

α -Ti₂Zr 高压物性的第一性原理计算研究*

张品亮¹⁾ 龚自正^{1)2)†} 姬广富³⁾ 刘崧¹⁾

1) (西南交通大学材料科学与工程学院, 材料先进技术教育部重点实验室, 成都 610031)

2) (北京卫星环境工程研究所, 可靠性与环境工程技术国防科技重点实验室, 北京 100094)

3) (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国防科技重点实验室, 绵阳 621900)

(2012年9月10日收到; 2012年10月29日收到修改稿)

基于密度泛函理论的第一性原理计算获得了 α -Ti₂Zr 的晶体结构、弹性常数、德拜温度和电子分布情况, 研究了它们与压力的关系. 计算得到的晶体结构参数与实验值一致. 运用有限应变方法计算得到了 α -Ti₂Zr 的体积模量 B 、剪切模量 G 、杨氏模量 E 和泊松比 σ . B 和 E 的零压值分别为 101.2 和 35.6 GPa. G/B 的值较小, 并且随着压力的增加而减小, 表明 α -Ti₂Zr 具有优异的延展性. 基于弹性常数得到平均声速, 从而获得了德拜温度 $\Theta = 321.7$ K. 通过解 Christoffel 方程获得的压缩波和剪切波数据揭示 α -Ti₂Zr 具有较强的各向异性. 此外, 压力诱导电子从 s 轨道到 d 轨道的转移说明在一定压力下 α -Ti₂Zr 将转变为 β 相.

关键词: 第一性原理, α -Ti₂Zr, 物性, 高压

PACS: 62.20.De, 71.15.Mb, 65.40.-b

DOI: 10.7498/aps.62.046202

1 引言

IV 族金属及其合金具有高的比强度、耐腐蚀、较好的高低温性能^[1], 因此引起科学界和工程应用界的广泛关注. 目前, Ti-Zr 合金已经广泛应用于航空航天、医学、核工业等领域. Ti-Zr 合金存在多种相结构^[2,3], 在室温下通常以密排六方 (hcp) 结构的 α 相形式存在; 随着压力的增加, α 相转变为六方结构的 ω 相; 当达到一定压力时, 形成具有体心立方 (bcc) 结构的 β 相. 研究表明, 压力诱导电子从 s 轨道转移到 d 轨道决定了压力下结构的稳定性^[4]. 因此, 研究高压下 α -Ti₂Zr 合金中电子的分布情况, 对确定高压下的稳定相具有重要作用.

体积模量、剪切模量和杨氏模量等是重要的物性参数, 研究高压下 α -Ti₂Zr 合金的这些参数, 对 Ti₂Zr 合金在高压环境下的性能评价和应用具有重要意义.

目前对 IV 族金属及其合金已做了大量研究, 但是主要集中在 Ti^[5-9], Zr^[4,10-14] 和 TiZr^[15,16], 很

少涉及 Ti₂Zr. 虽然 α -Ti₂Zr 合金已经在实验中制备得到, 并且测量了它的晶格参数^[17-19]. 但是关于它的弹性常数和热力学性能, 特别是高压下这些物性参数的变化还没有相关报道. 随着计算机技术的迅速发展, 第一性原理平面波赝势方法已经广泛应用于材料结构和性能的计算研究中^[20-25], 如王斌等^[23] 利用第一性原理计算了 TiC 的弹性常数和热力学性质; 陈中钧等^[24] 采用此方法研究了 MgS 的弹性性能, 电子结构和光学性质; Zhu 等^[25] 计算研究了 TiO₂ 在高压下的弹性性能. 因此, 本文基于第一性原理方法计算研究了 α -Ti₂Zr 的结构、弹性常数、德拜温度以及压力诱导下电子的分布情况等.

2 计算方法

2.1 参数设置

第一性原理计算采用了基于密度泛函理论 (DFT) 的平面波赝势法, 所用软件为 CASTEP^[26]. 计算中, 电子之间相互作用的交换关联势采用了

* 国家重点基础研究发展计划 (批准号: 2010CB731600) 和国家国防科工局空间碎片专项 (批准号: KJSP06209, KJSP06210) 资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: gongzz@263.net

广义梯度近似 (GGA) 的 Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) 势 [27]; 离子实和价电子之间的相互作用采用超软赝势 [28]; 平面波截断能为 550 eV; K 点为 $18 \times 18 \times 4$. 几何优化采用 Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (BFGS) 算法, 收敛标准为每原子总能量偏差 $< 10^{-5}$ eV, 原子的最大 Hellmann-Feynman 力 < 0.03 eV/Å, 最大应力偏差 < 0.05 GPa, 最大位移偏差 < 0.001 Å.

2.2 弹性常数

体积模量 B 和剪切模量 G 可通过 Voigt-Reuss-Hill (VRH) 方法获得 [29]. 对于具有六方结构的晶体, B 和 G 可以表示为 [30]

$$B_{\text{Voigt}} = (1/9)[2(C_{11} + C_{12}) + 4C_{13} + C_{33}], \quad (1)$$

$$B_{\text{Reuss}} = \frac{C^2}{C_{11} + C_{12} + 2C_{33} - 4C_{13}}, \quad (2)$$

$$G_{\text{Voigt}} = \frac{1}{30}(C_{11} + C_{12} + 2C_{33} - 4C_{13} + 12C_{44} + 12c_{66}), \quad (3)$$

$$G_{\text{Reuss}} = \frac{5}{2} \frac{C^2 \cdot C_{44} \cdot C_{66}}{3B_{\text{Voigt}}C_{44} \cdot C_{66} + C^2(C_{44} + C_{66})}, \quad (4)$$

其中

$$C_{66} = (C_{11} - C_{12})/2, \quad (5)$$

$$C^2 = (C_{11} + C_{12})C_{33} - 2C_{13}^2, \quad (6)$$

以上式中 C_{ij} 为独立弹性常数. 取 Voigt 值和 Reuss 值的算术平均, 得到 Hill 值 [31]:

$$B = B_{\text{Hill}} = (B_{\text{Voigt}} + B_{\text{Reuss}})/2, \quad (7)$$

$$G = G_{\text{Hill}} = (G_{\text{Voigt}} + G_{\text{Reuss}})/2. \quad (8)$$

杨氏模量 E 和泊松比 σ 可从以下关系推出:

$$E = \frac{9B \cdot G}{3B + G}, \quad (9)$$

$$\sigma = \frac{3B - 2G}{2(3B + G)}. \quad (10)$$

3 结果和讨论

3.1 晶格常数

本文中所建立的 α -Ti₂Zr 为 $1 \times 1 \times 3$ 的超胞结构, 具有 6 个原子, 采用 ReB₂ 类型的晶体结

构 [32], 如图 1. 在开始计算之前, 我们做了大尺度效应的验证. 根据对称性计算了两种大晶胞 ($2 \times 1 \times 3$ 和 $1 \times 1 \times 6$ 的超胞) 的总能量 E_{GE} , 这两种结构中每个原子的能量为: -1495.6958872 和 -1495.6958873 eV, 结果与本文所采用结构 (-1495.6958872 eV) 相同, 说明本文所采用的结构虽为最小晶胞, 但不存在大尺度效应.

通过比较总能量 E_{GE} 可以获得在零压下的平衡结构参数, 而通过拟合 $E_{\text{GE}}-V$ 关系可以得到体积模量 B_0 和体积模量对压力的一阶偏导数 B'_0 , 下标“0”表示在零温零压下的值. 根据 α -Ti₂Zr 的实验 c/a 值 1.593, 计算了一系列 c/a 值下不同晶格常数相应的总能量 E_{GE} 和原胞体积 V , 用 Birch-Murnaghan 状态方程 [33] 进行拟合, 最终得到的晶格常数 a 和 c , B_0 和 B'_0 列于表 1, 同时, 表 1 中还列出了实验测量结果. 对比后发现, 计算结果与实验结果相一致, 可认为我们的计算是可靠的.

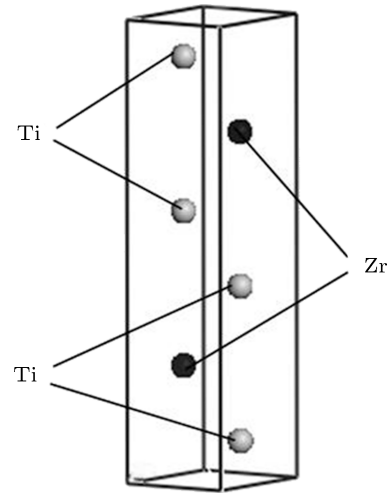


图 1 α -Ti₂Zr 的结构

表 1 α -Ti₂Zr 的晶格常数 a, c, B_0 和 B'_0

	$a/\text{Å}$	$c/\text{Å}$	c/a	B_0/GPa	B'_0
本文	3.032	4.877	1.608	99.3	3.4
实验结果 [17]	3.051	4.859	1.593		

图 2 为 α -Ti₂Zr 的晶格常数与压力的关系, 下标“0”表示在零压下的值. 对于 α -Ti₂Zr, 较弱的原子键 Zr—Zr 决定晶格参数 a , 因此在高压作用下, a 轴方向的压缩率明显大于 c 轴方向.

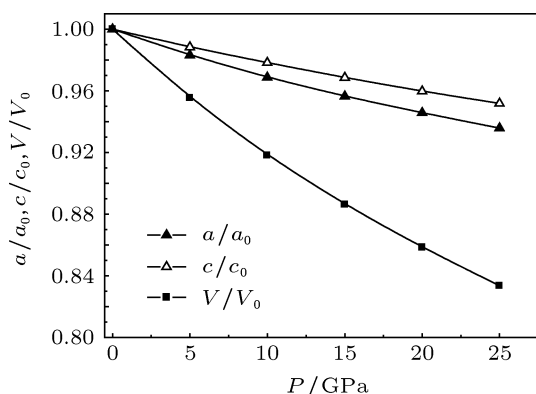


图2 $a/a_0, c/c_0$ 和 V/V_0 与压力 P 的关系

3.2 弹性常数

单晶的弹性常数可以通过计算能量 E_{GE} 的二阶偏导数获得^[34,35]:

$$C_{ij} = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial^2 E_{GE}}{\partial \varepsilon_i \partial \varepsilon_j} \right), \quad (11)$$

其中 V 为原胞体积; ε 是应变张量, 通过材料的变形来获得弹性常数. 对于晶体, 有 21 个独立的弹性常数, 但是根据晶体的对称性可以将它们减少. 对于六角晶系的 α -Ti₂Zr, 存在 5 个独立弹性常数: $C_{11}, C_{12}, C_{13}, C_{33}$ 和 C_{44} , 当它们符合条件^[36,37] $C_{44} > 0, C_{11} > |C_{12}|, (C_{11} + C_{12})C_{33} > 2C_{13}^2$ 时, 才能够稳定存在. 计算结果表明: α -Ti₂Zr 在 0—25 GPa 压力范围内稳定存在.

图 3 为 α -Ti₂Zr 的独立弹性常数与压力的关系. 从图 3 中可以看出 $C_{11}, C_{33}, C_{12}, C_{13}$ 均随着压力的升高而增加, 只有 C_{44} 随着压力的升高而降低. 对于过渡金属, C_{11} 和 C_{33} 非常重要, 它们与原子键和变形行为有关. $C_{33} > C_{11}$ 表明 {001} 面上的原子键强于 {100} 面上的原子键.

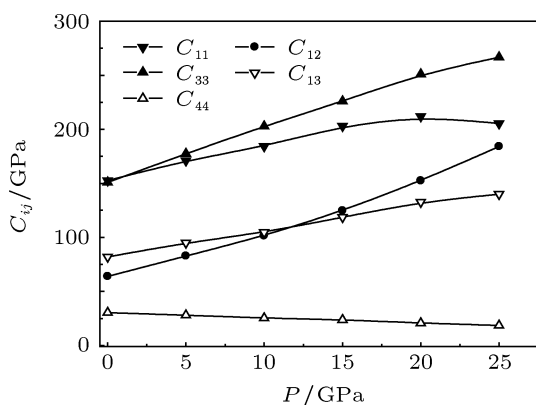


图3 独立弹性常数 C_{ij} 与压力 P 的关系

表 2 为计算得到的体积模量 B 、剪切模量 G 、杨氏模量 E 和泊松比 σ , 为便于对比, α -Ti, α -Zr 以及 α -TiZr 的参数也在表 2 中给出. 由表 2 可见, α -Ti 的体积模量 B 、剪切模量 G 和杨氏模量 E 最大, α -Ti₂Zr 的值介于 α -Ti 和 α -Zr 之间. 它们的泊松比 σ 基本一致. 因此, 可通过调节 Ti-Zr 系合金的组成元素含量实现对其弹性常数的控制. 图 4 为 B 和 G 随压力的变化趋势, 从图 4 中可以看出, B 随着压力的升高而迅速增加, G 则随着压力的升高而减小.

体积模量 B 和剪切模量 G 决定着材料的抗塑

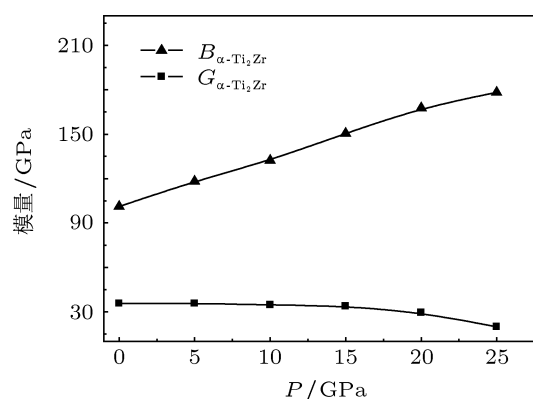


图4 体积模量 B 和剪切模量 G 与压力 P 的关系

表 2 α -Ti₂Zr, α -Ti, α -Zr 和 α -TiZr 的体积模量 B , 剪切模量 G , 杨氏模量 E , 泊松比 σ 和 G/B

结构	B/GPa	G/GPa	E/GPa	σ	G/B
α -Ti ₂ Zr	101.2	35.6	95.7	0.342	0.352
α -Ti ^[38]	107.2	40.1	108.0	0.345	0.374
α -Zr ^[10]	97.4	33.8	91.0	0.344	0.347
α -TiZr ^[16]	98.4	35.2	94.3	0.340	0.358

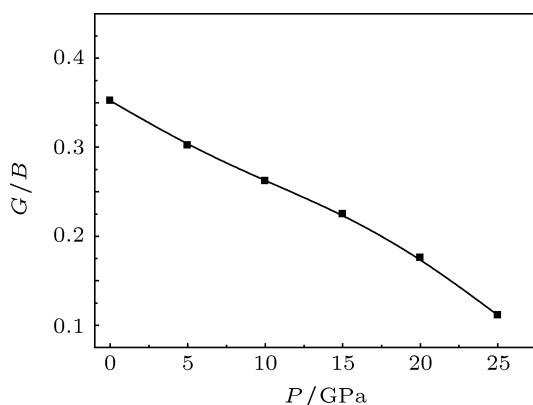


图5 α -Ti₂Zr 的 G/B 比值与压力 P 的关系

性变形和抗断裂能力. Pugh^[39] 基于弹性常数提出一种预测材料脆性和延展性的经验公式: $R = G/B$. 如果 $R > 0.57$, 材料表现为脆性; 反则具有较好的延展性. 从表 2 中可看出 $\alpha\text{-Ti}_2\text{Zr}$ 的 $R < 0.57$, 具有较好的延展性. 此外, $\alpha\text{-Zr}$ 的延展性最好, 其次为 Ti-Zr 合金. 图 5 给出了 R 与压力的关系, 随着压力的增加, R 值减小. 说明在压力作用下, $\alpha\text{-Ti}_2\text{Zr}$ 表现出更加优异的延展性.

3.3 各向异性

声速和弹性常数的关系服从 Christoffel 方程^[40]:

$$(C_{ijkl}m_jm_k - \rho u^2\delta_{il})\tau_i = 0, \quad (12)$$

式中 C_{ijkl} 为弹性常数, ρ 为密度, τ 为传播矢量, m 为传播方向, $M = \rho u^2$ 为传播系数, u 为速度. 声速的各向异性可表示为^[41]

$$\Delta_i = \frac{M_i[m_x]}{M_i[100]}, \quad (13)$$

这里 m_x 为除了 [100] 方向以外的传播方向, i 代表三种弹性波类型. 通过解 Christoffel 方程, 可获得 $\alpha\text{-Ti}_2\text{Zr}$ 的压缩波 (P)、垂直于基面的偏振波 ($S1$) 和平行于基面的偏振波 ($S2$) 的各向异性:

$$\Delta_P = \frac{C_{33}}{C_{11}}, \quad (14)$$

$$\Delta_{S1} = \frac{C_{11} + C_{33} - 2C_{13}}{4C_{44}}, \quad (15)$$

$$\Delta_{S2} = \frac{2C_{44}}{C_{11} - C_{12}}. \quad (16)$$

根据 Born 和 Huang^[42] 提出的 CNNF 模型, 独立弹性常数比率 $C_{33} : C_{11} : C_{12} : C_{13} : C_{44} = 32 : 29 : 11 : 8 : 8$, $\Delta_P = 1.1$, $\Delta_{S1} = 1.4$ 和 $\Delta_{S2} = 0.9$. 图 6 为压

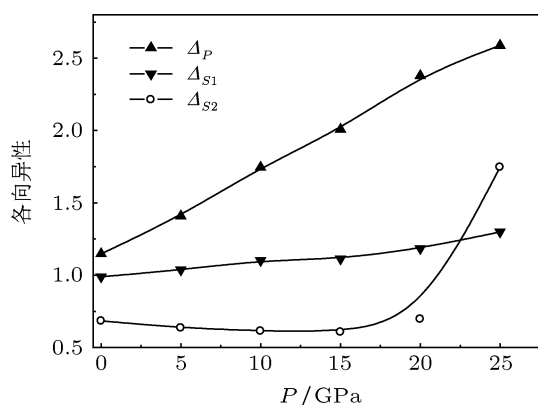


图 6 $\alpha\text{-Ti}_2\text{Zr}$ 的各向异性与压力 P 的关系

力与相关弹性波的各向异性的关系. $\alpha\text{-Ti}_2\text{Zr}$ 的零压 Δ_P , Δ_{S1} 和 Δ_{S2} 分别为 0.99, 1.15 和 0.68, 与 CNNF 模型偏差较大, $\alpha\text{-Ti}_2\text{Zr}$ 在零压下表现出较大的各向异性. 随着压力的增加 Δ_P 和 Δ_{S1} 均单调增加, Δ_{S2} 先缓慢减小再迅速增加. Δ_P , Δ_{S1} 和 Δ_{S2} 与 CNNF 模型的偏差随着压力的增加而增大, 因此 $\alpha\text{-Ti}_2\text{Zr}$ 在高压下同样具有较大的各向异性.

3.4 德拜温度

德拜温度是一个重要的物性参数, 很多物理属性都与德拜温度有关, 如比热容、热膨胀系数和熔点. 德拜温度可以从弹性常数计算得到^[43]:

$$\Theta = \frac{h}{k_B} \left(\frac{3n}{4\pi V} \right)^{1/3} v_m, \quad (17)$$

其中 h 是 Plank 常数; k_B 是 Boltzmann 常数; n 是原胞中的原子数量. 平均波速 v_m 可以利用 Navier 方程^[44] 从剪切波速 v_s 和压缩波速 v_p 计算得到:

$$v_p = \sqrt{\frac{(B + 4/3G)}{\rho}}, \quad (18)$$

$$v_s = \sqrt{\frac{G}{\rho}}, \quad (19)$$

$$v_m = \left[\frac{1}{3} \left(\frac{2}{v_s^3} + \frac{1}{v_p^3} \right) \right]^{-1/3}. \quad (20)$$

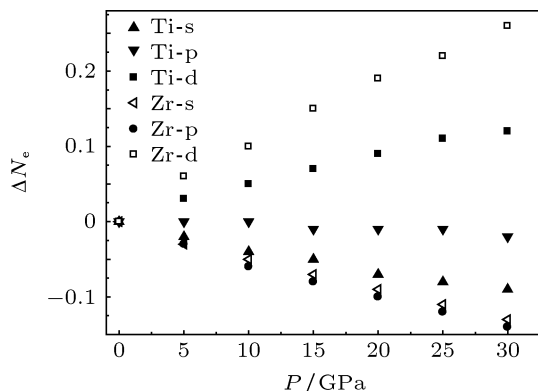
计算得到 $\alpha\text{-Ti}_2\text{Zr}$ 合金的德拜温度为 $\Theta = 321.7$ K.

3.5 压力下的 s-d 电子转移

IV 族元素具有较窄的 d 轨道. 在压力诱导下, s-p 轨道的电子转移到 d 轨道对这些晶体的结构稳定性具有重要影响^[45]. 下面采用 Mulliken 分布分析方法^[46] 讨论压力诱导 $\alpha\text{-Ti}_2\text{Zr}$ 的 s-d 电子转移情况. 图 7 为在加压下 s, p 和 d 轨道上电子数的变化情况, ΔN_e 为加压与零压下轨道上电子数之差. 在压力下 Ti 和 Zr 原子中 s, p 轨道上的电子转移到 d 轨道, 增加了 d 轨道上占据的原子数, 这正好解释了表 1 中零压体积模量对压力的偏导数 B'_0 为什么较小. 1983 年, Vohra^[47] 研究了 d 轨道金属的柔软度, 得到 B'_0 与轨道上电子数的关系:

$$B'_0 = B'_R + (2/N_{sp})X, \quad (21)$$

其中 N_{sp} 表示 sp 轨道上的电子数. $X = -dN_{sp}/d \ln V = dN_d/d \ln V$ 为 s \leftrightarrow d 电子转移参数, 负数表示 s \rightarrow d 的电子转移. B'_R 表示在没有电子转

图7 压力下 α -Ti₂Zr 各层电子数的变化情况

移情况下体积模量对压力的偏导数 ($X = 0$)。可见 $s \rightarrow d$ 电子转移将使 B'_0 偏小。Bashkin 等^[15] 认为压力诱导过渡金属发生 $s \rightarrow d$ 电子转移是 IV 族金属在压力下发生相变的原因。一些理论预计^[45] 当 IV 族金属 d 轨道电子数 $N_d > 2.2$ 时, bcc 结构的 β 相将更加稳定。图 7 表明, 在压力作用下 α -Ti₂Zr 中 Ti 和 Zr 原子 d 轨道的电子数随着压力的增加而增加。

因此, 当压力达到一定值时, α -Ti₂Zr 可能形成具有 bcc 结构的 β -Ti₂Zr, 这正好验证了我们早期的结论: β -Ti₂Zr 形成于 25.4—29.1 GPa^[48]。

4 结论

通过第一性原理计算得到了 α -Ti₂Zr 的晶体结构、弹性常数、德拜温度和电子分布, 研究了在压力作用下这些参数的变化情况。得到的结论如下: 1) 计算得到的晶体参数与实验结果一致, 因此本文的计算是可信的; 2) 在零压下, α -Ti₂Zr 的体积模量为 101.2 GPa, 剪切模量为 35.6 GPa, 在所研究的压力下体积模量随着压力的升高而增加, 与剪切模量的变化趋势相反。德拜温度为 $\Theta = 321.7$ K; 3) $G/B < 0.57$, 并且随着压力的增加而减小, 说明 α -Ti₂Zr 具有较好的延展性; 4) α -Ti₂Zr 在零压及高压下的各向异性均较大; 5) Mulliken 分布分析表明, 当达到一定压力时, α -Ti₂Zr 可能转变为 β -Ti₂Zr。

- [1] Vohra Y K, Spencer P T 2001 *Phys. Rev. Lett.* **86** 3068
- [2] Murray J L 1981 *Bulletin of Alloys Phase Diagrams* **2** 197
- [3] Chatterji D, Hepworth M T, Hruska S J 1971 *Metall. Trans.* **2** 1271
- [4] Liu W, Li B S, Wang L P, Zhang J Z, Zhao Y S 2007 *Phys. Rev. B* **76** 144107
- [5] Hao Y J, Zhang L, Chen X R, Li Y H, He H L 2008 *Solid State Commun.* **146** 105
- [6] Mei Z G, Shang S L, Wang Y, Liu Z K 2009 *Phys. Rev. B* **79** 134102
- [7] Errandonea D, Meng Y, Somayazulu M, Häusermann D 2005 *Physica B* **355** 116
- [8] Kerley G I 2003 *Sandia Report*, Sand 2003-3785
- [9] Hao Y J, Zhu J, Zhang L, Qu J Y, Ren H S 2010 *Solid State Commun.* **12** 1473
- [10] Wang B T, Zhang P, Liu H Y, Li W D, Zhang P 2011 *J. Appl. Phys.* **109** 063514
- [11] Hao Y J, Zhang L, Chen X R, Li Y H, He H L 2008 *J. Phys.: Condens. Mat.* **20** 235230
- [12] Liu W, Li B S, Wang L P, Zhang J Z, Zhao Y S 2008 *J. Appl. Phys.* **104** 076102
- [13] Xia H, Ducloux S J, Ruoff A L, Vohra Y K 1990 *Phys. Rev. Lett.* **64** 204
- [14] Zhang S H, Zhu Y, Zhang X Y, Zhang S L, Qi L, Liu R P 2010 *Comput. Mat. Sci.* **50** 179
- [15] Bashkin I O, Fedotov V K, Nefedova M V, Tissen V G, Ponyatovsky E G, Schiwiek A, Holzapfel W B 2003 *Phys. Rev. B* **68** 054401
- [16] Wang B T, Li W D, Zhang P 2012 *J. Nucl. Mater.* **420** 501
- [17] Dolukhanyan S K, Aleksanyan A G, Ter-Galstyan O P, Shekhtman V S, Sakharov M K, Abrosimova G E 2007 *Russ. J. Phys. Chem. B* **1** 563
- [18] Shekhtman V S, Dolukhanyan S K, Aleksanyan A G, Mayilyan D G, Ter-Galstyan O P, Sakharov M K, Khasanov S S 2010 *Int. J. Self-Propag. High-Temp. Synth.* **19** 40
- [19] Swainson I P, Dolukhanyan S K, Aleksanyan A G, Shekhtman V S, Mayilyan D G, Yonkeu A L 2010 *Can. J. Phys.* **88** 741
- [20] Xu G L, Chen J D, Chen D, Ma J Z, Yu B H, Shi D H 2009 *Chin. Phys. B* **18** 0744
- [21] Hao A M, Zhou T J, Zhu Y, Zhang X Y, Liu R P 2011 *Chin. Phys. B* **20** 047103
- [22] Li D H, Su W J, Zhu X L 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 023103 (in Chinese) [李德华, 苏文晋, 朱晓玲 2012 物理学报 **61** 023103]
- [23] Wang B, Liu Y, Ye J W 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 186501 (in Chinese) [王斌, 刘颖, 叶金文 2012 物理学报 **61** 186501]
- [24] Chen Z J 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 177104 (in Chinese) [陈中钧 2012 物理学报 **61** 177104]
- [25] Zhu J, Yu J X, Wang Y J, Chen X R, Jing F Q 2008 *Chin. Phys. B* **17** 2216
- [26] Segall M D, Lindan P J D, Probert M J, Pickard C J, Hasnip P J, Clark S J, Payne M C 2002 *J. Phys.: Condens. Mat.* **14** 2717
- [27] Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3865
- [28] Vanderbilt D 1990 *Phys. Rev. B* **41** 7892
- [29] Nye J F 1957 *Physical Properties of Crystals* (London: Oxford University Press)
- [30] Watt J P, Peselnick L 1980 *J. Appl. Phys.* **51** 1525
- [31] Hill R 1952 *Proc. Phys. Soc.* **65** 350
- [32] Long R, Dai Y, Jin H, Huang B B 2008 *Res. Lett. Phys.* **2008** 293517
- [33] Murnaghan F D 1944 *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **30** 244
- [34] Antonov V, Iordanova I 2009 *AIP Conf. Proc.* **1203** 1149
- [35] Accelrys Software Inc. 2010 *Materials Studio Release Notes* (Release 5.5) (San Diego: Accelrys Software Inc.)
- [36] Born M 1940 *Proc. Cambridge Philos. Soc.* **36** 160

- [37] Sin'ko G V, Smirnov N A 2002 *J. Phys.: Condens. Mat.* **14** 6989
- [38] Tang W H, Zhang R Q 1999 *Equation of State Theory and Calculation Conspectus* (Changsha: National University of Defense Technology Press) p321(in Chinese) [汤文辉, 张若棋 1999 物态方程理论及计算概论 (长沙: 国防科技大学出版社) 第 321 页]
- [39] Pugh S F 1954 *Philos. Mag.* **45** 823
- [40] Auld M A 1973 *Acoustic Fields and Waves in Solids* (Vol. 1) (New York: Wiley)
- [41] Steinle-Neumann G, Stixrude L, Cohen R E 1999 *Phys. Rev. B* **60** 791
- [42] Born M, Huang K 1954 *Dynamical Theory of Crystal Lattices* (Clarendon: Oxford)
- [43] Anderson O L 1963 *J. Phys. Chem. Solids* **24** 909
- [44] Schreiber E, Anderson O L, Soga N 1973 *Elastic Constants and Their Measurements* (New York: McGraw-Hill)
- [45] Skriver H L 1985 *Phys. Rev. B* **31** 909
- [46] Mulliken R S 1955 *J. Chem. Phys.* **23** 1833
- [47] Vohra Y K, Sikka S K, Holzapfel W B 1983 *J. Phys. F: Met. Phys.* **13** L107
- [48] Zhang P L, Gong Z Z, Ji G F 2012 *Proceedings of 20th International Conference on Composites Engineering* Beijing, China, July 22–28, 2012

First-principles study of high-pressure physical properties of α -Ti₂Zr*

Zhang Pin-Liang¹⁾ Gong Zi-Zheng^{1)2)†} Ji Guang-Fu³⁾ Liu Song¹⁾

1) (Key Laboratory of Advanced Technologies of Materials of Ministry of Education, School of Material Science and Engineering,

Southwest Jiaotong University, Chengdu 610031, China)

2) (National Key Laboratory of Science and Technology on Reliability and Environment Engineering, Beijing Institute of

Spacecraft Environment Engineering, Beijing 100094, China)

3) (Laboratory for Shock Wave and Detonation Physics, Institute of Fluid Physics, China Academy of Engineering Physics, Mianyang 621900, China)

(Received 10 September 2012; revised manuscript received 29 October 2012)

Abstract

The structure, elastic constant, Debey temperature and electron distribution of α -Ti₂Zr under high pressure are presented by using first-principles pseudopotential method based on density functional theory in this paper. The calculated structural parameters at zero pressure are in agreement with experimental values. The elastic constants and their pressure dependence are calculated using the static finite strain technique. We obtain the bulk modulus, Young's modulus and Poisson's ratio for α -Ti₂Zr. The G and B at zero pressure are 101.2 and 35.6 GPa, respectively. The G/B value is relatively small and decreases with pressure increasing, showing that the α -Ti₂Zr is rather ductile. The Debye temperature $\Theta = 321.7$ K is obtained by the average sound velocity based on elastic constants. We investigate anisotropies of the compressional wave and two shear waves. The acoustic velocities are obtained from elastic constants by solving Christoffel equation. The results indicate the strong anisotropy for α -Ti₂Zr. Moreover, the pressure dependence of $s \rightarrow d$ electron transfer indicates that β -Ti₂Zr will occur under high pressure.

Keywords: first-principles, α -Ti₂Zr, physical properties, high-pressure

PACS: 62.20.De, 71.15.Mb, 65.40.-b

DOI: 10.7498/aps.62.046202

* Project supported by the National Basic Research Program of China (Grant No. 2010CB731600) and the Specialized Research Project for the Protection Against Space Debris of China (Grant Nos. KJSP06209, KJSP06210).

† Corresponding author. E-mail: gongzz@263.net