

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
СУМСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

ФІЗИКА, ЕЛЕКТРОНІКА,
ЕЛЕКТРОТЕХНІКА

ФЕЕ :: 2018

**МАТЕРІАЛИ
та програма**

НАУКОВО-ТЕХНІЧНОЇ КОНФЕРЕНЦІЇ

(Суми, 05–09 лютого 2018 року)



Суми
Сумський державний університет
2018

Термодинамічна модель етапів нуклеації нанокластерних системЮщенко О.В., *доцент*; Ткаченко А.І., *студент*;Шрамко М.С., *студент*

Сумський державний університет, м. Суми

Все більше уваги вчених привертають до себе надзвичайні властивості нанокластерних систем. Значного прогресу останнім часом було досягнуто в цій області за рахунок зростання рівня експерименту, що дозволяє отримати ізольовані наночастинки та вивчати їх властивості.

Нанокластери займають проміжне положення між окремими молекулами і макротілами. Тому властивості одиночного ізольованого кластера можна порівнювати як з властивостями окремих атомів і молекул, так і з властивостями масивного твердого тіла. Поняття «ізольований кластер» є абстрактним, оскільки практично неможливо отримати кластер, що не взаємодіє з навколишнім середовищем. Але з огляду на те, що молекулярні кластери металів, ван-дер-вальсові кластери благородних газів і води, газофазні кластери металів і фулерени мають слабкі міжкластерні взаємодії, їх можна умовно розглядати як ізольовані.

Для системи неконтактуючих кластерів нами була проаналізована залежність вільної енергії Гіббса від радіуса кластера. При цьому було використано вираз для хімічного потенціалу системи, що характеризує етапи зародження та росту кластера. В результаті було доведено, що зростання кластерів спочатку призводить до їх торкання, а потім – до зникнення кордонів між ними (спікання). Початок спікання кластерів відповідає дискретному переходу від ізольованих кластерів до слабой взаємодії, а потім до сильної міжкластерної взаємодії.

За допомогою дослідженої термодинамічної моделі нуклеації можна наочно побачити етапи зростання і спікання кластерів, що, наприклад, пояснює експериментальні дані про термічне розкладання оксидату заліза. Таким чином, процес утворення нанокластерної системи проходить дві основні стадії: спочатку утворюється наносистема з слабо взаємодіючими кластерами (ця стадія починається з зародження кластерів), а потім створюється система сильно взаємодіючих кластерів (ця стадія починається зі спікання кластерів).