

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 26 年 6 月 19 日現在

機関番号：56301

研究種目：基盤研究(C)

研究期間：2011～2013

課題番号：23560792

研究課題名(和文)FPKKR法による金属中の不純物間相互作用の第一原理計算およびデータベース構築

研究課題名(英文)FIRST PRINCIPLES CALCULATIONS AND DATABASE CONSTRUCTION FOR IMPURITY INTERACTION ENERGIES IN METALS

研究代表者

安里 光裕 (ASATO, Mitsuhiro)

新居浜工業高等専門学校・数理科・准教授

研究者番号：20353261

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 4,200,000円、(間接経費) 1,260,000円

研究成果の概要(和文)：密度汎関数法のGGAに基づくフルポテンシャルKKR-Green関数法の第一原理計算を用いて金属に他の元素(添加元素や不純物)がある場合の母体原子の格子歪と体積変化、不純物原子間の(第1近接から第10近接までの)相互作用エネルギーの計算を行い、相互作用のメカニズムを解明した。具体的には、Fe、Al中のいろいろな元素について、原子間相互作用エネルギー、体積変化、磁性変化などを中心に周期表に沿って計算してまとめた。

研究成果の概要(英文)：Using the first principle calculations of the KKR-Green's function method based on the generalized-gradient approximation of the density functional method, we have calculated the impurity interatomic interaction energies, lattice distortion and volume change of the host atoms in metals (Fe, Al).

研究分野：材料工学

科研費の分科・細目：金属物性

キーワード：第一原理計算 密度汎関数法 KKR-Green関数法 格子欠陥 原子間相互作用 格子歪

1. 研究開始当初の背景

我々は、合金中の添加元素や不純物元素を、母体金属元素に対する不純物として扱い、それらの相互作用エネルギー、すなわち、「金属中の不純物間相互作用エネルギー」を高精度で求める第一原理電子構造計算 (FPKKR 法) のプログラムコード開発とその応用を行ってきた。高精度の実験結果がある系 (Hyperfine Interactions 60(1990) 581) では、本研究の計算結果が実験値を非常によく再現することも示してきた。また、アルミニウム合金 AlX(X=Sc~Zn)中の原子間相互作用の特徴を明らかにするため、合金の内部エネルギーのクラスター展開の方法 (dilute-limit からのアプローチ) を提案した。我々の方法の特徴は、よく用いられている Connolly-Williams の方法 (Phys. Rev. B27(1983), 5169) とは異なり、孤立原子と単元素金属状態の全エネルギー、金属中の X 原子の集合体の全エネルギーから、X 原子の 1 体、2 体、3 体...の相互作用エネルギーを一義的に決定できるという長所を有することにある。この方法により、すでに、AlX(X=Sc~Zn)の状態図の大きな特徴(X=Sc~Ni の場合は規則合金、または、準結晶、X=Cu,Zn の場合は析出相)が Al 中の X 原子の 2 体相互作用で区別できることを明らかにしている。さらに、近年、不純物周辺の格子歪を取り入れた計算や、格子間位置にある進入型不純物系(B, C, N などの小さい原子半径の元素)の計算も可能となってきた。すでに、Al 中、Fe 中の 1 原子不純物周りの格子ひずみの計算は多くの系で終えている。このような状況に基づき、以下に本研究の目的を述べる。

2. 研究の目的

新たな合金材料の開発や高品質化を進める上で、材料に含まれる様々な添加元素や不純物の効果や役割を調べるため、あるいは、材料組織の安定性や生成のメカニズムを原子レベルから理解するために、多くの実験を必要とする熱力学パラメータを高精度の理論計算により整備することが望まれている。そこで、本研究では、我々が開発してきたフルポテンシャル KKR-Green 関数法により、代表的な実用金属材料である Al, Fe, 等の金属中の添加元素や不純物元素等の原子間相互作用エネルギーの高精度第一原理計算を行い、その結果を(周期表に沿って)原子番号順にデータベース化するとともに、相互作用のメカニズムを解明する。これにより、国内の実験グループや、分子動力学等の大規模シミュレーションを行っている理論グループと連携をとり、材料開発・研究の更なる発展に貢献することを目的とする。

3. 研究の方法

我々のグループで開発してきた「密度汎関数法の一般化密度勾配近似 (GGA) とフルポテンシャル (FP)KKR-Green 関数法に基づく (GGA-FPKKR 法) の第一原理電子構造計算プログラムで格子歪効果までも取り入れた計算を行い、代表的な実用金属材料である Al, Fe 中の添加元素や不純物元素を母体金属に対する不純物原子として扱い、不純物原子 - 母体原子, 不純物原子 - 不純物原子間の相互作用エネルギーを算出してまとめ、データベースを構築して公開するとともに、相互作用のメカニズムを解明する。

4. 研究成果

(1) Fe 中の不純物対相互作用エネルギーの計算

図 1 に示すように、bcc 構造の (中心から見て) 第 1 近接位置から第 10 近接位置までの不純物原子間の相互作用エネルギーを Fe 中にいろいろな元素が挿入された場合について計算してまとめた。ほとんどの場合、第 1 近接配置での不純物原子対相互作用が支配的であり、第 8 近接以遠の配置ではかなり弱くなるのが分かったが、特に第 5 近接位置の相互作用はどの系でも小さくなく、状態図などの計算をするには、遠方の相互作用エネルギーまで正確に考慮する必要がある。

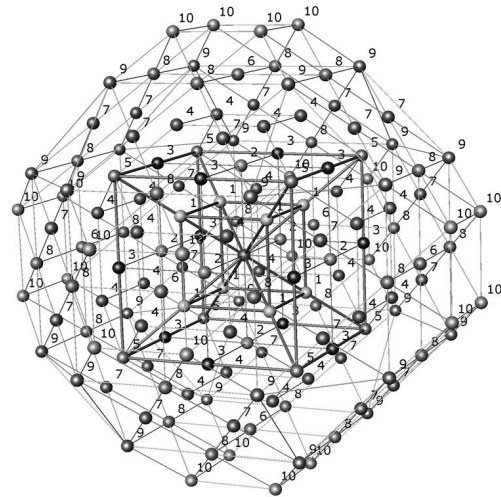


図 1 bcc 構造における第 1 ~ 10 近接位置の原子配置 1.

(2) 1 原子不純物周りの格子歪と体積変化 Fe, Al に他の元素が 1 原子挿入されたことによる周りの母体原子の格子歪について詳細に調べ、あわせて、全体的な体積膨張効果について調べた。特に、1 不純物の体積膨張の実験結果、格子定数測定実験の結果は Kanzaki 模型の表式を用いた計算で、ほぼ再現できることを示した。

(3) Fe 中の不純物対相互作用エネルギーと格子歪効果

第1近接位置に存在するいろいろな元素の不純物原子対に対し、その周りの格子歪について、第2近接母体原子の歪まで正確に取り入れて相互作用エネルギーおよび磁性効果について計算してまとめた。あわせて、そのメカニズムについても明らかにした。

5. 主な発表論文等

(研究代表者, 研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文](計4件)

M.Asato, C.Liu, K.Kawakami, N.Fujima, T.Hoshino
Full-Potential KKR Calculations for Lattice Distortion Effect of Point Defect in bcc-Fe Dilute Alloys, Based on the generalized-Gradient Approximation, Mater. Trans., Vol.55, No.8 (2014).

劉暢, 安里光裕, 藤間信久, 星野敏春,
GGA-FPKKR法によるFe基希薄合金中の点欠陥エネルギーの第一原理計算,
日本金属学会誌, 第78巻, 6号 (2014)
p.235-p240.

Chang Liu, M.Asato, N.Fujima and T.Hoshino
Full-Potential KKR Calculations for Point Defect Energies in Fe-Based Dilute Alloys, Based on the Generalized Gradient Approximation. Mater. Trans., Vol.54, No.9 (2013) p.1667-p.1672.

Chang Liu, M.Asato, N.Fujima and T.Hoshino,
Full-Potential KKR Calculations for Lattice Distortion of Impurities in Fe-Based Dilute Alloys, Based on the Generalized Gradient Approximation, Proc. of the 8th Pacific Rim International Conference on Advanced Materials and Processing, TMS, (2013) p.2821-p.2825.

[学会発表](計12件)

安里光裕, 劉暢, 藤間信久, 星野敏春,
FPKKR-Green関数法の第一原理計算によるFe, Al中の不純物周りの格子歪と体積変化,
日本金属学会2014年春季大会(東工大), 2014年3月22日.

劉暢, 安里光裕, 藤間信久, 星野敏春,
第一原理計算によるAl, Fe中の不純物対原子間相互作用: 磁性, 格子歪と相互作用エネルギー,
日本金属学会2014年春季大会(東工大), 2014年3月22日.

劉暢, 安里光裕, 星野敏春,
Al, Fe金属中の不純物まわりの格子歪: 磁性と格子欠陥エネルギー,
日本金属学会2013年秋季大会(金沢大), 2013年9月18日.

C.Liu, M.Asato, N.Fujima, T.Hoshino,
Full-Potential KKR calculations for lattice distortion of impurities in Fe-based dilute alloys, based on the Generalized-Gradient Approximation, 8th Pacific Rim International Congress on Advanced Materials and Processing, (Hilton Waikoloa Village, Waikoloa, Hawaii) 2013年8月6日.

劉暢, 安里光裕, 星野敏春, 川上和人,
Fe金属中のPACプローブと不純物の相互作用エネルギーと格子歪の第一原理計算,
日本金属学会2013年春季大会(東京理科大) 2013年3月28日.

劉暢, 安里光裕, 星野敏春, 川上和人,
Fe金属中のPACプローブと不純物の相互作用エネルギーと格子歪の第一原理計算,
日本金属学会2012年秋季大会(愛媛大) 2012年9月18日.

星野敏春, 安里光裕, 藤間信久, 劉暢,
Screened-FPKKR計算による遷移金属シリサイド $Fe_{1-x}Co_xSi$ の磁性: 原子配置依存性と温度効果(Fermi分布)
日本金属学会2012年秋季大会(愛媛大) 2012年9月18日.

原賢輔, 藤間信久, 安里光裕, 星野敏春
Screened-FPKKR計算による遷移金属シリサイド $X_{1-x}Y_xSi$ (X, Y=Ti-Cu)の磁性,
日本金属学会2012年春季大会, 横浜国大, 3月29日.

安里光裕, 星野敏春, 川上和人,
Fe金属中のPACプローブと不純物の相互作用エネルギーと格子歪の第一原理計算,
日本金属学会2012年春季大会(横浜国大), 3月29日.

原賢輔, 藤間信久, 安里光裕, 星野敏春
Screened-FPKKR法による遷移金属シリサイド XSi (X=Ti~Cu)の電子構造・磁性,
日本金属学会2011年秋季大会(沖縄コンベンションセンター), 11月9日.

安里光裕, 星野敏春, 川上和人,
Fe 金属中の PAC プローブと不純物の相互
作用エネルギーと格子歪の第一原理計算 ,
日本金属学会 2011 年秋季大会 (沖縄コンベン
ションセンター), 11 月 9 日.

6 . 研究組織

(1)研究代表者

安里 光裕 (ASATO MITUHIRO)
新居浜工業高等専門学校・数理科・准教授
研究者番号 : 20353261

(2)研究分担者

星野 敏春 (HOSHINO TOSHIHARU)
静岡大学・創造科学技術大学院・教授
研究者番号 : 70157014

(3)連携研究者

川上 和人 (KAWAKAMI KAZUTO)
新日鐵住金株式会社技術開発本部・数理科
学研究部・主任研究員
研究者番号 : 50373741