структурные превращения бора В МЕГАБАРНОм цикле ударное сжатие-разгрузка

Молодец А.М.

Институт проблем химической физики РАН, г. Москва, Россия, [molodets@icp.ac.ru](mailto:molodets@icp.ac.ru)

Исследования физики бора при высоких давлениях интенсивно ведутся на протяжении многих лет (см. ссылки в [1 – 4]). На сегодняшний день установлено, что твёрдая фаза бора существует в форме нескольких кристаллических модификаций, а также в аморфном состоянии. Главной структурной единицей большинства аллотропов твёрдой фазы бора является борный икосаэдр с двенадцатью атомами в вершинах и двадцатью треугольными гранями. Область более высоких давлений ~100 ГПа (мегабарная область) вызывает повышенный интерес в связи с тем, что в этой экстремальной области происходит изменение структурной единицы «низкого» давления - борного икосаэдра с образованием «атомарной» фазы alpha-B(Ga). До недавнего времени исследования превращений бора в мегабарной области носили теоретический характер, но в последнее время появились экспериментальные работы с использованием статических давлений алмазных наковален с подогревом [1] и с использованием высоких давлений и температур ударноволнового сжатия. В данном докладе представлены некоторые результаты исследования структурных превращения бора при высоких давлениях ударного сжатия.

Измерения электропроводности образцов поликристаллического бора β-B106 при ударном сжатии [2] дают основание полагать, что в области динамических давлений 90 – 110 ГПа и температур 700 – 800 К ударноволнового сжатия поликристаллический бор beta-B106 испытывает аморфизацию. Это предположение находит подтверждение в экспериментах по сохранению ударносжатых образцов бора [3]. Рентгенодифрактометрическое изучение образцов поликристаллического beta-ромбоэдрического бора после ударноволнового воздействия до давлений 115(5) ГПа и температур ~800 – 1400 К выявляет наличие аморфной фазы amB. Однако, помимо аморфной составляющей, продукты превращения содержат ещё и тетрагональную модификацию бора T-B192. В целом, сопоставляя результаты [1] и наши результаты, можно констатировать следующее. Продукты превращения ромбоэдрической фазы beta-B106 в области существования «неикосаэдрической» фазы бора при одинаковом давлении 115(5) в статических и динамических условиях оказываются различными: в [1] наблюдается образование «неикосаэдрической» модификации alpha–B(Ga), а в [3] конечными продуктами превращения оказываются amB и T-B192. В данной работе обсуждается детализация маршрута превращения бора при ударном сжатии. На начальном участке фазовой траектории ступенчатого ударного сжатия до 10 – 30 ГПа ромбоэдрический бор beta-B106 остаётся в метастабильном состоянии не только при пересечении линий равновесия beta-B106↔alpha-B12 и alpha-B12↔gamma-B28, но и в области существования ромбического бора gamma-B28 при 30 – 90 ГПа. Однако в дальнейшем происходит аморфизация beta-B106→amB, где amB «икосаэдрический» (в смысле [4]) аморфный бор A1-B106. Затем в волне разгрузки при давлениях 20 – 30 ГПа и температурах ~800 К часть аморфного бора A1-B106 превращается в beta-B106 и, наконец, при давлениях 10 ГПа происходит заключительное превращение beta-B106→T-B192.

Работа выполнена при поддержке РФФИ грант № 19-08-00561

Литература

1. Chuvashova I. et.al., Physical Review B. 95, 180102(R) (2017).
2. Молодец А.М. и др. Физика твердого тела. 59, вып. 7, 1379 (2017).
3. Молодец А.М. и др. ПЖЭТФ.108, вып. 6, 430 (2018).
4. An Q. et al., Physical Review B. 95, 064108 (2017).