

# Al粒界へのSnの偏析の第一原理計算

関西学院大学工学部  
情報科学科 西谷研究室

27016661

川井章由

2020年3月

## 概要

大槻の1990年に行った研究では、液体金属とAlの界面での粒界溝の2面角を測って粒界でのエネルギーを求めている。ところが西谷研で行われたVASPを用いた第一原理計算から導出されたエネルギーは20%程高いことが分かった。第一原理計算と研究で差があることの原因として、研究で使用したSnが粒界部分に偏析している可能性が考えられた。Alの粒界部分にSnを置換して偏析しているのかどうかを第一原理計算を用いて検証することを目的とした。

第一原理計算では、VASPを用いて外部緩和を行い、本研究では、原子数32の粒界を含まない完全結晶と原子数40の粒界を含むAlのモデルにSnを置換した。

その結果、最大の最安定エネルギーと最小の最安定エネルギーの差は1.98837eVというかなり大きな差が生まれていることが分かった。またエネルギーは粒界ではなく、粒界に近い位置で最安定を取りエネルギーが低くなっていることから粒界付近で偏析しているのではないかと考察された。

# 目次

<b>第1章</b>	<b>目的</b>	<b>2</b>
<b>第2章</b>	<b>背景と手法</b>	<b>4</b>
2.1	小傾角粒界エネルギー	4
2.2	第一原理計算	6
2.2.1	POSCAR ファイル	6
2.2.2	POTCAR ファイル	6
2.2.3	構造緩和	7
2.3	周期的境界条件	7
<b>第3章</b>	<b>計算結果</b>	<b>8</b>
3.1	粒界を含んでいない完全結晶 Al <sub>2220</sub> に Sn を置換した時のエネルギー	8
3.2	粒界モデルの作成	10
3.3	粒界を含んだ Al <sub>3315</sub> に Sn を置換した時の粒界エネルギー	10
3.4	粒界を含んだ Al <sub>3315</sub> に Sn を置換	11
3.4.1	Al <sub>3315</sub> の原子位置によって変化する最安定エネルギー推移	13
3.4.2	Sn を置換したユニットセルを構造緩和させた時の CONTCAR	14
<b>第4章</b>	<b>考察</b>	<b>18</b>
<b>第5章</b>	<b>付録 POSCAR とモデルの掲載</b>	<b>22</b>
5.1	原子数 32 個の Al <sub>2220</sub>	22
5.2	原子数 40 個の Al <sub>3315</sub>	23

# 第1章 目的

1990年に大槻は Sn-Zn 系金属の液体金属と、Al の粒界部に形成した粒界溝の 2 面角を測って粒界エネルギーを求める研究を行った。この実験で大槻は、粒界エネルギーの絶対値を界面張力との釣合いから得るために、固一液界面エネルギーの値を求めている。ここでは、Al(s)/Sn(l) 固一液界面エネルギーの値、並びに Al/Sn と Al/Sn-Zn との固一液界面エネルギーの比の値をそれぞれ推定している [1]。そのエネルギーを図 1.1 の実測値 (緑実線) に示す。

ところが、西谷研で行われた VASP を用いた第一原理計算から予測されるエネルギーは 20 % 程度高い [2]。この差の原因として図 1.1 に示す、EAM(経験的ポテンシャル) と実測値 (緑実線) では、実験に Sn を使用しており、その Sn が Al 粒界の欠陥部に偏析している可能性が考えられた。

この差の原因としては、図 1.1 に示す実測値 (緑実線) では実験に Sn を使用しており、その Sn が Al 粒界の欠陥部に偏析している可能性が考えられた。

そこで本研究では、高精度にエネルギーが求められる第一原理計算を用いて、Sn を粒界および粒内に置換したエネルギー差を比べることで、Sn が Al 粒界に偏析しているかどうかを検証することを目的とする。

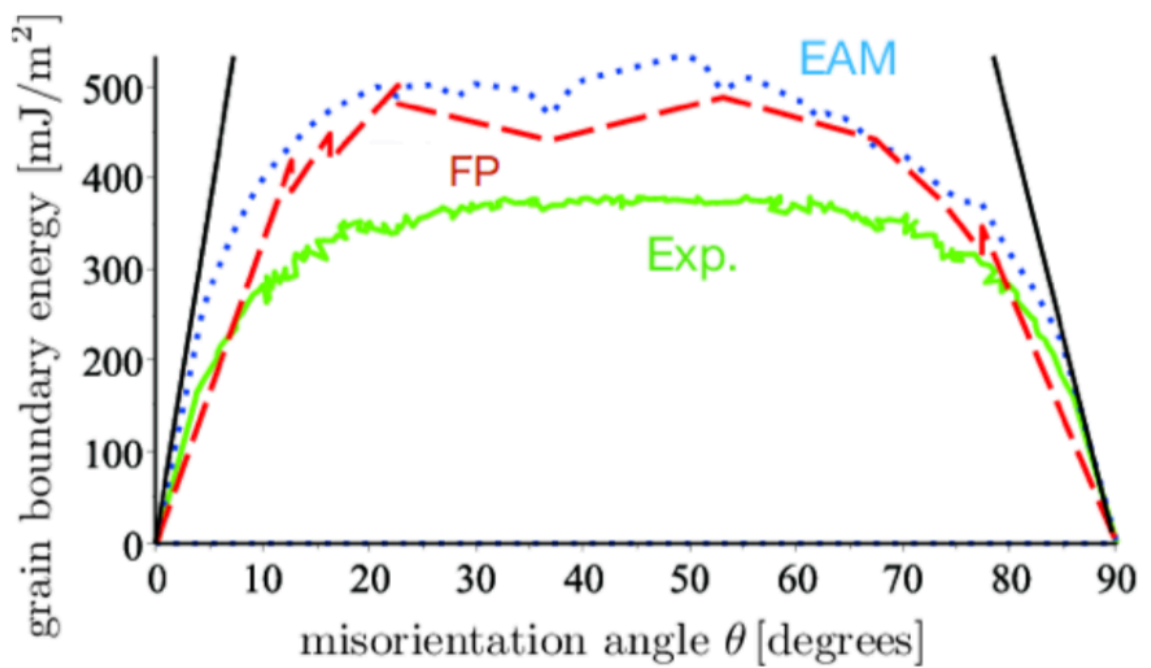


図 1.1: Al の対称傾角粒界エネルギー, EAM の計算結果 (青点線), 実測値 (緑実線), および第一原理 (FP) 計算値 (赤破線). 0 度, 90 度近辺の直線は EAM の立ち上がり角を示す.

## 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、非結晶に分けられる。その中でも多くの物質が属している多結晶とは、図 3.1 のように赤と青で囲まれた単結晶の粒がランダムに隣接している状態である。また、その粒にはそれぞれ方位が存在し、方位の異なる結晶同士の線の隣接部分を粒界という。特に、図 3.2 の Read-Shockley モデルが示しているような、二つの結晶が回転角  $\theta$  度の角度をなして結合し、粒界部分で赤に示した転位が等間隔  $D$  で並ぶことで構成される。それらで構成されるものを対称傾角粒界と呼び、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は高い特徴があり、角度  $\theta$  が  $0^\circ \sim 30^\circ$  程度のものを小傾角粒界と呼ぶ。粒界付近で求められるエネルギーと、粒内の単結晶でのエネルギーの差を粒界エネルギーという [3]。よって粒界エネルギーは  $E_{\text{boundary}}$  は以下の式

$$E_{\text{boundary}} = \frac{dE}{S} = \frac{E_{\text{defect}} - nE_0}{S}$$

で求めることが出来る。ここで  $dE$  は欠陥が入ることによるエネルギーの上昇を示しており、欠陥を含んだ系のエネルギー  $E_{\text{defect}}$  とそこに含まれる原子数  $n$  分の完全結晶の原子一個あたりのエネルギー  $E_0$  の差によって求めることが出来る。粒界エネルギーは粒界の単位面積あたりなので面積  $S$  で割っている。

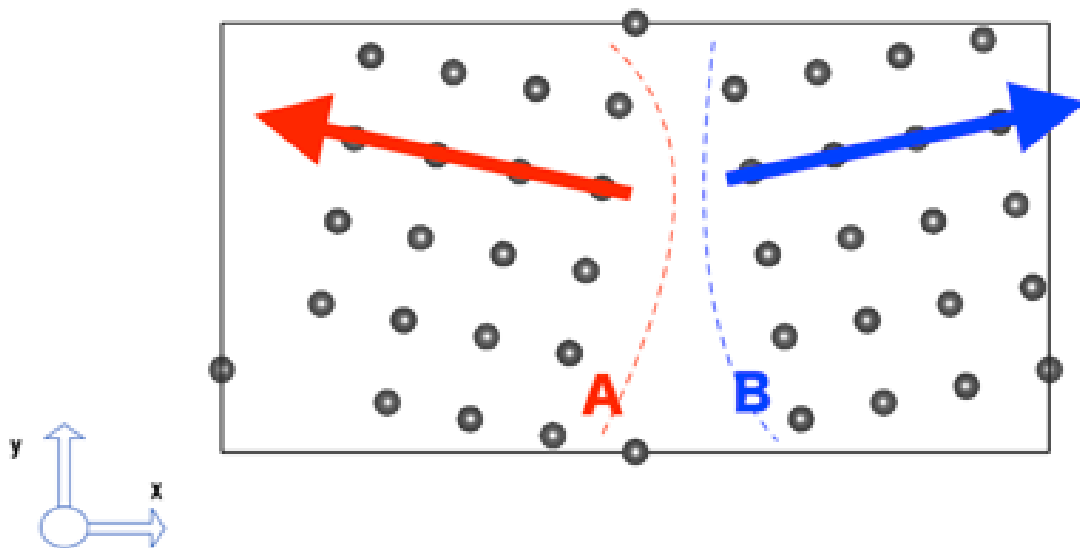


図 2.1: 粒界とそれを構成する粒および単結晶とその方位の模式図.

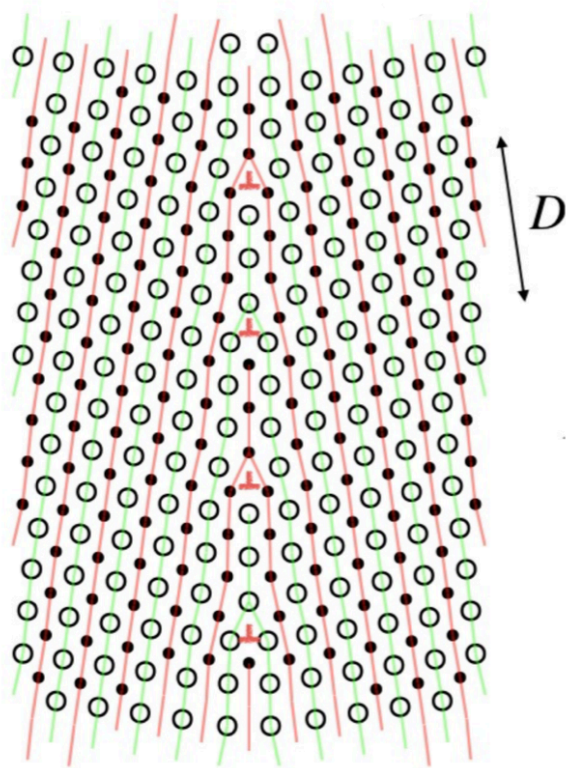


図 2.2: Read-Shockley モデル.

## 2.2 第一原理計算

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質の特性を予想することのできる第一原理計算 (First principles calculations) を用いた。それにより、様々なモデルに対してエネルギー計算を行う。第一原理計算に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、バルク構造、表面、界面など広範囲に適用できる汎用的なソフトウェアである VASP (Vienna Ab-initio Simulation Package) と呼ばれるパッケージを使用する [4]。また VASP は、平面波基底・擬ポテンシャル法を使用しており、イオンが示すポテンシャルを本物ではなく、平面波を上手に再演するように調整されたポテンシャルを使っているため、full ポテンシャルに比べて計算時間が節約されているという特徴がある。この手法では、3次元周期的境界条件を満たす平面波の基底関数を求めて電子被占有の軌道を展開して、波動関数を基に一電子方程式を解くことで、電子状態を求めるものである。擬ポテンシャル法とは原子核近くの内殻電子を除いた価電子だけを考慮するような手法であり、全電子を計算するフルポテンシャル法と比べて高速な計算が可能になり、十分な精度での計算ができるとされている。

第一原理計算では、構造緩和の1つである、ユニットセル体積を変化させて、エネルギーの最安定値を求めるために外部緩和を行う。

西谷研では、グリッド環境の構築において複数の計算資源へ処理を並列処理によって分散させることが可能である MPI (Message Passing Interface) と、分散処理の1つで多数のコンピュータを結びつけて利用できる SGE (Sun Grid Engine) を使用することで、並列計算を可能にする環境が構築されている。SGE によって複数の CPU で構築された環境での大量のジョブが投げられた時、それらを自動でスケジューリングする、また SGE は1つのプログラムを並列実行できない。MPI と組み合わせることで並列実行を行うことが可能になっている。

### 2.2.1 POSCAR ファイル

第一原理計算には、VASP を用いているため、粒界モデルを POSCAR として使用する。POSCAR ファイルはモデルを構築する際にユニットセルの形状やその中にある原子位置を決めるファイル。POSCAR の中にはユニットセルの  $x, y, z$  軸の原子位置やベクトルで示されており、relaxation の考慮などを決定することができる。

### 2.2.2 POTCAR ファイル

各原子のポテンシャルを明記したファイルである。POSCAR において構築された電子配列に関して、どの原子を用いるかを決定する。また1つのモデルの中に2種類以上の元素を用いる場合、POSCAR で指定した原子配列と紐づけなければならない。



### 2.2.3 構造緩和

構造緩和には、外部緩和と内部緩和があり、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であるとは限らない。最適な構造とは、原子1つあたりにかかる力が全くかからないという理想的な状態のことを表す。理想状態を見つけるために、第一原理計算を行うことで原子に働く力を計算する。そこから得られた力の向きによって原子を動かす、再度計算を行う。この過程を繰り返すことで最安定であるエネルギー位置を見つけることが出来る。外部緩和とはユニットセルの形状を変形させる手法である。第一原理計算によって求められたエネルギー結果の視覚化、および計算に必要な入力ファイルが正しく設定するために外部緩和を行ってエネルギーの囲い込みを行う。囲い込みとはエネルギーが任意の点を取った時、それらをの点を結んで放物線状に plot する。その時に、極小値がグラフの中心になっているようなグラフの表現手法である。内部緩和とは、構造内部の原子位置を動かすことによる最適化である。本研究では外部緩和を手動で行った。

## 2.3 周期的境界条件

結晶のモデルのエネルギーの計算は結晶格子が周期的に並べられている理想的な状態であると仮定して行われる。図 2.3 で示したように、周期的境界条件とはユニットセルの端で原子がぶつかり合うと、反対側から原子が出てくるような環境を作ることができる。有限的に広がっている結晶を表面がなく、計算で扱いやすいような無限結晶として扱うことが出来る。

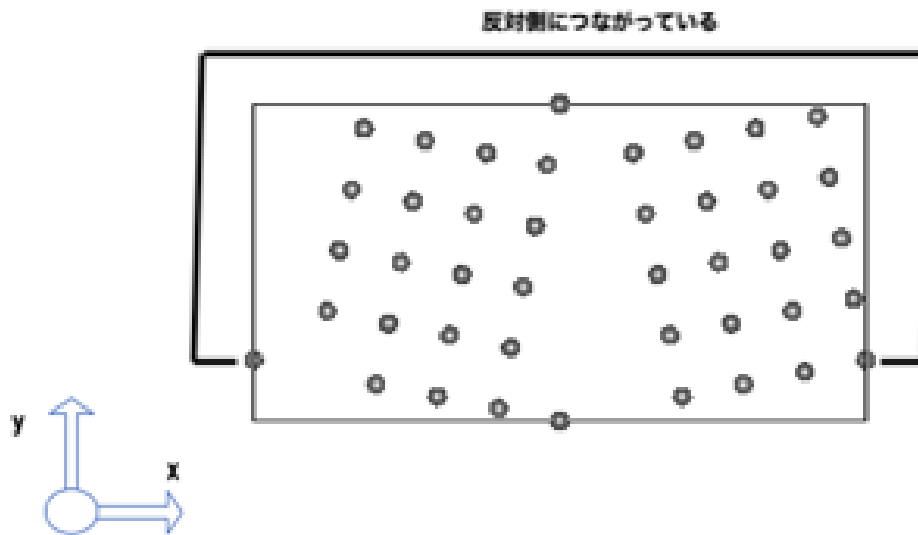


図 2.3: 周期的境界条件のモデル図.

## 第3章 計算結果

### 3.1 粒界を含んでいない完全結晶 Al<sub>2220</sub> に Sn を置換した時のエネルギー

VASP を用いた第一原理計算の所要時間は計算モデルである原子数に大きく影響される。本研究に置いて、結晶の中でも比較的、第一原理計算での計算が容易で、欠陥などのない理想的な結晶である原子数 32 の単結晶で計算時間も少ない結晶での体積変化を行った。原子数 32 の Al<sub>2220</sub> のモデルを POSCAR として使用し、そのモデルを図 3.2 に示す。図 3.3 ではそのエネルギー変化をプロットし、計算終了後、外部セルサイズ変化によってエネルギーの値を 3 次元 fitting し、繰り返すことでエネルギーの低い位置を検討する。

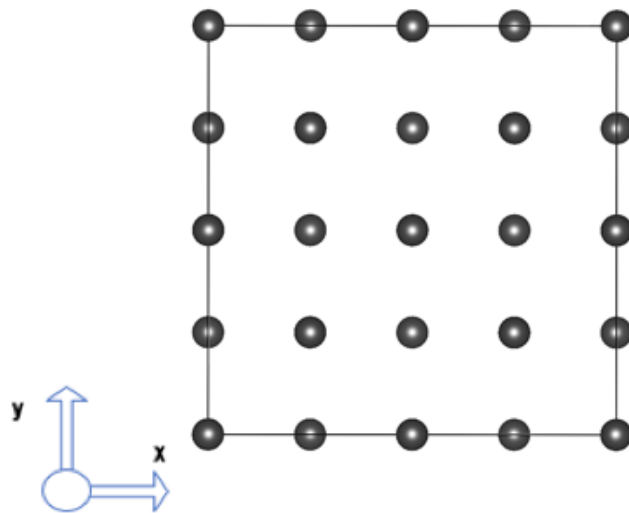


図 3.1: Al<sub>2220</sub> のユニットセル図。

計算結果のデータを以下の表 3.1 にまとめた。

表 3.1 と図 3.3 より、真ん中の点が一番低いエネルギーになっており、外部緩和である囲い込みが上手く出来ている。この結果より、 $x = 1, y = 1$  でエネルギーは最安定値を示しており、その時のエネルギーが  $-118.77261\text{eV}$  であった。

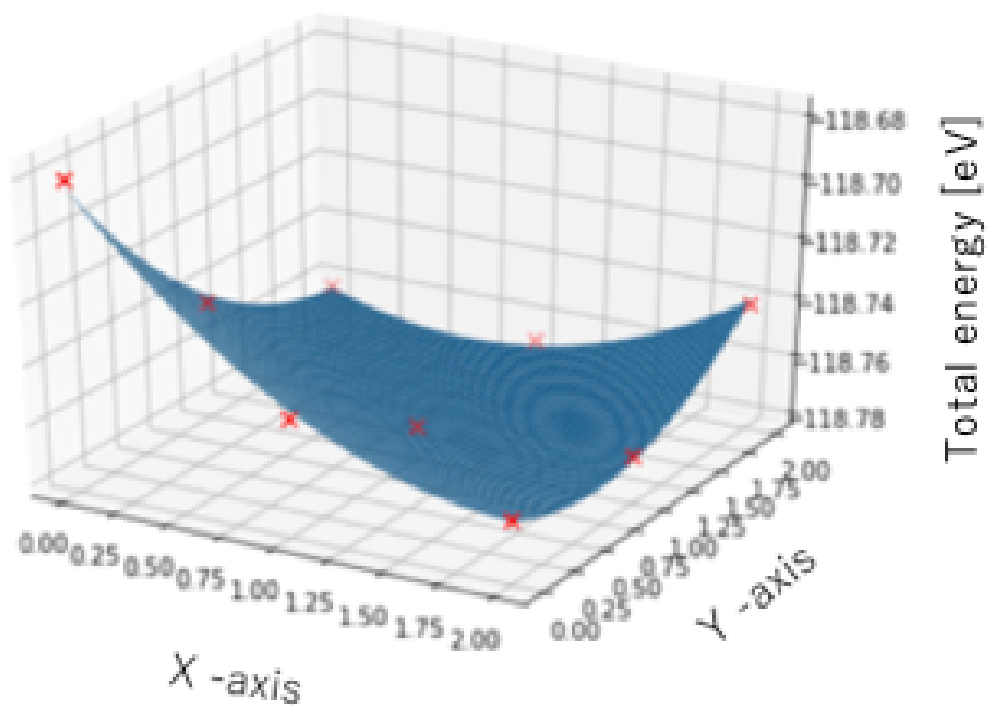


図 3.2: Al<sub>2220</sub> の最安定エネルギーの囲い込み図.

表 3.1: 計算結果.

x	y	E
0	0	-118.68119
0	1	-118.74433
0	2	-118.76248
1	0	-118.74433
1	1	-118.77261
1	2	-118.76784
2	0	-118.76248
2	1	-118.76784
2	2	-118.74124

## 3.2 粒界モデルの作成

本研究では粒界でのエネルギーを求める際にまず、粒界モデルを作成する必要がある。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 計算が可能であるが、Al\_3315 のような粒界を含んでいる結晶でのエネルギー計算では原子に力が全くかかっていない近い状態にするため、外部緩和をし、relax 計算を行う必要がある。

計算手順として以下に示す。

- ユニットセルの x 軸, y 軸においてユニットセルの形状の変化率を手動で設定し, relax 計算させる。
- 計算結果のエネルギー値と緩和された後のモデルが記されている CONTCAR が正しく得られていることを確認して,

Python での最安定エネルギーの囲い込みを行う。

- 囲い込みによって極小値が上手くプロットされていない場合には再度, セルの形状の変化率を設定し, relax 計算させる。

例として, 原子数 40 の Al\_3315 のモデルに Sn を置換せずに,  $x = -15, y = 0$  軸方向に外部緩和させた図 3.1 を示す。これらの計算結果を元にして, relax させた後に得られた CONTCAR で Sn を置換することで粒界位置にどのような変化が見られるかを確認する。

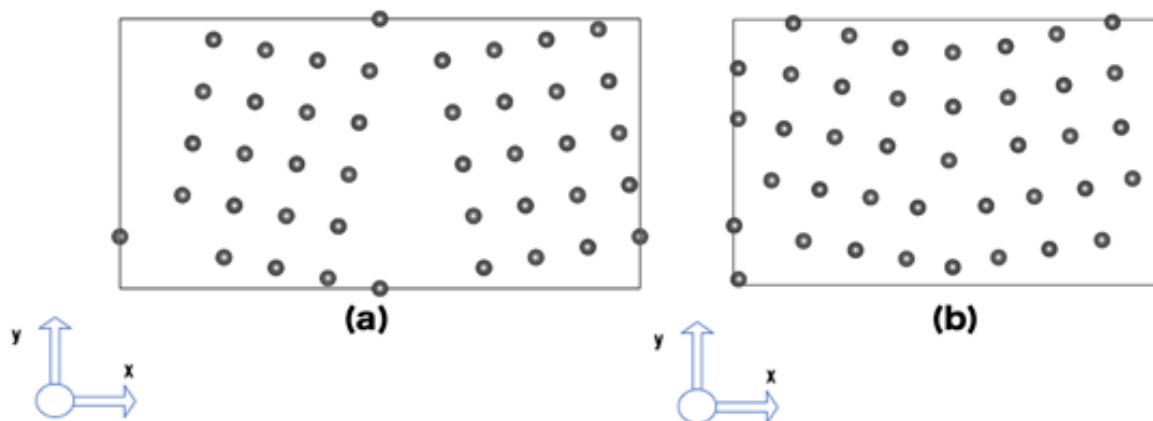


図 3.3: Al\_3315 のユニットセル. 緩和する前 (a), 緩和した後 (b) を表している。

## 3.3 粒界を含んだ Al\_3315 に Sn を置換した時の粒界エネルギー

粒界モデルは, 図 3.1 に示したモデルを用いて, Al\_3315 に Sn を置換し, 構造緩和する事で体積変化を行なった。図 3.4 ではそのエネルギー変化をプロットし, 横軸が x 軸方

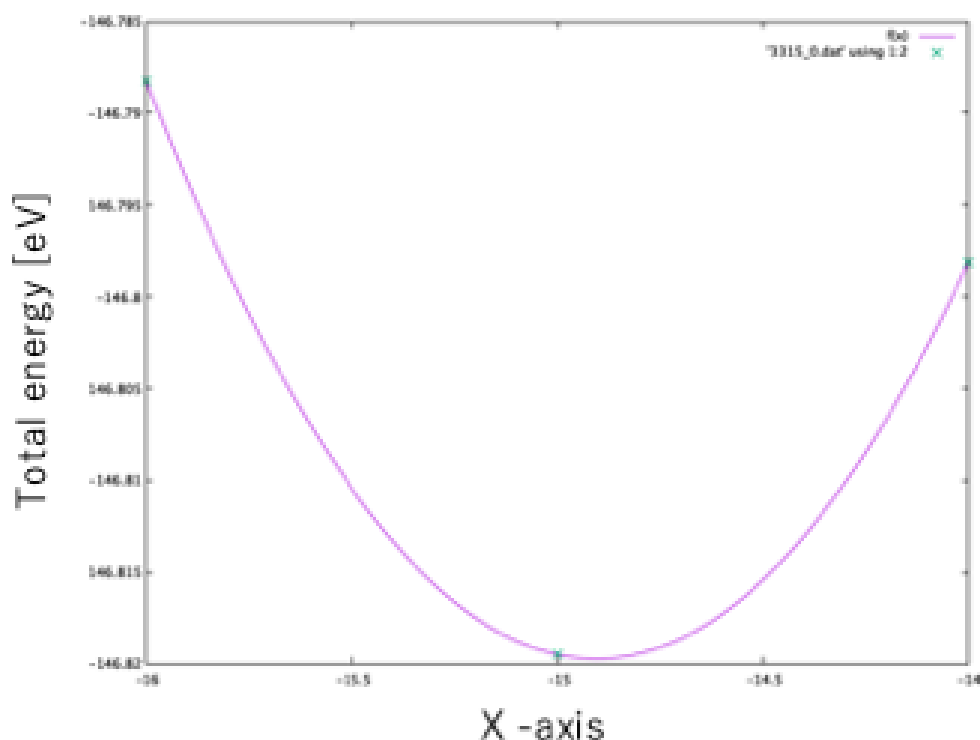


図 3.4: Al の体積-エネルギー曲線.

向の変化率(%), 縦軸がエネルギーを表しており,  $x = -15$  でエネルギーは最安定値を示している.

計算終了後, 図 3.5 のように, 外部緩和での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位置を模索していく.

図 3.5 は, 真ん中の点が一番低いエネルギーになっており, 囲い込みが上手く出来ている. この結果より  $x = -15, y = 0$  でエネルギーは最安定値を示しており, そのエネルギーは  $-146.81952\text{eV}$  であった.

この粒界を含んだユニットセルに実際に Sn を置換する. 置換する原子の位置をそれぞれ変えることで原子位置による最安定エネルギーの比較を行う. 最安定エネルギーをそれぞれ比較することで偏析が実際に起こっているかどうかを確認する.

### 3.4 粒界を含んだ Al\_3315 に Sn を置換

粒界を含む Al\_3315 結晶は原子数が 40 である. これらの 40 個の原子位置それぞれの箇所に Sn 原子を置換する. 置換した粒界を含んだ Al ユニットセルを図 3.6 に示す.

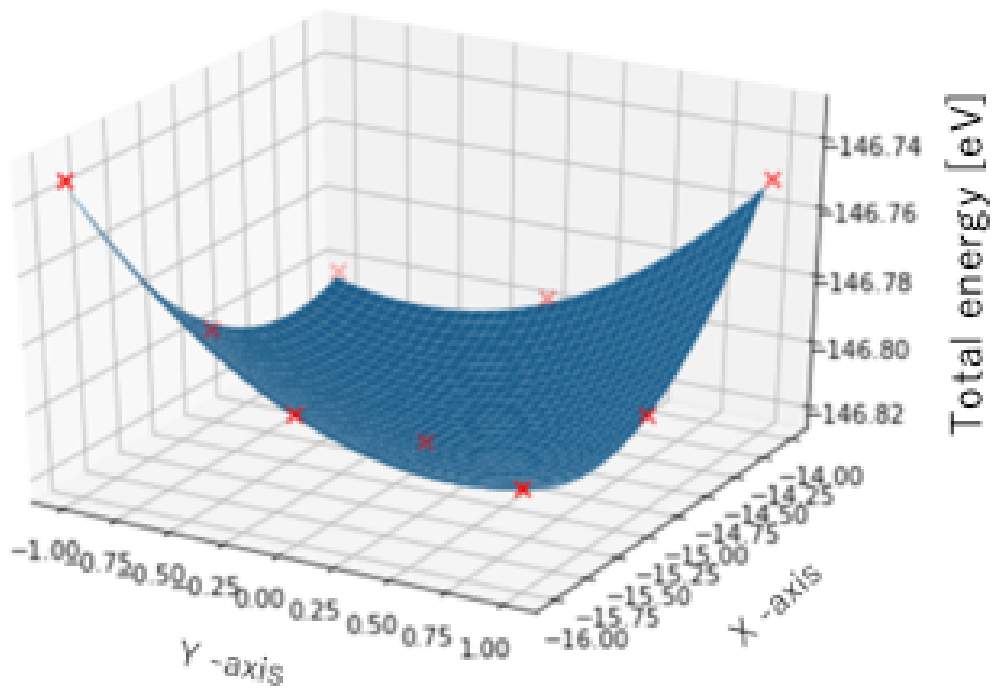


図 3.5: Al\_Sn の最安定エネルギーを囲い込んだ fitting 図.

表 3.2: 計算結果.

x	y	E
-16	-1	-146.73422
-16	0	-146.78827
-16	1	-146.79614
-15	-1	-146.79846
-15	0	-146.81952
-15	1	-146.79827
-14	-1	-146.80206
-14	0	-146.79807
-14	1	-146.75061

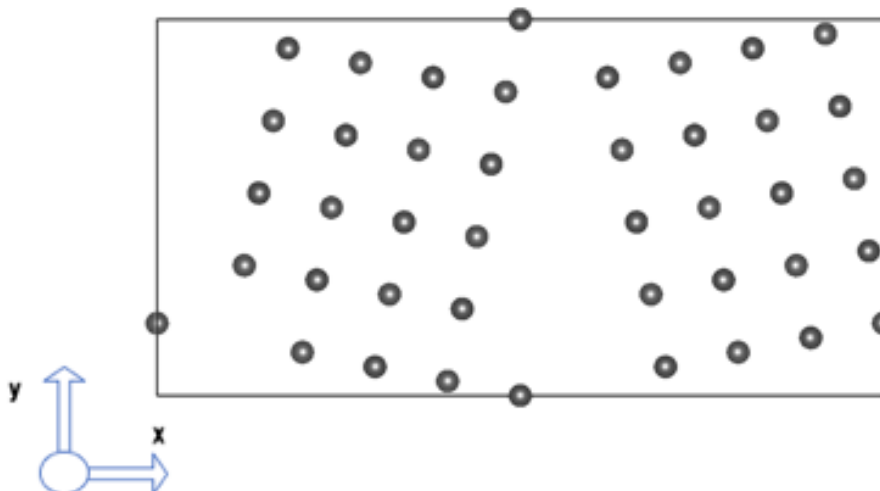


図 3.6: Sn を置換する粒界を含んだ Al\_3315 のモデル.

### 3.4.1 Al\_3315 の原子位置によって変化する最安定エネルギー推移

表 3.3 では、それぞれの原子位置に Sn を置換した時の、最安定エネルギーの推移を表しており、最も大きい最安定エネルギーが-148.0019eV、最も小さい最安定エネルギーが-146.0127eV という結果になった。dE では、最も小さいエネルギーである、-148.0019eV を基準値として、それぞれの差を取った時の値を示している。

表 3.3: 計算結果.

POSCAR	E	dE
3315_0	-146.81952	+1.18157
3315_2	-147.06339	+0.9377
3315_3	-146.35585	+1.64524
3315_4	-146.58492	+1.41617
3315_5	-146.81952	+1.18157
3315_6	-146.33984	+1.66125
3315_7	-146.60692	+1.39417
3315_8	-146.43773	+1.56336
3315_9	-146.01272	+1.98837
3315_10	-146.33927	+1.66182
3315_12	-146.33794	+1.66315
3315_14	-148.00109	+0

図 3.7 では、粒界を含んだ Al\_3315 に Sn を置換した時のエネルギーを値の低い順にソートしてプロットした。縦軸はエネルギーを表している。図より-146.4eV から-146.6eV の付近で最安定エネルギーの値が多く分布しており、最小のエネルギーである-148eV や、最大のエネルギーである-146eV の部分では等価な原子を除いて、最安定なエネルギーを取っ

ている箇所が少ないことが図より分かる。

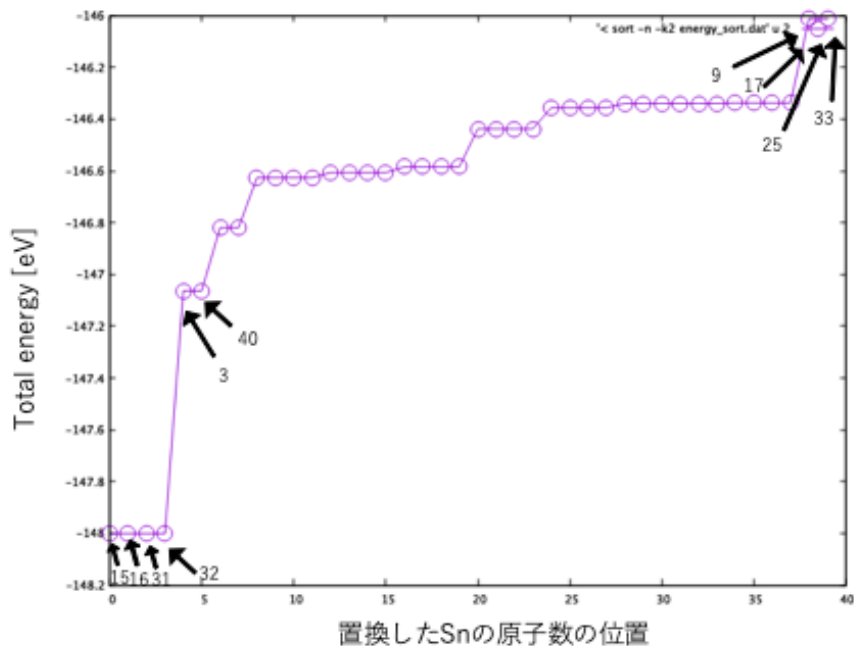


図 3.7: 計算結果のエネルギーを値の低い順にソートした図.

### 3.4.2 Sn を置換したユニットセルを構造緩和させた時の CONTCAR

Sn を置換したユニットセルを構造緩和させた時の変化を図 3.8～図 3.10 に示した。図中で示されている赤色矢印は Sn を置換した位置を示している。

構造緩和させ、置換した赤色印で示された Sn 原子の周りでは、ほとんどの場所で図 3.6 で構造緩和させる前よりも、構造緩和させた後の方が Sn 原子の周りに歪みが生じていることが分かる。

一番エネルギーの低かった Al\_3315\_14 では、緩和させた後の CONTCAR を見てみると、Sn を置換した位置よりも左部分のセルに注目した時、粒界が無くなって、完全結晶になっている。つまり粒界を含んだセルではなく、緩和させた後の完全結晶のセルでエネルギーが最安定を取っている。



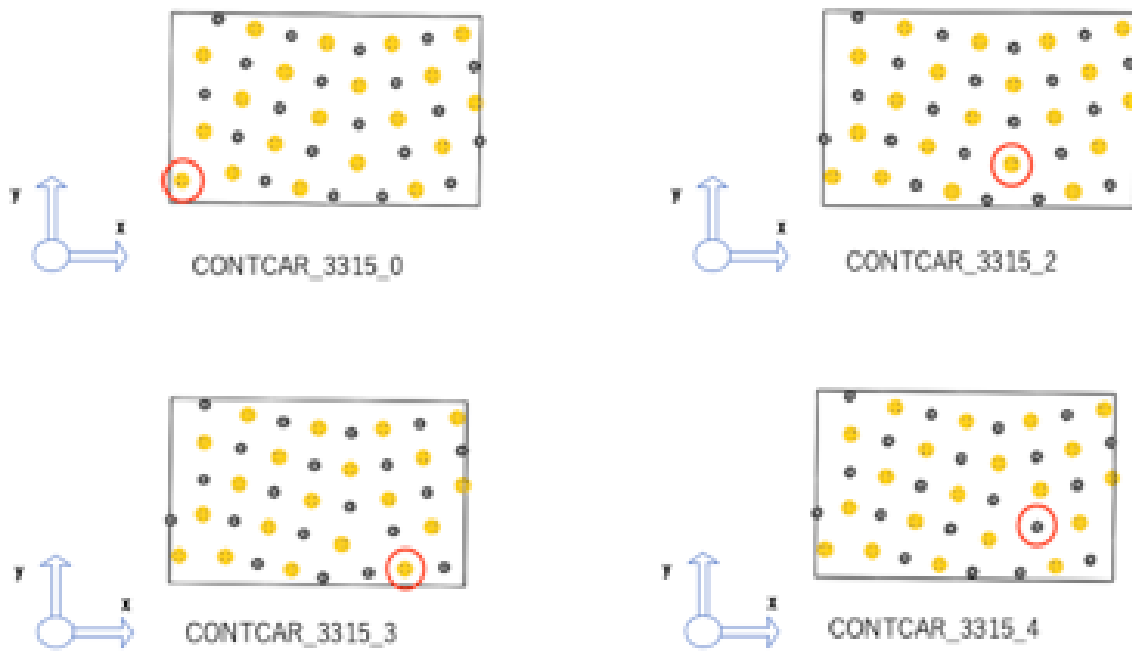


図 3.8: Al<sub>3315</sub> に Sn を置換して緩和した時の模式図 (1).

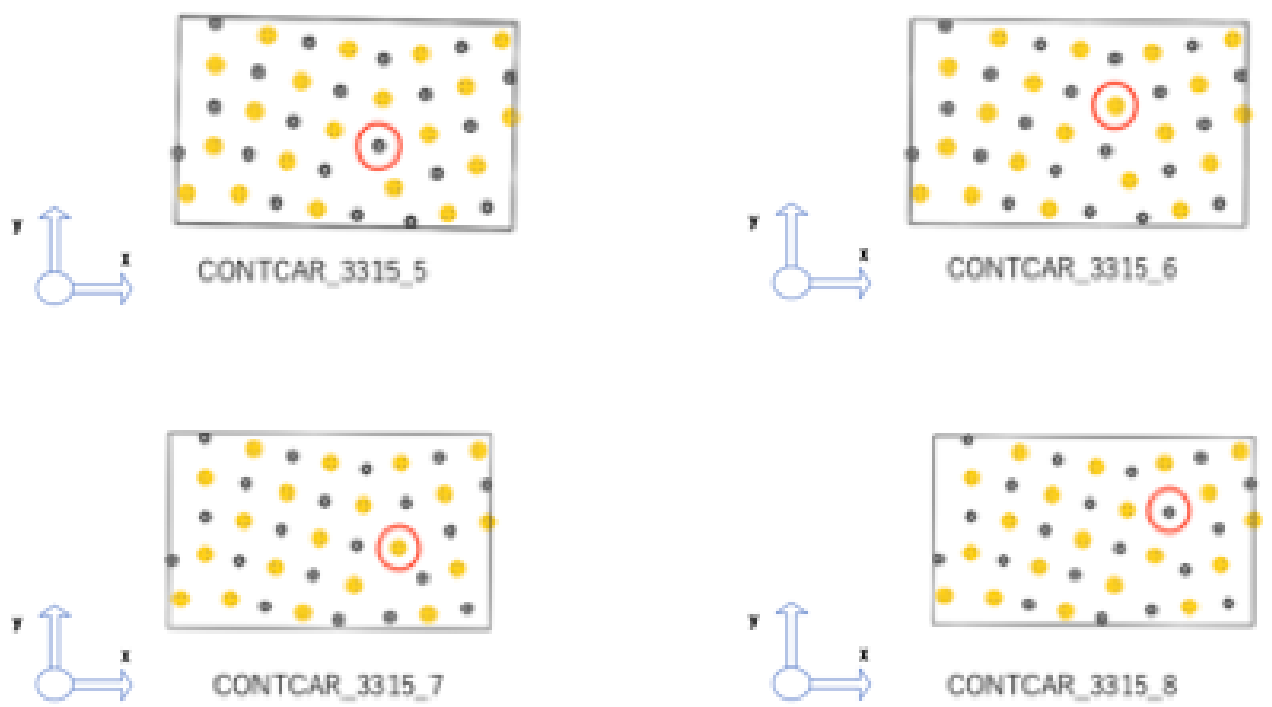


図 3.9: Al\_3315 に Sn を置換して緩和した時の模式図 (2).

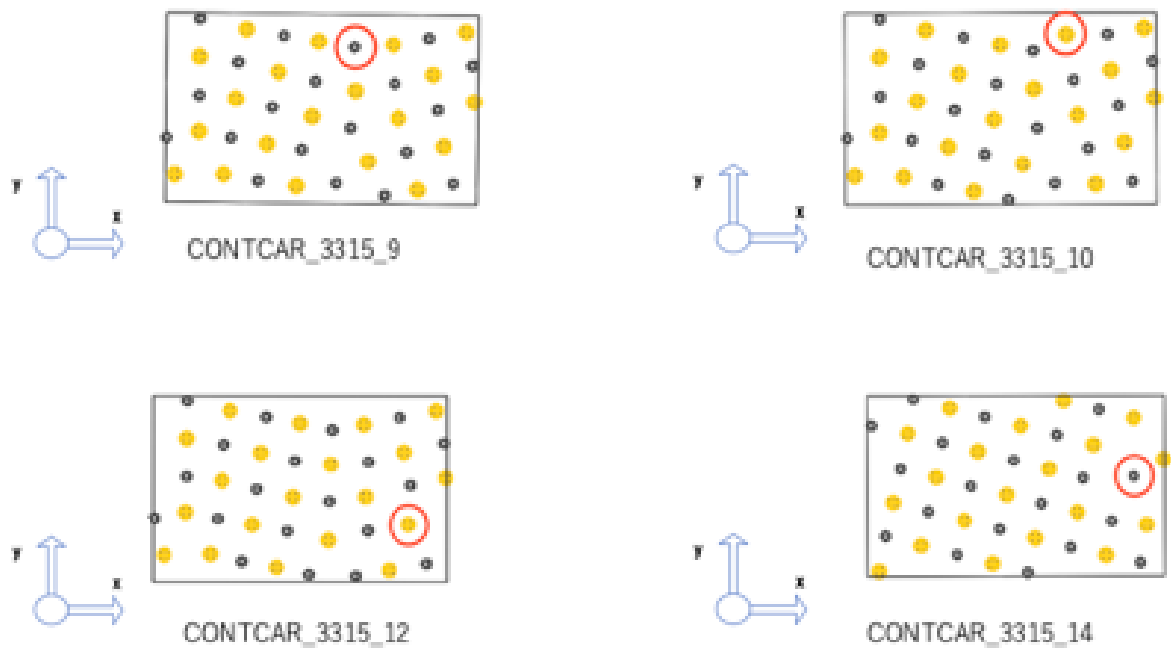


図 3.10: Al<sub>3315</sub> に Sn を置換して緩和した時の模式図 (3).

## 第4章 考察

Al の 3315 での粒界に対して，第一原理計算による粒界エネルギー計算を行い，それぞれの原子位置に Sn 原子を置換し，最安定エネルギーを求めて比べた結果，最大のエネルギーの安定値の値が $-146.0127\text{eV}$  であるのに対し，最小のエネルギーの安定値の値は $-148.0019\text{eV}$  となり，その差は， $1.98837\text{eV}$  というかなり大きな差が生まれていることが分かった。

図 4.1 では Al\_3315 の粒界を含んだモデルに dE のエネルギー平均値である $-146.64204\text{eV}$  を基準に取り，それよりも最安定エネルギーが低い位置は青色，高い位置では赤色で示した。基準値に設定した値である $-146.64204\text{eV}$  と比較した時に，粒界付近で基準よりも低い値で最安定エネルギーを取っている位置もある。また粒内やユニットセルの端の位置などで最安定エネルギーが低くなっている位置が多いことが分かる。

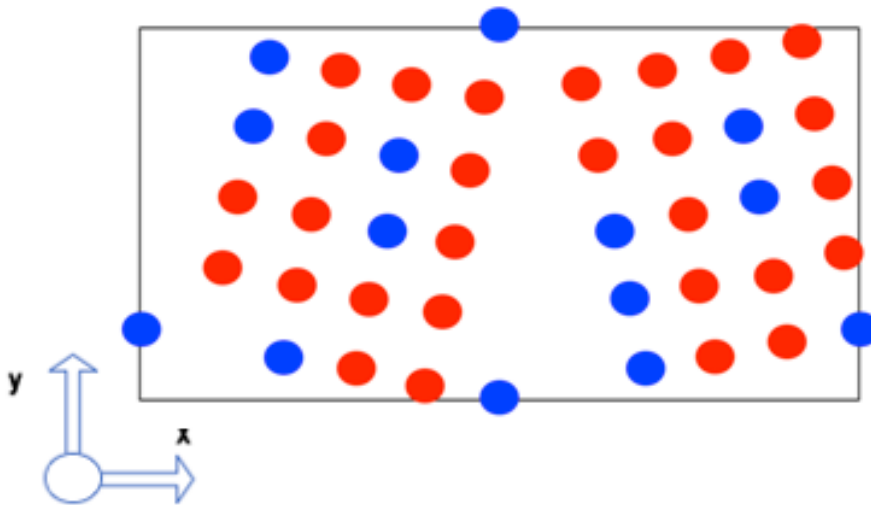


図 4.1: POSCAR の原子位置による dE の推移。

その結果を図 3.8~図 3.10 で示されている，緩和した後の粒界モデルである CONTCAR ファイルに入力されている x 座標, y 座標で表された原子位置に，それぞれ Sn を置換した時に求められた最安定エネルギーを入れて，プロットされた図を図 4.2~図 4.5 に示す。

これらの結果より，構造緩和する前と構造緩和する後でのエネルギーの推移を比較したところ，最安定エネルギーは粒界ではなく，粒内での位置で最安定を取り，エネルギーが低くなっていることが分かる。これら結果より，Sn 原子が Al 粒界で偏析しているのでは

なく、粒内で偏析しているのではないかと予想された。

一番エネルギーの低かった Al\_3315\_14 の計算結果より、粒界を含んでいるモデルよりも、緩和した時に完全結晶に変形したモデルの方が安定しているという結果になり、これは Al\_3315\_14 での計算が上手くいっていないためである。しかしこの計算は何度計算しても同じ結果になり、この構造が不安定であることを示唆している。今後は Al の粒界モデルを使用して、粒界でのエネルギーの計算に有限温度効果について調べていく必要がある。

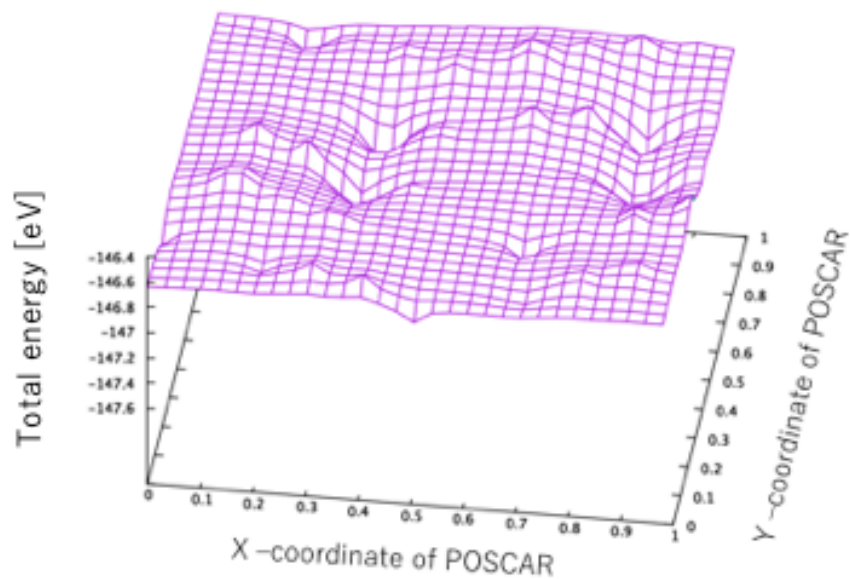


図 4.2: Sn を置換した Al\_3315 のユニットセル

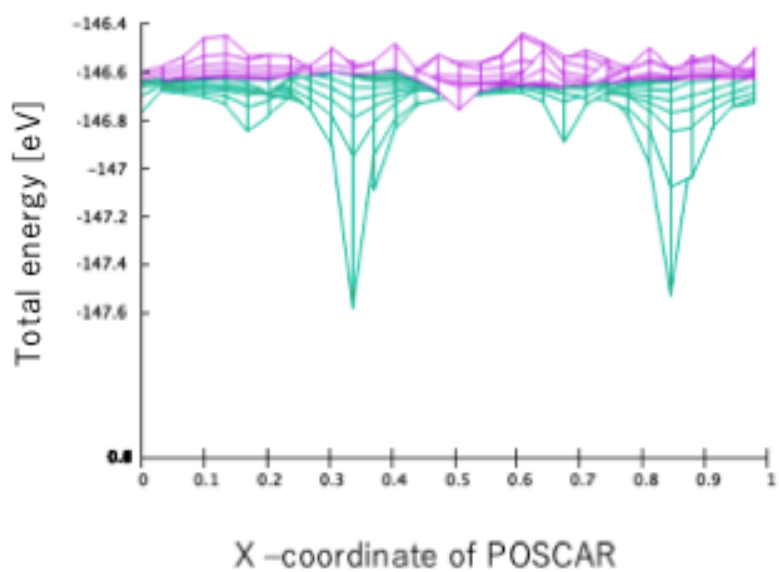


図 4.3: x 軸方向から見た Sn を置換した Al<sub>3315</sub> のユニットセル

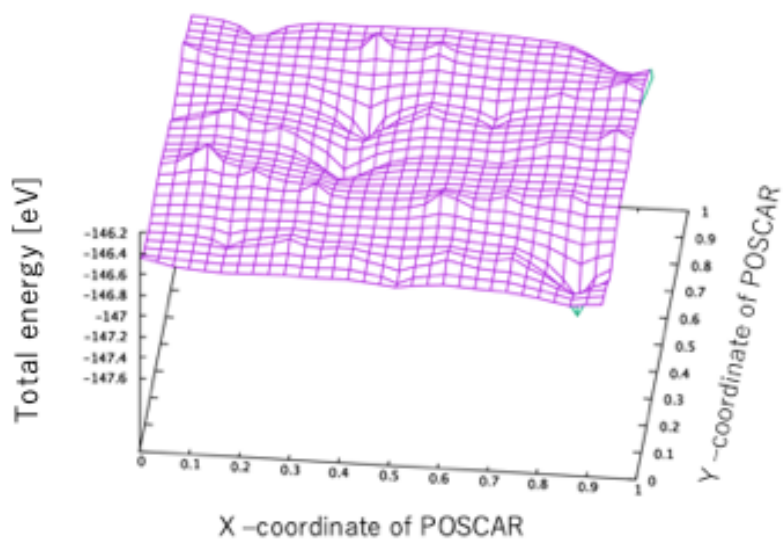


図 4.4: Sn を置換せずに Al<sub>3315</sub> を緩和させた後のユニットセル.

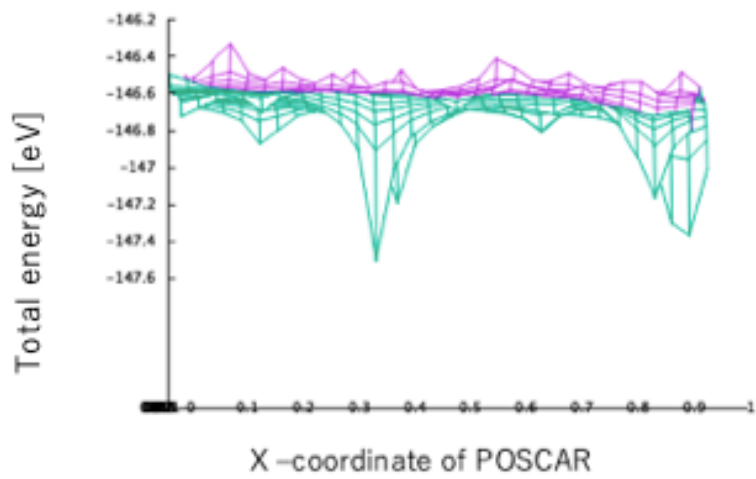


図 4.5: x 軸方向から見た Sn を置換せずに Al<sub>3315</sub> を緩和させた後のユニットセル.

# 第5章 付録 POSCARとモデルの掲載

計算に使用した POSCAR を掲載する.

## 5.1 原子数 32 個の Al\_2220

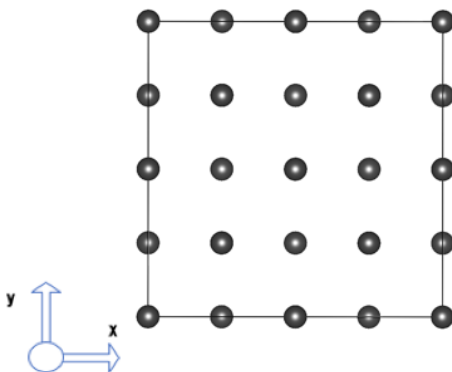


図 5.1: 使用した粒界を含んでいない Al\_2220 モデル. 原子数 32.

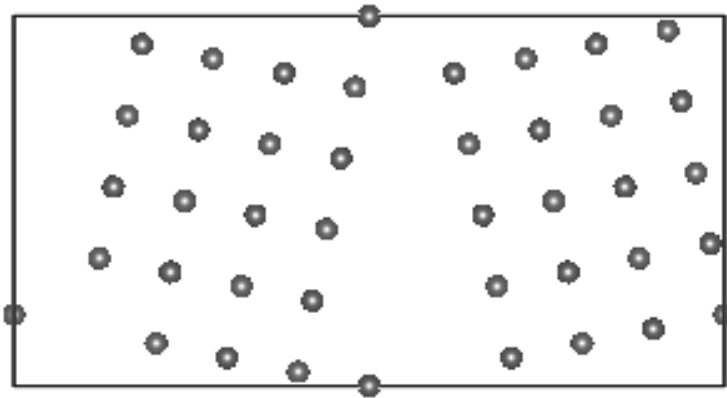
```
1.0000000000000000
8.0828000000 0.0000000000 0.0000000000
0.0000000000 8.0828000000 0.0000000000
0.0000000000 0.0000000000 8.0828000000
32
Selective dynamics
Direct
0.0000000000 0.0000000000 0.0000000000 T T T
0.2500000000 0.2500000000 0.0000000000 T T T
0.2500000000 0.0000000000 0.2500000000 T T T
0.0000000000 0.2500000000 0.2500000000 T T T
0.0000000000 0.0000000000 0.5000000000 T T T
0.2500000000 0.2500000000 0.5000000000 T T T
0.2500000000 0.0000000000 0.7500000000 T T T
0.0000000000 0.2500000000 0.7500000000 T T T
0.0000000000 0.5000000000 0.0000000000 T T T
```



0.2500000000	0.7500000000	0.0000000000	T	T	T
0.2500000000	0.5000000000	0.2500000000	T	T	T
0.0000000000	0.7500000000	0.2500000000	T	T	T
0.0000000000	0.5000000000	0.5000000000	T	T	T
0.2500000000	0.7500000000	0.5000000000	T	T	T
0.2500000000	0.5000000000	0.7500000000	T	T	T
0.0000000000	0.7500000000	0.7500000000	T	T	T
0.5000000000	0.0000000000	0.0000000000	T	T	T
0.7500000000	0.2500000000	0.0000000000	T	T	T
0.7500000000	0.0000000000	0.2500000000	T	T	T
0.5000000000	0.2500000000	0.2500000000	T	T	T
0.5000000000	0.0000000000	0.5000000000	T	T	T
0.7500000000	0.2500000000	0.5000000000	T	T	T
0.7500000000	0.0000000000	0.7500000000	T	T	T
0.5000000000	0.2500000000	0.7500000000	T	T	T
0.5000000000	0.5000000000	0.0000000000	T	T	T
0.7500000000	0.7500000000	0.0000000000	T	T	T
0.7500000000	0.5000000000	0.2500000000	T	T	T
0.5000000000	0.7500000000	0.2500000000	T	T	T
0.5000000000	0.5000000000	0.5000000000	T	T	T
0.7500000000	0.7500000000	0.5000000000	T	T	T
0.7500000000	0.5000000000	0.7500000000	T	T	T
0.5000000000	0.7500000000	0.7500000000	T	T	T

## 5.2 原子数40個の Al\_3315

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



**POSCAR\_3315\_40**

図 5.2: 使用した粒界を含んだ Al\_3315 のモデル. 原子数 40.

```

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

# 謝辞

本研究を行うにあたって、終始多大なる御指導、御鞭撻をいただいた西谷滋人教授に対し、深く御礼申し上げます。

また、本研究の進行に伴い、様々な助力、知識の供給を頂きました西谷研究室の同輩、並びに先輩方にご協力頂き、本研究を成就させることが出来ましたことを心から感謝の意を示します。本当にありがとうございました。

## 参考文献

- [1] 大槻 徹, 「アルミニウムの粒界エネルギーに関する研究 (京都大学 1990)」 .
- [2] 西谷 滋人, 大沢一人, 山本洋祐, "第一原理計算の注意点 -アルミニウム粒界のエネルギー収束性を例に,"*軽金属*, vol. 69, no. 10,(2019), 518.
- [3] W. T. Read Jr., and W. Shockley, "Dislocation Models of Grain Boundaries", in "Imperfection in nearly perfect crystals", ed. by W. Shockley, chap.13 (Wiley, New York, 1952), pp.352-376.
- [4] 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>, (2019/9/15 accessed).