

Теоретическая и прикладная физика выпуск 2 – 2022 год

РЕФЕРАТЫ

УДК 539.89

АНАЛИЗ ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В УГЛЕРОДЕ / Б. А. Надыкто, О. Б. Надыкто, А. Б. Надыкто // ВАНТ. Сер. Теоретическая и прикладная физика. 2022. Вып. 2. С. 3–13.

Анализ фазовых превращений графит-алмаз, проведенный в данной работе с использованием универсального уравнения состояния, учитывающего изменение электронной структуры, показывает, что при комнатной температуре и давлении около 20 ГПа (по нашим расчетам ~22 ГПа) происходит электронный фазовый переход, который является обратимым и исчезает при разгрузке, так как он не сопровождается изменениями кристаллической структуры. Наблюдаемое превращение графита в алмазоподобное состояние, вероятно, связано с тем, что именно при этих условиях энергия внешних электронов атомов углерода в сжатом графите становится равной энергии внешних электронов атомов углерода в растянутом алмазе, что обеспечивает возможность электронного фазового перехода $2p^2$ (графит) в $2s2p^2$ (алмаз). При более сильном сжатии алмаз становится стабильным, а графит – метастабильным. Основной причиной перехода графит-алмаз при комнатной температуре, вероятно, является инфракрасное тепловое излучение, что подтверждается анализом низкотемпературных экспериментов и резким уменьшением времени перехода с повышением температуры, наблюдаемым в экспериментах при более высоких температурах. Вывод о сильной зависимости времени электронного фазового перехода графит-алмаз t от интенсивности инфракрасного теплового излучения или температуры ($t \sim T^{-3}$) может быть независимо подтвержден в экспериментах по статическому сжатию углерода (графита) при криогенных температурах, когда интенсивность теплового излучения резко уменьшается и, следовательно, время перехода сильно увеличивается. Для того чтобы обеспечить возможность перестройки кристаллической структуры, необходимо увеличить подвижность атомов углерода, что может быть достигнуто выдержкой сжатых образцов при более высокой температуре или созданием сильных сдвиговых напряжений. Показано, что ударно-волновое сжатие первоначально спрессованной смеси тонкодисперсного алмазного порошка и чистого углерода (графита, фуллерена и др., возможно также углеводородов) может привести к значительному увеличению размеров кристаллов алмаза. Углерод (графит или другие «мягкие формы» углерода) при давлении выше 100 ГПа за фронтом ударной волны переходит в алмазоподобную фазу, нагретую до более высокой температуры, чем температура сжатого алмазного порошка. Благодаря высокой теплопроводности алмаза, температуры частиц алмазного порошка и алмаза, образованного за счет высокого давления и температуры за фронтом ударной волны из графита или другого «мягкого» углерода, связывающего частицы алмазного порошка, выравниваются, и, таким образом, более крупный кристалл алмаза образуется из нескольких частиц алмазного порошка и углеродного связующего. В случае статического сжатия более крупные алмазы могут быть образованы из частиц алмазного порошка и углеродной связки за счет больших сдвиговых напряжений в углеродной связке, создаваемых на границе контакта углерод-алмаз, что сильно увеличивает скорость диффузии атомов

углерода к поверхности частиц алмазного порошка.

УДК 535.375.5; 539.89

УНИВЕРСАЛЬНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ОТ ДАВЛЕНИЯ ЧАСТОТЫ КОЛЕБАНИЯ АТОМОВ В ТВЕРДОМ ТЕЛЕ И СДВИГ ЧАСТОТЫ ПРИ КОМБИНАЦИОННОМ РАССЕЙЯНИИ СВЕТА / Б. А. Надыкто, О. Б. Надыкто, А. Б. Надыкто // ВАНТ. Сер. Теоретическая и прикладная физика. 2022. Вып. 2. С. 14–31.

В статье получено аналитическое решение уравнения для колебаний атома в сжатой ячейке Вигнера–Зейтца. Для частоты колебаний в зависимости от степени сжатия $\sigma = \rho/\rho_0$ получено уравнение $\omega(\sigma) = \omega_0(3\sigma^{4/3} - 2\sigma)^{1/2}$, где индекс 0 относится к несжатому состоянию $\sigma = 1$. Используя зависимость давления от степени сжатия $P(\sigma)$ в параметрическом виде получена зависимость $\omega(P) = \omega(\sigma(P))$. Сравнение теоретических кривых $\omega(P)$ для алмаза, BN, BP, Si, SiC, GaP, InP, AlN, GaN, InN, ZnO и Ge показывает очень хорошее согласие во всей области экспериментальных условий. Оно доказывает, что теория является простым и эффективным инструментом для изучения зависимости $\omega(P)$ и других важных свойств твердых тел, и полезной альтернативой моделям полиномиальной экстраполяции и феноменологическим приближениям, обычно используемым для зависимости рамановского сдвига от давления.

Получены приближенные явные аналитические зависимости $P(\omega)$ и $\omega(P)$: $P/B_0 = 0,326586((\omega/\omega_0)^{3.1} - 1)$ и $\omega/\omega_0 = (1 + 3,062 P/B_0)^{1/3.1}$, с высокой точностью описывающие эксперимент. Из них видно, что часто используемое квадратичное разложение $\omega = \omega_0 + aP + bP^2$ явно неприменимо при $P \geq B_0/3$. Полученные уравнения полезны также при анализе энергии колебаний атомов в твердых телах, полученных методом неупругого рассеяния нейтронов и методом неупругого резонансного ядерного рассеяния рентгеновского излучения.

УДК 519.6; 533.9

ПРЯМОЕ 3D ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАЗВИТИЯ НЕУСТОЙЧИВОСТИ И ТУРБУЛЕНТНОГО ПЕРЕМЕШИВАНИЯ В ТЕЧЕНИИ СО СДВИГОМ СКОРОСТИ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ / С. И. Глазырин, М. Ю. Егужова, В. А. Жмайло, В. П. Стаценко // ВАНТ. Сер. Теоретическая и прикладная физика. 2022. Вып. 2. С. 32–50.

Численно исследуется развитие неустойчивого сдвигового течения идеально проводящей плазмы в магнитном поле. Расчеты проведены по 3D методике ТРЭК – МГД. Начальное поле задавалось постоянным во всей счетной области. Рассматривались две задачи: а) поле параллельно скорости; б) поле нормально к поверхности скачка скорости (раздела сред). Результаты расчетов сравниваются с соответствующими результатами расчетов без магнитного поля и анализа по модифицированной $k - \varepsilon$ модели.

А B S T R A C T

THE ANALYSIS OF GRAPHITE-DIAMOND PHASE TRANSFORMATIONS / B. A. Nadykto, O. B. Nadykto, A. B. Nadykto // VANT. Ser.: Theoret. i prikl. fizika. 2022, N 2. P. 3–13.

The analysis of graphite-diamond phase transformations carried out in this work using the universal equation of state, which accounts for

changes in the electronic structure, shows that at the room temperature and at the pressure of about 20 GPa (~22 GPa, according to our calculations), an electronic phase transition occurs, which is reversible and disappears upon unloading due to not being accompanied by changes in the crystalline structure. The observed transformation of graphite into a diamond-like state is likely to occur due to the fact that it is under these conditions that the energy of external electrons in carbon atoms in compressed graphite becomes equal to the energy of external electrons of carbon atoms in stretched diamond, thus providing a possibility of the $2p^2$ (carbon) to $2s2p^2$ (diamond) electronic phase transition. At a higher compression, diamond becomes stable, while graphite is metastable. The main reason for the graphite-diamond transition at room temperature is, likely, an infrared thermal radiation and this is confirmed by the analysis of low-temperature experiments and sharp decrease in transition times with an increasing temperature observed in experiments at elevated temperatures. The conclusion that there is a strong dependence of the graphite-diamond electronic phase transition time t on the intensity of infrared thermal radiation, or temperature T ($t \sim T^{-3}$) can be independently validated in experiments on static compression of carbon (graphite) at cryogenic temperatures, when the intensity of thermal radiation drastically decreases and, hence, the transition time greatly increases. In order to provide a possibility for the crystalline structure rearrangement, it is necessary to enhance the mobility of carbon atoms, which can be achieved by holding the compressed samples at a higher temperature, or by creating strong shear stresses. We show that the shock-wave compression of an initially compacted mixture of fine diamond powder and pure carbon (graphite, fullerene and others, also possibly hydrocarbons) may lead to a significant increase in the size of diamond crystals. Carbon (graphite or other "soft forms" of carbon) at the pressure above 100 GPa behind the shock wave front transforms to a diamond-like phase heated to a higher temperature than that of the compressed diamond powder particles. Due to the high thermal conductivity of diamond, the temperatures of the diamond powder particles and diamond formed due to the high pressure and temperature behind the shock wave front from the graphite, or other "soft" carbon binding equalize, and thus, a larger diamond crystal is formed from multiple diamond powder particles and carbon binding. In the case of static compression, larger diamonds can be formed from diamond powder particles and carbon binding due to large shear stresses in carbon binding created at the carbon-diamond contact boundary that drastically increases the diffusion rate of carbon atoms to the diamond particle surface.

UNIVERSAL PRESSURE DEPENDENCE OF THE ATOM VIBRATION FREQUENCY IN A SOLID AND FREQUENCY SHIFT IN RAMAN SCATTERING OF LIGHT RADIATION / B. A. Nadykto, O. B. Nadykto, A. B. Nadykto // VANT. Ser.: Theoret. i prikl. fizika. 2022, N 2. P. 14–31.

The paper presents an analytical solution of the equation describing vibrations of an atom in a compressed Wigner-Seitz cell. For the oscillation frequency depending on the compression ratio $\sigma = \rho/\rho_0$, the equation $\omega(\sigma) = \omega_0 (3\sigma^{4/3} - 2\sigma)^{1/2}$ is obtained, where index 0 refers to the uncompressed state $\sigma = 1$. Using the dependence of pressure on the compression ratio $P(\sigma)$ the dependence $\omega(P) = \omega(\sigma(P))$ is obtained in parametric form. A comparison of the theoretical $\omega(P)$ curves for diamond, BN, BP, Si, SiC, GaP, InP, AlN, GaN, InN, ZnO, and Ge shows a very good agreement over the entire range of experimental conditions. It proves that the theory is a simple and effective tool for studying the dependence of $\omega(P)$ and other important properties of solids and a useful alternative to the polynomial extrapolation models and phenomenological approximations commonly used for the pressure dependence of the Raman shift. Approximate explicit analytical dependences $P(\omega)$ and $\omega(P)$ are obtained: $P/B_0 = 0,326586((\omega/\omega_0)^{3,1} - 1)$ and $\omega/\omega_0 = (1 + 3,062 P/B_0)^{1/3,1}$, which describe the experiment with a high accuracy. It can be

seen from them that the often used quadratic expansion $\omega = \omega_0 + aP + bP^2$ is clearly inapplicable for $P > B_0/3$. The equations obtained are also useful in the analysis of the energy of atomic vibrations in solids obtained by the method of inelastic neutron scattering and the method of inelastic resonant nuclear X-ray scattering.

3D DIRECT NUMERICAL SIMULATION OF THE DEVELOPMENT OF INSTABILITY AND TURBULENT MIXING IN A FLOW WITH VELOCITY SHEAR IN THE MAGNETIC FIELD / S. I. Glazyrin, M. Yu. Eguzhova, V. A. Zhmaylo, V. P. Statsenko // VANT. Ser.: Theoret. i prikl. fizika. 2022, N 2. P. 32–50.

The development of an unstable shear flow of perfectly conducting plasma in the magnetic field is numerically studied. Computations were carried out using the 3D TREK-MGD code. The initial field was constant over the entire computational domain. Two problems were considered: a) the field is parallel to velocity; b) the field is normal to the surface of velocity jump (interface of media). The results obtained are compared to the corresponding results of the computations without the magnetic field and the results of the analysis using the modified k- ϵ model.