

ПЕРВОПРИНЦИПНЫЕ РАСЧЕТЫ ФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КОНДЕНСИРОВАННЫХ СИСТЕМ ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ

Э.Т. Кулатов¹, С.В. Лепешкин^{2,3}, М.В. Магницкая⁴,

Н.Л. Мацко², Ю.А. Успенский², Е.Г. Максимов²

¹ *Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, Москва*

² *Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва*

³ *Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Московская обл.*

⁴ *Институт физики высоких давлений РАН, Троицк, Московская обл.*

Представлены теоретические исследования сильно сжатого вещества, в которых высокие давление и температура являются или (1) внешними параметрами, изменяющими свойства системы, или (2) средством получения новых метастабильных фаз.

1. С помощью первопринципного численного моделирования методом квантовой молекулярной динамики (т.е. с полным учетом ангармонизма) вычислен динамический структурный фактор $S(\mathbf{q}, \omega)$ для кристаллического натрия в ОЦК и ГЦК фазах при давлениях 65–100 ГПа и температурах 250–700 К. Фононные частоты $\omega(\mathbf{q})$, определенные как центры пиков функции $S(\mathbf{q}, \omega)$, хорошо согласуются с нашим предшествующим квазигармоническим расчетом. Это позволяет заключить, что ангармонизм не оказывает существенного влияния на динамику решетки Na вплоть до температур вблизи кривой плавления.

2. Методом функционала плотности выполнен первопринципный расчет новых соединений CrGaSb и CrGa₂Sb₂, недавно синтезированных в системе Cr–GaSb при высоких давлениях и температурах. Измерения показывают, что метастабильная ферромагнитная фаза CrGa₂Sb₂, обладающая высокой температурой Кюри ($T_C \sim 350$ К), имеет также и высокое электросопротивление, что может быть признаком полупроводникового поведения. Расчеты хорошо воспроизводят магнитные и оптические свойства соединения CrGa₂Sb₂, однако характеризуют его как плохой металл с псевдощелью вблизи уровня Ферми. В то же время вид зонной структуры позволяет заключить, что в системе Cr–GaSb возможно образование полуметаллических фаз, что делает ее интересной с точки зрения спинтроники.