

РАЗМЕРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ТЕМПЕРАТУР ПЛАВЛЕНИЯ И КРИСТАЛЛИЗАЦИИ МОЛИБДЕНА

Ахмедов Э.Н.

*ИИГ ДНЦ РАН, Мазачкала, Россия
aen-code@yandex.ru*

На основании RP-модели, формализм которой представлен в [1], рассчитано уравнение состояния (P) нанокристалла молибдена. Межатомное взаимодействие описывалось парным потенциалом Ми-Леннарда-Джонса, параметры которого были определены нами путем подгонки под уравнение состояния, модуль упругости и коэффициент теплового расширения макрокристалла молибдена [2].

Исходя из критерия Линдемманна, при изобарических условиях ($P = 0$) рассчитана температура плавления (T_m) для нанокристаллов с различными размерами и формой поверхности. Оказалось, что величина T_m уменьшается при уменьшении числа атомов (N) в нанокристалле, причем это уменьшение идет заметнее при отклонении формы от наиболее энергетически оптимальной (для RP-модели это куб).

Поверхностное давление сжимает нанокристалл, и для того чтобы соблюсти изобаричность $P = 0$ мы должны увеличить межатомное расстояние, что облегчает плавление нанокристалла.

Для RP-модели кривые $T_m(N, P = 0)$ заканчиваются при N_{cr} – минимально возможном размере нанокристалла. Для куба $N_{cr} = 10$, и N_{cr} увеличивается при деформации формы нанокристалла. Если полагать, что значение N_{cr} это размер кристаллического зародыша с данной формой поверхности при $P(N_{cr}) = 0$, то можно получить размерную зависимость для температуры начала кристаллизации T_{cr} . Экстраполяция изобарической зависимости $T_{cr}^*(N_{cr}^{-\frac{1}{3}}) = T_{cr}(N_{cr}^{-\frac{1}{3}})/T_m(\infty)$ на макрокристалл ($N_{cr}^{-\frac{1}{3}} = 0$) показала, что значение $T_{cr}^*(N_{cr}^{-\frac{1}{3}} = 0)$ равно 0,713 для стержневидных и 0,857 для пластинчатых форм нанокристалла. Это согласуется с правилом Тарнбулла, что позволяет утверждать, что полученная зависимость $T_{cr}^*(N_{cr}^{-\frac{1}{3}})$ описывает размерную зависимость температуры начала кристаллизации Mo при $P = 0$.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант No 16-03-00041_a) и Программы Президиума РАН (программа No I.13).

-
1. М.Н. Магомедов. Кристаллография, 2017, 62, 3, 487-504.
 2. E.N. EAhmedov. Journal of Physics and Chemistry of Solids, 2018, 121, 62-66.