



РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

Сравнение кривых холодного сжатия, полученных по моделям среднего атома и из первопринципных расчётов

А.А. Овечкин, Н.А. Смирнов, П.А. Лобода

РФЯЦ – ВНИИТФ им. акад Е.И. Забабахина

Иерархия неэмпирических методов расчёта



РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

Квазиклассические
модели среднего
атома



Модель Томаса-Ферми (ТФ)



обменные эффекты

Модель Томаса-Ферми-Дирака (ТФД)



градиентные эффекты
(разложение по степеням \hbar)

**Модель ТФ с квантовыми (градиентными)
и обменными поправками (ТФП)**



оболочечные эффекты

Модели среднего атома с квантовым описанием электронов

Модель Либермана



многоцентровые расчёты

Первопринципные расчёты методом функционала электронной плотности

Полнопотенциальный метод линеаризованных маффин-тин орбиталей

(FP-LMTO)

Способы расчёта давления в модели Либермана



Способ 1.

Релятивистская теорема вириала $\Leftrightarrow P =$ компонента P_{rr} тензора напряжений

$$P^{(\text{Либ},1)} = P_{\text{xc}}(n_e(r_0)) + \frac{c}{4\pi r_0^2} \sum_{\nu} n(\varepsilon_{\nu}) (Q_{\nu}(r_0) P'_{\nu}(r_0) - P_{\nu}(r_0) Q'_{\nu}(r_0))$$

Нерелятивистский предел ($c \rightarrow \infty$): $P^{(\text{Либ},1)} = \frac{1}{3V} \left(\boxed{K + \tilde{K}} + E_{\text{el}} + C_{\text{xc}} \right)$

$$K = -\frac{1}{2} \sum_{\nu} n(\varepsilon_{\nu}) \int_V \psi_{\nu}^*(\mathbf{r}) \nabla^2 \psi_{\nu}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$$

$$\tilde{K} = \frac{1}{2} \sum_{\nu} n(\varepsilon_{\nu}) \int_V |\nabla^2 \psi_{\nu}(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r}$$

↑ кинетическая энергия
↑ электростатическая энергия
↑ обменно-корреляционный вклад

Способ 2. Численное дифференцирование энергии

$$P^{(\text{Либ},2)} = \rho^2 \frac{\partial E}{\partial \rho}$$

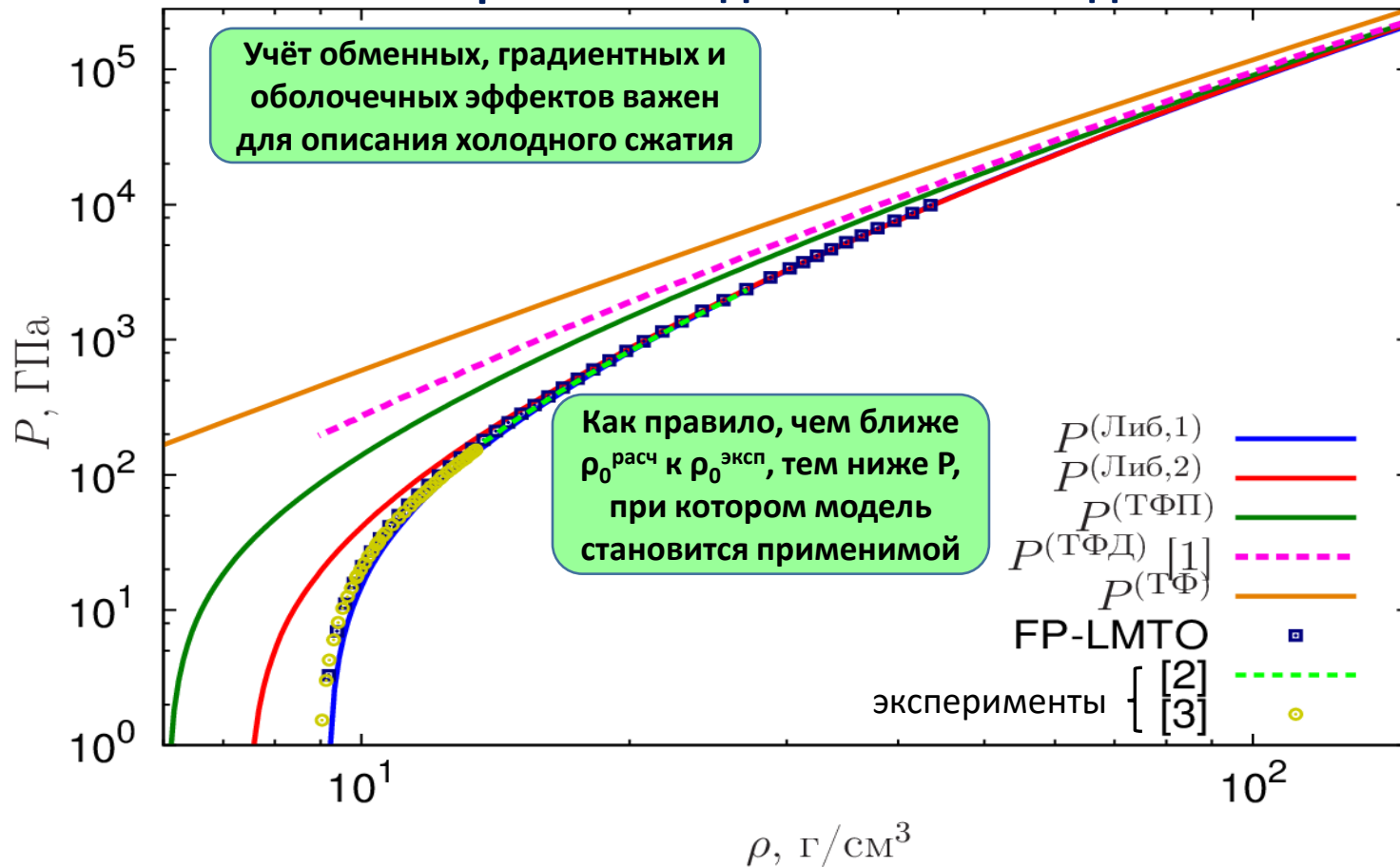
Способ 3. $P^{(\text{Либ},3)} = P_{\text{xc}}(n_e(r_0)) + \frac{c}{4\pi r_0^2} \sum_{\nu} n(\varepsilon_{\nu}) \left(Q_{\nu}(r_0) P'_{\nu}(r_0) - P_{\nu}(r_0) Q'_{\nu}(r_0) - \frac{1}{r_0} P_{\nu}(r_0) Q_{\nu}(r_0) \right)$

$c \rightarrow \infty \Rightarrow P^{(\text{Либ},3)} = \frac{1}{3V} (\boxed{2K} + E_{\text{el}} + C_{\text{xc}})$ ← традиционная форма нерелятивистской теоремы вириала

Кривая холодного сжатия меди



РФЯЦ-ВНИИТО
РОСАТОМ



1. C.W. Greeff, J.C. Boettger, M.J. Graf, J.D. Johnson. J. Phys. Chem. Sol. **67**, 2033 – 2040 (2006).

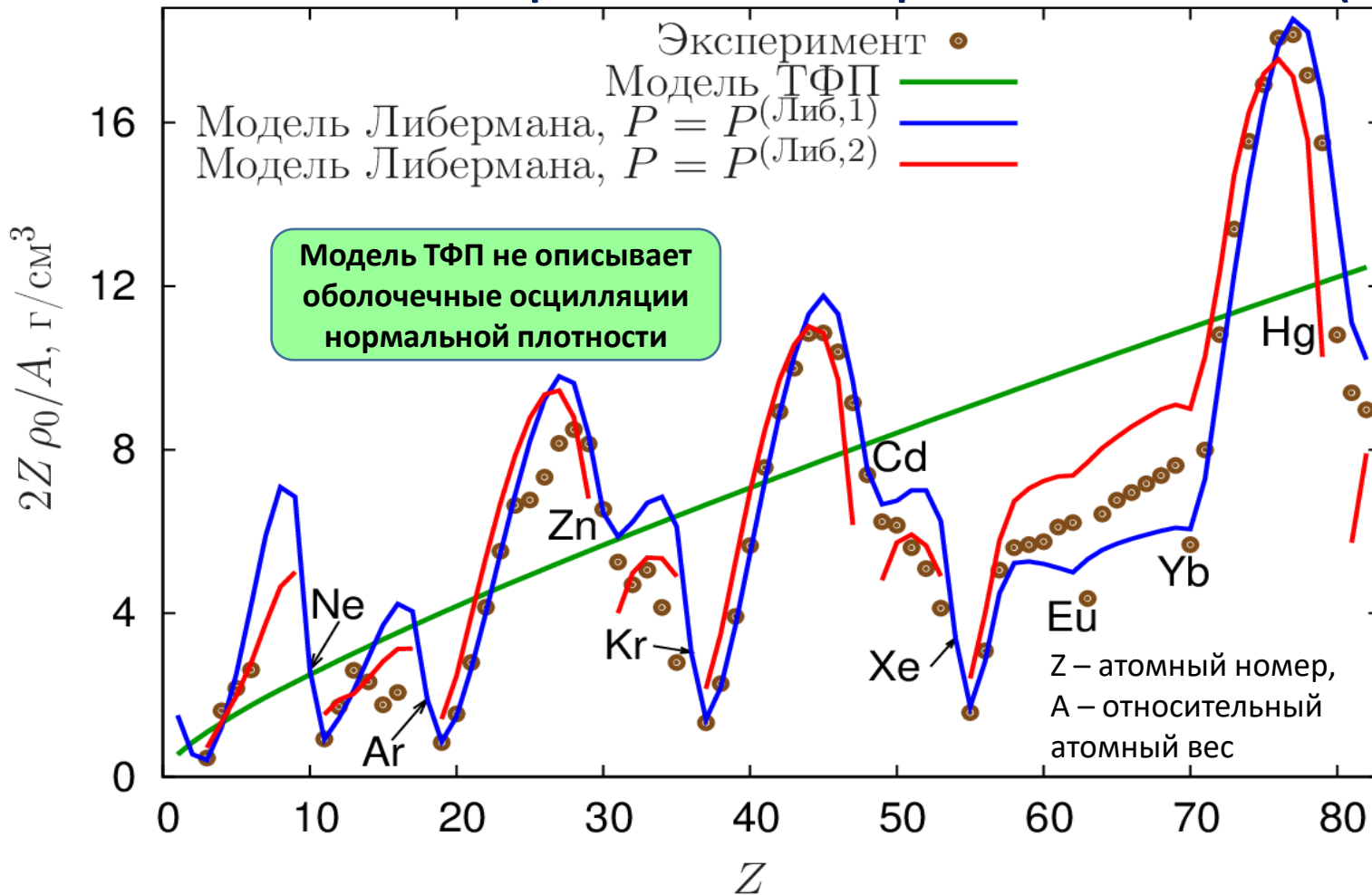
2. D.E. Fratanduono, R.F. Smith, S.J. Ali et al. Phys. Rev. Lett. **124**, 015701 (2020).

3. A. Dewaele, P. Loubeyre, M. Mezouar. Phys. Rev. B **70**, 094112 (2004).

Расчётная и экспериментальная нормальная плотность ($P=0$)



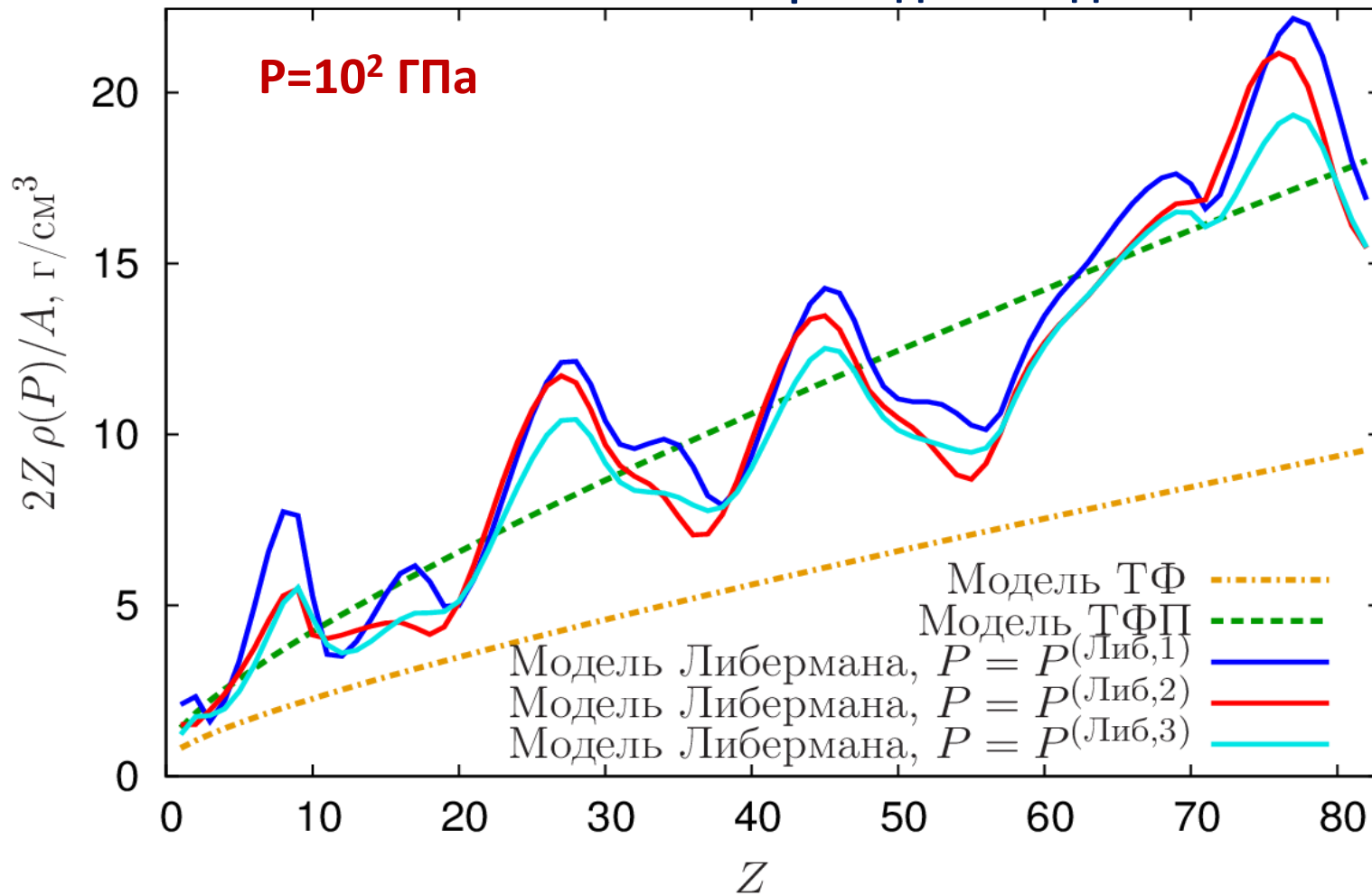
РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ



Расчётная плотность при заданном давлении



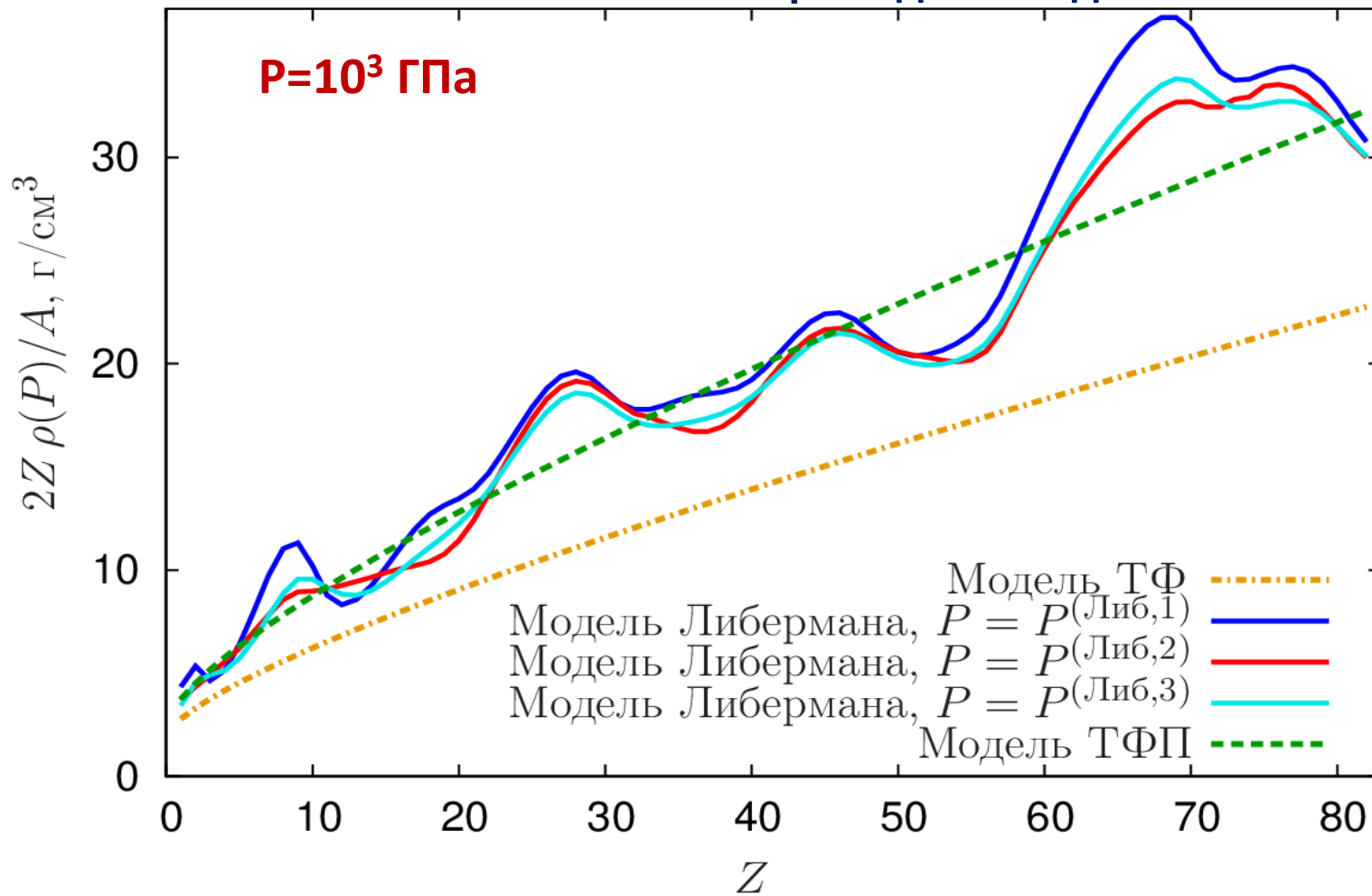
РФЯЦ-ВНИИТ
РОСАТОМ



Расчётная плотность при заданном давлении



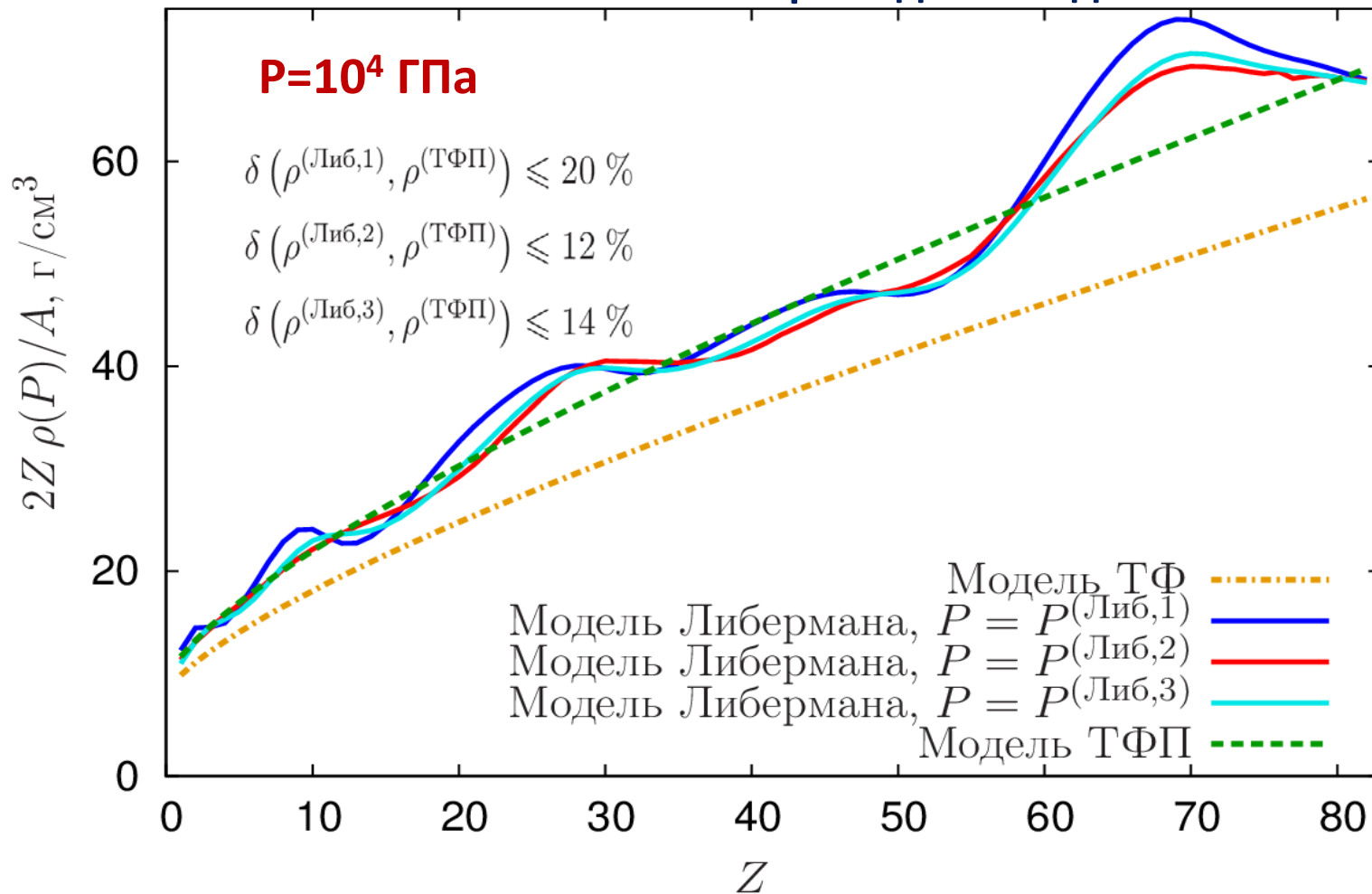
РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ



Расчётная плотность при заданном давлении



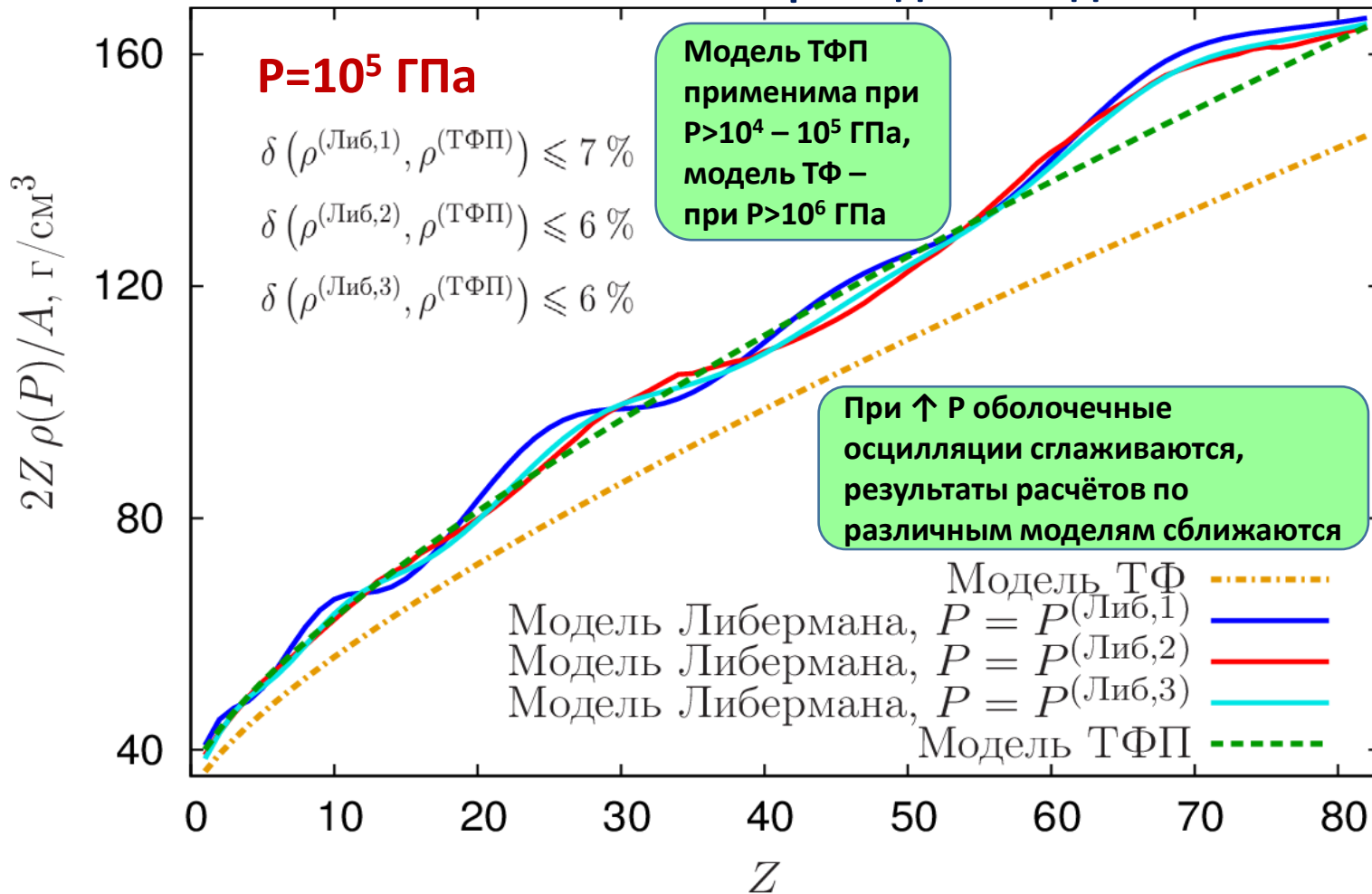
РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ



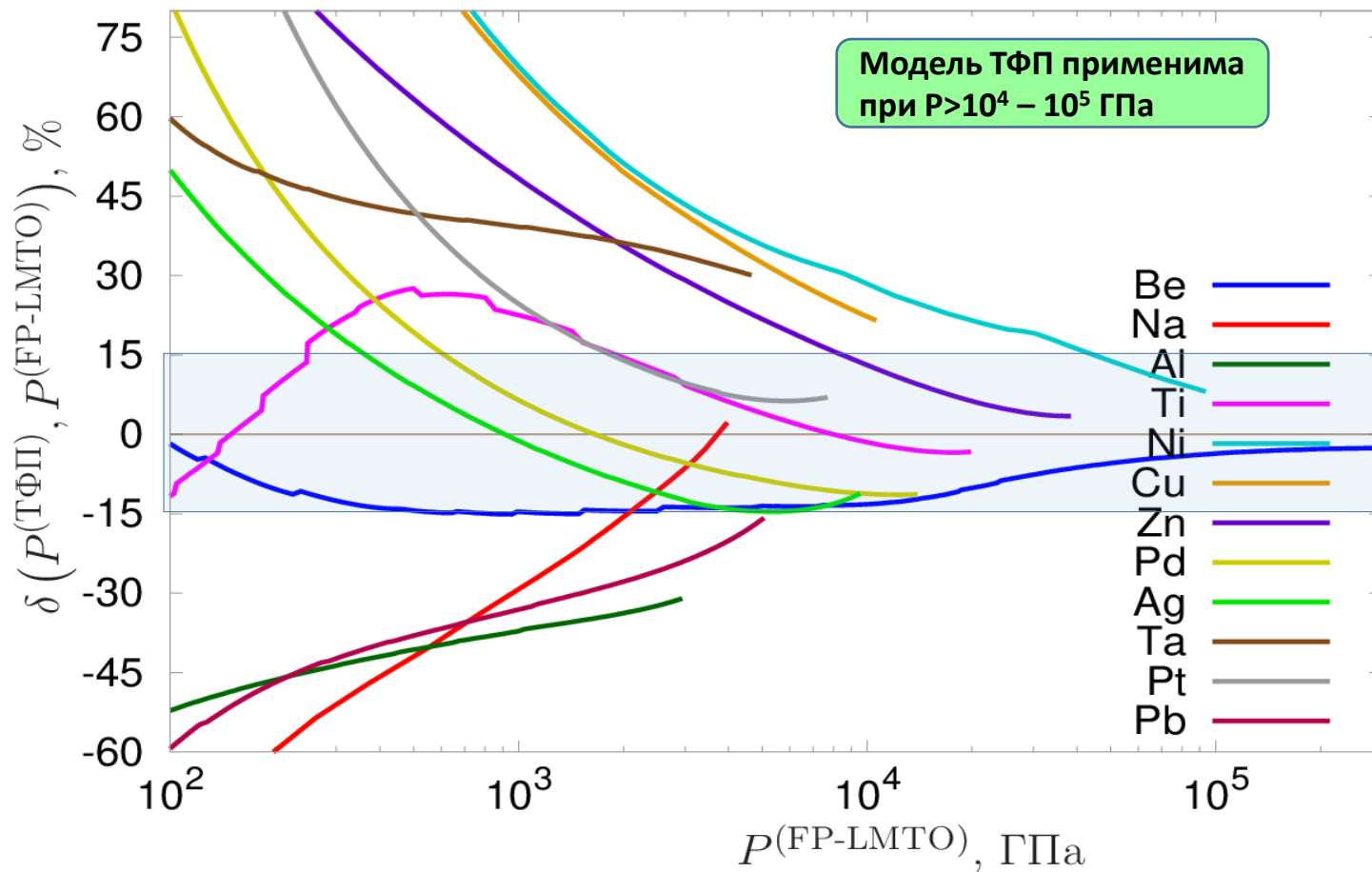
Расчётная плотность при заданном давлении



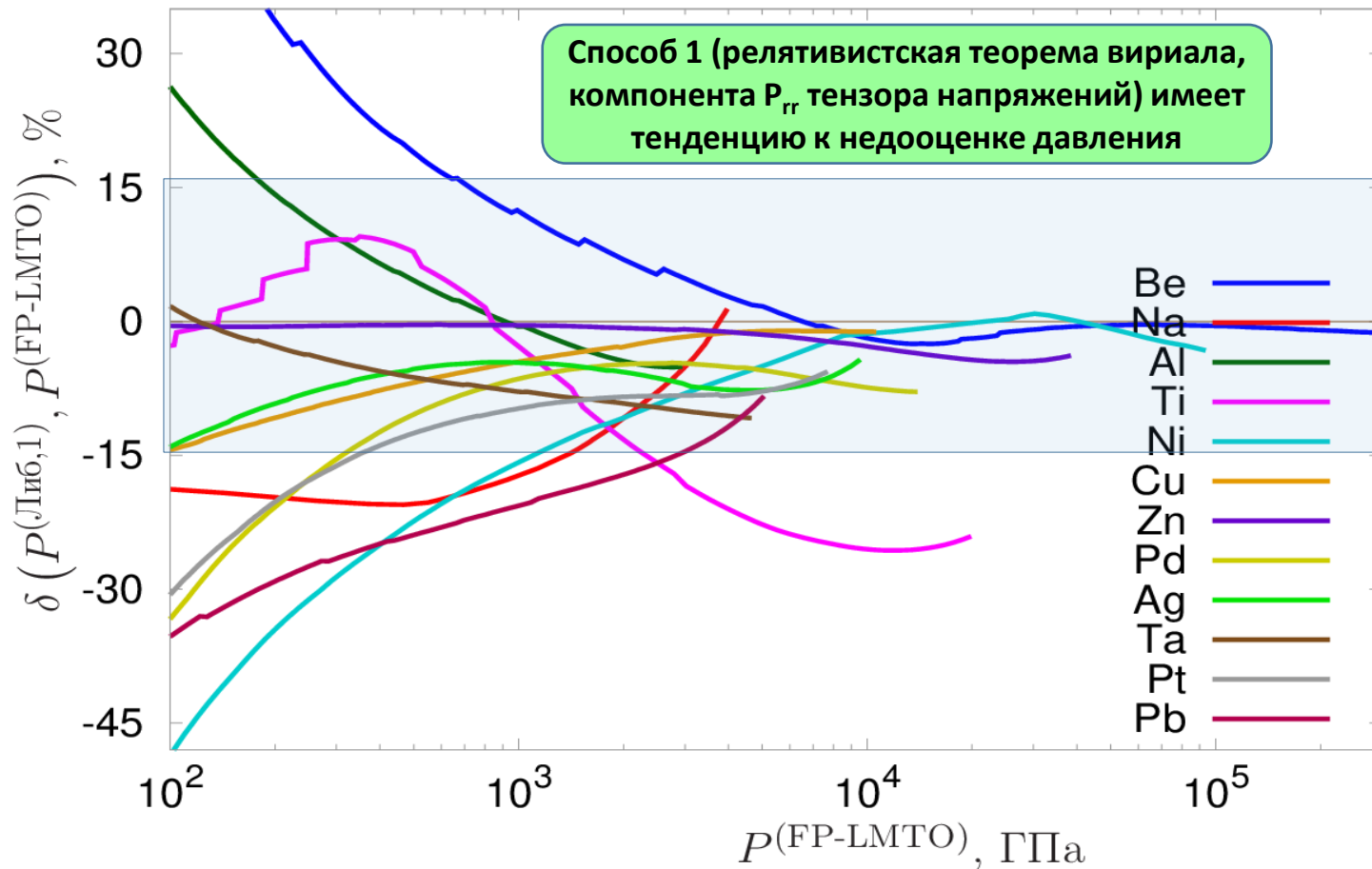
РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ



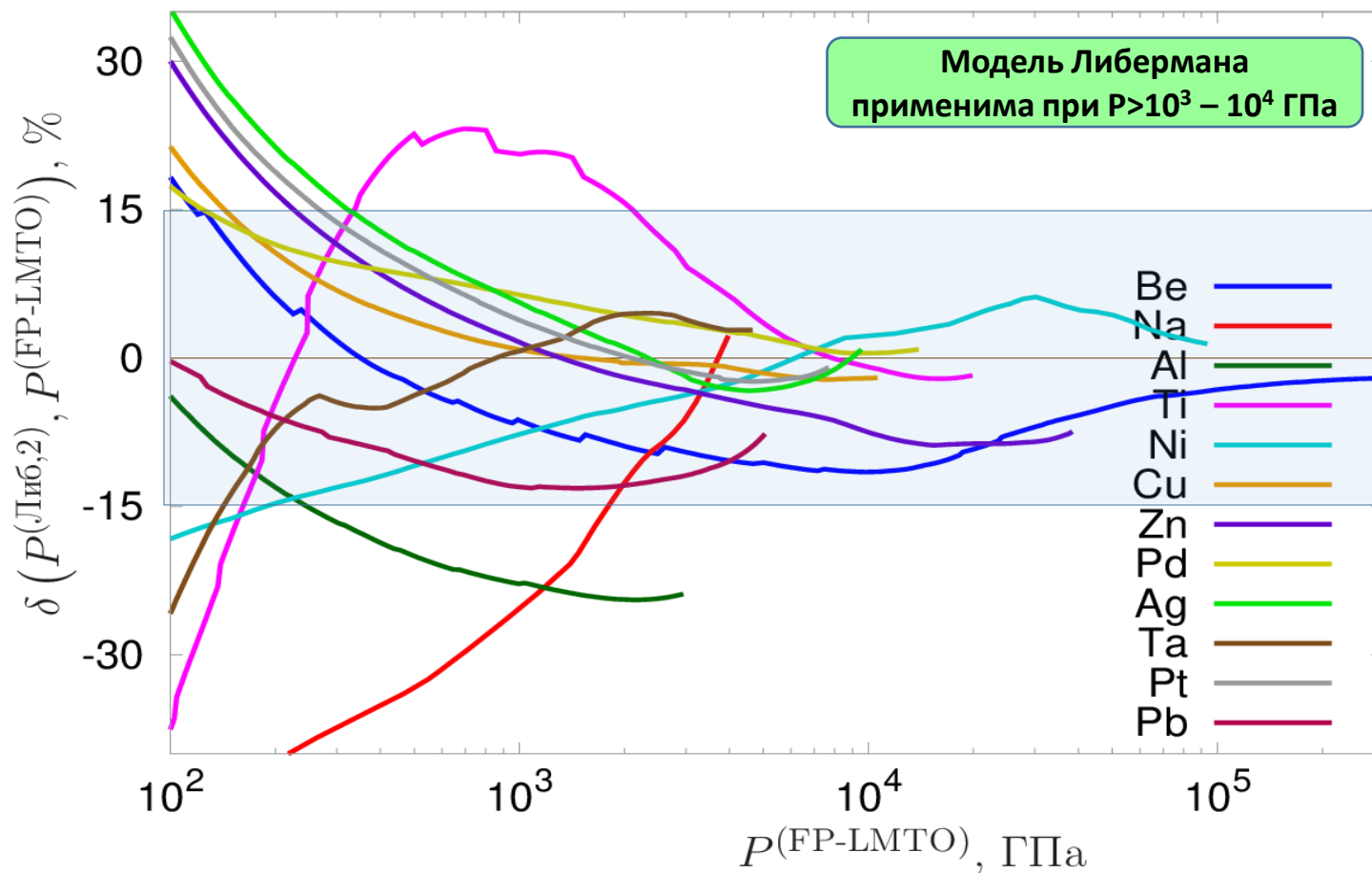
Относительное отличие давлений, полученных по модели ТФП и методом FP-LMTO



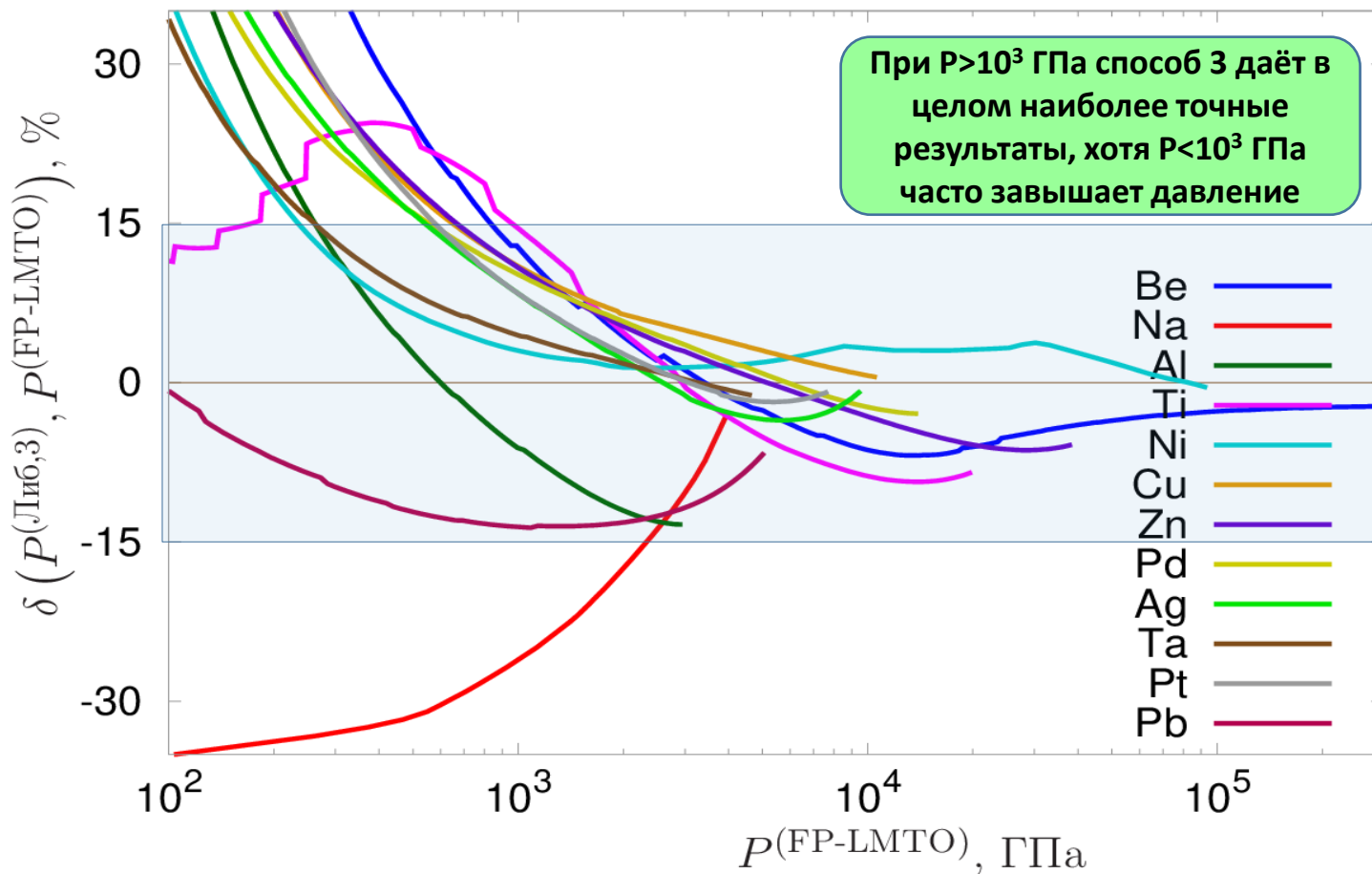
Относительное отличие давлений, полученных по модели Либермана (способ 1) и методом FP-LMTO



Относительное отличие давлений, полученных по модели Либермана (способ 2) и методом FP-LMTO



Относительное отличие давлений, полученных по модели Либермана (способ 3) и методом FP-LMTO



Выводы



- Проведено сравнение кривых холодного сжатия, рассчитанных первопринципным методом FP-LMTO и по различным моделям среднего атома.
- Показано влияние различных видов квантовых эффектов – обменных, градиентных, оболочечных – на кривые холодного сжатия. Неучёт хотя бы одного из этих эффектов сильно ограничивает область применимости модели.
- Получена оценка области применимости моделей среднего атома при холодном сжатии (погрешность расчётного давления меньше или порядка 10 %):
 - модель Либермана (способы расчёта 2 и 3): $P > 10^3 - 10^4$ ГПа
 - модель ТФП: $P > 10^4 - 10^5$ ГПа
 - модель ТФ: $P > 10^6$ ГПа.

Авторы выражают благодарность Е.Е. Мироновой за предоставленную программу для расчётов по модели Томаса-Ферми с поправками и А.А. Рыкунову за полезные обсуждения.