

Al<100> twist 粒界の有限温度第一原理計算

関西学院大, 理工

堀川恭平, 天川純平, 西谷滋人

Finite temperature first principles calculations of Al <100> twist grain boundary energy

Dept. of Informatics, Kwansai Gakuin Univ.

K. Horikawa, J. Amakawa, and S. R. Nishitani

■背景 Al の対称傾角粒界エネルギーを有限温度の第一原理計算で求める手法を西谷が開発した [1]. 有限温度計算において, 調和振動子近似には Einstein モデルを, 非調和振動子近似には熱平衡モンテカルロから自由エネルギーを計算する Frenkel 法を用いていた. 本研究では, Al <100> ねじり粒界に有限温度 Einstein モデルを適用し, その温度依存性を求める.

■手法 エネルギー計算は全て第一原理計算ソフト VASP を用いた. Einstein モデルは, 原子がそれぞれのサイトに釘付けされて, その周りを熱振動している. 有限温度の粒界エネルギーは, 粒界を含んだモデルと完全結晶とのエネルギー差から求める. 各サイト i で, それぞれの方向 $j = x, y, z$ のバネ定数 k_{ij} を以下の手順で求めた.

1. いくつかの体積で最安定構造を求める,
2. サイトごとに位置を少しずつずらして第一原理計算を行い,
3. バネ定数をフィッティングで求める.

得られたバネ定数から, 原子サイト i の有限温度の Helmholtz 自由エネルギー F_i は,

$$\Delta F_i(T, a) = E_i^0(a) - k_B T \sum_{j=x,y,z} \ln \frac{\exp(-\frac{\Theta_{ij}}{2k_B T})}{1 - \exp(-\frac{\Theta_{ij}}{k_B T})}$$

で求められる [1]. ここで, Θ_{ij} は Einstein 温度と呼ばれるパラメータで, バネ定数 k_{ij} から振動数 $\nu_{ij} = 1/2\pi\sqrt{k_{ij}/m}$ を求め, さらに $h\nu_{ij}/k_B$ で得られる. m, h, k_B はそれぞれ, 原子の質量, プランク定数, ボルツマン定数である. また, $E_i^0(a)$ はその体積での基底状態の欠陥エネルギーである.

■結果 Al の <100> ねじり粒界 $\theta = 36.87^\circ$ ($\Sigma 5$) でおこなった Einstein 計算の結果を図 1 に示した. exp. は実験結果 [2] を, また, tilt は西谷がおこなった傾角粒界での結果を示している. 計算で得られた温度依存性は, 実験結果 [2] と良い一致を示している. また, 温度依存性は傾角粒界の場合より小さい.

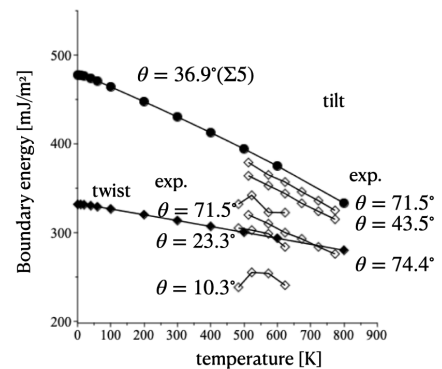


図 1 粒界エネルギーの温度依存性の計算 (twist, tilt) と実験 (exp.) の比較.

[1] S. R. Nishitani, "Finite-temperature first-principles calculations of Al <100> symmetric tilt grain-boundary energy", *Phil. Mag.* (*in press*), <https://doi.org/10.1080/14786435.2020.1855371>.

[2] 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.