

Al<100> 小傾角ねじり粒界の有限温度第一原理計算

関西学院大・工
堀川恭平, 西谷滋人

Finite temperature first principles calculation of Al <100> on small twist boundary

School of Engineering, Kwansei Gakuin Univ.

K. Horikawa, S. R. Nishitani

■背景 西谷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を, 図 1 に示した Al<100> 対称ねじり粒界を対象に検討した.

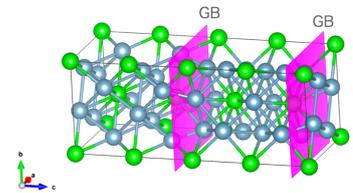


図 1 対称ねじり粒界の 3x3 モデル ($\theta = 36.87^\circ$).

■手法 有限温度の自由エネルギーは以下の手順で進める.

1. いくつかの格子定数 (a) で最安定構造を求める.
2. サイト (i) ごとに位置を少しずつ (δj) 第一原理計算を行い, バネ定数をフィッティングで求める.
3. 求めたバネ定数 k_{ij} から, 振動数 $\nu_{ij} = 1/2\sqrt{k_{ij}/m}$ を求め,
4. さらに, Einstein 温度と呼ばれるパラメータ $\Theta_{ij} = h\nu_{ij}/k_B$ を求める.

Θ_{ij} を用いて, 自由エネルギー F_i は,

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

で求められる [2]. ここで, m , h , k_B , $E_i^0(a)$ は, それぞれ, 原子の質量, プランク定数, ボルツマン定数, その体積での基底状態の欠陥エネルギーである. また, 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 のねじり粒界に Einstein モデルを適用したところ, 有限温度での粒界エネルギーの計算結果は, 図 2 のように実験結果 [1] の温度依存性と良い一致を示した. 図 3 に示した 513K での粒界エネルギーの実験結果に対する傾角依存性と 500K の計算結果は, 全ての角度で近い値を示している. 発表では, 界面間距離のより大きなモデルについて報告する.

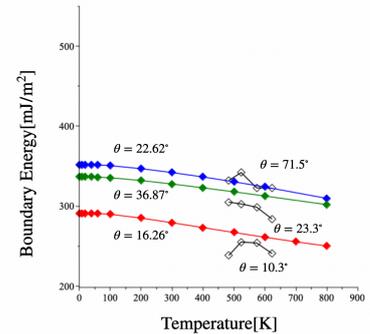


図 2 粒界エネルギーの温度依存性の計算と実験の比較.

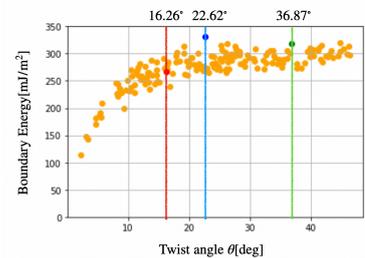


図 3 粒界エネルギーの傾角依存性の計算と実験の比較.

[1] 大槻, 「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.118,238.
[2] S. R. Nishitani, "Finite-temperature first-principles calculations of Al <100> symmetric tilt grain-boundary energy", Phil. Mag., **101**, (2021), 622-642.