

ИЗМЕНЕНИЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПРИ ИЗОБАРИЧЕСКОМ УМЕНЬШЕНИИ РАЗМЕРА НАНОКРИСТАЛЛА

Магомедов М.Н.

*Институт проблем геотермии Дагестанского научного центра Российской Академии Наук,
367030, г. Махачкала, пр-т Шамиля 39-а,
e-mail: mahmag4@mail.ru*

На основе парного потенциала межатомного взаимодействия Ми-Леннард-Джонса и методики, представленной в¹, рассчитаны изотермы уравнения состояния: $P(T, v)$, для кристаллов Si, Ge и твердого раствора Si-Ge. Здесь T – температура, v удельное (на атом) значения объема. Для Si и Ge параметры потенциала Ми-Леннард-Джонса были определены в², а для твердого раствора Si-Ge – в³. Расчеты были проведены как для макрокристалла (при $N = \infty$), так и для нанокристалла кубической формы из $N = 223$ атомов. Были рассчитаны изменения термодинамических свойств при изобарическом ($P = 0$) уменьшении размера кристалла для изотерм $T = 100, 300, 1000$ К.

Были рассчитаны следующие свойства: Θ – температура Дебая и $\Theta'(P) = (\partial\Theta/\partial P)_T$, три параметра Грюнайзена: $\gamma = -[\partial\ln(\Theta)/\partial\ln(V)]_T$, $q = [\partial\ln(\gamma)/\partial\ln(V)]_T$, $z = -[\partial\ln(q)/\partial\ln(V)]_T$, BT – модуль упругости и $V'(P)$, α_p – коэффициент теплового расширения и $\alpha_p'(P)$, $\alpha_p \cdot V_T = (\partial P/\partial T)_v$, C_v и C_p удельные (на атом) изохорная и изобарная теплоемкости, $C_v'(P)$ и $C_p'(P)$, σ – удельная (на единицу площади) поверхностная энергия, $\sigma'(T)_v = (\partial\sigma/\partial T)_v$, $\sigma'(T)_p = (\partial\sigma/\partial T)_p$, $\sigma'(P) = (\partial\sigma/\partial P)_T$, μ_p – коэффициент Пуассона.

Показано, что при изобарическом ($P = 0$) переходе от макро- к нано-кристаллу уменьшаются значения следующих свойств: Θ , q , z , V_T , σ и температура плавления. При этом увеличиваются значения следующих свойств: v , $\Theta'(P)$, γ , $V'(P)$, α_p , $|\alpha_p'(P)|$, $\alpha_p \cdot V_T$, C_v , $|C_v'(P)|$, C_p , $|C_p'(P)|$, μ_p , $|\sigma'(T)_v|$, $|\sigma'(T)_p|$, $\sigma'(P)_T$.

При переходе от макро- к нано-кристаллу слабо меняются следующие параметры: при $T = 100$ К: γ , z , $V'(P)$, μ_p ; при $T = 300$ и 1000 К: γ , z , $V'(P)$, $\alpha_p \cdot V_T$, C_v , $C_v'(P)$, C_p , μ_p . Поэтому при данных P-T-условиях можно использовать значения этих параметров, полученные для макрокристалла.

Литература

1. Магомедов М.Н. Физика Твердого Тела, 2019, 61, 4, 757.
2. Магомедов М.Н. Физика Твердого Тела, 2017, 59, 6, 1065.
3. Магомедов М.Н. Физика Твердого Тела, 2018, 60, 5, 970.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 18-29-11013_мк) и Программы Президиума РАН (программа № I.13).