

21	▼	\subsection{Phonon計算}
313	•	<p>ここでは、\ref{ZrCr2Laves相のphonon計算による高温安定性}節、\ref{SiC結晶多形における熱膨張率}節で用いたPhonon-DOS法を紹介する。 Phonon-DOS法とは基底状態におけるPhonon分散曲線（図\ref{Phonon_Dispersion_DOS}(a)）を求め、それを積分することによってPhonon-DOSを算出し、熱振動自由エネルギーを求める手法である。 このルーチンは、VASPのモデル構築前処理ソフトであるMedaAに組み込まれている。 Phonon計算自身はParlinskiが開発し、フリーソフトとして公開されている直接法を採用している\cite{Parlinski}.</p>
115	•	<p>直接法は、単純に一個の原子を平衡位置から微少量だけ動かし、その時のエネルギー変化を微分し、原子間の力定数を求める。 そしてその力定数から振動数ωのPhonon分散曲線を描き、Phonon-DOSを求める手法である。</p>
413	•	<p>Phonon-DOS$n(\omega)$から自由エネルギーFを導出する関係式は</p> $F(a,T)=E(a)+k_B T \int_0^\infty n(\omega) \ln \left[2 \sinh \left(\frac{\hbar \omega}{2 k_B T} \right) \right] d\omega$ <p>\label{Phonon_DOS_Method} \end{equation}</p> <p>となる。ωはk-spaceにおける振動数、$E(a)$は系の静止エネルギー、aはそのときの格子定数、k_Bはボルツマン定数、Tは温度である。 \hbarはプランク定数hを2πで割った定数である \cite{Kittel05}\cite{Nagai05}.</p>
339	•	<p>式(\ref{Phonon_DOS_Method})で明示したように、Phonon-DOS法から算出する自由エネルギーは、格子定数aと温度Tを変数パラメータとしている。 つまり、基底状態における系のエネルギー、およびPhonon-DOSを決定できる高精度な第一原理計算と、Phonon-DOS法を組み合わせると、結晶格子の格子モデルさえ設定すれば、その系における自由エネルギーの温度依存性を算出できることを意味する。 これを利用すると、同様の結晶格子において、格子定数などを意図的に操作し、各々のモデルにおける自由エネルギーの温度依存性を求めると、ある温度での最安定構造を決定でき、結晶多形等の相安定性のみならず、熱膨張率や体積弾性率などの諸物性も求めることが出来る。</p>
220	•	<p>\begin{figure}[htbp] \begin{center} \includegraphics[width=11cm]{./yamamoto/Figure/Phonon_Dispersion_DOS.jpg} \caption{アルミニウムにおける(a) Phonon分散曲線, (b) Phonon-DOS. } \label{Phonon_Dispersion_DOS} \end{center} \end{figure}</p>
26	▼	\begin{thebibliography}{9}
95	•	<p>\bibitem{Parlinski} K. Parlinski, Z. Q. Li, and Y. Kawazoe: Phys. Rev. Lett.78(1997) 4063-4066.</p>
82	•	<p>\bibitem{Kittel05} C.Kittel著, 宇野良清, 津屋昇, 新関駒二郎, 森田章, 山下次郎訳 (2005), 『キッテル 固体物理学入門』, 丸善株式会社.</p>
62	•	<p>\bibitem{Nagai05} 沼居貴陽著 (2005), 『固体物理学演習 キッテルの理解を深めるために』, 丸善株式会社.</p>
21	•	\end{thebibliography}