

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, 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重要である．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理想の結果が得られず，これは非調和の項の影響が大きいからだと思われる．

神藤の Moment 法では，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 fcc 構造の金属である Cu, Ag, Au のシミュレーション結果であり，自由エネルギー，最近接原子間距離が温度に上手く依存していることが確認できる．しかし，ポテンシャルの 2 次，4 次微分を利用するこの計算手法の正当性はわかっておらず検証を行う必要がある．また，単純なペアポテンシャルを利用しているが VASP での計算結果の組み込みが可能か検証を行う．

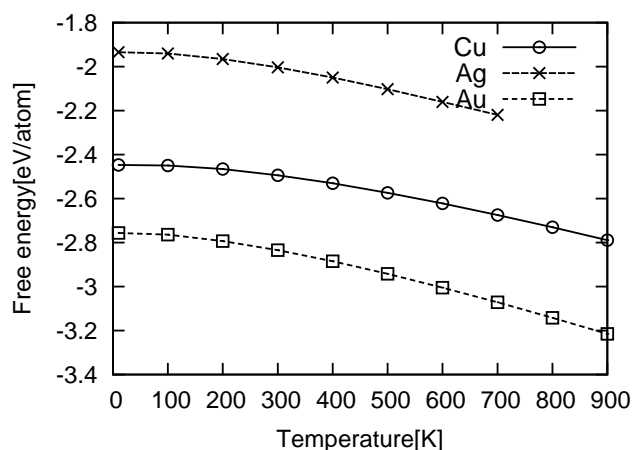


図 1: Cu, Ag, Au における自由エネルギーの温度依存性．

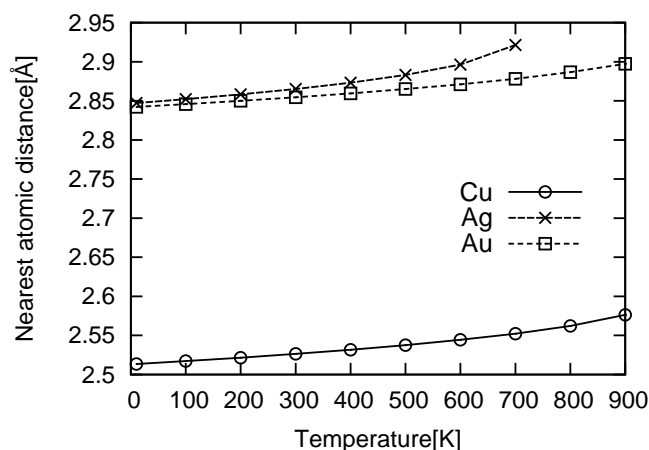


図 2: Cu, Ag, Au における最近接原子間距離の温度依存性．

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

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