

FIRST-PRINCIPLES PHONON DENSITY OF STATES OF GRAPHITE FOR THERMAL NEUTRON SCATTERING APPLICATIONS

Nguyen Bich Thuy^{a, 1}, Pham Ngoc Son^a

^a Dalat Nuclear Research Institute, Lam Vien, Dalat, Lamdong, 66124, Vietnam

The study presents first-principles calculations of the phonon density of states (PhDOS) of graphite using density functional theory (DFT) within the local density approximation (LDA), as implemented in the Quantum ESPRESSO package. The calculated phonon spectrum exhibits characteristic vibrational features, including high-frequency in-plane optical modes reaching approximately 48 THz and low-frequency interlayer modes. The resulting PhDOS shows good agreement with the reference PhDOS derived from inelastic neutron scattering measurements, with minor discrepancies attributed to the harmonic approximation and finite-temperature effects. These results support the suitability of the LDA-based DFT approach for describing graphite lattice dynamics and provide a basis for constructing the thermal neutron scattering law $S(\alpha, \beta)$, thereby laying the groundwork for generating high-precision thermal scattering libraries for crystalline materials.

В данной работе представлены первопринципные расчеты плотности фононных состояний (PhDOS) графита с использованием теории функционала плотности (DFT) в приближении локальной плотности (LDA), реализованной в программном пакете Quantum ESPRESSO. Рассчитанный фононный спектр демонстрирует характерные особенности колебаний, включая высокочастотные внутривиброскостные оптические моды, достигающие приблизительно 48 ТГц, а также низкочастотные межслоевые моды. Полученная PhDOS хорошо согласуется с эталонной PhDOS, полученной из измерений неупругого рассеяния нейтронов, с незначительными расхождениями, обусловленными гармоническим приближением и эффектами конечной температуры. Наши результаты подтверждают применимость подхода DFT в рамках LDA для описания динамики решетки графита и обеспечивают основу для построения закона рассеяния тепловых нейтронов $S(\alpha, \beta)$, тем самым способствуя разработке высокоточных библиотек теплового рассеяния нейтронов для кристаллических материалов.

PACS: 63.20.dk; 81.05.uf; 65.40.De; 28.20.Cz

Received on December 5, 2025.

¹E-mail: thuynb@dnri.vn