



Тверской
государственный
университет

Галузин Иван Русланович

СТАБИЛЬНОСТЬ/НЕСТАБИЛЬНОСТЬ БИМЕТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОЧАСТИЦ $Ni@Ag$ и $Ag@Ni$

Руководитель: Сдобняков Н.Ю.

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра общей физики

Объекты исследования: наночастицы $Ni_{1500}@Ag_{1500}$ и $Ag_{1500}@Ni_{1500}$

Метод исследования: метод молекулярной динамики с использованием потенциала Сильной связи.

Результаты исследования:

При охлаждении исследуемых систем от $T=950K$ для реализуется два принципиально разных сценария:

1. В системе $Ni@Ag$ оболочка из Ag в процессе моделирования остается стабильной, отсутствует поверхностная сегрегация атомов ядра, состоящего из Ni .

2. В системе $Ag@Ni$ является нестабильным уже при $T=540K$, т.е. начинает наблюдаться поверхностная сегрегация атомов серебра, по завершению которой системы $Ni@Ag$ и $Ag@Ni$ становятся практически идентичными.

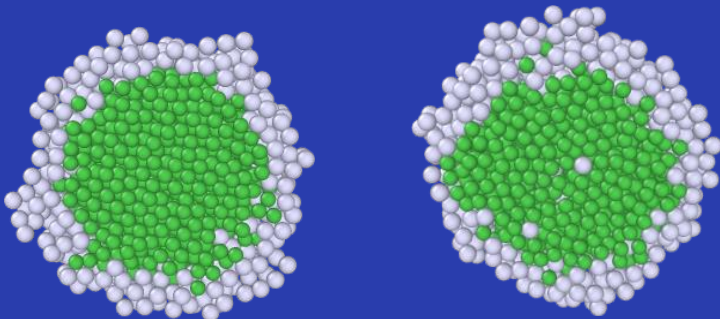


Рис. 1. Конечные конфигурации систем $Ni_{1500}@Ag_{1500}$ (слева) и $Ag_{1500}@Ni_{1500}$ (справа), полученные в процессе нагревания. Атомы Ag изображены светлыми шарами.

