

Al 点欠陥の有限温度第一原理計算

関西学院大・理工
西谷 滋人

Finite Temperature First Principles Calculations on Al vacancy

Dept. of Informatics, Kwansei Gakuin Univ.

S. R. Nishitani

■背景 著者らが提案している欠陥エネルギーの有限温度第一原理計算手法を、Al の対称傾角粒界エネルギーに適用した結果は、液体金属との接触角計測により平衡状態で求められた実験結果 [1] と非常に良い一致を示した [2]. 本研究では、この有限温度の第一原理計算手法の計算精度を Al の単空孔を対象にして検討した.

■手法 有限温度の自由エネルギー計算は

1. 各サイトの緩和位置でのバネ定数からの、Einstein 結晶の自由エネルギー計算.
2. 平衡 MC シミュレーション中にエネルギー差を記録し、非調和効果エネルギーを求める.
3. 完全結晶との自由エネルギー差から欠陥エネルギーを算出する.

という手順で求めている. 第一原理エネルギー計算には平面波基底擬ポテンシャル法で実装された VASP を用いた.

■結果 Al の単空孔に適用したところ、図 1 のようにモデルによって大きく異なった結果が得られた. その原因を調べるため、各サイトでのバネ定数をプロットすると図 2 のようになった. (a) の $2 \times 2 \times 2$ モデルでは、完全結晶に比べて欠陥モデルの各サイトのバネ定数の分布が低い方に系統的にずれており、その差となる欠陥自由エネルギーは温度とともに減少する. 一方、(b) の $3 \times 3 \times 3$ モデルでは完全結晶のバネ定数とほぼ一致しており、欠陥エネルギーの温度依存性は顕著にはみられない. これらの原因と、さらに非調和効果を求める Frenkel 法を組み合わせた結果を検討し、新しく提案している有限温度第一原理計算の適切な手順について考察を加える.

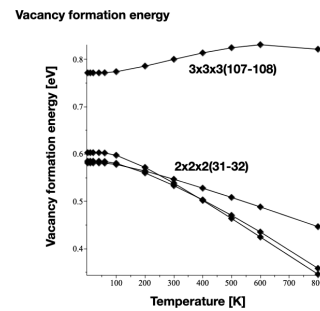


図 1 Al 単空孔生成自由エネルギーの温度変化.

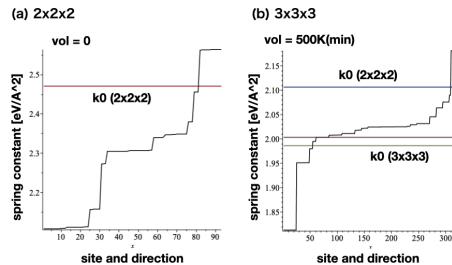


図 2 Einstein 計算に用いたバネ定数の分布.

[1] 大槻徹, 「アルミニウムの粒界エネルギーに関する研究」, 京都大学学術情報リポジトリ, (1990), p.233.

[2] S. R. Nishitani, “Finite-temperature first-principles calculations of Al $\langle 100 \rangle$ symmetric tilt grain-boundary energy”, *Phil. Mag.*, **101**, (2021), 622-642.