

## 硅酸镁钙钛矿弹性及热力学特性的第一性原理计算

# Elastic Tensor and Thermodynamic Property of Magnesium Silicate Perovskite from First-principles Calculations

摘要点击 123 全文点击 101 投稿时间: 2011-6-25 采用时间: 2011-8-19

[查看全文](#) [查看/发表评论](#) [下载PDF阅读器](#)

doi: 10.1088/1674-0068/24/06/703-710

中文关键词 [热力学特性](#) [弹性特性](#) [硅酸镁钙钛矿](#)

英文关键词 [Thermodynamic property](#) [Elastic property](#) [MgSiO<sub>3</sub> perovskite](#)

基金项目

作者	单位	E-mail
<a href="#">刘子江*</a>	<a href="#">兰州城市学院物理系, 兰州730070</a> ; <a href="#">兰州交通大学数理学院, 兰州730070</a>	liuzj2000@126.com
<a href="#">孙小伟</a>	<a href="#">兰州交通大学数理学院, 兰州730070</a>	
<a href="#">张材荣</a>	<a href="#">兰州理工大学应用物理系, 兰州730050</a>	
<a href="#">胡建波</a>	<a href="#">东京工业大学材料和结构实验室, R3-10, 4259, 横滨 226-8503</a>	
<a href="#">宋婷</a>	<a href="#">兰州交通大学数理学院, 兰州730070</a>	
<a href="#">祁建宏</a>	<a href="#">兰州城市学院物理系, 兰州730070</a>	

中文摘要

基于密度泛函理论的第一性原理计算, 结合准谐德拜模型研究了高压下硅酸镁钙钛矿的弹性及热力学特性. 计算得到的物态方程数据、热容、热膨胀系数等在宽广的温度和压力范围与实验结果及其他理论计算结果吻合. 根据有限应变理论计算了硅酸镁钙钛矿的弹性常数, 并讨论了杨氏模量、泊松比、德拜温度、晶体各向异性随压力的变化.

英文摘要

The thermodynamic and elastic properties of magnesium silicate (MgSiO<sub>3</sub>) perovskite at high pressure are investigated with the quasi-harmonic Debye model and the first-principles method based on the density functional theory. The obtained equation of state is consistent with the available experimental data. The heat capacity and the thermal expansion coefficient agree with the observed values and other calculations at high pressures and temperatures. The elastic constants are calculated using the finite strain method. A complete elastic tensor of MgSiO<sub>3</sub> perovskite is determined in the wide pressure range. The geologically important quantities: Young's modulus, Poisson's ratio, Debye temperature, and crystal anisotropy, are derived from the calculated data.

Copyright©2007 IOPP

承办: 中国科学技术大学 协办: 中国科学院大连化学物理研究所  
主管: 中国科学技术协会 主办: 中国物理学会 国际代理发行: 英国物理学会

编辑部地址: 安徽省合肥市金寨路96号 中国科学技术大学东区外语楼二楼  
联系电话: 0551-3601122 Email: [cjcp@ustc.edu.cn](mailto:cjcp@ustc.edu.cn)

本系统由北京勤云科技发展有限公司设计