

Сосуществование фаз и гистерезис при фазовых переходах в металлических кластерах.

R.S.Berry¹⁾, Б.М.Смирнов. ²⁾.

¹⁾Department of Chemistry, University of Chicago, 929 East 57th St., Chicago, IL 60637, USA

²⁾Объединенный Институт Высоких Температур РАН, Ижорская 13/19, Москва 127412, Россия

PACS: 36.40.Ei, 36.70.Dv, 64.70.Hz

Аннотация.

Рассмотрены свойства кластеров в области фазового перехода, которые для малых кластеров, содержащих менее 100 атомов, определяются сосуществованием фаз. Хотя фазовый переход связан с изменением конфигурационного состояния, а конфигурационная степень свободы кластера отделяется от осцилляционных (тепловых) степеней свободы при низких температурах, тем не менее тепловое движение атомов дает заметный вклад в энтропию перехода. В противоположность диэлектрическим кластерам, для которых конфигурация атомов в жидком агрегатном состоянии мало изменяется при нагревании, жидкое состояние металлических кластеров включает в себя много конфигурационных состояний, и эта смесь конфигураций атомов зависит от температуры. Этот факт приводит к гистерезису при плавлении и затвердевании больших металлических кластеров.

Phase coexistence and hysteresis in phase transitions of metal clusters.

Abstract.

Properties of clusters in the range of the phase transitions are considered. For small clusters consisting of a number of atoms below 100, these properties are determined by phase coexistence. Though the phase transition is connected with change of the cluster configuration state, and the configuration degree of freedom is separated from oscillation (thermal) degrees of freedom at low temperatures, nevertheless, the oscillation degrees of freedom give a remarkable contribution to the transition entropy. In contrast to dielectric clusters, where the configuration of atoms for the liquid aggregate state varies weakly with cluster heating, the liquid aggregate state of metal clusters includes many atomic configurations and this configuration mixture depends on the temperature. This fact leads to a hysteresis in melting and solidification of large metal clusters.