

В.Ю. Долматов, д-р техн. наук¹; **А.П. Возняковский**, д-р хим. наук²; **V. Mullymäki**,
A. Vehanen, PhD³; **А.А. Возняковский**, инж.⁴; **Н.М. Лапчук**, канд. физ.-мат. наук⁵;
В.А. Марчуков, канд. хим. наук¹

¹Федеральное государственное унитарное предприятие «Специальное конструкторско-технологическое бюро «Технолог», г. Санкт-Петербург, Советский пр., д. 33-а, 192076, Россия, e-mail: diamondcentre@mail.ru

²Федеральное унитарное государственное предприятие «НИИ синтетического каучука им. акад. С.В. Лебедева», Россия, 198035, г. Санкт-Петербург, ул. Гапсальская, д. 1

³CarbodeonLtd. Oy, Vantaa, Pakkalankuja 5, 01510, Финляндия

⁴ФТИ им. Иоффе, Россия, 194021, Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26

⁵Белорусский государственный университет, Физический факультет, Беларусь, 220030 Минск, ул. Бобруйская, 5

ИНФРАКРАСНАЯ СПЕКТРОМЕТРИЯ МОДИФИЦИРОВАННЫХ ДЕТОНАЦИОННЫХ НАНОАЛМАЗОВ.

В работе проанализированы ИК-спектры детонационных наноалмазов (ДНА), полученных из различных взрывчатых веществ (ВВ): из сплава тротила и гексогена; тетрила; тетрила с гексогеном и тройной смеси: смеси тротила, гексогена и тетрила. Полученные ДНА были обработаны: водным аммиаком при 220 °С, в газовой среде (воздух и аргон) при 430 °С. Показано, что высокотемпературное воздействие на различные ДНА приводит к идентичному результату – все образцы наноалмазов, вне зависимости от ВВ и характера модификации, имеют сильные полосы поглощения азотных примесных центров (826, ~1100, 1255, 1328, 1558 см⁻¹). Кроме того, у всех образцов присутствуют ярко выраженные полосы поглощения адсорбированной воды (1625–1637 см⁻¹), карбонильной группы (1742–1790 см⁻¹), валентные колебания C_{sp3}-H-группы (2853–2958 см⁻¹) и валентные колебания ОН-группы (3330–3397 см⁻¹).

Ключевые слова: детонационные наноалмазы, тротил, гексоген, тетрил, модификация наноалмазов, инфракрасная спектроскопия, функциональные поверхностные группы, азотные примесные центры.

Введение

При образовании ДНА, в связи с громадным градиентом давления и температуры, образуются кристаллиты алмазов с дефектной структурой, в которой, наряду с вакансиями в кристаллической решетке и разорванными связями, имеются поверхностные включения атомов химических элементов, присутствующих во взрывчатом веществе (ВВ) – С, Н, N, О. Доказанное внутри кристаллическое включение имеет только азот (~2,5% мас.) [1, 2].

Очищенный от неалмазного углерода и основной части неорганических примесей (металлы, их оксиды) ДНА представляет собой порошок серого цвета, который содержит агрегаты первичных частиц наноалмазов (4–6 нм). Агрегаты обладают различным размером (до мм) и имеют различную прочность. Чем меньше размер агрегатов, тем больше энергии требуется для их дальнейшего разрушения.

Водород, азот и кислород молекул ВВ находится в составе поверхностных функциональных групп и сорбированных поверхностью ДНА соединений (СО₂, СО, N₂, Н₂О). Последние могут находиться на доступной поверхности наноалмаза или быть «замурованными» в закрытых порах агрегатов частиц ДНА. Функциональные группы

являються неотъемлемою частиною надмолекулы наноалмаза: их можно удалить, обменять на другие, но они всегда присутствуют на поверхности ДНА.

Эффективность введения ДНА в композиционные материалы (металл-алмазные покрытия, полимеры, топлива, масла и смазки, полированные системы и т. д.) прямо связана с размером агрегатов наноалмаза и равномерностью их распределения в матрице. Для разрушения агрегатов используются механические [3], термохимические [4] и термические [5] методы.

Минимальные затраты по энергии, времени и применяемому оборудованию характерны для термического воздействия на агрегаты ДНА. Последующее применение частично дезагрегированных наноалмазов связано, в том числе, с возможными химическими реакциями матрицы с функциональными группами ДНА. Поэтому весьма важно определить состав функциональных групп на поверхности модифицированных наноалмазов.

ИК-спектры широко использовали для получения данных по функциональным группам поверхности ДНА, полученных исключительно подрывом зарядов из смеси тротила с гексогеном (ТГ) в соотношении ~50/50 [6, 7]. Однако, как правило, в предыдущих работах по ИК-спектрам наноалмазов не прослеживалась их предыстория, а именно – особенности методов их получения, химической очистки, возможность модификации и их влияния спектра ИК. Редко указывали производителей ДНА.

В настоящий момент существует только два способа промышленного получения ДНА – из смесей тротила с гексогеном ~ 50/50 и из тетрила (2,4,6-тринитро-N-метил-N-нитроанилин), разработанный в последнее время [8]. Соответственно, встает вопрос об отличии или тождестве таких наноалмазов. В работе [9] показано, что кристаллическая структура ДНА, полученных из тротил-гексогеновых смесей, тетрила и тройной смеси – тротила, гексогена и тетрила, идентичны. В этой работе решается вопрос о возможной идентичности (или ее отсутствии) функциональных групп на поверхности ДНА, полученных из тех же составов ВВ.

Целью работы являлось определение особенностей ИКС ДНА, полученных из смеси ТГ 50/50 и тетрила (2,4,6-тринитро-N-метил-N-нитроанилин) и подвергнутых различной модификации.

Экспериментальная часть

В качестве объектов исследования использовались детонационные наноалмазы, полученные подрывом тротила с гексогеном (50/50), тетрила (2,4,6-тринитро-N-метил-N-нитроанилин), их смесей и обработанные, после химической очистки, водным аммиаком (температура 200 °С и давление ~ 40 атм) [4], воздухом и аргоном при 430 °С (сухой порошок наноалмазов). Данные об обработке ДНА приведены в табл. 1.

ИК-спектры поглощения регистрировали на приборе *Perkin ElmerSpectrum 100 FT-1R (USA)* в таблетках КВг. Таблетки готовили, перетирая в агатовой ступке порошок КВг и ДНА, взятые в соотношении 100:1 соответственно. Давление прессования соответствовало 250 МПа, толщина таблетки не превышала 0,11 мм. Подготовку образцов и регистрацию спектров осуществлял один и тот же исполнитель.

Таблица 1. Исследованные наноалмазы, производитель ФГУП «СКТБ «Технолог»

№ п/п	Образец ДНА	Метод воздействия
1	2	3
1	Получен подрывом заряда ТГ 50/50 в водной среде	Обработан NH ₄ OH при температуре 220 °С и давлении 40–50 атм [4]
2	Получен подрывом заряда ТГ 50/50 в водной среде	Термообработка при 430 °С на воздухе в течение 2-х часов
3	Получен подрывом заряда тетрила в водной среде	Термообработка при 430 °С на воздухе в течение 2-х часов

Окончание таблицы

1	2	3
4	Получен подрывом заряда из 70% мас. тетрила и 30% мас. гексогена	Термообработка при 430 °С в аргоне в течение 2х часов
5	Получен подрывом заряда из 50% мас. тетрила, 30% мас. тротила и 20% мас. гексогена	Термообработка при 430 °С в аргоне в течение 2х часов

Обсуждение результатов

На рис. 1–5 представлены ИК-спектры исследованных образцов наноалмазов (см. табл. 1).

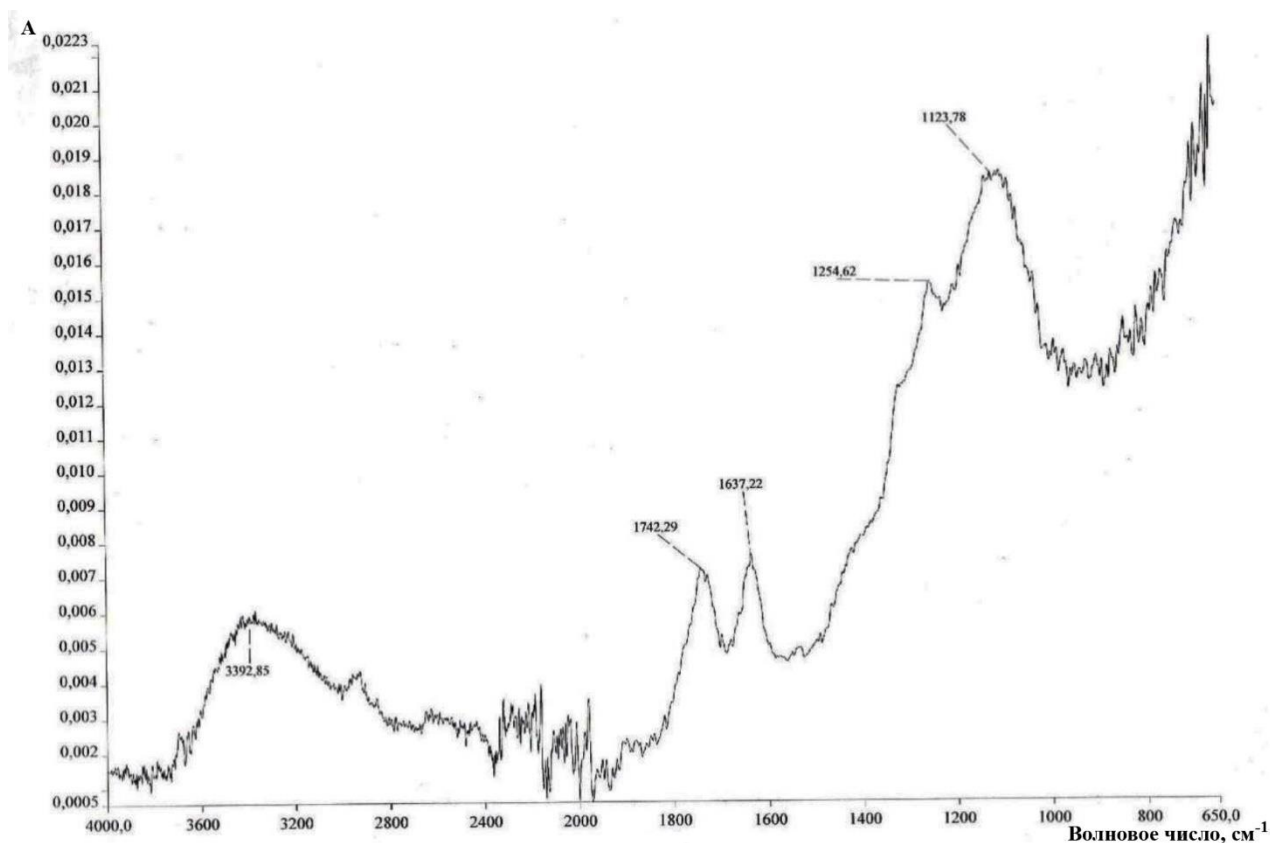


Рис. 1. ИК-спектр тротил-гексогеновых ДНА–ТАН, термообработанных аммиаком при 220 °С (обр. 1, см. табл. 1)

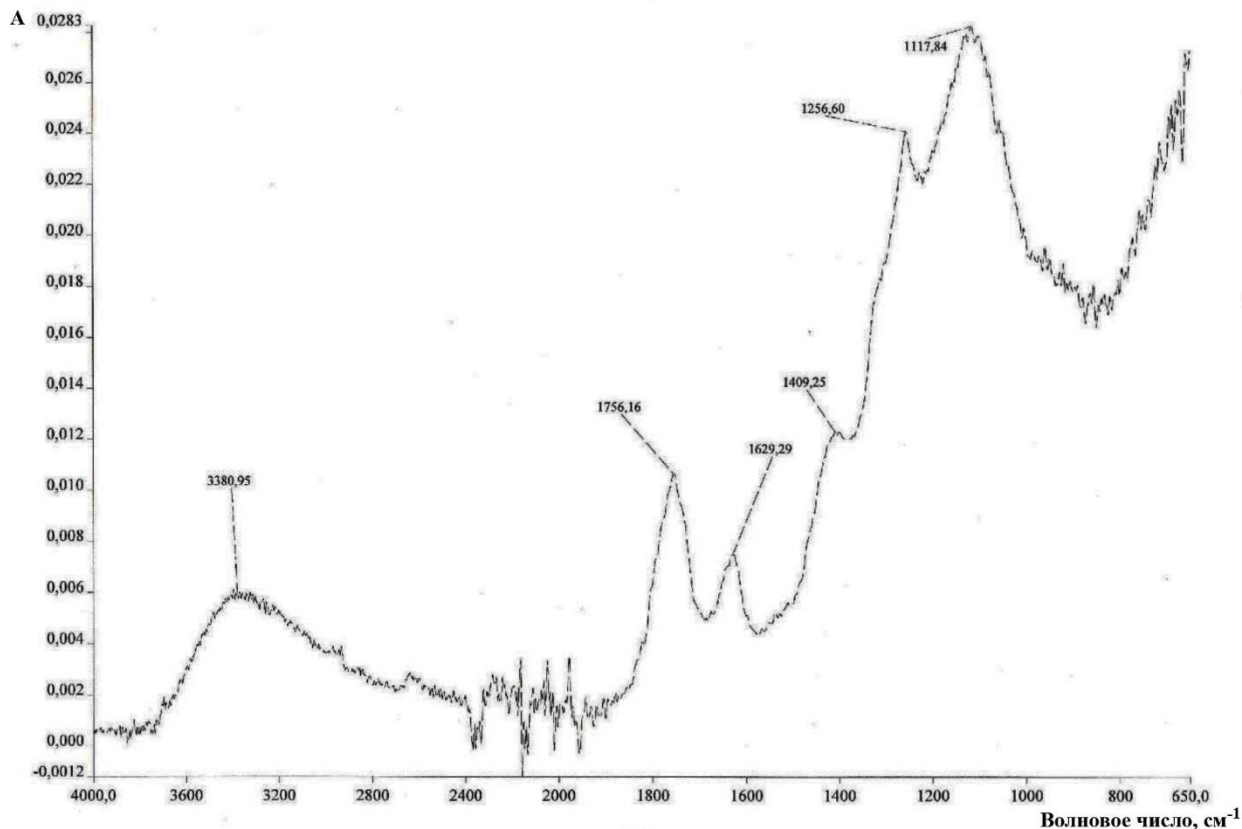


Рис. 2. ІК-спектр тротил-гексогенових ДНА, термообработаних на повітрі при 430 °С (обр. 2, см. табл. 1)

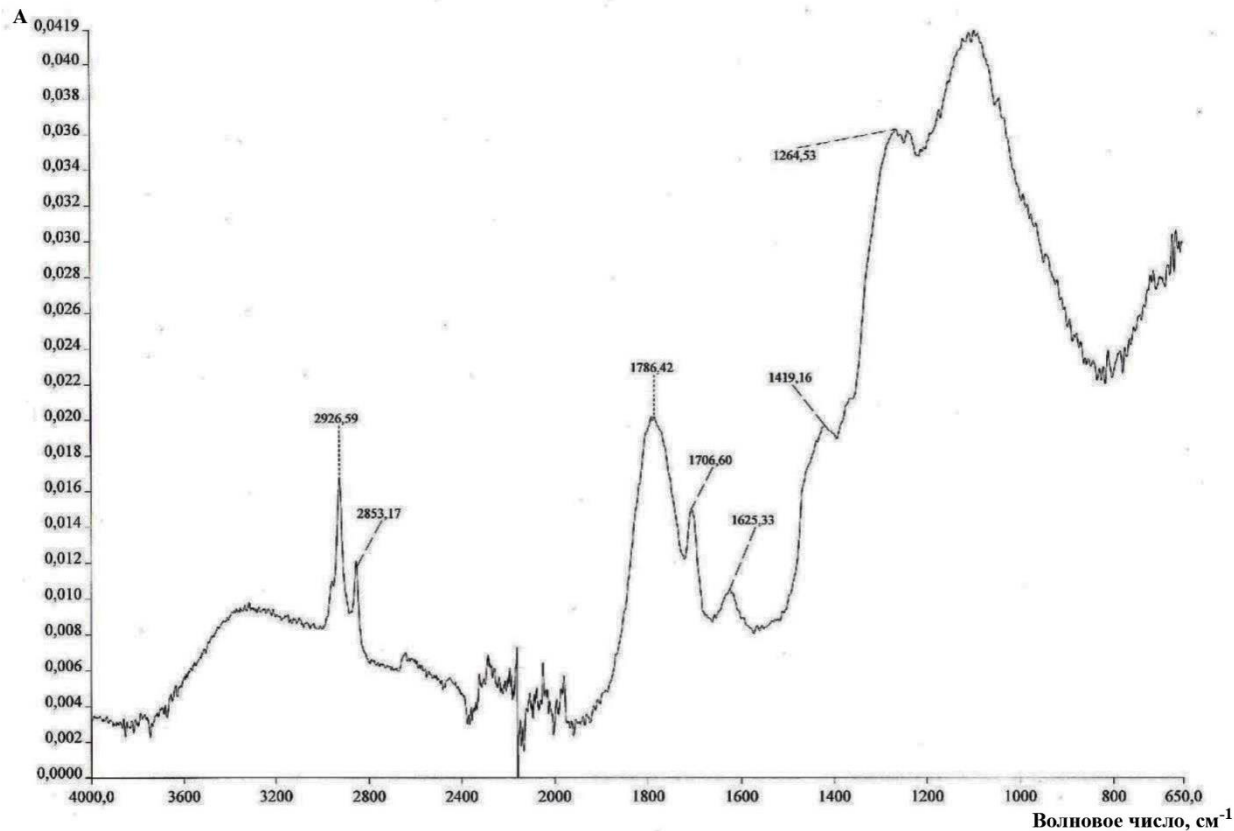


Рис. 3. ІК-спектр тетрилових ДНА, термообработаних на повітрі при 430 °С (обр. 3, см. табл. 1)

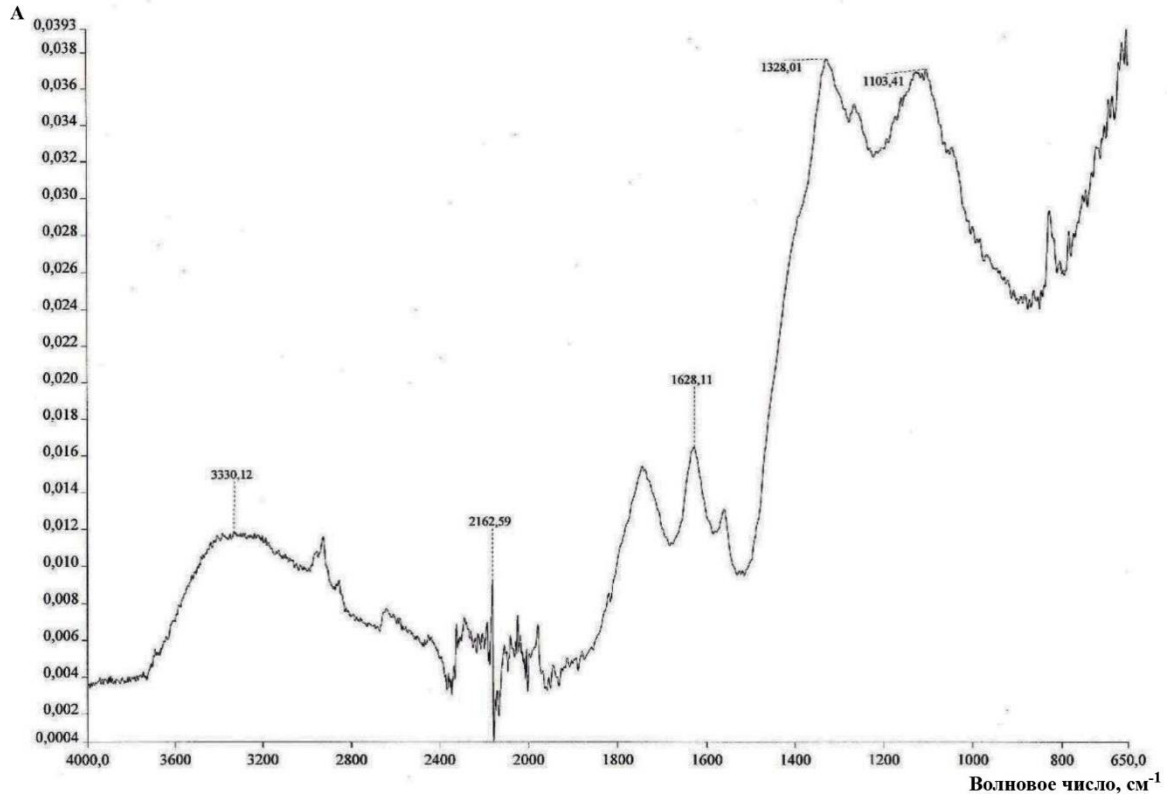


Рис. 4. ИК-спектр ДНА, полученных из бинарного заряда: тетрил – 70% мас., гексоген – 30% мас. (обр. 4, см. табл. 1)

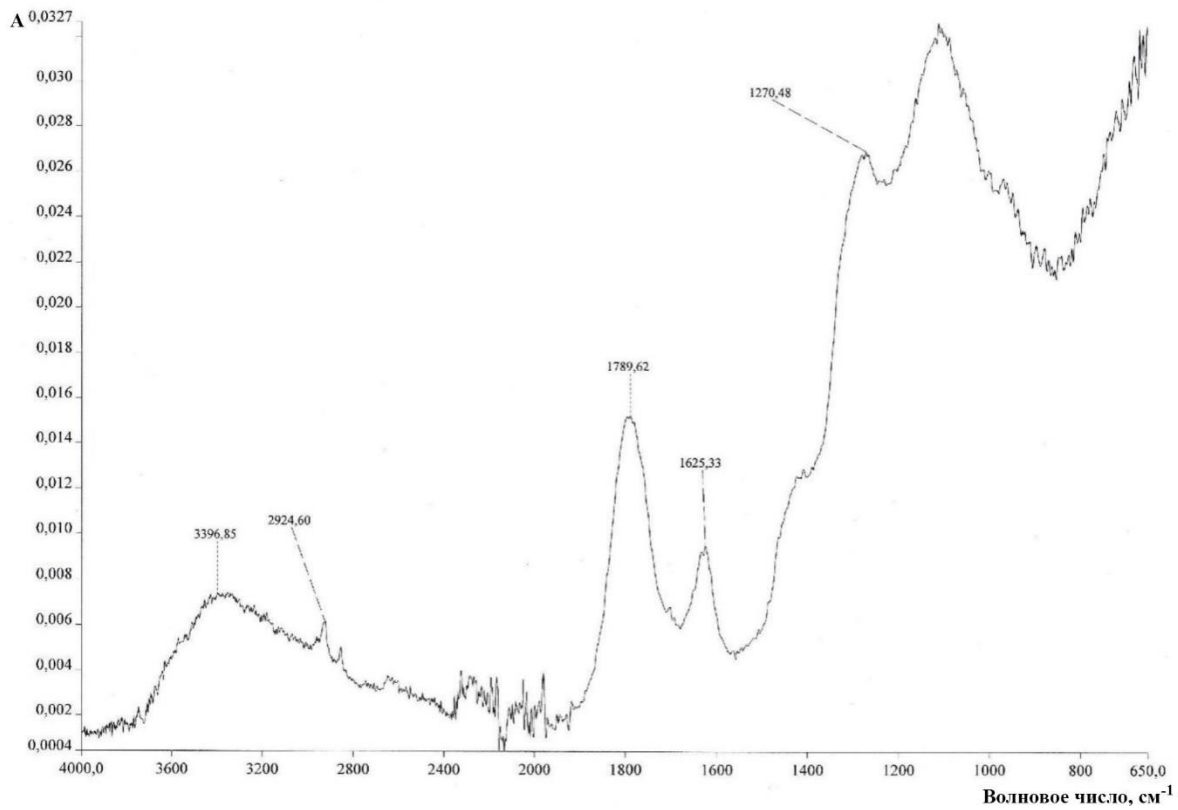


Рис. 5. ИК-спектр ДНА, полученных из тройного заряда: тетрил – 50% мас., тротил – 30% мас., гексоген – 20% мас. (обр.5, см. табл.1)

Анализ ИК-спектров различных образцов ДНА необходимо вести в соотношении друг с другом, поэтому для наглядности данные по максимумам полос поглощения сведены в табл. 2, в которой приведены значения волновых чисел и интерпретация данных полос.

В ИК-спектрах образцов ДНА (обр. 1–5, рис. 1–5), несмотря на то, что все образцы ДНА были подвергнуты высокотемпературной обработке: аммиаком (правда, в воде, обр. 1), воздухом и аргоном, присутствуют полосы поглощения средней интенсивности в диапазоне $3300\text{--}3390\text{ см}^{-1}$, обусловленные валентными колебаниями О–Н-групп, и полосы поглощения средней интенсивности в диапазоне $1625\text{--}1637\text{ см}^{-1}$, соответствующем деформационным колебаниям О–Н-групп в воде, адсорбированной на поверхности наноалмазов. Таким образом, ни аминирование в воде, ни высокотемпературная обработка поверхности ДНА в активной (воздух) и инертной газовой среде (аргон), скорее всего не влияет на количество трудноудаляемых ОН-групп.

Внешние воздействия (аммиачной водой и газами – воздух и аргон сухого порошка ДНА, при относительно невысоких температурах обработки (до $430\text{ }^{\circ}\text{C}$) не смогли внести существенные изменения в кристаллическую структуру наноалмазов. Поэтому все виды образцов показывают интенсивное поглощение азотных примесных центров при \sim одних и тех же частотах ($1103\text{--}1124$, $1255\text{--}1270\text{ см}^{-1}$). Следует отметить, что у ДНА–ТАН больше азотных примесных центров, причем очень сильных полос поглощения (826 , 1328 , 1558 см^{-1}). Таким образом, воздействия высоких температур на все остальные образцы ДНА вызвали небольшое уменьшение концентрации азота в кристаллитах ДНА за счет возможного выхода N_2 за пределы двух-трех верхних углеродных слоев (координационных сфер) кристаллитов. ИК-спектр отражает состояние поверхностного слоя и двух-трех верхних координационных сфер.

Все остальные полосы поглощения: деформационные колебания адсорбированной воды ($1625\text{--}1637\text{ см}^{-1}$), >C=O ($1742\text{--}1790\text{ см}^{-1}$), валентные колебания $\text{C}_{\text{sp}^3}\text{--H}$ ($2853\text{--}2958\text{ см}^{-1}$) и валентные колебания ОН-группы присутствуют у всех пяти образцов ДНА.

Выводы

1. Воздействие температуры ($430\text{ }^{\circ}\text{C}$, 2 часа, аргон или воздух), приводит к понижению интенсивности полос поглощения азотных примесей в кристаллитах ДНА за счет возможного выхода N_2 за пределы двух-трех верхних координационных сфер.

2. Все образцы ДНА, полученные: из тротил-гексогеновой смеси, тетрила, смеси тетрила с гексогеном, тройной смеси – тротила, гексогена и тетрила, как обработанные водным аммиаком ($220\text{ }^{\circ}\text{C}$), так и газами (аргон, воздух) в виде сухих порошков, имеют одни сильные полосы азотных примесных центров (826 , 1328 , 1558 см^{-1}) (ДНА-ТАН) и ~ 1110 , ~ 1255 у всех образцов.

3. У всех пяти образцов модифицированных ДНА в ИК-спектре присутствуют и ярко выражены одни и те же полосы поглощения адсорбированной воды ($1625\text{--}1637$), C=O группы ($1742\text{--}1790\text{ см}^{-1}$), валентные колебания $\text{C}_{\text{sp}^3}\text{--H}$ ($2853\text{--}2958\text{ см}^{-1}$) и валентные колебания ОН-групп ($3330\text{--}3397\text{ см}^{-1}$).

Таблиця 2. Полосы поглощения ИК-спектров ДНА разной модификации (из табл. 1), см⁻¹

Диапазон линий поглощения образцов	Обр.1, после термоаммиачной обработки (из ТГ 50/50)	Обр.2, 430 °С, воздух из ТГ (50/50)	Обр.3, 430 °С, воздух (из тетрилла)	Обр.4, аргон (из тетрил-гексогеновой смеси)	Обр.5, аргон (из смеси: тетрил, гексоген, тротил)	Интерпретация спектра
826 оч.сил	826 оч.сил	-	-	-	-	Азотсодержащие дефекты кристаллической структуры
1103-1110	1103 оч.сил	1105 оч.сил	1110 оч.сил	-	-	Поглощение азотных примесных центров (1100)
1118-1124	-	-	-	1118 оч.сил	1124 оч.сил	Эфирная группа -C-O-C-
1255-1257	-	-	-	1257 оч.сил	1255 оч.сил	Поглощение азотных примесных центров
1265-1270	1268 оч.сил	1265 оч.сил	1270 сил.	-	-	Эфирная группа -C-O-C-
1328	1328 оч.сил	-	-	-	-	Изолированные единичные N-V центры
1558	1558 ср.	-	-	-	-	Поглощение азотных примесных центров
1625-1637	1628 ср.	1265 ср.	1625 ср.	1629 ср.	1637 ср.	Деформационное колебание поверхностных групп -ОН и атмосферной воды Н-О-Н
1742-1790	1747 ср.	1786 ср.	1790 сил.	1756 сил.	1742 ср.	C=O
2163	2163 сл.	-	-	-	-	Собственное поглощение решетки алмаза
2853-2958	2936 сл.	2853 сл. 2927 ср.	2925 сл.	2958 сл.	2943 ср.	C _{sp3} -H валентные
3330-3397	3330 ср.	3336 ср.	3397 ср.	3381 ср.	3393 ср.	ОН - валентные

**В.Ю. Долматов¹, О.П. Возняковскій², V. Myllymäki, A. Vehanen³,
О.О. Возняковскій⁴, М.М. Лапчук⁵, В.О. Марчук¹**

¹Федеральное державне унітарне підприємство «Спеціальне конструкторсько-технологічне бюро
«Технолог», м. Санкт-Петербург, Росія

²Федеральное унітарне державне підприємство «НДІ синтетичного каучуку
ім. акад. С.В. Лебедева», м. Санкт-Петербург, Росія

³Carbodeon Ltd. Oy, Фінляндія

⁴ФТІ ім. Іоффе, Санкт-Петербург, Росія

⁵Белоруський державний університет, Мінськ, Білорусь

ІНФРАЧЕРВОНА СПЕКТРОМЕТРІЯ МОДИФІКОВАНИХ ДЕТОНАЦІЙНИХ НАНОАЛМАЗІВ

В роботі проаналізовані ІЧ-спектри детонаційних наноалмазів (ДНА), отриманих з різних вибухових речовин (ВР): зі сплаву тротилу та гексогену; тетрилу; тетрилу з гексогеном і потрійній суміші: суміші тротилу, гексогену і тетрилу. Отримані ДНА були оброблені: водним аміаком при 220 °С, в газовому середовищі (повітря і аргон) при 430 °С. Показано, що високотемпературний вплив на різні ДНА призводить до ідентичному результату – всі зразки наноалмазів, незалежно від вихідної ВР і характеру модифікації, мають сильні смуги поглинання азотних домішкових центрів (826, ~ 1100, 1255, 1328, 1 558 cm^{-1}). Крім того, у всіх зразках присутні яскраво виражені смуги поглинання адсорбованої води (1625–1637 cm^{-1}), карбонільної групи (1742–1790 cm^{-1}), валентні коливання $\text{C}_{\text{sp}^3}\text{-H}$ -групи (2853–2958 cm^{-1}) і валентні коливання ОН-групи (3330–3397 cm^{-1}).

Ключові слова: детонаційні наноалмази, тротил, гексоген, тетрил, модифікація наноалмазів, інфрачервона спектроскопія, функціональні поверхневі групи, азотні домішкові центри.

**V.Yu. Dolmatov¹, A.P. Wozniakovsky², V. Myllymäki, A. Vehanen³,
A.A. Voznyakovsky⁴, N.M. Lapchuk⁵, V.A. Marchukov¹**

¹Federal State Unitary Enterprise «Special Design and Technological Bureau «Technologist»,
St. Petersburg, Russia

²Federal Unitary State Enterprise «S.V. Lebedev Research Institute of Synthetic Rubber»,
St. Petersburg, Russia

³Carbodeon Ltd. Oy, Finland

⁴FTI them. Ioffe, St. Petersburg, Russia

⁵Belarusian State University, Minsk, Belarus

INFRARED SPECTROMETRY OF MODIFIED DETONATION NANODIAMONDS

The paper analyzes the IR spectra of detonation nanodiamonds (DND) obtained from various explosives: from an alloy of TNT and RDX; tetryl; tetryl with hexogen and a ternary mixture: a mixture of TNT, RDX and tetryl. The DNDs obtained were treated with aqueous ammonia at 220 °C, in a gaseous medium (air and argon) at 430 °C. It has been shown that high-temperature action on various DNDs leads to an identical result – all samples of nanodiamonds, regardless of the initial explosive and the nature of the modification, have strong absorption bands of nitrogen impurity centers (826, ~ 1100, 1255, 1328, 1558 cm^{-1}). In addition, all samples have pronounced absorption bands of adsorbed water (1625–1637 cm^{-1}), carbonyl group (1742–1790 cm^{-1}), stretching vibrations of the $\text{C}_{\text{sp}^3}\text{-H}$ -group (2853–2958 cm^{-1}) and stretching vibrations of the OH group (3330–3397 cm^{-1}).

Key words: detonation nanodiamonds, TNT, RDX, tetryl, modification of nanodiamonds, infrared spectroscopy, functional surface groups, nitrogen impurity centers.

Литература

1. I. I. Kulakova. Surface Chemistry of Nanodiamond // Phys. Sol. State. – 2004. – V.46, № 4. – P. 636–643.

2. Кулакова И.И., Корольков В.В., Яковлев Р.Ю., Карпухин А.В., Лисичкин Г.В. Строение частиц химически модифицированного наноалмаза детонационного синтеза // Породоразрушающий и металлообразующий инструмент – техника и технология его изготовления и применения». Сб. науч. тр. – Вып. 12. – Киев: ИСМ им. В.Н. Бакуля НАН Украины, 2009. – С. 299–305.
3. Попов. В.А. Разработка способов получения и улучшения свойств композиционных материалов с применением нанопорошков: дис. ... д-ра техн. наук: 05.16.08. – Москва, 2017. – 359 с.
4. Патент № 2384524 РФ. С01В 31/06 (2006.01), В82В 1/00 (2006.01). Способ получения стабильной суспензии детонационных наноалмазов // В.Ю. Долматов, В.А. Марчуков, В.Г. Сущев, М.В. Веретенникова. – Опубл. 20.03.2010, Бюл. № 8.
5. Детонационные наноалмазы. Технология, структура, свойства и применения: сб. ст. / ред. А.Я.Вуль, О.А.Шендерова. – СПб.: ФТИ им. А.Ф.Иоффе, 2016. – 381 с.
6. Dolmatov V.Yu., Kulakova I.I., Myllymäki V., Vehanen A., Vochechka A.A., Panova A.N., Nguyen B.T.T. IR spectra of diamonds of different origins and upon different purification procedures // *Journal of Superhard Materials*. – 2016. – V. 38, N 1. – P. 58–65.
7. Лисичкин Г.В., Оленин А.Ю., Кулакова И.И. Модифицированные поверхности неорганических наночастиц. – М.: Техносфера, 2020. – 394 с.
8. Патент № 2712551 РФ. С01В 32/15 (2017.01), В82В 3/00 (2006.01), С01В 32/26 (2017.01), В01J 3/08 (2006.01), В82Y 40/00 (2011.01). Способ получения детонационных наноалмазов // В.Ю. Долматов, Д.В. Руденко, О.Н. Лисицин, М.Н. Киселёв, А.О. Дорохов, И.В. Денисов. – Опубл. 29.01.2020, Бюл. № 4.
9. Panich A.M., Shames A.I., Goren S.D., Yudina E.B., Aleksenskii A.E., Vul' A.Ya. Examining relaxivities in suspensions of nanodiamonds grafted by magnetic entities: comparison of two approaches// *Magnetic Resonance Materials in Physics, Biology and Medicine*. – 2020. – V. 33. – P. 885–888.

Поступила 15.03.21

References

1. Kulakova, I. I. (2004). Surface Chemistry of Nanodiamond. *Phys. Sol. State*, 46, 4, 636–643.
2. Kulakova, I.I., Korolkov, V.V., Yakovlev, R.Yu, et al. Stroenie chastits khimicheskii modifitsirovannogo nanoalmazza detonatsionnoho sinteza [Particle structure of chemically modified detonation synthesis nanodiamond]. *Porodorazrushaiushchii i metalloobrabatyvaiushchii instrument – tekhnika i tekhnologiya ego izgotovleniia i primeneniia – Rock Destruction and Metal-Working Tools – Techniques and Technology of the Tool Production and Applications*, 12, 299–305 [in Russian].
3. Popov, V.A. (2017). Razrabotka sposobov poluchenii i ulushcheniia svoistv kompozitsionnykh materialov s primeneniem nanoporoshkov [Development of methods for obtaining and improving the properties of composite materials using nanopowders]. *Doctor's thesis*. Moscow [in Russian].
4. Dolmatov, V.Yu., Marchukov, V.A., Sushchev, V.H., & Veretennikova, M.V. (2010). Patent of Russia 2384524 [in Russian].
5. Vul, A.Ya., & Shenderova, O.A. (Eds.). (2016). *Detonatsionnye nanoalmazzy. Tekhnologiya, struktura, svoistva i primeneniia [Detonation nanodiamonds. Technology, structure, properties and applications]*. St. Petersburg: FTI [in Russian].
6. Dolmatov, V. Yu., Kulakova, I. I., Myllymäki, V., et al. (2016). IR spectra of diamonds of different origins and upon different purification procedures, *Journal of Superhard Materials*, January, 38, N 1, 58–65.

7. Lisichkin, H.V., Olenin, A.Yu., & Kulakova, I. I. (2020). *Modifitsirovannyye poverkhnosti neorhanicheskikh nanochastiz [Modified surfaces of inorganic nanoparticles]*, Moscow: Tekhnosfera [in Russian].
8. Dolmatov, V.Yu., Rudenko, D.V., Lisitsin, O.N., et al. (2020). Patent of Russia 2712551 [in Russian].
9. Panich, A.M., Shames, A.I., Goren, S.D., et al. (2020). Examining relaxivities in suspensions of nanodiamonds grafted by magnetic entities: comparison of two approaches. *Magnetic Resonance Materials in Physics, Biology and Medicine*, 33, 885–888.

УДК 536.421.1:620.187:661.057.5

DOI: 10.33839/2708-731X-24-1-217-237

І. А. Петруша, д-р техн. наук; **О. М. Соколов**, **Т. І. Смірнова**, кандидати технічних наук;
І. С. Білоусов, пров. інженер

*Інститут надтвердих матеріалів ім. В. М. Бакуля НАН України, 04074
м. Київ, вул. Автозаводська, 2, Київ, Україна, e-mail: dialab@ism.kiev.ua*

НАКОПИЧЕНИЙ ДОСВІД ОТРИМАННЯ ПРОЗОРИХ МОНО- І ПОЛІКРИСТАЛІВ КУБІЧНОГО НІТРИДУ БОРУ (КОРОТКИЙ ОГЛЯД)

З огляду на фундаментальні оптичні властивості кубічний нітрид бору (сBN) має бути прозорим у всьому діапазоні частот видимого світла. Разом з тим, оптична прозорість в реальності серед безлічі відомих матеріалів сBN досі сприймається як екзотичне виключення, а не правило. На практиці, особливо серед спечених матеріалів інструментального призначення, домінують абсолютно непрозорі полікристали і композити сBN переважно чорного або темно-сірого кольорів. Безумовно, високочисті прозорі та цілеспрямовано леговані матеріали широкозонного сBN, які, крім того, є надтвердими і високотеплопровідними, викликають певний практичний інтерес, спонукаючи до їх використання в ультрафіолетовій оптоелектроніці та напівпровідниковій техніці. В даній роботі наведено короткий огляд існуючого досвіду з отримання прозорих моно- і полікристалів сBN різнманітними способами, такими як спонтанна масова кристалізація, спікання порошків кінцевої фази та конверсійне спікання графітоподібних модифікацій VN різного генезису (кольорова презентація доступна online: www.altis-ism.org.ua).

Ключові слова: кубічний нітрид бору, високі тиски, синтез, спікання, твердофазні перетворення, монокристали і полікристали, оптична прозорість.

Кубічний сфалеритоподібний нітрид бору (сBN) – високотемпературна сполука з групи $A_{III}B_V$ з ковалентним полярним зв'язком між атомами бору і азоту. Як відомо, електронегативність і іонізаційний потенціал В менше, ніж у N, аналогічно до інших елементів груп A_{III} і B_V , що означає підвищення густини електронного заряду біля атомів азоту. Хартрі-Фоківські розрахунки свідчать на користь цих передбачень [1]. Ефективний заряд на атомах за В. Szigetі, розрахований за оптичними даними, становить 1,14 заряду електрону [2].

Фундаментальні оптичні властивості кубічного VN.

Частково іонний характер міжатомного зв'язку сBN обумовлює відбиття та поглинання випромінювання в інфрачервоній області спектра (смуга залишкових променів). Резонансний характер однофоновного поглинання в районі частот коливань підґратки бору відносно підґратки азоту дозволяє застосовувати апроксимацію експериментальних даних про відбивну здатність (R) з використанням моделі гармонічного затухаючого осцилятора і, таким чином,