

Министерство науки и высшего образования
Российской Федерации
Федеральное государственное
бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Тверской государственный университет»

**ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ
ИЗУЧЕНИЯ КЛАСТЕРОВ,
НАНОСТРУКТУР
И НАНОМАТЕРИАЛОВ**

**PHYSICAL AND CHEMICAL ASPECTS
OF THE STUDY OF CLUSTERS,
NANOSTRUCTURES AND
NANOMATERIALS**

**FIZIKO-HIMIČESKIE ASPEKTY
IZUČENIÂ KLASTEROV,
NANOSTRUKTUR I NANOMATERIALOV**

МЕЖВУЗОВСКИЙ СБОРНИК НАУЧНЫХ ТРУДОВ

выпуск 11

ТВЕРЬ 2019

УДК 620.22:544+621.3.049.77+539.216.2:537.311.322: 530.145

ББК Ж36:Г5+В379

Ф50

Рецензирование статей осуществляется на основании Положения о рецензировании статей и материалов для опубликования в Межвузовском сборнике научных трудов «Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов».

Официальный сайт издания в сети Интернет:

<https://www.physchemaspects.ru>

Ф50 Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов [Текст]. – Тверь: Твер. гос. ун-т, 2019. – Вып. 11. – 680 с.

Зарегистрирован Федеральной службой по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций, свидетельство о регистрации СМИ ПИ № ФС 7747789 от 13.12.2011.

Издание составлено из оригинальных статей, кратких сообщений и обзоров теоретического и экспериментального характера, отражающих результаты исследований в области изучения физико-химических процессов с участием кластеров, наноструктур и наноматериалов физики, включая межфазные явления и нанотермодинамику. Сборник предназначен для научных и инженерно-технических работников, преподавателей ВУЗов, студентов и аспирантов. Издание подготовлено на кафедре общей физики Тверского государственного университета.

Переводное название: Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials

Транслитерация названия: Fiziko-himičeskie aspekty izučeniâ klasterov, nanostruktur i nanomaterialov

УДК 620.22:544+621.3.049.77+539.216.2:537.311.322: 530.145

ББК Ж36:Г5+В379

Print ISSN 2226-4442

Online ISSN 2658-4360

© Коллектив авторов, 2019

© Тверской государственной
университет, 2019

**МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
ПЛАВЛЕНИЯ БИНАРНОЙ МЕТАЛЛИЧЕСКОЙ
НАНОПРОВОЛОКИ**

С.А. Васильев, А.Ю. Картошкин, М.В. Самсонов, Е.В. Дьякова
ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»
170100, Россия, Тверь, ул. Желябова, 33
vsa812@yandex.ru

DOI: 10.26456/pcascnn/2019.11.431

Аннотация: В данной работе проведено молекулярно-динамическое исследование процессов плавления бинарных металлических нанопроволок, различающихся по исходному составу и мезоскопической структуре (распределение компонентов между сердцевинной нанопроволоки и поверхностным слоем). На примере системы $Ni-Cu$ показано, что соотношение компонентов и мезоскопическая структура действительно оказывают значительное влияние на температуру плавления и закономерности данного процесса. Так, при прочих равных условиях, нанопроволока Ni , покрытая атомами Cu , сохраняет свою стабильность при значительно больших температурах, чем нанопроволока Cu , покрытая атомами Ni .

Ключевые слова: металлическая нанопроволока, система $Ni-Cu$, плавление, размерная зависимость, молекулярная динамика.

1. Введение

Как уже отмечалось нами ранее в статье [1], размерная зависимость температуры плавления $1D$ -объектов (нанопроволок, нанонитей), в том числе бинарных, исследовалась в гораздо меньшей степени, чем температуры плавления $0D$ -объектов (наночастиц). Вместе с тем, в таких работах, как [2, 3] представлены формулы для расчета размерных зависимостей температур плавления нанонитей. Эти формулы можно рассматривать как аналоги известной формулы Томсона [4, 5], т.к. аргументом является обратное значение характерного размера объекта (диаметр нанопроволоки).

В работе [1] мы рассматривали взаимосвязь размерных зависимостей температур плавления наночастиц и нанопроволок одинакового диаметра и состава. Был сделан вывод об общей схожести зависимостей на качественном уровне, однако для проволок температура плавления оказалась выше, чем для частиц аналогичного диаметра. В данной работе мы перешли от однокомпонентных нанопроволок к бинарным и на примере системы $Ni-Cu$ оценили влияние не только состава, но и начального распределения компонентов в объеме.

2. Метод исследования

Для молекулярно-динамического (МД) исследования поведения металлических нанопроволок мы воспользовались программой LAMMPS [6] и методом погруженного атома с параметризацией [7].

Термостатирование осуществлялось по методу Нозе-Гувера [8]. Ранее этот подход уже был апробирован в [9] для сферических наночастиц. Исходное состояние нанопроволок отвечало цилиндрическим объектам бесконечной длины. Бесконечность одного из измерений в молекулярно-динамических экспериментах обеспечивалась с помощью периодических граничных условий. Были рассмотрены три варианта начальных структур:

- а) равномерное распределение компонентов;
- б) сердцевина из атомов никеля, окруженная оболочкой из атомов меди ($Ni(c)Cu(s)$);
- в) сердцевина из атомов меди, окруженная оболочкой из атомов никеля ($Cu(c)Ni(s)$).

Для определения свойств нанопроволок при различных температурах была проведена серия МД экспериментов, в которых одинаковые проволоки релаксировались при различных температурах. В результате выявлялась некоторая характерная температура, ниже которой нанопроволоки находились в твердом состоянии, а при релаксации при более высоких температурах происходил фазовый переход или разрыв. Согласно введенному в [1] определению именно эту температуру мы и будем считать температурой плавления T_m , хотя ее нельзя полностью отождествлять с температурой плавления в привычном ее понимании, т.к. при этой температуре происходит разрыв проволоки, однако в этот момент значительная доля атомов сохраняет упорядочение, отвечающее ГЦК структуре. В то же время, за время порядка 1 пс после разрыва кристаллическая структура разрушается во всей проволоке и происходит ее перестроение в сферическую частицу.

3. Результаты моделирования

На рис. 1 представлены наши МД результаты по температуре плавления бинарной нанопроволоки $Ni-Cu$. Из графика хорошо видно, что случаю $Ni(c)Cu(s)$ отвечает наибольшее значение температуры плавления, а системе $Cu(c)Ni(s)$ – наименьшее. При этом при содержании 10–20% одного из компонентов разность соответствующих температур составляет 50–100 К, а одна из них может совпадать с температурой плавления для случая равномерного распределения металлов. При 30–70% содержании одного из компонентов разность температур плавления для случаев $Ni(c)Cu(s)$ и $Cu(c)Ni(s)$ может достигать 250 К. Также важно отметить, что при содержании меди >30% разница температуры плавления нанопроволок с $Cu(c)Ni(s)$ структурой и с равномерным распределением компонентов значительно превышает разность последней и температуры плавления случая $Ni(c)Cu(s)$ с одинаковым содержанием Cu .

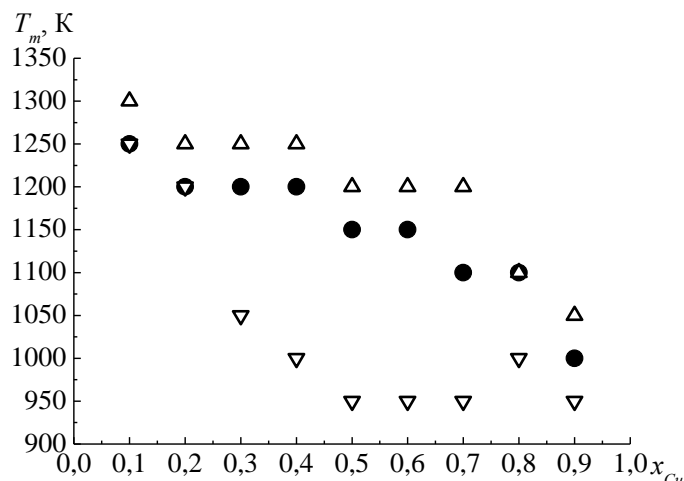


Рис. 1. Зависимость температуры плавления бинарной нанопроволоки $Ni-Cu$ от содержания меди. Символами \bullet обозначены температуры плавления для случая равномерного распределения компонентов, Δ – для случая сердцевины из атомов никеля, покрытой оболочкой из атомов меди ($Ni(c)Cu(s)$), ∇ – для случая сердцевины из атомов меди, окруженной оболочкой из атомов никеля ($Cu(c)Ni(s)$).

4. Заключение

Таким образом, результаты наших МД экспериментов свидетельствуют более высокой температуре плавления и, соответственно, термической стабильности нанопроволок $Ni-Cu$ со структурой типа Ni (сердцевина)/ Cu (оболочка). Эти данные коррелируют с полученными нами термодинамическими и МД данными [9] для сферических наночастиц $Ni-Cu$, где было показано, что частицы со структурой Ni (ядро)/ Cu (оболочка) также являются наиболее стабильным вариантом данной системы.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 18-33-00985) и Минобрнауки РФ в рамках конкурса научных проектов, выполняемых научными коллективами исследовательских центров и (или) научных лабораторий образовательных организаций высшего образования (проект № 2019-0126).

Библиографический список:

1. **Васильев, С.А.** Молекулярно-динамическое моделирование плавления металлической нанопроволоки / С.А. Васильев, А.Ю. Картошкин, М.В. Самсонов и др. // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2018. – Вып. 10. – С. 204-209.
2. **Abudukelimu, G.** Theoretical phase diagrams of nanowires / G. Abudukelimu, G. Guisbiers, M. Wautelet // Journal of Materials Research. – 2006. – V. 21. – I. 11. – P. 2829-2834.
3. **Kumar, R.** Effect of size on cohesive energy, melting temperature and Debye temperature of nanomaterials / R. Kumar, M. Kumar // Indian Journal of Pure & Applied Physics. – 2012. – V. 50. – I. 5. – P. 329-334.

4. **Samsonov, V.M.** A comparative analysis of the size dependence of the melting and crystallization temperatures in silver nanoparticles via the molecular dynamics and Monte-Carlo methods / V.M. Samsonov, N.Yu. Sdobnyakov, V.S. Myasnichenko, et al. // *Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques*. – 2018. – V. 12. – I. 6. – P. 1206-1209.
5. **Ершов, П.М.** Исследование размерных зависимостей температур плавления и кристаллизации и удельной избыточной поверхностной энергии наночастиц никеля вблизи фазового перехода плавление/кристаллизация / П.М. Ершов, А.Ю. Колосов, В.С. Мясниченко, Д.Н. Соколов, А.А. Хорт, С.С. Богданов, А.Н. Шиманская, Н.Ю. Сдобняков // *Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов*. – 2018. – Вып. 10. – С. 242-251.
6. LAMMPS Molecular dynamics simulator. Режим доступа: [www.url: http://lammps.sandia.gov](http://lammps.sandia.gov). – 15.11.2019.
7. **Foiles, S.M.** Calculation of the surface segregation of *Ni–Cu* alloys with the use of the embedded-atom method / S.M. Foiles // *Physical Review B*. – 1985. – V. 32. – I. 12. – P. 7685-7693
8. **Nosé, S.** A unified formulation of the constant temperature molecular dynamics methods / S. Nosé // *The Journal of Chemical Physics*. – 1984. – V. 81. – I. 1. – P. 511-519.
9. **Samsonov, V.M.** Surface segregation in binary *Cu–Ni* and *Au–Co* nanoalloys and the core–shell structure stability/instability: thermodynamic and atomistic simulations / V.M. Samsonov, I.V. Talyzin, A.Yu. Kartoshkin, S.A. Vasilyev // *Applied Nanoscience*. – 2019. – V. 9. – I. 1. – P. 119-133.

References:

1. **Vasil'ev, S.A.** Melting of metal nanowires: molecular dynamics simulation / S.A. Vasil'ev, A.Yu. Kartoshkin, M.V. Samsonov et al. // *Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials*. – 2018. – I. 10. – P. 204-209. (In Russian).
2. **Abudukelimu, G.** Theoretical phase diagrams of nanowires / G. Abudukelimu, G. Guisbiers, M. Wautelet // *Journal of Materials Research*. – 2006. – V. 21. – I. 11. – P. 2829-2834.
3. **Kumar, R.** Effect of size on cohesive energy, melting temperature and Debye temperature of nanomaterials / R. Kumar, M. Kumar // *Indian Journal of Pure & Applied Physics*. – 2012. – V. 50. – I. 5. – P. 329-334.
4. **Samsonov, V.M.** A comparative analysis of the size dependence of the melting and crystallization temperatures in silver nanoparticles via the molecular dynamics and Monte-Carlo methods / V.M. Samsonov, N.Yu. Sdobnyakov, V.S. Myasnichenko, et al. // *Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques*. – 2018. – V. 12. – I. 6. – P. 1206-1209.
5. **Ershov, P.M.** Investigation of size dependences of melting and crystallization temperatures and specific excess surface energy of nickel nanoparticles under melting / crystallization phase transition / P.M. Ershov, A.Yu. Kolosov, V.S. Myasnichenko, D.N. Sokolov, A.A. Khort, S.S. Bogdanov, A.N. Shimanskaya, N.Yu. Sdobnyakov // *Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials*. – 2018. – I. 10. – P. 242-251. (In Russian).
6. LAMMPS Molecular dynamics simulator. Режим доступа: [www.url: http://lammps.sandia.gov](http://lammps.sandia.gov). – 15.11.2019.
7. **Foiles, S.M.** Calculation of the surface segregation of *Ni–Cu* alloys with the use of the

embedded-atom method / S.M. Foiles // Physical Review B. – 1985. – V. 32. – I. 12. – P. 7685-7693

8. **Nosé, S.** A unified formulation of the constant temperature molecular dynamics methods / S. Nosé // The Journal of Chemical Physics. – 1984. – V. 81. – I. 1. – P. 511-519.

9. **Samsonov, V.M.** Surface segregation in binary *Cu–Ni* and *Au–Co* nanoalloys and the core–shell structure stability/instability: thermodynamic and atomistic simulations / V.M. Samsonov, I.V. Talyzin, A.Yu. Kartoshkin, S.A. Vasilyev // Applied Nanoscience. – 2019. – V. 9. – I. 1. – P. 119-133.

Short communication

MELTING OF BINARY METAL NANOWIRES: MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION

S.A. Vasilyev, A.Yu. Kartoshkin, M.V. Samsonov, E.V. Dyakova

Tver State University, Tver, Russia

DOI: 10.26456/pcascnn/2019.11.431

Abstract: In this paper a molecular-dynamic study of melting of binary metal nanowires with different initial composition and mesoscopic structure is carried out. For the *Ni–Cu* system it is shown that the melting temperature is significantly affected not only by the percentage of components, but also by their location in the particle, i.e. by the mesoscopic structure. Thus, the *Ni* nanowire coated with *Cu* atoms retains its stability at much higher temperatures than the *Cu* nanowire coated with *Ni* atoms, *ceteris paribus*.

Keywords: metal nanowire, *Ni–Cu* system, melting, size dependence, molecular dynamics.

Васильев Сергей Александрович – младший научный сотрудник Управления научных исследований ФГБОУ ВО «Тверской государственной университет»

Картошкин Андрей Юрьевич – магистрант физико-технического факультета ФГБОУ ВО «Тверской государственной университет»

Самсонов Максим Владимирович – научный сотрудник ФГБОУ ВО «Тверской государственной университет»

Дьякова Екатерина Владимировна – младший научный сотрудник ФГБОУ ВО «Тверской государственной университет»

Sergey A. Vasilyev – Junior Researcher of Management of Scientific Research, Tver State University

Andrey Yu. Kartoshkin – undergraduate student, Physico-technical Faculty, Tver State University

Maksim V. Samsonov – Researcher, Tver State University

Ekaterina V. Dyakova – Junior Researcher, Tver State University

Поступила в редакцию/received: 15.09.2019; после рецензирования/reviced: 28.10.2019; принята/accepted 05.11.2019.