

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
ТВЕРСКОЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

Сдобняков Н.Ю., Соколов Д.Н.

**ИЗУЧЕНИЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ
И СТРУКТУРНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК
НАНОЧАСТИЦ МЕТАЛЛОВ
В ПРОЦЕССАХ ПЛАВЛЕНИЯ
И КРИСТАЛЛИЗАЦИИ: ТЕОРИЯ
И КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ**

МОНОГРАФИЯ

Тверь 2018

УДК 536.42
ББК В375.1
С27

Сдобняков Н.Ю., Соколов Д.Н.

С27 Изучение термодинамических и структурных характеристик наночастиц металлов в процессах плавления и кристаллизации: теория и компьютерное моделирование: монография. – Тверь: Тверской государственный университет, 2018. – 176 с.

ISBN 978-5-7609-1323-4

Монография является результатом обобщения исследований, выполнявшихся в рамках ряда научных проектов Тверского государственного университета, на кафедре теоретической физики и в дальнейшем на кафедре общей физики с 2009 года по начало 2018 года. Представлено описание комплекса методик для получения в результате моделирования методом Монте-Карло термодинамических и структурных характеристик металлических наночастиц, теоретических подходов к исследованию соответствующих размерных зависимостей. В качестве объектов моделирования рассматриваются свободные металлические ГЦК нанокластеры золота, меди, алюминия и кобальта.

Монография предназначена для студентов, аспирантов и преподавателей физических, химических и технологических факультетов вузов, также может быть полезна научным сотрудникам, работающим в области компьютерного моделирования наносистем, в том числе для изучения процессов спонтанной коалесценции, нанопайки, растекания и кристаллизации в наноразмерных системах, а также представляет интерес для специалистов в области молекулярной электроники и технологии синтеза нанокomпозиционных материалов.

The monograph is the result of generalization of the studies carried out in the framework of a number of scientific projects at Tver State University, the Department of Theoretical Physics and later at the Department of General Physics, from 2009 to the beginning of 2018. A description of a set of techniques for obtaining the thermodynamic and structural characteristics of metallic nanoparticles as a result of modeling by the Monte Carlo method, and theoretical approaches to the study of the corresponding size dependencies is presented. The unsupported metal fcc nanoclusters of gold, copper, aluminum and cobalt are considered as modeling objects.

Designed for students, post-graduate students and teachers of physical, chemical, and technological faculties of universities, it can also be useful for scientific personnel working in the field of computer simulation of nanosystems, including studying the processes of spontaneous coalescence, nanosoldering, spreading and crystallization in nanoscale systems, and also is of interest for specialists in the field of molecular electronics and synthesis technology of nanocomposite materials.

Табл. 10. Ил. 118. Библиограф. 351 назв.

УДК 536.42
ББК В375.1

ISBN 978-5-7609-1323-4

Монография опубликована при поддержке РФФИ (проект № 17-53-04010).

© Сдобняков Н.Ю., Соколов Д.Н., 2018
© Тверской государственный университет, 2018

Предисловие

Металлические нанокластеры могут демонстрировать в экспериментах загадочное и парадоксальное поведение. В одних случаях это загадочное поведение может являться артефактом, т.е. ошибкой эксперимента, а в некоторых случаях – адекватно отражать реально существующее необычное поведение наночастиц. Очевидно, что в настоящее время особую актуальность приобретает дальнейшее развитие и применение методов компьютерного моделирования к исследованию наночастиц и наносистем. При грамотном применении именно для нанометрового диапазона методы компьютерного моделирования вполне могут конкурировать с более затратными методами прямого эксперимента. Вычислительные эксперименты, как правило, достаточно трудоемки, но в гораздо меньшей степени, чем аналогичные прямые эксперименты. Это делает актуальным их применение на этапе исследований, предваряющем прямые эксперименты, так и для независимой экспертизы результатов прямых экспериментов. К настоящему времени имеется возможность моделирования не только наноразмерных объектов и наносистем, но и протекающих в них процессов, включая технологические процессы, связанные с получением и использованием наночастиц.

Данная монография является результатом обобщения исследований, выполнявшихся в рамках ряда научных проектов Тверского государственного университета, на кафедре теоретической физики и в дальнейшем на кафедре общей физики с 2009 года по начало 2018 года. В данной работе представлено подробное описание комплекса методик для получения в результате моделирования методом Монте-Карло термодинамических и структурных характеристик металлических наночастиц, а также теоретических подходов к исследованию соответствующих размерных зависимостей. В качестве объектов моделирования рассматриваются свободные металлические ПЦК нанокластеры золота, меди, алюминия и кобальта. Отметим лишь, что применение активных и пассивных наноразмерных рабочих элементов в электронике и других направлениях нанотехнологий требует знания термодинамических и структурных характеристик наночастиц и их размерных зависимостей. Кроме того, исследования в этом направлении представляют большой интерес и с фундаментальной точки зрения, поскольку способствует формированию общих методологических подходов в физико-химии наночастиц.

Авторы выражают признательность д. ф.-м. н. В.М. Самсонову и д. ф.-м. н. П.В. Комарову, совместно с которыми проводились исследования по теме монографии. Авторы также благодарны коллегам за обсуждение результатов работы на научных конференциях и семинарах. В частности, авторы выражают признательность к. ф.-м. н. А.Н. Базулеву, В.С. Мясниченко. Кроме того, отдельные результаты были получены при плодотворном сотрудничестве с Н.В. Новожиловым, А.С. Антоновым, А.Ю. Колосовым.

Оглавление

Предисловие.....	3
Введение.....	4
Глава 1. Теоретические и экспериментальные исследования фазовых переходов первого рода в металлических наносистемах..	11
1.1. Наночастицы и моделирование физико-химических процессов с их участием.....	11
1.2. Обзор вычислительных методов, используемых при моделировании.....	13
1.3. Результаты рассмотрения поведения наночастиц при фазовом переходе 1 рода, полученные классическими методами моделирования.....	23
1.4. Теоретическое рассмотрение размерной зависимости температуры плавления наночастиц.....	30
1.5. Экспериментальные исследования плавления и кристаллизации наночастиц.....	36
1.6. Заключение.....	43
Глава 2. О методике проведения компьютерного эксперимента по моделированию термодинамических и структурных характеристик нанокластеров металлов методом Монте-Карло....	44
2.1. О применении потенциала Гупта для описания межмолекулярного взаимодействия в металлических системах.....	44
2.2. Об алгоритме компьютерной программы для моделирования термодинамических и структурных характеристик при фазовом переходе первого рода для ГЦК нанокластеров металлов.....	46
2.3. К вопросу об идентификации фазового перехода первого рода в нанокластерах металлов.....	48
2.4. О методике исследования изменения формы и структурных характеристик наночастиц при фазовом переходе кристалл-жидкость..	52
2.5. О практических аспектах моделирования фазовых переходов первого рода в нанокластерах металлов.....	66
2.6. Заключение.....	73
Глава 3. О результатах компьютерного эксперимента по моделированию термодинамических и структурных характеристик при фазовом переходе первого рода для нанокластеров металлов методом Монте-Карло.....	74
3.1. Моделирование плавления и кристаллизации металлических нанокластеров, определение параметров гистерезиса калорических кривых потенциальной части внутренней энергии.....	74
3.2. Расчет размерных зависимостей температуры плавления и кристаллизации металлических нанокластеров.....	78

3.3. Расчет теплоемкости металлических нанокластеров по данным результатов компьютерного эксперимента.....	83
3.4. Исследование размерной зависимости удельной избыточной поверхностной энергии металлических нанокластеров.....	86
3.5. О результатах исследования структурных характеристик в металлических нанокластерах при фазовом переходе плавление – кристаллизация.....	90
3.6. О влиянии поверхностных и объемных дефектов на термодинамические и структурные характеристики наночастиц алюминия при плавлении.....	96
3.7. Основные результаты и выводы к главе 3.....	103
Глава 4. Термодинамический подход к исследованию размерных зависимостей термодинамических характеристик наночастиц (температура плавления, температура кристаллизации, теплота плавления, удельная свободная поверхностная энергия).....	105
4.1. Исследование удельной свободной поверхностной энергии наноклапел алюминия с использованием потенциала Шоммерса.....	105
4.2. О взаимосвязи размерных зависимостей температур плавления и кристаллизации наночастиц металлов.....	112
4.3. Расчет размерных зависимостей теплот плавления и кристаллизации наночастиц металлов.....	119
4.4. Зависимость минимального размера наночастиц металлов от температуры при коалесценции.....	123
4.5. Термодинамический подход к проблеме размерной зависимости температуры плавления тонких пленок.....	127
4.6. Основные результаты и выводы к главе 4.....	134
Основные результаты и выводы.....	136
Список цитируемой литературы.....	138
Приложение 1. Вспомогательные программы для проведения процедуры моделирования	161
Приложение 2. О структурных характеристиках нанокластеров Al и Co	169
Оглавление.....	173

Научное издание

Сдобняков Николай Юрьевич

Соколов Денис Николаевич

ИЗУЧЕНИЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ
И СТРУКТУРНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК
НАНОЧАСТИЦ МЕТАЛЛОВ
В ПРОЦЕССАХ ПЛАВЛЕНИЯ
И КРИСТАЛЛИЗАЦИИ: ТЕОРИЯ
И КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

МОНОГРАФИЯ

Печатается с оригиналов авторов

Подписано в печать 25.12.2018. Формат 60 × 84 ¹/₁₆.

Усл. печ. л. 11,0. Тираж 300 экз. Заказ № 686.

Отпечатано в редакционно-издательском управлении

Тверского государственного университета.

Адрес: Россия, 170100, г. Тверь, Студенческий пер., д. 12, корпус Б.

Тел. РИУ: 8 (4822) 35-60-63.