

УДК 538.9

Коротун А.В.¹, Рева В.І.¹, Смирнова Н.А.², Курбацький В.П.¹, Погосов В.В.³

¹ доц. НУ «Запорізька політехніка»

² ст. викл. НУ «Запорізька політехніка»

³ проф. НУ «Запорізька політехніка»

ВПЛИВ ГЕОМЕТРІЇ НАНОСТРУКТУР НА ЇХ ТЕРМОДИНАМІЧНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ

Широкий спектр новітніх технологій надає безпрецедентні можливості при виготовленні різноманітних структур нанометрових розмірів. Властивості подібних систем залежать від форми і розмірів. Для їх синтезу потрібні знання термодинамічних властивостей, зокрема, температури плавлення, питомої теплоємності, теплопровідності, тощо. Крім того, фундаментальне розуміння особливостей термодинамічних властивостей наноструктур особливо важливе для високотемпературних застосувань, включаючи високотемпературний каталіз [1]. Тому метою даної роботи є дослідження впливу геометричної форми низькорозмірних систем на розмірні залежності температури плавлення і питомої теплоємності.

В рамках моделі, що враховує розмірну залежність відношення кількості атомів на поверхні до їх кількості в об'ємі, вираз для температури плавлення наноструктур може бути записаний у вигляді [2]:

$$\frac{T_m}{T_m^{\text{bulk}}} = 1 - \frac{3}{4} \kappa, \quad (1)$$

де T_m^{bulk} – температура плавлення об'ємного матеріалу; κ – відношення кількості атомів на поверхні до їх кількості в об'ємі, що визначається як

$$\kappa = \frac{4r_0}{D}(3-d). \quad (2)$$

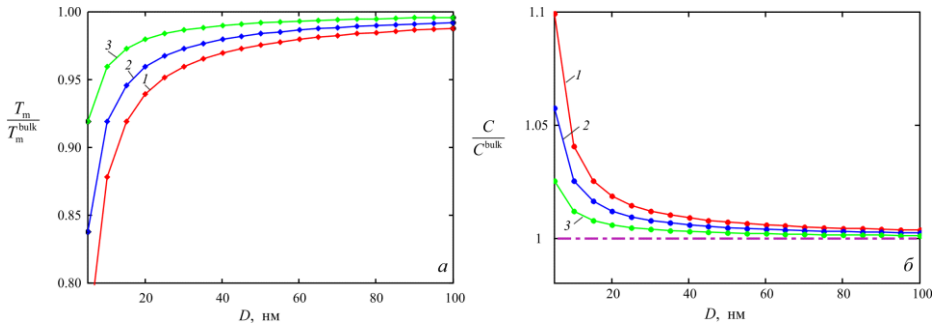
Тут d – розмірність системи; r_0 – радіус атому; D – характерний розмір системи (діаметр для наночастинки або нанодроту і товщина для наноплівки).

Вираз для питомої теплоємності наноструктури має вигляд

$$\frac{C}{C^{\text{bulk}}} = \left(1 - \frac{3}{4}\kappa\right) \left[1 - \frac{3}{4}\kappa \frac{T_m^{\text{bulk}}}{T_m^{\text{bulk}} - T_0}\right]^{-1}, \quad (3)$$

де C^{bulk} – теплоємність 3D-матеріалу; T_0 – температура оточуючого середовища.

Співвідношення (1) – (3) надалі використовуються для аналізу розмірних залежностей температури плавлення і питомої теплоємності наносистем срібла різної геометрії (рис. 1).



a – температура плавлення; b – питома теплоємність.

1 – наночастинка; 2 – нанодріт; 3 – наноплівка.

Рисунок 1 – Розмірні залежності.

Як видно з рис. 1, найбільш істотно температура плавлення і питома теплоємність відрізняються від об'ємних значень у випадку наночастинок. Це пов'язане з тим, що зі зменшенням розмірності системи збільшується кривизна поверхні, а, отже, збільшується кількість поверхневих обірваних зв'язків.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. **Liu, X.** Surface activation of transition metal nanoparticles for heterogeneous catalysis: what we can learn from molecular dynamics [Text] / X. Liu, X. Wen, R. Hoffmann // ACS Catalysis. – 2018. – V. 8. – P. 3365–3375.
2. **Xie, D.** Thermal stability of indium nanocrystals: A theoretical study [Text] / D. Xie, M.P. Wang, W.H. Qi, L.F. Cao // Mater. Chem. Phys. – 2006. – V. 96. –P. 418–421.