

纳米材料的热力学函数

Thermodynamic Functions of Nanomaterials

项目批准号: 59671010、59931030

吉林大学 蒋青、赵明、李建忱等

由于纳米材料大的表面/体积比, 表面与界面性质明显影响其整体性能和表面状态。为制造纳米器件并具有确定的物理、化学和力学性能, 需要确定熔化温度、熔化熵、界面能、界面应力等热力学量以及与材料尺寸的依赖关系。

● 主要研究成果

(1) 建立了纳米粒子、纳米线和纳米薄膜晶体的熔化温度与熔化熵的无自由参数的尺寸依赖性模型。

(2) 提出了非晶体纳米粒子和纳米薄膜的玻璃转变温度以及玻璃与液体在玻璃转变温度的比热差的无自由参数的尺寸效应模型。

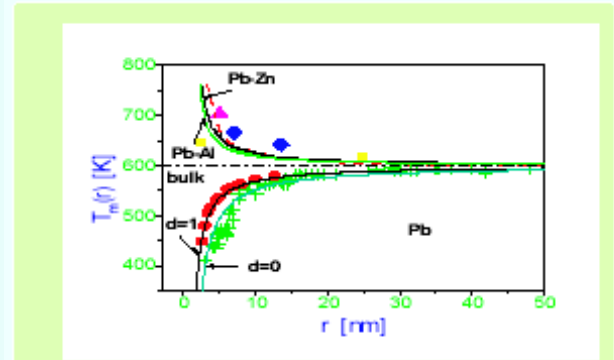
(3) 获得了纳米粒子和纳米薄膜的界面应力、固液和固固界面能的无自由参数的数学表达式及其尺寸依赖性。

● 应用前景、成果转化

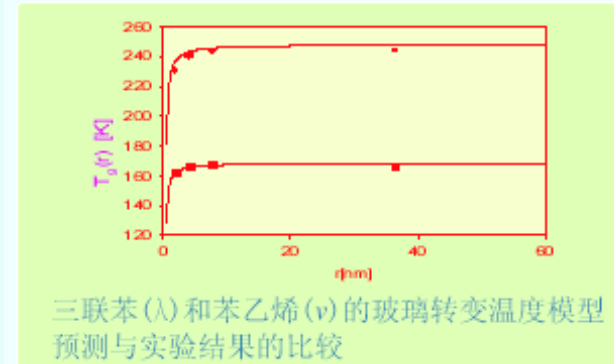
熔化温度、熔化熵、界面能、界面应力等热力学函数在宏观和纳米尺寸上都缺乏准确的实验或理论数据。确定上述热力学量不仅在热力学理论方面提出了新的尺寸变量, 而且由于纳米材料在各个工业领域中的应用或潜在应用前景, 研究成果提出的普适无自由参数热力学模型为了解纳米材料的热稳定性和表面状态提供了方便的热力学工具。

● 代表性论文

1. Q. Jiang, H. X. Shi, M. Zhao, " Melting thermodynamics of organic nanocrystals" , J. Chem.Phys., 1999, 111, 2176-2180.
2. Q. Jiang, H. X. Shi, M. Zhao, " Free energy of crystal-liquid interface" , Acta Mater., 1999, 47,2109-2112.
3. Q. Jiang, Z. Zhang, J. C. Li, " Melting thermodynamics of nanocrystals embedded in a matrix" ,Acta Mater., 2000, 48, 4791-4795.



In的熔化温度模型预测与实验结果的比较



三联苯(λ)和苯乙烯(v)的玻璃转变温度模型预测与实验结果的比较

工程与材料科学部、国际合作局 主办
数理科学部、化学科学部 协办