

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, Kansai Gakuin Univ.
S. R. Nishitani

- Read-Shockley model
- CSL, slab vs relax
- shift and delete operations
- collapse plots(z-position, $E - \theta$, R-S)

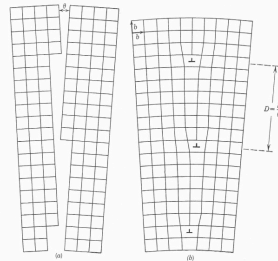
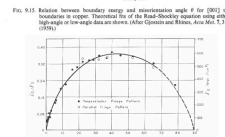
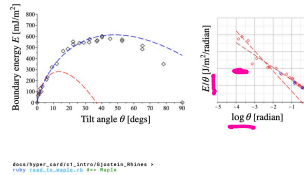
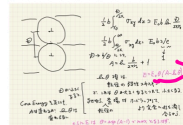
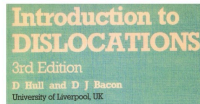


FIG. 1. Simple grain boundary showing (a) two grains with common crystal axes and (b) method of joining and dislocation model.

"Dislocation Models of Grain Boundaries", W. T. Read Jr., and W. Shockley, "Imperfection in nearly perfect crystals", ed. by W. Shockley, chap.13, (Wiley)



"Absolute interfacial energies of [001] tilt and twist grain boundaries in copper."
N.A. Giometis and F.N. Rhines, Acta Metallurgica, Vol. 7, May 1959, 319.
Fig.4. Dependences of grain boundary energy on misorientation for [001] tilt boundaries at 1065°C. Solid line represents the curve calculated from equation (1), using the large angle parameters.

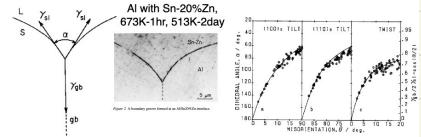


Figure 7. Interfacial energy balance at an intersection of solid/solid interface and a grain boundary.

A. Otsuki, J. Material Science, 40(2005), 3219.

*アルミニウムの粒界エネルギーに関する研究*大槻 徹
(京都大学, 1990-07-23), 博士論文, p.115.

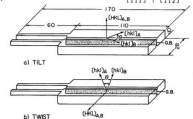
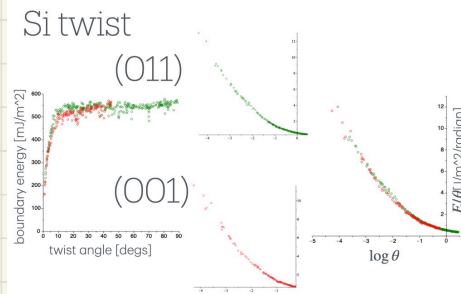
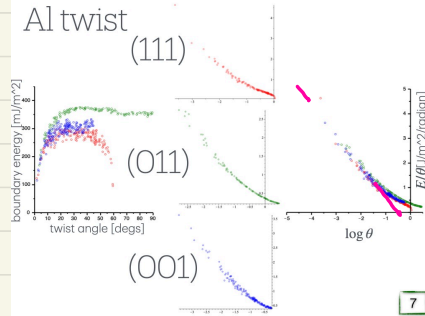
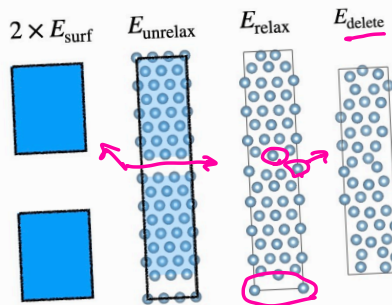


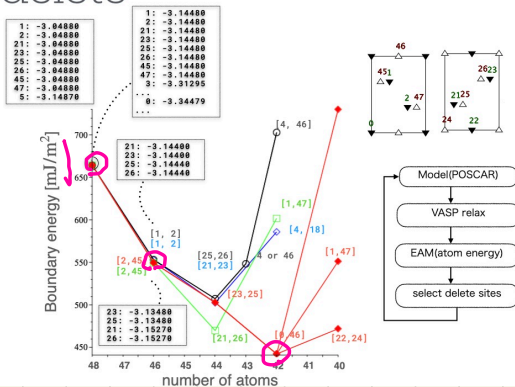
Fig.2-1. Geometry of bicrystals specimens with a flat grain boundary.



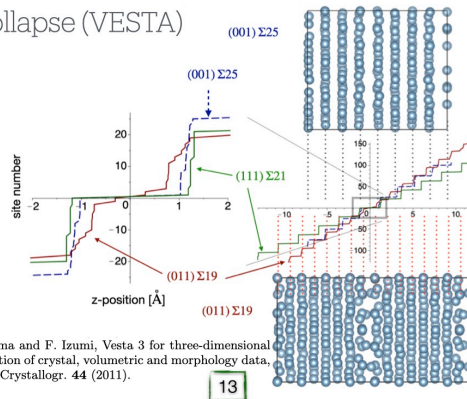
Models(CSL, unreal vs relax)



delete

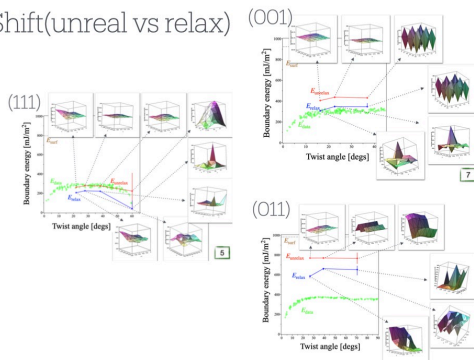


collapse (VESTA)

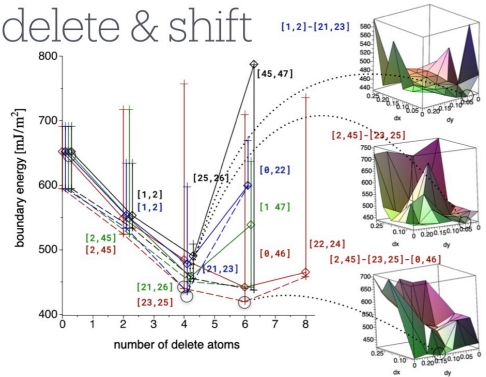


K. Momma and F. Izumi, Vesta 3 for three-dimensional visualization of crystal, volumetric and morphology data, J. Appl. Crystallogr. **44** (2011).

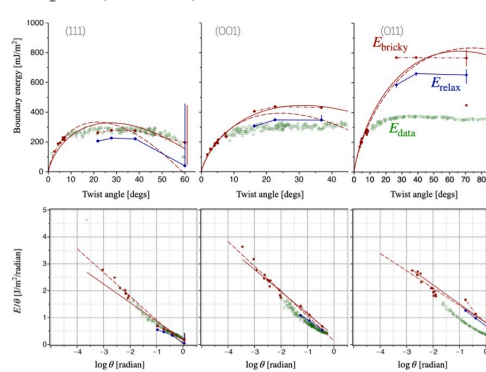
Shift(unreal vs relax)



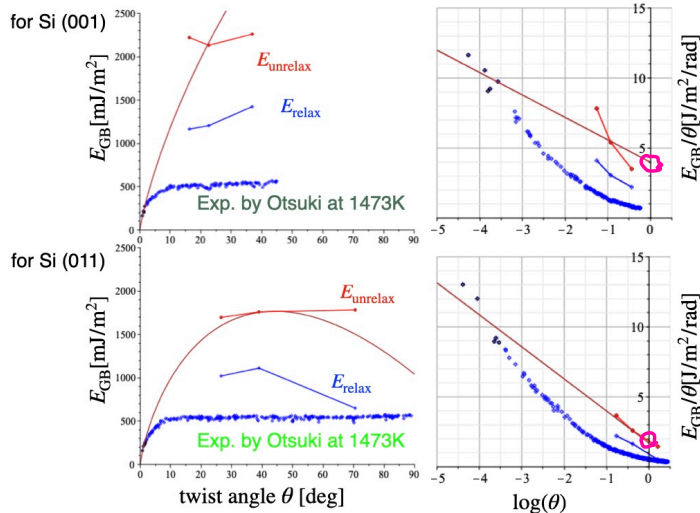
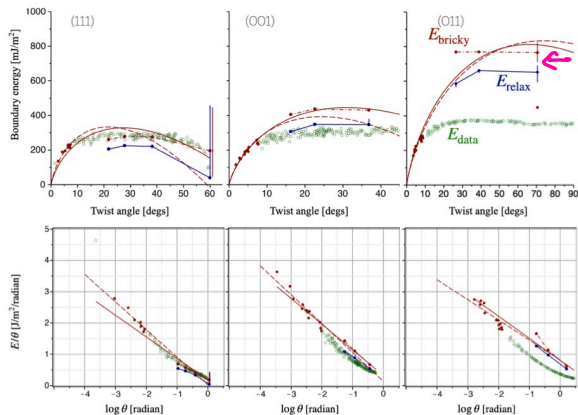
delete & shift



collapse (e-t, R-S)



collapse (e-t, R-S)



REGULAR PAPER · OPEN ACCESS

Thermally activated plastic deformation of Si single crystals at temperatures above 1173 K

To cite this article: Tubasa Suzuki et al 2023 *Jpn. J. Appl. Phys.* 62 021001

View the [article online](#) for updates and enhancements.

You may also like

- Influence of rafted microstructures on creep in Ni-base single crystal superalloys: a 3D discrete dislocation dynamics study
Siwen Gao, Muhammad Adil Ali and Alexander Hartmaier
- Role of diffusing interstitials on dislocation glide in refractory body centered cubic metals
Lauren T W Fey, Abigail Hunter and Irene J Beyerlein
- Crystal plasticity modeling of non-Schmid yield behavior: from Ni₃Al single crystals to Ni-based superalloys
Devraj Ranjan, Sankar Narayanan, Kai Kadau et al.

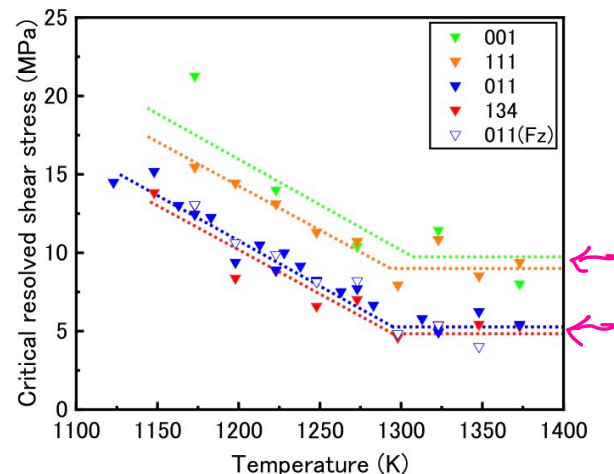


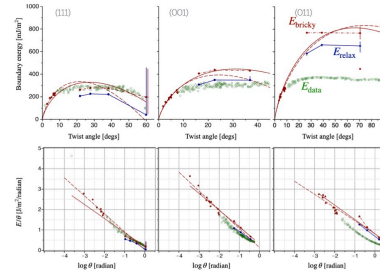
Fig. 3. (Color online) Relationship between the CRSS obtained from lower yield point and temperature. Filled plots indicate Cz, while unfilled plots indicate Fz results.

Al および Si のねじり粒界エネルギー

2024/9/17

- Al twist GB
- (111), (001) relax, (011) need delete
- Collapse(POSCAR, Energy)
- collapse plots(z-position, $E - \theta$, R-S)
- Read-Shockley plot
- Dislocation theory

collapse (e-t, R-S)



$$\gamma_g = \frac{h}{a}$$

である。

原子構造まで考慮に入れたもっとも信頼できる計算は、結晶中の転位の運動に対する弾性力の計算とすることで述べられる。ここでは連続体近似を用いた上の計算結果を実験値と比較してみよう。あとで結晶境界エネルギーの計算の項に述べように、結晶境界エネルギーと両側の結晶のなす角の関係から、転位の芯のエネルギーを求めることができる。そのようにして求められた μb の値を第19.4表に示す。この数から $\mu b \sin \theta$ になるという

第18.4表 転位の芯のエネルギー

物質	転位線	バーガス・ベクトル	$\frac{4\pi(1-\nu)}{25} E(b_0)$	$\frac{h}{b}$
Sn	[001]	$a[100]$	1.3	1.3
Fe-Si	[110]	$\frac{a}{2}[111]$	2.4	3.6
	[100]	$a[001]$	2.3	3.3
Pb	[100]	$\frac{a}{2}[011]$	2.3	3.3
Ag	[100]	$\frac{a}{2}[011]$	2.6	4.7

上の計算結果は Sn の場合を除くかなりよく一致することが知られる。さらに、 γ_g として 10^{-4} m 程度の値を仮定すると、 γ_g が2倍になっても、転位のエネルギーは10%以下しか変化しないから、上のような連続体としての近似によっても、転位のエネルギーはかなりの正確さで計算されることが出来る。

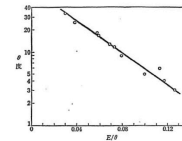
以上の計算から知られることは、転位のエネルギーの大部分は弾性的な歪とみなされる弾性エネルギーとしてたくわえられており、芯のエネルギーは小部分にすぎない。また転位のエネルギーは μb^2 に比例するが、これは異なったバーガス・ベクトルをもつ転位のエネルギーと比較する

77

「転位論入門」鈴木秀次,
(1967 アグネ), p.77

- 結晶粒界エネルギーと両側の結晶のなす角の関係から、転位の芯のエネルギーを求めることができる。
- 転位のエネルギーの大部分は弾性的な歪みとみなされる領域の弾性エネルギーとしてたくわえられており、
- 転位のエネルギーは μb^2 に比例する

19



第22a図 Pbの結晶境界エネルギー (Aust と Chalmers はより)。

「転位論入門」鈴木秀次,
(1967 アグネ), pp.350-351.

結晶境界エネルギーの測定値が、転位模型から計算した値と、以上のように一致することは、転位論の発展の初期にすでに明らかにされたことであり、その当時から転位論の正しいことを示すもっとも重要な証拠の一つとみなされている。

20