**文章编号**：1000-5773(2012)01-0041-07

# 固氖高压物态方程的量子理论计算*

武　娜[1]，田春玲[1]，刘福生[2]，匡安农[1]，袁宏宽[1]，郑兴荣[1]

（1.西南大学物理科学与技术学院，重庆　400715；
2.西南交通大学高温高压物理研究所，四川成都　610031）

**摘要**：运用 Hartree-Fock 计算方法和原子团簇理论，研究了高压下面心立方晶体氖中的二体相互作用、三体相互作用对中心原子势能及冷能的贡献。结合零点振动能，计算得到了固氖在 4～208 GPa 压强范围内的等温物态方程。结果表明，在较高压强区域内，等温压缩线与高压实验数据符合得非常好；在压强超过 100 GPa 的区域内，计算得到的等温压缩线较目前已有的理论研究结果系统地改善并提高了 3%～5%，精确地解释了固氖的高压实验数据。

**关键词**：二体势；三体势；从头算；固氖；物态方程
**中图分类号**：O414.12　　**文献标识码**：A

## 1　引　言

氖具有相对简单的满壳层电子结构，这使它成为检验量子多体理论的理想体系之一[1-3]。固氖除了适于研究固体的键合理论及压力引发的相变[4]外，还具有多种实际应用[5]，如在高压实验中用作传压介质[1,6-7]。因此在对物质高压性质的理论和实验研究中，固氖一直备受关注[8]。固氖的等温压缩线能够很好地反映它在高压下的性质。实验上人们利用金刚石对顶砧技术，已经在室温下将氖压缩到 208 GPa，且在所测量的压力范围内氖保持面心立方(fcc)晶体结构[9]；理论上，人们已对固氖的等温压缩实验现象提出了多种解释，但在高于 100 GPa 的压强区间还缺乏准确的理论解释。

在固氖的多体问题中，研究最多的是两体、三体问题。1980 年，Aziz 等人[10]提出了半经验的 Hartree-Fock Dispersion (HFD) C2 势，运用该势函数能够较准确地描述固氖的两体相互作用，模拟出氖气的多组实验数据及固氖的零温零压性质[11]，并将两个氖原子间的相互作用能分为从头算 Hartree-Fock 部分和拟合常压实验数据的半经验长程关联能(Dispersion)部分。

随着压缩度的增大，仅用两体势已不能很好地描述固氖在高压下的性质，此时需要考虑三体相互作用的影响。三体势也可以用两部分来描述，即由 Pauli 排斥效应引起的交换相互作用(即 Exchange 项)及色散相互作用(通常指 Axilrod-Teller 项，简称 AT 项)，其中短程区交换作用项对三体势的贡献较大，且该项符号与 AT 项相反[12]。一般地，三体解析式中 AT 项可通过求解三阶瑞利-薛定谔微扰方程得到，交换作用项则根据计算结果拟合得出。Loubeyre[12]曾对固态稀有气体的三体相互作用做出较系统的研究，给出了三体势的解析公式和各部分的参数值，但在拟合交换相互作用时仅选用了部分三原子构型，没有考虑全部的等腰三角形结构，即不同顶角、不同边长的等腰三角形。最近 Schwerdtfeger 等人[2]对 3 个氖原子组成的团簇进行了超分子单双迭代(包括非迭代三重激发)耦合簇理论 CCSD(T)方法计算，拟合出了解析公式，利用该解析式对固氖的冷能和压缩性进行了研究，由于在拟合解析式时仅

* **收稿日期**：2010-08-20；**修回日期**：2011-03-30
**基金项目**：重庆市重点自然科学基金(CSTC2009BA4005)；中央高校基本科研业务费专项资金
**作者简介**：武　娜(1987－)，女，硕士研究生，主要从事固态惰性气体的高压性质研究. E-mail：wnhtt0820@163.com
**通讯作者**：田春玲(1971－)，女，博士，副教授，主要从事凝聚态物质的高压性质研究. E-mail：tclswn@163.com

选用了某些特殊构型的从头计算结果，导致固氖压缩性的研究结果出现一定的偏差。

高压下决定物质性质的主要是短程排斥作用，采用 Hartree-Fock Self-Consistent-Field (SCF)方法可以计算出短程排斥作用的大小。本研究运用 SCF 方法，计算固氖中任意一个原子与周围一个、两个原子的两体、三体相互作用能以及与多个近邻原子间的短程排斥作用能，即中心原子势能，采用原子团簇方法和多体势展开理论，将该中心原子势能展开为两体、三体相互作用能分量的求和形式。运用多体分量来展开中心原子势能的优点是能够讨论多体展式的收敛性和截断精度，从而判断出三体分量的合理截断位置。对于不能由 SCF 方法计算得出的长程关联能，采用 HFD C2 势[10]的色散项来考虑。室温下固氖晶体的等温压缩性除受上述能量的影响外，还会受到晶格零点振动和温度的影响，因此本研究综合考虑了这 3 种因素的影响，研究固氖在 4～208 GPa 压强范围内的等温压缩性，以期在 100 GPa 以上的压强区间内能准确地解释目前出现的实验现象。

## 2 理论模型和计算方法

### 2.1 多体势的定义

对于处在 $r_o$、$r_i$ 位置上的两个氖原子 $Ne_o$ 和 $Ne_i$，它们所构成团簇的相互作用能可以用两体势来描述，即

$$u_2(o,i) = E(r_o,r_i) - 2E_0 \tag{1}$$

式中：$u_2(o,i)$为两个氖原子 $Ne_o$、$Ne_i$ 间的两体相互作用，$E(r_o,r_i)$为两个氖原子分别位于 $r_o$、$r_i$ 位置时它们所构成原子团簇 $Ne_2$ 的基态能量，$E_0$ 为一个孤立氖原子的基态能量。当第 3 个氖原子 $Ne_j$ 靠近 $Ne_o$、$Ne_i$ 这两个氖原子时，它们之间的电子云分布会发生变化，使得 3 个氖原子间存在三体相互作用，即三体势

$$u_3(o,i,j) = E(r_o,r_i,r_j) - 3E_0 - u_2(o,i) - u_2(o,j) - u_2(i,j) \tag{2}$$

式中：$E(r_o,r_i,r_j)$为 3 个氖原子分别位于 $r_o$、$r_i$、$r_j$ 位置时 3 个氖原子所构成团簇 $Ne_3$ 的基态能量。

### 2.2 中心原子势能及其多体展开

高压条件下，固氖晶体中任意一个原子 $Ne_o$ 与周围 $n-1$ 个近邻原子都存在相互作用。以这个原子团簇 $Ne_n$ 作为研究对象，中心原子 $Ne_o$ 与其 $n-1$ 个近邻原子的相互作用能 $V_n$ 就等于将原子 $Ne_o$ 从无穷远处移到当前位置 $r_o$ 处该原子团簇 $Ne_n$ 的基态能量变化，即

$$V_n = E(r_o,r_1,r_2,\cdots,r_{n-1}) - [E(r_1,r_2,\cdots,r_{n-1}) + E_0] \tag{3}$$

式中：$E(r_o,r_1,r_2,\cdots,r_{n-1})$为中心原子 $Ne_o$ 与其 $n-1$ 个近邻原子在 $r_o,r_1,r_2,\cdots,r_{n-1}$ 位置时团簇 $Ne_n$ 的基态能量，$E(r_1,r_2,\cdots,r_{n-1})$为挖去中心原子 $Ne_o$ 后余下 $n-1$ 个近邻原子所构成团簇 $Ne_{n-1}$ 的基态能量，$E_0$ 为孤立氖原子的基态能量。按照多体展开理论，原子势能 $V_n$ 可展开为中心氖原子 $Ne_o$ 与其 $n-1$ 个近邻氖原子间的多体相互作用之和(见图 1)，即

$$V_n = \sum_{i=1}^{n-1} u_2(o,i) + \sum_{i<j}^{n-1} u_3(o,i,j) + \cdots = U_2 + U_3 + \cdots \tag{4}$$

式中：$u_2(o,i)$、$u_3(o,i,j)$分别为中心原子 $Ne_o$ 与其近邻原子中任意一个氖原子、任意两个氖原子间的两体势、三体势，$U_2$、$U_3$ 分别为 $u_2(o,i)$、$u_3(o,i,j)$对所有近邻氖原子的求和。当近邻原子个数 $n-1$ 的值取得足够大时，由(3)式、(4)式可以得到宏观晶体中任意原子的势能 $V_n$ 以及两体、三体分量($U_2$、$U_3$)。但是，由于存在多体屏蔽效应，较远壳层的原子对原子势能的贡献可忽略不计，如图 1 所示。

(3)式中 $E(r_o,r_1,r_2,\cdots,r_{n-1})$、$E(r_1,r_2,\cdots,r_{n-1})$和 $E_0$ 的值均可用从头算方法获得，进而得到 $V_n$。(4)式中两体势 $u_2(o,i)$、三体势 $u_3(o,i,j)$也可根据(1)式、(2)式由从头算方法得到。$n$ 个氖原子所构成团簇的 Hamilton 算符为

$$H = -\sum_I \frac{1}{2M_I}\nabla_I - \sum_i \frac{1}{2}\nabla_i + \sum_{I<J} \frac{Z_I Z_J}{r_{IJ}} + \sum_{i<j} \frac{1}{r_{ij}} - \sum_{I,j} \frac{Z_I}{r_{Ij}} \tag{5}$$

式中：$M_I$、$Z_I$ 分别为氖原子核 $I$ 的质量和核电荷数，$r_{IJ}$、$r_{ij}$ 分别为两个核和两个电子间的距离，$r_{Ij}$ 为原

子核 $I$ 到电子 $j$ 的距离。在单电子轨道近似下,将氖原子团簇体系的薛定谔方程简化为 Hartree-Fock-Roothaan (HFR)方程,通过求解该方程得到团簇的基态能量。在实际求解过程中,采用 Gamess 计算程序计算不同氖原子团簇的基态能量,同时采用 Triple Zeta Valence (TZV)基函数。

## 2.3 固氖的冷能

由于晶格原子势能 $V_n$ 中的 $k$ 体势部分属于原子 $Ne_o$ 与其近邻原子共有,所以在计算晶体冷能时为了避免重复累加多体相互作用,求任意一个氖原子 $Ne_o$ 的 $k$ 体势对晶体冷能的贡献时要除以 $k$。所以,冷能的排斥部分 $E_{rep}$ 与自洽场计算得到的多体组分的关系为

$$E_{rep} = \frac{1}{2}U_2 + \frac{1}{3}U_3 + \cdots \tag{6}$$

关联能 $E_{att}$ 采用 HFD C2 势[10]的长程吸引部分 $\varphi(r_{oi})$ 来计算,即

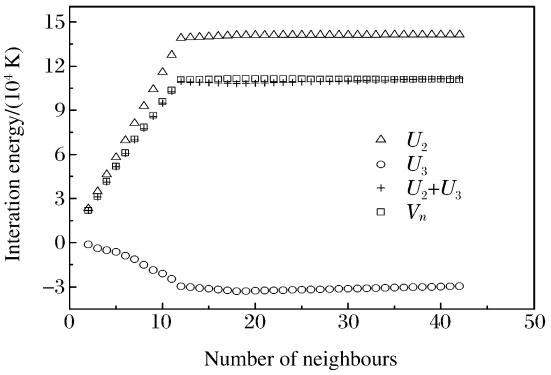



图 1 $R=0.18$ nm 时 fcc 晶格原子势能及其两体、三体分量随近邻原子数的变化

Fig. 1 Variations of the atomic potential and its two- and three-body components with the number of neighbours at $R=0.18$ nm in fcc phase

$$E_{att} = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\varphi(r_{oi}) \tag{7}$$

$$\varphi(r_{oi}) = -\varepsilon(c_6 x^{-6} + c_8 x^{-8} + c_{10} x^{-10})F(x) \tag{8}$$

$$F(x) = \begin{cases} \exp[-(D/x-1)^2] & x < D \\ 1 & x \geqslant D \end{cases} \tag{9}$$

式中:$x = r_{oi}/r_m$,$r_{oi}$ 为中心原子 $Ne_o$ 与第 $i$ 个近邻原子的距离,$r_m = 0.306$ nm;$\varepsilon = 43$ K,$c_6 = 1.291\times10^{-6}$ nm$^6$,$c_8 = 3.29\times10^{-9}$ nm$^8$,$c_{10} = 1.34\times10^{-11}$ nm$^{10}$,$D = 1.28$。根据(7)式的收敛情况,计算时采用的近邻原子数为 $n = 1\,000$。

固氖晶体的冷能为

$$E_n = E_{rep} + E_{att} \tag{10}$$

## 2.4 固氖的压强

温度为 $T$ 时,固氖压强 $p(V,\omega(V),T)$ 可分为 3 部分,即

$$p(V,\omega(V),T) = p_n(V) + p_{zpv}(\omega(V)) + p_{th}(\omega(V),T) \tag{11}$$

式中:$p_n(V)$、$p_{zpv}(\omega(V))$、$p_{th}(\omega(V),T)$ 分别为冷压、晶格零点振动产生的压强及热压。冷压 $p_n(V)$ 可由冷能和体积的函数关系获得,即

$$p_n(V) = -\frac{dE_n(o)}{dV} \tag{12}$$

对于 $p_{zpv}(\omega(V))$,虽然固氖晶格中零点振动能对总能量的贡献较小,但却不可忽略[13],因此 $p_{zpv}(\omega(V))$ 也是固氖压强 $p(V,\omega(V),T)$ 中较为重要的一部分。本研究采用爱因斯坦模型来考虑固氖晶格的零点振动,即在体积 $V$ 下,计算固氖晶格中一个中心原子振动而其它原子固定在原晶格平衡位置时体系能量的变化。根据固氖晶格中能量变化与振动位移的关系,拟合出零点振动频率,进而得出零点振动能及零点振动频率随体积的变化关系 $\omega(V)$。根据固体晶格理论[14],晶格零点振动对压强的贡献为

$$p_{zpv}(\omega(V)) = \frac{3}{2}\frac{\gamma(V)}{V}\hbar\omega(V) \tag{13}$$

式中:$\gamma(V)$ 为 Grüneisen 系数;$\hbar = h/2\pi$,$h$ 为 Planck 常数。

$$\gamma(V) = -\frac{d\ln\omega(V)}{d\ln V} \tag{14}$$

由于(11)式中的 $p_{\mathrm{th}}(\omega(V),T)$ 与晶格零点振动频率有关,因此只要已知零点振动频率及温度,就可以得到晶格的热压,即

$$p_{\mathrm{th}}(\omega(V),T)=-\frac{3}{\exp[\hbar\omega(V)/k_{\mathrm{B}}T]-1}\frac{\hbar\,\mathrm{d}\omega(V)}{\mathrm{d}V} \tag{15}$$

式中:$k_{\mathrm{B}}$ 为 Boltzmann 常数。

## 3 计算结果与讨论

### 3.1 中心原子势能及其两体、三体分量

图 1 给出了最近邻原子间距($R$)为 0.18 nm 时,fcc 固氖中任意原子 $\mathrm{Ne}_o$ 与其近邻原子的相互作用能 $V_n$ 及其两体、三体分量($U_2$、$U_3$)随近邻原子数的变化情况。本研究考虑了 $\mathrm{Ne}_o$ 原子与其最近邻 3 个壳层原子间的相互作用,其近邻原子配位数分别为 12、6 和 24。可见,中心原子 $\mathrm{Ne}_o$ 的势能 $V_n$ 及其两体分量 $U_2$ 主要来源于 $\mathrm{Ne}_o$ 与最近邻壳层原子的相互作用,当考虑到中心原子 $\mathrm{Ne}_o$ 与其最近邻壳层(12 个近邻原子)间的相互作用时 $V_n$ 就已饱和,收敛较快。但对于三体分量 $U_3$,收敛要慢一些,次近邻原子有一定贡献,当考虑到中心原子 $\mathrm{Ne}_o$ 与前两个近邻壳层(18 个近邻原子)间的相互作用时,三体分量 $U_3$ 也将达到饱和值。

表 1 列出了 fcc 固氖在最近邻原子间距 $R$ 为 0.18～0.26 nm、相应体积 $V$ 为 2.5～7.5 $\mathrm{cm^3/mol}$ 范围内,只考虑中心原子 $\mathrm{Ne}_o$ 与最近邻两个原子壳层的相互作用时,所得到的原子势能 $V_n$ 及其两体、三体分量。表 1 中的最后两列为原子势能的多体展开式(即(4)式)在两体项及三体项截断的精度。例如:$R$=0.24 nm 时,若只考虑两体贡献,多体展开式的截断精度 $U_2/V_n$ 为 105.8%,但引入三体的负修正后,多体展开式的截断精度 $(U_2+U_3)/V_n$ 提高到 100.9%,三体分量占中心原子势能的 −5%;当 $R$=0.18 nm 时,多体展开式在两体项的截断精度为 126.6%,考虑三体贡献后,截断精度提高到 97%,三体贡献在原子势能中的比例提高到了 −29.6%。可见:随着体积减小,压缩度增大,三体势对中心原子势能的贡献越来越大;当最近邻原子间距小于 0.18 nm 时,可能还需要考虑四体势的贡献。

**表 1 fcc 氖原子势能及各多体势的贡献**

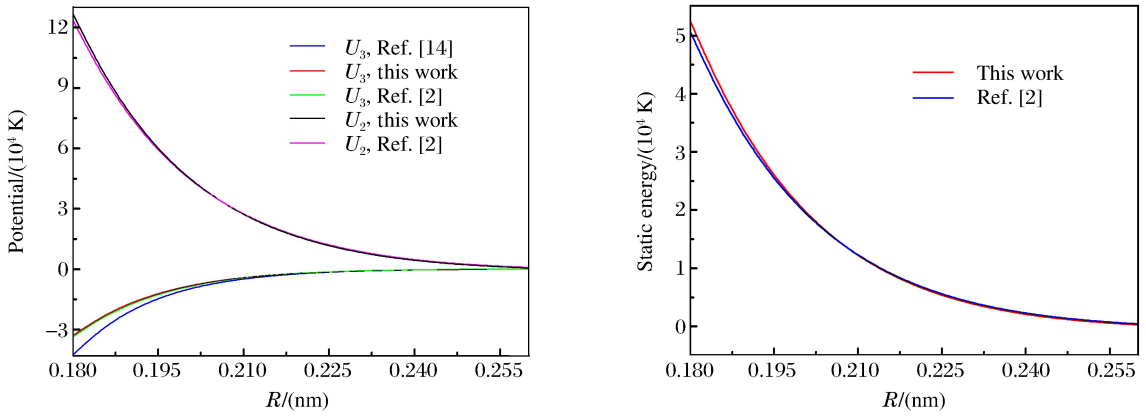
**Table 1 Atomic potential energy of fcc Ne and its contributions of two- and three-body potentials**

| $R$/(nm) | $V$/($\mathrm{cm^3/mol}$) | $U_2$/(K) | $U_3$/(K) | $V_n$/(K) | $U_2/V_n$ | $(U_2+U_3)/V_n$ |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 0.18 | 2.483 | 141 138.1 | −33 004.6 | 111 477.6 | 1.266 | 0.970 |
| 0.19 | 2.921 | 88 431.4 | −16 839.8 | 72 563.4 | 1.219 | 0.987 |
| 0.20 | 3.407 | 55 309.3 | −8 488.9 | 46 980.2 | 1.177 | 0.997 |
| 0.21 | 3.944 | 34 509.8 | −4 195.8 | 30 181.6 | 1.143 | 1.004 |
| 0.22 | 4.534 | 21 468.4 | −2 010.8 | 19 316.5 | 1.111 | 1.007 |
| 0.23 | 5.181 | 13 306.9 | −916.4 | 12 304.2 | 1.081 | 1.007 |
| 0.24 | 5.887 | 8 208.8 | −381.5 | 7 757.8 | 1.058 | 1.009 |
| 0.25 | 6.654 | 5 029.3 | −130.0 | 4 829.6 | 1.041 | 1.014 |
| 0.26 | 7.484 | 3 049.6 | −19.5 | 2 980.2 | 1.023 | 1.017 |

### 3.2 冷能及其两体、三体组分

由于本研究采用 Hartree-Fock 自洽场近似,对能量的计算只涉及自洽(SCF)部分,对于吸引能部分则采用 Aziz[10] 给出的 HFD C2 势的色散关联项(见(7)式)。在 0.18～0.26 nm 范围内,冷能及其两体、三体组分的计算结果以及与 Schwerdtfeger[2]、Neumann[15] 等人理论结果的比较见图 2。由图 2(a)可知:在最近邻原子间距小于 0.205 nm 的短程区内,本研究计算得到的两体势比 Schwerdtfeger 等人[2] 的大些,三体势的计算结果也高于 Schwerdtfeger 等人[2] 的三体势理论值,并且都比 Neumann[15] 的三体理论值大,表明在三体相互作用中,等边、等腰这类特殊的三原子构型对三体势的贡献最大,普通

三原子构型也有一定的贡献。从图 2(b)中可以看出:在短程区内,本研究得到的冷能(如(10)式所示)比 Schwerdtfeger 等人[2]的结果高,冷能变化曲线更陡,使得本研究得到的等温压缩线比 Schwerdtfeger 等人的更高;而在长程区内,本研究得到的冷能则略低于 Schwerdtfeger 等人[2]的冷能。




(a) Two- and three-body potentials　　(b) Static energy

图 2　不同方法得到的多体势计算结果比较

Fig. 2　Comparisons of many-body potentials obtained with different methods

## 3.3　零点振动能

固氖晶格的零点振动频率随体积的变化关系如图 3 所示。可以看出,本研究得到的零点振动频率计算值与 Schwerdtfeger 等人[2]的理论值基本吻合,偏差小于 1%,如零温下体积为 3.4 $cm^3$/mol 时,本研究与 Schwerdtfeger 等人[2]的零点振动频率理论值($\nu$)分别为 $1.15\times10^{14}$ 和 $1.14\times10^{14}$ Hz。在该条件下零点振动能约占总能量的 6%,此时总压强为 167.91 GPa,零点振动能引起的压强为 4.59 GPa。由于本研究与 Schwerdtfeger 等人[2]计算得到的零点振动频率的差距很小,因此比较两者引起的压强可知,由零点振动引起的差别很小,可忽略不计。

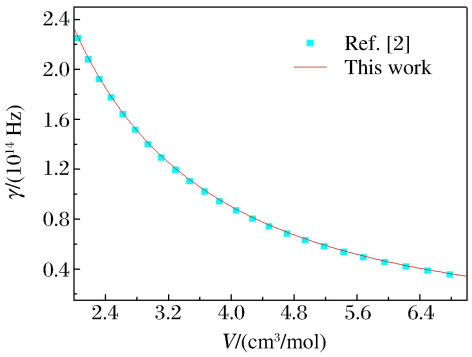



图 3　零点振动频率随体积的变化关系

Fig. 3　Zero-point vibration frequency versus volume

## 3.4　等温压缩线

根据 3.2 节和 3.3 节中冷能和零点振动能的计算结果,由(11)式可以得到 $T=300$ K 时固氖的等温压缩线,并与实验值和其它理论值[2,9,16-17]进行比较,如图 4 所示。在 30～210 GPa 范围内(见图 4(a)),考虑三体作用后的等温压缩线与实验测量值符合得很好。其中,在 30～100 GPa 范围内,Schwerdtfeger 等人[2]的理论结果也能很好地符合实验测量值,但在 100～210 GPa 区域内,Schwerdtfeger 等人的结果系统地低于实验测量值;而本研究的计算结果不仅与实验数据吻合得很好,而且较 Schwerdtfeger 等人的结果整体地改进并提高了 3%～5%。例如:当 $V=3.4$ $cm^3$/mol 时,实验值为176 GPa,本研究计算得到的压强为 175 GPa,而 Schwerdtfeger 等人的计算压强仅为 168 GPa,已超出实验误差范围(实验误差小于 3 GPa[8])。因此,在压强高于 100 GPa 的区域,本研究计算得到的冷能随体积的变化曲线较 Schwerdtfeger 等人的变化曲线更陡(见图 2(b))的结果是合理的,在对冷能的贡献中,普通三原子构型的三体势贡献虽不大,但提供的能量值为正,对冷能的增大也有一定帮助。在 4～30 GPa 的低压范围内,考虑了三体作用后的理论压强值较实验数据低了 0.2～2 GPa,如图 4(b)所

示。这是由于本研究采用的是自洽场计算，对于三体色散关联作用(Dispersion 项)考虑不足，而这部分作用在压强不太高的区域仍不可忽略。

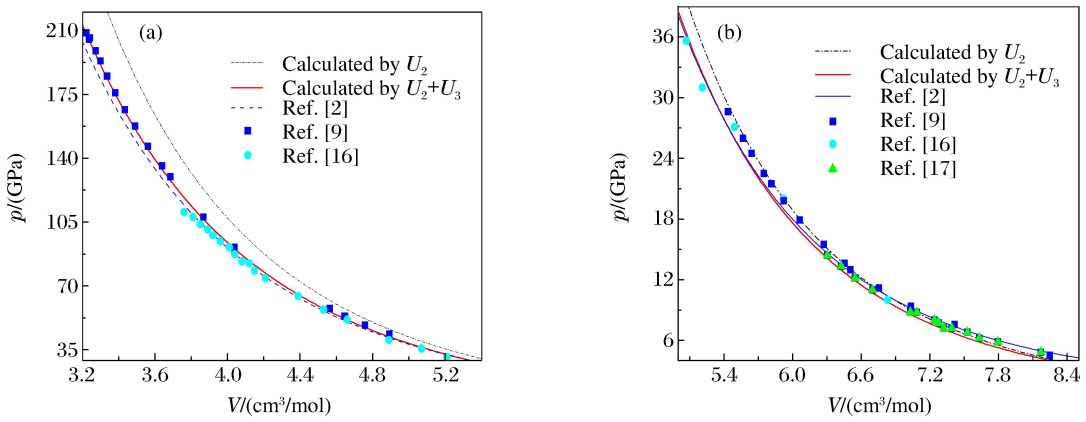



图 4 $T$=300 K 时固氖的等温压缩线

Fig. 4 Isotherm of solid neon at $T$=300 K

## 4 结 论

根据 Hartree-Fock 自洽场的从头计算方法和多体展开理论，计算了固氖晶格的冷能和零点振动能，得到了固氖的等温压缩线。结果表明，在高压区内压强计算值与实验值具有良好的一致性，特别是在压强大于 100 GPa 的高压区，本模型较现有的理论模型能更准确地解释实验测量结果。

## References:

[1] Pechenik E, Kelson I, Makov G. Many-body model of rare gases at high pressures [J]. Phys Rev B, 2008, 78(13): 134109.

[2] Schwerdtfeger P, Hermann A. Equation of state for solid neon from quantum theory [J]. Phys Rev B, 2009, 80(6): 064106.

[3] Drummond N D, Needs R J. Quantum Monte Carlo, density functional theory, and pair potential studies of solid neon [J]. Phys Rev B, 2006, 73(2): 024107.

[4] Tse J S, Klug D D, Shpakov V, et al. High pressure elastic properties of solid argon from first-principles density functional and quasi-harmonic lattice dynamic calculations [J]. Solid State Commun, 2002, 122(2): 557-560.

[5] Shao X P, Gong T L, Chen Y, et al. Spectroscopic diagnosis of the relative ionization depth with different buffer gases [J]. Acta Physica Sinica, 2010, 59(3): 1677-1680. (in Chinese)
邵旭萍，龚天林，陈 艳，等. 不同载气下气体相对电离度的光谱诊断 [J]. 物理学报，2010，59(3)：1677-1680.

[6] Errandonea D, Boehler R, Japel S, et al. Structural transformation of compressed solid Ar: An X-ray diffraction study to 114 GPa [J]. Phys Rev B, 2006, 73(9): 092106.

[7] Cazorla C, Errandonea D, Sola E. High-pressure phases, vibrational properties, and electronic structure of $Ne(He)_2$ and $Ar(He)_2$: A first-principles study [J]. Phys Rev B, 2009, 80(6): 064105.

[8] Pechenik E, Kelson I. Many-body model of rare gases at high pressures [J]. Phys Rev B, 2008, 78(13): 134109.

[9] Dewaele A, Datchi F, Loubeyre P, et al. High pressure-high temperature equations of state of neon and diamond [J]. Phys Rev B, 2008, 77(9): 094106.

[10] Aziz R A. An accurate intermolecular potential for neon [J]. High Temp High Press, 1980, 12: 565-577.

[11] Freiman Y A, Tretyak S M. Many-body interactions and high-pressure equations of state in rare-gas solids [J]. Low Temp Phys, 2007, 33(6): 545-552.

[12] Loubeyre P. Three-body-exchange interaction in dense rare gases [J]. Phys Rev B,1987,37(10):5432-5439.

[13] Rosciszewski K,Paulus B,Fulde P,et al. *Ab initio* coupled-cluster calculations for the fcc and hcp structures of rare-gas solids [J]. Phys Rev B,2000,62(9):5482-5488.

[14] Huang K,Han R Q. Solid State Physics [M]. Beijing:Higher Education Press,1988:137-139. (in Chinese)
黄　昆,韩汝琦. 固体物理学 [M]. 北京:高等教育出版社,1988:137-139.

[15] Neumann M,Zoppi M. Path-integral Monte Carlo simulations of solid neon at room temperature [J]. Phys Rev B,2000,62(1):41-44.

[16] Hemley R J,Zha C S,Jephcoat A P,et al. X-ray diffraction and equation of state of solid neon to 110 GPa [J]. Phys Rev B,1989,39(16):11820-11827.

[17] Finger L W,Hazen R M,Zou G,et al. Structure and compression of crystalline argon and neon at high pressure and room temperature [J]. Appl Phys Lett,1981,39(11):892-894.

## Equation of State of Solid Neon from Quantum Calculation

WU Na[1],TIAN Chun-Ling[1],LIU Fu-Sheng[2],KUANG An-Nong[1],
YUAN Hong-Kuan[1],ZHENG Xing-Rong[1]

(1. *School of Physics Science and Technology*,
*Southwest University*,*Chongqing* 400715,*China*;
2. *Institute of High Temperature and High Pressure Physics*,
*Southwest Jiaotong University*,*Chengdu* 610031,*China*)

**Abstract**: The interaction energy for fcc-neon-crystals at high pressure is calculated by Hartree-Fock method and the atomic cluster theory. The two- and three-body contributions to the static energy are also studied. Incorporating the influence of the zero-point vibration, the equations of state of fcc neon are calculated and compared with the available experimental 300 K isotherm up to the pressure of 208 GPa. It demonstrates that the calculated isotherm is in good agreement with measurements at pressures above 30 GPa. Compared with the recent predictions, the calculated results systematically improve the 300 K isotherm by 3%-5% between 100 and 210 GPa, and imply more static energy-volume relation at high pressure.

**Key words**: two-body interactions; three-body interactions; *ab initio* calculation; solid neon; equation of state