

Применимость различных псевдопотенциалов для расчета термодинамических свойств дейтерида лития при сжатии

Дмитрий Минаков.*^{1,2}, Павел Левашов^{1,2}

Dmitry Minakov, Pavel Levashov

¹Объединенный институт высоких температур РАН

²Московский физико-технический институт (государственный университет)

*minakovd@ihed.ras.ru

Цели

Goals

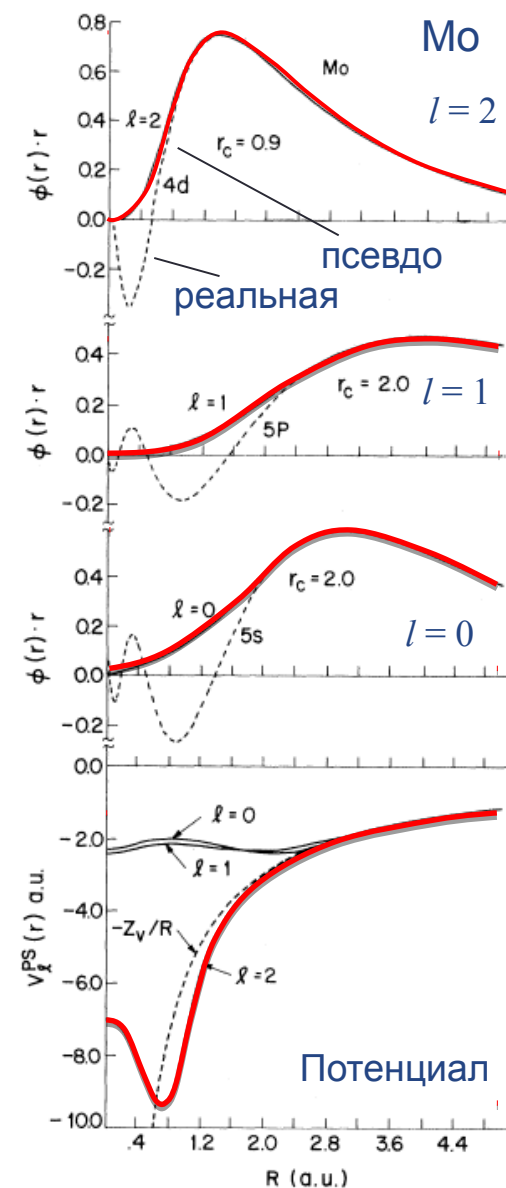
- Оценка влияния электронов внутренней оболочки лития и эффекта перекрывания псевдопотенциальных коров на термодинамические свойства LiD при сжатии
- Расчет ударной адиабаты и ударной адиабаты повторного сжатия LiD
- Анализ применимости псевдопотенциалов Li для квантового молекулярного динамического (КМД) моделирования свойств LiD при больших температурах и давлениях

Пседопотенциальное приближение

Pseudopotential approximation

Идея: «сглаживание» потенциала и волновых функций электронного кора

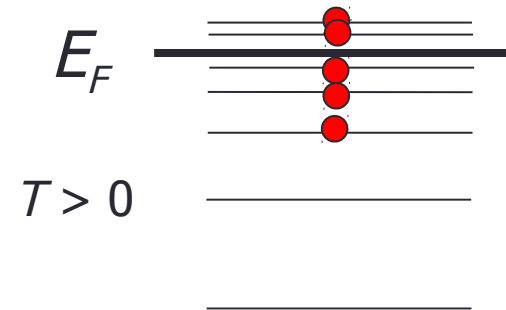
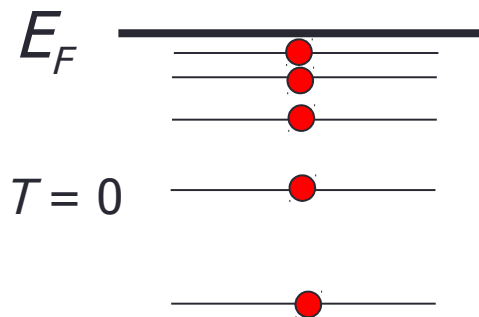
1. Точные и приближенные уровни энергии для валентных электронов совпадают для данной конфигурации.
2. Точные и приближенные волновые функции совпадают при $r > R_{CORE}$.
3. Интегралы от 0 до r для точной и приближенной плотности совпадают при $r > R_{CORE}$ для каждого валентного состояния (сохранение нормы).
4. Логарифмические производные и их производные по энергии совпадают для точной и приближенной волновой функции при $r > R_{CORE}$.



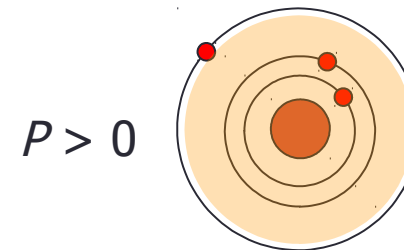
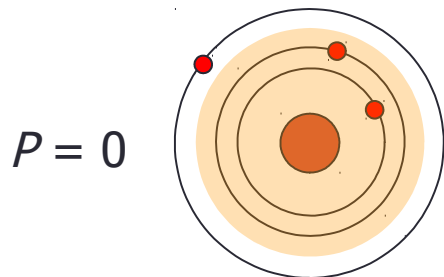
Влияние псевдопотенциала на результат моделирования

Influence of a pseudopotential on result of simulation

Псевдопотенциалы описывают электроны с энергиями меньше энергии Ферми – ошибки при высоких температурах



Пространственное распределение электронов кора не меняется – ошибки при высоких давлениях



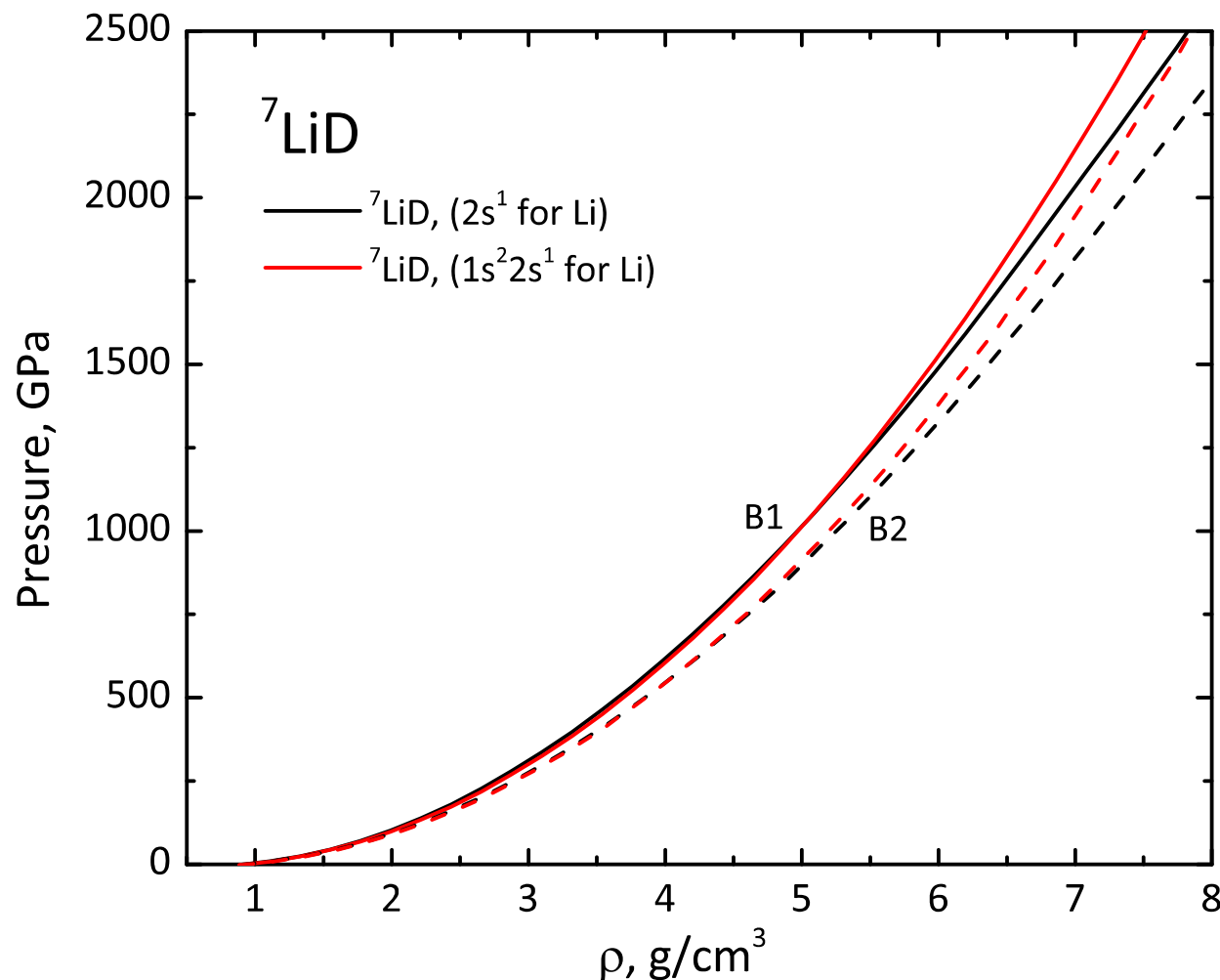
Параметры расчетов

Parameters of calculations

- GGA приближение с корректировками PBE
- PAW псевдопотенциалы – 1 и 3 валентных электрона для Li
- E_{cut} : 600 эВ для 1-электронного Li, 900 эВ для 3-электронного Li
- Г-точка в зоне Бриллюэна
- B1 (NaCl) решетка
- Термостат Нозе-Гувера
- 108 молекул LiD для плотностей $< 2 \text{ г/см}^3$ и 32 молекулы при плотностях $> 2 \text{ г/см}^3$
- Шаг по времени 0.2-2 фс (полное время симуляции 3-5 пс)

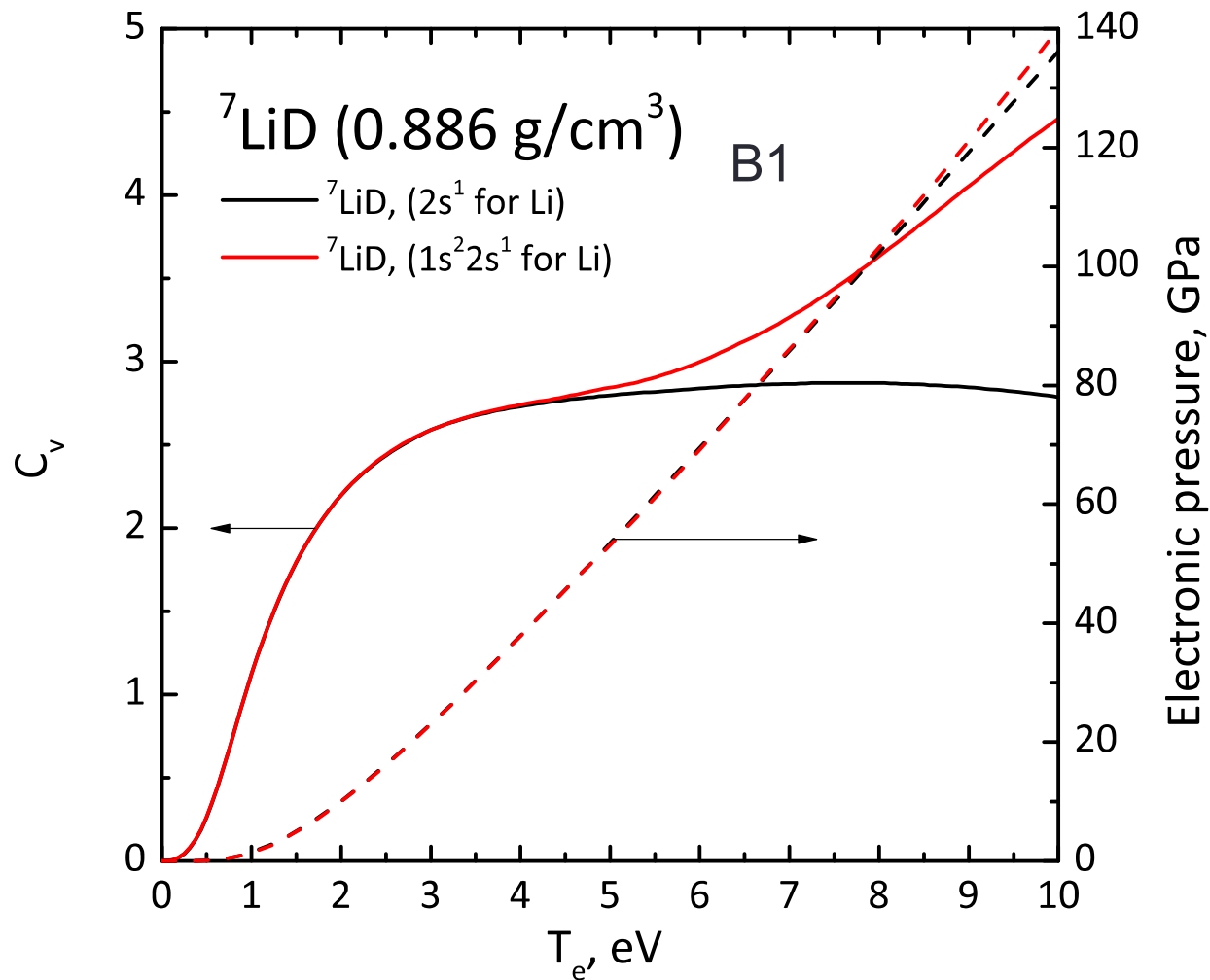
Расчет холодной кривой LiD с использованием различных псевдопотенциалов для Li

Calculation of cold curve of LiD with different pseudopotentials for Li



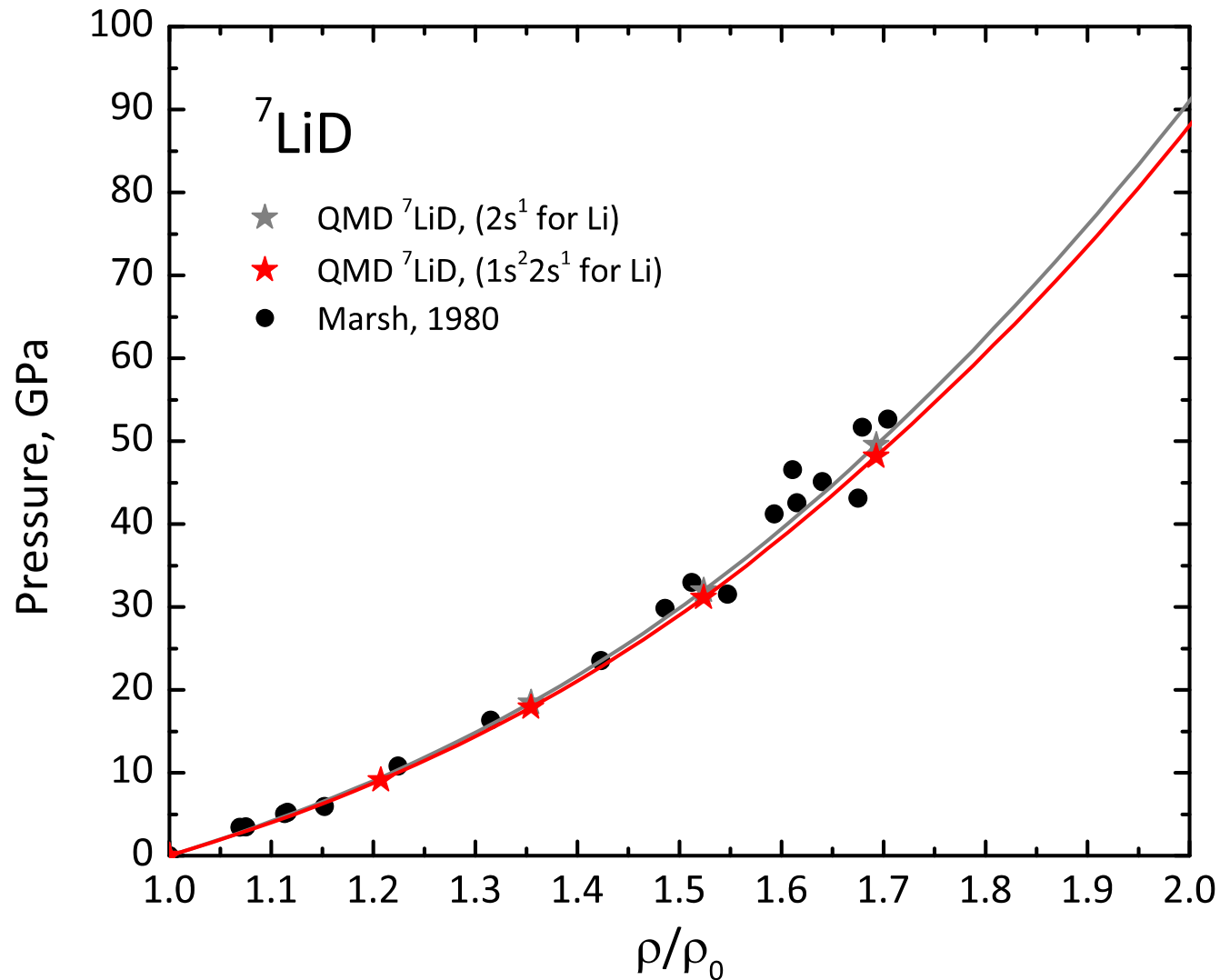
Электронная теплоемкость и электронное давление LiD при постоянном объеме

Electron heat capacity and electronic pressure of LiD for at constant volume



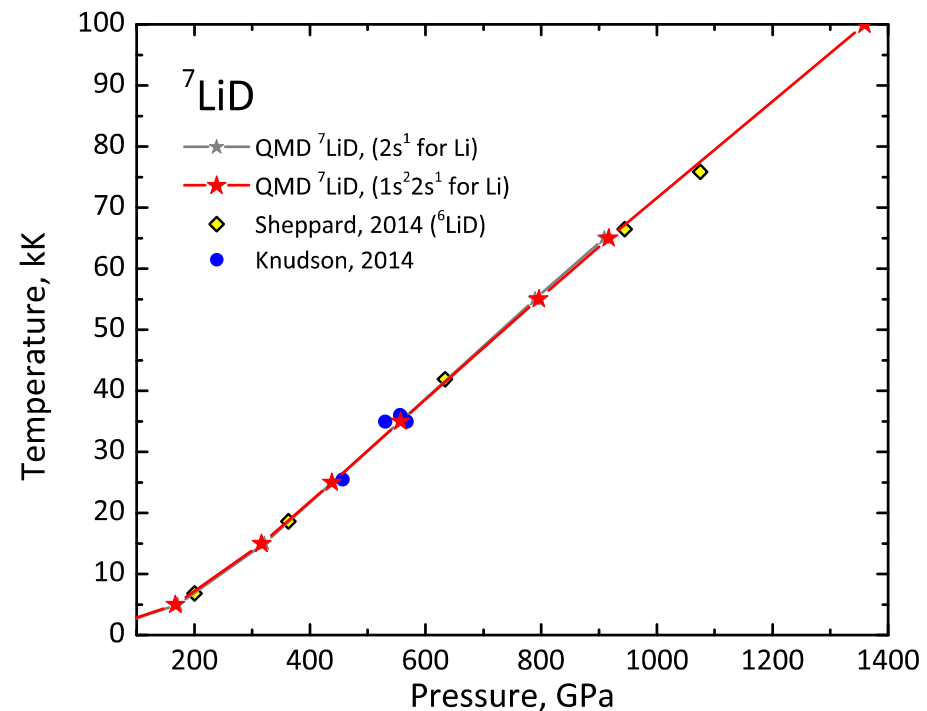
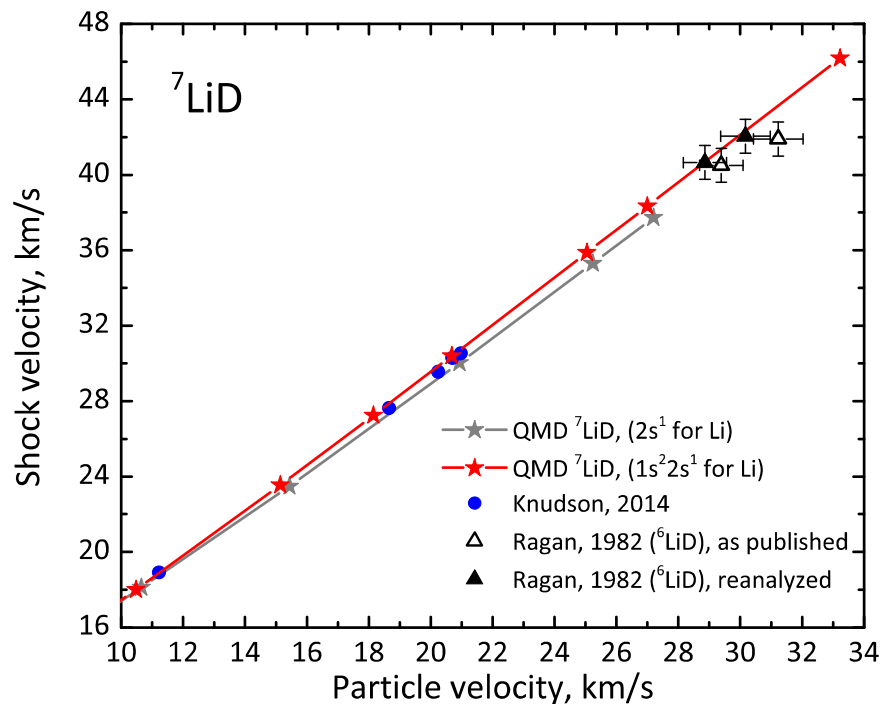
Ударная адибата LiD

Principal shock Hugoniot of LiD



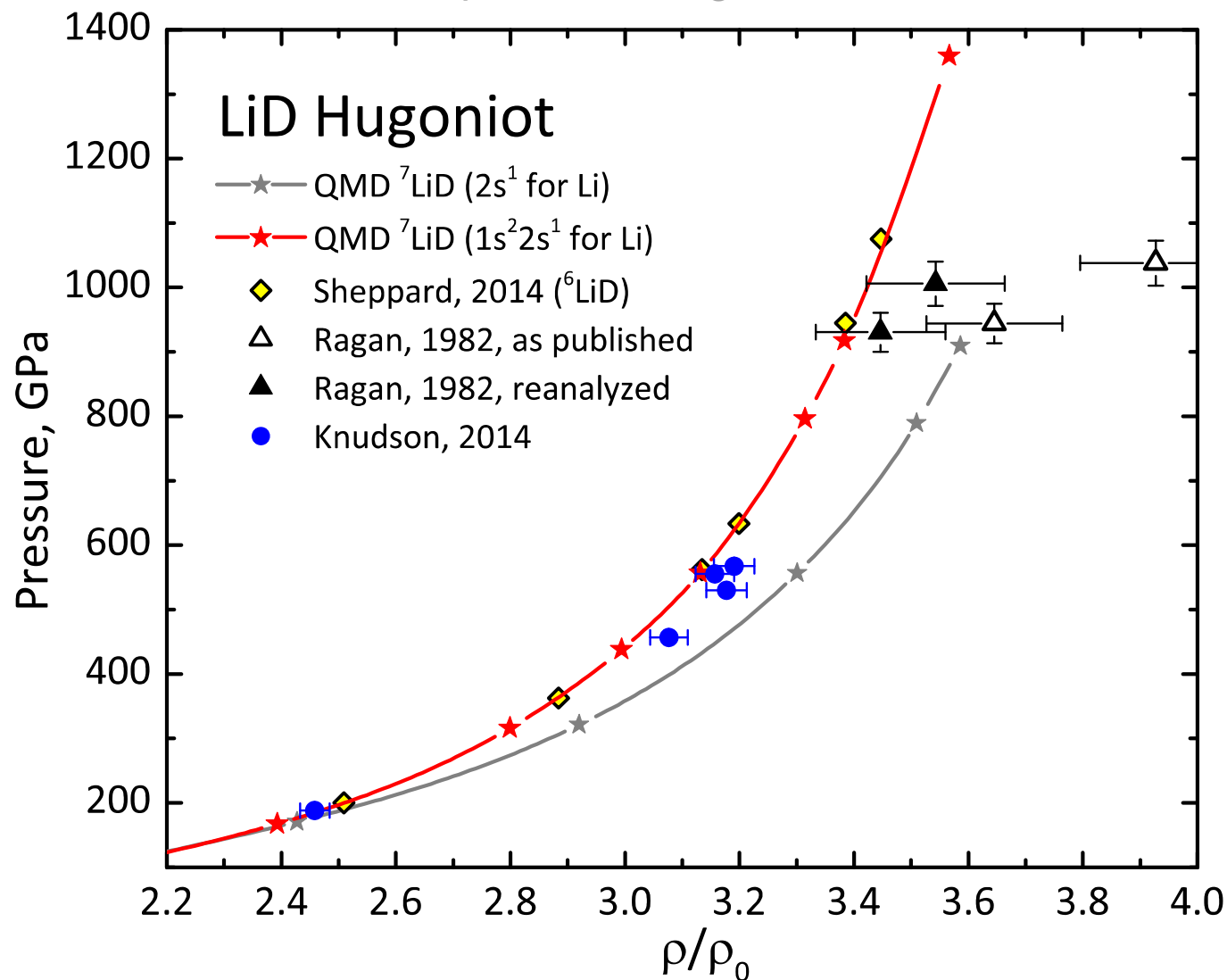
Ударная адибата LiD

Principal shock Hugoniot of LiD



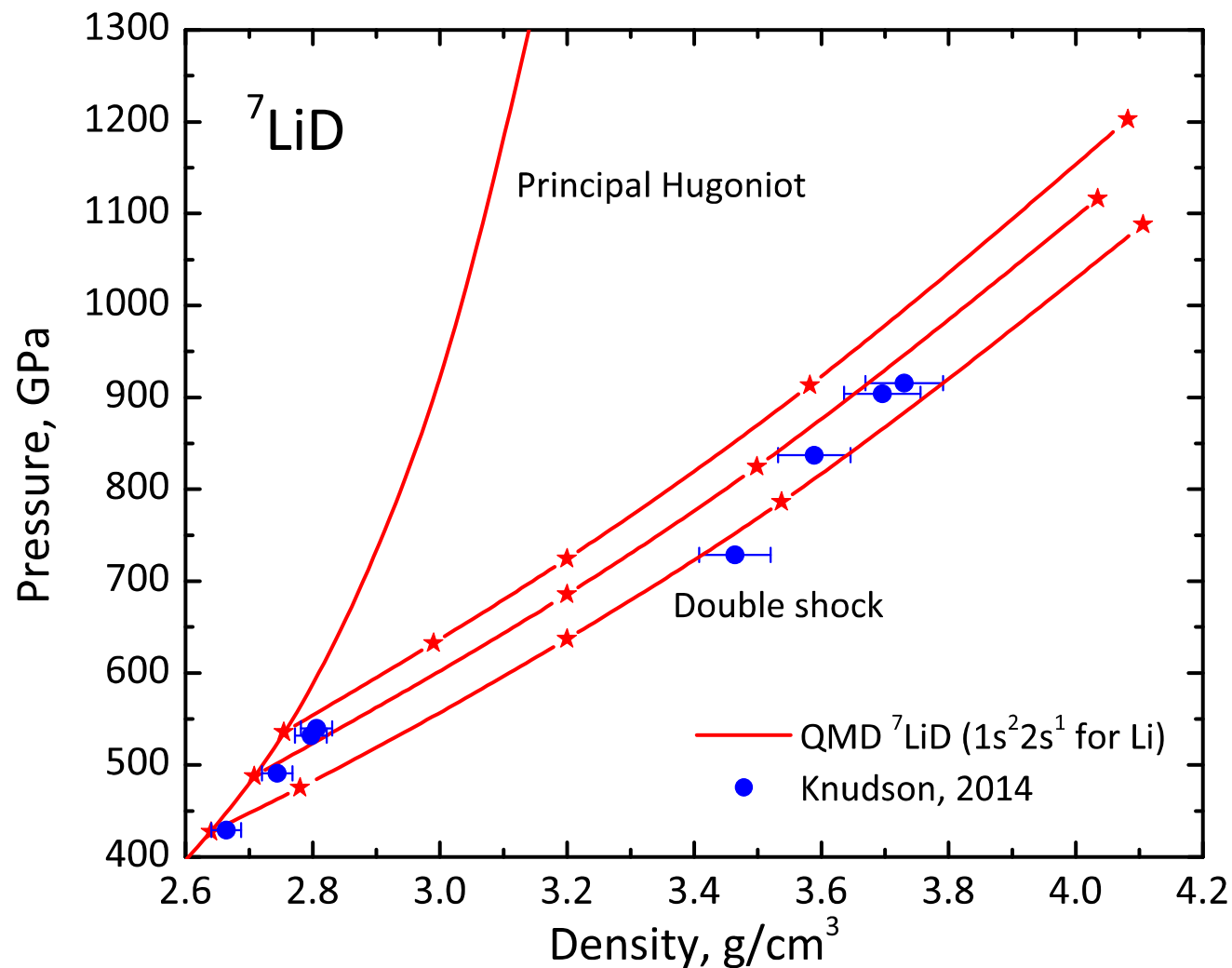
Ударная адиабата LiD

Principal shock Hugoniot of LiD



Ударная адабата повторного сжатия LiD

Double shock Hugoniot of LiD

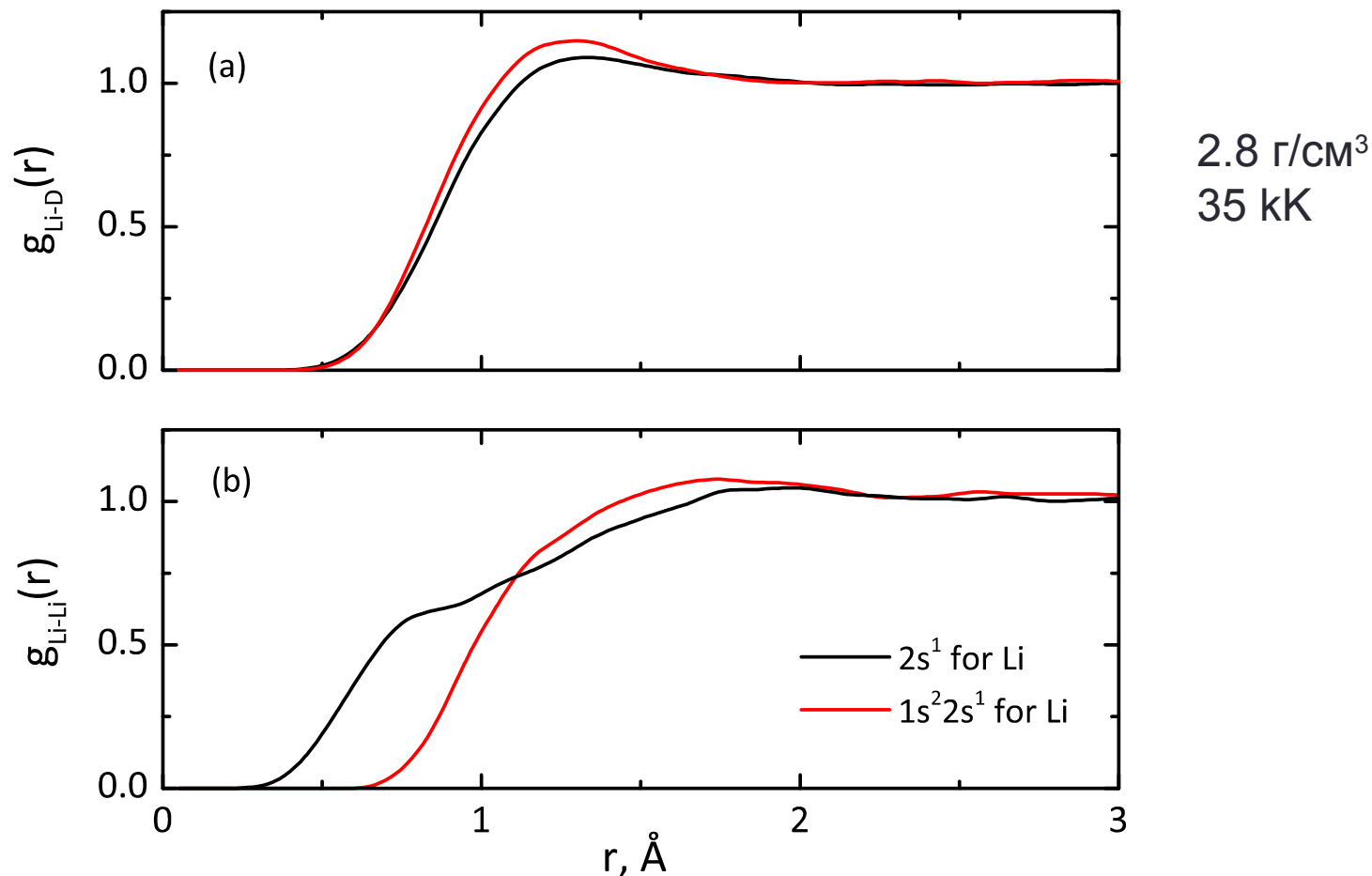


Knudson *et al.* J. Appl. Phys. 120, 235902 (2016)

D.V. Minakov and P.R. Levashov. Com Mat Sci 114 (2016) 128–134

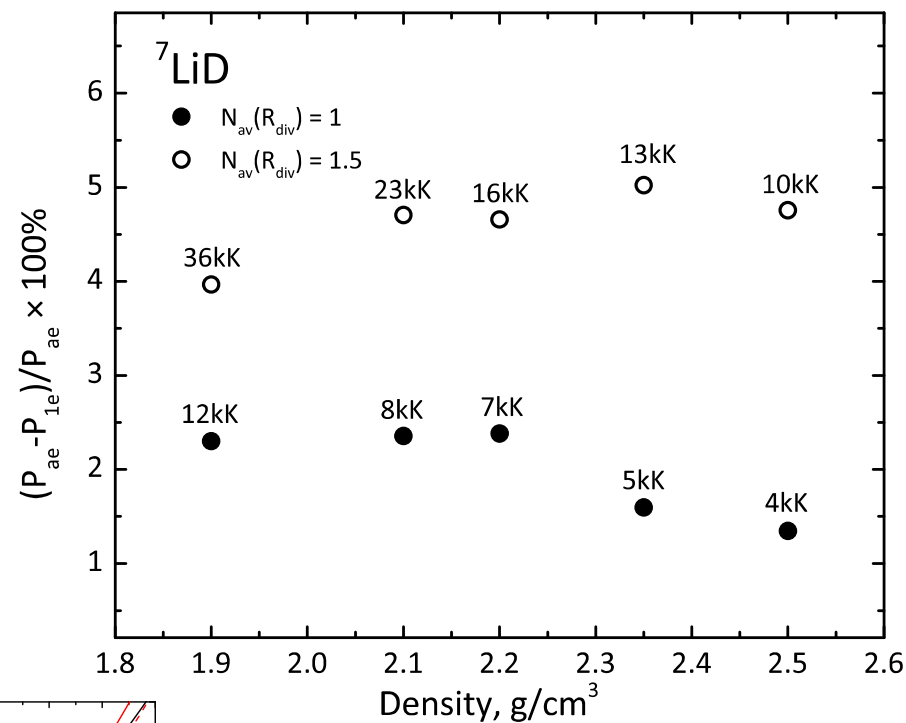
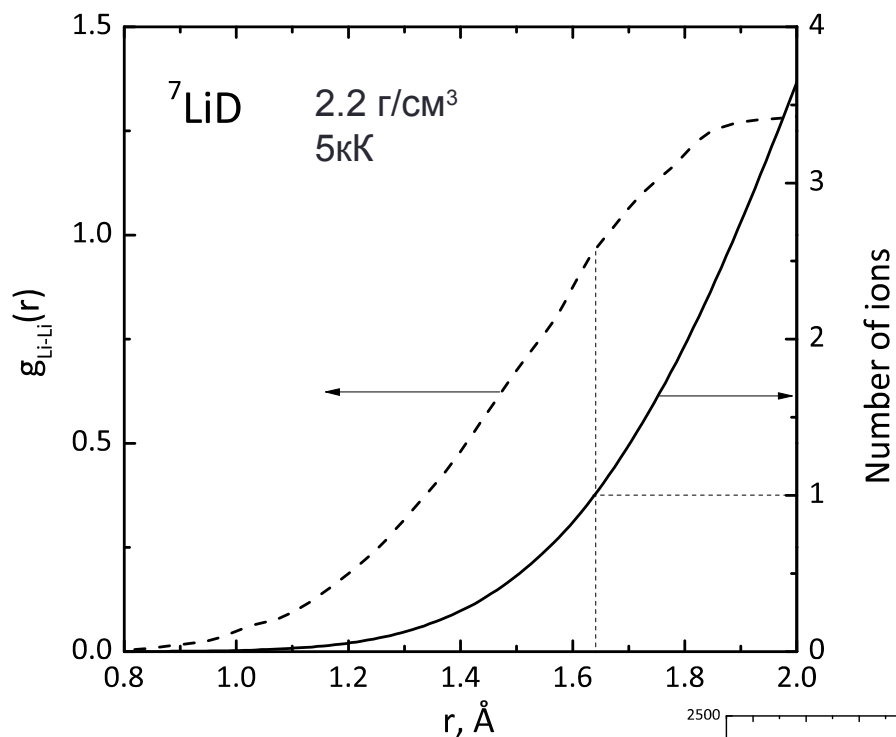
Парные корреляционные функции LiD для Li-D и Li-Li

Pair correlation functions of LiD for Li-D and Li-Li



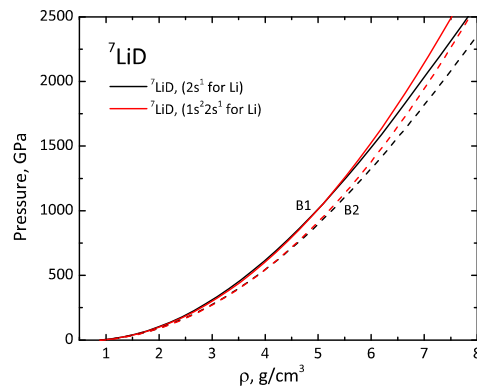
Критерий применимости псевдопотенциалов

Influence of a pseudopotential on result of simulation



$$N(r) = \int_0^r 4\pi n_0 r_1^2 g(r_1) dr_1$$

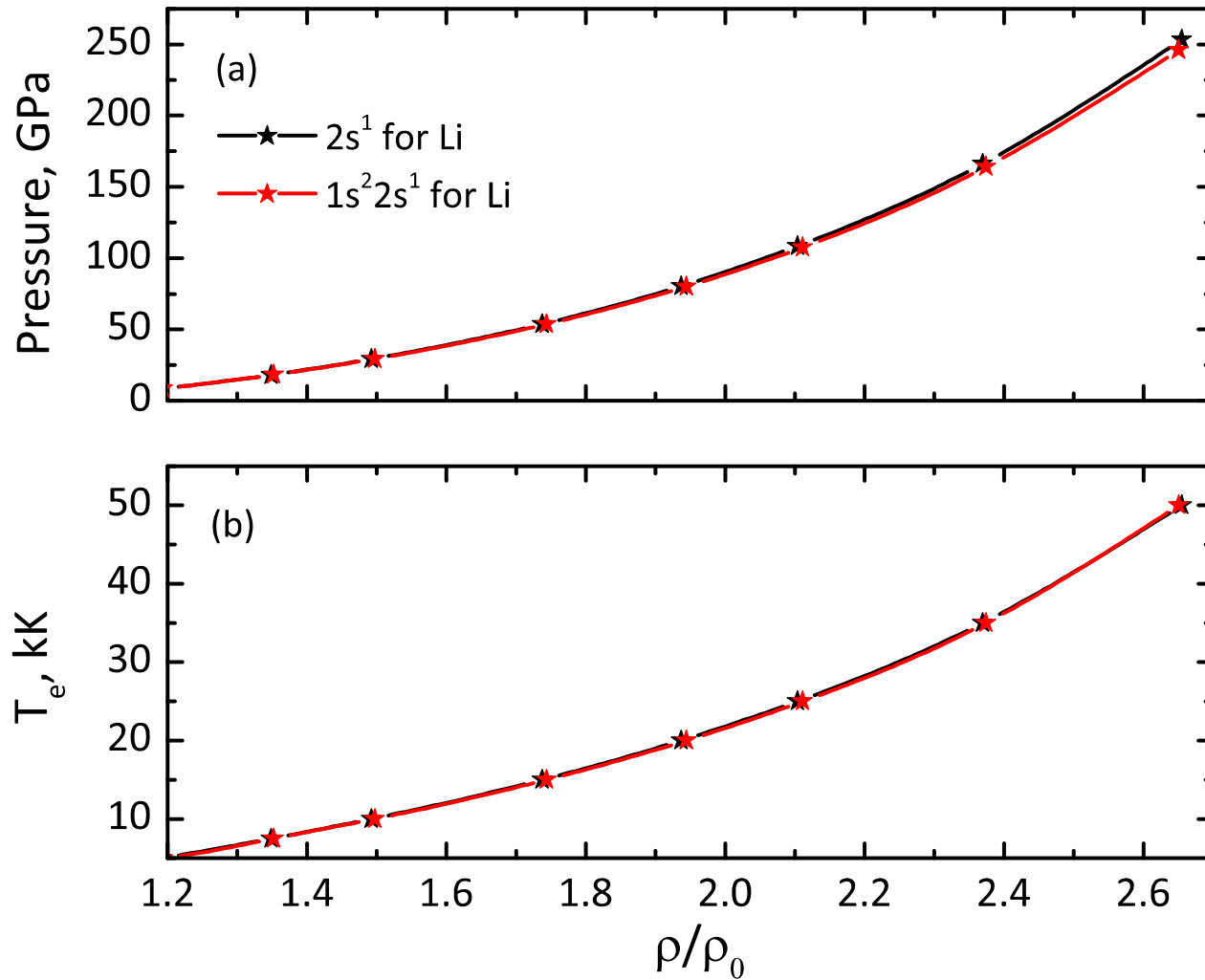
$$N(R_{\text{div}}) \approx 1$$



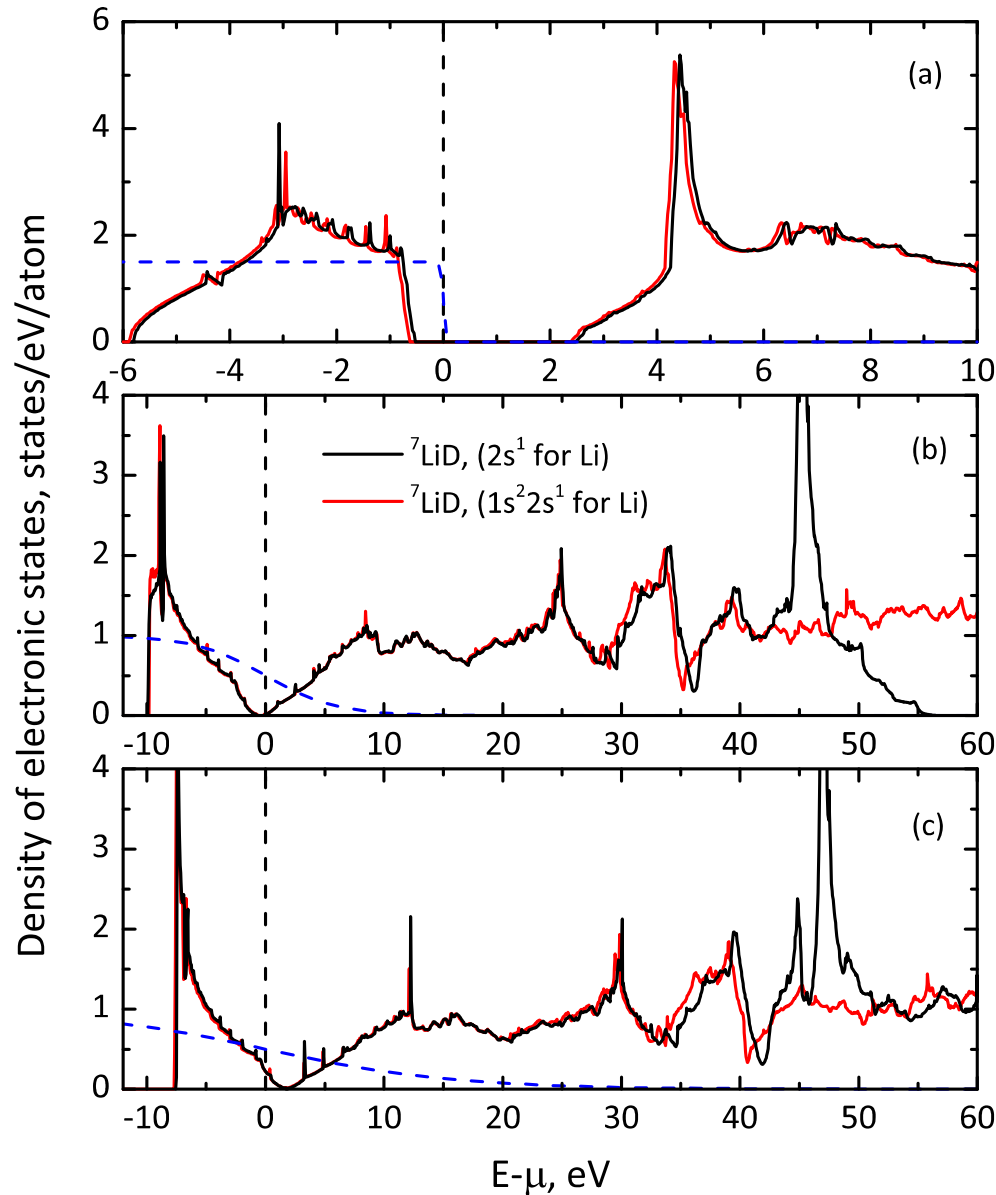
Заключение

Conclusion

- Проведена оценка влияния электронов внутренней оболочки лития на свойства LiD
- Были рассчитаны ударная адиабата и повторная ударная адиабата LiD и проведено сравнение с экспериментальными данными, отмечено хорошее согласие
- Проведен анализ применимости псевдопотенциалов Li для QMD моделирования свойств LiD при больших температурах и давлениях



Плотность электронных состояний LiD



0.85 g/cm³,
300 K

2.8 g/cm³,
3 eV

3.2 g/cm³,
8 eV

Холодная кривая LiD, сравнение с экспериментальными данными

