

ИЗМЕНЕНИЕ БАРИЧЕСКОЙ ЗАВИСИМОСТИ ТЕМПЕРАТУРЫ ПЛАВЛЕНИЯ ПРИ УМЕНЬШЕНИИ РАЗМЕРА НАНОКРИСТАЛЛА

Магомедов М.Н.

*ИПГВЭ ОИВТ РАН, Махачкала, Россия
mahmag4@mail.ru*

Ранее нами в работе [1] был предложен метод расчета зависимости температуры плавления T_m однокомпонентного кристалла от давления P . Метод основан на четырех параметрическом парном потенциале межатомного взаимодействия Ми-Леннард-Джонса, и не содержит других подгоночных параметров. При получении формулы для барической зависимости $T_m(P)$ был использован делокализационный критерий плавления, который обобщает критерий Линдемманна на случай кристаллизации. Данным методом были рассчитаны барические зависимости температуры плавления $T_m(P)$ и ее производной по давлению: $T'_m(P) = dT_m/dP$, для макрокристаллов золота, платины и ниобия в интервале давлений $P=0-1000$ ГПа.

В данной работе метод из [1] был обобщен на случай нанокристалла из N атомов, который имеет определенную форму поверхности. Обобщение произведено в рамках RP-модели нанокристалла [2]. Расчеты барических зависимостей функций $T_m(P)$ и $T'_m(P)$ были проведены как для макро-, так и для нано-кристалла кубической формы из 306 атомов. Было показано, что значение $T_m(P)$ для нанокристалла меньше, чем для макрокристалла при любом давлении. Это обусловлено уменьшением среднего (по нанокристаллу) первого координационного числа при уменьшении N , что уменьшает среднюю потенциальную энергию атома в нанокристалле.

При низких давлениях функция $T'_m(P)$ для нанокристалла больше чем для макрокристалла. Однако при определенном давлении ($P_x=13.66$ ГПа) барические зависимости функций $T'_m(P)$ для макрокристалла и нанокристалла пересекаются. Это означает, что при низких давлениях величина $T'_m(P)$ возрастает, а при $P > P_x$ величина $T'_m(P)$ уменьшается при изоморфно-изобарном переходе от макро- к нанокристаллу. Однако разница между данными функциями при $P > P_x$ не очень большая. Поэтому можно принять, что при $P > P_x$ функция $T'_m(P)$ не изменяется при уменьшении размера нанокристалла. Объяснены причины такого размерного изменения функция $T'_m(P)$.

-
1. M.N. Magomedov, Vacuum, 2023, 213, 112079. DOI: 10.1016/j.vacuum.2023.112079
 2. M.N. Magomedov, Journal of Physics and Chemistry of Solids, 2021, 151, 109905. DOI: 10.1016/j.jpics.2020.109905