

第一原理計算による体積弾性率の評価

2023年12月26日

概要

第一原理計算を用いると、結晶・表面など様々な物質の状態における電子・原子構造を取得することが可能です。取得した情報はそのまま材料開発の指標に使用されたり、実験値が既知の場合は計算の妥当性の検証に使用されます。

第一原理計算において結晶の全エネルギーの格子定数依存性を計算し、格子定数と全エネルギーをBirch-Murnaghanの状態方程式にフィッティングすることで体積弾性率を求めることができます。体積弾性率は圧力に対する体積変化の度合いを示す物理量となっており、材料の強度評価や熱膨張の議論の際に参照される指標です。そのため、結晶の性質を表す基本的な物理量となっています。

本書では、Winmostarで各種金属の体積弾性率を評価した例を示します。

計算条件

本書の計算にはQuantum ESPRESSO 7.1を使用しました。汎関数にはLDA(PZ)とPBEを使用し、ウルトラソフト型の擬ポテンシャルを使用しました。波動関数および電荷密度に対するカットオフエネルギーはそれぞれ50 Ry、450 Ryとしました。スミアリングにはMarzari-Vanderbilt法を使用し、broadeningのパラメータは0.02 Ryとしました。

手順については、まずAl, Pd, Pt, Auそれぞれについてバルク結晶モデルを作成しました。k点の計算にはMonkhorst-Packの方法を利用し、k点の密度(Spacingパラメータ)は0.28 Å⁻¹としました。そして構造最適化計算によって格子定数を求めました。次にAl, Pd, Pt, Auそれぞれについて、求めた格子定数を基準として体積を変えた11種の構造に対し、全エネルギーを計算しました。k点数はSpacingパラメータ0.28 Å⁻¹と同等である8³で固定しました。最後にWinmostarの関数フィッティング機能を使い体積弾性率を求めました。

計算結果

図1に、Ptで汎関数にPBEを用いたときのフィッティング結果を示します。青線が計算した11点を直線です。

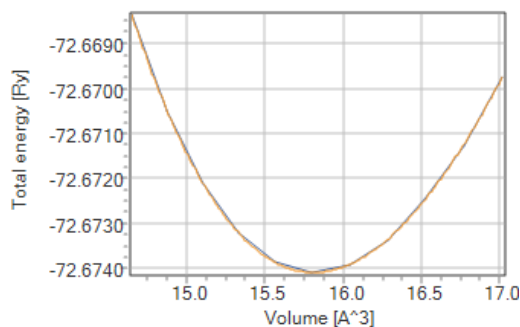


図1 フィッティングの結果

ないものの、橙の線がフィッティングした曲線となっていますが、計算した11点に対し良好にフィッティングされていることが分かります。

図2に、各物質におけるGPa単位での体積弾性率について、先行研究[1]における計算値と本書での計算値との比較を示します。いずれも交換相関にはPBEを使用しています。先行研究における計算結果が良好に再現されていることが分かります。

図3に、各物質におけるGPa単位での体積弾性率について、実験値と、LDAとPBEを用いたときの計算値との比較を示します。ここでは実験に比べLDAでは過大評価、PBEでは過小評価している傾向が見られます。この傾向は先行研究[2]で60種の固体の体積弾性率を計算で調べた結果と一致します。

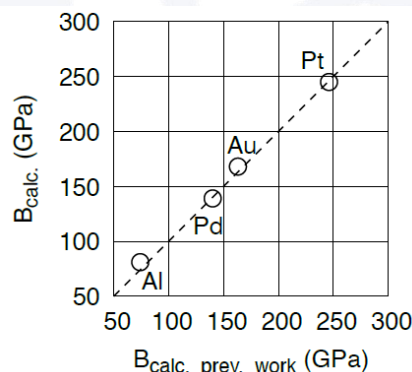


図2 計算値の比較

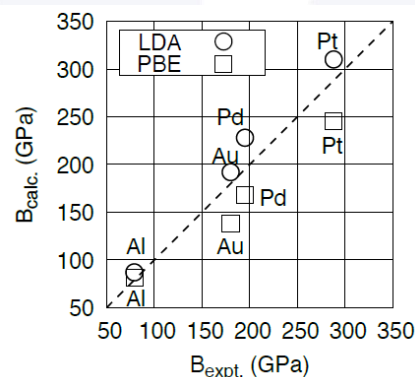


図3 実験値と計算値の比較

Winmostarを用いた体積弾性率の算出手順については[無料のチュートリアル資料](#)において細かく紹介されており、初心者の方でも実施できます。通常、様々な物質に対するモデルの作成、体積を変化させた構造の生成、物性値の算出作業は煩雑で大きな作業コストを伴いますが、Winmostarを用いるとマウス操作のみで手軽に実行でき、作業を大幅に効率化できます。

Winmostarバージョン: 11.6.3

対応ソルバ: Quantum ESPRESSO

引用: [1] Phys. Rev. B 80, 235407 (2009).

[2] Phys. Rev. B 79, 085104 (2009).