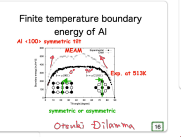


Where is the error?

- As 100% symmetric tilt boundary energy with VASP
- Small model
- OK by Buehler method
- Ground state calc. is still wrong
- Einstein model
- consistent with Experimental results
- Frenkel method
- small effect of anharmonicity

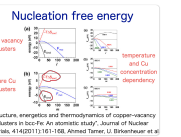
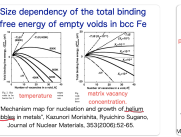
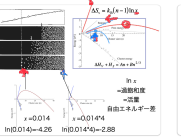
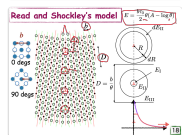
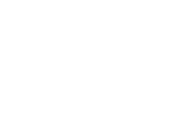
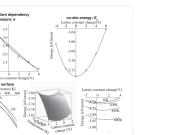
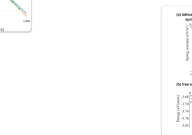
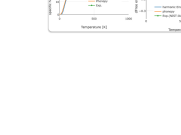
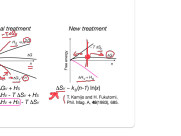
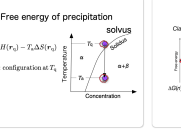
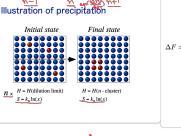
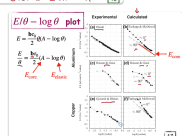
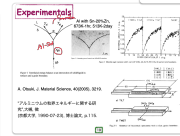
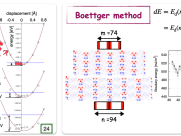
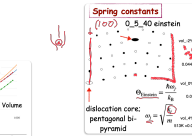
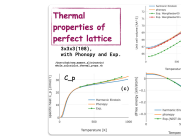
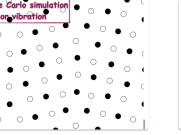
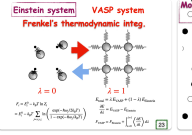
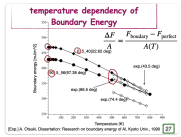
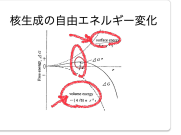
Where is wrong?

- Reason of failure on boundary energies
- Global relaxation?
- Too small model?
- Fluctuation?
- Temperature effect?
- VASP calc with small models
- is not AI-CVD symmetric tilt
- finite temp. (not phonon)



転位

- 転位線の形成エネルギーを計算することが重要である (理論的)
- 2D 転位線の形成エネルギーを計算することが重要である (実験的)
- 転位線の形成エネルギーを計算することが重要である (理論的)
- 転位線の形成エネルギーを計算することが重要である (実験的)
- 転位線の形成エネルギーを計算することが重要である (理論的)
- 転位線の形成エネルギーを計算することが重要である (実験的)



21世紀の格子欠陥研究に挑まれた課題
2003から20年
— 20 years since the "problems of defects physics" —
藤田 浩一, 藤田 浩一

転位

- 転位線の形成エネルギーを計算することが重要である (理論的)
- 2D 転位線の形成エネルギーを計算することが重要である (実験的)
- 転位線の形成エネルギーを計算することが重要である (理論的)
- 転位線の形成エネルギーを計算することが重要である (実験的)
- 転位線の形成エネルギーを計算することが重要である (理論的)
- 転位線の形成エネルギーを計算することが重要である (実験的)

核生成/点欠陥

- 核生成の自由エネルギーを計算することが重要である (理論的)
- 核生成の自由エネルギーを計算することが重要である (実験的)
- 核生成の自由エネルギーを計算することが重要である (理論的)
- 核生成の自由エネルギーを計算することが重要である (実験的)
- 核生成の自由エネルギーを計算することが重要である (理論的)
- 核生成の自由エネルギーを計算することが重要である (実験的)

Myoshi, H., Shinbata, H., Shi, A. et al. Computing nucleation of single and double-edge dislocation prisms in $\text{Al}_2\text{Cu}_3\text{Mg}_2$. Sci Rep 11, 4503 (2021). <https://doi.org/10.1038/s41598-021-83900-8>