

# Al の対称傾角粒界エネルギーの有限温度第一原理計算

関西学院大・理工  
西谷滋人

Finite temperature boundary energy of Al by first principles calculation

Dept. of Informatics, Kwansei Gakuin Univ.

S. R. Nishitani

■背景 Al の対称傾角粒界エネルギーを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と齟齬が生じていた。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。前回は、有限温度での粒界エネルギーを見積もるために、調和振動子近似の Einstein method を適用した。本研究では、Frenkel 法による非調和効果について検討した [1]。

■手法 基底状態の計算は Boettger 法により行った [2]。そこで得られた小さなモデルを使って以降の計算を行った。Frenkel 法による Thermodynamical integration は次の通りである。仮想敵な系のエネルギーを

$$E^{\text{total}} = \lambda E^{\text{VASP}} + (1 - \lambda) E^{\text{Einstein}}$$

とし、この  $\lambda$  を変えて Monte Carlo (MC) シミュレーションを行い

$$F^{\text{VASP}} = F^{\text{Einstein}} + \int_0^1 \left\langle \frac{dE^{\text{total}}}{d\lambda} \right\rangle d\lambda = F^{\text{Einstein}} + \int_0^1 \langle E^{\text{VASP}} - E^{\text{Einstein}} \rangle d\lambda$$

により解析的に求められる Einstein 結晶から VASP 自由エネルギーを求める。

■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。Einstein 結晶では、実験で取られた平衡温度での完全結晶の体積を使って計算した。一方、Frenkel 結晶では Einstein 結晶で求めた体積に固定して MC を行った。得られた計算結果と実験結果 [3] との比較を図 1 に示した。基底状態では実験結果から離れているが、Einstein 結晶ではほぼ一致している。また、Frenkel 結晶は Einstein 結晶からあまり離れておらず、非調和効果は少ないと結論づけられる。

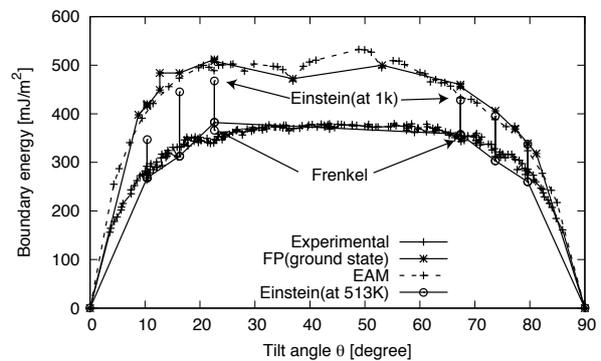


図 1 第一原理計算による基底状態、調和振動子近似、非調和振動シミュレーションでの Al 粒界エネルギー。

- [1] D. Frenkel and B. Smit, "Understanding Molecular Simulation, from Algorithms to Applications" (Academic Press, 1996).  
[2] 西谷滋人, 大澤一人, 山本洋佑, 軽金属, 第 69 巻 10 号 (2019), p.518.  
[3] 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.