

## ВЛИЯНИЕ ВНЕШНЕГО ДАВЛЕНИЯ НА СТРУКТУРУ КРИСТАЛЛИЗУЕМЫХ БИМЕТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОЧАСТИЦ

**В.С. Мясниченко, П.М. Ершов, С.С. Богданов, К.Г. Савина, Н.Ю. Сдобняков**

*Тверской государственный университет, 170002, Россия, Тверь, Садовый пер., 35,  
E-mail: [viplabs@yandex.ru](mailto:viplabs@yandex.ru), [nsdobnyakov@mail.ru](mailto:nsdobnyakov@mail.ru)*

## INFLUENCE OF EXTERNAL PRESSURE ON THE STRUCTURE OF CRYSTALLIZED BIMETALLIC NANOPARTICLES

**V.S. Myasnichenko, P.M. Ershov, S.S. Bogdanov, K.G. Savina, N.Yu. Sdobnyakov**

*Tver State University, 35 Sadoviy lane, Tver, 170002 Russia,  
E-mail: [viplabs@yandex.ru](mailto:viplabs@yandex.ru), [nsdobnyakov@mail.ru](mailto:nsdobnyakov@mail.ru)*

В данной работе исследовался процесс структурообразования на примере биметаллической наносистемы *Co–Au* стереохимического состава *A3B* с общим числом атомов 200. Компьютерные эксперименты проводились методом молекулярной динамики с использованием потенциала сильной связи. Установлены структурные мотивы, характерные для изолированной рассматриваемой биметаллической системы и находящейся под давлением 4 ГПа и 10 ГПа.

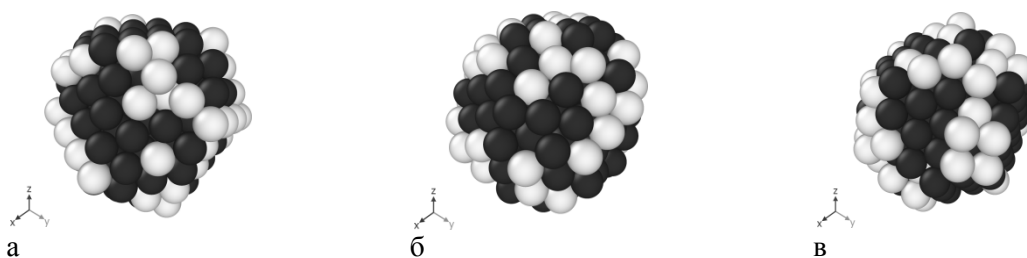
In this work, the process of structure formation was investigated by the example of a bimetallic nanosystem *Co–Au* of stereochemical composition *A3B* with a total number of atoms of 200. Computer experiments were carried out via the molecular dynamics method using the tight-binding potential. Structural motives specific for the isolated bimetallic system under consideration and under pressure of 4 GPa and 10 GPa have been established.

Ранее нами в [1, 2] было изучено влияние внешнего давления на температуру фазовых переходов в биметаллических серебросодержащих наночастицах (НЧ) эквиатомного состава. Было установлено, что на температурный диапазон структурной стабильности биметаллических наночастиц (наносплавов) оказывают совокупное влияние следующие факторы: размер и начальная геометрическая форма наночастицы, состав наночастицы, тип и степень атомного упорядочения, наличие внешнего давления. В данной работе проводилось молекулярно-динамическое моделирование с использованием программного продукта [3] для кобальтсодержащих НЧ. Нами был рассмотрен биметаллический наносплав *Co–Au* стехиометрического состава *A3B* с общим числом атомов 200. Шаг по времени в МД эксперименте составлял 1 фс. Компьютерный эксперимент заключался в охлаждении начальной конфигурации от 1000 К до 100 К со скоростью изменения температуры  $10^{13}$  К·с<sup>-1</sup>. Далее мы повторяли эксперимент при различных внешних давлениях: 4 ГПа и 10 ГПа. Выполнялась серия по 20 экспериментов для каждого значения давления. Для вычисления сил, действующих между атомами, использовался модифицированный потенциал сильной связи, параметры которого взяты из работы [4], для определения перекрестных параметров мы использовали правило комбинирования Лоренца – Берто. Коэффициент размерного несоответствия между металлами был уменьшен до 3%.

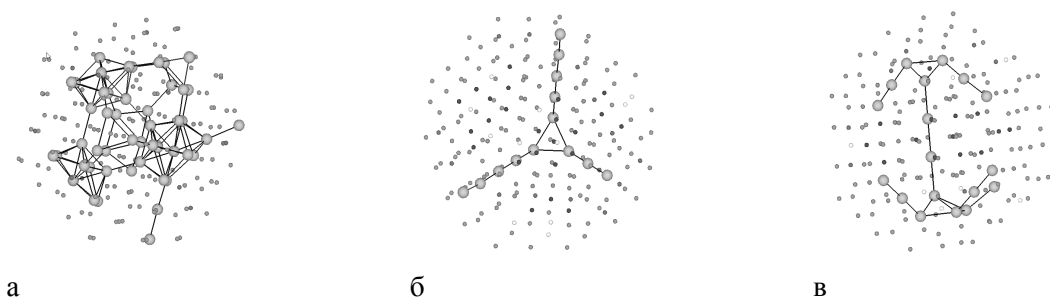
Известным нам глобальным энергетическим минимумом для НЧ данного состава является икосаэдр с признаками хиральности (-3,908 эВ/атом). Во всех трёх сериях, в условиях вакуума и при наличии внешнего давления, икосаэдрическая конфигурация образуется в половине случаев. При 4 ГПа и выше к ним добавляются конфигурации (polyICO), имеющие по 2 и 3 центра икосаэдрической симметрии. Атомы на осях симметрии пятого порядка условно можно отнести к DEC фазе, а их расположение в НЧ показано на рис. 2. Плотнупакованная структура образуется в каждом четвёртом эксперименте (при давлении не выше 4 ГПа).

Встречаются структурные мотивы двух видов: поликристаллическая ГЦК/ГПУ с параллельными плоскостями двойникования, и ГПУ структура с ‘ядром’ в виде тетраэдра ГЦК из 20 и более атомов. При внешнем давлении 10 ГПа мотив ГЦК/ГПУ практически не образуется. В этом случае преобладают ИСО структурные мотивы, а также DEC3 (см. рис. 2 б), DEC4 и DEC6 (см. рис. 2 в) – фрагменты икосаэдрической структуры большого размера.

Размер поликристаллического ядра, как суммарное число атомов, принадлежащих к распознанным ГЦК и ГПУ фазам, уменьшается от 65 атомов в вакууме до 56 атомов при 10 ГПа. При этом образуемая структура не становится более аморфной, но содержит больше атомов на осях симметрии пятого порядка (DEC фаза). Среднее межатомное расстояние уменьшается от 2,49 Å в вакууме до 2,43 Å при максимальном давлении.



**Рис. 1** - Характерные конечные конфигурации наносплавов *Co – Au* при температуре 100 К (светлые шары – атомы *Au*): а – в вакууме, б – 4 ГПа, в – 10 ГПа



**Рис. 2** - Расположение осей симметрии пятого порядка в НЧ структурных мотивов: а – polyICO (три ядра икосаэдрической симметрии), б – DEC3, в – DEC6

Таким образом, внешнее давление можно рассматривать как ограниченный управляющий параметр (сравнимый, например, со скоростью изменения температуры) при формировании структурно-фазового состава в биметаллических наносистемах. Сочетание размерного фактора и величины внешнего давления позволяет получать биметаллические структуры различного фазового состава и, соответственно, обладающие различными физико-химическими характеристиками. Понимание процессов, происходящих под действием высокого давления в биметаллических наночастицах, позволяет расширить наши представления о механизмах структурных и фазовых превращений [5].

*Исследования выполнены при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках выполнения государственного задания в сфере научной деятельности (проект № 0817-2020-0007) и Российского фонда фундаментальных исследований (проекты № 18-03-00132 и 20-37-70007).*

#### Список использованных источников:

1. Мясниченко В.С., Кулагин В.В., Соколов Д.Н., Сдобняков Н.Ю., Кирилов Л. // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. 2016. Вып. 8. С. 259-265.
2. Богданов С.С., Мясниченко В.С., Колосов А.Ю., Соколов Д.Н., Акимова Ю.Н., Антонов А.С., Сдобняков Н.Ю. // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. 2019. Вып. 11. С. 422-430.
3. Свидетельство № 2011615692 РФ. Молекулярнодинамическое моделирование и биоинспирированная оптимизация бинарных и тройных металлических наноструктур (КластерЭволюшн): свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ / В.С. Мясниченко; заявитель и правообладатель заявитель и правообладатель ФГБОУ ВПО «Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова». № 2011613732; заявл. 23.05.2011; зарегистрировано в реестре программ для ЭВМ 20.06.2011. 1 с.
4. Cleri F., Rosato V. // Physical Review B. 1993. V. 48. I. 1. P. 22-33.
5. Васильев Л.С., Ломаев Л.С. // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. 2019. № 2. С. 63-85.