

# Al 粒界エネルギーへの添加元素の影響

情報科学科 27018552 百合 慶将

## 1 序論

### 1.1 研究の背景

ジュラルミンを作る際は微小なクラスタと呼ばれる領域が Al 中にできる。それが硬度上昇の要因となる。クラスタは硬度に関係があり、脆さとは関係がない。脆さの要因となっているのは粒界偏析と考えられている [1]。粒界偏析は粒界にある場合と粒内にある場合でエネルギーが異なる。この差を有限温度第一原理計算 [2] により再現できるかどうかを本研究の目的とした。

## 2 手法

最初に粒界のモデルを作成する。結晶は unit cell で構成される。これを  $x$  軸方向に 3 倍、 $y$  軸方向に 3 倍、 $z$  軸方向に 1 倍拡張し、rotate(回転操作) する。

次に boundary の場所を見つけ、座標を取り出し、cut(削除操作) する。得られたモデルを mirror(鏡映操作) し、削除すべき原子を選びリストアップして実行する。今回は最初 52 個の原子が表示されるが、計算時間を削減するために 40 個まで削除する。

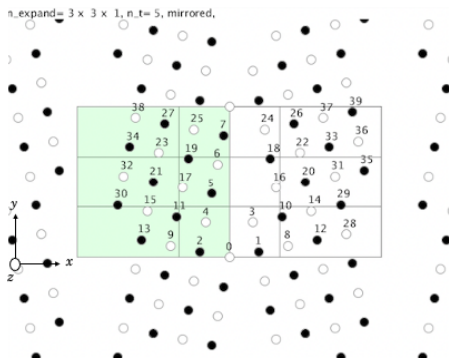


図 1 緩和前の mirror 操作及び不要原子を消したモデル。

図 1 は mirror(鏡映操作) を行い、52 個の原子から 40 個まで削除した緩和計算前に対応するモデルである。周期的境界条件から真ん中及び、左右に粒界が存在している。白丸、黒丸は  $z$  軸方向に 0.5 前後している。しかし両端にある粒界の部分に空白がある。外部の  $x$  軸を変化させると空白が埋まりエネルギーが安定化する。

relax(緩和, 最適化) 計算は計算サーバを用いて行う。計算結果から得られたデータをグラフ化する。

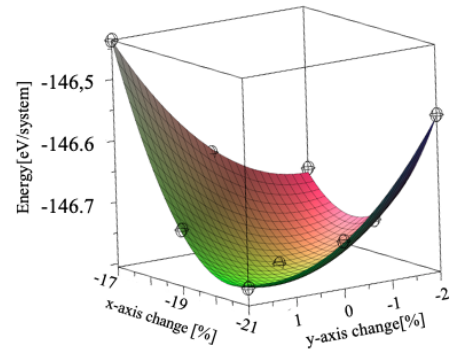


図 2 図 1 のモデルを  $x$  軸、 $y$  軸を変化させて緩和したエネルギー変化。

## 3 結果

図 2 の  $x$  軸は、図 1 の横軸、 $y$  軸は縦軸に対応している。 $z$  軸はエネルギーである。グラフから最安定の  $x, y$ 、今回は  $(-19.5685, 0.3217)$  で再度内部緩和を行った。得られた最安定な原子配置を図 3 で示した。

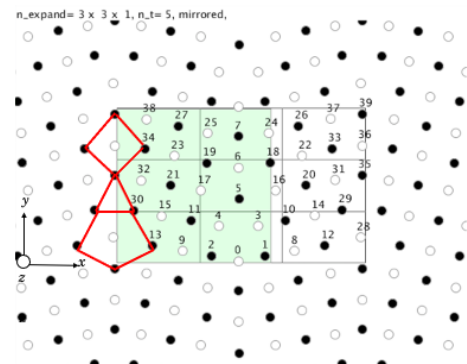


図 3 最安定の  $x, y$  で内部緩和を行った時の最安定な原子配置。

粒界近傍は空白部分が埋まり、粒界を形成している。粒界はこの方位に特徴的な五員環 (pentagonalbipyramid) と、四員環、三員環で構成されている。

## 4 今後

今回作成した粒界モデルの元素を置き換える。得られたモデルを有限温度の計算で実行していくことで析出傾向を検討する。

## 参考文献

- [1] 松田健二, まてりあ, 60, (2021), 404-410.
- [2] S. R. Nishitani, Phil. Mag., 101, (2021), 622-642.