

Al<100> ねじり粒界エネルギーの非調和振動の影響

関西学院大・理工

堀川恭平, 天川純平, 西谷滋人

Anharmonic effects in Al<100> twist grain boundary energy

Dept. of Informatics, Kwansei Gakuin Univ.

K. Horikawa, J. Amakawa, S. R. Nishitani

■背景 西谷らが提案している欠陥エネルギーの有限温度第一原理計算手法を, Al の対称傾角粒界エネルギーに適用した結果は, 液体金属との接触角計測により平衡状態で求められた実験結果 [1] と非常に良い一致を示した [2]. 本研究では, この有限温度の第一原理計算手法を Al のねじり粒界を対象にして検討した.

■手法 有限温度の自由エネルギー計算は

1. 各サイトの緩和位置でのバネ定数からの, Einstein モデルによる調和振動子自由エネルギー計算.
2. Frenkel 法による, 平衡 MC シミュレーションからの熱力学積分による非調和エネルギー計算,
3. 完全結晶との自由エネルギー差から欠陥エネルギーの算出,

という手順で求めている. 第一原理エネルギー計算には平面波基底擬ポテンシャル法で実装された VASP を用いた.

■結果 Al のねじり粒界に Einstein モデルを適用したところ, 有限温度での粒界エネルギーはねじり角

36.87 度の時, 図 1 のように実験結果 [1] と良い一致を示した. Einstein モデルでは, 各サイトのバネ定数の体積変化から有限温度の自由エネルギーが求められる. 完全結晶 (perfect) とねじり粒界モデルの, 513K の体積に対応する 1.3% 膨張時の各サイトでのバネ定数をプロットすると図 2 のようになった. 3×3 モデルでは完全結晶のバネ定数とほぼ一致しており, 温度変化が小さい原因となっている. 発表では, より小さなねじり粒界の結果と Frenkel 法による非調和効果の影響を報告する.

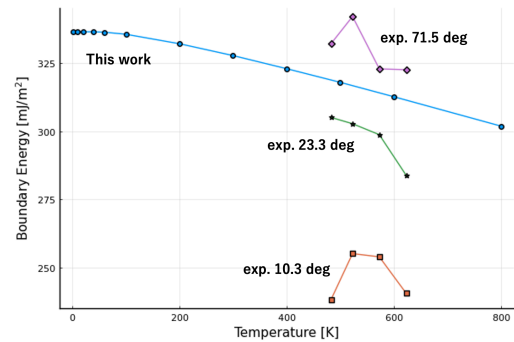


図 1 Al ねじり粒界エネルギーの温度変化.

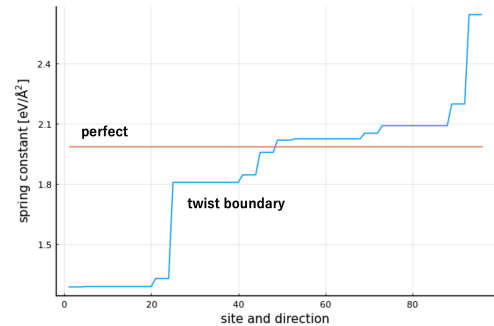


図 2 Einstein 計算に用いたバネ定数の分布.

[1] 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.238.

[2] S. R. Nishitani, “Finite-temperature first-principles calculations of Al <100> symmetric tilt grain-boundary energy”, Phil. Mag., **101**, (2021), 622-642.