



Моделювання фазових переходів в політипах BN з перших принципів



В. І. Іващенко¹, Н. Ю. Павлова², В. І. Шевченко¹

¹Інститут проблем матеріалознавства НАН України, Київ

²Український державний університет імені Михайла Драгоманова, Київ

Анотація

Методом першопринципної молекулярної динаміки проведено моделювання зумовлених температурою та тиском фазових переходів в політипах BN. Виявлено ряд структурних перетворень та пояснено їх механізми.

Вступ

BN характеризується високою твердістю, зносостійкістю, теплопровідністю, хімічною стійкістю та іншими параметрами [1]. Серед галузей застосування BN є і ядерна енергетика [2].

Метод

Для моделювання використовувався пакунок програм *Quantum ESPRESSO*, а для ідентифікації атомних структур — програма *ISOTROPY*.

Обговорення результатів

На рис. 1 зображено результати моделювання політипу h-BN. Приблизно на 300 фс відбувається фазовий перехід h-BN → w-BN. Аналіз з використанням просторового розподілу стискуваності та фононних спектрів пов'язує цей перехід з конденсацією фононної моди Γ_{-2} .

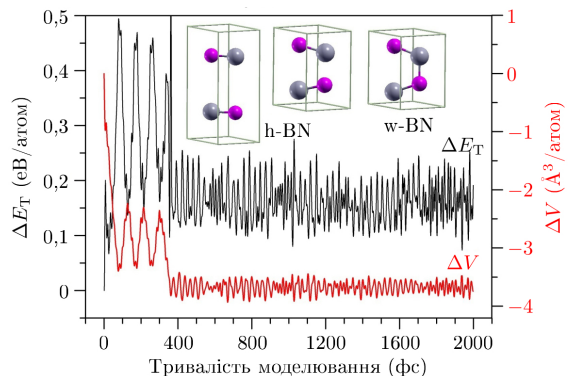


Рис. 1. h-BN → w-BN при $T = 300$ К і $P = 50$ ГПа.

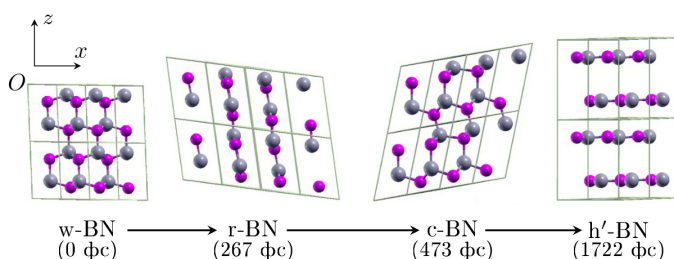


Рис. 2. w-BN → h'-BN при $T = 2500$ К і $P = 0$.

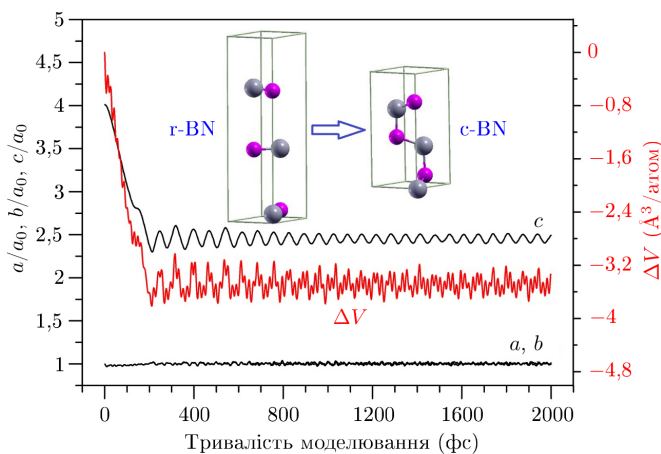


Рис. 3. r-BN → c-BN при $T = 300$ К і $P = 23$ ГПа.

Послідовність фазових перетворень, отримана при моделюванні політипу w-BN, зображено на рис. 2.

Результати моделювання 6-атомної комірки політипу r-BN представлені на рис. 3. Аналіз показує, що перетворення r-BN → c-BN є наслідком колапсу оптичної фононної моди Γ_1 .

Висновки

Методом першопринципної молекулярної динаміки встановлено такі фазові перетворення в політипах BN:

- 300 К, 50 ГПа: h-BN → w-BN,
- 2500 К, 0 ГПа:
w-BN → r-BN → c-BN → h'-BN,
- 300 К, 23 ГПа: r-BN → c-BN.

h-BN → w-BN і r-BN → c-BN спостерігались експериментально [3], а w-BN → h'-BN — ні.

Література

1. A. Biswas et al. *Appl. Mater. Today* 30 (2023)101734.
2. L. Jiao et al. *Polymer Degradation and Stability* 190 (2021) 109643.
3. L. Vel et al. *Materials Science and Engineering:B* 10 (1991) 149.