МОДИФИКАЦИЯ ЯНУСОПОДОБНЫХ ДВУХКОМПОНЕНТНЫХ КЛАСТЕРОВ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ЧАСТИЦ Ar1 И Ar13 НИЗКИХ ЭНЕРГИЙ

Д.В. Широкорад1), Г.В. Корнич1), С.Г. Буга2),3)

1)Национальный университет «Запорожская политехника», Запорожье, Украина

2)ФГБНУ “Технологический институт сверхтвердых и новых углеродных материалов”, г. Москва, г. Троицк, Россия

3)Московский физико-технический институт (ГУ МФТИ),

Московская обл., г. Долгопрудный, Россия

Янусоподобные нанокластеры, их эволюция в оболочечные и другие упорядоченные структуры является перспективным направлением исследований в связи с применениями в катализе, наноэлектронике, фармацевтике, материаловедении /1/. В работе рассматривается эволюция янусоподобных кластеров Ni-Al, Cu-Au, Cu-Bi, состоящих из 195 атомов каждого из компонентов, при бомбардировке частицами Ar1 и Ar13 до 1.4 кэВ в рамках молекулярной динамики. Сферические распределения концентраций компонентов после 100 и 500 пс, показывают тенденцию к формированию кластеров с повышенным содержанием атомов Al, Au и Bi в поверхностном слое. При высоких энергиях Ar13, инициирующих активное распыление и перемешивание, наблюдалось маскирование разной эффективности обогащения поверхностного слоя этими элементами. Температуры при этом оказались высокими и для анализа состояния кластеров были проведены модельные эксперименты температур плавления и кипения соответствующих уединенных монокомпонентных долей в случае межатомного потенциала Акланда.

ЛИТЕРАТУРА

1. S. Granick, Janus Particle Synthesis, Self-Assembly and Applications, Cambridge, Royal Soc. of Chem., 2012, 313 p.