

# Al の格子欠陥の有限温度第一原理計算

関西学院大・理工

西谷滋人, 河野大登, 堀川恭平

Temperature dependency of Al boundary energy by first principles calculation

*Dept. of Informatics, Kwansei Gakuin Univ.*

S. R. Nishitani, H. Kono, and K. Horikawa

■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た結果は、図1に示した通り、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]。有限温度の計算は、調和振動子近似である Einstein model による計算と、非調和振動の効果をもonteカルロシミュレーションから求める Frenkel 法を用いている。エネルギーの温度変化は Einstein モデルで求められる結果が支配的で、非調和の効果は小さく、バネ定数の体積変化による温度依存性や、整合界面を作るための刃状転位の free volume が大きく効いていることが判明した。本研究では、この有限温度の第一原理計算手法を他の格子欠陥であるねじり粒界、表面、点欠陥に適用した結果を報告する。

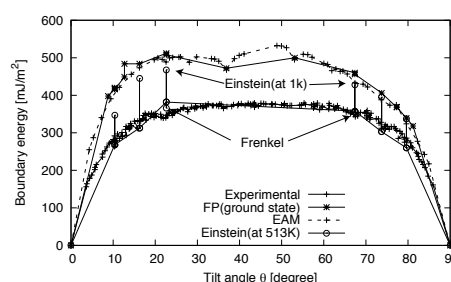


図1 第一原理計算による基底状態、調和振動子近似、非調和振動シミュレーションでの Al 粒界エネルギー。

■手法 有限温度の自由エネルギー計算手順は次のとおりである、

1. 完全結晶から、平衡温度での体積膨張を求める。
2. 欠陥構造モデルの各体積での緩和配置を求める。
3. 各サイトを微小移動させてエネルギー変化を求め、Einstein モデルに適用するバネ定数を決定する。
4. 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。
5. Monte Carlo シミュレーションから非調和振動自由エネルギーを求める。

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 ねじり粒界に適用したところ、ほとんど温度依存性を示さない結果が得られた。これは、欠陥近傍の原子環境が完全結晶とあまり変わらず、温度変化がほとんど同じであるためである。一方、表面エネルギーはこの手順では計算が困難であることが判明した。これは、表面では原子の拘束が無く、温度変化に伴う体積膨張が再現できないためである。従って、粒界計算で見られた熱膨張に伴うバネ定数の顕著な低下が再現できていない。Frenkel 法による非調和の影響を現在見積もっている。発表では、さらに単一空孔に適用した結果も報告する予定である。

[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 <100> symmetric tilt grain-boundary energy", *Phil. Mag.* (in press), <https://doi.org/10.1080/14786435.2020.1855371>.