

アルミニウム

A1の小傾角粒界エネルギーの 第一原理計算と転位論の見直し



御講演 西谷滋人先生
御所属 関西学院大学
工学部
情報科学科
教授

研究室HP <http://ist.ksc.kwansei.ac.jp/~nishitani/>

代表著書



固体物理の基礎

材料がわかる量子
力学と熱統計力学

御講演概要

小傾角粒界エネルギーはRead-Shockleyによって転位論の基礎となる理屈で予測されている。この予測によって転位論の正しさが支持されてきた。しかし、大槻による精緻な実測によるとその予測と矛盾する結果が得られている。これは転位論の基礎を揺るがしかねない結果である。われわれは、この実験結果を検証するため、第一原理計算によるA1の小傾角粒界の計算を行ってきたが、その結果はどちらを支持するか微妙である。

発表では、Read-Shockley理論の疑問点、経験ポテンシャル、第一原理計算を用いた計算の問題点、エネルギー解析の結果を紹介する。ご参加頂いている方々のご意見をお伺いし、本質的課題の議論を行いたい。

日時 : 2017年7月14日15:00~ (18:00より懇親会)
場所 : 大阪大学吹田キャンパス (大阪府吹田市山田丘2-1)
材料系R2棟2階 R2-221号室
主催 : 大阪大学ナノサイエンスデザイン教育研究センター
住友電工アドバンスト解析技術共同研究部門
連絡先 : 下司雅章 (特任准教授) geshi@insd.osaka-u.ac.jp