

Al(100) 対称傾角粒界の大域的緩和

関西学院大学理工学部
情報科学科 西谷研究室

27016652

池田侑哉

2020年3月

第1章 はじめに

小傾角粒界エネルギーは, 第一原理計算から求められる. 図 1.1 の青点線で示された EAM(Embedded atom method) を用いたシミュレーション結果は 0 度および 90 度近傍で立ち上がり角に違いが見られ, Read-Shockley の理論値を支持する結果になっている. また, 図 1.1 の赤点線で示された, 西谷が行ったより計算精度の高い第一原理計算を用いた結果は EAM の結果と一致していた [1]. しかし, 図 1.1 の緑実線で示された測定された実験結果は立ち上がり角に違いがなく, ほぼ左右対称になっている.

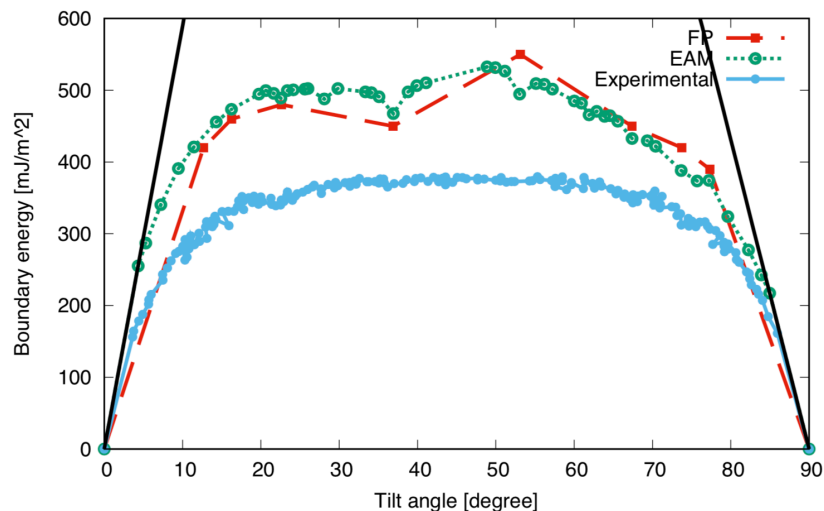


図 1.1: Al の対称傾角粒界エネルギー, EAM 計算結果 (青点線), 実験値 (緑点線), および第一原理計算値. 直線 (黒実線) は EAM の立ち上がり角を示す [2].

この第一原理計算の結果と実験結果の違いは以下の 3 つが考えられる.

1. 有限温度効果
2. 不純物の粒界偏析
3. 広域での緩和

この中でも特に, 広域での緩和に着目した. 広域での緩和とは転位芯が現れる位置をずらす事で, 従来のような局所的な緩和とは違って, 広域での緩和が起こるのではないかという考えである. その第一歩として, 小さなモデルで転位芯が現れる位置をずらすため, y 軸方向への平行移動を試みた.

第2章 手法

2.1 粒界と粒界エネルギー

一般的に金属は複数の単結晶が結合し、多結晶を構成する。単結晶とは図 2.1 の結晶 A や結晶 B のように原始配列に乱れが無く、向きが全く同じものである。これら単結晶には方位というものが存在し、方位が異なる単結晶が隣接する境界を粒界という。また、完全結晶では注目する原子が配位数分結合し、エネルギーポテンシャルを下げて安定する。しかし、粒界部分では完全結晶に比べて配位数が減り結晶が不安定になる。これによりエネルギーポテンシャルが上昇し不安定な状態になる。この完全結晶のエネルギーポテンシャルと粒界が存在する時のエネルギーポテンシャルの差を粒界エネルギーという。

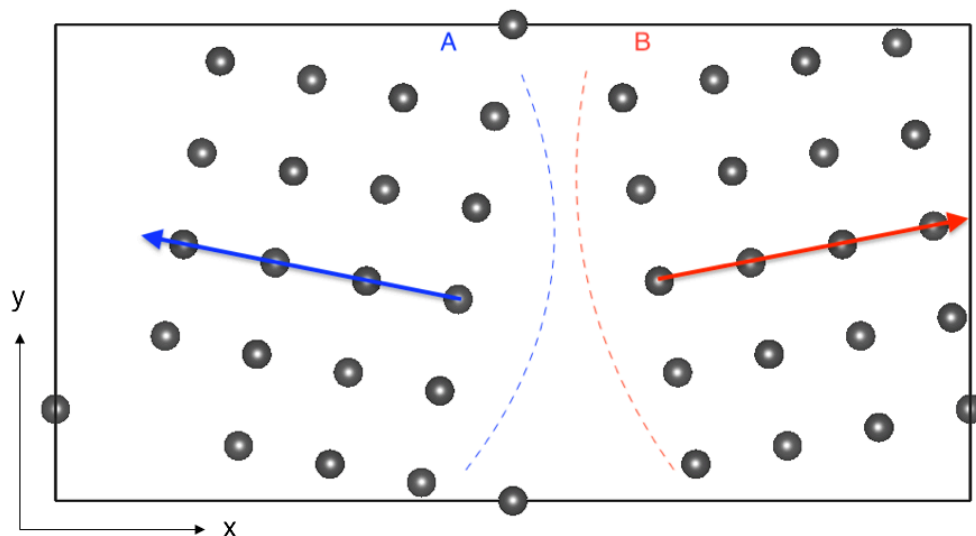


図 2.1: 粒界のモデル図.

2.2 第一原理計算

本研究では系の構造の最適化に努めるため構造緩和を行い、第一原理計算によりエネルギーを求める。第一原理計算とは、原子レベルの物性の基本法則である第一原理に基づきシュレディンガーの方程式を正確に解くことにより、原子の種類や番号のみを入力パラメータとし様々な物性の予測を行う手法である [3].

また, 第一原理計算を行うためのパッケージは様々あるが, 本研究ではそれらの中でも計算時間が比較的短いVASP(Vienna Ab-initio Simulation Package)を使用する. VASPとは平面波基底と擬ポテンシャルを用い, 計算対象となる系の情報のみを入力としコンピュータシミュレーションを行う方法である. VASPには第一原理計算の条件を決定するINCARファイル, 格子定数や原子数, および各原子の相対座標を入力でき, 局所的な原子緩和の指定も行えるPOSCARファイル, メッシュの細やかさを指定するKPOINTSファイル, 計算に用いる各原子の擬ポテンシャルを示したPOTCARファイルである.

西谷研究室では分散コンピューティングにおけるジョブ管理システムであるSGE(Sun Grid Engine)と, 様々な計算リソースで処理を分散させ高機能計算を可能とするMPI(Message Passing Interface)を併用し, 並列計算を可能にしている.

2.3 周期的境界条件

結晶モデルのエネルギー計算は結晶格子が周期的に並べられているという理想的な状態であると仮定して行われる. 図2.2で示されたように, 周期的境界条件とはユニットセルの端に原子が衝突すると反対側から原子が出てくるような状況を作ることが出来る. よって, 本来有限である結晶を表面が無く計算で扱いやすい無限結晶として扱うことが可能となる.

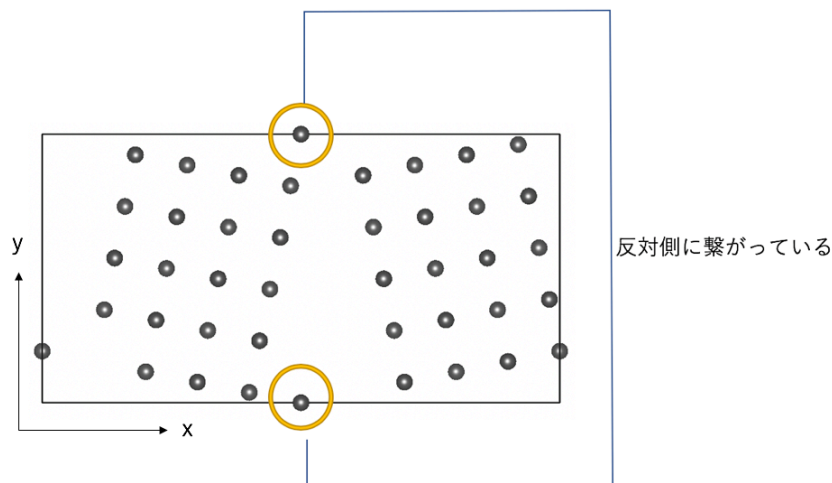


図 2.2: 周期的境界条件のモデル図.

第3章 結果と考察

3.1 囲い込み

第一原理計算により算出された結果の視覚化, および計算に必要な入力ファイルが正しく設定されているのかを確認するために最安定エネルギーの囲い込みを行なった. 囲い込みとは任意の点を取った時, それらの点を結んで出来た放物線の極小値がグラフの中心でplotされているようなグラフの作成手法の1つである. x軸にはセルのx軸方向への変化率を, y軸にはセルのy軸方向への変化率, z軸にはエネルギーをプロットする. 外部緩和によるセルのサイズ変化とそれに伴うエネルギー変化を3次元でプロットし, 繰り返し計算を行う事により最安定エネルギーを求める.

図3.1の場合は, $x=-16, y=0$ 周辺でエネルギー値極小を取っていることが分かる.

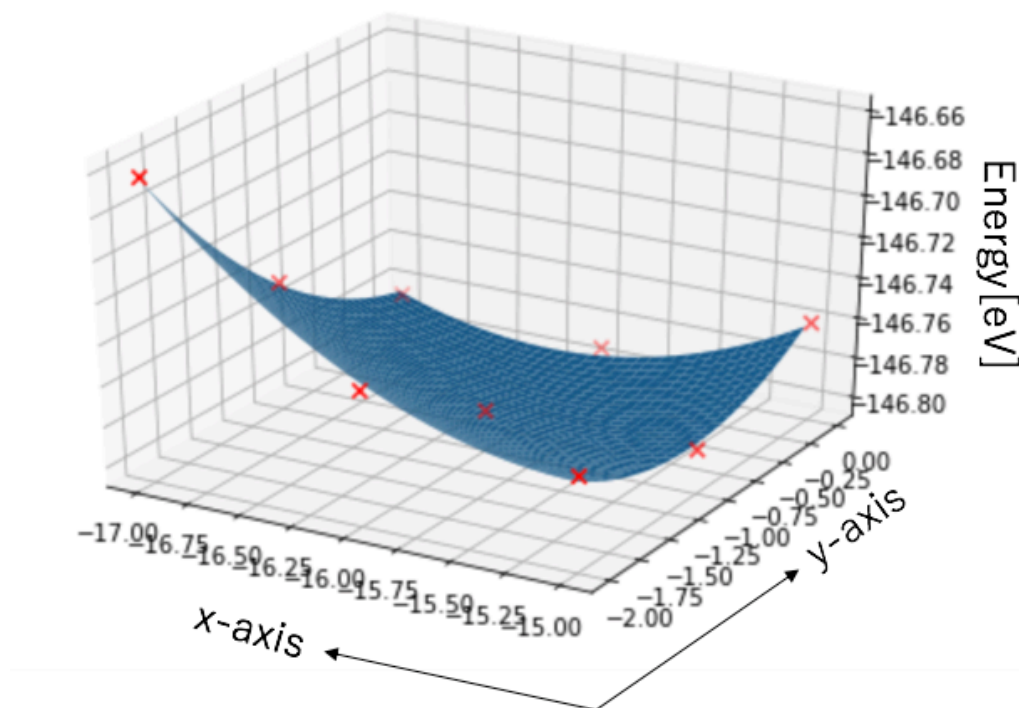


図 3.1: 最安定エネルギーを囲い込んだモデル図.

3.2 粒界モデルの作成

3.2.1 プログラミング言語

本研究で扱う第一原理計算では VASP を使用するため粒界モデルとして POSCAR を使用する。使用する POSCAR はプログラミング言語である Ruby を用いて原子の位置を操作出来るように設定した。

Ruby とはまつもとひろゆき氏によって開発されたオブジェクト指向型のプログラミング言語である。様々なクラスライブラリが標準搭載されているほか、記述がシンプルな為読みやすく修正しやすい特性を持つ。プログラミングを快適に行うための機能を多く備えている言語となっている [4]。

今回の研究において西谷がデフォルトで持っている POSCAR ファイルから、座標データを読み込み、それらを書き換え、粒界モデル作成に必要なファイルの作成を Ruby によって行う。以下は本研究で使用した、POSCAR の y 座標を 0.25 平行移動させた時のプログラムである。

```
File.readlines("POSCAR_0_3315_40").each_with_index do |line,i|
  if i>=8
    x,y,z= line.split(" ")
    if x.to_f>0.5
      printf("%15.10f %15.10f %15.10f T T T\n",
             x.to_f,(y.to_f+ 0.25)%1.0,z.to_f)
    else
      puts line
    end
  else
    puts line
  end
end
```

3.2.2 POSCAR モデルの作成

図3.2は Al の立ち上がり角 0 度における y 軸方向へ、0.00,0.25,0.50,0.75 平行移動させた粒界のモデルであり、図3.3は Al の立ち上がり角 90 度における y 軸方向へ、0.00,0.25,0.50,0.75 平行移動させた粒界のモデルを VESTA によって可視化したものである。VESTA とは結晶構造や結晶の外形、および電子等の 3 次元データを可視化するプログラムである。本研究では VESTA により原子位置を可視化する事により、転位位置の確認や計算後の粒界の確認を可能とする。

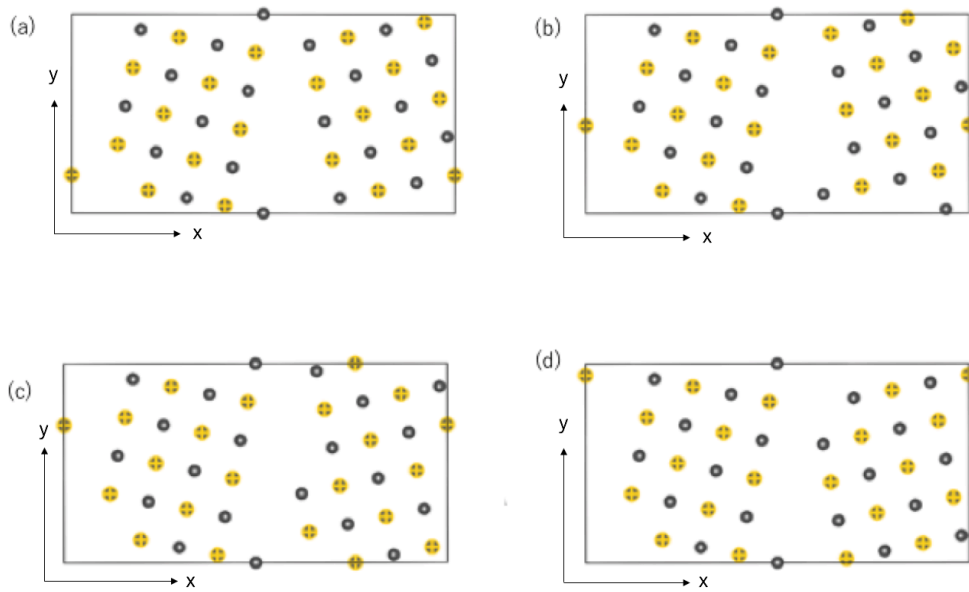


図 3.2: 0 度側における y 軸 0.00 平行移動 (a), y 軸 0.25 平行移動 (b), y 軸 0.50 平行移動 (c), y 軸 0.75 平行移動 (d) の粒界モデル図.

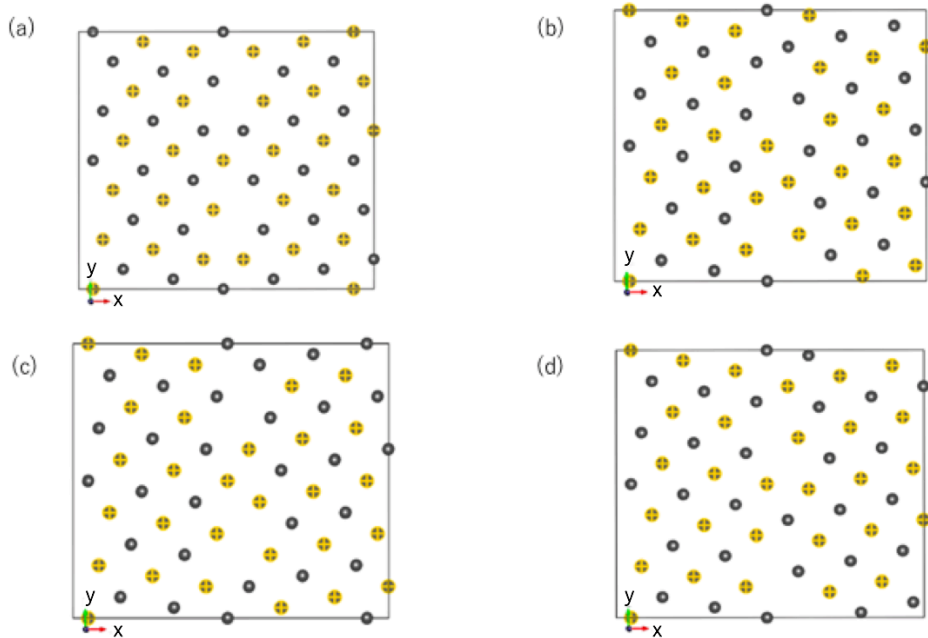


図 3.3: 90 度側における y 軸 0.00 平行移動 (a), y 軸 0.25 平行移動 (b), y 軸 0.50 平行移動 (c), y 軸 0.75 平行移動 (d) の粒界モデル図.

3.3 最安定エネルギーの計算

格子欠陥や不純物が存在しない完全結晶では原子位置を固定する fix での計算が可能であるが, 粒界を持つ結晶のエネルギー計算では原子に全く力がかかっていない状態にするために外部緩和をし, relax で計算を行う必要がある. 計算手順は以下のようになっている.

1. ユニットセルの x 軸,y 軸におけるセルの形状の変化率を任意の値に設定し,relax で計算する.
2. エネルギー値と CONTCAR が正しく得られていることを確認し,Python を用いてエネルギーの囲い込みを行う.
3. 囲い込みが行われていない場合は再度,セルの形状の変化率を任意の値に設定し,relax 計算を行う.

3.3.1 構造緩和

第一原理計算を行うにあたって,与えられた結晶構造が最適な構造とは限らない [2]. 最適な構造とは原子 1 つ 1 つに全く力のかからない理想的な状態である. 理想状態を見つけるために,第一原理計算を行い原子に働く力を計算する. 得られた力の向きによって原子を動かし再度,第一原理計算を行う. この過程を繰り返しエネルギー的に 1 番安定な構造を見つける. また,構造緩和には原子 1 つ 1 つを移動させる内部緩和と格子定数を変化させてセルの形状を変化させる外部緩和が存在するが本研究ではこの外部緩和を手動で行った.

3.3.2 0 度側におけるエネルギー (転位位置:0.00shift, 原子数:40)

粒界モデルは図 3.2 の (a) に示されたモデルを使用した. 図 3.4 に最安定エネルギーを囲い込みした fitting グラフを示す. 計算結果のデータを以下の表 3.1 にまとめた. 図 3.4 と表 3.1 より最安定は $x=-16,y=-1$ の時であり,そのエネルギーは -146.79476eV である.

また,relax 後に得られた CONTCAR の結晶構造を図 3.5 に示した. この計算結果を基に転位位置を変化させる事でエネルギーや relax 後の転位位置にどのような変化が見られるか確認する.

3.3.3 0 度側におけるエネルギー (転位位置:0.25shift, 原子数:40)

粒界モデルは図 3.2 の (b) に示されたモデルを使用した. 図 3.6 に最安定エネルギーを囲い込みした fitting グラフを示す. 計算結果のデータを以下の表 3.2 にまとめた. 図 3.6 と表 3.2 より最安定は $x=-16,y=-1$ の時であり,そのエネルギーは -146.79217eV である.

また,relax 後に得られた CONTCAR の結晶構造を図 3.7 に示した. 転位位置を shift せずに第一原理計算を行った場合の最安定エネルギーは -146.79476eV であったため shift 後の最安定エネルギーとの差は 0.00259eV となっている. これは値が小さすぎるため有効

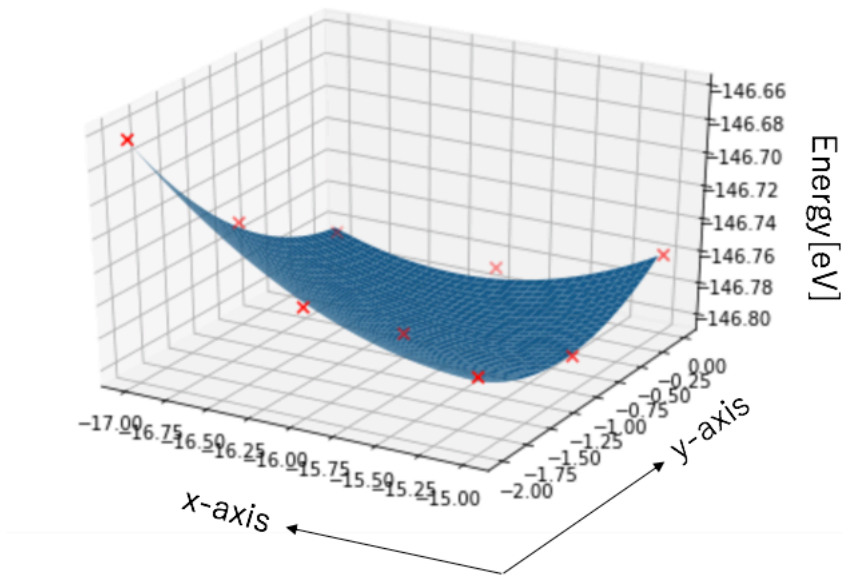


図 3.4: 最安定エネルギーを囲い込んだ fitting 図.

表 3.1: 計算結果

x	y	Energy
-17	-2	-146.66366
-17	-1	-146.74574
-17	0	-146.78576
-16	-2	-146.74202
-16	-1	-146.79476
-16	0	-146.78881
-15	-2	-146.76229
-15	-1	-146.78735
-15	0	-146.76049

表 3.2: 計算結果

x	y	Energy
-17	-2	-146.66227
-17	-1	-146.74584
-17	0	-146.78659
-16	-2	-146.74197
-16	-1	-146.79642
-16	0	-146.79217
-15	-2	-146.76146
-15	-1	-146.78843
-15	0	-146.76131

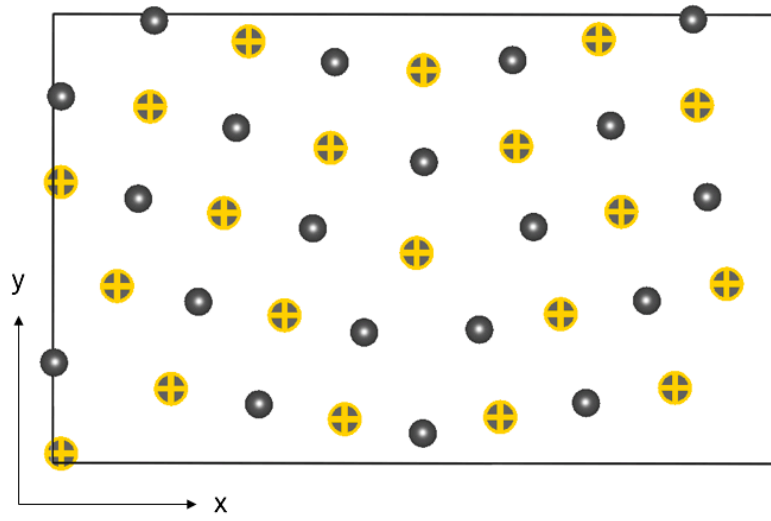


図 3.5: relax 後の原子位置のモデル.

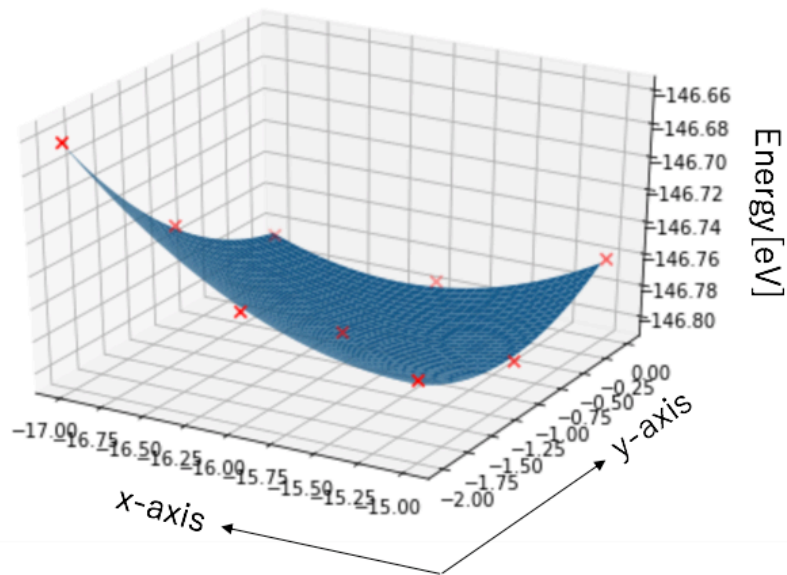


図 3.6: 最安定エネルギーを囲い込んだ fitting 図.

的な結果ではない. また,CONTCAR で表示された転位位置の確認を行うと, 転位位置をずらしたにも関わらず,relax 後には転位位置と形状は変化していない. よって,隣接転位の位置を 0.25 変化させても有意な結果を得ることは出来なかった.

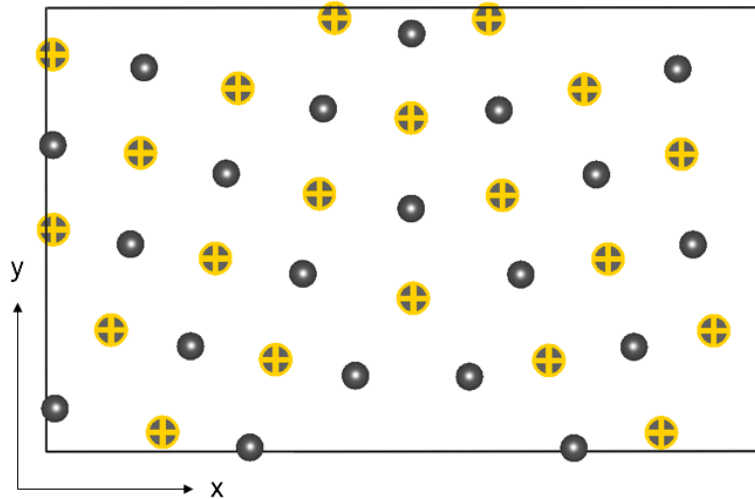


図 3.7: relax 後の原子位置のモデル.

3.3.4 0 度側におけるエネルギー (転位位置:0.50shift, 原子数:40)

粒界モデルは図 3.2 の (c) に示されたモデルを使用した. 図 3.8 に最安定エネルギーを囲い込みした fitting グラフを示す. 計算結果のデータを以下の表 3.3 にまとめた. 図 3.8 と表 3.3 より最安定は $x=-16,y=-1$ の時であり, そのエネルギーは -146.81761eV である.

表 3.3: 計算結果

x	y	Energy
-17	-2	-146.65655
-17	-1	-146.75312
-17	0	-146.80729
-16	-2	-146.73701
-16	-1	-146.81761
-16	0	-146.79888
-15	-2	-146.75728
-15	-1	-146.7909
-15	0	-146.77941

また,relax 後に得られた CONTCAR の結晶構造を図 3.9 に示した. 転位位置を shift せずに第一原理計算を行った場合の最安定エネルギーは上記と同じである. shift 後の最安定エネルギーとの差は 0.02285eV となっている. この結果も値が小さすぎるため有効的な

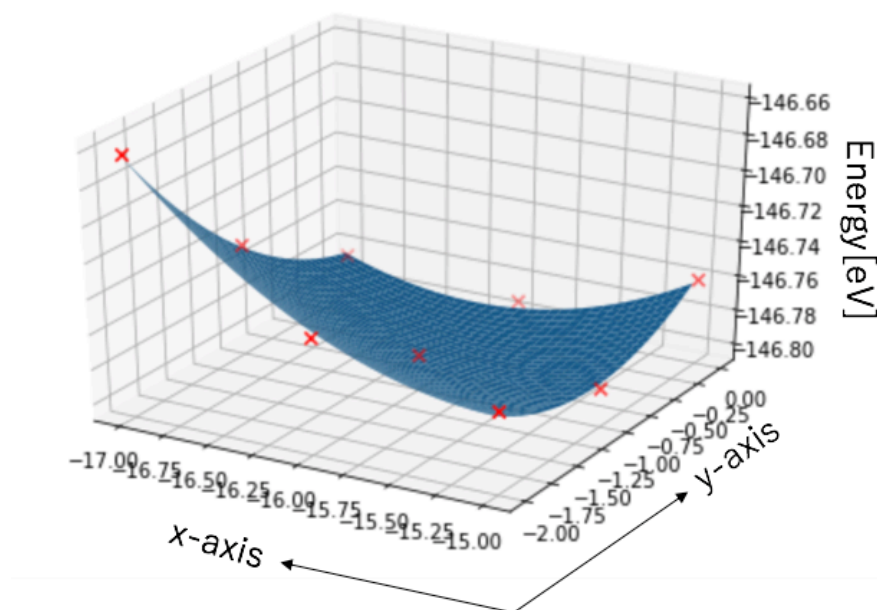


図 3.8: 最安定エネルギーを囲い込んだ fitting 図.

結果ではない. また, CONTCAR で表示された転位位置の確認を行うと, 転位位置をずらしたにも関わらず, relax 後には転位位置と形状は変化していない. よって, 隣接転位の位置を 0.50 変化させても有意な結果を得ることは出来なかった.

3.3.5 0度側におけるエネルギー (転位位置:0.75shift, 原子数:40)

粒界モデルは図 3.2 の (d) に示されたモデルを使用した. 図 3.10 に最安定エネルギーを囲い込みした fitting グラフを示す. 計算結果のデータを以下の表 3.4 にまとめた. 図 3.10 と表 3.4 より最安定は $x=-16, y=-1$ の時であり, そのエネルギーは -146.79349eV である.

表 3.4: 計算結果

x	y	Energy
-17	-2	-146.65924
-17	-1	-146.74723
-17	0	-146.78646
-16	-2	-146.73784
-16	-1	-146.79349
-16	0	-146.78725
-15	-2	-146.75219
-15	-1	-146.78228
-15	0	-146.75552

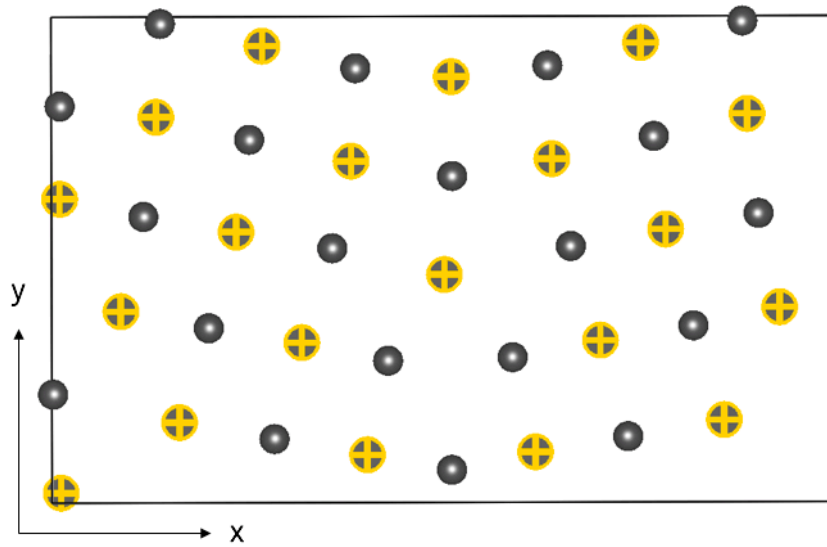


図 3.9: relax 後の原子位置のモデル.

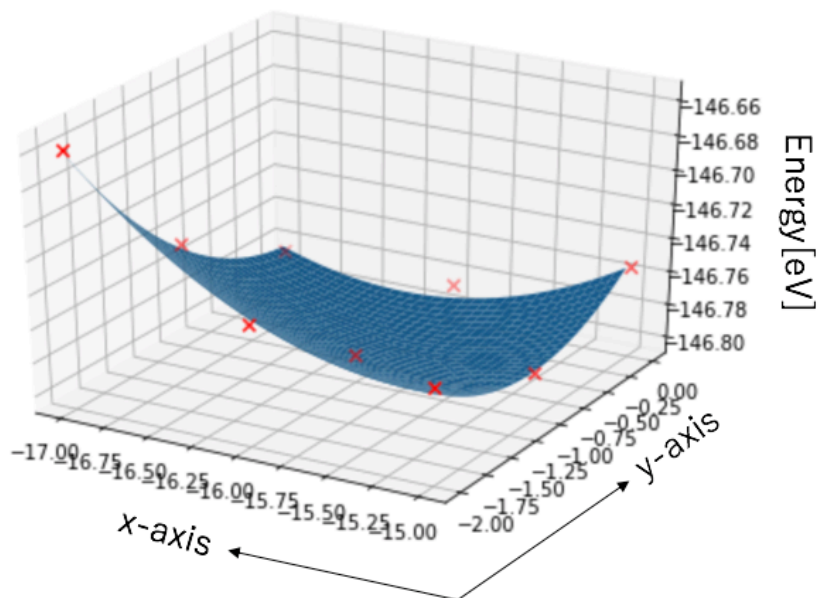


図 3.10: 最安定エネルギーを囲い込んだ fitting 図.

また,relax 後に得られた CONTCAR の結晶構造を図 3.11 に示した. 同様に転位位置を shift させずに第一原理計算を行った場合の最安定エネルギーは上記と同じである. shift 後の最安定エネルギーとの差は 0.00127eV となっている. この結果も値が小さすぎるため有効的な結果ではない. また,CONTCAR で表示された転位位置の確認を行うと, 転位位置は 1layer ずれる結果になったが形状自体は変化しておらず予期した結果と異なっている. よって, 隣接転位の位置を 0.75 変化させても有意な結果を得ることは出来なかった.

以上の結果から 0 度側では隣接転位の位置を変化させても, 転位位置の変化前とほぼ同様の計算結果になることが判明した.

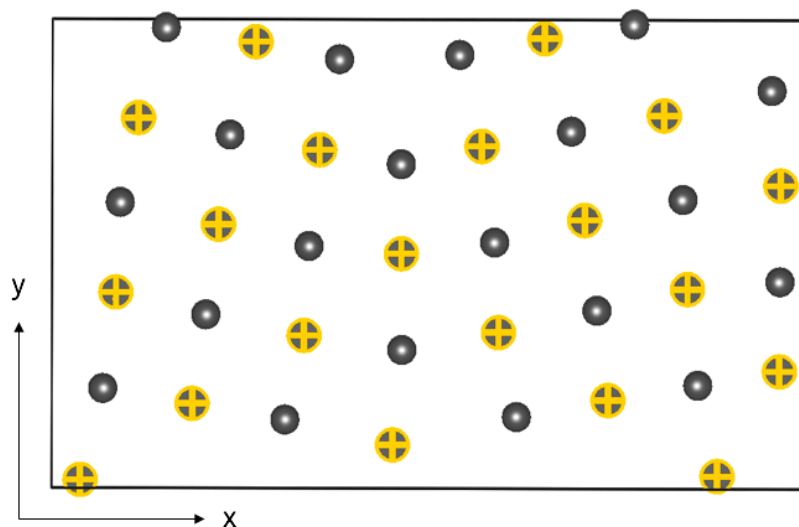


図 3.11: relax 後の原子位置のモデル.

3.3.6 90 度側におけるエネルギー (転位位置:0.00shift, 原子数:56)

粒界モデルは図 3.3 の (a) に示されたモデルを使用した. 図 3.12 に最安定エネルギーを囲い込みした fitting グラフを示す. 計算結果のデータを以下の表 3.5 にまとめた. 図 3.12 と表 3.5 より最安定は $x=-1, y=-2$ の時であり, そのエネルギーは -205.88016eV である.

また,relax 後に得られた CONTCAR の結晶構造を図 3.13 に示した. この計算結果を基に転位位置を変化させる事でエネルギーや relax 後の転位位置にどのような変化が見られるか確認する.

3.3.7 90 度側におけるエネルギー (転位位置:0.25shift, 原子数:56)

粒界モデルは図 3.3 の (b) に示されたモデルを使用した. 図 3.14 に最安定エネルギーを囲い込みした fitting グラフを示す. 計算結果のデータを以下の表 3.6 にまとめた. 図 3.14 と表 3.6 より最安定は $x=1, y=-1$ の時であり, そのエネルギーは -204.3305eV である.

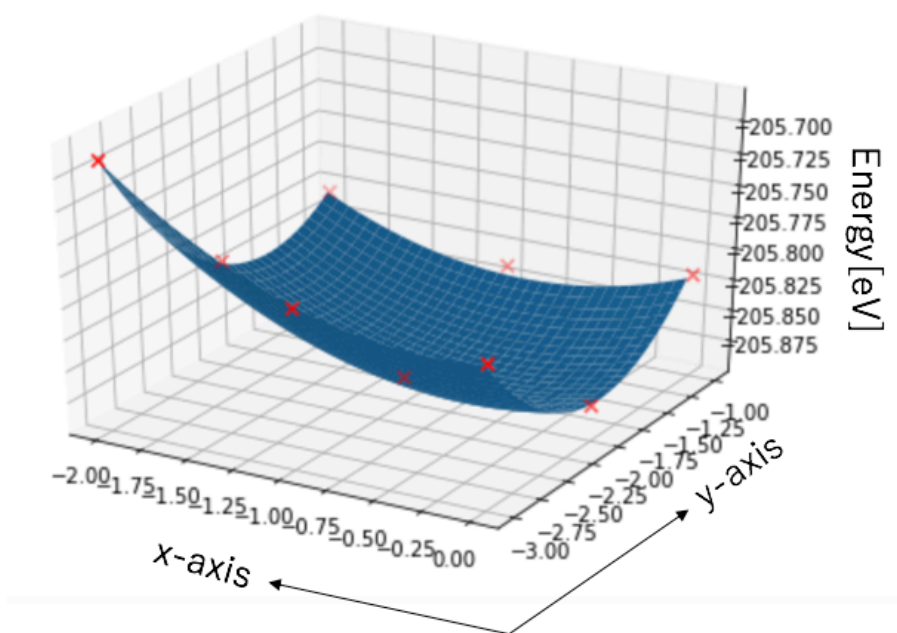


図 3.12: 最安定エネルギーを囲い込んだ fitting 図.

表 3.5: 計算結果

x	y	Energy
-2	-3	-205.68927
-2	-2	-205.81488
-2	-1	-205.80626
-1	-3	-205.77323
-1	-2	-205.88016
-1	-1	-205.83946
0	-3	-205.7855
0	-2	-205.87213
0	-1	-205.81838

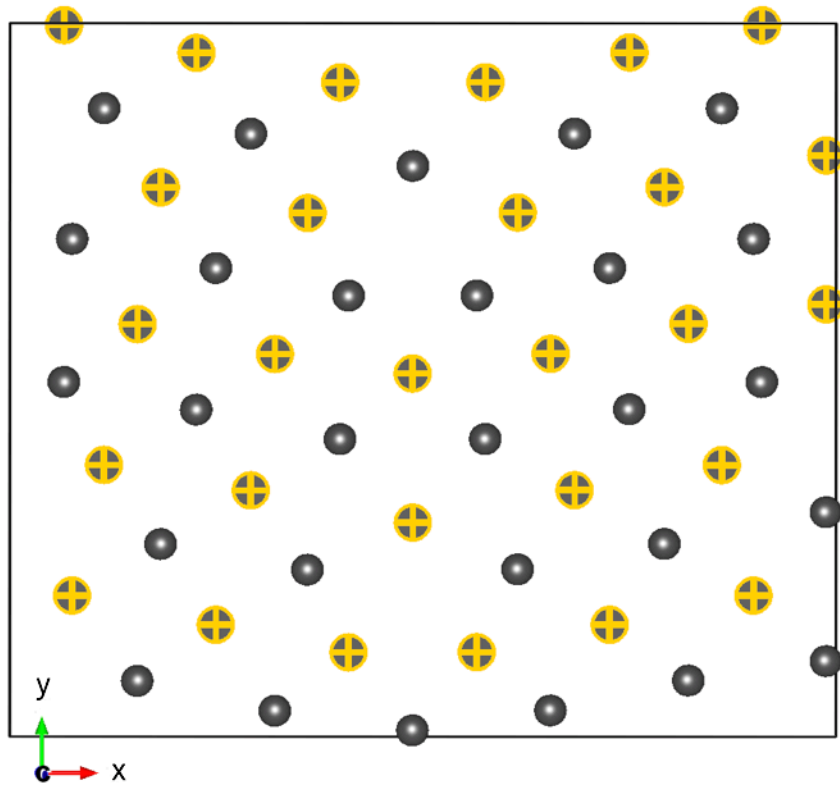


図 3.13: relax 後の原子位置のモデル.

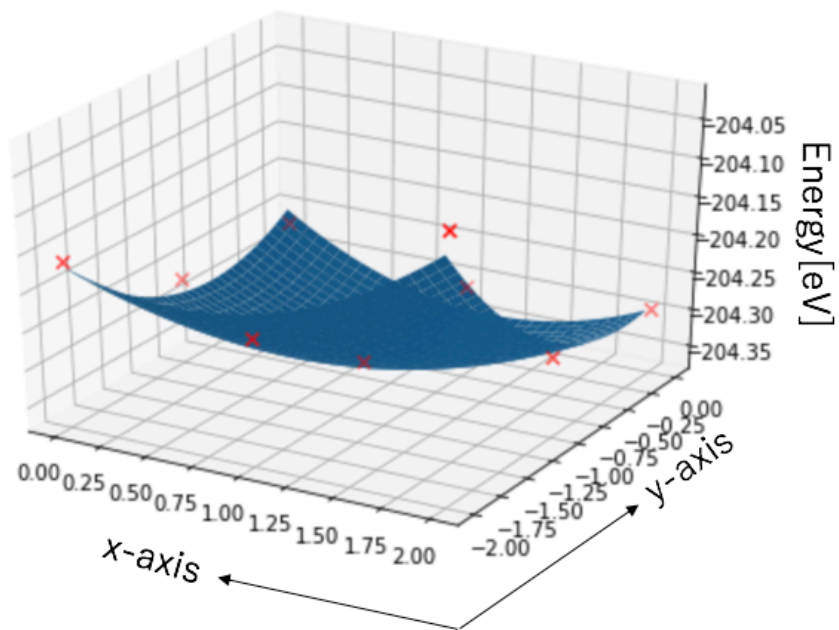


図 3.14: 最安定エネルギーを囲い込んだ fitting 図.

表 3.6: 計算結果

x	y	Energy
0	-2	-204.1626
0	-1	-204.26778
0	0	-204.27205
1	-2	-204.21276
1	-1	-204.3305
1	0	-204.31364
2	-2	-204.03008
2	-1	-204.27394
2	0	-204.29557

また,relax 後に得られた CONTCAR の結晶構造を図 3.15 に示した. 転位位置を shift させずに第一原理計算を行った場合の最安定エネルギーは-205.88016eV であったため shift 後の最安定エネルギーとの差は 1.54966eV となっている.

3.3.8 90 度側におけるエネルギー (転位位置:0.50shift, 原子数:56)

粒界モデルは図 3.3 の (c) に示されたモデルを使用した. 図 3.16 に最安定エネルギーを囲い込みした fitting グラフを示す. 計算結果のデータを以下の表 3.7 にまとめた. 図 3.16 と表 3.7 より最安定は $x=1,y=-1$ の時であり, そのエネルギーは-204.3227eV である.

表 3.7: 計算結果

x	y	Energy
0	-2	-204.16163
0	-1	-204.26455
0	0	-204.2682
1	-2	-204.162
1	-1	-204.3227
1	0	-204.31071
2	-2	-204.02612
2	-1	-204.3025
2	0	-204.29586

また,relax 後に得られた CONTCAR の結晶構造を図 3.17 に示した. 転位位置を shift させずに第一原理計算を行った場合の最安定エネルギーは上記と同じである. shift 後の最安定エネルギーとの差は 1.55746eV となっている.

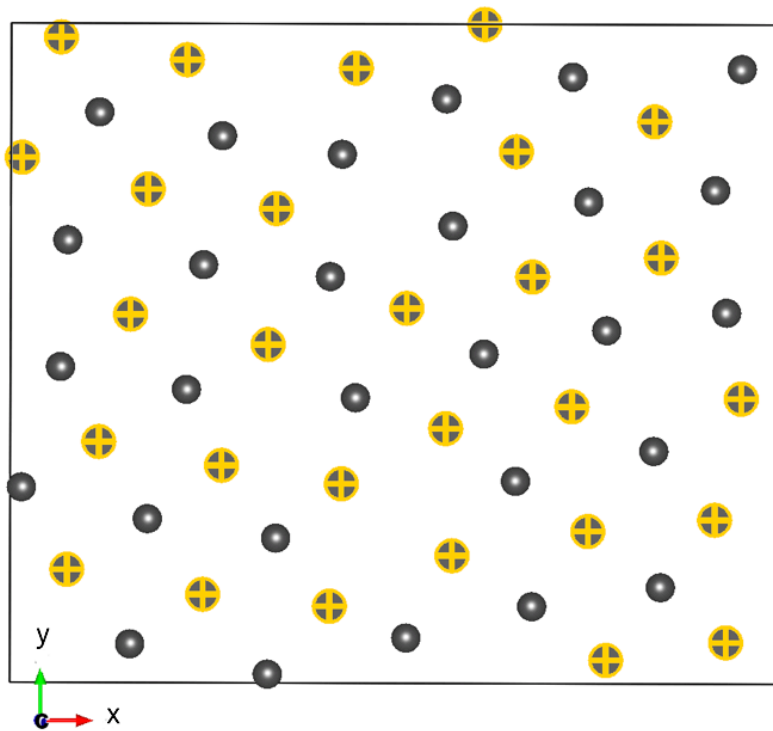


図 3.15: relax 後の原子位置のモデル.

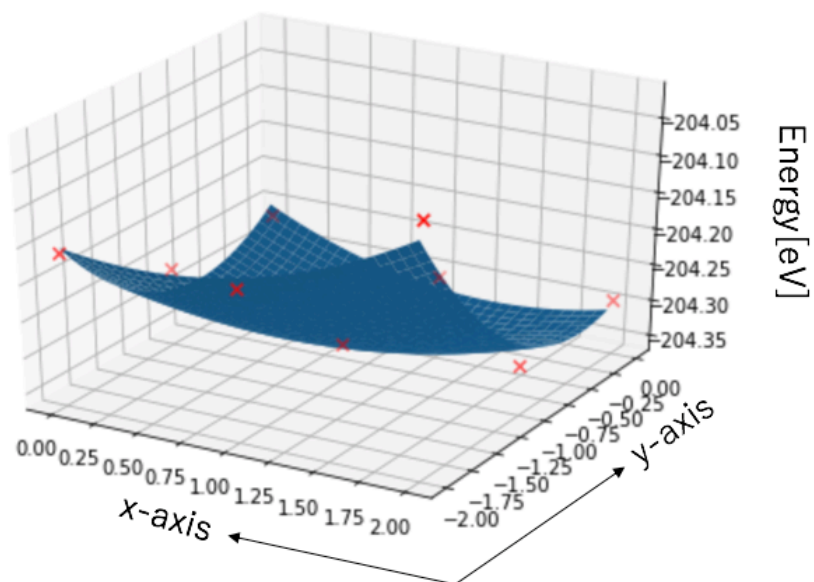


図 3.16: 最安定エネルギーを囲い込んだ fitting 図.

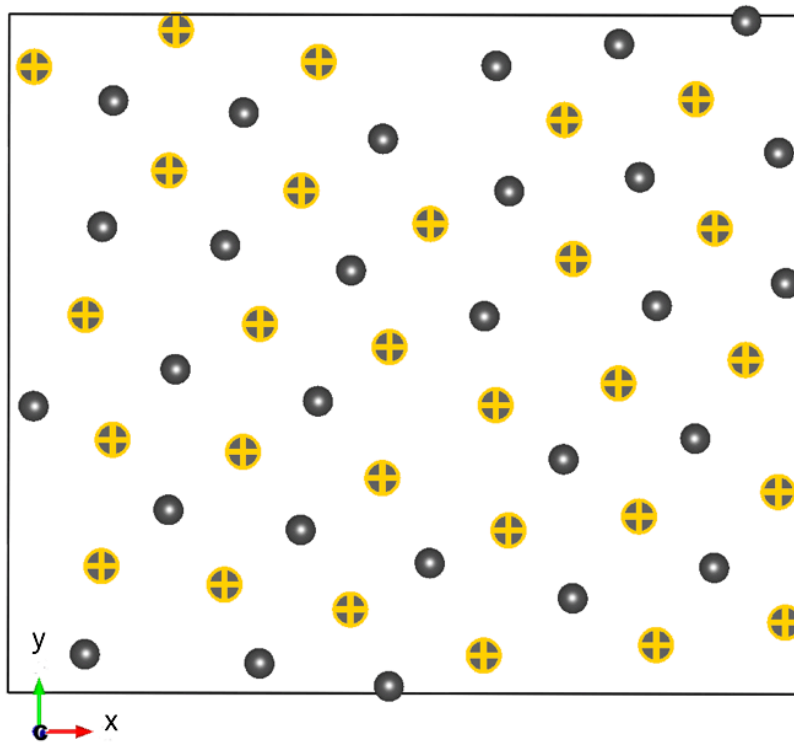


図 3.17: relax 後の原子位置のモデル.

3.3.9 90度側におけるエネルギー (転位位置:0.75shift, 原子数:56)

粒界モデルは図 3.3 の (d) に示されたモデルを使用した. 図 3.18 に最安定エネルギーを囲い込みした fitting グラフを示す. 計算結果のデータを以下の表 3.7 にまとめた. 図 3.18 と表 3.8 より最安定は $x=-1, y=-2$ の時であり, そのエネルギーは -205.88174eV である.

また, relax 後に得られた CONTCAR の結晶構造を図 3.19 に示した. 転位位置を shift せずに第一原理計算を行った場合の最安定エネルギーは上記と同じである. shift 後の最安定エネルギーとの差は 0.00158eV となっている. この結果は値が小さすぎるため有効的な結果ではない.

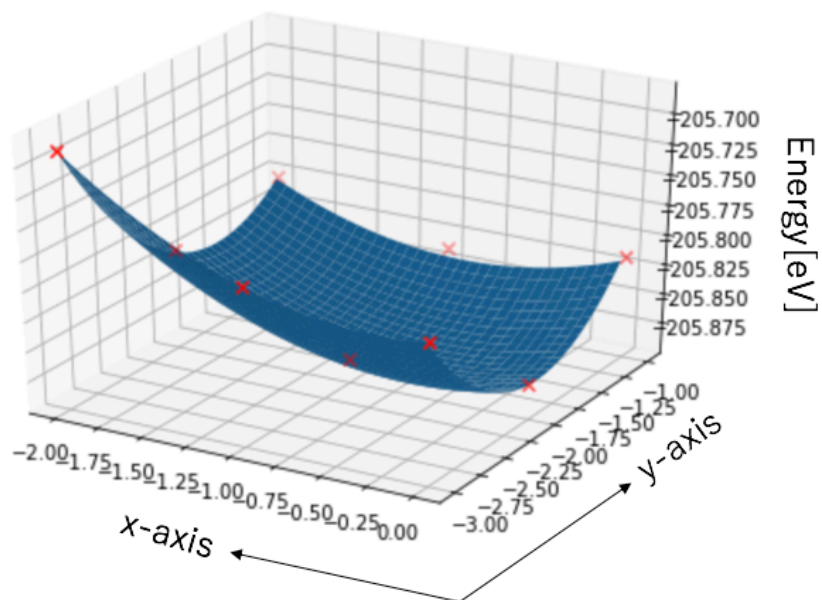


図 3.18: 最安定エネルギーを囲い込んだ fitting 図.

表 3.8: 計算結果

x	y	Energy
-2	-3	-205.68941
-2	-2	-205.81769
-2	-1	-205.80316
-1	-3	-205.76926
-1	-2	-205.88174
-1	-1	-205.83722
0	-3	-205.78348
0	-2	-205.87223
0	-1	-205.81597

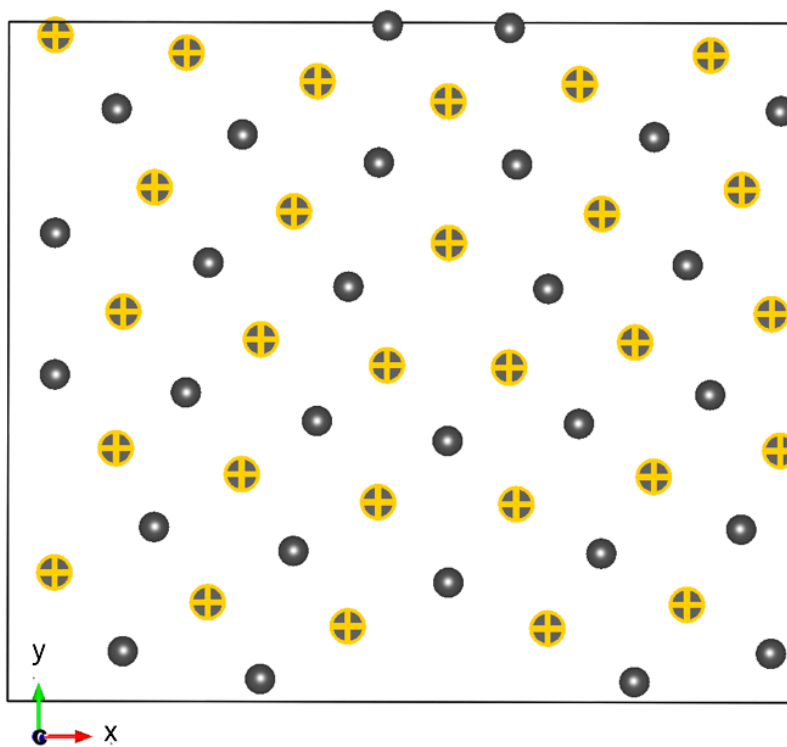


図 3.19: relax 後の原子位置のモデル.

第4章 総括

Al(100) の0度側および90度側において、転位芯の位置をずらし、より広域での緩和を実現するために第一原理計算によりエネルギーの最安定値を求めた。図4.1に0度側と90度側における平行移動していない時の最安定エネルギーと各平行移動後の最安定エネルギーの差を示した。

0度側においては、図4.1より転位芯の位置をずらしても最安定エネルギーはほとんど変わらず、転位位置がずれなかったため有意な結果を得ることが出来なかった。また,relax後の転位位置を確認したが,y軸0.75変化させた時に転位のlayerの変化が見られたが、形状の変化は見られず予期していた結果とは異なるものだった。これは緩和中に原子がドリフトを起こし、平行移動させていない時とほぼ同様の原子配置になったためエネルギーに落ちたからだと考えられる。

また,90度側においては図4.1より0.25,0.50平行移動させた時にはエネルギーの大きな変化が見られ、さらに粒界の位置も変化している。しかし、平行移動前のモデルの方がエネルギーの極小値をとっており安定となっている。0.75平行移動に関しては,0度側と同様に緩和中に原子がドリフトを起こしており、原子配置が平行移動前とほぼ同様になっているため有意な結果ではない。この結果,y軸方向への粒の平行移動では、大域的な緩和を起こすことは不可能と考えられる。今後は平行移動前の粒界モデルを使用し、有限温度効果と不純物の粒界偏析について調べていく必要がある。

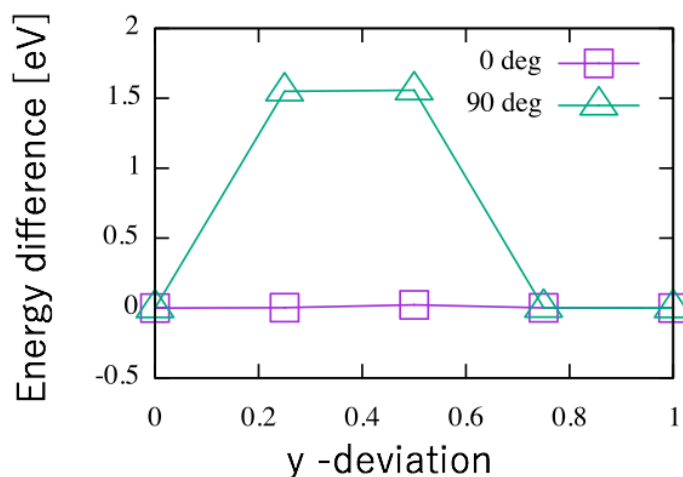


図 4.1: 転位位置の平行移動前と平行移動後の最安定エネルギーの差。

第5章 付録

計算に使用した粒界モデルの POSCAR を掲載する.

5.1 0度側 (原子数:40)

5.1.1 y 軸 0.00 平行移動

```
1.0000000000
19.8145937137    0.0000000000    0.0000000000
 0.0000000000   10.3035887311    0.0000000000
 0.0000000000    0.0000000000    4.0414000000
40
Selective dynamics
Direct
 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
 0.9800000000    0.3846153846    0.0000000000 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
0.4600000000	0.6153846154	0.0000000000	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
0.1200000000	0.3461538462	0.5000000000	T	T	T
0.1400000000	0.5384615385	0.0000000000	T	T	T
0.1600000000	0.7307692308	0.5000000000	T	T	T
0.1800000000	0.9230769231	0.0000000000	T	T	T

5.1.2 y 軸 0.25 平行移動

1.0000000000		
19.8145937137	0.0000000000	0.0000000000
0.0000000000	10.3035887311	0.0000000000
0.0000000000	0.0000000000	4.0414000000

40

Selective dynamics

Direct

1.0000000000	0.4423076923	0.5000000000	T	T	T
0.7000000000	0.3269230769	0.0000000000	T	T	T
0.6800000000	0.5192307692	0.5000000000	T	T	T
0.8000000000	0.3653846154	0.5000000000	T	T	T
0.7800000000	0.5576923077	0.0000000000	T	T	T
0.6600000000	0.7115384615	0.0000000000	T	T	T
0.6400000000	0.9038461538	0.5000000000	T	T	T
0.7600000000	0.7500000000	0.5000000000	T	T	T
0.7400000000	0.9423076923	0.0000000000	T	T	T
0.6200000000	0.0961538462	0.0000000000	T	T	T
0.7200000000	0.1346153846	0.5000000000	T	T	T

0.9000000000	0.4038461538	0.0000000000	T	T	T
0.8800000000	0.5961538462	0.5000000000	T	T	T
0.9800000000	0.6346153846	0.0000000000	T	T	T
0.8600000000	0.7884615385	0.0000000000	T	T	T
0.8400000000	0.9807692308	0.5000000000	T	T	T
0.9600000000	0.8269230769	0.5000000000	T	T	T
0.9400000000	0.0192307692	0.0000000000	T	T	T
0.8200000000	0.1730769231	0.0000000000	T	T	T
0.9200000000	0.2115384615	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
0.4600000000	0.6153846154	0.0000000000	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
0.1200000000	0.3461538462	0.5000000000	T	T	T
0.1400000000	0.5384615385	0.0000000000	T	T	T
0.1600000000	0.7307692308	0.5000000000	T	T	T
0.1800000000	0.9230769231	0.0000000000	T	T	T

5.1.3 y 軸 0.50 平行移動

1.0000000000		
19.8145937137	0.0000000000	0.0000000000
0.0000000000	10.3035887311	0.0000000000
0.0000000000	0.0000000000	4.0414000000

40

Selective dynamics

Direct

1.0000000000	0.6923076923	0.5000000000	T	T	T
0.7000000000	0.5769230769	0.0000000000	T	T	T

0.6800000000	0.7692307692	0.5000000000	T	T	T
0.8000000000	0.6153846154	0.5000000000	T	T	T
0.7800000000	0.8076923077	0.0000000000	T	T	T
0.6600000000	0.9615384615	0.0000000000	T	T	T
0.6400000000	0.1538461538	0.5000000000	T	T	T
0.7600000000	0.0000000000	0.5000000000	T	T	T
0.7400000000	0.1923076923	0.0000000000	T	T	T
0.6200000000	0.3461538462	0.0000000000	T	T	T
0.7200000000	0.3846153846	0.5000000000	T	T	T
0.9000000000	0.6538461538	0.0000000000	T	T	T
0.8800000000	0.8461538462	0.5000000000	T	T	T
0.9800000000	0.8846153846	0.0000000000	T	T	T
0.8600000000	0.0384615385	0.0000000000	T	T	T
0.8400000000	0.2307692308	0.5000000000	T	T	T
0.9600000000	0.0769230769	0.5000000000	T	T	T
0.9400000000	0.2692307692	0.0000000000	T	T	T
0.8200000000	0.4230769231	0.0000000000	T	T	T
0.9200000000	0.4615384615	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
0.4600000000	0.6153846154	0.0000000000	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
0.1200000000	0.3461538462	0.5000000000	T	T	T
0.1400000000	0.5384615385	0.0000000000	T	T	T
0.1600000000	0.7307692308	0.5000000000	T	T	T
0.1800000000	0.9230769231	0.0000000000	T	T	T

5.1.4 y軸0.75平行移動

```

1.0000000000
19.8145937137    0.0000000000    0.0000000000
  0.0000000000    10.3035887311    0.0000000000
  0.0000000000    0.0000000000    4.0414000000

```

40

Selective dynamics

Direct

```

  1.0000000000    0.9423076923    0.5000000000 T T T
  0.7000000000    0.8269230769    0.0000000000 T T T
  0.6800000000    0.0192307692    0.5000000000 T T T
  0.8000000000    0.8653846154    0.5000000000 T T T
  0.7800000000    0.0576923077    0.0000000000 T T T
  0.6600000000    0.2115384615    0.0000000000 T T T
  0.6400000000    0.4038461538    0.5000000000 T T T
  0.7600000000    0.2500000000    0.5000000000 T T T
  0.7400000000    0.4423076923    0.0000000000 T T T
  0.6200000000    0.5961538462    0.0000000000 T T T
  0.7200000000    0.6346153846    0.5000000000 T T T
  0.9000000000    0.9038461538    0.0000000000 T T T
  0.8800000000    0.0961538462    0.5000000000 T T T
  0.9800000000    0.1346153846    0.0000000000 T T T
  0.8600000000    0.2884615385    0.0000000000 T T T
  0.8400000000    0.4807692308    0.5000000000 T T T
  0.9600000000    0.3269230769    0.5000000000 T T T
  0.9400000000    0.5192307692    0.0000000000 T T T
  0.8200000000    0.6730769231    0.0000000000 T T T
  0.9200000000    0.7115384615    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
  0.4600000000    0.6153846154    0.0000000000 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
0.1200000000	0.3461538462	0.5000000000	T	T	T
0.1400000000	0.5384615385	0.0000000000	T	T	T
0.1600000000	0.7307692308	0.5000000000	T	T	T
0.1800000000	0.9230769231	0.0000000000	T	T	T

5.2 90度側(原子数:56)

5.2.1 y軸0.00平行移動

1.0000000000					
16.7123216598	0.0000000000	0.0000000000			
0.0000000000	14.5714749208	0.0000000000			
0.0000000000	0.0000000000	4.0414000000			
56					
Selective dynamics					
Direct					
0.0478848152	0.5000000000	0.0000000000	T	T	T
0.0478848152	1.0000000000	0.5000000000	T	T	T
0.0818465192	0.1923076923	0.5000000000	T	T	T
0.0818465192	0.6923076923	0.0000000000	T	T	T
0.1158082232	0.3846153846	0.5000000000	T	T	T
0.1158082232	0.8846153846	0.0000000000	T	T	T
0.1497699273	0.0769230769	0.0000000000	T	T	T
0.1497699273	0.5769230769	0.5000000000	T	T	T
0.1837316313	0.2692307692	0.0000000000	T	T	T
0.1837316313	0.7692307692	0.5000000000	T	T	T
0.2176933353	0.4615384615	0.0000000000	T	T	T
0.2176933353	0.9615384615	0.5000000000	T	T	T
0.2516550393	0.1538461538	0.5000000000	T	T	T
0.2516550393	0.6538461538	0.0000000000	T	T	T
0.2856167434	0.3461538462	0.5000000000	T	T	T
0.2856167434	0.8461538462	0.0000000000	T	T	T
0.3195784474	0.0384615385	0.0000000000	T	T	T
0.3195784474	0.5384615385	0.5000000000	T	T	T
0.3535401514	0.2307692308	0.0000000000	T	T	T
0.3535401514	0.7307692308	0.5000000000	T	T	T
0.3875018554	0.4230769231	0.0000000000	T	T	T

0.3875018554	0.9230769231	0.5000000000	T	T	T
0.4214635594	0.1153846154	0.5000000000	T	T	T
0.4214635594	0.6153846154	0.0000000000	T	T	T
0.4554252635	0.3076923077	0.5000000000	T	T	T
0.4554252635	0.8076923077	0.0000000000	T	T	T
0.4893869675	0.0000000000	0.0000000000	T	T	T
0.4893869675	0.5000000000	0.5000000000	T	T	T
0.5573103755	0.1153846154	0.5000000000	T	T	T
0.5573103755	0.6153846154	0.0000000000	T	T	T
0.5912720796	0.4230769231	0.0000000000	T	T	T
0.5912720796	0.9230769231	0.5000000000	T	T	T
0.6252337836	0.2307692308	0.0000000000	T	T	T
0.6252337836	0.7307692308	0.5000000000	T	T	T
0.6591954876	0.0384615385	0.0000000000	T	T	T
0.6591954876	0.5384615385	0.5000000000	T	T	T
0.6931571916	0.3461538462	0.5000000000	T	T	T
0.6931571916	0.8461538462	0.0000000000	T	T	T
0.7271188957	0.1538461538	0.5000000000	T	T	T
0.7271188957	0.6538461538	0.0000000000	T	T	T
0.7610805997	0.4615384615	0.0000000000	T	T	T
0.7610805997	0.9615384615	0.5000000000	T	T	T
0.7950423037	0.2692307692	0.0000000000	T	T	T
0.7950423037	0.7692307692	0.5000000000	T	T	T
0.8290040077	0.0769230769	0.0000000000	T	T	T
0.8290040077	0.5769230769	0.5000000000	T	T	T
0.8629657117	0.3846153846	0.5000000000	T	T	T
0.8629657117	0.8846153846	0.0000000000	T	T	T
0.8969274158	0.1923076923	0.5000000000	T	T	T
0.8969274158	0.6923076923	0.0000000000	T	T	T
0.9308891198	0.5000000000	0.0000000000	T	T	T
0.9308891198	1.0000000000	0.5000000000	T	T	T
0.9648508238	0.3076923077	0.0000000000	T	T	T
0.9648508238	0.8076923077	0.5000000000	T	T	T
0.9988125278	0.1153846154	0.0000000000	T	T	T
0.9988125278	0.6153846154	0.5000000000	T	T	T

5.2.2 y 軸 0.25 平行移動

1.0000000000		
16.7123216598	0.0000000000	0.0000000000
0.0000000000	14.5714749208	0.0000000000

0.000000000	0.000000000	4.041400000			
56					
Selective dynamics					
Direct					
0.0478848152	0.500000000	0.000000000	T	T	T
0.0478848152	1.000000000	0.500000000	T	T	T
0.0818465192	0.1923076923	0.500000000	T	T	T
0.0818465192	0.6923076923	0.000000000	T	T	T
0.1158082232	0.3846153846	0.500000000	T	T	T
0.1158082232	0.8846153846	0.000000000	T	T	T
0.1497699273	0.0769230769	0.000000000	T	T	T
0.1497699273	0.5769230769	0.500000000	T	T	T
0.1837316313	0.2692307692	0.000000000	T	T	T
0.1837316313	0.7692307692	0.500000000	T	T	T
0.2176933353	0.4615384615	0.000000000	T	T	T
0.2176933353	0.9615384615	0.500000000	T	T	T
0.2516550393	0.1538461538	0.500000000	T	T	T
0.2516550393	0.6538461538	0.000000000	T	T	T
0.2856167434	0.3461538462	0.500000000	T	T	T
0.2856167434	0.8461538462	0.000000000	T	T	T
0.3195784474	0.0384615385	0.000000000	T	T	T
0.3195784474	0.5384615385	0.500000000	T	T	T
0.3535401514	0.2307692308	0.000000000	T	T	T
0.3535401514	0.7307692308	0.500000000	T	T	T
0.3875018554	0.4230769231	0.000000000	T	T	T
0.3875018554	0.9230769231	0.500000000	T	T	T
0.4214635594	0.1153846154	0.500000000	T	T	T
0.4214635594	0.6153846154	0.000000000	T	T	T
0.4554252635	0.3076923077	0.500000000	T	T	T
0.4554252635	0.8076923077	0.000000000	T	T	T
0.4893869675	0.000000000	0.000000000	T	T	T
0.4893869675	0.500000000	0.500000000	T	T	T
0.5573103755	0.3653846154	0.500000000	T	T	T
0.5573103755	0.8653846154	0.000000000	T	T	T
0.5912720796	0.6730769231	0.000000000	T	T	T
0.5912720796	0.1730769231	0.500000000	T	T	T
0.6252337836	0.4807692308	0.000000000	T	T	T
0.6252337836	0.9807692308	0.500000000	T	T	T
0.6591954876	0.2884615385	0.000000000	T	T	T
0.6591954876	0.7884615385	0.500000000	T	T	T
0.6931571916	0.5961538462	0.500000000	T	T	T

0.6931571916	0.0961538462	0.0000000000	T	T	T
0.7271188957	0.4038461538	0.5000000000	T	T	T
0.7271188957	0.9038461538	0.0000000000	T	T	T
0.7610805997	0.7115384615	0.0000000000	T	T	T
0.7610805997	0.2115384615	0.5000000000	T	T	T
0.7950423037	0.5192307692	0.0000000000	T	T	T
0.7950423037	0.0192307692	0.5000000000	T	T	T
0.8290040077	0.3269230769	0.0000000000	T	T	T
0.8290040077	0.8269230769	0.5000000000	T	T	T
0.8629657117	0.6346153846	0.5000000000	T	T	T
0.8629657117	0.1346153846	0.0000000000	T	T	T
0.8969274158	0.4423076923	0.5000000000	T	T	T
0.8969274158	0.9423076923	0.0000000000	T	T	T
0.9308891198	0.7500000000	0.0000000000	T	T	T
0.9308891198	0.2500000000	0.5000000000	T	T	T
0.9648508238	0.5576923077	0.0000000000	T	T	T
0.9648508238	0.0576923077	0.5000000000	T	T	T
0.9988125278	0.3653846154	0.0000000000	T	T	T
0.9988125278	0.8653846154	0.5000000000	T	T	T

5.2.3 y 軸 0.50 平行移動

1.0000000000		
16.7123216598	0.0000000000	0.0000000000
0.0000000000	14.5714749208	0.0000000000
0.0000000000	0.0000000000	4.0414000000

56

Selective dynamics

Direct

0.0478848152	0.5000000000	0.0000000000	T	T	T
0.0478848152	1.0000000000	0.5000000000	T	T	T
0.0818465192	0.1923076923	0.5000000000	T	T	T
0.0818465192	0.6923076923	0.0000000000	T	T	T
0.1158082232	0.3846153846	0.5000000000	T	T	T
0.1158082232	0.8846153846	0.0000000000	T	T	T
0.1497699273	0.0769230769	0.0000000000	T	T	T
0.1497699273	0.5769230769	0.5000000000	T	T	T
0.1837316313	0.2692307692	0.0000000000	T	T	T
0.1837316313	0.7692307692	0.5000000000	T	T	T
0.2176933353	0.4615384615	0.0000000000	T	T	T
0.2176933353	0.9615384615	0.5000000000	T	T	T

0.2516550393	0.1538461538	0.5000000000	T	T	T
0.2516550393	0.6538461538	0.0000000000	T	T	T
0.2856167434	0.3461538462	0.5000000000	T	T	T
0.2856167434	0.8461538462	0.0000000000	T	T	T
0.3195784474	0.0384615385	0.0000000000	T	T	T
0.3195784474	0.5384615385	0.5000000000	T	T	T
0.3535401514	0.2307692308	0.0000000000	T	T	T
0.3535401514	0.7307692308	0.5000000000	T	T	T
0.3875018554	0.4230769231	0.0000000000	T	T	T
0.3875018554	0.9230769231	0.5000000000	T	T	T
0.4214635594	0.1153846154	0.5000000000	T	T	T
0.4214635594	0.6153846154	0.0000000000	T	T	T
0.4554252635	0.3076923077	0.5000000000	T	T	T
0.4554252635	0.8076923077	0.0000000000	T	T	T
0.4893869675	0.0000000000	0.0000000000	T	T	T
0.4893869675	0.5000000000	0.5000000000	T	T	T
0.5573103755	0.6153846154	0.5000000000	T	T	T
0.5573103755	0.1153846154	0.0000000000	T	T	T
0.5912720796	0.9230769231	0.0000000000	T	T	T
0.5912720796	0.4230769231	0.5000000000	T	T	T
0.6252337836	0.7307692308	0.0000000000	T	T	T
0.6252337836	0.2307692308	0.5000000000	T	T	T
0.6591954876	0.5384615385	0.0000000000	T	T	T
0.6591954876	0.0384615385	0.5000000000	T	T	T
0.6931571916	0.8461538462	0.5000000000	T	T	T
0.6931571916	0.3461538462	0.0000000000	T	T	T
0.7271188957	0.6538461538	0.5000000000	T	T	T
0.7271188957	0.1538461538	0.0000000000	T	T	T
0.7610805997	0.9615384615	0.0000000000	T	T	T
0.7610805997	0.4615384615	0.5000000000	T	T	T
0.7950423037	0.7692307692	0.0000000000	T	T	T
0.7950423037	0.2692307692	0.5000000000	T	T	T
0.8290040077	0.5769230769	0.0000000000	T	T	T
0.8290040077	0.0769230769	0.5000000000	T	T	T
0.8629657117	0.8846153846	0.5000000000	T	T	T
0.8629657117	0.3846153846	0.0000000000	T	T	T
0.8969274158	0.6923076923	0.5000000000	T	T	T
0.8969274158	0.1923076923	0.0000000000	T	T	T
0.9308891198	0.0000000000	0.0000000000	T	T	T
0.9308891198	0.5000000000	0.5000000000	T	T	T
0.9648508238	0.8076923077	0.0000000000	T	T	T

0.9648508238	0.3076923077	0.5000000000	T	T	T
0.9988125278	0.6153846154	0.0000000000	T	T	T
0.9988125278	0.1153846154	0.5000000000	T	T	T

5.2.4 y 軸 0.75 平行移動

1.0000000000					
16.7123216598	0.0000000000	0.0000000000			
0.0000000000	14.5714749208	0.0000000000			
0.0000000000	0.0000000000	4.0414000000			

56

Selective dynamics

Direct

0.0478848152	0.5000000000	0.0000000000	T	T	T
0.0478848152	1.0000000000	0.5000000000	T	T	T
0.0818465192	0.1923076923	0.5000000000	T	T	T
0.0818465192	0.6923076923	0.0000000000	T	T	T
0.1158082232	0.3846153846	0.5000000000	T	T	T
0.1158082232	0.8846153846	0.0000000000	T	T	T
0.1497699273	0.0769230769	0.0000000000	T	T	T
0.1497699273	0.5769230769	0.5000000000	T	T	T
0.1837316313	0.2692307692	0.0000000000	T	T	T
0.1837316313	0.7692307692	0.5000000000	T	T	T
0.2176933353	0.4615384615	0.0000000000	T	T	T
0.2176933353	0.9615384615	0.5000000000	T	T	T
0.2516550393	0.1538461538	0.5000000000	T	T	T
0.2516550393	0.6538461538	0.0000000000	T	T	T
0.2856167434	0.3461538462	0.5000000000	T	T	T
0.2856167434	0.8461538462	0.0000000000	T	T	T
0.3195784474	0.0384615385	0.0000000000	T	T	T
0.3195784474	0.5384615385	0.5000000000	T	T	T
0.3535401514	0.2307692308	0.0000000000	T	T	T
0.3535401514	0.7307692308	0.5000000000	T	T	T
0.3875018554	0.4230769231	0.0000000000	T	T	T
0.3875018554	0.9230769231	0.5000000000	T	T	T
0.4214635594	0.1153846154	0.5000000000	T	T	T
0.4214635594	0.6153846154	0.0000000000	T	T	T
0.4554252635	0.3076923077	0.5000000000	T	T	T
0.4554252635	0.8076923077	0.0000000000	T	T	T
0.4893869675	0.0000000000	0.0000000000	T	T	T
0.4893869675	0.5000000000	0.5000000000	T	T	T

0.5573103755	0.8653846154	0.5000000000	T	T	T
0.5573103755	0.3653846154	0.0000000000	T	T	T
0.5912720796	0.1730769231	0.0000000000	T	T	T
0.5912720796	0.6730769231	0.5000000000	T	T	T
0.6252337836	0.9807692308	0.0000000000	T	T	T
0.6252337836	0.4807692308	0.5000000000	T	T	T
0.6591954876	0.7884615385	0.0000000000	T	T	T
0.6591954876	0.2884615385	0.5000000000	T	T	T
0.6931571916	0.0961538462	0.5000000000	T	T	T
0.6931571916	0.5961538462	0.0000000000	T	T	T
0.7271188957	0.9038461538	0.5000000000	T	T	T
0.7271188957	0.4038461538	0.0000000000	T	T	T
0.7610805997	0.2115384615	0.0000000000	T	T	T
0.7610805997	0.7115384615	0.5000000000	T	T	T
0.7950423037	0.0192307692	0.0000000000	T	T	T
0.7950423037	0.5192307692	0.5000000000	T	T	T
0.8290040077	0.8269230769	0.0000000000	T	T	T
0.8290040077	0.3269230769	0.5000000000	T	T	T
0.8629657117	0.1346153846	0.5000000000	T	T	T
0.8629657117	0.6346153846	0.0000000000	T	T	T
0.8969274158	0.9423076923	0.5000000000	T	T	T
0.8969274158	0.4423076923	0.0000000000	T	T	T
0.9308891198	0.2500000000	0.0000000000	T	T	T
0.9308891198	0.7500000000	0.5000000000	T	T	T
0.9648508238	0.0576923077	0.0000000000	T	T	T
0.9648508238	0.5576923077	0.5000000000	T	T	T
0.9988125278	0.8653846154	0.0000000000	T	T	T
0.9988125278	0.3653846154	0.5000000000	T	T	T

謝辞

本研究を進めるにあたって,多忙な中,熱心な御指導,および助言を頂いた関西学院大学工学部 情報科学科 西谷滋人教授に深く感謝するとともに,御礼申し上げます. また,本研究の進行に伴い,1年間西谷研究室に所属する同輩の皆様からの様々な知識の共有,御協力を頂きました. この場を借りて感謝の意を示します. ありがとうございました.

参考文献

- [1] 西谷滋人,Al の小傾角粒界の精密計算, https://github.com/daddygongon/tilt_boundary/tree/master/docs/first_paper (2020/02/07 accessed).
- [2] W.T.ReadJr. and W.Shockley, Imperfection in nearly perfect crystals, ed.by W.Shockley,(Wiley,New York,1952),pp.352-76.
- [3] 西谷研究室,"はじめての vasp 原理から使用法, 適用例まで."<https://ist.ksc.kwansei.ac.jp/~nishitani/RecentPublications> (2020/02/07 accessed).
- [4] 高橋征義, 後藤裕蔵 (著), たのしい Ruby,(SB クリエイティブ,2020/02/07)