

Тактаров Антон Алексеевич
**ИЗУЧЕНИЕ ЗАКОНОМЕРНОСТЕЙ ПОВЕРХНОСТНОЙ
И СТРУКТУРНОЙ СЕГРЕГАЦИИ В
БИМЕТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОЧАСТИЦАХ Ni-Pd**

Руководитель: Сдобняков Н.Ю.

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

Объекты исследования: бинарные наночастицы Ni-Pd.

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

Результаты моделирования:

1. В процессе нагревания в наночастице $\text{Ni}_{1500}\text{-Pd}_{1500}$ с первоначально равномерным распределением компонентов при температуре $T=798\text{K}$ начинается формирование структуры ядро-оболочка, которая окончательно формируется при температуре $T=1284\text{K}$.
2. В структуре ядро-оболочка наблюдаются дефекты (полости).

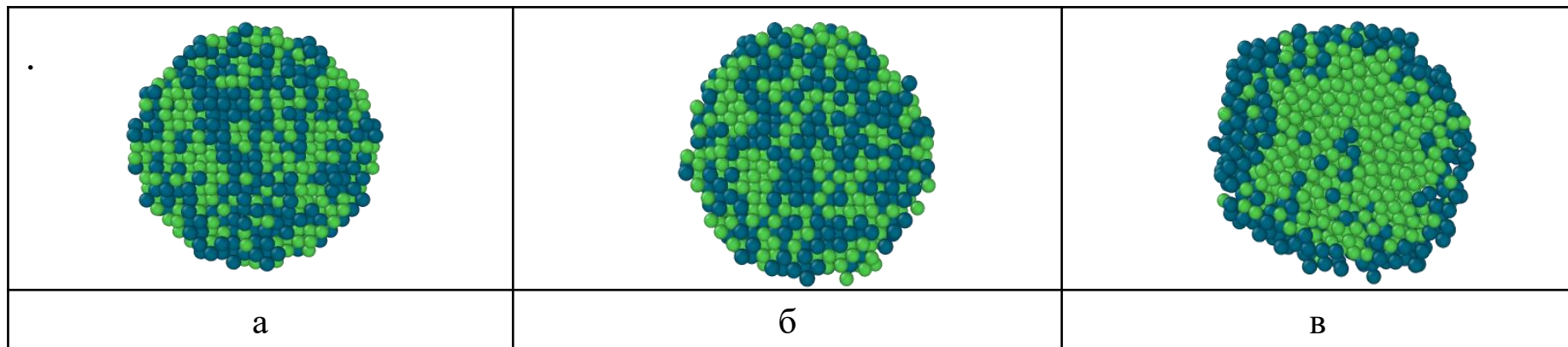


Рис. 1. Экваториальное сечение наночастицы $\text{Ni}_{1500}\text{-Pd}_{1500}$ в процессе плавления: а – 300 К, б – 798 К, в – 1284 К. Атомы Pd изображены более темными шарами.