

## ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЙ МЕТОД ОПРЕДЕЛЕНИЯ ХАРАКТЕРИСТИК МАЛОРАЗМЕРНЫХ НАНОЧАСТИЦ

Зеликов А. Д.

Балтийский государственный технический университет «ВОЕНМЕХ»  
им. Д.Ф. Устинова, г. Санкт-Петербург, Россия

В настоящее время одним из возможных путей увеличения энергетических характеристик традиционных энергетических конденсированных систем (ЭКС): твердых ракетных топлив и взрывчатых веществ, является частичная или полная замена дисперсных компонентов таких ЭКС (частиц микронного размера) на малоразмерные наночастицы (состоящие из десятков микроскопических частиц – атомов, молекул или ионов). Для исследования различных вопросов, связанных с созданием подобных систем и сохранением их свойств, необходима информация о различных характеристиках малоразмерных наночастиц, в числе которых важную роль играют термодинамические характеристики (энтальпия, химический потенциал и пр.). Разработанные к настоящему моменту подходы к определению характеристик малоразмерных наночастиц имеют различные недостатки.

**Целью работы** является разработка аппарата, базирующегося на термодинамическом методе и обеспечивающего определение разнообразных характеристик малоразмерных наночастиц с достаточным уровнем точности.

Термодинамический метод определения характеристик наночастиц предполагает, что если рассматриваемым объектом является макроскопическое количество микроскопических частиц, распределенных в пространстве таким образом, что они образуют систему наночастиц, то для такого объекта будут справедливы положения термодинамики. В основе используемого метода лежит применение оптимизационной процедуры, в рамках которой для определения размера и структуры рассматриваемых объектов в качестве целевой функции для твердых частиц используется потенциальная энергия, а для жидких – энергия Гельмгольца.

Для отыскания термодинамических функций наночастиц применяются общепринятая система отсчета, идеология «надмолекул» и положения статистической термодинамики. При использовании понятия «фаза» для наночастиц в рамках классического подхода рассмотрены закономерности фазовых превращений и определено давление, являющееся аналогом капиллярного давления.

Численные расчеты были проведены применительно к наночастицам алюминия. Количество микроскопических частиц не превышало 100, а для описания взаимодействия между микроскопическими частицами использовался трехпараметрический парный потенциал Морзе.

Результаты расчетов показывают, что для малоразмерных наночастиц характерен значительный запас энергии в сравнении с макроскопическими объектами. Это обстоятельство связано с двумя факторами: а) высоким значением относительного количества микроскопических частиц, находящихся на периферии наночастицы (микрочастиц «поверхностного слоя»), б) уменьшением (по абсолютной величине) потенциальной энергии каждой микроскопической частицы в сравнении с кристаллической фазой. Данные свойства микроскопических частиц являются следствием их ограниченного количества в составе наночастиц.

Проведенное сравнение значений температуры плавления наночастиц, полученных при использовании термодинамического метода, со значениями, полученными при использовании метода молекулярной динамики, позволяет говорить о близости полученных результатов.

Выявлено, что количество микроскопических частиц, входящих в состав наночастицы, необходимо рассматривать в качестве параметра состояния.

Полученные результаты позволяют говорить о возможности использования термодинамического метода для изучения малоразмерных наночастиц. Разработанный аппарат: а) обеспечивает определение характеристик малоразмерных наночастиц с достаточной степенью точности, б) характеризуется высоким быстродействием.

Разработанный аппарат может быть в дальнейшем использован при решении ряда различных задач при исследовании наноразмерных компонентов в составе энергетических конденсированных систем – в частности, для решения одной из важнейших задач: сохранения свойств наночастиц при создании и хранении ЭКС.