

ПЕРВОПРИНЦИПНЫЕ РАСЧЕТЫ ФАЗОВОЙ ДИАГРАММЫ НАТРИЯ ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ И ТЕМПЕРАТУРАХ

Е.Г. Максимов¹⁾, С.В. Лепешкин²⁾, М.В. Магницкая³⁾

¹⁾ *Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва*

²⁾ *Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Московская обл.*

³⁾ *Институт физики высоких давлений РАН, Троицк, Московская обл.*

Фазовая (P , T)-диаграмма натрия в ОЦК и ГЦК структурах исследована с помощью первопринципных расчетов динамики решетки в квазигармоническом приближении методом функционала плотности (DFT). Кривая плавления $T_{\text{melt}}(P)$ получена на основе расчета среднеквадратичных смещений атомов $u(T)$, при этом для определения температуры T_{melt} использовался критерий Линдемана. В рамках данного простого подхода, без исследования свойств жидкой фазы, удалось количественно описать немонотонное поведение кривой плавления $T_{\text{melt}}(P)$ натрия в очень широком интервале давлений (до 1 Мбар) и температур (300 – 1000 К), наблюдаемое экспериментально. Показано, что аномальное падение кривой плавления Na при $P > 30$ ГПа хорошо объясняется возрастанием среднеквадратичного отклонения атомов вследствие смягчения фононного спектра при сжатии твердой фазы.

Чтобы выяснить влияние ангармонизма на фазовую диаграмму Na при температурах порядка T_{melt} , было выполнено численное моделирование плавления методом первопринципной молекулярной динамики Борна–Оппенгеймера (BOMD). При моделировании температура твердой фазы повышалась до момента плавления системы. Точка плавления определялась двумя способами: по расходимости среднеквадратичного смещения атомов со временем $u(t)$ и по изменению вида парной корреляционной функции, причем в пределах точности вычислений оба критерия дали совпадающие результаты. Среднеквадратичные отклонения атомов при различных давлениях и температурах, вычисленные в квазигармоническом приближении в рамках DFT и при численном моделировании методом BOMD, хорошо согласуются между собой. Соответственно, хорошо согласуются и кривые плавления $T_{\text{melt}}(P)$, полученные с помощью двух указанных первопринципных подходов, что говорит о малости эффектов ангармонизма в Na вплоть до температур порядка T_{melt} .