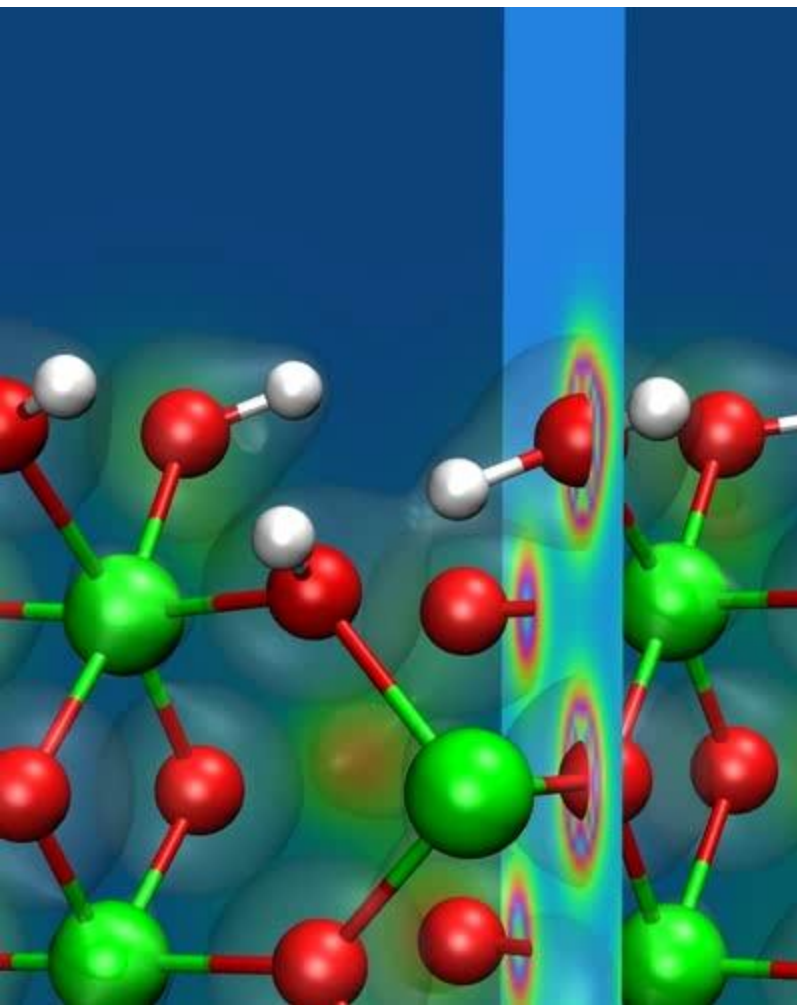




# **Керування властивостями матеріалів в екстремальних умовах**

**ЦИКЛ РОБІТ НА ЗДОБУТТЯ ДЕРЖАВНОЇ ПРЕМІЇ УКРАЇНИ В  
ГАЛУЗІ НАУКИ ТА ТЕХНІКИ В 2020 р.  
ВИСУНУТИЙ ВЧЕНОЮ РАДОЮ  
ЛЬВІВСЬКОГО НАЦІОНАЛЬНОГО УНІВЕРСИТЕТУ  
ІМЕНІ ІВАНА ФРАНКА 2020р.**

# *Ab initio* моделювання



- Класичні рівняння руху для  $N$  іонів

$$m_i \vec{R}_i(t) = \vec{F}_i(t)$$

реальна маса іонів

Сили Геллмана-Фейнмана, що діють на іони

- На кожному часовому кроці розраховується  $Nz/2$  власних функцій гамільтоніану Кона-Шема

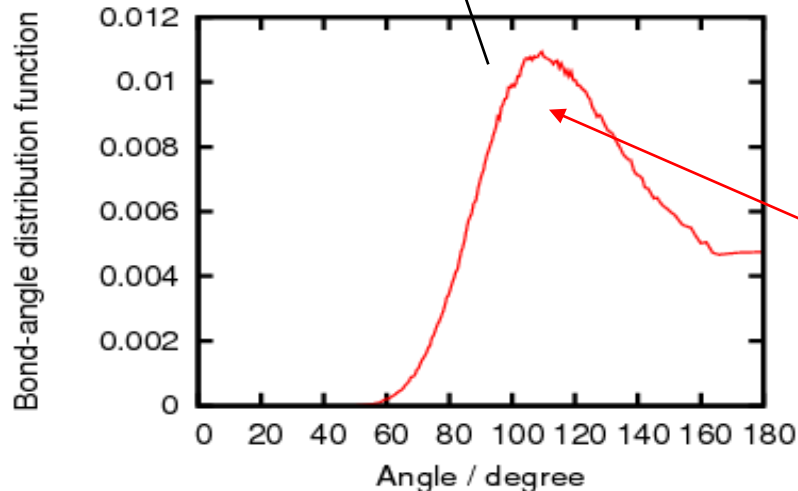
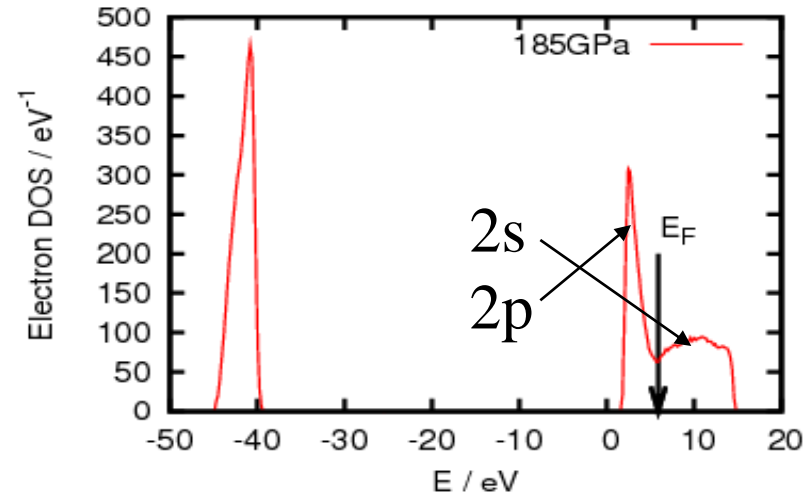
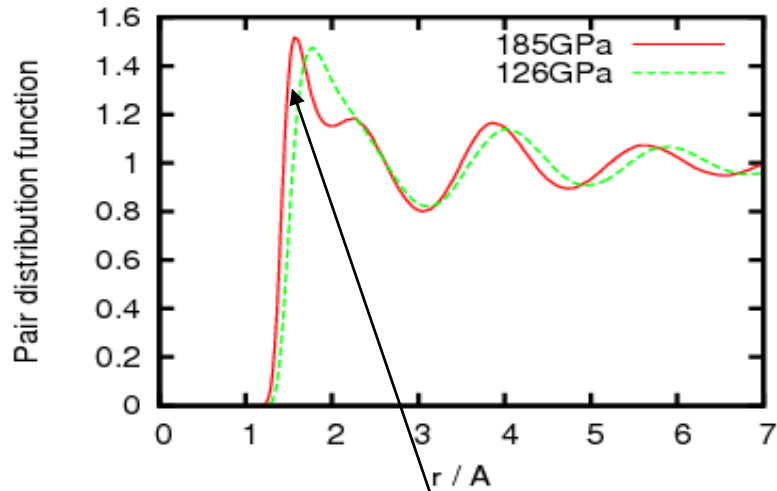
$$H = -\frac{\nabla^2}{2} + W(\vec{r}, \vec{r}') + \int d\vec{r}' \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} + \mu_{xc}(\vec{r}, \vec{r}')$$

Обмінно-кореляційні ефекти при високих тисках повинні враховувати градієнтні поправки (GGA):  
BLYP, PBE, PW91, .....

Пакети

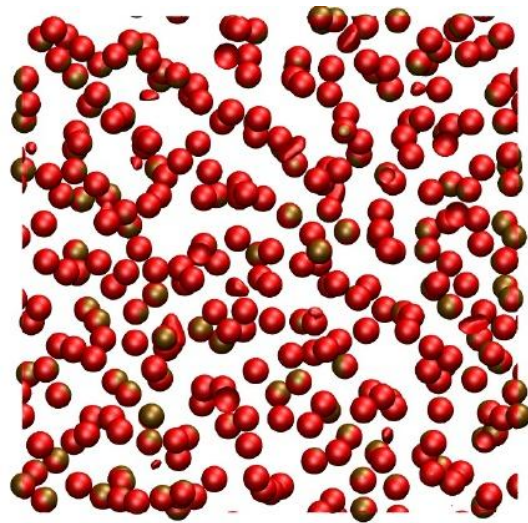
VASP, CPMD, CP2K

# Екзотична структура розплаву Li при високому тиску: поява тетраедричного ближнього порядку при $P \sim 180$ ГПа

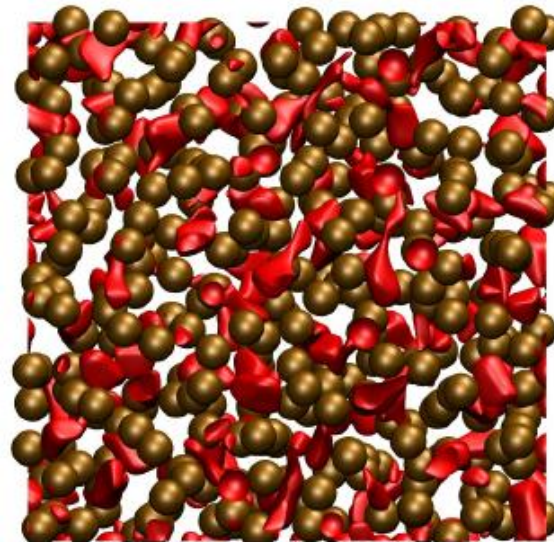


При високих тисках 2p-зона понижається по енергії відносно 2s-зони, яка зсувається вище рівня Фермі. Це спричинює появу **тетраедричного порядку найближчих сусідів**, який появляється разом з псевдощільною на рівні Фермі

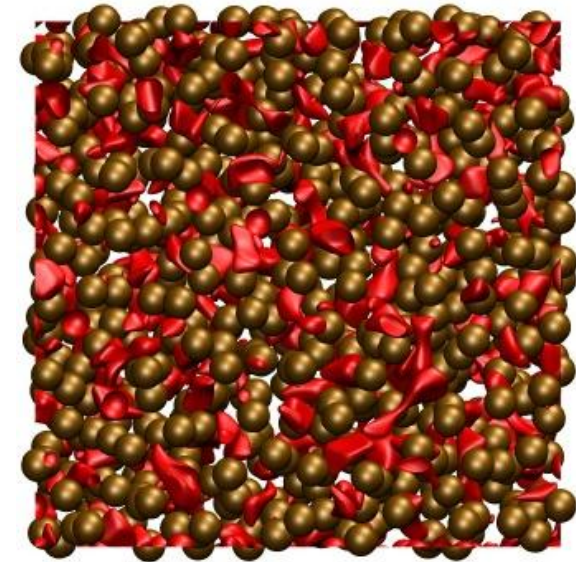
# Функції електронної локалізації в розплаві Li



P= 1 atm



P= 68 GPa



P= 186 GPa

Функції ELF появляються з ростом тиску, однак через дифузію частинок вони виникають і загасають. До найбільшого дослідженого тиску розплав Li залишається металічним.

PHYSICAL REVIEW B 90, 014202 (2014)

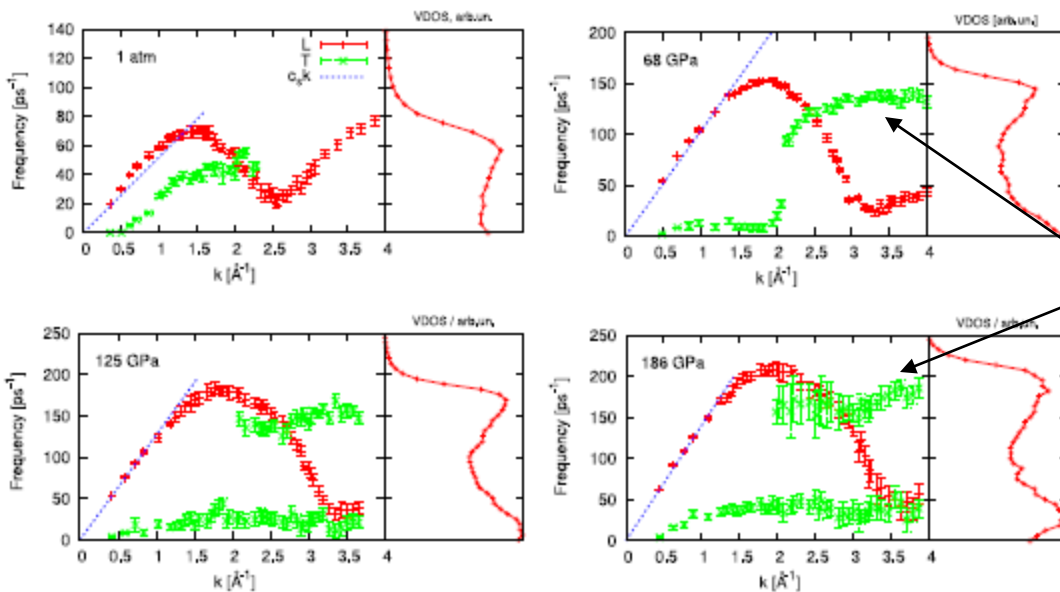
Charge-density correlations in pressurized liquid lithium calculated using *ab initio* molecular dynamics

# Дисперсійні криві колективних мод в розплаві Лі при різних тисках

THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 143, 104502 (2015)

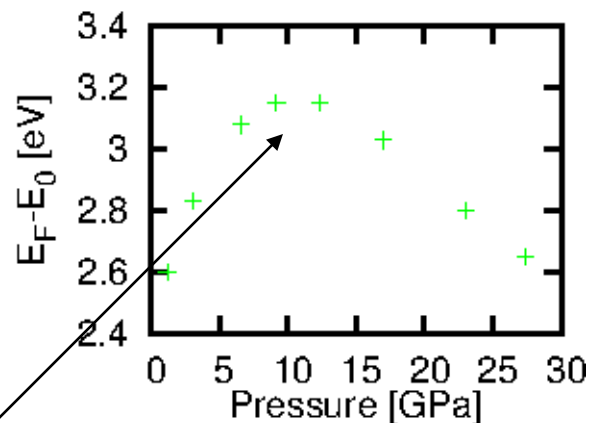
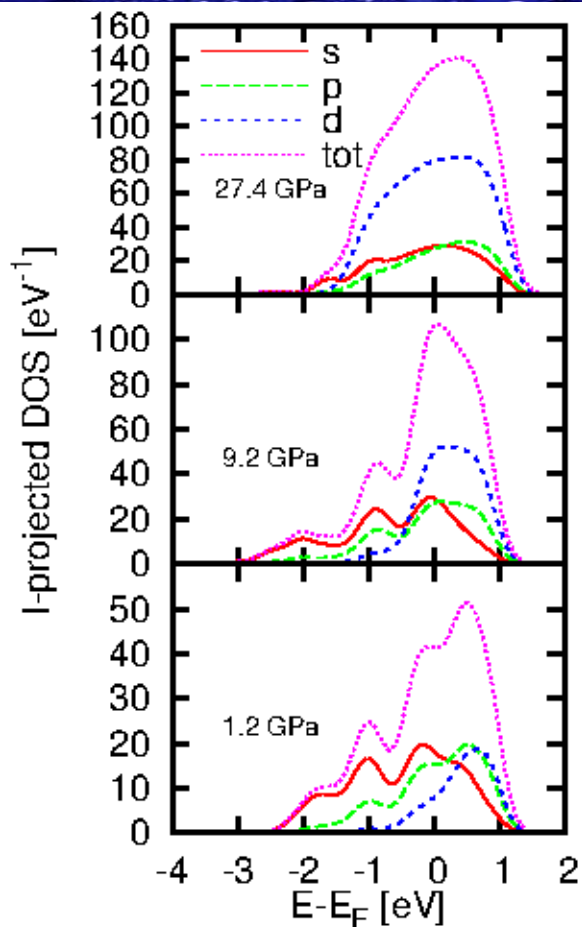
Pressure-induced emergence of unusually high-frequency transverse excitations in a liquid alkali metal: Evidence of two types of collective excitations contributing to the transverse dynamics at high pressures

Taras Bryk,<sup>1,2</sup> G. Ruocco,<sup>3,4</sup> T. Scopigno,<sup>3,5</sup> and Ari P. Seitsonen<sup>6,7</sup>

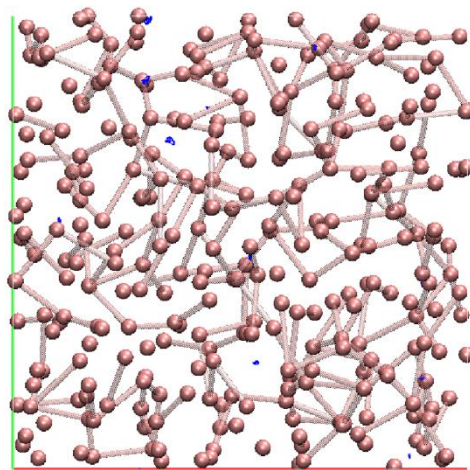


При прикладанні тиску  
появляється ще одна,  
високочастотна вітка  
поперечних збуджень, яка  
існує лише в другій  
псевдо-зоні Брілюена

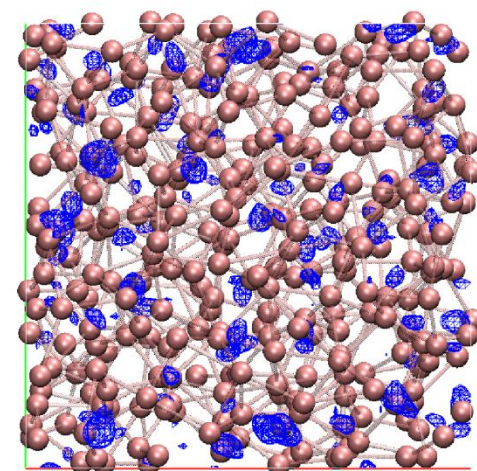
# Електронна структура розплаву Rb



Немонотонна залежність від тиску для ширини валентної зони



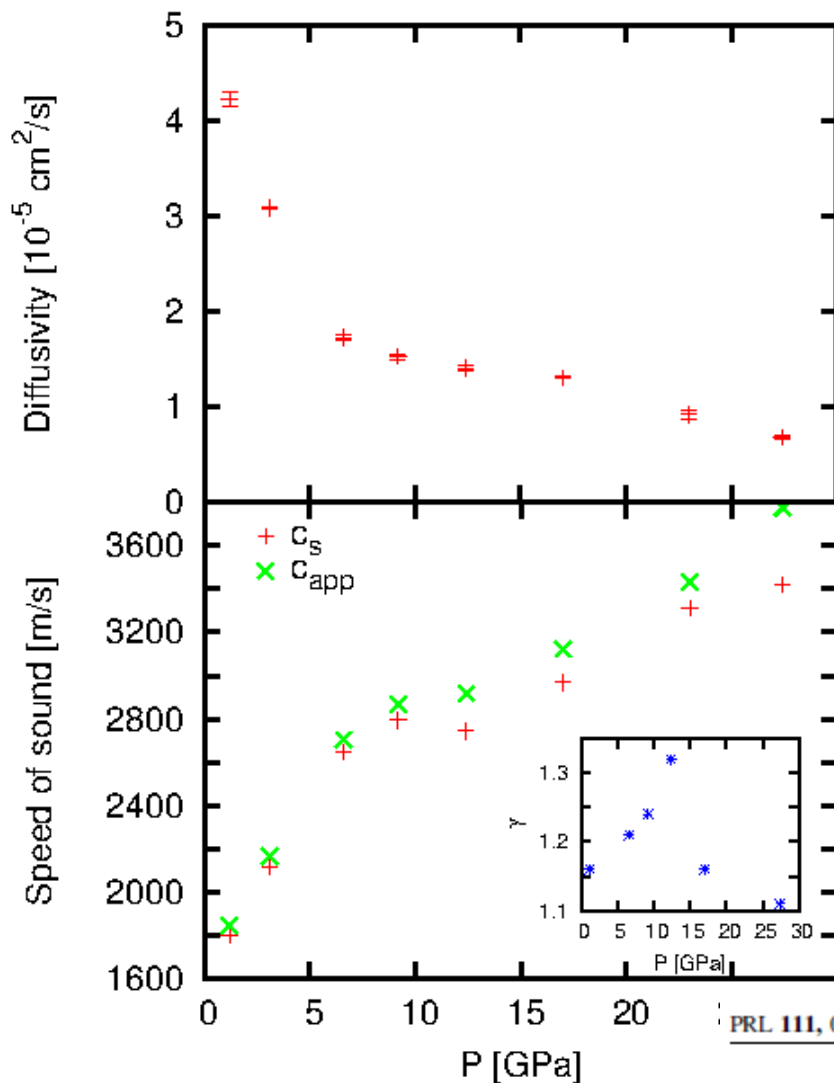
ELF, 1.2 GPa



ELF, 27.4 GPa

Спроектвані парціальні spd-DOS свідчать про зростаючу з тиском долю електронів d-типу на  $E_F$

# Динамічний кросовер в розплаві Rb зі зростанням тиску



Вираз Клеймана-Байлендера для дифузії в металевих розплавах:

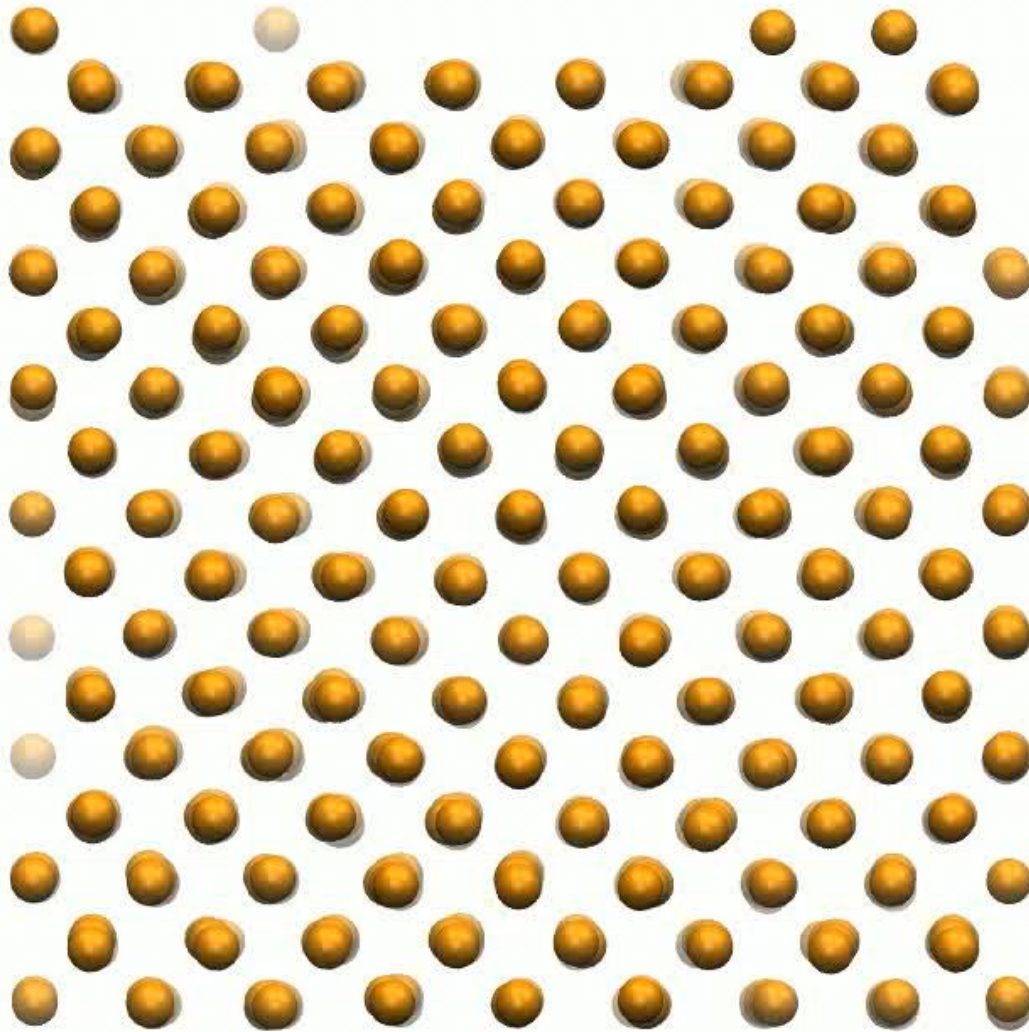
$$D = \left( \frac{k_B T}{m \pi^3} \right)^{1/2} \left( V - \frac{4\pi r_0^3}{3} \right) / 6r_0^2$$

$V$ - атомний об'єм,  $r_0$ - ефективний радіус частинки.

Адіабатична швидкість звуку

$$c_s = \left( \frac{\gamma k_B T}{m S(0)} \right)^{1/2}$$

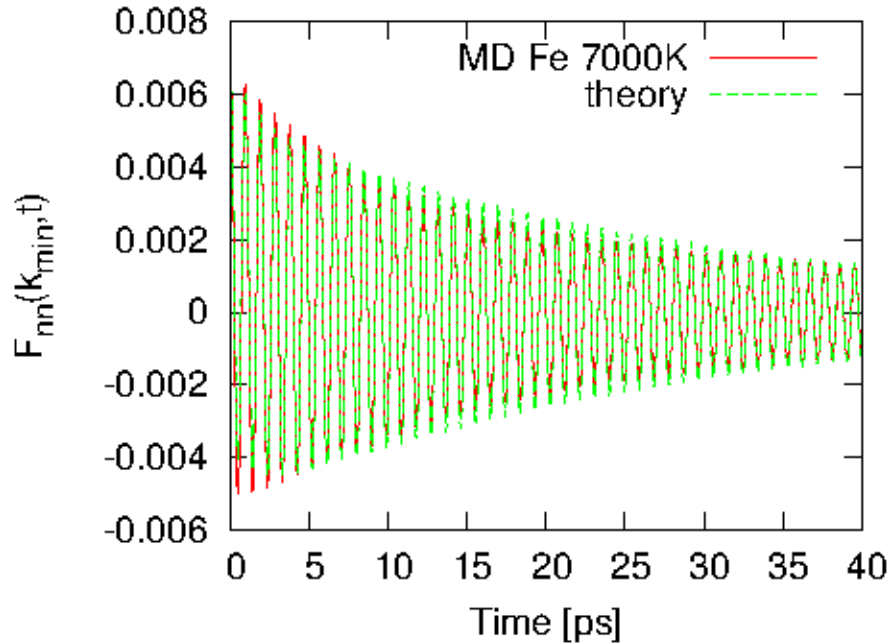
# Дифузійні процеси в ОЦК Fe при тисках $\sim 360\text{GPa}$



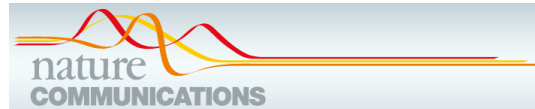
При температурах  
вище  $6500\text{K}$  в оцк  
залізі починаються  
дифузійні процеси  
вздовж площин  
(110)



# Загасання акустичних збуджень в оцк залізі при тисках $\sim 360$ GPa



Функції відгуку на збурення є пов'язані з часовими кореляційними функціями густина-густина, які напряду розраховуються з траєкторій частинок.



ARTICLE

<https://doi.org/10.1038/s41467-019-10346-2>

OPEN

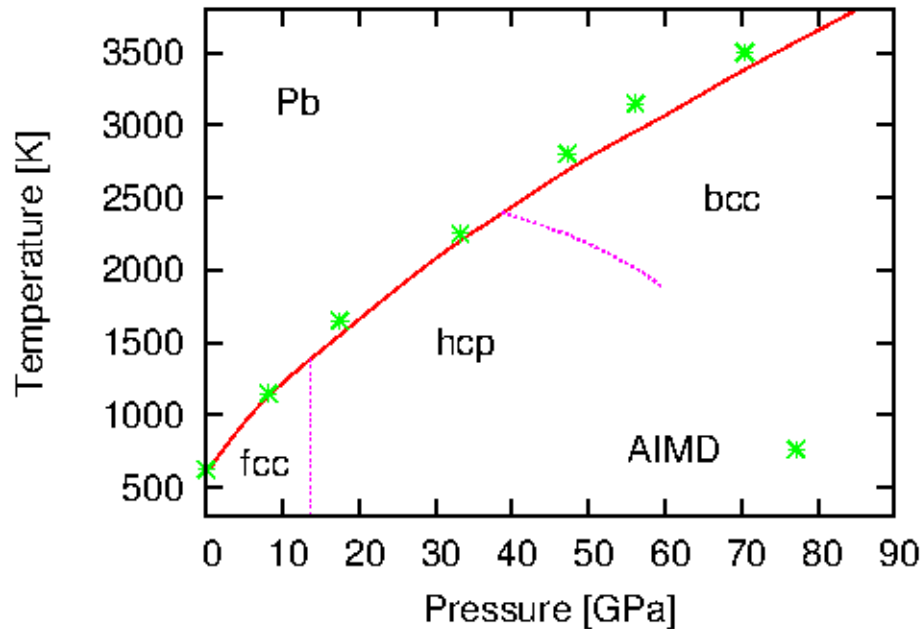
Low viscosity of the Earth's inner core

Anatoly B. Belonoshko<sup>1</sup>, Jie Fu<sup>2</sup>, Taras Bryk<sup>3</sup>, Sergei I. Simak<sup>4</sup> & Maurizio Mattesini<sup>5,6</sup>

$$F_{nn}(k, t)/F_{nn}(k, t=0) = A_{nn} e^{-t/\tau_\sigma} + [(1 - A_{nn}) \cos(c_s k t) + D_{nn}(k) \sin(c_s k t)] e^{-\Gamma k^2 t}$$

# *Ab initio* моделювання структури і динаміки розплаву Рb вздовж кривої плавлення

- $T=623\text{K}-3500\text{K}$ ,  $P$  : 7 тисків в області 0-72 GPa
- 300 атомів, 600 хвильових функцій



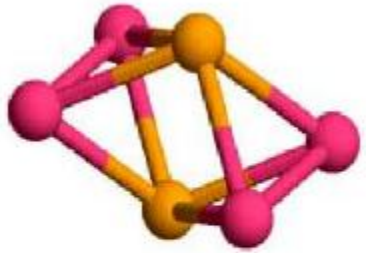
Встановлено відповідність внесків від поперечних пропаторних мод максимумам спектру одночастинкової автокореляційної функції швидкостей при усіх досліджених тисках.

PHYSICAL REVIEW B **99**, 014201 (2019)

**Atomistic structure and collective dynamics in liquid Pb along the melting line up to 70 GPa:  
A first-principles molecular dynamics study**

Taras Bryk,<sup>1,2</sup> Taras Demchuk,<sup>1</sup> and Noël Jakse<sup>3</sup>

# Чи “пам’ятає” структура розплаву Рв кристалічну структуру при тому ж тиску?

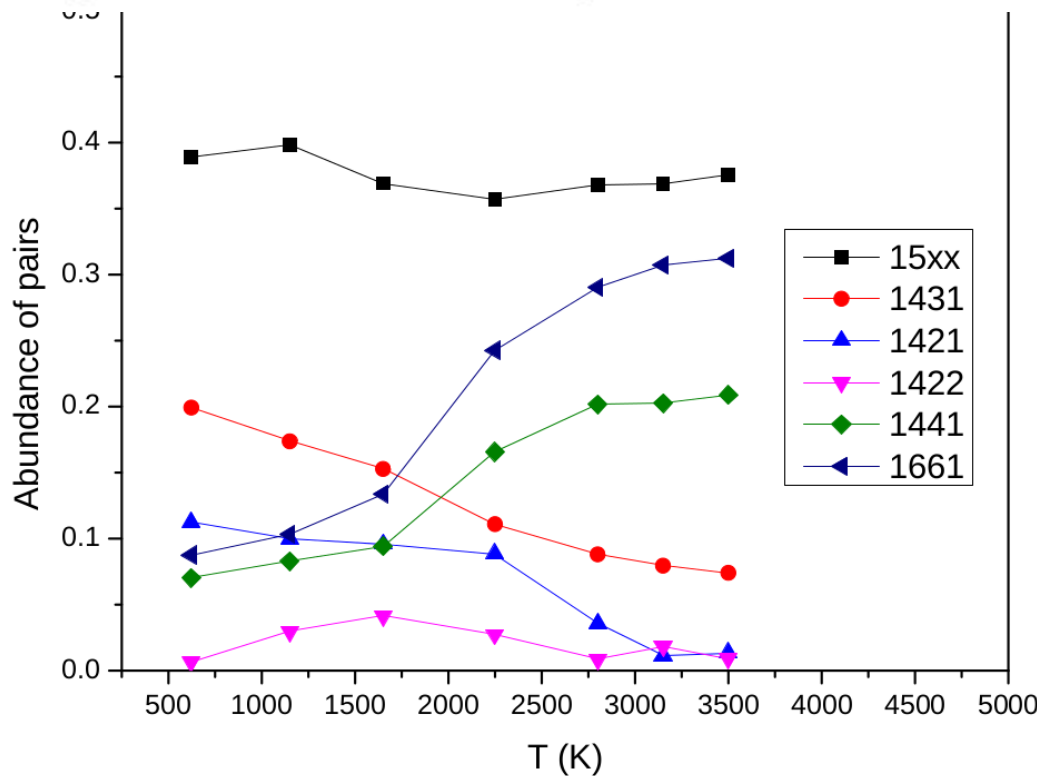


Аналіз спільних сусідів (common neighbor analysis)

1421 pair

1422 pair

1441 pair



Типові індекси для стурктур:

FCC: 1421, 2101, 22xx, ...

HCP: 1422, 1421, 23xx, ...

BCC: 1441, 1661, 2101, ....

# Подяка:

- І. Мриглод (ІФКС, Львів)
- A. Belonoshko (KTH, Stockholm, Sweden)
- J.-F. Wax (Uni Lorraine, Metz, France)
- T.Scopigno, G. Ruocco (Sapienza Uni, Rome, Italy)
- A.P. Seitsonen (ENS, Paris, France)
- N. Jakse (Uni Grenoble Alpes, France)
- C. Pierleoni (Maison de la Simulation, CEA Saclay, France)