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**

МЕЖВУЗОВСКИЙ СБОРНИК НАУЧНЫХ ТРУДОВ

выпуск 10

ТВЕРЬ 2018

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:

www.physchemaspects.ru

Ф50 Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов [Текст]: межвуз. сб. науч. тр. / под общей редакцией В.М. Самсонова, Н.Ю. Сдобнякова. – Тверь: Твер. гос. ун-т, 2018. – Вып. 10. – 708 с.

ISBN 978-5-7609-1395-1

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

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

УДК 620.22:544+621.3.049.77+539.216.2:537.311.322: 530.145

ББК Ж36:Г5+В379

ISBN 978-5-7609-1395-1

ISSN 2226-4442

© Коллектив авторов, 2018

© Тверской государственной
университет, 2018

УДК 536.421.1+539.23+548.54

ЗАВИСИМОСТЬ СВОЙСТВ ОТ РАЗМЕРА И ФОРМЫ НАНОКРИСТАЛЛА ЗОЛОТА В ИЗОБАРИЧЕСКИХ УСЛОВИЯХ

Э.Н. Ахмедов

ФГБУН «Институт проблем геотермии Дагестанского научного центра

Российской академии наук»

367030, Махачкала, пр-т Шамиля, 39-а

aei-code@yandex.ru

DOI: 10.26456/pcascnn/2018.10.053

Аннотация: Используя RP-модель нанокристалла, рассчитано уравнение состояния золота. На основе данного уравнения получена изобарическая ($P=0$) зависимость температуры плавления от размера и формы нанокристалла. Показано, что чем сильнее форма нанокристалла отклоняется от энергетически оптимальной формы, тем при больших размерах достигается точка начала кристаллизации. Аппроксимация таких точек для различных форм позволила определить температуру начала кристаллизации макрокристалла Au : $T_{cr}(N=\infty, P=0)=921$ К, которая совпала с правилом Турнбулла.

Ключевые слова: уравнение состояния, нанокристалл, золото, размер, форма.

1. Введение

Размерные зависимости различных свойств нанокристаллов рассчитываются давно, как аналитически, так и численными (Монте-Карло, молекулярная динамика) методами [1-5]. Но в большинстве методов расчета остается неясным при каких условиях получены эти размерные зависимости: при изохорическом, или изобарическом процессе? В большинстве теоретических методик, ввиду отсутствия уравнения состояния нанокристалла, размерные зависимости рассчитывают при изохорическом уменьшении размера. Но все экспериментальные зависимости получают в изобарических условиях. Поэтому в данной работе на основании RP-модели из [6, 7] сначала было рассчитано уравнение состояния (P) нанокристалла, а потом изучена изобарическая (при $P=0$) зависимость различных свойств, как от размера, так и от формы поверхности нанокристалла золота.

2. Постановка задачи

Пусть межатомное взаимодействие описывается потенциалом Ми–Леннард–Джонса [6, гл. 3]:

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

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

Ограничение системы поверхностью приведет к обрыву связей на границе. Поэтому если использовано приближение «взаимодействия

только ближайших соседей», то значение первого координационного числа k_n будет зависеть как от размера, так и от формы нанокристалла [6, 7]. При этом структуру кристалла полагаем неизменной $k_p = \text{const}$, где k_p – коэффициент упаковки. Тогда удельная (на атом) свободная энергия Гельмгольца (при использовании приближения «взаимодействия только ближайших соседей», и для колебательного спектра одноатомного нанокристалла модели Эйнштейна) при температуре T имеет вид [6, 8]:

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

где k_B – постоянная Больцмана, Θ_E – это температура Эйнштейна, которая связана с температурой Дебая соотношением: $\Theta = (4/3)\Theta_E$, $U(R)$ – функция потенциальной энергии, которая, в соответствии с (1), равна:

$$U(R) = \left(\frac{aR^b - bR^a}{b-a} \right),$$

где $R = r_o / c$ – линейная относительная плотность кристалла, $c = [6k_p V / (\pi N)]^{1/3}$ – расстояние между центрами ближайших атомов, V – объем нанокристалла из N атомов.

Температуру Дебая определим выражением [6, 9]:

$$\Theta(k_n, c) = A_w(k_n, c) \xi \left[-1 + \left(1 + \frac{8D}{k_B A_w(k_n, c) \xi^2} \right)^{1/2} \right], \quad (3)$$

где введены обозначения:

$$A_w(k_n, c) = K_R \frac{5k_n a b (b+1)}{144(b-a)} \left(\frac{r_o}{c} \right)^{b+2}, \quad K_R = \frac{\hbar^2}{k_B r_o^2 m}, \quad \xi = \frac{9}{k_n(\infty)}, \quad (4)$$

m – масса атома, $\hbar$ – постоянная Планка.

Для определения размерных зависимостей используем модель нанокристалла в виде прямоугольного параллелепипеда (RP-модель), форму которого можно варьировать с помощью параметра формы: $f = N_{ps} / N_{po}$. Он определяется отношением числа атомов на боковом ребре N_{ps} к числу атомов на ребре основания N_{po} прямоугольного параллелепипеда. В рамках RP-модели изменение нормированного среднего значения первого координационного числа при вариации N и f определяется согласно [6, 7]:

$$k_n^* = \frac{k_n(N, f)}{k_n(\infty)} = 1 - Z_s(f) \left(\frac{\alpha^2}{N} \right)^{1/3}, \quad (5)$$

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

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

Объем, площадь поверхности и диаметр (d – расстояние между центрами наиболее удаленных атомов модели) для RP-модели равны:

$$V = N_{po}^3 f c^3 = N \alpha c^3, \quad \Sigma = 6 c^2 \alpha_s (N \alpha)^{2/3} Z_s(f), \quad (6)$$

$$d = N_{po} (2 + f^2)^{1/2} \alpha_d c = 3^{1/2} c \alpha_d (N \alpha)^{1/3} Z_d(f). \quad (7)$$

Здесь коэффициенты α_s и α_d учитывают плотность упаковки атомов на грани и на ребре нанокристалла $\alpha_s \cong \alpha^{2/3}$ и $\alpha_d \cong \alpha^{1/3}$.

Функции формы для площади $\Sigma(N)$ (и для $k_n(N)$ из (5)) и для диаметра $d(N)$ имеют вид:

$$Z_s(f) = \frac{2f+1}{3f^{2/3}}, \quad Z_d(f) = \frac{1}{f^{1/3}} \left(\frac{2+f^2}{3} \right)^{1/2}. \quad (8)$$

Эти функции достигают минимума при $f=1$, т.е. для наиболее оптимальной формы параллелепипеда – куба, где $Z_s(f=1)=Z_d(f=1)=1$. Как видно из (6)-(8), объем RP-модели не зависит от ее формы, но значения Σ и d из (6) и (7) (как и k_n^* из (5)) зависят от параметра f , т.е. от формы прямоугольного параллелепипеда.

Температура плавления рассчитывалась по формуле, полученной в [10], на основании критерия Линдемманна:

$$T_m^* = \frac{T_m(N)}{T_m(\infty)} = \left[\frac{\Theta(N)}{\Theta(\infty)} \right]^2 \left[\frac{c(N)}{c(\infty)} \right]^2 = [\Theta^*(N) \cdot c^*(N)]^2. \quad (9)$$

Используя формализм RP-модели можно рассчитать зависимость удельной свободной энергии Гельмгольца из (2) как от размера, так и от формы нанокристалла простого вещества если известны структура вещества и параметры межатомного потенциала (1).

3. Результаты и обсуждение

Для расчетов возьмем кристалл золота ($m(Au)=196,967$ а.е.м.), с гранецентрированной кубической структурой решетки, т.е. $k_n=12$, $k_p=0,7405$. Исследуя теплофизические свойства макрокристалла Au на основе методики, опробованной в [11] на молибдене, нами были определены параметры парного межатомного потенциала Ми-Леннарда-Джонса (1) путем подгонки под уравнение состояния, модуль упругости и коэффициент теплового расширения макрокристалла золота. Они имеют следующие значения:

$$r_o = 2,8751 \cdot 10^{-10} \text{ м}, \quad a = 2,93, \quad a = 12,82, \quad D/k_B = 7411,5 \text{ К}.$$

На рис. 1 представлена изотерма уравнения состояния для макрокристалла золота при $T=300$ К (сплошная линия) в сравнении с

данными других авторов (символы) из работ [12-15]. Как видно из рис. 1 наши расчёты дают хорошее согласие с данными других авторов, особенно при низких давлениях, что важно при расчёте размерных свойств, так как расчёты проводились нами при низких давлениях.

Определив параметры межатомного потенциала, и, предполагая, что они не зависят от размера, мы рассчитали уравнения состояния нанокристалла золота с учётом его размера и формы. На рис. 2 показано уравнение состояния, которое рассчитывалось путем численного дифференцирования функции (2) по удельному объему $v = V/N$: $P = -(\partial f_E / \partial v)_T$. Расчет зависимости $P(v)$ был проведен от размера макрокристалла (т.е. при $N_{po} = 100$ и $f = 1$, т.е. $N = 1,4 \cdot 10^6$, где выполняется $k_n^* = 1$) – пунктирная линия, до минимального (в рамках RP-модели) размера нанокристалла (при $N_{po} = 2$ и $f = 1$, т.е. $N = 11$) – сплошная линия.

Рис. 1. Уравнение состояния макрокристалла золота при $T = 300$ К. Символами показаны экспериментальные и расчетные данные различных авторов из работ [12-15].

Из рис. 2 видно, что при определенном значении относительного объема $(v/v_0)_0$ изотермические зависимости $P(v/v_0)$ для нанокристалла и макрокристалла пересекаются. Таким образом, в точке: $(v/v_0)_0 = 1,00013$ и $P(N = 11, f = 1) = 8,13$ ГПа, поверхностное давление равно нулю:

$$P_{sf}(v/v_0)_0 = P(\text{Macro}) - P(N = 11, f = 1) = 0.$$

В отличие от работ других авторов значения $\Theta^*(N)$ и $c^*(N)$ определялись нами с учетом поверхностного давления при изобарическом ($P = 0$) уменьшении размера нанокристалла.

На рис. 3 и 4 приведены изобарические зависимости функций Θ^* и c^* от $\lg(N)$, полученные при $P = 0$ и температуре плавления макрокристалла

($T=1337$ К). Символами на рис. 3-6 показаны значения $N = fN_{po}^3 / \alpha$ – для стержня (при $f > 1$) и $N = N_{ps}^3 / (f^2 \alpha)$ – для пластины (при $f < 1$), полученные при данном f и при N_{po} или $N_{ps} = 2, 3, \dots$. Изоморфы с квадратами соответствуют нанокристаллам кубической формы ($f=1$), а изоморфы с кружками получены для нанокристаллов стержневидной формы ($f=5$).

Рис. 2. Изотермо-изоморфные для $T=1337$ К, $N_{po}=2$ и $N_{po}=100$ зависимости давления от нормированного объема нанокристалла из $N=11$ – сплошная линия и $N=14 \cdot 10^5$ – пунктирная линия.

Рис. 3. Размерные изоморфно-изобарические зависимости нормированной на значение для макрокристалла температуры Дебая для двух форм: кубической ($f=1$) и стержневидной ($f=5$).

Из рис. 2 видно, что давление в нанокристалле при $(v/v_0) > (v/v_0)_0$ больше чем в макрокристалле, и для того чтобы соблюсти изобаричность $P=0$ необходимо увеличить межатомное расстояние (как это видно из рис. 4), что облегчает плавление нанокристалла.

Рис. 4. Размерные изоморфно-изобарические зависимости нормированного на значение для макрокристалла среднего расстояния между центрами ближайших атомов для двух форм: кубической ($f=1$) и стержневидной ($f=5$).

Полученная нами изобарическая зависимость функции T_m от $\lg(N)$ представлена на рис. 5, где также приведены размерные зависимости других авторов. Наши кривые рассчитаны для двух форм нанокристалла при изохорическом и изобарическом процессах.

Рис. 5. Размерная зависимость температуры плавления золота в сравнении с данными других авторов.

Изобарическая зависимость функции T_m от $N^{-1/3}$ при разных формах нанокристалла представлена на рис. 6 для $f > 1$ и на рис. 7 для $f < 1$. Как видно из рис. 5-7 зависимость $T_m(N)$ усиливается при отклонении формы нанокристалла от формы куба. Для RP-модели кривые $T_m(N, P=0)$ на рис. 5-7 заканчиваются при минимально возможном размере нанокристалла: $N_{cr}=11$ для куба. Величина N_{cr} увеличивается при отклонении значения f от единицы, т.е. при деформации кубической формы нанокристалла.

Рис. 6. Размерная изобарная ($P=0$) зависимость температуры плавления для стержневидных нанокристаллов.

Рис. 7. Размерная изобарная ($P=0$) зависимость температуры плавления для пластинчатых нанокристаллов.

Если рассматривать конечные точки размерной зависимости температуры плавления $T_m(N_{cr}, P=0)$, как точки начала кристаллизации, то

их аппроксимация даст зависимость температуры кристаллизации (T_{cr}) от размера, т.е. $\min[T_m(N_{cr}, P=0)] = T_{cr}(N, P=0)$.

На рис. 8 показана аппроксимация конечных точек размерной зависимости $T_m(N_{cr}^{-1/3}, P=0)$ для пластинчатых и стержневидных форм, которая определяет температуру начала кристаллизации: $T_{cr}(N^{-1/3}, P=0)$. Звёздочками на рис. 8 показаны оценки $T_{cr}(N^{-1/3})$, полученные в [3] методом Монте-Карло. Экстраполяция зависимости $T_{cr}(N^{-1/3}, P=0)$ на макрокристалл (т.е. на $N^{-1/3} = 0$) дала значение: $T_{cr}(N=\infty, P=0) = 921$ К для стержней и 1146 К для пластин, как это показано на рис. 8. Это хорошо согласуется с правилом Турнбулла [16] для отношения температуры начала кристаллизации к температуре плавления для макрокристалла чистого металла при $P=0$ [10]: $T_{cr}/T_m = 0,7 - 0,867$.

Рис. 8. Аппроксимация конечных точек размерной зависимости $T_m(N_{cr}^{-1/3})$ для пластинчатых и стержневидных форм.

4. Заключение

Таким образом, получена размерная изобарическая зависимость температуры плавления нанокристалла Au при $P=0$, которая лучше согласуется с экспериментальной зависимостью из [1], чем рассчитанная изохорическая зависимость. Показано, что чем сильнее форма нанокристалла отклоняется от энергетически наиболее оптимальной (для RP-модели это куб), тем при больших N_{cr} достигается точка начала кристаллизации. Аппроксимация таких значений N_{cr} для различных форм позволила оценить размерную зависимость температуры начала кристаллизации наноклапты золота.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований в рамках научных проектов № 16-03-00041_а, № 18-29-11013_мк и Программы Президиума РАН (программа № I.13).

Библиографический список:

1. **Buffat, P.** Size effect on the melting temperature of gold particles / P. Buffat, J.P. Borel // *Physical Review A*. – 1976. – V. 13. – I. 6. – P. 2287-2298.
2. **Bertoldi, D.S.** Thermodynamics of the melting process in *Au* nano-clusters: Phenomenology, energy, entropy and quasi-chemical modeling / D.S. Bertoldi, E.N. Millán, A.F. Guillermet // *Journal of Physics and Chemistry of Solids*. – 2017. – V. 111. – P. 286-293.
3. **Сдобняков, Н.Ю.** Исследование термодинамических характеристик нанокластеров золота с использованием многочастичного потенциала Гупта / Н.Ю. Сдобняков, П.В. Комаров, Д.Н. Соколов, В.М. Самсонов // *Физика металлов и металловедение*. – 2011. – Т. 111. – № 1. – С. 15-22.
4. **Shim, J.H.** Thermal stability of unsupported gold nanoparticle: a molecular dynamics study / J.H. Shim, B.J. Lee, Y.W. Cho // *Surface Science*. – 2002. – V. 512. – I. 3. – P. 262-268.
5. **Liu, H.B.** Melting behavior of nanometer sized gold isomers / H.B. Liu, J.A. Ascencio, M. Perez-Alvarez, M.J. Yacaman // *Surface Science*. – 2001. – V. 491. – I. 1-2. – P. 88-98.
6. **Магомедов, М.Н.** Изучение межатомного взаимодействия, образования вакансий и самодиффузии в кристаллах / М.Н. Магомедов – М.: Физматлит, 2010. – 544 с.
7. **Магомедов, М.Н.** О статистической термодинамике «безопрного» нанокристалла: Кремний / М.Н. Магомедов // *Кристаллография*. – 2017. – Т. 62. – № 3. – С. 487-504.
8. **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.
9. **Магомедов, М.Н.** О температуре Дебая и параметрах Грюнайзена для ГПУ кристаллов из молекул $p-H_2$ и $o-D_2$ / М.Н. Магомедов // *Журнал технической физики*. – 2013. – Т. 83. – № 9. – С. 56-62.
10. **Магомедов, М.Н.** О критерии фазового перехода кристалл-жидкость / М.Н. Магомедов // *Физика металлов и металловедение*. – 2008. – Т. 105. – № 2. – С. 127-136.
11. **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.
12. **Yokoo, M.** Ultrahigh-pressure scales for gold and platinum at pressures up to 550 GPa / M. Yokoo, N. Kawai, G. Kazutaka, Nakamura, K. Kondo, Y. Tange, T. Tsuchiya // *Physical Review B*. – 2009. – V. 80. – I. 10. – P. 104114-1-104114-9.
13. **Takemura, K.** Isothermal equation of state for gold with a *He*-pressure medium / K. Takemura, A. Dewaele // *Physical review B*. – 2008. – V. 78. – I. 10. – P. 104119-1-104119-13.
14. **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.
15. **Dorfman, S.M.** Intercomparison of pressure standards (*Au, Pt, Mo, MgO, NaCl* and *Ne*)

to 2.5 Mbar / S.M. Dorfman, V.B. Prakapenka, Y. Meng, T.S. Duffy // Journal of Geophysical Research. – 2012. – V. 117. – I. 8. – Art. B08210. – P. 1-15.

16. **Turnbull, D.** Microscopic observation of the solidification of small metal droplets / D. Turnbull, R.E. Cech // Journal of Applied Physics. – 1950. – V. 21. – I. 8. – P. 804-810.

References:

1. **Buffat, P.** Size effect on the melting temperature of gold particles / P. Buffat, J.P. Borel // Physical Review A. – 1976. – V. 13. – I. 6. – P. 2287-2298.

2. **Bertoldi, D.S.** Thermodynamics of the melting process in *Au* nano-clusters: Phenomenology, energy, entropy and quasi-chemical modeling / D.S. Bertoldi, E.N. Millán, A.F. Guillermet // Journal of Physics and Chemistry of Solids. – 2017. – V. 111. – P. 286-293.

3. **Sdobnyakov, N.Yu.** Issledovanie termodinamicheskikh harakteristik nanoklasteroz zolota s ispol'zovaniem mnogochastichnogo potentsiala Gupta / N.Yu. Sdobnyakov, P.V. Komarov, D.N. Sokolov, V.M. Samsonov // Fizika metallov i metallovedenie. – 2011. – V. 111. – no. 1. – P. 15-22.

4. **Shim, J.H.** Thermal stability of unsupported gold nanoparticle: a molecular dynamics study / J.H. Shim, B.J. Lee, Y.W. Cho // Surface Science. – 2002. – V. 512. – I. 3. – P. 262-268.

5. **Liu, H.B.** Melting behavior of nanometer sized gold isomers / H.B. Liu, J.A. Ascencio, M. Perez-Alvarez, M.J. Yacaman // Surface Science. – 2001. – V. 491. – I. 1-2. – P. 88-98.

6. **Magomedov, M.N.** Izuchenie mezhatomnogo vzaimodejstviya, obrazovaniya vakansij i samodiffuzii v kristallah / M.N. Magomedov – M.: Fizmatlit, 2010. – 544 p.

7. **Magomedov, M.N.** O statisticheskoy termodinamike «bezopornogo» nanokristalla: Kremnij / M.N. Magomedov // Kristallografiya. – 2017. – V. 62. – no. 3. – P. 487-504.

8. **Magomedov, M.N.** Izmenenie teplofizicheskikh svoystv OCK-zheleza pri izotermicheskom szhatii / M.N. Magomedov // Zhurnal tekhnicheskoy fiziki. – 2015. – V. 85. – I. 11. – P. 48-54.

9. **Magomedov, M.N.** O temperature Debaya i parametrah Gryunajzena dlya GPU kristallov iz molekul $p-H_2$ i $o-D_2$ / M.N. Magomedov // Zhurnal tekhnicheskoy fiziki. – 2013. – V. 83. – no. 9. – P. 56-62.

10. **Magomedov, M.N.** O kriterii fazovogo perekhoda kristall-zhidkost' / M.N. Magomedov // Fizika metallov i metallovedenie. – 2008. – V. 105. – no. 2. – P. 127-136.

11. **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.

12. **Yokoo, M.** Ultrahigh-pressure scales for gold and platinum at pressures up to 550 GPa / M. Yokoo, N. Kawai, G. Kazutaka, Nakamura, K. Kondo, Y. Tange, T. Tsuchiya // Physical Review B. – 2009. – V. 80. – I. 10. – P. 104114-1-104114-9.

13. **Takemura, K.** Isothermal equation of state for gold with a *He*-pressure medium / K. Takemura, A. Dewaele // Physical review B. – 2008. – V. 78. – I. 10. – P. 104119-1-104119-13.

14. **Dorogokupec, P.I.** Pochti absolyutnye uravneniya sostoyaniya almaza, *Ag, Al, Au, Cu, Mo, Nb, Pt, Ta, W* dlya kvazigidrostaticheskikh uslovij / P.I. Dorogokupec, T.S. Sokolova, B.S. Danilov, K.D. Litasov // Geodinamika i tektonofizika. – 2012. – V. 3. – no. 2. – P. 129-166.

15. **Dorfman, S.M.** Intercomparison of pressure standards (*Au, Pt, Mo, MgO, NaCl* and *Ne*) to 2.5 Mbar / S.M. Dorfman., V.B. Prakapenka, Y. Meng, T.S. Duffy // Journal of

Geophysical Research. – 2012. – V. 117. – I. 8. – Art. B08210. – P. 1-15.

16. **Turnbull, D.** Microscopic observation of the solidification of small metal droplets / D. Turnbull, R.E. Cech // Journal of Applied Physics. – 1950. – V. 21. – I. 8. – P. 804-810.

GOLD NANOCRYSTAL PROPERTIES DEPENDENCE ON SIZE AND SHAPE AT ISOBARIC CONDITIONS

E.N. Akhmedov

Institute for Geothermal Research of the Dagestan Scientific Center of RAS

DOI: 10.26456/pcascnn/2018.10.053

Abstract: Using the nanocrystal RP-model, the state equation of a gold was calculated. On the basis of this equation the isobaric dependence of the melting temperature on the size and shape was obtained at $P=0$. It is shown, that the stronger the shape of the nanocrystal deviates from the most energetically effective one, the bigger the size of the nanocrystal at the crystallization start point. Approximation of such points for various shapes made it possible to determine the crystallization start temperature of the *Au* macrocrystal: $T_{cr}(N=\infty, P=0)=921$ K, which coincided with the rule of Turnbull.

Keywords: equation of state, nanocrystal, gold, size, shape.

Ахмедов Энвер Нариманович – младший научный сотрудник лаборатории математического моделирования геотермальных объектов ФГБУН «Институт проблем геотермии Дагестанского научного центра Российской академии наук»

Enver N. Akhmedov – Junior Researcher, Laboratory of Mathematical Modeling of Geothermal Objects, Institute for Geothermal Research of Daghestan Scientific Center RAS