

# Mg-LPSO 構造の L<sub>12</sub> cluster と溶質原子の相互作用の精密計算

関西学院大, 理工  
日山太智, 西谷滋人

## First principles calculations of the interaction between L<sub>12</sub> cluster and Y in LPSO Mg-Zn-Y system

Dept. of Informatics, Kwansei Gakuin Univ.

T. Nishiyama and S. R. Nishitani

■背景 我々は, Mg-LPSO 合金における LPSO 構造の生成機構について第一原理計算による検証を行ってきた. 前報 [1] では, 孤立した Y 溶質原子は L<sub>12</sub> クラスタから 5, 6 層離れた位置において安定化しなかった. これは small cluster と L<sub>12</sub> クラスタの中周期の安定化を支持する結果であった. しかし, 孤立した溶質原子の計算は k-points mesh を  $5 \times 5 \times 1$  で行ったため, 計算精度が不十分であった可能性がある. そこで k-points mesh を  $10 \times 10 \times 2$  に変更し, 精度を高めて再計算を行なった.

■手法 前回の計算 [1] から変更したのは, k-points mesh だけである. 系は前回と同じで, Mg273, Zn6, Y9 を 24 層のスラブモデルに配置した. 図 1 に示した通り, 溶質原子 Y を 2, 3 層にある L<sub>12</sub> クラスタから 1 層ずつ離れた位置に挿入する. 挿入サイトは, 図 1 の A,C 層に示した. k-points  $5 \times 5 \times 1$  で構造緩和を行った原子位置をそのまま使用している.

■結果 k-points mesh を細かくしたために, 計算は非常に長くなる. 今までに得られている第 0, 2 近接位置の結果を図 2 に示した. k-points  $5 \times 5 \times 1$  と  $10 \times 10 \times 2$  で得られたエネルギーを, L<sub>12</sub> クラスタと溶質原子 Y の層間距離に対して表示している.  $5 \times 5 \times 1$  と比べて  $10 \times 10 \times 2$  は, エネルギー値は全体的に上昇しているが, エネルギー値の変化は定量的にも同じである. これは系のサイズが一緒であることに起因している [2]. したがって精度を上げて再計算を行なったが, 得られた結果に変化はなく, 溶質原子は small cluster を形成することで中距離で安定化するという結論を支持している [3].

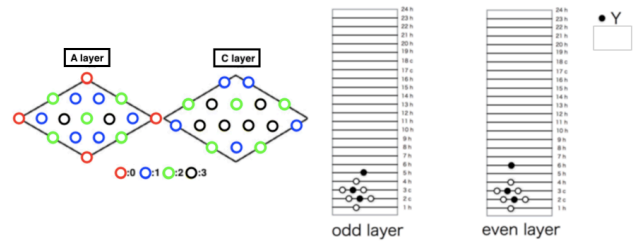


図 1 左図は hcp-Mg の A,C 面での挿入サイト, 右図は L<sub>12</sub> クラスタと溶質原子 Y の挿入位置を示す模式図 (スラブモデル) を示している.

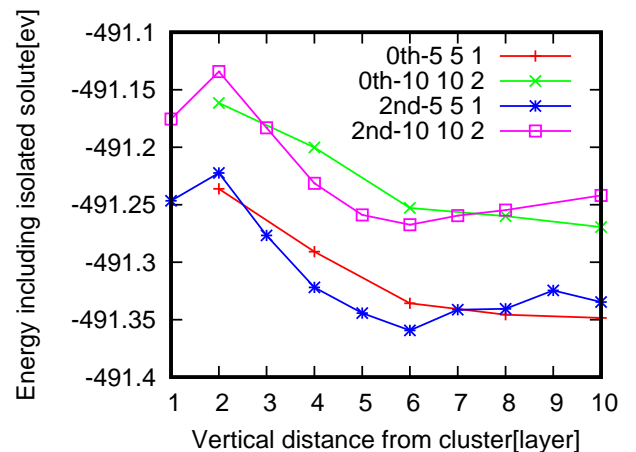


図 2 L<sub>12</sub> クラスタと溶質原子 Y との相互作用エネルギーの層間距離による変化. 第 0, 2 近接位置において k-points  $5 \times 5 \times 1$  と  $10 \times 10 \times 2$  の結果を示している.

- [1] 日山太智, 西谷滋人, 日本物理学会講演概要集, 第 74.1 巻 16pS-PS-89(2019).
- [2] 西谷他, 軽金属, 第 69 巻 10 号 (2019), 印刷中.
- [3] 森下慎也, 西谷滋人, 日本物理学会講演概要集, 第 72.2 巻 24pA45-5(2017).