

# ЗАКОНОМЕРНОСТИ СТРУКТУРНЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В БИМЕТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОЧАСТИЦАХ Pd-Pt

Руководитель: Сдобняков Н.Ю.

XXVIII Каргинские чтения  
(г. Тверь, 31 марта – 1 апреля 2022 г.)

**Объекты исследования:** бинарные наночастицы Pd-Pt.

**Метод исследования:** метод молекулярной динамики с использованием потенциала сильной связи.

**Результаты моделирования:**

1. В процессе нагревания наночастиц  $\text{Pd}_{1500}\text{-Pt}_{1500}$  с первоначально равномерным распределением компонент не наблюдается формирование наночастицы по типу ядро-оболочка (см. рис. 1);
2. При увеличении температуры, наночастица  $\text{Pd}_{1500}\text{-Pt}_{1500}$  становится «рыхлой» – появляются приповерхностные дефекты (полости).

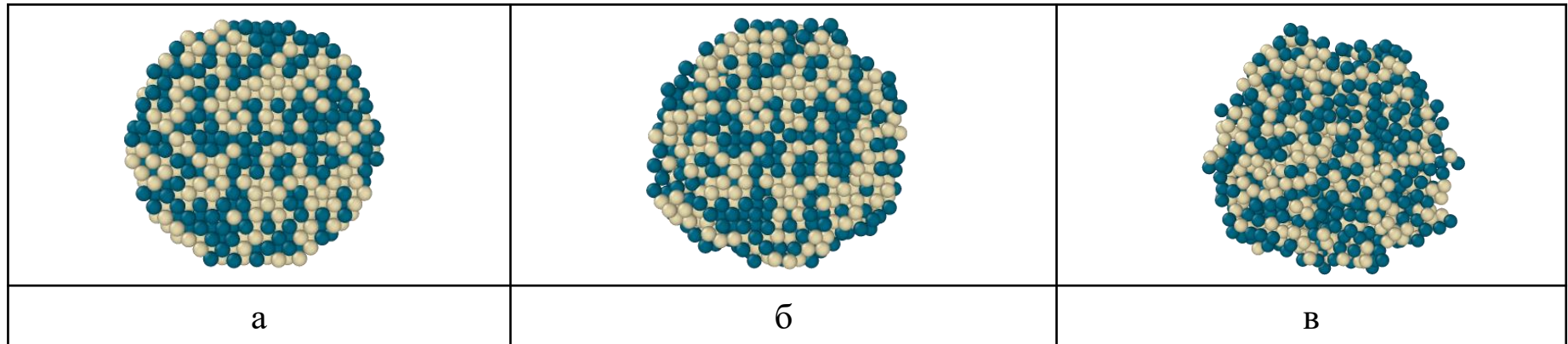


Рис. 1. Экваториальные сечения наночастицы  $\text{Pd}_{1500}\text{-Pt}_{1500}$  при различных температурах: а –  $T=300\text{K}$ , б –  $T=921\text{K}$ , в –  $T=1527\text{K}$ . Атомы Pt изображены светлыми шарами.