

Особо важные результаты.

полученные в 2017 году при выполнении научно-исследовательской темы:
«Разработка теоретических методов для прогнозирования теплофизических свойств веществ в макро- и нано-размерном состояниях при давлениях и температурах, присущих внешнему ядру Земли»

Номер госрегистрации темы: **01201360102**.

Научный руководитель темы: гнс, дф-мн **Магомедов М.Н.**

Исходя из парного межатомного потенциала Ми-Леннард-Джонса и модели кристалла Эйнштейна, получены, как уравнение состояния, так и барические зависимости решеточных свойств для различных полиморфных модификаций кремния и германия. Показано, что для полупроводниковой фазы лучшие результаты получаются при использовании межатомного потенциала упругого типа, а для металлизированных фаз лучшие результаты получаются при использовании межатомного потенциала пластичного типа, который имеет глубину потенциальной ямы намного меньше. Рассчитаны барические зависимости решеточных свойств вдоль изотермы 300 К и оценены скачки свойств при фазовом переходе из полупроводниковой фазы со структурой алмаза в металлическую фазу со структурой β -Sn как для кремния, так и для германия. Показано, что наибольшее изменение при фазовом переходе металлизации претерпевает коэффициент теплового расширения: на 80.9 % для Si, и на 42.7 % для Ge.

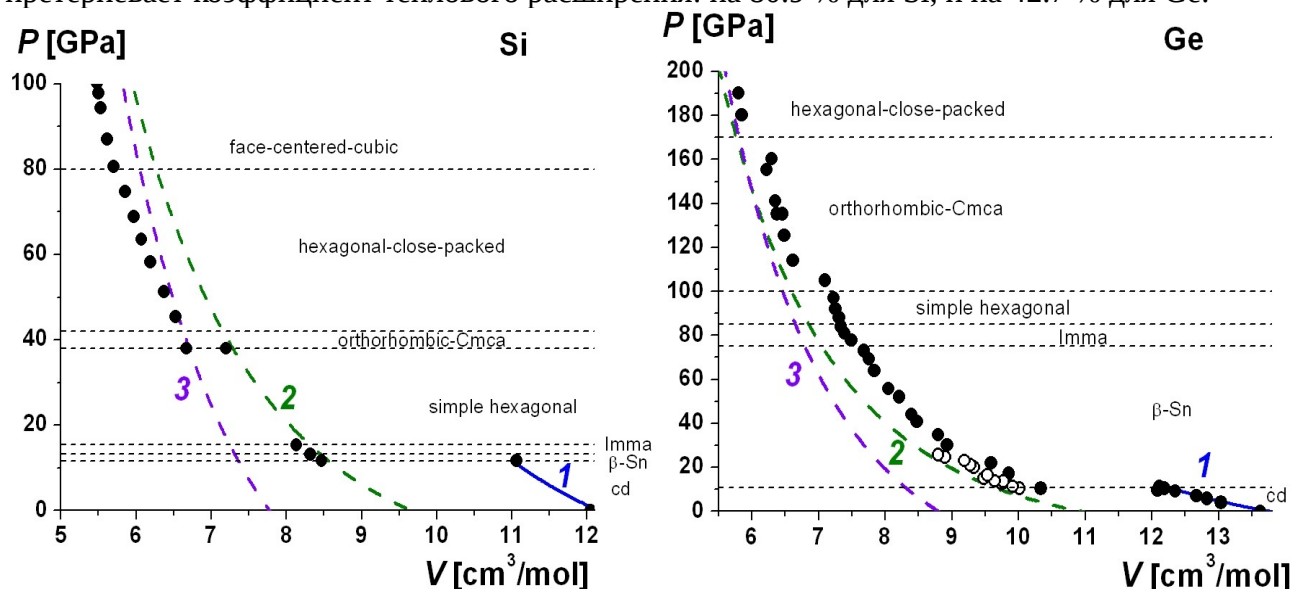


Рис 1. Уравнение состояния трех полиморфных модификаций Si (слева) и Ge (справа). Точки экспериментальные данные. Линиями показаны наши расчеты зависимости $P(V)$ вдоль изотермы $T = 300$ К: 1 – уравнения для полупроводниковой алмазной (cd) фазы, 2 и 3 – уравнение для металлизированных структур β -Sn и гексагональной плотной упаковки (hcp).

Результаты опубликованы в работах:

1. Магомедов М.Н. Об уравнении состояния и свойствах различных полиморфных модификаций кремния и германия // **Физика Твёрдого Тела**. – 2017. – Т. 59, № 6. – С. 1065 – 1072. [M.N. Magomedov. State Equations and Properties of Various Polymorphous Modifications of Silicon and Germanium // **Physics of the Solid State**, 2017, Vol. 59, No. 6, p. 1085–1093. DOI: 10.1134/S1063783417060142]
2. Magomedov M.N. On the Polymorphism of Silicon and Germanium // **Journal of Physics: Conference Series**. – 2017. – V. 918. – № 012031. – P. 1 – 5. DOI: 10.1088/1742-6596/918/1/012031
3. Магомедов М.Н. О полиморфизме кремния и германия // «Необратимые процессы в природе и технике»: труды Девятой Всероссийской конференции. – Россия, г. Москва, МГТУ им. Н.Э. Баумана 25 – 27 января 2017 г. (В двух частях) Ч. I. – М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана. –

2017. – 276 с. (С. 43 – 46.)

4. Магомедов М.Н. О металлизации ковалентной связи при растяжении или сжатии кристалла полупроводника // «Химическая термодинамика и кинетика»: Материалы седьмой Международной научной конференции. – Россия, г. **Великий Новгород**, 29 мая – 2 июня 2017 г. – Великий Новгород: Изд-во «Новгородский технопарк», 2017. – 393 с. (С. 171 – 172.)
5. Магомедов М.Н. О металлизации ковалентной связи при сжатии или растяжении кристалла полупроводника // VII Международная конференция «Деформация и разрушение материалов и наноматериалов». – Россия, г. **Москва**, 7 – 10 ноября 2017 г. / Сборник материалов. – М.: ИМЕТ РАН, 2017. – 951 с. (С. 261 – 263.)

Научный руководитель темы:

(Подпись)

Магомедов М.Н., гнс
(Ф.И.О., должность)