

ОБ ОДНОЙ НЕУСТОЙЧИВОСТИ КОНДЕНСИРОВАННОГО ВЕЩЕСТВА ПРИ ВЫСОКОМ ДАВЛЕНИИ

Карпенко С.В.*, Темроков А.И., Калмыкова М.Б.

НИИ ПМА КБНЦ РАН, Нальчик

*sv_karpenko@mailru.com

В последние годы, в связи с бурным развитием нанотехнологий, весьма актуальными стали исследования свойств кристаллических частиц с размерами порядка нескольких сотен ангстрем в условиях сильного сжатия. В таких объектах весьма существенна роль поверхностной энергии. В равновесных условиях как поверхностная энергия, так и поверхностное натяжение являются заведомо положительными величинами. При увеличении внешнего давления, как известно, поверхностная энергия уменьшается [1]. Естественно предположить, что при некотором значении давления $P = P_{crit}$ поверхностная энергия обращается в нуль, а при дальнейшем увеличении давления поверхностная энергия должна стать отрицательной.

В рамках метода функционала электронной плотности был проведен расчет поверхностной энергии σ щелочно-галлоидных кристаллов

$$\sigma(hkl) = \frac{1}{2} n_0(hkl) \sum_i (\beta^{(i)} - 1) W_\infty^{(i)}.$$

В результате расчета была получена зависимость поверхностной энергии кристалла от межчастичного расстояния. Используя экспериментальные данные по зависимости постоянной решетки от давления, можно оценить величину P_{crit} , при котором $\sigma = 0$. Для щелочно-галлоидных кристаллов было получено значение $P_{crit} \approx 0.3\text{--}0.6$ Мбар.

Интересным является вопрос об интерпретации состояния вещества с отрицательной поверхностной энергией. Если $\sigma > 0$, то, как известно, частицы поверхностного слоя стремятся «проникнуть» внутрь объема вещества, уменьшая свободную поверхность. Если же $\sigma < 0$, то, наоборот, частицы, находящиеся внутри объема вещества, будут стремиться выйти в поверхностный слой, так как увеличение свободной поверхности приведет в такой ситуации к уменьшению полной энергии кристалла. В результате кристаллическая структура теряет стабильность и происходит разрушение образца. Можно предположить, что если рубеж $P = P_{crit}$ будет пройден достаточно «быстро», то можно ожидать взрывного «расплескивания» материала образца.

1. Темроков А.И. // Дисс... доктора физ.-мат. наук. Нальчик, 1982. 239 с.
2. Карпенко С.В., Кяров А.Х., Темроков А.И. // Известия ВУЗов. Физика. 2002. №8. С.39.