

Theoretical Calculation of Plane Wave Speeds for Alkali Metals under Pressure

J. EFTIS, D. E. MACDONALD AND G. M. ARKILIC

School of Engineering and Applied Science, The George Washington University, Washington, D.C. (U.S.A.)

(Received May 13, 1971)

SUMMARY

Theoretical calculations of the variation with pressure of small amplitude plane wave speeds are performed for sodium and potassium at zero temperature. The results obtained for wave speeds associated with volume dependent second-order elastic coefficients

show better agreement with experimental data than for wave speeds associated with shear dependent coefficients. This result is believed to be due to omission of the band structure correction to the strain energy density.

RÉSUMÉ

L'influence de la pression sur la vitesse d'ondes planes de faible amplitude a été calculée de manière théorique dans le cas du sodium et du potassium au zéro absolu. Les résultats obtenus dans le cas où la vitesse des ondes est déterminée par les constantes élastiques du second ordre qui dépendent du volume sont en meilleur accord avec les données expérimentales

que ceux qui sont obtenus dans le cas où la vitesse des ondes fait intervenir les constantes élastiques qui dépendent du cisaillement. On pense que cette différence est due à l'omission de la correction de structure de bande dans le calcul de la densité d'énergie de déformation.

ZUSAMMENFASSUNG

Die Variation der Ausbreitungsgeschwindigkeit ebener Wellen kleiner Amplitude mit dem Druck wurde für Natrium und Kalium für 0°K theoretisch berechnet. Diejenigen Ausbreitungsgeschwindigkeiten, die mit den volumenabhängigen elastischen Koeffizienten zweiter Ordnung gekoppelt sind, zeigen bessere

Übereinstimmung mit den experimentellen Werten als jene Ausbreitungsgeschwindigkeiten, die mit den scherungsabhängigen Koeffizienten zusammenhängen. Dieses Ergebnis ist vermutlich eine Folge der Vernachlässigung der Bandstrukturkorrektur für die Verformungsenergiedichte.

INTRODUCTION

In previous papers we have shown that by means of a strain energy formulation it is possible to perform, in a general and unified manner, theoretical calculations for constitutive relations, pressure-volume relations, second-order elastic coefficients and the variation of these coefficients with dilatation or pressure for the alkali metals at absolute zero temperature^{1,2}. It should be noted that development of

the strain energy density function mentioned above is independent of classical thermodynamic considerations, which in purely continuum theories of elastic behavior must be employed in order to infer existence of such a function.

The strain energy is expressed as a continuous, differentiable function of the Green-Cauchy deformation tensors, and is based on well established quantum and classical calculations of various contributions to the crystal energy. These include ap-