







кластера кремния, что также приводило к увеличению его температуры, однако, частота этих столкновений значительно ниже, и формирующаяся частица успевала охлаждаться атомами буферного газа. Максимальная температура ядра в этом случае не превышала  $T_{cu}=700$  K. В конце процесса моделирования формировалась частично покрытые Si частица Cu (рис. 3 — справа). Отметим, что структура ядра формирующейся частицы сохранялась кристаллической, а также имелась четкая граница раздела фаз, данные частицы оставались стабильными и с течением времени остывали до температуры буферного газа  $T=300$  K.

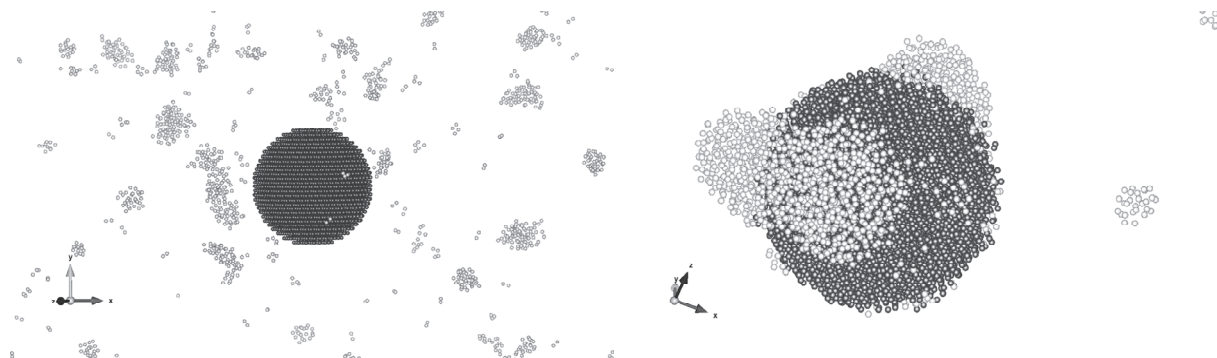


Рис. 3. Слева — частица меди диаметром  $D=4$  нм помещенная в область конденсации, начальная концентрация атомом кремния  $n=(240) \cdot 10^{23} \text{ м}^{-3}$ , мгновенная температура  $T_{si}=1500$  K, температура частицы-ядра  $T_{cu}=100$  K. Справа — через  $t=3$  нс моделирования, мгновенная температура  $T_{cu}=600$  K,  $T_{si}=1000$  K.

Таким образом, в работе проведено моделирование процесса формирования двухкомпонентных наночастиц системы Cu-Si. Показано, что при гомогенной конденсации из атомарных паров формируются только частицы сплава. Одним из возможных механизмов формирования ядро-оболочечных частиц может являться механизм осаждение малых кластеров Si на сформированное металлическое ядро Cu.

Представляемая работа была выполнена при финансовой поддержке  
Российского фонда фундаментальных исследований,  
номера грантов 16-32-00125 мол\_а и 15-42-04164 р\_сибирь\_а.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Jun Qua, Huaqing Lia, b, John J. Henry Jr.a, Surendra K. Marthaa, Nancy J. Dudneya, Hanbing Xua, Miaofang Chia, Michael J. Lancea, Shannon M. Mahurinc, Theodore M. Besmanna, Sheng Daic Self-aligned Cu–Si core–shell nanowire array as a high-performance anode for Li-ion batteries // Journal of Power Sources. - 2012. - V. 198, - P. 312-317.
2. Номоев А.В., Бардаханов С.П. Синтез, строение наночастиц металл/полупроводник Ag/Si, полученных методом испарения-конденсации // Письма в ЖТФ. - 2012. - Т. 38, вып. 8. - С. 46-53.
3. Воронцов А.Г., Гельчинский Б.Р., Коренченко А.Е. Кинетика и энергетические состояния нанокластеров в начальной стадии процесса гомогенной конденсации при высоких степенях пересыщения // ЖЭТФ. - 2012. - Т. 142, вып. 5 (11). - С. 897-907.
4. Jelinek B., Groh S., Horstemeyer M.F., Houze J., Kim S.G., Wagner G.J., Moitra A., and Baskes M.I. Modified embedded atom method potential for Al, Si, Mg, Cu, and Fe alloys // Phys. Rev. B. - 2012. - V/ 85. - P. 245102-1 — 245102-18.
5. Yasuoka K., Matsumoto M. Molecular dynamics of homogeneous nucleation in the vapor phase. I. Lennard-Jones fluid – J. Chem. Phys, 1998, 109, p. 8451.
6. Plimpton S. Fast parallel algorithms for shot-range molecular dynamics. // J. Comp Phys, 1995, V. 117, p. 1.
7. Grammatikopoulos P., Steinhauer S., Vernieres J. Singh V., Sowwan M. Nanoparticle design by gas-phase synthesis // Advances in Physics: X, 2016, V. 2, P. 1-20.