

# Al および Si のねじり粒界エネルギー

関西学院大・理工  
西谷 滋人

## Twist grain boundary energy of Aluminum and Silicon

Dept. of Informatics, Kwansei Gakuin Univ.

S. R. Nishitani

■背景 Read-Shockley の転位モデルは粒界エネルギーの低角での振る舞いを説明する最も広く受け入れられているモデルである [1]. しかし, 高角粒界エネルギーを統一的に理解するモデルは確立していない. また, 有限温度効果 [2] や, 粒界で考慮すべき自由度の多さから, 第一原理計算からの予測も実験値と一致していない. 我々は, Al の (111), (001), (011) 対称ねじり粒界に対して, 考えられるエネルギー緩和過程を網羅的に調べた. それらの結果から, 理想的なアーチ状のエネルギー曲線が崩壊 (Collapse) しているととらえるモデルを得た.

■手法 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. 考えられる緩和過程として, 粒界の並進移動, 削除の影響を調べた. 個別原子の構造緩和は, VASP に実装されているコードを用いた. CSL(coincident site lattice) モデルに基づいて, 出来るだけ小さいサイズの格子モデルを用意する. 原子の内部緩和を行わずに, 粒界を挟んだ上下の完全結晶部を面方向の並行移動と鉛直方向にブロックごと動かして得られるエネルギーを unrelaxed とする. さらに上下の結晶内の個々の原子緩和を認めたエネルギーを relaxed とする. さらに, 粒界に存在する原子の削除操作の影響を (011) $\Sigma 3 = 70.53^\circ$  粒界において調べた.

■結果 (011) 方位で得られた結果 (unrelaxed, relaxed) と実験結果 [3] を図 1 に示した. relaxed でも計算値と実験値には大きな差が存在する. 粒界原子の削除操作によってこの差はなくなり, ほぼ実験結果と一致する. 注目すべきは, unrelaxed の計算値が, Read-Shockley プロットの低角度領域 ( $\log \theta = -3 \sim -2$ ,  $\theta = 2.85 \sim 7.75^\circ$ ) の実験値と直線で結べることである. これは, 低角では unrelax 状態に近い構造が実現していることを示唆している. 一方で, 高角の現実の構造は, この理想的な界面が崩れて (collapse) エネルギーが低下していると解釈できる. より稠密で面間隔が広がる (111), (001) 面ではエネルギー値の低下は小さい. これを粒界の Collapse モデルと称している. 同様の計算結果を Si についても実行し, その結果も併せて報告する.

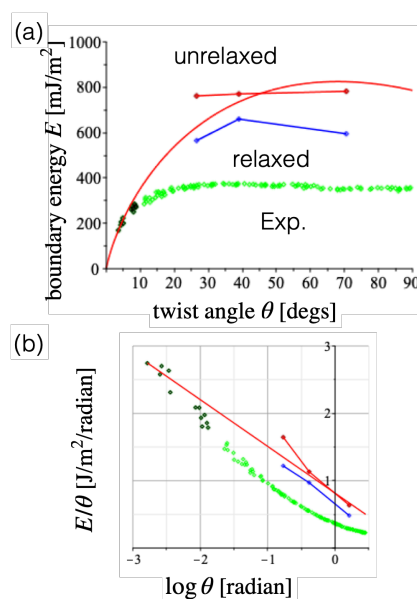


図 1 Al(011) ねじり粒界エネルギーの (a)  $\theta - E$ , (b) Read-Shockley ( $\log \theta - E/\theta$ ) プロット.

- [1] W. Shockley and W.T. Read, *Quantitative predictions from dislocation models of crystal grain boundaries*, Phys. Rev. 75 (1949), p. 692.
- [2] S. R. Nishitani, *Finite-temperature first-principles calculations of Al (100) symmetric tilt grain-boundary energy*, Phil. Mag. 101(2021), 622, <https://doi.org/10.1080/14786435.2020.1855371>.
- [3] 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), pp.99-120.