

〔数 理 科〕

〔区 分 A〕

川崎 宏一

Factors affecting texture memory appearing through $\alpha \rightarrow \gamma \rightarrow \alpha$ transformation in IF steels

N. Yoshinaga^{*1}, H. Inoue^{*2}, K. Kawasaki^{*3}, L. Kestens^{*4} and B. C. De Cooman^{*4}

^{*1}Steel Research Labs., Nippon Steel Corp., ^{*2}Dep. Materials Science, Osaka Prefecture Univ., ^{*3}Niihama National College of Tech., ^{*4}Dep. Metallurgy and Materials Science, Univ. Ghent

Mater. Trans. JIM Vol.48, No. 8, pp 2036~2042, (2007.8)

一般的に鋼の α 域の集合組織は $\alpha-\gamma-\alpha$ 変態でかなり弱化する。しかし、特別な条件下では変態後の集合組織は当初の集合組織に明らかに類似するが、著者等はこの現象を "texture memory" と呼ぶこととする。際立った texture memory 効果は IF 鋼で見られ、 $\gamma-\alpha$ 変態温度を低下させると texture memory が強化される。 γ 粒界における variant 選択が重要な役割を果たしていると思われる。また、texture memory の発現のためには当初の α 域集合組織が鋭くなければならない、と考えられる。

矢野 潤

Poly(*N*-methylaniline) microsphere formation and control of the average diameter by simple chemical polymerization

J. Yano^{*1}, K. Sanada^{*2}, R. Patil^{*2}, Y. Ooyama^{*2}, K. Komaguchi^{*2} and Y. Harima^{*2}

^{*1}新居浜工業高等専門学校数理科、^{*2}広島大学工学部

Materials Chemistry and Physics, 106(2-3), 279-285 (2007).

Microspheres of conducting poly(*N*-methylaniline)(PNMA) were successfully synthesized in aqueous solutions through chemical polymerization using only *N*-methylaniline as monomer, acid and oxidant without any templates. The microspheres were obtained only from acid solutions containing highly lyophilic anions such as ClO_4^- , BF_4^- and adipate ions. Several oxidants were employed and $(\text{NH}_4)_2\text{S}_2\text{O}_8$ was found to be the most appropriate for the microsphere formation. The average diameter of the microspheres with smooth surfaces was $0.38 \mu\text{m}$ when 25mM *N*-methylaniline was oxidized with 25mM $(\text{NH}_4)_2\text{S}_2\text{O}_8$ in 25mM adipic acid solution at 25°C. Although the average diameter was barely influenced by the acid concentration of the polymerizing solution, it could be controlled by three parameters: monomer concentration, reaction time and temperature. It was found further that the acid concentration is critical for the formation of the microspheres with smooth surfaces. The smooth surfaces were observed only when the acid concentration was less than 50 mM.

矢野 潤

Dispersed platinum and tin polyaniline film electrodes for the anodes of the direct methanol fuel cell

J. Yano^{*1}, T. Shiraga^{*2} and A. Kitani^{*2}

^{*1}新居浜工業高等専門学校数理科、^{*2}広島大学工学部

Journal of Solid State Electrochemistry, on-line version, 10.1007/s10008-007-0469-z

To develop better and cheaper electrocatalysts for the oxidation of methanol in direct methanol

fuel cells (DMFCs), several combinations of a conductive polymer polyaniline (PANI) and dispersed metal particles such as Pt and Sn were examined. The anodic current for the methanol oxidation (i_{MeOH}) showing the electrocatalytic activity of Pt particles was remarkably enhanced when the particles were dispersed on PANI films that should provide higher surface areas for the dispersed particles. The activity strongly depended on the morphology and the electric conductivity of the PANI films electropolymerized in five different acid solutions: H_2SO_4 , HNO_3 , HClO_4 , HBF_4 and HCl . The highest activity was achieved using the dispersed Pt particle PANI film electropolymerized from H_2SO_4 polymerizing solution. In order to reduce the dispersed amount of the expensive Pt particles, other metal particles were pre-dispersed on the PANI film prepared from the H_2SO_4 polymerizing solution, and then Pt particles were dispersed on the film. Among the pre-dispersed metal particles attempted here (Sn, Cu, Cr, Ni, In, Co, Sb, Bi, Pb and Mn), the highest activity was obtained with Sn particles. When the ratio of dispersed Pt to Sn particles ranges from 32: 68 to 100:0, i_{MeOH} is higher than that measured with the dispersed Pt particle PANI films without the Sn particles. This means that the dispersed amount of the Pt particles could be reduced by utilizing dispersed Sn particles.

柳井 忠

T A 学生による低学年学生への学習支援制度改善の取り組み

柳井 忠*

*新居浜工業高等専門学校数理科

論文集「高専教育」・第31号・729-734・2008.3

新居浜高専では低学年学生への学習支援として、上級生のティーチングアシスタント (T A) による補習 (T A 補習) が平成10年度から実施されている。成績不振学生に少人数の行き届いた学習支援を目的としていたが、平成16年度までは参加状況や出席率は決して良いものでなく、有効に活用されているとは言えない状況にあった。その状況を改善するため、学生の参加意識を高める取り組みを平成17年度より行った。2年間の取り組みを報告し、その成果を参加人数、出席率の推移や学生アンケート等をもとに検証するとともに、補習の有用性を考察した。

柳井 忠

高専第3学年学習到達度試験 (数学) の実施と評価について

佐藤義隆^{*1}、梅野善雄^{*2}、長水壽寛^{*3}、松田 修^{*4}、柳井 忠^{*5}

*¹東京工業高等専門学校一般科目、*²一関工業高等専門学校一般科目、*³福井工業高等専門学校一般教科自然科学系、

*⁴津山工業高等専門学校一般科目、*⁵新居浜工業高等専門学校数理科

論文集「高専教育」・第31号・583-588・2008.3

平成19年1月に国立高専機構により高専第3学年の数学到達度試験 (試行) が実施され、全国の国立高専55校9428名の学生が受験した。この試験の実行委員である著者5名が、問題作成までの経緯と出題の意図を述べ、試験結果から見えてくる国立高専の学生の現状を高専教員の視点で分析し、今後の課題を提唱した。

大村 泰

PLL回路を用いた単相回路における簡易な有効・無効電流検出法

大村 泰^{*1}、平木英治^{*2}、田中俊彦^{*2}

*¹新居浜工業高等専門学校数理科、*²山口大学大学院理工学研究科情報デザイン工学系学域

電気学会論文誌D分冊、第127巻、pp.538-539、(2007.5)

本稿では、電力用アクティブフィルタで電源電圧を検出する際に広く用いられている PLL 回路を用いた簡易な単相回路の有効・無効電流検出法を提案している。PLL 回路出力の sin 成分および cos 成分と、実際に検出した負荷電流を乗算し、有効・無効電流成分を LPF を用いて抽出する点に特長があり、それぞれ 2 個の乗算器と 1 つの LPF により有効・無効電流を検出できる。提案した有効・無効電流検出法を電力用アクティブフィルタに応用し、その有効性を計算機シミュレーションにより確認している。

大村 泰

A Novel Real-Time Detection Method of Active and Reactive Currents for Single-Phase Active Power Filters

Yasushi Omura^{*1}, Norio Ishikura^{*2}, Eiji Hiraki^{*2}, Toshihiko Tanaka^{*2}, Masayoshi Yamamoto^{*3}

^{*1}Niihama National College of Technology, ^{*2}Yamaguchi University, ^{*3}Shimane University

in Proc. IEEE Power Electronics Specialists Conference (PESC), pp.2933-2938, 2007.

This paper proposes the simplest real-time detection method of the fundamental active and reactive currents in single-phase circuits. The proposed method uses only four multipliers and two LPFs for detecting the fundamental active and reactive currents with a PLL circuit. The basic principle of the proposed detection method is discussed in detail, and the proposed method is applied to a previously proposed single-phase shunt active filter for consumer electronic equipment. Digital computer simulation is used to confirm the validity of the proposed detection method. A reduce-scale experimental model is constructed and tested. Experimental results demonstrate the excellent practicability of the proposed detection method.

安里 光裕

Ab-initio Data for Interatomic interactions in Zr-rich ZrCu alloys and Embedded-atom-method Potentials

M. Asato^{*1}, R.Tamura^{*2}, N. Fujima^{*2}, and T. Hoshino^{*3}

^{*1}新居浜工業高等専門学校数理科、^{*2}静岡大学工学部、^{*3}静岡大学創造科学技術大学院

Materials Science Forum, vol.561-565, pp.1259-1262 (2007).

The quantitative study for the stability of local atomic structures in bulk metallic glasses (BMGs) with temperature effect on physical quantities of BMGs needs the molecular dynamics simulation with the reliable interaction parameter model such as the Embedded-atom-method potentials (EAMPs) which reproduce the ab-initio data as well as the experimental data. We present the ab-initio data for inter-atomic interactions of Zr-rich ZrCu alloys and a preliminary result for the EAMPs of Zr-rich ZrCu alloys.

(区 分 B)

矢野 潤

最新導電性材料技術大全集-設計・配合から応用事例まで-

矢野 潤^{*1} 他 (分担執筆)

^{*1}新居浜工業高等専門学校数理科

最新導電性材料技術大全集-設計・配合から応用事例まで-(技術情報協会 発行)

第 1 章 第 4 節、導電性高分子の燃料電池への応用、pp. 51-71 (2007)

燃料電池にはいくつかのタイプがあり、それぞれについて一長一短があり、その短所を克服するために数々の研究・開発がなされてきている。その中であって、固体高分子型の燃料電池 (Polymer Electrolyte

Fuel Cell、PEFC) は、1) 大気中において使用できない、2) 大きな装置スペースが必要である、3) 運転温度が高すぎて定置型にならざるを得ない、などの制約がいたため、電気自動車用のクリーンかつ高出力の駆動電源、携帯電話、携帯オーディオ機器、ノートパソコンなどのポータブル電子機器用電源、家庭定置用コージェネレーション用として適している燃料電池の一つである。これらの用途は現在も普及が進んでいるとともに、これからの発展も見込まれる分野である。PEFCの中で現在、次世代のモバイル電源として最も期待されているのが直接酸化型メタノール燃料電池(Direct Methanol Fuel Cell、DMFC)である。そこでここでは導電性高分子のエネルギー関連材料への応用の一例として、DMFCへの応用に関する著者らの研究を中心に解説する。まず燃料電池の概要について触れたのち、導電性高分子/白金電極のDMFCへの応用、卑金属複合化電極のDMFCへの応用、導電性高分子のビタミンC(アスコルビン酸)燃料電池への応用、の4項目について著者らの研究を紹介し解説した。

(区 分 C)

川崎 宏一

Al合金溶湯中に形成される気泡の直接観察

I.Ohnaka^{*1}, H.Yasuda^{*2}, K.Kawasaki^{*3}, A.Sugiyama^{*1}, T.Nagira^{*2}, K.Umetani^{*4} and S.Nishijima^{*2}

^{*1}Dep. Entrepreneur, Osaka Sangyo Univ., ^{*2}Dep. Adaptive Machine Systems, Osaka Univ., ^{*3}Niihama National College of Tech., ^{*4}Japan Synchrotron Radiation Research Inst. SPring-8, SPring-8 User Experiment Report, Web Report2007, 2007A 1453.

純Al溶湯中における気泡の生成を観察することができた。今回の実験条件(試料厚さ10mm程度)であれば、十分な空間分解能と時間分解能で観察可能であることがわかった。しかしながら、気泡生成のためには想定以上に高い圧力が必要であることがわかった。これは、酸化皮膜の影響が大きいと考えられる。従って、ガスの導入部を酸化皮膜の生じていない溶湯内部に浸漬させて、安定的かつ容易に気泡生成できるような実験方法の工夫が必要である。

矢野 潤

直接酸化型メタノール燃料電池用電極としてのPtおよびSnを分散固定化させたポリアニリン電極

矢野 潤^{*1}、白鹿智久^{*2}、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68回分析化学討論会講演要旨集、P. 119 (2007)

Ptを分散させる代わりに、他の安価な金属を分散させても同等な触媒活性が得られるならば、Ptの分散量を軽減させることができる。そこで、Mn、Pb、Bi、Sb、Co、In、Cr、Cu、SnとPtを共に電析させてメタノールの酸化電流を測定した結果、Snが最も高い触媒活性を示した。さらに図に示すように、Ptのみ分散固定化させるよりもその電流値は増加した。またPANIが存在させると、その相乗効果によりさらに電流値は増大した。なお、硫酸水溶液から得られたPANIにPtを分散させたものが、メタノールの電解酸化に対する触媒活性が最大であった。

矢野 潤

Platinum and tin particle-dispersed polyaniline electrodes for the anodes of the direct methanol fuel cell

J. Yano^{*1}, T. Shiraga^{*2} and A. Kitani^{*2}

¹新居浜工業高等専門学校数理科、^{*2}広島大学工学部

Book of Abstracts of 58th Annual Meeting of the International Society of Electrochemistry, SP-31

(2007).

To develop better and cheaper electrocatalysts for the oxidation of methanol in direct methanol fuel cells (DMFCs), several combinations of a conductive polymer poly-aniline (PANI) and dispersed metals such as Pt and Sn were examined. The anodic current for the methanol oxidation (i_{pa}) showing the electrocatalytic activity of Pt particles was remarkably enhanced when the particles were dispersed on PANI films that should provide higher surface areas of the dispersed particles (dispersed amount of Pt: $179 \mu\text{g cm}^{-2}$). The activity strongly depended on the morphology and the electric conductivity of the PANI films electropolymerized in five different acid solutions: H_2SO_4 , HNO_3 , HClO_4 , HBF_4 and HCl . The highest activity was achieved using the Pt particle-dispersed PANI film electropolymerized from the H_2SO_4 polymerizing solution. In order to reduce the dispersed amount of the expensive Pt particles, another metal particles were pre-dispersed on the PANI film prepared from the H_2SO_4 polymerizing solution, and then Pt particles dispersed on it. Among the pre-dispersed metals attempted here (Sn, Cu, Cr, Ni, In, Co, Sb, Bi, Pb and Mn), the highest activity was obtained for Sn. Figure 1 shows how the dispersed amount ratio of Pt to Sn influences i_{pa} . The dispersed ratio was controlled by the charge passed during the metal electrodeposition. When the ratio of Pt to Sn ranges from 32: 68 to 100:0, i_{pa} is higher than that measured with the Pt particle-dispersed PANI without Sn. This means that the dispersed amount of Pt particles could be reduced by dispersing Sn particles.

(区 分 E)

矢野 潤

直接酸化型メタノール燃料電池用電極としてのPtおよびSnを分散固定化させたポリアニリン電極

矢野 潤^{*1}、白鹿智久^{*2}、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68回分析化学討論会 2007年5月

Ptを分散させる代わりに、他の安価な金属を分散させても同等な触媒活性が得られるならば、Ptの分散量を軽減させることができる。そこで、Mn、Pb、Bi、Sb、Co、In、Cr、Cu、SnとPtを共に電析させてメタノールの酸化電流を測定した結果、Snが最も高い触媒活性を示した。さらに図に示すように、Ptのみ分散固定化させるよりもその電流値は増加した。またPANIが存在させると、その相乗効果によりさらに電流値は増大した。なお、硫酸水溶液から得られたPANIにPtを分散させたものが、メタノールの電解酸化に対する触媒活性が最大であった。

矢野 潤

Platinum and tin particle-dispersed polyaniline electrodes for the anodes of the direct methanol fuel cell

J. Yano^{*1}, T. Shiraga^{*2} and A. Kitani^{*2}

^{*1}新居浜工業高等専門学校数理科、^{*2}広島大学工学部

58th Annual Meeting of the International Society of Electrochemistry 2007年9月

To develop better and cheaper electrocatalysts for the oxidation of methanol in direct methanol fuel cells (DMFCs), several combinations of a conductive polymer poly-aniline (PANI) and dispersed metals such as Pt and Sn were examined. The anodic current for the methanol oxidation (i_{pa}) showing the electrocatalytic activity of Pt particles was remarkably enhanced when

the particles were dispersed on PANI films that should provide higher surface areas of the dispersed particles (dispersed amount of Pt: $179 \mu\text{g cm}^{-2}$). The activity strongly depended on the morphology and the electric conductivity of the PANI films electropolymerized in five different acid solutions: H_2SO_4 , HNO_3 , HClO_4 , HBF_4 and HCl . The highest activity was achieved using the Pt particle-dispersed PANI film electropolymerized from the H_2SO_4 polymerizing solution. In order to reduce the dispersed amount of the expensive Pt particles, another metal particles were pre-dispersed on the PANI film prepared from the H_2SO_4 polymerizing solution, and then Pt particles dispersed on it. Among the pre-dispersed metals attempted here (Sn, Cu, Cr, Ni, In, Co, Sb, Bi, Pb and Mn), the highest activity was obtained for Sn. Figure 1 shows how the dispersed amount ratio of Pt to Sn influences i_{pa} . The dispersed ratio was controlled by the charge passed during the metal electrodeposition. When the ratio of Pt to Sn ranges from 32: 68 to 100:0, i_{pa} is higher than that measured with the Pt particle-dispersed PANI without Sn. This means that the dispersed amount of Pt particles could be reduced by dispersing Sn particles.

柳井 忠

国立高等専門学校学習到達度試験（数学）の実施と評価について

佐藤義隆*1、梅野善雄*2、長水壽寛*3、松田 修*4、柳井 忠*5

*1東京工業高等専門学校一般科目、*2一関工業高等専門学校一般科目、*3福井工業高等専門学校一般教科自然科学系、

*4津山工業高等専門学校一般科目、*5新居浜工業高等専門学校数理科

日本数学教育学会第89回総会高専・大学部会（2007.8）

平成19年1月に実施された高専第3学年の数学到達度試験（試行）について、実施までの経緯を踏まえながら、各出題領域の出題意図のねらいについて解説し、試験データの分析結果について報告した。あわせて今後に向けての課題を述べた。

大村 泰

単相回路における簡易な有効・無効電流検出法

大村 泰*1、石倉規雄*2、平木英治*2、田中俊彦*2、山本真義*3

*1 新居浜工業高等専門学校数理科、*2山口大学大学院理工学研究科情報デザイン工学系学域、*3島根大学総合理工学部電気電子システム工学科

電子情報通信学会エネルギー技術研究会資料、Vol.107、No.149、pp.39-44、(2007.7)

本稿文では、単相回路におけるより簡単な有効・無効電流検出法を提案する。提案法においては、アクティブフィルタの制御回路に一般的に使用される PLL 回路の出力を用い、4つの乗算器と2つの LPF のみで有効・無効電流が検出できる。これは、単相回路での有効・無効電流検出法において著者らが知る限り最も簡単で安定な手法であり、三相回路の瞬時有効・無効電力理論のように瞬時に単相回路の基本波有効・無効電流成分を検出することが出来る。ここでは、この有効・無効電流検出方式の基本的な原理について詳細に検討している。そして、本方式を以前から提案している"家電機器が発生する高調波電流補償を目的とした単相アクティブフィルタに応用し、その制御性について検討を行った。デジタルシミュレーションおよび縮小変圧器モデルによる実験結果により、本方式が非常に有効かつ実用的であることを明らかにしている。

安里 光裕

FP-KKR & GGA の第一原理計算によるフルホイスラー合金 X_2YZ ($\text{X}=\text{Co}, \text{Ru}$; $\text{Y}=\text{Cr}, \text{Mn}$; $\text{Z}=\text{Al}, \text{Si}$) の電子構造・磁性：I. 母体の電子構造・磁性

星野敏春*1、中村文滋*2、安里光裕*3、大久保雅史*4、立岡浩一*4

*¹静岡大学創造科学技術大学院、*²産業総合研究所、*³新居浜工業高等専門学校数理科、*⁴静岡大学工学部

日本金属学会2007年秋季大会 2007年9月21日

ホイスラー合金はスピントロニクス用材料として期待されているが、その磁気特性は格子欠陥（原子位置交換、磁気モーメント反転）に強く影響される。本研究目的は、密度汎関数法の一般化勾配近似を用いる計算で格子定数も決定し、母体の磁性とそれに及ぼす格子欠陥効果を系統的に調べ、スピントロニクス用材料設計のための理論的指針を与えることである。本講演では、 Co_2CrAl 、 Co_2MnSi の中の格子欠陥エネルギーの計算の結果を報告した。また、母体磁気特性について系統的に説明した。

安里 光裕

FP-KKR & GGA 計算によるフルホイスラー合金 X_2YZ ($\text{X}=\text{Co}, \text{Ru}$; $\text{Y}=\text{Cr}, \text{Mn}$; $\text{Z}=\text{Al}, \text{Si}$)の電子構造・磁性：II. 原子位置交換とスピン反転効果

中村文滋*¹、安里光裕*²、星野敏春*³、大久保雅史*⁴、立岡浩一*⁴

*¹産業総合研究所、*²新居浜工業高等専門学校数理科、*³静岡大学創造科学技術大学院、*⁴静岡大学工学部

日本金属学会2007年秋季大会 2007年9月21日

ホイスラー合金の磁気特性は、格子欠陥（原子位置交換、磁気モーメント反転）に強く影響されるため、格子欠陥効果の定量的研究が重要である。本講演では、 Co_2MnSi 、 Co_2CrAl の母体磁性に及ぼす格子欠陥効果について報告した。本研究の計算方法の大きな特徴は、格子欠陥系の電子構造が、母体の電子構造と同じ計算精度で求められることである。また、dilute-limitからのクラスター展開法による規則合金の相互作用研究の応用として、Co-bcc母体中のMn-Mn交換エネルギーの距離依存性も調べ、Co系フルホイスラー合金の磁性の特徴を明らかにした。

安里 光裕

Ab-initio Data for Interatomic interactions in Zr-rich ZrCu alloys and Embedded-atom-method Potentials

M. Asato*¹, R. Tamura*², N. Fujima*², and T. Hoshino*³

*¹新居浜工業高等専門学校数理科、*²静岡大学工学部、*³静岡大学創造科学技術大学院

The Sixth Pacific Rim International Conference on Advanced Materials and Processing (PRICM6)
2007年11月8日

The quantitative study for the stability of local atomic structures in bulk metallic glasses (BMGs) with temperature effect on physical quantities of BMGs needs the molecular dynamics simulation with the reliable interaction parameter model such as the Embedded-atom-method potentials (EAMPs) which reproduce the ab-initio data as well as the experimental data. We present the ab-initio data for inter-atomic interactions of Zr-rich ZrCu alloys and a preliminary result for the EAMPs of Zr-rich ZrCu alloys.

安里 光裕

GGA & FP-Screened-KKRの第一原理計算によるフルホイスラー合金 X_2MnY ($\text{X}=\text{Co}, \text{Ni}, \text{Ru}$; $\text{Y}=\text{Al}, \text{Si}, \text{Ge}$)の磁性

星野敏春*¹、安里光裕*²、大久保雅史*³、藤間信久*³、立岡浩一*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静岡大学工学部

日本金属学会2008年春季大会 2008年3月28日

ホイスラー強磁性合金はスピントロニクス用材料、形状記憶合金として期待されているが、その強磁性は原子位置交換に強く影響される。これまでに、 Co_2MnSi 、 Ni_2MnAl 、 Ru_2MnSi の母体磁性の特徴がGGA&FP-Screened-KKR法の計算で再現されることを示してきた。計算は非磁性、強磁性、反強磁性

(AF-I、AF-II)で行った。AF-I(AF-II)は(001)((111))面内でMn 磁気モーメントが強磁性的に結合し、隣接面間で反強磁性的に結合している。本講演では、これらの系の原子間相互作用の特徴を合金の凝集エネルギーのクラスター展開の方法で調べた結果について報告した。

安里 光裕

KKR-Green関数法による鉄中の不純物原子間相互作用エネルギーの第一原理計算 ～不純物元素がSc, Ti, La, Nd, Bi等の場合～

安里光裕*1、星野敏春*2、川上和人*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新日本製鐵(株)

日本金属学会2008年春季大会 2008年3月28日

鉄系の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・役割を調べるため、あるいは、組織の安定性や生成の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理論計算によって整備することが望まれている。本講演では、不純物元素がSc, Ti, La, Nd, Bi等の場合について報告した。これらの元素では、浅い内殻電子(例えば、Scの場合は3p電子)が不純物原子間相互作用エネルギーに及ぼす影響が無視できないため、価電子として取り扱う必要があることを示した。また、鉄は低温でbcc構造、高温でfcc構造をとるため、両者の結果、および、不純物原子間相互作用エネルギーの原子間距離依存性についても合わせて報告した。