

Аннотация

к диссертации на тему «Межфазные характеристики металлических нанокристаллов и тонких пленок на границах с вакуумом, расплавом и полярной органической жидкостью»

Цель работы состоит в разработке обобщенного электронно-статистического метода определения многопараметрической зависимости межфазной энергии (МЭ) d - и f -металлов и сплавов на разных границах и ориентационной и температурной зависимостей работы выхода (РВЭ); разработке экспериментального метода определения анизотропии МЭ и эффективного контактного угла в системе металлическая частица-подложка.

Научная новизна основных результатов заключается в следующем:

в области фундаментальных исследований развита теория Френкеля-Гамбоша-Задумкина поверхностной энергии (ПЭ) макрокристаллов s -металлов с учетом осцилляционного, дисперсионного, поляризационного и температурного вкладов, что расширило области применимости теории МЭ к тонким пленкам и наночастицам d - и f -металлов на разных границах;

впервые получены многопараметрические зависимости ПЭ тонких пленок и макрокристаллов сплавов d - и f -металлов от ориентации граней, концентрации компонентов, температуры, степени одноосной деформации;

предложен новый полуэмпирический метод расчета энергии связи кристаллов сплавов переходных металлов;

получены выражения и проведены исследования МЭ граней наночастиц сплавов d - и f -металлов на границе с расплавами при изменении размеров фаз и температуры;

получено выражение для поляризационного вклада в МЭ граней металлических нанообъектов на границе с полярным диэлектриком.

Исследована зависимость МЭ кобальта от размеров твердой и жидкой фаз;

получена аналитическая связь между ПЭ и РВЭ, позволяющая корректно оценить ориентационную и температурную зависимости РВЭ полиморфных фаз *d*- и *f*-металлов;

разработан экспериментальный метод исследования анизотропии МЭ и эффективного контактного угла на границе частица-подложка с помощью АСМ.

Разработанная теория может применяться для оптимизации технологии получения металлических наночастиц в неводных средах, для построения фазовых диаграмм наносистем, учета процессов адсорбции в сплавах. Предложенный экспериментальный метод исследования анизотропии МЭ и смачивания твердых систем универсален.