

交叉学科

高压下钒的结构相变研究

刘海平, 曾祥华[#], 胡永金, 张萱

扬州大学物理科学与技术学院, 江苏 扬州 225002

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要

运用密度泛函理论研究了钒(Vanadium)在高压下的结构相变。通过对体心立方(bcc)结构的钒在不同压强下剪切弹性系数 C_{44} 的计算, 发现当压强约95 GPa时 $C_{44} < 0$, 说明体心立方结构的钒在此条件下是不稳定的。进一步计算分析得到钒在高压下发生了从体心立方到菱面体 (Rhombohedral)的结构相变, 相变压强约70 GPa, 这一结果与最近的实验结果符合。还首次发现当压强约380 GPa时, 将会发生菱面体到体心立方的结构相变, 这有待实验的验证。

We have studied the structure phase transition of Vanadium under high pressures by density function theory. A mechanical instability in the shear elastic constant (C_{44}) has been found for body centred cubic(bcc) Vanadium at about 95 GPa, which indicates the existence of the structural transition. By calculation and analysis, we found that there was a bcc rhombohedral structure transition at the 70 GPa, which is consistent with the experiment data. Our calculations also firstly gave that there was a rhombohedral bcc structure transition at about 380 GPa, which needs to be verified by the experiment.

关键词 [密度泛函理论](#) [高压](#) [剪切弹性系数](#) [结构相变](#)

分类号

DOI:

通讯作者:

曾祥华 xhzeng@yzu.edu.cn

作者个人主页: 刘海平; 曾祥华[#]; 胡永金; 张萱

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(793KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [参考文献\[PDF\]](#)

▶ [参考文献](#)

服务与反馈

▶ [把本文推荐给朋友](#)

▶ [加入我的书架](#)

▶ [加入引用管理器](#)

▶ [引用本文](#)

▶ [Email Alert](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含“密度泛函理论”的
相关文章](#)

▶ [本文作者相关文章](#)

· [刘海平](#)

· [曾祥华](#)

· [胡永金](#)

· [张萱](#)