

卒業論文

Cuの粒界エネルギーの第一原理計算

関西学院大学理工学部

情報科学科 西谷研究室

27014520 山田 智子

2019年3月

概要

小傾角粒界エネルギーは、Read-Shockley の式により求まるとされている。経験的ポテンシャル (EAM) を用いた粒界エネルギーの角度依存性の計算結果は、その予測どおりに、回転角 0° および 90° 近傍の立ち上がり角に違いが見られる。しかし、測定された実験結果にはそのような違いはなく、 0° および 90° 近傍ともに同じ立ち上がり角である。第一原理計算を用いた、より信頼性の高い計算でも、EAM に近い結果が得られている。

以上の計算および実験結果は、Al での研究である。本研究は、Al と同じ fcc 構造をもつ Cu を対象に、小傾角粒界エネルギーの第一原理計算を行い、EAM による計算結果と実験結果との違いの原因を解明することを目的としている。

第一原理計算には、VASP を用いた。KPOINT は、粒界モデルの大きさが粒界傾角によりそれぞれ異なるため、VASP が用意している自動計算を用いた。昨年藤村の研究では、length=50 で計算していたが本研究では、length=100、ISMEAR=-5 の高精度計算を行い、length の数や精度の違いによる比較を行なった。また、回転角 0° だけでなく 90° の計算も行なった。

その結果、第一原理計算による結果は、EAM による計算に近い結果となった。

目次

第1章	はじめに	3
第2章	背景と手法	5
2.1	粒界エネルギー	5
2.2	Read-Shockley	6
2.3	立ち上がり角	8
2.4	第一原理計算	9
2.5	完全結晶のエネルギー値	10
2.5.1	cubic の場合	10
2.5.2	slab の場合	11
第3章	結果と考察	12
3.1	KPOINTS ファイルの検証	12
3.2	完全結晶のエネルギー値	13
3.2.1	cubic の場合	13
3.2.2	slab の場合	15
3.3	外部緩和	16
3.4	エネルギーの最安定値	16
3.5	0° 近傍の粒界エネルギー	17
3.5.1	回転角 $36.87^\circ(\arctan(1/3))$	17
3.5.2	回転角 $22.62^\circ(\arctan(1/5))$	18
3.6	90° 近傍の粒界エネルギー	19
3.6.1	回転角 $53.14^\circ(\arctan(1/3))$	19
第4章	おわりに	21

付録 A POSCAR とモデルの掲載	23
A.1 回転角 $36.87^\circ(\arctan(1/3))$	23
A.1.1 原子数 16	23
A.2 回転角 $22.62^\circ(\arctan(1/5))$	24
A.2.1 原子数 46	24
A.3 回転角 $53.13^\circ(\arctan(1/3))$	25
A.3.1 原子数 32	25

第1章 はじめに

小傾角粒界エネルギーは Read-Shockley の転位模型で理論的に説明されている [1]. その予測通り, Al[100] 方位の対称傾角粒界エネルギーは, 経験的ポテンシャル (EAM) の計算 (図 1.1: 青点線) では, 0 度および 90 度近傍における立ち上がり角に違いが見られる [2]. 第一原理計算を用いたより信頼性の高い計算 (図 1.1: 赤破線) でも, EAM に近い結果が得られている [3]. しかし, 測定された実験結果 (図 1.1: 緑実線) にはそのような立ち上がり角の違いは見られない [4]. Al と同じ fcc 構造を示す Cu においても, 図 1.2 に示した通り, このような実験 [6] と計算 [2] の齟齬が見られる.

昨年度, 藤村が fcc 構造を示す Cu を対象に小傾角粒界エネルギーの第一原理計算を行った. しかし, 90 度側の計算は行っていない. 加えて, より高精度な第一原理計算が行えることが判明した. そのため, 本研究では Cu を対象に 0 度および 90 度の粒界エネルギーの高精度な第一原理計算を行う.

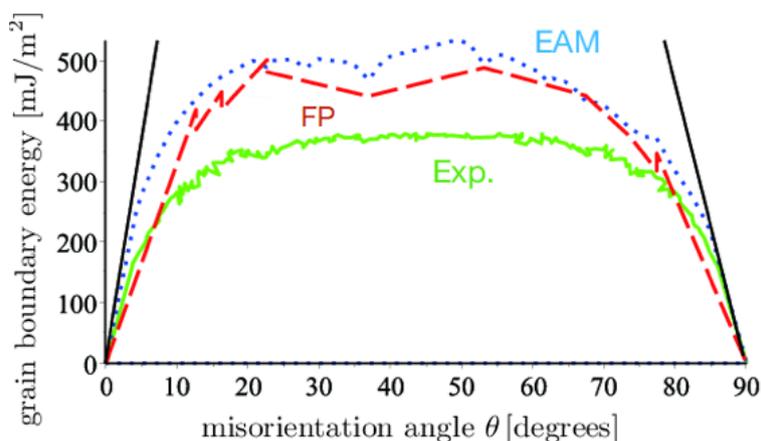


図 1.1: Al[100] 方位の対称傾角粒界エネルギー, EAM の計算結果 (青点線), 実測値 (緑実線), および第一原理 (FP) 計算値 (赤破線). 0 度, 90 度近傍の黒実線は EAM の立ち上がり角を示す.

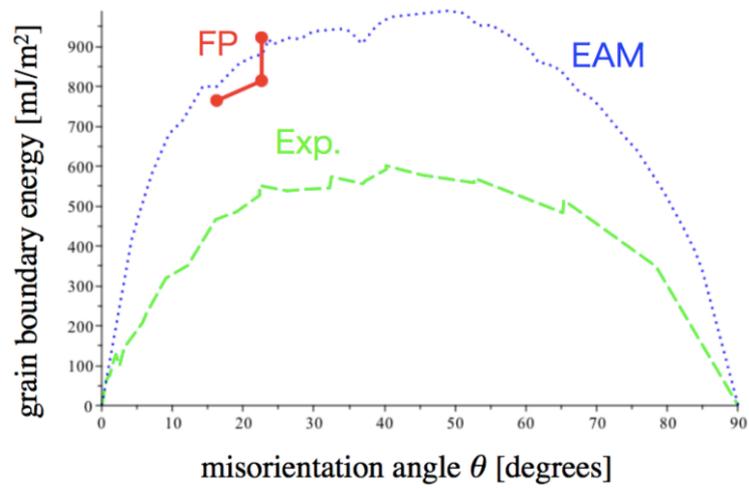


図 1.2: 藤村の Cu[100] 方位の対称傾角粒界エネルギーの第一原理 (赤実線)[9] と, EAM による計算結果 (青点線)[2] および, 実験結果 (緑破線)[6].

第2章 背景と手法

2.1 粒界エネルギー

物質は、単結晶、多結晶、非晶質に分けられる。多くの物質は多結晶に属しており、それは図 2.1 のように単結晶の粒がランダムに隣接している状態である。その粒には、それぞれ方位がある。方位の異なる粒同士が隣接する境界部分を粒界という。特に、図 2.2 の Read-Shockley モデルが示すような、対称傾角粒界とは、二つの結晶が回転角 θ 度の角度をなして結合しているものであり、粒界部分に赤で示した転位が等間隔 D で並ぶことによって構成される。一般に、格子欠陥の存在する系の方が完全結晶よりもエネルギーが高い状態にある。そのエネルギー値の差を単位面積あたりに換算したものを粒界エネルギーと呼ぶ。

よって、粒界エネルギー E_{boundary} は以下の式

$$E_{\text{boundary}} = \frac{dE}{S} = \frac{E_{\text{defect}} - nE_0}{S}$$

で求められる。ここで、 dE は欠陥が入ることにより上昇するエネルギーを意図しており、欠陥を含んだ系のエネルギー E_{defect} とそこに含まれる原子数 n 分の完全結晶の原子一個あたりのエネルギー E_0 の差によって求める。粒界エネルギーは粒界の単位面積あたりなので面積 S で割っている。

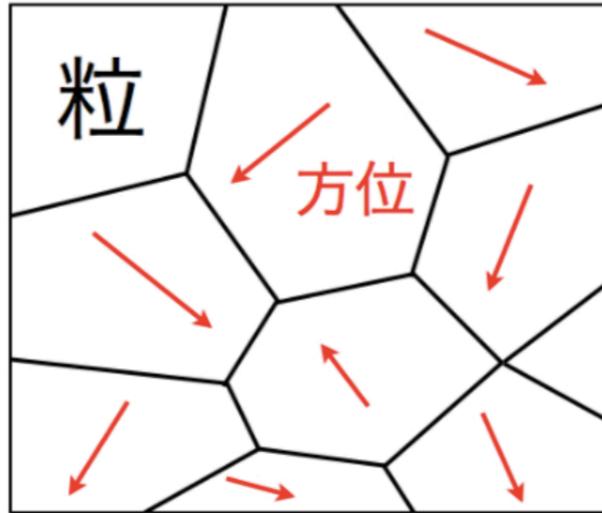


図 2.1: 粒, 粒界, 結晶方位の模式図 [5].

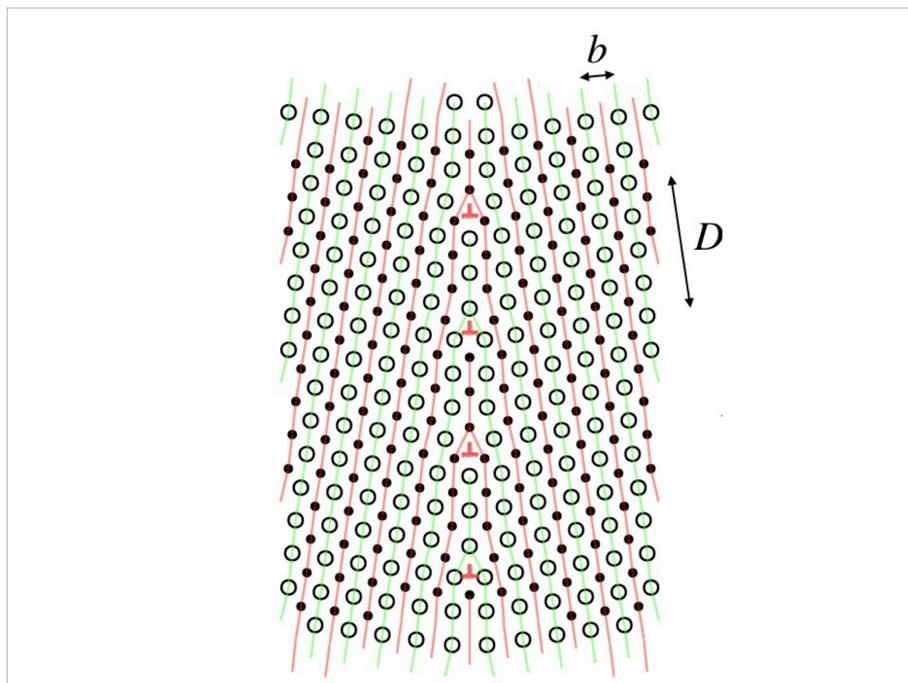


図 2.2: Read-Shockley モデル [1].

2.2 Read-Shockley

粒界エネルギーは, 転位論に基づく Read-Shockley の式で求まるとされてきた [1]. Read-Shockley の式の導出を以下に示す.

図 2.2 の Read-Shockley モデルを用いて、単純な対称傾角粒界を考えたとき、粒界の傾角 θ は、転位間隔 D と転位により歪む長さ、すなわちバーガースベクトル b を用いて

$$\frac{b}{D} = 2 \sin \frac{\theta}{2} \approx \theta$$

となる。転位間隔 D は傾角 θ との間に、

$$-\frac{d\theta}{\theta} = \frac{dD}{D} = \frac{dR}{R}$$

の関係がある。 R は次で考える転位の弾性場の半径である。全系を転位論でよく用いられる領域、すなわち、転位芯 (I)、転位の弾性場 (II)、そのほかの完全結晶部 (III) に分けて考える。それぞれの領域の持つエネルギーを E_I, E_{II}, E_{III} として、 E_I, E_{III} は、変わらないと仮定する。そうすると E_{II} は、刃状転位一本あたりの弾性エネルギー E_{\perp} に等しく、

$$dE_{\perp} = \frac{1}{2} \tau b dR$$

であるが、 τ は spherical cylinder を仮定すると、

$$\tau = \tau_0 \frac{b}{R} + \tau_1 \left(\frac{b}{R} \right)^2 + \dots$$

と考えると、高次項を無視して代入すると

$$dE_{\perp} = \frac{1}{2} \tau_0 b^2 \frac{dR}{R}$$

となる。これに、 $\frac{dR}{R} = -\frac{d\theta}{\theta}$ を代入して積分を取ると、

$$E_{\perp} = \frac{1}{2} \tau_0 b^2 (A - \log \theta)$$

が得られる。界面エネルギー、すなわち単位面積当たりのエネルギー E は、

$$E = \frac{E_{\perp}}{D} = E_{\perp} \frac{\theta}{b}$$

であるため,

$$E = \frac{1}{2}\tau_0 b\theta(A - \log \theta)$$

を最終的に得る. つまり界面エネルギーの角度依存性は転位のバーガースベクトルに直接依存した関数となる.

2.3 立ち上がり角

0°, 90° 近傍の立ち上がり角に違いが出る理由を簡単な式で説明する.

バーガースベクトルの値を

$$b := 1/(\text{sqrt}(2))/1.0;$$

と仮定し, エネルギーを求める式を以下に仮定する.

$$Ene := x \rightarrow 1.0 * x * (1 - \log(x));$$

$$Ene2 := x \rightarrow b * (Pi/2 - x) * (1 - \log(Pi/2 - x));$$

$$Ene3 := x \rightarrow (Pi/2 - x) * (1 - \log(Pi/2 - x));$$

エネルギーを求める式に角度 θ を代入したものを, プロットする.

$$\text{plot}([Ene(\theta), Ene2(\theta)], \theta = 0..Pi/2);$$

$$\text{plot}([Ene(\theta), Ene3(\theta)], \theta = 0..Pi/2);$$

すると, 図 2.3 の黒線の傾きに違いが出る. これが立ち上がり角の違いが出る原因である.

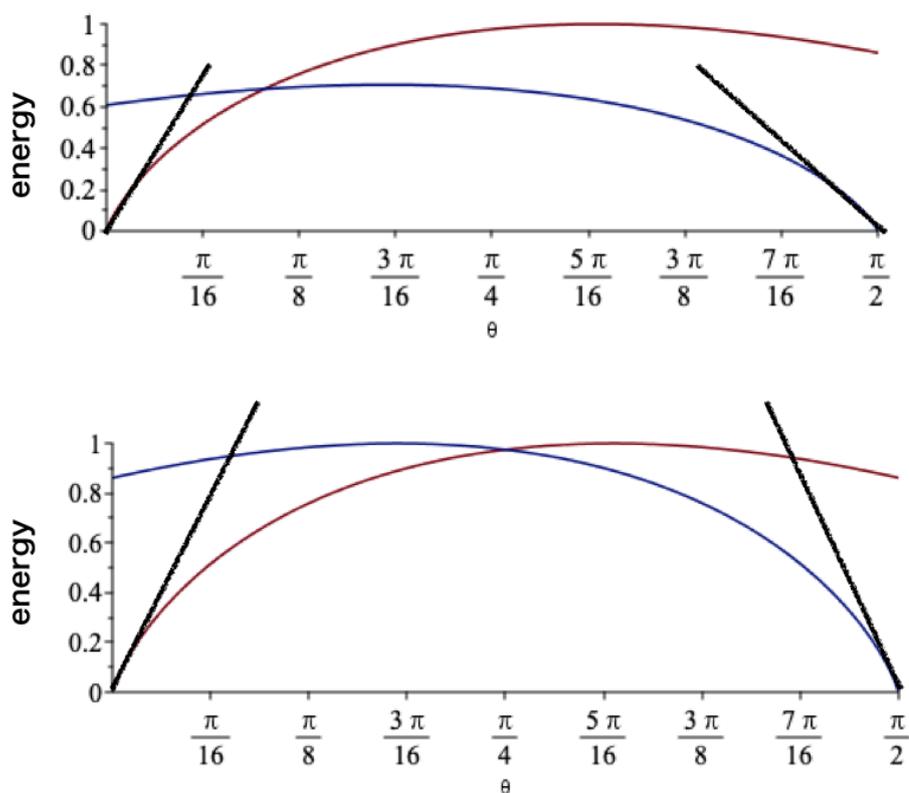


図 2.3: 立ち上がり角の違いを示す. 上のグラフはバーガススペクトルを考慮しており, 下のグラフは, 考慮していない.

2.4 第一原理計算

本研究では, 第一原理計算で粒界エネルギーを求めていく. 第一原理計算とは, 量子力学を支配する方程式である Schrödinger 方程式を精確に解いて原子の種類だけから電子構造を求め, いろいろな物性を予測する計算のことである.

EAM などの経験的ポテンシャルに比べて, 第一原理計算は非常に時間のかかる計算である. 第一原理計算を行うのに様々な手法があるが, ここでは VASP と呼ばれるパッケージを使用する. VASP では平面波基底, 擬ポテンシャルを使用する. 原子核の静電的ポテンシャルは, 全く近似を用いない Full Potential ではなく, 内殻電子を有効的に取り込んだポテンシャル (pseudo potential) を使用している. そのため, Full Potential に比べて計算時間が節約されている.

本研究での計算条件は次の通りである。KPOINTは、粒界モデルの大きさが粒界傾角によりそれぞれ異なるため、VASPが用意している自動生成を用いた。

Cuはd-電子を含むため、length=100で行なう必要がある[7]が、昨年藤村が行なった研究では、Alの初期設定と同じlength=50でしか計算を行なっていなかった。そのため、本研究ではlength=100で計算を行なった。擬ポテンシャルにはPAW_PBEを使用し、エネルギーカットオフは300eVで計算した。構造緩和は共役勾配法による自動(ibrion=2)で、外部形状は手動で緩和させて最安定のエネルギー値を算出した。また、fix計算では、tetrahedron法(ismear=-5)を使用し、高精度計算を行なった。

格子モデルは、対称傾角 $\Sigma 3$ (傾角 $\theta = 36.87^\circ, 53.13^\circ$)、 $\Sigma 5$ (傾角 $\theta = 22.62^\circ$)のslabモデルを作成した。系のサイズは計算時間を考えて、傾角を周期的に取れるできるだけ小さなサイズをとっている。

2.5 完全結晶のエネルギー値

完全結晶の精密なエネルギー値を求めるために、cubicとslabモデルにおいて計算を行なった。

2.5.1 cubicの場合

今までの研究では原子数4のcubicをunit cellで完全結晶のエネルギーを見積もっていた。しかし、パラメータを変えることでエネルギー値が変わるか検証する。

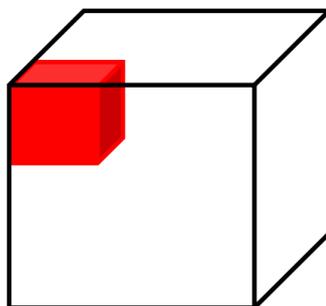


図 2.4: cubic モデル。

2.5.2 slab の場合

今回の計算では、 x 座標と y 座標をそれぞれ等倍に、 z 座標に 1 だけ拡張し、回転角 0° の完全結晶の slab モデルを用いた。slab モデルでは対称性が低いため、 x , y 軸を独立に変化させてエネルギー計算を行なった。

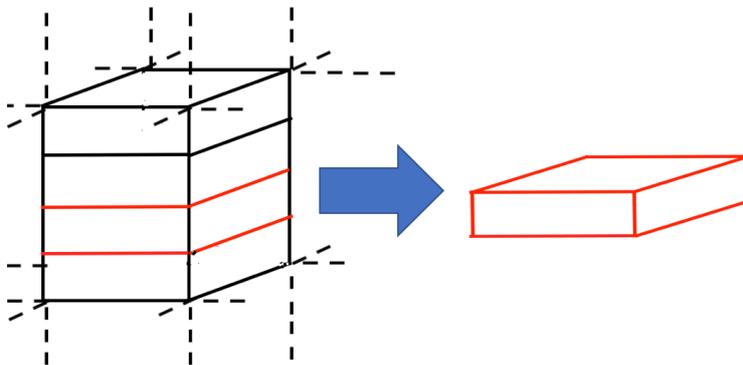


図 2.5: slab モデル。周りの点線は、実線より外側にも原子が続いていることを示している。

第3章 結果と考察

3.1 KPOINTS ファイルの検証

昨年度西谷研究室の藤村が同じ計算を 50 という値で行なったが，同じ fcc 構造を持つ Al とは異なり，Cu は d 電子を持つので値を 100 にして計算を行わなければならない [7]. しかし，k 点数を 50 から 100 に増やすと計算時間が増えるため，計算結果に差異がなければ，50 で計算を行いたい．そこで，50 と 100 で違いが生じるのかを検証した．

ここでは，完全結晶の第一原理計算を行い，状態密度 (Density of States) のグラフを描画した．

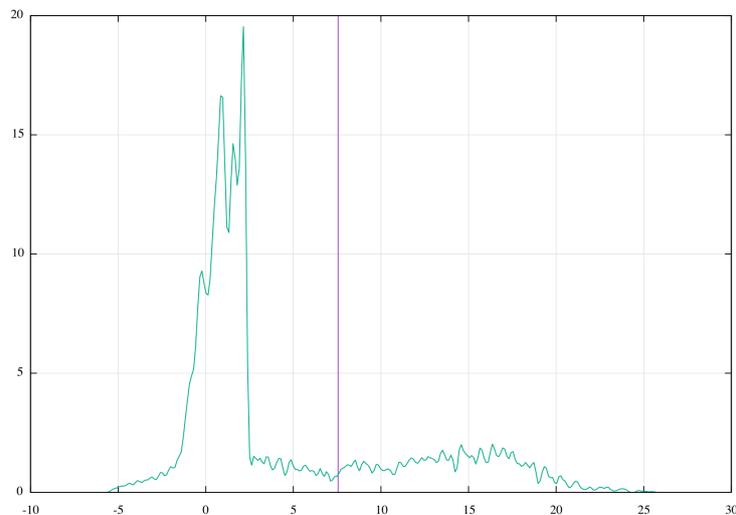


図 3.1: k 点数 50 の cubic モデルの DOS.

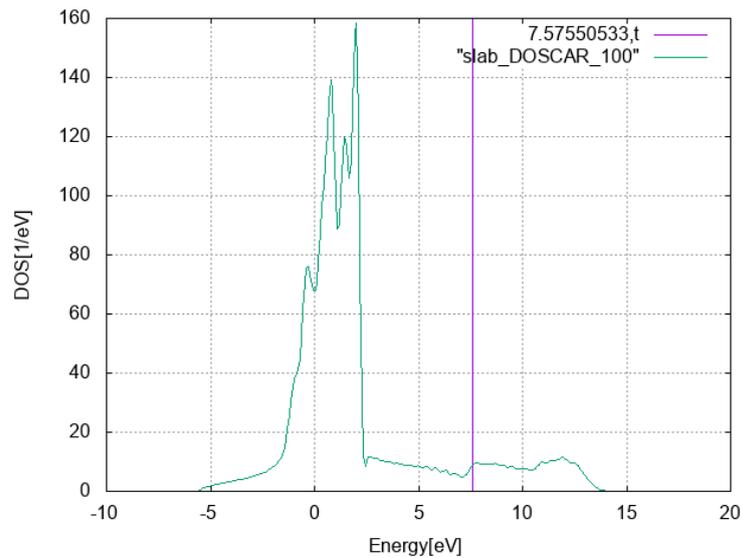


図 3.2: k 点数 100 の slab モデルの DOS.

細かい形状に差は出るものの、大きな差異はないということが判明した。

3.2 完全結晶のエネルギー値

3.2.1 cubic の場合

精確な粒界エネルギーを得るためには、完全結晶の原子一個あたりのエネルギー E_0 が精確な値でなければならない。その完全結晶のエネルギー E_0 の精度を確かめるため、cubic と slab における完全結晶のエネルギーを検証した。また、パラメータの変更を行うとポテンシャルがどのように変化するかを検証するため、cubic において $E - V$ 曲線を描画した。 $E - V$ 曲線とは、体積の倍率を縦軸に、1 原子あたりのエネルギー値を縦軸に表示したものである。

以下の表のパラメータでの系のエネルギーの体積依存性を示す $E - V$ 曲線を図 3.3 に示す。

ここでは、格子定数の倍率が 0.6% のときに最安定値をとる。auto のときの最安定のエネルギー値は -3.72704eV である。一番精度の高い 24-400 の最安定値は -3.71906eV であり、auto との差が約 0.008eV である。

表 3.1: k-point と energy-cutoff のパラメータ表.

k-point	energy-cutoff
auto(14, 14, 14)	300eV
auto_100(28, 28, 28)	300eV
12, 12, 12	350eV
12, 12, 12	400eV
24, 24, 24	350eV
24, 24, 24	400eV

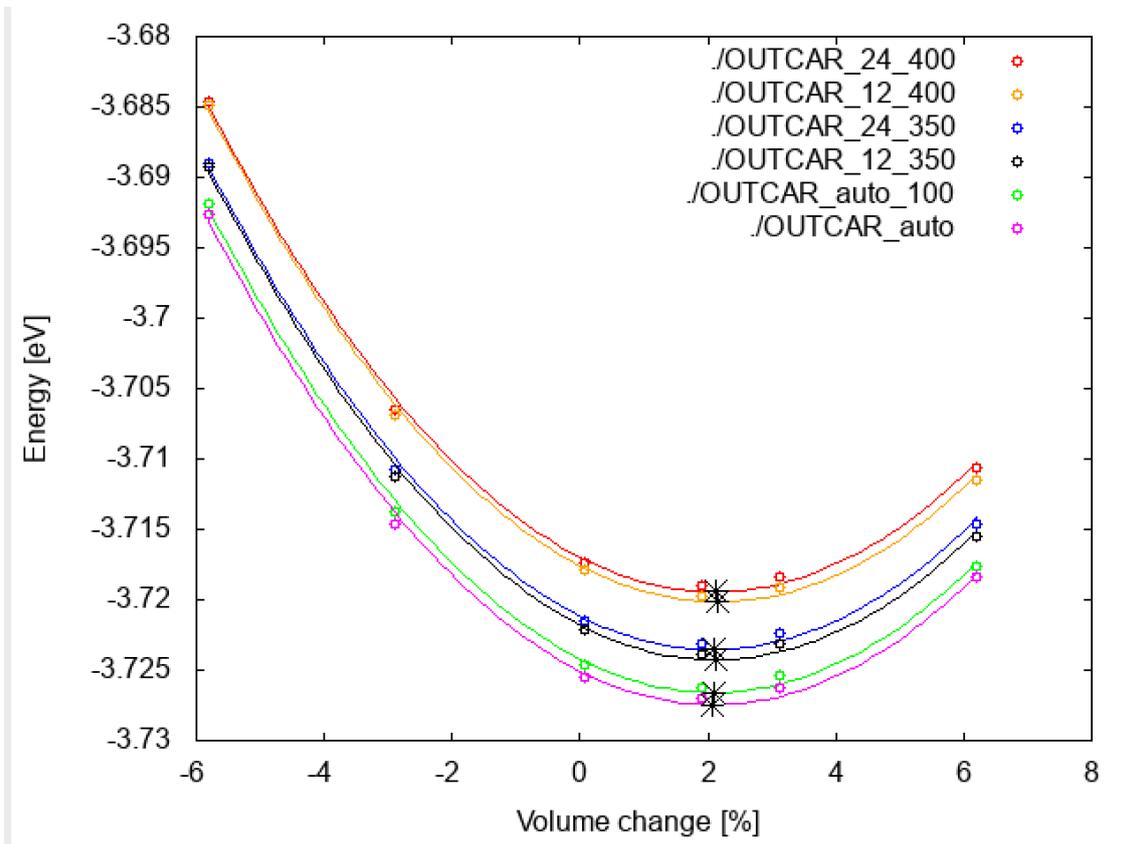


図 3.3: 原子数 4 の cubic unit の $E - V$ 曲線.

3.2.2 slab の場合

k-点数は auto_100, エネルギーカットオフの値は 300eV で計算を行った結果を以下に示す.

ここでは, 計算結果の囲い込み, 0° の計算結果は図 3.4に 90° の計算結果は図 3.5に示す. 0° の場合, ISMEAR=-1 では, x, y の格子定数が $+0.88\%$, $+0.88\%$ の時に最安定値をとっている. このときのエネルギー値は, -3.72621eV である.

ISMEAR=-5 では, x, y の格子定数が $+0.84\%$, $+0.85\%$ の時に最安定値をとり, このときのエネルギー値は, -3.72623eV である.

このときの差は, およそ 0.00002eV である.

length=50, ISMEAR=-5 で計算した場合, x, y の格子定数が $+0.82\%$, $+0.76\%$ の時に最安定値を取り, エネルギー値は, -3.72682eV である. length が 50, 100 での最安定エネルギー値の差は約 0.00059eV である.

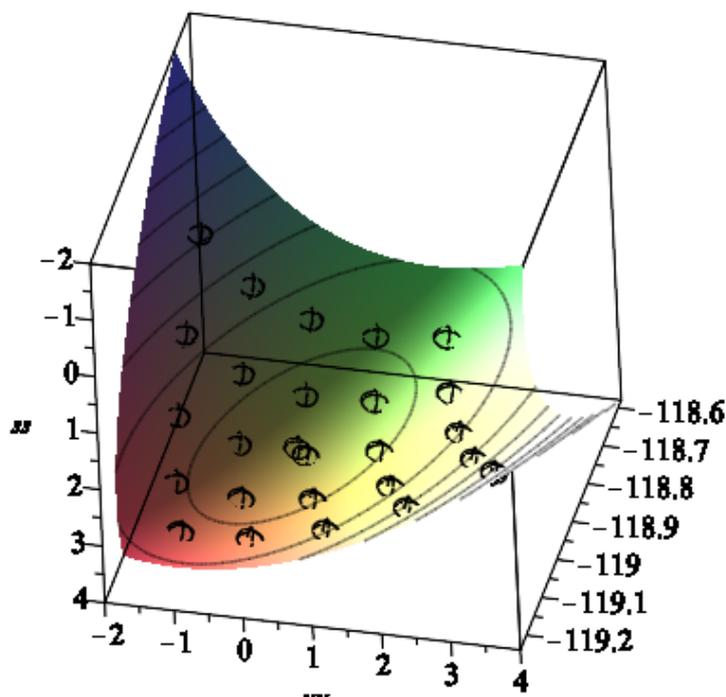


図 3.4: 0° における 2210, 原子数 32 の完全結晶 slab モデルのポテンシャル曲面.

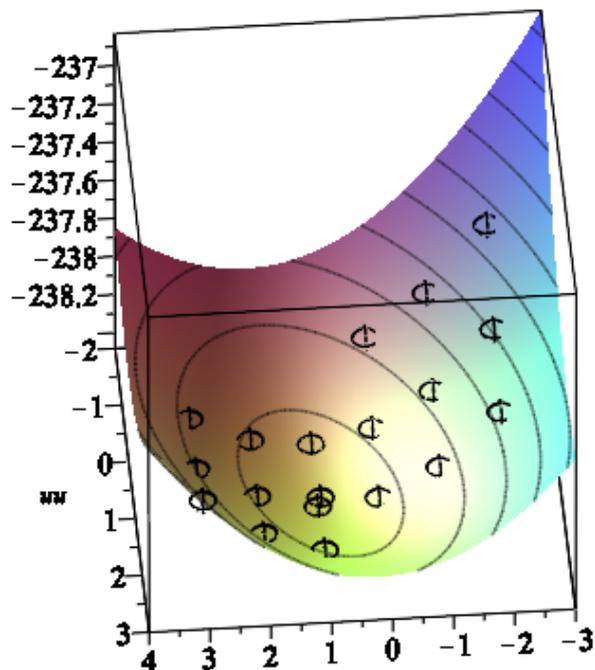


図 3.5: 90° における 2210, 原子数 64 の完全結晶 slab モデルのポテンシャル曲面.

3.3 外部緩和

本研究では, エネルギーの最安定値を求めるために, 外部緩和を行った. 外部緩和とは, 外部のセル形状を変形させる手法である. この外部緩和を計算 1 つにつき, 手動で 2 回ずつ行なう. 外部緩和を行なった後に, 高精度 (fix) 計算を行なう.

3.4 エネルギーの最安定値

計算終了後, エネルギーの最安定値を見つけるために, 外部緩和したエネルギーの値の 3 次元 fitting を行う. そのあと, 最安定エネルギーの囲い込みを行う. その方程式を微分して, 最安定値の存在する x , y を算出し, 最安定値を計算する.

3.5 0°近傍の粒界エネルギー

回転角 $36.87^\circ (\theta = \arctan(1/3))$ の第一原理計算を行なった。

また、昨年藤村の結果と比較するために、回転角 $22.62^\circ (\theta = \arctan(1/5))$ のときの最安定の粒界エネルギーを求めた。

3.5.1 回転角 $36.87^\circ (\arctan(1/3))$

最安定のエネルギーを囲い込んだ fitting グラフを図 3.6 に示す。計算結果のデータを以下の表 3.2 にまとめた。x=-1.00%, y=+1.00% のとき、最安定となり、その値は、 $0.85522 J/m^2$ である。

表 3.2: 計算結果。

x	y	E
1	1	0.86441
1	0	0.86466
1	-1	0.87302
0	1	0.85530
0	0	0.85987
0	-1	0.87288
-1	1	0.85522
-1	0	0.86429
-1	-1	0.88225
-0.03	0.04	0.85950

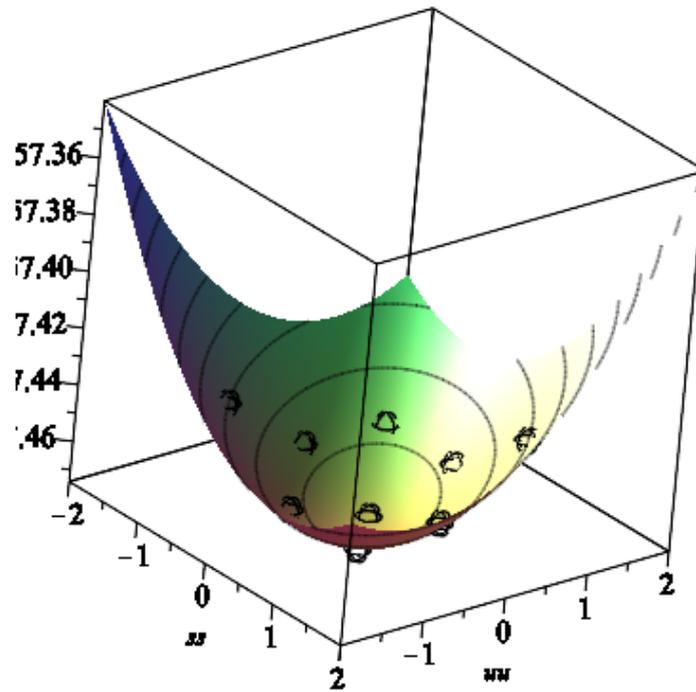


図 3.6: 最安定のエネルギーを囲い込んだ fitting 図.

3.5.2 回転角 $22.62^\circ (\arctan(1/5))$

計算結果のデータを以下の表 3.3にまとめた. $x=-1.00\%$, $y=+2.00\%$ のとき, 最安定となり, その値は, $0.94587 J/m^2$ である.

表 3.3: 計算結果.

x	y	E
1	2	0.98077
1	0	0.95636
1	-1	0.96466
0	2	0.95615
0	0	0.94719
0	-1	0.96420
-1	2	0.94587
-1	0	0.95342
-1	-1	0.97967
-0.13	0.10	0.94613

3.6 90° 近傍の粒界エネルギー

3.6.1 回転角 53.14° ($\arctan(1/3)$)

$x=0.00\%$, $y=+1.00\%$ のとき, 最安定となり, その値は, $0.88486 J/m^2$ である.

表 3.4: 計算結果.

x	y	E
1	1	0.89749
1	0	0.89535
1	-1	0.90688
0	1	0.88486
0	0	0.88784
0	-1	0.90473
-1	1	0.88559
-1	0	0.89392
-1	-1	0.91645
-0.09	0.11	0.88677

第4章 おわりに

$E-\theta$ プロットで比較を行ったものを図 4.1 に示す。この図より、VASP による Cu の第一原理計算の結果は、EAM による計算結果に類似していることがわかる。

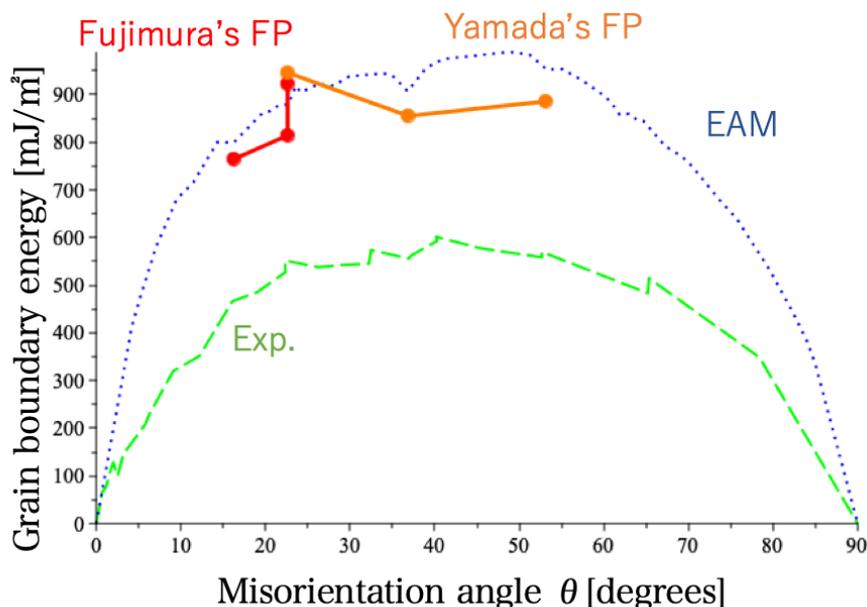


図 4.1: 本研究の結果 (Yamada's FP, 橙実線), 藤村の結果 (Fujimura's FP, 赤実線) と, EAM による計算結果 (青点線)[2] および, 実験結果 (緑破線)[6] との比較。

第一原理計算で求めた Cu の粒界エネルギーの角度依存性を図 1.2: 赤実線と橙実線に示した。Al の計算結果と同様に EAM (図 1.2: 青点線) に近い値を示している。

傾角 $\theta = 22.62^\circ$, 原子数 46 のとき, 藤村の計算と本研究の計算結果のエネルギー値に差が生じていることが分かる。その値は約 23.75 mJ/m^2 である。これは, 粒界エネルギーを求めるのに使用する, 欠陥エネルギーと完全結晶のエネルギーの精度が低かったためである。

また, 傾角 $\theta = 22.62^\circ$ に示した通り, スラブのサイズを変えると得られる粒界エネルギーに差が出るのがわかる [9]。小傾角の計算には原子サイズを大きく取る必要がある

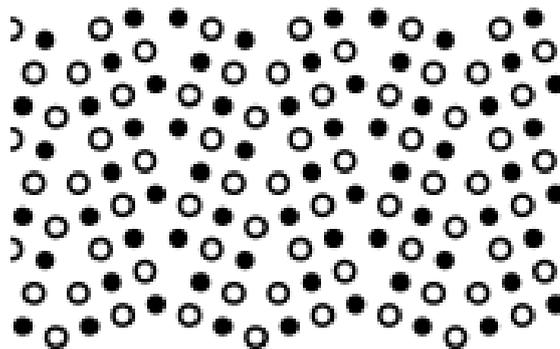
ため、計算時間が長時間におよびまだ終了していない。今後は、計算精度を確かめながらより傾角の小さな粒界エネルギーを求めていく。

付録A POSCARとモデルの掲載

3.5の計算に使用した 0° 側の粒界モデルの図とPOSCARを掲載する.

A.1 回転角 $36.87^\circ(\arctan(1/3))$

A.1.1 原子数16



POSCAR_0_2213_16

図 A.1: 使用した粒界0_2213モデル. 原子数16.

```
1.0000000000
10.2883565254 0.0000000000 0.0000000000
0.0000000000 5.7157536252 0.0000000000
0.0000000000 0.0000000000 3.6149600000
16
Selective dynamics
Direct
0.6666666667 0.1000000000 0.5000000000 T T T
0.6111111111 0.4000000000 0.0000000000 T T T
1.0000000000 0.3000000000 0.5000000000 T T T
0.8333333333 0.2000000000 0.0000000000 T T T
0.7777777778 0.5000000000 0.5000000000 T T T
0.9444444444 0.6000000000 0.0000000000 T T T
0.7222222222 0.8000000000 0.0000000000 T T T
0.8888888889 0.9000000000 0.5000000000 T T T
0.5000000000 0.0000000000 0.0000000000 T T T
0.3333333333 0.1000000000 0.5000000000 T T T
```

0.388888889	0.400000000	0.000000000	T	T	T
0.444444444	0.700000000	0.500000000	T	T	T
0.166666667	0.200000000	0.000000000	T	T	T
0.222222222	0.500000000	0.500000000	T	T	T
0.277777778	0.800000000	0.000000000	T	T	T
0.111111111	0.900000000	0.500000000	T	T	T

A.2 回転角 22.62° ($\arctan(1/5)$)

A.2.1 原子数 46

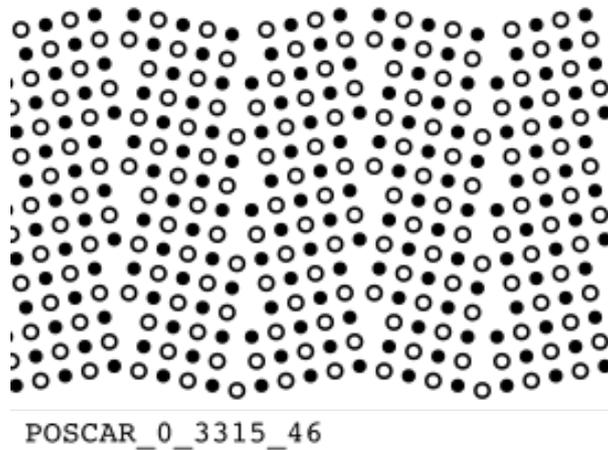


図 A.2: 使用した粒界 0_3315 モデル. 原子数 46.

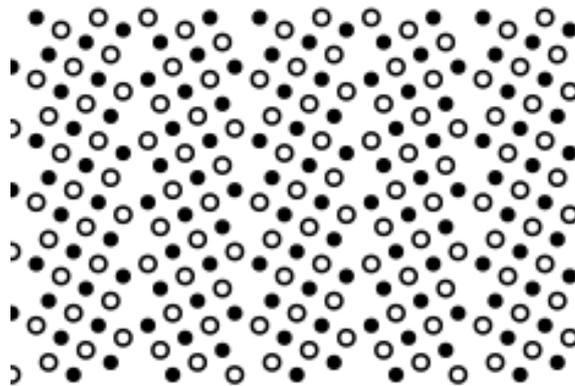
1.000000000	0.000000000	0.000000000			
17.7237995970	0.000000000	0.000000000			
0.000000000	9.2163757904	0.000000000			
0.000000000	0.000000000	3.6149600000			
46					
Selective dynamics					
Direct					
0.600000000	0.0384615385	0.500000000	T	T	T
0.580000000	0.2307692308	0.000000000	T	T	T
0.560000000	0.4230769231	0.500000000	T	T	T
1.000000000	0.1923076923	0.500000000	T	T	T
0.700000000	0.0769230769	0.000000000	T	T	T
0.680000000	0.2692307692	0.500000000	T	T	T
0.800000000	0.1153846154	0.500000000	T	T	T
0.780000000	0.3076923077	0.000000000	T	T	T
0.660000000	0.4615384615	0.000000000	T	T	T
0.640000000	0.6538461538	0.500000000	T	T	T
0.760000000	0.5000000000	0.500000000	T	T	T
0.740000000	0.6923076923	0.000000000	T	T	T
0.620000000	0.8461538462	0.000000000	T	T	T
0.720000000	0.8846153846	0.500000000	T	T	T
0.900000000	0.1538461538	0.000000000	T	T	T
0.880000000	0.3461538462	0.500000000	T	T	T
0.980000000	0.3846153846	0.000000000	T	T	T
0.860000000	0.5384615385	0.000000000	T	T	T
0.840000000	0.7307692308	0.500000000	T	T	T

0.9600000000	0.5769230769	0.5000000000	T T T
0.9400000000	0.7692307692	0.0000000000	T T T
0.8200000000	0.9230769231	0.0000000000	T T T
0.9200000000	0.9615384615	0.5000000000	T T T
0.5000000000	0.0000000000	0.0000000000	T T T
0.4000000000	0.0384615385	0.5000000000	T T T
0.4200000000	0.2307692308	0.0000000000	T T T
0.4400000000	0.4230769231	0.5000000000	T T T
0.4600000000	0.6153846154	0.0000000000	T T T
0.4800000000	0.8076923077	0.5000000000	T T T
0.3000000000	0.0769230769	0.0000000000	T T T
0.3200000000	0.2692307692	0.5000000000	T T T
0.2000000000	0.1153846154	0.5000000000	T T T
0.2200000000	0.3076923077	0.0000000000	T T T
0.3400000000	0.4615384615	0.0000000000	T T T
0.3600000000	0.6538461538	0.5000000000	T T T
0.2400000000	0.5000000000	0.5000000000	T T T
0.2600000000	0.6923076923	0.0000000000	T T T
0.3800000000	0.8461538462	0.0000000000	T T T
0.2800000000	0.8846153846	0.5000000000	T T T
0.1000000000	0.1538461538	0.0000000000	T T T
0.1200000000	0.3461538462	0.5000000000	T T T
0.1400000000	0.5384615385	0.0000000000	T T T
0.1600000000	0.7307692308	0.5000000000	T T T
0.0600000000	0.7692307692	0.0000000000	T T T
0.1800000000	0.9230769231	0.0000000000	T T T
0.0800000000	0.9615384615	0.5000000000	T T T

3.6の計算に使用した 90° 側の粒界モデルの POSCAR を掲載する。

A.3 回転角 53.13° ($\arctan(1/3)$)

A.3.1 原子数 32



POSCAR_90_2213_32

図 A.3: 使用した粒界 90_2213 モデル. 原子数 32.

1.0000000000			
14.5499333289	0.0000000000	0.0000000000	
0.0000000000	8.0832962938	0.0000000000	
0.0000000000	0.0000000000	3.6149600000	
32			
Selective dynamics			
Direct			
0.6666666667	0.1000000000	0.0000000000	T T T
0.6111111111	0.4000000000	0.0000000000	T T T
0.7222222222	0.3000000000	0.5000000000	T T T
0.6666666667	0.6000000000	0.5000000000	T T T
1.0000000000	0.3000000000	0.0000000000	T T T
0.6111111111	0.9000000000	0.5000000000	T T T
0.8333333333	0.2000000000	0.0000000000	T T T
0.7777777778	0.5000000000	0.0000000000	T T T
0.9444444444	0.6000000000	0.0000000000	T T T
0.8888888889	0.4000000000	0.5000000000	T T T
0.8333333333	0.7000000000	0.5000000000	T T T
1.0000000000	0.8000000000	0.5000000000	T T T
0.7222222222	0.8000000000	0.0000000000	T T T
0.8888888889	0.9000000000	0.0000000000	T T T
0.7777777778	0.0000000000	0.5000000000	T T T
0.9444444444	0.1000000000	0.5000000000	T T T
0.5000000000	0.0000000000	0.0000000000	T T T
0.5000000000	0.5000000000	0.5000000000	T T T
0.3333333333	0.1000000000	0.0000000000	T T T
0.3888888889	0.4000000000	0.0000000000	T T T
0.4444444444	0.2000000000	0.5000000000	T T T
0.2777777778	0.3000000000	0.5000000000	T T T
0.3333333333	0.6000000000	0.5000000000	T T T
0.4444444444	0.7000000000	0.0000000000	T T T
0.3888888889	0.9000000000	0.5000000000	T T T
0.1666666667	0.2000000000	0.0000000000	T T T
0.2222222222	0.5000000000	0.0000000000	T T T
0.1111111111	0.4000000000	0.5000000000	T T T
0.1666666667	0.7000000000	0.5000000000	T T T
0.2777777778	0.8000000000	0.0000000000	T T T
0.1111111111	0.9000000000	0.0000000000	T T T
0.2222222222	0.0000000000	0.5000000000	T T T

参考文献

- [1] W. T. Read Jr., and W. Shockley, "Imperfection in nearly perfect crystals", ed. by W. Shockley, (Wiley, New York, 1952), p.352.
- [2] M. A. Tschopp and D. L. McDowell, *Phil. Mag.*, **87**(2007), 3871.
- [3] 西谷滋人, 日本物理学会講演概要集,(17/9/24 岩手大) 領域 10,24pA45-2.
- [4] A. Otsuki, *J. Materials Science*, **40**(2005), 3219.
- [5] 八幡裕也, 「小傾角粒界のシミュレーション」, 関西学院大学情報科学科卒業論文 (2012).
- [6] N. A. Gjostein and F. N. Rhines, *Acta Metallurgica*, **7**(1959), p.319.
- [7] Automatic k-mesh generation, The VASP Manual, https://cms.mpi.univie.ac.at/vasp/vasp/Automatic_k_mesh_generation.html (2019/2/1 accessed).
- [8] Number of k-points, and method for smearing, The VASP Manual, https://cms.mpi.univie.ac.at/vasp/vasp/Number_k_points_method_smearing.html (2019/2/1 accessed).
- [9] 藤村尚輝, 「Cu の小傾角粒界エネルギーの第一原理計算」, 関西学院大学情報科学科卒業論文 (2018).

謝辞

本研究の遂行するにあたり，終始多忙な中，有益な御指導，及び丁寧な助言を頂いた西谷教授に深い感謝の意を表します．また本研究を進めるにつれ，西谷研究室に所属する同輩の皆様からの様々な知識の供給，御協力を頂き，本研究を成就させる事ができました．この場を借りて深く御礼申し上げます．