

## Mg-LPSO 合金の形成機構の第一原理計算を用いた検証

関西学院大・理工

西谷滋人, 久保里佳, 清原資之, 坂本雄一, 山本洋佑

First principles calculations on the formation of Mg-LPSO structure

Department of Informatics, Kwansei Gakuin Univ.,

S. R. Nishitani, R. Kubo, T. Kiyohara, Y. Sakamoto, 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程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L<sub>12</sub>クラスターと溶質原子との相互作用についてエネルギー的な検証を行った.

**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. YおよびZn溶質原子をさらに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の結果を示した. 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. 同じ層内でもクラスターとの相対的な位置によっていくつかの配置が存在するため、その違いによりエネルギー値が微妙に変わっている. しかし、全体的な傾向としてはクラスターから遠ざかるにつれてエネルギーが低下していることが読み取れる. また、その値は0.2eV程度である. 一方Znについてはこのような明瞭な傾向は認められなかった. これはY原子がMgに比べて大きな半径を有するため、クラスター領域から掃き出されていることを示唆している.

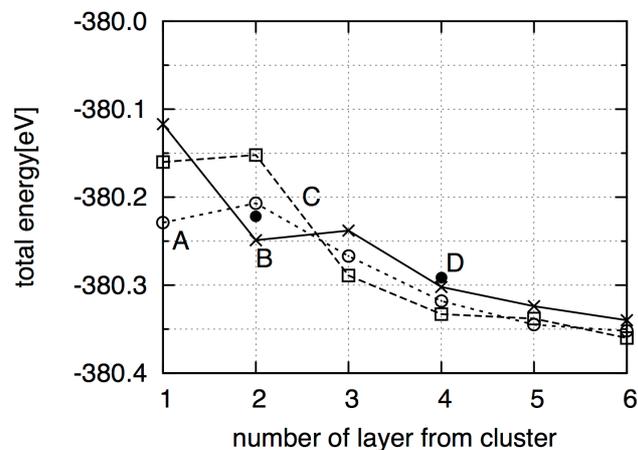


図1: Yの位置による全系のエネルギー変化.

- [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.