

## 鉄中溶質元素の第一原理計算

関西学院大院 理工 西川 篤史, 西谷 滋人

First principles calculations of solute atoms in bcc-Fe

Kwansei Gakuin Univ., Atsushi Nishikawa, and S.R.Nishitani.

Fe 中に置換固溶した原子は格子に歪みを与え、材料全体の強度に影響する。Fe 中に固溶する原子の固溶前と固溶後の原子半径は Fig.1 のように計測されている。本研究では、このような原子半径の変化を第一原理計算から求めることを目的とした。

bcc 構造の Fe16 原子に、3d 遷移金属の Ti から Zn までを 1 原子置換固溶させた原子モデルを構築し、第一原理計算を用いて、その体積-エネルギー曲線(E-V 曲線)を求めた。この曲線から最安定時の原子半径を計算し、Fe 中に固溶する原子の固溶前と固溶後の原子半径がどのような挙動を示すかをシミュレーションした。さらに、凝集エネルギーと硬度を求め、その系統的な変化から有効原子半径の振る舞いを調べた。

計算には平面波基底擬ポテンシャル法電子構造計算プログラムである VASP(Vienna Ab-initio Simulation Package)を用いた。交換相関関数には GGA(Generalized Gradient Approximation)を使用した。

計算結果を Fig.2 に示した。計算によって得られた原子半径は、Zn を除けば、定量的に実験結果と一致している。また希薄固溶エンタルピーが正、すなわち原子同士が退けあう傾向のある原子同士は半径が大きくなり、硬度は減少した。逆に負の場合は、半径が小さくなり、硬度は上昇するといった直観的な傾向を再現していた。

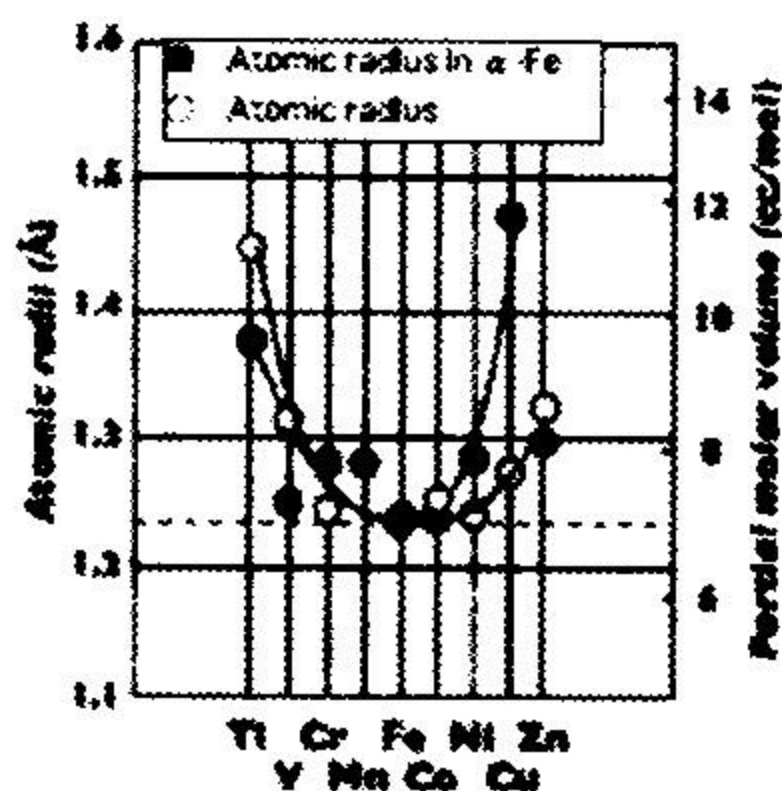


Fig1. Atomic radius for pure metals and diluted metal in Fe (courtesy of Dr. Futamura).

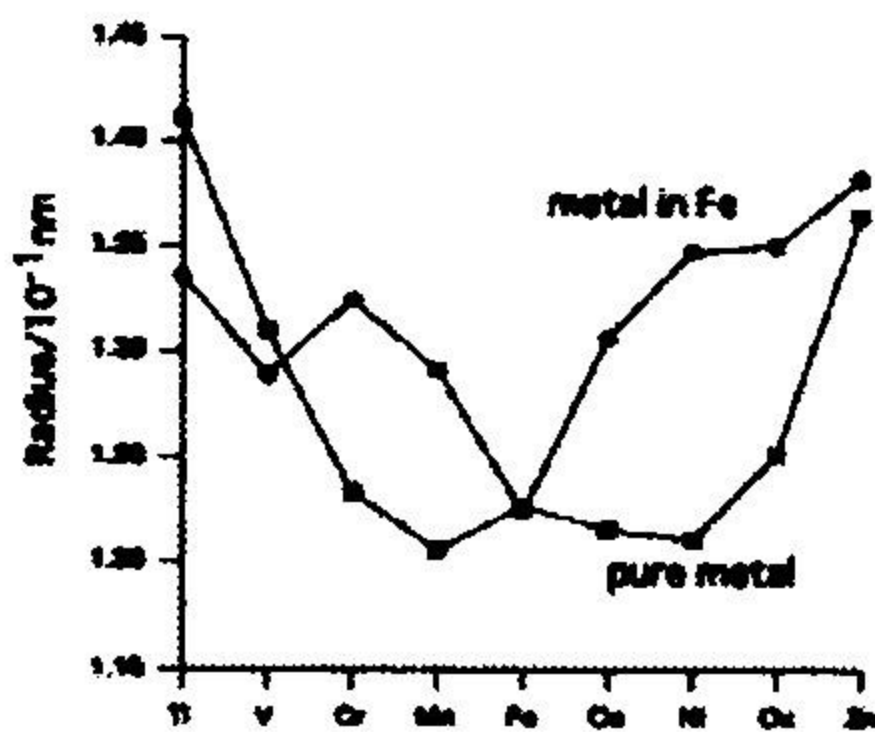


Fig2. Atomic radius of pure metal with bcc structure and effective radius of metal diluted in Fe.