

# ФОНОННЫЕ СПЕКТРЫ И ФАЗОВАЯ ДИАГРАММА АЛЮМИНИЯ ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ

О. М. Сурдин, Ю. Б. Кудасов

ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», г. Саров Нижегородской обл.

Ввиду широкого применения алюминия в промышленности и экспериментальной технике необходимо тщательное исследование его физических свойств. В частности, алюминий часто используется в качестве эталонного материала при измерении сверхсильных давлений. Алюминий также является предметом многочисленных экспериментов и теоретических исследований. Алюминий имеет гранецентрированную кубическую (ГЦК) структуру при нормальных условиях (рис. 1,а). Однако при повышенных давлениях он может иметь и другие кристаллические структуры, например, объемно-центрированную кубическую (ОЦК) (рис. 1,б) или гексагональную плотноупакованную (ГПУ) (рис. 1,в).

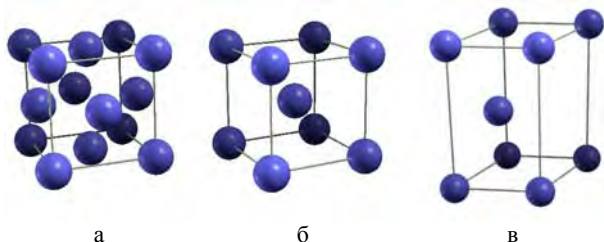


Рис. 1. Кристаллические решетки алюминия: а – гранецентрированная кубическая решетка; б – объемно-центрированная кубическая решетка; в – гексагональная плотноупакованная решетка

Поскольку твердое тело представляет собой сложную квантомеханическую систему, последовательный теоретический расчет которой в настоящее время нереален, приходится рассматривать систему с некоторыми ограничениями.

В качестве первого такого ограничения было принято адиабатическое приближение, позволяющее рассмотреть отдельно движение электронов и ядер, входящих в состав твердого тела [1]. В качестве второго было принято квазигармоническое приближение.

Ранее в работе [2] были получены законы дисперсии и фазовые диаграммы для ГЦК и ОЦК фаз алюминия. ГПУ фаза не была рассчитана вследствие более сложной структуры ГПУ решетки по сравнению с ГЦК и ОЦК: примитивная элементарная ячейка ГПУ решетки имеет два неэквивалентных атома, в отличие от одного атома на ячейку в ГЦК и ОЦК фазе. В данной же работе была разработана методика расчета законов дисперсии фононов для ГПУ фазы алюминия. В частности, были построены законы дисперсии фононов для ГПУ фазы, а также написана программа по расчету законов дисперсии фононов для данной структуры.

Основным соотношением в физике высоких давлений является уравнение состояния. Оно содержит ценную информацию о свойствах среды и позволяет переходить от одного термодинамического потенциала к другому. Изучая то или иное свойство твердого тела (например, проводимость, теплопроводность и др.), можно теоретически выявить его зависимость от температуры и постоянной решетки. Уравнение состояния как раз позволяет перейти от «теоретических» переменных ( $V, T$ ) к переменным ( $p, T$ ), с которыми обычно имеют дело на практике [3]. Для расчета фазовой диаграммы системы при конечных температурах необходимо вычислять не энтальпию  $H$ , описывающую свойства жесткой решетки при  $T = 0$ , а свободную энергию Гиббса  $G$ , которая включает в себя, помимо энергии статической решетки, вклады как от электронных возбуждений, так и от колебаний решетки. Когда  $T$  существенно меньше, чем характерные электронные энергии  $E$  порядка нескольких эВ, тепловые эффекты, связанные с электронными возбуждениями, малы и ими можно пренебречь. В то же время вклад решеточных колебаний может оказаться существенным для определения фазовой диаграммы кристалла, особенно в тех случаях, когда разности полных энергий различных фаз очень малы по абсолютной величине.

Для того чтобы определить границу между фазами, нужно сравнить энергии Гиббса для каждой из структур. При данной температуре находим значение давления, где разность энергий Гиббса обращается в нуль. Аналогично проделываем для каждого значения температуры. В результате получим границу ГЦК-ГПУ-ОЦК (см. рис. 2). Граница ГЦК-ОЦК была получена в работе [2].

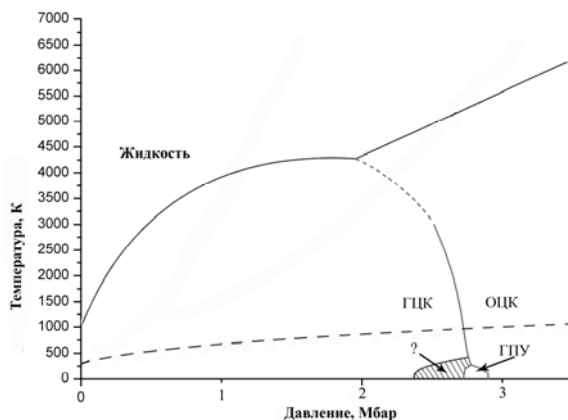


Рис. 2. Фазовая диаграмма алюминия

Сплошная черная кривая на графике – граница раздела жидкость-твердое тело. Заштрихованная область на графике под знаком «?» – это разница между границей ГЦК-ГПУ, построенной нами с помощью фононного спектра, и той же границей, построенной в работе [4], где фононные спектры не рассчитывались. Причиной данного расхождения может являться малая разность энергий фаз и недостатки метода, использованного в работе [4]. Энергия Гиббса при ненулевых температурах в [4] находилась с помощью упругих констант. Мы же рассчитывали энергию Гиббса с помощью фононного спектра, результаты расчета которого очень хорошо согласовались с экспериментальными данными. Кроме того, поскольку разность энергий между фазами мала, для надежного определения фазовых границ необходимо повышение точности расчетов, что вполне выполнимо с использованием программы WIEN2k, в которой квантовомеханические первопринципные расчеты выполняются на основе теории функционала электронной плотности (ТФП) [5–10].

При работе взрывомагнитного генератора МК-1 состояние алюминия описывается нормальной изоэнтропой (пунктирная кривая на рис. 2). Из рисунка видно, что нормальная изоэнтропа пересекает границу раздела ГЦК-ОЦК при давлении  $P = 2,72$  Мбар, где происходит скачок объема (плотности) примерно в 0,5 %. Следует также отметить, что нормальная изоэнтропа не пересекает область ГПУ. Заметим, что при криогенных начальных температурах изоэнтропа может пересечь границы ГЦК-ГПУ и ГПУ-ОЦК фаз.

1. Жарков В. Н., Калинин В. А. Уравнение состояния твердых тел при высоких давлениях и температурах. М.: Наука, 1968.
2. Кузин Р. С., Кудасов Ю. Б. Теоретический расчет «теплого» уравнения состояния алюминия при давлениях до 10 Мбар: Дипломная работа на соискание степени бакалавра. Саров: ФГОУ ВПО СарФТИ, 2009.
3. Ливанов Д. В., Физика металлов: Учебник для вузов. М.: МИСиС, 2006.
4. Sin'ko V., Smirnov N. A. Ab initio calculations of elastic constants and thermodynamic properties of bcc, fcc, and hcp Al crystals under pressure // J. Phys. Condens. Matter. 2002. 14. 6989.
5. Максимов Е. Г., Магницкая М. В., Фортвов В. Е. Непростое поведение простых металлов при высоких давлениях // УФН. 2005. 175. № 8.
6. Кудасов Ю. Б. Введение в вариационные методы теории сильно коррелированных ферми-систем: Учебное издание. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2006.
7. Kohn W., Hohenberg P. // Phys. Rev. 1964. V. 136. P. B864
8. Levi M. // Proc. Natl. Acad. Sci (USA). 1979. V. 76. P. 6062.
9. Gunnarson O., Lundqvist B. I. // Phys. Rev. B. 1976. V. 13. P. 4274.
10. Harris J., Jones R. O. // J. Phys. F. 1974. V. 4. P. 1170.