



Новые Материалы

Contribution ID : 18

Type : not specified

ПЕРЕХОД В ИКОСАЭДРИЧЕСКИЕ ИЗОМЕРЫ ПРИ ПРЕДПЛАВЛЕНИИ НАНОКЛАСТЕРОВ ГЦК-МЕТАЛЛОВ: МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

С использованием программы LAMMPS, изотермической молекулярной динамики и метода погруженного атома был изучен структурный переход кубооктаэдрических нанокластеров Ag, Al, Au, Cu, Ni, Pb, Pd и Pt в икосаэдрические изомеры в ходе нагрева КО-нанокластеров с тремя различными скоростями 0,03, 0,15 и 0,30 К/пс.

Primary author(s) : КАРАКЕЯН, Игорь (г. Тверь, ТвГУ, ФТФ)

Presenter(s) : КАРАКЕЯН, Игорь (г. Тверь, ТвГУ, ФТФ)