

СТРУКТУРНЫЕ ОСОБЕННОСТИ ЖИДКОГО ВИСМУТА: DFT АНАЛИЗ

А.А. Цыганков, Б.Н. Галимзянов, А.В. Мокшин

Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

*e-mail: tsigankov.artiom@yandex.ru

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 [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 3.2 до 4.6 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 [4-7], использующем методы теории функционала плотности (DFT). Для определения возможности существования стабильных структур в жидком висмуте было рассчитано распределение частиц по временам соседства из полученных результатов моделирования *ab-initio* молекулярной динамики. Результаты показали, что в областях, ограниченных сферой радиуса 5 Å, имеются устойчивые образования со временем жизни более, чем 200 фс.

Для идентификации таких структур были оценены параметры порядка q_4 и q_6 [8]. Результаты показали, что в жидком

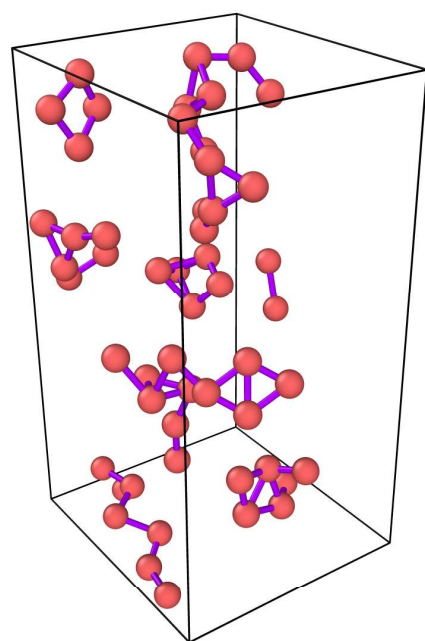


Рис. 1. Структуры в висмуте.

висмуте образуются структуры, не идентифицируемые однозначным образом.

При анализе полученных данных моделирования было установлено методами кластерного анализа, что в висмуте реализуются устойчивые структуры по типу цепочек и димеров, показанные на рис. 1.

Работа выполнена при поддержке программы «Приоритет-2030». АВМ признателен фонду развития теоретической физики и математики «Базис».

1. Y. Waseda, K. Suzuki, Phys. Stat. Sol. (b) **49**, 339, (1972).
2. Y. Greenberg *et al.*, Europhysics Letters **86**, 36004 (2009).
3. J. Akola *et al.*, J. Chem. Phys. **141**, 194503 (2014).
4. G. Kresse, J. Hafner, Phys. Rev. B **47**, 558 (1993).
5. G. Kresse, J. Furthmuller, Comput. Mat. Sci. **6**, 15 (1996).
6. G. Kresse, J. Furthmuller, Phys. Rev. B **54**, 11169 (1996).
7. G. Kresse, J. Hafner, J. Phys.: Condens. Matt. **6**, 8245 (1994).
8. P. Steinhardt *et al.*, Phys. Rev. B **28**, 784 (1983).