

## ИЗМЕНЕНИЕ УПРУГИХ СВОЙСТВ ПРИ УМЕНЬШЕНИИ РАЗМЕРА НАНОКРИСТАЛЛА ЗОЛОТА

Ахмедов Э.Н.

Институт проблем геотермии Дагестанского НЦ РАН,  
367030, Махачкала, проспект И. Шамиля 39а,  
e-mail: aen-code@yandex.ru

На основе ранее опробованной методики<sup>1</sup>, позволяющей рассчитывать, как макроскопические ( $N = \infty$ ), так и размерные свойства вещества, получены зависимости модуля упругости:  $B_T = -V(\partial P/\partial V)_T$ , и его производной по давлению:  $B_T'(P) = (\partial B_T/\partial P)_T$ , от числа атомов  $N$  в нанокристалле. Расчеты выполнены для ГЦК золота при изотермо-изобарическом (т.е. при  $T = \text{const}$  и  $P = 0$ ) уменьшении  $N$  для нанокристалла кубической формы.

Парное межатомное взаимодействие представлено потенциалом Ми-Леннарда-Джонса:  $\phi(r) = [D/(b-a)] \cdot [a(r_0/r)^b - b(r_0/r)^{12}]$ , где  $D$  и  $r_0$  – глубина и координата минимума потенциала,  $b > a$  – параметры. Данные параметры были определены по методу из<sup>2</sup>. Для ГЦК-Au нами получено ( $k_B$  – постоянная Больцмана):  $r_0 = 0.28751$  nm,  $a = 2.93$ ,  $b = 12.82$ ,  $D/k_B = 7411.5$  K.

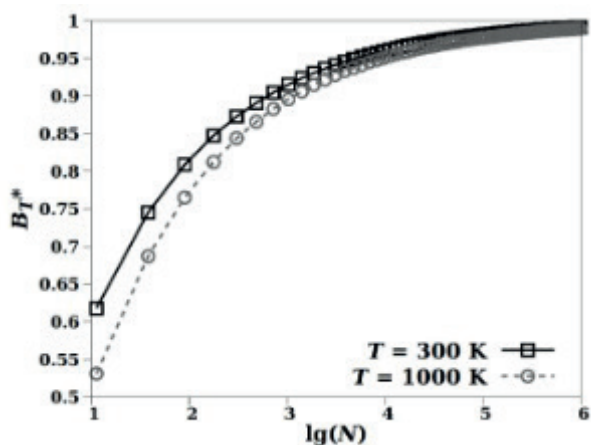


Рисунок 1. Размерная зависимость для нормированного значения  $B_{\infty}^*$ .

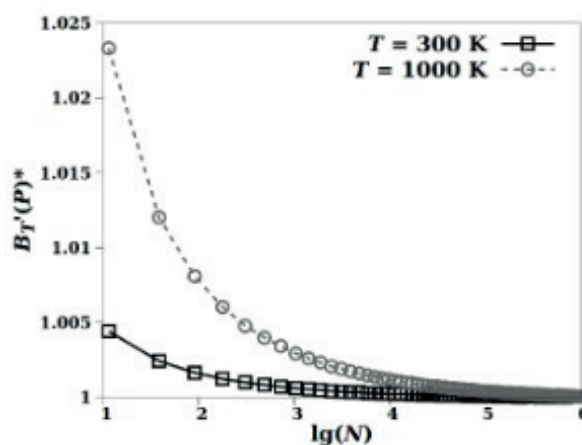


Рисунок 2. Размерная зависимость для нормированного значения  $B_T'(P)^*$ .

На рис. 1 и 2 показаны изоморфно-изотермо-изобарические зависимости нормированных (на значение для макрокристалла) функций  $B_T^*$  и  $B_T'(P)^*$  от  $N$  для нанокристалла Au кубической формы. Из рисунков видно, что с уменьшением размера нанокристалла, значение  $B_T^*$  уменьшается, а значение  $B_T'(P)^*$  увеличивается. При изоморфно-изобарическом росте температуры, размерные зависимости данных функций усиливаются.

### Литература

1. Magomedov M.N. Physics of the Solid State, 2019, 61, 4, 642.
2. Akhmedov E.N. Journal of Physics and Chemistry of Solids, 2018, 121, 62.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 18-29-11013\_мк) и программы Президиума Российской академии наук (грант № I.13).