

種々の Al 粒界への Mg 添加の有限温度第一原理計算

関西学院大・工

百合 慶将, 西谷 滋人, 堀川 恭平, 齋藤 優大

Finite Temperature First Principles Calculations of Mg Addition to Various Al Boundary Energy

Dept. of Informatics, Kwansai Gakuin Univ.

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

■背景 ジュラルミンは時効硬化型アルミニウム合金である。時効温度は高温であり、同時に脆化が進行する。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。前回、Al 傾角粒界への Mg 添加の有限温度の第一原理計算を報告した [2]。今回は Al $\langle 100 \rangle$ の対称ねじり粒界モデル [3] についての同様の計算を行った。

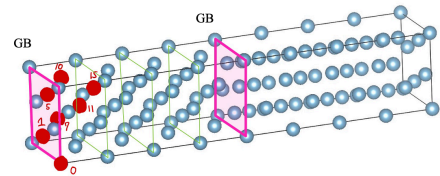


図1 Al $\langle 100 \rangle$ 対称ねじり粒界モデル.

■手法 図1の通り、Al $\langle 100 \rangle$ の対称ねじり粒界で Mg を置換したモデルを用いた。ここで GB はねじり粒界を、数字は site 番号を示す。また緑の枠はそれぞれの層を示すアイガイドラインである。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 0K, 500K で行なった [4]。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。

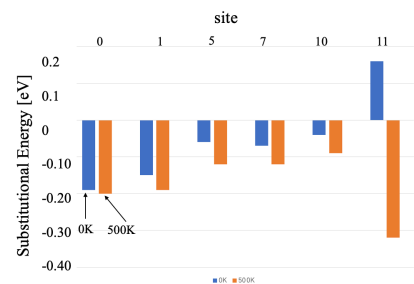


図2 site 15 を基準とした各 site のエネルギー差.

■結果 図2はそれぞれの site に Mg 置換した時の、0K(青棒) および 500K(オレンジ棒) でのエネルギー差を、site 15 を基準にして示している。この site 15 より奥に位置する完全結晶に近い site では、バネ定数の値がほぼ同じであった。

粒界面 (layer0) に属している site 0, 1 では 0K と 500K でエネルギー差があまりみられなかった。しかし同じく粒界面に属している site 5 では約2倍の差が生じている。site 7, 10, 11 は同じ1層目 (layer1) に属しているにもかかわらず、エネルギー差に変化がみられた。特に site 11 では 0K の時 +0.16eV 上昇しているが、500K では -0.32eV 低下している。これらは、温度依存性が一様ではないことを示している。発表では、対称傾角粒界との比較を報告する。

- [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”, まてりあ, 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] 堀川恭平 他, “Al $\langle 100 \rangle$ 小傾角ねじり粒界の有限温度第一原理計算”, 日本物理学会, 2022-09-15, aW323-4.
- [4] S. R. Nishitani, “Finite-temperature first-principles calculations of Al $\langle 100 \rangle$ symmetric tilt grain-boundary energy”, Phil. Mag., 101, (2021), 622-642.