

負熱膨張物質Ca₂RuO_{3.75}の第一原理フォノンモード解析

大阪大学 基礎工学研究科 氏名 石井明男, 上馬場洋介, 山添恵介

目的 負熱膨張材料Ca₂RuO_{3.75}における負熱膨張はその熱膨張の異方性に起因すると言われている。本研究では第一原理フォノンモード解析を用いてその線熱膨張係数の異方性を確認するとともに異方性の原因となるフォノンモードを特定する。

内容 図1のようなCa₂RuO₄よりO原子を一つ抜去したCa₂RuO_{3.75}のスーパーセルモデルを作成し、フォノンモード解析を行った。各軸に対応する線熱膨張係数を計算し、異方性熱膨張の存在を確認した(図2)。異方性熱膨張を引き起こすのは低周波数のモードであり、O原子が大きく振動するモードであることがわかった。

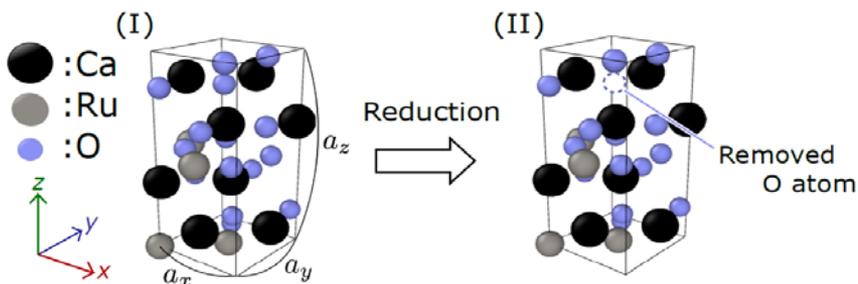


図1.使用したCaRuO_{3.75}原子モデル

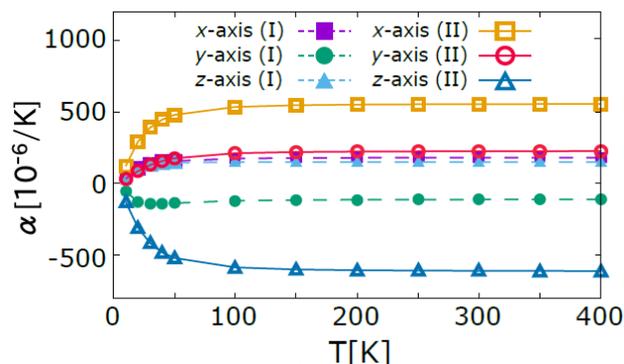


図2.温度ごとの線熱膨張係数

利用した計算機	Octopus
ノード時間	5566時間
使用メモリ	100MB
並列化	6並列

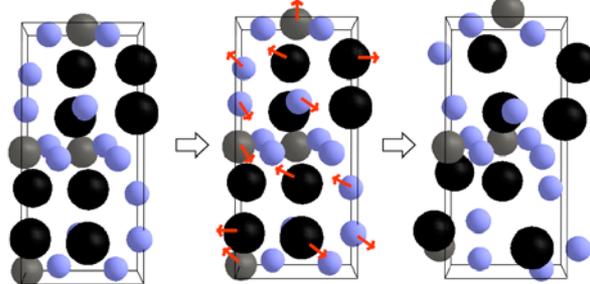


図3.周波数2.02THzのフォノンモードにおける原子の動き方