

## 〔 数理科 〕

### 〔 区 分 A 〕

#### 柳井 忠

##### 地域資源（別子銅山）を活用した課外学習活動の取組み

平田隆一郎\*1、竹原信也\*2、松田一秀\*3、安里光裕\*3、柳井忠\*3、塚野修\*1

\*1 新居浜工業高等専門学校一般教養科、\*2 奈良工業高等専門学校一般教科、\*3 新居浜工業高等専門学校数理科  
高専教育 第 38 号 (2015. 印刷中)

新居浜高専がある愛媛県新居浜市は別子銅山によって発展してきた町である。別子銅山は元禄 4 年(1691)に開坑し、昭和 48 年(1973)に閉山となるまで一貫して住友が経営した銅山である。特に明治以降に事業の近代化、すなわち鉱山鉄道、水力発電所、精錬技術の近代化に取り組み、大きな発展を遂げ、住友グループ発展の礎となり、日本の貿易や産業の近代化に非常に大きく貢献した銅山である。

この別子銅山の歴史、および、産業遺産には、創造的技術者の養成を主軸とする新居浜高専の学生にとって学ぶべき事柄が多岐にわたって存在する。そもそも別子銅山は、海拔約 1300m の高さから、海拔約 -1000m の深さまで山の原型をとどめたまま坑道を掘り下げており、そこには多くの技術が実践されている。気温 40 度、湿度 99% を超え、光や音のないヤマの中で、技術者達は鉱床を調査し、エレベーターや電線、貨車と線路、ショベルカー等を入れ粗銅を取り出し、精銅をした。別子銅山の歴史とは、技術者が知恵を集め工夫をしながら、自然の困難さと向き合い続けたという歴史でもあるのである。

新居浜高専一般教養科・数理科はこのことに着目し、平成 24、25 年度の 2 年間、低学年(1・2 年生)教育における取組として特別活動の時間等を活用して、エンジニアという観点から、別子銅山の歴史学習に取り組んだ。1 年生時に、まず別子銅山の歴史について新居浜市の文化遺産課の協力の下、講話を行った。次に実際に鉱山の中で地質課の職員として鉱床調査に従事していた元技術者の方を招いて当時の仕事の様子などについて講話をしていただいた。まとめとして、2 年生時の学外研修として別子登山を実施し、多くの産業遺産を実際に見ることによってそれまでの学習の理解をさらに深めた。

本稿では一連の学習取組の過程を報告するとともに、本取り組みの成果と課題を報告する。報告を踏まえ、地域資源を活用した技術者教育や地域と連携しながら高専での教育を行うことの意義や可能性について考察する。

#### 安里 光裕

##### Full-Potential KKR calculations for Lattice Distortion around Impurities in Al-based dilute alloys, Based on the Generalized-Gradient Approximation

C Liu\*1, M Asato\*2, N. Fujima\*3, and T. Hoshino\*3

\*1 静岡大学創造科学技術大学院、\*2 新居浜工業高等専門学校数理科、\*3 静岡大学大学院工学研究科  
Transactions of the Materials Research Society of Japan, Vol. 40, No2(2015)

We calculate systematically the atomic volume changes caused by Sc-Ge impurities in Al, using the formalism given by the Kanzaki model. All the parameters in the Kanzaki model, such as the Hellmann-Feynman (HF) forces and the lattice distortion, are calculated by the ab-initio calculations based on the generalized-gradient approximation in density functional formalism and the full-potential Korringa-Kohn-Rostoker (FPKKR) Green's function method for point defects. Most

of the calculated results agree very well (within the error of 5%) with the available experimental results. We found that the calculated results for the HF forces on the 1st-nearest neighboring host atoms around impurities are strongly correlated with the volume changes per impurity in Al. The magnetism of 3d transition-metal impurities (Cr, Mn, Fe) is also discussed.

## 安里 光裕

### Full-Potential KKR calculations for Lattice Distortion Effect of Point Defect in bcc-Fe Dilute Alloys, Based on the Generalized-Gradient Approximation

M Asato<sup>\*1</sup>, C Liu<sup>\*2</sup>, K. Kawakami<sup>\*3</sup>, N. Fujima<sup>\*4</sup>, and T. Hoshino<sup>\*4</sup>

\*1 新居浜工業高等専門学校数理科, \*2 静岡大学創造科学技術大学院, \*3 新日鐵住金 (株) 先端技術研究所, \*4 静岡大学大学院工学研究科

Materials Transactions, Vo.55, No.8, pp.1248-1256 (2014).

We present the *ab-initio* calculations for the lattice distortion effect of substitutional single impurities, I (=Sc~Ge, Sn), and substitutional two impurities, I-I and I-Sn, in bcc-Fe. Sn is a perturbed-angular-correlation (PAC) probe. The calculations are based on the generalized-gradient-approximation in the density-functional formalism and the full-potential Korringa-Kohn-Rostoker (FPKKR) Green's function method. For single impurities, we show that the available experimental results, such as lattice distortion around the impurities and the atomic volume changes per impurity, are reproduced very well by the present calculations. For two impurities, we clarify the lattice distortion effect on 1st-nearest neighbor (NN) interaction energies of I-I and I-Sn pairs in Fe, being a difference between the distortion energies with two impurities located on the infinitely separated sites and on the neighboring sites. We initially show that the lattice distortion effect is very low for the interaction energies between two impurities with a small size-misfit, compared with the host atom, although it becomes high for the interaction energies of two impurities with a large size-misfit. The lattice distortion effect on the I-I (I=Cr~Zn) interaction energies is less than 0.02eV, while the lattice distortion effect on the I-Sn (I=Sc, Ge) interaction energies is greater than 0.2eV. Secondly, we show that we can improve the agreement with the experimental results for the interaction energies of I-Sn pairs in bcc-Fe, by taking into account the lattice distortion. Finally, we show that the magnetic interaction is important for the lattice distortion of the I-Sn (I=Cr, Mn) pairs. The high lattice distortion for I-Sn pairs (I=Cr, Mn) is partly caused by the antiferromagnetic interaction of impurities I with the 1st-NN host atom on the opposite site of the Sn impurity, resulting in the high energy gain (0.13eV, 0.06eV) of I-Sn interaction.

## 安里 光裕

### GGA-FPKKR 法による Fe 基希薄合金中の点欠陥エネルギーの第一原理計算

劉暢<sup>\*1</sup>, 安里光裕<sup>\*2</sup>, 藤間信久<sup>\*3</sup>, 星野敏春<sup>\*3</sup>

\*1 静岡大学創造科学技術大学院, \*2 新居浜工業高等専門学校数理科, \*3 静岡大学大学院工学研究科

日本金属学会誌 第78巻 第6号 p.235-p.240 (2014).

We present systematically *ab-initio* calculations for defect energies of 3d and 4sp impurities (Sc~Ge) in Fe. The calculations are based on the Generalized-Gradient-Approximation in the density-functional formalism and the full-potential Korringa-Kohn-Rostoker (FPKKR) Green's

function method. We first examine the distance dependence, from the 1st- to the 10th-nearest neighbors, of the impurity-impurity (I-I; I=Sc~Ge) interaction energies and show that for most cases, the 1st-nearest neighboring I-I interaction energies are dominant. We found that fundamental features of phase diagrams of Fe-based binary alloys, such as segregation, solid solution, and order, known experimentally, may be classified by use of the sign and magnitude of the 1st-nearest neighboring I-I interaction energies. Second we discuss the calculated results for the 1st- and 2nd-nearest neighboring interaction energies of perturbed-angular-correlation (PAC)-probe Sn with 3d and 4sp impurities in Fe. The comparison of the calculated results with available experimental results shows that the observed attraction for Sn-Co, Sn-Ni, and Sn-Cu may be understood by the 1st-nearest neighboring interaction energies of these impurity pairs, while the observed repulsion for Sn-Ga, and Sn-Ge by the 2nd-nearest neighboring interaction energies of these impurity pairs. We also discuss the magnetism of single impurities X (=Sc~Cu) in Fe. The anti-parallel coupling to the bulk magnetization of the neighboring Fe atoms is stable for Sc~Mn, while the parallel coupling for Fe~Cu.

## 安里 光裕

### 地域資源（別子銅山）を活用した課外学習活動の取組み

平田隆一郎\*1、竹原信也\*2、松田一秀\*3、安里光裕\*3、柳井忠\*3、塚野修\*1

\*1 新居浜工業高等専門学校一般教養科、\*2 奈良工業高等専門学校一般教科、\*3 新居浜工業高等専門学校数理科  
高専教育 第38号（2015.印刷中）

概要は前掲

## 松田 一秀

### 地域資源（別子銅山）を活用した課外学習活動の取組み

平田隆一郎\*1、竹原信也\*2、松田一秀\*3、安里光裕\*3、柳井忠\*3、塚野修\*1

\*1 新居浜工業高等専門学校一般教養科、\*2 奈良工業高等専門学校一般教科、\*3 新居浜工業高等専門学校数理科  
高専教育 第38号（2015.印刷中）

概要は前掲

## 長尾 桂子

### “Directional Dark Matter Search and Velocity Distribution”

National Institute of Technology, Niihama College

Interplay between Particle and Astroparticle physics（予定）

Directional detection of dark matter is the next generation experiment, which is expected to have better background rejection efficiency than conventional direct search. Another intriguing possibility of the experiment by means of the directional information is measurement the velocity distribution of dark matter. Especially, it will be potent to figure out whether the velocity distribution is anisotropic. Supposing three distribution models, we discuss the possibility in one of the directional dark matter searches, nuclear emulsion detector.

暗黒物質の直接検出実験における速度分布の測定可能性

[ 区 分 B ]

矢野 潤

これでわかる電気化学

矢野 潤\*1, 木谷 皓\*2

\*1新居浜工業高等専門学校数理科、\*2広島大学

これでわかる電気化学 (三共出版) (2014)

高等専門学校および理工系の短期大学や大学における基礎専門科学の教科書で、従来にはない平易な解説を行なった。豊富な例題・問題・章末課題などを配し、図解、問題や例題の図解など解り易さを最優先して以下の項目を詳述した。

1. はじめに
2. 物質と電気
3. 電極電位
4. 電流と電位の関係
5. 電極表面の過程
6. 電池
7. 電解
8. センサ

柳井 忠

工学系数学テキストシリーズ 微分積分

阿蘇和寿\*1、柳井 忠\*2 ほか4名編集、阿蘇和寿\*1、柳井 忠\*2 (執筆代表) ほか14名執筆

\*1 石川工業高等専門学校一般科目、\*2 新居浜工業高等専門学校数理科

森北出版, 2014年12月

高専テキストシリーズ「微分積分1」「微分積分2」を再編集し、新たな例題等を加えて、工学系の大学向けの微分積分の教科書として作成されたものである。「数列と級数」「微分法」「積分法」「関数の展開」「偏微分法」「2重積分」の各章から構成されている。例題とともに問題を多く配置して、理論の定着に配慮している。

長尾 桂子

“Directional Dark Matter Search and Velocity Distribution”

National Institute of Technology, Niihama College

Interplay between Particle and Astroparticle physics (予定)

概要は前掲

[ 区 分 C ]

長尾 桂子

“Directional Dark Matter Search and Velocity Distribution”

National Institute of Technology, Niihama College

Interplay between Particle and Astroparticle physics (予定)

概要は前掲

[ 区 分 D ]

原田 潤平

第 37 回素粒子論グループ四国セミナー報告書

原田潤平, 長尾桂子

新居浜工業高等専門学校数理科

第 37 回素粒子論グループ四国セミナーが、京都大学基礎物理学研究所の「地域スクール制度」からの補助を受け、2014 年 12 月 13・14 日の日程で、国立新居浜工業高等専門学校において開催された。参加者は、四国のみならず島根県からもあり、計 20 名であった。この研究集会は毎年一度四国地区の素粒子・原子核・宇宙論研究者が集まり、招待講師の講義を中心として、その時々テーマで研究交流を図ることを目的としている。今回は、宇宙論の最近の発展に焦点を当てたスクールとすることを計画した。招待講師はこのテーマで精力的に研究を続けておられる東京理科大学の辻川信二氏にお願いし、主に理論的な観点から、宇宙論の基礎からインフレーション宇宙論・宇宙背景輻射・暗黒エネルギーについて、現状での理解や問題点、今後の展望などについて、合計 6 時間にわたって講義して頂いた。また、参加者による研究発表と議論の場を設け、参加者間の研究交流が行われることも目指した。今年度は 8 名による一般講演があり、互いの研究に興味を持って活発に議論し合う、非常に面白い研究集会にすることができた。

長尾 桂子

第 37 回素粒子論グループ四国セミナー報告書

原田潤平, 長尾桂子

新居浜工業高等専門学校数理科

概要は前掲

長尾 桂子

Constraints for Dark Matter in Particle Models

新居浜工業高等専門学校数理科

ILC workshop, 2014 年 7 月

素粒子論的な暗黒物質に対する実験的制限を、直接検出実験と加速器実験の両面から総合的に評価した。

[ 区 分 E ]

矢野 潤

NADHとフラビン補酵素を用いた光ガルバニ電池の基礎的研究

矢野 潤\*1, 木谷 皓\*2

\*1新居浜工業高等専門学校数理科, \*2広島大学工学部

第74回分析化学討論会, 日本大学工学部(福島県郡山市), 第74回分析化学討論会講演要旨集, G1006 (2014).

Gustらは色素増感太陽電池と生体関連物質を用いた燃料電池をハイブリット化させた太陽光バイオ燃料電池を考案した。この電池は色素増感太陽電池を異なりカソードの反応を自由に選択でき、通常のバイオ燃料電池に比べ高い出力電圧を得ることが可能である。われわれはこのタイプの電池のカソード反応として水素イオンの還元反応を利用し、常温で水素生成可能な水素改質システムを構築できないかどうか検討している。つまり電池を使用しながらクリーンな燃料である水素を得ようとするものである。バイオ燃料電池の出力特性を向上させるには、糖やエタノールといった生体由来の燃料を酸化する酵素反応を促進させる必要がある。そのためには酸化酵素の必須成分（補酵素）であるNADHがその酸化体（NAD<sup>+</sup>）に変わる電子移動反応を速めなければならない。その電子移動反応を促進させるのに効果があるものとしてキノイミン構造を持つ電子メディエータがある。われわれはメディエータ存在下でNADHに光照射すると、その電子移動反応がさらに高速化することを見出した。そこでここでは、電子メディエータとしてビタミンB2類（フラビンモノヌクレオチド（FMN）、フラビンアデニンヌクレオチド（FAD）、リボフラビン（FR））を用い、それらの存在下でNADHに光照射を行なった。その結果、光電流が得られ光ガルバニ電池が形成されることを確認できた。

陽極にはカーボン電極（電極面積：4.78cm<sup>2</sup>）、陰極には白金板電極（電極面積：8.20cm<sup>2</sup>）を用いた。電解質溶液は、陽極室には0.1M（M=mol・dm<sup>-3</sup>）のKClを含むpH7の緩衝溶液を、陰極室には0.5Mの硫酸水溶液を用いた。NADHの濃度は2mMとした。陽極室と陰極室の電解質溶液は飽和KCl溶液の塩橋で連絡させた。光照射は21Wの蛍光ランプで行い、光電流測定時には負荷として900Ωの外部抵抗を接続させた。

15分ほど窒素置換した2mMのNADHと1mMのFMNを含む溶液に光照射すると光電流が観測され、光ガルバニ電池が形成された。光電流値は照射時間とともに増加し、光照射を停止すると電流は緩やかに減少した。光電流はFMNの濃度とともに増大し、FMNが存在しない場合ほとんど光電流は観測されなかった。光電流は溶存酸素や電子メディエータの種類に影響され、溶存酸素により光電流は減少され、電子メディエータとしてFMNを用いたときに最大の電流が得られた。

## 矢野 潤

### Time Indicator Using Polyaniline and Conventional Transparent Polymer Films

\*1新居浜工業高等専門学校数理科

65th Annual Meeting of the International Society of Electrochemistry, September, Lausanne, Switzerland, Book of Abstracts of 65th Annual Meeting of the International Society of Electrochemistry (CD version), S08-032 (2014)

It is widely accepted that a conductive polymer polyaniline (PANI) shows bright color change between its oxidized and reduced states. The reduced state looks almost colorless, while the oxidized state is green or violet. We have already reported that the reduced PANI is gradually colored when it is exposed to oxygen and the coloration depends on the exposure time. In this paper, using both the reduced PANI and conventional transparent polymer films with different oxygen permeability coefficient, time display materials are prepared and the coloration is monitored.

PANI was easily prepared on a transparent Indium-tin oxide (ITO) electrode as a stable film by oxidative electropolymerization of 0.5 M (M=mol・dm<sup>-3</sup>) aniline in 0.5 M H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> aqueous solution. To obtain colorless reduced PANI, the PANI film-covered ITO electrode was polarized at -0.2 V vs. Ag/AgCl in 0.5 M H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> aqueous solution until the cathodic current reached the background value. Five time indicative materials were prepared by enclosing the reduced PANI film in five types of common transparent polymer films. To take into consideration the oxygen permeability coefficient and the thickness, the following common transparent polymer films were employed: low density polyethylene (LDPE) films with the thickness of 0.03 and 0.08 mm, high density polyethylene (HDPE)

films with the thickness of 0.01 and 0.03 mm, and polypropylene (PP) film with the thickness of 0.026 mm. The color change of the materials was colorless-violet-bluish violet-black violet. The reduced PANI films enclosed in 0.03 mm-thick LDPE and 0.026 mm-thick PP films could be used for 10-day indicative materials. On the other hand, that enclosed in 0.01 mm-thick HDPE was applicable to about 30-day indicative one and those enclosed in 0.03mm-thick HDPE and 0.08 LDPE films are expected to be longer time indicative materials. This approach to prepare time indicative materials could be available using other poly(aniline derivatives) whose color changes are different from PANI as well as transparent polymer films with different oxygen permeability coefficients and thickness.

## 矢野 潤

### NADHモデル化合物と電子メディエータにフラビン類を用いた光ガルバニ電池

矢野 潤\*1, 木谷 皓\*2

\*1新居浜工業高等専門学校数理科, \*2広島大学工学部

平成26年度化学系学協会東北大会, 山形大学工学部 (山形県米沢市), 平成26年度化学系学協会東北大会講演予稿集, 2P186 (2014).

色素増感太陽電池やバイオ燃料電池は次世代のエネルギーとして注目されているが、最近 Gust らは太陽光バイオ燃料電池を考案した。陽極では、色素修飾  $\text{TiO}_2$  電極の太陽光により励起した色素によって NADH が酸化させて  $\text{NAD}^+$  となり、この  $\text{NAD}^+$  を用いて燃料であるアルコールなどを酸化する。陰極では  $\text{H}^+$  の電解還元により水素が得られる。したがって通常の太陽電池や燃料電池に比べて高い出力を得ることが可能である。また電池の放電時に燃料である水素も得られ、結果的に燃料の常温改質も行なえる利点がある。しかしながら  $\text{TiO}_2$  電極などの半導体電極が不可欠で、その表面に照射される光しか利用できない欠点がある。もし電解質溶液中の NADH を  $\text{NAD}^+$  にすることさえできれば、 $\text{NAD}^+$  は基質と酸化還元酵素によって再生できるので、同様な電池を構築できると考えられる。しかしながら電解酸化により NADH を  $\text{NAD}^+$  に変換するためには高い過電圧を要する。

われわれはフラビン類を電子メディエータに用いて光照射すると、この変換が著しく促進されることを見出した。そこで本研究では、NADH のモデル化合物として 1-ベンジル-1, 4-ジヒドロニコチンアミド (BNAH) を、フラビン類としてリボフラビン (RF) を用い、150 W のタングステンランプによる光照射を行なった。なお陽極室と陰極室は塩橋で連絡させ、陽極には  $2 \times 3$  cm の白金板を陰極には  $0.5 \times 2$  cm の白金板を用いた。その結果、RF が電子メディエータとして働き BNAH が酸化された (図1)。他方、陰極室では  $\text{H}^+$  が電解還元されて  $\text{H}_2$  が発生した。照射光の波長依存性を調べた結果、 $\text{BNAH} \rightarrow \text{BNA}^+$  の酸化の促進には RF が励起されることが不可欠であることが分かった。最大出力は  $80 \mu\text{W}$  (短絡電流:  $290 \mu\text{A}$ 、開回路電圧:  $0.86 \text{V}$ ) であり、BNAH 濃度が  $10 \text{mM}$ 、RF 濃度が  $1 \text{mM}$  のときに得られた。

## 柳井 忠

### 数学活用大事典 — 協力校の取り組み

\*新居浜工業高等専門学校数理科

全国高専教育フォーラム (2014. 8)

石川高専を主体校とする高専改革推進経費による事業『オーダーメイド数学活用大事典システム』の構築 (平成 25 ~ 26 年度) の協力教員としての取り組みを報告し、気づきと課題を述べた。校内の専門学科の教員に、数学の応用問題の提供を依頼し、数学教員の立場で解説に手を加えて、専用サイトにアップ

した。提供された問題で使われる数学は、低学年で学習する基本的なものであり、この作業によって、高専における数学の重要性を再認識することになった。事典を橋渡しとして、専門学科と数学の教員が情報共有をしていくことが、この事業のひとつの意義であると言える。今後も校内の教員に呼びかけ、連携を広げていくことが課題となる。

## 安里 光裕

### Full-Potential KKR Calculations for Lattice Distortion of Impurities in Al-based Dilute Alloys, Based on the Generalized Gradient Approximation

C Liu<sup>\*1</sup>, M Asato<sup>\*2</sup>, N. Fujima<sup>\*3</sup>, and T. Hoshino<sup>\*3</sup>

\*1 静岡大学創造科学技術大学院, \*2 新居浜工業高等専門学校数理科, \*3 静岡大学大学院工学研究科  
IUMRS International Conference in Asia 2014(福岡大), 2014年8月26日

We calculate systematically the atomic volume changes caused by impurities in Al, using the formalism given by Kanzaki model. We treat 3d and 4sp impurities (Sc-Cu, Zn-Ge). All the parameters in the Kanzaki model, such as the Hellmann-Feynman (HF) forces and the lattice distortion, are calculated by the ab-initio calculations based on the generalized-gradient approximation in density functional formalism and the full-potential Korringa-Kohn-Rostoker (FPKKR) Green's function method for point defects. The calculated results agree very well, within the error of 5%, with the available experimental results. We found that the calculated results for the HF forces on the 1st-nearest neighboring host atoms around impurities are strongly correlated with the volume changes per impurity in Al. The magnetism of 3d transition-metal impurities (Cr, Mn, Fe) is also discussed.

## 安里 光裕

### 第一原理電子構造計算による Al 中の不純物対の格子歪、磁性と相互作用エネルギー

劉暢<sup>\*1</sup>、安里光裕<sup>\*2</sup>、藤間信久<sup>\*3</sup>、星野敏春<sup>\*3</sup>

\*1 静岡大学創造科学技術大学院、\*2 新居浜工業高等専門学校数理科、\*3 静岡大学大学院工学研究科  
日本金属学会 2014 年秋季大会(名古屋大), 2014 年 9 月 25 日

合金材料開発や高品質化を進める上で、様々な添加元素の効果や役割を調べるため、あるいは、組織の安定性や生成メカニズムを原子レベルで理解するために、多くの実験を必要とする熱力学パラメータを高精度の第一原理計算によって整備することが望まれている。我々のグループでは、添加元素を金属(母体元素 Al, Fe など)に対する不純物原子として扱い、金属中の不純物原子間相互作用エネルギーをフルポテンシャル KKR-Green 関数法の高精度第一原理計算を用いて算出し、周期表に沿ってデータベース化し、あわせて、相互作用のメカニズムを解明するという試みを続けている。不純物原子の 4 体相互作用エネルギーまでを含む実空間のクラスター展開で、Ni, Fe, Al 合金のバンドエネルギー計算で求まる全エネルギーが 1 原子当たり、1mRy 以下の誤差で求まることも示した (Materials Transactions, Vol. 42, No. 11 (2001), 2206; J. Alloys and Compounds, 504s (2010), s534)。今回は、前回の発表に続いて母体元素 Al 中の 1, 2 不純物格子欠陥について調べた。特に Al 中の Cr, Mn, Fe 不純物原子の局所格子歪、磁性、不純物対相互作用エネルギーについての計算結果を報告した。

## 安里 光裕

### 第一原理電子構造計算による Al, Pd 中の単一不純物による局所格子歪と平均体積変化

劉暢<sup>\*1</sup>、安里光裕<sup>\*2</sup>、藤間信久<sup>\*3</sup>、星野敏春<sup>\*3</sup>



\*1 静岡大学創造科学技術大学院、\*2 新居浜工業高等専門学校数理科、\*3 静岡大学大学院工学研究科  
日本金属学会 2015 年春季大会(東京大), 2015 年 3 月 19 日

合金材料開発や高品質化を進める上で、様々な添加元素の効果や役割を調べるため、あるいは、組織の安定性や生成メカニズムを原子レベルで理解するために、多くの実験を必要とする熱力学パラメータを高精度の第一原理計算によって整備することが望まれている。我々のグループでは、添加元素を金属(母体元素 Al、Fe など)に対する不純物原子として扱い、フルポテンシャル KKR-Green 関数法と密度汎関数法の一般化勾配近似(GGA)の高精度第一原理計算を用いて、金属中の不純物原子間相互作用エネルギーを算出し、周期表に沿ってデータベース化し、相互作用のメカニズムを解明するという試みを続けている。不純物原子の 4 体相互作用エネルギーまでを含む実空間のクラスター展開で、Ni、Fe、Al 合金のバンドエネルギー計算で求まる全エネルギーが 1 原子当たり、1mRy 以下の誤差で求まることも示した(Materials Transactions, Vol. 42, No. 11(2001), 2206; J. Alloys and Compounds, 504s (2010), s534)。最近、我々は Pd 母体中の格子欠陥についても研究を始めた。今回は、Al、Pd 中の 4d、5sp 単一不純物による局所格子歪と平均体積変化についての計算結果を報告した。

## 安里 光裕

FPKKR-Green 関数法とクラスター変分法による遠距離原子間相互作用エネルギーを考慮した合金の固溶限の計算

安里光裕\*1、劉暢\*2、藤間信久\*3、星野敏春\*3

\*1 新居浜工業高等専門学校数理科、\*2 静岡大学創造科学技術大学院、\*3 静岡大学大学院工学研究科  
日本金属学会 2015 年春季大会(東京大), 2015 年 3 月 19 日

我々のグループでは、添加元素(または不純物元素)を母体金属元素に対する不純物原子として扱い、母体結晶中の様々な格子欠陥エネルギーをフルポテンシャル(FP)-KKR-Green 関数法の高精度第一原理計算を用いて算出し、周期表に沿ってデータベース化し、あわせて、それらのメカニズムを解明するという試みを続けてきている。今回の講演では、FPKKR-Green 関数法とクラスター変分法(CVM)を組み合わせた自由エネルギーの計算による金属中の不純物元素の固溶限の計算について報告した。

## 松田 一秀

Analogues of Jacobi's derivative formulas

新居浜工業高等専門学校数理科

平成 26 年度日本数学会中国・四国支部例会, 1 月 25 日

テータ関数における Jacobi の微分公式は指標が整数の場合のものだが、指標を有理数の場合に類似の公式を得た。

## 長尾 桂子

Constraints for Dark Matter in Particle Models

新居浜工業高等専門学校数理科

ILC workshop, 2014 年 7 月

概要は前掲

### 長尾 桂子

#### Directional Dark Matter Search and Velocity Distribution

新居浜工業高等専門学校数理科

Interplay between particle and astroparticle physics, 2014年8月

概要は前掲

### 長尾 桂子

#### 方向感度をもつ暗黒物質検出実験における速度分布の制限

新居浜工業高等専門学校数理科

瀬戸内サマーインスティテュート, 2014年9月

概要は前掲

### 長尾 桂子

#### 到来方向情報を含めた非弾性暗黒物質の検出

新居浜工業高等専門学校数理科

日本物理学会, 2014年9月

概要は前掲

### 長尾 桂子

#### Directional Dark Matter Search and Velocity Distribution

新居浜工業高等専門学校数理科

2nd International Workshop on Particle Physics and Cosmology after Higgs and Planck,  
2014年10月

概要は前掲