

Л.С. Пинчук, В.А. Лиопо, В.А. Струк

## ФИЗИЧЕСКИЕ КРИТЕРИИ НАНОРАЗМЕРНОСТИ ДИСПЕРСНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Цель данной работы заключается в анализе размерной границы между нано- и макросостоянием. Наночастица должна обладать двумя свойствами. Во-первых, наночастица имеет поверхность, во-вторых – зависимость численных значений параметров физических свойств от размера частицы. Функция

$S(r)$  описывается условием  $S(r) = \frac{S_V}{\exp\left[-\alpha\left(\frac{1-x}{x}\right)^{3/2}\right]}$ , где  $S_V$  – объёмное значение параметра,

$\alpha$  – коэффициент, зависящий от изучаемого свойства,  $x = r/L_0$ ,  $r$  – размер частицы,  $L_0$  – размерная граница между макроскопическим и наноразмерным состояниями. Значение  $L_0$  может быть рассчитано по формуле  $L_0 = 230\theta_D^{-1/2}$  [нм], где  $\theta_D$  – температура Дебая. Во-вторых, размерная граница между наносостоянием и атомно-кластерной системой ( $B$ ) определяется условием  $B = 3,2\delta$ ,  $\delta$  – амплитуда колебаний атомов на внешнем атомном слое частицы.

**Ключевые слова:** наночастица, температура Дебая, квантовый размерный эффект, масштабный диапазон.

**Введение.** Современной парадигмой материаловедения стали наноматериалы, состоящие из структурных элементов нанометрового размера, и технология их формирования – нанотехнология, позволяющая модифицировать традиционные технические материалы, придав им необычные свойства и новые функции. Благодаря этому, например, удалось повысить эффективность катализаторов химических реакций, пленок для микроэлектроники, защитных покрытий, магнитных систем и медицинских технологий. В теорию и практику материаловедения вошли новые термины с приставкой «нано».

В принципе, их введение не является существенно необходимым при еще не изжившей себя классификации материальных объектов на макро-, микро- и квантовые объекты или системы. Целесообразность разработки новой терминологии обычно возникает, когда обнаруживаются явления, для описания которых традиционный понятийный аппарат неприменим или недостаточно адекватно отражает их новые свойства. Наноматериалы в виде стекол, окрашенных коллоидными частицами металлов, изготавливали еще в Древнем Египте. Рассеяние света такими стеклами изучал М. Фарадей. Нанотехнология, как технология коллоидной химии, известна с середины XIX в. [1]. Просто на рубеже XX и XXI вв. сумма фундаментальных знаний физики, химии и смежных с ними наук была осознана как научная база принципиально новой для машиностроения технологии, получившей название нанотехнологии. Приставка «нано» не вносит ничего принципиально нового в понимание взаимосвязи структуры и свойств материалов, но требует более строгого научного обоснования используемых ее терминов, основным из которых является «наночастица». Считается, что она состоит из малого количества основного вещества и соизмеримого с ним по объёму поверхностного слоя, в значительной мере определяющего свойства наночастицы.

Целью работы является физическое обоснование и математическое описание этого термина.

**Понятие «наночастица».** Прежде чем рассматривать цель данной работы, которая

*Пинчук Леонид Семёнович*, д-р техн. наук, проф., заслуженный изобретатель Республики Беларусь, гл. науч. сотрудник Института механики металлополимерных систем им. В.А. Белого НАН Беларуси, (Гомель).  
Адрес для корреспонденции: ул. Кирова, 32а, 246050, г. Гомель, Беларусь; e-mail: mpri-otdel8@mail.ru

*Лиопо Валерий Александрович*, д-р физ.-мат. наук, проф., проф. каф. теоретической физики ГрГУ им. Янки Купалы (Гродно).

Адрес для корреспонденции: ул. Ожешко, 22, 230023, г. Гродно, Беларусь; e-mail: liopo@grsu.by

*Струк Василий Александрович*, д-р техн. наук, проф., декан факультета инновационных технологий машиностроения ГрГУ им. Янки Купалы (Гродно).

Адрес для корреспонденции: ул. Ожешко, 22, 230023, г. Гродно, Беларусь; e-mail: struk@grsu.by

заключается в анализе размерной границы между нано- и макросостоянием, мы считаем необходимым указать, что понимается под наночастицей.

В настоящее время принято считать, что наночастица – это атомно-молекулярная система, которая сохраняет свою форму и имеет линейный размер не более 100 нм. Иногда говорят, что наночастица – это объект, размеры которого измеряются нанометрами, и в нем содержится небольшое число атомов. Есть и другие дополнения к этим дефинициям, которые, на наш взгляд, совершенно не обоснованы, а носят в какой-то мере эмоциональную окраску.

Размер любого объекта можно выразить в общепринятых единицах, например нанометрах. Указывать единую верхнюю границу размеров любых наночастиц невозможно. С таким же «успехом» можно установить для всех веществ единую температуру плавления и т.п. Представление о том, что в наночастице обычно содержится небольшое число атомов, также нуждается в уточнении.

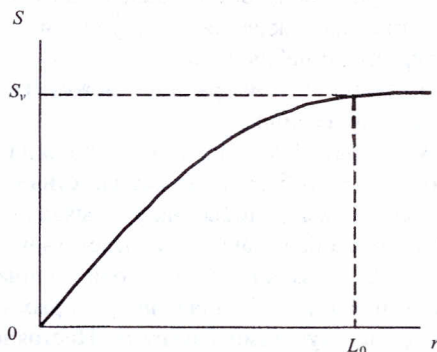
Пусть радиус сферической металлической наночастицы равен 10 нм. Средний радиус атомов металлов не превышает  $r = 1,5 \text{ \AA}$ . Если коэффициент упаковки атомов в частице равен  $K$ , то число атомов в наночастице равно

$$N = \left(\frac{R}{r}\right)^3 \cdot K. \quad (1)$$

Для плотнейшей упаковки  $K = 0,74$ , то есть  $N \approx 3 \cdot 10^5$  атомов. Такую частицу вряд ли можно считать состоящей из небольшого числа атомов. Кроме этого, следует разделять понятия «наночастица» и «нанообъект». Нанообъектом можно считать любую атомно-молекулярную систему с размерами в нанодиапазоне. Например, нанообъектом может быть кластер в жидкости или некоторая часть вещества другого состава по сравнению с основной матрицей. Нанообъект может не иметь границу раздела с другими составляющими вещества. Наночастица обязательно имеет поверхность и может быть выделена из смеси механическим способом.

Важная особенность наночастицы заключается в зависимости численных значений параметров физических свойств вещества от размера. Во всех современных справочниках параметры физических свойств указывают без учета размеров частиц вещества, полагая, что такая зависимость отсутствует. Считается, что на величину этих параметров размер объекта влияние не оказывает, то есть оно рассматривается как континуальная среда. Эти параметры соответствуют макроскопической объёмной фазе ( $S_v$ ) [2].

**Зависимость численных значений параметров физических свойств веществ от размеров их частиц.** Еще в первой половине прошлого века было экспериментально установлено, что теплоёмкость веществ ( $C_p$ ) зависит от размера их частиц [3]. Особенно заметно интерес к низкоразмерным объектам возрос после известного доклада Р. Фейнмана в 1959 г. [4]. Исследования свойств наноразмерных частиц были выполнены различными авторами [5–9]. Было установлено, что численные значения параметров самых различных физических свойств веществ остаются постоянными до определенных размеров их частиц  $r = L_0$ . Если размер  $r < L_0$ , то значения параметров  $S = S(r)$ , то есть зависят от размера частиц. Типичная зависимость  $S(r)$  приведена на рисунке 1.



Пояснения:  $S_v$  – объёмное значение параметра,  $L_0$  – максимальный размер наночастицы.

Рисунок 1 – Зависимость параметра  $S$  физического свойства материала от размера  $r$  его частиц



Приведенная кривая  $S(r)$  с достаточной точностью описывается формулой

$$S(r) \Rightarrow S(x) = \frac{S_V}{\left[ \exp \left[ \alpha \left( \frac{1-x}{x} \right)^{3/2} \right] \right]}, \quad (2)$$

где  $S_V$  – объёмное макроскопическое значение параметра изучаемого физического свойства,  $\alpha$  – параметр, зависящий от изучаемого свойства,  $x = r/L_0$ .

Как показал анализ многочисленных литературных данных, значение  $L_0$  лежит в наноразмерном диапазоне и ее значение зависит от вещества. Следовательно,  $L_0$  является размерной границей между макроскопическим и наноразмерным состоянием. Если размер частицы  $r > L_0$ , то показатель экспоненты становится мнимой величиной и  $S(r) = S_V$ , так как  $|\exp i_\tau| = 1$  для любого действительного значения  $\tau$ . Значения  $S(x)$  и  $L_0$  определяются из эксперимента. Тогда открывается возможность определения величины  $\alpha$ .

Если ввести обозначения:

$$\ln \frac{S_V}{S_0} = Y, \quad \frac{1-x}{x} = X,$$

то условие (1) преобразуется в линейную функцию

$$Y = \alpha(X), \quad (3)$$

точки которой известны из эксперимента. Очевидно, что при  $x = L_0$   $X = Y = 0$ , величина  $\alpha$  – это тангенс угла наклона. Нами были выполнены расчёты для различных степеней  $\left( \frac{1-x}{x} \right)$

(см. (2)). Наибольший коэффициент корреляции соответствует степени  $3/2$ . В ряде случаев экспериментальные линейные функции (3) не проходят через начало координат. Это можно объяснить тем, что изучаются не моноразмерные частицы, а в статистическом распределении частиц по размерам входят частицы с  $r > L_0$ .

**Расчёт размерной границы  $L_0$  между макро- и наносостоянием.** При исследовании свойств различных объектов с большими размерами их поверхность рассматривается как бесконечно тонкая оболочка, по одну сторону от которой находятся атомы (молекулы) изучаемого объекта, а по другую – они отсутствуют. При этом имеется в виду, что атомы поверхностного слоя находятся в ином, по сравнению с внутренними атомами, состоянии и влияние атомов поверхностного слоя распространяется на несколько внутренних слоев (до 5–7) [10]. Однако толщина этого поверхностного слоя настолько меньше размера образца, что ею можно пренебречь. При этом считается, что поверхность является абсолютно жесткой и фиксированной в пространстве.

Спектры волновых функций электрона, фотона и других частиц являются дискретно-линейными. С уменьшением размеров частицы относительные размеры поверхностного слоя возрастают. Линии в спектрах начинают размываться в полосы, что приводит к изменению численных значений параметров свойств. При дальнейшем уменьшении размеров полосы продолжают расширяться, что сопровождается последующим изменением  $S(s)$ . Эти изменения носят монотонный характер, что и наблюдается в экспериментах. Эта качественная модель объясняет, почему  $L_0$  не является резкой границей между нано- и макросостоянием, но не позволяет выполнить расчёт этой величины.

На наш взгляд, формула расчёта значения  $L_0$  должна удовлетворять нескольким требованиям. Во-первых, она должна обосновываться известными, проверенными физическими принципами. Во-вторых, необходимо, чтобы она учитывала свойства вещества. В-третьих, чтобы она была достаточно простой, а главное – соответствовала экспериментам.

Обратимся к рисунку 1. Если вместо  $S(r)$  по оси ординат представить теплоёмкость вещества при различных температурах  $T$ , значения которых отложены по оси абсцисс, то вместо  $L_0$  следует указать Дебаевскую температуру  $\theta_D$ . Постоянство  $C_V$  при  $T > \theta_D$  объяснено в рамках классической термодинамики на основе статистических представлений Максвелла–

Больцмана–Гиббса. При  $T < \theta_D$ , как показали А. Эйнштейн и П. Дебай, необходимо отвлечься от представлений взаимодействия атомов только путем столкновений. Следует учитывать, что атомы – это квантовые осцилляторы, которые имеют одинаковую частоту (по А. Эйнштейну) или описываются распределением частот  $P(\omega) \sim \omega^2$  (по П. Дебаю). Оба этих приближения соответствуют зависимости  $C_V = f(T)$ . Но дебаевская теория оказалась более адекватной эксперименту. При  $T = \theta_D$  происходит смена механизма протекания процессов в веществе. Чем сильнее неравенства  $T > \theta_D$  или  $T < \theta_D$ , тем обоснованнее применение соответствующего описания процессов в анализируемом веществе.

Наряду с температурой Дебая используется понятие дебаевской частоты ( $\omega_D$ ), импульса ( $P_D$ ), длины волны, точнее дебаевской волны ( $\lambda_D$ ), а также дебаевской энергии. Все эти величины взаимосвязаны:

$$E_D = \hbar\omega_D = k\theta_D = \frac{P_D^2}{2m} = \frac{h^2}{2m\lambda_D^2}, \quad (4)$$

где  $\hbar, h$  – постоянная Планка ( $h = 2\pi\hbar$ ),  $k$  – постоянная Больцмана,  $m$  – масса электрона.

Процессы в веществах обычно разделяют по двум типам: электронные и решеточные. К электронным процессам относятся те, где фигурируют электромагнитные взаимодействия. К решеточным процессам относят диффузию, тепловые колебания атомов, волны механических (например, акустических) возбудений. В первом случае переносчиками взаимодействия являются фотоны, во втором – фононы. Возможно появление потоков и других квазичастиц (экситонов, плазмонов, вакансионных и др.). Этот аспект не является принципиальным, так как, в конечном счете, взаимодействие различных объектов в веществах обусловлено электронами, которые могут вызывать и движение ионов (атомов). Именно этим можно объяснить то обстоятельство, что в равенствах (4) встречаются и фононные ( $\omega_D$ ), и электронные ( $m$ ) характеристики.

Наибольший интерес вызывает дебаевская длина ( $\lambda_D$ ). Для электронов  $\lambda_D$  определяет размер участка в веществе, на который распространяется влияние отдельного электрона. При  $r > \lambda_D$  справедливо одноэлектронное адиабатическое приближение. При  $r < \lambda_D$  необходимо использовать модель «электронного желе».

Дебаевская длина является важным параметром фононных процессов, так как  $\lambda_D$  – это средняя длина свободного пробега фонона [11]. То есть при  $r < \lambda_D$  частица характеризуется состоянием своеобразного «фононного вакуума» и физические процессы, происходящие в ней, отличаются от объёмных.

Следовательно,  $L_0 = \lambda_D$  ограничивает размер частиц с макросвойствами. Новые механизмы протекания физических процессов говорят о том, что численные значения параметров меняются в зависимости от размера.

Рассмотрим равенство

$$k\theta_D = \frac{P_D}{2m}. \quad (5)$$

Так как  $\lambda_D$  определяется вдоль конкретного направления (путь вдоль  $x$ ), то необходимо анализировать составляющую импульса вдоль этого направления. Для простоты примем, что

$P_x = P_y = P_z$ , то есть  $P^2 = 2P_x^2$ . Но  $P_x = \left(\frac{h}{\lambda_D}\right)_x$ . Следовательно,

$$k\theta_D = \frac{3P^2}{2m} = \frac{3h^2}{2m\lambda_D^2}. \quad (6)$$

Индекс  $x$  опущен, так как векторы  $\lambda_D$  и компонента  $P_x$  в условии (6) коллинеарны.

Из условия (6) следует:

$$\lambda_D = \frac{\sqrt{1,5h}}{\sqrt{km}} \theta_D^{-1/2} = C\theta_D^{-1/2}. \quad (7)$$

После подстановки численных значений физических констант в условие (7) получим:



$$C = 2,3 \cdot 10^{-7} \left[ \text{м} \cdot \text{К}^{1/2} \right].$$

Следовательно,

$$L_0 = \lambda_D = 2,3 \cdot 10^{-7} \theta_D^{-1/2} [\text{м}] = 230 \cdot \theta_B^{-1/2} [\text{нм}]. \quad (8)$$

Эта формула полностью соответствует многим десяткам результатов, опубликованных различными авторами.

Дебаевская частота определяется формулой

$$\omega_D = \bar{u} (6\pi^2 n)^{1/3}, \quad (9)$$

где  $\bar{u}$  – средняя скорость фонона (скорость звука),  $n$  – число атомов в единице объёма.

Если скорость звука является анизотропной величиной, то и частота ( $\omega_D$ ), и длина ( $\lambda_D$ ), и дебаевская температура становятся анизотропными величинами. В этом случае необходимо рассматривать  $\omega_D$  по определенному направлению (например, вдоль оси  $x$ ):

$$\omega_D^{(x)} = k u^{(x)} n^{(x)} (6\pi^2)^{1/3}, \quad (10)$$

где  $n^{(x)}$  – линейная плотность атомов. Отсюда

$$\theta_D = k u^{(x)} \cdot n^{(x)} (6\pi^2)^{1/3}, \quad (11)$$

Таким образом, граница между макроскопическим и наноструктурным состояниями определяет различие механизмов протекания физических процессов в частицах, когда размер  $r > L_0$  не влияет на величину параметра физического свойства и когда размер частицы  $r < L_0$  оказывает влияние на эту величину [12].

**Нижняя граница размера наночастицы.** Из формулы (2), описывающей связь значения параметра физического свойства от размера наночастицы, следует, что

$$\lim_{r \rightarrow 0} S(r) = 0. \quad (12)$$

Но это противоречит общефизическим представлениям. Действительно, отдельный атом имеет размер  $d > 0$ , но не является наночастицей, так как не имеет поверхности и понятие физического свойства вещества для него теряет смысл. Следовательно, должна существовать размерная граница  $B$  такая, что при  $L_0 > r > B$  объект ведет себя как наночастица, а при  $r < B$  его необходимо рассматривать как атомный (молекулярный) кластер, свойства которого не могут соответствовать свойствам нано- и макрофаз. Частицей не будет являться и агрегат, включающий первую координационную сферу. При дальнейшем росте этого агрегата, начиная с  $n$ -й координационной сферы, объект приобретает свойства частицы. Величина  $n$  не может быть единой для всех веществ.

При малых размерах частиц амплитуды колебаний внешних атомов ( $\delta$ ) могут быть соизмеримы с размером частицы. Размер объекта  $d$  является некоторой средней величиной, так как он изменяется во времени в интервале  $d \pm \delta$ .

Рассмотрим поведение электрона в частице с размером  $d$  без учета колебаний атомов поверхностного слоя (модель бесконечно глубокой потенциальной ямы). Уравнение Шредингера для электрона имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \quad (13)$$

или

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + q^2\psi = 0, \quad (14)$$

где  $q = \frac{P}{\hbar}$ , так как импульс  $P = \sqrt{2m_e E}$ .

Решение ищем в виде

$$\psi = \psi_0 \sin qx.$$

Функция  $\psi(x) = 0$  при  $x = 0$ ,  $x = d$ . Следовательно,  $qd = n\pi$ . То есть  $q = n\pi/d = \frac{P}{\hbar} = \frac{2\pi P}{h}$ .

Так как при учёте колебаний поверхностных атомов неопределенность координаты электрона может быть принята равной  $d$ , а неопределенность импульса  $\Delta P = P_{\max} - P_{\min}$ , то (при  $n = 1$ )

$$\Delta P = P_{\max} - P_{\min} = \frac{h}{2} \left( \frac{1}{d - \delta} - \frac{1}{d + \delta} \right) = \frac{h}{d}. \quad (15)$$

Введем обозначение  $\delta/d = \Delta$ . В этом случае из (15) следует

$$\frac{\Delta}{1 - \Delta^2} = 1. \quad (16)$$

Решением этого уравнения является золотое отношение  $\tau = 0,5(\sqrt{5} - 1)$ . Отсюда

$$d = \frac{\delta}{\tau}. \quad (17)$$

Следует обратить внимание, что в рассматриваемой модели считается, что координаты поверхности объекта меняются на  $\pm\delta$ , а другая поверхность неподвижна и находится в точке  $x = 0$ . Для учёта колебаний атомов на противоположных поверхностях необходимо размерную границу рассчитывать по формуле

$$B = \frac{2}{\tau} \cdot \delta = 3,25\delta. \quad (18)$$

Если размер атомного (молекулярного) объекта  $d > B$ , то его можно рассматривать как частицу. Если  $d < B$ , то это атомно-молекулярный кластер. Как и  $L_0$ , размерная граница  $B$  не является строго определенной, то есть точной. Чем сильнее  $d$  отличается от  $B$ , тем с большим основанием объект относится к состоянию наночастицы или кластера [13].

**Заключение.** Наночастица – это такая часть вещества, которая обладает двумя основными свойствами. Во-первых, наночастица имеет поверхность, то есть из смеси с другими веществами она может быть выделена механическим способом. Вторая характерная особенность наночастицы – зависимость численных значений параметров физических свойств от ее размера. При уменьшении размеров однородного вещественного объекта параметры его физических свойств от размера не зависят до определенного значения  $L_0$ . Если размер  $r < L_0$ , то параметры физических свойств начинают меняться. Следовательно, существует размерная граница  $L_0$  между макроскопическим и наноразмерным состояниями. Эта граница зависит от свойств вещества и связана с фундаментальным параметром физики твердого тела – с дебаевской температурой. Выведенная и физически обоснованная зависимость  $L_0 = f(\theta_D)$  имеет вид  $L_0 = 230\theta_D^{-1/2}$  [нм]. Рассчитанные по этой формуле значения  $L_0$  полностью соответствуют имеющимся в литературе данным по изучению свойств наночастиц. Численное значение параметра физического свойства в зависимости от размера объекта описывается условием

$$S(r) = \frac{S_V}{\left[ \exp \left[ -\alpha \left( \frac{1-x}{x} \right)^{3/2} \right] \right]},$$

где  $S_V$  – объёмное (макроскопическое, то есть табличное) значение параметра,  $x = r/L_0$ ,  $\alpha$  – коэффициент, зависящий от изучаемого свойства.

При уменьшении размеров частицы до очень малых величин понятие «наночастица» исчезает, так как исчезает поверхность объектов и понятие «физическое свойство» теряет смысл. Размерная граница между наносостоянием и атомно-кластерной системой ( $B$ ) определяется колебаниями поверхностных атомов. Именно этот фактор «размывает» поверхность, преобразуя ее в поверхностный слой. Значение ( $B$ ) определяется условием

$$B = 3,2\delta,$$

где  $\delta$  – амплитуда колебаний атомов на внешнем атомном слое частицы.

Отметим, на наш взгляд, необычную особенность функции  $S(r)$ . Если  $(1-x)/x = \tau$ , то



отношение  $S(r)/S_V$  отличается от золотого отношения всего на величину, меньшую 0,003.

Итак, для определения размерной границы между макро- и наносостояниями необходимо учитывать дебаевскую температуру, которая определяется структурно-химическими особенностями вещества. При расчёте размерной границы между нано- и атомно-кластерным состояниями необходимо знать параметры пространственных флуктуаций атомов внешней координационной сферы ( $\delta$ ). Величина  $\delta$  не является табличной, так как может меняться в зависимости от взаимоконфигурации атомов в кластере, от внешних условий (температуры, давления, особенностей окружающей среды и др.).

В работе не рассматривается проблема расчёта величины  $\delta$  как параметра изменения положения поверхностных атомов. Но учёт этой величины при малых размерах частиц позволил обосновать наличие размерной границы между наносостоянием и атомно-кластерным состоянием ( $B$ ). Если размер объекта  $d$  лежит в интервале  $B < d < L_0$ , то этот объект является наночастицей. При значениях  $d < B$  группа атомов (молекул) образует кластер. Однако этот объект не имеет фиксированной поверхности, то есть теряет основной признак частицы. Граница  $B$ , как и  $L_0$ , не является резкой, точно фиксированной и зависит не только от вещества кластера, но и от других факторов.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Полинг, Л. Химия / Л. Полинг, П. Полинг. – М.: Мир, 1978. – 683 с.
2. Бацанов, С.С. Экспериментальные основы структурной химии / С.С. Бацанов. – М.: Изд-во стандартов, 1985. – 239 с.
3. Китель, Ч. Введение в физику твердого тела / Ч. Китель. – М.: Гос. изд-во физ.-матем. лит., 1967. – 696 с.
4. Фейнман Р.Ф. Внизу полным-полно места: приглашение в новый мир физики / Р.Ф. Фейнман // Журн. Рос. хим. о-ва им. Д.И. Менделеева. – 2002. – Т. XLVI, № 5. – С. 22–29.
5. Гусев, А.И. Наноматериалы, наноструктуры, нанотехнологии / А.И. Гусев. – М.: Физматлит, 2007. – 416 с.
6. Ажаян, Р.М. Nanocomposite science and technology / Р.М. Ажаян, L.S. Schadler, A.V. Braun. – NY: Wiley, 2004. – 230 p.
7. Пул, Ч. Нанотехнологии / Ч. Пул, Ф. Оуэнс. – М.: Техносфера, 2005. – 334 с.
8. Ролдугин, В.И. Свойства фрактальных дисперсных систем / В.И. Ролдугин // Успехи химии. – 2004. – Т. 73, № 2. – С. 123–156.
9. Stoscio, M.A. Phonons in nanostructures / M.A. Stoscio, M. Dutta. – Cambridge: Univ. Press. 2011. – 298 p.
10. Дункен, Х. Квантовая химия адсорции на поверхности твердых тел / Х. Дункен, В. Лыгин. – М.: Мир, 1980. – 288 с.
11. Рейсленд, Дж. Физика фонона / Дж. Рейсленд. – М.: Мир, 1975. – 365 с.
12. Лиопо, В.А. Размерные факторы фононных спектров / В.А. Лиопо, В.А. Струк, А.В. Никитон // Вісник Гродзенскага дзяржаўнага ўніверсітэта імя Янкі Купалы. Серыя 2. Матэматыка. Фізіка. Інфарматыка, вылічальная тэхніка і ўпраўленне. Біялогія. – 2010. – № 3. – С. 59–64.
13. Лиопо, В.А. Размерная граница между наночастицей и атомно-кластерным состоянием / В.А. Лиопо // Вісник Гродзенскага дзяржаўнага ўніверсітэта імя Янкі Купалы. Серыя 2. Матэматыка. Фізіка. Інфарматыка, вылічальная тэхніка і кіраванне. – 2012. – № 1. – С. 100–104.

Поступила в редакцию 24.08.12.

The aim of the article is determination of nanoparticle definition. This object must have two properties. The first they have surface and the second the parameters of their physical properties depend on the particles size. The

function  $S(r)$  is  $S(r) = \frac{S_V}{\exp\left[-\alpha\left(\frac{1-x}{x}\right)^{3/2}\right]}$ , here  $S_V$  – parameter of macrostate,  $\alpha$  – coefficient depending

on physical property,  $x = r/L_0$ ,  $r$  – is the size of the particle.  $L_0$  is bound between macro- and nanostate. The

$L_0$  may be calculated as  $L_0 = 230\theta_D^{-1/2}$  [nm],  $\theta_D$  is Debye temperature. The size bound between nanostate and atomic-cluster system ( $B$ ) described as  $B = 3,2\delta$ . Here  $\delta$  is the amplitude of vibration surface atoms of object.

**Keywords:** nanoparticle, Debye temperature, quantum dimension effect, scale diapason.