

材料研究・開発支援のための計算機シミュレーション

—第一原理計算手法による金属中の原子間相互作用エネルギーとそのメカニズム解析—

数理科・安里 光裕

私たちが普段利用する工業製品に用いられている金属材料は（身近なものでは、鉄やアルミニウム等）、そのほとんどが複数の元素からなる合金です。例えば、鉄（鉄鋼材料）の場合、鉄の中に鉄以外の複数の元素が混入している状態です。これらの元素は、自然に混入してしまうもの（不純物元素）から意図的に混合したもの（添加元素）まで様々であり、その種類や量により、合金は異なる特性を示すことが実験からわかっています。例えば、微視的（ミクロ）にみると、原子の並び方（原子構造）が変化したり、巨視的（マクロ）にみると、その合金の強度や延性、加工性が変化したりします。したがって、材料の使用目的に応じて（例えば、材料を強くしたい（強度を出したい）という場合）、添加元素の種類や量を変えたり、あるいは、不要な不純物を取り除いたりする必要があります（実はこの場合も、不純物を取り除くために別の元素を添加するのですが）。

しかしながら、添加元素の種類とその量（混合比）の組合せは膨大な数（無限）となり、あらゆる場合を試し、どのような特性が出るのかを調べることは、時間的制約、コストの問題、また、人体や環境に害を及ぼすような（例えば毒性のある）元素を扱う際の安全面の問題等を考えると現実には不可能です。そこで、実際の開発現場で行われてきた添加元素の選択等は、過去の経験や勘に基づく場合も多いようです。さらに、添加した元素が材料特性にどのような役割を果たしているのかよくわかっていないことも多くあります。

このような状況の下、当研究室では現在（静岡大学工学部のグループと共同で）材料研究・設計を支援することを目的とした第一原理計算^{※1}と呼ばれる理論計算手法とその計算プログラムの開発を行っており（本研究で用いている第一原理計算はKKRグリーン関数法^{※2}と呼ばれます）、金属中で添加元素や不純物元素がどのように影響しあっているのか（相互作用エネルギー）を計算により求め、その役割や、相互作用のメカニズムを明らかにする研究を行っています。

例えば、**図1**（上）は母体金属（青色）中で添加元素（または不純物）（黄色）が（相互作用がないくらい）離れた状態（この系の全エネルギーを E_1 ）、**図1**（下）は添加元素（または不純物）が近接位置にある状態（この系の全エネルギーを E_2 ）を表し、両者のエネルギー差（ $E_2 - E_1$ ）で金属中の添加元素同士による原子間相互作用エネルギーが求まります。相互作用エネルギーがプラス（正）の場合は、斥力に対応し、添加元素同士は母体金属中で離れた状態（**図1**（上）すなわち母体金属中に溶ける）になります。反対に、相互作用エネルギーがマイナス（負）の場合は、引力に対応し、添加元素同士は互いに引き合い、母体金属中から析出します（**図1**（下）の状態）。**図2**は実際に計算したパラジウム(Pd)中の原子間相互作用エネルギーを示しています。例えば、Pd中のロジウム(Rh)同士の相互作用エネルギーはマイナスで、引力相互作用に対応し、Pd中でRh原子同士は互いに引き合いPd中から析出しやすいと計算結果は予測します。この結果は、実験で得られている結果を再現しています（**図2**に示す他の元素による結果も同様に説明ができます）。このような計算を様々な元素について行っていけば、新たな合金開発の助けになる、あるいは、実験で解明することが難しい相互作用のメカニズムなどを理論計算で解決できるのでないかと期待されています。

現在、科学研究費の助成を受け、原子間相互作用エネルギーを周期表に沿ってデータベース化して相互作用のメカニズムを解明することや、得られた相互作用エネルギーを用いて合金状態図を理論計算のみから求めるという試みを行っています。

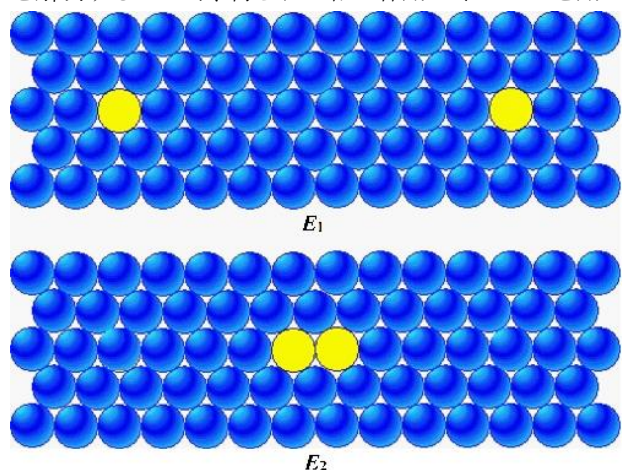


図1

（上）：母体金属中で添加元素（または不純物元素）が遠く離れた状態
（下）：母体金属中で添加元素（または不純物元素）が近接位置にある状態

原子間相互作用エネルギーは2つの系の全エネルギー差（ $E_2 - E_1$ ）から求まる

※1 第一原理計算：計算対象とする系の構成元素の原子番号とその構造から系の電子状態を求め、金属（合金）のエネルギーを求めることができる。実験データは一切用いる必要はない。
※2 KKRグリーン関数法：第一原理計算手法のひとつで、完全結晶系と不純物系の計算精度が同等で材料研究に有効な手法

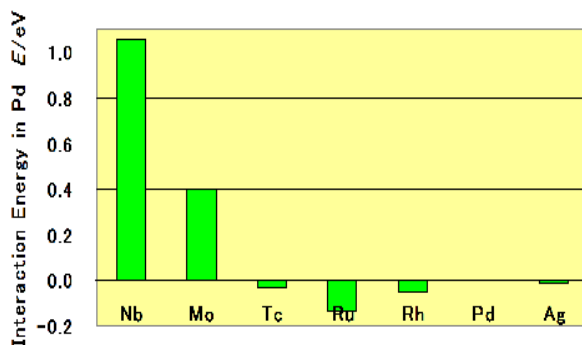


図2 パラジウム (Pd) 中の原子間相互作用エネルギー