

## Tiの熱膨張の第一原理計算

関西学院大理工 清原資之, 山本洋佑, 西谷滋人  
First principles calculations on thermal expansion of Ti

Kwansei Gakuin Univ., M. Kiyohara, Y. Yamamoto, and S. R. Nishitani

Tiは元素戦略の対象金属としてその材料設計指針を得るために、第一原理的な取り扱いが盛んに研究されている。特に有限温度の自由エネルギーが必要となる。bcc-Tiは基底状態で、 $[110]_{Ti}$ 変位に対して不安定であるため擬調和振動子近似では再現できない[1]。一方hcp-Tiに対しては、擬調和振動子近似が適用できると期待できる。そこでhcp-Tiを対象にして、熱膨張の再現性を擬調和振動子近似で調べた。

本研究では第一原理計算ソフトVASPと、熱振動効果を取り入れるPhonon-DOS法により、hcp-Tiの自由エネルギーを算出した。図1にa, c軸の線膨張係数と体積膨張係数の温度依存性を示した。(a)はSouvatzisらによる報告値(実線はGGA, 破線はLDAによる計算値, 黒点・白点は実験値を示している)[2], (b)は本研究での計算値を示している。 $\alpha_a$ はa軸,  $\alpha_c$ はc軸の線膨張係数,  $\beta$ は体積膨張係数を示している。本結果では、Souvatzisらが報告した低温部でのc軸の収縮や、0~300Kでのa軸, 体積の膨張を再現した。しかし、 $\alpha_c$ が負から正へ変化する温度は異なっていた。また実験で観測された約150Kでの $\alpha_c$ の急激な上昇は、Souvatzisらと同じく再現できていない。

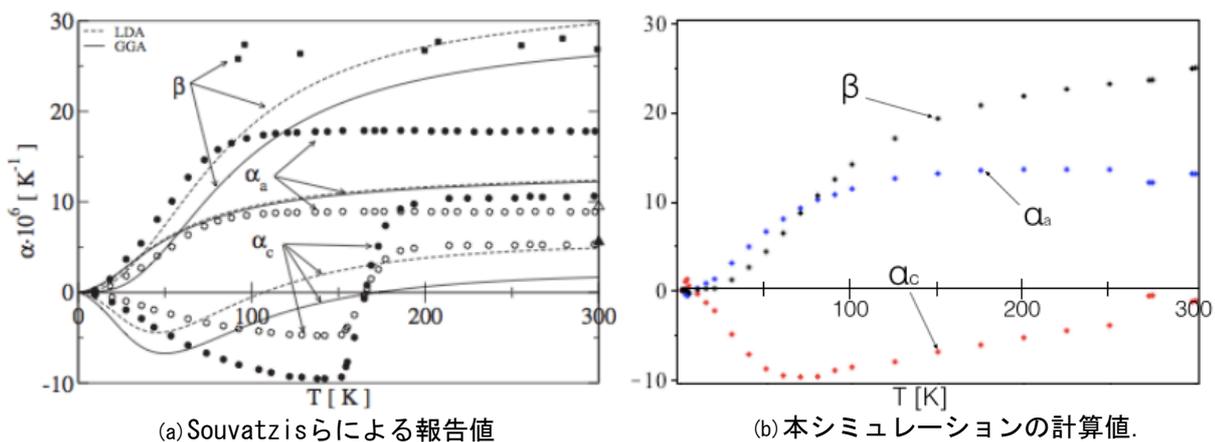


図1: 線膨張係数及び体積膨張係数

[1] S. R. Nishitani *et al.*, *Mat. Sci. Eng., A*, **312** (2001) 77-83.

[2] P. Souvatzis *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **99** (2007) 015901.