

EAM を用いた格子欠陥の歪み解析

関西学院大, 理工
河野大登, 西谷滋人

Strain analysis of lattice defects using EAM potential

Dept. of Informatics, Kwansai Gakuin Univ.

H.Kono and S. R. Nishitani

■背景 格子欠陥周辺の歪み解析を行う新しい手法を開発した。この手法は、EAM ポテンシャルを基礎に解析的に求めることが可能である。この手法を、AI の粒界に適用した結果を報告する。

■手法 第一原理計算により求めた初期構造と、EAM により求めた歪みを下にゆらぎ表示を行う。ゆらぎは、

$$de = k_x * x^2$$
$$x = \sqrt{de/k}$$

で求められる。de は、約 240 °C の温度において、約 0.044eV に相当する。ここで k は、粒界を表している。x の計算についてはプログラミング言語 Ruby を用い、粒界 k_x, k_y, k_z に対する x を各々 r_x, r_y, r_z とし、ファイルとして保存した。Ruby を用いて得た r_x, r_y, r_z を下に、Processing を用い Plot を行った。Plot する際、元データでは小さすぎるため、30 倍で表示した。

■結果 図 1 は今回のゆらぎ表示の結果である。粒界において、ゆらぎが最も大きいサイトの周辺においてもゆらぎが確認できる。

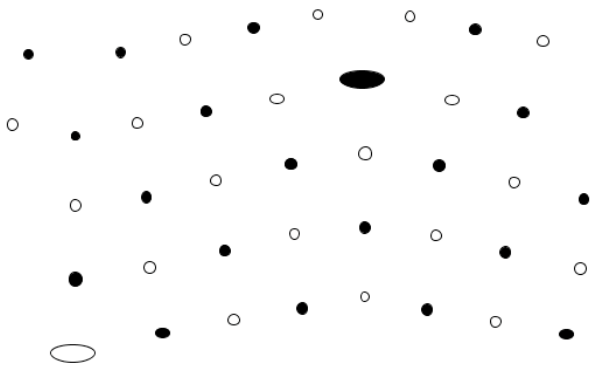


図 1 ゆらぎ表示.