

文字数	アウトライン
51	▼ \subsection{SiC結晶多形における熱膨張率}\label{SiC結晶多形における熱膨張率}
14	▼ \paragraph{背景}
314	<ul style="list-style-type: none"> \ref{ZrCr2Laves相のphonon計算による高温安定性}節では、ZrCr\$_{2}\$ Laves相の各格子モデルに対する自由エネルギーを算出し、有限温度における相安定性を示した。しかし、実験結果と計算結果で、一部整合しない点が見受けられた。この一因として熱膨張を考慮していないことが考えられる。 <p>相安定性の議論の際、自由エネルギー算出に用いたMedeA-Phononは、熱振動効果を加味するものの、熱膨張は取り入れることができない。本節では3C、4H-SiCを計算対象とし、このMedeA-Phononを使って、作為的な格子定数変化から、ある温度域での最安定構造を求めることで、算出した熱膨張率を紹介する。</p>
14	▼ \paragraph{手法}
493	<ul style="list-style-type: none"> 3C-SiCは\$c/a\$比が1となり、立方晶を形成する。それに対し、4H-SiCは、VASPで構造最適化を行うと、\$c/a\$比が3.10となる。したがって熱膨張を議論する際、3C-SiCは\$a\$軸、\$c\$軸方向に等倍率な線形膨張を考えればよいが、4H-SiCは\$a\$軸と\$c\$軸の線形膨張率が異なる。 <p>今回利用したMedeA-Phononは一定体積のもと、系の自由エネルギーの温度依存性を計算する。そこで3C-SiCは\$a\$軸、\$c\$軸方向に等倍率で格子定数を変化させ、各モデルの自由エネルギーを求め、各温度での最適な構造を検証し、熱膨張率を求めた。4H-SiCは\$a\$軸、\$c\$軸方向を別々に格子定数を変化させ、各温度における自由エネルギーの格子定数依存性を表すエネルギーサーフェイスを描いた。そしてその極小値をとる格子定数を算出し、各温度における最適なモデルを求めることから、\$a\$軸、\$c\$軸各々に対する線形膨張率の温度依存性を求めた。</p> <p>%そこで作為的に格子定数を変化させ、各モデルの自由エネルギーを算出することから、各温度での最適な構造を検証し、熱膨張率を求めた。</p>
26	▶ \if0 \begin{figure}[htbp]
14	▼ \paragraph{結果}
242	<ul style="list-style-type: none"> 図\ref{3C_Thermal_Energy_Surface}は各温度における3C-SiCの自由エネルギーの格子定数依存性を示している。横軸とした\$a/a_{0}\$における、\$a_{0}\$は零点振動を加味していない基底状態における格子定数、\$a\$はある温度における最適な構造の格子定数を示している。各温度の自由エネルギー曲線における極小値は、平衡格子定数における自由エネルギーを示している。これによると温度の上昇とともに、平衡格子定数も増加し、熱膨張を再現している。
21	▶ \begin{figure}[htbp]
245	<ul style="list-style-type: none"> 一方、図\ref{4H_Thermal_Energy_Surface}は各温度における4H-SiCの自由エネルギーの\$a\$軸、\$c\$軸の依存性を示している。すべての温度域において、基底状態における平衡格子定数（\$(a/a_{0}, c/c_{0})=(1.0,1.0)\$）を青点、(a)500K (b)1000K (c)1500Kにおける平衡格子定数を赤点で示している。こちらも3C-SiCと同様に、温度上昇とともに平衡格子定数が推移し、熱膨張を再現していることがわかる。
21	▶ \begin{figure}[htbp]
262	<ul style="list-style-type: none"> 図\ref{SiC_Thermal_Expansion}は、図\ref{3C_Thermal_Energy_Surface}と図\ref{4H_Thermal_Energy_Surface}で示した各温度域の平衡格子定数を用いて求めた(a)3C (b)4H-SiCにおける線形膨張率と、実験的に報告されている線形膨張率を示している。両図とも実験値と計算値の最大の差分は0.03\%ほどであり、計算値と実験値が非常に良く整合している。また4H-SiCの熱膨張に関して、\$a\$軸が\$c\$軸よりも膨張しやすいという知見を得た。
21	▶ \begin{figure}[htbp]