

Al 粒界エネルギーの Mg 添加有限温度第一原理計算

関西学院大, 理工

百合慶将, 西谷滋人

物理学会 (13pPSB-9)

2022/9/12-15

研究の背景

- ・ジュラルミン
 - ・時効硬化型アルミニウム合金
 - ・時効温度(~500K)
 - ・同時に脆化
 - ・脆化の要因は粒界偏析 [1]
 - ・置換サイトが粒界と粒内でエネルギーは???
- ・5000系 (Mg添加)
 - ・Mgの原子半径はAlよりも大
- ・粒界, Mg 添加, 有限温度の第一原理計算[2]

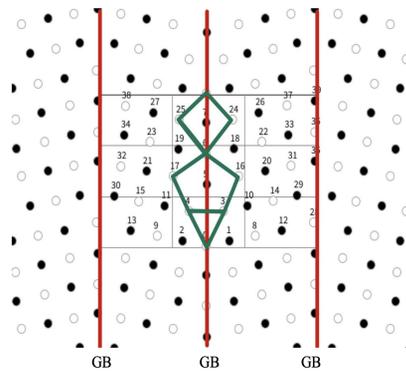
[1] 松田健二他, "Al-Mg-Si 合金の時効析出過程に関する最新の研究動向", まてりあ, 60, (2021), 404-410.
 [2] S. R. Nishitani, "Finite-temperature first-principles calculations of Al(100) symmetric tilt grain-boundary energy", Phil. Mag., 101, (2021), 622-642.

手法 I (VASP)

- ・第一原理計算に VASP (Vienna Ab initio Simulation Package) を使用.
- ・Al, Mg の擬ポテンシャルには PAW, PBE 法を使用.
- ・Al はs2p1, Mg はs2p0.
- ・カットオフエネルギーはPOTCARのデフォルトを使用.
- ・K-POINT は auto (parameter を 50に設定).

手法 II (計算モデル)

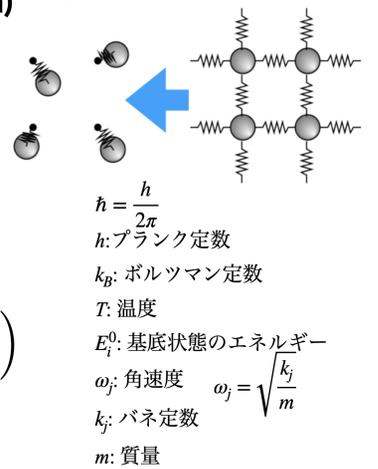
- ・粒界構造 Al <100> 対称傾角 (22.6°)
- ・Z = 1, 2 のモデルを使用



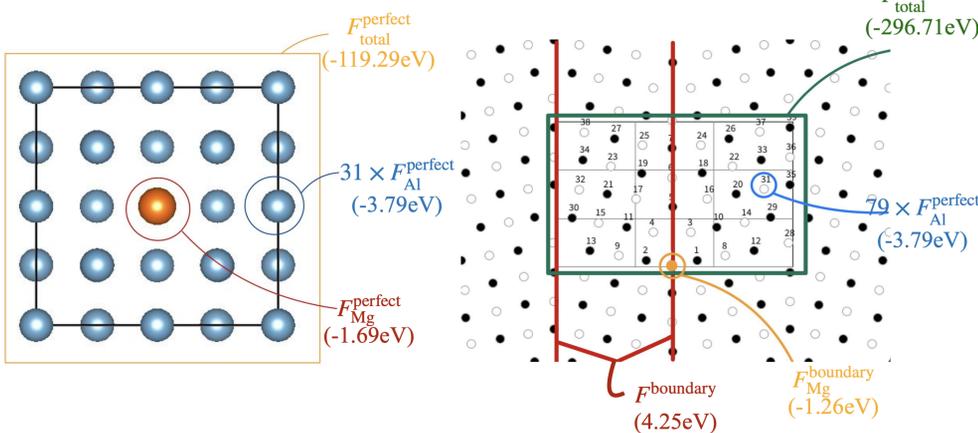
手法 III (Einstein)

- ・各原子を釘付けにしたEinsteinモデルを考える.
- ・原子それぞれのサイト i での有限温度での Helmholtz 自由エネルギー F_i は以下の式.

$$F_i = E_i^0 - k_B T \ln Z_i = E_i^0 - k_B T \sum_{j=x,y,z} \ln \left(\frac{\exp(-\hbar\omega_j/2k_B T)}{1 - \exp(-\hbar\omega_j/k_B T)} \right)$$

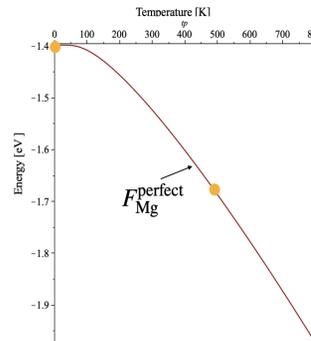


結果 I (完全結晶 Mg 固溶エネルギー $F_{Mg}^{perfect}$, 粒界 Mg 固溶エネルギー $F_{Mg}^{boundary}$)



結果 II (完全結晶 Mg 固溶エネルギー $F_{Mg}^{perfect}$)

- ・求められた $F_{Mg}^{perfect}$ をグラフ化.



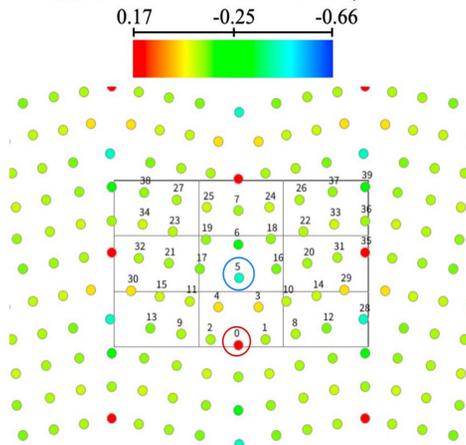
- ・0K, 500Kでのエネルギーの表.

Temperature	$F_{total}^{perfect}$	$F_{Al}^{perfect}$	$F_{Mg}^{perfect}$
0	-115.7767	-3.6897	-1.40
500	-119.2884	-3.7936	-1.69

結果 III (2層80原子, 0Kでの結果とスペクトル表示)

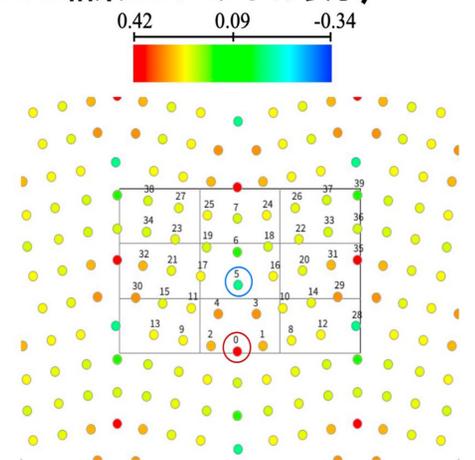
- ・計算を各 site で実行.
- ・ $F_{Mg}^{perfect}$ との差, $F_{Mg}^{boundary} - F_{Mg}^{perfect}$

site	$F_{Mg}^{boundary}$	$F_{Mg}^{boundary} - F_{Mg}^{perfect}$
0	-1.2269	0.17
2	-1.6330	-0.23
5	-2.0624	-0.66
6	-1.7860	-0.39
7	-1.6193	-0.22



結果 IV (2層80原子, 500Kでの結果とスペクトル表示)

site	$F_{Mg}^{boundary}$	$F_{Mg}^{boundary} - F_{Mg}^{perfect}$
0	-1.2602	0.42
2	-1.5609	0.12
5	-2.0192	-0.34
6	-1.7122	-0.03
7	-1.5857	0.09



結果 V (1層 40原子での計算結果)

0K.

site	$F_{Mg}^{boundary}$	$F_{Mg}^{boundary} - F_{Mg}^{perfect}$
0	-0.6535	0.75
2	-0.9417	0.46
5	-1.4751	-0.08
6	-1.2116	0.19
7	-1.0339	0.37

500K.

site	$F_{Mg}^{boundary}$	$F_{Mg}^{boundary} - F_{Mg}^{perfect}$
0	-1.1853	0.50
2	-1.4348	0.25
5	-1.9419	-0.26
6	-1.6972	-0.02
7	-1.5282	0.15

まとめ

- ・2層 500 K モデルのとき
 - ・site 0 は +0.42eV エネルギーが上昇.
 - ・site 5 は -0.34eV エネルギーが低下.
- ・Mg の原子半径はAlよりも大きい.
 - ・粒界転位の中心となる site 5 は空隙が大きい.
- ・500K の有限温度でも安定化.
- ・この結果から Mg は粒界に偏析.