

卒業論文

Fe,Cu,Alの積層欠陥エネルギーの 第一原理計算

関西学院大学 理工学部 情報科学科

6606 山下裕二郎

2010年 3月

指導教員 西谷 滋人 教授

概要

金属材料である鉄 (Fe), 銅 (Cu), アルミニウム (Al) は現在でもその用途は数知れず未だにその可能性は計り知れない。しかし金属結晶の内部には様々な格子欠陥が存在し, その格子欠陥によって金属材料の強度や硬さといった機械的性質に大きく関与する事が知られている。本研究では格子欠陥の一つである積層欠陥に着目し, 積層欠陥を作るのに要するエネルギーである積層欠陥エネルギーを第一原理計算を用いて求めた。

計算には平面波擬ポテンシャル法による第一原理バンド計算プログラムである VASP (Vienna Ab-initiation Simulation Package) を用いた。また VASP の入力ファイルを作成するために GUI を備えた原子モデル構築ソフト MedeA を使用した。

まず積層欠陥エネルギーを求める計算手法の妥当性を検証するために, Cu の表面エネルギーを計算した。結果, 計算値は 1.1J/m^2 , 文献値は 1.6J/m^2 と若干の誤差はあるがある程度近い値を再現することができた。

次に Al, Cu の 2H, 4H, 6H, 8H, 3C の積層を持つモデルを作成し, それらのエネルギーを計算した。その結果から積層欠陥エネルギーを求めた。Cu, Al 共に hcp 構造である 2H から 4H, 6H, 8H と fcc 構造である 3C に近づいていくに従って, エネルギーが安定しているという結果となった。また積層欠陥エネルギーの予測として 2H と 3C の構造エネルギー差から導いた積層欠陥エネルギー (計算値) と文献に載っている実験値を比較した。Al では計算値 90mJ/m^2 , 実験値 200mJ/m^2 , Cu においても計算値 22mJ/m^2 , 実験値 45mJ/m^2 と実験値の約半分という結果を得た。また Cu においてエネルギーは 4H, 6H, 8H は 2H と 3C のエネルギーの差を結んだ直線上に位置しており, 積層欠陥エネルギーはある程度一定な値となった。結果, その直線のどこに各モデルのエネルギーが位置するか (上下やその直線上) で積層欠陥エネルギーの値を予測する事ができた。Al では, Cu のように線形上に各モデルのエネルギーが位置しているのではなく, 二次的な曲線上に位置しているので簡単に積層欠陥エネルギーを予測する事は困難であった。しかし各モデルのエネルギーが二次的な曲線上に位置しているという一つの規則性を見出すことができた。

最後に Fe の 2H, 4H, 6H, 8H, 3C の積層を持つモデルを作成し, それらのエネルギーを計算した。その結果から積層欠陥エネルギーを求めた。Fe では Cu, Al の場合と違い最安定構造が bcc 構造であるため 2H から 3C の安定性が議論できない事が判明した。そこで積層欠陥エネルギーに対して添加元素がどのような影響を与えるか調べるために, 2H, 8H, 3C のモデルをスーパーセルに拡張し, 添加元素 (Be, Na, Mg, P, S, Ti 等) を 2 原子, 固溶させ計算を行った。

目次

第1章	序論	3
1.1	産業用資源	3
1.2	機械的性質 (Mechanical property)	3
1.3	転位 (Dislocation)	4
1.3.1	積層欠陥 (Stacking fault)	7
1.4	目的	8
第2章	計算原理	9
2.1	MedeA	9
2.2	VASP	9
2.2.1	密度汎関数法	9
2.2.2	PAW (ProJector Augmented Wave) 法	10
2.2.3	INCAR File	10
2.2.4	POSCAR File	17
2.2.5	POTCAR File	17
2.3	積層欠陥エネルギーを求める手法	18
第3章	Cu の表面エネルギー計算	20
3.1	手法	20
3.2	計算結果と考察	22
第4章	Al , Cu の積層欠陥エネルギー	23
4.1	手法	23
4.2	計算結果	26
4.3	考察	26
第5章	Fe の積層欠陥エネルギー	29
5.1	手法	29
5.1.1	基底状態での安定性	29
5.1.2	積層欠陥エネルギー導出	30
5.1.3	添加元素による積層欠陥エネルギーの影響	31
5.2	計算結果	33
5.3	考察	33

第 6 章 総括	36
付 録 A 本研究で使⽤した Maple スクリプト	40

第1章 序論

1.1 産業用資源

人類が鉄を利用し始めたのは今から約 5000 年前とも言われている。しかしなが今現在に至っても『産業の米』と呼ばれるほど、鉄は人間にとって最も利用価値がある元素である。その用途も幅広く、鉄筋や鉄骨など多くの建物の建材として使われており、私達の生活に欠かす事にできないものである。また炭素を始めとする合金元素を添加する事により鋼となり、炭素量を変化させたり焼き入れなどを行うことにより、硬度を調節できる。また鉄は固体材料の中で最も強度増幅能力が高い部類に属するため、不変形特性が重要でかつ加工形状の自由度が要求される自動車部品などに使用されている。そして鉄は他の金属と有用な合金を作る事で知られている。代表的なものとして、ステンレス鋼が挙げられる。通常の鉄は空気中や水分を含む場所でゆっくりと酸化し、錆を生じるが、鉄とクロム、ニッケルの合金であるステンレス鋼は錆びにくい合金として有名である。このため、鉄はステンレス鋼として飲み物などの液体を入れる缶やキッチンシンクなどにも用いられるほか、生活用品や鉄道、自動車あるいは産業用ロボットなど、あらゆる分野で利用されている。そして、金属材料で最も熱膨張係数が低いインバー合金、高い保磁力を持つ磁性材料にも鉄が必須の合金元素となっている。冒頭にも述べた様に鉄には様々な利用価値があり、未だにその可能性は計り知れない [5].

1.2 機械的性質 (Mechanical property)

上記したように鉄には様々な性質があるが、ここでは本研究と関係のある機械的性質について述べる。機械的性質とは、固体物質に接触した状態で静かに外力を与えると、その大きさや与え方（与える方向）に応じてその物質は変形、あるいは破壊するような力学的な性質を意味する物性の事をいう。そして外力のことを荷重 (load) といい、上記したように力の大きさを変化させないで静かに加えた荷重のことを静的荷重 (static load) という。そして金属材料はミクロレベルで見ると三次元的に構成原子が規則正しく並んだ完全結晶であるが、実際の結晶には何らかの規則の乱れが含まれている。それらを総称して格子欠陥と呼ぶ。次に格子欠陥と金属の機械的性質の関係について述べる [4].

1.3 転位 (Dislocation)

格子欠陥には 0 次元的な欠陥の点欠陥や，1 次元的な欠陥の線欠陥や 2 次元的な面欠陥の積層欠陥などがある．線欠陥は転位と呼ばれ，材料の変形を左右する重要な欠陥である．結晶に力を加えて変形すると，結晶はそれに応えて同等の力を返す．これを変形応力という．加えた変形量「ひずみ」に対する応力は図 1.1(a) のような応力-ひずみ曲線に示される．ひずみが小さい直線的に応答する領域を弾性変形域，それ以上の変形を加えた領域を塑性変形域と呼ぶ．またその限界を，降伏応力あるいは降伏強度と呼ぶ．一般に弾性変形域の傾きを硬度，降伏応力を強度，破断する時の強度をねばり強さと言う．それぞれの領域での固体内部の様子を模式的に示したものが，図 1.1 の (b) である．弾性域での変形は格子の相対的な配置はそのままなので，荷重を除けば元に戻る．しかし塑性域では，変形がズレによって起こるために，除荷重しても永久変形が残る．このズレを起こす原因が転位である．代表的な転位として刃状転位とらせん転位がある．刃状転位とは，原子配列が規則正しい完全結晶内において，ある面においてその面と平行に原子がすべり，原子配列のズレがそのすべり面に対して垂直にしわ寄せされたものである．らせん転位とは，原子のすべる方向が平行ではあるが，ねじったような形のようにすべり，原子配列のズレがらせん状になっているものである．刃状転位とらせん転位のモデルは図 1.2 に示す [1]．このような転位が結晶内部で多数起きることによって転位同士が複雑にからみ合い，簡単にすべる事ができなくなる．これを転位の強化機構という．簡単にすべれないという事は降伏応力が高く，結晶の外力に対する応力も高いので，もちろん機械的性質も向上する．これが格子欠陥と機械的性質の関係の一つである．

また転位が結晶格子のベクトルの一つと等しい Burgers vector を持つ時，その転位は完全転位と呼ばれている．Burgers vector とは転位のすべる量，方向，すべり面を表したベクトルである．そこで代表的な金属の構造モデルのすべり変形の Burgers vector を図 1.3 に示す． b は Burger vector， a は格子定数を表している．そして完全転位の Burgers vector は 2 本の部分転位（結晶格子のベクトルとは異なるベクトルを持つ転位のこと）を示すベクトルに分解される．そこで代表的なものとして FCC 金属の完全転位の Burgers vector の分解の例を次に挙げる．

$$\frac{a}{2}[10\bar{1}] \rightarrow \frac{a}{6}[11\bar{2}] + \frac{a}{6}[2\bar{1}1]$$

この式の左辺は完全転位を右辺は部分転位を表している．この式の右辺からも分かるように 2 本の部分転位に分解されると右辺の Burgers vector はちがうすべり方向を向いており，互いに平行ではないので定まったあるすべり面上でしか動けない．従ってあるすべり面上を動いてきた転位が別のすべり面上で動くためには，結晶格子のベクトルと等しいベクトルを持つ完全転位になる必要がある．この転位が別のすべり面に移動する事を交叉すべりと呼ぶ．交叉すべりのモデルは図 1.4 に示している．また図 1.5 ではらせん転位の交叉すべりを示している．らせん転位

では Burgers vector とすべり方向が平行なため，転位が与えられてもすべり面は特定されず，もし転位のすべり方向に障害物などがあれば適宜，すべり面を変えて交叉すべりできる．次に積層欠陥とこの図 1.5 にある収縮と転位の関係について述べていく [2].

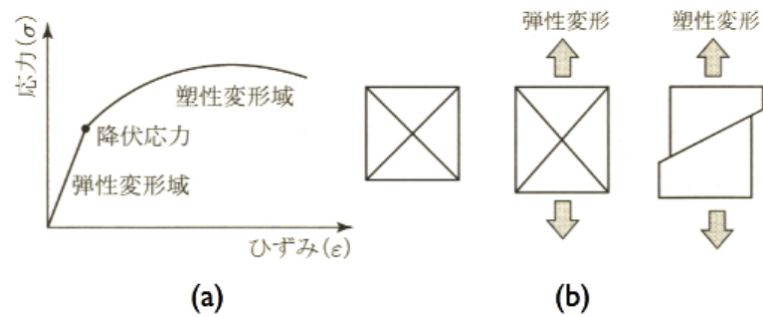


図 1.1: (a) 応力-ひずみ曲線，(b) 弾性変形と塑性変形 [1].

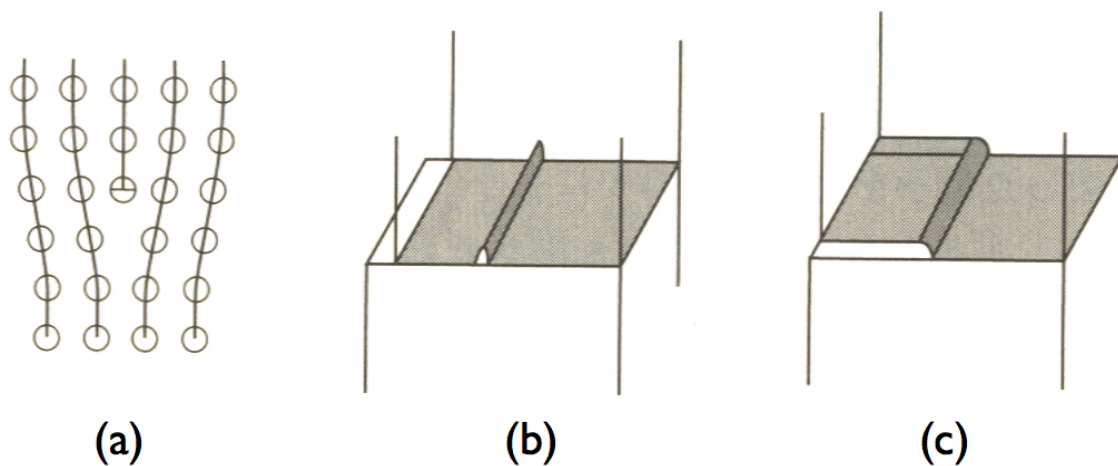


図 1.2: (a) 刃状転位の原子レベルでのモデル，(b) 刃状転位のじゅうたんモデル，(c) らせん転位のじゅうたんモデル [1].

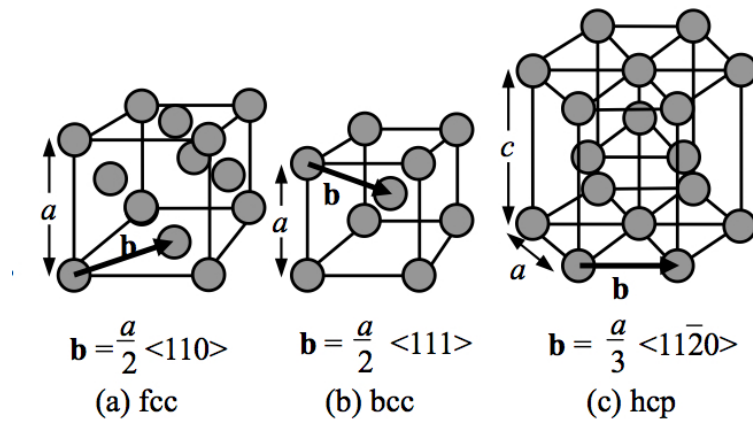


図 1.3: すべり転位と Vergers vector[4].

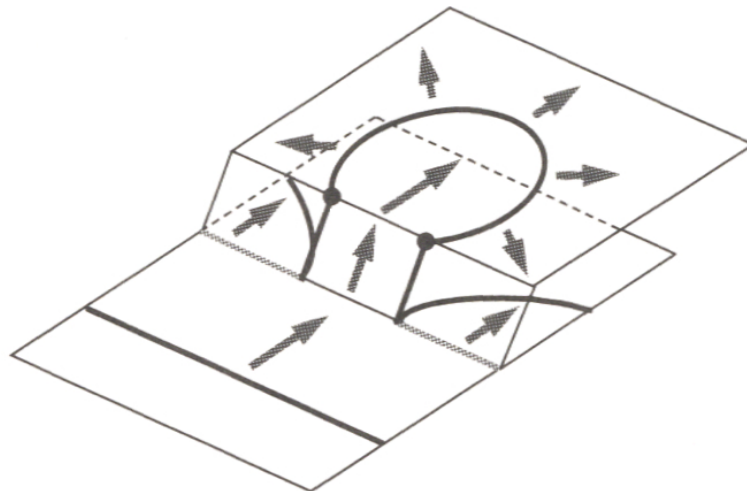


図 1.4: 交叉すべりのすべり面の変化 [2].

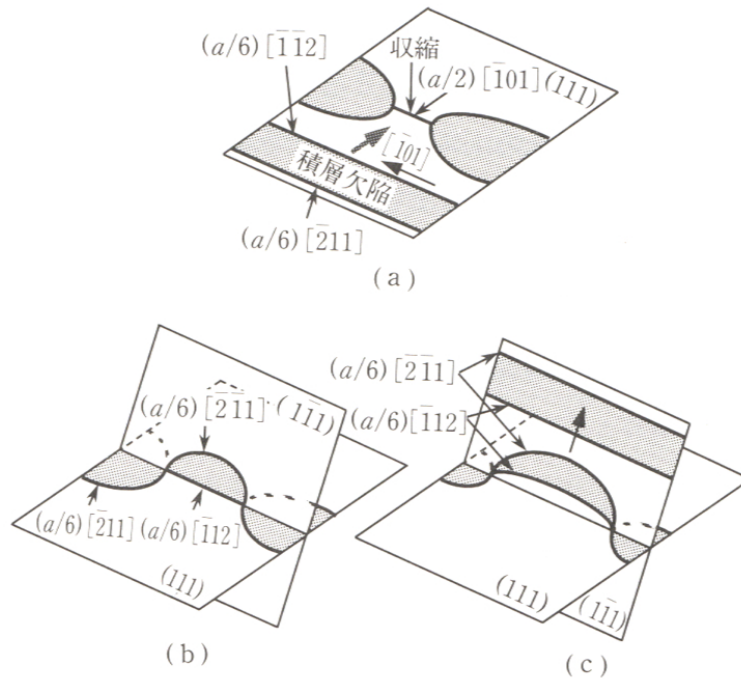


図 1.5: (a)fcc 構造の (111) 面上にある拡張転位の局所的収縮, (b)(c) 収縮部の交叉すべり [2].

1.3.1 積層欠陥 (Stacking fault)

2 次元的な面欠陥の積層欠陥とは原子配列のずれが結晶内部で面状になっている欠陥のことである．例えば fcc 金属における部分転位の間には，図 1.6 に示したように hcp 構造をもつ局部領域となっており，積層欠陥を形成している．2 本の部分転位とその間にはさまれた積層欠陥を含めたものを拡張転位と呼ぶ．そして拡張転位の幅 R は，その部分転位間に働く弾性的反発力 F とその間に広がる帯状の積層欠陥を作るのに要する積層欠陥エネルギー (Stacking fault energy) γ ，2 つの因子のバランスによって決まる．2 つの部分転位はすべり面上に平行にあるので，その間には反発力が働くため，なるべく遠ざかろうとする．しかし 2 つの部分転位が離れていけばそれだけ間に広がる帯状の積層欠陥の面積は増加し，これに比例して余分なエネルギーが必要となるので拡張転位の幅を狭くしようとする．この相反する力の釣り合いによって拡張転位の幅は決まるのである．この関係を表したのが次式である．

$$\begin{aligned} F &= \gamma R \\ &= F/R \\ R &= F/\gamma \end{aligned}$$

F は 2 本の部分転位間にかかる弾性的反発力．

R は拡張転位の幅．
 E は積層欠陥エネルギー．

拡張転位のままでは Bergers vector の向きとすべり面が平行ではなく，別のすべり面に移動する事はできない．そこで一旦収縮し完全転位となる必要がある．上述した拡張転位の幅が狭ければ，拡張転位の間に存在する2本の部分転位が収縮するためのエネルギーは低く，完全転位となるのが容易であり，交叉すべりを起こせる．逆に拡張転位の幅が広ければ2本の部分転位がいったん収縮するためのエネルギーは増加するので完全転位は起きにくい．よって交叉すべりをする事はできない．この拡張転位の収縮から交叉すべりにいたる様子を図 1.5 に示している．この図では拡張転位が (111) 面をすべって移動して行く際，別の面にぶつかる所で一旦収縮し，完全転位となり面を変え交叉すべりしている．この交叉すべりを限りなく止めることができれば，変形に必要な応力はとても大きくなり，いわゆる強い材料を作ることができる．交叉すべり発生の難易を決めているのは完全転位になれるかどうかであり，完全転位の起こり易さを左右するのは拡張転位の幅である．そこでその拡張転位の幅を決めている積層欠陥エネルギーを求める事が必要となる．

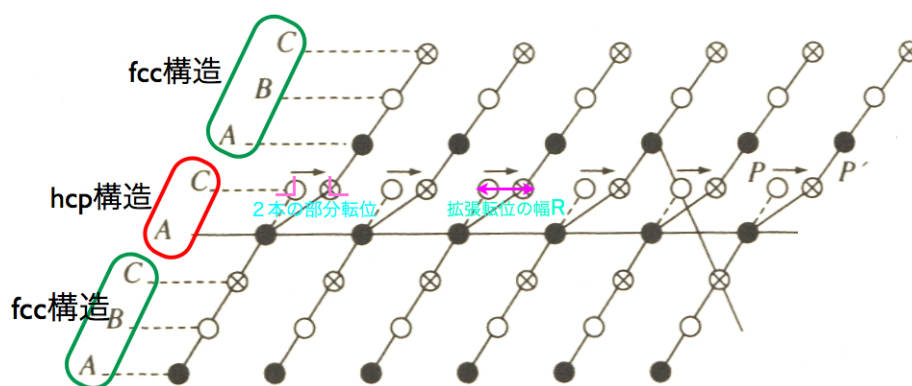


図 1.6: 積層欠陥のモデル [4].

1.4 目的

上記したように，金属結晶内部には多数の積層欠陥が存在し機械的性質を左右している．そこで本研究では積層欠陥エネルギー を第一原理計算によって求め，実験的に求められた積層欠陥エネルギー との相関を調べることを目的としている．

第2章 計算原理

本研究では，原子の種類だけから電子構造を求め様々な物性を予測することのできる第一原理計算 (First principles calculation) を用いて，原子モデル構築ソフト MedeA を使用し，構築した様々なモデルに対しエネルギー計算を行った．第一原理計算には VASP と呼ばれる密度汎関数法を用いた平面波・擬ポテンシャル法電子構造プログラムを使用する．

2.1 MedeA

MedeA は，データベースと第一原理計算の手法を1つのプラットフォームで統合した，新しい材料設計支援のための材料設計支援のための統合ソフトウェアである．

2.2 VASP

VASP は平面波・擬ポテンシャル法による第一原理バンド計算プログラムである．平面波基底の重ね合わせで波動関数を表現し，密度汎関数法に基づいて電子状態の計算を行う．平面波を使用する利点として，その系の原子にかかる力の計算を正確かつ高速に行える点が挙げられる．このことから，VASP は構造最適化や第一原理分子動力学計算のツールとして幅広く用いられている．また，擬ポテンシャル法により内殻電子をポテンシャルに置き換えて取り扱うので，波動関数の表現に用いる平面波基底の数を大幅に減らし，計算量を軽減する．内殻電子の取り扱いについては，本研究では擬ポテンシャルの方法として，全電子計算を行える PAW 法を採用しており，ウルトラソフト擬ポテンシャル法と比べ，さほど計算量を増やす事なく，精度を上げることができる．またバルク構造，表面，界面などに渡り広範囲に適用できる汎用的なソフトウェアである．

2.2.1 密度汎関数法

密度汎関数法は密度汎関数理論に基づいた方法で電子系のエネルギーを求める方法を言う．密度汎関数理論とは，与えられた系が縮退のない基底状態を持っている場合，その基底状態が波動関数を用いなくても電子密度を用いて表現できる

という理論である．この原理により，基底状態における任意の物理量は電子密度の汎関数で表すことができる．

2.2.2 PAW (ProJecter Augmented Wave) 法

本研究では VASP を使用するにあたり，擬ポテンシャルの方法として PAW 法を採用した．擬ポテンシャルの方法には，PAW 型，ウルトラソフト型の 2 つに分類される．擬ポテンシャル法以外には，非常に精度が高いが計算量が膨大な，フルポテンシャル法がある．PAW 法は Blochl が考案した全電子計算の方法であり，フルポテンシャル法の精度とウルトラソフト型の高速性の両者を兼ね備えた方法である．なおそれぞれの特徴を表 2.1 に示す．また，その模式図を図 2.1 に示す．ポ

表 2.1: 擬ポテンシャル法とフルポテンシャル法の比較.

フルポテンシャル	精度が高い 全元素対応 × 計算時間がかかるため，小さな系のみ × 原子半径等，パラメータ設定に熟練が必要
PAW ポテンシャル	フルポテンシャルの精度を維持しながら計算時間を軽減 全元素対応
(ウルトラソフト型) 擬ポテンシャル	計算時間を軽減 × アルカリ金属，アルカリ土類，希土類に難

テンシャル V は無限に深いものであると考える．そのポテンシャルを計算する際，擬ポテンシャル法では，図 2.1(a) の赤線の様なポテンシャルを仮想して計算する．反対にフルポテンシャル法では，図 2.1(c) の青線に記した，奥底までのポテンシャルを計算する．その結果，表 2.1 に示した長所，短所がある．そこで，考え出された PAW 法では，図 2.1(b) の緑線の様に擬ポテンシャルとフルポテンシャルの中間のポテンシャルを計算する．よって，計算精度を維持しつつ，時間も短縮できる [5]．

2.2.3 INCAR File

INCAR File は VASP における input file である．この INCAR File のパラメータによって第一原理計算をどのような計算条件下で行うかを決定する．実際に本研究で使った INCAR File を図 2.2 に示した．そこで各パラメータについていくつか取り上げて説明していく [7]．

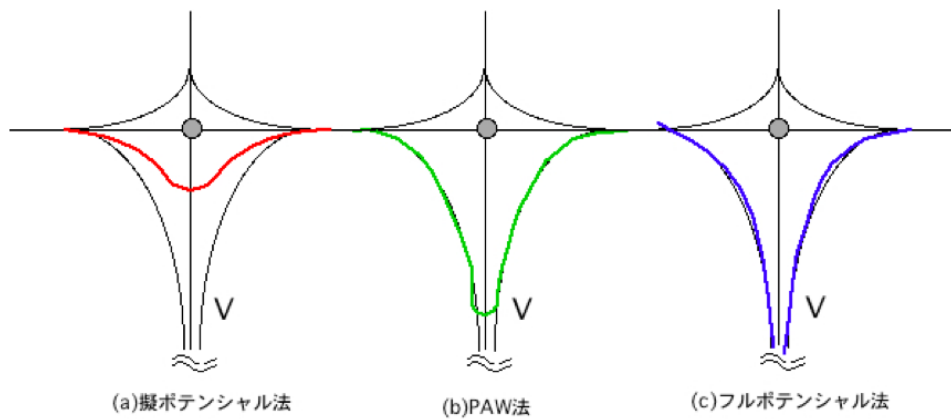


図 2.1: ポテンシャルの計算における各手法の模式図 .

PREC

計算精度をあげたり，下げたりすることができるパラメータ．精度を上げればその分，計算時間が増えるので注意しなければならない．

default PREC = Normal

Low/Normal/Accurate

ENCUT

カットオフエネルギーの値であり，どこまで短い波長の平面波を扱うを決めるパラメータ．また直接的に値を指定できるので自由にカットオフエネルギーの値を操作できる．しかしカットオフエネルギーを上げると，使用する波動関数が増えるのでPREC同様注意が必要である．

default 267

NBAND

計算の対象とするバンド数を指定するパラメータであり，計算対象モデルの持つ価電子数の半数程度にするのが適当である．

```

PREC = Normal
ENCUT = 400.000
NBANDS = 400
IBRION = 2
ISIF = 2
NSW = 60
ALGO = Normal (blocked Davidson)
NELM = 60
NELMIN = 2
EDIFF = 1.0e-05
EDIFFG = -0.02
VOSKOWN = 1
NBLOCK = 1
ISPIN = 1
INIWAV = 1
ISTART = 0
ICHARG = 2
LWAVE = .FALSE.
LCHARG = .FALSE.
ADDGRID = .FALSE.
ISMear = 1
SIGMA = 0.2
LREAL = .FALSE.
RWIGS = 1.11 0.77

```

☒ 2.2: INCAR File.

IBRION

イオンのリラクゼーションの方法を決定するパラメータである．

default

if NSW = 0 or 1 , IBRION = - 1

else , IBRION = 0

-1 イオンをリラックスさせない.

0 分子動力学法 (molecular dynamics).

1 準ニュートン法 (quasi-Newton).

2 共役勾配法 (conJugate-grandient).

3 最急降下法 (Steepest descent).

NSW

イオンのステップ数を決めるパラメータ．構造緩和において，大変重要な項目であり，少なすぎると計算精度が落ち，収束せずに終わる場合があるので注意が必要．

default NSW = 0

full-relax NSW = 100

ISIF

応力テンソルをどのように計算するかを決めるパラメータ．force や応力テンソル，イオンのリラックス，セルの形や体積の変化などを考慮するかを指定できる．詳しくは表 2.2 に示す．

default if IBRION = 0 ISIF = 0

else ISIF = 2

表 2.2: ISIF(0 ~ 7) による相違点

ISIF	calculate force	calculate stress tensor	relax ions	change cell shape	change cell volume
0	yes	no	yes	no	no
1	yes	trace only	yes	no	no
2	yes	yes	yes	no	no
3	yes	yes	yes	yes	yes
4	yes	yes	yes	yes	no
5	yes	yes	no	yes	no
6	yes	yes	no	yes	yes
7	yes	yes	no	no	yes

ALGO

使用するアルゴリズムを決定するパラメータである．

default ALGO = Normal(blocked Davidson)

Normal/Fast/Very_Fast

NELM

電子のステップ数の最大数を指定するパラメータである．

default NELM = 60

NELMIN

電子のステップ数の最小数を指定するパラメータである．

default NELMIN = 2

EDIFF

電子計算の際，どの程度の差で計算を終了するかを決めるパラメータ．イタレーションごとに前の結果とのエネルギー差を算出し，その値が指定した値以下になれば，計算が終了する．よって，より細かいデータが必要な時にはこの値を小さくすればよい．

default EDIFF = 1.0e-05 = 10^{-5}

EDIFFG

イオン計算の際，どの程度の差で計算を終了するかを決めるパラメータ．イタレーションごとに前の結果とのエネルギー差を算出し，その値が指定した値以下になれば，計算が終了する．よって，より細かいデータが必要な時にはこの値を小さくすればよい．

default EDIFFG = 1.0e-05 = -0.02

VOSKOWN

一般的な計算で，相関がある一部を補間する場合に使う補間の方法を決定するパラメータである．磁性を考慮する計算の場合は1にセットしなければならない．

default VOSKOWN = 0

ISPIN

スピンを考慮するかどうかを指定するパラメータである．

default ISPIN = 1

1 スピンを考慮しない計算を行うパラメータ．

2 スピンを考慮する計算を行うパラメータ．

MAGMOM

計算対象とするモデルに含まれる各原子の磁性のモーメントを指定するパラメータである．

default N ions* 1

INIWAV

ジョブをスタートさせる時に使用する初期の波動関数を決定するパラメータである．また ISTART = 0 なら意味をなさない

default INIWAV = 1

0 Jellium wave function simply

1 wave function arrays random numbers definitely

ISTART

WAVECAR file を読み込み，波動関数に使用するかを指定するパラメータである．

default

if WAVECAR exists ISTART = 1

else ISTART = 0

1 WAVECAR file を読み込む．

0 WAVECAR file を読み込まない．常に初期化された波動関数を使用．

ICHARG

初期の電化密度をどう構成するかを決定するパラメータである．

default

if ISTART = 0 ICHARG = 2

else ICHARG = 0

0 電化密度を初期の波動関数から導出．

1 CHGCAR.file から初期のポジションを読み取り，線形的な組み合わせで新しいポジションへと外挿法から推定し導出．

2 スーパーポジションを取り電化密度を導出（磁性を考慮する場合は設定）．

LWAVE

波動関数を WAVECAR に書き込むかどうか決定するパラメータ．TRUE の場合 WAVECAR.file が作成される．

default LWAVE = .TRUE.

LCHARG

電化密度を CHGCAR に書き込むかどうか決定するパラメータ.TRUE の場合

CHGCAR.file が作成される.
default LCHARG = .TRUE.

ISMear

smearing の方法を決定するパラメータ. このパラメータはそれぞれの波動関数をどのように部分的に占有された関数に表示するかを決定する.

default ISMEAR = 1

-1 fermi モデルから

0 Gaussian モデルから

1..N Methfessel-Paxton 法から

金属のリラクゼーションを考慮する場合は 1 or 2 を使用する (2 つに大差はない). より正確に全エネルギーを計算する場合, Tetrahedron with Blochl correction (-5) を推奨する. しかし, この手法は力に対する評価が正しく行えないことがある. そのため, 構造最適化計算や Phonon 計算の場合には, Methfessel-Paxton を推奨する. 半導体/絶縁体の場合, Methfessel-Paxton では, 電子の占有数が 2 以上になる場合がある. そのため, Tetrahedron with Blochl correction を推奨する. k 点数が少ない場合は, Gaussian を推奨する.

LREAL

積分方法を決定するパラメータ. Real space と Reciprocal sapce は積分の方法が異なる. 大きな系 (格子定数が 5 以上) のときは, Real space の方が, 計算が速い. 小さな系の場合には, Reciprocal space で計算することを推奨する. 高精度の計算を行いたい場合は, Reciprocal space で計算を推奨する.

default LREAL = .FALSE.

.FALSE. Reciprocal space を使用.

.TRUE. Real space を使用.

2.2.4 POSCAR File

POSCAR File はモデルを構築する際、セルの形状やモデル内の各原子の原子位置を決定し、 x , y , z 軸のベクトルや原子配列、原子緩和などを指定できるファイルである。実際のファイルは以下、図 2.3 の通り。そして各原子を個別に緩和させたい場合の POSCAR file を図 2.4 に示した。POSCAR file に水色の箇所を追加すると各原子個別の緩和を実現することができる。また桃色と灰色の部分と比べると、桃色の部分の原子は緩和を行わないのに対し、灰色の記述がなされている原子は z 軸方向にのみ緩和を行う。この機能が実装されていることから全ての原子を z 軸方向にのみ緩和させたり、いくつかの原子だけすべての方向に緩和を行う等の細かい設定が可能となっている [6]。

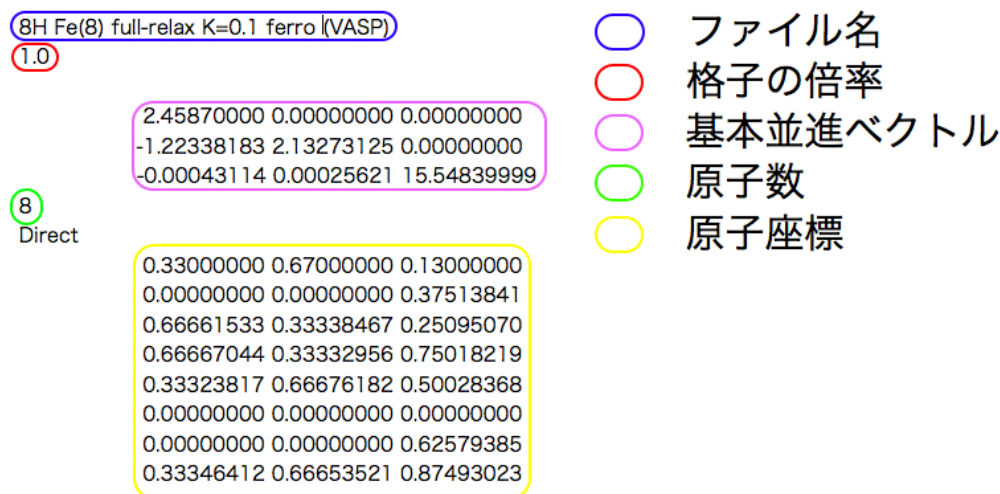


図 2.3: POSCAR file

2.2.5 POTCAR File

POTCAR File は各元素のポテンシャルを明記したファイルであり、POSCAR File で構築した原子配列に関してどの原子を配置するかを決定する。ひとつのモデルの中に 2 種類以上の元素を用いる場合は POSCAR File で指定した原子配列と関連づけなければならない。また、カットオフエネルギーの値もこの POTCAR File の中に存在し、直接的に指定することが可能であるが、基本的には INCAR File で指定する。

```

Selective dynamics
Direct
0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.7500000000000000 F F F
0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.5000000000000000 F F F
0.0833333300000021 0.1666666699999979 0.6250874999999994 F F F
0.1666666699999979 0.0833333300000021 0.3750874999999994 F F F
0.0000000000000000 0.2500000000000000 0.7500000000000000 F F F
0.0000000000000000 0.2500000000000000 0.5000000000000000 F F F
    ⋮
0.7500000000000000 0.7500000000000000 0.6562500000000000 F F F
0.7500000000000000 0.7500000000000000 0.4062500000000000 F F F
0.8333333300000021 0.9166666699999979 0.5313374999999994 F F F
0.5000000000000000 0.5000000000000000 0.3125000000000000 F F F

```

- ：各原子における緩和手法の記述
- ：x軸方向-緩和しない, y軸方向-緩和しない, z軸方向-緩和しない
- ：x軸方向-緩和しない, y軸方向-緩和しない, z軸方向-緩和する

図 2.4: 詳細な緩和を実現する POSCAR file .

2.3 積層欠陥エネルギーを求める手法

積層欠陥エネルギーを求める手法を Al の 2H と 3C の例を出して説明していく．まず欠陥部分の構造である 2H , 欠陥を含まない結晶構造の 3C の原子モデルを MedeA にて作成する．そして第一原理計算ソフト VASP にて自由エネルギーを計算する．そして 2H のモデルの 001 面の面積を格子定数から計算する．計算によって求めた 2H と 3C の自由エネルギーの差を出す．ただし層の数をそろえるために 3C の自由エネルギーを $2/3$ 倍し , 2 層分にし 2H と層の数を揃える必要がある．そして一層分の積層欠陥部分のエネルギーを算出したいのでさらにそのエネルギーを $1/2$ 倍する．そして計算によって求めた欠陥部分のエネルギーを面積で割り , 積層欠陥エネルギーを算出する．また格子定数の単位を Å から m へ , エネルギーの単位を eV から mJ へと変換し , 積層欠陥エネルギーの一般的な単位である mJ/m^2 に合わせ．ここからは計算方法を定式化したものを次式に示す．また計算手法の視覚的なイメージを図 2.5 に示す．

$$E_a - a/b E_b = E_c$$

$$E_c/2 = E_d$$

$$E_d / S = E_{SF}$$

E_a は 2H のエネルギー.

E_b は 3C のエネルギー.

a/b は層の数を揃える定数.

E_c は 2 層の欠陥部分の持つエネルギー.

E_d は 1 層の欠陥部分の持つエネルギー.

S は 2H の [001] 面の面積.

E_{SF} は積層欠陥エネルギー.

今回は 2H と 3C の例を出したが、他のモデルで計算を行う場合は、欠陥を含まない 3C の部分は固定して 2H の部分だけを 4H, 6H, 8H と変えていき積層欠陥エネルギーを計算していく、なお定数もそれに伴い変化するので注意が必要である.

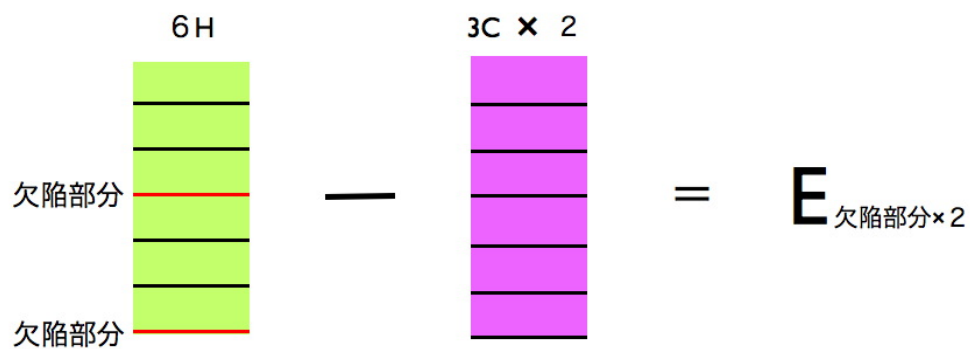


図 2.5: 積層欠陥エネルギーを求める手法の視覚的なイメージ.

第3章 Cuの表面エネルギー計算

本研究の目的の一つは、Fe、Cu、Alの積層欠陥エネルギーを第一原理計算計で求め、実験値と比較する事である。そこでまず積層欠陥エネルギーを求める計算手法の妥当性を検証するために、Cuの表面エネルギー計算を行った。fcc-Cuのユニットセルをc軸方向に3倍拡張し12原子のモデルで計算を行った。スラブモデルとは真空層で囲まれてモデルであり、その真空層との界面にエネルギーを持っている。バルクモデルとは通常のモデルである。なぜ表面エネルギー計算かというと、積層欠陥エネルギーを求める計算も計算対象とするモデルの各層の構造のエネルギーを求め各層のエネルギー差で積層欠陥エネルギーを算出するため、基本的には表面エネルギー計算と原理が同じであるからである。

3.1 手法

表面エネルギー計算の流れについて説明する。

- 原子モデル構築ソフト Medea を利用し、3C-Cu のバルクモデル、また 001 面のスラブモデルを作成する。
- 第一原理計算ソフト VASP を用いて作成した結晶モデルのエネルギーを求める。計算条件は以下の図??を参照。
- スラブモデルのエネルギーとバルクモデルのエネルギーから一層分の表面エネルギーを算出する。

計算手法のイメージを図 3.1 で示す。

- 求めた表面エネルギーと格子定数から計算した 001 面の面積で単位面積あたりのエネルギーに換算する。
- 実験値と比較して計算の妥当性の検証をおこなう。

対象としたモデルは図 3.2 で示す。

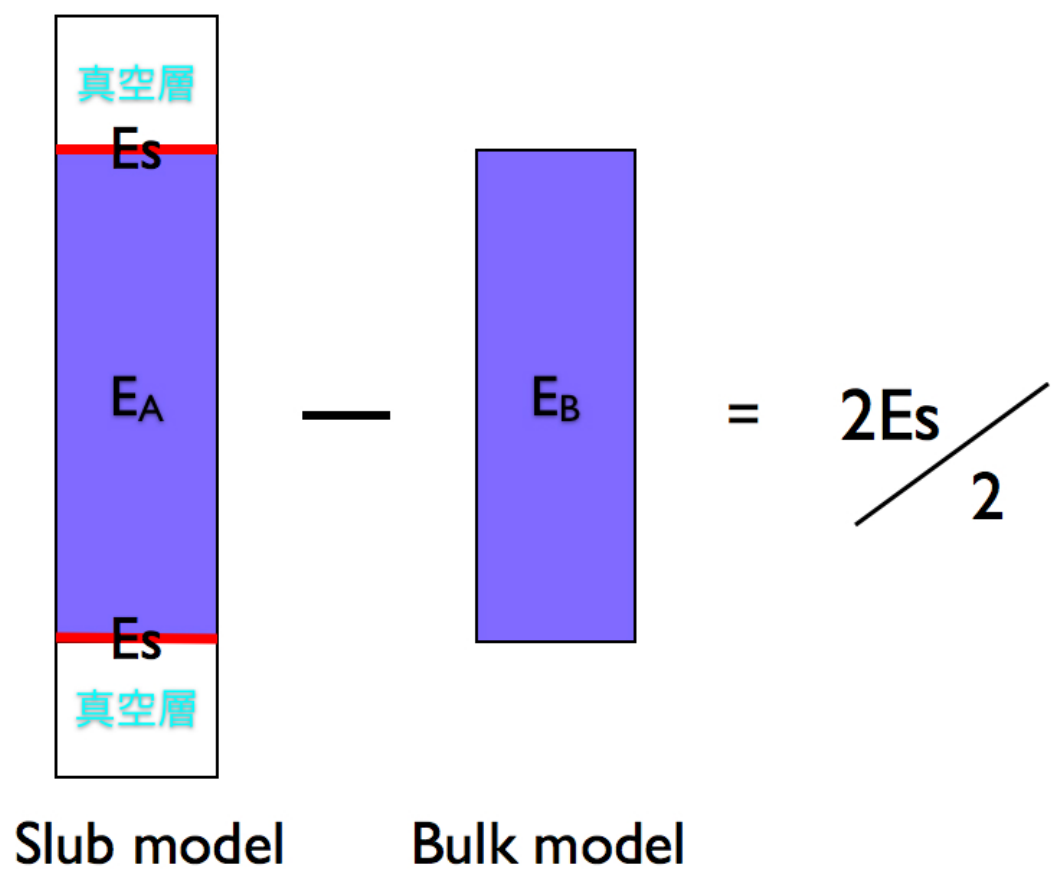


図 3.1: 表面エネルギー計算のイメージ図

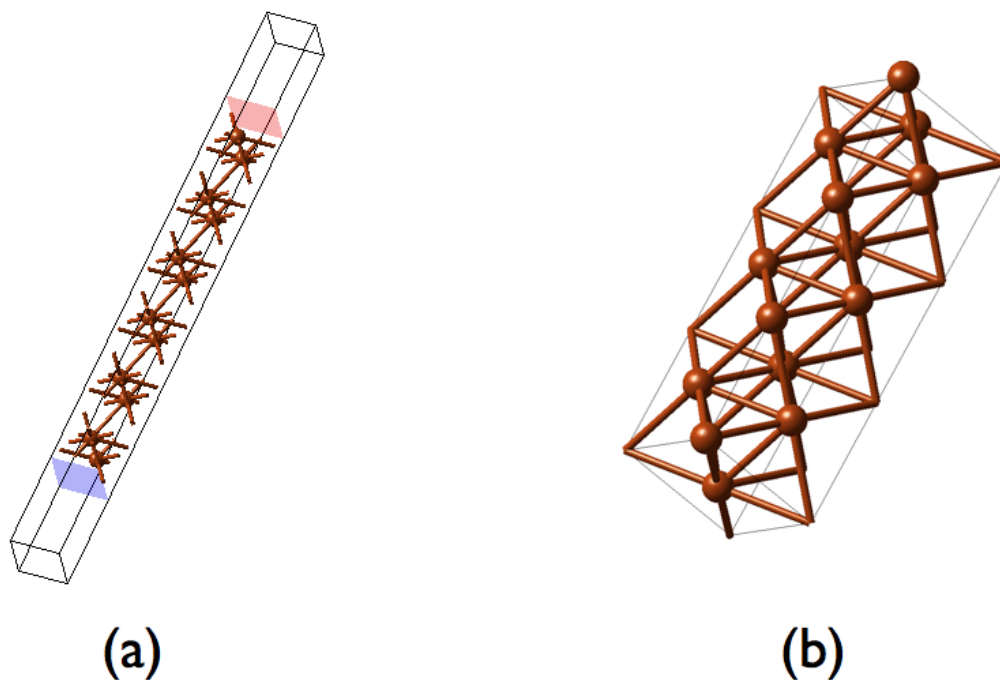


図 3.2: (a)Cu12 原子のスラブモデル , (b)Cu12 原子のバルクモデル

3.2 計算結果と考察

結果は表 3.1 で示した通りである．計算値は 1.1J/m^2 , 文献値は 1.6J/m^2 と今回の計算で若干の誤差はあるがある程度近い値を求めることができた．よって積層欠陥エネルギーを計算をする手法として対象モデルの各層のエネルギー差から求める手法は有効であると判断した．

表 3.1: Cu 表面エネルギー計算.

計算結果	実験値
1.1 J/m^2	1.6 J/m^2

第4章 Al, Cuの積層欠陥エネルギー

本章ではAl, Cuの2H, 4H, 6H, 8H, 3Cのモデルを使用し第一原理計算を行った。3章で確認された通り, 結晶を構成している各層のエネルギー差から積層欠陥エネルギーを導く方法は有効であった。そこでまずAl, Cuの欠陥のない完全な結晶構造であるfcc構造(3C)について計算を行った。次に積層欠陥部分の局所的な構造であるhcp構造(2H)について計算を行った。まずはこの2つ構造によるエネルギー差から積層欠陥エネルギーを算出した。しかしこの2つでは現実的な系とはほど遠く, 4H, 6H, 8Hと同一結晶内部にfcc構造とhcp構造の層, 両方を持つモデルについても計算を行った。4H, 6H, 8Hの違いは各層のfcc構造とhcp構造の占める割合の違いであり, 4H, 6H, 8Hという順に欠陥のない結晶構造であるfcc構造の層が増えていく。結晶のモデルは図4.1を参照。そして同様に4H, 6H, 8Hも計算されたエネルギーから積層欠陥エネルギーを計算した。またその各構造におけるfcc層とhcp層の組成比と自由エネルギーや積層欠陥エネルギーの相関についても検証した。

4.1 手法

- 原子モデル構築ソフトMedeAを利用し, Al, Cuについて2H, 4H, 6H, 8H, 3C各モデルを作成。
- 作成したモデルについて第一原理計算をVASPで行う。なお内部緩和, 外部緩和共に考慮している。詳しい計算条件は以下の図4.2参照。
- VASPで計算した2H, 4H, 6H, 8H, 3Cのエネルギーから欠陥部分だけのエネルギーを割り出す。

計算方法は2.3節を参照。

- 計算対象モデルの001面の面積を数値計算ソフトMapleにて計算する。
- 求められた欠陥部分のエネルギー, 001面の面積から積層欠陥エネルギーを計算する。

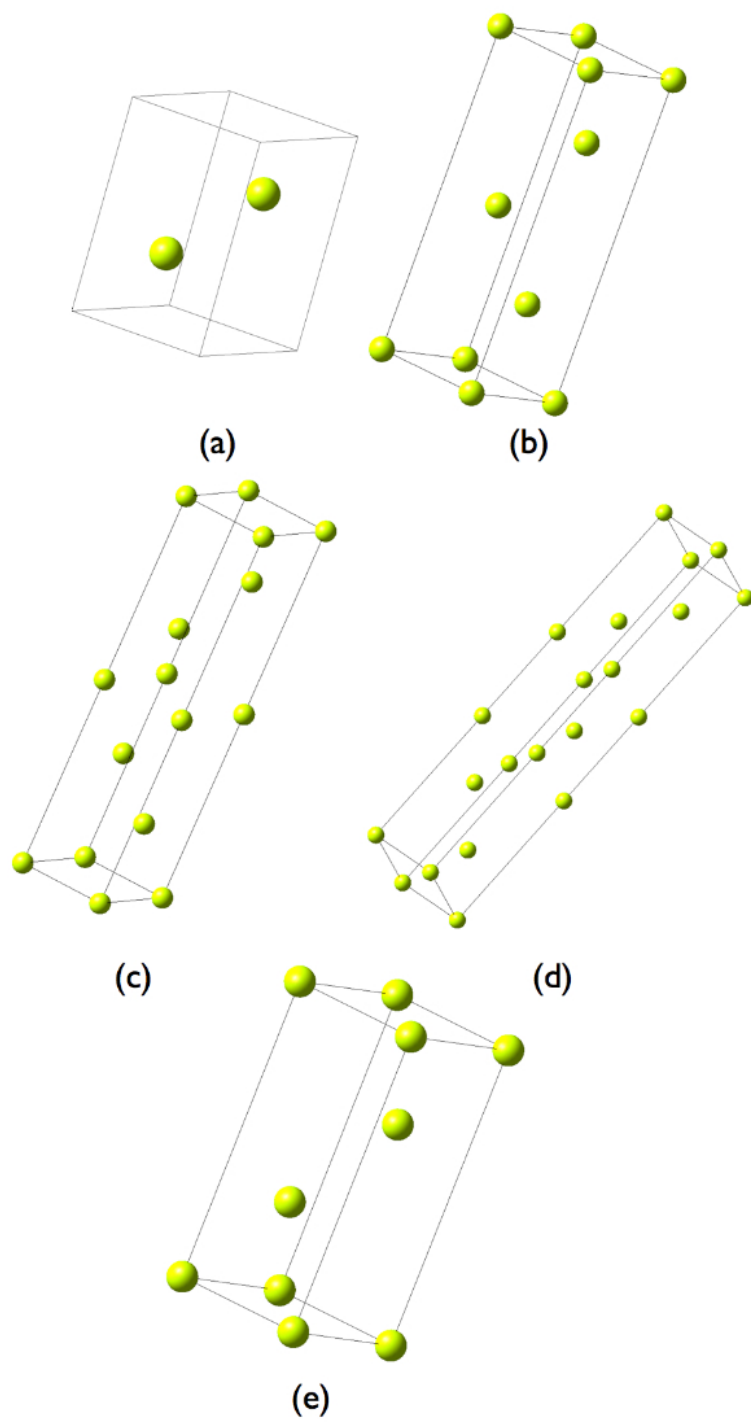


図 4.1: (a)2H , (b)4H , (c)6H , (d)8H , (e)3C の各構造のモデル .

```
PREC = Accurate
ENCUT = 400
IBRION = 2
NSW = 100
ISIF = 3
ALGO = Normal (blocked Davidson)
NELM = 60
NELMIN = 2
EDIFF = 1.0e-05
EDIFFG = -0.02
VOSKOWN = 1
NBLOCK = 1
ISPIN = 1
INIWAV = 1
ISTART = 0
ICHARG = 2
LWAVE = .FALSE.
LCHARG = .FALSE.
ADDGRID = .FALSE.
ISMEAR = 1
SIGMA = 0.2
LREAL = .FALSE.
RWIGS = 1.18
```

図 4.2: 計算条件

4.2 計算結果

まず 2H から 3C までの各構造ごとに計算して求めたエネルギーは以下表 4.1 で示す．次に V 積層欠陥エネルギーは以下表 4.2 で示す．また積層欠陥エネルギーと自由エネルギーの関係を表したものが図 4.3，図 4.4 となっている．

表 4.1: Cu, Al の構造別の自由エネルギー（1 原子辺り）．

Polytype	Cu	Al
2H	-3.7142eV	-3.7025eV
4H	-3.7179eV	-3.7292eV
6H	-3.7183eV	-3.7349eV
8H	-3.7203eV	-3.7361eV
3C	-3.7219eV	-3.7421eV

表 4.2: Cu, Al の積層欠陥エネルギー．

Polytype	Cu	Al
2H-3C	22mJ/m ²	90mJ/m ²
4H-3C	23mJ/m ²	59mJ/m ²
6H-3C	30mJ/m ²	49mJ/m ²
8H-3C	19mJ/m ²	55mJ/m ²
実験値	45mJ/m ²	200mJ/m ²

4.3 考察

Cu, Al 共に hcp 構造である 2H から 4H, 6H, 8H と完全な fcc 構造である 3C に近づいていくに従って，エネルギーが安定している事が分かった．そのエネルギーから積層欠陥エネルギーを求め，実験値と比較してみると，2H の積層欠陥エネルギーについては Cu は計算値 22mJ/m²，実験値 45mJ/m²，Al は計算値 90mJ/m²，実験値 200mJ/m² と共に実験値の約半分の積層欠陥エネルギーが確認できた．そして Cu においては図 4.3 に示されているように，4H, 6H, 8H の自由エネルギーは 2H と 3C の自由エネルギーの差を結んだ線形的な位置に属している，6H のようにこの直線より少し上に位置していれば積層欠陥エネルギーが高くなっており，8H のように低くなっていれば積層欠陥エネルギーも低くなっており，構造による

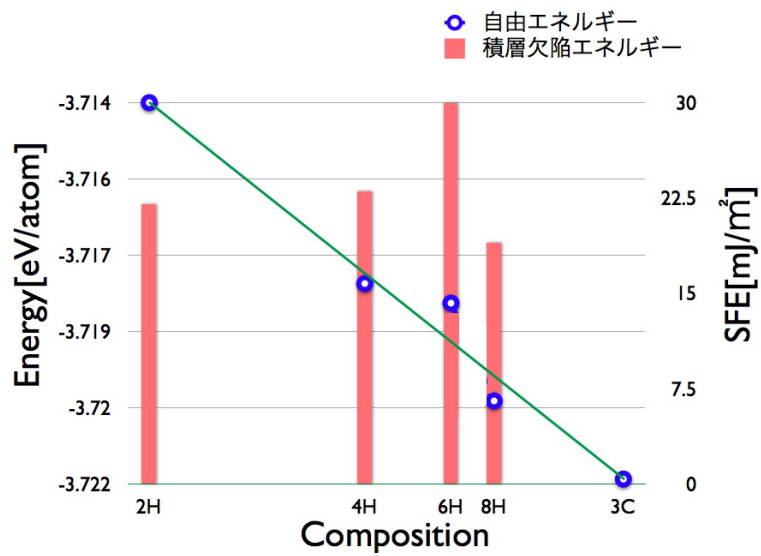


図 4.3: Cu の積層欠陥エネルギーと構造によるエネルギー差の相関図

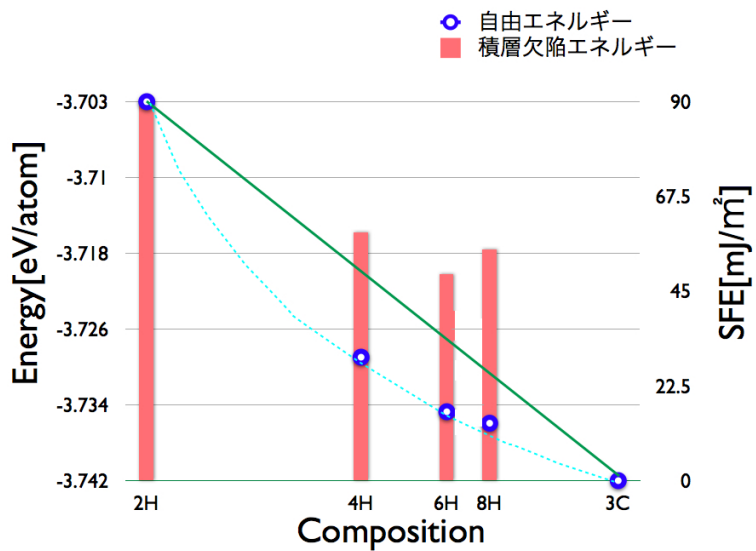


図 4.4: Al の積層欠陥エネルギーと構造によるエネルギー差の相関図

エネルギー差と積層欠陥エネルギーについての規則性を確認する事ができた。またこの横軸の 2H, 4H, 6H, 8H, 3C は各結晶の層の構造の組成比であり, 2H は 100 % hcp 構造, 3C は 100 % fcc 構造である, 4H は hcp50 % , fcc 50 % となっているので横軸のちょうど真ん中に位置している。この組成比によって横軸が決まり, 16H のような複雑な構造であっても自由エネルギーを求めるだけで線形的な位置に属しておれば規則性から積層欠陥エネルギーを予測できる。Al においては図 4.4 に示されているように, Cu のように線形ではなく二次関数的な曲線となっているので簡単に積層欠陥エネルギーを予測する事は難しいが, やはり一定の規則性を見出すことができた。

第5章 Feの積層欠陥エネルギー

本章では、まず Fe における磁性を考慮した各構造の安定性を調べた。磁性には強磁性、反強磁性、磁性を持たない非磁性などがある。強磁性とはとなり合う原子の磁気モーメントが同一方向を向いており、全体として大きな磁気モーメントを持つ物質の磁性のことである。反強磁性とは隣り合う原子の磁気モーメントが反対方向を向いており、全体として磁気モーメントを持たない物質の磁性を示す。なので反強磁性は非磁性の中に含まれる。なお強磁性と反強磁性のモーメントの向きの違いを図 5.1 に示す。そのために Fe の一般的な結晶構造である bcc 構造の強磁性、fcc 構造の時の強磁性と反強磁性について格子定数を変えていきながらエネルギーを計算していき、E-V 曲線を描いた。次に前章と同様に積層欠陥エネルギーを求めていくために、2H、4H、6H、8H、3C と各結晶構造のエネルギーを計算した。また今回の計算は基底状態なので、磁性は強磁性で考慮している。そしてそこから求められた自由エネルギーから積層欠陥エネルギーを前章と同様に求めた。そして求めた積層欠陥エネルギーに対しての添加元素がどのような影響を与えるか調べるために、2H、8H、3C のモデルをスーパーセルに拡張し、添加元素 (Be, Na, Mg, P, S, Ti, V, Cr, Mn, Co, Ni, Cu, Zn, Ag, Pt, Au) を固溶させ計算を行った。また図 5.3 は固溶前と固溶させた後のモデルを示している。(a) は 3C-Fe の 32 原子のスーパーセル、(b) は 3C-Fe の 32 原子のスーパーセルに Ti₂ 原子を固溶させたモデル、(c) は 8H-Fe の 32 原子のスーパーセル、(d) は 8H-Fe の 32 原子のスーパーセルに Ti₂ 原子を固溶させたモデル、(e) は 2H-Fe の 32 原子のスーパーセル、(f) は 2H-Fe の 32 原子のスーパーセルに Ti₂ 原子を固溶させたモデルである。なお添加元素の影響を計るためにユニットセルでは影響が大きすぎるためスーパーセルに拡張し、計算の収束性を高めるために 2 原子を固溶させている。

5.1 手法

5.1.1 基底状態での安定性

- 原子モデル構築ソフト MedeA を利用し、bcc-Fe-ferro のユニットセル、fcc-Fe-ferro のユニットセル、fcc-Fe-antiferro のユニットセルを作成。

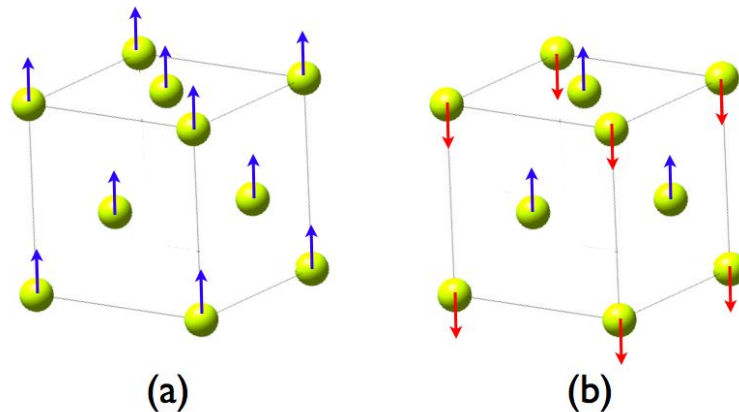


図 5.1: (a) 強磁性の磁性のモーメントの向き , (b) 反強磁性の磁性のモーメントの向き

- 作成した各モデルにつて内部緩和 , 外部緩和共に考慮し VASP にて計算を行う . 詳しい計算条件は図 5.2 に示す .
- その緩和後のモデルの格子定数を基準とし , 格子定数を 0.02 刻みで変化させながら約 10 点計算を行う . この時は格子定数を固定しているので内部緩和のみ .
- 計算で求めたエネルギー , また格子定数から Energy-Volume Curve を描く .

5.1.2 積層欠陥エネルギー導出

- 2H , 4H , 6H , 8H , 3C についてモデルを作成し , 前章と同様に計算を行う . なお内部緩和 , 外部緩和共に考慮している . また磁性は強磁性で計算を行っている .

その他の詳しい計算条件は図 5.2 に示している .

- VASP で計算した 2H , 4H , 6H , 8H , 3C のエネルギーから欠陥部分だけのエネルギーを割り出す .

計算方法は 2.3 を参照 .

- 計算対象モデルの 001 面の面積を数値計算ソフト Maple にて計算する .
- 求められた欠陥部分のエネルギー , 001 面の面積から積層欠陥エネルギーを計算する .

5.1.3 添加元素による積層欠陥エネルギーの影響

- 2H, 3C, 8H の各構造において, 32 原子のスーパーセルを MedeA にて作成し, 添加元素を固溶し計算を行う. 固溶させた原子位置は図 5.3 を参照. また固溶前の pure なモデルについても計算は行う. 基本的な計算条件は図 5.2 と同じであるが, セルが大きくなり計算時間も増加するので精度を少し落とし, 内部緩和のみ考慮している.
- 添加元素を固溶したすべてのモデルのエネルギーを欠陥のない完全結晶である 3C32 原子の Pure-Fe を基準にしエネルギー差を出し, 安定性を検証する.
- また 3C の Pure-Fe の 6 層分と 2H の固溶させた部分の 2 層分から理論的な 8H のモデルのエネルギーを予測し, 実際に構築した 8H のモデルとの差も検証する.

```
PREC = Accurate
ENCUT = 400
IBRION = 2
NSW = 100
ISIF = 3
ALGO = Normal (blocked Davidson)
NELM = 60
NELMIN = 2
EDIFF = 1.0e-05
EDIFFG = -0.02
VOSKOWN = 1
NBLOCK = 1
ISPIN = 2
MAGMOM = 2*2.5
INIWAV = 1
ISTART = 0
ICHARG = 2
LWAVE = .FALSE.
LCHARG = .FALSE.
ADDGRID = .FALSE.
ISMEAR = 1
SIGMA = 0.2
LREAL = .FALSE.
RWIGS = 1.17
```

磁性のモーメントを設定するとMAGMOMのパラメータが追加される

図 5.2: Fe における計算条件 .

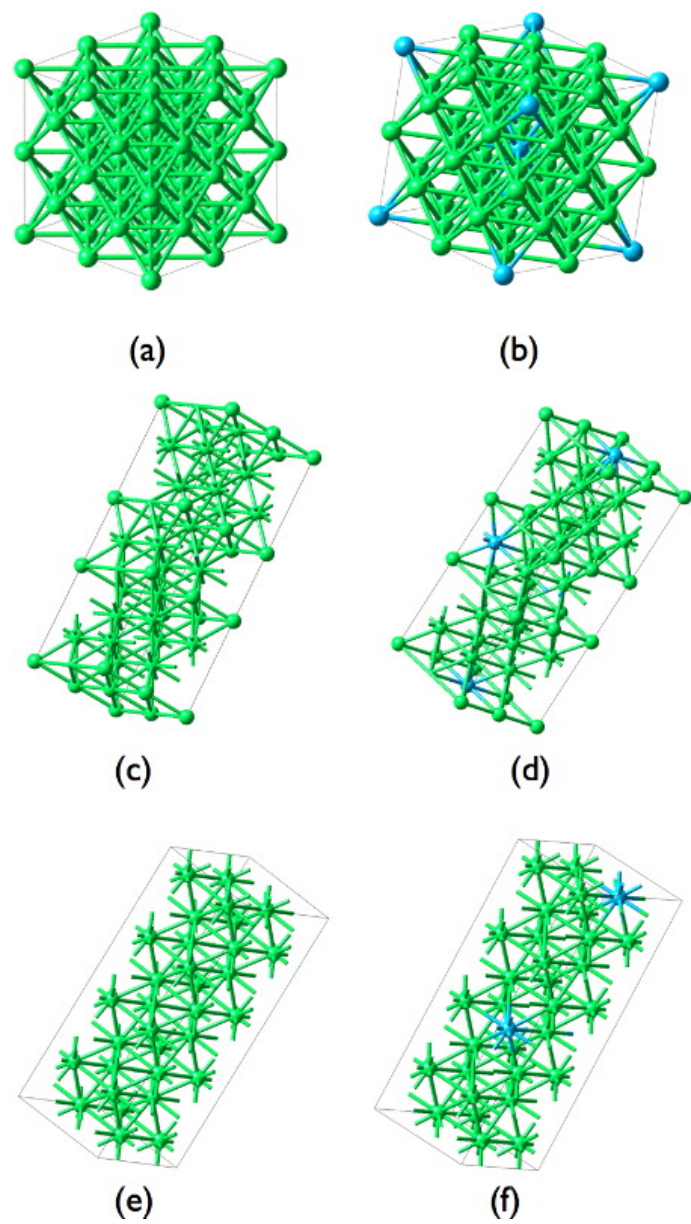


図 5.3: 各構造の Fe のスーパーセルと固溶させた位置 .

5.2 計算結果

Fe の各構造における磁性別の自由エネルギーは表 5.2 に示しており，それを plot した Energy-Volume Curve を図 5.4 に表示している．この結果から基底状態では bcc-ferro，fcc-anti-ferro，fcc-ferro の順で安定となった．また Fe-Ferro の時の構造別の自由エネルギーを表 5.2 に示している．そこから求めた積層欠陥エネルギーは表 5.3 に示す．

表 5.1: Fe の構造，磁性別の自由エネルギー

bcc(ferro)		fcc(anti-ferro)		fcc(ferro)	
格子定数 ()	Energy(eV)	格子定数 ()	Energy(eV)	格子定数 ()	Energy(eV)
2.75	-8.2591	3.45	-8.0149	3.60	-8.1516
2.77	-8.2842	3.47	-8.0856	3.62	-8.1615
2.79	-8.3015	3.49	-8.1379	3.64	-8.1620
2.81	-8.3115	3.51	-8.1729	3.66	-8.1605
2.83	-8.3148	3.53	-8.1926	3.68	-8.1559
2.85	-8.3121	3.55	-8.1991	3.70	-8.1482
2.87	-8.3038	3.57	-8.1903	3.72	-8.1379
2.89	-8.2906	3.59	-8.1819		
2.91	-8.2737	3.61	-8.1614		
2.93	-8.2547	3.63	-8.1340		

表 5.2: Fe-Ferro の構造別の自由エネルギー（1 原子辺り）．

Polytype	Fe
2H	-8.2220eV
4H	-8.1684eV
6H	-8.1495eV
8H	-8.1730eV
3C	-8.1523eV

5.3 考察

基底状態での安定性は図 5.4 に示した通り，bcc-ferro，fcc-anti-ferro，fcc-ferro の順となった．この結果は文献と同じ結果となっており，磁性を考慮した計算に

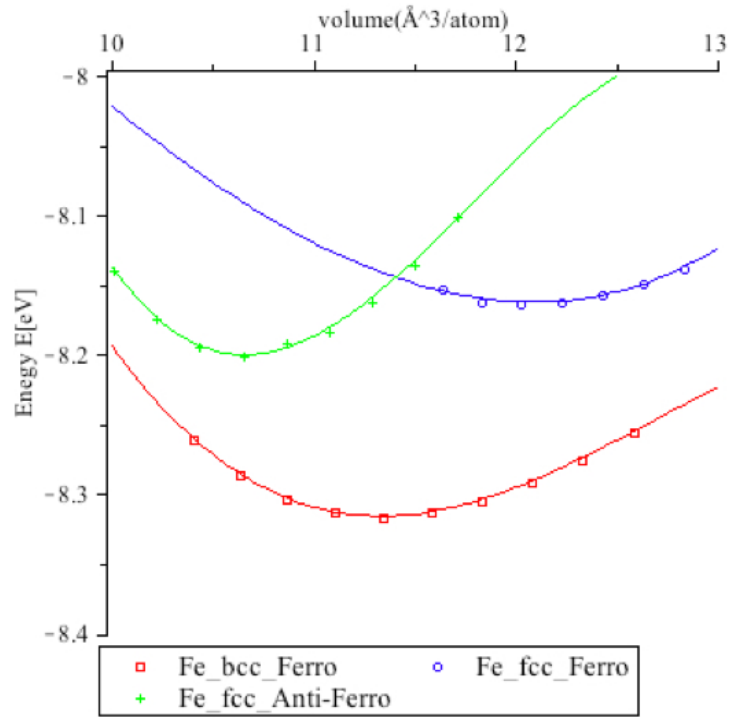


図 5.4: Fe の構造 , 磁性別の Energy-Volume Curve

表 5.3: Fe-Ferro の積層欠陥エネルギー.

Polytype	Fe
2H	213mJ/m ²
4H	98mJ/m ²
6H	26mJ/m ²
8H	253mJ/m ²
実験値	200mJ/m ²

においても信頼性が高い結果となった．また Fe-ferro の各構造の安定性は 2H , 8H , 4H , 3C , 6H という順に安定となり , 完全な結晶である 3C が不安定となり , 8H が安定となる結果となった．よって Fe では Cu , Al の場合と違い最安定構造が bcc 構造であるため 2H から 3C の安定性が議論できない事が判明した．

第6章 総括

本研究では第一原理計算を持ちいて Fe および Cu, Al の積層欠陥エネルギーについての計算を行った．得られた知見は以下の通りである．

- 『Cu の表面エネルギー計算』では fcc-Cu12 原子のスラブモデル，バルクモデルを使用し，表面エネルギーを検証した．結果，計算値は 1.1J/m^2 ，文献値は 1.6J/m^2 と若干の誤差はあるが，ある程度近い値を計算で再現することができた．よって積層欠陥エネルギーを計算をする手法として対象モデルの各層のエネルギー差から求める手法は有効な手段の一つであると判断した．
- 『Cu, Al の積層欠陥エネルギー』では Cu, Al 共に hcp 構造である 2H から 4H, 6H, 8H と fcc 構造である 3C に近づいていくに従って，エネルギーが安定しているという結果が得られた．また 2H と 3C の構造エネルギー差から求めた積層欠陥エネルギーは Al では計算値 90mJ/m^2 ，実験値 200mJ/m^2 ，Cu においても計算値 22mJ/m^2 ，実験値 45mJ/m^2 と実験値の約半分という結果を得た．また Cu においてエネルギーは 4H, 6H, 8H は 2H と 3C のエネルギーの差を結んだ直線上に位置しており，積層欠陥エネルギーはある程度一定な値となった．結果，その直線のどこに各モデルのエネルギーが位置するか（上下やその直線上）で積層欠陥エネルギーの値を予測する事ができた．Al では，Cu のように線形上に各モデルのエネルギーが位置しているのではなく，二次的な曲線上に位置しているので簡単に積層欠陥エネルギーを予測する事は困難であった．しかし各モデルのエネルギーが二次的な曲線上に位置しているという一つの規則性を見出すことができた．
- 『Fe の積層欠陥エネルギー』ではまず Fe における磁性を考慮した各構造の基底状態での安定性を調べた．結果，bcc-ferro, fcc-anti-ferro, fcc-ferro という順で安定となり，磁性を考慮した計算でも文献と同じ安定性を再現する事ができた．次に 2H, 4H, 6H, 8H, 3C と各結晶構造のエネルギーを計算した．結果は 2H, 8H, 4H, 3C, 6H の順で安定となった．Fe では Cu, Al の場合と違い最安定構造が，基底状態では bcc 構造であり 2H から 3C という順での安定性が議論ができない事が判明した．積層欠陥エネルギーにおいては，2H では計算値 213mJ/m^2 ，実験値 200mJ/m^2 と非常に近い値が確認できた．しかし実験値は bcc 構造の積層欠陥エネルギーであり，正確に再現できたとは言えない．だが基底状態での積層欠陥のできやすさという点では相

関のある値を再現する事ができたと思う．そして求めた積層欠陥エネルギー
に対しての添加元素がどのような影響を与えるか調べるために，2H，
8H，3Cのスーパーセルに，添加元素を固溶させ計算を行ったが，まだ計算
が終わっておらず，この部分についての議論は来年度の研究生に託したい．

参考文献

- [1] 西谷滋人 著,『固体物理の基礎』(森北出版 2006) .
- [2] 加藤雅治 著,『入門転位論』(裳華房 2005) .
- [3] 高村仁一 著,『材料強度の基礎』(京都大学学術出版会 1999) .
- [4] 谷野満,鈴木茂 著,『鉄鋼材料の科学 鉄に凝縮されたテクノロジー』(内田老鶴圃 2001) .
- [5] 西川篤史 著,『修士論文 Fe 及び Ti の希薄固溶体の第一原理計算』, (2008) .
- [6] 山本洋佑 著,『修士論文 調和振動子近似による有限温度の第一原理計算』, (2010) .
- [7] VASP マニュアル <http://cms.mpi.univie.ac.at/vasp/> .

謝辞

本研究を遂行するにあたり，終始多大なるご指導および有益な助言を頂いた関西学院大学理工学部情報科学科，西谷滋人教授に深く感謝の意を表すとともに，厚く御礼申し上げます．また，本研究を進めるにつれ，山本洋佑氏，戸賀瀬健介氏，また研究室員の皆様にも様々な知識の供給，ご協力を頂き，本研究を大成することができました．最後になりましたが，この場を借りて心から深く御礼を申し上げます．

付 録 A 本研究で使⽤した Maple スクリプト

```

[ lattice Vector from OUTCAR
> 2.57345000 0.00000000 0.00000000 :
> -1.28672495 2.22867311 0.00000000 :
> 0.00000064 0.00000112 35.15860000 :
[
>
>
ベクトルu,vの長さ  $u = \sqrt{u_1^2 + u_2^2 + u_3^2}$ 
> u:=sqrt((2.57345000)^2);
                                     u:=2.573450000 (1)
> v:=sqrt((-1.28672495)^2+(2.22867311)^2);
                                     v:=2.573450005 (2)
[
内積 uv=u1*v1+u2*v2+u3*v3
> uv:=(2.57345000*(-1.28672495));
                                     uv:=-3.311322323 (3)
[
面積のsの二乗を求める
> ss:=(u^2)*(v^2)-uv^2;
                                     ss:=32.89457014 (4)
[
面積Sへ変換
> s:=sqrt(ss);
                                     s:=5.735378814 (5)

```

図 A.1: 格子ベクトルから面積を求める Maple スクリプト

A1

格子定数の単位をÅからmへの変換

```
> c:=2.8473*10^(-10);
```

$c := 2.847300000 \cdot 10^{-10}$

表面積の計算 (m²) 赤本 5 章演習問題参照

```
> c1:=evalf(c^2*sqrt(3)/2);
```

$c1 := 7.020969526 \cdot 10^{-20}$

2H-3Cエネルギー差を求める(eV)

```
> d:=((-7.40498)-((-11.22624)*2/3))*1/2;
```

$d := 0.03959000000$

単位をeVからJへ変換

```
> d1:=d*1.60218*10^(-19);
```

$d1 := 6.343030620 \cdot 10^{-21}$

mJ/m²へ変換

```
> E:=evalf(d1/c1)*10^3;
```

$E := 90.34408420$

図 A.2: 単位換算から積層欠陥エネルギーまでの Maple スクリプト