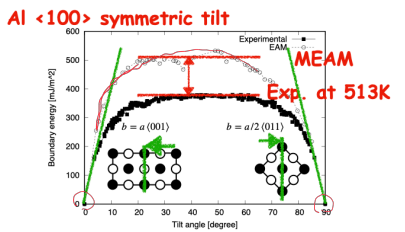


粒界エネルギーの大槻シレンマ： 転位論モデルのどこがおかしいか？

学振第172状態図委員会
2023/5/26 東京/zoom



symmetric or asymmetric
関西学院大学・理工学部・西谷滋人, 堀川恭平
京都大・エネ科・大槻徹

1

「転位入門」鈴木秀次 (1967 アプネ, p.77)

結晶	転位	転位の長さ	転位のエネルギー
Al	1/2[110]	0.15	0.15
Al	1/2[110]	0.15	0.15
Al	1/2[110]	0.15	0.15
Al	1/2[110]	0.15	0.15
Al	1/2[110]	0.15	0.15

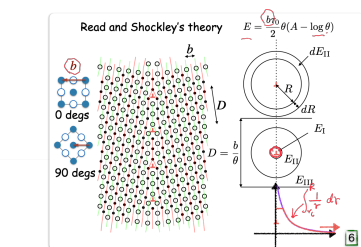
結晶粒界エネルギーと相角の結晶のなす角の関係から、転位のエネルギーを一考することができる。転位のエネルギーの本質は幾何学的な変形とみなされる領域の弾性エネルギー E_{el} としてとらえられ、転位のエネルギー E_{core} に比較する。

鈴木秀次先生の記述

「転位入門」鈴木秀次 (1967 アプネ, pp.350-351)

結晶粒界エネルギーの測定値が、転位模型から計算した値と、以上のよくなるべく一致するといふことは、転位の弾性エネルギーが十分に明らかになったことであり、その当時から転位の正しいことを示すことも重要な証拠の一つとみなされている。

3



Read - Shockley model

$E/\theta - \log \theta$ plot

$$E = \frac{b^2}{2} (A - \log \theta)$$

Experimental and Calculated results for Aluminum and Copper.

7



Al with $(\bar{2}0\bar{2})$ 673K-1hr, 513K-2day

A. Otsuka, 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, 1990-07-23), 博士論文, p.115.

8

Atomistic models

pentagonal bi-pyramid

tilt 0deg tilt 90deg

Where is wrong?

- エネルギー不一致の原因
- 大局的な緩和が不十分?
- モデルが小さい?
- 経験ポテンシャルがおかしい?
- 温度の効果
- 細節
 - vs EAM, 第一原理計算 -> 転位芯の振動空間
 - vs 理論 -> 転位芯のエネルギーが支配的
 - マイクロメカニクス(Eigen値)的な描像
 - 反論
 - 粒界の特殊性
 - 遮蔽効果による短距離の閉じ込め

24

Where is wrong?

- エネルギー不一致の原因
- 大局的な緩和が不十分?
- モデルが小さい?
- 経験ポテンシャルがおかしい?
- 温度の効果
- 小さいモデルで第一原理計算(VASP)
- Al<100> 対称傾角粒界
- 有限温度 (not phonon)

10

Boettger method

$$dE = E_d(n) - nE_0 = E_d(n) - \frac{E_d(n) - E_d(m)}{n - m}$$

11

Finite Temperature, Einstein - MC, harmonic - anharmonic

Thermal expansion, Free Energy, Specific Heat

Thermal properties of perfect $3 \times 3 \times 3$ (188), with Phonony and Exp.

13

0.5_40 einstein

displacement [Å]

energy [eV]

$\omega_{Einstein} = \frac{\hbar \omega}{k_B}$

$\omega = \sqrt{\frac{k_B}{m}}$