SURE 静岡大学学術リポジトリ
Shizuoka University REpository

第一原理計算による希薄合金の研究：点欠陥による格子歪エネルギーと合金の内部エネルギーの実空間クラスター展開

メタデータ	言語: ja 出版者: 静岡大学 公開日: 2017-06-07 キーワード (Ja): キーワード (En): 作成者: 劉, 暢 メールアドレス: 所属:
URL	https://doi.org/10.14945/00010197

（課程博士・様式９）　　審　査　要　旨

専攻　光・ナノ物質機能　　学籍番号　55445008　　学生氏名　　劉　　暢

論文題目　第一原理計算による希薄合金の研究

－点欠陥による格子歪エネルギーと合金の内部エネルギーの実空間クラスター展開－

本論文は，不純物原子や格子欠陥を含む非周期系の電子構造を，周期系と同程度の高い精度で計算を可能とする第一原理 GGA-FPKKR 計算プログラムを用いて，工学的な応用上重要な材料である Fe，Al および Pd 金属中の不純物原子まわりの格子歪，不純物原子間の相互作用エネルギー等の局所的な情報を計算し，これらの諸量と実空間クラスター展開法，クラスター変分法を組み合わせることにより，溶解度限，相図等，合金のもつ巨視的な諸物性を理論的に明らかにすることを目的とするものである．本論文は以下の 8 章で構成されている．

第 1 章で研究の背景を述べた後，第 2 章では，研究に用いる第一原理 GGA-FPKKR 法等の計算手法について概括している．第 3 章では，第 4 周期元素を不純物(Sc-Ge)として，Fe，Al 母体中の単一不純物原子まわりに生じる Hellmann-Feynman 力と格子歪の距離依存性を計算し，これらの諸量と Kanzaki 模型を用いて，Fe，Al 母体の不純物による平均体積変化の実験値を再現している．また，不純物まわりの体積変化の微視的機構を明らかにしている．第 4 章において，Fe，Al 母体中での不純物原子(Sc-Ge)対の格子歪を明らかにした上で，第 5 章では，不純物対相互作用エネルギーの距離依存性，および不純物対の格子歪・磁性が相互作用エネルギーへ与える効果について明らかにしている．不純物対相互作用エネルギーの符号と大きさを用いて，Fe 系，Al 系の 2 元合金が，少数元素(Sc-Ge)の種類によって，規則合金型，2 相分離型，全率固溶型等のどの相に属するのかを理論的に判断する基準を提唱している．さらに，Fe 中の Sn 原子と不純物原子(Sc-Ge）との異種原子対相互作用エネルギーを計算し，母体中で不純物元素がとりうる配置(対となる不純物原子の相対位置)について解明している．第 6 章では，実験的に溶解度限が得られている PdI(I=Rh,Ru)合金について，不純物原子間多体相互作用エネルギーによる実空間クラスター展開法によって，$L1_2$ 構造 Pd_3I 合金の全エネルギーが，バンド計算に対して 1 原子当り 1 mRy 以下の誤差で再現されることを示している．第 7 章では，第 6 章の結果とクラスター変分法を用いて，Pd 中不純物の溶解度限を理論的に算出している．Ru のように溶解度限の温度変化が大きな系で実験結果を再現するには、不純物原子間相互作用エネルギーの温度効果が重要であることを明らかにしている．また，格子歪エネルギーの濃度依存性を模型的に扱い，実験結果を再現するとともに，模型計算を第一原理的に実現することが今後の課題として示唆されている．第 8 章では本論文の結論を述べている．

上記の結果は，Fe，Al，Pd 系という限られたものではあるが，理論手法は汎用性のあるものであり，また，参照可能な実験結果をおおむね再現するものであることから，他の合金系にも十分適用可能である．本論文の成果が、今後，多くの不純物系，不規則系に適用され，それらの局所的な情報から系の巨視的な物理量に関する知見が理論的に予測されることが期待できる．よって，本論文は博士(工学)の学位を授与するに十分の内容であることを認めるものである．