

# Mg-LPSO 構造における相互作用の精密評価

関西学院大, 理工

日山太智, 岡本雄大, 森下慎也, 西谷滋人

## Precise assessment of first principles calculations on Mg-LPSO

*Dept. of Informatics, Kwansei Gakuin Univ.*

T. Nishiyama, Y. Okamoto, S. Morishita and S. R. Nishitani

■背景 我々は新材料である Mg-LPSO 合金で未だ解明されていない LPSO 構造の生成機構について理論的に取り組んでいる。Mg は軽量であるが、可燃性が高く、耐食性が悪いため実用化されていない。2001 年に熊本大学の河村教授によって開発された LPSO 構造を持った Mg 合金はジュラルミンを上回る機械特性を持っているため、次世代の航空機の材料として世界中から注目を集めている。しかし新材料として活用するためには組織制御が不可欠であり、そのためには LPSO 生成機構の解明が必要である。我々は LPSO 構造の生成機構において、形成過程を先導するのは積層欠陥の導入ではなく、溶質原子の中距離濃化であるとして、第一原理計算に取り組んできた [1]。本研究では、 $L_{12}$  クラスタと small cluster および溶質原子の相互作用の距離依存性の精密計算を [2] 報告する。

■手法 第一原理計算には VASP を使用した。図 1 に Mg 合金の構造モデルを示した。積層欠陥を含む長周期構造のスラブモデルを表している。図 1 のように  $L_{12}$  クラスタを積層欠陥部に、small cluster および溶質原子 Y を一層ずつ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 2 はエネルギーを縦軸に取り、横軸には配置した small cluster および溶質原子 Y が  $L_{12}$  クラスタからどれだけ離れているかを表している。溶質原子 Y は単調に減少しており、極小値はみられない。一方で small cluster は第 4-6 層で極小値を取り、中距離において安定化している。これにより溶質原子単体ではなく、small cluster として中距離で安定化する傾向を示している。よって本研究では「積層欠陥部に  $L_{12}$  クラスタが形成され、そこから排斥された溶質原子 Zn, Y が中周期的に small cluster として濃化し新たな積層欠陥を誘発する」というシナリオを [3] 支持する結果となった。

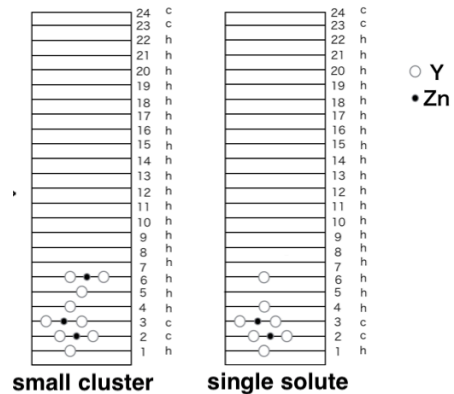


図 1  $L_{12}$  クラスタと small cluster, 溶質原子 Y の挿入位置を示すスラブモデルの模式図。

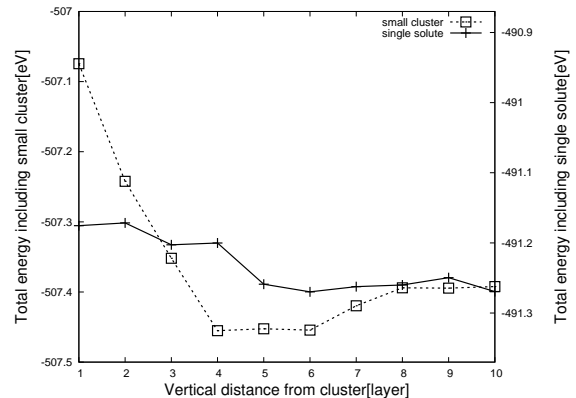


図 2  $L_{12}$  クラスタと small cluster(□), および溶質原子 Y(○) との相互作用エネルギーの層間距離による変化。

- [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), p.518.
- [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).