

非調和振動の効果を入れた有限温度自由エネルギー計算

関西学院大・理工

榊原健，西谷滋人

Free energy calculation of finite temperature with anharmonic effects.

Department of Informatics, Kwansei Gakuin Univ,

K. Sakakibara, and S. R. Nishitani

材料設計において系の有限温度における自由エネルギーの変化はもっとも重要な物性値である．第一原理計算ソフト VASP(Vienna ab initio simulation package) では，擬調和振動子近似に基づいた phonon 計算パッケージが開発されており，自由エネルギーを見積もることができる [1]．しかし，Ti 結晶での相変態温度近傍での振る舞いにおいて実験を再現する結果が得られない．これは非調和の項の影響が大きいと考えられる．

Vu Van Hung らが開発した Moment 法では，原子間の相互作用エネルギーの高次位置微分を考慮にいれることによって，非調和効果を取り入れた有限温度における自由エネルギー，熱膨張などを見積もることができる [2]．図 1,2 は我々が開発したコードを用いて求めた，fcc 金属である Cu, Ag, Au の自由エネルギー，最近接原子間距離の温度依存性である．本研究では，この計算手法の妥当性を確かめるため，幾つかの金属において，調和振動子近似および実験結果との比較を行う．また，経験的な原子間ポテンシャルだけでなく，第一原理計算の組み込みが可能か検討する．

[1] K. Parlinski, Z. Q. Li and Y. Kawazoe, Phys. Rev. Let., 78, 4063-4066 (1997).

[2] Vu Van Hung, & K. Masuda-Jindo, J. Phys. Soc. Jpn. 69 (2000), 2067.

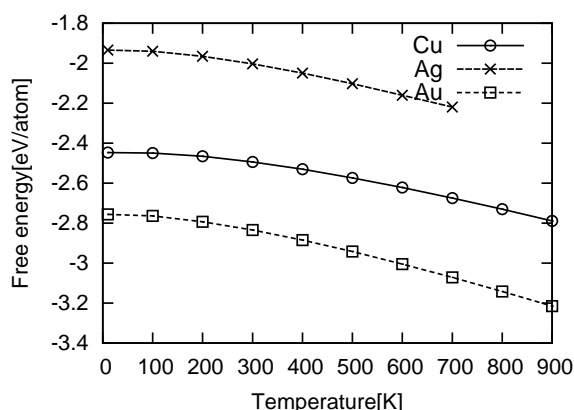


図 1: Cu, Ag, Au における自由エネルギーの温度依存性．

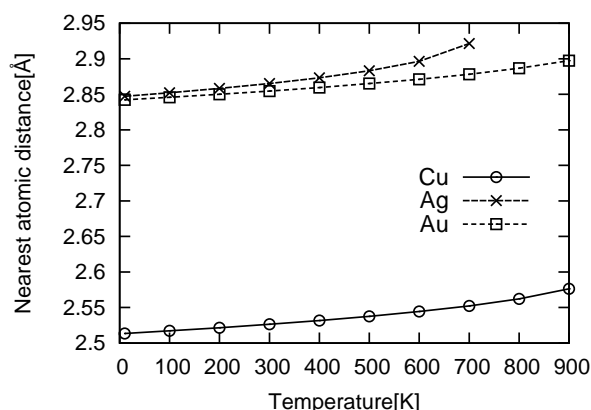


図 2: Cu, Ag, Au における最近接原子間距離の温度依存性．