

УДК 538.911:539.211

ВАРИАЦИОННЫЙ МЕТОД ИССЛЕДОВАНИЯ НАНООБЪЕКТОВ**Л.А. Борыняк, А.П. Чернышев***Новосибирский государственный технический университет
alfred.chernyshev@gmail.com*

В настоящей работе обосновано применение методов вариационного исчисления для исследования свойств нанобъектов. Получены уравнения для расчета параметра порядка тонкой пленки, нанесенной на подложку. Проведены расчеты параметра порядка для когерентной границы подложка – тонкая пленка. Рассмотрен случай, когда материал подложки и материал тонкой пленки имеют фазовый переход второго рода. Проведено сравнение когерентных, полукogerентных и некогерентных границ.

Ключевые слова: тонкие пленки, когерентные границы, параметр порядка.

1. Постановка задачи

Хорошо известно, что структура и свойства нанобъектов могут сильно отличаться от структуры и свойств макроскопических тел, имеющих тот же химический состав. Равновесные свойства нанобъектов можно рассматривать в изотермических, адиабатических или неравновесных условиях. Адиабатические условия имеют место, если наночастицы находятся в теплоизолирующей матрице или наночастицы получены распылением вещества в вакуум. С точки зрения статистической механики изолированный нанобъект является микроканоническим ансамблем и может исследоваться различными методами: методом молекулярной динамики, методом Монте-Карло и методом среднего поля. В настоящей статье рассматривается метод среднего поля. Метод среднего поля был первоначально использован для исследования фазовых переходов в макроскопических телах [1]. Однако в настоящее время этот метод успешно применяется для описания термодинамических свойств нанобъектов [2–5]. Из множества нанобъектов целесообразно выделить кластеры. К кластерам мы будем относить частицы, состоящие из $N = 10 - 500$ атомов или молекул. Свойства кластеров обычно исследуются теоретически с помощью потенциальной энергии взаимодействия в многочастичной системе $-U = U(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$. Здесь \mathbf{r}_i – радиус-вектор i -го атома или молекулы кластера. Минимум функции $U(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ соответствует механически устойчивому расположению частиц, составляющих кластер. Седловая точка гиперповерхности $U(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ соответствует переходному состоянию, отделяющему долину притяжения от остальной части гиперповерхности. Для фазового превращения вида твердое тело – жидкость нижний минимум соответствует твердой фазе, верхний минимум – жидкой фазе. Аморфной фазе соответствуют несколько мелких минимумов вблизи седловой точки. В определенном интервале давления и температуры кластеры проявляют свойства, совершенно не присущие массивным твердым телам. К таким свойствам можно отнести динамическое сосуществование различных фаз – перемежающееся существование в условиях равновесия то одной фазы, то другой; существо-

вание равновесных фаз, которые абсолютно неустойчивы в макроскопических телах [6–9]. Различие между фазовыми переходами первого и второго рода в кластерах становится слабым [8].

Нанообъекты отличаются от кластеров, прежде всего, количеством атомов или молекул, из которых они состоят. Исследование физических свойств нанообъектов с использованием функции $U(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$, несмотря на свою простоту, в настоящее время дает только качественные результаты, поскольку топография гиперповерхности $U(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ сложна и неизвестна. Количество геометрически разделенных минимумов растет экспоненциально с увеличением количества атомов в нанообъекте. Abinitio расчеты и численное моделирование дают только качественные результаты из-за большого количества взаимодействующих частиц. Метод среднего поля Ландау, в котором используется параметр порядка, один из важнейших способов описания фазовых переходов и кооперативных явлений. Параметр порядка – это характеристика определенного фазового перехода в многомерном фазовом пространстве. Он имеет более низкую размерность, чем многочастичная система, так как может быть получен из микроскопических свойств исследуемой системы путем рассмотрения только тех степеней свободы системы, которые ответственны за данный фазовый переход. С термодинамической точки зрения параметр порядка – это один из параметров термодинамической системы, которые наряду с такими параметрами, как температура T , давление p , объем V и другие, описывают состояние термодинамической системы. Как функция параметра порядка, свободная энергия имеет, по крайней мере, два минимума, разделенных максимумом или седловой точкой, которая соответствует неустойчивому состоянию.

1.1. Гомогенные системы

Примем термодинамическое определение фазы вещества: фаза – это гомогенная часть термодинамической системы, которая может быть выделена из остальной части системы благодаря присущим ей внутренним параметрам. Изолированной системой мы будем называть термодинамическую систему, которая не обменивается с окружающей средой веществом и энергией. Закрытая термодинамическая система, соответственно, не обменивается с окружающей средой веществом и может обмениваться энергией. В рамках модели среднего поля нами было показано в работах [5, 10], что вместо отдельного нанообъекта (наночастицы, нанопроволоки, тонкой пленки и т. п.) можно рассматривать макроскопическое тело. Для этого определяется эффективное значение параметра порядка нанообъекта и в дальнейшем рассматривается макроскопическое тело, имеющее такой же параметр порядка, структуру и химический состав.

Рассмотрим фазовый переход твердое тело – жидкость. Свободная энергия Гиббса как функция параметра порядка должна иметь хотя бы два минимума, соответствующих твердому состоянию η_0 и жидкому состоянию η_1 , и переходное состояние с параметром порядка η_2 . Здесь переходное состояние соответствует вершине барьера, разделяющего области стабильности твердого и жидкого состояний вещества. Для гомогенной закрытой термодинамической системы устойчивые фазы соответствуют

минимуму мольной энергии Гиббса $g^0(p, T, \eta)$, т. е. могут быть найдены среди решений уравнения

$$\partial g^0(p, T, \eta) / \partial \eta = 0. \quad (1)$$

Примем, что жидкая фаза является симметричной при любой температуре выше температуры фазового перехода, поэтому $\eta_1 = 0$. В соответствии с теорией Ландау плотность энергии Гиббса имеет вид

$$g^0(p, T, \eta) = g_0^0(p, T) + V^0 \left(A\eta^2/2 - B\eta^3/3 + C\eta^4/4 \right), \quad (2)$$

где V^0 – мольный объем; A , B и C – коэффициенты Ландау. В условиях равновесия мольная энергия Гиббса симметричной и несимметричной фаз одинакова в обеих фазах:

$$g_0^0(p_m, T_m) = g^0(p_m, T_m, \eta_m), \quad (3)$$

здесь использовано очевидное соотношение $g^0(p, T, \eta_1) = g_0^0(p, T)$; T_m – температура плавления при давлении p_m . Из уравнений (2) и (3) следует, что в условиях равновесия должно выполняться соотношение

$$A\eta_m^2/2 - B\eta_m^3/3 + C\eta_m^4/4 = 0. \quad (4)$$

С другой стороны, в условиях равновесия энергия Гиббса имеет минимальное значение, поэтому должно выполняться условие экстремума:

$$\partial g^0 / \partial \eta = V^0 \left(A\eta - B\eta^2 + C\eta^3 \right).$$

Последнее уравнение дает очевидное решение $\eta_1 = 0$ (симметричная фаза) и уравнение

$$A - B\eta + C\eta^2 = 0. \quad (5)$$

Это уравнение дает еще два решения для несимметричной фазы:

$$\eta_0 = \left(B + \sqrt{B^2 - 4AC} \right) / 2C, \quad (6)$$

$$\eta_2 = \left(B - \sqrt{B^2 - 4AC} \right) / 2C. \quad (7)$$

При $A > 0$ решения η_1 и η_0 соответствуют локальным минимумам. Однако, если $T < T_m$, то $g(p, T, \eta_1) > g(p, T, \eta_0)$, поэтому симметричная фаза находится в метастабильном состоянии. Решение (7) при $A > 0$ соответствует локальному максимуму и дает переходное состояние. Решение (6) соответствует равновесному состоя-

нию несимметричной фазы. Объединяя уравнения (4) и (5), получаем, что при температуре плавления параметр порядка определяется соотношением

$$\eta_m = 2B/(3C). \quad (8)$$

Подставляя равенство (8) в уравнение (5), получаем

$$A(T_m) = 2B^2/(9C). \quad (9)$$

Если использовать аппроксимацию Ландау

$$A = a(T - T_c), \quad (10)$$

то из соотношений (9) и (10) следует, что

$$T_m = T_c + 2B^2/(9aC).$$

Здесь T_c – критическая температура. $T_m > T_c$, поэтому при фазовом переходе твердое тело – жидкость коэффициент A больше нуля.

1.2. Гетерогенные системы

Межфазовые границы, поверхности нанобъектов и неоднородности структуры делают рассматриваемую систему гетерогенной. Некоторые эффекты, обусловленные влиянием неоднородности структуры на физические свойства нанобъектов, также можно учесть с помощью введения эффективного параметра порядка [11]. Однако для получения полной информации о таком влиянии, оставаясь в рамках модели Ландау, надо использовать вариационные методы решения физических задач. Влияние неоднородностей будем учитывать добавлением квадрата градиента параметра порядка [2–4]. В изолированной гетерогенной системе выполняется закон сохранения энергии E :

$$E = \int_V \left[e(V, S) + J_e (\nabla \eta)^2 / 2 \right] dx^3 = \text{const},$$

где $e(V, S)$ – плотность энергии, V – объем, S – энтропия. Энтропия в условиях термодинамического равновесия достигает максимального значения:

$$S = \int_V \left[s(V, T) - J_s (\nabla \eta)^2 / 2 \right] dx^3 \rightarrow \text{max}. \quad (11)$$

Вариационное соотношение (11) в одномерном случае ($dx^3 \rightarrow dx$) можно сопоставить с принципом наименьшего действия в механике. Тогда подынтегральное выражение можно рассматривать как аналог лагранжиана, $s(V, T)$ и $J_s (\nabla \eta)^2 / 2$ – как аналоги потенциальной и кинетической энергии соответственно. В роли времени выступает координата x . Если термодинамический процесс протекает при постоянном объеме, то необходимо учитывать это при варьировании функционала. В реальных условиях нанобъект часто взаимодействует с подложкой. Если при этом не происхо-

дит обмена веществом с окружающей средой, то нанобъект с подложкой представляют собой замкнутую термодинамическую систему при постоянном внешнем давлении и температуре. В условиях равновесия в такой системе достигается минимума энергия Гиббса G :

$$G[\eta] = \int_V \left[J(\nabla\eta)^2 / 2 + g(\eta) \right] dx^3. \quad (12)$$

2. Описание метода решения

2.1. Основные уравнения

Рассмотрим тонкую пленку толщины d на подложке (рис. 1). Фактически подложка является макроскопическим телом, находящимся в тепловом равновесии с тонкой пленкой, которая имеет толщину в нанодиапазоне характерных размеров. Таким образом, подложка выступает в качестве термостата по отношению к тонкой пленке. Внешнее давление будет постоянным, поскольку с одной стороны пленки вакуум или инертный газ, а с другой стороны находится подложка. При постоянной температуре и постоянном давлении энергия Гиббса принимает минимальное значение в равновесных условиях. Энергия Гиббса в этом случае может быть представлена в виде функционала [12]:

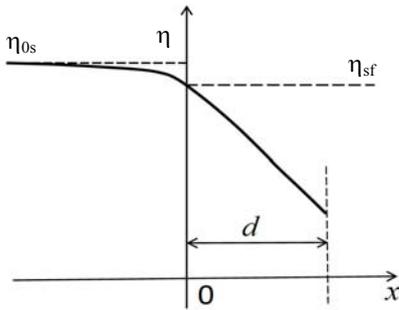


Рис. 1. Схематическая зависимость $\eta = \eta(x)$. Здесь d – толщина тонкой пленки; η_{sf} – значение параметра порядка на границе подложка – тонкая пленка; η_{s0} – значение параметра порядка в объеме подложки. В области $x < 0$ находится подложка; в области $0 < x < d$ расположена тонкая пленка

$$G[\eta(x)] = \int_{-\infty}^d \left[J(\nabla_x \eta)^2 / 2 + g(\eta(x)) \right] dx, \quad (13)$$

здесь $g(\eta)$ – плотность энергии Гиббса в однородной среде; $\nabla_x = d/dx$. Искомая функция $\eta = \eta(x)$ должна минимизировать функционал (13). Поскольку подынтегральная функция не зависит явно от x , приходим к первому интегралу движения:

$$J(\nabla_x \eta)^2 / 2 - g(\eta(x)) = \text{const}, \quad (14)$$

здесь $\eta \equiv \eta_s(x)$, $g \equiv g_s(x)$ и $\eta \equiv \eta_f(x)$, $g \equiv g_f(x)$ внутри подложки и внутри пленки, соответственно.

Из соотношения (14) непосредственно следует, что

$$J_s(\nabla_x \eta_s)^2 / 2 - g_s(\eta_s) = J_f(\nabla_x \eta_f)^2 / 2 - g_f(\eta_f) = \text{const}. \quad (15)$$

Константу можно определить из тех соображений, что в объеме носителя, т. е. при $x \rightarrow -\infty$, параметр порядка имеет свое равновесное значение η_0 . Поскольку в макроскопических телах относительные флуктуации параметра порядка малы по сравне-

нию с аналогичными флуктуациями в тонких пленках, то для плотности энергии Гиббса в объеме подложки g_{sb} можно использовать выражение (2):

$$g_{sb}(p, T, \eta_{s0}) = g_{s0}(p, T) + A\eta_{s0}^2/2 - B\eta_{s0}^3/3 + C\eta_{s0}^4/4. \quad (16)$$

Таким образом, константа в правой части уравнения (15) равна $-g_{sb}$. Теперь левую часть уравнения (15) можно переписать в виде

$$J_s (\nabla_x \eta_s)^2 / 2 - g_s(\eta_s(x)) = -g_{sb}(\eta_{s0}).$$

Из последнего уравнения легко получить дифференциальное уравнение

$$d\eta_s/dx = \pm \left(2(g_s(\eta_s) - g_{sb}(\eta_{s0})) / J_s \right)^{1/2}. \quad (17)$$

Разумеется, зависимость $g_{sb} = g_{sb}(\eta_{s0})$ нужно считать известной.

2.2. Фазовые переходы второго рода

Рассмотрим теперь фазовые переходы второго рода. Для таких переходов коэффициент Ландау B равен нулю. Используя соотношение (16) при $B = 0$, получим

$$g_s - g_{sb} = A_s (\eta_s^2 - \eta_{s0}^2) / 2 + C_s (\eta_s^4 - \eta_{s0}^4) / 4. \quad (18)$$

В этом случае энергия Гиббса (16) имеет экстремум при η_{s0} :

$$\eta_{s0}^2 = -A_s / C_s. \quad (19)$$

При выводе формулы (19) было учтено, что $A_s < 0$. Подстановка соотношения (19) в уравнение (18) дает

$$g_s - g_{sb} = |A_s| (\eta_{s0}^2 - \eta_s^2)^2 / 4\eta_{s0}^2. \quad (20)$$

Введем длину корреляции

$$L = (2J/|A|)^{1/2}. \quad (21)$$

В методе Ландау принято, что коэффициент A определяется формулой (10). Следовательно, длина корреляции растет по мере приближения температуры к T_c и достигает максимального значения при $T = T_c$. После подстановки соотношений (20) и (21) в уравнение (17) и очевидных преобразований получаем обыкновенное дифференциальное уравнение первого порядка:

$$d\eta_s/d\chi = \pm (\eta_{s0}^2 - \eta_s^2) / \eta_{s0}. \quad (22)$$

Здесь введено обозначение $\chi = x/L_s$. Решение уравнения (22) определено на интервале $-\infty < x \leq 0$. Поскольку $\eta_s = \eta_{s0}$ при $\chi \rightarrow -\infty$ по определению, то получаем, что

$$\eta_s = \eta_{s0} \frac{\eta_{sf} - \eta_{s0} \tanh \chi}{\eta_{s0} - \eta_{sf} \tanh \chi}. \quad (23)$$

Здесь η_{sf} – значение параметра порядка на границе подложка – тонкая пленка. Это значение пока не определено. С другой стороны, исходя из физического смысла параметра порядка и когерентности границы, можно предположить, что на этой границе выполняются соотношения:

$$\eta_s = \eta_f, \quad d\eta_s/dx = d\eta_f/dx \text{ при } x = 0. \quad (24)$$

Собственно, в тонкой пленке также справедливо уравнение (14):

$$J_f (\nabla_x \eta_f)^2 / 2 - g_f(\eta_f(x)) = -g_{sb}(\eta_{s0}). \quad (25)$$

Для определения зависимости $\eta_f = \eta_f(x)$ введем обозначение $g_{fb}(\eta_{f0})$ для плотности энергии Гиббса в объеме макроскопической пленки, т. е. при $d \rightarrow \infty$, и применим уравнение (20), но уже для тонкой пленки:

$$g_f(\eta_f) = g_{fb}(\eta_{f0}) + |A_f| (\eta_{f0}^2 - \eta_f^2)^2 / (4\eta_{f0}^2). \quad (26)$$

После подстановки соотношения (26) в уравнение (25) получим

$$\frac{dz}{d\chi_f} = \pm \left[\Delta\Phi + (1 - z^2)^2 \right]^{1/2}, \quad (27)$$

здесь введены вспомогательные обозначения: $z = \eta_f/\eta_{f0}$, $\chi_f = x/L_f$ и $\Delta\Phi = 2L_f^2 (g_{fb}(\eta_{f0}) - g_{sb}(\eta_{s0})) / (J_f \eta_{f0}^2)$. Оценим порядок величины $|\Delta\Phi|$. Из уравнения (25) следует оценка $g_{fb}(\eta_{f0}) - g_{sb}(\eta_{s0}) < g_f(\eta_f) - g_{sb}(\eta_{s0}) = J_f (\nabla \eta_f)^2 / 2 \approx J_f (\Delta \eta_f)^2 / (2L_f^2)$. После подстановки имеем $\Delta\Phi \sim (\Delta \eta_f / \eta_{f0})^2 < 1$. В последнем выражении $\Delta \eta_f$ – среднее изменение параметра порядка пленки вдоль оси x между двумя точками, расположенными на расстоянии, равном длине корреляции L .

Рассмотрим два случая: $\Delta\Phi < 0$ и $\Delta\Phi > 0$. В первом случае выражение в квадратных скобках можно рассматривать как разность квадратов: $(1 - z^2)^2 - |\Delta\Phi| =$

$= \left(1 + \sqrt{|\Delta\Phi|} - z^2\right) \left(1 - \sqrt{|\Delta\Phi|} - z^2\right)$. Подставляя это соотношение в (37) и интегрируя, имеем

$$\chi_f = \left(F(\omega, k) - F(\omega_{sf}, k)\right) / \left(1 + \sqrt{|\Delta\Phi|}\right)^{1/2}.$$

Здесь $\omega = z / \left(1 - \sqrt{|\Delta\Phi|}\right)^{1/2}$, $\omega_{sf} = z_{sf} / \left(1 - \sqrt{|\Delta\Phi|}\right)^{1/2}$, $z_{sf} = \eta_{sf} / \eta_{f0}$, $F(\omega, k)$ – эллиптический интеграл первого рода, $k^2 = \left(1 - \sqrt{|\Delta\Phi|}\right) / \left(1 + \sqrt{|\Delta\Phi|}\right)$. Второй случай ($\Delta\Phi > 0$) будет рассмотрен ниже.

2.3. Параметр порядка на границе подложка – пленка

Для определения параметра η_{sf} воспользуемся соотношениями (22), (24) и (27).

При $\chi_s = 0$ уравнение (22) имеет вид

$$d\eta_s/dx = \pm \left(\eta_{sf}^2 - \eta_{s0}^2\right) / \left(L_s \eta_{s0}\right). \quad (28)$$

Из равенства (27) получим производную в правой части уравнения (24):

$$\frac{d\eta_f}{dx} = \pm \frac{\eta_{f0}}{L_f} \left[\Delta\Phi + \left(1 - \left(\eta_{sf} / \eta_{f0}\right)^2\right)^2 \right]^{1/2}. \quad (29)$$

В этом уравнении учтено, что при $\chi_f = 0$ выполняется соотношение $\eta_f = \eta_{sf}$. Приравняв правые части уравнений (28) и (29) и возводя обе части в квадрат, получим биквадратное уравнение относительно $y = \eta_{sf} / \eta_{s0}$:

$$\varepsilon(\varepsilon\mu - 1)y^4 - 2\varepsilon(\mu - 1)y^2 + \mu(1 + \Delta\Phi) - \varepsilon = 0. \quad (30)$$

Здесь введены дополнительные обозначения: $\varepsilon = \eta_{s0}^2 / \eta_{f0}^2$ и $\mu = L_s^2 / L_f^2$.

Для того чтобы уравнение (30) при $\Delta\Phi < 0$ имело действительные корни, должны выполняться неравенства: $\varepsilon\mu > 1$, $|\Delta\Phi| > 1 - \varepsilon/\mu$. Или, наоборот: $\varepsilon\mu < 1$, $|\Delta\Phi| < 1 - \varepsilon/\mu$. Во втором случае, когда $\Delta\Phi > 0$, биквадратное уравнение имеет действительные корни при условии

$$\varepsilon\mu > 1, \quad \Delta\Phi < \varepsilon/\mu - 1, \quad (31)$$

или $\varepsilon\mu < 1$, $\Delta\Phi > \varepsilon/\mu - 1$ соответственно.

3. Обсуждение полученных результатов

В рамках теории Ландау коэффициенты ε и μ имеют вид:

$$\varepsilon = |A_s| C_f / (|A_f| C_s), \quad (32)$$

$$\mu = J_s |A_f| / (J_f |A_s|). \quad (33)$$

Как следует из соотношений (10), (32) и (33), коэффициенты ε и μ зависят от температуры. Однако эти же соотношения показывают, что если подложка и тонкая пленка имеют близкие критические температуры, то эта зависимость слабая. Произведение $\varepsilon\mu$ от температуры не зависит. В принятой модели $\varepsilon\mu$, ε , $\Delta\Phi$ и μ зависят от природы материала подложки и пленки и не зависят от толщины пленки, т. е. могут быть определены из макроскопических параметров вещества.

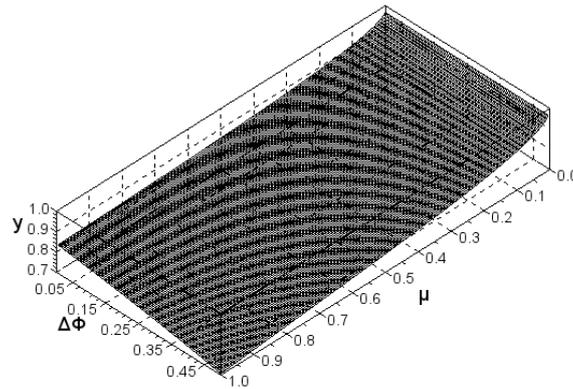


Рис. 2. Зависимость приведенного параметра порядка $y = \eta_{sf} / \eta_{s0}$ от макроскопических параметров μ и $\Delta\Phi$ на границе подложка – тонкая пленка

На рис. 2 представлены результаты расчетов приведенного параметра порядка $y = y(\mu, \Delta\Phi)$ при дополнительных условиях (31). При расчетах было принято, что $\varepsilon = 2$. Как следует из соотношений (10) и (32), если существует решение уравнения $\varepsilon(T) = 2$, то оно единственное и однозначно определяет температуру. Перемножая правые части соотношений (32) и (33), получим уравнение

$$\mu = J_s C_f / (J_f C_s \varepsilon). \quad (34)$$

Из полученного соотношения следует, что μ определяется выбранным значением ε и макроскопическими коэффициентами, не зависящими от температуры. Величина $\Delta\Phi$ прямо пропорциональна разности $g_{fb}(\eta_{f0}) - g_{sb}(\eta_{s0})$ и обратно пропорциональна η_{f0}^2 . Как показывают результаты расчетов (см. рис. 2), с увеличением $\Delta\Phi$ при фиксированном значении μ параметр порядка на границе подложка – тонкая пленка уменьшается.

4. Выводы

Таким образом, впервые методом среднего поля исследована граница между тонкой пленкой и подложкой для материалов, претерпевающих фазовый переход второго рода. Показано, что структура когерентной границы между подложкой и тонкой пленкой определяется макроскопическими параметрами материалов, из которых они изготовлены. Математически это обусловлено тем, что наличию когерентной границы соответствуют граничные условия вида (24). При наличии полукогерентной границы производная параметра порядка имеет конечный разрыв на границе подложка – тонкая пленка и параметр порядка тонкой пленки необходимо учитывать при расчете величины отношения η_{sf} / η_{s0} . Для полностью некогерентной границы оба граничных условия (24) не выполняются. Поэтому для решения задачи, сформулированной в виде соотношения (12), необходимо привлечение дополнительных физических принципов, описывающих свойства некогерентной границы.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Ландау Л.Д. Собрание трудов / Л.Д. Ландау; под ред. Е.М. Лифшица. – Т. 1. – М.: Наука, 1969. – С. 234–261.
- [2] Sakai H. Surface-induced melting of small particles / H. Sakai // Surface Science. – 1996. – Vol. 351. – P. 285–291.
- [3] Chang J. Surface and bulk melting of small metal clusters / J. Chang, E. Johnson // Philosophical Magazine. – 2005. – Vol. 85. – No. 30. – P. 3617–3627.
- [4] Tartaglino U. Melting and nonmelting of solid surfaces and nanosystems / U. Tartaglino, T. Zykova-Timan, F. Ercolessi, E. Tosatti // Physics Reports. – 2005. – Vol. 411. – P. 291–321.
- [5] Chernyshev A.P. Melting of surface layers of nanoparticles: Landau model / A.P. Chernyshev // Materials Chemistry and Physics. – 2008. – Vol. 112. – P. 226–229.
- [6] Wautelet M. Phase diagrams of small particles of binary systems: a theoretical approach / M. Wautelet, J.P. Dauchot, M. Hecq // Nanotechnology. – 2000. – Vol. 11. – P. 6–9.
- [7] Mei Q.S. Melting and superheating of crystalline solids: From bulk to nanocrystals / Q.S. Mei, K. Lu // Progress in Materials Science. – 2007. – Vol. 52. – P. 1175–1262.
- [8] Бери Р.С. Фазовые переходы в кластерах различных типов / Р.С. Бери, Б.М. Смирнов // Успехи физических наук. – 2009. – Т. 179. – № 2. – С. 147–177.
- [9] Umantsev A. Thermodynamic Stability of Transition States / A. Umantsev // J. Stat. Phys. – 2009. – Vol. 136. – № 1. – P. 117–130.
- [10] Chernyshev A.P. The thermodynamic properties of nanoparticles with the characteristic sizes less than 10 nm / A.P. Chernyshev // Physics Letters A. – 2010. – Vol. 374. – P. 4622–4624.
- [11] Chernyshev A.P. Effect of nanoparticle size on the onset temperature of surface melting / A.P. Chernyshev // Materials Letters. – 2009. – Vol. 63. – P. 1525–1527.
- [12] Chernyshev A.P. The dependence of surface tension of solid nanoscale films on their thickness / A.P. Chernyshev // Physica B. – 2011. – Vol. 406. – P. 4124–4128.

Borynyak L.A., Chernyshev A.P.

VARIATIONAL METHOD OF NANO-OBJECTS INVESTIGATION

In the present article, the application of calculus of variations was based to investigate nano-objects properties. The equations for the order parameter calculations were obtained in the case of supported thin films. The order parameter calculations were carried out for the coherent thin film-support boundary. The cases when the substances of thin film and support have the second-order phase transition were considered. The comparison of coherent, semi-coherent, and non-coherent boundaries was performed.

Keywords: Thin films; Coherent boundaries; Order parameter.

Статья поступила 9 октября 2012 г.