

# Alの小傾角粒界エネルギーの第一原理計算

関西学院大・理工 西谷滋人

## First principles calculations on small angle tilt boundary of Al

Department of Informatics, Kwansei Gakuin Univ.

S. R. Nishitani

■背景 小傾角粒界エネルギーは Read-Shockley の転位模型で理論的に説明されている [1]. この重要な帰結として, 粒界エネルギーは粒界を構成するに必要な幾何学的転位のバーガースベクトルの大きさに依存する. 経験的ポテンシャル (EAM) を用いた計算 (図 1:青点線) では, その予測に従って, 金属の [100] 方位の対称傾角粒界の 0 度と 90 度の立ち上がり角に違いが見られる [2]. しかし, 測定された実験結果 (図 1:緑実線) にはそのような差異はなく, どちらも同じ角度である [3]. これらの齟齬は数値的にはわずかであるが, 転位論の信ぴょう性に関わる問題である [4]. 本研究では, どちらが正しいかを確認するため, 第一原理計算をおこなった.

■手法 第一原理計算には VASP を用いた. 計算条件は次の通りである. KPOINT は, 粒界のモデルのサイズが粒界傾角によりそれぞれ違うため, VASP が用意している自動生成を用いた. Al は  $d$ -電子を含まないので length=50 で行った. 擬ポテンシャルには PAW を用いた. 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.

■結果 図 1 に赤破線で第一原理計算の結果

を示した. 計算結果は EAM を用いた結果に近い値を示している. しかし, 計算に用いる系の原子サイズを大きくすると計算値は単調に減少する. これは, 周期的境界条件にともなう転位間の相互作用や拘束の影響が考えられ, 十分に原子緩和が完了していないことが予測される. 発表では EAM を用いたエネルギー解析を踏まえて, 転位論への影響を考察する.

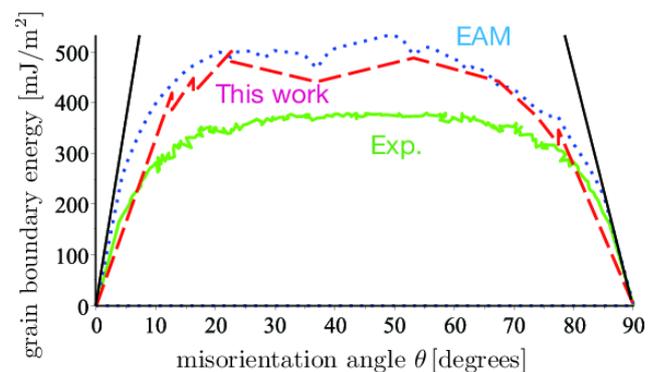


図 1 Al の [100] 方位の対称傾角粒界エネルギー, EAM の計算結果 (青点線), 実測値 (緑実線), および第一原理計算値 (赤破線). 0 度, 90 度近辺の青直線は EAM の立ち上がり角を示す.

- [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. Tschoopp and D. L. McDowell, Phil. Mag., **87**(2007), 3871.
- [3] A. Otsuki, J. Materials Science, **40**(2005), 3219.
- [4] 「転位論入門」鈴木秀次, (1967 アグネ), p.77,p.350.