МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ
ИНСТИТУТ ПРОБЛЕМ ГЕОТЕРМИИ ДАГЕСТАНСКОГО НАУЧНОГО ЦЕНТРА
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

УДК 539.23 + 539.216.1

Рег. № НИОКТР
АААА-А18-118012590336-9

Рег. № ИКРБС 0204-2018-0011

УТВЕРЖДАЮ

Врио Директора Института

_____Д.К. Джаватов

«____»_____2019 г.

ПРОМЕЖУТОЧНЫЙ ОТЧЕТ ЗА 2018 ГОД

О НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЕ

в рамках государственного задания по
Программе научных исследований Президиума РАН № I.13
«Конденсированное вещество и плазма при высоких плотностях энергии»
(координатор – академик РАН В.Е. Фортов)

тема № 11:

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

Руководитель темы _____ М.Н. Магомедов
подпись, дата

Махачкала 2019

СПИСОК ИСПОЛНИТЕЛЕЙ

Руководитель темы: М.Н. Магомедов
главный научный сотрудник,
доктор физ.-мат. наук

Исполнители: Э.Н. Ахмедов
младший научный сотрудник

Н.Ш. Газанова
ведущий специалист

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	10
8	Количество и список результатов интеллектуальной собственности	13
	Заключение	13

РЕФЕРАТ

Отчет состоит из: **8 глав**, **12 стр.**, **4 рисунков**, **0 таблиц**, **3 источников использованной литературы**, списка научных публикаций по теме за отчетный период, включающий в себя **23 опубликованных работ**.

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) изучение температуры Дебая, параметров Грюнайзена, температур солидуса и ликвидуса для бинарных сплавов металлов и полупроводников при различных давлениях;

2) разработка уравнения состояния и барической зависимости теплофизических свойств веществ как в макро-, так и в нано-размерном состоянии;

3) изучение исчезновения фазового перехода кристалл-жидкость при уменьшении размера нанокристалла;

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

1. Предложена методика расчёта температуры Дебая и параметров Грюнайзена для бинарного сплава замещения. На основании данной методики рассчитаны температур солидуса и ликвидуса для неупорядоченного сплава замещения SiGe и показала хорошее согласие с экспериментальными данными. Показано, что при уменьшении размера нанокристалла твердого раствора замещения разница между температурами ликвидуса и солидуса уменьшатся тем больше, чем заметнее форма нанокристалла отклонена от наиболее энергетически оптимальной формы.

2. Определены параметры парного потенциала для кристаллов следующих простых (однокомпонентных) веществ: алмаз (для 12 и 13 изотопов), ГЦК золото, ОЦК молибден, ОЦК вольфрам. На основе полученных параметров рассчитаны как уравнение состояния, так и барические зависимости решеточных свойств указанных кристаллов вдоль различных изотерм как в макро-, так и в нано-структурном состоянии.

3. На основании модели нанокристалла с вакансиями и делокализованными атомами сделаны расчеты уравнения состояния аргона. Показало, что при уменьшении числа атомов в системе S-петля на изотерме уравнения состояния для фазового перехода (ФП) кристалл-жидкость (К-Ж) уменьшается, и при определенном числе атомов (N_0) S-петля ФПК-Ж исчезает. Показано, что величина N_0 увеличивается при отклонении формы нано-системы от наиболее энергетически оптимальной формы. С ростом температуры на изотерме величина N_0 увеличивается. В кластере из $N < N_0$ атомов ФПК-Ж уже нет.

Ключевые слова: уравнение состояния, нанокристалл, железо, молибден, вольфрам, изотопы углерода, бинарный сплав SiGe

1. Актуальность проведенных исследований.

Разработка аналитической 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. Кроме этого, в наших исследованиях помимо решения этой основной задачи решается ряд вспомогательных задач, которые методически связаны с основной целью. Например, нам пришлось разработать метод для самосогласованного определения всех 4-х параметров парного межатомного потенциала Ми-Леннард-Джонса. Тестирование этих параметров проводится при расчете как уравнения состояния, так и барических зависимостей теплофизических свойств конкретных веществ. Получение этих барических зависимостей даже для макрокристала тоже является актуальной задачей. Особенно это актуально для тугоплавких веществ (вольфрам, молибден, и др.), а также для веществ с разным изотопным составом (алмаз из С-12 и из С-13). Особенно актуальна задача получения уравнения состояния для нанокристаллов, ибо только на основании его можно получить корректные изотермо-изобарические зависимости различных свойств как от размера, так и от формы нанокристалла. На основании полученных зависимостей мы изучаем нанофрагментацию (раньше это называлось дипергированием) кристалла при P-T-условиях ядра Земли. Барическая нанофрагментация позволит ответить на фундаментальные вопросы связанные с генерацией геотермального потока и природой жидкоподобного поведения внешнего ядра Земли.

2. Краткие формулировки важнейших результатов.

A. Разработана методика расчета параметров межатомного потенциала парного взаимодействия для бинарного твердого раствора, которая учитывает отклонение параметра решетки сплава от правила Вегарда. На основании этих параметров были рассчитаны концентрационные зависимости температуры Дебая и параметра Грюнайзена для бинарного твердого раствора. На примере твердого раствора Si-Ge показано, что данные функции изменяются при изменении концентрации Ge нелинейно. На основании данного метода и критерия плавления Линдеманна предложена методика расчета температур солидуса и ликвидуса для неупорядоченного сплава замещения. Предлагаемый метод был протестирован путем расчета фазовой диаграммы твердого раствора Si-Ge и показал хорошее согласие с экспериментальными данными. На рисунке показана фазовая диаграмма сплава Si-Ge. Верхние выпуклые кривые – концентрационные зависимости для температуры ликвидус, нижние вогнутые линии – концентрационные зависимости для температуры солидус. Сплошные кривые – экспериментальные зависимости, точечные линии – расчётные зависимости. Пунктирная прямая – зависимость, рассчитанная как среднее арифметическое по концентрации от температур плавления чистых Si и Ge. Данная методика была использована для изучения эволюции фазовой диаграммы неупорядоченного сплава замещения при уменьшении размера наносистемы или при деформации формы нанокристалла. Показано, что при изоморфном уменьшении размера нанокристалла твердого раствора замещения будут уменьшаться как температура солидуса и ликвидуса, так и температурная разница между ними, т.е. переходная область. При этом данные параметры уменьшатся с уменьшением размера тем больше, чем заметнее форма нанокристалла отклонена от наиболее энергетически оптимальной формы. Опубликовано в работах: статья [2], тезис [8].

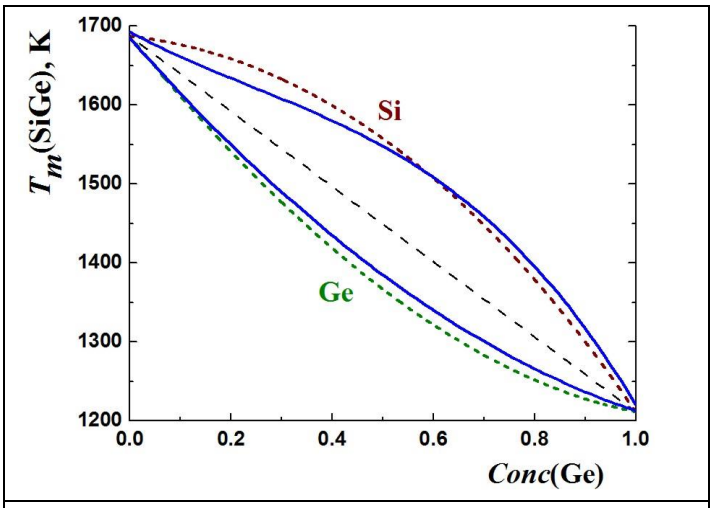

Рис 1. Фазовая диаграмма неупорядоченного сплава замещения Si-Ge. Сплошные кривые – экспериментальные зависимости, точечные линии – расчётные зависимости.

B. Разработана методика для самосогласованного определения параметров парного потенциала межатомного взаимодействия Ми-Леннард-Джонса, который имеет вид:

$$\varphi(r) = \frac{D}{(b-a)}\left[a\left(\frac{r_0}{r}\right)^b - b\left(\frac{r_0}{r}\right)^a\right],$$

где D и r_0 – глубина и координата минимума потенциальной ямы, b и a – степени потенциала, причем: $b > a > 1$.

На основе этой методики определены параметры парного потенциала для кристаллов следующих простых (однокомпонентных) веществ: алмаз (для 12 и 13 изотопов) [статья: 6, тезисы: 5], ГЦК золото [статья: 5], ОЦК молибден [статья: 3, тезисы: 4, 9, 12, 14, 17], ОЦК вольфрам [тезисы: 1, 16].

Полученные параметры протестированы при расчетах, как уравнения состояния $P(V, T)$,

так и барических зависимостей следующих решеточных свойств макрокристаллов указанных веществ (здесь и далее T – температура, V – объем): температура Дебая (Θ), первый ($\gamma = -(\partial\ln\Theta/\partial\ln V)_T$), второй ($q = (\partial\ln\gamma/\partial\ln V)_T$) и третий ($z = -(\partial\ln q/\partial\ln V)_T$) параметры Грюнайзена, $B_T = -V(\partial P/\partial V)_T$ – модуль всестороннего сжатия, $\alpha_p = (\partial\ln V/\partial T)_P$ – коэффициент теплового расширения, изохорная (C_v) и изобарная теплоемкость: $C_p = C_v(1 + \gamma\,\alpha_p\,T)$, σ – удельная (на единицу площади) поверхностная энергия грани (100), $\sigma'(T)_v$ и $\sigma'(T)_P$ – изохорная и изобарная производные функции σ по температуре. Также были рассчитаны изотермические производные данных функций по давлению.

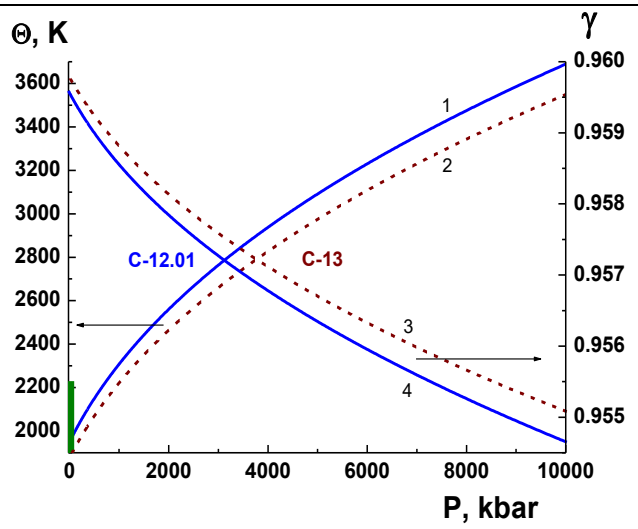

Рис. 2. Барическая зависимость температуры Дебая (кривые *1* и *2*, левая шкала) и первого параметра Грюнайзена (кривые *3* и *4*, правая шкала) для алмаза из $^{12.01}$C (сплошные линии *1* и *4*) и из ^{13}C (пунктирные линии *2* и *3*).

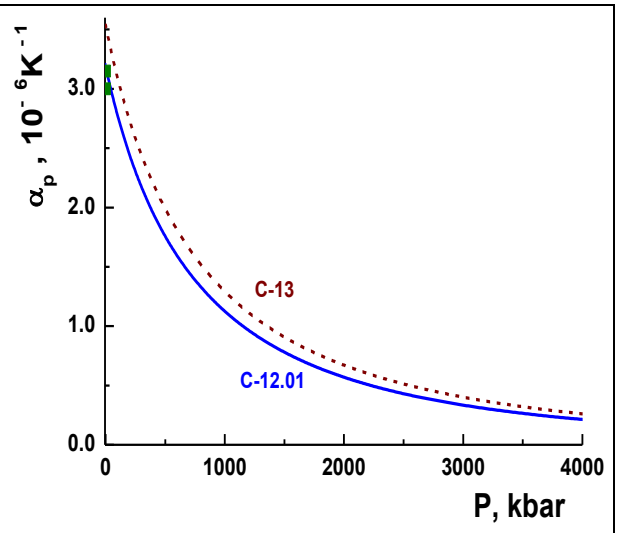

Рис. 3. Барическая зависимость коэффициента теплового расширения для алмаза из $^{12.01}$C (сплошная линия) и из ^{13}C (пунктир) при T = 300 K.

Таким образом, параметры потенциала были не только протестированы, но и на их основе впервые были рассчитаны такие барические зависимости, оценок которых в литературе нет. Например, вторые и третьи параметры Грюнайзена, производные по давлению для коэффициента теплового расширения, изохорной и изобарной теплоемкостей, поверхностной энергии и ее производных по температуре и давлению для указанных веществ.

Было изучено изменение уравнения состояния и барических зависимостей указанных свойств при переходе от алмаза природного изотопного состава (т.е. из C-12.01) к алмазу из C-13 [статья: 6, тезисы: 5].

C. На основе ранее созданной нами RP–модели (Rectangular Parallelepiped) получено уравнение состояния нанокристалла $P(T, v, N, f)$ из N атомов и с данной формой поверхности, которую определяет параметр f. Впервые было изучено изменение поверхностного давления: $P_{sf} = P(T, v, N{=}\infty) - P(T, v, N, f)$ в различных T-v-условиях. Здесь $v = V/N$ – удельный объем, f – параметр определяющий форму нанокристалла.

Исходя из полученного уравнения состояния $P(T, v, N, f)$ разработана методика для расчета зависимости решеточных свойств от размера (N) и формы (f) нанокристалла простого вещества при постоянных T-v- или T-P-условиях. Впервые были рассчитаны размерные зависимости решеточных свойств нанокристалла при постоянных температуре

и давлении (т.е. изотермо-изобарические зависимости). До последнего времени это было затруднительно ввиду отсутствия корректного выражения для уравнения состояния нанокристалла. Используя определенные нами параметры межатомного потенциала Ми-Леннард-Джонса, были рассчитаны изотермо-изобарические размерные зависимости решеточных свойств ОЦК железа [статья: 1, тезис 15], ОЦК молибдена [статья: 6, тезисы: 9, 12, 14], ОЦК вольфрама [тезисы: 1, 16], ГЦК золота [статьи: 5], кремния [статья: 4].

Показано, что рассчитываемое по нашей методике значение P_{sf} для нанокристалла всегда меньше, чем поверхностное давление, определяемое по формуле Лапласа. Это обусловлено тем, что давление Лапласа определено для гидродинамической среды и не учитывает особенностей твердой фазы. Показано, что при определенном значении удельного объема (v_o) изоморфно-изотермические зависимости $P(v)$ для нанокристалла и макрокристалла пересекаются. Т.е. при v_o поверхностное давление становится равным нулю: $P_{sf}(v_o) = 0$. Этот эффект был также обнаружен при компьютерном моделировании другими авторами. При $v < v_0$ поверхностное давление сжимает нанокристалл ($P_{sf} > 0$), а при $v > v_0$ поверхностное давление нанокристалл растягивает: $P_{sf} < 0$. Показано, что величина v_0 уменьшается как при изоморфно-изомерном росте температуры, так и при изоморфно-изотермическом уменьшении N, или при изомерно-изотермическом отклонении формы нанокристалла от наиболее энергетически оптимальной (для RP-модели – от формы куба). Поэтому давление в нанокристалле $P(v)$ переходит через ноль при значение удельного объема v большем, чем для макрокристалла. На основе данных результатов впервые удалось объяснить экспериментальные данные по размерному растяжение нанокристаллов при $P = 0$, чего не удавалось сделать на основе формулы Лапласа.

D. На основе RP–модели разработана аналитическая методика для расчета решеточных свойств нанокристалла, в котором присутствуют как вакансии, так и делокализованные (т.е. диффундирующие) атомы, т.е. была создана RP(vac)–модель. На основе этой RP(vac)–модели изучена эволюция как уравнения состояния, так и вероятностей образования вакансии и делокализации атома при переходе от макро- к нанокристаллу определенной формы. Изучена зависимость активационных параметров и коэффициента самодиффузии как от размера, так и от формы нанокристалла при различных температурах и давлениях.

Показано [статья: 1], что при P = 1 bar и T = 300 K нанокристалл содержит меньше вакансий на атом, чем макрокристалл, но при T = 1000 K диспергирование макрокристалла ведет к росту вероятности образования вакансий. При давлении P = 100 kbar = 10 GPa доля вакансий растет с ростом числа атомов N, как при 300 K, так и при 1000 K. Таким образом, малый нанокристал при давлениях нанофрагментации кристалла (P = 100 kbar) содержит меньше вакансий на атом, чем макрокристалл, как при 300 K, так и при 1000 K. Поэтому более совершенные нанокристаллы будут образовываться либо при низких давлениях и низких температурах, либо при высоких давлениях и любых температурах.

На основе RP(vac)–модели показано, что при изоморфно-изотермическом уменьшении числа атомов в нанокристалле S-петля фазового перехода кристалл-жидкость на изотерме

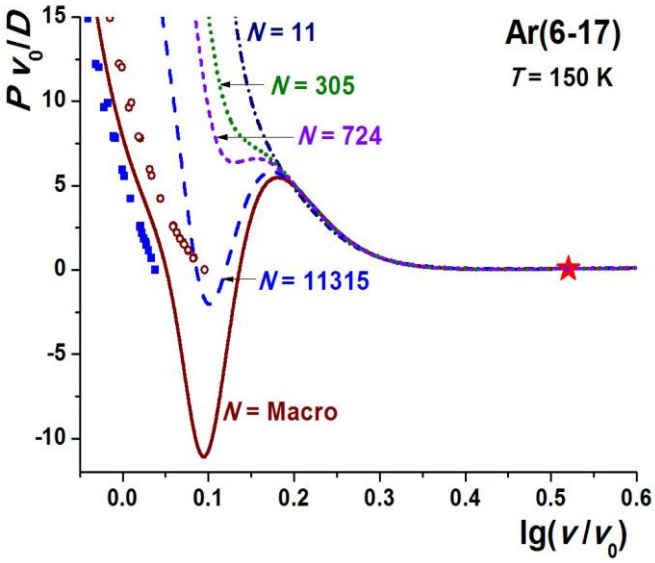

Рис. 4. Изменение изотермы 150 K уравнения состояния при уменьшении числа атомов в области фазового перехода кристалл-жидкость. Звездочкой показано положение критической точки аргона.

уравнения состояния уменьшается. На примере нанокристалла ГЦК аргона показано, что при числе атомов: N_0 = 50 – 100, размерная зависимость скрытой теплоты плавления достигает нуля. Показано, что при $N < N_0$ исчезает S-петля фазового перехода кристалл-жидкость, исчезает физическое различие жидкой и твердой фаз и фазовый переход в таком кластере уже невозможен. Показано, что исчезновение фазового перехода кристалл-жидкость обусловлено ростом доли делокализованных атомов ввиду усиления роли поверхности при уменьшении числа атомов.

Опубликовано в работах [статья: 1, тезисы: 2, 7, 11, 13].

3. Новизна результатов, их научная и практическая значимость.

Все вышеописанные результаты получены нами впервые и не имеют аналогов ни в отечественной, ни в зарубежной литературе. Данные результаты позволяют лучше понять природу некоторых эффектов, наблюдаемых при высоких *P-T*-условиях ядра Земли. Наши прогнозы барических свойств изотопов алмаза могут быть использованы при разработке датчиков давления. Это связано с тем, что внедрение алмаза из С-13 в алмазную наковальню из природного алмаза позволит более точнее определять значения высокого давление в среде по разности в спектрах рамановского рассеяния. Наши прогнозы размерных зависимостей свойств являются пионерскими в этом направлении, и используются зарубежными коллегами. См., например, следующие свежие статьи:

Shirinyan A., Wilde G., Bilogorodskyy Y. Solidification loops in the phase diagram of nanoscale alloy particles: from a specific example towards a general vision // **Journal of Materials Science.** 2018. V. 53. N 4. p. 2859-2879. **DOI:** 10.1007/s10853-017-1697-y

Fu W., Zhang W. Measurement of the surface hydrophobicity of engineered nanoparticles using an atomic force microscope // **Physical Chemistry Chemical Physics**. 2018. V. 20. N 37. p. 24434-24443. **DOI:** 10.1039/C8CP04676J

Hwang G.C., Blom D.A., Vogt T., et al. Pressure-driven phase transitions and reduction of dimensionality in 2D silicon nanosheets // **Nature Communications**. 2018. V. 9 N 1. p. 5412(1-9). **DOI:** 10.1038/s41467-018-07832-4

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

Все запланированные на 2018 год задачи выполнены.

5. Количество и список опубликованных монографий.

Нет

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

1. *Магомедов М.Н.* Уравнение состояния нанокристалла с вакансиями // **Поверхность. Рентген., синхротр., и нейтрон. исслед.** – 2018, № 2. – С. 103 – 116. [*M.N. Magomedov.* State Equation of a Nanocrystal with Vacancies // **Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques**, 2018, Vol. 12, No. 1, p. 185 – 197.] **DOI:** 10.1134/S1027451018010299
2. *Магомедов М.Н.* О вычислении температуры Дебая и температуры фазового перехода кристалл-жидкость для бинарного сплава замещения // **Физика Твердого Тела**. – 2018. – Т. 60, № 5. – С. 970 – 977. [*M.N. Magomedov.* On the Calculation of the Debye Temperature and Crystal–Liquid Phase Transition Temperature of a Binary Substitution Alloy // **Physics of the Solid State**, 2018, Vol. 60, No. 5, p. 981–988.] **DOI:** 10.1134/S1063783418050190
3. *Akhmedov E.N.* Molybdenum lattice properties at high pressure // **Journal of Physics and Chemistry of Solids.** – 2018. – V. 121. – P. 62 – 66. **DOI:** 10.1016/j.jpcs.2018.05.011
4. *Магомедов М.Н.* Об изменении барических свойств при уменьшении размера нанокристалла кремния // **Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов**: межвуз. сб. науч. тр. / под общей редакцией В.М. Самсонова, Н.Ю. Сдобнякова. – Тверь: Твер. гос. ун-т, 2018. – Вып. 10. – 708 с. (С. 434 – 445.) **DOI:** 10.26456/pcascnn/2018.10.434
5. *Ахмедов Э.Н.* Зависимость свойств от размера и формы нанокристалла золота в изобарических условиях // **Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов**: межвуз. сб. науч. тр. / под общей редакцией В.М. Самсонова, Н.Ю. Сдобнякова. – Тверь: Твер. гос. ун-т, 2018. – Вып. 10. – 708 с. (С. 53 – 63.) **DOI:** 10.26456/pcascnn/2018.10.053
6. *Magomedov M.N.* The baric properties of isotope-pure diamonds from ^{12}C and ^{13}C // **Materials Today: Proceedings.** – 2018. – V. 5, № 12. – Part 3. – P. 26025-26032. **DOI:** 10.1016/j.matpr.2018.08.023 **ISSN** 2214-7853

7. Количество и список докладов на конференциях: 17

1. *Газанова Н.Ш.* Зависимость поверхностного давления от температуры, размера и формы нанокристалла вольфрама // **Физико-математическое моделирование систем (ФММС-19)**: материалы XIX Международного семинара. – Россия, **г. Воронеж,** 24-25 июня 2017. – Воронеж: Изд-во ФГБОУ ВО «Воронежский государственный технический университет», 2018. – 168 с. (С. 33 – 39.) **ISSN** 2077-3110
2. *Магомедов М.Н.* О зависимости S–петли плавления от размера и формы нанокристалла простого вещества // VIII Международная научная конференция «Химическая термодинамика и кинетика»: Сборник научных трудов / под ред. Орлова Ю.Д. – Россия, **г. Тверь**, 28 мая – 1 июня 2018 г. – Тверь: Изд-во Тверского государственного университета, 2018. – 453 с. (С. 220 – 221.) **ISBN** 978-5-7609-1354-8
3. *Магомедов М.Н.* Зависимость модуля упругости от размера и формы нанокристалла аргона // VIII Международная научная конференция «Химическая термодинамика и кинетика»: Сборник научных трудов / под ред. Орлова Ю.Д. – Россия, **г. Тверь,** 28 мая – 1 июня 2018 г. – Тверь: Изд-во Тверского государственного университета, 2018. – 453 с. (С. 222 – 223.) **ISBN** 978-5-7609-1354-8
4. *Ахмедов Э.Н.* О параметрах парного межатомного потенциала для молибдена // VIII Международная научная конференция «Химическая термодинамика и кинетика»:

Сборник научных трудов / под ред. Орлова Ю.Д. – Россия, **г. Тверь**, 28 мая – 1 июня 2018 г. – Тверь: Изд-во Тверского государственного университета, 2018. – 453 с. (С. 47 – 48.) **ISBN** 978-5-7609-1354-8

5. *Магомедов М.Н.* О барических свойствах изотопно-чистых алмазов из 12С и 13С // «Углерод: фундаментальные проблемы науки, материаловедение, технология»: Сборник тезисов докладов 11-й Международной конференции. – Россия, **г. Троицк,** Россия, 29 мая − 1 июня 2018 г. – Троицк: Изд-во ФГБНУ «Технологический институт сверхтвердых и новых углеродных материалов», 2018. – 558 с. (С. 291 – 293.) http://www.ruscarbon.org/tisncmdocs/2018/Carbon_Conference_2018-Theses.pdf
6. *Магомедов М.Н.* О металлизации алмаза при сжатии или растяжении // «Углерод: фундаментальные проблемы науки, материаловедение, технология»: Сборник тезисов докладов 11-й Международной конференции. – Россия, **г. Троицк,** Россия, 29 мая − 1 июня 2018 г. – Троицк: Изд-во ФГБНУ «Технологический институт сверхтвердых и новых углеродных материалов», 2018. – 558 с. (С. 294 – 297.) http://www.ruscarbon.org/tisncmdocs/2018/Carbon_Conference_2018-Theses.pdf
7. *Магомедов М.Н.* Об исчезновении фазового перехода кристалл-жидкость при уменьшении размера наносистемы // X Международная научная конференция «Кинетика и механизм кристаллизации. Кристаллизация и материалы нового поколения»: Тезисы докл. – Россия, **г. Суздаль,** 1 – 6 июля 2018. – Иваново: Изд-во ОА «Ивановский издательский дом», 2018. – 502 с. (С. 239.) **ISBN** 978-5-904580-56-8
8. *Магомедов М.Н.* О вычислении температур солидус и ликвидус для бинарного твердого раствора // X Международная научная конференция «Кинетика и механизм кристаллизации. Кристаллизация и материалы нового поколения»: Тезисы докладов. – Россия, **г. Суздаль,** 1 – 6 июля 2018. – Иваново: Изд-во ОА «Ивановский издательский дом», 2018. – 502 с. (С. 240.) **ISBN** 978-5-904580-56-8
9. *Ахмедов Э.Н.* Размерная зависимость температуры плавления молибдена // X Международная научная конференция «Кинетика и механизм кристаллизации. Кристаллизация и материалы нового поколения»: Тезисы докладов. – Россия, **г. Суздаль,** 1 – 6 июля 2018. – Иваново: Изд-во ОА «Ивановский издательский дом», 2018. – 502 с. (С. 247 – 248.) **ISBN** 978-5-904580-56-8
10. *Магомедов М.Н.* Об изменении модуля упругости при изохорическом и изобарическом уменьшении размера нанокристалла // VIII Международный междисциплинарный симпозиум «Физика поверхностных явлений, межфазных границ и фазовые переходы (ФПЯ и ФП) “Physics of surface phenomena, interfaces boundaries and phase transitions” (PSP & PT)». Труды симпозиума. – Россия, **г. Нальчик– г. Ростов-на-Дону – г. Грозный – пос. Шепси,** 12 – 16 сентября 2018 г. – Ростов-на-Дону: Изд-во Фонд науки и образования, 2018. – 264 с. (С. 89 – 92.) **ISBN** 978-5-6041447-6-3
11. *Магомедов М.Н.* Об исчезновении фазового перехода кристалл-жидкость при уменьшении числа атомов в системе // VIII Международный междисциплинарный симпозиум «Физика поверхностных явлений, межфазных границ и фазовые переходы (ФПЯ и ФП) “Physics of surface phenomena, interfaces boundaries and phase transitions” (PSP & PT)». Труды симпозиума. – Россия, **г. Нальчик– г. Ростов-на-Дону – г. Грозный – пос. Шепси,** 12 – 16 сентября 2018 г. – Ростов-на-Дону: Изд-во Фонд науки и образования, 2018. – 264 с. (С. 93 – 96.) **ISBN** 978-5-6041447-6-3
12. *Ахмедов Э.Н.* Зависимость температуры плавления от размера и формы нанокристалла

молибдена в изобарических условиях // VIII Международный междисциплинарный симпозиум «Физика поверхностных явлений, межфазных границ и фазовые переходы (ФПЯ и ФП) “Physics of surface phenomena, interfaces boundaries and phase transitions” (PSP & PT)». Труды симпозиума. – Россия, **г. Нальчик– г. Ростов-на-Дону – г. Грозный – пос. Шепси,** 12 – 16 сентября 2018 г. – Ростов-на-Дону: Изд-во Фонд науки и образования, 2018. – 264 с. (С. 129 – 132.) **ISBN** 978-5-6041447-6-3

13. *Магомедов М.Н.* Изменение фазовой диаграммы простого вещества при уменьшении размера наносистемы // XV Российская конференция (с международным участием) по теплофизическим свойствам веществ (РКТС-15): Тезисы докладов – Россия, **г. Москва,** 15 – 17 октября 2018. – Москва: Изд-во «Янус-К», 2018. – 200 с. (С. 119.) **ISBN** 978-5-80370742-4 [*Magomedov M.N.* Change in the phase diagram of a simple matter with a decrease in the size of the nanosystem // XV Russian Conference (with international participation) on Thermophysical Properties of Substances (RCTP-15): Book of abstracts. – Russia, г. Moscow, October 15 – 17, 2018. – Moscow: Изд-во «Отечество», 2018. – 178 p. (P. 109.)] **ISBN** 978-5-9222-0895-6
14. *Ахмедов Э.Н.* Размерная зависимость температур плавления и кристаллизации молибдена // XV Российская конференция (с международным участием) по теплофизическим свойствам веществ (РКТС-15): Тезисы докладов – Россия, **г. Москва,** 15 – 17 октября 2018. – Москва: Изд-во «Янус-К», 2018. – 200 с. (С. 120.) **ISBN** 978-5-80370742-4 [*Ahmedov E.N.* Size dependence of molybdenum melting and crystallization temperatures // XV Russian Conference (with international participation) on Thermophysical Properties of Substances (RCTP-15): Book of abstracts. – Russia, **г. Moscow,** October 15 – 17, 2018. – Moscow: Изд-во «Отечество», 2018. – 178 p. (P. 110.)] **ISBN** 978-5-9222-0895-6
15. *Магомедов М.Н.* Изменение параметров плавления при барической фрагментации простого вещества // Возобновляемая энергетика: проблемы и перспективы. Актуальные проблемы освоения возобновляемых энергоресурсов // Материалы XI школы молодых ученых «Актуальные проблемы освоения возобновляемых энергоресурсов» имени чл.-корр. РАН Э.Э. Шпильрайна. 15 – 18 октября 2018 г. / Под. ред. д.т.н. Алхасова А.Б. – Россия, **г. Махачкала:** Изд-во АЛЕФ, 2018. – 454 с. (С. 258 – 272.) **ISSN** 2313-5743
16. *Газанова Н.Ш.* Зависимость поверхностного давления от температуры, размера и формы нанокристалла вольфрама // Возобновляемая энергетика: проблемы и перспективы. Актуальные проблемы освоения возобновляемых энергоресурсов // Материалы XI школы молодых ученых «Актуальные проблемы освоения возобновляемых энергоресурсов» имени чл.-корр. РАН Э.Э. Шпильрайна. 15 – 18 октября 2018 г. / Под. ред. д.т.н. Алхасова А.Б. – Россия, **г. Махачкала**: Изд-во АЛЕФ, 2018. – 454 с. (С. 283 – 288.) **ISSN** 2313-5743
17. *Ахмедов Э.Н.* Решеточные свойства молибдена при высоких давлениях // Возобновляемая энергетика: проблемы и перспективы. Актуальные проблемы освоения возобновляемых энергоресурсов // Материалы XI школы молодых ученых «Актуальные проблемы освоения возобновляемых энергоресурсов» имени чл.-корр. РАН Э.Э. Шпильрайна. 15 – 18 октября 2018 г. / Под. ред. д.т.н. Алхасова А.Б. – Россия, **г. Махачкала**: Изд-во АЛЕФ, 2018. – 454 с. (С. 397 – 404.) **ISSN** 2313-5743

Таким образом, **за 2018 г. по теме проекта было опубликовано 23 научные работы: 6 статей в рецензируемых журналах, 17 тезисов и материалов докладов на 6-ти конференциях в России** (см. ниже): в Твери, в Троицке, в пос. Шепси, в Суздале, в Москве, в Махачкале.

1. VIII Международная научная конференция «Химическая термодинамика и кинетика»: Сборник научных трудов. – Россия, **г. Тверь**, 28 мая – 1 июня 2018 г. (3 стендовых доклада)
2. 11-я Международная конференция «Углерод: фундаментальные проблемы науки, материаловедение, технология». – Россия, **г. Троицк,** Россия, 29 мая − 1 июня 2018 г. (1 устный и 1 стендовый доклад)
3. X Международная научная конференция «Кинетика и механизм кристаллизации. Кристаллизация и материалы нового поколения». – Россия, **г. Суздаль,** 1 – 6 июля 2018. (3 устных доклада)
4. VIII Международный междисциплинарный симпозиум «Физика поверхностных явлений, межфазных границ и фазовые переходы (ФПЯ и ФП) “Physics of surface phenomena, interfaces boundaries and phase transitions” (PSP & PT)». – Россия, **пос. Шепси,** 12 – 16 сентября 2018 г. (3 стендовых доклада)
5. XV Российская конференция (с международным участием) по теплофизическим свойствам веществ (РКТС-15). – Россия, **г. Москва,** 15 – 17 октября 2018. (2 устных доклада)
6. XI школа молодых ученых «Актуальные проблемы освоения возобновляемых энергоресурсов» имени чл.-корр. РАН Э.Э. Шпильрайна. – Россия, **г. Махачкала,** 15 – 18 октября 2018 г. (1 устный и 2 стендовых доклада)

8. Количество и список результатов интеллектуальной собственности.

Нет

Заключение.

1. Предложена методика расчёта температуры Дебая и параметров Грюнайзена для бинарного сплава замещения. Показано, что при уменьшении размера нанокристалла твердого раствора замещения разница между температурами ликвидуса и солидуса уменьшатся тем больше, чем заметнее форма нанокристалла отклонена от наиболее энергетически оптимальной формы.
2. Определены параметры парного потенциала для кристаллов следующих однокомпонентных веществ: алмаз (для 12 и 13 изотопов), ГЦК золото, ОЦК молибден, ОЦК вольфрам. На основе полученных параметров рассчитаны как уравнение состояния, так и барические зависимости решеточных свойств указанных кристаллов вдоль различных изотерм как в макро-, так и в нано-структурном состоянии.
3. На основании модели нанокристалла с вакансиями и делокализованными атомами сделаны расчеты уравнения состояния аргона. Показало, что при уменьшении числа атомов в системе S-петля на изотерме уравнения состояния для фазового перехода (ФП) кристалл-жидкость (К-Ж) уменьшается, и при определенном числе атомов (N_0) S-петля ФПК-Ж исчезает. Показано, что величина N_0 увеличивается при отклонении формы нано-системы от наиболее энергетически оптимальной формы. С ростом температуры на изотерме величина N_0 увеличивается. В кластере из $N < N_0$ атомов ФПК-Ж уже нет.