

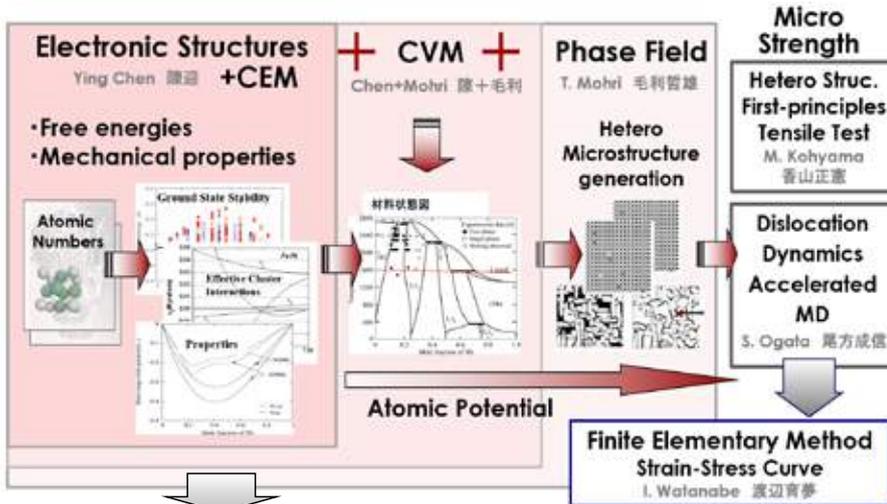
「革新的構造用金属材料創製を目指したヘテロ構造制御に基づく新指導原理の構築」

ハミルトニアンからの材料強度設計

電子構造に基づくFe-Si合金の弾性特性解析：磁気体積効果、規則化とフェルミレベル安定性

研究機関名：東北大学 所属名：金属材料研究所 代表研究者：教授 毛利哲雄 終了2013年度（平成25年度）
共同研究者：陳迎（東北大学）、香山正憲（産総研）、尾方成信（大阪大学）、渡邊育夢（物質・材料研究機構）

研究・成果概要



プロジェクト概要・成果

基礎理論の集積とスーパーコンピューティングに基づいた電子状態、原子配列と材料強度の関係の解明、材料の強さのマルチスケールシミュレーションを実現することが本研究の目的である。第一原理計算法、クラスター変分法、分子動力学法、有限要素法などの原子スケールから macroscale に至る個々の要素技術において新規性の高い優れた成果が得られた。要素技術を結びつけたマルチスケール計算材料科学の実現に向けても大きな第一歩を踏み出した。産学共創の場における産業界からの要請をマイルストーンの中に適切に取り込み、各スケールの要素技術において最先端の計算科学技術を実用材料のFe-Si系合金に適用し、Fe-rich組成の特徴的な力学特性の解析を行った。

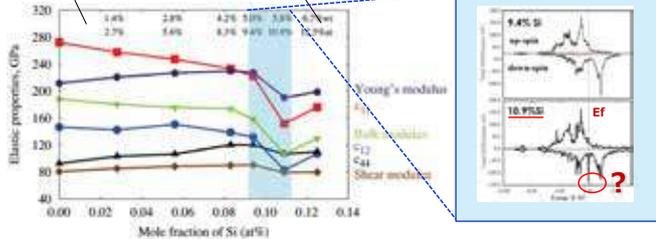
Mechanical properties of Fe-rich Si alloy from Hamiltonian, Tetsuo Mohri, Ying Chen, Masanori Kohyama, Shigenobu Ogata, Arkapol Saengdeejing, Somesh Kumar Bhattacharya, Masato Wakeda, Shuhei Shinzato and Hajime Kimizuka, npj Computational Materials - Nature 3, 10 (2017)

電子構造に基づく高精度自由エネルギー・力学特性計算

プロジェクト終了時主な研究成果

- Fe-rich 側のSi希薄固溶体(0-12.5at%Si)の力学特性評価：各弾性特性の変化と実験測定が一致する (Si 9.4-10.9at%の脆化の再掲)
- 弾性特性のSi濃度依存性の物理的起源：9.4at%以下Si濃度域で各弾性特性の変化：磁気体積効果
- 10.9at%以上Si濃度域で各弾性特性の回復：D0₃規則化効果
- 9.4-10.9at%Si各弾性定数の大幅な減少：Fermi level instability

Magnetovolume effect D0₃ ordering



計算手法

Free energy

$$F(V, T) = E_{el}(V) - TS_{conf}(V, T) + E_{vib}(V, T) - TS_{vib}(V, T) - TS_{el}(V, T)$$

Electronic energy (Internal energy) DFT + CEM

Lattice vibration energy Lattice vibration entropy

"Inter-atomic S" Lattice vibration entropy

"Atomic" S Configurational entropy (CVM)

Lattice vibration (Debye-Grüneisen App., Phonon)

"Electronic S" -thermal excitation -spin ordering

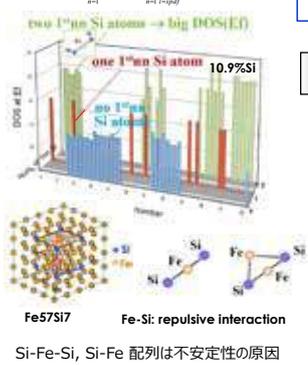
- Zero K: DFT, Cluster Expansion Method (CEM)
- Finite temperature: Cluster Variation Method (CVM), Phonon
- Elastic constants: Strain-Stress Method

プロジェクト終了後新たな展開：Fermi level instabilityの解明

Fermi Level LDOS 解析

LDOS(Ef) for all atoms

$$N(E) = \sum_{\alpha} N_{\alpha}(E) = \sum_{\alpha} \sum_{i} N_{\alpha,i}(E)$$

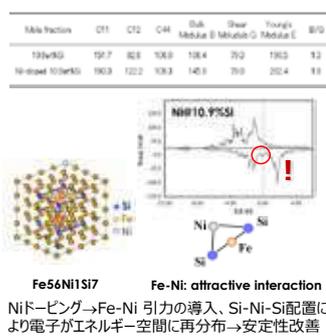


局所原子配列とEf安定性の関連性

Ni元素ドピング

実際の高Si濃度のFe-Si合金には微量なNiが含まれており、微量なNiの効果も調べた。

- Fermi levelの反強磁性のピークが消失した
- 弾性定数と各種の弾性特性は全て増加した



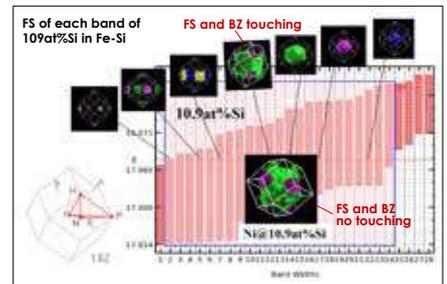
Fermi Surface 解析

- Fermi Surface と Brillouin Zoneの関係
- Fermi levelに沢山の電子が集まる原因

FSがBZの境界に接触する状態になると電子の特徴的な挙動が見られる。

- 8.3at%Si: FS and BZ no touch
- 10.9at%Si: FS and BZ touch
- Ni@10.9at%Si: no touch

10.9at%Si系のFS半径は8.3at%Si系のFS半径より小さい
→ 10.9at%Si系のk-space電子密度は高い
→ 電子はFSから内接しているBZの境界に移動
→ FS不安定性の起源



結論

材料の「強さ」の背後に磁性的効果、規則化とフェルミレベルの特徴など多様な物理が関与していることを明らかにした。特定の原子配置を導入することにより、電子構造や結合状態を調整して特定の物理特性を発現したり増幅させることが可能であるとの知見を得た。

意義・展望

本研究では、実験データやパラメータを用いずに、計算のみから強度を予測、解析する手法を提案した。本成果は、基礎理論の集積とこれを具現化する高速・大容量の大規模計算に基づいた設計手法の確立に大きく貢献し、今後、現場の材料開発を支援する強力な新しい手法として注目される。