нИЗКОТЕМПЕРАТУРНОЕ ПЛАВЛЕНИЕ КАРБИДА БОРА В МЕГАБАРНОЙ ОБЛАСТИ ДАВЛЕНИЙ УДАРНОГО СЖАТИЯ

Молодец А.М.

Институт проблем химической физики РАН, molodets@icp.ac.ru

Карбид бора сочетает ряд высоких служебных характеристик – это низкая плотность, высокая (при атмосферном давлении) температура плавления, высокая твёрдость, химическая инертность, электропроводность, что обуславливает его успешное использование в броневых конструкциях, в производстве химически стойких материалов, функциональных материалов полупроводниковой электроники, атомной энергетики и др.

Исследованию разнообразных свойств карбида бора в области высоких давлений и температур, в том числе в экстремальных условиях ударного сжатия посвящена обширная научная литература (см. [1,2] и ссылки в них). Было установлено, что при динамическом сжатии ударная адиабата карбида бора содержит изломы, которые свидетельствовуют, во-первых, о высоком (~15 ГПа) пределе текучести и, во-вторых, о протекании фазового превращения в области давлений 40-50 ГПа. В работах по молекулярно-динамическому моделированию ударного сжатия кристаллического карбида бора [3,4] было показано, что в этой области давлений одномерного ударного сжатия происходит резкое изменение угла в трёхатомных углеродно-борных цепочках, соединяющих икосаэдры бора.

В контексте предлагаемого доклада следует подчеркнуть, что до последнего времени внимание исследователей было сосредоточено в области давлений ударного сжатия не превышающей ~90 ГПа. Однако учёт новых экспериментальных данных [5] для области 200-800 ГПа позволяет предположить [6] существование ещё одного ярко выраженного излома, обусловленного плавлением карбида бора при ударном сжатии в диапазоне 95<*P*<125 ГПа. В докладе представлено обоснование и развитие этой гипотезы. При этом дано полуэмпирическое описание термодинамики ударного сжатия карбида бора и его расплава вплоть до мегабарных давлений и показано, что в рассмотренном диапазоне высоких давлений 0-400 ГПа предложенное термодинамическое описание карбида бора соответствует эксперименту в пределах его погрешности. Кроме этого, построена кривая плавления карбида бора при давлениях 0-120 ГПа, которая, обладая отрицательной кривизной, прогнозирует его низкотемпературное плавление в области давлений 120 ГПа при температуре 700К. Полученные результаты сопоставляются с современными результатами других авторов. В частности первопринципные молекулярно-динамические расчёты [7] в согласии с [6] дают уменьшение температуры плавления карбида бора в мегабарной области давлений. Расчёты температуры ударного сжатия вдоль ударной адиабаты расплава карбида бора из [7] и [6] также согласуются между собой.

Работа выполнена при поддержке программы фундаментальных исследований Президиума РАН «Конденсированное вещество и плазма при высоких плотностях энергии».

Литература.

[1]. М.Н. Павловский, Физика твёрдого тела 12, вып. 7, 2175 (1970).

[2]. D.E. Grady, J. Appl. Phys. **117**, 165904 (2015).

[3]. P. Korotaev, P. Pokatashkin, A. Yanilkin, Computational Materials Science **121,** 106 (2016).

[4]. DeCarlos E. Taylor, J. Am. Ceram. Soc., **98** [10] 3308 (2015).

[5]. P. A. Sterne, L. X. Benedict, S. Hamel et al., Journal of Physics: Conference Series 717, 012082 (2016).

[6] Молодец А.М., Шахрай Д.В., Голышев А.А. ЖЭТФ, **151**, вып.3 , стр.550-557 (2017)

[7] Shamp A., Zurek E., Ogitsu T., Fratanduono D.E, and Hamel S. “Properties of B4C in the shocked state for pressures up to 1.5 TPa”. PHYSICAL REVIEW B 95, 184111 (2017)