



РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

ПЕРВОПРИНЦИПНЫЕ РАСЧЁТЫ СКОРОСТЕЙ ЗВУКА В МЕТАЛЛАХ ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ

Н. А. Смирнов

ЗАБАБАХИНСКИЕ НАУЧНЫЕ ЧТЕНИЯ – 2023, СНЕЖИНСК

Метод расчёта



РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

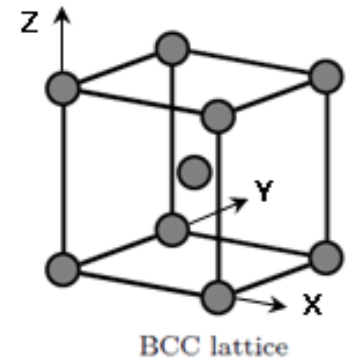
- Для вычислений удельной внутренней энергии при различной степени сжатия вещества и $T=0$ К использовался полнопотенциальный полноэлектронный метод расчёта зонной структуры кристалла FP-LMTO [1].

- Внутренние параметры метода были подобраны так, чтобы обеспечить разумную точность вычисления удельной энергии (~ 0.1 mRy/atom).

- Упругие константы определялись из расчёта зависимости внутренней энергии монокристалла E_c от степени деформации решётки [2,3]. В обозначениях Войта ($xx=1$, $yy=2$, $zz=3$, $yx=4$, $zx=5$, $yz=6$) выражение для упругих констант можно записать как:

$$C_{\alpha\beta} = \frac{1}{V} \frac{\partial^2 E_c(V, \{\eta\})}{\partial \eta_\alpha \partial \eta_\beta} \Big|_{\{\eta=0\}}; \quad \alpha, \beta = 1 \dots 6,$$

η - тензор деформаций Лагранжа.



FP-LMTO -
статический метод

[1] S. Yu. Savrasov, Phys. Rev. B **54**, p. 16470 (1996).

[2] G. V. Sin'ko & N. A. Smirnov, J. Phys.: Condens. Matter **14**, 6989 (2002).

[3] G. V. Sin'ko, Phys. Rev. B **77**, 104118 (2008).

Используя упругие постоянные монокристалла $C_{\alpha\beta}$ можно определить модуль сдвига поликристалла с помощью усреднения Фойгта-Ройса-Хилла [4].



Для кубических структур:

$$G_V = (C_{11} - C_{12} + 3C_{44})/5$$

$$G_R^{-1} = \frac{1}{5} \left(\frac{4}{C_{11} - C_{12}} + \frac{3}{C_{44}} \right)$$

Для гексагональных структур:

$$G_V = (7C_{11} - 5C_{12} - 4C_{13} + 2C_{33} + 12C_{44})/30$$

$$G_R^{-1} = \frac{1}{5} \left(\frac{4}{C_{11} - C_{12}} + \frac{2}{C_{44}} + \frac{2}{3} \cdot \frac{2(C_{11} + C_{12}) + C_{33} + 4C_{13}}{C_{33}(C_{11} + C_{12}) - 2C_{13}^2} \right)$$

Модуль сдвига:

$$G = \frac{1}{2} (G_V + G_R)$$

Скорости звука поликристаллов:

$$V_L = \left(\frac{B + 4G/3}{\rho} \right)^{1/2} ; \quad V_S = \left(\frac{G}{\rho} \right)^{1/2} ; \quad V_b = (V_L^2 - 4V_S^2/3)^{1/2}$$

Давление ударно-сжатого вещества:



- 'холодный' вклад в энергию системы от электронов $E_c(V)$ → расчёты FP-LMTO;
- вклад в энергию от ионной подсистемы определялся в квазигармоническом приближении:

$$F_{ph} = k_B T V \int \ln \left\{ 2 \sinh \left(\frac{\hbar \omega}{2k_B T} \right) \right\} g_{ph}(\omega, V) d\omega$$

$$E_{ph} = \frac{1}{2} V \int \hbar \omega \coth \left(\frac{\hbar \omega}{2k_B T} \right) g_{ph}(\omega, V) d\omega$$

$g_{ph}(\omega, V)$ - плотность состояний фононов → расчёты FP-LMTO.

Вклад от нагрева электронов: $S_e = -k_B \int g_e(\varepsilon, V) [f_e \ln f_e + (1 - f_e) \ln(1 - f_e)] d\varepsilon,$

Плотность состояний электронов $g_e(\varepsilon, V)$ и хим. потенциал → расчёты FP-LMTO.

$$F_e = E_e - TS_e$$

↑ расчёты FP-LMTO

Энергия всей системы:

$$F = E_c + F_{ph} + F_e, \quad E = E_e + E_{ph}.$$

Давление и ударная адиабата:

$$P = - \left(\frac{\partial F}{\partial V} \right)_T, \quad E - E_0 = \frac{1}{2} (P - P_0)(V_0 - V)$$

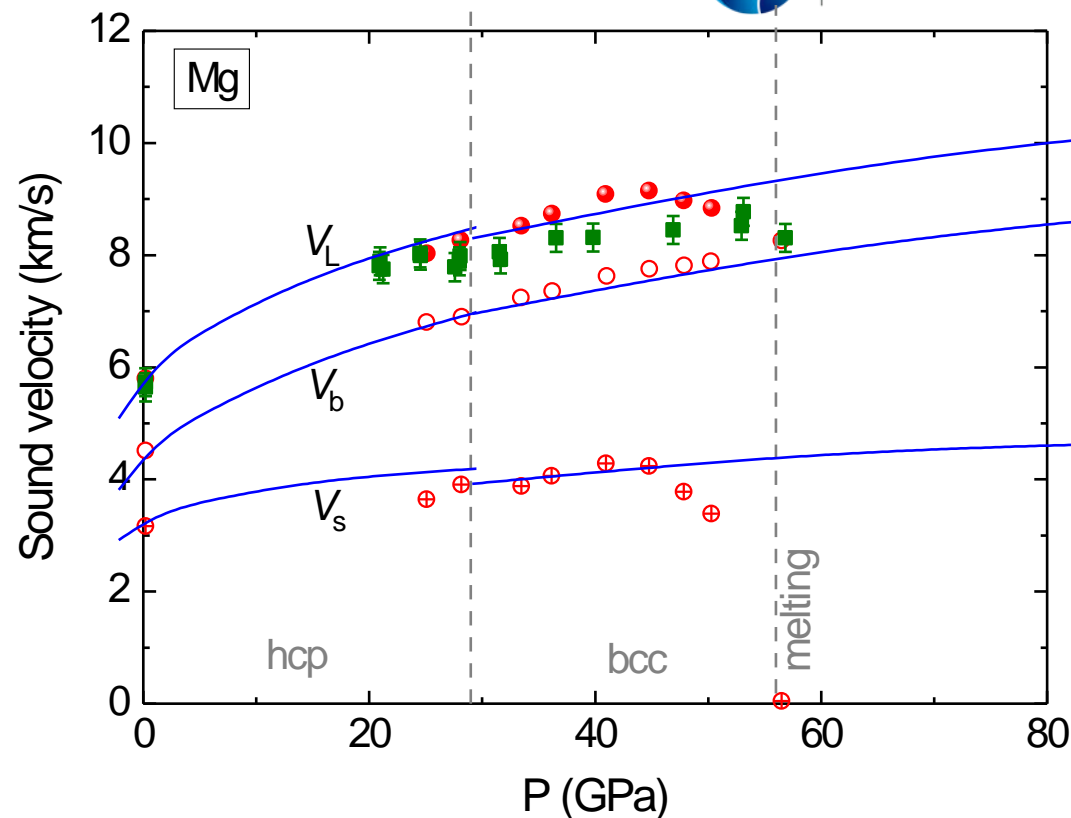
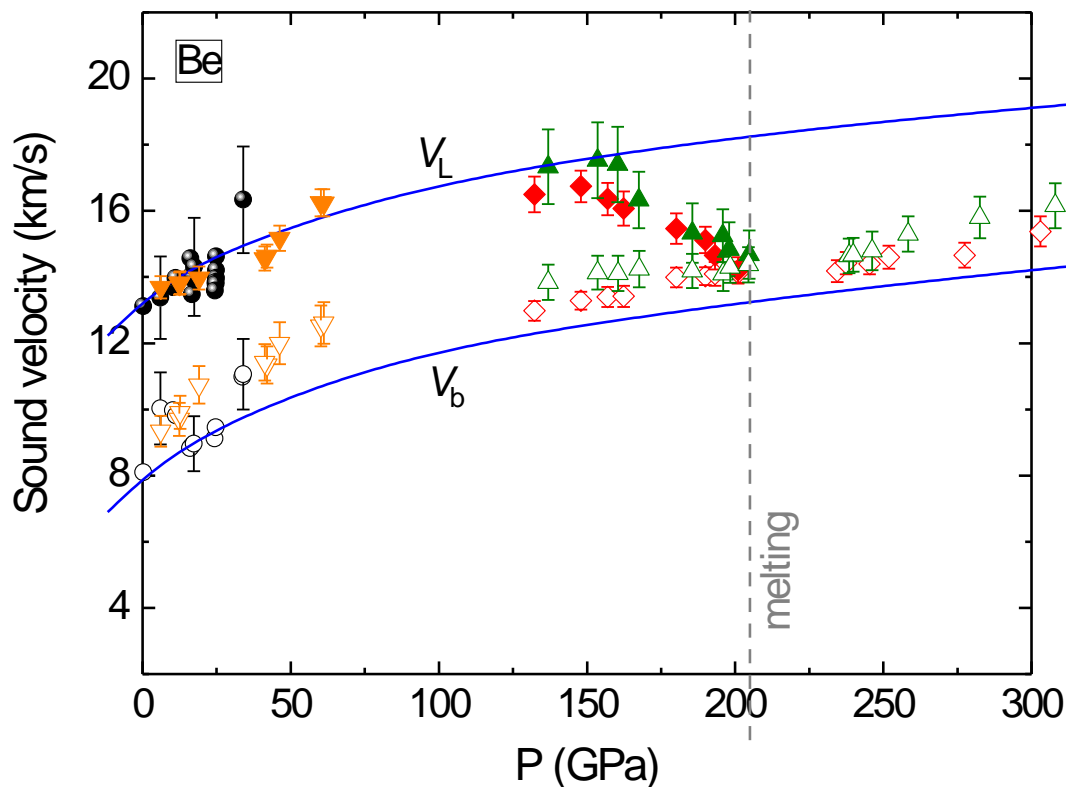


Рис. 1. Скорости звука Be при ударном сжатии. Линии – наш расчёт. Кружки – Chhabildas et al, *Shock Waves in Condens. Mat.*, p. 417 (1981); треугольники – Knudson et al, *AIP Conf. Proc.* **1426**, 35 (2012); ромбы – McCoy et al, *PRB* **100**, 054107 (2019); перевёрнутые треугольники – Крючков et al, *Труды ХНЧ-2019*, с. 344 (2019).

Рис. 2. Скорости звука Mg при ударном сжатии. Линии – наш расчёт. Кружки – Beason et al, *Phys. Rev. B* **104**, 144106 (2021); квадраты – Kozlov et al, *Instruments and Experimental Techniques* **60**, 98 (2017).

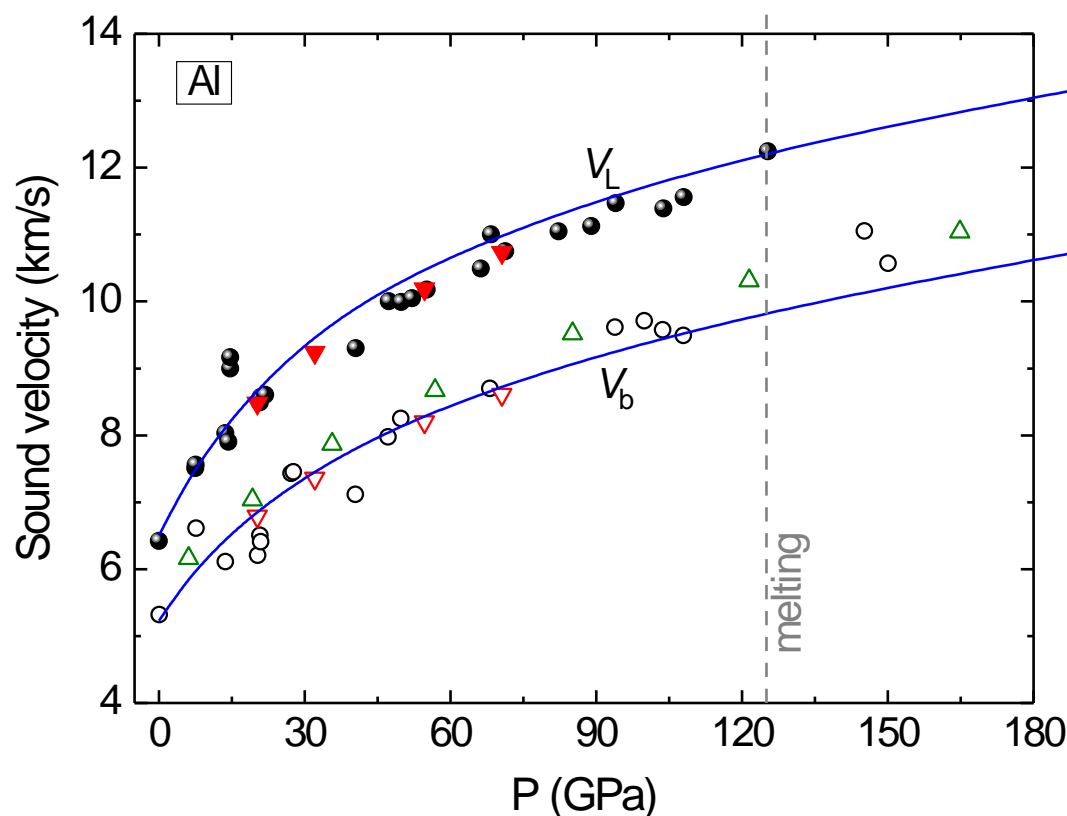


Рис. 3. Скорости звука Al при ударном сжатии. Линии – наш расчёт. Кружки – Duffy et al, J. Geophys. Res. **97**, 4503 (1992); перевёрнутые треугольники – Yu et al, Chin. Phys. Lett. **22**, 1742 (2005); треугольники – Al'tshuler et al, Sov. Phys. JETP **11**, 766 (1960) {EOS}.

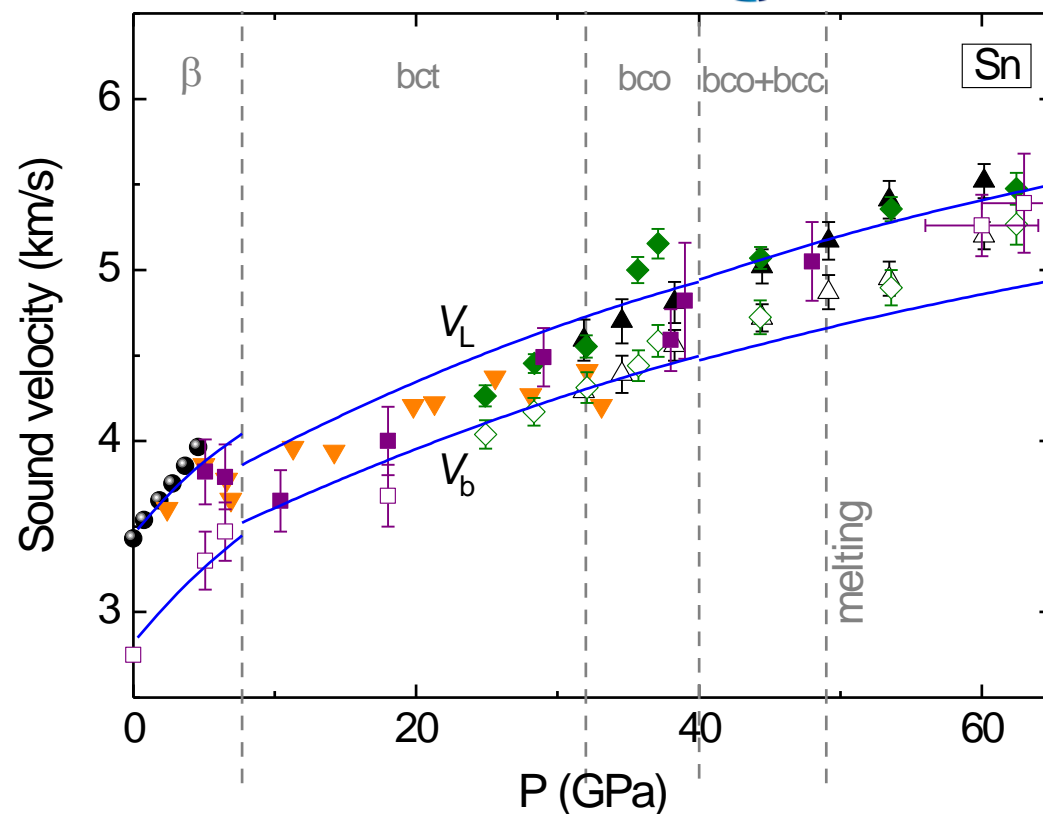


Рис. 4. Скорости звука Sn при ударном сжатии. Линии – наш расчёт. Кружки – Xu et al, JAP **115**, 164903 (2014); квадраты – Zhernokletov, AIP Conf. Proc. **1195**, 1217 (2009); перевёрнутые треугольники – Martinez et al, AIP Conf. Proc. **620**, 1200 (2002); ромбы – Hu et al, APL **92**, 111905 (2008); треугольники – Song et al, JAP **120**, 195101 (2016).

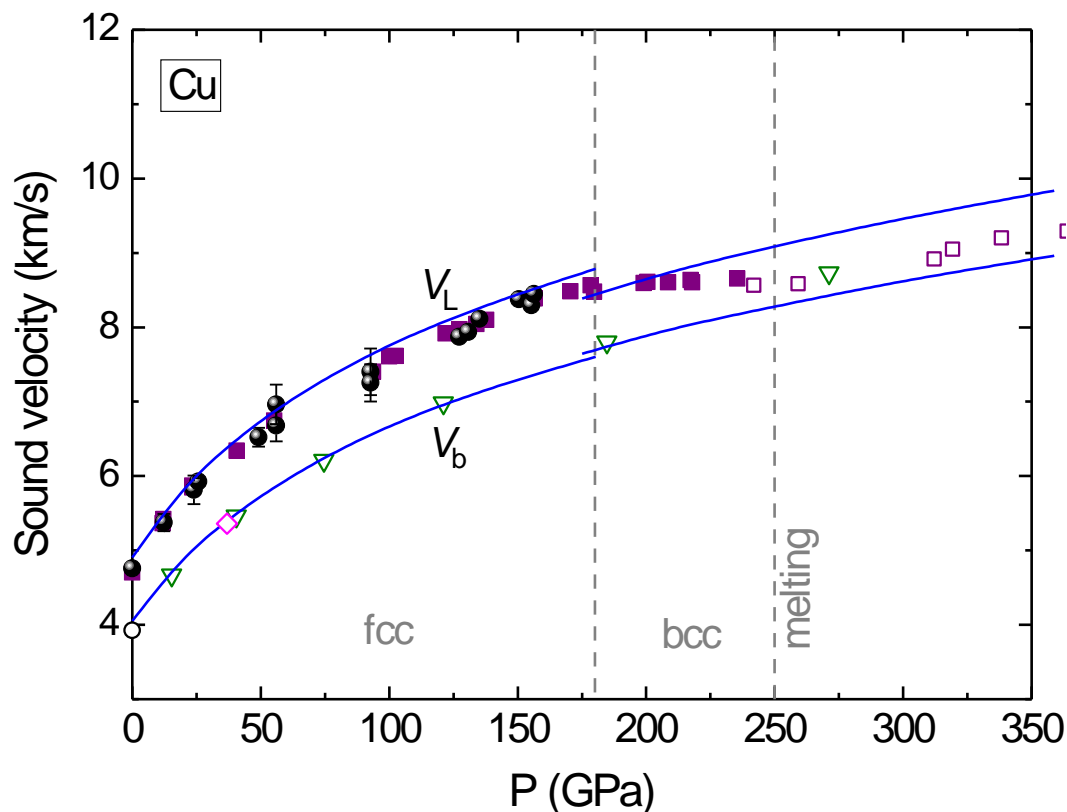


Рис. 5. Скорости звука Cu при ударном сжатии. Линии – наш расчёт. Кружки – Duffy et al, J. Geophys. Res. **97**, 4503 (1992); перевёрнутые треугольники – Al'tshuler et al, Sov. Phys. JETP **11**, 766 (1960) {EOS}; квадраты – Hayes et al, AIP Conf. Proc. **505**, 483 (2000); ромбы – Алексеев et al, ПМТФ **2**, 114 (1980).

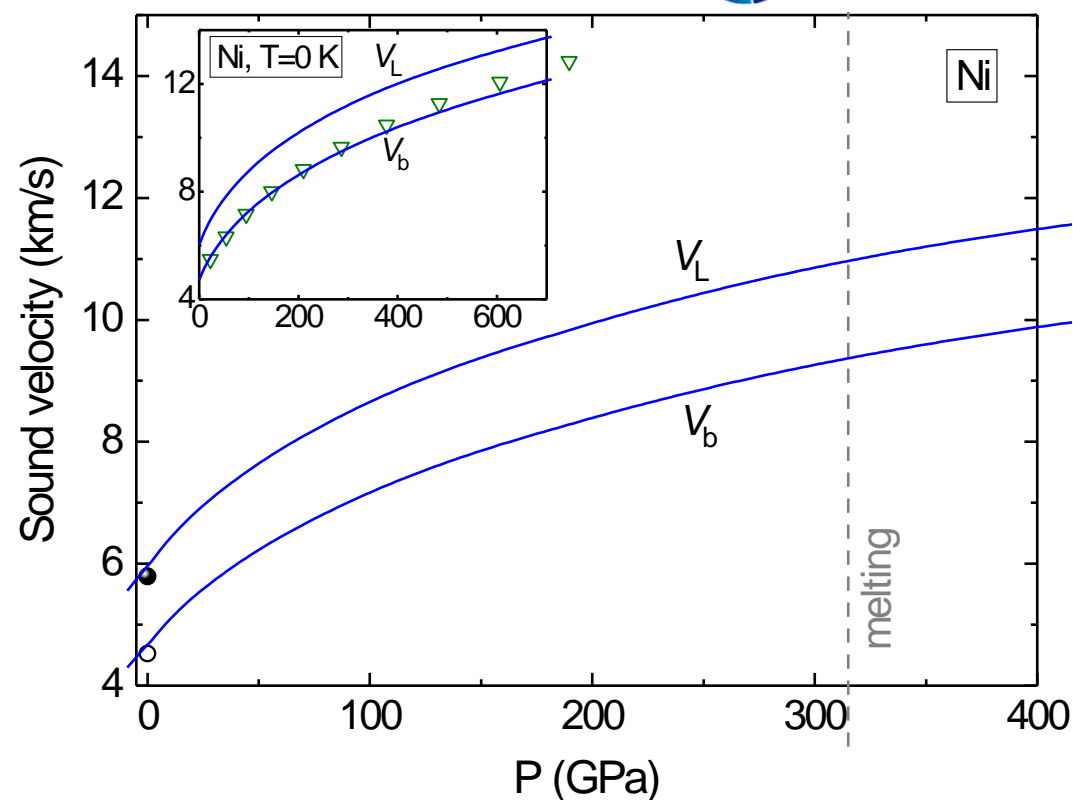


Рис. 6. Скорости звука Ni при ударном сжатии. Линии – наш расчёт. Кружки – LASL shock data (1980); перевёрнутые треугольники – Kormer et al, JETP **15**, 477 (1962) {EOS, T=0 K}.

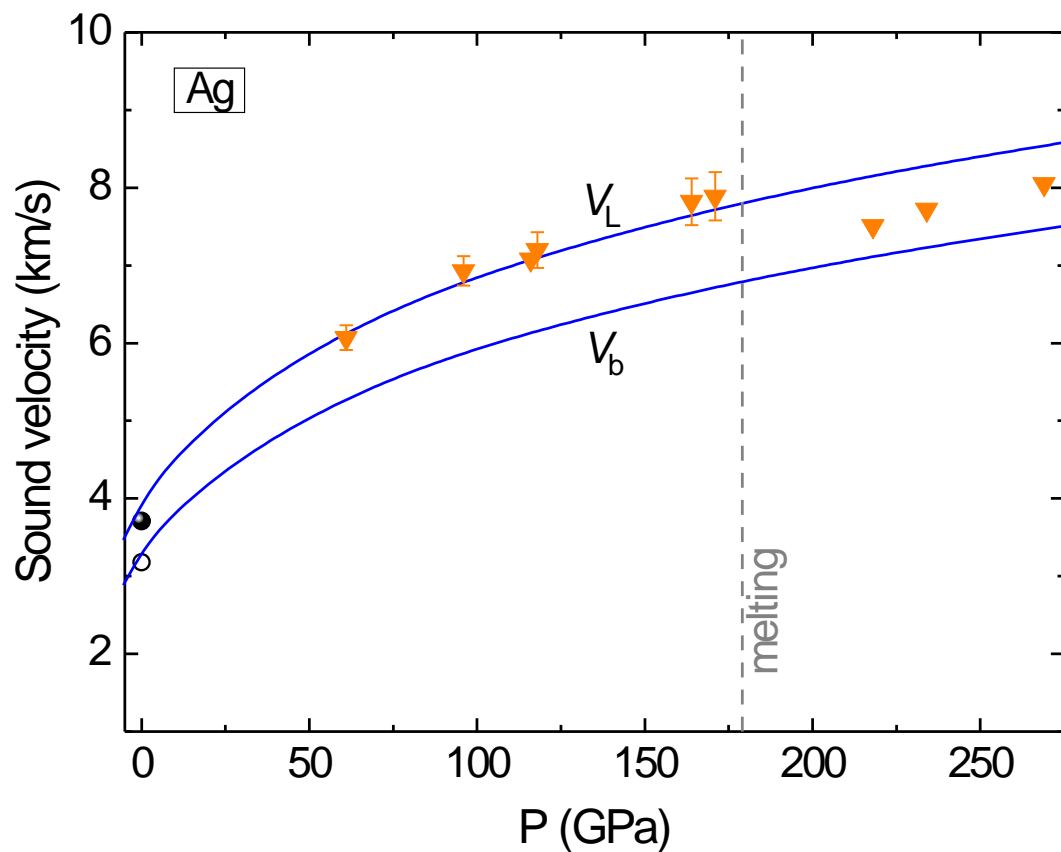


Рис. 7. Скорости звука Ag при ударном сжатии. Линии – наш расчёт. Кружки – LASL shock data (1980); перевёрнутые треугольники – Wallace et al, PRB **104**, 214106 (2021).

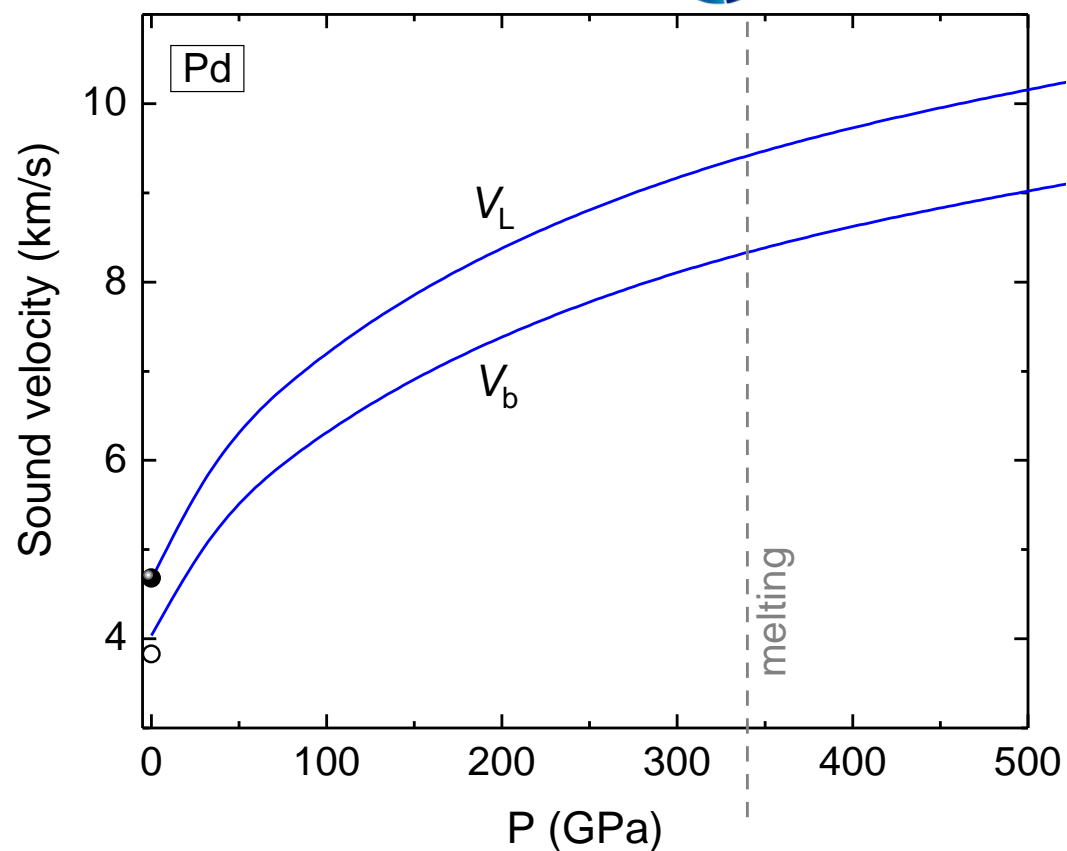


Рис. 8. Скорости звука Pd при ударном сжатии. Линии – наш расчёт. Кружки – LASL shock data (1980).

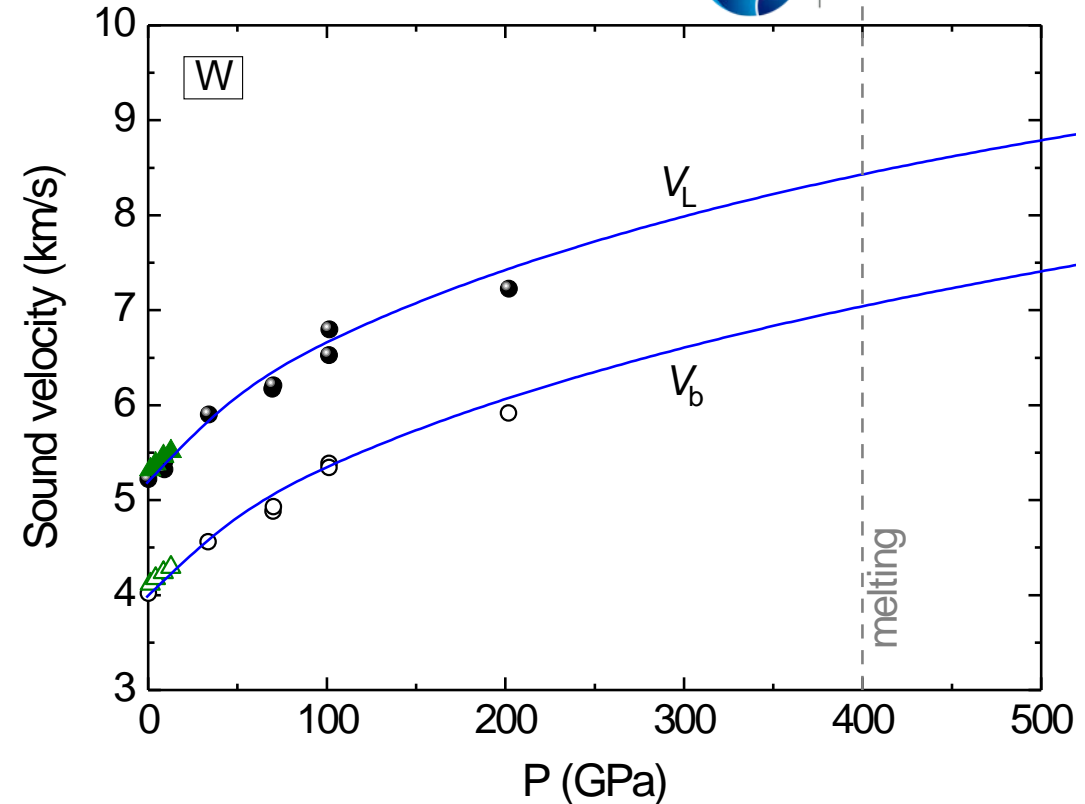
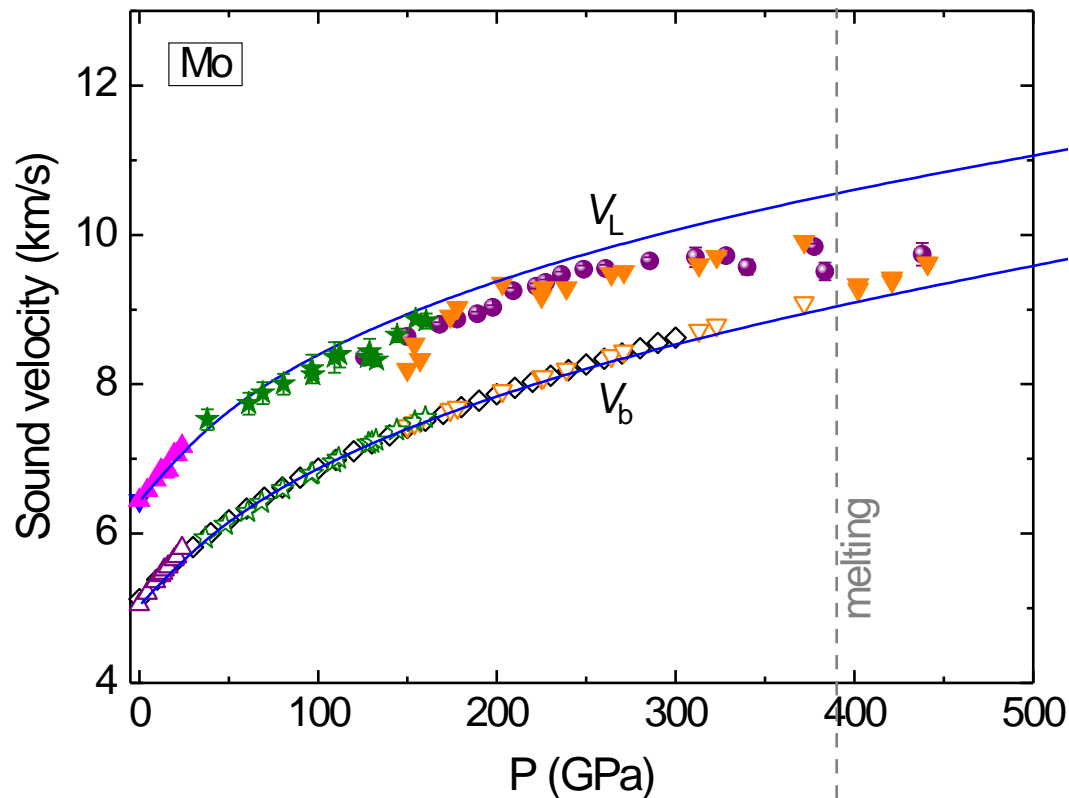


Рис. 9. Скорости звука Mo при ударном сжатии. Линии – наш расчёт. Треугольники – Duffy et al, JAP **86**, 6729 (1999); кружки – Nguyen et al, PRB **89**, 174109 (2014); перевёрнутые треугольники – Hixson et al, PRL **62**, 637 (1989); звёзды – Zhang et al, JAP **117**, 054302 (2015); ромбы – Hixson et al, JAP **71**, 1721 (1992) {EOS}.

Рис. 10. Скорости звука W при ударном сжатии. Линии – наш расчёт. Кружки – Duffy et al, J. Geophys. Res. **97**, 4503 (1992); треугольники – Qi et al, JAP **124**, 075902 (2018).

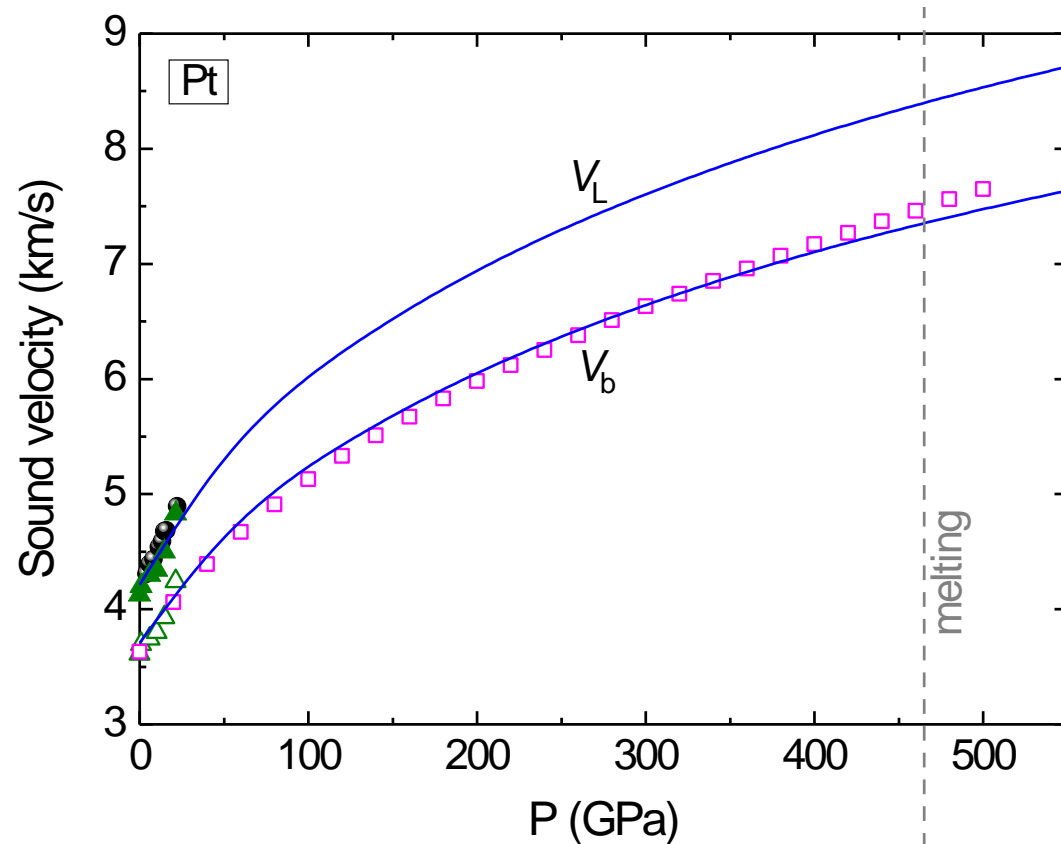


Рис. 11. Скорости звука Pt при ударном сжатии. Линии – наш расчёт. Треугольники – Kamada et al, Comptes Rendus Geosci. **351**, 236 (2019); кружки – Kavner et al, PRB **68**, 144101 (2003); квадраты – Morgan et al, High Temp. – High Press. **6**, 195 (1974) {EOS}.

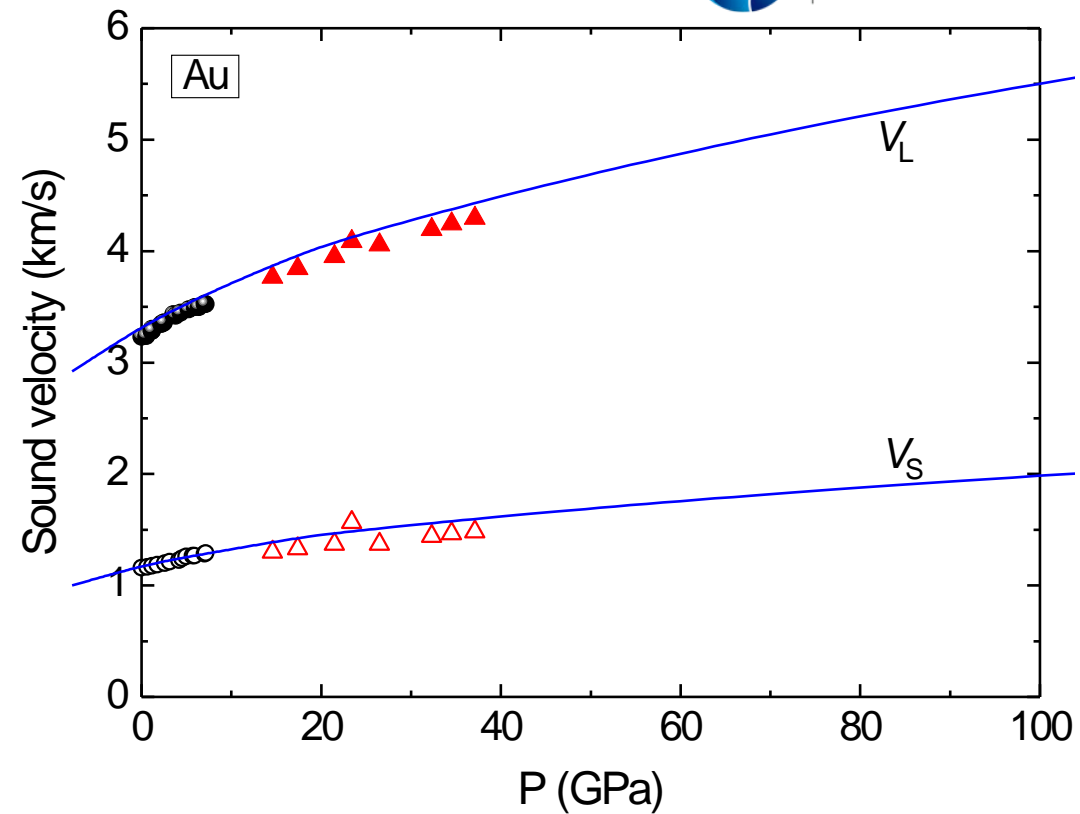


Рис. 12. Скорости звука Au в зависимости от давления при $T=300$ К. Линии – наш расчёт. Кружки – Montgomery et al, Rev. Sci. Instrum. **38**, 1073 (1967); треугольники – Duffy et al, PRB **60**, 15063 (1999).

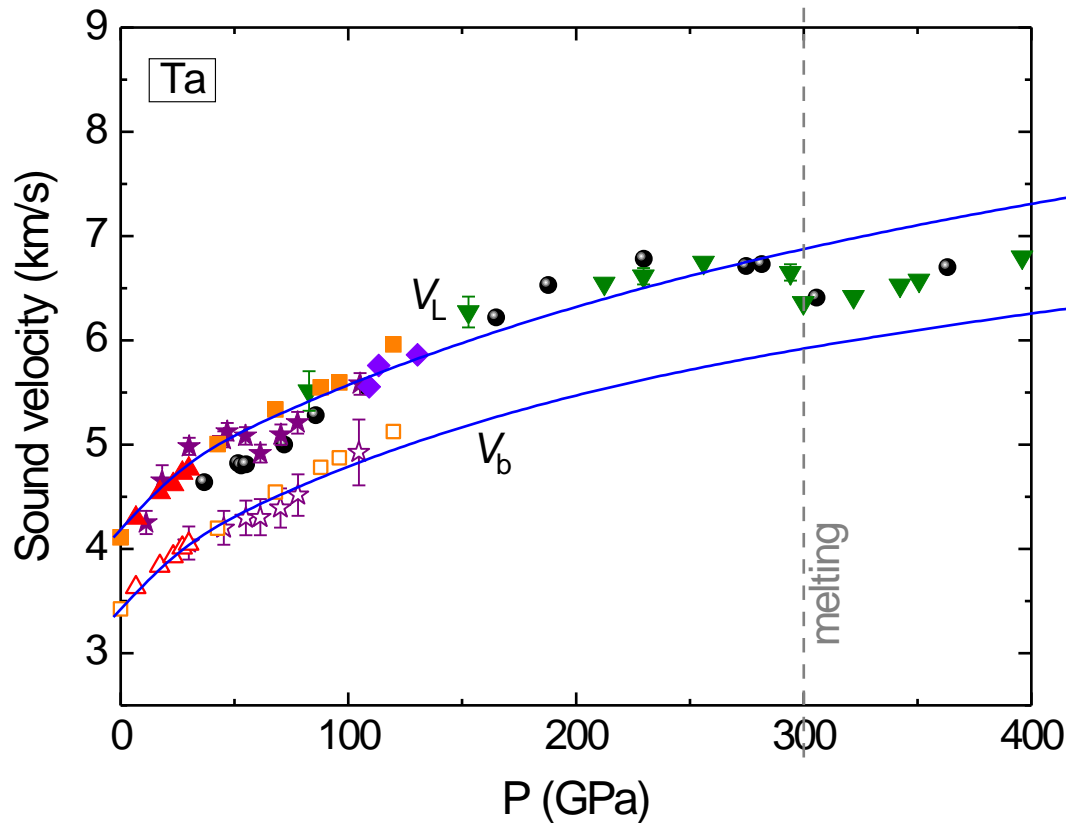


Рис. 13. Скорости звука Ta при ударном сжатии. Линии – наш расчёт. Треугольники – Crowhurst et al, High Press. Res. **23**, 373 (2003); кружки – Akin et al, JAP **125**, 145903 (2019); квадраты – Antonangeli et al, PRB **82**, 132101 (2010); звёзды – Hu et al, JAP **111**, 033511 (2012); ромбы – Yu et al, Explosion & Shock Waves **26**, 484 (2006); перевёрнутые треугольники – Brown et al, *Shock Waves in Condens. Mat.*, Chap. II, **17**, 91 (1984).

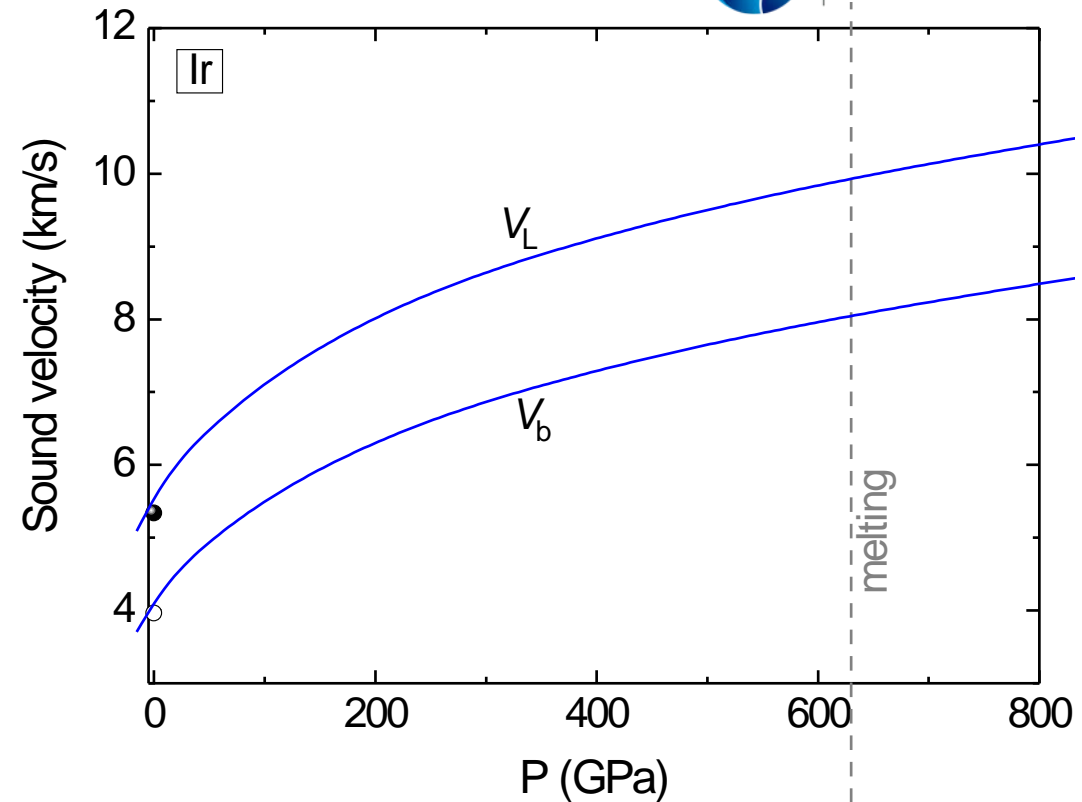


Рис. 14. Скорости звука Ir при ударном сжатии. Линии – наш расчёт. Кружки – LASL shock data (1980).



Заключение

- В работе представлены результаты первопринципных расчётов скоростей звука 14 металлов при высоких давлениях. Скорости звука поликристаллов были получены с помощью рассчитанных упругих констант монокристаллов и усреднения Фойгта-Ройса-Хилла. Вычисленные скорости сравнивались с имеющимися экспериментальными данными. Продемонстрировано хорошее согласие результатов расчётов и экспериментов.
- Достоинства статических методов: статические методы расчёта (в нашем случае FP-LMTO) сочетают в себе хорошую точность и меньшие временные затраты на вычисления по сравнению с квантовой молекулярной динамикой.
- Проблемы статических методов: отсутствие температурной зависимости упругих констант, что может приводить к потере точности вблизи границы плавления вещества.