

## 本期封面



2007年7

栏目: C20060557

DOI:

论文题目: 金属Zr热力学性质的第一原理研究

作者姓名: 聂耀庄 谢佑卿 李小波 彭红建

工作单位: 中南大学物理科学与技术学院

通信作者: 谢佑卿

通信作者Email: [yz\\_nie@163.com](mailto:yz_nie@163.com)

文章摘要: 应用基于密度泛函与密度泛函微扰理论的平面波赝势方法计算了一组不同晶格常数下hcp结构金属Zr的声子谱及相应的静态总能, 由此得到不同晶格常数下的自由能, 由准谐近似及自由能极小判据得到自由能与温度的关系, 进而计算了热膨胀系数、体弹性模量、定容及定压摩尔热容与温度的关系, 计算结果在较宽的温度范围内与实验相符。对热膨胀系数, 同时应用德拜-格林奈森模型进行了计算, 并与第一原理方法的结果进行了比较。对摩尔热容的计算考虑了电子的贡献, 表明在高温区电子热容的贡献不能忽略

关键词: 第一原理计算, 热力学性质, 声子, 赝势

分类号: 0621

关闭