

MedeA

MedeA MT による 材料の機械的特性評価

MedeA MT (Mechanical and Thermal properties) モジュールは、機械物性を評価することができます。差分法による弾性定数計算に加え、各種弾性率、Poisson比などの機械的特性の他、延性・脆性の判定に使えるPugh比などさまざまな物性値を算出します。MedeAに搭載されているハイスループットモジュールと組み合わせることで、材料の物性値データの大量生成にもお使いいただける便利なツールです。

■ 第一原理・力場計算による弾性定数計算

MedeA MTでは、応力に対する差分法¹⁾によって弾性定数テンソル要素を算出します。対象となる計算モデルの格子定数をそれぞれのパラメーターについて微小変化させた後に原子座標の緩和を行い、計算される応力の変化から最小自乗フィッティングによって弾性定数の値を求めます。この時、対称操作上等価な計算は行いません。応力の計算にはMedeA VASPあるいはMedeA LAMMPSを用いることができ、第一原理・力場両計算方法に対応しています。

- ・ この方法の利点は、モデル構造が安定な格子定数である必要がなく、例えば高压条件下での計算にも対応でき弾性定数テンソル、コンプライアンステンソル
- ・ 剛性率、体積弾性率、ヤング率
- ・ Grüneisen定数、Poisson比、Pugh比
- ・ ビッカース硬さ
- ・ 音速、デバイ温度
- ・ 熱力学関数(デバイ近似による比熱、線膨張係数、エントロピー、エンタルピー、自由エネルギー)

■ 実験値との比較

表1にMedeA MT (VASP: GGA-PBE)で計算されたAlNの弾性定数の値を実験値とともに示します。実験で得られる弾性定数は比較的ばらつきが大きく、表で示した2つの実験値の間でも、例えばC₁₁の値は60 GPa以上異なります。計算値は多くの値

で実験値の間あるいは近傍にあり、信頼できる値が得られているといえます。

表1. AlN の弾性定数と弾性率。単位はGPa。

	実験値 ³⁾	実験値 ⁴⁾	計算値
C ₁₁	345	411	378
C ₁₂	125	149	128
C ₁₃	120	99	96
C ₃₃	395	389	358
C ₄₄	118	125	109
C ₆₆	110	130	125
体積弾性率	202	212	195
剛性率	310	-	300
ヤング率	-	-	121

■ Pugh比による脆性/延性の判定

Pugh比は式1のように体積弾性率Bと剛性率Gの比で表され、その値の大小でその物質が脆いか、延性があるかを判定する指標の一つとして用いられます。この値が1.75未満では脆く、1.75以上だと延性があると判定され、更にこの値が大きいほど延性が高くなる傾向にあります。

$$k = \frac{B}{G} \quad \text{式1}$$

Pugh比の用い方の一例として、電池材料における界面の評価について示します。

Li₁₀GeP₂S₁₂ (LGPS) は、Liイオン電池における固体電解質材料として有望視されています。LGPSとLiを接合するとき、化合物としてLi₂SやLi₃Pの生成が考えられます。これら化合物の特性の一つとし

てPugh比を計算してみると、LiやLGPSと異なり脆いことが予見されます。こうした脆い化合物の存在は、電極-電解質間の接触面積減少の一因と成り得ることや、弾性率の違いから大きなミスマッチがあることが示唆されます。

表2. MedeA MTで求めたLiおよびLi化合物の体積弾性率、剛性率とPugh比⁵⁾。体積弾性率、剛性率の単位はGPa。

物質	体積弾性率	剛性率	Pugh比	
Li	12	5	2.4	延性
Li ₂ S	46	36	1.3	脆性
Li ₃ P	40	36	1.1	脆性
LGPS	19	8	2.4	延性

■ まとめ

分子シミュレーションで予測される弾性定数と、そこから導き出される種々の物性値は、材料研究に携わる多くの研究者にとって有益な情報です。MedeA MTで得られる物性値は、その物質の弾性特性を精確に表現するものであり、インフォーマティクスで用いる記述子としても大変有用です。

1) Le Page, Y. and Saxe, P. *Phys. Rev.* **2002**, B 65, 104104.
2) Pugh, S. F. *Phil. Mag.* **1954**, 45, 823-843.
3) McNeil, L. E.; Grimsditch, M.; French, R. H. *J. Am. Ceram. Soc.* **1993**, 76, 1132-1136.
4) Tsubouchi, K.; Mikoshiba, N. *IEEE Trans. Sonics Ultrason.* **1985**, SU-32, 634.
5) Windiks, R. Materials Design, unpublished data.