

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 クラスターの中間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間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 を用いて中間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間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間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).

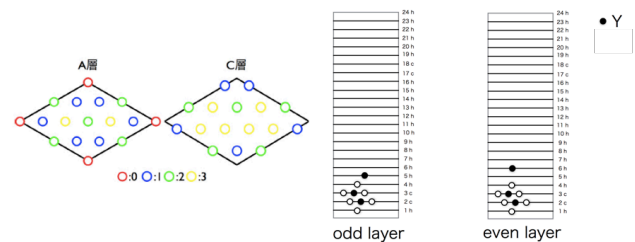


図 1 L₁₂ クラスターと溶質原子 Y(+) の挿入位置を示す模式図. 上面図は hcp-Mg の A,C 面での挿入サイトを示している.

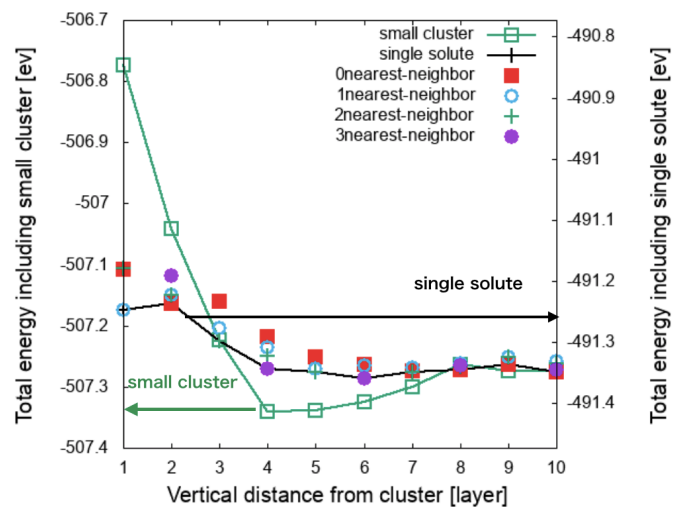


図 2 L₁₂ クラスターと small cluster(□) および溶質原子 Y(+) との相互作用エネルギーの層間距離による変化.