先ほど説明した配置ごとの分類がより複雑な条件においても成り立つかを調べるため, Zn,Y の配置を入れ替えた場合と full relax のエネルギーを計算したところ, どちらの場合も fix と同様の配置でエネルギーごとに分類することができた. この結果から, より複雑な条件においても fix における傾向が成り立つことが分かる.

### 3.4 配置パターンごとのエネルギーの大小関係

同層内における配置の仕方によってエネルギーがどの程度変化するかを調べるため配置パターンごとのエネルギーをグラフにして示した。

#### 3.4.1 Zn,Y の入れ替え前後のエネルギー

まず, Zn,Y を入れ替えることによって配置パターンごとのエネルギーの大小関係がどのように変化するのかを図 3.20 と図 3.21 で示した. グラフ内の赤と青の数字は溶質原子の近接距離を表している。

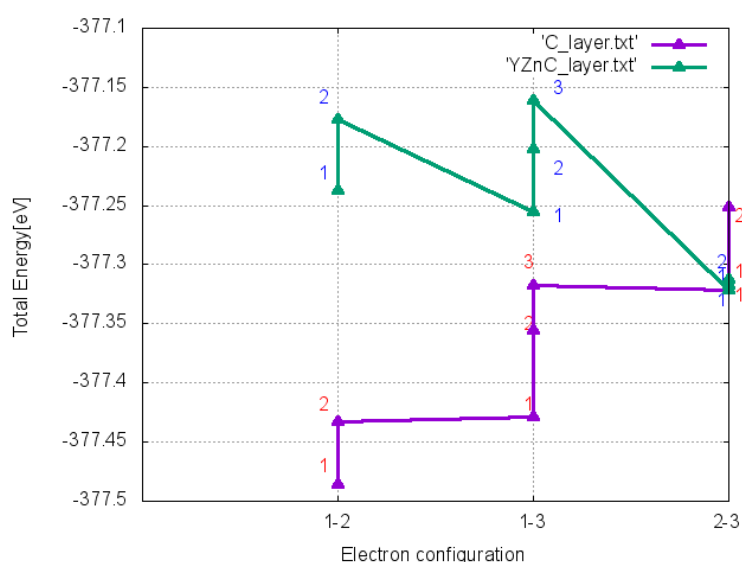


図 3.20: C 層の Zn,Y 入れ替え前 (下方) と入れ替え後 (上方) のエネルギーグラフ。

図 3.20 は C 層におけるエネルギーを示しているが, グラフから 1-2,1-3 においてはエネルギーの変動の仕方が近似しているが,2-3 においては入れ替え前のエネルギーの変動に対して入れ替え後のエネルギー変動が小さいことが分かる。

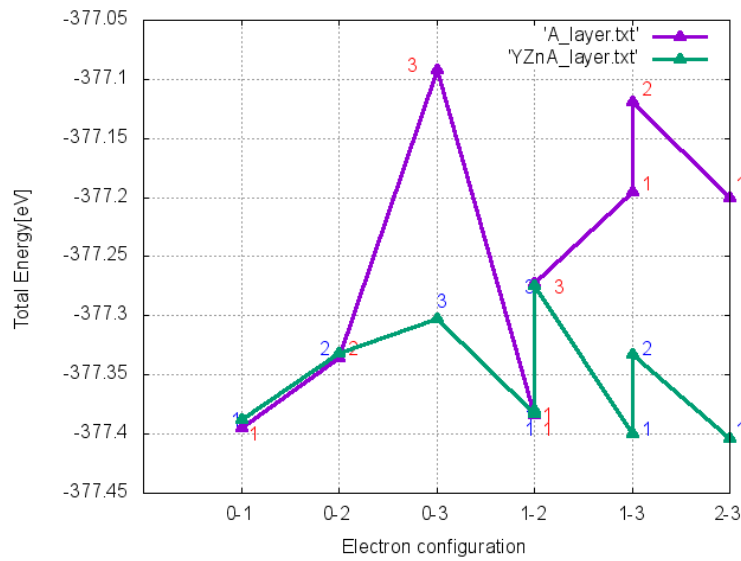


図 3.21: A 層の Zn,Y 入れ替え前 (上方) と入れ替え後 (下方) のエネルギーグラフ.

また, 図 3.21 は A 層におけるエネルギーを示しているが, グラフから 0-1, 0-2, 1-2, 1-3, 2-3 ではエネルギーの変動の仕方が近似しているが, 0-2 から 0-3 にかけて入れ替え前の変動が入れ替え後よりも約 0.2eV ほど大きいことや, 1-2 から 1-3 にかけて入れ替え前はエネルギーが上がっているのに対して, 入れ替え後が下がっているなどの違いも見られる.

しかし, すべてのグラフにおいてグラフ内の数字で示した近接距離が大きくなるに従ってエネルギーが大きくなっていることが分かる.

### 3.4.2 fix と full relax でのエネルギー

次に, Zn,Y を入れ替えることによって配置パターンごとのエネルギーの大小関係がどのように変化するのかを図 3.22 から図 3.25 で示した. グラフ内の赤と青の数字は溶質原子の近接距離を表している. 図 3.22 と図 3.23 は C 層におけるエネルギーを示しているが, グラフから 1-2 を除いてはエネルギーの変動の仕方が近似しているが, 1-3 から 2-3 にかけて fix ではエネルギーが右上がりであるのに対して full relax では右下がりであることが分かる.

また, 図 3.24 と図 3.25 は A 層におけるエネルギーを示しているが, グラフから 0-1, 0-2, 1-2, 1-3, 2-3 ではエネルギーの変動の仕方が近似しているが, 0-1 から 0-3 にかけて fix のエネルギー変動が full relax の変動よりも約 0.1eV ほど大きいことや, 1-2 から 1-3 にかけて

入れ替え前はエネルギーが上がっているのに対し full relax では下がっているなどの違いも見られる。

しかし、入れ替え前後の場合と同様にすべてのグラフにおいてグラフ内の数字で示した近接距離が大きくなるに従ってエネルギーが大きくなっていることが分かる。

このように、Zn,Y を入れ替えた場合や,full relax の場合でも溶質原子間距離が大きくなるに連れてエネルギーが上昇する傾向は見られたが、入れ替え前後と、fix と full relax ではそれぞれ違った傾向も見られた。

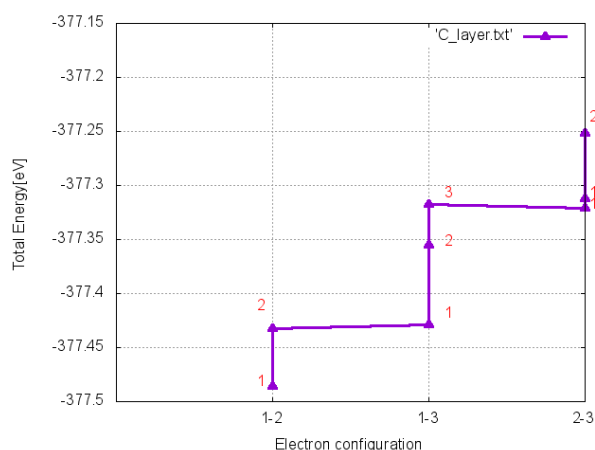


図 3.22: C 層 fix エネルギーグラフ。

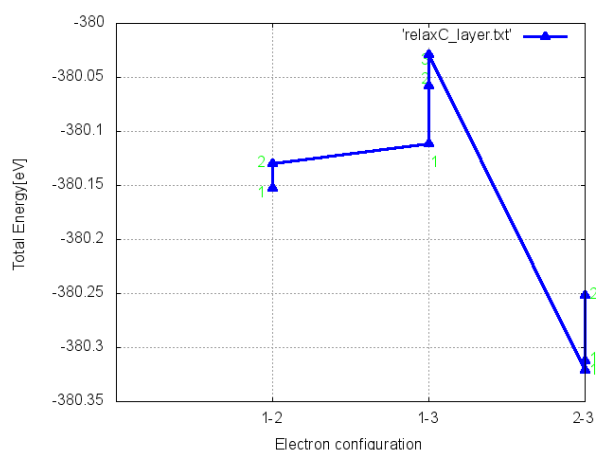


図 3.23: C 層 full relax エネルギーグラフ。

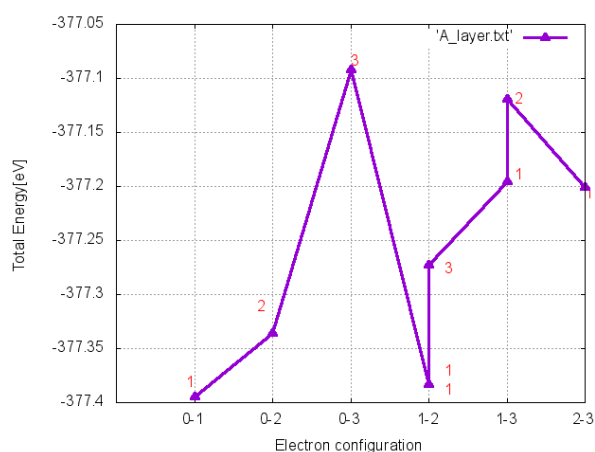


図 3.24: A 層 fix エネルギーグラフ。

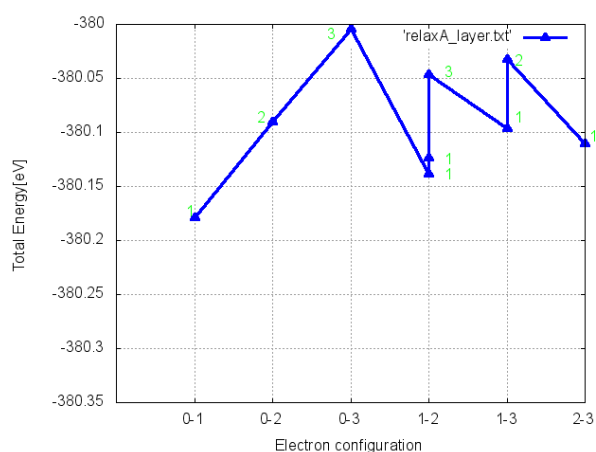


図 3.25: A 層 full relax エネルギーグラフ。

## 第4章 総括

本研究では、面内やクラスターとの位置関係などによるエネルギー変化の傾向を探し出すことで計算すべき配置を減少させることを目的とした。また、久保の計算結果には誤りも含まれていることも分かり、再計算するとともに A 層と C 層でエネルギーが等しい配置パターンをエネルギーの値によって分類した。その結果、クラスターから 1 層目である C 層では 8 種類、2 層目である A 層では 9 種類のエネルギーパターンに分類できることが分かった。この結果から溶質原子を配置した際のエネルギーはその溶質原子のクラスターからの距離によって決まるということが分かった。この傾向は構造緩和した場合や、Zn,Y を入れ替えた場合にも見られたが、緩和後と入れ替え後ではエネルギーパターンにおけるエネルギーの大小関係が異なっていることも分かった。

以上の研究によって、Zn-Y を同層に配置した時にしらべるべきパターンを 10 分の 1 に絞り込むことができた。しかし、平面幾何で等価と見えた配置には違いが存在することも判明した。今後、得られた分類に従って残された構造の緩和エネルギーを効率的に計算を進めていくことが望まれる。



## 参考文献

- [1] Y. Kawamura, K. Hayashi, A. Inoue and T. Masumoto: Mater. Trans., **42**, 1172(2001).
- [2] D. Egusa and E. Abe: Acta Mater., **60**, 166(2012).
- [3] 坂本雄一「Mg 合金の積層欠陥と溶質原子の相互作用の第一原理計算」関西学院大学 理工学研究科 情報科学専攻 修士論文 (2014).
- [4] 久保里佳「LPSO 型 Mg 合金の クラスターと溶質原子の相互作用」関西学院大学 理工学研究科 情報科学専攻 卒業論文 (2015).
- [5] 「VASP MANUAL」 [http://www.chem.saitama-u.ac.jp/takayanagi-lab/VASP\\_manual/page02.html](http://www.chem.saitama-u.ac.jp/takayanagi-lab/VASP_manual/page02.html)(アクセス 2016/02/27).

# 謝辞

本研究を進めるにあたり、有益なご指導及び有助言を賜り、関西学院大学 理工学 部 情報科学科 西谷滋人教授に深く感謝するとともに心より御礼申し上げます。また研究に関する有益なご助言を頂戴しました清原資之氏をはじめとする関西学院大学理工学部情報科学科西谷研究室に在籍しております皆様およびご卒業された先輩後輩の方々にも深く感謝の意を表します。心より御礼申し上げます。ありがとうございました。