

УДК 539.89: 536.413+536.631+539.32

Оригинальная статья

ВЛИЯНИЕ РАЗМЕРА И ДАВЛЕНИЯ НА ТЕМПЕРАТУРНЫЕ ЗАВИСИМОСТИ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПЛАТИНЫ

С.П. Крамынин

Институт физики им. Х.И. Амирханова – обособленное подразделение
ФГБУН «Дагестанского федерального исследовательского центра
Российской академии наук»

367015, Россия, Махачкала, ул. М. Ярагского, 94

kraminin@mail.ru

DOI: 10.26456/pcascnn/2021.13.465

Аннотация: Основываясь на параметрах парного потенциала межатомного взаимодействия Ми–Леннард–Джонса для *Pt*, и используя RP-модель нанокристалла, изучены температурные, барические и размерные зависимости следующих свойств: модуля упругости, коэффициента теплового расширения, изобарной теплоемкости и поверхностной энергии. Расчет уравнения состояния *Pt* показал хорошее согласие с экспериментом. Уравнение состояния было рассчитано вдоль пяти изотерм: $T = 300, 1300, 1500, 1700, 1900$ К. Впервые с единых позиций выполнены расчеты температурных зависимостей указанных свойств *Pt* в диапазоне от 0 К до 1500 К вдоль изобар 0 и 50 ГПа. Расчеты указанных зависимостей проведены как для макро-, так и для нанокристалла кубической формы из 306 атомов. Показано, что при изобарно-изотермическом уменьшении размера нанокристалла *Pt* происходит уменьшение значений модуля упругости и поверхностной энергии, а значения коэффициента теплового расширения и изобарной теплоемкости увеличиваются на исследуемом интервале температур.

Ключевые слова: платина, нанокристалл, размерные зависимости, уравнение состояния, поверхностная энергия.

1. Введение и метод расчета

Платина широко используется в научных и промышленных устройствах благодаря своим уникальным механическим, теплофизическим и химическим свойствам. В частности, платина термостойка и способна выдерживать механические нагрузки в агрессивных средах при очень высоких температурах в течение многих тысяч часов. Платина часто используется в качестве высокотемпературного маркера давления в экспериментах по лазерному нагреву из-за её способности хорошо поглощать лазерное излучение и отсутствию структурных переходов при больших сжатиях, а также химической инертности. Для расчета свойств гранецентрированного кристалла (ГЦК) кристалла *Pt* представим парное межатомное взаимодействие в виде потенциала Ми–Леннард–Джонса [1]:

$$\varphi(r) = \frac{D}{(b-a)} \left[a \left(\frac{r_0}{r} \right)^b - b \left(\frac{r_0}{r} \right)^a \right], \quad (1)$$

где D и r_0 – глубина и координата минимума потенциала, $b > a > 1$ – параметры.

Расчеты термодинамических свойств производились на основе формализма из [1]. Для расчётов свойств ГЦК – платины были использованы следующие параметры: масса атома $m(Pt) = 195,08$ а.е.м., $k_n(\infty) = 12$ – первое координационное число в макрокристалле и $k_p = 0,7405$ – коэффициент упаковки ГЦК-структуры. Параметры потенциала (1) были определены в работе [1] и соответственно равны:

$$r_0 = 2,766 \times 10^{-10} \text{ м}, D/k_B = 11400,7 \text{ К}, a = 3,05, b = 11,65. \quad (2)$$

Для расчета размерных зависимостей свойств нанокристалла платины использована RP-модель из [2, 3].

3. Обсуждение результатов

На рис. 1 представлены расчеты для низкотемпературной ($T = 300 \text{ К}$) области уравнения состояния. Наши расчеты – сплошная кривая, окружности – данные из [4], квадраты – [5], штриховая линия – [6], треугольники – [7], звездочки – [8], кривая с пятиугольниками – [9], закрашенные квадраты – [10]. Как видно из рис. 1, наши данные хорошо согласуются с литературными, в исследуемом диапазоне давлений.

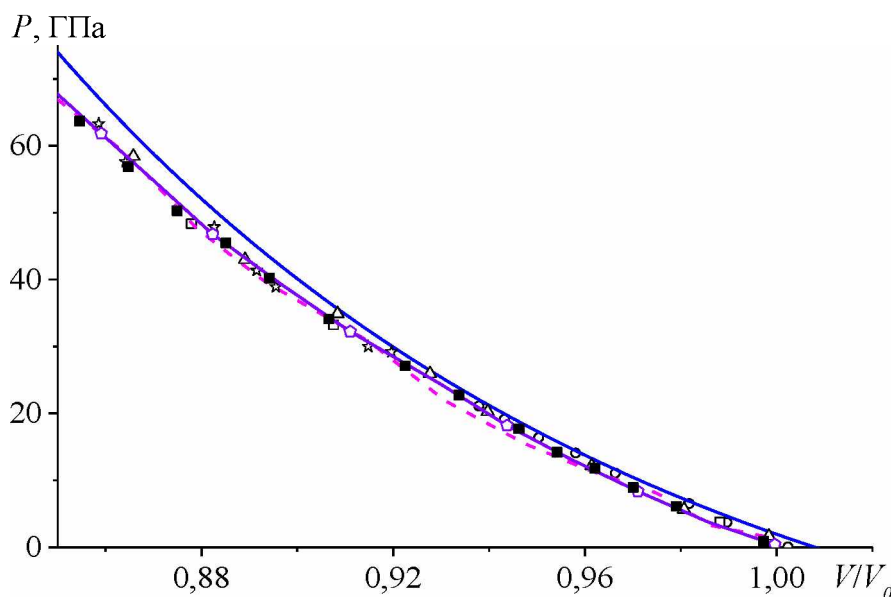


Рис. 1. Низкотемпературное уравнение состояния Pt .

На рис. 2 представлены расчеты для высокотемпературной ($T > 1000 \text{ К}$) области уравнения состояния. Наши расчеты – сплошные кривые (снизу вверх – $T = 1300, 1500, 1700, 1900 \text{ К}$); квадраты, окружности, треугольники и ромбы – данные из [5]; перечеркнутые окружности, треугольники и ромбы – данные из [4]. Из рис. 2 видно, что наши данные для высокотемпературной области уравнения состояния платины согласуются с данными других авторов.

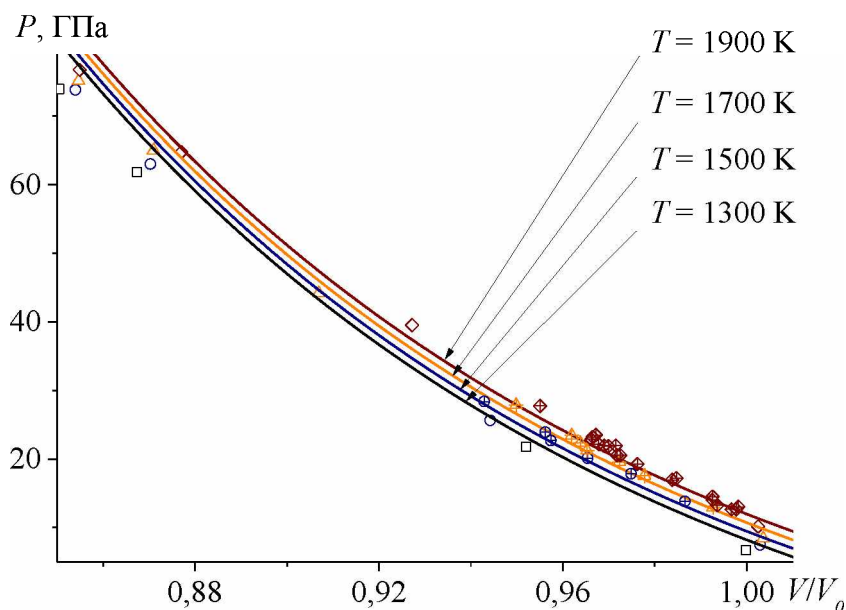


Рис. 2. Высокотемпературное уравнение состояния Pt .

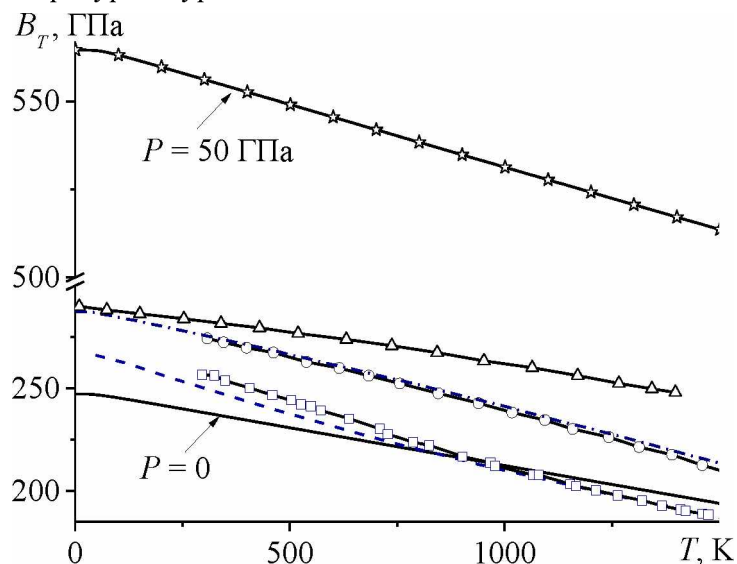


Рис. 3. Температурная зависимость модуля упругости платины $B_T(T)$ для двух изобар $P=0$ и $P=50$ ГПа.

На рис. 3 представлены температурные зависимости модуля упругости $B_T(T)$ для двух изобар $P=0$ и $P=50$ ГПа. Сплошная кривая и кривая со звездочками – наши расчеты для изобар $P=0$ и $P=50$ ГПа соответственно. Сплошная кривая с треугольниками ($P=0$) – данные из [11]; штрих-пунктирная кривая ($P=0$) – данные из [12]; кривая с окружностями ($P=0$) – данные из [6]; кривая с квадратами ($P=0$) – данные из [13]; пунктирная кривая ($P=0$) – данные из [14]. Как видно из рис. 3 имеется довольно большой разброс в оценках температурных зависимостей модуля упругости платины. В тоже время видно, что у всех авторов [11-14] с ростом температуры происходит уменьшение значения B_T . Данные для температурных зависимостей $B_T(T)$ при давлениях

отличных от $P=0$ в литературе не представлены.

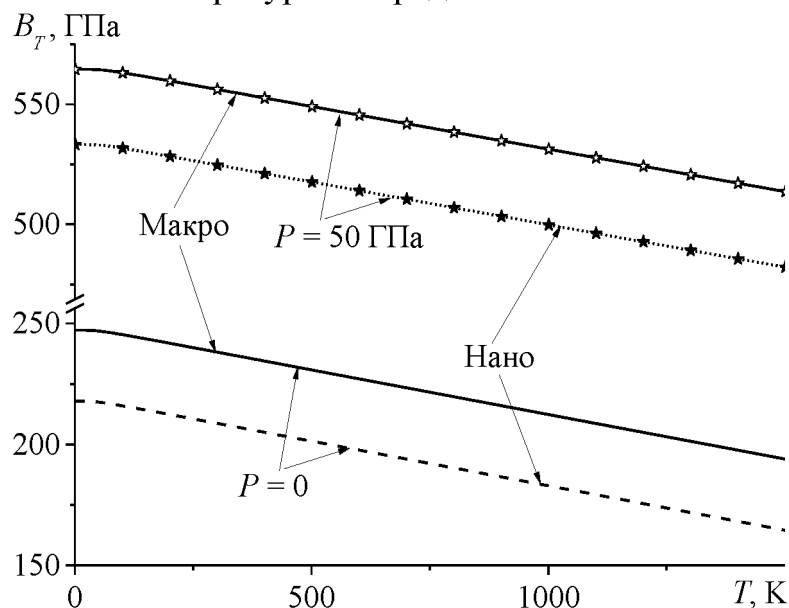


Рис. 4. Сравнение температурных зависимостей $B_T(T)$ нано- и макрокристалла Pt для изобар $P=0$ и $P=50$ ГПа.

На рис. 4 представлено сравнение температурных зависимостей $B_T(T)$ нано- (здесь и далее изучается нанокристалл кубической формы, состоящий из $N=306$ атомов) и макрокристалла платины для двух изобар. Сплошная кривая и сплошная кривая со звездочками – наши расчеты для макрокристалла платины, изобары $P=0$ и $P=50$ ГПа соответственно. Штриховая кривая и пунктирная кривая со звездочками – наши расчеты для нанокристалла платины, изобары $P=0$ и $P=50$ ГПа соответственно. Из графиков видно, что с уменьшением давления и уменьшением размера нанокристалла происходит уменьшение значения $B_T(T)$ для любого значения T в исследуемом диапазоне температур.

На рис. 5 показаны температурные зависимости коэффициента теплового объемного расширения платины $\alpha_p(T)$ для двух изобар $P=0$ и $P=50$ ГПа. Сплошная кривая и сплошная кривая со звездочками – наши расчеты для платины, изобары $P=0$ и $P=50$ ГПа соответственно. Окружности ($P=0$) – данные из работы [12]; треугольники ($P=0$) и перевернутые треугольники ($P=50$ ГПа) – данные из [11]; квадраты ($P=0$) – данные из [6]. Из рис. 5 видно, что наши данные при $P=0$ хорошо согласуются с работами [6, 12] в диапазоне температур $T < 500$ К, дальше наблюдается расхождение, которое можно объяснить отсутствием в нашей модели учета влияния вакансий и самодиффузии. Изменение температурной зависимости при увеличении давления хорошо согласуется с данными представленными в работе [11].]

Сравнение температурных зависимостей $\alpha_p(T)$ нано- и макро-

кристалла платины для двух изобар представлено на рис. 6. Сплошная кривая и сплошная кривая со звездочками – наши расчеты для макрокристалла платины, изобары $P=0$ и $P=50$ ГПа соответственно. Штриховая кривая и пунктирная кривая со звездочками – наши расчеты для нанокристалла платины, изобары $P=0$ и $P=50$ ГПа соответственно.

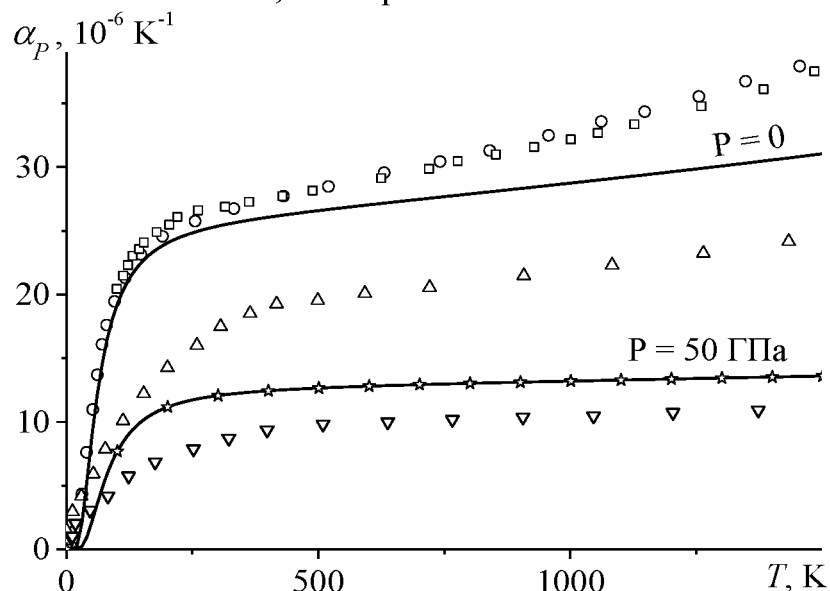


Рис. 5. Температурная зависимость коэффициента теплового объемного расширения платины $\alpha_p(T)$ для двух изобар $P=0$ и $P=50$ ГПа.

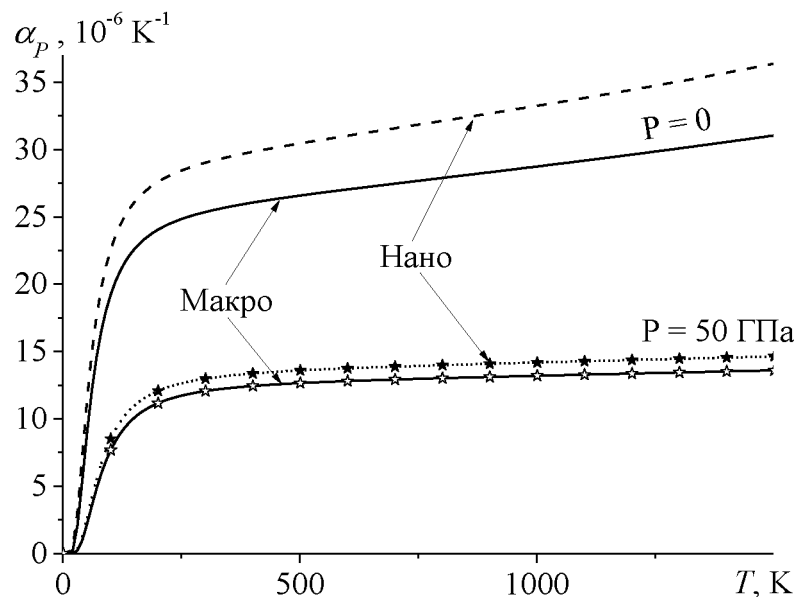


Рис. 6. Сравнение температурных зависимостей $\alpha_p(T)$ нано- и макро-кристалла Pt для двух изобар $P=0$ и $P=50$ ГПа.

Из графиков видно, что с уменьшением давления и уменьшением размера нанокристалла происходит увеличение значения $\alpha_p(T)$ для любого значения T в исследуемом диапазоне температур. Из рис. 5 и 6 также

видно, что $\alpha_p(T)$ испытывает значительный рост до $T=300$ К, который затем замедляется.

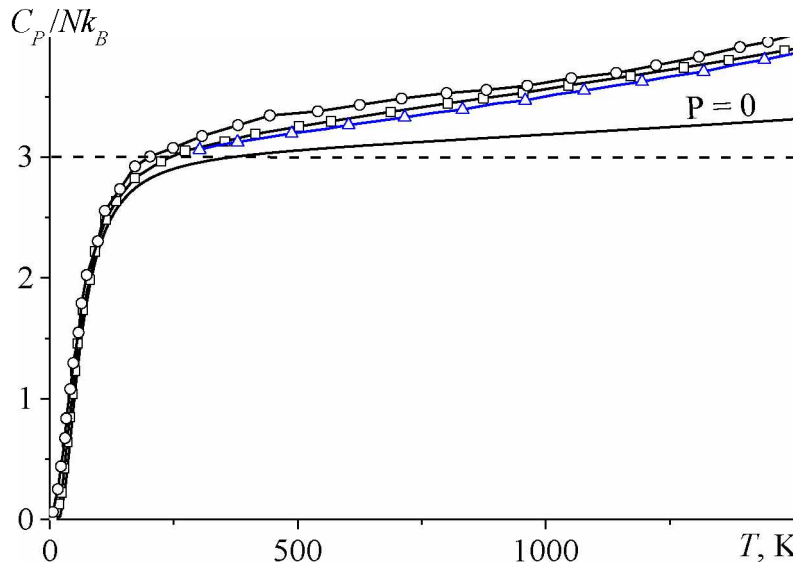


Рис. 7. Температурная зависимость удельной изобарной теплоемкости платины C_p / Nk_B для изобары $P=0$.

На рис. 7 показаны температурные зависимости удельной изобарной теплоемкости платины ($c_p(T) = C_p / Nk_B$, где N – число атомов в кристалле, k_B – постоянная Больцмана) для изобары $P=0$. Сплошная кривая – наши расчеты для платины. Сплошная кривая с треугольниками – данные из работы [6]. Сплошная кривая с квадратами – данные из работы [15]. Сплошная кривая с окружностями – данные из работы [16]. Литературные данные приведены для изобары $P=0$. Из рис. 7 видно, что наши данные при $P=0$ хорошо согласуются с работами [6,15,16] в диапазоне температур $T < 500$ К, дальше наблюдается расхождение, которое объясняется также как и расхождение на рис. 5. Данные для температурных зависимостей $c_p(T)$ платины вдоль изобар отличных от нуля не представлены в литературе.

Сравнение температурных зависимостей $c_p(T)$ нано- и макрокристалла платины для двух изобар представлено на рис. 8. Сплошная кривая и сплошная кривая со звездочками – наши расчеты для макрокристалла платины, изобары $P=0$ и $P=50$ ГПа соответственно. Штриховая кривая и пунктирная кривая со звездочками – наши расчеты для нанокристалла платины, изобары $P=0$ и $P=50$ ГПа соответственно. Из графиков видно, что с уменьшением давления и уменьшением размера нанокристалла происходит увеличение значения $c_p(T)$ для любого значения T в исследуемом диапазоне температур. Из рис. 7 и рис. 8 также видно, что $c_p(T)$ испытывает значительный рост до $T=300$ К, который затем замедляется. Также стоит отметить, что изменение размера

нанокристалла вносит незначительные изменения в значение $c_p(T)$, в то время как увеличение давления заметно уменьшает значение $c_p(T)$.

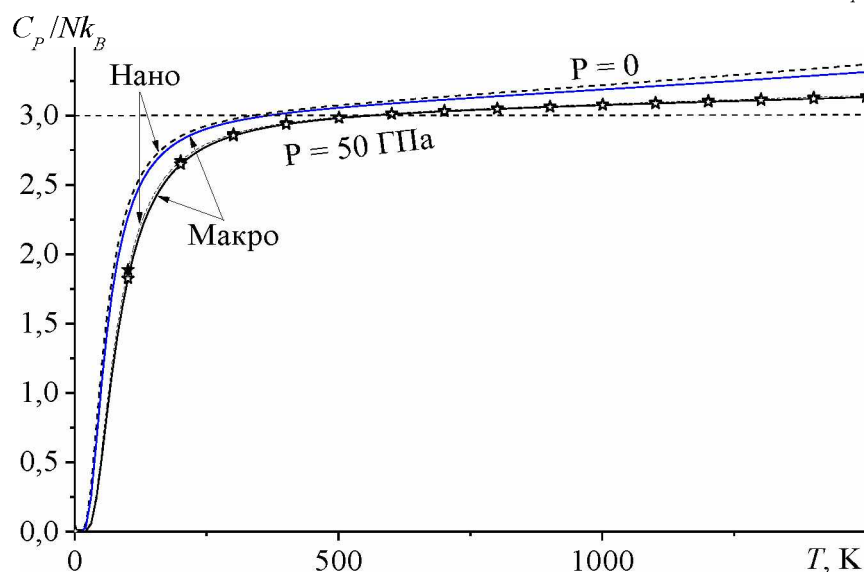


Рис. 8. Температурная зависимость $c_p(T)$ нано- и макро-кристалла Pt для изобар $P = 0$ и $P = 50$ ГПа.

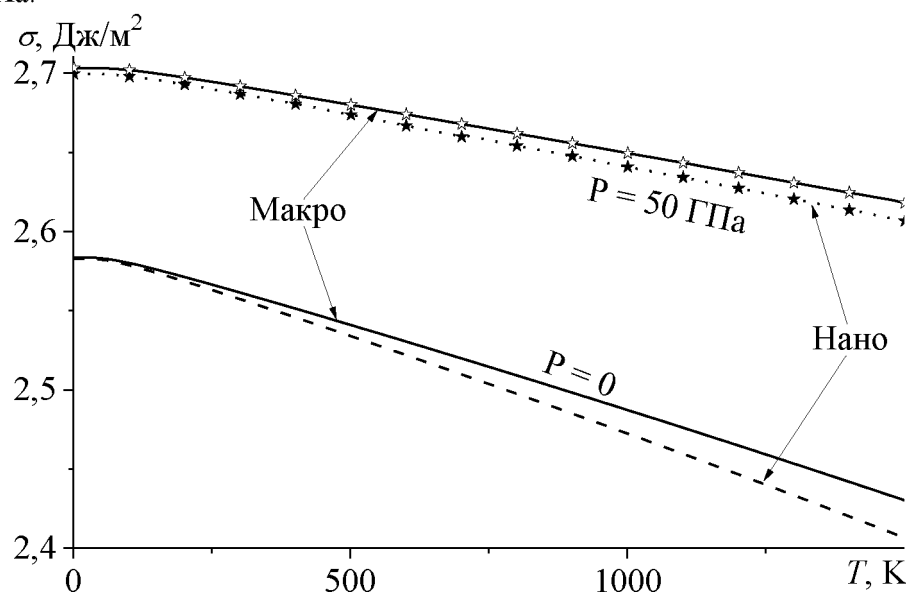


Рис. 9. Температурная зависимость удельной поверхностной энергии $\sigma(T)$ грани (100) нано- и макро-кристалла платины для двух изобар $P = 0$ и $P = 50$ ГПа.

На рис. 9 показано сравнение температурных зависимостей удельной поверхностной энергии грани (100) нано- и макрокристалла платины для двух изобар $P = 0$ и $P = 50$ ГПа. Сплошная кривая и сплошная кривая со звездочками – наши расчеты для макрокристалла платины, изобары $P = 0$ и $P = 50$ ГПа соответственно. Штриховая кривая и пунктирная кривая со звездочками – наши расчеты для нанокристалла платины, изобары $P = 0$ и $P = 50$ ГПа соответственно. Видно, что с уменьшением давления или уменьшением размера уменьшается значение $\sigma(T)$ вдоль изотермы.

3. Выводы

Основываясь на параметрах парного потенциала межатомного взаимодействия Ми–Леннард–Джонса для Pt и используя метод РР-модели, рассчитаны уравнения состояния для низко- и высокотемпературной области, а также размерные изменения в уравнении состояния Pt .

Рассчитаны температурные зависимости и их изменение с уменьшением размера и увеличением давления для следующих свойств: $B_T(T)$, $\alpha_p(T)$, $c_p(T)$, $\sigma(T)$. Показано, что при изобарно-изотермическом уменьшении размера нанокристалла Pt происходит уменьшение значений $B_T(T)$ и $\sigma(T)$, а функции $\alpha_p(T)$ и $c_p(T)$ увеличиваются на исследуемом интервале температур. При изотермическом увеличении давления происходит увеличение значений $B_T(T)$ и $\sigma(T)$, в то время как $\alpha_p(T)$ и $c_p(T)$ уменьшаются при любом размере кристалла.

Применяемый в статье метод расчета термодинамических параметров нанокристалла, а также методы расчета барических и температурных зависимостей как для макро-, так и для нано-кристаллов были успешно использованы в работах [17, 18] при изучении свойств Nb и сплава $Mo-W$.

Автор выражает благодарность М.Н. Магомедову, Э.Н. Ахмедову, Е.М. Зобову и Н.Л. Крамыниной за плодотворные обсуждения и помощь в работе. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 18-29-11013_мк).

Библиографический список:

1. **Magomedov, M.N.** Temperature and pressure dependences of the surface energy for a macro- and nanocrystal / M.N. Magomedov // *Physics of the Solid State*. – 2021. – V. 63. – I. 9. – P. 1595-1609. DOI: 10.1134/S1063783421090250.
2. **Magomedov, M.N.** On the statistical thermodynamics of a free-standing nanocrystal: silicon / M.N. Magomedov // *Crystallography Reports*. – 2017. – V. 62. – I. 3. – P. 480-496. DOI: 10.1134/S1063774517030142.
3. **Magomedov, M.N.** Study of properties of fcc- $Au-Fe$ alloys in macro- and nano-crystalline states under various $P-T$ -conditions / M.N. Magomedov // *Journal of Physics and Chemistry of Solids*. – 2021. – V. 151. – Art. № 109905. – 12 p. DOI: 10.1016/j.jpcs.2020.109905.
4. **Fei, Y.** A critical evaluation of pressure scales at high temperatures by in situ X-ray diffraction measurements / Y. Fei, J. Li, K. Hirose et al. // *Physics of the Earth and Planetary Interiors*. – 2004. – V. 143-144. – P. 515-526. DOI: 10.1016/j.pepi.2003.09.018.
5. **Zha, C.-S.** $P-V-T$ equation of state of platinum to 80 GPa and 1900 K from internal resistive heating/x-ray diffraction measurements / C.-S. Zha, K. Mibe, W.A. Bassett et al. // *Journal of Applied Physics*. – 2008. – V. 103. – I. 5. – P. 054908-1-054908-10. DOI: 10.1063/1.2844358.
6. **Дорогокупцев, П.И.** Почти абсолютные уравнения состояния алмаза, $Ag, Al, Au, Cu, Mo, Nd, Pt, Ta, W$ для квазигидростатических условий / П.И. Дорогокупцев, Т.С. Соколова, Б.С. Данилов, К.Д. Литасов // *Геодинамика и тектонофизика*. – 2012. – Т. 3. – № 2. – С. 129-166. DOI: 10.5800/GT-2012-3-2-0067.
7. **Holmes, N.C.** The equation of state of platinum to 660 GPa (6,6 Mbar) / N.C. Holmes, J.A. Moriarty, G.R. Gathers, W.J. Nellis // *Journal of Applied Physics*. – 1989. – V. 66. – I. 7. – pp. 2962–2967. DOI: 10.1063/1.344177.

8. **Marsh, S.** LASL shock hugoniot data / S. Marsh. – Berkeley, Los Angeles, London: University of California Press, 1980. XIX, 658 p.
9. **Jin, K.** Pressure–volume–temperature equations of state of *Au* and *Pt* up to 300 GPa and 3000 K: internally consistent pressure scales / K. Jin, Q. Wu, H. Geng et al. // *High Pressure Research*. – 2011. – V. 31. – I. 4. – P. 560-580. DOI: 10.1080/08957959.2011.611469.
10. **Dewaele, A.** Equations of state of six metals above 94 GPa / A. Dewaele, P. Loubeyre, M. Mezouar // *Physical Review B*. – 2004. – V. 70. – I. 9. – P. 094112-1-094112-8. DOI: 10.1103/PhysRevB.70.094112.
11. **Ono, S.** Elastic, thermal and structural properties of platinum / S. Ono, J.P. Brodholt, G.D. Price / *Journal of Physics and Chemistry of Solids*. – 2011. – V. 72. – I. 3. – P. 169-175. DOI: 10.1016/j.jpcs.2010.12.004.
12. **Elkin, V.M.** A wide-range multiphase equation of state for platinum / V.M. Elkin, V.N. Mikhaylov, A.A. Ovechkin, N.A. Smirnov // *Journal of Physics: Condensed Matter*. – 2020. – V. 32. – № 43. – Art. № 435403. – 12 p. DOI: 10.1088/1361-648X/aba428.
13. **Collard, S.M.** High-temperature elastic constants of platinum single crystals / S.M. Collard, R.B. McLellan // *Acta Metallurgica et Materialia*. – 1992. – V. 40. – I. 4. – P. 699-702. DOI: 10.1016/0956-7151(92)90011-3.
14. **Karbasi, A.** The thermodynamics of several elements at high pressure / A. Karbasi, S.K. Saxena, R. Hrubciak // *Calphad*. – 2011. – V. 35. – I. 1. – P. 72-81. DOI: 10.1016/j.calphad.2010.11.007.
15. **Елькин, В.М.** Полуэмпирическое двухфазное уравнение состояния платины (твердая фаза, жидкость) с учетом испарения / В.М. Елькин, В.Н. Михайлов, Т.Ю. Михайлова // *Вопросы атомной науки и техники. Серия: Теоретическая и прикладная физика*. – 2016. – № 1. – С. 38-52.
16. **Повзнер, А.А.** Влияние фононного ангармонизма на теплофизические и упругие свойства платины / А.А. Повзнер, А.Н. Филанович // *Теплофизика высоких температур*. – 2011. – Т. 49. – Вып. 5. – С. 695-700. DOI: 10.1134/S0018151X11050178.
17. **Крамынин, С.П.** Зависимость теплофизических свойств ниобия от размера нанокристалла / С.П. Крамынин // *Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов*. – 2019. – Вып. 11. – С. 315-325. DOI: 10.26456/pcascnn/2019.11.315.
18. **Крамынин, С.П.** Размерные зависимости свойств сплава *Mo–W* / С.П. Крамынин // *Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов*. – 2020. – Вып. 12. – С. 128-135. DOI: 10.26456/pcascnn/2020.12.128.

References:

1. Magomedov M.N. Temperature and Pressure Dependences of the Surface Energy for a Macro- and Nanocrystal, *Physics of the Solid State*, 2021, vol. 63, issue 9, pp. 1595-1609. DOI: 10.1134/S1063783421090250.
2. Magomedov M.N. On the statistical thermodynamics of a free-standing nanocrystal: silicon, *Crystallography Reports*, 2017, vol. 62, issue 3, pp. 480-496. DOI: 10.1134/S1063774517030142.
3. Magomedov M.N. Study of properties of fcc-*Au–Fe* alloys in macro- and nano-crystalline states under various *P–T*-conditions, *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 2021, vol. 151, art. no. 109905, 12 p. DOI: 10.1016/j.jpcs.2020.109905.
4. Fei Y., Li J., Hirose K. et al. A critical evaluation of pressure scales at high temperatures by in situ X-ray diffraction measurements, *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, 2004, vol. 143-144, pp. 515-526, DOI: 10.1016/j.pepi.2003.09.018.
5. Zha C.-S., Mibe K., Bassett W.A. et al. *P–V–T* equation of state of platinum to 80 GPa and 1900 K from internal resistive heating/x-ray diffraction measurements, *Journal of Applied Physics*, 2008, vol. 103, issue 5, pp. 054908-1-054908-10. DOI: 10.1063/1.2844358.
6. Dorogokupets P.I., Sokolova T.S., Danilov B.S., Litasov K.D. Near-absolute equations of state of diamond, *Ag, Al, Au, Cu, Mo, Nd, Pt, Ta, W* and *W* for quasi-hydrostatic conditions, *Geodynamics & Tectonophysics*, 2012, vol. 3, no. 2, pp. 129-166. DOI: 10.5800/GT-2012-3-2-0067. (In Russian).
7. Holmes N.C., Moriarty J.A., Gathers G.R., Nellis W.J. The equation of state of platinum to 660 GPa (6,6 Mbar), *Journal of Applied Physics*, 1989, vol. 66, issue 7, pp. 2962-2967. DOI: 10.1063/1.344177.
8. Marsh S. *LASL shock hugoniot data*. Berkeley, Los Angeles, London, University of California Press, 1980, XIX, 658 p.
9. Jin K., Wu Q., Geng H. et al. Pressure–volume–temperature equations of state of *Au* and *Pt* up to 300 GPa and 3000 K: internally consistent pressure scales, *High Pressure Research*, 2011, vol. 31, issue 4, pp. 560-580. DOI: 10.1080/08957959.2011.611469.
10. Dewaele A., Loubeyre P., Mezouar M. Equations of state of six metals above 94 GPa, *Physical Review B*, 2004, vol. 70, issue 9, pp. 094112-1-094112-8. DOI: 10.1103/PhysRevB.70.094112.

11. Ono S., Brodtholt J.P., Price G.D. Elastic, thermal and structural properties of platinum, *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 2011, vol. 72, issue 3, pp. 169-175. DOI: 10.1016/j.jpcs.2010.12.004.
12. Elkin V.M., Mikhaylov V.N., Ovechkin A.A., Smirnov N.A. A wide-range multiphase equation of state for platinum, *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2020, vol. 32, no. 43, art. no. 435403, 12 p. DOI: 10.1088/1361-648X/aba428.
13. Collard S.M., McLellan R.B. High-temperature elastic constants of platinum single crystals, *Acta Metallurgica et Materialia*, 1992, vol. 40, issue 4, pp. 699-702. DOI: 10.1016/0956-7151(92)90011-3.
14. Karbasi A., Saxena S.K., Hrubak R. The thermodynamics of several elements at high pressure, *Calphad*, 2011, vol. 35, issue 1, pp. 72-81. DOI: 10.1016/j.calphad.2010.11.007.
15. El'kin V.M., Mikhajlov V.N., Mikhajlova T.Yu. Poluempiricheskoe dvukhfaznoe uravnenie sostoyaniya platiny (tverdaya faza, zhidkost') s uchetom ispareniya [Semi-empirical two-phase equation of state for platinum (solid phase, liquid) taking into account evaporation], *Voprosy atomnoj nauki i tekhniki. Seriya: Teoreticheskaya i prikladnaya fizika [Nuclear science and technology. Series: Theoretical and Applied Physics]*, 2016, no. 1, pp. 38-52. (In Russian).
16. Povzner A.A., Filanovich A.N. Effect of phonon anharmonicity on the thermophysical and elastic properties of platinum, *High Temperature*, 2011, vol. 49, issue 5, pp. 674-678. DOI: 10.1134%2FS0018151X11050178.
17. Kramynin S.P. Zavisimost' teplofizicheskikh svoystv niobiya ot razmera nanokristalla [Change in the baric dependences of the thermophysical properties of a niobium nanocrystal with a change in size], *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov [Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials]*, 2019, issue 11, pp. 315-325. DOI: 10.26456/pcascnn/2019.11.315. (In Russian).
18. Kramynin S.P. Razmernye zavisimosti svoystv splava Mo–W [The size dependences of properties of Mo–W alloy of equiatomic composition], *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov [Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials]*, 2020, issue 12, pp. 128-135. DOI: 10.26456/pcascnn/2020.12.128. (In Russian).

Original paper

INFLUENCE OF SIZE AND PRESSURE ON THE TEMPERATURE DEPENDENCIES OF THERMODYNAMIC PROPERTIES OF PLATINUM

S.P. Kramynin

*Institute of Physics named after H.I. Amirkhanova – subdivision of Dagestan Federal Research Center
of the Russian Academy of Sciences, Makhachkala, Russia*

DOI: 10.26456/pcascnn/2021.13.465

Abstract: Based on the parameters of the pair interatomic interaction potential of the Mie-Lennard-Jones for Pt, and using the RP-model of the nanocrystal, the temperature, pressure and size dependencies of the following properties are studied: elastic modulus, thermal expansion coefficient, isobaric heat capacity, and surface energy. The calculation of the equation of state showed good agreement with experiment. The equation of state was calculated along five isotherms: $T = 300, 1300, 1500, 1700, 1900$ K. For the first time, calculations of the temperature dependences of the above properties of Pt in the range from 0 to 1500 K along 0 and 50 GPa isobars were performed from a unified standpoint. Calculations of these dependencies were carried out for both macro- and cubic nanocrystals of 306 atoms. It is shown that with an isobaric-isothermal decrease in the nanocrystal size, the values of the elastic modulus and surface energy decrease, while the values of the thermal expansion coefficient and isobaric heat capacity increase over the investigated temperature range.

Keywords: platinum, nanocrystal, size dependencies, equation of state, surface energy.

Крамьнин Сергей Петрович – младший научный сотрудник Института физики им. Х.И. Амирханова – обособленного подразделения ФГБУН «Дагестанского федерального исследовательского центра Российской академии наук»

Sergey P. Kramynin – Junior Researcher, Institute of Physics named after H.I. Amirkhanova – subdivision of Dagestan Federal Research Center of the Russian Academy of Sciences

Поступила в редакцию/received: 10.09.2021; после рецензирования/reviced: 10.10.2021; принята/accepted 12.10.2021.