

卒業論文

Cuの小傾角粒界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 西谷研究室

27014558 藤村 尚輝

2018年3月

概 要

小傾角粒界エネルギーは、Read-Shockley の式により求まるとされている。経験的ポテンシャル (EAM) を用いた粒界エネルギーの角度依存性の計算結果は、その予測どおりに、回転角 0° および 90° 近傍の立ち上がり角に違いが見られる。しかし、測定された実験結果にはそのような違いはなく、 0° および 90° 近傍ともに同じ立ち上がり角である。第一原理計算を用いた、より信頼性の高い計算でも、EAM に近い結果が得られている。

以上の計算および実験結果は、Al での研究である。本研究は、Al と同じ fcc 構造をもつ Cu を対象に、小傾角粒界エネルギーの第一原理計算を行い、EAM による計算結果と実験結果との違いの原因を解明することを目的としている。

第一原理計算には、VASP を用いた。Cu の計算時間が、Al に比べ、大幅に大きかったため、比較的計算時間の短い 0° 近傍においての粒界エネルギーの角度依存性を求めた。その結果、第一原理計算による結果は、EAM による計算に近い結果となった。

目次

第1章	はじめに	2
第2章	背景と手法	3
2.1	小傾角粒界エネルギー	3
2.2	Read-Shockley の式の導出	4
2.3	第一原理計算	6
第3章	結果と考察	8
3.1	$E - V$ 曲線の作成	8
3.2	粒界モデルの作成	9
3.3	外部緩和	11
3.3.1	最安定エネルギーの囲い込み	11
3.4	Al と Cu の計算時間比較	12
3.5	0° 近傍の粒界エネルギー	13
3.5.1	回転角 $22.62^\circ(\arctan(1/5))$	13
3.5.2	回転角 $16.26^\circ(\arctan(1/7))$	17
第4章	おわりに	20
第5章	付録	21
5.1	回転角 $22.62^\circ(\arctan(1/5))$	21
5.1.1	原子数 46	21
5.1.2	原子数 108	23
5.2	回転角 $16.26^\circ(\arctan(1/7))$	27

第1章 はじめに

小傾角粒界エネルギーは，Read-Shockley の式により求まるとされている [1]．図 1.1 の青点線で示した経験的ポテンシャル (EAM) を用いたシミュレーション結果は， 0° および 90° 近傍における立ち上がり角に違いが見られ [2]，Read-Shockley の式を支持する結果となっている．ところが，緑実線で示した実験結果は 0° および 90° 近傍どちらも同じ角度で，ほぼ左右対称のエネルギー曲線を描いている [3]．また，第一原理計算を用いた，より信頼性の高い計算でも，赤破線に示すように EAM に近い結果が得られている [4]．

以上の計算および実験結果は，Al での研究である．本研究では，Al と同じ fcc 構造をもつ Cu を対象にして，小傾角粒界エネルギーの第一原理計算を行う．これにより，粒界エネルギーの角度依存性の 0° および 90° 近傍に見られる経験的ポテンシャルによる計算結果と実験結果との違いの原因を解明する．

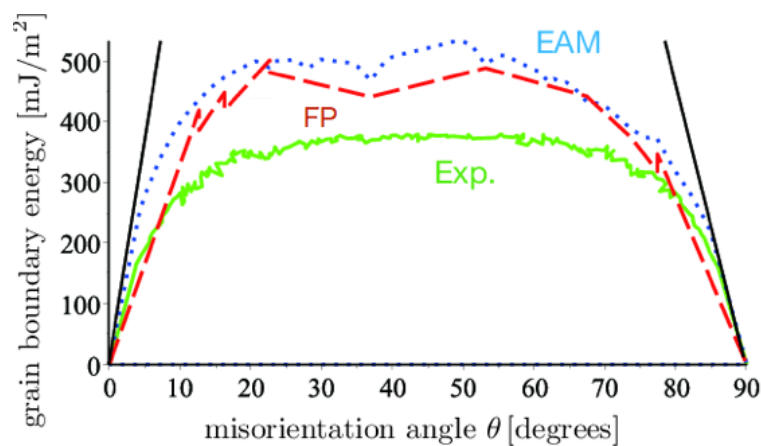


図 1.1: Al の対称傾角粒界エネルギー，EAM の計算結果 (青点線)，実測値 (緑実線)，および第一原理 (FP) 計算値 (赤破線)． 0° 度， 90° 度近辺の直線は EAM の立ち上がり角を示す．

第2章 背景と手法

2.1 小傾角粒界エネルギー

物質は，単結晶，多結晶，非晶質に分けられる．中でも多結晶とは，図 2.1 のように単結晶の粒がランダムに隣接している状態である．その粒には，それぞれ方位があり，方位の異なる結晶同士が隣接する境界部分を粒界という．特に，図 2.2 の Read-Shockley モデルが示すような，二つの結晶が回転角 θ 度の角度をなして結合しているものを対称傾角粒界と呼び，粒界部分に赤で示した転位が等間隔 D で並ぶことで構成される．粒界が存在する物質は，粒界のない物質よりもエネルギーが高い状態にあり，そのエネルギーの差を粒界エネルギーという．角度 θ が $0^\circ \sim 30^\circ$ 程度のものを小傾角粒界と呼ぶ．

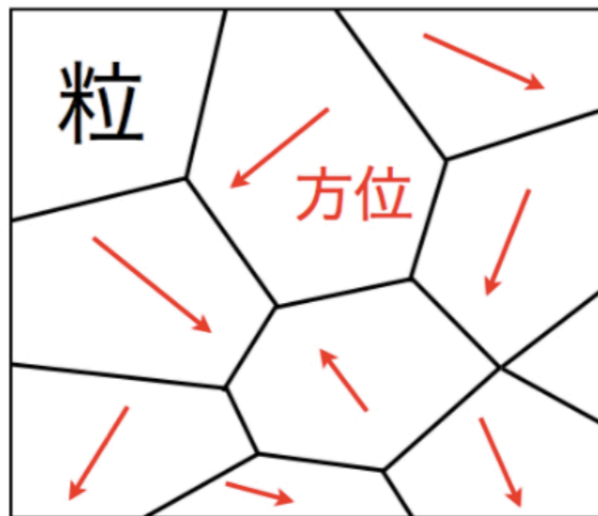


図 2.1: 粒，粒界，結晶方位の模式図 [5].

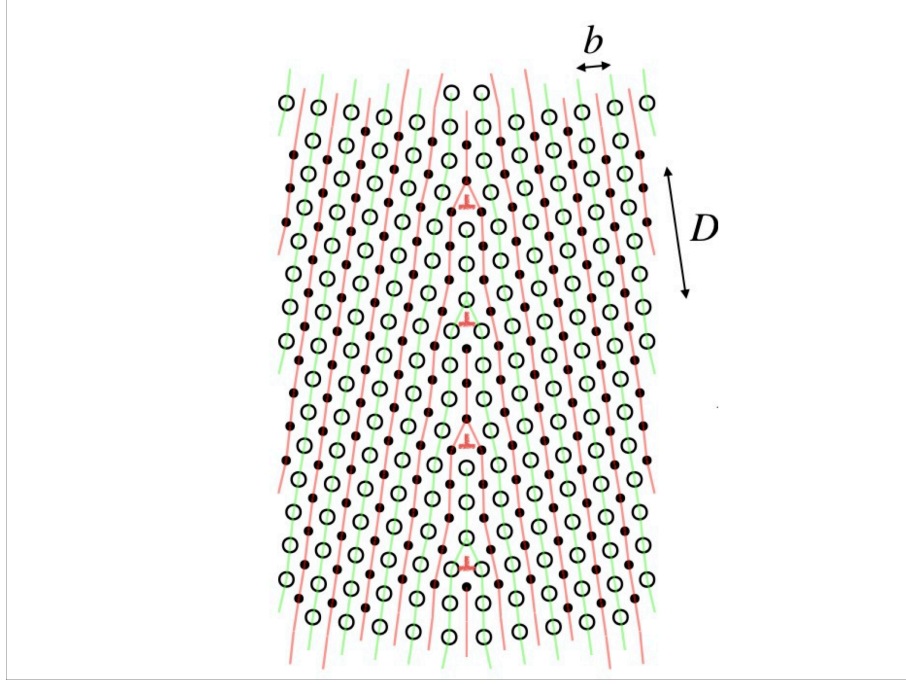


図 2.2: Read-Shockley モデル [1].

2.2 Read-Shockley の式の導出

粒界エネルギーは、転位論に基づく Read-Shockley の式で求まるとされてきた [1] . Read-Shockley の式の導出を以下に示した .

図 2.2 の Read-Shockley モデルを用いて、単純な対称傾角粒界を考える . 粒界の傾角 θ は、転位間隔 D と転位により歪む長さ、すなわちバーガースベクトル b を用いて

$$\frac{b}{D} = 2 \sin \frac{\theta}{2} \approx \theta$$

となる . 転位間隔 D は傾角 θ との間に、

$$-\frac{d\theta}{\theta} = \frac{dD}{D} = \frac{dR}{R}$$

の関係がある . R は次で考える転位の弾性場の半径である . 全系を転位論でよく用いられる領域、すなわち、転位芯 (I)、転位の弾性場 (II)、そのほかの完全結晶部 (III) に分けて考える . それぞれの領域の持つエネルギーを E_I, E_{II}, E_{III} として、 E_I, E_{III} は、変わらない

と仮定する．そうすると E_{II} は，刃状転位一本あたりの弾性エネルギー E_{\perp} に等しく，

$$dE_{\perp} = \frac{1}{2}\tau b dR$$

であるが， τ は spherical cylinder を仮定すると，

$$\tau = \tau_0 \frac{b}{R} + \tau_1 \left(\frac{b}{R} \right)^2 + \cdots$$

と考えると，高次項を無視して代入すると

$$dE_{\perp} = \frac{1}{2}\tau_0 b^2 \frac{dR}{R}$$

となる．これに， $\frac{dR}{R} = -\frac{d\theta}{\theta}$ を代入して積分を取ると，

$$E_{\perp} = \frac{1}{2}\tau_0 b^2 (A - \log \theta)$$

が得られる．界面エネルギー，すなわち単位面積当たりのエネルギー E は，

$$E = \frac{E_{\perp}}{D} = E_{\perp} \frac{\theta}{b}$$

であるため，

$$E = \frac{1}{2}\tau_0 b \theta (A - \log \theta)$$

を最終的に得る．つまり界面エネルギーの角度依存性は転位のバーガースベクトルに直接依存した関数となる．

図 2.3 は $E/\theta - \log \theta$ をプロットしている．これは，先ほど得られた界面エネルギーの表式を

$$\frac{E}{\theta} = \frac{1}{2}\tau_0 b (A - \log \theta) = B - C \log \theta$$

と変形できることから求めたプロットである． A, B, C は適当な定数となる．横軸を $\log \theta$ にしているため，マイナスの領域でのプロットとなっており，原点近傍はランダム方位を，負に大きくなると 0° および 90° 近傍の値を示している．

Read-Shockley が予測した小傾角だけでなく，ほぼ全域において直線的な依存性を示し

ている．EAM を用いて求めた Tschopp & McDowell による計算結果は 0° , 90° 近傍の立ち上がり角度が違う傾向を示している [2]．ところが，実験的に確かめた大槻の結果は，これとは異なりどちらも同じ立ち上がり角度を示している [3]．Hasson & Goux が示している実験結果及び計算結果においても不一致が見られる [6]．さらに，Al と同じ fcc 構造を示す Cu に対する結果でも実験と計算の不一致を確認することができる [7]．

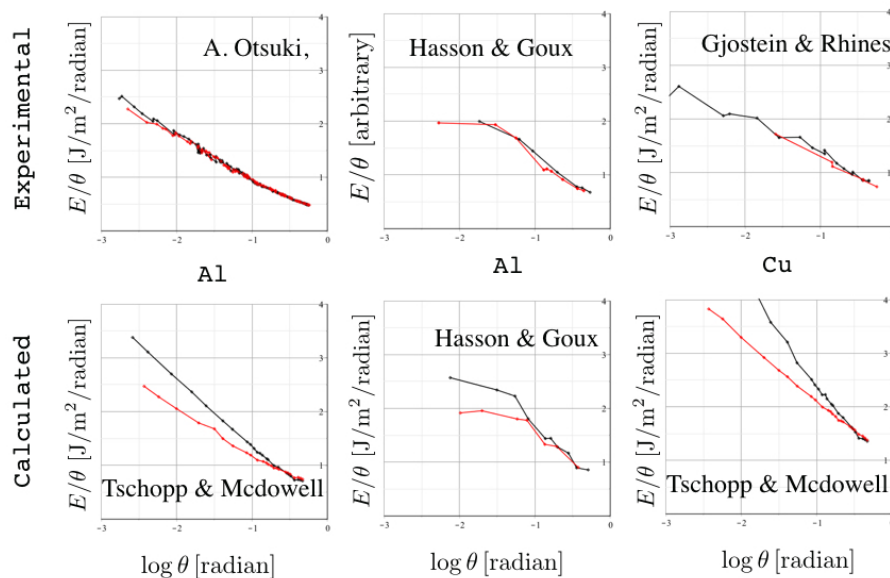


図 2.3: 実験結果と計算結果の $E/\theta - \log \theta$ プロットでの比較．Hasson&Goux の実験値は arbitrary であるため，見やすいように適当に補正している．

2.3 第一原理計算

本研究では，第一原理計算で粒界エネルギーを求めていく．第一原理計算とは，量子力学を支配するシュレディンガー方程式を正確に解いて，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計算のことである．EAM の計算値の実測値に対する不一致は，計算に用いられた原子間ポテンシャルの精度が低いことが原因と考えられる．よって，より精度の高い第一原理計算を使う．

しかし，第一原理計算は EAM などの経験的ポテンシャルに比べて，非常に時間のかかる計算である．第一原理計算にはいくつかの流儀があるが，本研究では，それらの中でも比較的計算時間の短縮できる VASP というパッケージを使用する．

VASP は平面波基底・擬ポテンシャルを使っている．原子の周りのポテンシャルを本物ではなく，平面波をうまく再現するように調整されたポテンシャル (pseudo potential) を使っているため，full ポテンシャルに比べて計算時間が節約されている．

しかしながら，Cu は，spd 電子を取り入れる必要があり，Al の sp 電子に比べて複雑な電子構造となるため，計算時間がかかることが予想される．

また，その電子構造を平面波基底の重ね合わせによって表現するため，FFT などをつかって効率よく電子構造を再現するとされている．しかし，電子の表現に平面波を用いるので，原子モデルには周期的境界条件が課される．したがって，モデルをうまく生成するには工夫が必要となる．

本研究での計算条件は次の通りである．KPOINT は，粒界モデルの大きさが粒界傾角によりそれぞれ異なるため，VASP が用意している自動生成を用いて，Cu は d -電子を含むが，Al の初期設定と同じ length=50 で行った．擬ポテンシャルには PAW を使い，エネルギーカットオフは 300eV で計算した．緩和は原子緩和を共役勾配法による自動 (IBRION = 2) で，外部形状は手動で緩和させて最安定のエネルギーを求めた．

第3章 結果と考察

3.1 $E - V$ 曲線の作成

幾つかの設定ファイル (POSCAR, INCAR, KPOINTS) が正しく設定されているかを確認するために, $E - V$ 曲線を最初にもとめた. $E - V$ 曲線とは, 図 3.1, 図 3.2 のように, 横軸を体積, 縦軸をエネルギーとしてデータを plot したものをいう. エネルギーの最小値を原子数で割ったものが凝集エネルギーとなり, その時の体積の 3 乗根が格子定数となる.

最初に Cu の $E - V$ 曲線を作成し, 凝集エネルギーと格子定数を求め, それらを用いて計算を進めたが, 予測とは全く異なる結果が得られた. 原因として, 原子のポテンシャル情報が記述された POTCAR ファイルが正しくないことが考えられた. 実際に, POTCAR ファイルには Cu ではなく, Al のポテンシャル情報が記述されたものを使用していたので, そこを修正し, 計算をやり直した. しかし, それでもなお予測する結果が得られなかった. ため, さきに Al の $E - V$ 曲線を作成し, Al でうまくいった設定ファイルを用いて Cu の $E - V$ 曲線を作成することにした.

まずは, Al の $E - V$ 曲線について記す. はじめは, 格子定数や凝集エネルギーの値に大きな誤差が見られた. その原因として考えられたのは, 計算条件が記述された INCAR ファイルが誤っていることである. そこで, INCAR ファイル内を以下のように変更すると, 誤差を最小限に抑えることができた. 得られた結果を図 3.1 に示した. 最安定のエネルギーとなる凝集エネルギーは -3.73910eV で, その時の格子定数は 4.04107\AA であった.

```
IBRION = 2
```

```
NSW = 40
```

```
IBRION = -1
```

```
NSW = 1
```

同様にして，Cu の $E - V$ 曲線を作成した．得られた結果を図 3.2 に示した．最安定のエネルギーとなる凝集エネルギーは -3.73663eV で，その時の格子定数は 3.63589\AA であった．この値を用いて，粒界エネルギーを求めていく．

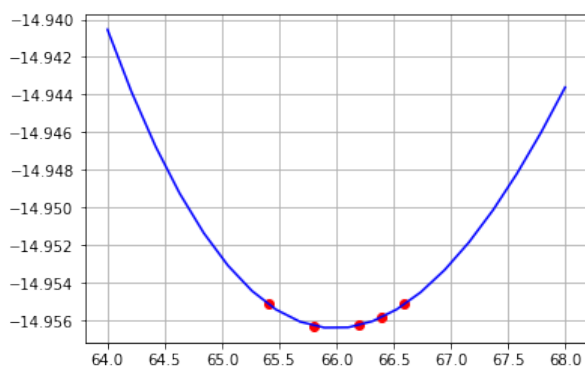


図 3.1: Al の $E - V$ 曲線．

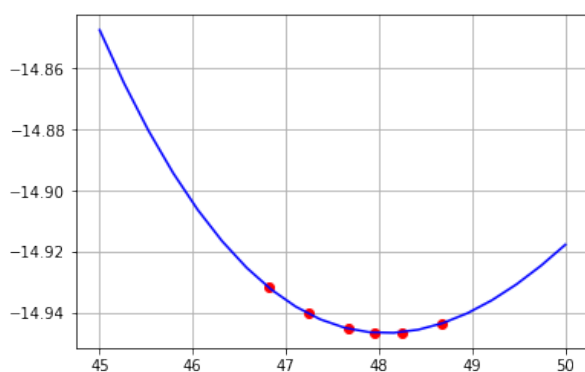


図 3.2: Cu の $E - V$ 曲線．

3.2 粒界モデルの作成

第一原理計算には，VASP を用いるため，粒界モデルを POSCAR として使用する．その粒界モデルを作成する必要がある．例として，回転角 $\theta = \arctan(1/5)$ におけるユニットセルを図 3.3 に示す．図 3.3[a] から [b] のように近すぎる原子を削除することで，図 3.4 のような粒界モデルが出来上がる．

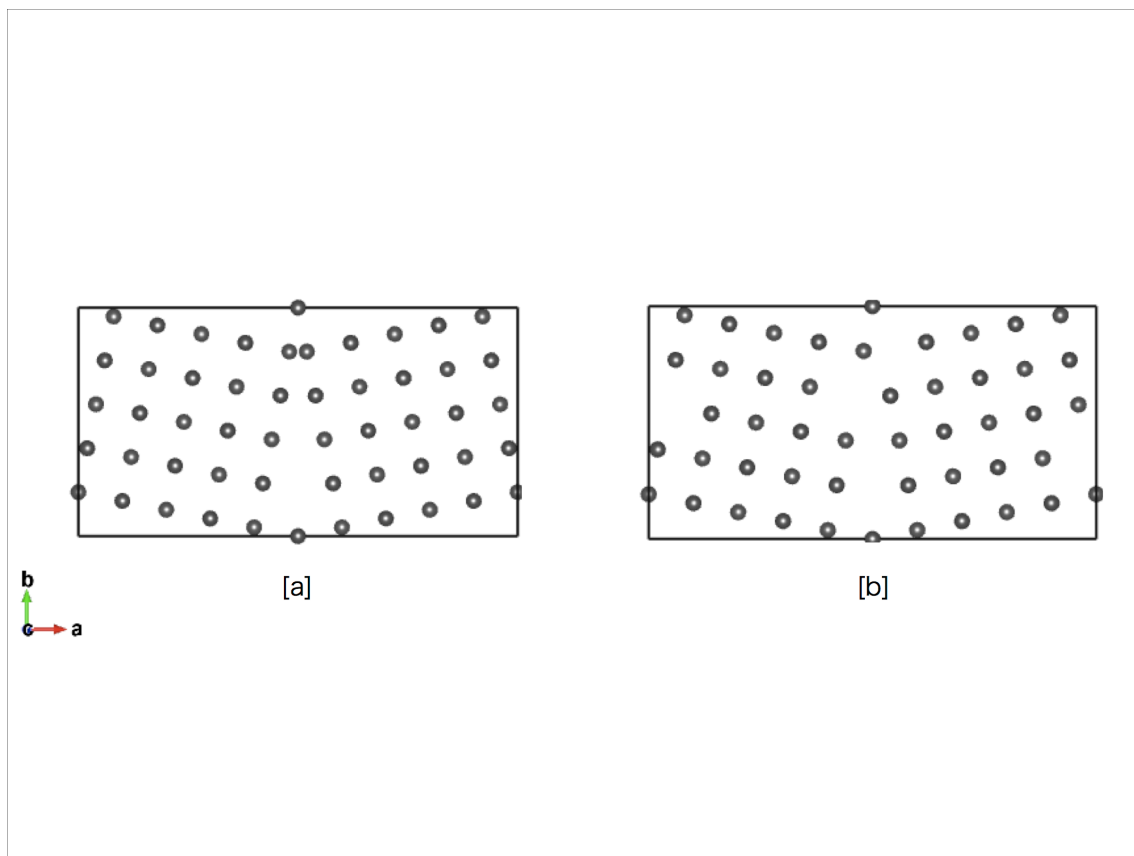


図 3.3: 回転角 $=\arctan(1/5)$ におけるユニットセル．近い原子の削除前 [a], 削除後 [b] を表している．

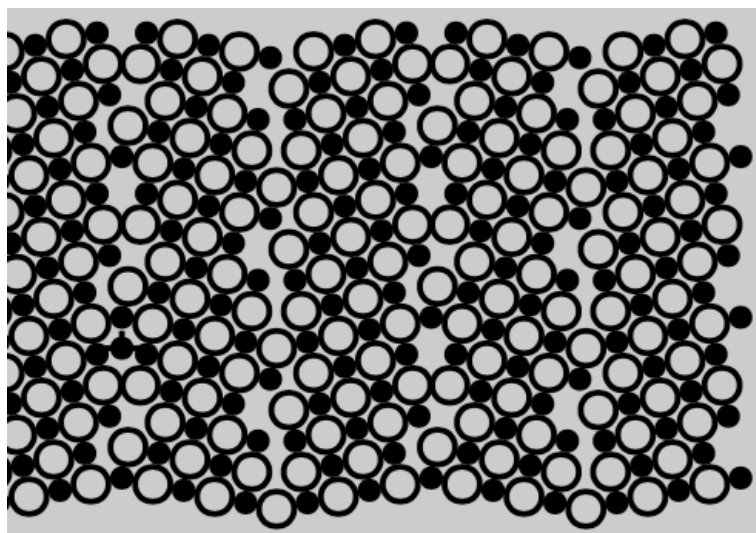


図 3.4: 回転角 $=\arctan(1/5)$ における粒界モデル．

3.3 外部緩和

最安定のエネルギーを求めるために、外部緩和を行う。外部緩和とは、外部のセル形状を変形させる手法である。本研究では、この外部緩和を手動で行った。

3.3.1 最安定エネルギーの囲い込み

計算終了後、図 3.5のように、外部のセルサイズ変化によるエネルギーの値を 3 次元 fitting し、エネルギーの低い位置を検討する。計算を繰り返し行うことで、最安定のエネルギーの位置を模索していく。

図 3.5は、真ん中の点が一番低い値となっており、囲い込みがうまくいっている。つまり、この点が最安定のエネルギーとなる。

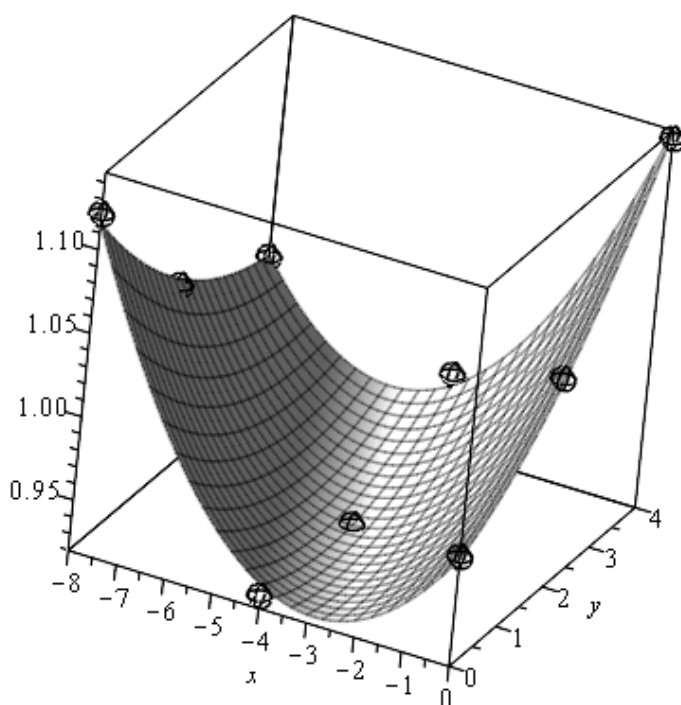


図 3.5: 外部のセルサイズ変化によるエネルギー値の 3 次元 fitting .

3.4 Al と Cu の計算時間比較

回転角 $\theta = \arctan(1/5)$ のときの Al と Cu の計算時間の比較をおこなった．計算には，同じ VASP を使用している．

OUTCAR ファイルには，一点に要する計算時間が書かれていない．よって，`ls -lat` コマンドで，一点の計算に用いるファイルが入った directory を時間でソートすることで計算が開始した時刻，終了した時刻を確認し，その差から一点の計算に要した時間を求めた．

この directory の中には，計算の入力あるいは出力ファイルが存在する．ファイルには三つのタイムスタンプが押されている．それはすなわち，計算を投入した時刻，計算を開始した時刻，および計算が終了した時刻である．

```
>ls -lat /home/csl/0_3315_46_Al/inner_relax/finished/inner_relax_-8_2/
合計 72284
drwxr-xr-x 11 csl users      4096 12月 20 00:17 2017 ..
-rw-r--r--  1 csl users    34776 12月 19 23:36 2017 inner_relax_-8_2.o4605
-rw-r--r--  1 csl users   5247856 12月 19 23:36 2017 OUTCAR
-rw-r--r--  1 csl users    474869 12月 19 23:36 2017 vasprun.xml
...
-rw-r--r--  1 csl users  45167916 12月 19 23:28 2017 CHG
-rw-r--r--  1 csl users      167 12月 19 21:49 2017 DOSCAR
...
-rw-r--r--  1 csl users          0 12月 19 21:49 2017 inner_relax_-8_2.po4605
-rw-r--r--  1 csl users      112 12月 19 19:59 2017 run.csh
-rw-r--r--  1 csl users     3791 12月 19 19:59 2017 INCAR
-rw-r--r--  1 csl users       25 12月 19 19:59 2017 KPOINTS
-rw-r--r--  1 csl users     2829 12月 19 19:59 2017 POSCAR
-rw-r--r--  1 csl users   156799 12月 19 19:59 2017 POTCAR
-rw-r--r--  1 csl users       20 12月 19 19:59 2017 vs_input.txt
```

この開始時刻，終了時刻を 3 つの計算例で，それぞれの計算時間を以下の表 3.1 にまとめた．結果は，Al は一点の計算に 2 時間程度，Cu は 5 時間半程度かかり，およそ 3 倍近

くの差があった．Al よりも Cu の方が，計算時間が大幅に大きくなることがわかった．

表 3.1: Al と Cu の計算時間．

	x	y	開始時刻	終了時刻	所要時間
Al	-8	2	12/19 21:49	12/19 23:36	1:47
	0	0	12/19 21:41	12/19 23:39	1:58
	-4	-2	12/19 19:58	12/19 21:49	1:51
Cu	0	4	1/13 11:40	1/13 16:47	5:07
	-4	4	1/13 06:52	1/13 12:24	5:32
	-8	4	1/13 06:18	1/13 11:40	5:22

3.5 0° 近傍の粒界エネルギー

回転角 $22.62^\circ (\theta = \arctan(1/5))$ と回転角 $16.26^\circ (\theta = \arctan(1/7))$ のときの最安定の粒界エネルギーを求めた．

3.5.1 回転角 $22.62^\circ (\arctan(1/5))$

粒界モデルは，図 3.6 に示したモデルを用いた．最安定のエネルギーを囲い込んだ fitting グラフを図 3.7 に示す．計算結果のデータを以下の表 3.2 にまとめた． $x=-4, y=2$ のとき，最安定となり，その値は， $0.92238 J/m^2$ である．

表 3.2: 計算結果 .

x	y	E
-8	0	1.1211085433894874
-8	2	1.0314616767859839
-8	4	1.0012890073089535
-4	0	0.9271743804604435
-4	2	0.9223840351744943
-4	4	0.964815191703069
0	0	0.9852781674965011
0	2	1.0443302548797995
0	4	1.140978912158578

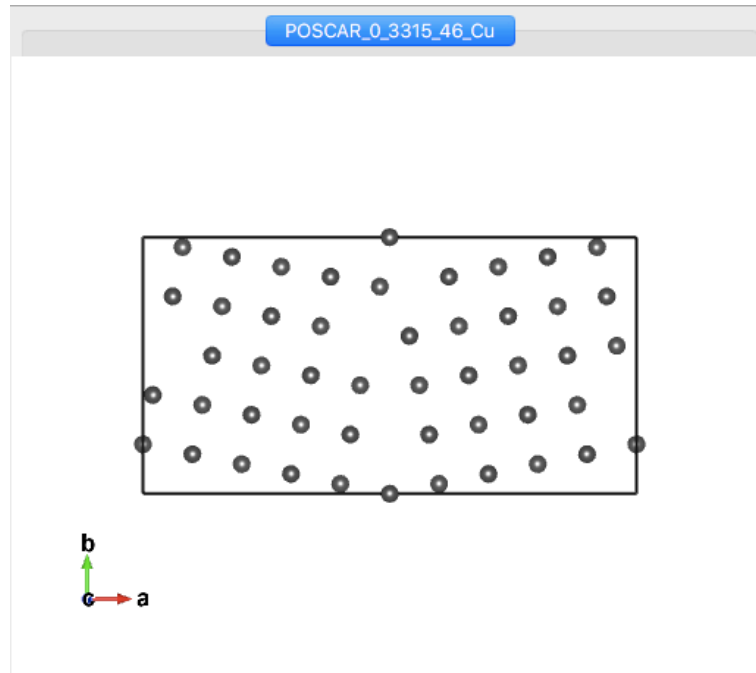


図 3.6: 使用した粒界モデル .

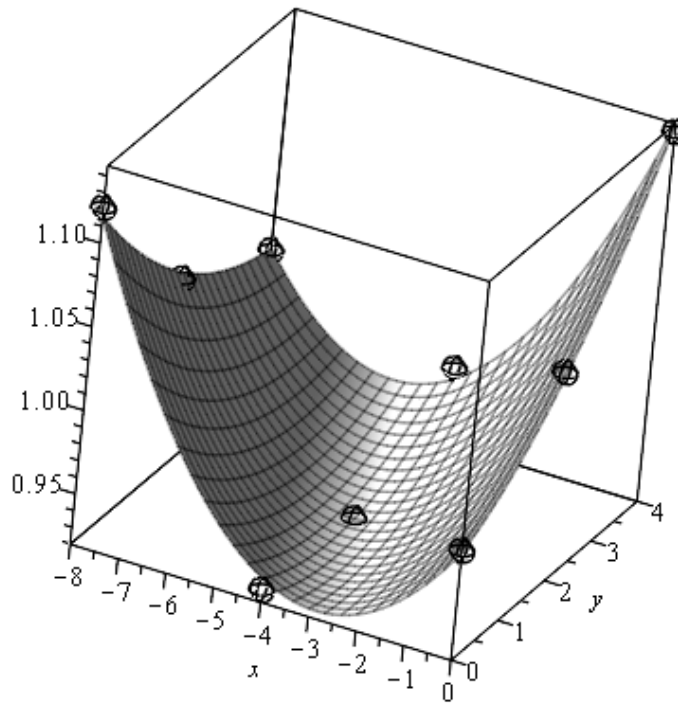


図 3.7: 最安定のエネルギーを囲い込んだ fitting 図 .

また , より大きな系での計算を行った . 図 3.8 に示したのは , 使用した粒界モデルを , 外部緩和により原子配置が変更されたモデルである . 最安定のエネルギーを囲い込んだ fitting グラフを図 3.9 に示す . 計算結果のデータを以下の表 3.3 にまとめた . $x=-8, y=1$ のとき , 最安定となり , その値は , $0.81419 J/m^2$ である .

以上の結果から , 系が大きい方がより安定したエネルギー値を得られることがわかる .

表 3.3: 計算結果 .

x	y	E
-12	-1	1.1914905661424353
-12	1	1.0142645097073162
-12	3	0.9209372977811268
-8	-1	0.8807374937334829
-8	1	0.8141979251157112
-8	3	0.8160274809942127
-4	-1	0.8576463653131688
-4	1	0.8801575129949235
-4	3	0.9563845344816418

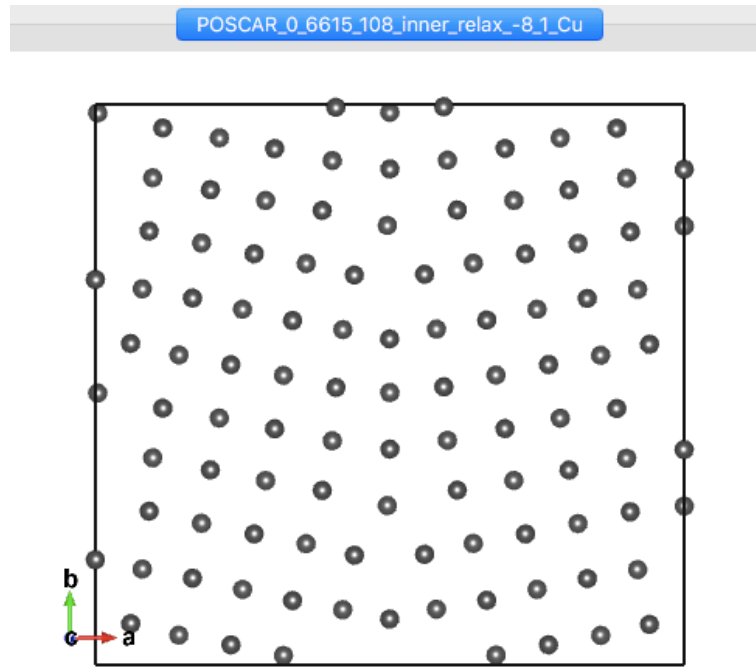


図 3.8: 外部緩和を行った粒界モデル . 原子配置が変更されている .

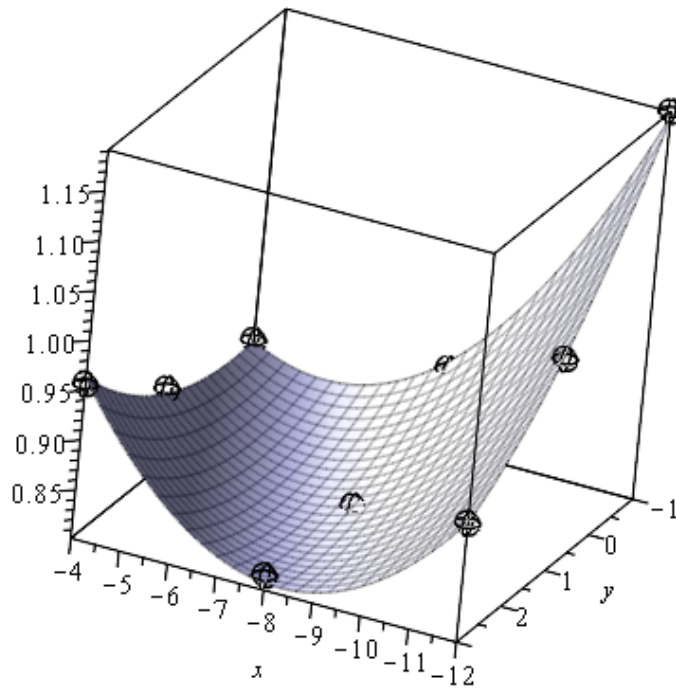


図 3.9: 最安定のエネルギーを囲い込んだ fitting 図 .

3.5.2 回転角 $16.26^\circ (\arctan(1/7))$

粒界モデルは , 図 3.10 に示したモデルを用いた . 最安定のエネルギーを囲い込んだ fitting グラフを図 3.11 に示す . いくつか異常値があるので , その点を除いて fitting している . 計算結果のデータを以下の表 3.4 にまとめた . $x=-12, y=2$ のとき , 最安定となり , その値は , $0.76451 J/m^2$ である .

表 3.4: 計算結果 .

x	y	E
-16	-2	28.903812028886495
-16	0	18.86776638603999
-16	2	0.8933091398636881
-16	4	0.831744429072182
-16	6	0.8408390946866859
-12	-2	0.8765812808815442
-12	0	0.7832911885247673
-12	2	0.7645140721962438
-12	4	0.811346318290632
-12	6	0.9131141288739628
-8	-2	0.8874799620580733
-8	0	5.444150834446313
-8	2	0.9811965128432448
-8	4	1.1081317445904395
-8	6	1.2762395382754619

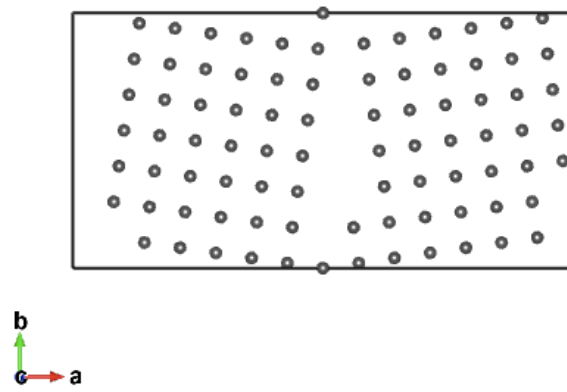


図 3.10: 使用した粒界モデル .

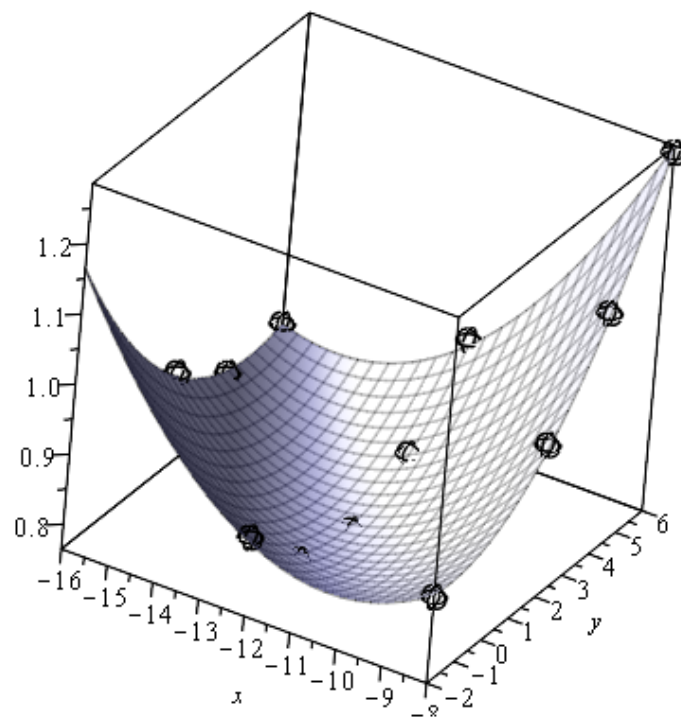


図 3.11: 最安定のエネルギーを囲い込んだ fitting 図 .

第4章 おわりに

3.5の計算結果 (FP) と EAM による計算結果 [2] および、実験結果 [7] を、 $E - \theta$ プロットで比較を行ったものを図 4.1 に示す。この図より、VASP による Cu の第一原理計算の結果は、EAM による計算結果に類似していることがわかる。

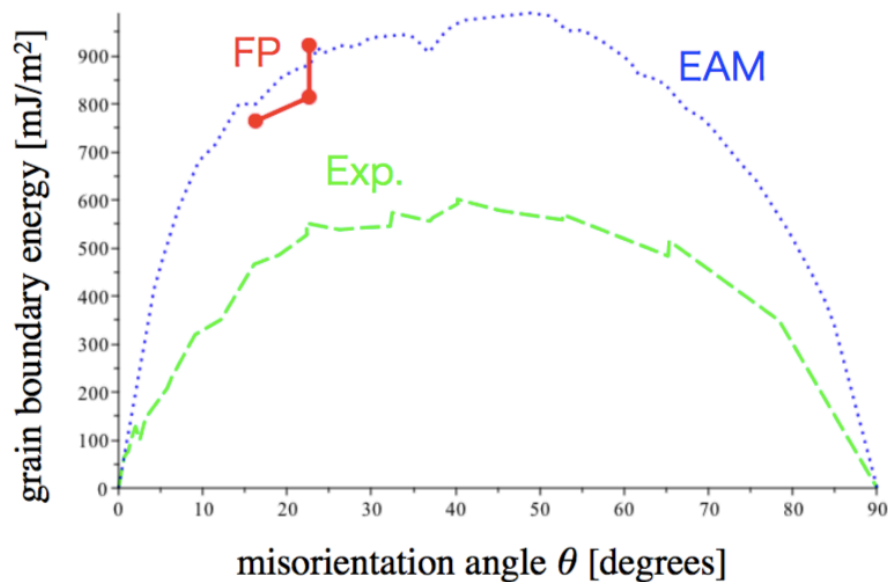


図 4.1: 本研究の結果 (FP, 赤実線) と、EAM による計算結果 (青点線)[2] および、実験結果 (緑破線)[7] との比較。

今後の課題として、より安定な構造を持つ粒界モデルの考案およびそれらを用いた粒界エネルギーの角度依存性の検証が必要である。これにより、実験値に近い計算結果が得られると考えられる。

第5章 付録

3.5の計算に使用した粒界モデルの POSCAR を掲載する .

5.1 回転角 $22.62^\circ(\arctan(1/5))$

5.1.1 原子数 46

```
1.0000000000000000
17.7237995970      0.0000000000      0.0000000000
  0.0000000000      9.2163757904      0.0000000000
  0.0000000000      0.0000000000      3.6149600000
46
Selective dynamics
Direct
  0.6000000000      0.0384615385      0.5000000000 T T T
  0.5800000000      0.2307692308      0.0000000000 T T T
  0.5600000000      0.4230769231      0.5000000000 T T T
  0.5400000000      0.6153846154      0.0000000000 T T T
  1.0000000000      0.1923076923      0.5000000000 T T T
  0.7000000000      0.0769230769      0.0000000000 T T T
  0.6800000000      0.2692307692      0.5000000000 T T T
  0.8000000000      0.1153846154      0.5000000000 T T T
  0.7800000000      0.3076923077      0.0000000000 T T T
  0.6600000000      0.4615384615      0.0000000000 T T T
  0.6400000000      0.6538461538      0.5000000000 T T T
```

0.7600000000	0.5000000000	0.5000000000 T T T
0.7400000000	0.6923076923	0.0000000000 T T T
0.6200000000	0.8461538462	0.0000000000 T T T
0.7200000000	0.8846153846	0.5000000000 T T T
0.9000000000	0.1538461538	0.0000000000 T T T
0.8800000000	0.3461538462	0.5000000000 T T T
0.8600000000	0.5384615385	0.0000000000 T T T
0.8400000000	0.7307692308	0.5000000000 T T T
0.9600000000	0.5769230769	0.5000000000 T T T
0.9400000000	0.7692307692	0.0000000000 T T T
0.8200000000	0.9230769231	0.0000000000 T T T
0.9200000000	0.9615384615	0.5000000000 T T T
0.5000000000	0.0000000000	0.0000000000 T T T
0.4000000000	0.0384615385	0.5000000000 T T T
0.4200000000	0.2307692308	0.0000000000 T T T
0.4400000000	0.4230769231	0.5000000000 T T T
0.4800000000	0.8076923077	0.5000000000 T T T
0.3000000000	0.0769230769	0.0000000000 T T T
0.3200000000	0.2692307692	0.5000000000 T T T
0.2000000000	0.1153846154	0.5000000000 T T T
0.2200000000	0.3076923077	0.0000000000 T T T
0.3400000000	0.4615384615	0.0000000000 T T T
0.3600000000	0.6538461538	0.5000000000 T T T
0.2400000000	0.5000000000	0.5000000000 T T T
0.2600000000	0.6923076923	0.0000000000 T T T
0.3800000000	0.8461538462	0.0000000000 T T T
0.2800000000	0.8846153846	0.5000000000 T T T
0.1000000000	0.1538461538	0.0000000000 T T T
0.1200000000	0.3461538462	0.5000000000 T T T

0.0200000000	0.3846153846	0.0000000000	T T T
0.1400000000	0.5384615385	0.0000000000	T T T
0.1600000000	0.7307692308	0.5000000000	T T T
0.0600000000	0.7692307692	0.0000000000	T T T
0.1800000000	0.9230769231	0.0000000000	T T T
0.0800000000	0.9615384615	0.5000000000	T T T

5.1.2 原子数 108

1.0000000000000000		
19.5670747550444659	0.0000000000000000	0.0000000000000000
0.0000000000000000	18.6170790966353366	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	3.6149600000000000

108

Selective dynamics

Direct

0.0001945282996399	0.1875675540659487	-0.0000000000000000	T	T	T
0.4998054717003599	0.0816632151340513	-0.0000000000000000	T	T	T
0.5792719957891490	0.0992909371229004	0.5000000000000000	T	T	T
0.5590579002324564	0.1971495636148439	-0.0000000000000000	T	T	T
0.5002031889002697	0.3850161959886633	0.0000000000000000	T	T	T
0.4998054717003599	0.5816632151340514	-0.0000000000000000	T	T	T
0.6646635629304177	0.1152896311923604	0.0000000000000000	T	T	T
0.6418886358105279	0.2166845153924791	0.5000000000000000	T	T	T
0.7500000000000000	0.1346153845999964	0.5000000000000000	T	T	T
0.7304329056321528	0.2334604155754992	0.0000000000000000	T	T	T
0.6146051636629228	0.3117078921939598	-0.0000000000000000	T	T	T
0.5978477881174563	0.4006508104832333	0.5000000000000000	T	T	T
0.7107007266718252	0.3290258498304420	0.5000000000000000	T	T	T
0.6956306690414976	0.4217143509453184	0.0000000000000000	T	T	T

0.5917431812501209	0.4961494165913832	0.0000000000000000	T	T	T
0.5792719957891490	0.5992909371229005	0.5000000000000000	T	T	T
0.6803748332853511	0.5171805766955858	0.5000000000000000	T	T	T
0.6646635629304177	0.6152896311923605	0.0000000000000000	T	T	T
0.5590579002324564	0.6971495636148440	-0.0000000000000000	T	T	T
0.6418886358105279	0.7166845153924790	0.5000000000000000	T	T	T
0.6146051636629228	0.8117078921939600	-0.0000000000000000	T	T	T
0.5002031889002697	0.8850161959886634	0.0000000000000000	T	T	T
0.5978477881174563	0.9006508104832331	0.5000000000000000	T	T	T
0.5917431812501209	-0.0038505834086168	-0.0000000000000000	T	T	T
0.7695670943678472	0.0357703537245026	-0.0000000000000000	T	T	T
0.8353364370695823	0.1539411380076467	0.0000000000000000	T	T	T
0.8196251667146489	0.2520501925044145	0.5000000000000000	T	T	T
0.9207280042108510	0.1699398321770942	0.5000000000000000	T	T	T
0.9082568187498791	0.2730813526086168	-0.0000000000000000	T	T	T
0.8043693309585024	0.3475164183546763	-0.0000000000000000	T	T	T
0.7892992733281748	0.4402049193695580	0.5000000000000000	T	T	T
0.9021522118825437	0.3685799587167738	0.5000000000000000	T	T	T
0.8853948363370772	0.4575228770060402	0.0000000000000000	T	T	T
0.7695670943678472	0.5357703537245025	-0.0000000000000000	T	T	T
0.7500000000000000	0.6346153845999964	0.5000000000000000	T	T	T
0.8581113641894721	0.5525462538075210	0.5000000000000000	T	T	T
0.8353364370695823	0.6539411380076466	-0.0000000000000000	T	T	T
0.7304329056321528	0.7334604155754992	0.0000000000000000	T	T	T
0.7107007266718252	0.8290258498304423	0.5000000000000000	T	T	T
0.8196251667146489	0.7520501925044142	0.5000000000000000	T	T	T
0.8043693309585024	0.8475164183546764	-0.0000000000000000	T	T	T
0.6956306690414976	0.9217143509453183	0.0000000000000000	T	T	T
0.6803748332853511	0.0171805766955856	0.5000000000000000	T	T	T

0.7892992733281748	0.9402049193695577	0.5000000000000000	T	T	T
0.8581113641894721	0.0525462538075209	0.5000000000000000	T	T	T
0.9409420997675436	0.0720812055851560	0.0000000000000000	T	T	T
0.9997968110997303	0.3842145732113296	-0.0000000000000000	T	T	T
0.9409420997675436	0.5720812055851560	-0.0000000000000000	T	T	T
0.9207280042108510	0.6699398321770942	0.5000000000000000	T	T	T
0.0001945282996399	0.6875675540659486	0.0000000000000000	T	T	T
0.9082568187498791	0.7730813526086170	0.0000000000000000	T	T	T
0.9021522118825437	0.8685799587167741	0.5000000000000000	T	T	T
0.9997968110997303	0.8842145732113295	-0.0000000000000000	T	T	T
0.8853948363370772	0.9575228770060400	-0.0000000000000000	T	T	T
-0.0000535707872151	0.2832600338960428	0.5000000000000000	T	T	T
0.4202395028923097	0.0983142252833692	0.5000000000000000	T	T	T
0.4398770895364227	0.1957147383132189	-0.0000000000000000	T	T	T
0.4957969438037006	0.2842163176966287	0.5000000000000000	T	T	T
0.5000535707872154	0.4859707354039590	0.5000000000000000	T	T	T
0.3349596809027142	0.1146287145856950	0.0000000000000000	T	T	T
0.3580167632052438	0.2161855952069181	0.5000000000000000	T	T	T
0.2500000000000000	0.1346153845999964	0.5000000000000000	T	T	T
0.2697520691621188	0.2335475912734615	0.0000000000000000	T	T	T
0.3853030877454094	0.3111605390106100	-0.0000000000000000	T	T	T
0.4024847158358983	0.3998840639888016	0.5000000000000000	T	T	T
0.2893166020616044	0.3288139957505249	0.5000000000000000	T	T	T
0.3045010808973736	0.4212988005540051	0.0000000000000000	T	T	T
0.4085330629694629	0.4951096908772529	0.0000000000000000	T	T	T
0.4202395028923097	0.5983142252833690	0.5000000000000000	T	T	T
0.3195703949234346	0.5166240272089005	0.5000000000000000	T	T	T
0.3349596809027142	0.6146287145856947	-0.0000000000000000	T	T	T
0.4398770895364227	0.6957147383132188	-0.0000000000000000	T	T	T

0.4957969438037006	0.7842163176966287	0.5000000000000000	T	T	T
0.3580167632052438	0.7161855952069179	0.5000000000000000	T	T	T
0.3853030877454094	0.8111605390106101	-0.0000000000000000	T	T	T
0.5000535707872154	0.9859707354039593	0.5000000000000000	T	T	T
0.4024847158358983	0.8998840639888016	0.5000000000000000	T	T	T
0.4085330629694629	-0.0048903091227470	-0.0000000000000000	T	T	T
0.2302479308378812	0.0356831780265403	-0.0000000000000000	T	T	T
0.1650403190972858	0.1546020546143121	0.0000000000000000	T	T	T
0.1804296050765655	0.2526067419910995	0.5000000000000000	T	T	T
0.0797604971076901	0.1709165440166255	0.5000000000000000	T	T	T
0.0914669370305369	0.2741210783227471	-0.0000000000000000	T	T	T
0.1954989191026266	0.3479319687459895	0.0000000000000000	T	T	T
0.2106833979383956	0.4404167734494751	0.5000000000000000	T	T	T
0.0975152841641017	0.3693467052112056	0.5000000000000000	T	T	T
0.1146969122545906	0.4580702301893900	0.0000000000000000	T	T	T
0.2302479308378812	0.5356831780265401	-0.0000000000000000	T	T	T
0.2500000000000000	0.6346153845999964	0.5000000000000000	T	T	T
0.1419832367947561	0.5530451739930821	0.5000000000000000	T	T	T
0.1650403190972858	0.6546020546143124	-0.0000000000000000	T	T	T
0.2697520691621189	0.7335475912734617	0.0000000000000000	T	T	T
0.2893166020616044	0.8288139957505248	0.5000000000000000	T	T	T
0.1804296050765655	0.7526067419910994	0.5000000000000000	T	T	T
0.1954989191026266	0.8479319687459896	0.0000000000000000	T	T	T
0.3045010808973736	0.9212988005540050	0.0000000000000000	T	T	T
0.3195703949234346	0.0166240272089005	0.5000000000000000	T	T	T
0.2106833979383956	0.9404167734494752	0.5000000000000000	T	T	T
0.1419832367947561	0.0530451739930819	0.5000000000000000	T	T	T
0.0601229104635773	0.0735160308867811	-0.0000000000000000	T	T	T
0.0042030561962994	0.4850144516033731	0.5000000000000000	T	T	T

0.0601229104635773	0.5735160308867812	0.0000000000000000	T	T	T
0.0797604971076901	0.6709165440166257	0.5000000000000000	T	T	T
0.0914669370305369	0.7741210783227470	-0.0000000000000000	T	T	T
0.0975152841641017	0.8693467052112055	0.5000000000000000	T	T	T
-0.0000535707872151	0.7832600338960425	0.5000000000000000	T	T	T
0.1146969122545906	0.9580702301893899	0.0000000000000000	T	T	T
0.0042030561962994	0.9850144516033731	0.5000000000000000	T	T	T

5.2 回轉角 $16.26^\circ(\arctan(1/7))$

1.0000000000000000

25.0503947512 0.0000000000 0.0000000000

0.0000000000 12.7808136486 0.0000000000

0.0000000000 0.0000000000 3.6149600000

84

Selective dynamics

Direct

0.5714285714	0.0200000000	0.5000000000	T	T	T
0.5612244898	0.1600000000	0.0000000000	T	T	T
0.6428571429	0.0400000000	0.0000000000	T	T	T
0.6326530612	0.1800000000	0.5000000000	T	T	T
0.7142857143	0.0600000000	0.5000000000	T	T	T
0.7040816327	0.2000000000	0.0000000000	T	T	T
0.6224489796	0.3200000000	0.0000000000	T	T	T
0.6122448980	0.4600000000	0.5000000000	T	T	T
0.6938775510	0.3400000000	0.5000000000	T	T	T
0.6836734694	0.4800000000	0.0000000000	T	T	T
0.6020408163	0.6000000000	0.0000000000	T	T	T
0.5918367347	0.7400000000	0.5000000000	T	T	T

0.6734693878	0.6200000000	0.5000000000	T	T	T
0.6632653061	0.7600000000	0.0000000000	T	T	T
0.5816326531	0.8800000000	0.0000000000	T	T	T
0.6530612245	0.9000000000	0.5000000000	T	T	T
0.7857142857	0.0800000000	0.0000000000	T	T	T
0.7755102041	0.2200000000	0.5000000000	T	T	T
0.8571428571	0.1000000000	0.5000000000	T	T	T
0.8469387755	0.2400000000	0.0000000000	T	T	T
0.7653061224	0.3600000000	0.0000000000	T	T	T
0.7551020408	0.5000000000	0.5000000000	T	T	T
0.8367346939	0.3800000000	0.5000000000	T	T	T
0.8265306122	0.5200000000	0.0000000000	T	T	T
0.7448979592	0.6400000000	0.0000000000	T	T	T
0.7346938776	0.7800000000	0.5000000000	T	T	T
0.8163265306	0.6600000000	0.5000000000	T	T	T
0.8061224490	0.8000000000	0.0000000000	T	T	T
0.7244897959	0.9200000000	0.0000000000	T	T	T
0.7959183673	0.9400000000	0.5000000000	T	T	T
0.9285714286	0.1200000000	0.0000000000	T	T	T
0.9183673469	0.2600000000	0.5000000000	T	T	T
0.9081632653	0.4000000000	0.0000000000	T	T	T
0.8979591837	0.5400000000	0.5000000000	T	T	T
0.9795918367	0.4200000000	0.5000000000	T	T	T
0.9693877551	0.5600000000	0.0000000000	T	T	T
0.8877551020	0.6800000000	0.0000000000	T	T	T
0.8775510204	0.8200000000	0.5000000000	T	T	T
0.9591836735	0.7000000000	0.5000000000	T	T	T
0.9489795918	0.8400000000	0.0000000000	T	T	T
0.8673469388	0.9600000000	0.0000000000	T	T	T

0.9387755102	0.9800000000	0.5000000000	T	T	T
0.5000000000	0.0000000000	0.0000000000	T	T	T
0.4285714286	0.0200000000	0.5000000000	T	T	T
0.4387755102	0.1600000000	0.0000000000	T	T	T
0.4489795918	0.3000000000	0.5000000000	T	T	T
0.4591836735	0.4400000000	0.0000000000	T	T	T
0.4693877551	0.5800000000	0.5000000000	T	T	T
0.4795918367	0.7200000000	0.0000000000	T	T	T
0.4897959184	0.8600000000	0.5000000000	T	T	T
0.3571428571	0.0400000000	0.0000000000	T	T	T
0.3673469388	0.1800000000	0.5000000000	T	T	T
0.2857142857	0.0600000000	0.5000000000	T	T	T
0.2959183673	0.2000000000	0.0000000000	T	T	T
0.3775510204	0.3200000000	0.0000000000	T	T	T
0.3877551020	0.4600000000	0.5000000000	T	T	T
0.3061224490	0.3400000000	0.5000000000	T	T	T
0.3163265306	0.4800000000	0.0000000000	T	T	T
0.3979591837	0.6000000000	0.0000000000	T	T	T
0.4081632653	0.7400000000	0.5000000000	T	T	T
0.3265306122	0.6200000000	0.5000000000	T	T	T
0.3367346939	0.7600000000	0.0000000000	T	T	T
0.4183673469	0.8800000000	0.0000000000	T	T	T
0.3469387755	0.9000000000	0.5000000000	T	T	T
0.2142857143	0.0800000000	0.0000000000	T	T	T
0.2244897959	0.2200000000	0.5000000000	T	T	T
0.1428571429	0.1000000000	0.5000000000	T	T	T
0.1530612245	0.2400000000	0.0000000000	T	T	T
0.2346938776	0.3600000000	0.0000000000	T	T	T
0.2448979592	0.5000000000	0.5000000000	T	T	T

0.1632653061	0.3800000000	0.5000000000	T	T	T
0.1734693878	0.5200000000	0.0000000000	T	T	T
0.2551020408	0.6400000000	0.0000000000	T	T	T
0.2653061224	0.7800000000	0.5000000000	T	T	T
0.1836734694	0.6600000000	0.5000000000	T	T	T
0.1938775510	0.8000000000	0.0000000000	T	T	T
0.2755102041	0.9200000000	0.0000000000	T	T	T
0.2040816327	0.9400000000	0.5000000000	T	T	T
0.0816326531	0.2600000000	0.5000000000	T	T	T
0.0918367347	0.4000000000	0.0000000000	T	T	T
0.1020408163	0.5400000000	0.5000000000	T	T	T
0.1122448980	0.6800000000	0.0000000000	T	T	T
0.1224489796	0.8200000000	0.5000000000	T	T	T
0.1326530612	0.9600000000	0.0000000000	T	T	T

謝辞

本研究の遂行するにあたり，終始多忙な中，有益な御指導，及び丁寧な助言を頂いた西谷教授に深い感謝の意を表します．また本研究を進めるにつれ，西谷研究室に所属する先輩，並びに同輩の皆様からの様々な知識の供給，御協力を頂き，本研究を成就させる事ができました．この場を借りて深く御礼申し上げます．

参考文献

- [1] W. T. Read Jr. and W. Shockley, Imperfection in nearly perfect crystals, ed. by W. Shockley, (Wiley, New York, 1952), pp.352–76.
- [2] M. A. Tschopp and D. L. McDowell, Phil. Mag., **87**(2007), 3871.
- [3] A. Otsuki, J. Materials Science, **40**(2005), 3219.
- [4] 西谷滋人, 「Al の小傾角粒界エネルギーの第一原理計算」, (日本物理学会 2017).
- [5] 八幡裕也, 「小傾角粒界のシミュレーション」, (関西学院大学情報科学科卒業論文 2012).
- [6] G.C.Hasson and C.Goux, Scripta Metallurgica, **5**(1971), pp.889–94.
- [7] N. A. Gjostein and F. N. Rhines, Acta Metallurgica, **7**(1959), pp.319–30.