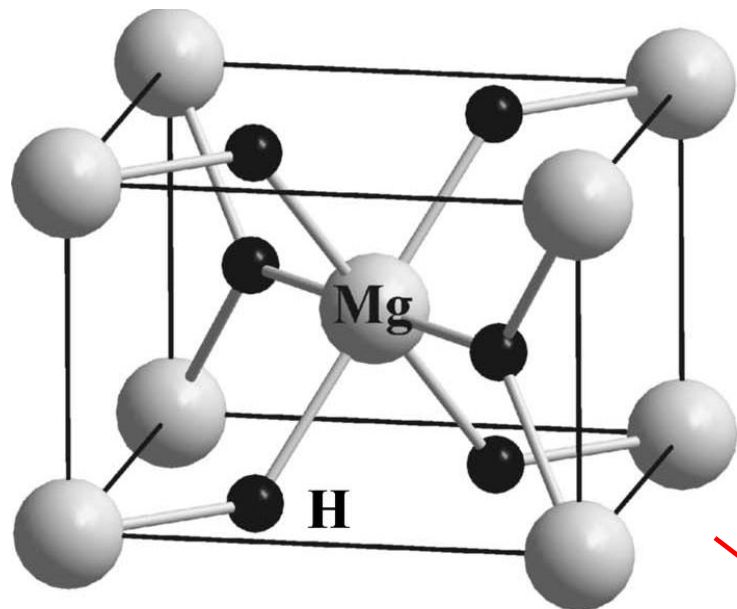


Динамика решетки дигидрида магния

Ефимченко В.С.

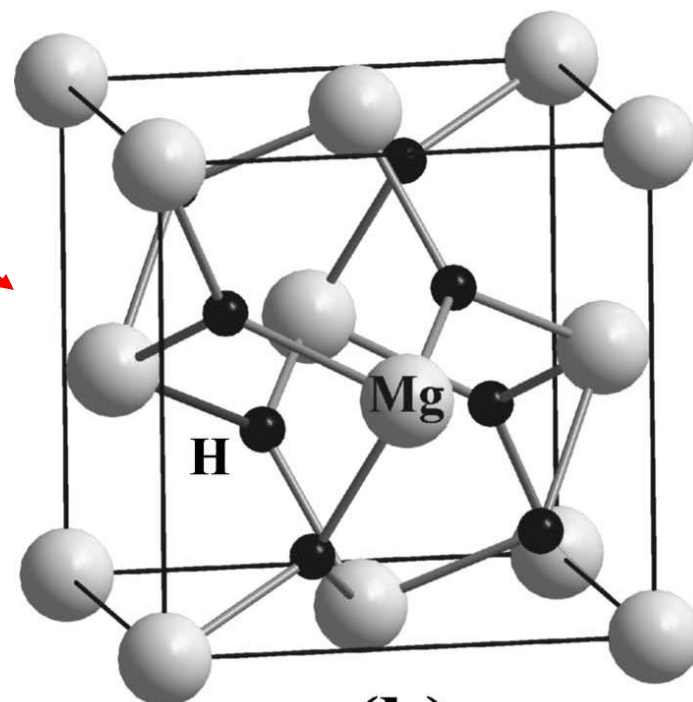
Институт физики твердого тела РАН, 142432 Черноголовка



Альфа фаза
 $P4_2/mnm$ (136)
 $a=4.51731(5)$ Å
 $c=3.02038(4)$ Å

(a)

50 кбар, 475°C



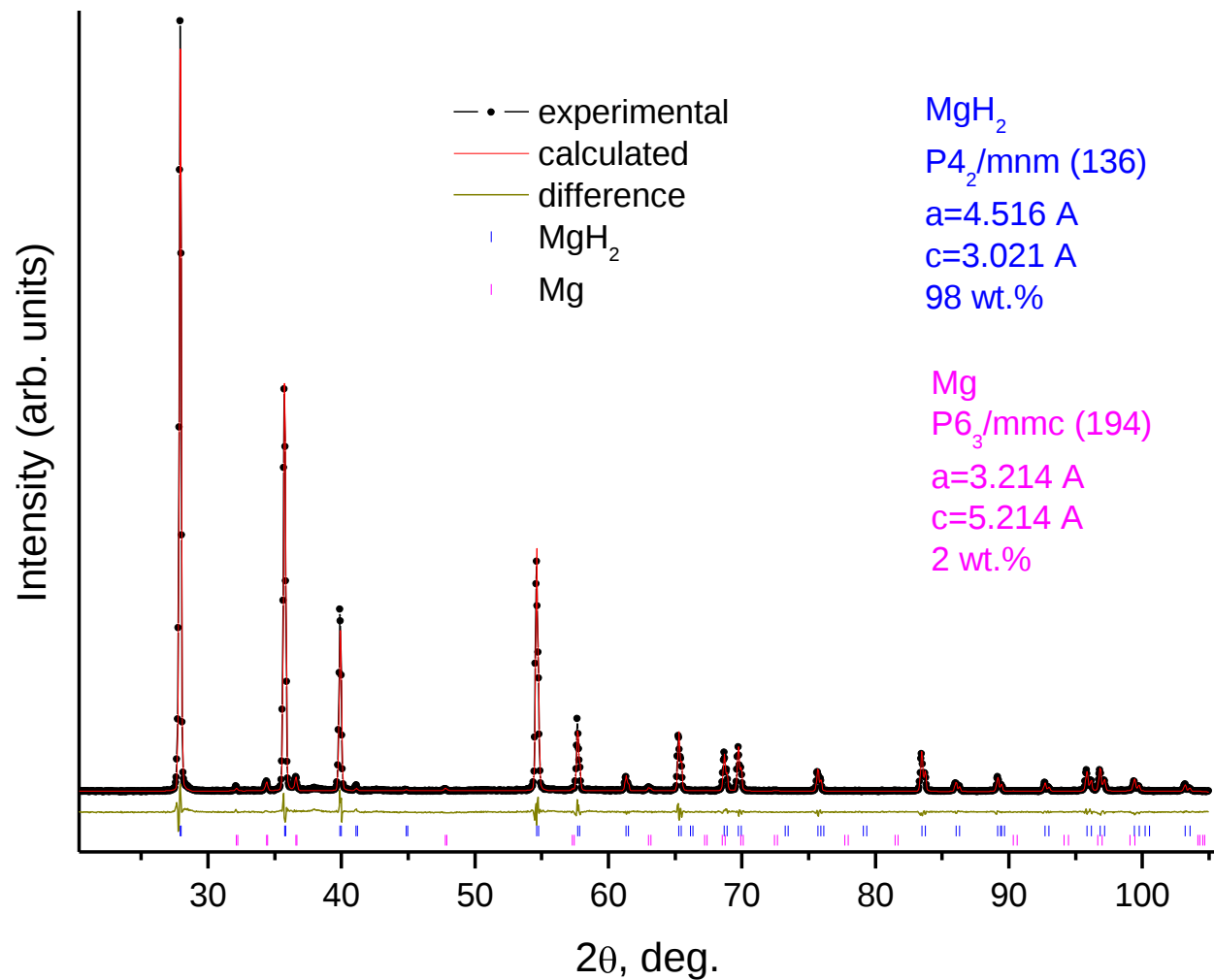
Гамма фаза
 $Pbcn$ (60)
 $a=4.52129(8)$ Å
 $b=5.4403(1)$ Å
 $c=4.93510(8)$ Å

(b)

Цели работы

1. Синтез образца с максимальным содержанием гамма фазы дигидрида магния
2. Получение и исследование спектров неупругого рассеяния нейтронов для альфа и гамма фаз
3. Получение зависимостей $C_v(T)$ и $C_p(T)$ для альфа фазы дигидрида магния.

Дифрактограмма исходного образца MgH_2



Свинцовая пломба



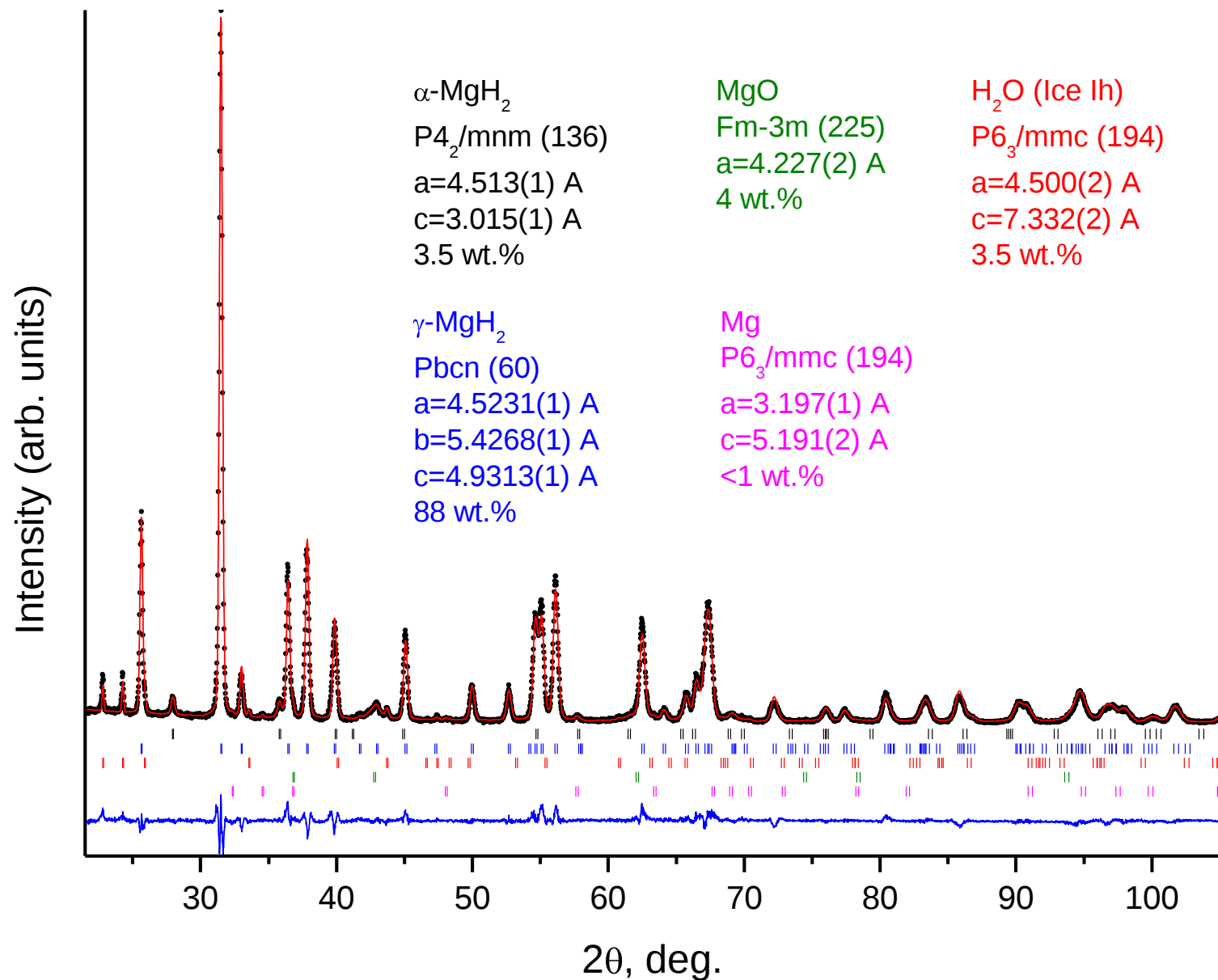
Медная ампула

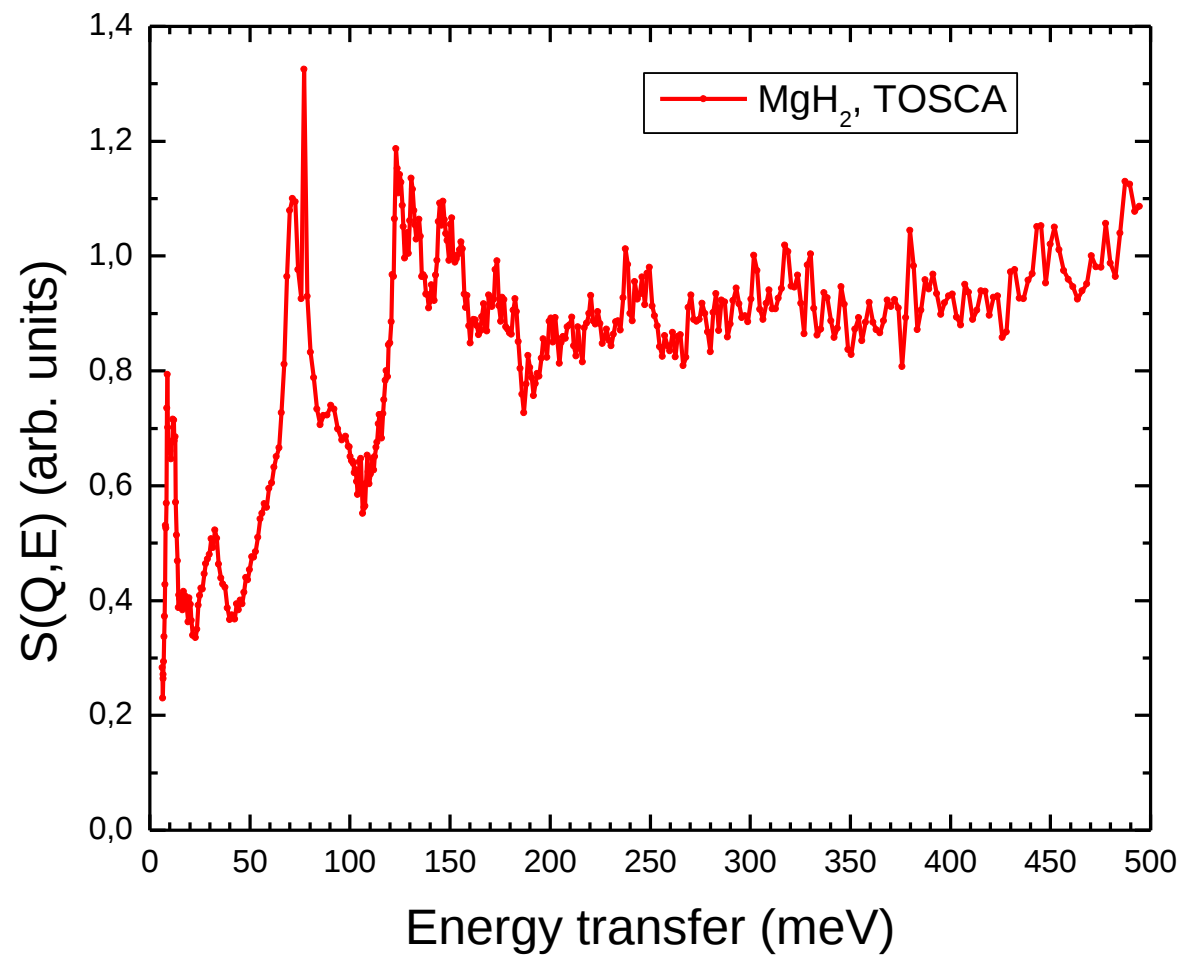


Образец MgH_2

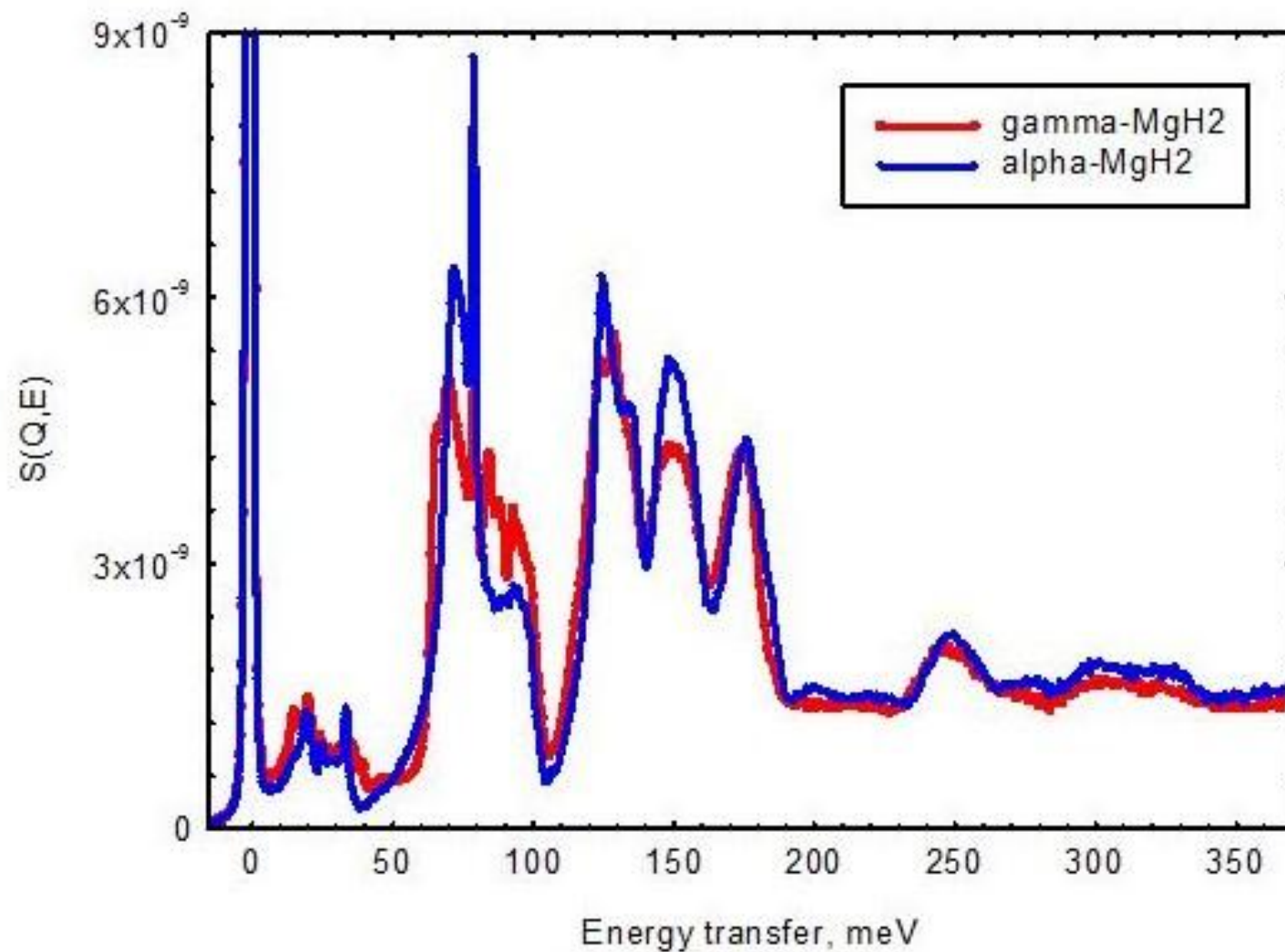


Дифрактограмма образца MgH_2 подвергнутого термобарической обработке при 50 кбар и 450 С

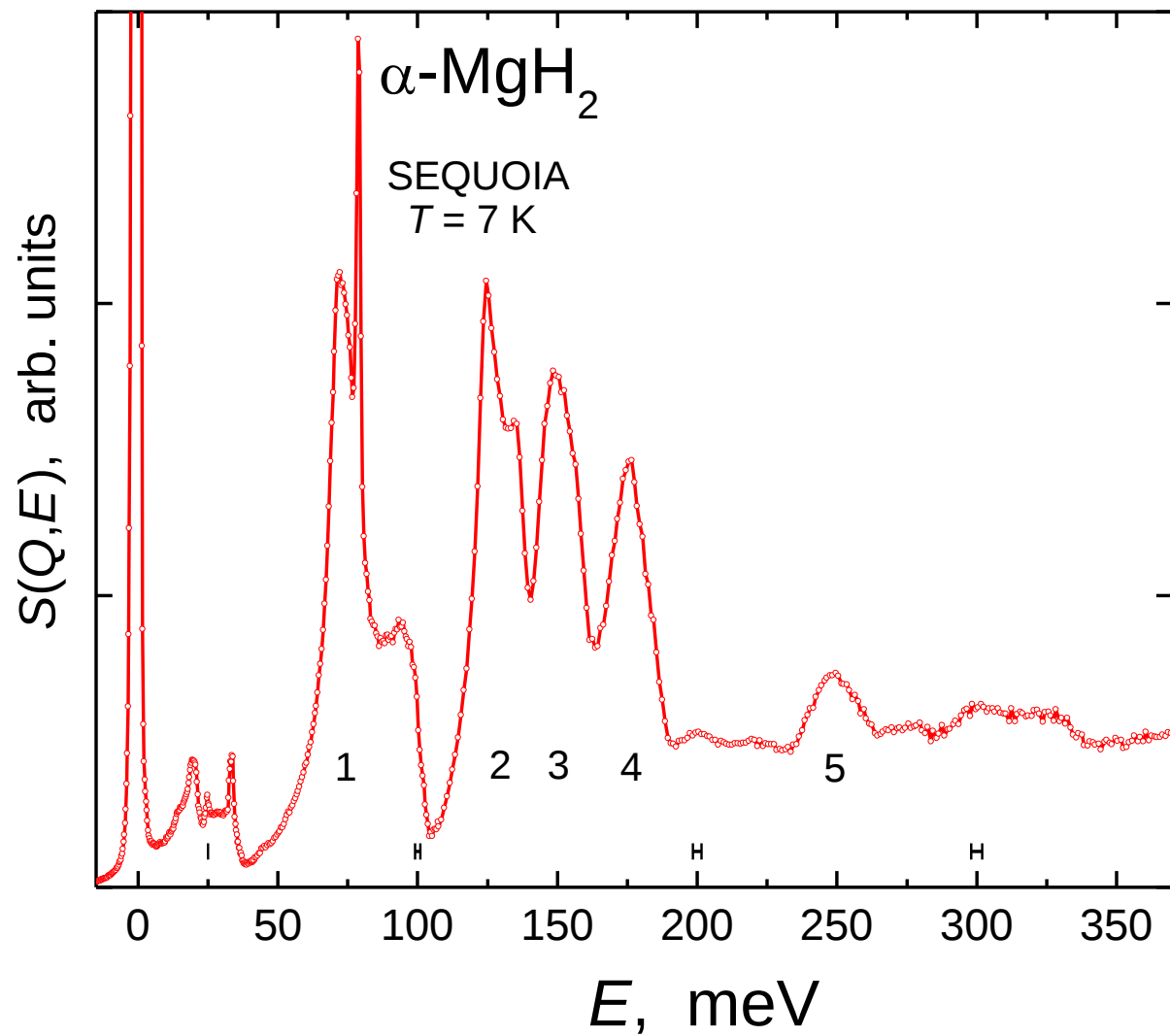




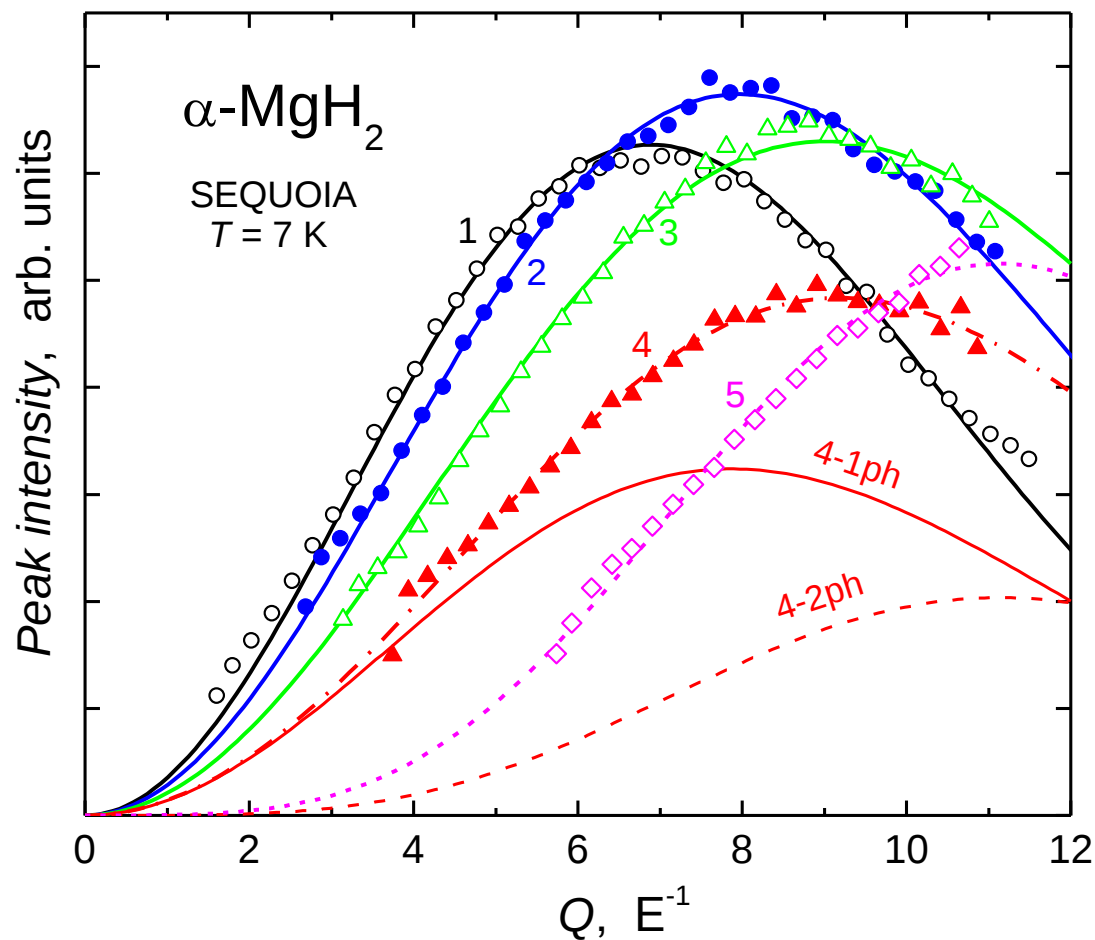
Спектр неупругого рассеяния нейтронов для α -MgH₂ и γ -MgH₂



Спектр неупругого рассеяния нейтронов для α -MgH₂



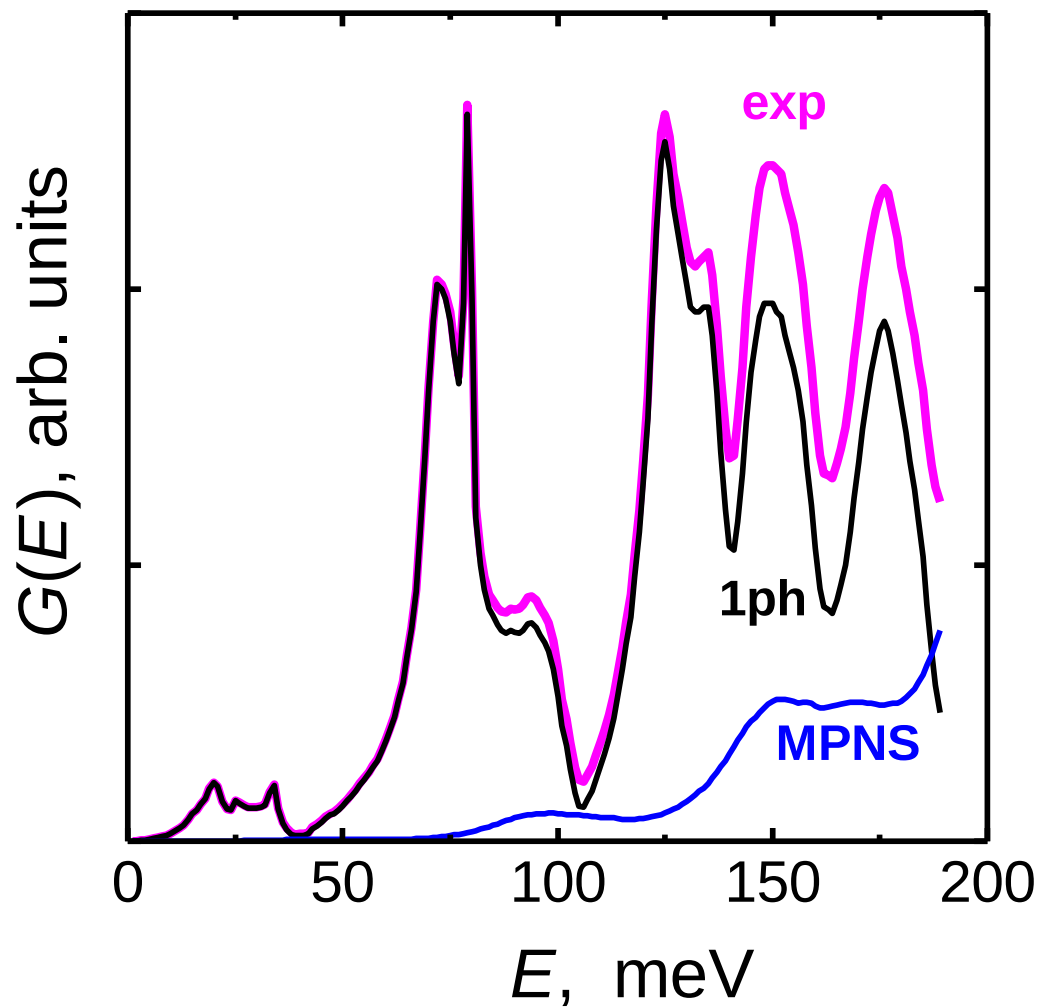
Зависимость интенсивности пиков от величины переданного импульса



$$I(Q) = (a \cdot Q^2 + b \cdot Q^4) \exp(-u_{\text{H}}^2 Q^2),$$

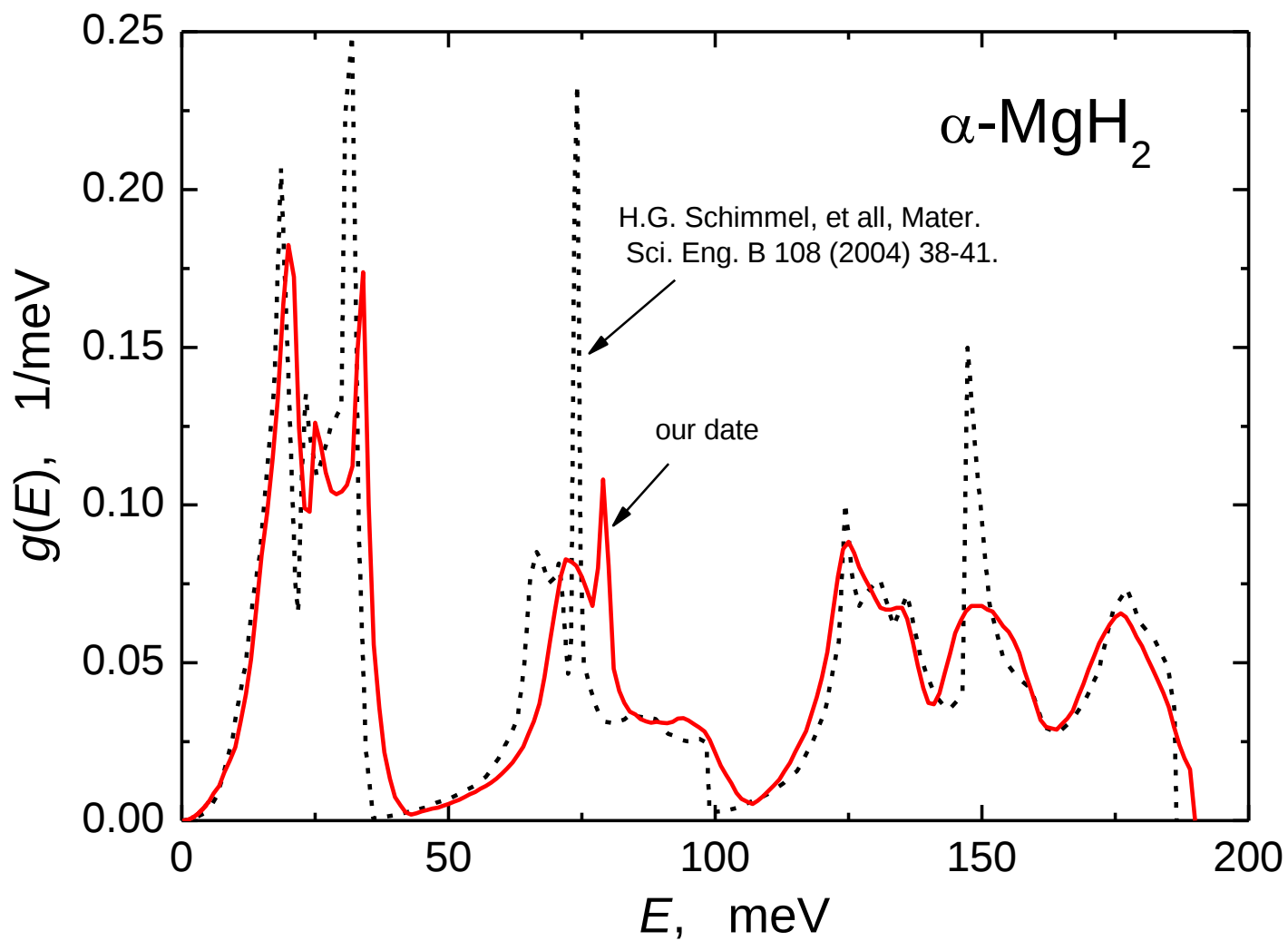
where a , b and u_{H} are the fitting parameters. The $a \cdot Q^2$ and $b \cdot Q^4$ factors characterize, respectively, the one- and two-phonon scattering contributions with the same value of the mean squared displacement of hydrogen atoms.

Спектр обобщенной плотности состояний α -MgH₂

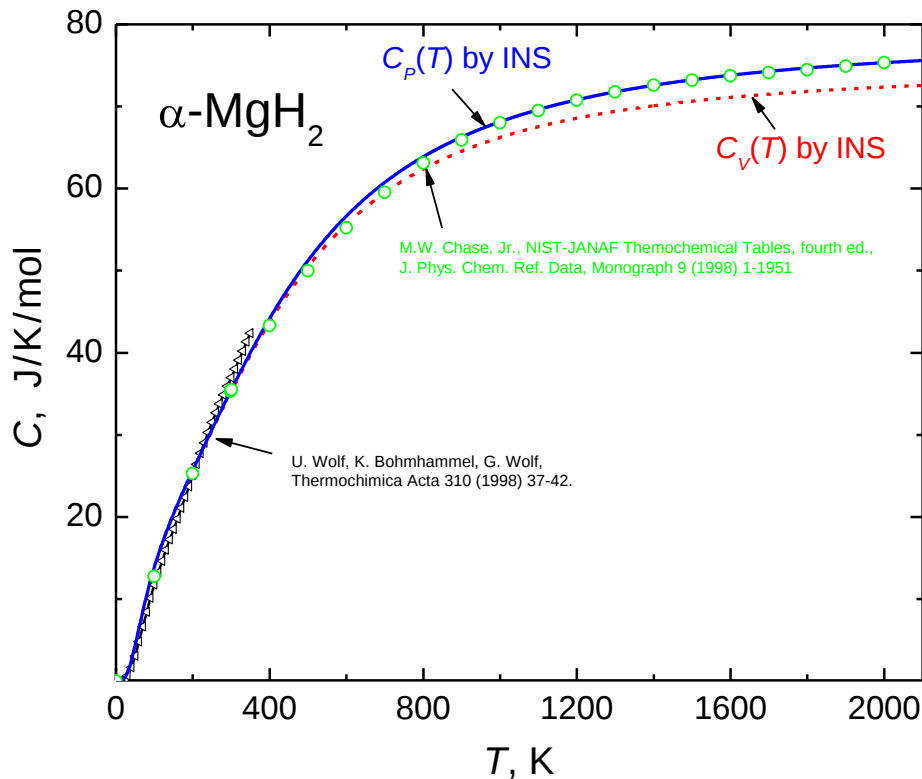


$$G(E) = \frac{S(Q, E)E \cdot \exp(u_H^2 Q^2)}{Q^2 [n(E, T) + 1]}$$

Фононная плотность состояний



Зависимости теплоемкости от температуры для α -MgH₂



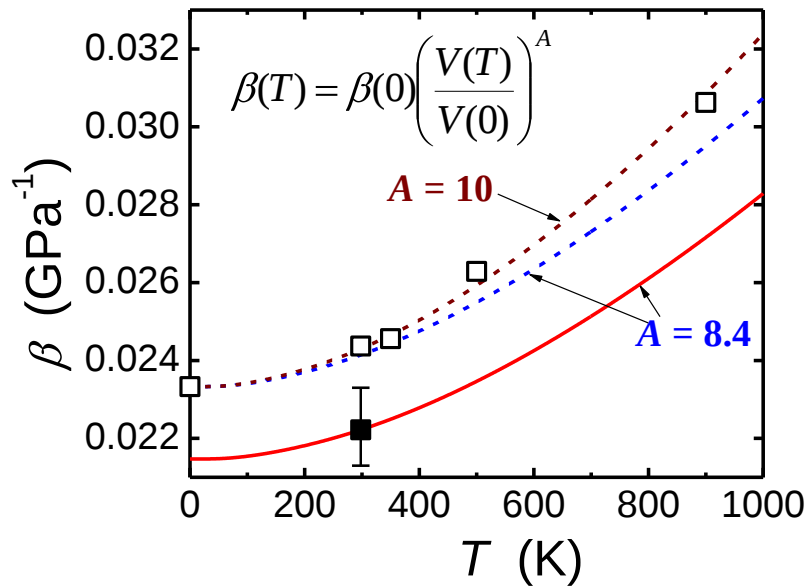
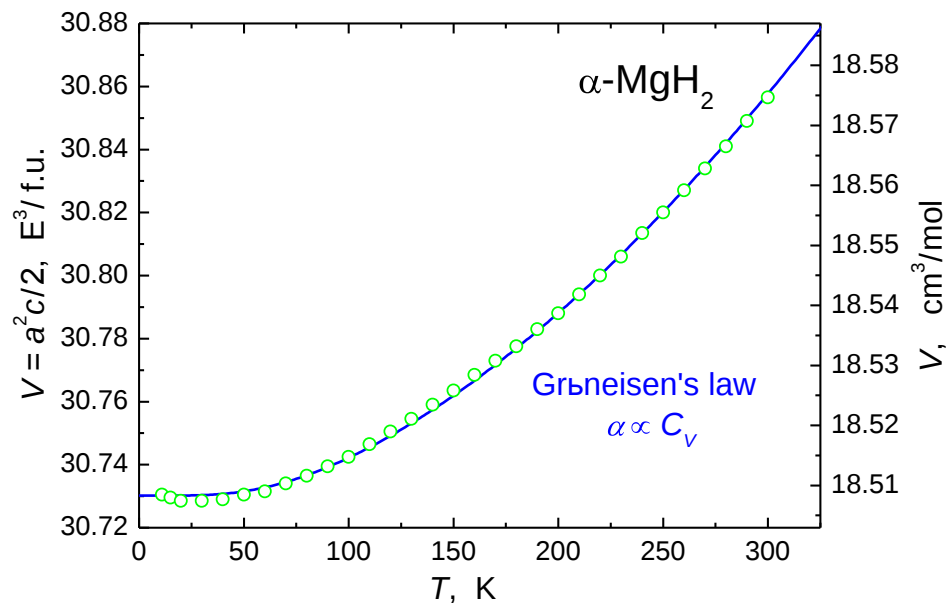
$$\Delta C_{PV}(T) = C_P - C_V = \alpha^2 TV / \beta$$

$$\Delta C_{PP}(T) \approx \frac{T(1 - V_0/V)}{\beta} \left(\frac{\partial^2 V}{\partial T^2} \right)_P$$

where $V(T)$ is the molar volume of α -MgH₂; $\alpha = (1/V)(\partial V/\partial T)_P$ is the coefficient of volume expansion and $\beta = -(1/V)(\partial V/\partial P)_T$ is the isothermal compressibility.

$$C_V(V_0, T) = R \int \left(\frac{E}{k_B T} \right)^2 g(E) n(E, T) \frac{1}{e^{E/k_B T} + 1} dE$$

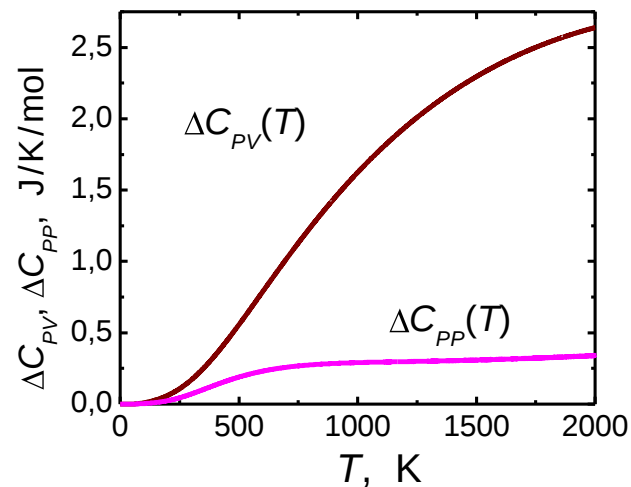
where $V_0 = V(7 \text{ K}) \approx V(0 \text{ K})$ is the molar volume of α -MgH₂ at a temperature of 7 K of the INS measurement; $R = 8.314 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \text{K}^{-1}$ is the universal gas constant and $k_B = 1.381 \cdot 10^{-23} \text{ J} \cdot \text{K}^{-1}$ is the Boltzmann constant.



$$\alpha(T) = B \cdot C_V(T) \quad (1/\beta)(\partial\beta/\partial T)_P \approx 8.4\alpha$$

$$V(T) = V(0) \exp \left[B \int_0^T C_V(\tau) d\tau \right]$$

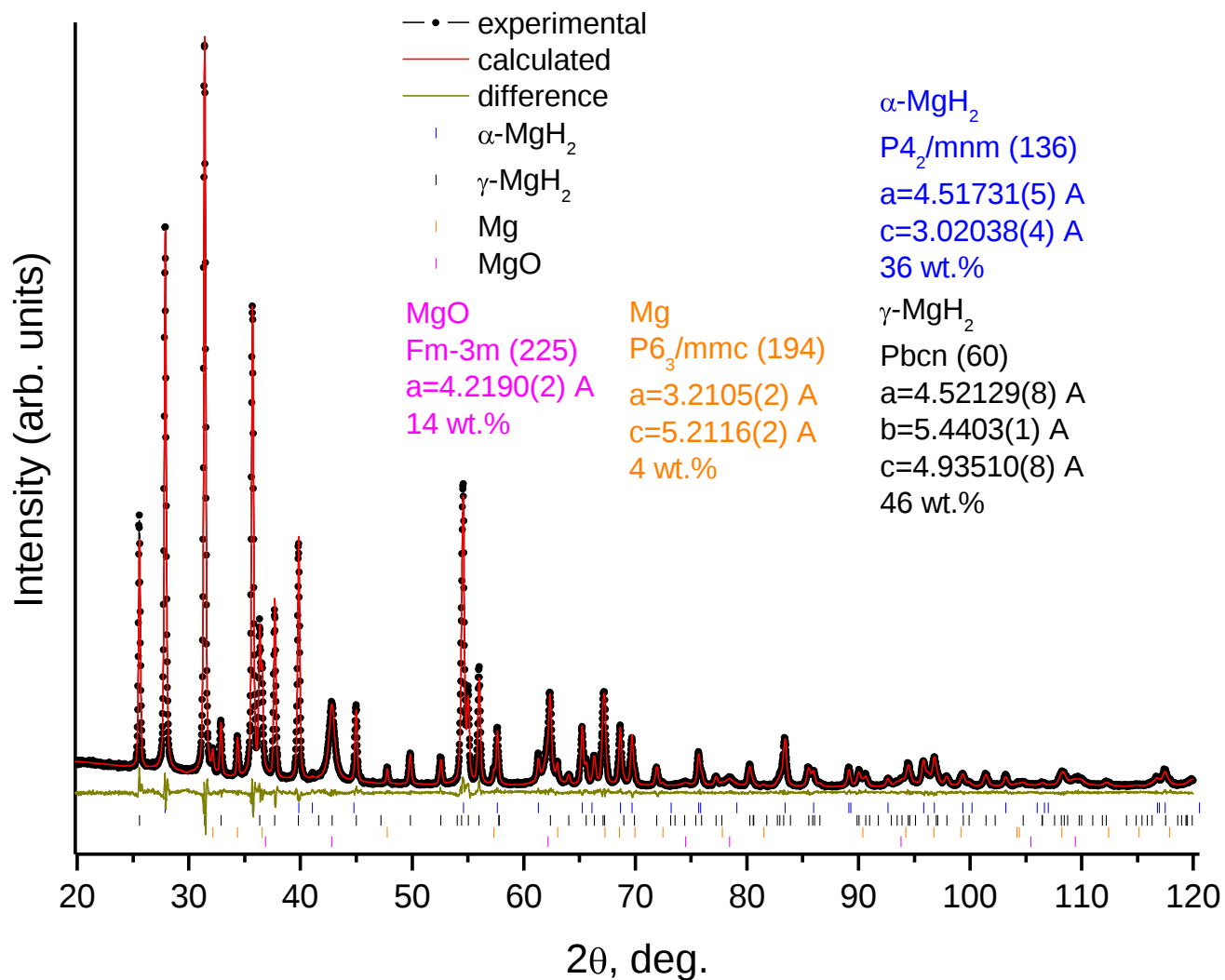
$$\beta(T) = \beta(0) [V(T)/V(0)]^{8.4}$$



Выводы

- Получен образец с максимальным содержанием гамма фазы дигидрида магния (~90 вес.%)
- На спектрометре SEQUOIA изучены спектры альфа и гамма фаз дигидрида магния. Построена плотность фононных состояний $g(E)$ для альфа фазы.
- На основе полученной $g(E)$ построены температурные зависимости теплоемкостей C_V и C_P для α - MgH_2 . Зависимость $C_P(T)$ хорошо согласуется с литературными данными при температурах до 2000 К.

MgH₂ 50 κбар, 450°C



Using the relation [12]

$$\left(\frac{\partial C_P}{\partial P}\right)_T = -T \left(\frac{\partial^2 V}{\partial T^2}\right)_P,$$

the changes in C_P caused by the increase in V with increasing temperature can be estimated as:

$$\begin{aligned} \Delta C_{PP}(T) &= C_P(V, T) - C_P(V_0, T) \\ &\approx \left(\frac{\partial C_P}{\partial P}\right)_T (P_0 - P) \approx TP \left(\frac{\partial^2 V}{\partial T^2}\right)_P, \end{aligned}$$

where $V(T)$ is given by equation (4), $V_0 = V(9 \text{ K}) \approx V(0 \text{ K})$ at $P_0 = 1 \text{ atm}$ and P is the pressure that reduces the sample volume from $V(T)$ to V_0 . The $P(T)$ dependences can be obtained from the equation of state

$$V(P, T) \approx V(T)(1 - \beta P) \quad (9)$$

under the condition that $V(P, T) = V_0$.