

計算サイズ[]	格子定数[Å]	全エネルギー[a.u.]	単位格子あたりのエネルギー[eV/cell]
21.5	5.375	35.13736796	14.93975003
21.6	5.4	34.95552107	14.86243214
21.7	5.425	34.80775323	14.79960403
21.8	5.45	34.69499264	14.75166034
21.9	5.475	34.61242222	14.71655294
22	5.5	34.56223474	14.69521417
22.1	5.525	34.54484707	14.68782126
22.2	5.55	34.55881025	14.69375814
22.3	5.575	34.60211769	14.71217165
22.4	5.6	34.67323353	14.74240877
22.5	5.625	34.77230597	14.78453252

近似二次曲線

a[eV/cell/ /]

b[]

a[J/cell/m/m]

10.662

117.89

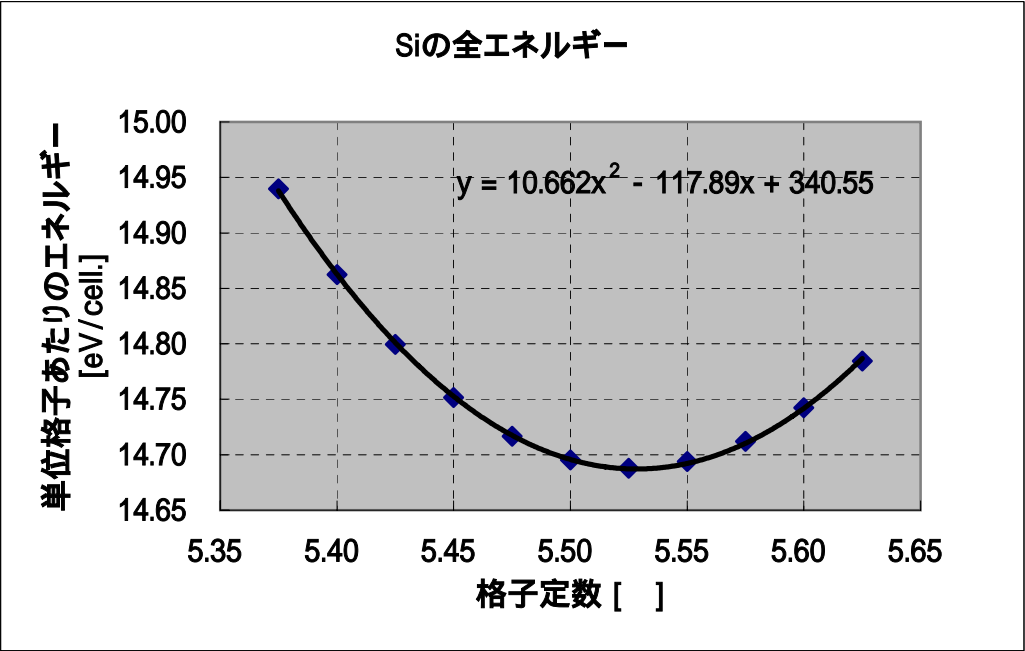
170.8241402

格子定数

5.53

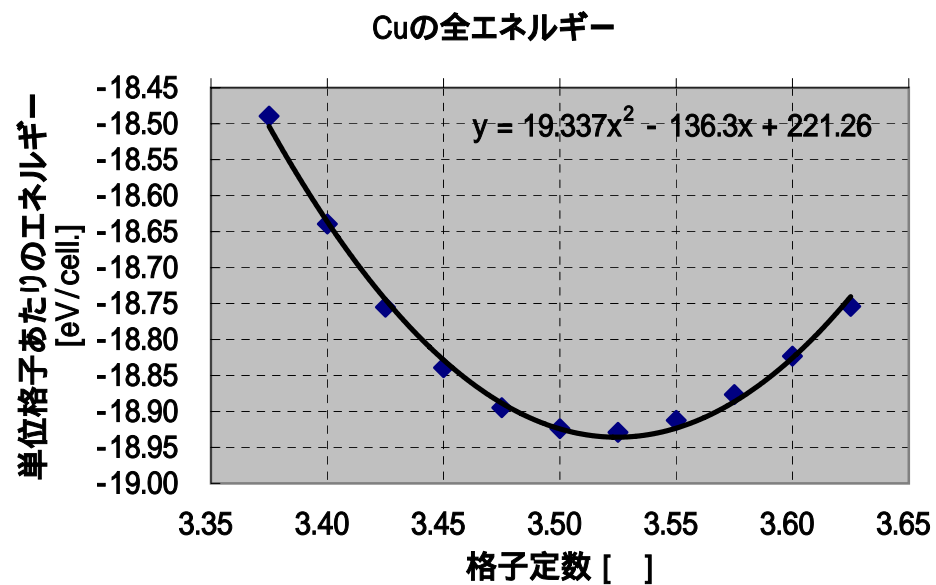
体積弾性率[GPa]

68.66



計算サイズ[]	格子定数[Å]	全エネルギー[a.u.]	単位格子あたりの エネルギー[eV/cell]
13.5	3.375	-43.48573263	-18.48931816
13.6	3.4	-43.83849134	-18.63930454
13.7	3.425	-44.11059535	-18.75499807
13.8	3.45	-44.30872812	-18.83924041
13.9	3.475	-44.43914246	-18.89469014
14	3.5	-44.50772515	-18.92385021
14.1	3.525	-44.52005387	-18.92909215
14.2	3.55	-44.4808753	-18.91243416
14.3	3.575	-44.3965054	-18.87656166
14.4	3.6	-44.27086559	-18.82314197
14.5	3.625	-44.10831088	-18.75402675

近似二次曲線	a[eV/cell/ /]	19.337
	b[]	136.3
	a[J/cell/m/m]	309.8130181
格子定数		3.52
体積弾性率[GPa]		195.35



計算サイズ[]	格子定数[Å]	全エネルギー[a.u.]	単位格子あたりのエネルギー[eV/cell]
19	3.8	2.02270316	0.440327914
19.1	3.82	1.323708131	0.288161729
19.2	3.84	0.791346259	0.172270383
19.3	3.86	0.410702469	0.08940697
19.4	3.88	0.177708407	0.038685841
19.5	3.9	8.47E-02	0.018439708
19.6	3.92	0.122798195	0.026732283
19.7	3.94	0.283567155	0.061730528
19.8	3.96	0.558792749	0.121645158
19.9	3.98	0.940623204	0.204766899
20	4	1.421520625	0.309454805

近似二次曲線

a[eV/cell/ /]

b[]

a[J/cell/m/m]

35.636

278.51

570.9518909

格子定数

3.91

体積弾性率[GPa]

324.69

