

FIRST-PRINCIPLES STUDY OF PHASE TRANSITIONS IN BORON CARBIDE UNDER PRESSURE

P.Yu. Korotaev, A.V. Yanilkin

FSUE VNIIA, Moscow, Russia

Boron carbide is super-hard and light-weighted material with a wide range of different applications. Nevertheless, the question of its behavior under pressure is still open.

In the present work we study the stability of polar phase of boron carbide B_4C under high pressure within density functional theory. At zero temperature in hydrostatic compression the CBC chain bending is observed, but there is no phase transition in considered range of strain and pressure values. During uniaxial compression chain also starts to bend. But in contrast to hydrostatic compression, at uniaxial strain value of 24% and corresponding uniaxial stress of 200 GPa the amorphization occurs, accompanied with drastic reduce of uniaxial stress. The amorphization is confirmed by pair correlation function calculation. Several possible amorphous structures was studied, and we obtained that the most energy favorable is distorted B_{12} icosahedra with CCC bended chains.

The molecular dynamic modeling also was performed an temperature value 500 K. We obtain that such a temperature lowers the critical values of uniaxial strain and stress to 20% and 160 GPa, correspondingly.

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ SiO_2 АЭРОГЕЛЯ ПРИ УДАРНО-ВОЛНОВОМ НАГРУЖЕНИИ

И.А. Рубцов, Э.Р. Прууэл, К.А. Тен

Институт гидродинамики им. М.А. Лаврентьева СО РАН, г. Новосибирск, Россия
Новосибирский государственный университет, г. Новосибирск, Россия

Аэрогель – высокопористый материал, главной особенностью которого является низкая плотность и большое количество пор различного размера. Основой материала является диоксид кремния с размером отдельных частиц 3-4 нанометра. Из них формируются разреженные кластеры с размером десятки нанометров. Кластеры формируют относительно жесткий каркас составляющий малую долю объема аэрогеля, то есть почти весь его объем приходится на поры [1]. Большая пористость и наличие наноразмерных структур делают материал интересным для исследования ударно-волновых свойств и построения моделей поведения наноструктур при динамическом воздействии.

Синхротронное излучение (СИ) – электромагнитное излучение, испускаемое заряженными частицами при движении по искривленным в магнитном поле траекториям. СИ дает уникальную возможность для изучения структуры вещества, как в статике, так и в условиях динамического воздействия.

В работе измерено малоугловое рентгеновское рассеяние (МУРР) образцов аэрогеля различной плотности (0.08, 0.14, 0.25 г/см³), как в статике, так и при ударно-волновом нагружении. Эксперименты проводились в сибирском центре синхротронного и терагерцового излучения с использованием ускорительного комплекса ВЭПП-3 ИЯФ СО РАН. Для генерации в аэрогеле ударных волн использовались разгоняемые взрывом плоские металлические ударники [1].

Проведено молекулярно-динамическое моделирование структуры аэрогеля. При этом использовался парный потенциал молекулярного взаимодействия Морзе. Характерные размеры расчетной области составляли $200 \times 200 \times 200$ нм. Сформированный образец подвергался ударно-волновому нагружению путем движения одной из стенок расчетной области. При этом, наблюдалось разрушение структуры, а при больших интенсивностях и самих частиц аэрогеля.

Рассчитанный по молекулярному ансамблю МУРР количественно совпадает с данными статических исследований, что говорит о корректности разработанной модели. Моделирование МУРР при прохождении ударной волны демонстрирует качественное совпадение с экспериментальными данными [1, 2].

Литература

1. Динамика фрактальной размерности аэрогеля при ударном нагружении. Мержиевский Л.А., Пруэл Э.Р., Лукьянчиков Л.А., Тен К.А., Титов В.М. XXII Международная конференция. Воздействие интенсивных потоков энергии на вещество. 2007 г. п. Эльбрус, Кабардино-Балкарская республика, Россия. Сборник докладов. Физика экстремальных состояний вещества -- 2007. С 135--136.
2. Synchrotron diagnostics of shock-wave compression of aerogel. L.A. Merzhievsky, L.A. Lukianchikov, E.R. Prueel, K.A. Ten, V.M. Titov, B.P. Tolochko, O.V. Evdakov, I.L. Zhogin, M.A. Sheromov. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A 575 (2007) 121--125.

MOLECULAR DYNAMIC SIMULATION OF STRUCTURE OF SiO_2 AEROGEL AT SHOCK-WAVE ACTION

L.A. Rubtsov, E.R. Prueel, K.A. Ten

Lavrentyev Institute of Hydrodynamics SB RAS, Novosibirsk, Russia
Novosibirsk State University, Novosibirsk, Russia

Aerogel is highly porous material whose main features are ultimately low density and large amount of small-size pores. The typical sizes of separate particles are 3-4 nanometers. The rarefied clusters formed from these particles whose size are tens nanometers. The clusters form the rigid frame which is a small part of aerogel volume, i.e. the almost all its volume (up to 98-99% and more) account for pores. Big porosity and nanodimensional structure makes this material interesting to research shock-wave properties and to creation behavior models at dynamic influence.

Synchrotron radiation (SR) is the electromagnetic radiation emitted when charged particles are accelerated radially (in magnetic field). SR gives the unique feature for studying structure of substance, in statics or in the conditions of dynamic influence.

In the work was measured small-angle x-ray scattering (SAXS) on samples of aerogel with the different densities ($0.08, 0.14, 0.25 \text{ g/cm}^3$), in static and shock-wave action. The experiments were made in the Siberian Synchrotron and Terahertz Radiation Center on the accelerate complex VEPP-3 INP SB RAS. The accelerated by explosion metal striker is used to generate shock-waves in aerogel [1].

Also we carried out molecular dynamics simulation of structure of aerogel. We used the Morse pair potential of molecular interaction; a typical size of the computation area is $200 \times 200 \times 200$ nanometers. The created sample was exposed to shock-wave action by the movement one of walls of the computation area. The destruction of structure was observed more over the particles were destructed too at high intensity of shock-wave.

The calculated on molecular dynamic experiments. It's shows on shock-wave passing SAXS is qua

References

1. Synchrotron diagnostics of shock-wave compression of aerogel. L.A. Merzhievsky, L.A. Lukianchikov, E.R. Prueel, K.A. Ten, V.M. Titov, B.P. Tolochko, O.V. Evdakov, I.L. Zhogin, M.A. Sheromov. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A 575 (2007) 121--125.

ТЕРМОДИНАМИКА ГАЗОВ

В.К.

- ¹Институт проблем химической физики
²Томский национальный исследовательский университет
³Объединенный институт ядерных исследований
⁴Московский физико-технический институт

Интерес к исследованию газов при высоких давлениях и в природе, применением в разном активно ведущимся исследованием «внесолнечных» планет. Уравнение субмегабарном и мегабарном несколькими методами. Теория водорода и инертных газов в междоузлиях вещества сопровождается с идеальной плазмой) было предложено (модель свободной энергии), так как прямое численное моделирование имеющиеся как экспериментальное изучение свойств плотных газов. В частности в настоящее время переходов при высоких температурах экспериментальные данные по водороду перекрывают диапазон давлений в несколько раз превышающих плотность теоретические результаты, и первопринципными методами в

В данной работе представлены результаты для различных начальных состояний. Результаты были получены при помощи модели семейства SAHA.

Для водорода и инертных газов в широком диапазоне параметров динамического давления идеальную вырожденную плазму

моделирование структуры аэрогеля при статическом и динамическом взаимодействии. Моделирование составляли 200x200x200 нм. При ударно-волнового нагружении путем численного моделирования. В этом, наблюдалось разрушение частиц аэрогеля. Результаты численного моделирования МУРР количественно совпадают с экспериментальными данными о корректности разработанной модели. Результаты моделирования ударной волны демонстрируют качественное совпадение с экспериментальными [1, 2].

при ударном нагружении. Мерзиевский Л.А., Толочко О.В., Евдоков И.Л., Жогин И.Л. XXII Международная конференция по физике высоких температур. 2007 г. п. Эльбрус, Кабардино-Балкарская Республика. Физика экстремальных состояний. М.: Физматлит, 2007. С. 121-125.

ANALYSIS OF STRUCTURE
AND WAVE ACTION

... Ten
... RAS, Novosibirsk, Russia
... Novosibirsk, Russia
... are ultimately low density and
... arate particles are 3-4 nanometers
... are tens nanometers. The clusters
... me, i.e. the almost all its volume
... ty and nanodimensional structure
... operties and to creation behavior
... radiation emitted when charged
... R gives the unique feature for
... ns of dynamic influence.
... attering (SAXS) on samples of
...), in static and shock-wave action
... nd Terahertz Radiation Center on
... ated by explosion metal striker is
... of structure of aerogel. We used
... l size of the computation area is
... sed to shock-wave action by the
... ction of structure was observed
... of shock-wave.

The calculated on molecular ensemble SAXS quantity coincides with the data of the static experiments. It's shows correctness of the developed model. The calculated when shock-wave passing SAXS is quality coincidence to the experimental data [1].

References

1. Synchrotron diagnostics of shock-wave compression of aerogel. L.A. Merzhievsky, L.A. Lukianchikov, E.R. Prueel, K.A. Ten, V.M. Titov, B.P. Tolochko, O.V. Evdokov, I.L. Zhogin, M.A. Sheromov. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A 575 (2007) 121--125.

ТЕРМОДИНАМИКА ГАЗОВ В МЕГАБАРНОМ ДИАПАЗОНЕ ДАВЛЕНИЙ

В.К. Грязнов^{1,2}, И.Л. Иосилевский^{3,4}

¹Институт проблем химической физики РАН, г. Черноголовка, Россия
²Томский национальный исследовательский университет, г. Томск, Россия
³Объединенный институт высоких температур РАН, г. Москва, Россия
⁴Московский физико-технический институт (Государственный университет), г. Долгопрудный, Россия

Интерес к исследованию термодинамических свойств водорода и инертных газов при высоких давлениях и температурах связан с их широким распространением в природе, применением в различных высокоэнергетических устройствах, а также с активно ведущимся исследованием процессов в недрах планет-гигантов и «внесолнечных» планет. Уравнения состояния водорода и инертных газов в субмегабарном и мегабарном диапазоне давлений экспериментально изучались несколькими методами. Теоретическое описание термодинамических свойств водорода и инертных газов в мегабарном диапазоне давлений, где высокая плотность вещества сопровождается сильным кулоновским взаимодействием (сильно неидеальная плазма) было предложено как в рамках квазихимического представления (модель свободной энергии), так и "первопринципными" методами, использующими прямое численное моделирование системы ядер и электронов. Несмотря на имеющиеся как экспериментальные, так и теоретические результаты, дальнейшее изучение свойств плотных газов в этой области параметров имеет большое значение. В частности в настоящее время недостаточно данных о возможности фазовых переходов при высоких степенях сжатия. Имеющиеся к настоящему времени экспериментальные данные по калорическому и термическому уравнению состояния перекрывают диапазон давлений с килобар до десятков мегабар и плотностей в три раза превышающих плотность алюминия. В последнее время были получены и теоретические результаты, как в рамках химической модели, так и первопринципными методами в широком диапазоне параметров.

В данной работе представлены результаты вычислений ударных адиабат и энтропии для различных начальных плотностей водорода и инертных газов. Результаты были получены при помощи кодов, реализующих усовершенствованные модели семейства SAHA.

Для водорода и инертных газов были выполнены расчеты ударных адиабат и энтропии для твердых, жидких, и предварительно сжатых газовых мишеней в широком диапазоне параметров. Вычисления показали, что в рассматриваемом диапазоне динамических давлений сжатый газ представляет собой сильно неидеальную вырожденную плазму с плотностями близкими к плотности