

# Al 粒界エネルギーの有限温度第一原理計算

## Finite temperature first principles calculation of Al boundary energy

関西学院大・理工 ○ 西谷滋人

Dept. of Informatics, Kwansai Gakuin Univ. ○ S. R. Nishitani

■緒言 低角の粒界エネルギーは Read-Shockley の転位論に基づいた理論があり、角度依存がバーガスベクトルに比例する結果が予測され、実験結果が一致しているとされてきた [1]。しかし、第一原理計算で求めた場合、液体金属との接触角計測により求められた実験結果 [2] と齟齬が生じている。これは実験結果が有限温度での熱平衡状態での測定であるのに対して、第一原理計算では基底状態のエネルギーを求めているためである。本研究では、有限温度での粒界エネルギーを見積もるために、Einstein model を適用した結果を報告する。また、非調和振動効果をモンテカルロシミュレーションを用いて確認した [3]。

■手法 Einstein model は原子がそのサイトに釘付けされて、その周りを熱振動しているモデルである。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、

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

で求められる。ここで  $E_i^0$  は基底状態のエネルギーを、 $\omega_j$  は  $x, y, z$  方向のバネ定数から求めた振動数を表している。この値を求めるために第一原理計算には VASP を用いた。完全結晶と粒界モデルを用意して全ての等価なサイトでバネ定数を計算する。粒界は  $\langle 100 \rangle$  方位の対称傾角粒界で傾角  $22.62, 67.38^\circ$  を用いた。k-点は VASP が用意している自動生成機構を用いて、length=50 を用いた。

■結果 粒界エネルギーは完全結晶のエネルギーとの差から求める。まず、完全結晶のある温度での最安定体積を定める。その体積での、粒界モデルのフィッティングで得られたバネ定数から計算される自由エネルギーとの差を求めてその温度での粒界エネルギーを定めた。計算結果と実験結果 [2] との比較を図 2 に示した。温度依存性はよく一致している。また実験の測定温度 513K では、高傾角は、低傾角と近い値を示している。さらに、第一原理計算による Frenkel 法の影響は非常に小さい結果が得られ、計算結果は実験結果を概ね再現している。発表では、塑性変形の基礎となる転位のバーガスベクトル依存性について議論する。

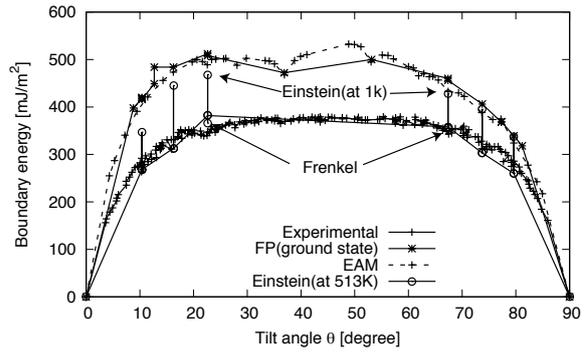


図 1 Al<110> 対称傾角粒界エネルギーの角度依存性の実験結果 [2] と計算結果 [4] および本研究での第一原理計算。

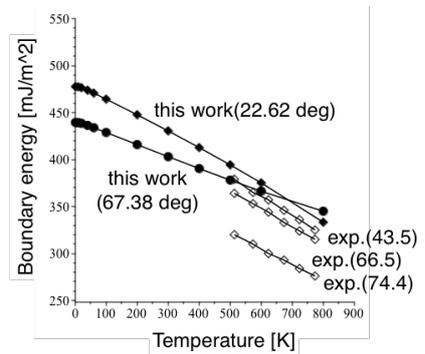


図 2 粒界エネルギーの温度依存性の計算 (this work) と実験 (exp) の比較。

[1] W. T. Read and W. Shockley, Phys. Rev., **78**(1950), 275.

[2] 大槻徹, 「アルミニウムの粒界エネルギーに関する研究」, 京都大学学術情報リポジトリ, (1990), p.233.

[3] D. Frenkel, in *Molecular-dynamics simulation of statistical-mechanical systems: proceedings of the 97th international school of physics "Enrico Fermi,"* (1986), pp. 151-188.

[4] M. A. Tschopp and D. L. McDowell, Phil. Mag., **87**(2007), 3871.