Тема работы: Создание упорядоченных структур из нанодисперсных частиц конденсирующихся из газовой фазы

Состав коллектива:
Гафнер Юрий Яковлевич, дфмн, профессор, ФГБОУ ХГУ им. Н.Ф. Катанова
Байдышев Виктор Сергеевич, кфмн, доцент, ФГБОУ ХГУ им. Н.Ф. Катанова
Чепкасов Илья Васильевич, кфмн, доцент, ФГБОУ ХГУ им. Н.Ф. Катанова

Информация о гранте: РФФИ, 15-42-04164 р_сибирь_а «Создание упорядоченных структур из нанодисперсных частиц конденсирующихся из газовой фазы», рук. Гафнер Ю.Я., 2015-2016.
РФФИ, 16_32_00125_мол_а «Исследование механизмов синтеза и термических свойств однородных и раздельнофазных двухкомпонентных наночастиц», рук. Чепкасов И. В., 2016-2017.

Научное содержание работы:

1. Постановка задачи

Разработка экспериментально-теоретических основ получения наноматериалов с новыми физико-механическими свойствами путем создания в них упорядоченных структур из нанодисперсных порошков металлов, оксидов, нитридов и карбидов. Для оптимизации производства частиц требуемой формы и строения будет произведен детальный компьютерный анализ процесса их формирования, а также проведена оценка воздействия на наночастицы внешних факторов различной природы. Установление теоретическими методами взаимосвязи между строением, физико-химическими и каталитическими свойствами нанопорошков. Развитие представлений о генерировании необходимых для протекания каталитических реакций дефектных состояний, которые могут быть сформированы в условиях приготовления наночастиц.

2. Современное состояние проблемы

В настоящее время существует множество способов получения наночастиц, таких как методы механохимического дробления, плазмохимические методы, некоторые варианты химического, фотохимического, радиационного восстановления и метод конденсации из газовой фазы. Широко применяются методы, использующие для синтеза водную среду. Данные подходы удобны благодаря способности воды к стабилизации различных ионов и молекул. К ним относятся восстановление ионов металлов с помощью электромагнитного излучения, сонохимиии или химических восстановителей. Большой процент наноматериала синтезируется с использованием метода получения необходимого продукта в пламени [1] и вследствие испарения материала под действием лазера в очень коротком фемтосекундном диапазоне [2].

Среди всего разнообразия методов получения одним из перспективных способов синтеза нанодисперстных частиц является метод испарения и конденсации в атмосфере инертного газа [3-6]. Простая масштабируемость к промышленным нормам и высокая частота материала с необходимыми свойствами (электропроводность, прочность, пластичность), выгодно отличает частицы, синтезированные газофазным способом, от частиц, полученных другими методами, например механическим размолом.

С использованием такого рода синтеза теоретически возможно создание наночастиц с контролируемым химическим составом [7], степенью дефектности, внутренней структурой и фиксированным распределением по размеру. Кроме этого, при синтезе из газовой среды легче осуществляется контроль основных параметров экспериментальных установок [8].

Однако проблема подготовки кластеров с определенным размером, строением и физическими свойствами технически все же не решена. Производство макроскопического количества (несколько миллиграмм) кластеров заданного размера является не тривиальным делом, решенным только для нескольких сортов наночастиц. Примером могут служить C_60 кластеры или другие фуллерены, а также некоторые кластеры золота, например Au_55 получаемые химическим путем. В отличие от благородных металлов синтез многих других металлов химическими методами представляется все же довольно затруднительным [9]. Поэтому развитие индустриально остро востребованных технологий производства нанокластеров требует подробного изучения систем нанометрового диапазона и, в особенности, поведения и эволюции свободных кластеров.

Некоторые из методов промышленного производства наночастиц поддаются непосредственному компьютерному моделированию и, в частности, синтез нанокластеров из газовой фазы способом конденсации. Несмотря на принципиальную возможность, работ по компьютерному анализу такого синтеза известно очень мало, что связано со сложностью происходящих процессов [10]. Нами используется собственная методика компьютерной имитации формирования нанокластеров из высокотемпературной газовой среды, позволяющая с большой степенью достоверности прогнозировать возможные результаты синтеза [11].

Немаловажное значение имеют вопросы фундаментального характера. Так практически отсутствуют физические модели образования гетерогенных наночастиц синтезированных испарением и конденсацией в потоке охлаждающего инертного газа. Химические способы получения наночастиц, в частности металлов, хорошо известны, но при этом, наночастицы образующиеся в результате реакций восстановления или ионного обмена, всегда содержат ионы и продукты реакции, отделение которых представляет трудную, а порою неразрешимую задачу. Наночастицы меди окисляются, поэтому покрытие Cu герметичной оболочкой является важной задачей. Например, в [13] осуществлялась стабилизация наночастиц Cu слоями графена. Медные

наночастицы формировались в пламени горелки при разложении металлоорганического прекурсора. Синтез происходил в атмосфере азота. В присутствии ацетилена на поверхности наночастиц образовалась графеновая оболочка. Стабилизированные таким образом частицы Cu могут стать привлекательной альтернативой частицам Ag, Au.

Сплав системы серебро-кремний (Ag-Si) представляет интерес с точки зрения фундаментальной науки и с технологических приложений как модель эвтектической системы. Использование серебра (Ag) в микроэлектронике обусловлено его высокой проводимостью и высокой устойчивостью к образованию силицидов. Большая фоточувствительность Ag, огромный плазмонный резонанс в видимой области спектра обуславливают его расширяющееся применение в оптоэлектронике. Происходит усиление более чем на порядок интенсивности люминесценции центров свечения Pr3+, La и других веществ [14,15] при добавлении к ним Ag/Si композитных наночастиц. Усиление обусловлено резонансной передачей энергии поверхностных плазмонов композитных Ag/Si наноструктур этим центрам люминесценции. При использовании наночастиц серебра в качестве биосенсоров возникает единственная, но очень серьезная проблема: наночастицы с поверхности выделяют токсичные для клеток ионы серебра. Однако, оболочка из диоксида кремния не влияет на световые свойства биосенсоров на основе наночастиц серебра, если частицы покрыты ею герметично [16], кроме того оболочка наночастиц уменьшает их размеры и агломерацию. Поэтому в последнее время синтез, изучение свойств композитных Ag/Si наноструктур, в том числе оболочечных наночастиц, привлекает большое число исследователей.

Количественные характеристики, обусловленные высокопроизводительным физическим способом получения гетерогенных наночастиц, их химическая чистота, а также их разнообразие позволяют предполагать, что комплекс их исследованных физико-химических свойств, перечисленных в заявке, будет соответствовать, результатам, полученным в ведущих исследовательских лабораториях мира, а в некоторых случаях их превосходить.

1. R. Strobel, S.E. Pratsinis Flame aerosol synthesis of smart nanostructured materials, Journal of Materials Chemistry 17 (2007) 4743–4756.
2. Energy consumption during nanoparticle production: How economic is dry synthesis? / N. Osterwalder [et al.] // J. of Nanoparticles Research. – 2006. –Vol. 8. –P. 1–9
3. Giesen A., Kowalik A. and Roth P. Iron-atom condensation interpreted by a kinetic model and a nucleation model approach. // Phase transition. – 2004. – 77. – P.115.
4. Freund H.J., Bauer S.H. Homogenious nucleation in metal vapors. 2. Dependence of the heat of condensation on cluster size. // J. Phys. Chem. – 1977. – 81. – P.994.
5.Siegel R.W., Ramasamy S., Hahn H., Zongquan Li, Ting Lu and Gransky R. Synthesis, characterisation and properties of nanophase TiO2. // J. Mater. Res. – 1988. – 3. – P.1367.
6. Stappert S., Rellinghaus B., Acet M. and Wassermann E.F. Gas-Phase preparation of L10 ordered FePt nanoparticles. // J. Cryst. Growth. – 2003. – 252. – P.440.
7. T. Ohno, Journal of Nanoparticle Research 4, 255 (2002).
8. E. Kauffeldt and Th. Kauffeldt, Journal of Nanoparticle Research 8, 477 (2006).
9. Kan-Sen Chou and Kuo-Cheng Huang, Journal of Nanoparticle Research 3, 127 (2001).
10. В.М. Иевлев, Е.В. Шведов, ФТТ 48, В.1, 133 (2006).
11.R. Meyer, J.J. Gafner, S.L. Gafner et al., Phase Transitions 78, №1-3, 35 (2005).
12. А.И. Ряснянский, B. Palpant, S. Debrus, U.Pal, А.Л. Степанов. Нелинейно-оптические свойства наночастиц золота, диспергированных в различных оптически-прозрачных матрицах //ФТТ.-2009.-Т.51,№1.-С.52-56.
13. M. Zhao, L.Zheng, Na Li, Li Yu. Fabrication of hollow silica spheres in an ionic liquid micro-emulsion // Materials Letters 62. - 2008. P.4591–4593.
14. Shujuan Zhuo, Mingwang Shao, Liang Cheng, Ronghui Que, Shujuan Zhuo, Dorthy Duo Duo Ma, and Shuit-Tong Lee. Surface-Enchanced Fluorescence of Praseodymium ions (Pr3+) on Silver /Silicon Nanostructure //Appl. Phys. Lett. - 2010. V.96, I.10. P.103108.
15. Shu-Juan Zhuo, Ming-Wang Shao, Liang Cheng, Rong-Hui Que, Dorthy Duo Duo Ma, and Shuit-Tong Lee. Silver/silicon nanostructure for surface-enchanced fluorescence of Ln3+(Ln/Nd, Ho and Er) //J. Appl. Phys. - 2010. 108, I. 3. P.034305-0343405-4.
16. Hao Chen. Structure and phase transformation of nanocrystalline and amorphous alloy thin films // Dissertation. DAI-B 67/11, p. 6668, May 2007. University of Illinoice at Urbana-Champaign. Publication Number 324814.

3. Подробное описание работы, включая используемые алгоритмы.

Одной из основных линий проекта является исследование методам молекулярной динамики (МД) с использованием tight-binding потенциалов процессов конденсации из высокотемпературной газовой фазы наночастиц с целью определения их строения и ряда физических свойств. Кроме этого значительная часть исследований будет посвящена отработке методик постконденсационной обработки синтезированных наночастиц.

Параметры моделирования будут выбраны таким образом, чтобы отразить условия различных методов синтеза частиц из газовой фазы. Первый набор параметров будет выбран таким образом, чтобы так можно более точно имитировать условия конденсации в инертном газе (IGC - inert gas condensation). В таких установках сверхнасыщенный металлический пар образуется методом термического испарения или методом DC sputtering.

Это ведет к высокой начальной плотности металлического пара, который далее перемещается в окружающую инертную атмосферу.

Начальной точкой процесса конденсации наночастиц из газовой фазы будет конфигурация, содержащая несколько десятков тысяч атомов исходного вещества распределенных в кубической ячейке с использованием периодических граничных условий. Расстояние между атомами будет больше радиуса обрезания, который для используемого потенциала взаимодействия (группа потенциалов сильной связи) составил 11-12 боровских радиусов. Кроме этого, начальная скорость атомов будет распределена случайным образом, согласно распределению Максвелла-Больцмана, при начальной температуре порядка 1000 К. Все это дает основания полагать, что имитируемая система очень быстро теряет память о своем первоначальном распределении.

Важным моментом моделирования процессов конденсации является взаимодействие системы с тепловым резервуаром. Так как при формировании кластеров высвобождается значительное количество энергии связи, то такое взаимодействие представляется необходимым для устранения физически некорректного значительного роста температуры в системе. В ситуации прямого эксперимента такого рода взаимодействие происходит путем контакта с атмосферой из некоторого инертного газа. При описанном здесь моделировании будет применен стохастический термостат Андерсена для охлаждения атомов инертного газа (Ar) до требуемой по условию эксперимента температуры. Энергия, высвобожденная при конденсации атомов исходного вещества, в результате столкновений передается атомам аргоновой атмосферы и далее удаляется термостатом. Уравнения движения интегрируются с помощью скоростного алгоритма Верлета с шагом по времени в 2 фс.

Для моделирования, описанного выше, характерным является то, что начальная плотность металлического пара много выше плотности инертного газа. В противоположность этому также будет проведено моделирование с иным набором параметров, при котором начальная плотность металлического пара оказывается много меньше плотности инертного газа. Подобное моделирование имитирует ситуацию в ударной трубе (shock tube), в которой молекулы на начальном этапе разбавляются атмосферой инертного газа еще до своего разложения на атомы.

Понижение начальной плотности металла существенным образом меняет роль инертного газа. Основанием для этого является то, что для формирования связанных пар атомов необходимым является третий участник столкновения, который и удаляет избыточную энергию. В случае большой плотности частиц металла во многих случаях этим третьим атомом является также атом металла. В случае же низкой плотности подобные процессы становятся все менее и менее вероятными и столкновения между двумя атомами металла и одним атомом инертного газа являются доминирующим механизмом димерного формирования, что может оказать существенное воздействие на размер и строение синтезируемых частиц.

4. Полученные результаты

Методом молекулярной динамики (МД) были изучены базовые механизмы, ответственные за формирование нанокластеров в процессах синтеза из газовой фазы. В первую очередь, из полученных результатов следует, что скорость охлаждения газовой смеси напрямую влияет на размер получаемых частиц при неизменном общем размере системы (всего 85000 атомов). При уменьшении скорости охлаждения в 5 раз среднее количество атомов в частице увеличивалось примерно в 1,5 раза. Такая зависимость вполне закономерна, так как при медленном охлаждении в системе достаточно кинетической энергии для того, чтобы частицы хаотично двигались и сталкивались между собой, формируя довольно большие кластеры. Размер таких частиц в данных компьютерных экспериментах превышал 10 нм, и синтезированные при таких условиях частицы могли быть образованы объединением между собой более 20 мелких кластеров.

Также в результате анализа систем, сконденсированных с различными начальными параметрами, были выявлены условия наиболее вероятного формирования цепочечных и сферических кластеров CuAu. Больше всего кластеров цепочечной формы синтезируется в системах с наибольшей концентрацией атомов металла.

С понижением скорости отвода тепла наблюдается переход первичных жидких кластеров к плотноупакованным структурам вне зависимости от конечных температур охлаждения. На первый взгляд, такой результат выглядит вполне ожидаемым, однако при детальном сравнении структур было выявлено, что при высокой конечной температуре процентное соотношение декаэдров с уменьшением скорости охлаждения падает, в отличие от показателей для этой же структуры при T_f = 77 К. Это связано, прежде всего с тем, что декаэдрическая структура является промежуточной между икосаэдрической и плотноупакованной (ГЦК, ГПУ) и в условиях, когда в системе достаточно кинетической энергии, частицы используют её для перестройки своей внутренней структуры.

При изучении структур частиц, сконденсированных из газовой фазы, было выявлено, что наиболее благоприятные условия для образования кластеров с плотноупакованной ГЦК или ГПУ структурами возникают при установившейся в системе скорости охлаждения $U = 0{,}8*10^{11}$ К/с и конечной температуре T_f = 373 К, и расстоянии в начальный момент моделирования 15 a_B (a_B - радиус Бора)между атомами. Форма таких плотноупакованных частиц в основном цепочечная, что связано с процессами агломерации при свободном хаотическом движении частиц в системе.

Для синтеза наночастиц с икосаэдрической структурой наиболее благоприятные условия создаются при скорости охлаждения $U = 0{,}8*10^{11}$ К/с и конечной температуре T_f = 373 К, и расстоянии в начальный момент моделирования 30 a_B между атомами. Таким образом, после проведения серии моделирований были определенны наиболее оптимальные условия синтеза наночастиц CuAu с необходимыми свойствами (форма, размер, структура).

Также для изучения влияния буферного газа на процессы формирования наночастиц было проведено моделирование конденсации наночастиц CuAu в атмосфере аргона. Количество атомов буферного газа соответствовало общему количеству атомов сплава. Рассматривались системы с начальными концентрациями атомов металлов n_1=0.25×10^25 *м^-3* и n_2=1×10^25 *м^-3*. Первый случай соответствовал малой степени перенасыщения пара и в этом режим использовался для изучения непосредственно процессов нуклеации, во втором случае мы стремились исследовать процессы образования более крупных кластеров. Анализ кинетики формирования кластеров показал, что при высокой степени перенасыщения начального металлического пара процесс конденсации протекает стремительным образом: так на временах порядка *t*=15 нс в системе формируется максимальное количество кластеров, преимущественно это димеры и тримеры, и дальнейшая эволюция происходит путем их объединения в более крупные агрегаты.

Иная картина наблюдалась при малой степени перенасыщения начального состояния пара. В этом случае процесс образования начальных кластерных «зародышей» (димеров и тримеров) занимает довольно продолжительное время. Система достигала максимального количества кластеров только на временах порядка *t*=110 нс, можно утверждать, что процессы нуклеации в этом случае являются преобладающими на данном временном промежутке. По результатам моделирования были определены скорости роста кластеров. В первом приближении средний размер кластера является линейной функцией времени, исходя из этого, для рассмотренных концентраций средние скорости роста наночастиц соответственно равны J_1=1.85×10^8 *атомов/с* и J_2=36.5×10^8 *атомов/с.*

Для всех полученных наночастиц, в конце процесса моделирования, был определен стехиометрический состав кластеров. Отметим, что для малых кластеров содержащих менее 1000 атомов, наблюдается значительная дисперсия состава наночастицы. Для частиц содержащих более 1000 атомов (диаметр частицы *D* >> 3 *нм*) состав кластеров стремится к фазе $Cu_{0.75}Au_{0.25}$ и с увеличением размера наночастицы дисперсия состава уменьшается.

Для определения термодинамических условий образования ядро-оболочечных (ядро - Cu, оболочка - Si) частиц была проведена серия компьютерных экспериментов. В первом случае рассматривалась гомогенная конденсация при начальном равномерном распределении атомов Cu и Si. По результатам данного моделирования можно сделать вывод, что при любой рассмотренной начальной концентрации формирующиеся наночастицы представляют собой неупорядоченный сплав атомов Cu и Si, количество атомов Cu в нанокластере близко к количеству атомов Si.

Далее, моделировалось осаждение кремниевой оболочки на предварительно полученные частицы меди диаметром *D* = (3-6) нм. Частица ядра, предварительно выдержання при температуре *T*=100 K, помещалась в пары кремния, имеющие температуру *T* = 2000 K, температура буферного газа составляла *T* = 300 K. Было получено, что столкновение кристаллического ядра меди диаметром до *D* =6 нм с низкоэнергетическими атомами кремния приводит к его нагреванию, и при температуре ядра порядка T_{Cu}= 700 K, наблюдается диффузия кремния в медное ядро. Основная причина значительного нагревания ядра заключается в энергии, выделяющейся при образовании связи Si-Cu. Оценки, проведенные для металлов дают значение порядка 2-4 эВ/атом, при этом охлаждение атомами буферного газа уменьшает энергию частицы на всего 0,04 – 0,2 эВ/атом. В третьем случае для уменьшения частоты столкновения атомов кремния с кристаллическим ядром, ядро помещалось в систему, в которой предварительно была проведена конденсация паров кремния в течении *t*= 2 нс. В этом случае, в системе успевали сформироваться малые кластеры кремния и средняя температура достигала значения T_{Si} = 1500 K. В конце процесса моделирования формировались частично покрытые Si наночастицы меди. Отметим, что структура ядра формирующейся частицы оставалась кристаллической, а также имелась четкая граница раздела фаз меди и кремния, данные частицы оставались стабильными и с течением времени остывали до температуры буферного газа *T* = 300 K. В результате проведенного моделирования было показано, что при гомогенной конденсации из атомарных паров формируются только частицы аморфного сплава Cu-Si. Одним из возможных механизмов формирования ядро-оболочечных частиц может являться механизм осаждения малых кластеров Si на предварительно сформированное металлическое ядро Cu.

При изучении термодинамической стабильности сферических наночастиц неупорядоченного сплава Cu_xAg_{1-x} различного состава и размера (D=3-5 нм, x=10-90 % было получено, что для малых частиц диаметром D=3нм, содержащих (0 – 20 и 80-100) % атомов Ag, при нагревании наблюдался классический фазовый переход, с характерным скачком потенциальной энергии в точке плавления. В этом случае зависимость температур плавления наночастиц от концентрации атомов (Ag) качественно согласуется с фазовой диаграммой для объемной системы CuAg и имеет нелинейный характер. Для частиц с содержанием Ag в диапазоне от (30-70) %, при термическом воздействии наблюдалась совершенно иная картина. В этом случае, на калориметрических кривых отсутствовал явный скачок потенциальной энергии, соответствующий плавлению наночастицы. Процесс плавления реализовывался следующим образом: при достижении некоторой температуры наблюдался массовый выход атомов Ag на поверхность наночастицы, с образованием внешнего слоя, что приводило к уменьшению поверхностной энергии наночастицы и ее переходу в аморфное состояние. При дальнейшем нагревании частицы данного размера постепенно переходили в жидкое состояние. С увеличением размера наночастиц до *D*=5 нм данный эффект не наблюдался. В этом случае процессы плавления, для всех рассмотренных концентраций протекали классическим образом, со скачком потенциальной энергии в точке фазового перехода.

В результате исследования термодинамических свойств наночастиц CuAu различного строения было

определено, что покрытие поверхности наночастицы атомами золота является более термодинамически выгодным вариантом строения частицы. Также при исследовании наночастиц при различных температурах было определено, что наночастицы CuAu всех четырех вариантов строения остаются относительно структурно стабильными примерно до *T*=700 К, при более высоких температурах наблюдаются активные процессы диффузии атомов меди и золота, что приводит к формированию сплава медь-золото, со смешанным составом поверхности.

В результате изучения термостабильности наночастиц Pt-Pd различного строения и размера, было определено, что наночастицы размером 1.5 нм являться наиболее структурно нестабильными из всех рассмотренных случаях Так, даже при температуре 500-700 К частицы всех возможных четырех вариантов построения претерпевают структурные переходы в икосаэдричесую фазу. В случае наночастиц размером 2 нм, перестройка из ГЦК в икосаэдрическую (Ih) и декаэдрическую (Dh) фазу наблюдалось лишь нескольких случаях ($Pd_{55}@Pt_{266}$, $Pd_{177}@Pt_{144}$, $Pd_{225}@Pt_{96}$, $Pt_{135}@Pd_{186}$). При размере D > 2.5 нм никаких изоморфных переходов не наблюдалось во всех четырех вариантах строения и различного соотношения атомов во всем исследуемом диапазоне температур. Также, было определено, что в наночастицах разного строения процесс перераспределения атомов различных сортов происходят по нескольким сценариям. Так в наночастицах биметаллического сплава (Pt-Pd) и наночастицах с Pd-ядро/Pt-оболочка (Pd@Pt) процесс перераспределение атомов происходит в результате диффузии атомов палладия из объема к поверхности и диффузии атомов Pt в обратном направлении - с поверхности в объем. А в результате отжига «Янус» - частицы происходят диффузия атомов Pd по поверхности всей частицы, в результате чего они постепенно переходят на поверхность платиновой полусферы и формируют вокруг нее оболочку из нескольких атомных слоев палладия. В наночастицах размером более 2.5 нм в результате трансформации «Янус»-частицы происходит формирование несимметричной Pt@Pd наночастицы с центром ядра смещенным относительно центра оболочки.

При определении влияния варианта строения частиц Pt-Pd на электронные свойства была проведена серия DFT расчетов. Было определенно, что во всех рассматриваемых случаях на поверхности частиц локализуется отрицательный заряд, причем в случаях Pt-ядро/Pd-оболочка и Pd-ядро/Pt-оболочка, движение границы раздела Pt-Pd и Pd-Pt из центра частицы на поверхность приводит к противоположным результатам. Так в случае Pt-ядро/Pd-оболочка уменьшение количество слоев палладия на увеличивающемся ядре из платины приводит к увеличению количества электронов на поверхности, в отличии от случая Pd-ядро/Pt-оболочка.

Также было исследовано, как термоактивируемые структурные переходы могут повлиять на электронные свойства наночастиц. Было определенно, что при структурном переходе ГЦК→Ih существенно изменяется картина распределения заряда на поверхности. Исследование электронных свойств икосаэдрических наночастиц PtPd показало увеличение среднего поверхностного заряда по сравнению с ГЦК PtPd наночастицами. Согласно нашим расчетам, увеличение среднего поверхностного заряда для икосаэдрических монодисперсных наночастиц Pt и Pd по сравнению с ГЦК-структурой составляет 27% (от -0,0357 для Pt (ГЦК) до -0,0454 для Pd (Ih) и 39% (от -0,0208 для Pd (ГЦК) до -0,0289 для Pd (Ih)). Среди всех исследованных наночастиц наибольший избыток электронной плотности на поверхности наблюдался в икосаэдрической частице, где ядро Pd покрывалось монослоем Pt, и при структурном переходе средний поверхностный заряд увеличивался на 18% (от -0,0635 для Pd @ Pt (ГЦК) до -0.0749 для Pd @ Pt (Ih)). Для Ih частиц, где монослой Pd покрывает Pt ядро, заряд изменился с +0.0015 для Pt @ Pd (ГЦК) до -0.0001 для Pt @ Pd (Ih).

6. Эффект от использования кластера в достижении целей работы

Большая часть выполненных работ была проведена с использованием пакета для молекулярно-динамических исследований LAMMPS, который позволяет эффективно использовать многопроцессорные вычисления, в том числе технологию GPU. В частности, проведение численного моделирования методом молекулярной динамики для систем содержащих 85000 атомов на обычных рабочих станциях невозможно вследствие большого объема требуемой памяти, и времени счета. Поэтому использование кластера является определяющим для успешного достижения поставленных целей.

7. Перечень публикаций, содержащих результаты работы

1. Chepkasov I. V. et al. Stability and Electronic Properties of PtPd Nanoparticles via MD and DFT Calculations //The Journal of Physical Chemistry C. – 2018. – Т. 122. – №. 31. – С. 18070-18076. (Импакт-фактор: 4.484)
2. Chepkasov I. V., Gafner Y. Y., Gafner S. L. Synthesis of Cu nanoparticles by condensation from the gas phase // Phase Transitions. – 2017. – Т. 90. – №. 6. – С. 590-597. (Импакт-фактор: 1.028)
3. Чепкасов И. В., Гафнер Ю. Я., Высотин М. А., Редель Л. В. Исследование процессов плавления наночастиц Pt-Pd различного типа // Физика твердого тела. – 2017. – Т. 59. – №. 10. – С. 2050-2055. (Импакт-фактор: 0.727)
4. Чепкасов И.В. Оценка стабильности структуры палладий-платиновых наночастиц различного типа // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов [Текст]: межвуз. сб. науч. тр. / под общей редакцией В.М. Самсонова, Н.Ю. Сдобнякова. Тверь: Твер. гос. ун-т, 2016. - Вып. 8. - С.379-386

5. Чепкасов И.В. Анализ термической стабильности наночастиц Cu@Si // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов [Текст]: межвуз. сб. науч. тр. / под общей редакцией В.М. Самсонова, Н.Ю. Сдобнякова. Тверь: Твер. гос. ун-т, 2016. - Вып. 8. - С.387-392
6. Чепкасов И.В. Исследование конденсации наночастиц CuAu из газовой фазы. МД – моделирование // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов [Текст]: межвуз. сб. науч. тр. / под общей редакцией В.М. Самсонова, Н.Ю. Сдобнякова. Тверь: Твер. гос. ун-т, 2016. - Вып. 8. - С.393-397
7. Байдышев В. С., Картавых Е. А. Теоретическое исследование механизмов синтеза из газовой фазы двухкомпонентных наночастиц Cu@Si // Наноматериалы и технологии: Сборник трудов международной научно-практической конференции (Улан-Уде, 22-26 августа 2016 г.) / науч.ред. Б. Б. Дамдинов, В. В. Сызранцев. - Улан-Уде: Издательство БГУ, 2016. – С. 248-253.
8. Байдышев В.С., Цура В.А., Чепкасов И.В. Моделирование образования наночастиц CuAu в процессе газофазного синтеза // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов: межвуз. сб. науч. тр. / под общей редакцией В.М. Самсонова, Н.Ю. Сдобнякова. – Тверь: Твер. гос. ун-т, 2017. – Вып. 9. – С. 64-70.
9. Чепкасов, И.В., Артемова Н.Д., Байдышев В.С. Термодинамическая стабильность наночастиц CuxAg1-x // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов: межвуз. сб. науч. тр. / под общей редакцией В.М. Самсонова, Н.Ю. Сдобнякова. – Тверь: Твер. гос. ун-т, 2017. – Вып. 9. – С. 500-504.
10. Чепкасов, И.В., Баев А.Ю., Байдышев В.С. Оценка стабильности наночастиц CuAu различного типа // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов: межвуз. сб. науч. тр. / под общей редакцией В.М. Самсонова, Н.Ю. Сдобнякова. – Тверь: Твер. гос. ун-т, 2017. – Вып. 9. – С. 505-509.
11. Чепкасов И.В., Джамалханова А.М. Термодинамические свойства наночастиц «ядро-оболочка» Cu@Si // Наноматериалы и технологии: Сборник трудов международной научно-практической конференции (Улан-Уде, 22-26 августа 2016 г.) / науч.ред. Б. Б. Дамдинов, В. В. Сызранцев. - Улан-Уде: Издательство БГУ, 2016. – С. 244-247
12. Чепкасов И.В., Гафнер Ю.Я. Термическая стабильность наночастиц Cu@Si // Перспективы развития фундаментальных наук: труды XIIIМеждународной конференции студентов и молодых ученых. Россия, Томск, 26-29 апреля 2016г./ под ред. И.А. Курзиной, Г.А. Вороновой. - Томск: Изд-во Национального Исследовательского Томского политехнического университета, 2016. - С. 316-318.
13. Чепкасов И.В., Высотин М.А., Редель Л.В. Структура и стабильность палладий-платиновых наночастиц различного типа // Нанотехнологии функциональных материалов (НФМ'16): Труды международной научно-технической конференции. - СПб.: Изд-во Политехн. ун-та. 2016. 674-680 с.
14. Байдышев В.С., Картавых Е.А., Гафнер Ю.Я. Компьютерное моделирование процесса образования двухкомпонентных наночастиц Cu@Si из газовой фазы // Фундаментальные проблемы радиоэлектронного приборостроения / Материалы Международной научно-технической конференции «INTERMATIC–2016», 21–25 ноября 2016 г., Москва. / Под ред. академика РАН А.С. Сигова. –М.: Галлея-Принт, 2016, часть 1. – С. 67-70.
15. Картавых Е.А., Цура В.А., Байдышев В.С. Исследование термодинамической стабильности нанокластеров CuAu // Фундаментальные проблемы радиоэлектронного приборостроения / Материалы Международной научно-технической конференции «INTERMATIC–2017», 21–23 ноября 2017 г., Москва. / Под ред. академика РАН А.С. Сигова. – М.: МИРЭА, 2017, часть 1. – С. 104-107.
16. Чепкасов И.В., Баев А.Ю. Компьютерное моделирование термического воздействия на наночастицы Pd-Pt различного типа // Фундаментальные проблемы радиоэлектронного приборостроения / Материалы Международной научно-технической конференции «INTERMATIC–2017», 21–23 ноября 2017 г., Москва. / Под ред. академика РАН А.С. Сигова. – М.: МИРЭА, 2017, часть 1. – С. 120-123.
17. Картавых Е. А. Моделирование процессов формирования двухкомпонентных янус-частиц Cu@Au в процессе конденсации из высокотемпературной газовой фазы // XIII Российская ежегодная конференция молодых научных сотрудников и аспирантов «Физико- химия и технология неорганических материалов». Москва. 17-20 октября 2017 г. / Сборник трудов. – М: ИМЕТ РАН, 2017. – С. 113-115.
18. Baidyshev V. S., Chepkasov I. V., Artemova N. D. Study of thermal stability of disordered alloy AgxCu1-x nanoparticles by molecular dynamic simulations // J. Phys.: Conf. Ser. 2018, 1015, 032021 (WoS, Scopus)
19. Chepkasov I. V., Baidyshev V. S., Baev A.Y. Structural properties of CuAu nanoparticles with different type. Molecular dynamic simulations // J. Phys.: Conf. Ser. 2018, 1015, 032022 (WoS, Scopus)
20. Chepkasov I. V., Baidyshev V. S., Tsura V.A. Molecular dynamic simulation of melting copper-silicon nanoparticles // J. Phys.: Conf. Ser. 2018, 1015, 032023(WoS, Scopus)
21. Байдышев В.С. Компьютерное моделирование процесса формирования ядро-оболочечных наночастиц Cu@Si // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2018. – Вып.10. – С. 64-71. (ВАК)
22. Чепкасов И.В., Байдышев В.С., Высотин М.А., Попов З.И. Исследование процесса напыление тонких пленок силицида железа на поверхность кремния // Четвертый междисциплинарный научный форум с

международным научный форум участием «Новые материалы и перспективные технологии» . Москва. 27-30 ноября 2018 г./ Сборник материалов. ТОМ I - М: ООО «Буки Веди», 2018 г. С. 529-530

23. Высотин М.А., Чепкасов И.В., Попов З.И. Исследование свойств интерфейса тонких пленок силицида марганца и поверхности Si (111) // Четвертый междисциплинарный научный форум с международным научный форум участием «Новые материалы и перспективные технологии». Москва. 27-30 ноября 2018 г./ Сборник материалов. ТОМ I - М: ООО «Буки Веди», 2018 г. С. 112-114.