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 государственнй университет, 2019

УДК 539.219.3.072

Оригинальная статья

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИФфуЗИИ ВБЛИЗИ РАЗДЕЛА МЕТАЛЛОВ В НАНОСПЛАВАХ Co – M (M = Au, Cu, Pt)

В.С. Мясниченко, А.Ю. Колосов, К.Р. Щербатых, Н.Ю. Сдобняков

ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

170002, Россия, Тверь, Садовый пер., 35

viplabs@yandex.ru, nsdobnyakov@mail.ru

DOI: 10.26456/pcascnn/2019.11.500

Аннотация: В работе представлены результаты молекулярно-динамического моделирования для упорядоченных конфигураций наносплавов кобальта. Атомная диффузия в частицах Януса диаметром 3,6 нм исследовалась в диапазоне температур до 1200 К. Установлено, что коэффициент диффузии существенно зависит от состава наночастиц, а именно от степени размерного несоответствия компонент наносплава. В то же время, коэффициент диффузии незначительно увеличивается при удвоении удельного числа вакансий от 1% до 2%.

Ключевые слова: кобальтсодержащие наносплавы, объемная и поверхностная диффузия, граница раздела, вакансии, метод молекулярной динамики, Янус частицы.

1. Введение и методика определения коэффициента диффузии

Объемная и, в особенности, поверхностная диффузия может играть решающую роль в процессе создания формы и структуры растущих наночастиц. Атомная диффузия даже на наноуровне является долгосрочным процессом, который может вызывать морфологические изменения свободных поверхностей и границ раздела. В чистых металлах наблюдается самодиффузия, перемещение атомов в собственной кристаллической решетке. В сплавах наряду с возможной самодиффузией протекает гетеродиффузия. В настоящее время возможно моделировать процессы атомной гетеродиффузии и фазовых переходов в биметаллических наночастицах с высокой степенью точности [1, 2].

Эволюция наночастиц на металлических поверхностях происходит посредством атомных скачков, которые описываются начальной и конечной конфигурациями. Все такие локальные конфигурации естественным образом присутствуют в молекулярно-динамическом (МД) моделировании, которое может быть использовано для изучения эволюции поверхности более подробно. Метод кинетического Монте-Карло (КМК), с другой стороны, дает возможность достичь довольно продолжительных временных масштабов, при условии, что все атомные скачки описаны в рамках узлов неподвижной решетки. Метод позволяет получить заметные изменения морфологии поверхности уже при температурах ниже температуры плавления [2]. Ранее мы применяли КМК метод для исследования взаимосвязи структурной стабильности и поверхностной сегрегации в нанопроволоках Au – Ag [3].

Атомная миграция внутри объема металла – это трехмерный процесс

с прыжками от дислокаций и обратно к дислокациям, а также скачками вместе с ядром дислокации. Дислокации и границы зерен оказывают существенное влияние на диффузионный массоперенос, ускоряя его при пониженных температурах. При этом эксперименты по диффузии и компьютерному моделированию указывают на вакансионный механизм диффузии при достаточно хорошо локализованной вакансии. Эффективная ширина границы для зернограницной диффузии составляет около двух атомных плоскостей. Диффузия вдоль движущихся границ зерен оказывается на несколько порядков больше, чем вдоль стационарных границ [4]. В настоящей работе исследовались наночастицы без дислокаций, вследствие малого числа атомных рядов.

Коэффициент диффузии D является одной из наиболее важных величин, определяющих скорость диффузии, и зависит от природы растворителя и растворенного вещества, от структурной и дефектной структуры кристаллической решетки, а также от температуры материала. Согласно эйнштейновской теории броуновского движения [5] следует, что коэффициент диффузии D определяет величину коэффициента пропорциональности между средним квадратом смещения атома $\langle(\Delta\vec{r})^2\rangle$ и временем t :

$$\langle(\Delta\vec{r})^2\rangle = 6Dt. \quad (1)$$

Проблема применимости данного соотношения для наночастиц подробно обсуждается в [6]. Автором утверждается, что применение формулы Эйнштейна для нахождения коэффициента самодиффузии может быть ограниченным, т.к. необходимо убедиться в том, что поведение среднеквадратичного смещения атомов за времена наблюдения будут в полной мере соответствовать описываемому диффузионному режиму.

Наиболее сильно на коэффициент диффузии влияет изменение температуры T . Как правило, экспериментальные данные о диффузии в объемной фазе и на поверхности представляют в терминах предэкспоненциального фактора D_0 и энергии активации диффузии E_a , которые фигурируют в уравнении Больцмана – Аррениуса:

$$D = D_0 \exp(-E_a / kT), \quad (2)$$

где k – постоянная Больцмана. Экспериментальные данные и численные оценки величин D_0 и E_a для одного и того же металла могут существенно различаться. В частности, в [7] методом погруженного атома определены значения D_0 и E_a для ряда ГЦК металлов для случая самодиффузии и диффузии на границе раздела. Также имеются работы [8], посвященные МД моделированию поверхностной диффузии, в которых значение энергии активации определяется для различных граней ГЦК кластеров.

Ряд работ посвящен исследованию диффузионных процессов в биметаллических системах. В работе [9] утверждается, что для частицы «ядро-оболочка» $Au - Ag$ размером 10 нм значение коэффициента диффузии составляет $2 \cdot 10^{-10} \text{ м}^2/\text{с}$, при этом данное значение находится в диапазоне значений для типичных ГЦК металлов в твердом состоянии ($10^{-12} \text{ м}^2/\text{с}$) и жидком состоянии ($10^{-9} \text{ м}^2/\text{с}$) вблизи температуры плавления.

2. Описание результатов

В нашей работе проведено молекулярно-динамическое моделирование атомной диффузии для упорядоченных биметаллических кобальтсодержащих наночастиц. Вторым металлом являлось золото, медь, либо платина. Начальная конфигурация (см. рис. 1 а) вырезалась из ГЦК решетки и содержала 2441 узла (атома). Диаметр НЧ составлял 3,6 нм. Внедрялись точечные дефекты в виде вакансий, с концентрацией 1% и 2% (см. рис. 1 б). Состав наносплава в обоих случаях соответствовал 53,7% атомов Co . Число атомных рядов (плоскостей) было нечётным и каждый ряд целиком состоял из одного сорта. Температурный диапазон моделирования находился от 300 К до 1200 К, общее время моделирования составляло 1,8 нс. Для расчёта энергии межатомного взаимодействия использовался многочастичный потенциал сильной связи (tight-binding potential), параметры которого представлены в Таблице 1 (использовано соотношение $r_0 = a/\sqrt{2}$, а также данные для монометаллических частиц из работ [10, 11], перекрестные параметры найдены по правилу Лоренца – Бертло). Выбранный потенциал получил апробацию во многих из предыдущих наших работ, в т.ч. использовался в [3].

В процессе моделирования нами получены значения коэффициента диффузии, отдельно для атомов кобальта и каждого сорта второго металла, при определенных температурах с шагом 100 К (см. рис. 2 и 3). Перед расчётом атомных смещений (для коэффициента диффузии) геометрический центр частицы автоматически совмещался с началом координат, а граница раздела металлов совмещалась с плоскостью $X = 0$.

Таблица 1. Параметры межатомного потенциала

Параметр	$Co - Co$	$Au - Au$	$Cu - Cu$	$Pt - Pt$		$Co - Cu$	$Co - Pt$
A эВ	0,095	0.2061	0,0855	0,2975	0,1458	0,0902	0,245
ζ эВ	1,488	1,790	1,224	2,695	1,507	1,353	2,386
p	11,604	10,229	10,960	10,612	10,591	11,280	9,97
q	2,286	4,036	2,278	4,004	3,094	2,282	3,32
$a, \text{\AA}$	3,554	4,078	3,615	3,924	3,821	3,589	3,719

Рис. 1. Поперечное сечение начальных упорядоченных конфигураций наночастиц Януса: частица без дефектов (левый рисунок) и содержащая 2 % вакансий (правый рисунок). Красным цветом показаны атомы кобальта.

В Таблице 2 указаны коэффициенты диффузии для температуры 700 К. Видно, что состав наносплава и соотношение атомных радиусов его компонент значительно влияет на коэффициент диффузии. Так, наименьшее значение параметра $D \sim 6,58 \cdot 10^{-12} \text{ м}^2/\text{с}$ получено в биметаллических НЧ с медью 1% вакансий (размерное несоответствие 1,4 %), а максимальное значение коэффициента диффузии составило $3,14 \cdot 10^{-11} \text{ м}^2/\text{с}$ и было достигнуто в наносплаве *Co–Pt* с размерным несоответствием компонент 10,7 %.

Таблица 2. Расчётные значения коэффициента диффузии

Конфигурация	Вакантные узлы	Сорт атомов	$D, \text{ м}^2/\text{с}$
Янус-частица	1%	<i>Co</i>	$2,91 \cdot 10^{-11}$
		<i>Au</i>	$1,12 \cdot 10^{-10}$
	2%	<i>Co</i>	$2,84 \cdot 10^{-11}$
		<i>Au</i>	$1,15 \cdot 10^{-10}$
Янус-частица <i>Co–Cu</i>	1%	<i>Co</i>	$6,58 \cdot 10^{-12}$
		<i>Cu</i>	$1,75 \cdot 10^{-11}$
	2%	<i>Co</i>	$6,70 \cdot 10^{-12}$
		<i>Cu</i>	$1,82 \cdot 10^{-11}$
Янус-частица <i>Co–Pt</i>	1%	<i>Co</i>	$3,09 \cdot 10^{-11}$
		<i>Pt</i>	$1,95 \cdot 10^{-10}$
	2%	<i>Co</i>	$3,14 \cdot 10^{-11}$
		<i>Pt</i>	$1,99 \cdot 10^{-10}$

Установлено, что с ростом температуры значение коэффициента диффузии увеличивается, причем получаемые зависимости проявляют

нелинейный характер (сплошные кривые на рис. 2 и 3). Кроме того, наблюдается рост коэффициента диффузии в зависимости от концентрации вакансий в наночастице. Однако наличие дефектов сильно влияет на линейность зависимости коэффициента диффузии от температуры. Из рис. 2 и 3 видно, что с 2% концентрацией вакансий у всех сплавов «разброс» точек становится больше по сравнению с данными для 1% концентрации вакансий. Значительное увеличение коэффициента диффузии для атомов *Au* объясняется их выходом на поверхность наночастицы.

Рис. 2. Графики зависимости коэффициента диффузии D от температуры для атомов кобальта в Янус-частицах с 1% и 2% точечных дефектов.

Рис. 3. Графики зависимости коэффициента диффузии D от температуры для атомов меди, золота и платины в Янус-частицах с 1% точечных дефектов.

Согласно [12] коэффициент диффузии D для наночастиц золота при температуре порядка 650 К в диапазоне размеров от 675 до 5425 атомов (что соответствует диаметру от 2,5 до 5,3 нм) составляет $5,0 \cdot 10^{-11} \text{ м}^2/\text{с}$. Экспериментальные данные [13] для макроскопических образцов при температуре 704,5 К для коэффициента самодиффузии Au дают значение $4,22 \cdot 10^{-11} \text{ м}^2/\text{с}$. Наши расчёты дают $D \sim 5,06 \cdot 10^{-11} \text{ м}^2/\text{с}$ для атомов Au при температуре 650 К в частице с 1% вакансий.

Дополнительно рассмотрим изменение фазового состава наносплавов (с 1% вакансий) при нагревании. Состав наносплава и размерное несоответствие компонент влияет и на его фазовый состав.

Рис. 4. Распределение атомов наносплава $Co_{1297} - Au_{1120}$ (а), $Co_{1297} - Cu_{1120}$ (б) и $Co_{1297} - Pt_{1120}$ (в) по распознанным фазам при различных температурах: бсс – ОЦК, фсс – ГЦК, гсп – ГПУ фазы, исо – икосаэдрические ядра. Усреднение по серии из пяти экспериментов для каждого размера.

Процесс плавления в наносплаве $Co - Au$ происходит в два этапа. Первый этап начинается при температуре $\sim 590 \text{ К}$ и заканчивается, когда атомы золота распределятся по всей поверхности. Второй этап

заключается в плавлении ядра из атомов кобальта. Наблюдается образование множественных областей ГПУ (hcp) фазы на обоих этапах.

Наносплав $Co-Si$ стабилен при нагревании в диапазоне температур до 900 К. На границе раздела металлов образуется твёрдый раствор замещения. Медь характеризуется наибольшим значением фактора D_0 , т.е. скоростью роста коэффициента диффузии D (см. рис. 3). Состоящая из атомов кобальта половина НЧ дольше сохраняет свою форму. Согласно [14] коэффициент диффузии кобальта в макроскопическом образце меди при температуре 701 К составляет $\sim 5,81 \cdot 10^{-17} \text{ м}^2/\text{с}$.

Биметаллическая наночастица $Co-Pt$ стабильна до 900 К и характеризуется образованием значительной доли ОЦК (bcc) фазы, которая предшествует плавлению, как видно на рис. 4 в. В ходе аморфизации в НЧ этого состава образуют в среднем 37 локальных ядер икосаэдрической симметрии, как из атомов кобальта, так и платины.

Для определения характера атомных смещений вдоль оси X наночастицы были построены графики (см. рис. 5-7) распределения атомов в каждом наносплаве. В каждом из трёх случаев при температуре 500 К (до начала плавления) только отдельные атомы обоих сортов в процессе объёмной диффузии перешли через границу раздела металлов в плоскости $X = 0$. Заметим, что такое новое расположение энергетически выгодно для атомов второго металла M . Особенно выражена тенденция к образованию смешанных связей в системе $Co-Pt$ (см. рис. 7 б).

Решетка кобальта более термодинамически стабильна и атомы дольше сохраняют своё взаимное расположение при нагревании. Данный фактор также влияет на измеренную величину коэффициента диффузии — для кобальта она меньше чем у металла M в каждом нанославе из рассмотренных.

Рис. 5. Распределение атомов наносплава $Co_{1297} - Au_{1120}$ по координате X и удельной потенциальной энергии U при различных температурах: а – 500 К, б – 1000 К.

Рис. 6. То же для наносплава

Рис. 7. То же для наносплава

3. Заключение

В работе была исследована гетеродиффузия в частицах Януса в диапазоне температур от 300 К до 1200 К. Полученные коэффициенты диффузии меди, золота и платины в наночастицах значительно различаются. Коэффициент диффузии кобальта также существенно зависит от состава наносплава, а именно от степени размерного несоответствия кобальта и второго металла. Заметного влияния процентной доли вакансий (по сравнению с влиянием состава и температуры) не выявлено. Это может объясняться быстрым выходом вакансий на поверхность при нагревании. При этом механизм диффузии изменяется с объемного (вакансионного) механизма диффузии на поверхностный, что сопровождается скачком на температурной зависимости коэффициента диффузии, построенном в логарифмическом масштабе. Таким образом, дефектность структуры слабо влияет на

изменения коэффициента диффузии в биметаллических системах, в отличие от, например, термодинамических и энергетических характеристик наночастиц [15-17].

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 18-38-00571 мол_а, № 20-37-70007) 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. **Julin, J.** Comparative study on methodology in molecular dynamics simulation of nucleation / J. Julin, I. Napari, H. Vehkamäki // The Journal of Chemical Physics. – 2007. – V. 126. – I. 22. – P. 224517-1-224517-8.
2. **Baibuz, E.** Migration barriers for surface diffusion on a rigid lattice: Challenges and solutions / E. Baibuz, S. Vigonski, J. Lahtinen, et al. // Computational Materials Science. – 2018. – V. 146. – P. 287-302.
3. **Myasnichenko, V.** Structural instability of gold and bimetallic nanowires using Monte Carlo simulation / V. Myasnichenko, N. Sdobnyakov, L. Kirilov, R. Mikhov, S. Fidanova // In: Fidanova S. (eds) Recent Advances in Computational Optimization. Studies in Computational Intelligence. Springer, Cham, 2020. – V. 838. – P. 133-145.
4. **Peterson, N.L.** Grain-boundary diffusion in metals / N.L. Peterson // International Metals Reviews. – 1983. – V. 28. – I. 1. – P. 65-91.
5. **Леонтович, М.А.** Введение в термодинамику. Статистическая физика / М.А. Леонтович. – М.: Наука, 1983. – 416 с.
6. **Талызин, И.В.** Молекулярно-динамическое исследование термодинамических и кинетических аспектов плавления и кристаллизации металлических наночастиц: дисс. ... канд. физ.-мат. наук: 02.00.04: защищена 03.04.19: утв. 31.07.19 / Талызин Игорь Владимирович. – Тверь: ТвГУ, 2019. – 148 с.
7. **Adams, J.B.** Self-diffusion and impurity diffusion of fcc metals using the five-frequency model and the embedded atom method / J.B. Adams, S.M. Foiles, W.G. Wolfer // Journal of Materials Research. – 1989. – V. 4. – № 1. – P. 102-112.
8. **Baletto, F.** Molecular dynamics simulations of surface diffusion and growth on silver and gold clusters / F. Baletto, C. Mottet, R. Ferrando // Surface Science. – 2000. – V. 446. – I. 1-2. – P. 31-45.
9. **Hodak, J.H.** Laser-induced inter-diffusion in *AuAg* core-shell nanoparticles / J.H. Hodak, A. Henglein, M. Giersig, G.V. Hartland // The Journal of Physical Chemistry B. – 2000. – V. 104. – I. 49. – P. 11708-11718.
10. **Cleri, F.** Tight binding potentials for transition metals and alloys / F. Cleri, V. Rosato // Physical Review B. – 1993. – V. 48. – I. 1. – P. 22-33.
11. **Wu, X.** Influence of noble metal dopants ($M = Ag, Au, Pd$ or Pt) on the stable structures of bimetallic *Co-M* clusters / X. Wu, Y. Sun, Z. Wei, T. Chen // Journal of Alloys and Compounds. – 2017. – V. 701. – P. 447-455.
12. **Qiao, Zh.** Molecular dynamics simulations on the melting of gold nanoparticles / Zh. Qiao, H. Feng, J. Zhou // Phase Transitions. – 2014. – V. 87. – I. 1. – P. 59-70.
13. **Makin, S.M.** Self-diffusion in gold / S.M. Makin, A.H. Rowe, A.D. LeClaire // Proceedings of the Physical Society. Section B. – 1957. – V. 70. – № 6. – P. 545-552.

14. **Döhl, R.** Measurement of the diffusion coefficient of cobalt in copper / R. Döhl, M.-P. Macht, V. Naundorf // *Physica Status Solidi a*. – 1984. – V. 86. – I. 2. – P. 603-612.
15. **Колосов, А.Ю.** Исследование влияния точечных дефектов на термодинамические и структурные свойства нанокompактированных кобальта и меди / А.Ю. Колосов, Д.Н. Соколов, В.С. Мясниченко, Н.Ю. Сдобняков и др. // *Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов*. – 2017. – Вып. 9. – С. 252-257.
16. **Сдобняков, Н.Ю.** Моделирование термодинамических и структурных характеристик наночастиц металлов, содержащих поверхностные и объемные дефекты при фазовом переходе кристалл-расплав / Н.Ю. Сдобняков, Т.А. Ванюшева, А.Ю. Колосов и др. // *Вестник Тверского государственного университета. Серия «Физика»*. – 2013. – Вып. 20. – С. 27-45.
17. **Сдобняков, Н.Ю.** О влиянии поверхностных и объемных дефектов на термодинамические и структурные характеристики наночастиц алюминия при плавлении / Н.Ю. Сдобняков, Т.А. Ванюшева, А.Ю. Колосов, Д.Н. Соколов и др. // *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования*. – 2015. – № 2. – С. 60-68.

References:

1. **Julin, J.** Comparative study on methodology in molecular dynamics simulation of nucleation / J. Julin, I. Napari, H. Vehkamäki // *The Journal of Chemical Physics*. – 2007. – V. 126. – I. 22. – P. 224517-1-224517-8.
2. **Baibuz, E.** Migration barriers for surface diffusion on a rigid lattice: Challenges and solutions / E. Baibuz, S. Vigonski, J. Lahtinen, et al. // *Computational Materials Science*. – 2018. – V. 146. – P. 287-302.
3. **Myasnichenko, V.** Structural instability of gold and bimetallic nanowires using Monte Carlo simulation / V. Myasnichenko, N. Sdobnyakov, L. Kirilov, R. Mikhov, S. Fidanova // In: Fidanova S. (eds) *Recent Advances in Computational Optimization. Studies in Computational Intelligence*. Springer, Cham, 2020. – V. 838. – P. 133-145.
4. **Peterson, N.L.** Grain-boundary diffusion in metals / N.L. Peterson // *International Metals Reviews*. – 1983. – V. 28. – I. 1. – P. 65-91.
5. **Leontovich, M.A.** Introduction to thermodynamics. Statistical physics / M.A. Leontovich. – M.: Nauka, 1983. – 416 p. (In Russian).
6. **Talyzin, I.V.** Molecular-dynamic study of the thermodynamic and kinetic aspects of the melting and crystallization of metal nanoparticles: diss. ... kand. fiz.-mat. nauk: 02.00.04: zashchishchena 03.04.19: utv. 31.07.19 / Talyzin Igor' Vladimirovich. – Tver': TvGU, 2019. – 148 p. (In Russian).
7. **Adams, J.B.** Self-diffusion and impurity diffusion of fcc metals using the five-frequency model and the embedded atom method / J.B. Adams, S.M. Foiles, W.G. Wolfer // *Journal of Materials Research*. – 1989. – V. 4. – № 1. – P. 102-112.
8. **Baletto, F.** Molecular dynamics simulations of surface diffusion and growth on silver and gold clusters / F. Baletto, C. Mottet, R. Ferrando // *Surface Science*. – 2000. – V. 446. – I. 1-2. – P. 31-45.
9. **Hodak, J.H.** Laser-induced inter-diffusion in *AuAg* core-shell nanoparticles / J.H. Hodak, A. Henglein, M. Giersig, G.V. Hartland // *The Journal of Physical Chemistry B*. – 2000. – V. 104. – I. 49. – P. 11708-11718.
10. **Cleri, F.** Tight binding potentials for transition metals and alloys / F. Cleri, V. Rosato // *Physical Review B*. – 1993. – V. 48. – I. 1. – P. 22-33.

11. **Wu, X.** Influence of noble metal dopants ($M = Ag, Au, Pd$ or Pt) on the stable structures of bimetallic $Co-M$ clusters / X. Wu, Y. Sun, Z. Wei, T. Chen // *Journal of Alloys and Compounds*. – 2017. – V. 701. – P. 447-455.
12. **Qiao, Zh.** Molecular dynamics simulations on the melting of gold nanoparticles / Zh. Qiao, H. Feng, J. Zhou // *Phase Transitions*. – 2014. – V. 87. – I. 1. – P. 59-70.
13. **Makin, S.M.** Self-diffusion in gold / S.M. Makin, A.H. Rowe, A.D. LeClaire // *Proceedings of the Physical Society. Section B*. – 1957. – V. 70. – № 6. – P. 545-552.
14. **Döhl, R.** Measurement of the diffusion coefficient of cobalt in copper / R. Döhl, M.-P. Macht, V. Naundorf // *Physica Status Solidi a*. – 1984. – V. 86. – I. 2. – P. 603-612.
15. **Koloso, A.Yu.** The investigation of the influence of point defects on the thermodynamic and structural properties of nanocompacted cobalt and copper / A.Yu. Koloso, D.N. Sokolov, V.S. Myasnichenko, N.Yu. Sdobnyakov, et al. // *Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials*. – 2017. – I. 9. – P. 252-257. (In Russian).
16. **Sdobnyakov, N.Yu.** Simulation of thermodynamic and structural characteristics of metal nanoparticles with surface and volumetric defects at crystal-melt phase transition / N.Yu. Sdobnyakov, T.A. Vanyusheva, A.Yu. Koloso et al. // *Vestnik Tverskogo gosudarstvennogo universiteta. Seriya «Fizika»*. – 2013. – I. 20. – P. 27-45. (In Russian).
17. **Sdobnyakov, N.Yu.** On the influence of surface and bulk defects on the thermodynamic and structural characteristics of Al nanoparticles during melting / N.Yu. Sdobnyakov, A.Yu. Koloso, D.N. Sokolov, et al. // *Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques*. – 2015. – V. 9. – I. 1. – P. 164-171.

Original paper

**SIMULATION OF DIFFUSION NEAR THE INTERFACE OF METALS IN NANOALLOYS
 $Co-M$ ($M = Au, Cu, Pt$)**

V.S. Myasnichenko, A.Yu. Koloso, K.R. Shcherbatykh, N.Yu. Sdobnyakov
Tver State University, Tver, Russia

DOI: 10.26456/pcascnn/2019.11.500

Abstract: This paper presents results of molecular dynamics simulations for ordered configurations of cobalt nanoalloys. Atomic diffusion in Janus particles with a diameter of 3,6 nm was studied in the temperature range up to 1200 K. It was found that the diffusion coefficient significantly depends on the composition of nanoparticles, namely on the degree of dimensional mismatch of the nanoalloy components. At the same time, the diffusion coefficient increases slightly when the relative number of vacancies doubles from 1% to 2%.

Keywords: cobalt-containing nanoalloys, volume and surface diffusion, interface, vacancies, molecular dynamics method, Janus particles.

Мясниченко Владимир Сергеевич – научный сотрудник кафедры общей физики ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Колосов Андрей Юрьевич – научный сотрудник кафедры общей физики ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Щербатых Кристина Романовна – студент 2 курса магистратуры физико-технического факультета ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Сдобняков Николай Юрьевич – к.ф.-м.н., доцент кафедры общей физики ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Vladimir S. Myasnichenko – Researcher of the General Physics Department, Tver State University

Andrey Yu. Koloso – Researcher of the General Physics Department, Tver State University

Kristina R. Shcherbatykh – undergraduate student, Physico-technical Faculty, of Tver State University

Nickolay Yu. Sdobnyakov – Ph. D., Docent of the General Physics Department, Tver State University

Поступила в редакцию/received: 15.11.2019; после рецензирования/revise: 28.11.2019; принята/accepted 05.12.2019.