

Mg-Zn-Y-LPSO合金中のクラスターと添加元素の相互作用の第一原理計算

関西学院大・理工

清原資之, 西谷滋人, 久保里佳, 坂本雄一, 山本洋佑

Interaction energy between cluster and additions in Mg-Zn-Y-LPSO

Department of Informatics, Kwansai Gakuin Univ.,

M. Kiyohara, S. R. Nishitani, R. Kubo, Y. Sakamoto, and Y. Yamamoto.

目的: 熊大・河村らによって2001年にMg-Zn-Y合金で発見されたLPSO(Long Period Stacking Order)構造は、積層欠陥と溶質原子が長周期に規則的に並んでいる[1]。この新奇的な構造の生成機構について我々は、溶質原子主導あるいは積層欠陥主導のいずれが律速しているかを第一原理計算によって検証してきた[2]。結果をまとめると、溶質原子の中距離規則は認められず、また、積層欠陥の周期的な導入は期待されるほど大きなエネルギーを示さない。一方で、YとZnが共存する層においては積層欠陥が非常に導入されやすいという結果が得られている。今回は溶質原子が構成するL₁₂クラスターとY, Znペアとの相互作用についてエネルギー的な検証を構造緩和なしで求めたが、今回は構造緩和を取り入れて検証を進めた。

方法: 第一原理計算には、VASP(Vienna ab initio simulation package)を使用した。18周期を積層させたスラブモデルの中に、江草[3]、岸田ら[4]が報告しているクラスターを埋め込む。このモデルにY, Zn溶質原子両方を同時に1原子ずつ加えて、クラスターから離れた位置に配置しそのエネルギー変化を求めた。

結果: 図1にY-Znペアを配置した時の緩和前、緩和後のエネルギー変化を示した。全系のエネルギーを縦軸に取り、横軸には配置したY-Znペアがクラスター位置からどれだけ離れているかを示している。全体的な傾向として、緩和前はクラスターから1層離れた層で最安定となり、2層目でエネルギー値が上がった後、クラスターから離れるにつれて減少していった。緩和後の結果はペアがクラスターから離れるにつれてエネルギーは単調に減少している。これは、Yを個別に挿入した場合の結果と同様で、Y-Znペアを挿入した場合も積層欠陥部に偏析したクラスターから掃き出されている事を示唆している。

[1] Y Kawamura, K Hayashi, A Inoue, T Masumoto, Mater. Trans., **42**(2001) 1172.

[2] Y. Yamamoto, Y. akamoto, Y. Masaki and S. R. Nishitani, Mater. Trans. **54**(2013), 656.

[3] D. Egusa, E. Abe, Acta Mater., **60**(2012), 166.

[4] H. Yokobayashi, K. Kishida, H. Inui, M. Yamasaki, Y. Kawamura, **59**(2011), 7287.

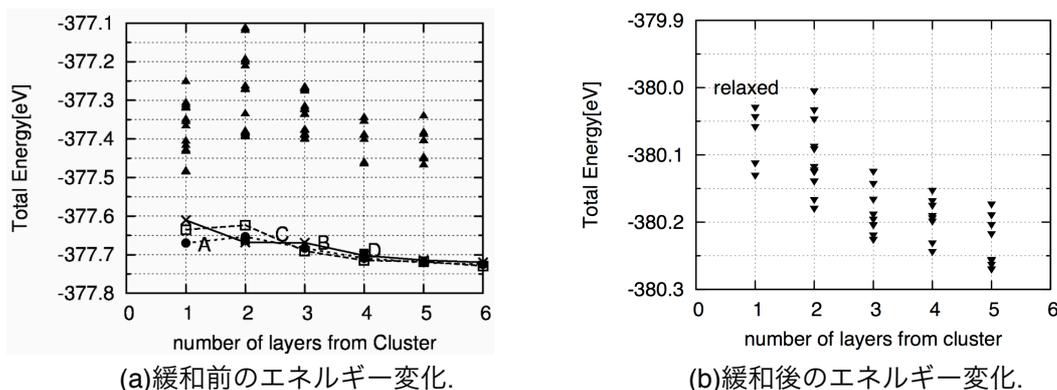


図1: Zn-Yペアの位置による全系のエネルギー変化.