

КІНЕТИКА ЯНУСОПОДІБНИХ АТОМНИХ КЛАСТЕРІВ ПІД ДІЄЮ НИЗЬКОЕНЕРГЕТИЧНОГО БОМБАРДУВАННЯ

Еволюція вільних 390-атомних янусоподібних кластерів Ni-Al вздовж 100 і 500 пс під дією бомбардування снарядами Ar і Ar₁₃ з енергіями до 1,0 кеВ моделюється класичним методом молекулярної динаміки. Початкові метастабільні янусоподібні кластери мають дві монокомпонентні частини, рівні за кількістю атомів, з невеликим просторовим перекриттям. Після удару снарядів і швидкого розширення, що супроводжується розпиленням, для снарядів Ar₁ та Ar₁₃ виявляються критично різні кінетики; кластери Ni-Al поступово еволюціонують внаслідок екзотермічного змішування компонентів, при цьому спостерігається тенденція до поверхневої сегрегації атомів Al.

Температури плавлення металевих нанокластерів зазвичай нижчі, ніж точки плавлення тих самих макроскопічних матеріалів, більше того, вони можуть змінюватись немонотонно зі зменшенням розміру кластера нижче двохсот атомів [1]. Значення АЕІ (індекси атомної еквівалентності), які є сумами модулів різниці атомних радіусів-векторів, в залежності від температури кластера були розраховані в наших дослідженнях із використанням методики Берендсена. Результати показують, що процес плавлення, який руйнує атомну структуру кластера, як і очікувалося, починається з його поверхні за більш низьких температур і досягає внутрішніх областей приблизно за температур 870 і 550 К для монокомпонентних кластерів Ni та Al, що складаються з 195 атомів кожен. Різниця в точках плавлення поверхневого та внутрішнього шарів у наших розрахунках сягає понад 200 К, особливо для кластеру Ni. Моделювання бомбардування частинками Ar₁ продемонструвало, що температури кластеру Ni-Al після 100 пс еволюції вищі, ніж точки плавлення відповідних монокомпонентних кластерів Al та Ni. Більше того, температура кластера вища за точки плавлення кластерів Al і Ni вже після 5 і 15 пс при всіх енергіях удару. Тому в багатьох випадках бомбардування алюмінієва частина янусоподібного кластера демонструє більш швидкий перехід у неупорядкований стан. У цих випадках протягом певного періоду частина нікелю частково покривається більш рухливими атомами алюмінію. Таким чином, протягом деякого часу існує нестабільна для цієї атомної системи форма розподілу компонентів «ball-and-cup» [2]. Крім того, взаємодії кластера-мішені зі снарядом Ar призводить до генерування радіаційних дефектів та руйнування впорядкованої атомної структури в кластері при сильних нерівноважних умовах протягом декількох початкових пікосекунд, що також

¹ ст. викл. каф. СА та ОМ, НУ «Запорізька політехніка»

² зав. каф. СА та ОМ, НУ «Запорізька політехніка»

сприяє формуванню розплаву. Таким чином, в цих моделюваннях було передбачено неструктуровану форму, яка може бути інтерпретована як майже рідкий стан кластеру Ni-Al після взаємодії зі снарядом Ag_1 . Зауважимо, що перехід до неструктурованої форми кластера також призводить до збільшення його потенційної енергії.

Випадки зі снарядами Ag_{13} різко відрізняються. Впливи, спричинені розпиленням більшої частини атомів, призводять до значного поступового збільшення потенційної енергії протягом приблизно 10 пс, виключаючи випадок Ag_{13} з енергією 100 еВ. Також виражений ефект підвищення температури кластера з розміром бомбардуючої частинки спостерігався протягом усього часу моделювання. Це також сприяє збільшенню потенційної енергії. У випадку ударів Ag_{13} температури кластера після еволюції приблизно 15 пс, за винятком впливу низьких енергій, перевищують температуру кипіння кластеру Al, і порівняні з температурою кипіння кластеру Ni (~ 2520 К та 3200 К відповідно). Це головна причина тривалого високого виходу розпилення після завершення стадії зіткнення, особливо для компонента Al. Це можна інтерпретувати як інтенсивне випаровування, яке дещо знижує температуру кластера на тривалих періодах і супроводжується повільним збільшенням потенційної енергії. Очевидно, що за таких умов речовина кластерів знаходиться в рідкому стані з інтенсивним переходом у газовий стан. У разі низьких енергетичних впливів вихід розпилення і температура кластера мінімальні. Як результат, у цьому випадку потенційна енергія кластера після еволюції 100 пс нижче початкової, аналогічно випадкам бомбардування Ag_1 .

ПЕРЕЛІК ПОСИЛАНЬ

1. I. Hamid, M. Fang, H. Duan, Molecular dynamical simulations of melting behaviors of metal clusters, *AIP Adv.* 5 (2015) 047129. doi:10.1063/1.4918770.
2. R. Ferrando, Symmetry breaking and morphological instabilities in core-shell metallic nanoparticles, *J. Phys. Condens. Matter.* 27 (2015) 13003. doi:10.1088/0953-8984/27/1/013003.