

รหัสโครงการ: MRG4880190

ชื่อโครงการ: โครงการการเปลี่ยนสถานะทางโครงสร้างภายใต้สภาวะรุนแรง

ชื่อนักวิจัย: รองศาสตราจารย์ ดร.อุดมศิลป์ ปิ่นสุข

ภาควิชาฟิสิกส์ คณะวิทยาศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

E-mail Address: pinsook@gmail.com

ระยะเวลาโครงการ: 2 ปี

บทคัดย่อ

การวิจัยนี้ได้ใช้การคำนวณแบบ แอบ อินิซิ และการจำลองพลศาสตร์โมเลกุลเพื่อตรวจสอบการเปลี่ยนสถานะภายใต้อุณหภูมิสูงของไททาเนียมสถานะของแข็ง การหลอมเหลวภายใต้ความดันและอุณหภูมิสูงของโซเดียม และการหลอมเหลวภายใต้อุณหภูมิต่ำมากๆ ของโลหะเหลว $\text{Li}(\text{NH}_3)_4$ ผู้วิจัยได้ระบุค่าอุณหภูมิการเปลี่ยนสถานะของการเปลี่ยนสถานะแบบ bcc-hcp ของไททาเนียม ได้คำนวณแผนภูมิการเปลี่ยนสถานะของโซเดียม และหาสมบัติต่างๆ ที่จุดหลอมเหลวของ $\text{Li}(\text{NH}_3)_4$ ผลที่ได้สอดคล้องกับผลการทดลอง นอกจากนี้ การคำนวณสามารถอธิบายกลไกการเปลี่ยนสถานะระดับจุลภาคได้เป็นอย่างดี

คำหลัก: การเปลี่ยนสถานะทางโครงสร้าง การคำนวณแบบ แอบ อินิซิ การหลอมเหลว สภาวะรุนแรง

Project Code: MRG4880190

Project Title: Structural phase transitions under extreme conditions

Investigator: Associate Professor Dr.Udomsilp Pinsook

Department of Physics, Faculty of Science, Chulalongkorn University

E-mail Address: pinsook@gmail.com

Project Period: 2 year

Abstract

We have used *ab initio* calculations and Molecular dynamics simulations to examine the phase transitions in solid titanium under high temperature, solid sodium under high pressure and high temperature, and liquid metal $\text{Li}(\text{NH}_3)_4$ under very low temperature. We can determine the transition temperature of bcc-hcp in Ti, and the phase diagram of Na under extreme conditions, and the melting point of liquid metal $\text{Li}(\text{NH}_3)_4$. Most results are in good agreement with the experimental values. Furthermore, the calculation results provide explanations for the structural phase transition in Ti and for the anomalously low melting point in Na under high pressure, recently reported by experiments.

Keywords: Structural phase transitions, *ab initio* calculations, Melting, Extreme conditions