

БАРИЧЕСКАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ТЕМПЕРАТУРЫ ПЛАВЛЕНИЯ НИОБИЯ ДЛЯ МАКРО- И НАНО-КРИСТАЛЛОВ

Крамынин С. П., Ахмедов Э. Н.

ФГБУН Институт физики им. Х.И. Амирханова Дагестанского научного центра РАН,
367015, Махачкала, ул. М. Ярагского 94
e-mail: kraminin@mail.ru

Для расчетов барической зависимости температуры плавления $T_m(P)$ ОЦК Nb использован формализм из¹. Для описания парного межатомного взаимодействия был использован 4-х параметрический потенциал Ми-Леннард-Джонса с параметрами: $r_o = 2.8648 \cdot 10^{-10}$ м, $D/k_B = 30200$ К, $a = 2.3$, $b = 6.2$, где k_B – постоянная Больцмана. Исходя из критерия плавления Линдемманна и полученного нами уравнения состояния, для зависимости $T_m(P)$ получено²: $T_m(P) = T_m(0)[V(P)/V(0)]^{2/3}[\Theta(V(P)/V(0))/\Theta(V(0)/V(0))]^2$, где $T_m(0)$ и $V(0)$ – температура плавления и объем при $P = 0$, $V(0) = N \pi r_o^3 / (6 k_p)$.

Взяв для Nb значение³: $T_m(0) = 2742$ К мы рассчитали $T_m(P)$ и $T'_m(P)$, для макрокристалла ($N = \infty$) и нанокристалла кубической формы из $N = 83$ числа атомов. Для расчета свойств нанокристалла был использован метод из².

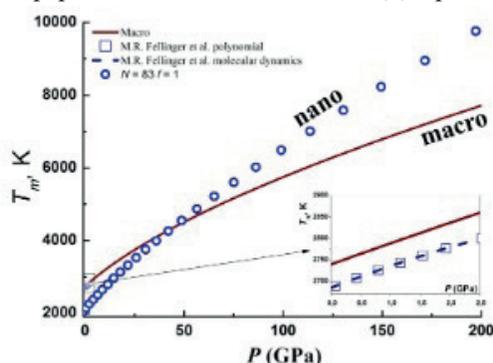


Рисунок 1. Наши расчеты $T_m(P)$ – сплошная линия. Окружности – расчеты для нанокристалла (при $N = 83$). Квадраты и штриховая линия – данные из³.

Т.к. экспериментальных данных по $T_m(P)$ для макрокристалла Nb в литературе нет, поэтому мы сравнивали $T_m(P)$ и $T'_m(P)$ с результатами из³.

Литература

1. Magomedov M.N., Technical Physics, 2015, 60, 11, 1619.
2. Magomedov M.N. Physics of the Solid State, 2019, 61, 4, 642.
3. Fellingner M.R., Park H. and Wilkins J.W., Phys. Rev. B., 2010, 81, 14, 144119.

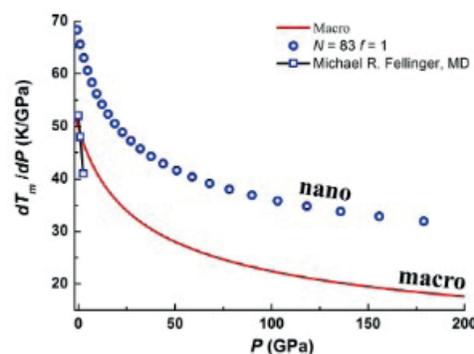


Рисунок 2. Зависимость $T'_m(P)$. Окружности – наши расчеты для нанокристалла (при $N = 83$), сплошная – для макрокристалла. Символы – данные из³.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-29-11013_мк.