

Mg-LPSO 構造の L₁₂cluster と溶質原子の相互作用

関西学院大, 理工学部

日山太智, 西谷滋人

Interaction between L₁₂ cluster and single solute in Mg-LPSO

Kwansei Gakuin Univ., Dept. of Informatics,

Taichi Nishiyama and Shigeto 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. ごく最近, 「溶質原子拡散が律速段階」という仮説を支持する, small cluster と L₁₂ クラスターの中周期的安定化を示唆する結果が得られた [1]. 一方で, 孤立した溶質原子との中距離相互作用は検討が十分ではなかった. そこで本研究では, 第一原理計算 VASP を用いて中距離相互作用の有無を確かめた.

■手法 計算に用いた 24 層のスラブモデルの模式図を図 1 に示した. 2, 3 層に積層欠陥を挿入し, そこに L₁₂ クラスターを配置している. 溶質原子 Y を L₁₂ クラスターから 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.

■結果 図 2 に L₁₂ クラスターと溶質原子 Y の層間距離と系全体のエネルギー変化を示した. 最安定のエネルギーを結んだ線は第 6 層において最低値を示しており, その後上昇しているが, 最低値から増大した差は 0.02eV 程度である. 一方, 同時に記した small cluster とのエネルギー変化は 0.08eV 程度で, 孤立した溶質原子よりも明らかに大きな変化となっている [1]. したがって, 孤立した溶質原子では中距離の相互作用は認められず, 溶質原子は small cluster を形成することで中距離で安定化することを示唆している.

[1] 森下慎也, 西谷滋人「Mg-LPSO における L₁₂ クラスターとスモールクラスターの相互作用」, (日本物理学会 2017).

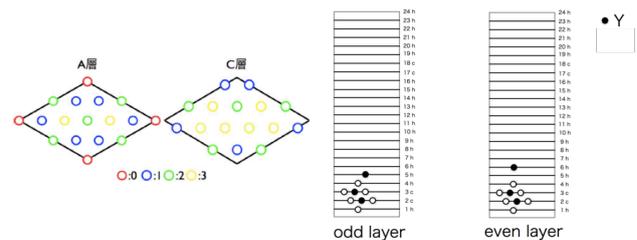


図 1 L₁₂ クラスターと溶質原子 Y(+) の挿入位置を示す模式図. 上面図は hcp-Mg の A,C 面での挿入サイトを示している.

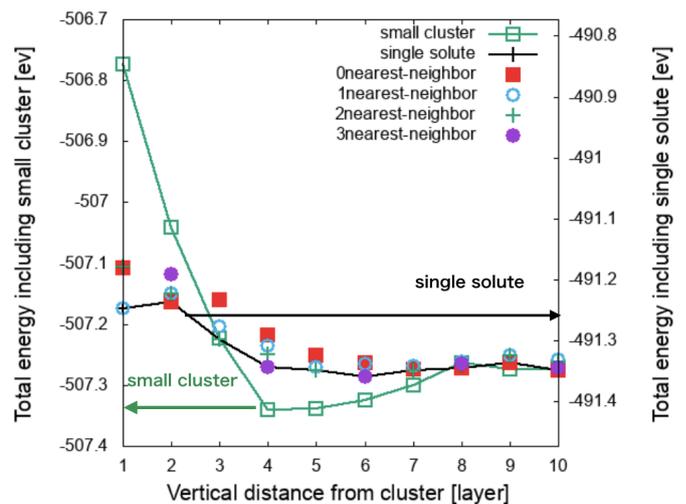


図 2 L₁₂ クラスターと small cluster(□) および溶質原子 Y(+) との相互作用エネルギーの層間距離による変化.