

Al 粒界エネルギーへの Mg, Zn 添加の有限温度効果

関西学院大・工

百合 慶将, 西谷 滋人, 堀川 恭平, 齋藤 優大

Finite temperature effect of Mg and Zn additions on Al boundary energy

Dept. of Informatics, Kwansei Gakuin Univ.

Y. Yuri, S. R. Nishitani, K. Horikawa, Y. Saito

■背景 実用材として広く使われているジュラルミンは、焼鈍によって Al 基地中での GP ゾーンの生成により硬化が進行するが、同時に粒界偏析により脆化する [1]. 粒界偏析は、添加元素が粒界か粒内のどちらにあるかに起因するエネルギーの違いに支配される。そこで、時効温度での自由エネルギーが問題となる。前回、Al 傾角粒界への Mg 添加による自由エネルギー変化を、有限温度の第一原理計算により求めた [2]. 今回はさらに Zn 添加の計算を行い、Mg との比較を行った。

■手法 Mg 置換と同様に、Al $\langle 100 \rangle$ 傾角 22.6° の対称粒界モデルに、Zn を置換したモデルを用いた (図 1). 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 [3]. 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 図 2 はそれぞれの site に Mg を添加し、500K でのエネルギー差を、site 20 を基準にしてスペクトル表示させたものである。図 3 は Zn での同様のプロットである。Mg と Zn の安定サイトは、大まかには原子半径の序列、Mg (0.16nm) > Al (0.14nm) > Zn (0.13nm) で理解できる。Mg では site 0 (tighter site) はエネルギーが上昇し、site 5 (looser site) はエネルギーが低下した。しかし、Zn では site 5 ではなく site 6 がエネルギーが上昇し、site 0 はエネルギーが低下した。発表では、この挙動を詳しく議論する。

- [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”, あたりあ, 60, (2021), 404-410.
- [2] 百合慶将 他, “Al 粒界エネルギーの Mg 添加の有限温度第一原理計算”, 日本物理学会, 2022-09-13, pPSB-9.
- [3] S. R. Nishitani, “Finite-temperature first-principles calculations of Al $\langle 100 \rangle$ symmetric tilt grain-boundary energy”, Phil. Mag., 101, (2021), 622-642.

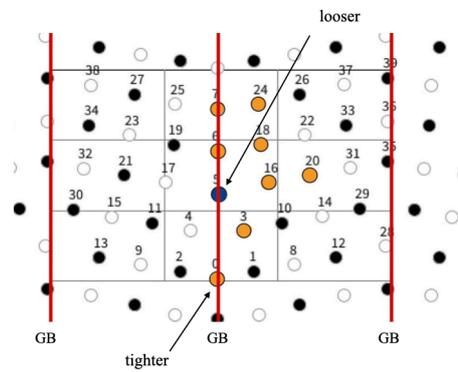


図 1 Al $\langle 100 \rangle$ 傾角 22.6° の対称傾角粒界モデル.

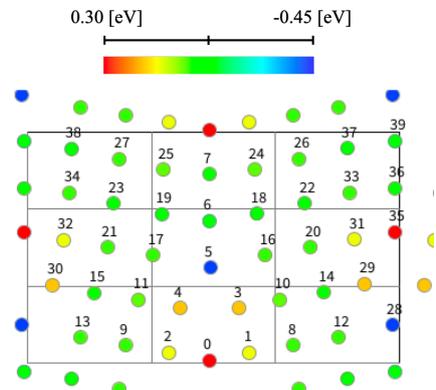


図 2 Mg 添加, 500K でのスペクトル表示.

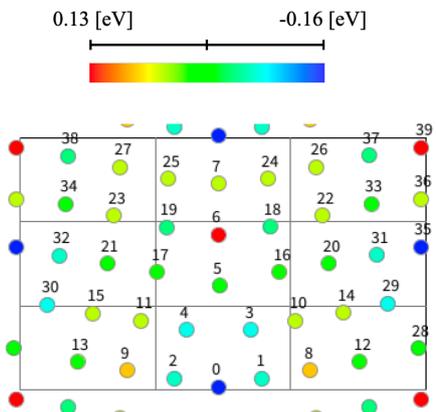


図 3 Zn 添加, 500K でのスペクトル表示.