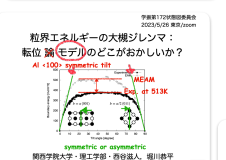
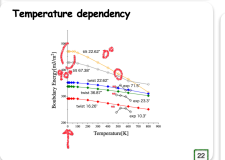


Where is wrong?

- エネルギー不一致の原因
 - 大規模な緩和が不十分?
 - モデルが小さい?
 - 経験ポテンシャルがおかしい?
 - 温度の効果
- vs EAM, 第一原理計算 -> 転位位の運動状態
 - vs 実験 -> 転位のエネルギーが定量的
 - マイクロメカニクス(Eigen)的な描像
 - 転位
 - 転位の特殊性
 - 遅延効果による短期緩和の押し込み

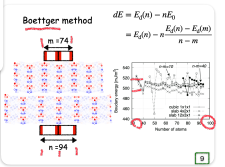
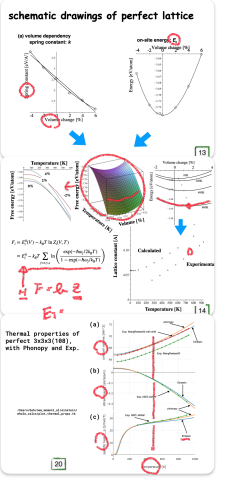
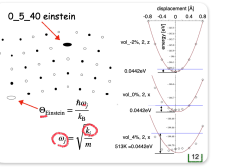
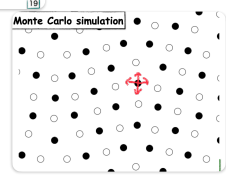
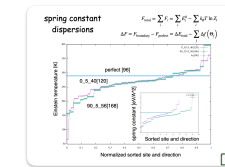
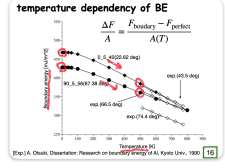
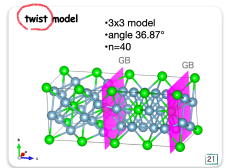
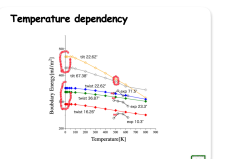
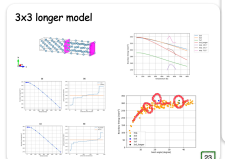
Where is wrong?

- エネルギー不一致の原因
 - 大規模な緩和が不十分?
 - モデルが小さい?
 - 経験ポテンシャルがおかしい?
 - 温度の効果
- 小さいモデルで第一原理計算(VASP)
 - AI(100) 対称構造転位
 - 有限温度 (not phonon)



結論

- AI(100) 対称構造転位の第一原理計算
- 基礎状態計算 - 実験値を再現できない
- Boettger法 - 小さいモデルでエネルギーを再現
- Einstein model: 有限温度計算で実験値を再現
- Frankel法: 非調和効果は小さい



鈴木秀次先生の記述

転位エネルギーの計算方法に関する記述。

