

第一原理計算の自動化によるマテリアル空間の拡大

Expanding the material space by automating first-principles calculations

○物材機構¹, 東大物性研² ○木野 日織¹, 福島 鉄也², 知京 豊裕¹

NIMS¹, Tokyo-Univ., ISSP.², °Hiori Kino¹, Tetsuya Fukushima², Toyohiro Chikyo¹,

E-mail: kino.hiori@nims.go.jp

BCC 構造, FCC 構造などの単純な構造を取るハイエントロピー合金 (HEA) は高強度物質として有名であり, 近年は新学術領域にも採択され学術研究が進んでいる。応用的には, 例えば, 磁性を持たば容易軸が存在しない軟磁性になり, 元素とその比率を調整することにより様々な物性値が発現することが期待される。しかし, 現在のところ大きな磁性を持つ HEA は見つかっていない。HEA の物性探索の最も大きな難点は探索空間が広すぎることである。また, 実験データもごく一部の組成でしか存在しないため, データ駆動により物質探索を行うこともできない。

一方, 米マテリアルズ・プロジェクトなど, VASP を用いた結晶の第一原理網羅自動計算を主とした物質探索が進んでいる。しかしながら, 合金を計算するには膨大な計算機資源が必要となる。密な構造の合金の計算を小さい計算機資源で行える手法に KKR 法があるが, グリーン関数法であるため VASP などの波動関数法にない困難があり, これまで網羅自動計算には適用されてこなかった。我々は KKR 法の計算パラメタ設定を自動化した。これにより, 人手を介せずに物質の電子状態を収束させることが可能になった。

この KKR 自動計算手法を 38 種類の元素から組み合わせた等比 4 元 HEA (HEA4) に適用し BCC 構造, FCC 構造それぞれ約 7 万件の物性を評価した。図に全磁化 M , 平均場近似による磁気相転移温度 (T_c), Kubo-Greenwood 公式による電気抵抗率 (R) を示す。講演では詳細を説明する。

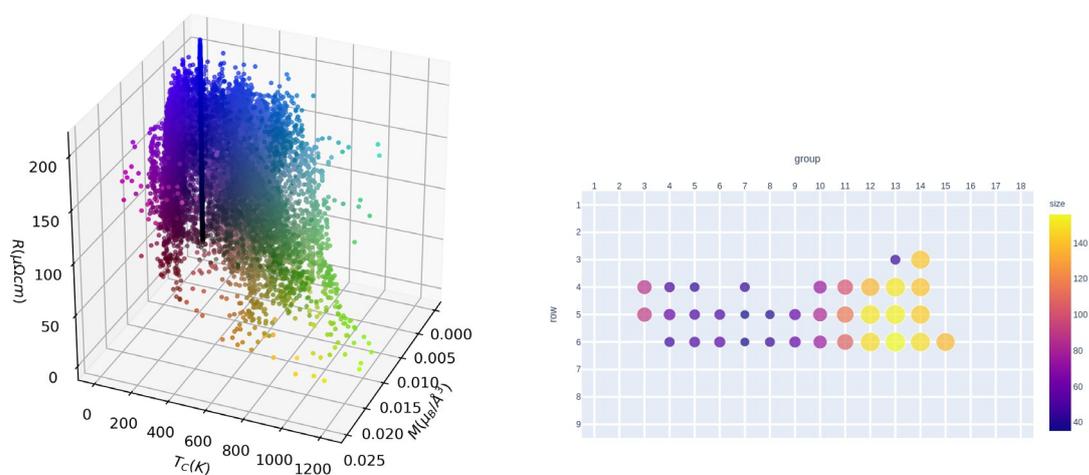


図: 左は HEA4 に対する磁気相転移温度 (T_c), 全磁化 (M), 電気抵抗率 (R) を示す。右は CrFeCoX において元素 X を変えた場合の電気伝導率の変化をバブルダイアグラムで示す。