

СТАБИЛЬНОСТЬ СТРУКТУРНЫХ МОДИФИКАЦИЙ НАНОКЛАСТЕРОВ Ag_{55} И Ag_{147} РАЗЛИЧНОЙ НАЧАЛЬНОЙ МОРФОЛОГИИ

Д. А. Рыжкова*, С. Л. Гафнер, Ю. Я. Гафнер
Хакасский государственный университет им. Н. Ф. Катанова, г. Абакан

Цель работы: исследование методом молекулярной динамики с использованием модифицированного потенциала сильной связи TB-SMA характера термически индуцированных структурных переходов в нанокластерах (НК) серебра Ag_{55} и Ag_{147} при вариации их начальной морфологии.

Компьютерная модель

Начальные сферические НК были получены путем вырезания из идеальной ГЦК решетки. После термической релаксации был сформирован **первый ансамбль** НК. Затем НК были ступенчато нагреты до температуры $T = 1000$ К и плавно охлаждались до 20 К. Из полученного массива были выделены НК с аморфным строением - был сформирован **второй ансамбль НК**. Далее НК ступенчато нагревались до $T = 1000$ К с шагом 20 К, а в области структурных переходов в шаге 5 К. При каждом фиксированном значении НК выдерживались в течение 1 нс.

Результаты и обсуждения

Для НК с начальным ГЦК строением формирование Ih структуры происходит еще на этапе предварительной термической релаксации (рис. 1) и сохраняется вплоть до температур плавления 601 К (Ag_{55}) и 685 К (Ag_{147}).

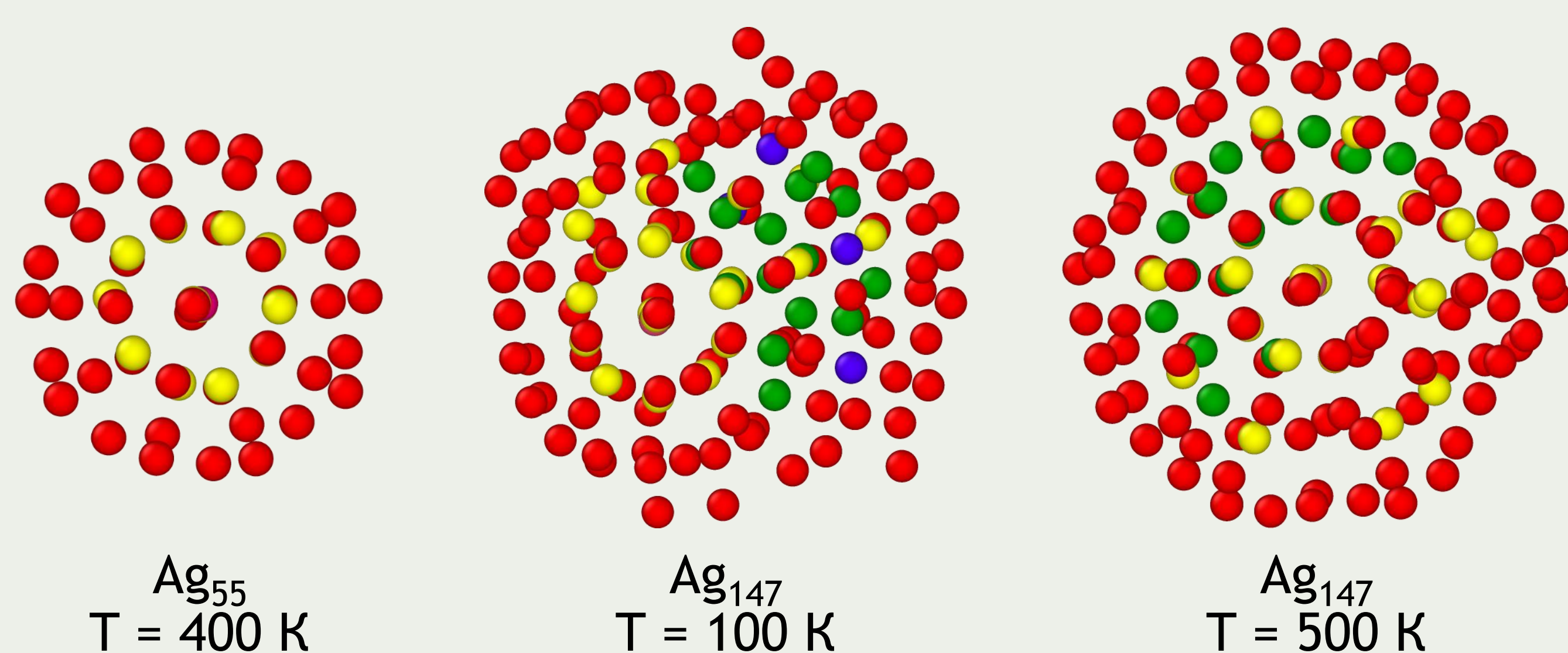


Рис. 1. НК с начальным ГЦК строением.

Для ансамбля НК исходной аморфной морфологии процесс структурообразования претерпевает существенные изменения.

Для частиц Ag_{55} он может происходить двумя путями (рис. 2):

- кластер сохраняет начальную конфигурацию;
- при температуре порядка 500 К происходит структурный переход к Ih модификации, при этом температура плавления кластера существенно повышается до значений порядка 750 К.

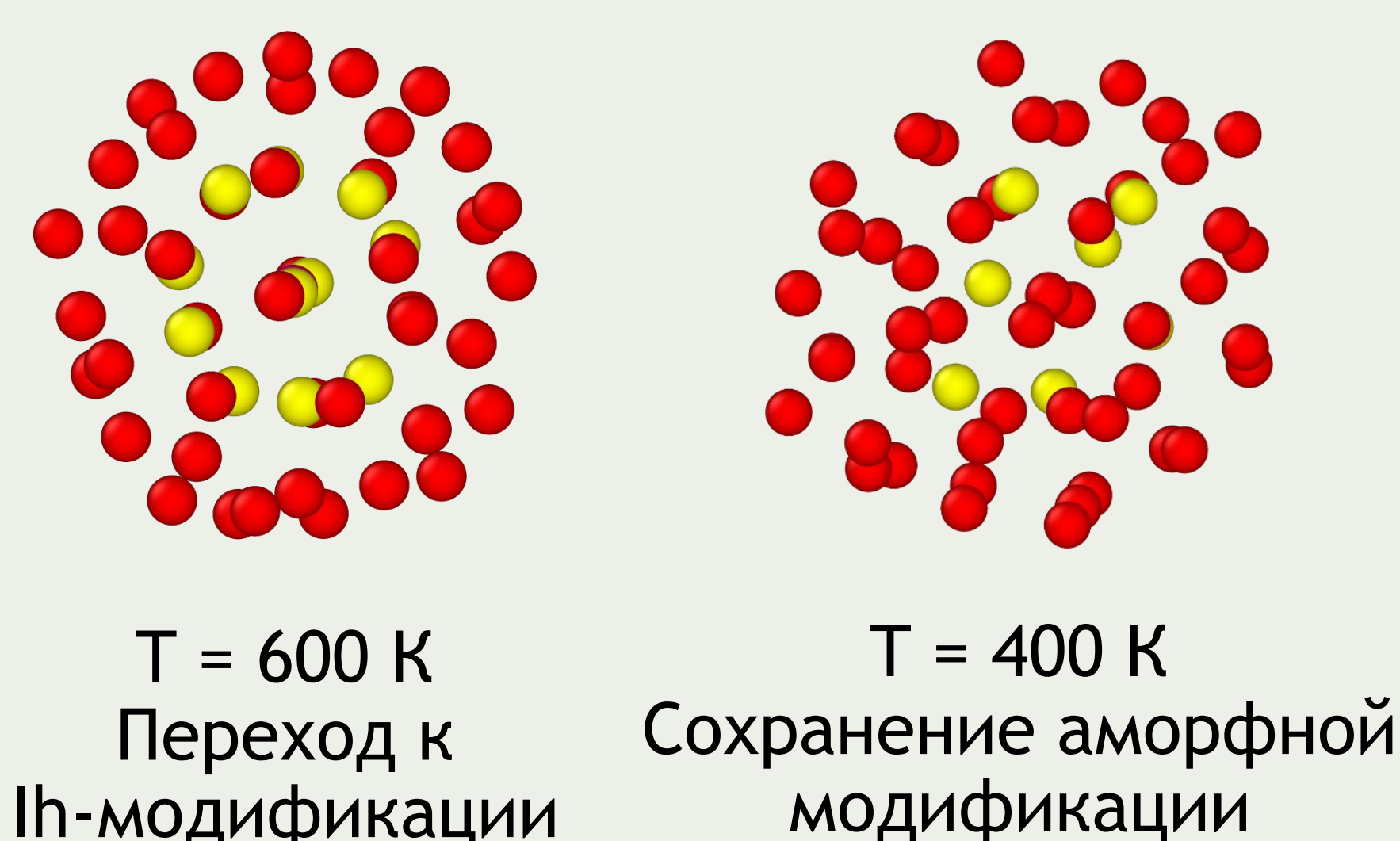


Рис. 2. НК Ag_{55} с начальной аморфной морфологией.

Для нанокластеров Ag_{147} переход к Ih структуре (рис. 5) имеет место при $T \approx 380$ К, а температура плавления НК смещается до 830 К.

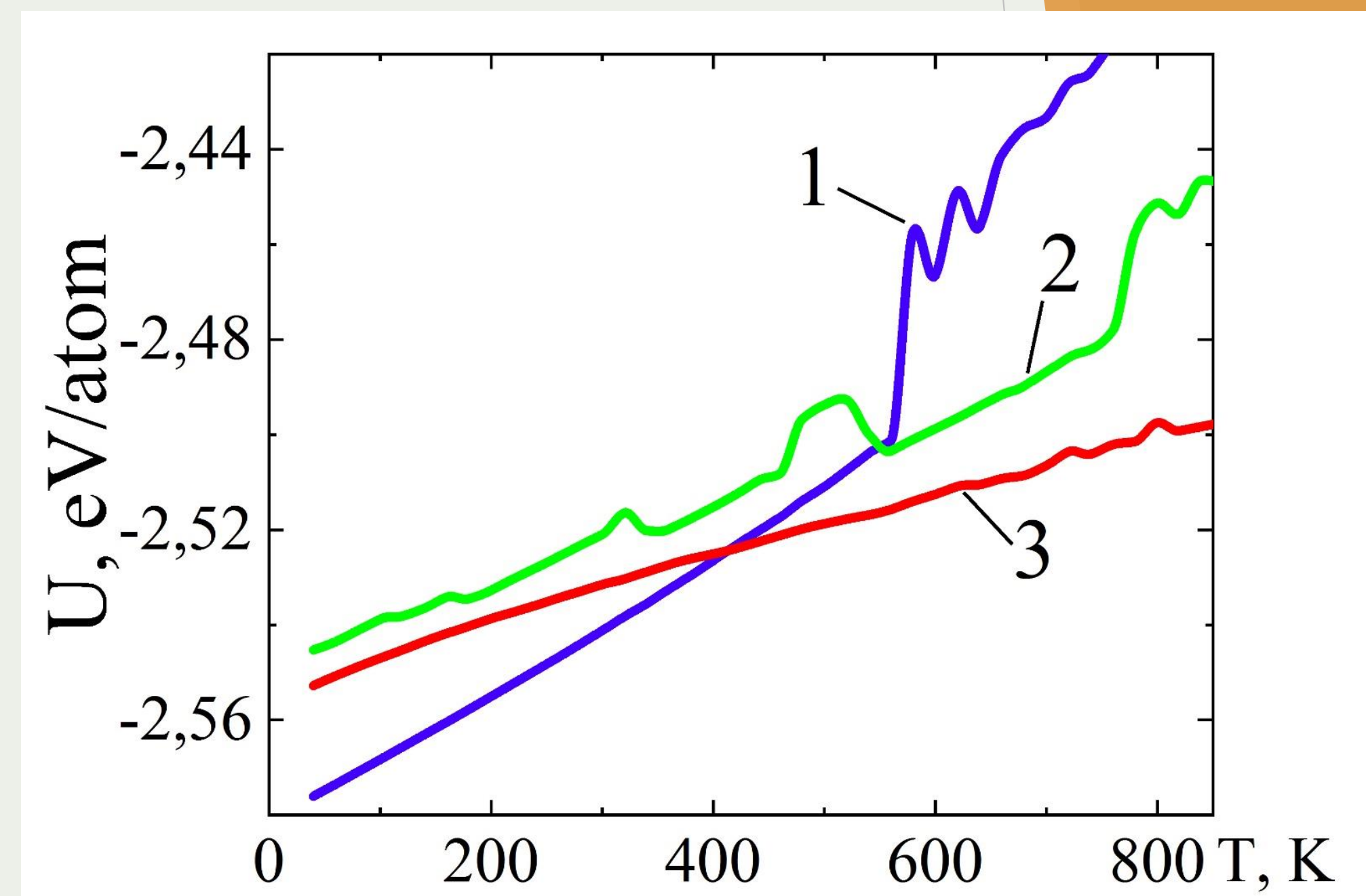


Рис. 3. Зависимость удельной потенциальной энергии от температуры НК Ag_{55} : начальный ГЦК кластер - 1; аморфный кластер со структурным переходом к Ih конфигурации - 2, и без структурного перехода - 3.

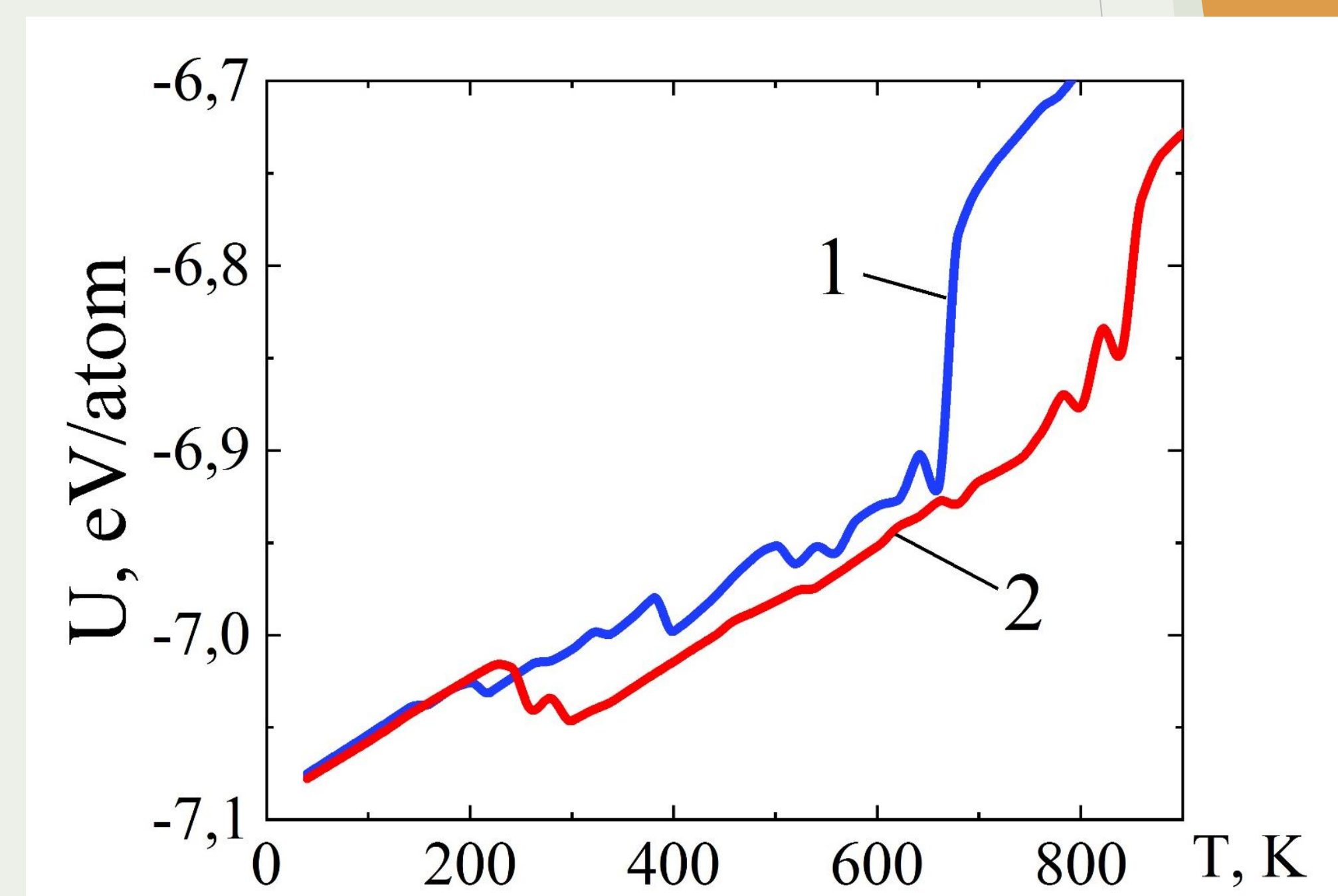


Рис. 4. Зависимость удельной потенциальной энергии от температуры НК Ag_{147} : начальный ГЦК кластер - 1; аморфный кластер со структурным переходом к Ih конфигурации.

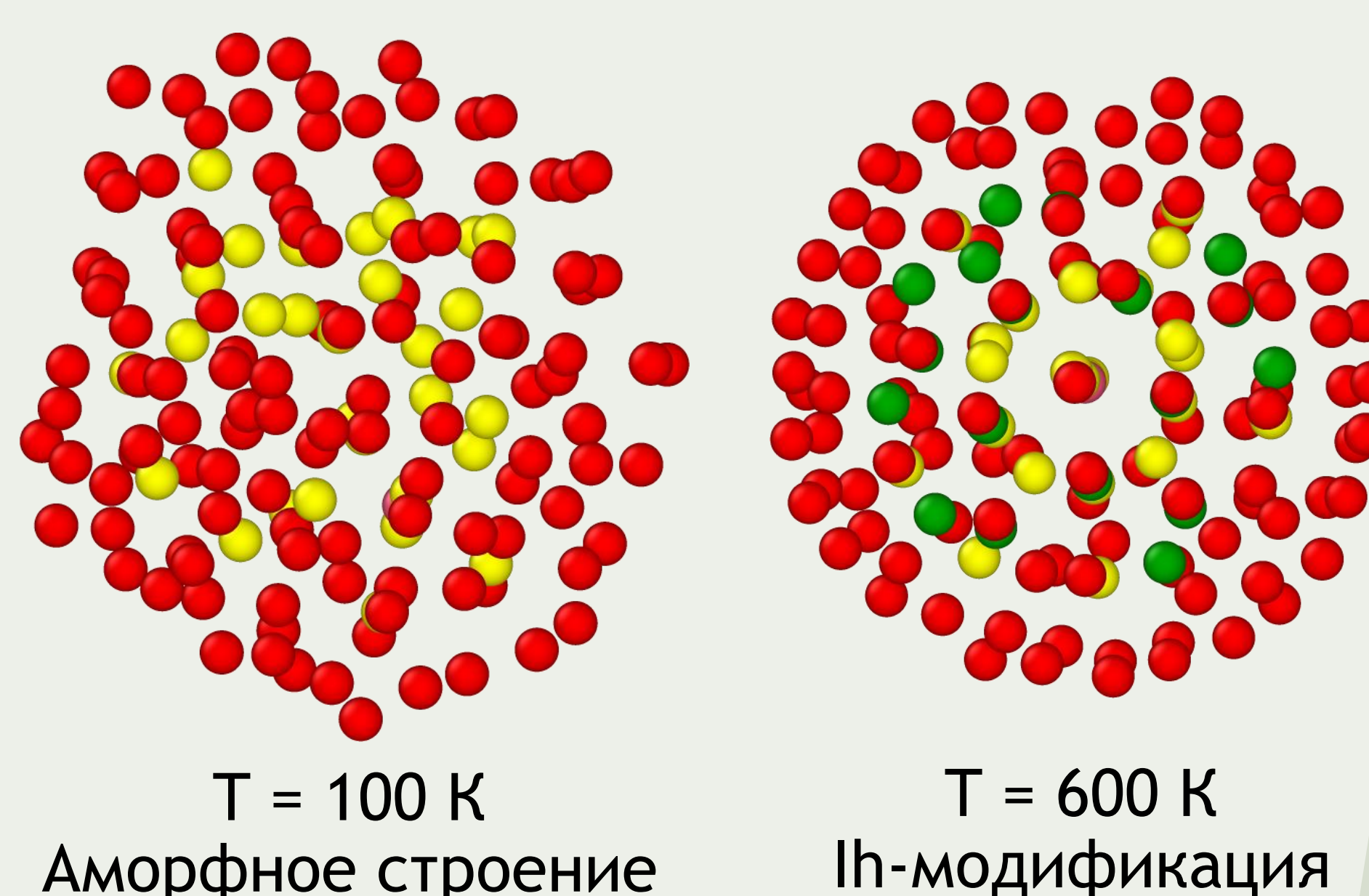


Рис. 5. НК Ag_{147} с начальной аморфной морфологией.

Заключение

Наблюдаемые отличия можно объяснить различным характером зависимости удельной потенциальной энергии U НК первого и второго ансамблей. Так для Ag_{55} разность U для Ih и аморфной модификаций составляет около 0,023 эВ/атом (рис. 3). При этом угол наклона кривых 2 и 3 значительно меньше, чем кривой 1, что при высоких температурах позволяет сохранить Ih строение (при условии его формирования) и температура плавления существенно возрастает ($\Delta T = 150$ К). Похожие закономерности можно также наблюдать и для Ag_{147} (рис. 4), но в менее выраженной форме: имеет место смещение точки плавления, но не возникают иные структурные модификации.