

УДК 538.971

Корніч Г.В.¹, Широкоград Д.В.²

¹ д-р. фіз.-мат. наук, проф. НУ «Запорізька політехніка»

² канд. фіз.-мат. наук, ст. викл. НУ «Запорізька політехніка»

ЕВОЛЮЦІЯ ЯНУСОПОДІБНИХ NI-AL КЛАСТЕРІВ ПІД ВПЛИВОМ НИЗЬКОЕНЕРГЕТИЧНИХ КЛАСТЕРІВ AR TA AR₁₃

Класичним методом молекулярної динаміки моделюється еволюція вільних 390-атомних янусоподібних Ni-Al кластерів протягом 100 і 500 пс під впливом частинок Ar і Ar₁₃ з енергіями до 1,0 кєВ. Початкові метастабільні янусоподібні кластери мають дві однокомпонентні частини, рівні за кількістю атомів, з невеликим просторовим перекриттям. Після удару снарядів починається швидке розширення кластерів-мішеней, що супроводжується розпиленням в умовах високотемпературного піку протягом перших 0,5 пс. При цьому, кінетики снарядів Ar₁ і Ar₁₃ критично відрізняються. Після цього кластери Ni-Al поступово розвиваються внаслідок екзотермічного змішування компонентів та демонструють тенденцію до поверхневої сегрегації атомів Al. Поверхнєве збагачення атомами Al після 500 пс чітко видно у випадку ударів Ar₁, тоді як при ударах Ar₁₃ енергіями понад 100 еВ ця тенденція маскується інтенсивним розпиленням, що включає як каскадно-рекойловий, так і тривалий тепловий внесок, з великим переважанням атомів Al у вихідному матеріалі.

Особливий інтерес становить дослідження еволюції структури біметалевих кластерів. Температури плавлення металевих нанокластерів зазвичай нижчі, ніж температури плавлення тих самих макроскопічних матеріалів, хоча вони можуть немонотонно змінюватись при зменшенні розміру кластера нижче двохсот атомів [1]. Значення АЕІ (індексів атомної еквівалентності), що є сумами модулів атомних радіус-векторних відстаней, були розраховані в нашому дослідженні за методикою Берендсена залежно від температури кластера і представлені на загальному рис. 1 для всіх атомів кластера.

Результати показують, що процес плавлення, який руйнує атомну структуру кластера, як очікувалося, починається з його поверхні за нижчих температур і сягає внутрішніх областей приблизно за 870 і 550 К для однокомпонентних кластерів Ni і Al, що складаються з 195 атомів кожен. Різниця в точках плавлення поверхневого та внутрішнього шарів в наших розрахунках сягають понад 200 К, особливо для кластеру Ni, як видно на рис. 1.

У наших моделюваннях для випадків бомбардування Ag_1 показали, що температури кластера Ni-Al після еволюції протягом 100 пс вищі за температури плавлення відповідних вільних однокомпонентних кластерів Al і Ni. Більше того, температури кластерів вищі, ніж температури плавлення кластерів Al та Ni вже після 5 та 15 пс при всіх енергіях бомбардування. Тому у багатьох комп'ютерних експериментах, алюмінієва частина янусоподібного кластера демонструє більш швидкий перехід у невпорядкований стан. У цих випадках протягом певного періоду часу частина нікелю частково покрита більш рухливими атомами алюмінію. Таким чином, протягом певного часу існує нестабільна для цієї атомної системи форма «ball-and-cup» компонентів [2]. Крім того, колізійна взаємодія кластера-мішені зі снарядом Ag призводить до генерації радіаційних дефектів та руйнування впорядкованої структури атома в кластері за сильних нерівноважних умов протягом декількох початкових пікосекунд, що також сприяють утворенню розплаву. Таким чином, неструктурована форма, яку можна інтерпретувати як майже рідкий стан кластеру Ni-Al після взаємодії зі снарядом Ag_1 , передбачалася в цих моделюваннях. Зауважимо, що перехід до неструктурованої форми кластера також призводить до збільшення його потенційної енергії.

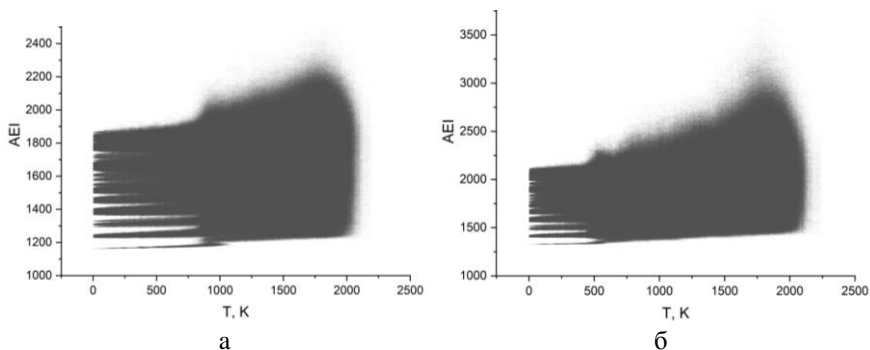


Рисунок 1 – Температурна залежність АЕІ для кластерів, що складаються з 195 атомів: а) Ni, б) Al.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Hamid I. Molecular dynamical simulations of melting behaviors of metal clusters / I. Hamid, M. Fang, H. Duan // AIP Adv. – 2015. – No. 5. – P. 047129.
2. Ferrando R. Symmetry breaking and morphological instabilities in core-shell metallic nanoparticles / R. Ferrando // J. Phys. Condens. Matter. – 2015. – No. 27. – P. 2713003.