

非静水压条件下铁从 α 到 ϵ 结构 相变的第一性原理计算*

卢志鹏^{1,2)} 祝文军^{2)†} 刘绍军³⁾ 卢铁城¹⁾ 陈向荣¹⁾

1) 四川大学物理科学与技术学院, 成都 610064)

2) 中国工程物理研究院流体物理研究所冲击波物理与爆轰物理重点实验室, 绵阳 621900)

3) 北京师范大学物理系, 北京 100875)

(2008 年 6 月 23 日收到, 2008 年 8 月 7 日收到修改稿)

采用基于密度泛函理论的平面波赝势方法, 研究了三轴加载的非静水压力和静水压力对铁从体心立方结构 (bcc α 相) 到六角密排结构 (hcp ϵ 相) 相变压力和磁性的影响. 结果发现: 在 0—18 GPa 压力范围内, 相对静水压力条件, 随着压力的升高, bcc 结构的原子磁矩在非静水压力下降低得更快; 在非静水压力下, 相变更容易发生, 相变压力随着非静水压力程度的增加而降低, 并且对非静水压力对相变压力影响的物理机理进行了讨论.

关键词: 相变, 非静水压力, 第一性原理, 铁

PACC: 8130K, 9410D, 3120D, 7630F

1. 引 言

铁是地球上丰度位列第四的元素, 是地核的主要成分^[1,2], 具有非常复杂的相图, 在不同条件下可以以体心立方 (bcc), 面心立方 (fcc), 六角密排 (hcp) 等结构存在. 在一定条件下, 这些结构之间可以相互转变. 铁的结构相变在凝聚态物理、材料科学、地球物理等领域一直是个重要的研究课题, 受到广泛的关注. 1956 年 Bancroft 等^[3] 在实验中发现了铁在冲击压缩条件下发生了结构相变, 随后静高压实验证实这是从 bcc 结构到 hcp 结构 (α — ϵ) 的马氏体相变, 这一发现激励了动态和静态研究压致相变的热潮.

实验^[4,5] 表明, 铁从 bcc 结构到 hcp 结构的静水压相变压力落在 10—15 GPa 范围内, 存在较大的分散性. 对于同种材料, 相同条件下静水压相变压力应该唯一确定. 然而, 实际上严格的静水压条件却难以获得. 例如, 冲击波实验大多在一维应变条件下进行, 由于固体强度的作用, 应力状态并不像流体所表现出的各向同性压缩 (静水压), 而是存在应力的各

向异性, 只有在冲击压力很高的情况下才能忽略应力的各向异性. 而静高压实验中, 由于压砧的结构, 静水压条件的满足程度取决于传压介质的有效性以及所研究材料的塑性性质. 一般情况下, 当压力到达 10 GPa 左右, 传压介质产生近似的静水压力^[6]; 当压力超过 15 GPa 时, 将产生明显的非静水压力; 在更高的压力下, 传压介质发生固化, 将产生强烈的非静水压效应; 而且即使在静水压力区域, 传压介质中仍然会有小的压力梯度存在^[7]. 压砧的形状同样会导致非静水压力的产生^[8]. 研究表明非静水压力会对物质相变产生明显的影响, 例如, 实验^[9,10] 研究发现, 非静水压压缩有效降低了 Si 从 cd (cubic-diamond) 结构到 β -tin (body-centered tetragonal) 结构的相变压力; 在对 GaSb^[11] 和 InSb^[12] 的研究中发现, 非静水压条件强烈地影响着稳定相的结构; Ma 等^[13] 采用旋转金刚石压砧研究了剪切对铁 α — ϵ 相变影响, 研究表明, 在加载剪切作用以后, 相变压强明显降低.

理论对铁的相变研究主要集中于对稳定相结构的讨论^[14—16], 从第一性原理计算静水压下两相吉布斯自由能以确定相变压力^[17]. 然而, 利用第一性原

* 冲击波物理与爆轰物理重点实验室基金 (批准号: 9140C6701010602), 中科院科学技术发展基金重点项目 (批准号: 2007A01004) 及国家自然科学基金 NSAF 联合基金项目 (批准号: 10576004) 资助的课题.

† 通信联系人, E-mail: wjzhu@caep.ac.cn

理对非静水压条件下的结构相变研究却很少,目前对非静水压条件下的理论研究主要基于经验势的分子动力学方法^[18].近年来,Libotte等^[19],Cheng^[20]和 Gaál-Nagy等^[21]利用第一性原理研究了非静水压条件下 Si 的结构相变;Kulkarni^[22]等利用分子动力学和第一性原理研究了 ZnO 在单轴加载下的相变;Durandurdu^[23]利用第一性原理研究了 Au 在三轴加载下的相变.Caspersen等^[24]基于第一性原理计算弹性性质的细观尺度模型,研究了剪切应变对铁 bcc 结构到 hcp 结构相变平衡态混合相的影响,发现剪切应变能激活相变,有降低相变压力的趋势,对实验测量铁 $\alpha-\epsilon$ 相变压力存在较大的分散性进行了解释,但还没有对剪切应力对相变压力影响的物理机理进行明确的讨论.因此研究铁在非静水压加载条件下的结构相变对于深入认识铁的相变机理有着重要意义.

本文基于第一性原理研究了在三轴加载的非静水压条件对铁 $\alpha-\epsilon$ 相变结构、相变压力、磁性的影

响.通过对不同程度非静水压条件下两相的吉布斯自由能的计算,得到了相变压力随着非静水压程度增加而变化的关系,并对非静水压影响进行了物理分析.

2. 模型与计算方法

2.1. 模型结构

为了便于计算和说明,我们采用具有 $Cmcm$ 空间群的正交晶格描述 bcc 结构和 hcp 结构,如图 1 所示.晶格矢量分别为 $(a/2, b/2, 0)$ $(a/2, -b/2, 0)$, $(0, 0, c)$;对于 bcc 结构为 $a = a_{bcc}$, $b = c = \sqrt{2}a_{bcc}$, 原胞中两原子分别位于 $(0, 1/4, 1/4)$ $(0, -1/4, -1/4)$;对于 hcp 结构为 $a = a_{hcp}$, $b = \sqrt{3}a_{hcp}$, $c = c_{hcp}$, 原胞中两原子分别位于 $(0, 1/6, 1/4)$ $(0, -1/6, -1/4)$. bcc 结构的 $[110]$ $[\bar{1}\bar{1}0]$ $[001]$ 方向分别用 x, y, z 表示.

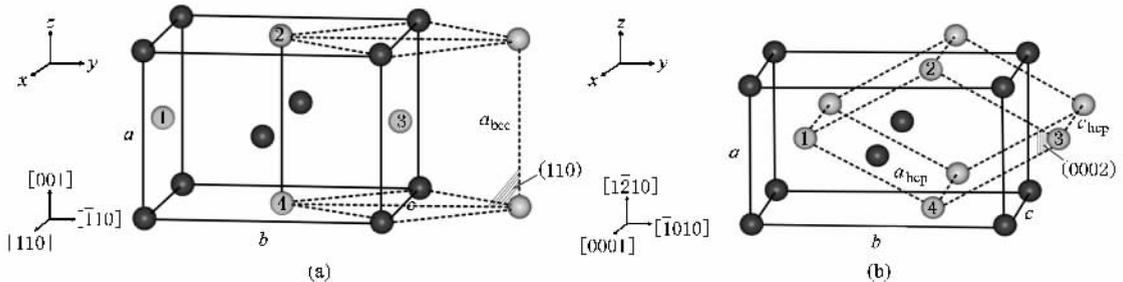


图 1 用正交结构(空间群: $Cmcm$)表示的 bcc 结构(a)和 hcp 结构(b)

2.2. 理论及计算方法

本文采用了基于密度泛函理论(DFT)^[25, 26]的平面波赝势方法的 Castep 程序^[27, 28].电子间的交换关联作用选择广义梯度近似(GGA-PBE)^[29],离子实和价电子之间的相互作用采用 Vanderbilt 超软赝势^[30],布里渊区积分采用 Monkhorst-pack 方法^[31],用 $22 \times 22 \times 22$ 的 k 点(网格原点位于 Γ 点)对布里渊区进行采样;为了消除 Pulay stress 的影响,计算中采用有限基组校正,平面波基函数的截断能量取为 750 eV,计算的总能偏差小于 5.0×10^{-7} eV/atom 时认为达到自洽收敛.几何优化采用 BFGS 算法,自洽收敛的标准为:计算的原子能量偏差小于 5.0×10^{-6} eV/atom,原子的最大 Hellmann-Feynman 力偏差小于 0.01 eV/Å,最大应力偏差小于 0.02 GPa,最大位移

偏差小于 5.0×10^{-4} Å;对更大的截断能(1000 eV)和更密的 k 点采样($25 \times 25 \times 25$)进行测试,总能变化不超过 0.002 eV/atom,晶格常数变化不超过 0.03%.计算中,对 Fe 的 bcc 结构,分别取不同的晶格常数计算总能;对 hcp 结构,在不同体积下分别取不同的 c/a 值计算总能,得到各个体积下最稳定的 c/a 值;总能量与体积关系用 Birch-Murnaghan 状态方程^[32]进行拟合.

对于三轴加载的非静水压情况,可以看作是在静水压力的基础上再叠加一个单轴应力.此时,对零温下吉布斯自由能的计算 $G = E + PV$ 不再适用,必须考虑非静水压力的修正.为了得到非静水压下的吉布斯自由能,本文采用文献[19]提出的方法,利用下式(遵守爱因斯坦求和约定):

$$\int_V \epsilon_{ij} \sigma_{ij} dV \quad (1)$$

计算非静水压力对吉布斯自由能的贡献,其中 σ_{ij} 和 ϵ_{ij} 分别为应力张量和应变张量,三轴加载下的应力张量可以写为

$$\begin{aligned} \sigma_{ij} &= \begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_1 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_3 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} -P_x & 0 & 0 \\ 0 & -P_x & 0 \\ 0 & 0 & -P_z \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_1 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & t \end{pmatrix}, \quad (2) \end{aligned}$$

$t = \sigma_3 - \sigma_1$ 为叠加的单轴应力, P_x, P_z 为晶格外部压力.由热力学第二定律,零温下相变发生的热力学条件(从 1 相到 2 相)为

$$E_2 - E_1 + W \leq 0, \quad (3)$$

其中 W 是相变过程中系统所做的功; E_2 和 E_1 分别为两相的内能,利用(1)和(2)式(3)式可写为

$$E_2 - E_1 + P_x(V_2 - V_1) + \int_1^2 (P_z - P_x) l_x l_y dl_z \leq 0, \quad (4)$$

l_x, l_y, l_z 的积分上下限分别为(2)式应力加载下 2 相和 1 相的晶格常数 a, b, c . (4)式取等号时为相变发生的临界点.从而,对于均匀变形,各相吉布斯自由能可以写为

$$G = E + PV + \gamma F_z c, \quad (5)$$

其中 $\gamma = \frac{\sigma_3 - \sigma_1}{\sigma_1}$ 是单轴应力的百分比,用于描述所加载的非静水压的程度; $P = -\sigma_1$ (5)式第三项是非静水压力对吉布斯自由能的修正,其中 F_z 是沿着 c 轴方向的力,可由 $P \times (ab)$ 近似给出; a, b, c 为晶胞的晶格参数.当 $\gamma = 0$ 时,正好为静水压条件.本文中考虑在静水压下沿 a 轴方向再叠加一个单轴应力(如图 1,即 z 方向).

3. 结果与讨论

为了获得非静水压力条件,对正交晶格(空间群: $Cmcm$)沿坐标轴(如图 1 所示)施加三轴应力 (P_x, P_x, P_z); 其中 $P_z > P_x$, $\gamma = \frac{P_z - P_x}{P_x}$. 图 2 是计算得到的静水压和非静水压 ($\gamma = 0.3$) 条件下 bcc 结构和 hcp 结构总能 E 作为原胞体积 V 的函数关系曲

线.计算得到的零温零压下 bcc 和 hcp 结构的平衡体积 V_0 , 体模量 B_0 , 原子磁矩 $\mu, c/a$ 和实验数据的比较如表 1 所示.由表 1 可以看出,对于 bcc 结构,本文计算结果与实验值^[33]和其他理论计算^[24]结果相符合.对于 hcp 结构,本文计算与其他第一性原理计算结果^[24]也符合得很好.在静水压力条件下, $\gamma = 0$ (3)式即为零温焓表达式,通过焓相等条件计算得到零温静水压力下 bcc 结构到 hcp 结果的相变压力为 11.17 GPa,与其他理论计算^[14-16]符合得很好,也在实验值 10—15 GPa^[4]的范围.通过以上对比表明本文的计算能够对铁的性质进行合理描述.

表 1 零温零压下 Fe 的 bcc 和 hcp 结构平衡体积 (\AA^3), 体模量 (GPa) 和原子磁矩 (μ_B) 与其他理论计算和实验值比较

	本文计算结果	其他计算结果	实验值
bcc			
$V_0/\text{\AA}^3$	11.19 ^{a)}	11.21 ^{b)}	11.43 ^[24]
B_0/GPa	185 ^{a)}	194 ^{b)}	172 ^[24]
μ/μ_B	2.23 ^{a)}	2.23 ^{b)}	2.21 ^[24]
hcp			
$V_0/\text{\AA}^3$	10.09 ^{a)}	10.09 ^{b)}	10.25 ^[24]
B_0/GPa	307 ^{a)}	304 ^{b)}	293 ^[24]
c/a	1.584 ^{a)}	1.584 ^{b)}	1.58 ^[24]

a) 拟合 Birch-Murnaghan 方程; b) CASTEP 几何优化.

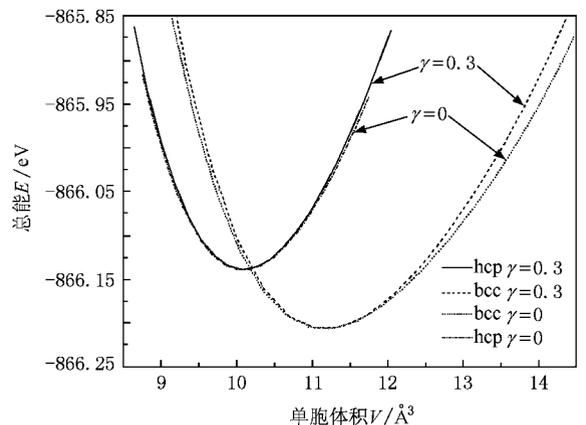


图 2 静水压和非静水压 ($\gamma = 0.3$) 条件下 bcc 结构和 hcp 结构的 $E-V$ 关系曲线

为了研究非静水压力对相变压力的影响,利用(5)式计算了不同 γ 值对应的两相的吉布斯自由能.得到的静水压和非静水压下两相吉布斯自由能 G 随着压力 P ($P = P_x$) 的变化关系分别如图 3(a), (b), (c), (d) 所示.由图可以得到,静水压条件 $\gamma = 0$

及不同程度的非静水压条件 $\gamma = 0.1, \gamma = 0.2, \gamma = 0.3$ 对应的相变压力分别为 11.17 GPa, 10.09 GPa, 9.10 GPa 和 8.24 GPa. 很明显, 对比静水压条件, 在三轴加载的非静水压压力下铁从 bcc 结构到 hcp 结构的相变压力降低, 这与 Ma 等^[13]的加剪切作用的旋转金刚石压砧实验结果及 Caspersen 等^[24]的理论计

算得到的趋势是一致的. 并且, 随着 γ 值的增大, 非静水压程度的增加, 相变压力进一步降低. 计算得到的相变压力 P_x^I 与 γ 的关系如图 4 所示, 拟合得到二者近似关系为 $P_x^I = 11.121 - 9.872\gamma$, 三轴加载的非静水压压力程度的增加与相变压力降低近似成线性关系.

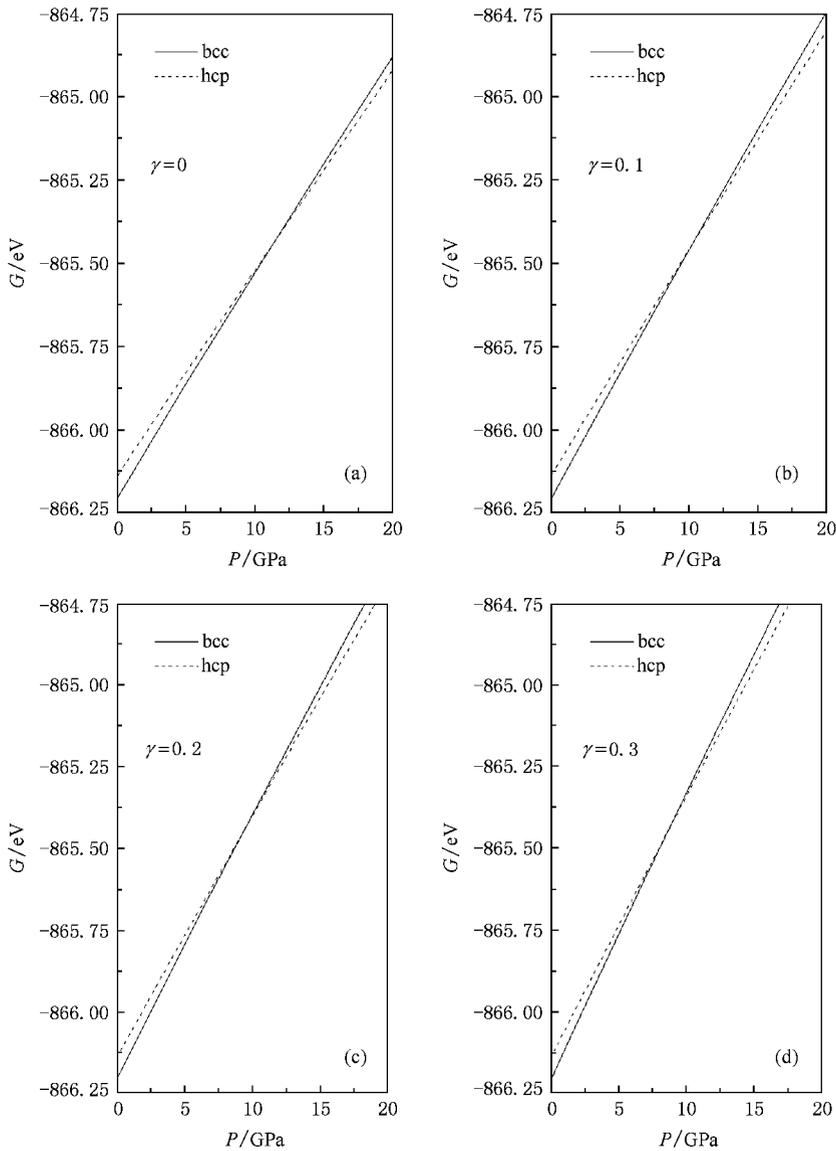


图 3 bcc 结构和 hcp 结构自由能与压强 ($P = P_x$) 关系曲线 (a) 静水压 $\gamma = 0$ (b) $\gamma = 0.1$ (c) $\gamma = 0.2$ (d) $\gamma = 0.3$

图 5 给出了静水压力 $\gamma = 0$ 和非静水压力 $\gamma = 0.3$ 下两相晶格常数(如图 1)随着压力的变化. 如图所示, 在 $\gamma = 0.3$ 的非静水压力条件下, bcc 结构对称性发生变化, 随着加载压力的增加, 原子体积单调减小, 在 $P_x = 8.24$ GPa 时发生一阶相变, 相变发生使得正交晶格表示的 bcc 结构 a 轴和 c 轴分别被压缩了大约 12.2% 和 2.6%, 而 b 轴膨胀了大约

6.6%. 静水压力条件下, 随着加载压力的增加原子体积同样单调减小, 但 bcc 结构对称性一直保持到相变发生, 相变压力为 11.17 GPa, 相变发生使得正交晶格表示的 bcc 结构 a 轴和 c 轴分别被压缩了大约 12.7% 和 2.2%, 而 b 轴膨胀了大约 6.9%. 图 5 中的插图给出静水压力 $\gamma = 0$ 和非静水压力 $\gamma = 0.3$ 下相变前后两相原子体积随着压力变化的关系曲



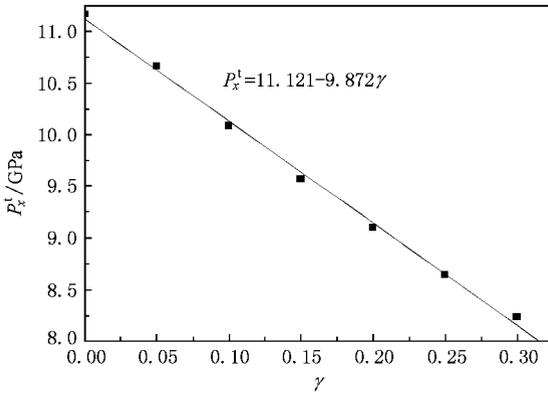


图4 bcc 结构到 hcp 结构相变压力与单轴应力百分比 γ 的关系曲线

线,由图可见,在非静水压力条件下,相变时 bcc 结构的体积大于静水压力下相变时的体积,表明非静水压力下, bcc 结构在更大体积时变得不稳定,向 hcp 结构转变。

三轴加载的非静水压力导致 bcc 结构到 hcp 结构相变压力的降低可以从两相的结构参数定性给出说明.铁从 bcc 结构到 hcp 结构相变可以由 bcc 结构(002)面间距缩短以形成 hcp 结构(1 $\bar{2}$ 10)面,同时(1 $\bar{1}$ 0)面间距扩大以形成 hcp 结构(10 $\bar{1}$ 0)及相邻(110)面沿[1 $\bar{1}$ 0]方向相对滑移完成^[35,36].用图1所示正交晶格结构表示时,这一过程可以看作 a 轴压缩, bc 面膨胀及 ab 面原子的相对滑移. ab 面原子的相对滑移看作只是能量趋于最小化的结果,本文所加载的三轴应力对之并不做功.对于零温零压下的 bcc 结构, $\sqrt{bc} \approx 3.988 \text{ \AA}$, $a \approx 2.82 \text{ \AA}$; 对比零温零压下 hcp 结构 $\sqrt{bc} \approx 4.058 \text{ \AA}$ 及 $a \approx 2.4502 \text{ \AA}$ 可以发现,相变发生时需要 a 轴被压缩而 bc 面发生膨胀,并且 a 轴被压缩的程度大于 bc 面膨胀的程度.从图5可见,在相同压力 P_x 时,对于 bcc 结构,非静水压力作用下 a 轴被压缩的程度比静水压力条件下要大,而 b 轴和 c 轴被压缩的程度比静水压力条件下要小,这是由于在非静水压力作用下, a 轴方向(如图1)所施加的应力大于 b 轴和 c 轴方向的应力($P_z > P_x$),由于泊松效应, b 轴和 c 轴有膨胀的趋势,从而使得 b 轴和 c 轴的被压缩程度减小;而静水压力条件下, bcc 结构三轴压缩程度相同.对比可以发现,非静水压力更利于促使 bcc 结构的(110)面形成 hcp 结构(0002)面,促使相变发生.所以,当所加载的应力 $P_z > P_x$ 时,相变压力降低,相变更容易发生,这与文献[20]得出的结论是一致的。

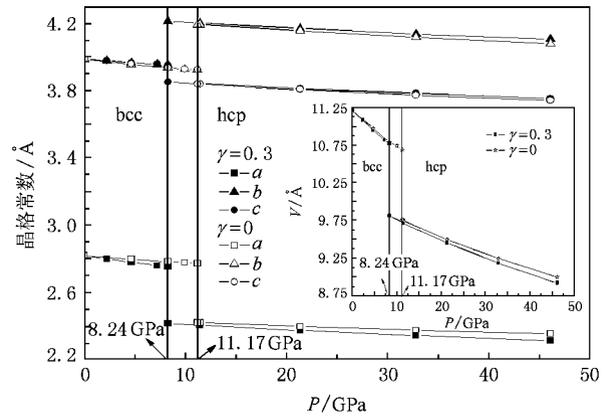


图5 非静水压力条件下($\gamma = 0.3$) bcc 结构到 hcp 结构相变前后晶格常数(见图1)随着压力 P ($P = P_x$) 的变化

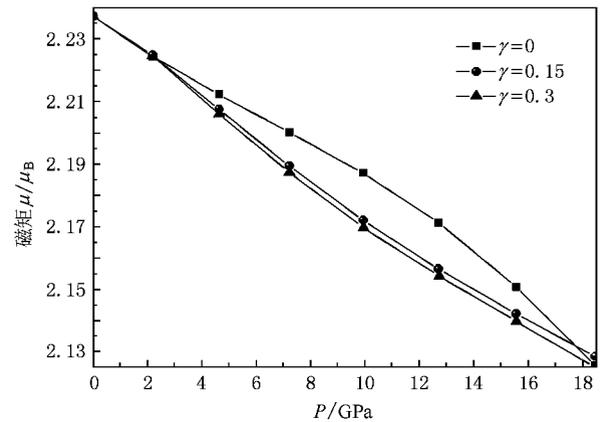


图6 静水压($\gamma = 0$)和非静水压($\gamma = 0.15, \gamma = 0.3$)条件下, bcc 结构原子磁矩随着压力 P ($P = P_x$) 变化关系

进一步考察图2中静水压力和三轴加载的非静水压力下 bcc 结构和 hcp 结构 $E-V$ 关系曲线发现,相同体积下,三轴加载的非静水压力使两相的结构发生变形,导致两相能量相对于静水压下升高;对比 bcc 结构和 hcp 结构发现:由于 hcp 结构本身已经是密排结构,由非静水压力所导致的结构变形没有 bcc 结构大,从而非静水压力使 bcc 结构发生变形导致能量升高较 hcp 结构更为明显,有利于 bcc 结构越过相变势垒向 hcp 结构转变.并且, γ 值越大,非静水压程度越大, bcc 结构变形进一步加剧,能量升高更快,使得 bcc 结构更容易越过相变势垒,从而促使相变压力进一步降低。

由于铁的 bcc 结构具有铁磁性,而 hcp 不具有磁性,所以当发生从 bcc 结构到 hcp 结构的相变时,伴随有磁性的转变.为了更深入研究非静水压力对

相变的影响,本文分别考察了静水压力和非静水压力($\gamma = 0.15, \gamma = 0.3$)对 bcc 结构原子磁矩的影响,得到原子磁矩随着压力 P_x 变化关系如图 6 所示.无论静水压还是非静水压条件, bcc 结构的原子磁矩均随着压力增加降低.在图示压力范围内,对比静水压条件,非静水压下 bcc 结构的原子磁矩随着压力增加而降低得快,并且非静水压程度越大原子磁矩随着压力增加而下降越快.早期第一性原理对铁的 bcc 结构原子自旋和非自旋极化的计算^[37]发现磁性是 bcc 结构的稳定因素之一,压力的增加促使 bcc 结构原子波函数发生重叠, d 轨道展宽而导致费米面附近态密度降低,从而使磁性降低,最终导致 bcc 结构不稳定而向非铁磁性转变.非静水压力下, bcc 结构发生变形从而对称性降低,从而降低了费米面附近的态密度数目,同时随着非静水压力的增加, d 轨道发生重叠而展宽,降低了自旋极化,从而非静水压力下 bcc 结构的原子磁矩下降得更快.所以,相对于静水压力而言,非静水压力使得 bcc 结构在更低压力时不稳定,从而促使相变更容易发生.

4. 结 论

采用基于平面波赝势的第一性原理计算,通过在不同程度非静水压条件下两相的自由能的计算,

研究了非静水压力条件下铁 $\alpha-\epsilon$ 相变压力随着非静水压程度变化的趋势,讨论了非静水压力对相变结构磁性的影响.研究发现,在 0—18 GPa 压力范围内,随着压力升高, bcc 结构的原子磁矩在非静水压力下比静水压力下降低要快,导致变形的 bcc 结构不稳定而向 hcp 结构转变,从而促使相变压力降低,与旋转金刚石压砧实验^[13]相一致;对两相吉布斯自由能的计算表明,相变压力随着非静水压力程度的增加而降低,近似满足线性关系: $P_t = 11.121 - 9.872\gamma$.这表明实验中非静水压性的存在将导致对铁从 α 到 ϵ 结构相变压力测量存在分散性.早前对含有纳米孔洞的单晶铁在冲击波压缩下的结构相变研究^[38, 39]发现,相变首先在孔洞周围成核,这也可以从本文结果给出一些说明:对于实际材料,内部存在各种缺陷,晶体缺陷所处的区域存在强烈的应力不均匀性,能够明显降低相变压力^[13],使得相变在晶体缺陷处先发生.由于实际的冲击压缩实验和静高压实验中都存在着不同程度的非静水压性,对非静水压力的研究有利于对铁相变的微观机理做进一步的了解.

感谢中国工程物理研究院计算机应用研究所张亚林、平勇红、刘建在程序并行编制过程中提供的帮助.

- [1] Ringwood A E 1979 *Geochem. J* **11** 111
- [2] Poirier J P 1994 *Phys. Earth Planet. Inter.* **85** 319
- [3] Bancroft D, Peterson E L, Minshall S 1956 *J. Appl. Phys.* **27** 291
- [4] Andson O L 1993 *J. Geomagn. Geoelectr.* **45** 1235
- [5] Wang F M, Ingalls R 1998 *Phys. Rev. B* **57** 5647
- [6] Piermarini G J, Block S, Barnett J S 1973 *J. Appl. Phys.* **44** 5377
- [7] Barnett J S, Block S, Piermarini G J 1973 *Rev. Sci. Instrum.* **44** 1
- [8] Brister K E, Vohra Y K, Ruoff A L 1988 *Rev. Sci. Instrum.* **59** 318
- [9] Jamieson J C 1963 *Science* **139** 762
- [10] Gupta M C, Ruoff A L 1980 *J. Appl. Phys.* **51** 1072
- [11] Mezouar M, Libotte H, Deputier S et al 1999 *Phys. Status Solidi B* **211** 395
- [12] Mezouar M, Le Bihan T, Libotte H et al 1999 *J. Synchrotron Radiat.* **6** 115
- [13] Ma Y Z, Selvi E, Levitas I V et al 2006 *J. Phys: Condens. Matter* **18** S1075
- [14] Söderlind P, Moriarty J A, Willis J M 1996 *Phys. Rev. B* **53** 14063
- [15] Cohen R E, Stixrude L, Wasserman E 1997 *Phys. Rev. B* **56** 8575
- [16] Stixrude L, Cohen R E, Singh D 1994 *Phys. Rev. B* **50** 6442
- [17] Hou Y, Yuan J M 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 3458 (in Chinese) [侯永、袁建民 2007 物理学报 **56** 3458]
- [18] Lee I H, Jeong J W, Chang K J 1997 *Phys. Rev. B* **55** 5689
- [19] Libotte H, Gaspard J P 2000 *Phys. Rev. B* **62** 7110
- [20] Cheng C 2003 *Phys. Rev. B* **67** 134109
- [21] Gaál-Nagy K, Strauch D 2006 *Phys. Rev. B* **73** 134101
- [22] Kulkarni A J, Zhou M, Sarasamak K et al 2006 *Phys. Rev. Lett.* **97** 105502
- [23] Durandurdu M 2007 *Phys. Rev. B* **76** 024102
- [24] Caspersen K J, Lew A, Ortiz M et al 2004 *Phys. Rev. Lett.* **93** 115501
- [25] Hobenberg P, Kohn W 1964 *Phys. Rev. B* **136** 864
- [26] Kohn W, Sham L J 1965 *Phys. Rev. A* **140** 1133
- [27] Payne M C, Teter M P, Allen D C et al 1992 *Rev. Modern Phys.* **64** 1045
- [28] Milman V, Winkler B, White J A et al 2000 *Int. J. Quantum Chem.* **77** 895
- [29] Perdew J P, Burke K, Ernzerhor M 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3865

- [30] Vanderbilt D 1990 *Phys. Rev. B* **41** 7892
- [31] Monkhorst H J , Pack J D 1976 *Phys. Rev. B* **13** 5188
- [32] Murnaghan F D 1994 *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **30** 244
- [33] Simmons G , Wang H 1997 *Single Crystal Elastic Constants and Calculated Aggregate Properties : A Handbook* (Cambridge : MIT Pres)
- [34] Ashcroft N V , Mermin N D 1976 *Solid State Physics* (Philadelphia : Saunders College Publishers)
- [35] Bassett W A , Huang E 1987 *Science* **238** 780
- [36] Mao H K , Bassett W A , Takahashi T 1967 *J. Appl. Phys.* **38** 272
- [37] Ekman M , Sadigh B , Einarsdotter K 1998 *Phys. Rev. B* **58** 5926
- [38] Cui X L , Zhu W J , Deng X L , Li Y J , He H L 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 5545 (in Chinese) [崔新林、祝文军、邓小良、李英骏、贺红亮 2006 物理学报 **55** 5545]
- [39] Shao J L , Wang Pei , Qin C S , Zhou H Q 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 1254 (in Chinese) [邵建立、王 裴、秦承森、周洪强 2008 物理学报 **57** 1254]

Structure phase transition from α to ϵ in Fe under non-hydrostatic pressure : an ab initio study *

Lu Zhi-Peng^{1,2)} Zhu Wen-Jun²⁾† Liu Shao-Jun³⁾ Lu Tie-Cheng¹⁾ Chen Xiang-Rong¹⁾

¹ *Department of Physics , Sichuan University , Chengdu 610064 , China*

² *Laboratory for Shock Wave Detonation Physics Research , Institute of Fluid Physics , CAEP , Mianyang 621900 , China*

³ *Department of Physics , Beijing Normal University , Beijing 100875 , China*

(Received 23 June 2008 ; revised manuscript received 7 August 2008)

Abstract

We performed first-principles calculations for the pressure-induced martensitic phase transition from the ground state ferromagnetic bcc phase to a nonmagnetic hcp phase in Fe under hydrostatic and non-hydrostatic pressure based on density-functional theory , employing the pseudopotential and plane-wave method. The calculated results show that the magnetic moment of bcc iron under non-hydrostatic conditions decreases faster than that under hydrostatic conditions as the stress increases from 0 GPa to 18 GPa. Theoretical calculations prove that non-hydrostatic conditions can significantly reduce the bcc phase to hcp phase transition pressure. The critical stress for bcc-to-hcp transformation decreases linearly as the non-hydrostatic effect increases. The physical origins of the influence of non-hydrostatic pressure on the transition pressure are discussed.

Keywords : phase transition , non-hydrostatic pressure , iron

PACC : 8130K , 9410D , 3120D , 7630F

* Project supported by the Foundation of State Key Laboratory of Shock Wave and Detonation Physics(Grant No. 9140C6701010602) and the Science and Technology Fund of China Academy of Engineering Physics(Gran. No. 2007A01004) , and the Joint Funds of the National Natural Science Foundation of China(Grant No. 10576004).

† Corresponding author. E-mail : wjzhu@caep.ac.cn