

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ
ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУР
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

УДК 536.7 + 539.23 + 550.36

Рег. № НИОКТР: АААА-А18-118012590336-9

УТВЕРЖДАЮ

Директор ОИВТ РАН

_____ О.Ф. Петров

«____» _____ 20____ г.

ОТЧЕТ
О НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЕ

в рамках государственного задания по программе президиума РАН № 6:
«Новые подходы к созданию и изучению экстремальных состояний вещества»
(координатор – академик РАН В.Е. Фортов)
направление 18: «Физико-технические и экологические проблемы энергетики;
теплообмен; теплофизические и электрофизические свойства веществ;
низкотемпературная плазма и технологии на ее основе»

по теме № 2-13:

**«Получение уравнения состояния и барической зависимости
теплофизических свойств различных веществ как в макро-, так и в
нано-размерном состоянии при P - T -условиях ядра Земли»**
(промежуточный за 2019)

Руководитель НИР:

г.н.с. ИПГ ДНЦ РАН,
доктор физ.-мат. наук _____ М.Н. Магомедов

Махачкала 2019

СПИСОК ИСПОЛНИТЕЛЕЙ

Руководитель проекта,
Главный научный сотрудник
доктор физ.-мат. наук

подпись, дата

М..Н. Магомедов
(реферат, отчет, заключение,
общее редактирование)

Младший научный сотрудник

подпись, дата

Э.Н. Ахмедов
(раздел 2, 6, 7)

СОДЕРЖАНИЕ

	Реферат	4
1	Актуальность проведенных исследований	5
2	Краткие формулировки важнейших результатов	6
3	Новизна результатов, их научная и практическая значимость	9
4	Выполнены ли все поставленные задачи, если нет, то по каким причинам	9
5	Количество и список опубликованных монографий	9
6	Количество и список статей опубликованных в рецензируемых журналах	10
7	Количество и список докладов на конференциях	11
8	Количество и список результатов интеллектуальной собственности	14
	Заключение	14

РЕФЕРАТ

Отчет состоит из: **8 глав, 14 стр., 2 рисунков, 0 таблиц, 8 источников использованной литературы**, списка научных публикаций по теме за отчетный период, включающий в себя **31 опубликованную работу**.

Тема: Получение уравнения состояния и барической зависимости теплофизических свойств различных веществ как в макро-, так и в нано-размерном состоянии при *P-T*-условиях ядра Земли

Объектами исследования являются кристаллы простых однокомпонентных веществ в макро- и нано-размерном состоянии, а также кристаллы бинарных сплавов замещения.

Цели работы: 1) разработка методики для определения параметров парного межатомного потенциала Ми-Леннард-Джонса для бинарных сплавов металлов и полупроводников;

2) апробация полученных параметров потенциала Ми-Леннард-Джонса при расчетах теплофизических свойств кристаллов в макро-размерном состоянии;

3) разработка методики для изучения изменения уравнения состояния и теплофизических свойств при переходе вещества в нано-размерное состояние;

4) изучение изменения уравнения состояния и теплофизических свойств при переходе вещества в нано-размерное состояние при уменьшении размера нанокристаллов как простых (Si, Ge, Mo, Au), так и бинарных веществ (Si-Ge, Mo-W).

В процессе работы на данном этапе нами были **получены следующие результаты:**

1. Предложена методика расчёта параметров парного межатомного потенциала Ми-Леннард-Джонса для бинарных сплавов металлов и полупроводников. На основании данной методики рассчитаны уравнения состояния и теплофизические свойства макрокристаллов как простых однокомпонентных веществ (Au, Fe, Mo, W, Nb, Si, Ge, изотопно-чистый алмаз (из C-12 или из C-13 изотопов)), а также бинарных твердых растворов замещения (Mo-W, Si-Ge). Сравнение показало хорошее согласие с экспериментальными данными.

2. Впервые получены данные по барическим зависимостям для коэффициента теплового расширения и его производной по давлению, для изохорной и изобарной производных поверхностной энергии по температуре для указанных веществ. Впервые получена барическая зависимость как температуры плавления, так и ее производной по давлению для ниобия.

3. Изучены изменения уравнения состояния и теплофизических свойств при изотермо-изоморфном переходе вещества в нано-размерное состояние при различных температурах. Изучено изменение свойств при отклонении формы нанокристалла от наиболее энергетически оптимальной формы.

4. На основании RP-модели нанокристалла с вакансиями и делокализованными атомами изучено изменение модуля упругости ($B_T = -V(\partial P/\partial V)_T$) для нанокристалла аргона. Показано, что при изоморфно-изобарическом уменьшении размера нанокристалла функция B_T уменьшается, а в случае изоморфно-изохорического уменьшения размера нанокристалла модуль упругости аргона возрастает при уменьшении в нем числа атомов.

Ключевые слова: уравнение состояния, нанокристалл, теплофизические свойства, бинарный твердый раствор замещения

1. Актуальность проведенных исследований.

Известно, что при уменьшении размера нанокристалла его свойства изменяются. При этом наименее изучены размерные зависимости барических свойств. Поэтому мы разработали аналитическую методику для изучения изменения с размером как уравнения состояния, так и барических зависимостей решеточных и поверхностных свойств нанокристалла. Разработка именно аналитической (а не численной, как сейчас делает большинство ученых) методики для прогноза свойств вещества при переходе от макро- к нано-кристаллу в различных T - v -условиях является актуальной задачей, над которой работают ученые многих стран. Здесь и далее T – температура, $v = V/N$ – удельный объем.

Но экспериментальное изучение размерных зависимостей проводят, как правило, в изобарических условиях, т.е. когда давление в системе постоянно: $P = \text{const}$. Вместе с тем теоретические расчеты проводят, в большинстве работ, для изохорного процесса, т.е. при постоянной плотности: $R = \text{const}$. Это связано с тем, что в эксперименте трудно сохранить постоянную плотность нанокристалла, а в теоретических моделях трудно было определить поверхностное давление, а потому и уравнение состояния нанокристалла. В связи с этим возникают следующие вопросы.

(i). Насколько велика разница в изменении того или иного свойства при изохорном и при изобарном уменьшении размера нанокристалла?

(ii). Какие свойства изменяются слабо при изохорном либо изобарном изменении размера нанокристалла?

Поэтому мы изучили размерное изменение различных свойств веществ как при изохорном, так и при изобарном уменьшении числа атомов в нанокристалле. Методика была апробирована на кристаллах простых однокомпонентных веществ (Au, Fe, Mo, W, Nb, Si, Ge), а также бинарных твердых растворов замещения (Mo-W, Si-Ge).

Кроме этого, в наших исследованиях помимо решения этой основной задачи был решен и ряд вспомогательных задач, которые методически связаны с основной целью. Например, нам пришлось разработать метод для изучения изменения модуля упругости ($B_T = -V(\partial P/\partial V)_T$) при уменьшении размера нанокристалла как в изоморфно-изохорном, так и в изоморфно-изобарном процессе. Расчеты были выполнены для нанокристалла аргона при $T = 10$ К. Показано, что при изоморфно-изобарном уменьшении размера нанокристалла функция B_T уменьшается, а в случае изоморфно-изохорного уменьшения размера модуль упругости нанокристалла аргона возрастает.

В процессе работы по плану проекта помимо изучения свойств нанокристаллов также были получены оценки некоторых свойств для макрокристаллов указанных веществ, которых нет в мировой литературе даже при $T = 300$ К и $P = 0$. Речь идет об изотермических производных по давлению для функций: температуры Дебая (Θ), коэффициента теплового расширения (α_p), изохорной и изобарной теплоемкостей (C_v , $C_p = C_v(1 + \gamma \alpha_p T)$), удельной поверхностной энергии (σ), а также об изохорной и изобарной производных функции σ по температуре. Впервые была изучена барическая зависимость температуры плавления и ее производной по давлению для макрокристалла ниобия.

Изучение свойств нанокристалла позволит понять и описать физические процессы происходящие при экзотермической барической нанофрагментации твердого вещества, которые обуславливают жидкоподобное поведения внешнего ядра Земли и позволяют объяснить природу генерации геотермального потока.

2. Краткие формулировки важнейших результатов.

А. На основе метода расчета свойств кристалла из парного межатомного потенциала Ми–Леннард–Джонса и RP-модели нанокристалла рассчитано уравнение состояния $P(v/v_0)$ и барические зависимости как решеточных, так и поверхностных свойств для макро- и

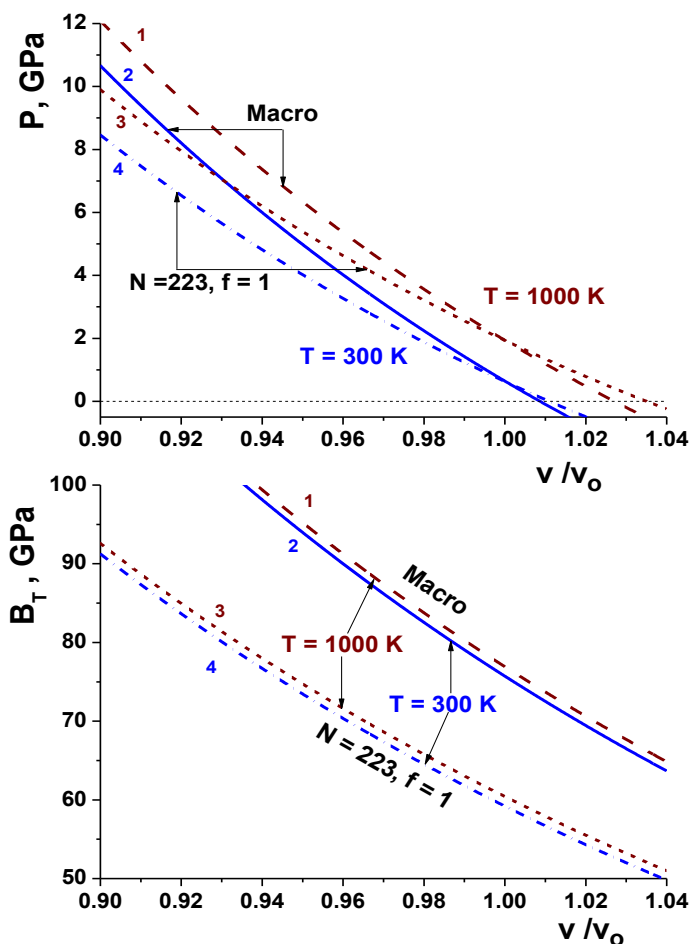


Рисунок 1 [2]. Изотермо-изоморфные зависимости давления (верхний график) и модуля упругости (нижний график) от относительного объема для макро- (линии 1 и 2) и нано- (линии 3 и 4) кристалла Ge. Линии 1 и 3 – изотермы 1000 К, а линии 2 и 4 – изотермы 300 К.

нанокристалле при различных температурах. Показано, что при изобарном ($P = 0$) уменьшением размера удельный объем нанокристалла увеличивается тем больше, чем больше температура нанокристалла. На основе данных результатов впервые удалось объяснить экспериментальные данные по размерному растяжению нанокристаллов при $P = 0$, чего не удавалось сделать на основе формулы Лапласа.

Всего было рассчитано 23 свойства, и данные результаты не имеют аналогов в мировой литературе. Помимо новых результатов для нанокристаллов, были получены пионерские результаты и для макро-кристаллов изотопно-чистого алмаза (из 12 или 13 изотопов), тугоплавких веществ (Mo, W, Nb) и сплавов замещения (Mo-W, Si-Ge).

Опубликовано в работах: статьи [2, 3, 5, 9-12], тезисы [13, 15-19, 21-23, 25, 26, 28-30].

простых однокомпонентных веществ (Au, Fe, Mo, W, Nb, C-12, C-13, Si, Ge), а также бинарных твердых растворов замещения (Mo-W, Si-Ge). Показано, что при определенном значении относительного объема $(v/v_0)_0$ изотермические зависимости $P(v/v_0)$ для макро- и нанокристалла пересекаются. В точке пересечения (при $(v/v_0)_0$) поверхностное давление становится равным нулю. Величина $(v/v_0)_0$ уменьшается как при изоморфно-изомерном росте температуры, так и при изоморфно-изотермическом уменьшении числа атомов в нанокристалле, или при изомерно-изотермическом отклонении формы нанокристалла от энергетически оптимальной формы (для RP-модели это куб). Исходя из полученного уравнения состояния, изучено изменение свойств данных кристаллов как при изохорном ($v/v_0 = 1$), так и при изобарном ($P = 0$) уменьшении числа атомов в

В. На основе RP(vac)-модели рассчитано уравнение состояния аргона при $T = 10$ К как в макро-, так и в нано-кристаллическом состоянии. Показано, что изоморфное уменьшение размера нанокристалла вызывает рост давления, что обусловлено вкладом поверхностного давления. Причем, чем больше форма нанокристалла отклонена от наиболее энергетически оптимальной формы (для RP(vac)-модели это куб), тем резче происходит

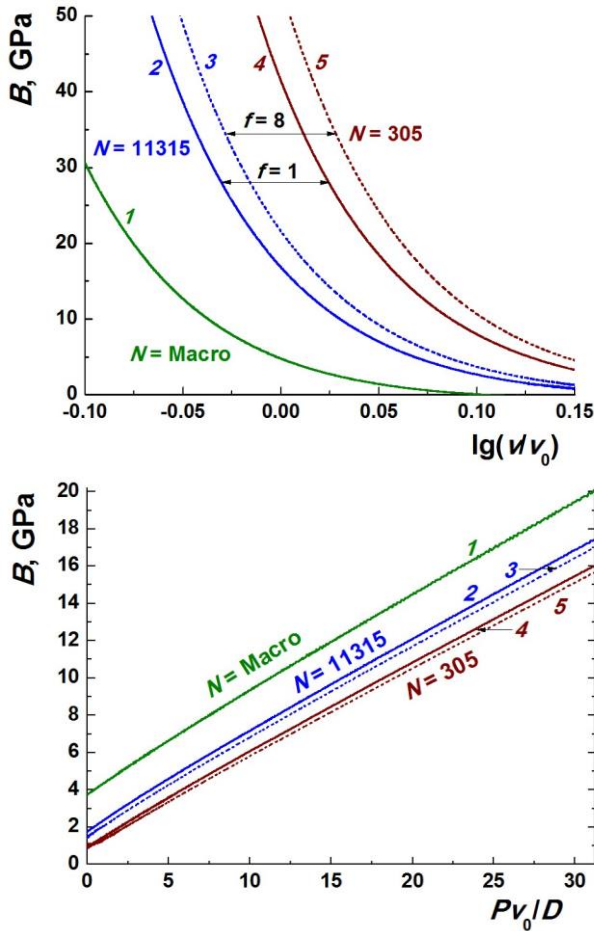


Рисунок 2 [1, 4]. Изотермо-изоморфные (при $T = 10$ К и $f = 1$ или 8) зависимости модуля упругости ГЦК-Аг от нормированного объема (верхний график) и от нормированного давления. Сплошные линии рассчитаны при $f = 1$ (т.е. для куба), пунктирные линии – при $f = 8$ (т.е. для стержня). Штрих-пунктирная линия на верхнем графике – это экспериментальная зависимость, для макрокристалла ГЦК-Аг при $T = 4.2$ К.

$B'(P)$ усиливаются, как при изотермо-изохорном, так и для изотермо-изобарном процессе.

Показано, что полученное в разных работах различие в зависимости B_T от размера нанокристалла может быть обусловлено характером процесса, при котором происходило изотермо-изоморфное уменьшение размера нанокристалла в этих работах.

Опубликовано в работах: статьи [1, 4], тезисы [13, 23, 26].

рост давления на изотерме.

Показано, что при изотермо-изохорно-изоморфном уменьшении размера нанокристалла функции: температура Дебая (Θ), второй параметр Грюнайзена ($q = (\partial \ln \gamma / \partial \ln V)_T$) и удельная поверхностная энергия (σ) уменьшаются, а величины первого параметра Грюнайзена ($\gamma = -(\partial \ln \Theta / \partial \ln V)_T$) и изотермического модуля упругости ($B_T = -V(\partial P / \partial V)_T$) увеличиваются. Возрастание модуля упругости при данном процессе обусловлено сжатием нанокристалла поверхностным давлением.

При изотермо-изобарно-изоморфном уменьшении размера нанокристалла функции Θ , q , σ , B_T и $B'(P) = (\partial B_T / \partial P)_T$ уменьшаются, а величина γ растет. Уменьшение модуля упругости связано с растяжением нанокристалла для выравнивания давления до $P = 0$.

При изотермо-изобарно-изоморфном уменьшении размера нанокристалла функции Θ , q и γ изменяются больше, а функция σ уменьшается меньше, чем в случае изотермо-изохорно-изоморфного уменьшения размера.

Из рис. 2 видно, что при изотермо-изоморфном уменьшении N в нанокристалле B_T возрастает если процесс изохорный и уменьшается для изобарного процесса.

При отклонении формы нанокристалла от наиболее энергетически оптимальной формы (для RP(vac)-модели это куб) размерные зависимости для Θ , q , γ , σ , B_T и

С. Как ясно следует из полученных нами результатов, модуль упругости $B_T(N) = -\nu(\partial P(N)/\partial \nu)_T$ уменьшается при изотермо-изоморфно-изобарном уменьшении числа атомов N . Вместе с тем, в некоторых статьях (например, в [1с] для Mo и Ni, в [2с] для Si и Ge, и в [3с, 4с] для алмаза) обнаружено увеличение модуля упругости B_T при уменьшении размера нанокристалла. Нами был проведен анализ методик определения $B_T(N)$ в этих работах, и показано, что это связано с использованием в указанных работах не вполне корректных методов экспериментального или теоретического изучения нанокристаллов.

Например, в [1с] экспериментально изучался спрессованный нанопорошок Mo и также Ni. Измерения, в соответствии с законом Холла-Петча (Hall-Petch), показали увеличение B_T спрессованного нанопорошка, как это признали и сами авторы. При этом, для получения величины B_T использовалось уравнение состояния Берча-Мурнагана (Birch-Murnaghan), в котором фиксировались два параметра: $\nu(P=0)/\nu_0 = 1$ и $B'(P) = 4$ (см. [1с, Table I]), т.е. полагалась их независимость от N . Но, как следует из наших результатов, параметры $\nu(P=0)$ и $B'(P)$ увеличиваются при изобарическом $P(N) = 0$ уменьшении N .

В работе [2с] изучение функции $B_T(N)$ было проведено квантовым методом Монте-Карло при $T = 0$ К. При этом уменьшение N проходило при постоянной или даже при увеличивающейся (см. [2с, Table IV]) с уменьшением N плотности, что и привело к закономерному росту величины B_T с уменьшением N .

Обнаруженное в [3с, 4с] путем изучения рамановского спектра увеличение модуля упругости nano-алмаза, связано со сжатием межатомных связей в приповерхностной области спрессованных 2–5 nm частиц алмаза. Это сжатие привело к росту величины B_T в приповерхностной области. А т.к. с уменьшением N вклад приповерхностной области растет, то это и привело к увеличению $B_T(N)$ для всего nano-алмаза при уменьшении N .

В наших статьях изучаются нанокристаллы со свободной поверхностью Гиббса в форме прямоугольного параллелепипеда (RP-модель). В рамках RP-модели было показано, что для такого нанокристалла модуль упругости $B_T(N)$ уменьшается при изотермо-изоморфном уменьшении N . Такое же уменьшение $B_T(N)$ при уменьшении N было получено и другими методами для нанокристалла со свободной поверхностью Гиббса. Например: для Cu и алмаза в [5с], для Pb и Au в [6с], для Si в [7с], для Cu, Pd и Si в [8с].

Опубликовано в работах: статья [2], тезисы [13, 26].

1. Selva V.R., Kulkarni S.R., Saxena S.K., Liermann H.-P., Sinogeikin S.V. Compression behavior of nanosized nickel and molybdenum // Applied Physics Letters. 2006. V. 89. № 26. P. 261901. DOI: 10.1063/1.2422886
2. Cherian R., Gerard C., Mahadevan P., Cuong N.T., Maezono R. Size dependence of the bulk modulus of semiconductor nanocrystals from first-principles calculations // Physical Review B. 2010. V. 82. № 23. P. 235321. DOI: 10.1103/PhysRevB.82.235321
3. Popov M., Churkin V., Kirichenko A., Denisov V., Ovsyannikov D., Kulnitskiy B., ... & Blank V. Raman spectra and bulk modulus of nanodiamond in a size interval of 2-5 nm // Nanoscale Research Letters. 2017. V. 12. № 1. P. 561. DOI: 10.1186/s11671-017-2333-0
4. Popov M., Churkin V., Ovsyannikov D., Khabibrakhmanov A., Kirichenko A., Skryleva E., ... & Terentiev S. Ultrasmall diamond nanoparticles with unusual incompressibility. Diamond and Related Materials. 2019. V. 96. P. 52-57. DOI: 10.1016/j.diamond.2019.04.033
5. Galanis N.V., Remediakis I.N., Kopidakis G. Structure and mechanical properties of ultra-nanocrystalline diamond and nanocrystalline Cu from atomistic simulations // Mechanics of Materials. 2013. V. 67. P. 79-85. DOI: 10.1016/j.mechmat.2013.07.019
6. Bhatt C.J., Kholiya K. Effect of Size on the Elastic and Thermodynamic Properties of Nanomaterials // Indian Journal of Pure & Applied Physics. 2014. V. 52. N 9. P. 604-608. http://nopr.niscair.res.in/handle/123456789/29354
7. Abdullah B.J., Omar M.S., Jiang Q. Size dependence of the bulk modulus of Si nanocrystals // Sādhanā. 2018. V. 43. № 11. P. 174(1-5). DOI: 10.1007/s12046-018-0956-1
8. Liang L., Li M., Qin F., Wei Y. Temperature Effect on Elastic Modulus of Thin Films and Nanocrystals // Philosophical Magazine. 2013. V. 93. № 6. P. 574-583. DOI: 10.1080/14786435.2012.725950

3. Новизна результатов, их научная и практическая значимость.

Все вышеописанные результаты по изучению свойств нанокристаллов получены нами впервые и не имеют аналогов ни в отечественной, ни в зарубежной литературе. Помимо изучения свойств нанокристаллов также были получены оценки некоторых свойств макро-кристалла, которых нет в мировой литературе даже при $T = 300$ К и $P = 0$. Речь идет об изотермических производных по давлению для функций: температуры Дебая (Θ), коэффициента теплового расширения (α_p), изохорной и изобарной теплоемкостей (C_v , $C_p = C_v(1 + \gamma \alpha_p T)$), удельной поверхностной энергии (σ), а также об изохорической и изобарической производных функции σ по температуре. Впервые была изучена барическая зависимость температуры плавления и ее производной по давлению для макрокристалла ниобия. Данные результаты позволяют лучше понять природу некоторых эффектов, наблюдаемых при высоких P - T -условиях вплоть до условий ядра Земли. Наши прогнозы барических свойств как для макро-, так и для нано-кристаллов могут быть использованы во многих областях науки и техники. Наши прогнозы свойств кристаллов являются пионерскими в этом направлении, и используются как зарубежными коллегами, так и в России. См., например, следующие свежие статьи за 2019 год:

Huang E.W., Chou H.S., Tu K.N., Hung W.S., Lam T.N., Tsai C.W., ... & Chang Y.J. Element Effects on High-Entropy Alloy Vacancy and Heterogeneous Lattice Distortion Subjected to Quasi-equilibrium Heating // **Scientific reports**. 2019. V. 9. № 1. P. 1-10. DOI: 10.1038/s41598-019-51297-4

Cuong T.D., Hoc N.Q., Phan A.D. Application of the statistical moment method to melting properties of ternary alloys with FCC structure // **Journal of Applied Physics**. 2019. V. 125. № 21. P. 215112. DOI: 10.1063/1.5089228

Doğan Z., Mehmetoğlu T. Accurate Calculations of the Heat Capacities of Pure Metals Using the Einstein–Debye Approximation // **Journal of Engineering Physics and Thermophysics**. 2019. V. 92, № 6. P. 1620-1624. DOI: 10.1007/s10891-019-02082-7

Ityanitov N.S. Does the period table appear doubled? Two variants of division of elements into two subsets. Internal and secondary periodicity // **Foundations of Chemistry**. 2019. V. 21. №. 3. P. 255-284. DOI: 10.1007/s10698-018-9321-z

Филанович А.Н., Повзнер А.А. Тепловые и упругие свойства смешанных оксидов $\text{Ce}_x\text{Th}_{1-x}\text{O}_2$: самосогласованный термодинамический подход // **Журнал технической физики**. 2019. Т. 89. № 1. С. 82-85. DOI: 10.1134/S1063784219010109

Маевский К.К., Кинеловский С.А. Численное моделирование термодинамических параметров высокопористой меди // **Журнал технической физики**. 2019. Т. 89. № 8. С. 1158-1163. DOI: 10.1134/S1063784219080127

Шшулин А.В., Федосеев В.Б., Шшулина А.В. К вопросу о плавлении наночастиц фрактальной формы (на примере системы Si–Ge) // **Журнал Технической Физики**. 2019. Т. 89. № 9. С. 1420-1426. DOI: 10.21883/JTF.2019.09.48069.88-19

4. Выполнены ли все поставленные задачи, если нет, то по каким причинам.

Все запланированные на 2019 год задачи выполнены.

5. Количество и список опубликованных монографий.

Нет

6. Количество и список статей опубликованных в рецензируемых журналах: 12

(знаком **W** отмечены работы, индексируемые в базе данных **WEB of Science**, знаком **S** отмечены работы, индексируемые в базе данных **Scopus**, знаком **R** отмечены работы, индексируемые в базе данных **РИНЦ**): **W S R**

1. Магомедов М.Н. Размерная зависимость упругих свойств нанокристалла аргона // **Физика Твёрдого Тела**. – 2019. – Т. 61, № 1. – С. 148 – 153. **DOI_R: 10.21883/FTT.2019.01.46905.175** M.N. Magomedov. Size Dependence of Elastic Properties of Argon Nanocrystals // *Physics of the Solid State*, 2019, Vol. 61, No. 1, pp. 160–166. **DOI: 10.1134/S1063783419010165** **W S R Impact Factor=0.950. Q3.**
2. Магомедов М.Н. Изменение термодинамических свойств при уменьшении размера нанокристалла германия в различных *P-T*-условиях // **Российские Нанотехнологии**. – 2019. – Т. 14, № 1-2. – С. 24 – 35. **DOI_R: 10.21517/1992-7223-2019-1-2-24-35** M.N. Magomedov. Change in thermodynamic properties of a germanium nanocrystal with a decrease in its size under various *P-T*-conditions // *Nanotechnologies in Russia*. – 2019. – Vol. 14, No. 1-2. – P. 21 – 32. **DOI: 10.1134/S1995078019010063** **W S R Impact Factor=0.760. Q2.**
3. Магомедов М.Н. Изменение термодинамических свойств при изохорическом и изобарическом уменьшении размера нанокристалла кремния // **Физика Твёрдого Тела**. – 2019. – Т. 61, № 4. – С. 757 – 764. **DOI_R: 10.21883/FTT.2019.04.47426.267** M.N. Magomedov. Changes of the Thermodynamic Properties at Isochoric and Isobaric Decrease of the Silicon Nanocrystal Size // *Physics of the Solid State*, 2019, Vol. 61, No. 4, pp. 642–649. **DOI: 10.1134/S106378341904019X** **W S R Impact Factor=0.950. Q3.**
4. Магомедов М.Н. О зависимости модуля упругости от размера и формы нанокристалла аргона // **Поверхность. Рентген., синхротр., и нейтрон. исслед.** – 2019, № 6. – С. 93 – 100. **DOI_R: 10.1134/S0207352819060076** M.N. Magomedov. Dependence of the Elastic Modulus of on the Size and Shape of an Argon Nanocrystal // *Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques*, 2019, Vol. 13, No. 3, p. 548 – 554. **DOI: 10.1134/S1027451019030273** **W S R Impact Factor= 0.360 Q3.**
5. Магомедов М.Н. Изменение свойств алмаза из ¹³C при изотермическом сжатии // **Журнал Технической Физики**. – 2019. – Т. 89, № 6. – С. 888 – 892. **DOI_R: 10.21883/JTF.2019.06.47635.2293** M.N. Magomedov. Variations of the ¹³C Diamond Properties under Isothermal Compression // *Technical Physics*, 2019, Vol. 64, No. 6, p. 834–838. **DOI: 10.1134/S1063784219060100** **W S R Impact Factor=0.637. Q3.**
6. Magomedov M.N. The change in the phase diagram of a simple substance at decreasing of the nano-system size // **Journal of Molecular Liquids**. – 2019. – V. 285. – P. 106 – 113. **DOI: 10.1016/j.molliq.2019.04.032** **W S R Impact Factor= 4.561. Q1.**
7. Магомедов М.Н. Об исчезновении фазового перехода кристалл-жидкость при уменьшении числа атомов в системе // **Поверхность. Рентген., синхротр., и нейтрон. исслед.** – 2019, № 9. – С. 103 – 112. **DOI_R: 10.1134/S0207352819090075** M.N. Magomedov. On the Disappearance of the Crystal-Liquid Phase Transition as the Number of Atoms in the System Decreases // *Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques*, 2019, Vol. 13, No. 5, p. 880 – 888. **DOI: 10.1134/S1027451019050070** **W S R Impact Factor= 0.360. Q3.**

8. Магомедов М.Н. Изменение температуры Дебая при аморфизации однокомпонентного вещества // **Письма в Журнал Технической Физики**. – 2019. – Т. 45, № 20. – С. 32-35. DOI: 10.21883/PJTF.2019.20.48391.17944 M.N. Magomedov. A Change in the Debye Temperature of a Single-Component Substance upon Amorphization // *Technical Physics Letters*, 2019, Vol. 45, No. 10, pp. 1042–1046. DOI: 10.1134/S1063785019100249 ISSN: 0320-0116 W S R Impact Factor=0.773. Q2.
9. Магомедов М.Н. Изменение термодинамических свойств твердого раствора Si-Ge при уменьшении размера нанокристалла // **Физика Твёрдого Тела**. – 2019. – Т. 61, № 11. – С. 2169-2177. DOI: 10.21883/FTT.2019.11.48424.484 M.N. Magomedov. Changes in the Thermodynamic Properties of a Si-Ge Solid Solution at a Decrease of the Nanocrystal Size // *Physics of the Solid State*, 2019, Vol. 61, No. 11, pp. 2145–2154. DOI: 10.1134/S1063783419110210 W S R Impact Factor=0.950. Q3.
10. Ahmedov E.N. Size Dependence of Molybdenum Melting Temperature // **Physica B: Condensed Matter**. 2019. V. 571. P. 252-256. DOI: 10.1016/j.physb.2019.07.027 ISSN: 0921-4526 Impact Factor=1.874. Q2.
11. Kraminin S.P., Ahmedov E.N. Equation of state and properties of Nb at high temperature and pressure // **Journal of Physics and Chemistry of Solids**. 2019. V. 135. P. 109108. DOI: 10.1016/j.jpcs.2019.109108 Impact Factor=2.752. Q2.
12. Крамынин С.П., Ахмедов Э.Н. Изменение теплофизических свойств и температуры плавления ниобия с ростом давления // **Физика металлов и металловедение**. 2019. Т. 120. N 11. С. 1123-1128. DOI: 10.1134/S0015323019110093 Kraminin S.P., Ahmedov E.N. Change in Thermophysical Properties and Melting Temperature of Niobium with Increasing Pressure // *Physics of Metals and Metallography*. 2019. Vol. 120. No. 11. pp. 1027–1032. DOI: 10.1134/S0031918X19110097 Impact Factor=1.169. Q2.

7. Количество и список докладов на конференциях: 19

13. Магомедов М.Н. Изменение барических свойств при уменьшении размера нанокристалла // «Необратимые процессы в природе и технике»: труды Десятой Всероссийской конференции. – Россия, г. Москва, МГТУ им. Н.Э. Баумана, 29 – 31 января 2019 г. (В трех частях) Ч. I. – М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана. – 2019. – 292 с. (С. 106 – 109.) ISBN 978-5-7038-5084-8 R Устный доклад
14. Магомедов М.Н. О размере нанокристалла, в котором возникает необратимый процесс // «Необратимые процессы в природе и технике»: труды Десятой Всероссийской конференции. – Россия, г. Москва, МГТУ им. Н.Э. Баумана, 29 – 31 января 2019 г. (В трех частях) Ч. I. – М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана. – 2019. – 292 с. (С. 110 – 113.) ISBN 978-5-7038-5084-8 R Устный доклад
15. Ахмедов Э.Н. Решёточные свойства золота при высоких давлениях // «Необратимые процессы в природе и технике»: труды Десятой Всероссийской конференции. – Россия, г. Москва, МГТУ им. Н.Э. Баумана, 29 – 31 января 2019 г. (В трех частях) Ч. I. – М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана. – 2019. – 292 с. (С. 122 – 125.) ISBN 978-5-7038-5084-8 R Устный доклад
16. Ахмедов Э.Н. Размерные зависимости температур плавления и кристаллизации золота в изобарических условиях // «Необратимые процессы в природе и технике»: труды Десятой Всероссийской конференции. – Россия, г. Москва, МГТУ им. Н.Э. Баумана,

- 29 – 31 января 2019 г. (В трех частях) Ч. I. – М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана. – 2019. – 292 с. (С. 142 – 145.) ISBN 978-5-7038-5084-8 R Устный доклад
17. Крамынин С.П., Ахмедов Э.Н. Изменение свойств ниобия с ростом давления // «Необратимые процессы в природе и технике»: труды Десятой Всероссийской конференции. – Россия, г. Москва, МГТУ им. Н.Э. Баумана, 29 – 31 января 2019 г. (В трех частях) Ч. I. – М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана. – 2019. – 292 с. (С. 146 – 149.) ISBN 978-5-7038-5084-8 R Устный доклад
18. Ахмедов Э.Н. Термодинамические свойства сплава молибдена и вольфрама // IX Международная научная конференция «Химическая термодинамика и кинетика»: Сборник научных трудов / под ред. Орлова Ю.Д. – Россия, г. Тверь, 20 – 24 мая 2019 г. – Тверь: Изд-во Тверского государственного университета, 2019. – 399 с. (С. 48 – 49.) ISBN 978-5-7609-1440-8 R Стендовый доклад
19. Магомедов М.Н. Изменение решеточных свойств при уменьшении размера нанокристалла бинарного состава // IX Международная научная конференция «Химическая термодинамика и кинетика»: Сборник научных трудов / под ред. Орлова Ю.Д. – Россия, г. Тверь, 20 – 24 мая 2019 г. – Тверь: Изд-во Тверского государственного университета, 2019. – 399 с. (С. 197 – 198.) ISBN 978-5-7609-1440-8 R Стендовый доклад
20. Магомедов М.Н. Вычисление температуры Дебая для аморфных фаз простого вещества // IX Международная научная конференция «Химическая термодинамика и кинетика»: Сборник научных трудов / под ред. Орлова Ю.Д. – Россия, г. Тверь, 20 – 24 мая 2019 г. – Тверь: Изд-во Тверского государственного университета, 2019. – 399 с. (С. 199 – 200.) ISBN 978-5-7609-1440-8 R Стендовый доклад
21. Ахмедов Э.Н. Зависимость свойств нанокристалла золота от размера и формы поверхности // «Микро- и нанотехнологии в электронике»: Материалы XI Международной научно-технической конференции. – Россия, пос. Эльбрус, 3 – 8 июня 2019 г. – Нальчик: Изд-во Кабардино-Балкарского государственного университета, 2019. – 624 с. (С. 159 – 164.) ISBN 978-5-93681-164-7 R Устный доклад
22. Магомедов М.Н. Изменение термодинамических свойств твердого раствора Si-Ge при изобарическом уменьшении размера нанокристалла // «Микро- и нанотехнологии в электронике»: Материалы XI Международной научно-технической конференции. – Россия, пос. Эльбрус, 3 – 8 июня 2019 г. – Нальчик: Изд-во Кабардино-Балкарского государственного университета, 2019. – 624 с. (С. 89 – 93.) ISBN 978-5-93681-164-7 R Стендовый доклад
23. Магомедов М.Н. Изменение термодинамических свойств при изобарическом уменьшении размера нанокристалла // XXI Менделеевский съезд по общей и прикладной химии. В 6 томах. Т. 1: Тезисы докладов. – Россия, г. Санкт-Петербург, 9 – 13 сентября 2019. – Санкт-Петербург: Изд-во ООО «Месол», 2019. – 496 с. (С. 82.) Magomedov M.N. Change in thermodynamic properties with isobaric reduction of nanocrystal size // XXI Mendeleev Congress on General and Applied Chemistry. In six book. Book 1: Abstracts. – Saint Petersburg, 9 – 13 September 2019. – 476 p. (P. 79.) ISBN 978-5-6043248-4-4 R Устный доклад
24. Магомедов М.Н. Вычисление температуры Дебая для аморфных металлов // XXI Менделеевский съезд по общей и прикладной химии. В 6 томах. Т. 3: Тезисы докладов. – Россия, г. Санкт-Петербург, 9 – 13 сентября 2019. – Санкт-Петербург: Изд-во ООО «Месол», 2019. – 472 с. (С. 79.) Magomedov M.N. Debye temperature

- calculation for amorphous metals // XXI Mendeleev Congress on General and Applied Chemistry. In six book. Book 3: Abstracts. – **Saint Petersburg**, 9 – 13 September 2019. – 472 p. (P. 77.) ISBN 978-5-6043248-4-4 R Устный доклад
25. *Ахмедов Э.Н.* Фазовая диаграмма разупорядоченного сплава Mo-W // XXI Менделеевский съезд по общей и прикладной химии. В 6 томах. Т. 3: Тезисы докладов. – Россия, г. **Санкт-Петербург**, 9 – 13 сентября 2019. – Санкт-Петербург: Изд-во ООО «Месол», 2019. – 472 с. (С. 52.) *Ahmedov E.N.* Phase diagram of disordered alloy Mo-W // XXI Mendeleev Congress on General and Applied Chemistry. In six book. Book 3: Abstracts. – **Saint Petersburg**, 9 – 13 September 2019. – 472 p. (P. 53.) ISBN 978-5-6043248-4-4 R Устный доклад
26. *Ахмедов Э.Н.* Изменение упругих свойств при уменьшении размера нанокристалла золота // XXI Менделеевский съезд по общей и прикладной химии. В 6 томах. Т. 3: Тезисы докладов. – Россия, г. **Санкт-Петербург**, 9 – 13 сентября 2019. – Санкт-Петербург: Изд-во ООО «Месол», 2019. – 472 с. (С. 53.) *Ahmedov E.N.* Change of gold elastic properties at nanocrystal size reduction // XXI Mendeleev Congress on General and Applied Chemistry. In six book. Book 3: Abstracts. – **Saint Petersburg**, 9 – 13 September 2019. – 472 p. (P. 54.) ISBN 978-5-6043248-4-4 R Устный доклад
27. *Магомедов М.Н.* Изменение температуры Дебая при аморфизации металла // 22-й Международный междисциплинарный симпозиум «Упорядочение в минералах и сплавах» (ОМА-22). Труды симпозиума. – Россия, г. **Ростов-на-Дону – пос. Шепси**, 9 – 14 сентября 2019 г. – Ростов-н/Д: Изд-во Фонд науки и образования, 2019. – Выпуск 22. – Том 1. – 216 с. (С. 110 – 113.) ISBN 978-5-907125-95-7 R Стендовый доклад
28. *Ахмедов Э.Н.* Барические свойства сплава замещения молибден-вольфрам // 22-й Международный междисциплинарный симпозиум «Упорядочение в минералах и сплавах» (ОМА-22). Труды симпозиума. – Россия, г. **Ростов-на-Дону – пос. Шепси**, 9 – 14 сентября 2019 г. – Ростов-н/Д: Изд-во Фонд науки и образования, 2019. – Выпуск 22. – Том 1. – 216 с. (С. 19 – 22.) ISBN 978-5-907125-95-7 R Стендовый доклад
29. *Магомедов М.Н.* О температуре плавления различных фаз железа в условиях ядра Земли // «Глубинное строение, геодинамика, тепловое поле Земли, интерпретация геофизических полей». Десятые научные чтения памяти Ю.П. Булашевича: Материалы всероссийской конференции с международным участием. – Россия, г. **Екатеринбург**. 23 – 27 сентября 2019 г. – Екатеринбург: Изд-во ИГФ УрО РАН, 2019. – 318 с. (С. 165 – 170.) R Стендовый доклад
30. *Ахмедов Э.Н.* Барические свойства сплава Mo-W // VIII Международная конференция «Деформация и разрушение материалов и наноматериалов». – Россия, г. **Москва**, 19 – 22 ноября 2019 г. / Сборник материалов. – М.: Изд-во ИМЕТ РАН, 2017. – 860 с. (С. 663 – 664.) ISBN 978-5-4465-2550-8 R Устный доклад
31. *Магомедов М.Н.* Об аморфной структуре однокомпонентного металла // VIII Международная конференция «Деформация и разрушение материалов и наноматериалов». – Россия, г. **Москва**, 19 – 22 ноября 2019 г. / Сборник материалов. – М.: ИМЕТ РАН, 2019. – 860 с. (С. 726 – 728.) ISBN 978-5-4465-2550-8 R Устный доклад

Таким образом, за 2019 г. по теме проекта было опубликовано 31 научная работа: 12 статей в рецензируемых журналах, 19 тезисов и материалов докладов на 7-ми

конференциях в России (см. ниже): в Москве, в Твери, в пос. Эльбрус, в пос. Шепси, в Санкт-Петербурге, в Екатеринбурге.

1. Десятая Всероссийская конференция «Необратимые процессы в природе и технике»: труды. – Россия, г. **Москва**, МГТУ им. Н.Э. Баумана, 29 – 31 января 2019 г. (5 устных докладов)

2. IX Международная научная конференция «Химическая термодинамика и кинетика»: Сборник научных трудов. – Россия, г. **Тверь**, 20 – 24 мая 2019 г. (3 стендовых доклада)

3. XI Международная научно-техническая конференция «Микро- и нанотехнологии в электронике»: – Россия, **пос. Эльбрус**, 3 – 8 июня 2019 г. (1 устный и 1 стендовый доклад)

4. XXI Менделеевский съезд по общей и прикладной химии. – Россия, г. **Санкт-Петербург**, 9 – 13 сентября 2019. (4 устных доклада)

5. 22-й Международный междисциплинарный симпозиум «Упорядочение в минералах и сплавах» (ОМА-22). – Россия, **пос. Шепси**, 9 – 14 сентября 2019 г. – Россия, (2 стендовых доклада)

6. X-я Всероссийская конференция с международным участием: научные чтения памяти Ю.П. Булашевича – Россия, г. **Екатеринбург**. 23 – 27 сентября 2019 г. (1 стендовый доклад)

7. VIII Международная конференция «Деформация и разрушение материалов и наноматериалов». – Россия, г. **Москва**, 19 – 22 ноября 2019 г. (2 устных доклада)

8. Количество и список результатов интеллектуальной собственности.

Нет

Заключение.

В рамках RP-модели изучено изменение уравнение состояния и теплофизических свойств как при изохорическом, так и при изобарическом уменьшении числа атомов в нанокристалле. Были изучены размерные изменения свойств как для кристаллов простых однокомпонентных веществ (Au, Mo, W, Nb, Si, Ge), так и для кристаллов бинарных твердых растворов замещения (Mo-W, Si-Ge).

В рамках RP(vac)-модели разработан метод для изучения изменения модуля упругости ($B_T = -V(\partial P/\partial V)_T$) при уменьшении размера нанокристалла как в изоморфно-изохорическом, так и в изоморфно-изобарическом процессе. Расчеты были выполнены для нанокристалла аргона при $T = 10$ К. Показано, что при изоморфно-изобарическом уменьшении размера нанокристалла функция B_T уменьшается, а в случае изоморфно-изохорического уменьшения размера модуль упругости нанокристалла аргона возрастает.

Сделан анализ теоретических и экспериментальных методик, использованных другими авторами при теоретическом или экспериментальном определении размерной зависимости модуля упругости. Указаны некорректности тех методик, в которых было обнаружено возрастание модуля упругости при изобарном уменьшении размера.

Для макрокристаллов указанных веществ получены оценки некоторых свойств которых нет в мировой литературе даже при $T = 300$ К и $P = 0$. Речь идет об изотермических производных по давлению для функций: температуры Дебая (Θ), коэффициента теплового расширения (α_p), изохорной и изобарной теплоемкостей (C_v , $C_p = C_v(1 + \gamma \alpha_p T)$), удельной поверхностной энергии (σ), а также об изохорной и изобарной производных функции σ по температуре. Впервые была изучена барическая зависимость температуры плавления и ее производной по давлению для макрокристалла ниобия.