

КЕРАМИКАЛЫҚ КРИСТАЛ ТОРЛАРЫНА ЖОҒАРҒЫ ТЕМПЕРАТУРА МЕН ҚЫСЫМНЫҢ ӘСЕРЛЕРІН АЛҒАШҚЫ ҚАҒИДАЛАР БОЙЫНША ЗЕРТТЕУЛЕРГЕ ШОЛУ

Жағышар Нұржан Алексейұлы

zhagypar.n@gmail.com

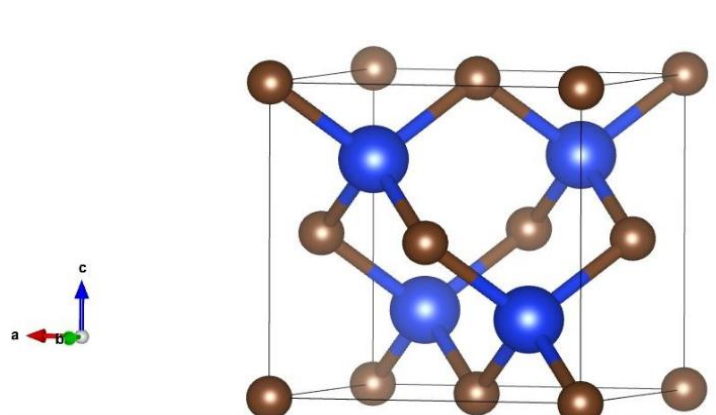
Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ Техникалық физика кафедрасы 8D05323 -Техникалық физика мамандығы бойынша 1 курс докторанты, Нұр-Сұлтан, Қазақстан
Ғылыми жетекші – А.Ү. Абуова

Жоғары температура мен қысым жағдайларында материалдық қасиеттердің өзгерістерін түсіну тек қана конденсацияланған күйдегі заттарда емес, сонымен қатар, геофизикадағы, плазмалар мен астрофизика маңыздылыққа ие. Мұндай күйлер ядролық жарылыс, лазерлік-заттық өзара әрекеттесу немесе гипер жылдамдықта қатты денені сығылу кезінде оңай қол жеткізіледі.

Қатты, жартылай өткізгіш материал болып табылатын кремний карбидінің, алюминий тотығының жоғары қысымдағы күйін және отқа төзімділігін зерттеу кеңінен тарады. Эксперименттік және есептеу арқылы жасалған жұмыстар арқылы жоғары қысымды керамикалық материалдардың көптеген қызықты аспектілері өлшенді және зерттелді. Қомақты жұмыс қысымның материалдардың тербелісі мен материалдық қасиеттеріне әсерін өлшеу мақсатында жасалған [1].

Энергияға бағытталған, толықтай автоматтандырылған, есептеу тиімділігі құрылымға қысым мен температураның әсерін бір мезгілде сипаттайтын әдістерді ұсынады. Стандартты ab initio модельдеу арқылы материалдардың қасиеттері, тепе-теңдік көлемі, жылулық ұлғаю коэффициенті, күй теңдеуі, Грюнейсен параметрі, тұрақты қысым және тұрақты көлемдегі меншікті жылу алмасудың қарапайым кристалы үшін температура мен қысым функциясы ретінде есептеледі және дәл тәжірибелік мәліметтермен салыстырылады [2].

Қарастырылған керамикалық материалдар тор құрамы (1, 2 және 3 суреттер) және қасиеттері төмендегідей:



Қасиеттері:

$a = 3.097 \text{ \AA}$; $b = 3.097 \text{ \AA}$; $c = 3.097 \text{ \AA}$;

$\alpha = 60.000^\circ$; $\beta = 60.000^\circ$; $\gamma = 60.000^\circ$;

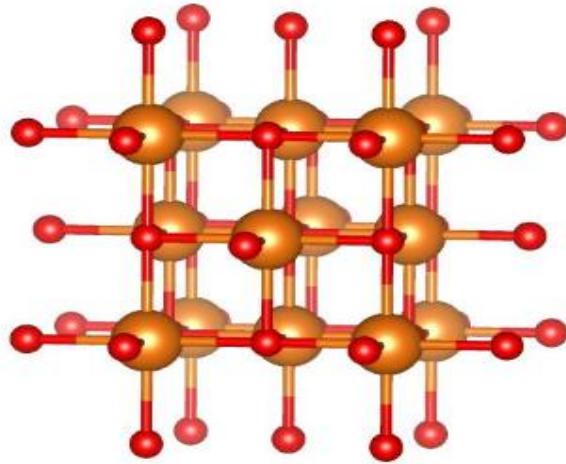
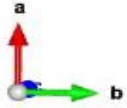
Көлемі = 21.001 \AA^3

Атом құрылу энергиясы: -0.204 eV

Тығыздығы: 3.17 g/cm^3

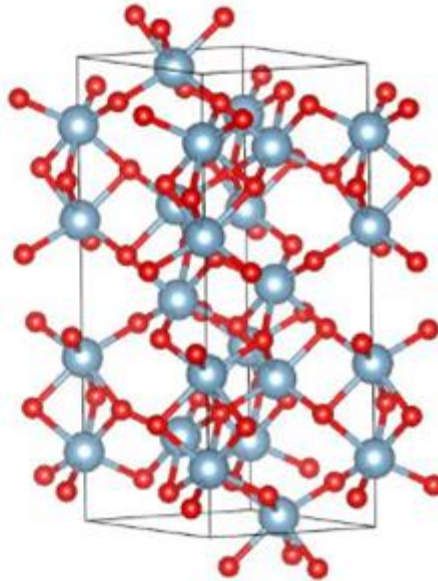
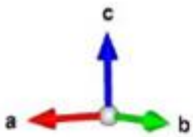
Тиым салынған зона: 1.594 eV

Сурет 1 - SiC кристал торы



Қасиеттері:
 $a = 3.010 \text{ \AA}$; $b = 3.010 \text{ \AA}$; $c = 3.010 \text{ \AA}$;
 $\alpha = 60.000^\circ$; $\beta = 60.000^\circ$;
 $\gamma = 60.000^\circ$;
 Көлемі = 19.279 \AA^3
 Атом құрылу энергиясы: -
 3.061 eV
 Тығыздығы: 3.47 g/cm^3
 Тиым салынған зона: 4.638 eV

Сурет 2 - MgO кристал торы



Қасиеттері:
 $a = 7.774 \text{ \AA}$; $b = 7.774 \text{ \AA}$; $c = 7.774 \text{ \AA}$;
 $\alpha = 109.471^\circ$; $\beta = 109.471^\circ$;
 $\gamma = 109.471^\circ$;
 Көлемі = 361.657 \AA^3
 Атом құрылу энергиясы: -
 3.406 eV
 Тығыздығы: 3.75 g/cm^3
 Тиым салынған зона: 5.216 eV

Сурет 3 - Al₂O₃ кристалл торы

Квазигармониялық жуықтауға (QHA) сәйкес, кристалдағы Гельмгольцтің бос энергиясы, F сол гармоникалық өрнекті сақтай отырып жазылады [3] бірақ жиіліктегі дірілдің [4,5] көлемге айқын тәуелділігін көрсетеді:

$$F^{QHA}(T, V) = U_0(V) + F_{vib}^{QHA}(T, V) \quad (1)$$

мұндағы $U_0(V)$ - кристалдағы ешқандай тербеліссіз нөлдік температуралық ішкі энергия.

Берілген T температурадағы нөлдік қысым тепе-теңдік көлемі $V(T)$, V және көлемге қатысты $F^{QHA}(V; T)$ азайту арқылы, T -ны белгіленген параметр ретінде сақтау арқылы алынады. Көлем температура $V(T)$ қатынасы, көлемдік жылулық кеңею коэффициенті $\alpha_V(T)$ келесі түрде алынады:

$$\alpha_V(T) = 1/V(T) (\partial V(T)/\partial T)_{p=0} \quad (2)$$

Кубтық кристалдар үшін сызықтық термиялық кеңею коэффициенті $\alpha_l(T)$ әдетте $\alpha_l(T) = \alpha_V(T) / 3$ болып саналады.

Талқыланған мәліметтерді қолдана отырып, керамикалық кристал торларына жоғары қысым мен температураның әсерлері қарастырылған. Сала бағытында зертеу жұмыстары көбейген сайын, қолданыс аясы да кеңейген.

Қолданылған әдебиеттер тізімі

1. A. Erba, On combining temperature and pressure effects on structural properties of crystals with standard ab initio techniques, *The Journal of Chemical Physics*, 2014, №141(12)
2. A. K. Verma, P. Modak, S.V. Rao, B. Godwal, Role of ab initio calculations in high pressure–high temperature studies and material properties, *Journal of Physics and Chemistry of Solids* 2006, №67(9): P. 2222-2229
3. A. A. Maradudin, E. W. Montroll, and G. H. Weiss, *Theory of Lattice Dynamics in the Harmonic Approximation*, Academic, New York, 1963, Vol. 3.
4. R. E. Allen and F. W. De Wette, *Phys. Review*, 1969, №179, P. 873
5. L. L. Boyer, *Physics Review Letter*, 1979, №42, P. 584.