

## **ОПРЕДЕЛЕНИЕ УПРУГИХ И ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КРИСТАЛЛОВ НА ОСНОВЕ ПЕРВОПРИНЦИПНЫХ РАСЧЕТОВ ИХ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ**

***Синько Г.В.\*; Смирнов Н.А.***

*РФЯЦ-ВНИИТФ, Снежинск*

*\*g.v.sinko@vniitf.ru*

В докладе изложены результаты выполненных в последние годы работ по определению упругих и термодинамических свойств кристаллов на основе первопринципных расчетов их электронной структуры. Качественно обсуждается вывод основных соотношений, связывающих упругие постоянные второго порядка со второй производной энергии деформированного кристалла по степени деформации и давлением. Обсуждается связь температуры Дебая с упругими постоянными второго порядка. Излагается способ, позволяющий определить зависимость температуры Дебая от объема по полученной из первопринципных расчетов зависимости упругих постоянных от объема. Основываясь на результатах расчетов электронной структуры кристаллов *s*-металлов натрия, калия, бериллия, *p*-металла алюминия и *d*-металла титана обсуждаются особенности изменения электронного спектра, поверхности Ферми и упругих констант этих кристаллов при сжатии. Анализируется поведение температуры Дебая при сжатии кристаллов с различной электронной структурой и обсуждаются результаты построения с использованием модели Дебая диаграмм относительной стабильности различных структурных модификаций кристаллов натрия, калия, бериллия, алюминия и титана.