

# 小傾角粒界エネルギーの視覚化を容易にするソフト開発

関西学院大学 情報科学科 西谷研究室 1549 成田大樹

## 1 はじめに

未だ、Read-Shockley と大槻の双方による小傾角粒界エネルギーの実験結果における矛盾が解明されていない。

具体的に、Hasson らによるシミュレーション結果では、小傾角粒界エネルギーの 0 度、及び 90 度に相当する立ち上がりの傾きが異なる形で表示された。これに対し、大槻のシミュレーション結果では、小傾角粒界エネルギーの 0 度、及び 90 度に相当する立ち上がりの傾きが左右対称であった [?]。

西谷研究室では、小傾角粒界エネルギーによるこの矛盾を解くために様々な手法をこれまで試してきたが、未だ解明されていない。そこで本研究では、原子の配置や粒界エネルギーの高低差を視覚的に検証し易くするためのソフト開発である。

## 2 現状

実験結果の矛盾を解くために、第一原理計算ソフト VASP や原子間ポテンシャルを使ったシミュレーションをはじめ、Sutton Vitek による粒子モデルの研究に取り組んできた。粒子シミュレーションのモデル作成アルゴリズムをおこなった八幡の研究では、再安定の原子配置での計算ができず、実験データは Read-Shockley の理論予測となり、矛盾点を解明できなかった。

また、岩佐は最安定な原子配置をとるために原子の削除操作をおこない、第一原理計算ソフト VASP を用いて構造緩和し、系全体のエネルギーを計算した。岩佐のこの研究は、周期的境界条件のなかで削除操作ができ、予測通りに小傾角粒界エネルギーが低い結果となったが、

できなかった vs できたけどしなかった。viewer による安定構造の検証をしなかったために、構造緩和に過ちがあった。

## 3 手法

ソフトウェア設計は、「機能」場所が明確に分離でき、開発作業の分業化が比較的容易である、「MVC モデル」で作成する。

POSCAR 形式の POSCAR.txt を作成し、小傾角粒界の原子モデルを視覚的に確かめるためのモデル viewer を「SVG」で作成する。また、SVG の「描画」については、Ruby で「2 次元」の視覚化を容易に実現する 2 次元画像描画ライブラリ「Cairo」を用いて、粒界原子の構造を表示する。「Cairo」を使用することで、ベクトルベースのため、曲線や文字を描画

しやすく、様々な画像フォーマットで描画することが可能になる。

## 4 今後の課題

原子の配置と小傾角粒界エネルギーの「高低差」を多面的角度で「描写」することを「簡易化」する。「これは、岩佐の研究において、原子が  $z$  軸方向に動いていることを表示できなかったことが構造緩和の過ちの原因であるため、」

## 参考文献

- [1] 「小傾角粒界粒子シミュレーションの原子ポテンシャル依存性」、八幡裕也 (関西学院大学 理工学部研究科情報科学専攻 修士論文 2015)。
- [2] 「原子削除操作を加えた対称傾角粒界のエネルギー計算」、岩佐 恭佑 (西学院大学 理工学部研究科情報科 学士論文 2016)。
- [3] cairo: 2 次元画像描画ライブラリ, 須藤功平, Rubyist Magazine - るびま, Vol.54 (2016-08)。