

## 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  $\sigma$  щелочно-галогидных 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-галогидных 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.