



## Новые Материалы

Contribution ID : 10

Type : not specified

### ХИМИЧЕСКАЯ И СТРУКТУРНАЯ СЕГРЕГАЦИЯ В ТЕРНАРНЫХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОЧАСТИЦАХ: АТОМИСТИЧЕСКОЕ И ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Используя изотермическую молекулярную динамику (МД) и два типа силовых полей (метод встроенного атома [1] и потенциал сильной связи [2]), было проведено моделирование равномерного нагрева тернарных наночастиц Pt-Pd-Ni с последующим охлаждением (закалкой) нанокпель до конечной температуры 300 К [3]. Затем была исследована взаимосвязь между спонтанной сегрегацией компонентов в тернарных наночастицах Pt-Pd-Ni и стабильностью наноструктур типа ядро-оболочка Pd5000Ni5000@Pt5000, Pt5000Ni5000@Pd5000 и Pt5000Pd5000@Ni5000 [4]. Сделан вывод о взаимосвязи между более высокой стабильностью наноструктур PtNi@Pd и влиянием поверхностной сегрегации Pd в тернарных наночастицах Pt-Pd-Ni. В свою очередь, выраженная поверхностная сегрегация Pd в нано-частицах Pt-Pd-Ni объясняется тем, что именно этот компонент характеризуется наименьшим значением удельной поверхностной энергии. Более совершенный термодинамический подход к прогнозированию сегрегации в наночастицах Pt-Pd-Ni был основан на решении уравнения Батлера. Кроме того, наши недавние результаты молекулярно-динамического моделирования касаются наносплава Pt-Pd-Cu. Объектом наших молекулярно-динамических симуляций были выбраны наночастицы Pt1700Pd1700Cu5100, состоящие из 8500 атомов (радиусом около 3 нм), ввиду их потенциального применения в качестве нанокатализатора. Для анализа структурных изменений в наночастицах в процессе нагрева и охлаждения были найдены и проанализированы температурные зависимости потенциального (когезионного) члена в удельной внутренней энергии и радиусов инерции всех атомных подсистем (Pt, Pd и Cu). Локальная структура наночастиц была исследована с помощью программы Ovito [5]. Проведенные исследования показали, что нагрев наночастиц с изначально равномерным распределением компонентов приводит к поверхностной сегрегации атомов Pd. Поверхностная сегрегация Pd также характерна для конечных конфигураций, соответствующих затвердевшим нанокеплям. В свою очередь, атомы Pt наблюдались в первом (внешнем) атомном монослое до плавления наночастиц, а также во втором и нижних монослоях на всех стадиях нагрева и закалки. Мы наблюдали и описали не только химическую сегрегацию, то есть пространственное разделение компонентов частиц, но и структурную сегрегацию, то есть разделение на области (зерна) с определенной кристаллической структурой. Один из наиболее интересных результатов соответствует образованию многодвойниковой структуры и икосаэдрической морфологии в конечных конфигурациях (температура 300 К), сформированных после закалки нанокпель. Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках государственной программы в области научно-исследовательской деятельности (проект № 0817-2026-0006). 1. Zhou X.W., Johnson R.A., Wadley H.N.G. Misfit-energy-increasing dislocations in vapor-deposited CoFe/NiFe multilayers. *Physical Review B*. – 2004. – Vol. 69. – Iss. 14, № 144113 2. Cleri F., Rosato V. Tight-binding potentials for transition metals and alloys. *Physical Review B*. – 1993. – Vol. 48. – Iss. 1. – P. 22-33. 3. Samsonov V., Nepsha N., Sdobnyakov N., Talyzin I., Kolosov A., Puitov V., Savina K., Zhigunov D., Romanovski V. Chemical and structural segregation in Pt-Pd-Ni ternary nanosystems: molecular dynamics simulation. *Materials Chemistry and Physics*. – 2025. – Vol. 340, № 130827. 4. Самсонов В.М., Талызин И.В., Романов А.А., Пуйтов В.В., Жигунов Д.В., Луцай А.В., Васильев С.А., Непша Н.И., Сдобняков Н.Ю. О взаимосвязи между спонтанной сегрегацией компонентов в тернарных наночастицах Pt-Pd-Ni и стабильностью

наноструктур ядро-оболочка: молекулярно-динамическое исследование. Коллоидный журнал. – 2025. – Т. 87. – № 4. – С. 399-414. 5. Stukowski A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO—the Open Visualization Tool. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering. – 2010. – Vol. 18. – Iss. 1, № 015012.

**Primary author(s) :** Prof. СДОБНЯКОВ, Николай (ТвГУ)

**Presenter(s) :** Prof. СДОБНЯКОВ, Николай (ТвГУ)