УДК 538.911

Определение атомных объемов химических элементов под давлением на основе первопринципных расчетов

А.А. Малюгин1,2, П.Р. Левашов1,2, Д.В. Минаков1,2

1Московский физико-технический институт  
(национальный исследовательский университет)  
2Объединённый институт высоких температур РАН

Хорошо известно, что атомные объемы химических элементов задают осциллирующую зависимость от порядкового номера при атмосферном давлении [1]. Кроме того, предсказано, что с ростом давления химические элементы теряют индивидуальность своей электронной структуры и функция  становится монотонной [2]. При высоких давлениях становятся применимыми полуклассические модели. В частности, в модели Томаса -Ферми [3] все атомные и термодинамические свойства могут быть описаны особым свойством подобия по атомному номеру (свойство автомодельности). Также известно, что молекулярные системы нестабильны в приближении Томаса-Ферми, поэтому при достаточно высоких давлениях элементы не проявляют химических свойств [4].

В данной работе использованы современные подходы для расчета атомных объемов при разных давлениях. Методом функционала плотности совместно с псевдопотенциальным подходом получены кривые сжимаемости ряда металлов и инертных газов при нулевой температуре, а также при конечных в квазигармоническом приближении. Для описания дисперсионных взаимодействий в молекулярных кристаллах использованы и сопоставлены различные классы обменно-корреляционных функционалов.

В рамках метода функционала плотности в полноэлектронном и псевдопотенциальном расчете, а также при помощи модели среднего атома получены зависимости атомного объема от порядкового номера при нулевом давлении и при давлениях 1 и 10 Мбар. Результаты сопоставлены с ударно-волновыми экспериментальными данными и данными, полученными методом алмазных наковален. Результаты говорят о том, что осцилляции на зависимостях атомных объемов уже при давлении 1 Мбар значительно менее выражены, чем предполагалось ранее.

Литература

1. *Bridgman P.W.* Theoretically interesting aspects of high pressure phenomena // Rev. Mod. Phys. 1935. V. 7. P. 1.
2. *Альтшулер Л.В.* Применение ударных волн в физике высоких давлений // Phys-Usp+ (In Russian). 1965. V. 8. P. 52–91.
3. *Никифоров А.Ф., Новиков В.Г., Уваров В.Б.* Quantum-Statistical Models of Hot Dense Matter: Methods for Computation Opacity and Equation of State // Springer Science & Business Media. 2005. V. 37.
4. *Teller E.* On the stability of molecules in the Thomas-Fermi theory // Rev. Mod. Phys. 1962. V. 34. P. 627.