

# 鉄の基底状態の第一原理計算

## First-principles calculation of ground state of Iron

### 1. 背景

物質を構成する原子の種類と配置(結晶構造)は、物質の基礎物理特性に強い影響を与えている。物質のエネルギーが最も低くなる基底状態における構造が分かれば、そこから物質の様々な物理特性を知ることが出来る。

実世界では、強磁性の体心立方構造が鉄の基底状態となっている。長い間、汎関数密度理論の局所密度近似では鉄の基底状態を求めることはうまくいってなかった。しかし、密度の勾配を考慮したGGA(Generalized gradient approximation)を用いて実験と一致する結果を得ることが出来た<sup>1)</sup>。

### 2. 目的

実験結果と一致する鉄の基底状態を量子力学第一原理計算<sup>2), 3)</sup>によって求める。

また、同時に得られる構造ごとの物性を比較して、各構造の違いや特徴を理解する。

### 3. 計算方法と計算パラメーター

今回の第一原理計算には、電子構造計算コード「WIEN2k」<sup>4)</sup>を用いた。「WIEN2k」にはFLAPW(Full-potential Linearized Augmented Plane Wave Method)法が用いられている。

計算に用いた主なパラメーターとして、交換相関ポテンシャルに対してはGGA-PBE96(Perdew-Burke-Ernzerhof 96)<sup>3)</sup>を用いた。また、鉄のMuffin-tin半径は2.2(a.u.)とした。

計算対象は、体心立方構造、面心立方構造、六方最密構造、それぞれ磁性を考慮する場合としない場合の計6種類とした。

まず、各構造における電子状態を求める。各構造におけるエネルギーの体積依存性をもとめ、以下のマーナハンの状態方程式でfittingする。

$$E_{tot}(V) = \frac{BV}{B'(B'-1)} \left[ B' \left( 1 - \frac{V_0}{V} \right) + \left( \frac{V_0}{V} \right)^{B'} - 1 \right] + E_{tot}(V_0)$$

ここで、 $E_{tot}$ は系の全エネルギー、 $B$ は体積弾性率、 $B'$ は体積弾性率の圧力の微分  $B' = \frac{\partial B}{\partial P}$ 、 $V_0$ は平衡格子定数での系の体積、 $E_{tot}(V_0)$ は平衡格子定数での全エネルギーである。

次に、各構造の平衡状態における全エネルギーを比較する。その結果、エネルギーの一番低い構造が基底状態である。

また、同時に、バンド構造、状態密度、電荷密度分布を計算した。

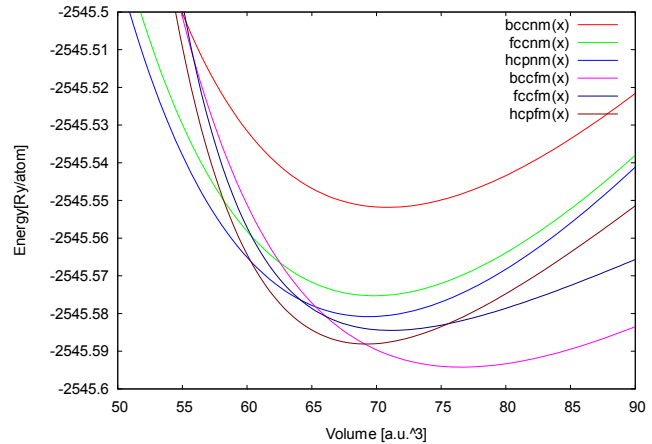


図1 各構造の全エネルギーのグラフ

### 4. 計算結果と考察

図1で、横軸は体積、縦軸は系の一原子あたりの全エネルギーである。結晶構造ごとに、曲線が色分けされている。

体心立方構造の強磁性体が基底状態であることを今回の計算によって求めることが出来た。また、基底状態における格子定数をNIMS<sup>5)</sup>で得られるデータと比較したところ、同じ値が得られた。

また、このときの体積の小さい領域では、六方最密構造の強磁性構造がエネルギーが一番低い、Feの高圧安定相である。

他に、ここにグラフは載せることが出来なかったが、バンド構造、状態密度、電荷密度分布についても、構造ごとに比較をした。簡単にまとめると、バンド構造から鉄は導電性を持つ金属であることが分かった。状態密度からは、鉄が強磁性体であることが分かった。また、電荷密度分布は、実空間における分布が立体的に見られて、興味深かった。

### 参考文献

- 1) T.Asada and K.Terakura, Phys. Rev. B 46,13599(1992)
- 2) キッテル固体物理学入門(上)(丸善,2003)
- 3) Norm-Conserving Pseudopotential database (NCPS95,97,2K)[Backup] <http://www.geocities.co.jp/Technopolis/4765/index.html>
- 4) WIEN2k, <http://www.wien2k.at/>
- 5) NIMS 物質・材料データベース <http://mits.nims.go.jp/>