



ОБ УСЛОВИЯХ СТАБИЛЬНОСТИ/НЕСТАБИЛЬНОСТИ БИМЕТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОСТРУКТУР ЯДРО-ОБОЛОЧКА

Тверской государственный университет, кафедра общей физики

Автор: Веселов Алексей Дмитриевич

Руководитель: к.ф.-м.н., доцент Сдобняков Н.Ю.

Актуальность: Несмотря на важность проблемы стабильности наноматериалов, к настоящему времени отсутствует даже классификация проявлений стабильности/нестабильности наночастиц и наносистем. На протяжении последнего десятилетия большой интерес проявляется к биметаллическим наноструктурам, включая Янус-структуры и структуры ядро-оболочка, у которых центральная часть (ядро) представлено одним металлом, а оболочка – другим. Янус-структуры и структуры ядро-оболочка имеют перспективы применения в энергетике, медицине, катализе и других областях нанотехнологий. В частности, наночастицы Co(ядро)/Au(оболочка) имеют перспективы применения в магнитно-резонансной томографии, и оболочка из атомов Au должна защищать организм от токсического действия магнитного компонента, т.е. Co.

Цель работы: Проверка гипотезы о взаимосвязи между степенью стабильности наноструктур A(ядро)@B(оболочка) и спонтанной поверхностной сегрегацией одного из компонентов в бинарных наночастицах A-B с первоначально равномерным распределением компонентов и выявление возможных отклонений от этой закономерности с использованием результатов атомистического моделирования для наноструктур Co@Au, Au@Co.

Методика моделирования: метод молекулярной динамики, метод Монте-Карло, потенциал взаимодействия – потенциал сильной связи.

Ранее была выдвинута и частично подтверждена гипотеза о тесной взаимосвязи между степенью стабильности/нестабильности наноструктур A(ядро)@B(оболочка) и спонтанной поверхностной сегрегацией одного из компонентов в бинарных наночастицах A-B с первоначально равномерным распределением компонентов. Было показано, что в бинарных наночастицах Au-Co должна наблюдаться поверхностная сегрегация Au как низкоэнергетического по сравнению с Co компонента, характеризующегося более низкими значениями энергии связи и поверхностного натяжения.

В отличие от МД экспериментах в МК экспериментах оба типа наночастиц Co2500@Au2500 и Au2500(ядро)@Co2500 сохраняли структуру ядро-оболочка вплоть до $T=1800$ К (см. рис. 1).

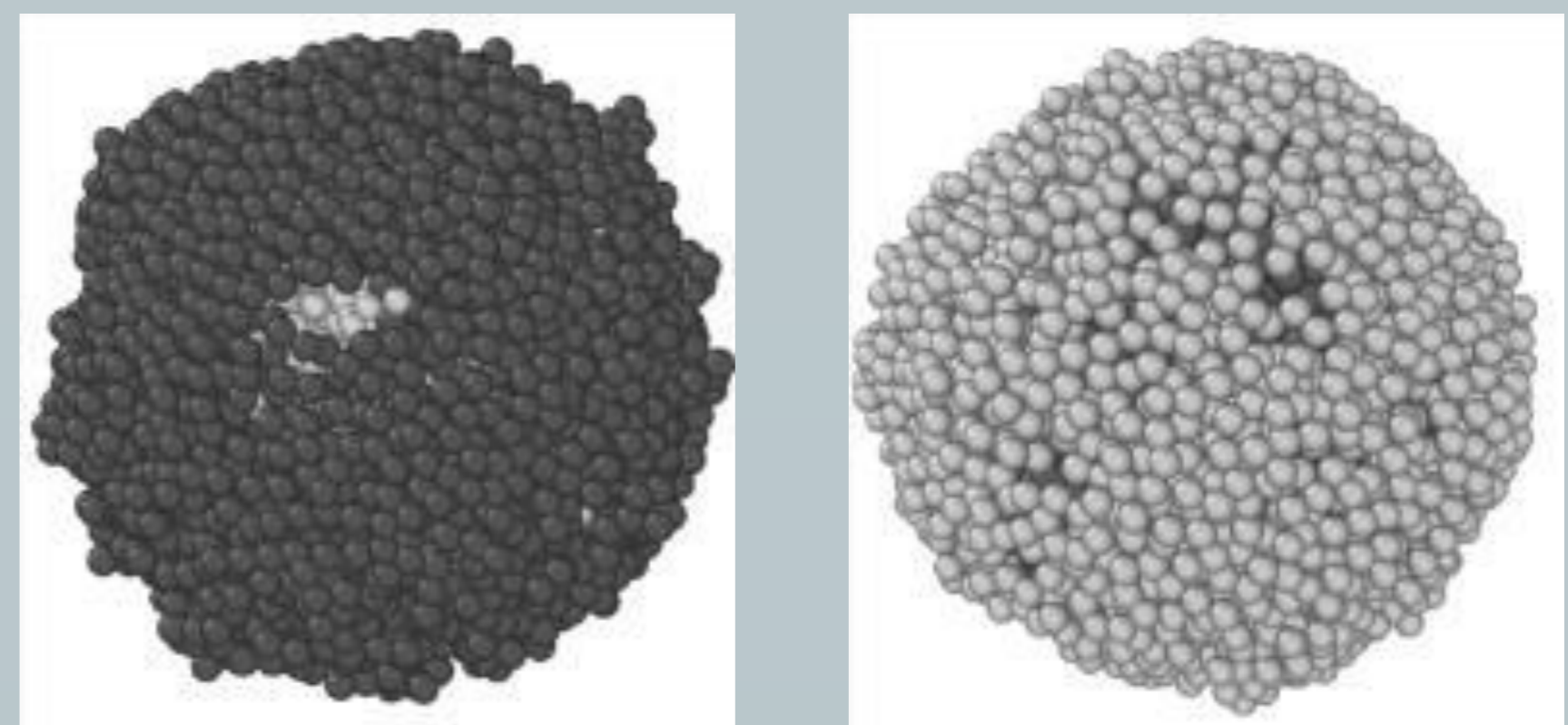


Рис. 1. Конфигурации системы Co2500/Au2500, полученные в процессе моделирования методом Монте-Карло. Левый столбец отвечает случаю Co2500(ядро)/Au2500(оболочка), правый – Au2500(ядро)/Co2500(оболочка). Атомы Au изображены темными шарами.

Выводы:

1. Таким образом, результаты атомистического моделирования наноструктур Co@Au и Au@Co подтверждают гипотезу о взаимосвязи стабильности/нестабильности наноструктур A@B и B@A со спонтанной поверхностной сегрегацией одного из компонентов бинарных наночастиц A-B с первоначально равномерным, в некотором приближении, распределением компонентов.

2. Представленные в работе результаты демонстрируют условность как понятий стабильности и нестабильности одной из наноструктур A@B или B@A, так и представлений о более и менее стабильных структурах. Действительно, до определённой температуры стабильными могут быть обе структуры, A@B и B@A. В данной работе мы совместно с научной группой проф. Самсонова В.М. предложили считать менее стабильной или просто нестабильной ту из двух альтернативных структур, которая теряет стабильность при более низкой температуре. При этом возможны различные сценарии потери стабильности. В наших экспериментах наблюдались три такие сценария:

- 1) переход структуры ядро-оболочка в бинарную наночастицу с равномерным, в некотором приближении, распределением компонентов;
- 2) переход наноструктуры A@B в Янус-структуру;
- 3) распад наночастицы A@B на нанокластеры меньшего размера.