Министерство науки и высшего образования Российской Федерации Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Тверской государственный университет»

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ ИЗУЧЕНИЯ КЛАСТЕРОВ, НАНОСТРУКТУР И НАНОМАТЕРИАЛОВ

PHYSICAL AND CHEMICAL ASPECTS OF THE STUDY OF CLUSTERS, NANOSTRUCTURES AND NANOMATERIALS

FIZIKO-HIMIČESKIE ASPEKTY IZUČENIÂ KLASTEROV, NANOSTRUKTUR I NANOMATERIALOV

МЕЖВУЗОВСКИЙ СБОРНИК НАУЧНЫХ ТРУДОВ

выпуск 11

ТВЕРЬ 2019

УДК 620.22:544+621.3.049.77+539.216.2:537.311.322: 530.145 ББК Ж36:Г5+В379 Ф50

Рецензирование статей осуществляется на основании Положения о рецензировании статей и материалов для опубликования в Межвузовском сборнике научных трудов «Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов».

Официальный сайт издания в сети Интернет: https://www.physchemaspects.ru

Ф50 Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов [Текст]. – Тверь: Твер. гос. ун-т, 2019. – Вып. 11. – 680 с.

Зарегистрирован Федеральной службой по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций, свидетельство о регистрации СМИ ПИ № ФС 7747789 от 13.12.2011.

Издание составлено из оригинальных статей, кратких сообщений и обзоров теоретического и экспериментального характера, отражающих физико-химических результаты исследований области изучения В процессов с участием кластеров, наноструктур и наноматериалов физики, межфазные явления нанотермодинамику. Сборник включая И работников, инженерно-технических предназначен для научных И преподавателей ВУЗов, студентов и аспирантов. Издание подготовлено на кафедре общей физики Тверского государственного университета.

Переводное название: Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials

Транслитерация названия: Fiziko-himičeskie aspekty izučeniâ klasterov, nanostruktur i nanomaterialov

УДК 620.22:544+621.3.049.77+539.216.2:537.311.322: 530.145 ББК Ж36:Г5+В379

Print ISSN 2226-4442 Online ISSN 2658-4360

© Коллектив авторов, 2019

© Тверской государственный университет, 2019

УДК 539.89: 536.413+536.631+539.32 ЗАВИСИМОСТЬ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ НИОБИЯ ОТ РАЗМЕРА НАНОКРИСТАЛЛА Оригинальная статья

С.П. Крамынин

Институт физики им. Х.И. Амирханова – обособленное подразделение ФГБУН «Дагестанского федерального исследовательского центра Российской академии наук» 367015, Россия, Махачкала, ул. М. Ярагского, 94

kraminin@mail.ru

DOI: 10.26456/pcascnn/2019.11.315 Аннотация: С единых позиций на основе парного межатомного потенциала взаимодействия Ми–Леннард–Джонса и RP-модели нанокристалла рассчитаны как уравнение состояния, так и изменение теплофизических свойств нанокристалла *Nb* вдоль изотерм 300 К и 3000 К с ростом давления. Изучено изменение барических зависимостей теплофизических свойств и температуры плавления нанокристалла ниобия при уменьшении размера.

Ключевые слова: ниобий, нанокристалл, размерные зависимости, уравнение состояния, температура плавления.

1. Введение

Ниобий широко используется в промышленности, технике, а также в атомной энергетике. Но в литературе очень мало данных о барических зависимостях его теплофизических свойств. По барическим зависимостям теплофизических свойств макрокристалла Nb есть только одна теоретическая работа [1]. Барическая зависимость температуры плавления одной работе [2]. макрокристалла представлена только В Для нанокристалла ниобия барические зависимости теплофизических свойств и температуры плавления в литературе отсутствуют. По этим причинам в данной работе проведены расчеты барических зависимостей данных свойств, как для макро- так и для нано-кристалла ниобия.

2. Метод расчета теплофизических свойств нанокристалла

Для расчета теплофизических свойств нанокристалла простого однокомпонентного вещества необходимо определить, как потенциал взаимодействия пары его атомов, так и метод расчета, который основан на этом потенциале. Представим парное межатомное взаимодействие в кристалле однокомпонентного вещества в виде потенциала Ми-Леннард-Джонса, который имеет следующий вид [3, гл. 3]:

$$\varphi(r) = \frac{D}{(b-a)} \left[a \left(\frac{r_0}{r} \right)^b - b \left(\frac{r_0}{r} \right)^a \right],\tag{1}$$

где D и r_0 – глубина и координата минимума потенциала, b > a > 1 – параметры.

Тогда, используя приближение «взаимодействия только ближайших

соседей», температуру Дебая как функцию первого координационного числа и расстояния между центрами ближайших атомов можно определить из выражения [3, гл. 2; 4]:

$$\Theta(k_n, c) = A_w(k_n, c) \,\xi \left[-1 + \left(1 + \frac{8D}{k_B A_w(k_n, c) \,\xi^2} \right)^{1/2} \right], \tag{2}$$

где k_B – постоянная Больцмана, функция A_w возникает из-за учета энергии «нулевых колебаний» атомов в кристалле, k_n – первое координационное число, которое в нанокристалле зависит как от его размера, так и от формы его поверхности [3, гл. 6], $c = (6k_p v/\pi)^{1/3}$ – расстояние между центрами ближайших атомов, v = V/N – удельный объем, V и N – объем и число атомов в нанокристалле:

$$A_{w}(k_{n},c) = K_{R} \frac{5k_{n}ab(b+1)}{144(b-a)} \left(\frac{r_{0}}{c}\right)^{b+2}, \quad K_{R} = \frac{\hbar^{2}}{k_{B}r_{0}^{2}m}, \quad \xi = \frac{9}{k_{n}(\infty)}, \quad (3)$$

m – масса атома, \hbar – постоянная Планка, k_p – коэффициент упаковки, $k_n(\infty)$ – первое координационное число в объеме нанокристалла.

Используя для колебательного спектра нанокристалла модель Эйнштейна, для удельной (на атом) свободной энергии Гельмгольца нанокристалла можно принять выражение [3, 5]:

$$f_H(k_n, c, T) = \left(\frac{k_n}{2}\right) D \cdot U(R) + 3k_B \Theta_E(k_n, c) \left\{ \left(\frac{1}{2}\right) + \left(\frac{T}{\Theta_E(k_n, c)}\right) \ln \left[1 - \exp\left(-\frac{\Theta_E(k_n, c)}{T}\right)\right] \right\},$$
(4)

где Θ_E – температура Эйнштейна, которая связана с температурой Дебая соотношением [5]: $\Theta = (4/3)\Theta_E$, $R = r_0/c$ – относительная линейная плотность кристалла, функция потенциальной энергии, в соответствии с (1), равна: $U(R) = (aR^b - bR^a)/(b-a)$.

Положим, что зависимость функции k_n от размера и формы нанокристалла с поверхностью Гиббса не зависит от плотности и температуры, а определяется только числом атомов в нанокристалле N, параметром его формы f и постоянными $k_n(\infty)$ и k_p . Тогда из (4) для уравнения состояния P и модуля упругости B_T можно получить [6]:

$$P = -\left(\frac{\partial f_H}{\partial v}\right)_T = \left[\frac{k_n}{6} D \cdot U'(R) + 3k_B \Theta_E \cdot \gamma \cdot E_w\left(\frac{\Theta_E}{T}\right)\right] \frac{1}{v}, \qquad (5)$$

$$B_{T} = -v \left(\frac{\partial P}{\partial v}\right)_{T} = P + \left[\frac{k_{n}}{18}D \cdot U''(R) + 3k_{B}\Theta_{E} \cdot \gamma \cdot (\gamma - q) \cdot E_{v}\left(\frac{\Theta_{E}}{T}\right) - 3N \cdot k_{B} \cdot \gamma^{2} \cdot T \cdot F_{E}\left(\frac{\Theta_{E}}{T}\right)\right] \frac{1}{v}, (6)$$

Здесь введены следующие функции:

$$F_E(y) = \frac{y^2 \exp(y)}{\left[\exp(y) - 1\right]^2}, \quad E_w(y) = 0.5 + \frac{1}{\left[\exp(y) - 1\right]}, \tag{7}$$

$$U'(R) = R\left[\frac{\partial U(R)}{\partial R}\right] = \frac{ab(R^b - R^a)}{b - a}, \quad U''(R) = R\left[\frac{\partial U'(R)}{\partial R}\right] = \frac{ab(bR^b - aR^a)}{b - a}$$

Из (2) легко найти выражения для первого γ , второго q и третьего z параметров Грюнайзена:

$$\gamma = -\left(\frac{\partial \ln \Theta}{\partial \ln v}\right)_{T} = \frac{b+2}{6(1+X_{w})}, \quad q = \left(\frac{\partial \ln \gamma}{\partial \ln v}\right)_{T} = \gamma \frac{X_{w}(1+2X_{w})}{(1+X_{w})},$$

$$z = -\left(\frac{\partial \ln q}{\partial \ln v}\right)_{T} = \gamma (1+4X_{w}) - 2q = \gamma \left(\frac{1+3X_{w}}{1+X_{w}}\right) = \frac{(b+2)}{6} \frac{(1+3X_{w})}{(1+X_{w})^{2}},$$
(8)

где функция: $X_w = A_w \xi / \Theta$, определяет роль квантовых эффектов.

Так как температура Дебая (2) не зависит от температуры при изохорическом нагреве, то изохорную и изобарную теплоемкости можно определить в виде [5]:

$$C_{\nu} = 3N \cdot k_B \cdot F_E\left(\frac{\Theta_E}{T}\right), \quad C_p = C_{\nu}(1 + \gamma \alpha_p T),$$
(9)

где коэффициент теплового расширения можно рассчитать по формуле [5]:

$$\alpha_{p} = \frac{\gamma \cdot C_{v}}{V \cdot B_{T}} = \frac{\gamma \cdot C_{v}}{N \cdot B_{T} [\pi r_{o}^{3} / (6k_{p})]} \left(\frac{v_{o}}{v}\right), \quad v_{o} = \frac{\pi r_{0}^{3}}{6k_{p}}.$$
 (10)

Отметим, что если принять: $N \to \infty$, $V \to \infty$ при v = V/N = const, и $k_n(N, f) = k_n(\infty)$, то формализм из (2)-(10) позволяет рассчитать как уравнение состояния, так и барические зависимости термодинамических свойств макрокристалла. Формализм из (2)-(10) был применен нами для расчета барических зависимостей макрокристалла ниобия в [7], где было получено хорошее согласие с экспериментальными данными. Этот метод был успешно применен при расчете свойств макрокристаллов железа, алмаза, кремния, германия [8] и молибдена [9]. В данной работе мы обобщим этот формализм применительно к нанокристаллу. Для этого необходимо определить функцию $k_n(N, f)$.

3. RP-модель нанокристалла

Для определения функции $k_n(N, f)$ используем RP-модель нанокристалла [3, 10], суть которой в следующем. Положим, что Гиббса нанокристалл co свободной поверхностью имеет ВИЛ прямоугольного параллелепипеда с квадратным основанием, ограненный гранями типа (100). Величина $f = N_{ps} / N_{po}$ – это параметр формы, который определяется отношением числа атомов на боковом ребре N_{ps} к числу атомов на ребре основания N_{po} . Для стержневидной формы f > 1, для куба f = 1, для нанокристалла пластинчатой формы f < 1. Число атомов в нанокристалле, равное: $N = f N_{m}^{3} / \alpha$, изменяется в пределах: $2^{3} / \alpha \leq N \leq \infty$,

где $\alpha = \pi / (6k_p)$ – параметр структуры.

В рамках RP-модели зависимость нормированного среднего значения первого координационного числа от размера N и формы f нанокристалла имеет вид [3, 10]:

$$k_n^* = \frac{k_n(N, f)}{k_n(\infty)} = 1 - Z_s(f) \left(\frac{\alpha^2}{N}\right)^{1/3},$$
(11)

Где $k_n(\infty) = k_n(N = \infty)$ – координационное число для макрокристалла,

$$Z_s(f) = \frac{1+2f}{3f^{2/3}}.$$
 (12)

Функция формы $Z_s(f)$ достигает минимума равного единице при f = 1, т.е. при форме куба. Для пластинчатых (f < 1) или стержневидных (f > 1) форм значение $Z_s(f)$ больше единицы. Поэтому функция $k_n^*(f)$ из (11) при любом значении N имеет максимум при f = 1, т.е. для наиболее энергетически оптимальной – кубической формы прямоугольного параллелепипеда.

В рамках RP-модели для $\sigma(N, f)$ – удельной (на единицу площади) поверхностной энергии грани (100) нанокристалла были получены выражения следующего вида [3, гл. 6; 10]:

$$\sigma(N,f) = -\frac{k_n(\infty)DR^2}{12\alpha^{2/3}r_0^2} L_E(N,f), \qquad (13)$$

$$L_{E}(N,f) = U(R) + 3H_{w}(N,T), \qquad (14)$$

$$H_{w}(N,T) = \frac{6\gamma(N,f)}{(b+2)} \left[\frac{k_{B}\Theta_{E}(N,f)}{Dk_{n}(N,f)} \right] E_{w} \left(\frac{\Theta_{E}}{T} \right), \quad E_{w}(y) = 1 - \frac{2y\exp(y)}{[\exp(2y) - 1]}.$$
(15)

Таким образом, полученная в рамках RP-модели функция $k_n(N, f)$ вместе с формализмом из (2)-(15) позволяют рассчитать зависимость всех решеточных и поверхностных свойств от размера и формы нанокристалла при данных значениях температуры и удельного объема. Для этого необходимо знать параметры межатомного потенциала (1).

4. Параметры межатомного потенциала ниобия

Кристалл ниобия (с массой атома m(Nb) = 92,906 а.е.м.) имеет кубическую (ОЦК) объемно центрированную структуру. Для макрокристалла ниобия были использованы следующие значения $k_n = 8$, $k_p = 0,6802$ и $\alpha = 0,76977$. Ниобий является одним из самых твердых и тугоплавких кристаллов, в связи с чем экспериментальное изучение его термодинамических свойств при высоких P - T -условиях очень затруднительно. Поэтому экспериментальных данных для барической зависимости теплоемкости, коэффициента теплового расширения и температуры плавления в литературе нет.

Параметры парного межатомного потенциала Ми-Леннард-Джонса (1) для *Nb*, определенные по методу, описанному в [3, гл. 3; 11], равны:

 $r_0 = 2,8648 \times 10^{-10}$ M, $D/k_B = 21706,44$ K, a = 1,88, b = 5,81. (16)Заметим, что первоначально в [3, гл. 3; 11] все четыре параметра потенциала (1) однозначно определялись из замкнутой системы четырех уравнений, в которую входили четыре определенных из эксперимента при T = 0 К и P = 0 величины: V_0 – молярный объем, L_0 – удельная энергия атомизации, Θ_0 – температура Дебая и γ_0 – первый параметр Грюнайзена. Таким путем в [3, гл. 3; 11] был получен набор параметров (16). Но, как было указано в [8], величины Θ_0 и γ_0 определяются из экспериментальных данных не вполне точно. Особенно это касается тугоплавких металлов. Поэтому в данной работе использовался другой метод определения параметров потенциала (1), который не связан со значениями Θ_0 и γ_0 . Так как для ниобия $k_B \Theta_0 / D \ll 1$, то неопределенность величин Θ_0 и γ_0 слабо скажется на вычисление параметра r_0 , но существенно изменит величину D и степени потенциала. Поэтому в данной работе величины D, b и a были скорректированы как по изотерме T = 300 К термического уравнения состояния $P(V/V_0, 300 \text{ K})$, так и по величине $\alpha_p(P,T)$ измеренной при нормальных условиях, т. е. при P = 0 и T = 300 К. Здесь V/V_0 – отношение молярных объемов кристалла при давлении Р и температуре Т, и при P = 0 и T = 0 К. Для ниобия величина $\alpha_p(0, 300 \text{ K})$ равна [12, стр. 173]: $\alpha_n(0,300 \text{ K}) = 21,3 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$. Зависимость $P(V/V_0,300 \text{ K})$ была взята из работ [1, 13-15]. Она показана на рис. 1. Значения D, b и а были определены путем согласования рассчитанных по методу из (1)-(10) величины $P(V/V_0, 300 \,\mathrm{K})$ $\alpha_{n}(0, 300 \,\mathrm{K})$ И зависимости с указанными экспериментальными данными.

Таким образом для параметров потенциала (1) ОЦК-*Nb* получено:

 $r_0 = 2,8648 \times 10^{-10} \text{ M}, \quad D/k_B = 30200 \text{ K}, \quad a = 2,3, \ b = 6,2.$ (17)

Отметим, что здесь также как и в [16] не учитывается вклад в термодинамические параметры электронной подсистемы, ибо потенциал (1) описывает парное взаимодействие нейтральных атомов. Это обосновывается тем, что потенциал (1) описывает парное взаимодействие нейтральных атомов. Как было показано в [6, 17], погрешности, возникающие при расчете термодинамических свойств металла вследствие исключения из рассмотрения электронной подсистемы, очень малы.

Параметры (17) были использованы нами при расчете барических зависимостей макрокристалла ниобия в [7], где было получено хорошее согласие с оценками других авторов. В данной работе мы изучим

эволюцию этих барических зависимостей при уменьшении размера нанокристалла ниобия вдоль различных изотерм.

Рассчитанные на основе параметров потенциала (17) две изотермические зависимости давления от нормированного объема v/v_o для ниобия показаны на рис. 1. Две нижние линии – изотермы T = 300 K, две верхние линии – изотермы T = 3000 K. Сплошные линии – расчёты для макрокристалла, пунктирные – для нанокристалла из $N = fN_{po}^3 / \alpha = 83$ атомов ($N_{po} = 4$ и f = 1). Уменьшение роста давления при переходе от макро- к нано-кристаллу указывает на уменьшение модуля упругости с уменьшением N.



Рис. 1. Уравнение состояния для макро- (сплошные линии) и нано- (пунктир) кристаллов ниобия.



Рис. 2. Барические зависимости для удельной поверхностной энергии макро- и нано-кристалла *Nb*.

На рис. 1 имеются точки пересечения изотерм уравнения состояния макро- и нано-кристаллов с координатами: $P_A = 0.84 \ \Gamma\Pi a$, $(v/v_o)_A = 1.001$, $T = 300 \ K$; $P_B = 9.25 \ \Gamma\Pi a$, $(v/v_o)_B = 1.001$, $T = 3000 \ K$, в этих точках давление не зависит от размера для данной температуры. Отрицательная область давлений иллюстрирует ситуацию, когда кристалл однородно растянут внешним воздействием, т.е. $v/v_o > 1.001$.

На рис. 2 представлены барические зависимости для σ – удельной (на единицу площади) поверхностной энергии грани (100) для макро- и нано-кристалла *Nb*. Линии 1 и 2 – расчеты для макрокристалла вдоль изотерм 300 и 3000 K, линии 3 и 4 – расчеты для нанокристалла при *N* = 83 и *f* = 1 вдоль изотерм 300 и 3000 K. На рис. 2 присутствуют характерные точки: $P_A = 1,89 \ \Gamma\Pi a$; $\sigma(P_A) = 4,03 \ Дж/M^2$; $T = 300 \ K$; $P_B = 64,52 \ \Gamma\Pi a$; $\sigma(P_B) = 4,44 \ Дж/M^2$; $T = 300 \ K$, где значение $\sigma(P)$ не зависит от *N* при заданном значении *T*, для изотермы *T* = 3000 K такие точки отсутствуют.

На рис. 3 представлены барические зависимости $T_m(P)$ для макро и нанокристаллов с различным количеством атомов. Сплошная линия – расчеты для макрокристалла, линия с окружностями – нанокристалл с N = 1300 атомов ($N_{po} = 10$ и f = 1), штриховая линия N = 83 атома ($N_{po} = 4$ и f = 1). Видно, что с увеличением N происходит возрастание $T_m(P)$.



Рис. 3. Барические зависимости $T_m(P)$ для макро- (сплошная линия) и нано-кристаллов с различным количеством атомов.

Производные $T_m(P)$ по давлению для макро и нанокристаллов с различным количеством атомов показаны на рис. 4. Сплошная линия расчет для макрокристалла, линия с окружностями – нанокристалл с N = 1300 атомов (f = 1), штриховая линия N = 83 атома (f = 1). Видно, что барические зависимости производной температуры плавления по давлению $T'_m(P) = \partial T_m(P) / \partial P$ пересекаются в точке: $P_x = 4,3$ ГПа, $T'_m(P_x) = 61$ К/ГПа. Очевидно, что при давлениях $P < P_x$ с ростом размера будет происходить уменьшение $T'_m(P)$, а при $P > P_x$ увеличение $T'_m(P)$, что показано на рис. 5.



Рис. 4. Производные $T_m(P)$ по давлению для макро- и нано-кристаллов с различным количеством атомов.



Рис. 5. Размерные зависимости $T'_m(N)$ для двух изобар: P = 0 и 10 ГПа.

5. Выводы

На основе параметров потенциала (17) и RP-модели нанокристалла впервые была изучена размерная зависимость как уравнения состояния ниобия, так и барических зависимостей удельной поверхностной энергии,

и температуры плавления. Также изучены производные этих функций по давлению. Показано, что при уменьшении размера значения T_m уменьшаются вдоль изобары. Для σ наблюдается более сложный ход зависимости, но при давлениях P > 50 ГПа тенденция к уменьшению значения σ с уменьшением размера сохраняется для изотермы 3000 К. Для изотермы 3000 К значения σ уменьшаются вдоль изобары. Впервые изучена размерная зависимость $T'_m(P)$ вдоль двух изобар P = 0 и 10 ГПа. Функции $T'_m(P)$ для макро и нанокристаллов пересекаются в точке $P_x = 4,3$ ГПа, $T'_m(P_x) = 61$ К/ГПа.

В заключение отметим, что достоверность использованного здесь метода была продемонстрирована при расчетах размерных зависимостей температур плавления и кристаллизации золота в работе [18].

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 18-29-11013 мк).

Библиографический список:

1. Дорогокупец, П.И. Почти абсолютные уравнения состояния алмаза, *Ag, Al, Au, Cu, Mo, Nb, Pt, Ta, W* для квазигидростатических условий / П.И. Дорогокупец, Т.С. Соколова, Б.С. Данилов, К.Д. Литасов // Геодинамика и тектонофизика. – 2012. – Т. 3. – №. 2. – С. 129-166.

2. Fellinger, M.R. Force-matched embedded-atom method potential for niobium / M.R. Fellinger, H. Park, J.W. Wilkins // Physical Review B. – 2010. – V. 81. – I. 14. – P. 144119-1-144119-15.

3. **Магомедов, М.Н.** Изучение межатомного взаимодействия, образования вакансий и самодиффузии в кристаллах / М.Н. Магомедов – М.: Физматлит, 2010. – 544 с.

4. **Магомедов, М.Н.** Об определении температуры Дебая из экспериментальных данных / М.Н. Магомедов // Физика твердого тела. – 2003. – Т. 45. – № 1. – С. 33-36.

5. Жирифалько, Л. Статистическая физика твердого тела / Л. Жирифалько – М.: Мир, 1975. – 383 с.

6. Магомедов, М.Н. Изменение теплофизических свойств ОЦК-железа при изотермическом сжатии / М.Н. Магомедов // Журнал технической физики. – 2015. – Т. 85. – Вып. 11. – С. 48-54.

7. **Kramynin, S.P.** Equation of state and properties of *Nb* at high temperature and pressure / S.P. Kramynin, E.N. Akhmedov // Journal of Physics and Chemistry of Solids. – 2019. – V. 135. – Art. N 109108. – 22 p.

8. **Магомедов, М.Н.** Об уравнении состояния и свойствах различных полиморфных модификаций кремния и германия / М.Н. Магомедов // Физика твердого тела. – 2017. – Т. 59. – № 6. – С. 1065-1072.

9. Akhmedov, E.N. Molybdenum lattice properties at high pressure / E.N. Akhmedov // Journal of Physics and Chemistry of Solids. – 2018. – V. 121. – P. 62-66.

10. **Магомедов, М.Н.** Зависимость упругих свойств от размера и формы нанокристаллов алмаза, кремния и германия / М.Н. Магомедов // Журнал технической физики. – 2014. – Т. 84. – № 11. – С. 80-90.

11. Магомедов, М.Н. О вычислении параметров потенциала Ми-Леннарда-Джонса /

М.Н. Магомедов // Теплофизика высоких температур. – 2006. – Т. 44. – № 4. – С. 518-533.

12. **Новикова, С.И.** Тепловое расширение твердых тел / С.И. Новикова. – М.: Наука, 1976. – 293 с.

13. **McQueen, R.G.** The equation of state of solids from shock wave studies / R.G. McQueen, S.P. Marsh, J.W. Taylor, et al. In: High-Velocity Impact Phenomena; ed. by R. Kinslow. – New York, London: Academic Press, 1970. – Ch. 7. – P. 293-417.

14. **Kenichi, T.** High-pressure equation of state for *Nb* with a helium-pressure medium: Powder x-ray diffraction experiments / T. Kenichi, A.K. Singh // Physical Review B. -2006. -V. 73. -I. 22. -P. 224119-1-224119-9.

15. Альтшулер, Л.В. Изотермы и функции Грюнайзена 25 металлов / Л.В. Альтшулер, С.Е. Брусникин, Б.А. Кузьменков // Прикладная механика и техническая физика. – 1987. – Т. 28. – № 1. – С. 134-146.

16. **Магомедов, М.Н.** О самодиффузии в железе при сильном сжатии кристалла / М.Н. Магомедов // Физика металлов и металловедение. – 2013. – Т. 114. – № 3. – Р. 227-236.

17. **Huang, X.** Thermal equation of state of Molybdenum determined from in situ synchrotron X-ray diffraction with laser-heated diamond anvil cells / X. Huang, F. Li, Q. Zhou, et al. // Scientific Reports. -2017. - V. 6. - Art. N = 19923. - 10 p.

18. Ахмедов, Э.Н. Зависимость свойств от размера и формы нанокристалла золота в изобарических условиях / Э.Н. Ахмедов // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2018. – Вып. 10. – С. 53-63.

References:

1. **Dorogokupets, P.I.** Near-absolute equations of state of diamond, Ag, Al, Au, Cu, Mo, Nb, Pt, Ta, and W for quasi-hydrostatic conditions / P.I. Dorogokupets, T.S. Sokolova, B.S. Danilov, K.D. Litasov // Geodynamics & Tectonophysics. – 2012. – V. 3. – I. 2. – P. 129-166.

2. Fellinger, M.R. Force-matched embedded-atom method potential for niobium / M.R. Fellinger, H. Park, J.W. Wilkins // Physical Review B. – 2010. – V. 81. – I. 14. – P. 144119-1-144119-15.

3. **Magomedov, M.N.** The study of interatomic interaction, vacancy formation and self-diffusion in crystals / M.N. Magomedov – M.: Fizmatlit, 2010. – 544 p. (In Russian).

4. **Magomedov, M.N.** On the determination of the Debye temperature from experimental data / M.N. Magomedov // Physics of the Solid State. – 2003. – V. 45. – I. 1. – P. 32-35.

5. **Girifalco, L.A.** Statistical physics of materials / L.A. Girifalco. – New York: John Wiley & Sons Inc., 1973. – 346 p.

6. **Magomedov, M.N.** Change in the thermophysical properties of BCC iron during isothermal compression / M.N. Magomedov // Technical Physics. – 2015. – V. 60. – I. 11. – P. 1619-1625.

7. **Kramynin, S.P.** Equation of state and properties of *Nb* at high temperature and pressure / S.P. Kramynin, E.N. Akhmedov // Journal of Physics and Chemistry of Solids. – 2019. – V. 135. – Art. No 109108. – 22 p.

8. **Magomedov, M.N.** State equations and properties of various polymorphous modifications of silicon and germanium / M.N. Magomedov // Physics of the Solid State. – 2017. – V. 59. – I. 6. – P. 1085-1093.

9. Akhmedov, E.N. Molybdenum lattice properties at high pressure / E.N. Akhmedov //

Journal of Physics and Chemistry of Solids. - 2018. - V. 121. - P. 62-66.

10. **Magomedov, M.N.** Elastic properties of diamond, silicon, and germanium nanocrystals as functions of their size and shape / M.N. Magomedov // Technical Physics. -2014. -V. 59. -I. 11. -P. 1658-1668.

11. **Magomedov, M.N.** The calculation of the parameters of the Mie-Lennard-Jones potential / M.N. Magomedov // High Temperature. – 2006. – V. 44. – I. 4. – P. 513-529.

12. Novikova, S.I. Teplovoe rasshirenie tverdykh tel / S.I. Novikova. – M.: Nauka, 1976. – 293 p.

13. **McQueen, R.G.** The equation of state of solids from shock wave studies / R.G. McQueen, S.P. Marsh, J.W. Taylor, et al. In: High-Velocity Impact Phenomena; ed. by R. Kinslow. – New York, London: Academic Press, 1970. – Ch. 7. – P. 293-417.

14. **Kenichi, T.** High-pressure equation of state for *Nb* with a helium-pressure medium: Powder x-ray diffraction experiments / T. Kenichi, A.K. Singh // Physical Review B. -2006. -V. 73. -I. 22. -P. 224119-1-224119-9.

15. **Al'Tshuler, L.V.** Isotherms and Grüneisen functions for 25 metals / L. V. Al'tshuler, S.E. Brusnikin, E.A. Kuz'menkov // Journal of Applied Mechanics and Technical Physics. -1987. - V. 28. - I. 1. - P. 129-141.

16. **Magomedov, M.N.** On self-diffusion in iron at very strong compression of crystal / M.N. Magomedov // The Physics of Metals and Metallography. -2013. -V. 114. -I. 3. -P. 207-216.

17. **Huang, X.** Thermal equation of state of Molybdenum determined from in situ synchrotron X-ray diffraction with laser-heated diamond anvil cells / X. Huang, F. Li, Q. Zhou, et al. // Scientific Reports. -2017. - V. 6. - Art. N o 19923. - 10 p.

18. Ahmedov, E.N. Gold nanocrystal properties dependence on size and shape at isobaric conditions / E.N. Ahmedov // Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials. – 2018. – I. 10. – P. 53-63. (In Russian).

Original paper

CHANGE IN THE BARIC DEPENDENCES OF THE THERMOPHYSICAL PROPERTIES OF A NIOBIUM NANOCRYSTAL WITH A CHANGE IN SIZE

S.P. Kramynin

Institute of Physics named after H.I. Amirkhanova – subdivision of Dagestan Federal Research Center of the Russian Academy of Sciences, Makhachkala, Russia

DOI: 10.26456/pcascnn/2019.11.315

Abstract: From a general point of view, the equation of state and the change in thermophysical properties of Nb nanocrystals along 300 K and 3000 K isotherms with increasing pressure were calculated on the basis of the Mie – Lennard – Jones pair interatomic interaction potential and the nanocrystal RP model. The change in the baric dependences of thermophysical properties and the melting temperature of niobium nanocrystal with decreasing its size was studied.

Keywords: niobium, nanocrystal, size dependences, equation of state, melting point.

Крамынин Сергей Петрович – младший научный сотрудник Института физики им. Х.И. Амирханова Дагестанского Федерального Исследовательского Центра РАН

Sergey P. Kramynin – Junior Researcher, Institute of Physics named after H.I. Amirkhanova – subdivision of Dagestan Federal Research Center of the Russian Academy of Sciences

Поступила в редакцию/received: 02.09.2019; после рецензирования/revised: 12.10.2019; принята/accepted 15.11.2019.