

Al 粒界エネルギーの Mg 添加の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

Finite temperature first principle calculations on Mg added Al boundary energy

Dept. of Informatics, Kwansei Gakuin Univ.

Y. Yuri, S. R. Nishitani

■背景 ジュラルミンは Al 基地中に GP ゾーンが生成することで硬度が上昇する。同時に脆化が進行するが、これは粒界偏析が原因だと考えられる [1]。添加元素が粒界にある場合と粒内にある場合でエネルギーが異なり、これが粒界偏析のしやすさと関係がある。このエネルギー差を有限温度の第一原理計算 [2] により求めた。

■手法 図 1 の通り、Al $\langle 100 \rangle$ 傾角 22.6° の対称傾角粒界モデルで Mg を置換したモデルを用いた。自由エネルギー計算は Einstein モデルによる調和振動子近似を 500K で行なった。第一原理エネルギー計算には平面波基底擬ポテンシャル法で実装された VASP を用いた。

■結果 表 1 に示した通り、各 site で粒界モデル Mg 固溶エネルギー $F_{\text{Mg}}^{\text{boundary}}$ を求めた。その結果と完全結晶モデル Mg 固溶エネルギー $F_{\text{Mg}}^{\text{perfect}} = -1.68\text{eV}$ とのエネルギー差で Mg は粒界に偏析するかどうかを算出した。site 0 は $+0.43\text{eV}$ エネルギーが上昇し、site 5 は -0.13eV エネルギーが低下した。その他の site、特に粒内にある時はエネルギー差があまりなかった。Mg の原子半径は Al よりも大きく、粒界転位の中心となる site 5 は空隙が大きいため、500K の有限温度でも安定化することがわかる。この結果から Mg は粒界に偏析することが期待される。

- [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 $\langle 100 \rangle$ symmetric tilt grain-boundary energy”, Phil. Mag., 101, (2021), 622-642.

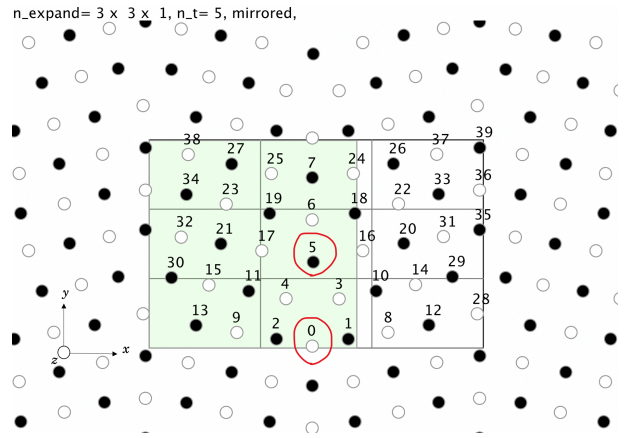


図 1 Al $\langle 100 \rangle$ 傾角 22.6° の対称傾角粒界モデル.

表 1 粒界モデル Mg 固溶エネルギー $F_{\text{Mg}}^{\text{boundary}}$, 粒界モデル Mg 固溶エネルギー $F_{\text{Mg}}^{\text{perfect}}$ と完全結晶 Mg 固溶エネルギー $F_{\text{Mg}}^{\text{perfect}}$ とのエネルギー差.

site	$F_{\text{Mg}}^{\text{boundary}}$ [eV]	$F_{\text{Mg}}^{\text{boundary}} - F_{\text{Mg}}^{\text{perfect}}$ [eV]
0	-1.2602	0.43
2	-1.4842	0.20
5	-1.8163	-0.13
6	-1.7122	-0.03
9	-1.5619	0.13
11	-1.5753	0.11
17	-1.5579	0.13
21	-1.5598	0.13
27	-1.5678	0.12