

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

## Abstract

190368

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.