

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
СУМСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

ФІЗИКА, ЕЛЕКТРОНІКА,
ЕЛЕКТРОТЕХНІКА

ФЕЕ: 2016

**МАТЕРІАЛИ
та програма**

НАУКОВО-ТЕХНІЧНОЇ КОНФЕРЕНЦІЇ

(Суми, 18–22 квітня 2016 року)



Суми
Сумський державний університет
2016

Моделювання плавлення біметалевих наночастинок методами молекулярної динаміки

Реброва К.С., студент; Кравченко Я.О., аспірант
Сумський державний університет, м. Суми

Металеві наночастинок широко застосовуються в багатьох галузях наноелектроніки як складові частини різноманітних пристроїв [1]. На теперішній час існує велика кількість методів синтезу та фабрикації наночастинок різних металів потрібної форми та будови [1, 2]. Більшість фізичних, хімічних та електричних властивостей наночастинок сильно залежать від розмірів, структури та хімічного складу, тому температурна стабільність таких об'єктів важливим питанням наноелектроніки [2, 3].

Одними з найпоширеніших металів, що використовуються для фабрикації наночастинок є золото і срібло. Зазначені метали мають гранецентровану кубічну кристалічну решітку зі сталими 0.4078 (Au) та 0.4086 (Ag) нанометрів, а отже можуть відносно легко поєднуватись в нанорозмірних сполуках [2].

У запропонованій роботі був досліджений процес температурного плавлення біметалевої Au-Ag наночастинок за допомогою моделювання методами класичної молекулярної динаміки. Поведінку досліджуваної наночастинок було розглянуто в діапазоні температур 300-1300 К. Виходячи з отриманих з моделювання даних, для зазначених температур були розраховані кількісні параметри, що описують структурний стан наночастинок, а саме значення показника Ліндемана а також функції радіального розподілу атомів до і після плавлення. З розрахованих параметрів було визначено що плавлення біметалевої Au-Ag наночастинок відбувається при температурі приблизно 900 К.

Керівник: Борисюк В.М., докторант

1. R.G. Chaudhuri, S. Paria, *Chem. Rev.* **112**, 2373 (2012).
2. M. Tsuji, N. Miyamae, et al., *Crystal Growth Design* **6**, 1801 (2006).
3. H.A. Alarifi, M. Atis, et al., *J. Phys. Chem. C* **117**, 12289 (2013).