
单质锂量子固体高压相图计算获进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/34388.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

单质锂量子固体高压相图计算获进展

。锂原子质量很轻，因此由单质锂形成的固体结构表现出显著的核量子效应。在低压条件下，锂具有高对称的立方结构，但取决于具体温压条件，锂或表现出体心立方（bcc）和面心立方（fcc）结构；在高压条件下，锂则表现出更复杂的晶体结构，如每元胞可包含16甚至88个原子的cl16和oC88。由于这些结构自由能差微小，因此如何精准处理非简谐核量子效应和有限温效应，以正确预言单质锂的物态亟待探讨。

近期，中国科学院物理研究所研究员王磊团队联合北京应用物理与计算数学研究所研究员王涵等，在单质锂的高压固体相图计算中取得进展。此前，该团队提出了神经网络正则变换方法，即利用生成模型参数化量子多体系统的变分密度矩阵，并通过自由能优化的方式求解体系的状态方程、热力学熵及激发谱等。该研究进一步发展了这一方法并结合机器学习势函数DeepMD与国产软件ABACUS完成高精度密度泛函理论计算，系统研究了有限温度和压强下单质锂量子固体的相图。

研究表明，相较于经典计算，量子非谐效应显著降低了bcc-fcc结构间的转变温度，这与实验观测一致。究其原因在于锂原子在更松散的bcc晶格中大幅度非简谐振动使声子模软化。同时，在高压条件下，理论计算预测cl16结构中锂原子的分数坐标与实验结果相吻合，这验证了计算方法的可靠性。进一步，研究显示，在更高压强下实验发现的oC88结构起源于经典势能面的能量效应，而非传统认为的核量子效应或温度效应。研究人员得出这一结论的基础是神经网络正则变换方法对非简谐核量子效应和热力学熵的精准处理。同时，由于oC88结构表现出局域化的电子结构，对其势能曲面的准确描述有必要依赖高精度的密度泛函理论计算。

该研究对单质锂相图的计算和理解有助于学界理解其他碱金属在高压下所表现出的复杂相图。同时，神经网络正则变换方法的进一步发展和应用，将为金属氢、冰相图等基础科学问题提供新的物理洞察。

相关研究成果以Neural Canonical Transformations for Quantum Anharmonic Solids of Lithium

为题，发表在《物理评论快报》上。研究工作得到国家自然科学基金委员会和中国科学院的支持。

[论文链接](#)

[开源代码和模型](#)

图. (a) 低压下，锂的 bcc-fcc 结构转变起源于非简谐核量子效应所引起的自由能反转；(b) 50GPa附近cI16 结构中计算预测的锂原子分数坐标与实验观测数据的对比；(c) 70GPa附近实验所观察到的oC88结构起源于高精度密度泛函理论对自由能的修正。

研究团队单位：物理研究所

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](https://www.iikx.com)转发