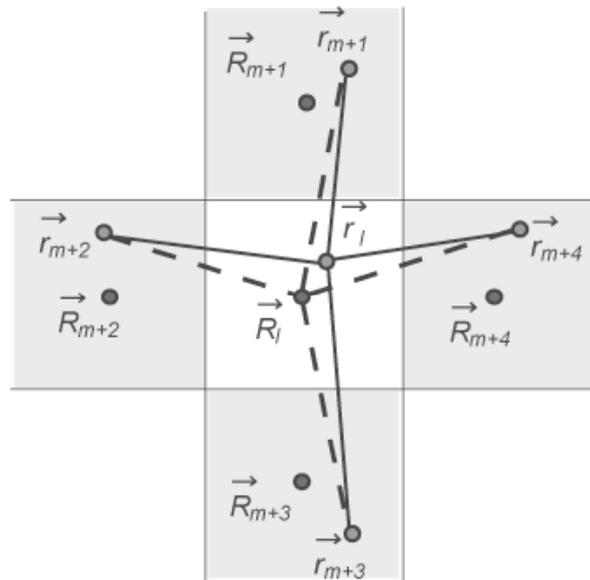


ポテンシャル繰り込み理論による FCC 金属の弾性特性の温度依存性

○佐原亮二¹, 水関博志¹, 大野かおる², 川添良幸¹(¹東北大学金属材料研究所、²横浜国立大学)

計算状態図作製や弾性特性の温度依存性に代表される、金属や合金の有限温度における振る舞いの解析は、実験困難な条件下における平衡相の予想や実験状態図の手がかりとして、また、系の状態の本質的理解に重要である。しかし従来の第一原理計算では、有限温度での相安定性の議論に必要な電子系の効果や格子振動の非調和項の効果を、自由エネルギー計算に取り入れる事が困難であった。そのため、例えば相転移温度が実験値に比べて極めて高く評価される等の不都合が生じてしまい、実験との定量的比較には至っていないのが現状である。また、弾性特性(体積弾性率、弾性定数、剛性率、ヤング率等)の温度依存性の定量評価も困難である。

本研究では、上述の欠点を改善するため、古典分子動力学(MD)ポテンシャルを格子モデルに適切にマッピングしモンテカルロ法の多体相互作用とすることで、格子振動の効果を非調和項まで考慮し、より正確な計算状態図計算を作製することを試みている。多体相互作用を得る際のポイントは、連続空間での分配関数と等しい分配関数を持つ離散系の多体相互作用(繰り込みポテンシャル)を見出すことであり、本研究では2回の操作に分けて繰り込みの手続きを行った^{[1]-[3]}。



本研究ではこれまでに、Cu-Au系二元系合金状態図を作製している。その際、Acklandらによる Finnes-Sinclair 型ポテンシャルを、ポテンシャルの繰り込み操作により FCC 格子モデルに適切にマッピングを行い、これをモンテカルロ法の多体相互作用として用いた。また、モンテカルロ法にはメトロポリス法を適用した。規則配列を初期状態として各温度に保持し最終的に得られた熱平衡状態の長距離オーダーパラメータを評価することより相変態点を得た。比較のために、繰り込みを行わないポテンシャルを用いた場合についても同様の計算を行った結果、繰り込みポテンシャル

を用いた場合の方がオリジナルポテンシャルを用いた場合に比べ相転移温度は低下し、実験での相転移温度を再現する事が示されている。

今回の発表では、この手続きにより **CuAu** 二元系合金の弾性特性(体積弾性率、弾性定数、剛性率、ヤング率)の温度依存性の定量評価を行った結果について示す。体積弾性率の評価には、Murnaghan による状態方程式を用いる。一方、弾性定数の評価には体積一定の歪みテンソルを導入する。本研究で得られた弾性特性と実験値を比較することで、本手法の妥当性を検討する。

参考文献

- [1] K. Ohno, The Sci. Rep. Res. Inst. Tohoku Univ. A 43, (1997) 17, K. Ohno, K. Esfarjani and Y. Kawazoe, *Introduction to Computational Materials Sciences: From Ab Initio to Monte Carlo Methods, Solid-State Sciences*, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, pp.188-197 (1999).
- [2] R. Sahara, H. Mizuseki, S. Uda, K. Ohno, T. Fukuda, and Y. Kawazoe, J. Chem. Phys. 110, (1999) 9608.
- [3] R. Sahara, H. Ichikawa, H. Mizuseki, K. Ohno, H. Kubo, and Y. Kawazoe, J. Chem. Phys. 120 (2004) 9297.
- [4] F. D. Murnaghan, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. **30**, 244 1944.
- [5] M. J. Mehl, J. E. Osburn, D. A. Papaconstantopoulos, and B. M. Klein, Phys. Rev. B41, (1990) 4891.