

ИЗМЕНЕНИЕ ФАЗОВОЙ ДИАГРАММЫ ПРОСТОГО ВЕЩЕСТВА ПРИ УМЕНЬШЕНИИ РАЗМЕРА НАНОСИСТЕМЫ

Магомедов М.Н.

*ИПГ ДНЦ РАН, Мазачкала, Россия
mahmag4@mail.ru*

Разработанная ранее в [1] статистическая трехфазная модель простого вещества обобщена на случай нано-системы. На основе парного потенциала межатомного взаимодействия Ми-Леннард-Джонса получены аналитические выражения для свободной энергии Гельмгольца и уравнения состояния работоспособные при произвольных значениях плотности, температуры и числа атомов в системе.

Расчеты уравнения состояния аргона показали, что при уменьшении числа атомов в системе S-петля на изотерме уравнения состояния для фазового перехода (ФП) кристалл-жидкость (К-Ж) уменьшается, и при определенном числе атомов (N_0) S-петля ФПК-Ж исчезает. Показано, что величина N_0 увеличивается при отклонении формы наносистемы от наиболее энергетически оптимальной формы. С ростом температуры на изотерме величина N_0 увеличивается. В кластере из $N < N_0$ атомов ФПК-Ж уже нет.

При уменьшении числа атомов S-петля для ФП жидкость-газ (Ж-Г) также уменьшается. Параметры критической точки для ФПЖ-Г с уменьшением числа атомов изменяются: критические температура и давление уменьшаются, а критический удельный объем возрастает.

Ранее, как в экспериментах, так и при компьютерном моделировании, отмечалось, что с уменьшением размера нано-системы наблюдается как сближение размерных зависимостей температур плавления и кристаллизации, так и уменьшение удельной теплоты и удельного скачка объема при плавлении. Исходя из этих фактов, и изучая экстраполяцию данных размерных зависимостей на малые размеры, в [2] было указано на возможное исчезновение ФПК-Ж при уменьшении числа атомов в нано-системе. В данной работе показано, что это исчезновение S-петля ФПК-Ж обусловлено ростом доли делокализованных атомов при уменьшении размера нано-системы.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта No 16-03-00041_а и Программы Президиума РАН (программа No I.13).

1. М.Н. Магомедов. Вестник Московского Гос. Технического Университета им. Н.Э. Баумана. Серия: Естественные науки, 2013, 2, 28 – 42.
2. М.Н. Магомедов. Журнал Технической Физики, 2014, 84, 5, 46–51.