

# アルミニウム粒界エネルギー計算から見た転位モデルの問題点

関西学院大・理工  
西谷 滋人

Defect on dislocation model seeing from aluminum boundary energy calculations

*Dept. of Informatics, Kwansei Gakuin Univ.*

S. R. Nishitani

■背景 小角粒界のエネルギーを説明する最も広く受け入れられているモデルは、Read-Shockley の転位モデルである [1]。このモデルの定量的な見積もりとして、fcc  $\langle 100 \rangle$  傾角粒界においてはバーガースベクトル ( $b$ ) の大きさの違いから、角度依存性が非対称になる。実際に、EAM ポテンシャルや第一原理計算で求められる基底状態の粒界エネルギーは、図 1 の通り、非対称性を再現している。

ところが、実験で計測された粒界エネルギーにはそのような非対称性は認められない [2]。著者らは最近、Einstein モデルを用いた有限温度第一原理計算手法を開発し、Al $\langle 100 \rangle$  対称傾角粒界に適応したところ、実験を再現する結果を得た [3]。本発表では、理論予測のどこに問題があるかを検討する。

■手法と結果 全てのエネルギー計算を第一原理計算法 VASP を用いて求めた。平衡位置から少し原子を偏位させて、フィッティングによりバネ定数を求め、Einstein の式を用いて、各体積での自由エネルギーを求めた。実験値が求められた 513K での粒界エネルギーが図 1 の Einstein(513K) で、実験結果 (Experimental) の誤差範囲内に収まっている。さらに、非調和性を計算する Frenkel 法の結果は、その影響が小さいことを示している。

■結論 理論と実験の齟齬は、単純には、絶対零度か有限温度かの違いである。得られた計算結果から、「転位芯エネルギーが支配的」と考えるのが妥当であろう。これはマイクロメカニクスにおける Eigen 歪、つまり「欠陥により生成したエネルギーの緩和した名残」が周囲の弾性場と考える描像と一致する。結論に至った過程は、講演で詳しく議論する予定である。

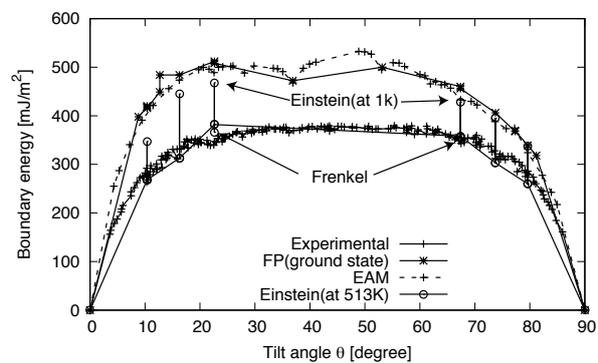


図 1 第一原理計算による基底状態、調和振動子近似、非調和振動シミュレーションでの Al 粒界エネルギー。

[1] W. Shockley and W.T. Read, *Quantitative predictions from dislocation models of crystal grain boundaries*, Phys. Rev. 75 (1949), p. 692.

[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.

[3] S. R. Nishitani, *Finite-temperature first-principles calculations of Al  $\langle 100 \rangle$  symmetric tilt grain-boundary energy*, Phil. Mag. 101(2021), 622, <https://doi.org/10.1080/14786435.2020.1855371>.