

# 高压物理学报

## 高压下HBT晶体的弹性性质

李佐 张凤玲 廖大麟

### Elastic Properties of HBT Crystal under High Pressure

LI Zuo, ZHANG Fengling, LIAO Dalin

引用本文:

李佐, 张凤玲, 廖大麟. 高压下HBT晶体的弹性性质[J]. 高压物理学报, 2020, 34(4):041301. DOI: 10.11858/gywlb.20190823

LI Zuo, ZHANG Fengling, LIAO Dalin. Elastic Properties of HBT Crystal under High Pressure[J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 2020, 34(4):041301. DOI: 10.11858/gywlb.20190823

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.11858/gywlb.20190823>

## 您可能感兴趣的其他文章

### Articles you may be interested in

#### 高压下 $\text{ReN}_2$ 的弹性性质

Elastic Properties of  $\text{ReN}_2$  under High Pressure

高压物理学报. 2019, 33(4): 042401 <https://doi.org/10.11858/gywlb.20180647>

#### 高压下 $\text{Ir}_2\text{P}$ 晶体结构预测与物理性质

Evolution of Crystal Structures and Electronic Properties for  $\text{Ir}_2\text{P}$  under High Pressure

高压物理学报. 2019, 33(1): 011103 <https://doi.org/10.11858/gywlb.20180645>

#### 稀土硼化物 $\text{LaB}_6$ 晶体材料的弹性性质和力学性能

Elastic and Mechanical Properties of Rare Earth Boride  $\text{LaB}_6$  Crystalline Material

高压物理学报. 2019, 33(2): 022201 <https://doi.org/10.11858/gywlb.20180668>

#### 高压下立方 $\text{BC}_3$ 的力学和热力学性质

Mechanical and Thermodynamic Properties for Cubic  $\text{BC}_3$  under High Pressure

高压物理学报. 2018, 32(2): 021101 <https://doi.org/10.11858/gywlb.20170640>

#### 高压下六方 $\text{TaSi}_2$ 晶体基于结构稳定性的电学输运性质

Electrical Transport Properties of Hexagonal  $\text{TaSi}_2$  Crystals Based on Structural Stability under High Pressure

高压物理学报. 2018, 32(2): 021102 <https://doi.org/10.11858/gywlb.20170571>

#### 高压下 $\text{MgN}_8$ 晶体结构理论模拟与物性研究

Theoretical Simulation and Physical Properties of  $\text{MgN}_8$  Crystal Structure under High Pressure

高压物理学报. 2020, 34(1): 011102 <https://doi.org/10.11858/gywlb.20190818>

# 高压下 HBT 晶体的弹性性质

李 佐, 张凤玲, 廖大麟

(贵州工程应用技术学院理学院, 贵州 毕节 551700)

**摘要:** 采用基于密度泛函理论的第一性原理方法, 研究了 HBT 晶体在常压和高压下的晶格常数和弹性性质及各向异性, 利用 3 种不同理论模型研究了高压下 HBT 晶体的各向异性性质。研究表明: 高压下 HBT 晶体的弹性常数和弹性模量显著增加, 晶体表现出高压韧性; 同时, 高压下 HBT 晶体具有较大的弹性模量和力学各向异性, 随着压强的增大, HBT 晶体的各向异性程度减弱。此外, 热力学性质计算结果表明, HBT 晶体具有较高的德拜温度, 并且德拜温度随着压强的增大而升高。

**关键词:** HBT 晶体; 高压; 弹性性质; 各向异性

**中图分类号:** O521.21

**文献标识码:** A

含能材料的弹性性质包括弹性常数、体弹模量、杨氏模量和剪切模量等。它反映材料在常温、静荷载作用下的宏观力学性能, 不但决定材料对施加应力的响应方式, 还能反映含能材料的稳定性等<sup>[1]</sup>。目前, 含能材料的弹性性质得到了人们的广泛关注, 并对 RDX<sup>[2]</sup>、TATB<sup>[3]</sup>、HMX<sup>[4]</sup>、FOX-7<sup>[5]</sup>、CL-20<sup>[6]</sup> 等含能材料开展了研究。5, 5'-双四唑肼 (5, 5'-Hydrazinebistetrazole, HBT) 晶体是一种著名的单质富氮、高能、钝感含能材料<sup>[7]</sup>。HBT 含有 83.7% 的氮元素, 爆炸燃烧后释放的气体主要为氮气、二氧化碳和水, 因此被称为“绿色”含能材料<sup>[8-11]</sup>。本研究采用基于第一性原理的准谐振近似方法, 计算固态 HBT 晶体在 0~120 GPa 高压下的弹性性质, 同时分析其弹性的各向异性特征。

## 1 理论与计算方法

### 1.1 HBT 晶体结构优化方法

采用基于第一性原理的 Quantum ESPRESSO 软件包中的 PWSCF 模块<sup>[12]</sup> 计算电子结构的总能量。广义梯度近似 (GGA) 下交换相关势采用 Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) 形式<sup>[13-14]</sup>, 原子赝势平面波基组采用超软赝势加核修正的 C.pbe\_v1.2.uspp.F.UPF, N.pbe\_v1.2.uspp.F.UPF, H.pbe\_v1.2.uspp.F.UPF 形式<sup>[15]</sup>, 几何优化采用 BFGS 算法<sup>[16]</sup>。为增加计算精度, 平面波基函数的截断能取为 544 eV, 布里渊空间采用 Monkhorst-Pack 方法<sup>[17]</sup>,  $k$  点方案为  $6 \times 6 \times 3$ , 总能自洽, 离子位移最大值和应力最大值都能达到设置的收敛精度。在高压下几何结构优化的基础上, 利用准谐振近似方法计算 HBT 晶体的弹性性质, 详细的计算过程在软件 Thermo\_pw 中体现<sup>[18]</sup>。

### 1.2 弹性常数

固态物质弹性理论计算中引入应变  $\varepsilon_j (j = 1, 2, \dots, 6)$ , 晶体的一个应力用  $\sigma_i$  表示。当应力较小时,  $\sigma_i$  和  $\varepsilon_j$  满足<sup>[19]</sup>

\* 收稿日期: 2019-08-19; 修回日期: 2019-09-20

基金项目: 贵州省科技厅、毕节市、贵州工程应用技术学院联合基金 (LH[2014]7525); 贵州省教育厅青年科技人才成长项目 (KY[2018]398)

作者简介: 李 佐 (1983—), 男, 硕士, 讲师, 主要从事高压下含能材料物性研究. E-mail: lizuo212@163.com

$$\sigma_i = \sum_{j=1}^6 C_{ij} \varepsilon_j \quad (1)$$

$$\varepsilon_i = \sum_{j=1}^6 S_{ij} \sigma_j \quad (2)$$

式中: 系数  $C_{ij}$  为弹性常数(或者弹性劲度), 矩阵  $S$  为矩阵  $C$  的逆矩阵,  $S_{ij}$  为弹性柔顺系数。初始构型采用 Klapötke 等<sup>[7]</sup> 获得的 HBT 晶体的实验结构, 它属于单斜结构的分子晶体, 点群为  $C2/c$  空间群, 其原胞晶系属于三斜晶系, 对称性最低, 包含最多的矩阵元。弹性常数矩阵  $C$  是一个对称矩阵, 共有 21 个独立矩阵元。计算中采用原胞结构, 弹性常数矩阵表达式为

$$C = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ C_{12} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ C_{13} & C_{23} & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ C_{14} & C_{24} & C_{34} & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ C_{15} & C_{25} & C_{35} & C_{45} & C_{55} & C_{56} \\ C_{16} & C_{26} & C_{36} & C_{46} & C_{56} & C_{66} \end{pmatrix} \quad (3)$$

考虑到二阶弹性常数与能量满足如下关系<sup>[20]</sup>

$$C_{ij} = \frac{1}{V_0} \left( \frac{\partial^2 E_c}{\partial \varepsilon_i \partial \varepsilon_j} \right) \quad (4)$$

因此, 只要知道稳定构型下的晶体体积  $V_0$  和能量  $E_c$ , 就可以获得弹性常数。

## 2 结果与讨论

### 2.1 晶体结构参数

基于密度泛函理论的第一性原理, 得到零温零压下 HBT 晶体的晶格参数, 如表 1 所示, 晶体几何结构如图 1 所示。从表 1 可以看出, 晶格参数  $b$ 、 $c$  和  $V$  的计算值均高于实验结果, 而  $a$  和  $\beta$  却低于实验结果。在目前的第一性原理方法中, 晶格参数的计算精度取决于原子赝势和计算方法的选择, 因此, 无法做到与实验结果完全符合。此外, 采用 5 GPa 间隔优化 HBT 晶体在 0~120 GPa 压强范围内的晶体结构。优化后获得了稳定的晶体构型, 压强-体积比( $p$ - $V/V_0$ )曲线与实验结果的比较如图 2 所示。从图 2 可以看出, 在 0~26 GPa 压强范围内, 理论计算结果与 Ciezak-Jenkins 等<sup>[21]</sup> 的实验

表 1 HBT 晶体晶格参数的计算值和实验值

Table 1 Calculated lattice parameters of HBT crystal along with experimental data

| Method               | $a/\text{nm}$ | $b/\text{nm}$ | $c/\text{nm}$ | $\beta/(\circ)$ | $V/\text{nm}^3$ |
|----------------------|---------------|---------------|---------------|-----------------|-----------------|
| Exp. <sup>[7]</sup>  | 1.240 1       | 0.551 3       | 0.983 5       | 115.57          | 0.606 69        |
| Exp. <sup>[21]</sup> | 1.241 5       | 0.551 7       | 0.984 2       | 115.63          | 0.607 79        |
| This work            | 1.211 2       | 0.697 0       | 1.038 8       | 113.65          | 0.634 54        |

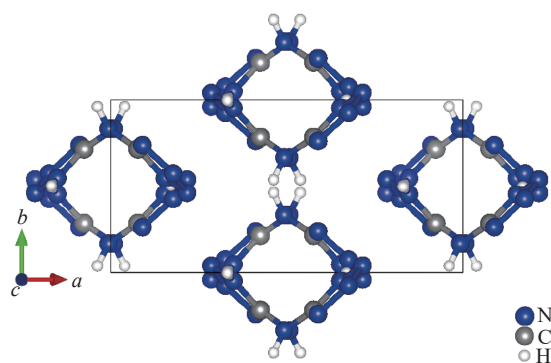


图 1 优化后的 HBT 晶体几何结构

Fig. 1 Geometric structure of optimized HBT crystal

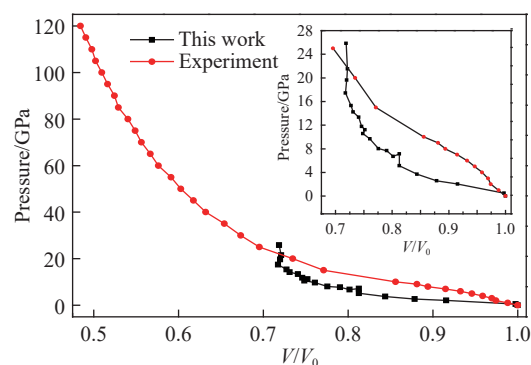


图 2 理论和实验得到的压强-体积比关系

Fig. 2 Pressure as a function of volume ratio  $V/V_0$  from theoretical and experimental data

结果具有相同的变化趋势, 并且在 1 和 22 GPa 处曲线相交, 说明本理论计算结果与实验结果有一定的可比性。同时, 给出了 HBT 晶体在压强高于 25 GPa 时的体积变化情况。理论计算显示, 随着压强的增大, 晶体体积变化受压强的影响越来越明显, 60 GPa 以上时压强与体积比呈线性关系。

## 2.2 高压弹性

通过高压下结构优化, 得到不同压力下稳定的 HBT 晶体结构, 在此基础上计算弹性系数和弹性模量。三斜结构的弹性常数矩阵包含 21 个独立矩阵元。Born<sup>[22]</sup> 给出了晶体材料力学稳定性的充分必要条件为弹性常数矩阵  $C$  正定。按照线性代数知识可知, 对称矩阵  $C$  正定的充要条件为  $C$  的各阶顺序主子式都为正, 即

$$C_{11} > 0, \quad \begin{vmatrix} C_{11} & C_{12} \\ C_{12} & C_{22} \end{vmatrix} = C_{11}C_{22} - C_{12}^2 > 0 \quad (5)$$

$$\begin{vmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} \\ C_{12} & C_{22} & C_{23} \\ C_{13} & C_{23} & C_{33} \end{vmatrix} = (C_{11}C_{22}C_{33} - C_{11}C_{23}^2 - C_{12}^2C_{33} - C_{13}^2C_{22} + 2C_{12}C_{13}C_{23}) > 0 \quad (6)$$

$$\begin{vmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} \\ C_{12} & C_{22} & C_{23} & C_{24} \\ C_{13} & C_{23} & C_{33} & C_{34} \\ C_{14} & C_{24} & C_{34} & C_{44} \end{vmatrix} > 0, \quad \begin{vmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} \\ C_{12} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} \\ C_{13} & C_{23} & C_{33} & C_{34} & C_{35} \\ C_{14} & C_{24} & C_{34} & C_{44} & C_{45} \\ C_{15} & C_{25} & C_{35} & C_{45} & C_{55} \end{vmatrix} > 0 \quad (7)$$

$$\begin{vmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ C_{12} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ C_{13} & C_{23} & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ C_{14} & C_{24} & C_{34} & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ C_{15} & C_{25} & C_{35} & C_{45} & C_{55} & C_{56} \\ C_{16} & C_{26} & C_{36} & C_{46} & C_{56} & C_{66} \end{vmatrix} > 0 \quad (8)$$

式 (5)~式 (8) 给出了三斜晶体稳定性的充要条件。四阶以上行列式的表达式比较复杂, 一般采用直接带入行列式元素来计算验证。图 3(a)、图 3(b)、图 3(c)、图 3(d) 给出了 21 个弹性常数随压强的变化关系。从图 3 可以看出,  $C_{15}$ 、 $C_{56}$ 、 $C_{24}$ 、 $C_{46}$  随压强的变化比较剧烈, 其中  $C_{15}$ 、 $C_{56}$  和  $C_{24}$  先减小后增大, 而  $C_{46}$  则先增大后减小随后又增大。将零温零压下晶体的弹性常数代入式 (5)~式 (8), 验证后发现符合稳定性条件。对高压下晶体进行验证, 发现也符合稳定性条件, 说明高压下 HBT 晶体是稳定的。

计算体弹模量、剪切模量的普适公式为<sup>[23]</sup>

$$\begin{cases} 9B^V = C_{11} + C_{22} + C_{33} + 2C_{12} + 2C_{13} + 2C_{23} \\ 1/B^R = S_{11} + S_{22} + S_{33} + 2S_{12} + 2S_{13} + 2S_{23} \\ 15G^V = C_{11} + C_{22} + C_{33} - C_{12} - C_{13} - C_{23} + 3C_{44} + 3C_{55} + 3C_{66} \\ 15/G^R = 4(S_{11} + S_{22} + S_{33} - S_{12} - S_{13} - S_{23} + 3S_{44} + 3S_{55} + 3S_{66}) \end{cases} \quad (9)$$

根据 Voigt-Reuss-Hill 均值方法, 有

$$B = \frac{B^V + B^R}{2}, \quad G = \frac{G^V + G^R}{2} \quad (10)$$

再根据  $B$ 、 $G$  可以获得体弹模量  $E$  和泊松比  $\mu$

$$E = \frac{9BG}{3B+G}, \quad \mu = \frac{3\frac{B}{G} - 2}{6\frac{B}{G} + 2} \quad (11)$$

依据式 (9)~式 (11), 可以获得体弹模量、剪切模量和杨氏模量随压强的变化关系, 如图 4 所示。从图 4 可以看出, 随着压强的增大, 3 种模量的数值也增大, 其中体弹模量在 15 GPa 以上时表现出与压强

的线性关系。而 3 种模量中, 杨氏模量的变化最显著, 高压下的数值也最大。此外, 根据 Pugh<sup>[24]</sup> 的理论,  $B/G$  可作为鉴别晶体韧脆性的标准, 即当  $B/G < 1.74$  时, 晶体材料表现为脆性; 反之, 晶体材料表现为韧性。因此, 根据式 (11) 中泊松比  $\mu$  与  $B/G$  的关系来计算  $B/G$  的数值, 并作出  $B/G$  与压强的关系曲线, 如图 5 所示。随着压强增大,  $B/G$  逐渐增大, 与图 4 的变化趋势一致。当压强低于 85 GPa 时,  $B/G < 1.74$ , 材料表现出脆性; 而当压强高于 85 GPa 时, HBT 晶体表现出韧性。类似的层状分子晶体 TATB 在 0~50 GPa 时表现为韧性<sup>[25]</sup>, 而同为层状分子晶体的 HBT 在 0~85 GPa 下却表现为脆性, 说明 HBT 晶体对压力的响应较为敏感。

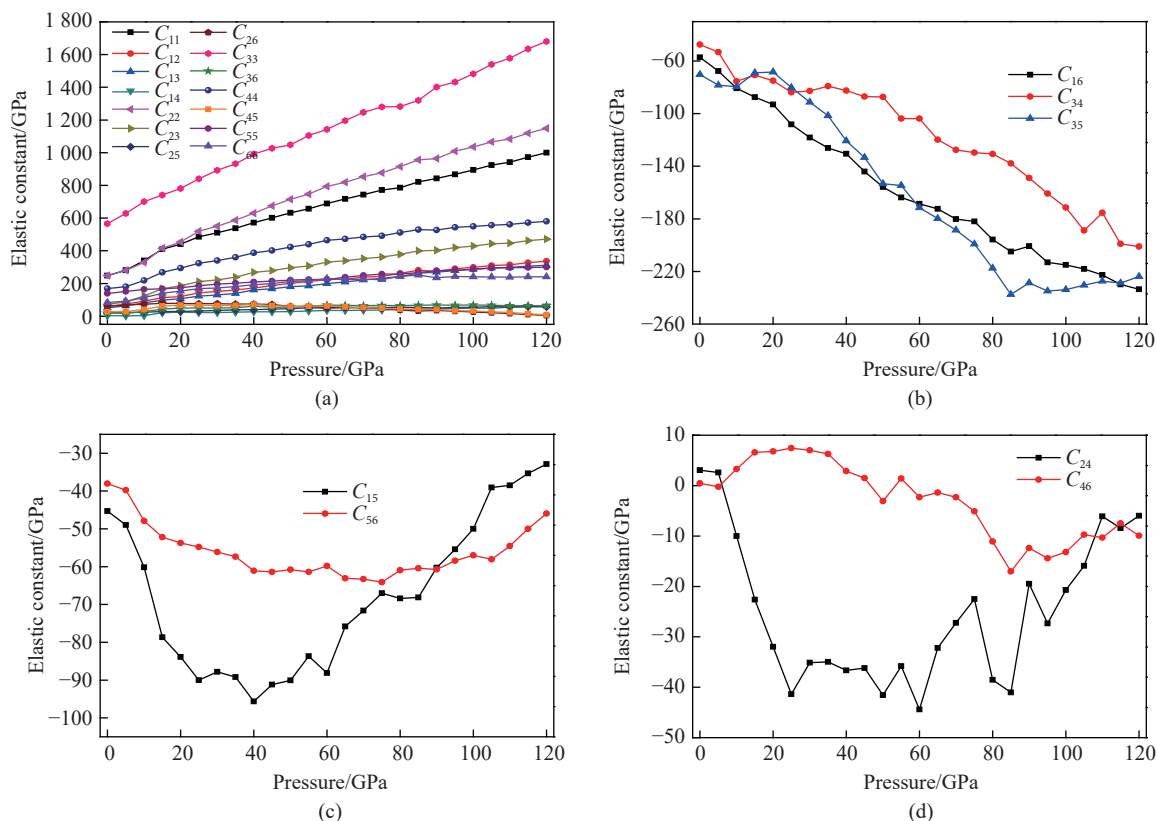


图 3 弹性常数随压强的变化

Fig. 3 Variations of elastic constant with pressure

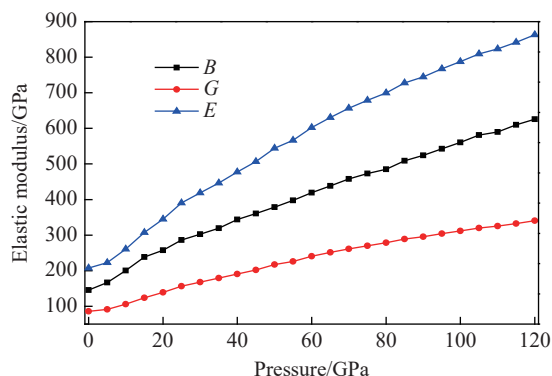


图 4 体弹、剪切和杨氏模量随压强的变化关系

Fig. 4 Variations of bulk modulus  $B$ , shear modulus  $G$  and Young's modulus  $E$  with pressure

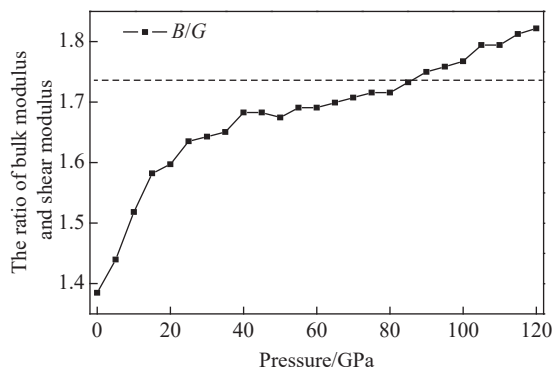


图 5 体弹模量和剪切模量之比与压强的关系

Fig. 5 Pressure dependence of the ratio of bulk modulus and shear modulus



同时, 根据以下公式可以得到 HBT 晶体材料的压缩波声速  $v_p$ 、剪切波声速  $v_s$  及平均声速  $v_m$

$$v_p = \sqrt{\frac{3B + 4G}{3\rho}} \quad (12)$$

$$v_s = \sqrt{G/\rho} \quad (13)$$

$$v_m = \left[ \frac{1}{3} \left( \frac{1}{v_p^3} + \frac{2}{v_s^3} \right) \right]^{-1/3} \quad (14)$$

式中:  $\rho$  为 HBT 晶体密度。平均声速  $v_m$  与德拜温度  $\Theta$  满足如下关系<sup>[26]</sup>

$$\Theta = \frac{h}{k_B} \left[ \frac{3n}{4\pi} \left( \frac{N_A \rho}{M} \right) \right]^{1/3} v_m \quad (15)$$

式中:  $h$  为普朗克常数,  $k_B$  为玻尔兹曼常数,  $n$  为原子数,  $N_A$  为阿伏加德罗常数,  $M$  为相对分子质量。图 6 给出了压缩波声速  $v_p$ 、剪切波声速  $v_s$ 、平均声速  $v_m$  和德拜温度  $\Theta$  随压强的变化关系。可见, 声速随压强的增大而增大, 其中压缩波声速  $v_p$  最大, 且随压强变化最明显。在 0 GPa 下得到的德拜温度为 975 K, 而 120 GPa 时则为 1 820 K, 压强对德拜温度的影响明显。

### 2.3 高压弹性各向异性

弹性性质的各向异性是材料力学性能通常受微裂纹和晶格畸变影响的重要条件, 因此, 研究弹性性质的各向异性对于提高材料的力学性能有着重要的意义<sup>[27]</sup>。目前有 3 种处理方案。第 1 种方案是 Chung 等<sup>[28]</sup>提出的体弹模量、杨氏模量和剪切模量分数比各向异性的概念, 定义为

$$A_B = \frac{B^V - B^R}{B^V + B^R} \quad (16)$$

$$A_E = \frac{E^V - E^R}{E^V + E^R} \quad (17)$$

$$A_G = \frac{G^V - G^R}{G^V + G^R} \quad (18)$$

式 (16)~式 (18) 分别用于表征材料的体弹模量、杨氏模量和剪切模量的各向异性程度。据此可以计算出模量各向异性分数比与压强的关系, 如图 7 所示。对于弹性各向同性材料,  $A_B$ 、 $A_E$  和  $A_G$  都为零, 而  $A_B$ 、 $A_G$  为 1 表示最大可能的弹性各向异性。从图 7 可以看出,  $A_B$ 、 $A_E$  和  $A_G$  均大于零而小于 1, 说明在 0~120 GPa 的压强范围内 HBT 晶体的弹性模量表现出各向异性。此外, 体弹模量分数比只有很小的波动, 杨氏模量和剪切模量则表现出相同的变化趋势, 即先增大后逐渐减小, 说明 HBT 晶体在高压下的各向异性程度减弱。

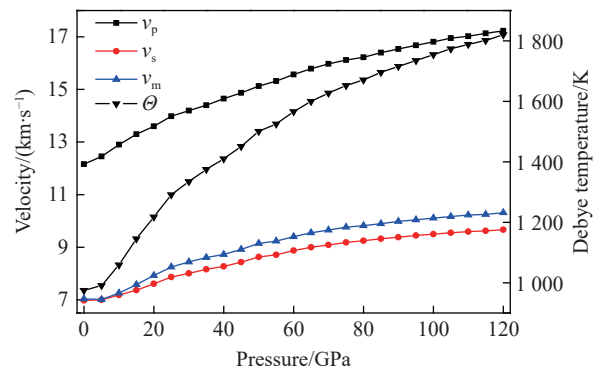


图 6 不同压强下 HBT 晶体的声速和德拜温度

Fig. 6 Compressional wave velocity, shear wave velocity and averaged wave velocity of HBT crystal under different pressures

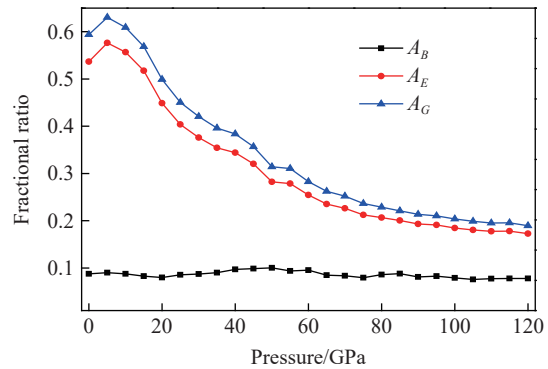


图 7 模量分数比与压强的关系

Fig. 7 Pressure dependence of the fractional ratio of modulus

第 2 种方案是 Ranganathan 等<sup>[29]</sup>提出的全局弹性各向异性系数( $A^U$ )的概念,用来描述材料弹性模量的各向异性,具体表达式如下

$$A^U = 5 \frac{G^V}{G^R} + \frac{B^V}{B^R} - 6 \quad (19)$$

$$A^C = \frac{G^V - G^R}{2G} \quad (20)$$

图 8 的纵轴表示 0~120 GPa 压强范围内的全局弹性各向异性系数  $A^U$  的数值,其中,最高点表示 0 GPa 下的数值。从结果看都大于零,因此, HBT 晶体在高压下表现出各向异性。

此外,式 (20) 的  $A^C$  与式 (18) 的  $A_G$  是相等的,都是由 Chung 等于 1967 年提出,均用于表征剪切模量的各向异性。为了比较两种方案的关系,作  $A^U$ - $A^C$  曲线。可见,两种方法都很好地描述了 HBT 晶体在 0~120 GPa 压强范围弹性模量的各向异性特征。随着压强的增大,  $A^U$ 、 $A^C$  和  $A^U/A^C$  的数值都在减少,说明弹性模量的各向异性程度在减弱,两种方案得到的结论一致。

第 3 种方案是 Toher 总结和发展的 Ranganathan 关于材料弹性各向异性的理论表述<sup>[30]</sup>

$$A^L = \sqrt{5} \ln \left( 1 + \frac{A^U}{5} \right) \quad (21)$$

$A^L$  随压强的变化关系如图 9 所示。可以发现,曲线的变化趋势与第 1 种方案(弹性模量分数比理论)得到的结果类似,即  $A^L$  先增大后减小, 5 GPa 处出现转折。整体上看,高压下 HBT 晶体弹性模量的各向异性程度减弱。由此可知,  $A^C$ 、 $A^U$  和  $A^L$  三者 在描述 HBT 晶体各向异性程度上是等价的。

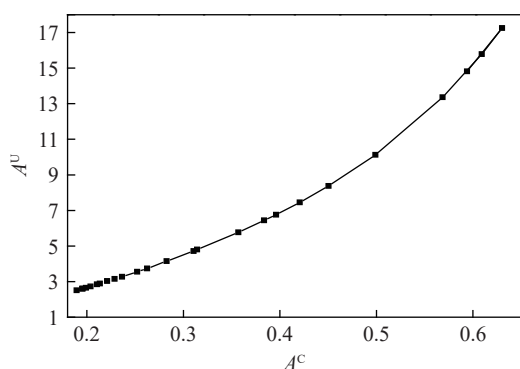


图 8  $A^U$  和  $A^C$  的各向异性关系

Fig. 8 Anisotropy diagram of the  $A^U$  and  $A^C$

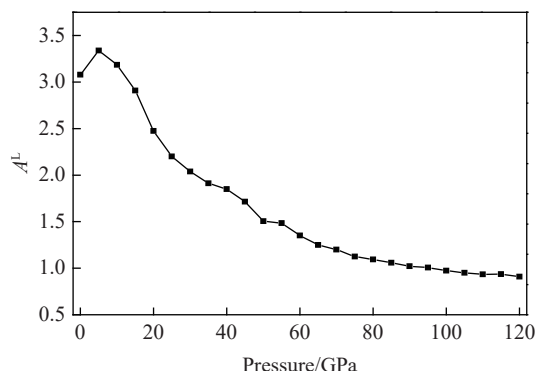


图 9  $A^L$  随压强的变化关系

Fig. 9 Pressure as a function of anisotropy index  $A^L$

从图 7、图 9 可以明显看出, 5、25 和 55 GPa 下曲线有较为明显的变化。为了进一步考察这 3 个压强下 HBT 晶体模量的各向异性程度, 利用 ELATE 开源软件<sup>[31]</sup>, 将这 3 个压强下的弹性系数 6×6 矩阵元 36 个数值全部代入, 绘制出剪切模量的二维分布, 如图 10 所示。因单位换算, 图 10 中坐标轴均被放大了 10 倍。图 10(a)、图 10(b)、图 10(c) 分别显示了 5、25 和 55 GPa 下剪切模量的二维分布。每个压强下的 3 幅图分别代表剪切模量三维分布在  $xy$ 、 $xz$ 、 $yz$  3 个面上的投影。蓝线和绿线分别代表  $\vec{a}$ 、 $\vec{b}$  两个方向剪切模量的矢量投影。从图 10 可以看出: 压强越大, 每个面上投影矢量的各向异性越强; 在确定的压强下, 每个面上的投影也表现出差异性。综上所述, HBT 晶体剪切模量的各向异性受压强的影响显著。

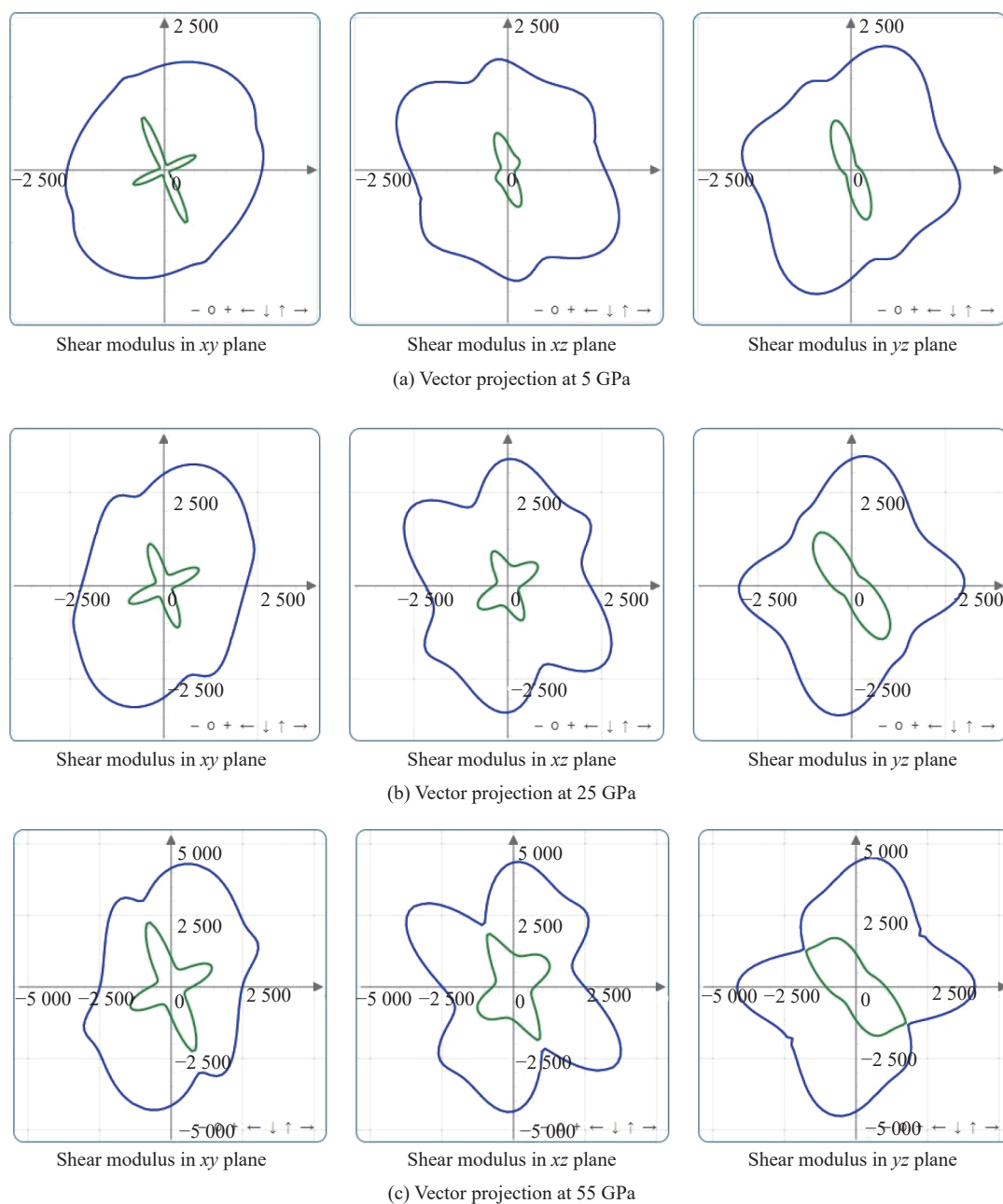


图 10 不同压强下剪切模量各向异性的二维投影

Fig. 10 Anisotropic two-dimensional projection of shear modulus at different pressures

### 3 结 论

采用基于密度泛函理论的第一性原理方法计算了 HBT 晶体在零温零压及高压下的结构, 研究了高压下 HBT 的力学稳定性和弹性性质, 具体分析了 HBT 晶体的弹性常数  $C_{ij}$ 、弹性模量 ( $B$ 、 $G$ 、 $E$ )、声速 ( $v_p$ 、 $v_s$ 、 $v_m$ ) 和德拜温度  $\theta$  随压强的变化关系。在此基础上, 基于 3 种不同理论研究了弹性模量的各向异性。结果表明, 弹性常数和模量都随压强的增加而增加。根据  $B/G$  估测了 HBT 晶体在高压下的韧脆性。弹性模量各向异性参量随压强表现出不同的变化规律, 总体而言, 高压下 HBT 晶体的弹性模量各向异性程度减弱。



## 参考文献:

- [1] 范开敏, 杨莉, 孙庆强, 等. 六角相  $\text{ErA}_x$  ( $A = \text{H}, \text{He}$ ) 体系弹性性质的第一性原理研究 [J]. *物理学报*, 2013, 62(11): 116201.  
FAN K M, YANG L, SUN Q Q, et al. First-principles study on elastic properties of hexagonal phase  $\text{ErA}_x$  ( $A = \text{H}, \text{He}$ ) [J]. *Acta Physica Sinica*, 2013, 62(11): 116201.
- [2] ANIRBAN P, CATALIN R P. Contribution of molecular flexibility to the elastic-plastic properties of molecular crystal  $\alpha$ -RDX [J]. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2017, 25(1): 015006.
- [3] RYKOUNOV A A. Investigation of the pressure dependent thermodynamic and elastic properties of 1,3,5-triamino-2,4,6-trinitrobenzene using dispersion corrected density functional theory [J]. *Journal of Applied Physics*, 2015, 117(21): 215901.
- [4] LIAN D, LU L Y, WEI D Q. High-pressure behavior of  $\beta$ -HMX crystal studied by DFT-LDA [J]. *Chinese Physics Letters*, 2008, 25(3): 899–902.
- [5] WU Q, ZHU W H, XIAO H M. DFT study on crystalline 1,1-diamino-2,2-dinitroethylene under high pressures [J]. *Journal of Molecule Modeling*, 2013, 19(9): 4039–4047.
- [6] XU X J, ZHU W H, XIAO H M. DFT studies on the four polymorphs of crystalline CL-20 and the influences of hydrostatic pressure on epsilon-CL-20 crystal [J]. *The Journal of Physical Chemistry B*, 2007, 111(8): 2090–2097.
- [7] KLAPÖTKE T M, SABATE C M. Bistetrazoles: nitrogen-rich, high-performing, insensitive energetic compounds [J]. *Chemistry of Materials*, 2008, 20(11): 3629–3637.
- [8] KLAPÖTKE T M, SABATE C M. 5, 5'-Hydrazinebistetrazole: an oxidation-stable nitrogen-rich compound and starting material for the synthesis of 5, 5'-Azobistetrazolates [J]. *Zeitschrift für Anorganische und Allgemeine Chemie*, 2007, 633(15): 2671–2677.
- [9] KARAGHISOFF K, KLAPÖTKE T M, SABATE C M. Nitrogen-rich compounds in pyrotechnics: alkaline earth metal salts of 5, 5'-Hydrazine-1, 2-diylbis(1H-tetrazole) [J]. *European Journal of Inorganic Chemistry*, 2009, 2: 238–250.
- [10] EBESPACHER M, KLAPÖTKE T M, SABATE C M. Nitrogen-rich alkali metal 5, 5'-Hydrazinebistetrazolate salts: environmentally friendly compounds in pyrotechnic mixtures [J]. *New Journal of Chemistry*, 2009, 33: 517–527.
- [11] DE LUCIA F C, GOTTFRIED J L. Characterization of a series of nitrogen-rich molecules using laser induced breakdown spectroscopy [J]. *Propellants Explosives Pyrotechnics*, 2010, 35(3): 268–277.
- [12] GIANNOZZI P, ANDREUSSI O, BRUMME T, et al. Advanced capabilities for materials modelling with Quantum ESPRESSO [J]. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2017, 29(46): 465901.
- [13] PERDEW J P, BURKE K, ERNZERHOF M. Generalized gradient approximation made simple [J]. *Physical Review Letter*, 1996, 77(18): 3865–3868.
- [14] PERDEW J P, BURKE K, ERNZERHOF M. Errata: generalized gradient approximation made simple [J]. *Physical Review Letter*, 1997, 78(7): 1396.
- [15] HAMANN D R. Optimized norm-conserving vanderbilt pseudopotentials [J]. *Physical Review B*, 2013, 88(8): 085117.
- [16] FLETCHER R. Practical methods of optimization [M]. New York: Wiley, 1980: 126–127.
- [17] MONKHORST H J, PACK J D. Special points for brillouin-zone integrations [J]. *Physical Review B*, 1976, 13(12): 5188–5192.
- [18] CORSO D A. Pseudopotentials periodic table: from H to Pu [J]. *Computational Materials Science*, 2014, 95: 337–350.
- [19] CORSO D A. Elastic constants of beryllium: a first-principles investigation [J]. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2016, 28(7): 075401.
- [20] MOUHAT F, COUDERT F X. Necessary and sufficient elastic stability conditions in various crystal systems [J]. *Physical Review B*, 2014, 90(22): 224104.
- [21] CIEZAK-JENKINS J A, JENKINS T A. Shear induced weakening of the hydrogen bonding lattice of the energetic material 5,5'-Hydrazinebistetrazole at high-pressure [J]. *Journal of Molecular Structure*, 2017, 1129: 313–318.
- [22] BORN M. On the stability of crystal lattices. I [J]. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 1940, 36(2): 160–172.
- [23] HILL R. The elastic behaviour of a crystalline aggregate [J]. *Proceedings of the Physical Society (Section A)*, 1952, 65(5): 349–354.
- [24] PUGH S F. XCII Relations between the elastic moduli and the plastic properties of polycrystalline pure metals [J]. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, 1954, 45(367): 823–843.

- [25] 范航, 聂福德, 龙瑶, 等. 钝感高能炸药三氨基三硝基苯高温高压下热力学性质的分子动力学模拟研究 [J]. *物理学报*, 2016, 65(6): 066201.
- FAN H, NIE F D, LONG Y, et al. A molecular dynamics simulation of thermodynamic properties of 1, 3, 5-triamino-2, 4, 6-trinitrobenzene under high pressure and high temperature [J]. *Acta Physica Sinica*, 2016, 65(6): 066201.
- [26] ANDERSON O L. A simplified method for calculating the Debye temperature from elastic constants [J]. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 1963, 24(7): 909–917.
- [27] 陈志谦, 林兴香, 李春梅. 硅化锆 (ZrSi) 弹性及其各向异性研究 [J]. *西南大学学报(自然科学版)*, 2016, 38(3): 1–8.
- CHEN Z Q, LIN X X, LI C M. Investigations of elasticity anisotropy of ZrSi [J]. *Journal of Southwest University (Natural Science Edition)*, 2016, 38(3): 1–8.
- [28] CHUNG D H, BUESSEM W R. The elastic anisotropy of crystals [J]. *Journal of Applied Physics*, 1967, 38(5): 2010–2012.
- [29] RANGANATHAN S I, OSTOJA-STARZEWSKI M. Universal elastic anisotropy index [J]. *Physical Review Letter*, 2008, 101(5): 055504.
- [30] TOHER C, PLATA J J, LEVY O, et al. High-throughput computational screening of thermal conductivity, Debye temperature, and Grüneisen parameter using a quasiharmonic Debye model [J]. *Physical Review B*, 2014, 90(17): 174107.
- [31] GAILLAC R, PULLUMBI P, COUDERT F X. ELATE: an open-source online application for analysis and visualization of elastic tensors [J]. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2016, 28(27): 275201.

## Elastic Properties of HBT Crystal under High Pressure

LI Zuo, ZHANG Fengling, LIAO Dalin

(*School of Science, Guizhou University of Engineering Science, Bijie 551700, Guizhou, China*)

**Abstract:** The lattice constants, elastic and anisotropy properties of HBT crystals at normal and high pressure were investigated by using the first-principle method based on density functional theory. The anisotropic properties of HBT crystal under high pressure were studied by using three different theoretical models. The results show that the elastic constant and elastic modulus of HBT crystal increase significantly under high pressure, and HBT crystal shows high-pressure toughness. Simultaneously, HBT crystal has large elastic modulus and mechanical anisotropy under high pressure. With increasing pressure, the extent of anisotropy of HBT crystal decreases. In addition, the thermodynamic properties show that HBT crystal has a higher Debye temperature, which increases with increasing pressure.

**Keywords:** HBT crystal; high pressure; elastic properties; anisotropic