

## Уравнение состояния жидкого селена на основе первопринципных расчётов

Р.А. Сарган, Г.Э. Норман, И.М. Сайтов

Объединенный институт высоких температур РАН

Проведен расчёт уравнения состояния, диэлектрических и структурных свойств селена посредством программного пакета VASP (*Vienna Ab initio Simulation Package*). Полученные данные анализируются на предмет наличия фазового перехода первого рода и сравниваются с результатами экспериментальных работ.

Фазовый переход в пределах жидкой фазы был экспериментально зафиксирован в ряде веществ: Bi, Te, Se, S, Fe [1, 2]. Диапазон давлений и температур - 1-10 ГПа, 900-1500 К. Для всех веществ имеет место металлизация (изменение проводимости на несколько порядков), а так же небольшой (~2%) скачок плотности. Фазовые линии перечисленных веществ так же обладают одним общим свойством – отрицательный наклон (в координатах P-V).

Природа подобных переходов ещё точно не известна. Не известно так же, является ли механика металлизации уникальной для каждого из веществ.

Предполагается, что атомы жидкого селена образуют одномерные структуры – цепочки [1]. Согласно [3], при переходе, помимо проводимости, скачком меняется вязкость, что авторы связывают с разрушением цепочек.

Моделирование селена было проведено в [4]. Авторы рассмотрели несколько точек в большом диапазоне давлений (0,1 ГПа - 86 ГПа) и при разных температурах. Анализ свойств проводился по парным корреляционным функциям и электронной плотности состояний; проводимость не измерялась. С изменением давления и температуры рассматриваемые величины изменялись плавно.

В данной работе исследовался диапазон давлений 2,5 ГПа - 5 ГПа вдоль изотермы 1000 К. Рассматриваются термодинамические, диэлектрические и структурные свойства. В качестве термодинамических свойств проанализирована фазовая диаграмма (в координатах давление-плотность). Предположительная область перехода близка к экспериментальной, но сам переход слабо выражен. Результаты расчётов проводимости не обнаружили ожидаемого скачка вовсе: величина растёт плавно вдоль изотермы. Структурный анализ состоял из двух частей: построение парной корреляционной функций и непосредственный расчёт длины цепочек селена. Вид парной корреляционной функции селена имеет существенные отличия от аналогичной для простой жидкости, однако изменяется плавно вдоль изотермы, не обнаруживая фазового перехода. В отличие от вышеперечисленного, при расчёте длины цепочек селена замечена особенность при давлениях, близких к экспериментальным давлениям фазового перехода в [1].

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований в рамках проекта 16-08-01218-а.

## Литература

1. *Brazhkin V.V., Popova S.V. & Voloshin R.N.* High-pressure transformations in simple melts // *High Pressure Research: An International Journal*. 1997. V. 15, P. 267-305.
2. *Korobenko V. N. and Rakhel A.D.* Observation of a first-order metal-to-nonmetal phase transition in fluid iron // *Physical Review Letters*. 2012. V. 85, N 014208.
3. *Brazhkin V.V., Funakoshi K., Kanzaki M. & Katayama Y.* Nonviscous Metallic Liquid Se // *Physical Review Letters*. 2007. V. 99, N 245901.
4. *Satoshi O. & Fuyuki S.* *Ab initio* molecular dynamics study of the metallization of liquid selenium under pressure // *Physical Review Letters*. 2011. V. 83, N 134206.