

# 卒業論文

## 三面図を利用した粒界原子配列の視覚化

関西学院大学 理工学部 情報科学科

1549 成田 大樹

2017 年 3 月

指導教員 西谷 滋人 教授

## 目次

1	概要	3
2	MVC モデル	3
3	原子配列を表示するソフト"view"	4
4	三面図の使用	4
5	各関数の機能	5
5.1	read_pos . . . . .	5
5.2	identical_atoms . . . . .	5
5.3	mk_deleted_atom . . . . .	5
5.4	draw_exes . . . . .	5
5.5	draw_atoms . . . . .	5
5.6	pos_y . . . . .	5
5.7	open_circle . . . . .	5
5.8	draw_each_plane . . . . .	5
5.9	find_max . . . . .	5
5.10	main_draw . . . . .	5
6	削除した原子を色分けして表示	9
7	relax 前後の原子移動を表示	9
8	Read-Shockley の理論	10
9	計算方法	14
10	研究結果と反省	14

## 目次

## 1 概要

本研究では，原子配列を容易に視覚化しやすくするためのソフト開発をおこなう．なお，ソフト開発は MVC モデルで作成していく．

## 2 MVC モデル

web application の開発において取られている手法であり，データを処理する Model, 画面に結果を出力する View, 処理機能を制御する Controler の機能が明確に分離されている．

MVC モデルをおこなうことで，機能を直交化することができ，開発作業の分業化しやすく， 処理結果を画面表示する機能構築に特化した開発が可能となる．

### 3 原子配列を表示するソフト"view"

本研究で開発する"viewer"は、小傾角粒界の原子モデルを視覚的に確かめるためのソフトであり、VASPの入出力で採用されているPOSCAR形式のファイルを入力とし、SVGで出力する。SVGには、以下の特徴がある。ベクトルベースによるため、曲線や文字の拡大縮小しても画質が劣化することなく表示できる、汎用性が高く、画像表示や変換の処理が容易にできる。なお、SVGの生成には、Ruby言語で視覚化を容易に実現できる2次元画像描画ライブラリ"Cairo"を用いる。

### 4 三面図の使用

三面図は、立体を正面図、平面図、側面図の三方向からみて投影した図を展開したもので、立体の形状を2次元上で適切に表示することが出来る。実際に、三面図を使用したPOSCAR\_2223の原子配置は図のように表示される。

## 5 各関数の機能

5.1 read\_pos

5.2 identical\_atoms

5.3 mk\_deleted\_atom

5.4 draw\_exes

5.5 draw\_atoms

5.6 pos\_y

5.7 open\_circle

5.8 draw\_each\_plane

5.9 find\_max

5.10 main\_draw

(Al)4 (Fm-3m)

1.0000000000000000

11.3867605961746481	0.0100935929319685	-0.0017461789180479
0.0041105062482931	6.3305944602789737	-0.0005256693932857
-0.0010552304551614	-0.0005576642430577	7.7999169997776718

-0.112458518905E+03

dF-31\*(-3.739501247) %=> 3.4660198

3.4660198/(6.3305944602789737\*7.7999169997776718)\*1.60218\*10/2

Full relax の最安定 energy は, 0.5623126780

xx=0.9899786872, yy=1.007043146

であるが, fix の-3\_1において,

-3	1	11.15697	6.34918	8.08280	-112.35392	0.5573720133794792
----	---	----------	---------	---------	------------	--------------------

とそれより小さな値が出ている.

もう少しその方向で上がるまで計算を追加する必要がある.

cat 2223\_ind.txt

-6	1	10.81190	6.34918	8.08280	-112.30642	0.5647867426403657
-6	2	10.81190	6.41205	8.08280	-112.3123	0.5583407509605174
-6	3	10.81190	6.47491	8.08280	-112.29352	0.5557945934739222
-6	4	10.81190	6.53777	8.08280	-112.25456	0.5563566217861508

-5	1	10.92692	6.34918	8.08280	-112.36269	0.5560030202085747
-5	2	10.92692	6.41205	8.08280	-112.34929	0.5526232371583745
-5	3	10.92692	6.47491	8.08280	-112.31201	0.5529643568367403
-5	4	10.92692	6.53777	8.08280	-112.25093	0.5569069177758106

-4	0	11.04194	6.28632	8.08280	-112.38303	0.5583562346401736
-4	1	11.04194	6.34918	8.08280	-112.38191	0.5530027866002744
-4	2	11.04194	6.41205	8.08280	-112.35048	0.5524392998395155
-4	3	11.04194	6.47491	8.08280	-112.29313	0.5558542901904441
-3	-1	11.15697	6.22346	8.08280	-112.3816	0.5642239285248216
-3	0	11.15697	6.28632	8.08280	-112.37952	0.5589096232023381
-3	1	11.15697	6.34918	8.08280	-112.35392	0.5573720133794792
-3	2	11.15697	6.41205	8.08280	-112.30236	0.5598771685650941
-2	-2	11.27199	6.16059	8.08280	-112.38376	0.5696338188082548
-2	-1	11.27199	6.22346	8.08280	-112.38698	0.563367146901053
-2	0	11.27199	6.28632	8.08280	-112.36558	0.5611074113950909
-2	1	11.27199	6.34918	8.08280	-112.32077	0.562546713905762
-2	2	11.27199	6.41205	8.08280	-112.25037	0.5679132199998959
-1	-2	11.38701	6.16059	8.08280	-112.37613	0.5708613188749168
-1	-1	11.38701	6.22346	8.08280	-112.36337	0.5671271123540664
-1	0	11.38701	6.28632	8.08280	-112.32574	0.5673886080664855
-1	1	11.38701	6.34918	8.08280	-112.26303	0.5715599026957316
-1	2	11.38701	6.41205	8.08280	-112.17362	0.5797764042203458
0	-2	11.50203	6.16059	8.08280	-112.33666	0.5772111783285478
0	-1	11.50203	6.22346	8.08280	-112.3085	0.5758653293979867
0	0	11.50203	6.28632	8.08280	-112.25474	0.5785825077569731
0	1	11.50203	6.34918	8.08280	-112.17344	0.5855448625795808
0	2	11.50203	6.41205	8.08280	-112.07095	0.5956460214700341

1	-2	11.61705	6.16059	8.08280	-112.26554	0.5886528303260675
1	-1	11.61705	6.22346	8.08280	-112.22402	0.5893190304344416
1	0	11.61705	6.28632	8.08280	-112.15653	0.5940663512584203
1	1	11.61705	6.34918	8.08280	-112.06291	0.6027985473207549
1	2	11.61705	6.41205	8.08280	-111.94264	0.6154787923798172

2	-2	11.73207	6.16059	8.08280	-112.16641	0.604600678505402
2	-1	11.73207	6.22346	8.08280	-112.10922	0.6076012851572761
2	0	11.73207	6.28632	8.08280	-112.02921	0.6141396936329679
2	1	11.73207	6.34918	8.08280	-111.92426	0.6244417517843739
2	2	11.73207	6.41205	8.08280	-111.79417	0.6384276778678974

だが、最安定は、

-4	2	11.04194	6.41205	8.08280	-112.35048	0.5524392998395155
----	---	----------	---------	---------	------------	--------------------

その周りも同じ程度の値.



## 6 削除した原子を色分けして表示

前研究者の岩佐が取り入れた原子の削除操作で，消された原子の位置を明確にするためにおこなった．実際に，三面図での原子配置を図のように表示した．

## 7 relax 前後の原子移動を表示

## 8 Read-Shockley の理論

小傾角粒界の粒界エネルギーは、Read-Shockley によって提案された転位が等間隔に並んだモデルによって計算できる。このモデルの特徴のひとつとして、(001)tilt 粒界において、幾何学的に要求される転位のバーガースベクトルが異なるため、その立ち上がり角度に違いが出ることもある。図に示す通り、 $\eta=0$  近傍では、fcc のユニットセルの大きさ  $a$  に等しいバーガースベクトルのずれによって粒界の両側にある原子の並びが一致する。一方で、 $\theta = 90^\circ$  近傍では (110) 方向粒界があるため、幾何学的に要求されるバーガースベクトルは  $a/\sqrt{2}$  と、小さくなる。Read-Shockley が転位論から導いた粒界エネルギーの理論式の導出は次の通りである。このようにして求められたエネルギーは傾角が小さい領域では、 $E_0$  に比例するが、これは、 $E_0 = \frac{b\gamma_0}{2}$  となり、バーガースベクトル  $b$  に比例している。この理論予測は、最近行われた EAM 経験的ポテンシャルを用いた Tschopp-Mcdowell によるシミュレーション結果によっても再現されており、信頼できる結果として広く認知されている。

対称傾角粒界のエネルギーの角度 0 度、及び 90 度 に相当する立ち上がりが異なる結果となった。

a

test

test

## 9 計算方法

原子モデルの削除操作を行い最安定の構造を求める研究をおこなった。小傾角粒界の原子モデルの作成には、西谷研究室で開発された3つのツールを使用した。3つのツールの各機能は、具体的に以下の通りである。

拡張するサイズや傾ける角度を指定して対称傾角粒界を作成する maker,

小傾角粒界の原子モデルを描画出力する viewer

エネルギーの高い原子で原子の配置番号が奇数のものを削除する adjuster

また、小傾角粒界の構造緩和は、第一原理計算ソフト VASP を使用し、系全体のエネルギーを計算した。

## 10 研究結果と反省

削除を用いた本シミュレーションでは大槻の実験結果を支持する値となり、大槻の原子モデルよりも安定した構造が得られた。したがって、粒界エネルギーの立ち上がり0度付近の最安定の構造を求める目的は達成できた。しかし90度付近の傾きの結果は得られていないので矛盾を解明することはできなかった。これは、粒界がより低い角度になった状態を計算しており、原子が全体的に傾いた構造になっていたためである。この構造緩和の過ちは、安定構造の原子配置を視覚的に確認しなかったことで生じた。

2223 モデルの計算結果を記す.

---

```

1
2 (Al)4 (Fm-3m)
3 1.0000000000000000
4 11.3867605961746481 0.0100935929319685
   -0.0017461789180479
5 0.0041105062482931 6.3305944602789737
   -0.0005256693932857
6 -0.0010552304551614 -0.0005576642430577
   7.7999169997776718
7
8
9 -0.112458518905E+03
10
11 dF-31*(-3.739501247) %=> 3.4660198
12
13 3.4660198/(6.3305944602789737*7.7999169997776718)
   *1.60218*10/2

```

---

Full relax の最安定 energy は, 0.5623126780

xx=0.9899786872, yy=1.007043146

であるが, fix の-3.1 において,

-3 1 11.15697 6.34918 8.08280 -112.35392 0.5573720133794792

とそれより小さな値が出ている.

もう少しその方向で上がるまで計算を追加する必要がある.

Absolute interfacial energies of [001] tilt and twist grain boundaries in copper. Acta Metallurgica, Vol. 7, May 1959, 319. N.A.Gjostein and F.N.Rhines, Fig.4. Dependencies of grain boundary energy on misorientation for [001] tilt boundaries at 1065C. Solid line represents the curve calculated from equation (1), using the large angle parameters.

```

#Murakami-0
13.000 0.227 -1.483 646.970 2851,435
10.811 0.189 -1.668 560.606 2971.081

```

9.324	0.613	-1.816	540.909	3323.874
-------	-------	--------	---------	----------

#Murakami\_90

7.838	0.137	-1.989	356.061	2602.806
9.189	0.160	-1.830	400.000	2494.103
10.811	0.189	-1.668	431.818	2288.535
12.703	0.222	-1.506	490.909	2214.202
22.703	0.396	-0.926	671.212	1693.944

#Otsuki-0

10.000	0.174	-1.740	280.000	1609.195
7.300	0.127	-2.064	230.000	1811.024
5.000	0.087	-2.439	190.000	2183.908

#Otsuki-90

10.000	0.174	-1.740	280.000	1609.195
7.460	0.130	-2.040	230.000	1769.231
6.000	0.105	-2.256	207.000	1971.429

"Asymmetric tilt grain boundary structure and energy in copper and aluminium", M. A. TSCHOPPy and D. L. MCDOWELL, Philosophical Magazine, Vol. 87, No. 25, 1 September 2007, 3871-3892