

金属の対称傾角粒界エネルギーの精密計算

関西学院大・理工^A 大阪府大・工^B 九大・応力研^C
西谷滋人^A, 中野克哉^A, 山田智子^B, 大澤一人^C

First principles calculations on symmetric tilt boundary energy of metallic systems

^ADept. of Info, Kwansai Gakuin Univ., ^BDept. of Quantum and Radiation Eng., Osaka Pref. Univ., ^CResearch Inst. for Appl. Mech., Kyushu Univ.

S. R. Nishitani^A, K. Nakano^A, T. Yamada^B, K. Ohsawa^C

■背景 我々は対称傾角粒界のエネルギーの精密計算に取り組んできた。Al や Cu などの金属の対称傾角粒界エネルギーは、液体金属との接触角計測により求められた実験結果と、pair あるいは EAM ポテンシャルを用いた計算結果には齟齬が生じている。そこで、第一原理計算による粒界エネルギーの精密計算に取り組んできた。しかし、小傾角でのエネルギー計算には大きな原子サイズのユニットセルが必要なため、得られたエネルギーの精度に疑問がある [1]。本研究では、k-点数および参照系について検討を行った [2]。

■手法 第一原理計算には VASP を用いた。粒界モデルとして、図 1 に示したようなスラブモデルを用いる。ここでは、粒界の傾角は $\Sigma 13(510)\langle 100 \rangle$ (傾角 22.62°) を示している。粒界は、周期的境界条件を満たすようにユニットセルの中心と両端に 2 枚配置し、紙面に垂直方向には 2 層とっている。k-点は VASP が用意している自動生成機構を用いて、length=50,100,150,200 で比べた。収束性を確かめたところ、100 で 0.001eV で収束していた [2]。いびつなスラブモデルでは参照エネルギーを適切に選ぶことが難しいが、表面エネルギーで開発されてきた Boettger の手法を用いた [3]。

■結果 Boettger の手法は図 1 のような二つのモデルを比較することに対応する。n=94 で示したモデルと、m=74 で示したモデルでは、粒界間の完全結晶部の幅が変化している。n-m=2,4,10,20 で比べた粒界エネルギーの計算結果を図 2 に示した。n-m=2,4 ではばらつきが大きいが、10,20 程度の大きな差を取ると系のサイズが大きくなるにつれて値は収束して行く。発表では図 1 に用いた、粒界近傍の歪みを示す EAM 解析についても報告する。

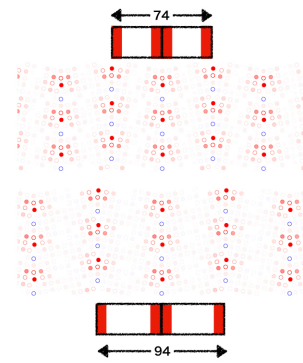


図 1 Boettger の手法の模式図と実際のモデルのひずみ表示。

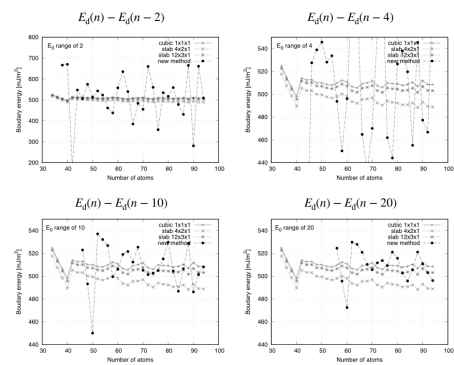


図 2 参照モデルの差による粒界エネルギーの収束性の変化。左上の n - m = 2 以外は y 軸のスケールを揃えている。

[1] S. R. Nishitani, Materials Science Forum, **941** (2018), 2296.

[2] 西谷他, 軽金属, 第 69 巻 10 号 (2019), 印刷中.

[3] J. C. Boettger, Phys. Rev. B, **49** (1994), 16798.