

МИНИСТЕРСТВО ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РЕСПУБЛИКИ ТАТАРСТАН  
КАЗАНСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ  
УНИВЕРСИТЕТ ИМ. А. Н. ТУПОЛЕВА — КАИ  
КАЗАНСКИЙ (ПРИВОЛЖСКИЙ) ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ  
НАУЧНЫЙ СОВЕТ РАН ПО ФИЗИКЕ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОЙ ПЛАЗМЫ  
КАЗАНСКИЙ ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ ИМЕНИ Е. К. ЗАВОЙСКОГО  
ФЕДЕРАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР  
«КАЗАНСКИЙ НАУЧНЫЙ ЦЕНТР РАН»  
АКАДЕМИЯ НАУК РЕСПУБЛИКИ ТАТАРСТАН

**III МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ  
«ГАЗОРАЗРЯДНАЯ ПЛАЗМА  
И СИНТЕЗ НАНОСТРУКТУР»**

*Сборник трудов (г. Казань, 1-4 декабря 2022 г.)*

Казань  
Издательство «Бук»  
2022

УДК 533.9+620.3(063)  
ББК 22.333+22.353.2я431  
Т66

**Редакционная коллегия:**

Борис Ахунович Тимеркаев, член-корр. Академии наук РТ, профессор,  
доктор физико-математических наук;  
Ильназ Изаилович Файрушин, кандидат технических наук;  
Артем Олегович Софроницкий, кандидат технических наук;  
Алмаз Ильгизович Сайфутдинов, кандидат физико-математических наук;  
Сергей Витальевич Рыжков, доктор физико-математических наук

**Т66 III Международная конференция «Газоразрядная плазма и синтез наноструктур»** : сборник трудов (г. Казань, 1-4 декабря 2022 г.) / М-во высшего образования и науки Рос. Федерации, М-во образования и науки Респ. Татарстан, Казанский нац. исследовательский технический ун-т и др. — Казань : Бук, 2022. — 676 с. — Текст : непосредственный.

ISBN 978-5-907665-16-3.

Материалы конференции предназначены для специалистов, в области физики газоразрядной плазмы, наноматериалов и нанотехнологий. Могут быть полезны для студентов и аспирантов соответствующих специальностей.

УДК 533.9+620.3(063)  
ББК 22.333+22.353.2я431

ISBN 978-5-907665-16-3

## СТРУКТУРНЫЕ ОСОБЕННОСТИ ЖИДКОГО ВИСМУТА: АНАЛИЗ И ХАРАКТЕРИЗАЦИЯ СТРУКТУР

**А. А. Цыганков<sup>1</sup>, Б. Н. Галимзянов<sup>1</sup>, А. В. Мокшин<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Казанский (Приволжский) Федеральный Университет, Казань, Россия

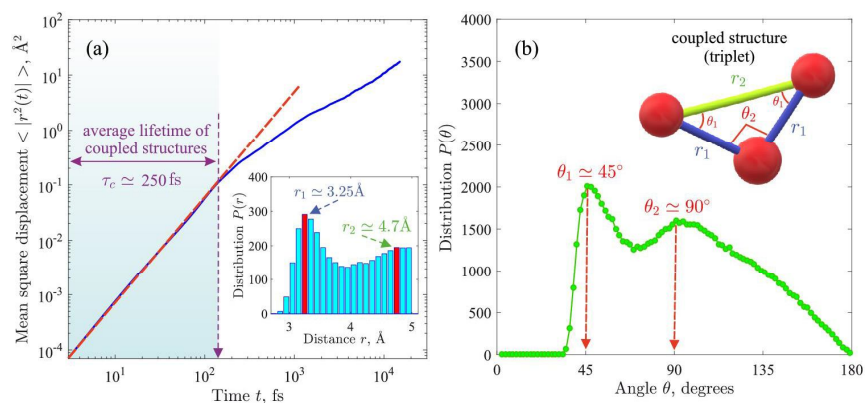
Большинство жидкостей с точки зрения теории можно характеризовать наличием ближнего порядка в структуре, причем на больших расстояниях порядок отсутствует. Но случай жидкого висмута занимает особое место, поскольку в нем имеются аномалии, не описываемые современными моделями. Одно из них – это наличие плеча в радиальной функции распределения и статическом структурном факторе вблизи точки плавления [1, 2], являющееся нетипичным для жидкостей.

Радиальная функция распределения является вероятностной характеристикой найти частицу на определенном расстоянии от другой частицы, то можно сделать вывод, что данная особенность может возникнуть только в том случае, если частицы притягиваются друг к другу на относительно малое расстояние размерами порядка от 3.25 до 4.7 Å, приводящее к образованию димеров, кластеров [3] или цепочек. Для проверки воспроизводимости структурных особенностей жидкого висмута современными вычислительными методами было проведено ab-initio моделирование молекулярной динамики в пакете VASP [4, 5, 6, 7], использующем методы теории функционала плотности (DFT).

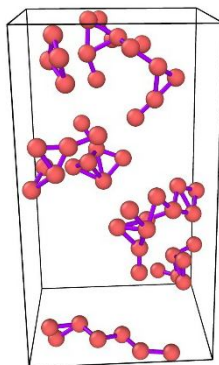
Для проверки возможности существования стабильных структур в жидком висмуте было рассчитано распределение частиц по временам соседства, а также среднеквадратичное смещение атомов висмута. Результаты показали, что в областях, ограниченных сферой радиуса до 5 Å, имеются устойчивые образования со временем жизни более 250 фс, при времени структурной релаксации расплава висмута 200 фс (Рис. 1а.).

Для идентификации таких структур были оценены параметры порядка  $q_4$ ,  $q_6$  [8]. Результаты показали, что в жидком висмуте образуются структуры, не идентифицируемые однозначным образом. Для более точного анализа были рассчитаны распределения по длинам связей и углам связей тройки атомов [9]. По полученным данным был сделан вывод, что в жидком висмуте реализуются два значения расстояний (3.25 и 4.7 Å) и углов (45° и 90°). Самой простой структурой, удовлетворяющей данным

критериям, является равнобедренный треугольник (Рис. 1б.). Эти структуры, в свою очередь, могут объединяться в цепочки (Рис. 2).



**Рисунок 1.** а) среднеквадратичное смещение атомов висмута, на вставке – распределение по длинам связей, б) распределение по длинам связей тройки атомов висмута, на вставке – треугольная структура, образующаяся в жидком висмуте.



**Рисунок 2.** Примеры структур, реализующихся в жидком висмуте.

В данной работе было показано, что в жидком висмуте вблизи точки плавления реализуются треугольные структуры со средним временем жизни более 250 фс. Параметры треугольной структуры  $r_1 = 3.25 \text{ Å}$ ,  $r_2 = 4.7$

Å,  $\theta_1 = 45^\circ$ ,  $\theta_2 = 90^\circ$ . Данная треугольная структура является элементарной единицей цепочки в жидком висмуте, находящемся вблизи точки плавления.

**Литература:**

- [1] Greenberg Y. Evidence for a temperature-driven structural transformation in liquid bismuth. / Y. Greenberg, E. Yahel, E. N. Caspi, C. Benmore, B. Beuneu, M. P. Dariel, G. Makov // *Europhysics Letters*. – 2009. – Vol. 86. – No. 3. – P. 36004.
- [2] Waseda Y. Structure factor and atomic distribution in liquid metals by X-ray diffraction / Y. Waseda, K. Suzuki // *Phys. Stat. Sol (b)*. – 1972. – Vol. 49. – No. 1. – P. 339 – 347.
- [3] Akola J. Structure and dynamics in liquid bismuth and  $\text{Bi}_n$  clusters: a density functional study / J. Akola, N. Atodiresei, J. Kalikka, J. Larrucea, R. O. Jones // *The Journal of Chemical Physics*. – 2014. – Vol. 141. – No. 19. – P. 194503.
- [4] Kresse G. Ab initio molecular dynamics for liquid metals / G. Kresse, J. Hafner // *Phys. Rev. B*. – 1993. – Vol. 47. – No. 1. – P. 558.
- [5] Kresse G. Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set / G. Kresse, J. Furthmuller // *Computational Materials Science*. – 1996. – Vol. 6. – No. 1. – P. 15 – 50.
- [6] Kresse G. Efficient iterative schemes for ab-initio total energy calculations using a plane-wave basis set / G. Kresse, J. Furthmuller // *Phys. Rev. B*. – 1996. – Vol. 54. – No. 16. – P. 11169 – 11186.
- [7] Kresse G. Norm-conserving and ultrasoft pseudopotentials for first-row transition elements / G. Kresse, J. Hafner // *Phys. Rev. B*. – 1993. – Vol. 6. – No. 40. – P. 8245.
- [8] Steinhardt J. P. Bond-orientational order in liquids and glasses / P. J. Steinhardt, D. R. Nelson, M. Ronchetti // *Physical Review B*. – 1983. – Vol. 28. – No. 2. – P. 784 – 805.
- [9] Stukowski A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO – the open visualization tool / A. Stukowski // *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. – 2009. – Vol. 18. – No. 1. – P. 015012.

tsigankov.artiom@yandex.ru