

ОЦЕНКА ИЗБЫТОЧНОЙ ПОВЕРХНОСТНОЙ, ИЗБЫТОЧНОЙ ЛИНЕЙНОЙ ЭНЕРГИИ И ЭНЕРГИИ ВЕРШИН ДЛЯ ИКОСАЭДРИЧЕСКИХ НАНОЧАСТИЦ РАЗЛИЧНЫХ МЕТАЛЛОВ.

К.К. Небывалова

Научный руководитель – проф. Самсонов В.М.
Тверской государственный университет

e-mail: nebuvalova.kristina@mail.ru

Цель работы. Разработка и апробирование метода нахождения избыточной поверхностной энергии, избыточной линейной энергии ребер и точечной энергии вершин икосаэдрических наночастиц.

Метод и объекты исследования. Поверхностная энергия имеет непосредственное отношение к получению и обработке материалов, таких как пайка, сварка, спекание. Для наночастиц необходимо так же знать размерную зависимость избыточной поверхностной энергии $\varepsilon = \frac{E^{(S)} - E^{(\infty)}}{\omega}$,

например для однокомпонентных икосаэдрических наночастиц различных металлов. Нахождение поверхностной энергии частицы сводится к формуле:

где

$$E^{(\infty)} = E^c \cdot N(\omega)$$

$$E^{(S)} = E_{\text{пов}}^{\omega} = E_{\text{пов}}^v + E_{\text{пов}}^e + E_{\text{пов}}^f$$

где ω – это площадь поверхности икосаэдра, рассчитывается по формуле:

$\omega = 5a^2\sqrt{3}$, где a – длина ребра, которую можно выразить через диаметр атома d : $a = (n + 1)d$. Соответственно,

$$E^{(S)} = \frac{E^c \cdot N^{\omega} z^{\omega}}{z_1^{\infty}} = \frac{E^c \cdot N^v z^v}{z_1^{\infty}} + \frac{E^c \cdot N^e z^e}{z_1^{\infty}} + \frac{E^c \cdot N^f z^f}{z_1^{\infty}}$$

$N^v = 12$, $N^e = 30(n - 1)$, $N^f = N^{\omega} - 30(n - 1) - 12$

$N^{\omega} = N(n) - N(n - 1)$, где n – число слоев [1]

Значения представлены в Таблице 1, и удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными [2]

Таблица 1. Избыточная поверхностная энергия ε в Дж/м²

Me	Ag	Au	Cu	Ni	Pb	Pt	Cd	β -Co	Tl	Zn
ε	1,65	2,10	2,47	1,53	1,48	3,55	0,56	3	0,74	0,82
ε_{ex}	1,64	2,03	2,15	2,78	0,66	2,20	0,73	2,75	0,68	1
Me	Cr	Bi	Ga	In	Mo	Nb	Sn	Ta	V	W
ε	2,93	0,86	1,63	1,09	4,19	2,44	1,60	4,44	3,62	5,25
ε_{ex}	2,37	0,52	0,79	0,68	3,1	2,6	0,7	2,9	2,18	3,27

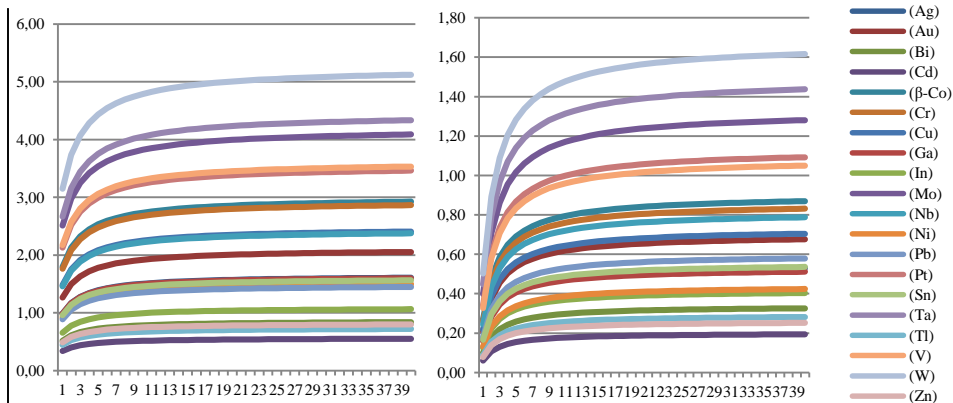


Рис 1. Размерные зависимости а - избыточной поверхностной энергии $\varepsilon^S(n)$ в Дж/м² для различных металлов б - избыточной линейной энергии ребер $\varepsilon^L(n)$ в нДж/м для различных металлов.

- Выводы:**
1. Поверхностная энергия икосаэдрических наночастиц монотонно уменьшается с уменьшением их размера
 2. При малых радиусах наночастиц R в некотором приближении выполняется линейная формула $\varepsilon = \varepsilon_0 + K_{\varepsilon}R$. Значения коэффициентов пропорциональности K_{ε} согласуются со значениями коэффициента K в линейной формуле Русанова $\sigma = KR$ для поверхностного натяжения σ .
 3. При $N \rightarrow \infty$ значения удельной поверхностной энергии ε_{∞} хорошо или удовлетворительно согласуются с имеющимися экспериментальными данными для ГЦК и ГПУ – металлов.
 4. Значения линейной энергии ребер ε_L согласуются порядку величины с экспериментальными и теоретическими данными для линейного натяжения χ других линейных границ раздела, включая линейное натяжение параметра смачивания.

Исследования выполнены при поддержке Минобрнауки РФ в рамках выполнения ГЗ в сфере научной деятельности (проект 0817-2020-007)

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Samsonov V.M., Vasilyev S.A., Nebyvalova K.K., Talyzin I.V., et al // Journal of Nanoparticle Research. 2020. V. 22. I. 8. P.247.
2. Alchagirov.A.B., Alchagirov.B.B., Tao Khokonov Kh.B.// Transactions of JWRL Osaka University. Osaka, Japan. V.2001. V30.P 287-292