高压下碳化锆的状态方程和结构相变研究*

贾　淇[1]，熊　伦[1**]，张俊然[2,3]

(1. 四川文理学院智能制造学院，四川 达州　635000；2. 中国科学院高能物理研究所多科学中心，北京　100049；3. 中国科学院大学物理科学学院，北京　100049)

摘要：利用同步辐射X射线衍射方法，研究了金刚石对顶砧中碳化锆(ZrC)的状态方程和结构相变，通过密度泛函理论(DFT)计算了该材料的高压压缩行为.结果表明：ZrC在压强为10.3 GPa时，发生拓扑相变；在压强为13.7 GPa时，相变结束.此外，ZrC立方相的体弹模量为158.6(8.6)GPa，相变后的结构体弹模量为233.8(8.8)GPa.

关键词：碳化锆(ZrC)；高压；状态方程；拓扑相变

中图分类号：O521　　**DOI**：10.19789/j.1004-9398.2021.04.007

0　引　言

碳化锆(ZrC)具有非常高的硬度，是切削金属刀具的主要成分.另外，ZrC是一种硬度大的高熔点和高温耐火材料，可以作为火箭发动机固体推进剂的原料[1].ZrC具有很高的电导率、刚度、超导参数、抗氧化性和非常好的力学性能，可以用于磁存储设备和核聚变电站[2].ZrC是共价键晶体，但具有离子键晶体(NaCl结构)的理化性质[3].

压力可以有效改变材料中的原子间距，增加相邻电子轨道的重叠，进而影响材料的能级和能带结构，使其达到新的高压平衡状态，形成不同于常压的新相结构[4].高压下揭示物质的新结构、新规律和新性能，为研究物质的物理和化学等性质提供了一种新的方法，拓展了物质的研究领域.因此，高压下物质性质的研究是凝聚态物理的一个重要分支，并渗透到其他相关的研究领域[5].高压下ZrC的物理化学性质取决于其高压结构，深入研究高压下ZrC的晶体结构，将有助于对其更加科学有效地利用.科研工作者通过实验[6-11]和理论计算[12-24]对ZrC的高压结构和相变进行了广泛的研究.一些理论计算表明[12,15,18,22-23]，在高压下，ZrC可能发生从NaCl型(B1相)到CsCl型(B2相)的结构相变.但是，在实验中没有观察到这种相变.为了研究ZrC在高压下是否存在相变及相变后的结构，本文在以硅油为传压介质的金刚石对顶砧中，研究了ZrC到45.6 GPa的结构相变及其状态方程.作为比较，用第一性原理研究了ZrC在0～50.0 GPa的状态方程和9.0～15.0 GPa电子性质.

1　实　验

纯度为99.5%的ZrC样品购自商业公司.在室温和常压下，ZrC为面心立方结构，空间群为Fm3m.在一个晶胞中锆原子(Zr)占据的位置为(0,0,0)，碳原子(C)占据的位置为(0.5,0.5,0.5)，其晶体结构如图1所示.使用日本电子株式会社生产的型号为JSM-7500F的扫描电子显微镜(scanning electron microscope，SEM)分析样品形貌.分辨率为1.0 nm(15 kV).常压下ZrC样品的SEM如图2所示.分析可知，ZrC的初始平均团簇大小约为4 μm，团簇的结构、性能与团簇的大小密切相关，使其具有不同于常规同类材料的物理和化学性质.根据ZrC的平均团簇大小分析，认为其为体材料.

使用荷兰帕纳科公司生产的型号为Empyrean X射线衍射仪进行ZrC的铜靶X射线衍射实验，2θ角范围为-110°～162°，最小可控步长为0.000 1°，分辨率为0.028°，波长(λ)为0.154 06 nm.ZrC粉末的一维X射线衍射谱如图3所示.ZrC可以很好地指标化为面心立方结构，晶面指数分别为(111)、(200)、(220)、(311)和(222).ZrC为纯相，且衍射

收稿日期：2020-10-29

* 中国科学院基金项目(KJCX2-SW-N03，KJCX2-SW-N20)；四川文理学院博士专项基金项目(2019BS006Z)

** 通信作者：1094129778@qq.com

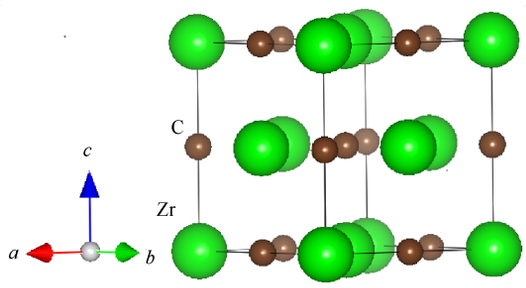


图1　常压下ZrC的晶体结构

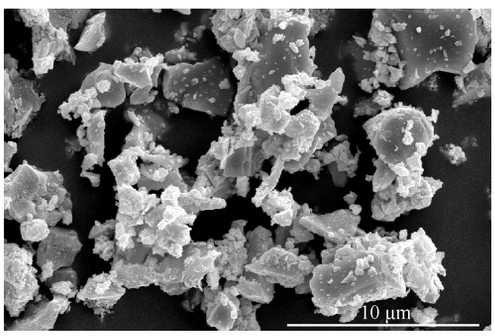


图2　常压状态下ZrC样品的扫描电子显微镜图像

峰尖锐,说明其结晶良好.由此推导出晶胞参数(a)为0.469 6 nm(0.000 1),与文献[17]报道的结果(a=0.468 9 nm)非常接近.使用直径为300 μm的改进Mao-bell型金刚石对顶砧进行高压X射线衍射实验.将T301封垫预压至约35 μm,使用激光在压痕中心打1个直径为120 μm的样品孔.以硅油作为传压介质,用10 μm的红宝石片作为传压物质[25].

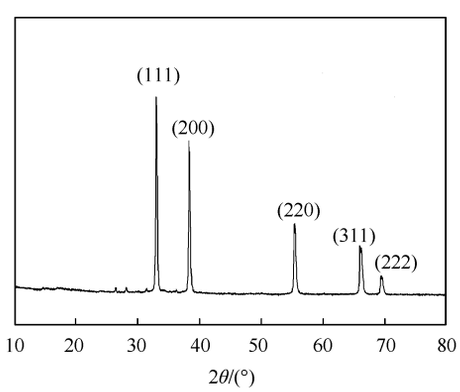


图3　常压条件下ZrC粉末铜靶X射线衍射图样

在北京同步辐射装置(BSRF)4W2束线上进行原位同步辐射高压衍射实验.单色同步辐射光的λ=0.061 99 nm. Pilatus探测器用于接收衍射信号,采用CeO_2标准标定样品与探测器的距离和探测器的倾斜角度,每个衍射图的曝光时间为5~8 min[26],使用fit2d软件对衍射图像进行分析和处理[27].

2　理论计算

高压下的物质具有很多未知结构和性质,由于实验条件限制,无法完全了解材料在高压下的特性.理论计算与实验相辅相成,可以与实验结果进行比较验证,有助于处理分析实验结果.密度泛函理论(density functional theory,DFT)是一种研究多电子体系电子结构的方法,其从量子力学的基本理论出发,经过一系列近似(伯恩-奥本海默近似、局域密度近似和广义梯度近似等)得到体系基态的基本性质[28-29].

1964年,Hohenberg和Kohn[30]经过严格的推导证明:体系总能量是电子密度的泛函,能量泛函的最小值是体系的基态能量.将多电子问题简化为单电子问题,可以得到电子体系的总能量为[26]

$$E_{\mathrm{TF}}[\rho]=C_k\int\rho^{5/3}\mathrm{d}\boldsymbol{r}+\int\rho(\boldsymbol{r})v(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{r}+1/2\int\frac{\rho(\boldsymbol{r})\rho(\boldsymbol{r}')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}\boldsymbol{r}\mathrm{d}\boldsymbol{r}',\tag{1}$$

式中C_k为常数,$\rho(\boldsymbol{r})$为体系的电子密度函数,$v(\boldsymbol{r})$为体系的势能函数.这样,能量被表示为只取决于电子密度函数的函数,成为电子密度的泛函.

根据Hohenberg和Kohn[30]提出的2个定理,可以得出体系的能量泛函为[26]

$$F(\rho)=T(\rho)+\frac{1}{2}\iint\mathrm{d}\boldsymbol{r}\mathrm{d}\boldsymbol{r}'\frac{\rho(\boldsymbol{r})\rho(\boldsymbol{r}')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}+V_{\mathrm{ion}}(\rho)+E_{\mathrm{XC}}(\rho),\tag{2}$$

式中$T(\rho)$为体系的动能项,$\frac{1}{2}\iint\mathrm{d}\boldsymbol{r}\mathrm{d}\boldsymbol{r}'\frac{\rho(\boldsymbol{r})\rho(\boldsymbol{r}')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}$为体系的库仑排斥项,$V_{\mathrm{ion}}(\rho)$为体系中电子和原子核之间相互作用,$E_{\mathrm{XC}}(\rho)$为体系的交换关联作用函数.

为了解决确定粒子数密度函数和动能泛函,Kohn与Sham[31]构造了一个无相互作用的独立电子系统.令电子数密度(ρ)等于真实的电子数密度,$T(\rho)$用一个已知的无相互作用的$T_{\mathrm{S}}(\rho)$来表示,然后将能量泛函对密度变分后求极值,从而得到单电子哈密顿量[26]的数学公式为

$$H=T+V(\boldsymbol{r})+\int\mathrm{d}\boldsymbol{r}'\frac{\rho(\boldsymbol{r}')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}+\frac{\delta E_{\mathrm{xc}}}{\delta\rho}=T+V(\boldsymbol{r})+V_{\mathrm{h}}+V_{\mathrm{xc}},\tag{3}$$

式中 T 是体系的动能泛函,$V(\boldsymbol{r})$ 是体系的势能泛函,E_{xc} 是体系的交换关联泛函,V_h 为体系的 Hartree 势,V_{xc} 为体系的交换关联势.

为了寻找关于 E_{xc} 的近似方法,Kohn 和 Sham[31] 提出了局域密度近似(local-density approximation,LDA).其基本想法是:空间各点的交换关联函数只与该点局域电子密度有关,与此对应的 LDA 交换关联势[26]为

$$V_{xc}[\rho(\boldsymbol{r})]=\varepsilon_{xc}[\rho(\boldsymbol{r})]+\rho(\boldsymbol{r})\frac{\mathrm{d}\varepsilon_{xc}[\rho(\boldsymbol{r})]}{\mathrm{d}\rho(\boldsymbol{r})},\quad(4)$$

式中 $\varepsilon_{xc}[\rho(\boldsymbol{r})]$ 为体系的交换关联能密度.

由于实际原子和分子体系的电子密度不均匀,使用 LDA 有一定的局限,如无法正确预测基态.为了克服 LDA 的局限,必须提出新的近似方法或进一步完善 LDA 计算方法.目前,使用最广泛的方法是广义梯度近似(generalized-gradient approximation,GGA),其交换关联函数[32]为

$$E_{xc}^{GGA}(\rho)=\int\mathrm{d}\boldsymbol{r}f_{xc}(\rho(\boldsymbol{r})\,|\,\nabla\rho(\boldsymbol{r})\,|)+\int\varepsilon_{xc}[\rho(\boldsymbol{r})]\rho(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{r},\quad(5)$$

式中 f_{xc} 为体系的交换关联能,$\nabla\rho(\boldsymbol{r})$ 为体系电子密度的一阶导数.GGA 中的交换关联能与 $\rho(\boldsymbol{r})$ 及其梯度有关,其更适合处理电子密度非均匀的体系.GGA 极大地改进了原子的交换能和相关计算结果,使价电子的电离能只有很小的改变,分子中的键长和晶胞参数稍有增加,但是离解能和内聚能明显下降.

目前,常用的 DFT 计算软件有 VASP、ABINIT、PWSCF、WIEN2K 和 CASTEP 等.VASP 是一个采用平面波赝势(或投影缀加波)方法进行从头模拟的软件包,是目前材料模拟和计算物质科学研究中最常用的商用软件之一[33].在高压研究领域,VASP 软件可以计算材料在不同压强下的结构参数(包括晶胞参数、原子位置、键长和键角等)、电子结构和磁学性质等.本文采用 VASP 软件进行 DFT 计算,对体系中电子的交换关联函数,采用 PBE(Perdew-Burke-Ernzerho)函数,利用投影缀加波(projector-augmented wave,PAW)方法,C 和 Zr 的价电子组态分别采用 $2s^22p^2$ 和 $4d^25s^2$.布里渊区中 k 点取样为 8×8×8 的 MP(monkhorst-pack)形式的网格.平面波基函数的截断能量收敛精度<2×10^{-3} eV.经过优化后的 ZrC 的结构为面心立方结构,其空间群为 Fm3m.优化后的 LDA 理论计算 a=0.464 508 nm,作为比较,优化后的 GGA 理论计算 a=0.470 958 nm.在获得不同压强的晶胞体积后,用三阶 Birch-Murnaghan 方程对压强-体积数据进行拟合,以求出体弹模量(K_0)及其一阶导数 K_0'.

3　结果与讨论

所获得的衍射谱用 fit2d 软件进行分析[27].实验的最大压强(P)为 45.6 GPa,压力值由红宝石压标给出[25].不同压力下 ZrC 的归一化 X 射线衍射积分谱如图 4 所示.(111)、(200)和(220)3 个衍射峰在整个压力范围内一直存在.当 P=8.0 GPa 时,ZrC 的衍射峰开始发生劈裂,其中一个原因是 ZrC 的晶粒大小不同(1 ~ 8 μm),在样品孔的边缘,大的晶粒可能遭受较小的压力产生一个<2θ 角的峰,且大的晶粒导致衍射谱不连续产生出衍射峰的劈裂现象;另一个原因可能是硅油固化导致的差应力改变了晶体结构,这需要后续的验证[34].

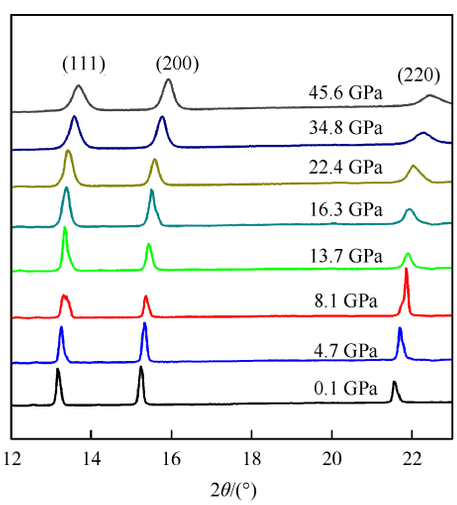


图 4　不同 P 下 ZrC 的归一化 X 射线衍射积分谱

利用 d(111)、d(200)和 d(220)的晶面间距拟合了不同 P 下 ZrC 的晶胞参数(a_{ZrC})和体积(V).a_{ZrC} 随 P 的压缩性如图 5 所示.结果表明,立方相结构下 a_{ZrC} 随 P 的增大而减小,其不连续始于 10.3 GPa,结束于 13.7 GPa.

实验结果和理论计算结果的 V_{ZrC} 随 P 的压缩曲线如图 6 所示.由图中可知,V_{ZrC} 随 P 的不连续起始于 10.3 GPa,结束于 13.7 Gpa,这种异常现象可能揭示了相变的存在.

利用三阶 Birch-Murnaghan 方程拟合 V 随 P 的变化数据,其方程为[35]

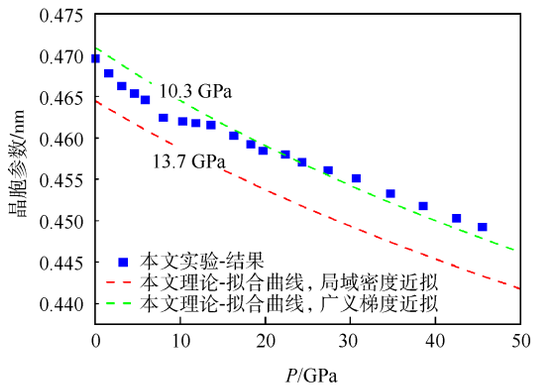
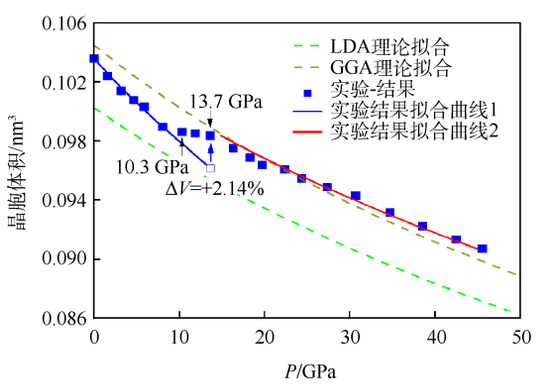


图5　ZrC晶胞参数随P的变化

$$P=1.5K_0[(\frac{V_0}{V})^{\frac{7}{3}}-(\frac{V_0}{V})^{\frac{5}{3}}]\{1+\frac{3}{4}(K_0'-4)[(\frac{V_0}{V})^{\frac{2}{3}}-1]\},\quad(6)$$

式中K_0、K_0'和V_0分别是室压下的体弹模量、体弹模量的一阶导数和晶胞体积.



注:LDA为局域密度近似;GGA为广义梯度近似.

图6　高压下V_{ZrC}与P变化的压缩曲线

理论计算的文献报道了ZrC在高压下可能发生从B1相到B2相的相变[12,15,18,22-23],其中B2相的空间群为Pm3m,a=0.294 nm[36].研究表明:B2相在高压(>13.7 GPa)下不能正确地指标化.在ZrC中没有新峰的出现或旧峰的消失,相变可能是由电子结构相变引起的等结构相变或拓扑相变.因此,高压下V_{ZrC}仍由B1相计算.相应地,ZrC在P为0~8.1和13.7~45.6 GPa的体弹模量分别为158.6(8.6)和233.8(8.8)GPa.结果表明,当P=13.7 GPa时,B2相与B1相的体积差为2.14%.

本文得到的结果与文献结果的比较见表1.结果显示,实验测得ZrC的B1相的体弹模量比文献的实验和理论结果要低得多[6-24],但理论计算得到ZrC的B1相的体弹模量与早期实验和理论计算的结果一致[6,9,13,17,20-21].

为了研究V_{ZrC}随P的异常变化是否是由异常的电子行为引起,计算了ZrC在高压下的电子结构.选定的高度对称方向上的ZrC能带结构(费米能级设置为0)如图7所示.ZrC是一种半金属化合物,其电子轨道占据费米能级.ZrC的电子态密度结构如图8所示.结果表明,ZrC的总电子态密度有3个明显的峰值,分别位于-2、6和8 eV附近.C2p与Zr4d和4p轨道的混合形成了一个-2 eV峰,这对C和Zr原子间的共价键有很大贡献,6和8 eV峰主要来自Zr的4d态.根据文献预测[12,15,18,22-23],ZrC在高压下可能有1个由B1到B2相的相变,但P>13.7 GPa的结构不能用CsCl结构进行指标化,认为相变可能是由电子结构相变引起的等结构相变或拓扑结构相变.但通过第一性原理计算,ZrC在高压下的能带结构和态密度,显示ZrC在9.0~15.0 GPa下的能带结构和电子态密度基本不变,因此,认为高压下V_{ZrC}异常不是由电子结构相变导致的等结构相变引起,但可能是由于结构在非平衡条件下的拓扑相变所致.

表1　不同方法计算的ZrC的参数对比

方法	K_0(B1相)	K_0'(B1相)	K_0(B2相)	K_0'(B2相)	P_t/GPa
本文实验	158.6(8.6)	4.0(固定不变)	233.8(8.8)	6.0(0.8)	10.3
本文理论计算	248.1(0.2)^{LDA}、223.3(0.1)^{GGA}	3.88(0.01)^{LDA}、3.93(0.01)^{GGA}	—	—	—
文献实验	234[6]、223[7-8]、230[9]、207[10]、220[11]	—	—	—	—
文献	222.88[12]、237[13]、217[14]、224[15]、218[16]、232[17]、224[18]、225[19]、230.5[20]229[21]265[22]、218[12]	4.05[12]、3.86[18]	192.58[12]、188[15]、191[18]、189[23]	4.07[12]	291[12]、98[22]、308[15]、295[18]、313[23]

注:—表示无数据;K_0和K_0'分别为体弹模量及其一阶导数.

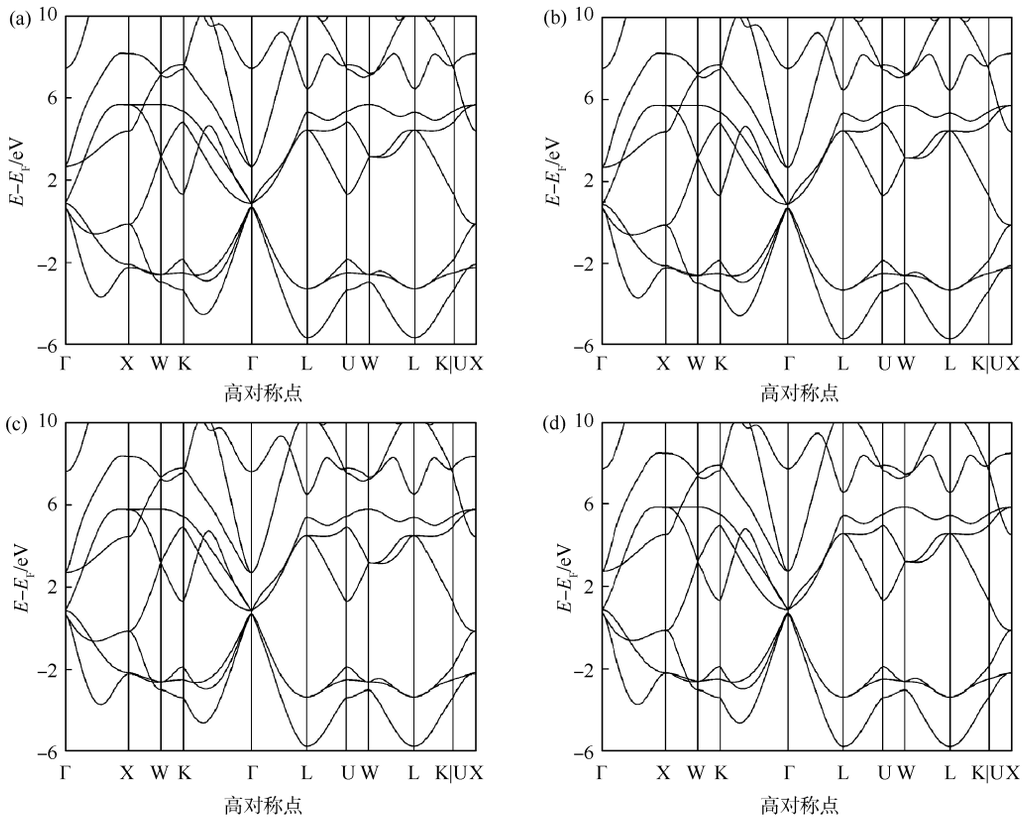


图 7　不同压强下 ZrC 的能带结构

(a)9.0 GPa;(b)11.0 GPa;(c)13.0 GPa;(d)15.0 GPa

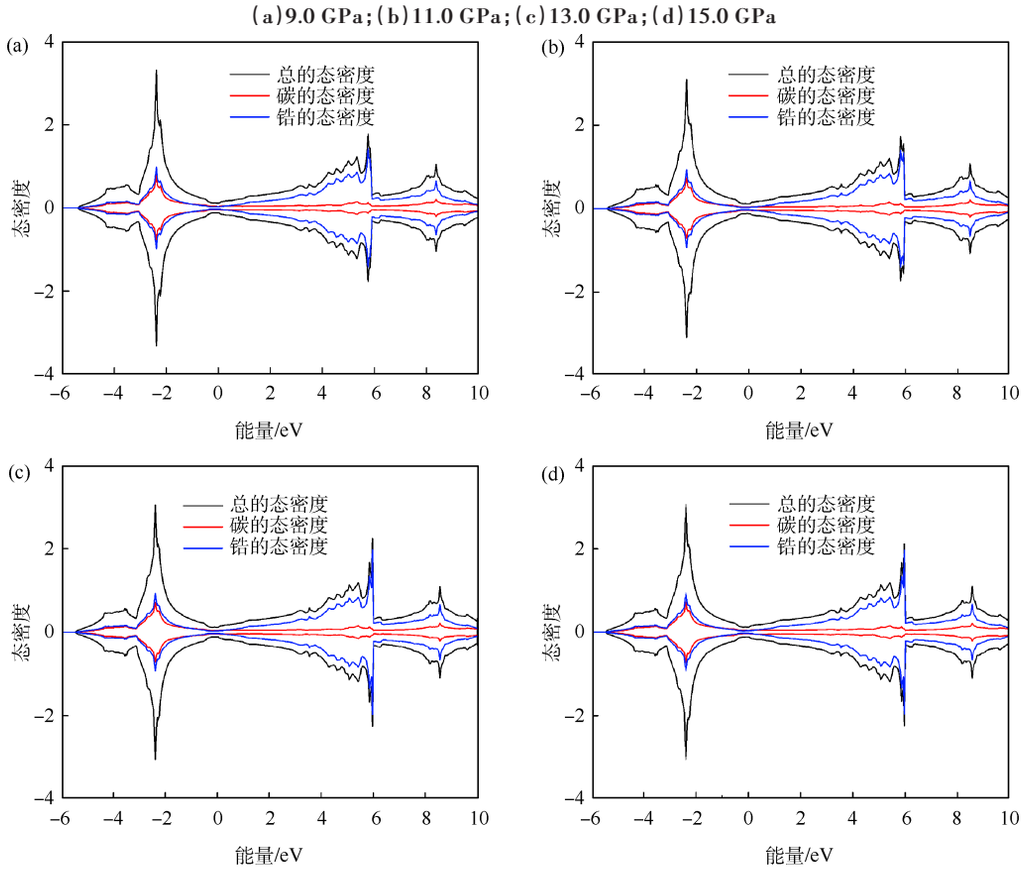


图 8　不同压强下 ZrC 的电子态密度

(a)9.0 GPa;(b)11.0 GPa;(c)13.0 GPa;(d)15.0 GPa

4 结 论

研究了金刚石对顶砧中准静水高压环境下ZrC的状态方程和结构相变,结果表明:V_{ZrC}随P的不连续变化发生在10.3 GPa,结束于13.7 GPa,这种异常现象揭示了相变的存在,由于高压下ZrC的电子结构和电子态密度没有发生变化,认为该相变不是电子结构相变,而是拓扑相变.同时,利用同步辐射X射线衍射实验测得ZrC的B1相体弹模量为158.6(8.6)GPa,拓扑相变后的体弹模量为233.8(8.8)GPa.

参 考 文 献

[1] ALWARD J F, FONG C Y, EI-BATANOUNY M, et al. Band structures and optical properties of two transition-metal carbides TiC and ZrC[J]. Physical Review B, 1975, 12(4): 1105-1117.

[2] 张育伟,张金咏,傅正义.碳化锆陶瓷的氧化及其对导电性能的影响[J].硅酸盐学报,2013,41(7):901-904.

[3] WEBER W. Lattice dynamics of transition-metal carbides[J]. Physical Review B, 1973, 8(11): 5082-5092.

[4] MING L C, MANGHANI M H. Isothermal compression of bcc transition metals to 100 kbar [J]. Journal of Applied Physics, 1978, 49(1): 208-212.

[5] XIONG L, BAI L G, LI X D, et al. Radial X-ray diffraction study of static strength of tantalum to 80 GPa[J]. Chinese Physics Letters, 2017, 34(10): 106101-106105.

[6] NINO A, TANAKA A, SUGIYAMA S, et al. Indentation size effect for the hardness of refractory carbides[J]. Materials Transactions, 2010, 51(9): 1621-1626.

[7] VOITOVICH R F, PUGACH E A. High-temperature oxidation of ZrC and HfC [J]. Powder Metall Met Ceram, 1973, 12: 916-921.

[8] JOHNSTON I D, KEELER G, ROLLINS R, et al. Solid state physics simulations: consortium for upper-level physics software[M]. New York: John Wiley and Sons, 1996.

[9] YANG Q, LENGAUER W, KOCH T, et al. Hardness and elastic properties of Ti(C_xN_{1-x}), Zr(C_xN_{1-x}) and Hf(C_xN_{1-x})[J]. Journal of Alloys and Compounds, 2000, 309(1/2): L5-L9.

[10] BROWN H L, KEMPTER C P. Elastic properties of zirconium carbide[J]. Physics Status Solidi B, 1966, 18(1): K21-K23.

[11] PUGH S F. Relations between the elastic moduli and the plastic properties of polycrystalline pure metals[J]. Philosophical Magazine, 1954, 45(367): 823-843.

[12] CHAUHAN M, GUPTA D C. Electronic, mechanical, phase transition and thermo-physical properties of TiC, ZrC and HfC: high pressure computational study[J]. Diamond and Related Materials, 2013, 40: 96-106.

[13] MECABIH S, AMRANE N, NABI Z, et al. Description of structural and electronic properties of TiC and ZrC by generalized gradient approximation[J]. Physica A, 2000, 285: 392-396.

[14] LU X G, SELLEBY M, SUNDMAN B. Calculations of thermophysical properties of cubic carbides and nitrides using the Debye-Grüneisen model[J]. Acta Materialia, 2007, 55(4): 1215-1226.

[15] RATHOD N, GUPTA S K, JHA P K. Dynamical stability and phase transition of ZrC under pressure [J]. Phase Transitions, 2012, 85(12): 1060-1069.

[16] LV Z T, HU H Q, WU C, et al. First-principles study of structural stability, electronic and elastic properties of ZrC compounds[J]. Physica B Condensed Matter, 2011, 406(14): 2750-2754.

[17] CHENG D Y, WANG S Q, YE H Q. First-principles calculations of the elastic properties of ZrC and ZrN[J]. Journal of Alloys and Compounds, 2004, 377(1/2): 221-224.

[18] HAO A M, ZHOU T J, ZHU Y, et al. First-principles investigation of the electronic, elastic and thermodynamic properties of VC under high pressure[J]. Chinese Physics B, 2011, 20(4): 047103.

[19] FU H Z, PENG W M, GAO T. Structural and elastic properties of ZrC under high pressure[J]. Materials Chemistry and Physics, 2009, 115(2/3): 789-794.

[20] YANG X Y, LU Y, ZHENG F W, et al. Mechanical, electronic, and thermodynamic properties of zirconium carbide from first-principles calculations[J]. Chinese Physics B, 2015, 24(11): 116301-116306.

[21] WANG J Y, ZHOU Y C, LIN Z J, et al. First-principles prediction of the mechanical properties and electronic structure of ternary aluminum carbide $Zr_3Al_3C_5$[J]. Physical Review B, 2006, 73(13): 134107.

[22] SINGH A, AYNYAS M, SANYAL S P. High pressure behavior and structural properties of transition metal carbides[J]. Phase Transition, 2009, 82(8): 576-586.
[23] KORIR K K, AMOLO G O, MAKAU N W, et al. First-principle calculations of the bulk properties of 4d transition metal carbides and nitrides in the rocksalt, zincblende and wurtzite structures[J]. Diamond and Related Materials, 2011, 20(2): 157-164.
[24] ISAEV E I, AHUJA R, SIMAK S I, et al. Anomalously enhanced superconductivity and ab initio lattice dynamics in transition metal carbides and nitrides[J]. Physical Review B Condensed Matter, 2005, 72(6): 064515.
[25] MAO H K, XU J, BELL P M. Calibration of the ruby pressure gauge to 800 kbar under quasi-hydrostatic conditions[J]. Journal of Geophysical Research Solid Earth, 1986, 91(B5): 4673-4676.
[26] 熊伦,张新欣,禹国梁. $LiMn_2O_4$的高压结构相变和状态方程研究[J].首都师范大学学报(自然科学版),2021,42(1):14-19.
[27] HAMMERSLEY A P, SVENSSON S O, HANFLAND M, et al. Two-dimensional detector software: from real detector to idealised image or two-theta scan[J]. High Pressure Research, 1996, 14: 235-248.
[28] THOMAS L H. The calculation of atomic fields[J]. Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society, 2008, 23(5): 542-548.
[29] FERMI E. Statistical method to determine some properties of atoms[J]. Rend Accad Naz Lincei, 1927, 6: 602-607.
[30] HOHENBERG P, KOHN W. Inhomogeneous electron gas[J]. Physical Review, 1964, 136(3B): B864-B871.
[31] KOHN W, SHAM L J. Self-consistent equations including exchange and correlation effects[J]. Physical Review, 1965, 140(4A): A1133-A1138.
[32] LANGRETH D C, PERDEW J P. Theory of nonuniform electronic systems I analysis of the gradient approximation and a generalization that works[J]. Physical Review B, 1980, 21(12): 5469-5493.
[33] KRESSE G G, FURTHMULLER J J. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set[J]. Physical Review B Condensed Matter, 1996, 54(16): 11169-11186.
[34] XIONG L, LIU J, BAI L G, et al. Radial *x*-ray diffraction of tungsten tetraboride to 86 GPa under nonhydrostatic compression[J]. Journal of Applied Physics, 2013, 113: 033507-033511.
[35] FRANCIS B. Finite strain isotherm and velocities for single-crystal and polycrystalline NaCl at high pressures and 300 °K[J]. Journal of Geophysical Research Solid Earth, 1978, 83(B3): 1257-1268.
[36] NIKITA R, SANJEEV K G, PRAFULLA K J. Dynamical stability and phase transition of ZrC under pressure[J]. Phase Transition, 2012, 85(12): 1-10.

Equation of state and phase transformation of ZrC under high pressure

JIA Qi[1], XIONG Lun[1], ZHANG Junran[2,3]

(1. School of Intelligent Manufacturing, Sichuan University of Arts and Science, Dazhou Sichuan 635000; 2. Multidiscipline Research Center, Institute of High Energy Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049; 3. School of Physical Sciences, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049)

Abstract: The equation of state and phase transformation of zirconium carbide (ZrC) in diamond anvil cell were studied by synchrotron radiation X-ray diffraction. The high pressure compression behavior of ZrC was calculated by density functional theory(DFT). It is found that a topological phase transition occurs at 10.3 GPa and ends at 13.7 GPa. In addition, the derived bulk modulus of ZrC cubic phase is 158.6(8.6) GPa, and the bulk modulus after phase transition is 233.8(8.8) GPa.

Keywords: zirconium carbide(ZrC); high pressure; equation of state; topological phase transition

(责任编辑:兰丽丽)