

原子削除操作を加えた対称傾角粒界の  
エネルギー計算

関西学院大学 理工学部  
情報科学科 西谷研究室

2524 岩佐 恭佑

2016年3月

## 概要

本研究では, Hasson らによる Morse ポテンシャルを用いたシミュレーションの結果と大槻の実験結果との間に生まれた矛盾を原子レベルシミュレーションから解明することを目的としている.

Hasson のシミュレーション結果は,  $0^\circ$  付近と  $90^\circ$  付近で立ち上がりの傾きが異なるが, 大槻の実験結果は,  $0^\circ$  付近と  $90^\circ$  付近の立ち上がりの傾きが同じとなった. この矛盾を解明するために削除操作を行い最安定の構造を求めることを目的とする.

転位エネルギーの定量的な見積もりは, この対称傾角粒界エネルギーの実測以外にない. もし, その根拠となる Read-Shockley の理論が間違っているなら, 転位論が構築してきた理論予測全体に大きな影響を与えることを意味する重要な研究である.

手法として, 西谷研究室で開発された, maker, viewer, adjuster のツールを用いる. 削除モデルの作成も容易にできる. その作られたモデルを第一原理計算ソフト VASP を用いて構造緩和を行い系全体のエネルギーを計算する.

削除操作を使用した本研究では,  $0^\circ$  付近の結果は Hasson らによるシミュレーション結果と大槻の実験結果よりもエネルギーの値が低くなったため,  $0^\circ$  付近の最安定の構造を求める目的は達成できた. しかし  $90^\circ$  付近の傾きの結果は得られていないので矛盾を解明することはできなかった.

# 目次

|       |                               |    |
|-------|-------------------------------|----|
| 第1章   | 目的                            | 3  |
| 第2章   | 研究背景                          | 4  |
| 第3章   | 研究手法                          | 7  |
| 3.1   | モデル作成 (maker,viewer,adjuster) | 7  |
| 3.1.1 | maker 使用法                     | 7  |
| 3.1.2 | viewer 使用法                    | 8  |
| 3.1.3 | adjuster 使用法                  | 10 |
| 3.2   | 第一原理計算ソフト VASP                | 12 |
| 3.2.1 | 第一原理計算                        | 12 |
| 3.2.2 | VASP                          | 12 |
| 3.3   | 粒界エネルギー計算方法                   | 12 |
| 3.3.1 | 角度の求め方                        | 12 |
| 3.3.2 | 粒界エネルギー                       | 13 |
| 第4章   | 結果と考察                         | 14 |
| 4.1   | 計算結果                          | 14 |
| 4.1.1 | 削除という方法が正しいかの検証               | 14 |
| 4.1.2 | POSCAR_3315 と 3325 の比較        | 15 |
| 4.1.3 | 削除操作の正誤検証                     | 17 |
| 4.1.4 | viewer を使用した正誤検証              | 18 |
| 4.2   | 5529 の検証                      | 19 |
| 4.2.1 | VASP エラー                      | 19 |
| 4.2.2 | POSCAR_3325 と POSCAR_5529 の比較 | 19 |

|          |                          |    |
|----------|--------------------------|----|
| 4.2.3    | POSCAR_5529 結果 . . . . . | 20 |
| 4.2.4    | log を使用した検証 . . . . .    | 21 |
| 4.2.5    | 削除操作の結果と比較 . . . . .     | 22 |
| 第 5 章 総括 |                          | 24 |

# 第1章 目的

本研究の目的は, Hasson らによる Morse ポテンシャルを用いたシミュレーションの結果 [1] と大槻による実験結果 [2] の矛盾を原子レベルシミュレーションから解明することを目標としている. そのために, 原子の最安定の構造を求めることが必要である. 図 1.1 の赤丸で囲まれている箇所が原子間距離が近くエネルギーが高くなる. 赤丸で囲まれたどちらかの原子を削除するという操作を行い最安定の構造を見つけるのが今回の研究の目的である.

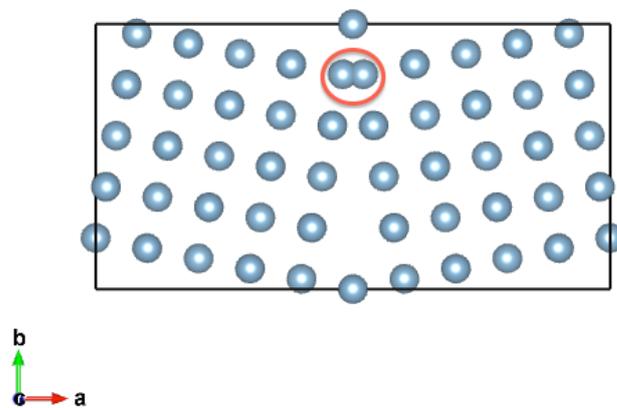


図 1.1: 3325 の原子配置が近い部分を示した図.

## 第2章 研究背景

対称傾角粒界は、欠陥構造の一つであり、完全結晶が回転角  $\theta^\circ$  ずれて結合したものである。この対称傾角粒界エネルギーの角度依存性を求めた Hasson らによる Morse ポテンシャルを用いた粒界シミュレーションの結果と大槻の実験結果には矛盾が生じている。対称傾角粒界エネルギーは、粒界に刃状転位が周期的に並んだ構造と見なす Read-Shockley の式 (2.1)(2.2) で求めることができるとされてきた [3].

$$E = E_0\theta(A - \log \theta) \quad (2.1)$$

$$E_0 = \frac{\mu b}{4(1 - \nu)} \quad (2.2)$$

$A$  は高次の弾性エネルギーや芯のエネルギーに関するエネルギー項、 $\mu$  と  $\nu$  は剛性率とポアソン比、 $b$  はバーガスベクトルの大きさ、 $\theta$  は結晶粒の傾角を示す [3].

Hasson らによる Morse ポテンシャルを用いたシミュレーションでは、対称傾角粒界のエネルギーの角度依存性は図 2.1 となった。Hasson らの結果では、 $0^\circ$  及び  $90^\circ$  付近それぞれの小傾角では立ち上がりの傾きが異なっている。これは、式 2.2 に含まれるバーガスベクトルが、 $0^\circ$  付近では  $a[001]$  であるのに対して、 $90^\circ$  付近では  $a/2[011]$  となるためである。しかし、大槻の実験データでは、図 2.2 のとおり角度  $0^\circ$  及び  $90^\circ$  での立ち上がりの傾きは全く同じという相違が生じた。この結果は、Read-Shockley の理論予測を全く否定する結果となった。2007 年に Tschopp と McDowell が EAM を用いたシミュレーションを行ったが Hasson らのシミュレーションを支持する結果 (図 2.3) になった [4].

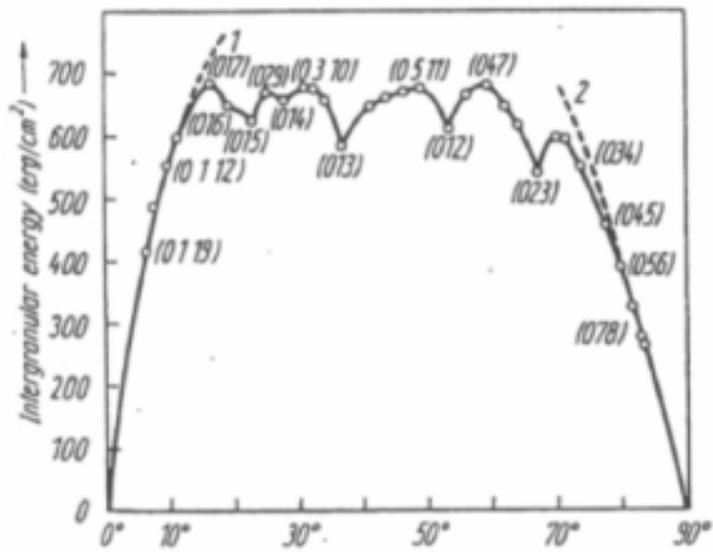


図 2.1: Hasson らによる粒界エネルギー角度依存性 [1].

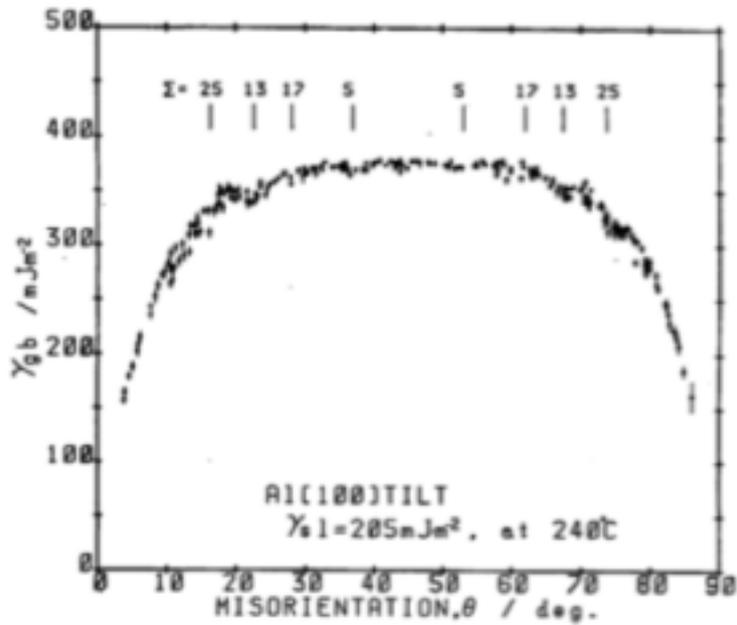


図 2.2: 大槻の実験による粒界エネルギー角度依存性 [2].

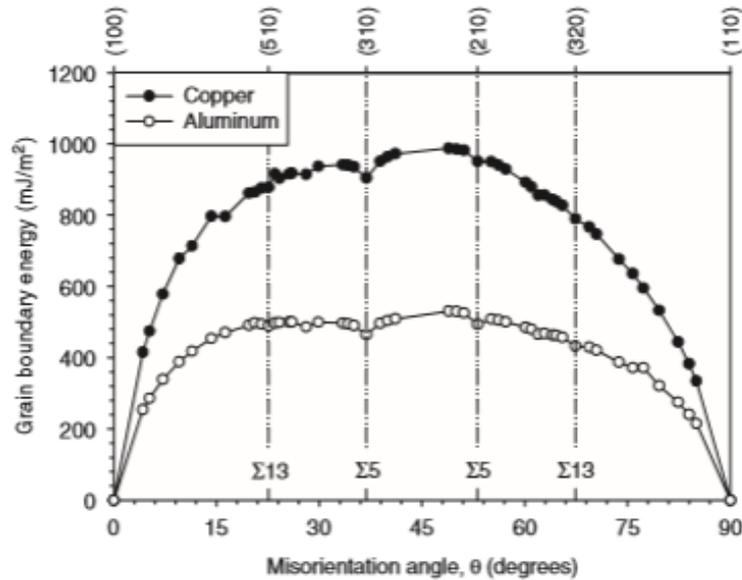


図 2.3: Tschopp と McDowell による粒界エネルギー角度依存性 [4].

西谷研究室では、原子レベルシミュレーションから矛盾を解明するために研究を行っている [5]. 最近では、原子間ポテンシャルを使用したシミュレーションならびに第一原理計算ソフト VASP によるシミュレーション、初期モデルの代わりに Sutton Vitek による粒界モデルを使用する研究を行ってきた [6]. Sutton Vitek による粒界モデルは、幾何学的に安定なモデルであり、回転角をつけた 2 つの完全結晶の間に 3 層構造から 1 層構造に変化する層 (buffer layer) を差し込むことで作成されている [7].

最近の八幡によるシミュレーション結果は、Read-Shockley の理論予測を支持しているが、大槻の実験結果よりも高いエネルギー値を示しており、八幡のシミュレーションでは再安定の原子配置を再現できていないことが示唆されていた. Sutton Vitek の考案したモデルを初期モデルとして使用し、粒子シミュレーションによる検証を進めたがその方法もうまくいかなかった. この失敗を通して削除という操作が最安定の構造を探すのに必要であるという考えに至った.

## 第3章 研究手法

ここでは、実験の操作手順を説明する。maker,viewer,adjuster は、西谷研究室で開発されたツールであり、それらを用いることで原子削除を簡単に行うことができる。計算方法として第一原理計算ソフト VASP を使用し構造緩和を行う。

### 3.1 モデル作成 (maker,viewer,adjuster)

maker は対称傾角粒界を作成する。viewer は小傾角粒界の原子モデルを視覚的に確かめる。adjuster はエネルギーの高い原子を選択し削除する。これらの使用法と使用例を記載していく。

#### 3.1.1 maker 使用法

拡張するサイズを整数で指定する。次に傾ける角度を整数で指定する。例えば、4 で指定すると  $\arctan(1/4)=0.245$  傾けたモデルの作成。

(使用例)

x 方向に 3, y 軸方向に 3, z 軸方向に 2 拡張したモデルを  $\arctan(1/5)$  傾けたモデル。

```
/Users/iwasakyoyuu/YahataProject/BoundaryModel/maker%  
ruby maker.rb 3 3 2 5  
{:output=>:normal, :expand=>:odd}  
nil  
Expanding vector and angle  
[3, 3, 2]  
0.19739555984988078  
(Al)4 (Fm-3m)
```

```
1. 000000
   8. 0827999115    0. 0000000000    0. 0000000000
   0. 0000000000    4. 0413999558    0. 0000000000
   0. 0000000000    0. 0000000000    4. 0413999558
4
Direct
  0. 5000000000    0. 0000000000    0. 0000000000 T T T
  0. 5000000000    0. 5000000000    0. 5000000000 T T T
  0. 7500000000    0. 0000000000    0. 5000000000 T T T
  0. 7500000000    0. 5000000000    0. 0000000000 T T T
2. 4514516892273006
2. 539800094641852
[[2. 4514516892273006, 0. 0, 0. 0], [0. 0, 2. 539800094641852, 0. 0],
[0. 0, 0. 0, 2. 0]]
128
"POSCAR_3325"
```

### 3.1.2 viewer 使用法

同じフォルダーに POSCAR 形式の POSCAR.txt を作成. ruby と組み合わせて自動化している. そのまま動かせば hiki.png が出力される.

(使用例)

POSCAR\_3325 を視覚的に表示する.

```
/Users/iwasakyoyuu/YahataProject/BoundaryModel/viewer%
ruby auto_viewer. rb 3325
"/Users/iwasakyoyuu/YahataProject/BoundaryModel/viewer"
". /POSCARs/POSCAR_3325"
```

実行後, 3325hiki.png(図 3.1) が出力される.

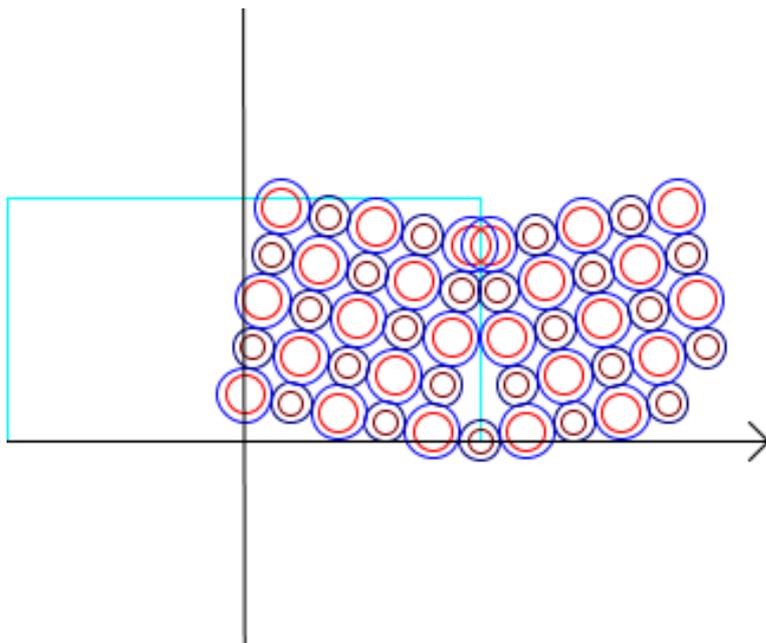


図 3.1: 3325hiki.png.

3325 は, 3315 が二枚重なったものである. 3315 は, 図 3.2 のとおりである.  $z$  軸に対して色分けをしている. 二つの図を見てわかるように, 3315 は 2 層, 3325 は 4 層である.

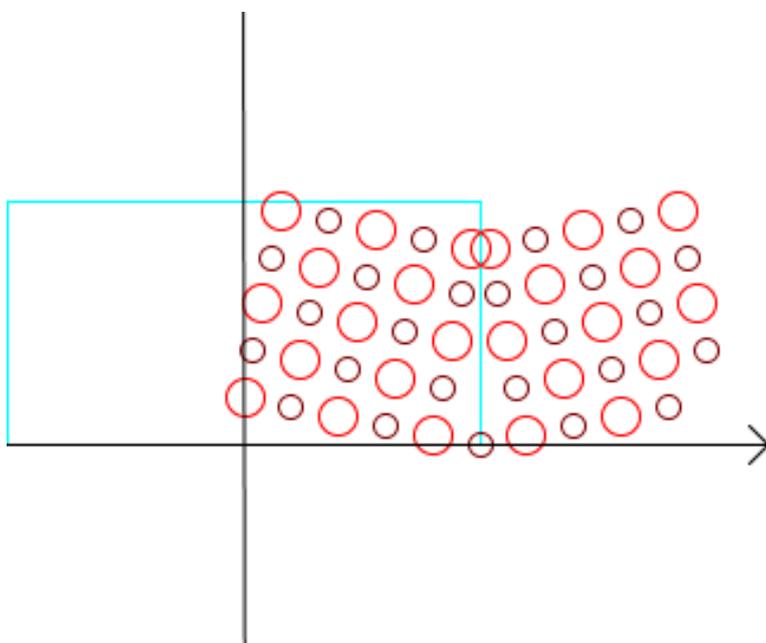


図 3.2: 3315hiki.png.

### 3.1.3 adjuster 使用法

エネルギーの高い原子で原子の配置番号が奇数のものを削除する。理由は、両方削除してしまうと向かい合う原子が消えてしまうためである。

(使用例)

POSCAR\_3325 の中の高エネルギー原子を削除する。

```
/Users/iwasakyoyuu/YahataProject/BoundaryModel/adjuster%  
ruby adjuster.rb  
input initial file_name[default POSCAR_2223]: POSCAR_3325  
"POSCAR_3325"
```

消したい POSCAR のファイルを選択する。

```
0. 460000 0. 617737 0. 500000 -19. 411868 0. 104530  
-0. 000000 1. 255208 17  
0. 540000 0. 617737 0. 500000 19. 411868 0. 104530  
0. 000000 1. 255208 16  
0. 520000 0. 810780 0. 250000 1661. 336359 -0. 144500  
0. 000000245. 655169 18  
0. 480000 0. 810780 0. 250000 -1661. 336359 -0. 144500  
-0. 000000245. 655169 19  
0. 520000 0. 810780 0. 750000 1661. 336359 -0. 144500  
0. 000000245. 655169 20  
0. 480000 0. 810780 0. 750000 -1661. 336359 -0. 144500  
0. 000000245. 655169 21  
0. 980000 0. 386086 0. 000000 -1661. 342956 0. 105534  
0. 000000245. 654336 67  
0. 020000 0. 386086 0. 000000 1661. 342956 0. 105534  
0. 000000245. 654336 68  
0. 980000 0. 386086 0. 500000 -1661. 342956 0. 105534  
0. 000000245. 654336 74
```

```

0. 020000 0. 386086 0. 500000 1661. 342956 0. 105534
0. 000000245. 654336 75
2051. 22620 eV, 198. 06223 J/m^2 (area: 82. 96467 A^2)
input operation([x]-relax, [b]ulk, [o]uter, [i]nner,
[a]ll(inner+outer), [l]og-list, [q]uit,
or indexes of deleting atoms(87,12,. . . )] : 75,67,21,19
"75,67,21,19"
#<MatchData "75,67,21,19">
["75", "67", "21", "19"]
["75", "67", "21", "19"]
["in BoudnaryMove::delete ", 75]
99
["in BoudnaryMove::delete ", 67]
98
["in BoudnaryMove::delete ", 21]
97
["in BoudnaryMove::delete ", 19]
96
"POSCAR_3325_0"
FREE ENERGIE OF THE ION-ELECTRON (eV)
-----
free energy TOTEN = -287. 5235165 eV

```

消したい原子の原子の配置番号を入力すればその原子が消える。今回の消した原子は、75,67,21,19である。この作業をした POSCAR を VASP によって計算する。

## 3.2 第一原理計算ソフト VASP

### 3.2.1 第一原理計算

第一原理計算とは、系の原子位置を入力として、シュレンディンガー方程式に従って計算し、系のエネルギーポテンシャルを出力する。第一原理計算は非常に高い精度が要求される複雑なものである。そこで、本研究では、第一原理計算ソフト VASP を用いることで、高精度の計算を実現する。

### 3.2.2 VASP

VASP は密度汎関数法による平面波・擬ポテンシャル基底を用いた第一原理電子状態計算プログラムパッケージである。密度汎関数法とは、密度汎関数理論に基づく電子状態計算法である。密度汎関数理論は、電子系のエネルギーなどの物性を電子密度から計算することが可能であるとする理論である。擬ポテンシャル法とは、原子核の内核電子を除いた、価電子に対する単なるポテンシャル関数に置き換える手法である。全電子を計算するフルポテンシャル法に比べて比較的に高速な計算が可能となる。

VASP の計算には、計算条件が記述された INCAR、計算モデルの構造が記述された POSCAR、原子情報が記述された POTCAR、計算精度を司る k-mesh が記述された KPOINTS の 4 種類の入力ファイルを使用する。上記の入力ファイルから計算を行い、系の全体のエネルギー等が記述された OUTCAR などを出力する。

## 3.3 粒界エネルギー計算方法

### 3.3.1 角度の求め方

```
angle=evalf(arctan(1/[x])*180/Pi)*2;
```

maker の使用法で説明した通り, 3325 なら  $\arctan(1/5)$  傾けたことになるため, [x] には 5 を入れる. 傾けた  $\arctan(1/5)$  はラジアンなので  $180/\text{Pi}$  で角度に直す. 反対側の角度もあるので 2 をかけることで角度が求まる.

### 3.3.2 粒界エネルギー

```
dE=(F-e0*N)
dE/Area=dE/Area*1.60218*10/2;
```

$dE/\text{Area}$  は粒界エネルギー,  $F$  は構造緩和した時のエネルギー,  $e0$  は完全結晶の時のエネルギー,  $N$  は原子数,  $\text{Area}$  は原子間の面積である.

(POSCAR.3325 の計算例)

```
e0 := -3.742593750;
N :=92;
-3.742593750
92
F := -. 34158311E+03;
-341.58311
d := F-e0*N;
2.7355150
Area := 10.14313305*8. 22096985;
83.38639099
dE :=d/Area*1. 60218*10/2;
```

## 第4章 結果と考察

### 4.1 計算結果

表 4.1 は, 粒界エネルギーの計算結果を示す. angle は, 対称傾角粒界によってできた角度, N は原子数, Area は面積. dE が粒界エネルギーである. この結果を見て粒界エネルギーがマイナスになっている POSCAR66111, POSCAR77113 の値はありえない結果となった. 粒界エネルギーがマイナスになることはない.

得られた結果から, 削除操作が間違っている可能性が浮上してきた. 削除操作が正しいのか検証する. 方法は, 原子を一つずつ消していき, 原子を消しきった時にもとの値に戻るのかということを検証する.

表 4.1:  $0^\circ$  付近の粒界エネルギー

| directory       | angle  | F[eV]           | N[atom] | Area[m <sup>2</sup> ]    | dE[J/m <sup>2</sup> ] |
|-----------------|--------|-----------------|---------|--------------------------|-----------------------|
| 1relax(3325)    | 28. 07 | -. 34158311E+03 | 92      | 10. 14313305*8. 22096985 | 0. 268                |
| 1relax2(4417)   | 16. 26 | -. 33399082E+03 | 90      | 14. 04291727*4. 10482383 | 0. 395                |
| 1relax3(5529)   | 12. 68 | -. 11668661E+04 | 312     | 18. 15886497*8. 21149337 | 0. 044                |
| 1relax4(4427)   | 16. 26 | -. 69309095E+03 | 192     | 14. 71734287*8. 39746686 | 1. 652                |
| 1relax11(66111) | 10. 39 | -. 87741452E+03 | 234     | 21. 94438713*4. 15737494 | -0. 145               |
| 1relax13(77113) | 8. 79  | -. 12406546E+04 | 330     | 26. 27679998*4. 06607758 | -0. 420               |

#### 4.1.1 削除という方法が正しいかの検証

検証をするにあたって, POSCAR\_3325 と POSCAR\_3315 のモデルを使用する. 削除する際に, 一つずつの原子を削除していき, 4 の倍数個消した時にエネルギーが最安定の構造になっているかを確認する. 消し続けた時に, 周期的境界条件のもと計算しているため元の値 (削除していない時の値) に戻ればこの削除操作は正しいということになる.

## 4.1.2 POSCAR\_3315 と 3325 の比較

図 4.1 は、3315 と 3325 の原子を削除していったエネルギーを比較したグラフである。緑のグラフは 3315、紫のグラフは 3325 である。図 4.1 を見て 3315 と 3325 の値が全く違うことがわかる。3315 はほとんどエネルギーに変化がないが、3325 は変化している。原子を 4 個消した時と 8 個消した時に一番低いエネルギーになっていることがわかる。3315 は、1 個消してもエネルギーにほぼ変化がなかった。層の厚みが足りないためこのような結果になったと考えられる。3325 では、4 層あるため求めていた計算結果が出たと考える。次は、viewer を使い比較する。

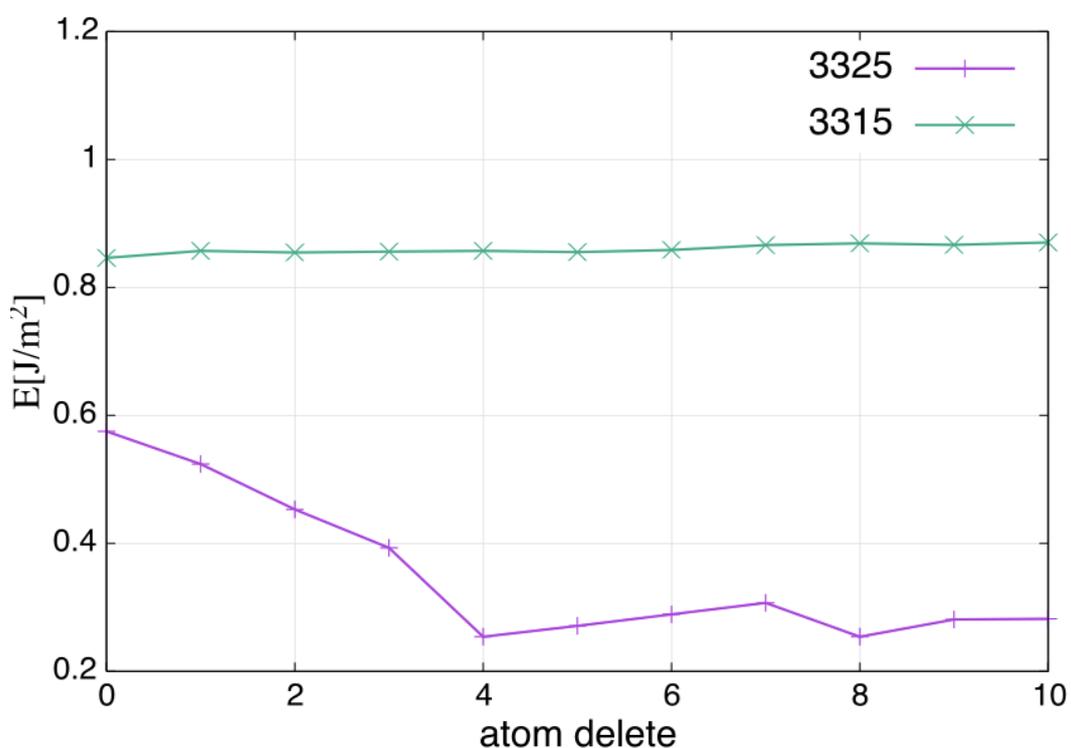


図 4.1: 3315 と 3325 の原子を削除していったエネルギー比較。

図 4.2 と図 4.3 を比較すると, 消えているのは二層目の同じ部分が消えていることがわかる. 周期的境界条件により, 反対の原子が消えているように感じるが同じ部分が消えている. 3325 の方は下の赤い層から一つ, 青い層から一つの原子が削除されているので最安定の構造になっている. 次の図は 8 個の原子と 4 個の原子を削除した図である.

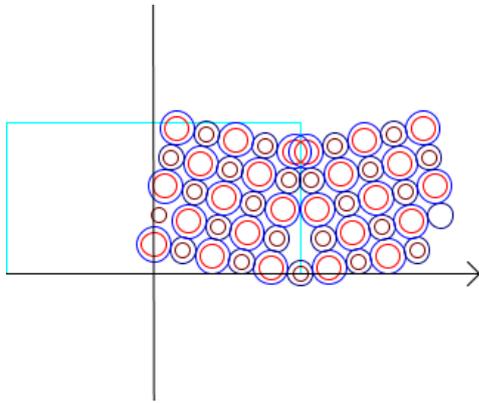


図 4.2: 3325 から 2 個原子を削除.

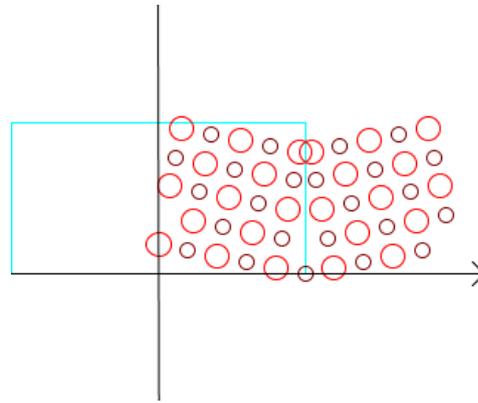


図 4.3: 3315 から 1 個原子を削除.

図 4.4 と図 4.5 を見てもわかるように 3325 は, 3315 と同じ部分が消えていて, 3325 は一つの層ごとに消えていることがわかる. 3315 だと一つの層からしか原子を削除できないため安定した構造にならなかった. 3325 で 4 つの原子と 8 個の原子を削除した時に最安定の構造になった理由は, 真ん中の層から 2 個, 外側の周期的境界条件に沿った原子を 2 個削除しているからである.

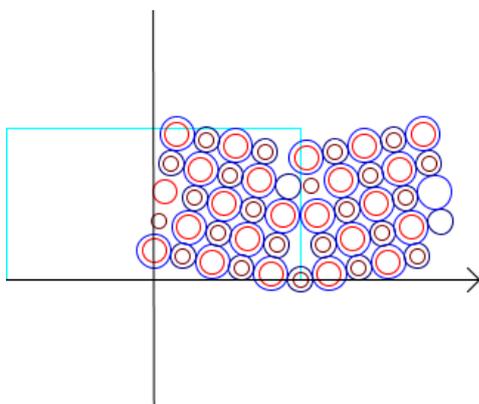


図 4.4: 3325 から 8 個原子を削除.

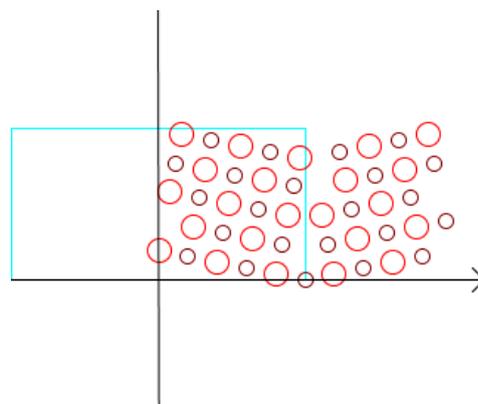


図 4.5: 3315 から 4 個原子を削除.

### 4.1.3 削除操作の正誤検証

図 4.6 は、3325 の原子を消し続けて得られたエネルギーのグラフである。17 個目の原子を削除した際に元のエネルギーに戻った。4 と 8 個消した時が最安定のエネルギーであることに変化はなかった。今回の結果から、削除操作が間違っていないことがわかった。この方法で 5529 の値も計算する。5529 は、粒界エネルギーが低い結果が得られた。削除操作は正しいと検証されたので、緩和の方法が正しいか検証する。

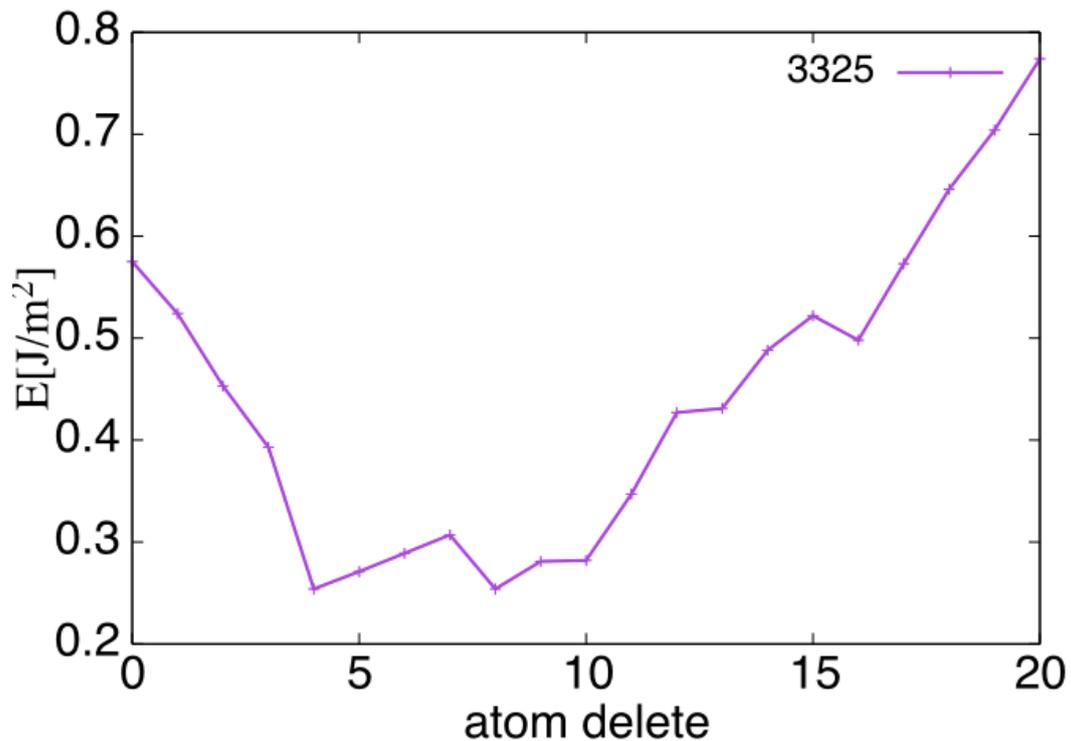


図 4.6: 3325 を削除し続ける。

#### 4.1.4 viewer を使用した正誤検証

構造緩和した後の構造を viewer で比較した. 図の 4.7 では y 軸方向に動いている様子は見られないが, 図 4.8 では y 軸方向に動いている様子が分かる. このことから 4 個原子を消した時は, 安定の構造になったのは正しいといえるが, 6 個消した時は正しい構造緩和ができていない. z 軸方向に原子が動いている様子があるので正しい構造緩和ができたとは言えない.

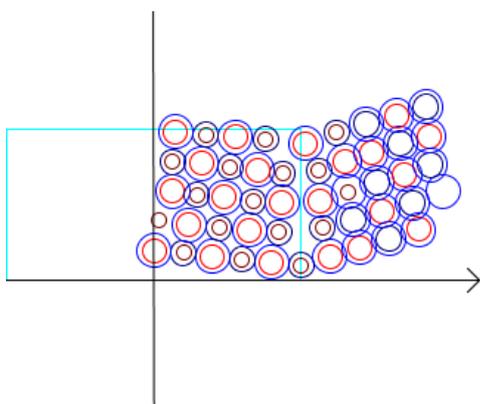


図 4.7: 4 個原子を削除し構造緩和した時の図.

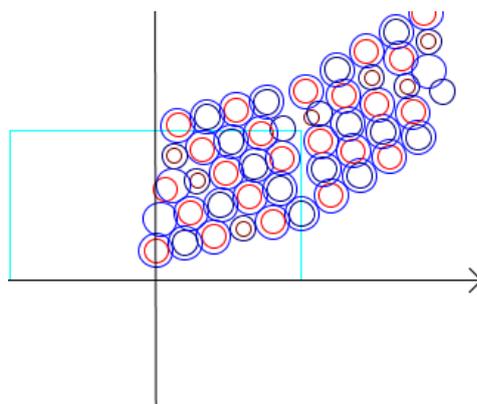


図 4.8: 6 個原子を削除し構造緩和した時の図.

## 4.2 5529の検証

### 4.2.1 VASP エラー

POSCAR\_5529 を一つずつ削除して 3325 と同じように計算を行った。結果は、エラーが出て計算ができなかった。前の 3325 の原子を一つずつ削除していき削除操作が正しいことが検証された。POSCAR の中身に間違いがあるか、3325 と 5529 を比較した。

```
bond charge predicted
      N      E          dE          d eps
      ncg      rms      rms(c)
DAV:  1  -0.117004345556E+04  -0.11700E+04  -0.10717E+00
10380  0.109E+00  0.216E-01
DAV:  2  -0.117006435860E+04  -0.20903E-01  -0.43307E-02
12516  0.378E-01  0.345E-01

-----
mpirun noticed that process rank 0 with PID 10538 on node
asura5 exited on signal 9 (Killed).
-----
```

### 4.2.2 POSCAR\_3325 と POSCAR\_5529 の比較

3325 と 5529 の POSCAR を比較してみた時に座標横についている数字が 1 か 0 かという違いがあった。下の四角で囲まれている 3325 と 5529 の POASCAR を見れば違いがわかる。5529 と 3325 の違いはこの部分しかないので 0 をすべて消してみるとエラーもなく求めたい値が出た。0 だと求まらなかった理由は TRUE と FALSE にある。本来ならば T か F で示す。0(T) の時は原子が移動できる。1(F) の時は原子が移動できない。構造緩和とは原子を動かして緩和するものなので 1 を表記したものではありません。これにより計算結果がマイナスになってしまった。このことをふまえたうえで計算を続ける。

```
POSCAR_3325
```

```
kiyohara@asura0:~/iwasa_calc/3325/98frelax$ emacs POSCAR
```

```
0. 500000 0. 000000 0. 000000 1 1 1
0. 600000 0. 038609 0. 250000 1 1 1
0. 400000 0. 038609 0. 250000 1 1 1
0. 580000 0. 231651 0. 000000 1 1 1
0. 420000 0. 231651 0. 000000 1 1 1
0. 500000 0. 000000 0. 500000 1 1 1
0. 600000 0. 038609 0. 750000 1 1 1
```

```
POSCAR_5529
```

```
kiyohara@asura0:~/iwasa_calc/5529/2frelax$ emacs POSCAR_5529_2
```

```
Direct
```

```
0. 500000 0. 000000 0. 000000 0 0 0
0. 555556 0. 012203 0. 250000 0 0 0
0. 444444 0. 012203 0. 250000 0 0 0
0. 549383 0. 122034 0. 000000 0 0 0
0. 450617 0. 122034 0. 000000 0 0 0
0. 500000 0. 000000 0. 500000 0 0 0
0. 555556 0. 012203 0. 750000 0 0 0
```

### 4.2.3 POSCAR\_5529 結果

図 4.7 のグラフを見てわかるように 4 個消した時と 8 個消した時で最安定の構造になっていることがわかる. 3325 と比較してみてエネルギーの差はあまりないが最安定の構造になる削除の個数は変わらなかった. 12 個消した時はやはりエネルギーが高くなってしまった. 3325 と 5529 の実験結果から最安定の構造を求めるためには 4 か 8 個原子を削除すればよいということがわかった. この得られた結果から大槻の実験結果と比較していく.

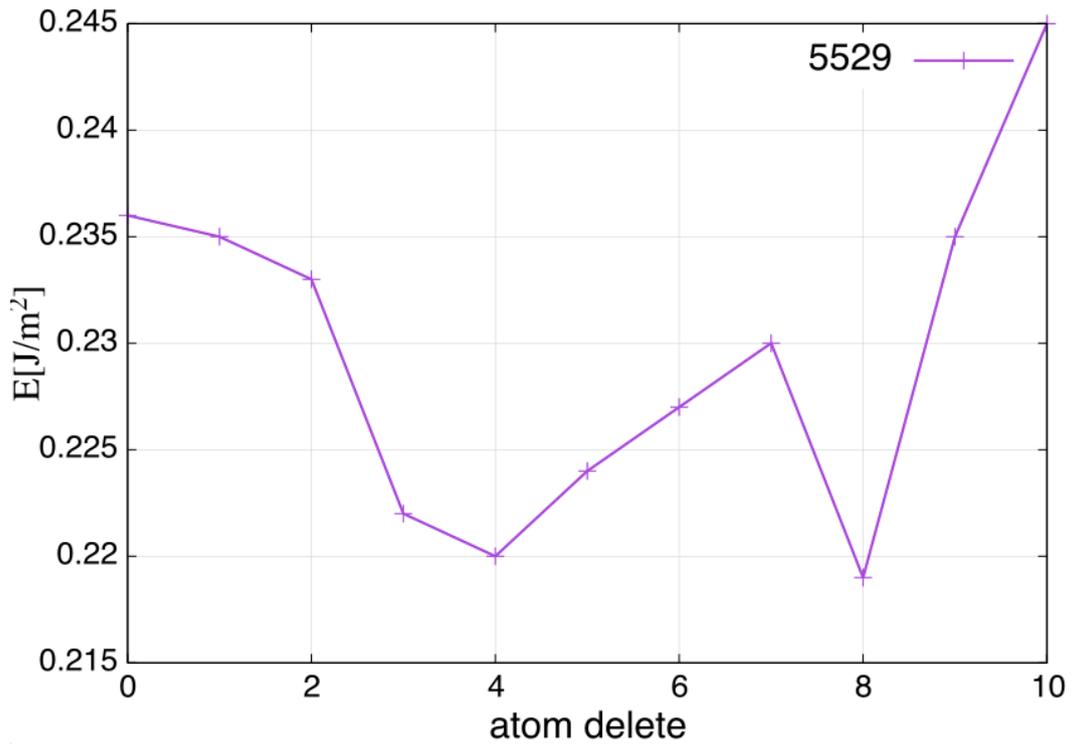


図 4.9: 5529 の原子削除していった粒界エネルギー.

#### 4.2.4 log を使用した検証

第 2 章で記載したとおり, Read-Shockley による粒界エネルギー  $E$  の式は式 4.1 である.

$$E = E_0\theta(A - \log \theta) \quad (4.1)$$

式 4.1 の両辺を  $\theta$  で割ると, 式 4.2 になる.

$$\frac{E}{\theta} = E_0A - E_0 \log \theta \quad (4.2)$$

粒界エネルギー  $E$  を角度  $\theta$  で割ることで,  $\log \theta$  の一次関数式であらわすことができる. 式 4.2 を  $\log \theta$  の一次関数で考えると, 傾きは  $E_0$  になる.  $E_0$  は, 第 2 章から式 4.3 であり, 傾きにバーガスベクトル  $b$  が含まれる.

$$E_0 = \frac{\mu b}{4(1 - \quad)} \quad (4.3)$$

シミュレーションの結果を  $\log \theta$  の一次関数で示し, Hasson らによる Morse ポテンシャルを用いたシミュレーションの結果と大槻の実験結果と村上のシミュレーション結果と比較して検証する.

#### 4.2.5 削除操作の結果と比較

図 4.8 は, 削除操作を用いたシミュレーション結果, Hasson らのシミュレーション結果, 大槻の実験結果, 村上のシミュレーション結果のエネルギー比較のグラフである. 今回の削除を使ったシミュレーションでは, 他の結果よりも低い値を示した. このことから最安定の原子位置を再現できた可能性がある. しかし, 今回の削除操作では,  $0^\circ$  付近の構造しか示せていない.  $90^\circ$  付近の構造を求めないと矛盾の解明にはつながらない. もしかしたら立ち上がりの傾きは異なるが大槻の実験結果よりもエネルギーが低くなるかもしれないし, 立ち上がりの傾きが同じとなる可能性もなる. そのため  $90^\circ$  付近の構造が大事になってくる.

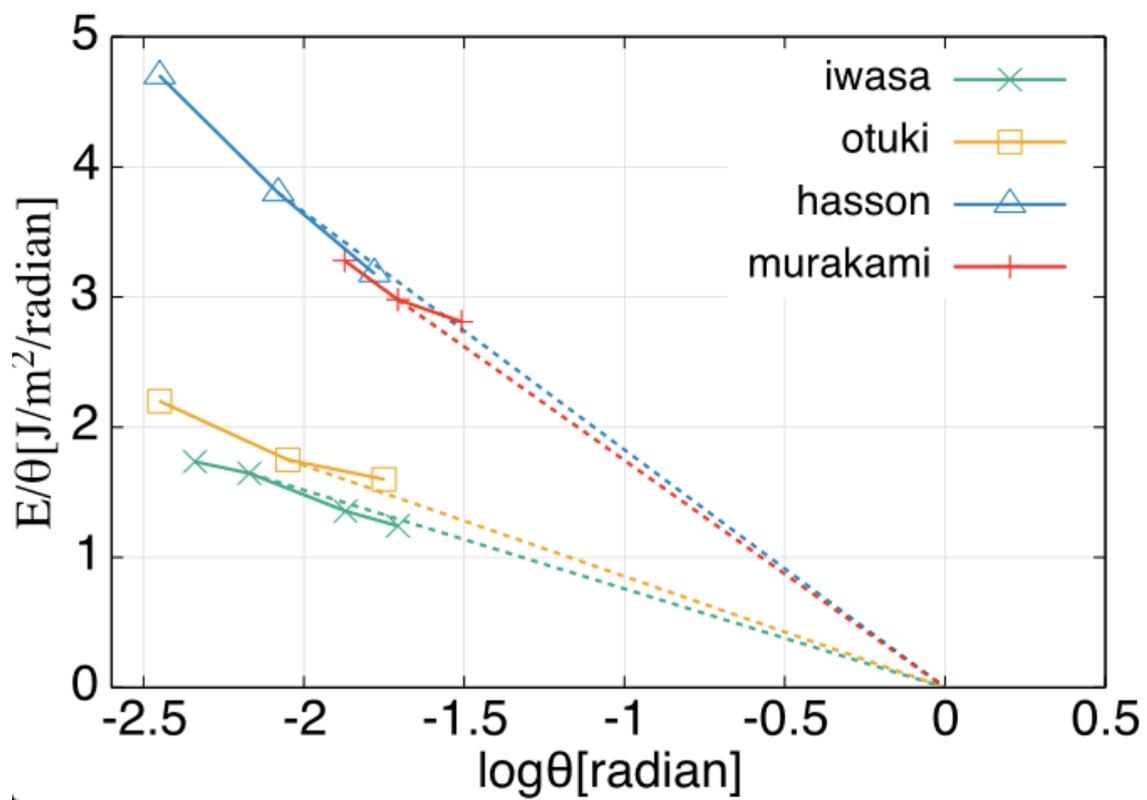


図 4.10: 削除を用いたシミュレーション結果と Hasson らのシミュレーション結果 [1], 大槻の実験結果 [2] と村上の計算結果 [6] の比較.

## 第5章 総括

本研究の目的は, Hasson らによる Morse ポテンシャルを用いた粒界シミュレーションの結果と大槻の実験の矛盾を原子レベルシミュレーションから解明するために最安定の構造を見つけることを目的とした。

削除という方法を用いてエネルギーがどのようになるのかを検証した。しかし, 期待していた結果とは全く違う値が出てきた。この失敗から第一に削除操作をしてよいか検証を始め, 削除操作を続けた結果, 周期的境界条件が守られていたため削除してもよいという結論が得られた。

村上の Sutton Viteck のモデルを用いた幾何学的に安定とされるモデルを使用したシミュレーションで得られた結果は Hasson の結果を支持していたが, 削除を用いた本シミュレーションでは大槻の実験結果を支持する値が得られた。大槻の実験結果と比べても低いエネルギー値が示されており, この削除という操作によって, 大槻の構造よりも安定した構造が得られた。しかし, すべての結果に対して viewer などによる構造緩和の達成を確認しているわけではないので, より詳細な検証が必要である。さらに,  $0^\circ$  付近では本研究で最安定の構造を求めることができたが, 今後  $90^\circ$  付近についての安定構造を検証する必要がある。

## 参考文献

- [1] G. C. Hasson and C. Goux, *Scripta Met.*, 5(1971), 889.
- [2] A. Otuki, *J. Material Science*, 40(2005), 3219.
- [3] W. T. Read and W. Shockley, in "Imperfections in Nearly Perfect Crystals," (Wiley, N. Y. 1952), p.352.
- [4] M. A. Tschopp and D. L. McDowell, *Phil. Mag.*, 87(2007), 3873.
- [5] 「小傾角粒界粒子シミュレーションの原子ポテンシャル依存性」, 八幡裕也 (関西学院大学院 理工学研究科情報科学専攻 修士論文 2015).
- [6] 「VASP による粒界エネルギーの第一原理計算」, 村上成那 (関西学院大学 理工学研究科情報科学専攻 卒業論文 2014).
- [7] A. P. Sutton and V. Vitek, *Phil. Trans. R. Soc. Lond.*, A309 (1983), 1.

# 謝辞

本研究を進めるにあたり終始多大なる有益なご指導およびご丁寧な助言をいただき、関西学院大学西谷滋人教授、研究室の先輩同期の方々に深く感謝するとともに心より御礼申し上げます。