



Актуальность: Наночастицы (НЧ) на основе Pt представляют интерес из-за их более высокой реакционной способности по отношению к органическим молекулам, что делает их полезными для электрокатализа в топливных элементах. Результаты этих исследований свидетельствуют о том, что НЧ Pt легко синтезируются с возможностью регулировать размер и форму НЧ. При определенных условиях поверхность этих НЧ обычно подвергается процессу, известному как «dealloying» или избирательная коррозия (ИК).

Цель работы: Целью исследования являлось изучение эволюции энергетического спектра биметаллических НЧ Cu-Pt в процессе ИК.

Методика моделирования: Использовались два альтернативных метода компьютерного моделирования: метод молекулярной динамики (МД) и метод Монте-Карло (МК). В качестве потенциала межатомного взаимодействия использовался потенциал сильной связи [1].

На рис. 1 представлены мгновенные конфигурации для НЧ Cu-Pt, полученные при удалении 25% от исходного числа атомов ($N=3000$).

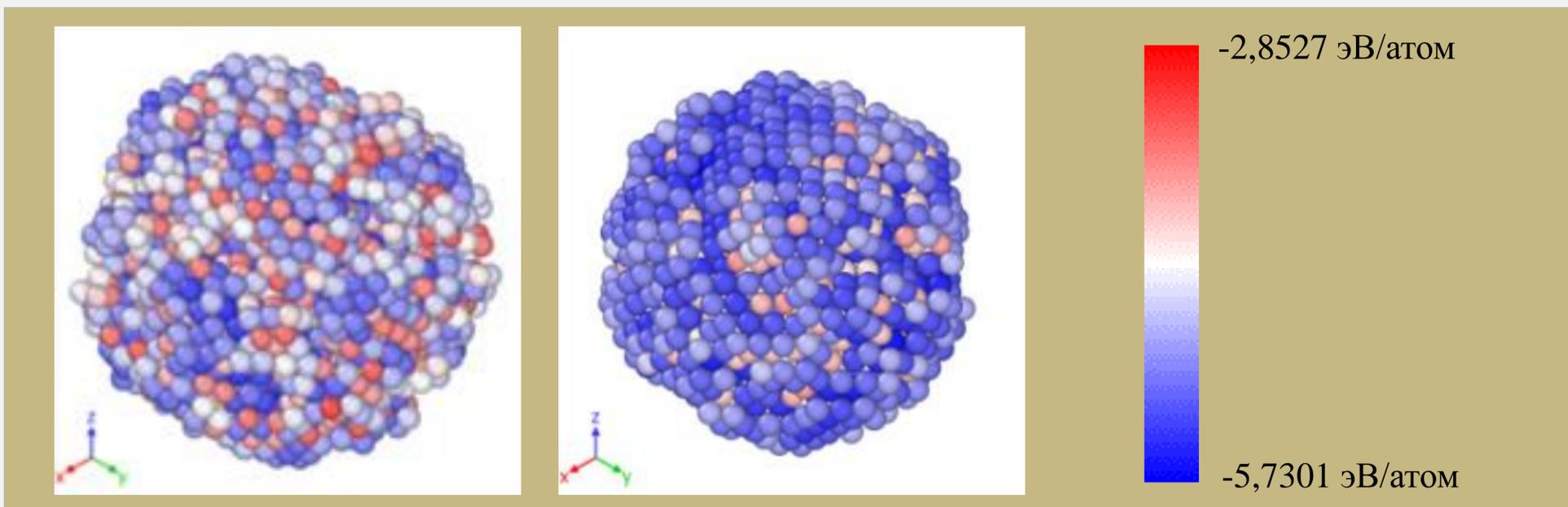


Рис. 1. Энергетический спектр биметаллических наночастиц Cu-Pt (результаты моделирования: метод МД слева, метод МК справа).

Выводы:

1. Избирательная коррозия не должна заметным образом менять состав центральной части частицы, а ее ядро отчасти сохраняет структуру бинарного наносплава.
2. Удаление атомов приводит к возрастающей степени дефектности частицы, которая приобретает поверхностную структуру, отличную от структуры наночастиц того же размера, не подвергавшихся избирательной коррозии.
3. Анализ показывает, что метод МД предсказывает обогащение поверхностного слоя НЧ атомами с большей энергией, по сравнению с данными полученными с использованием метода МК.