

Расчетные значения относительного размера манжеты, двугранного угла для системы $Au_{381} - Ag_{381}$ в окрестности температуры плавления

Величина	$d = 0,0$ нм	$d = 0,3$ нм	$d = 0,6$ нм	$d = 0,9$ нм
x/r	0,55	0,56	0,61	0,64
$\psi, ^\circ$	113	114	117	122
γ_{gb}/γ_s	1,1	1,08	1,05	0,97

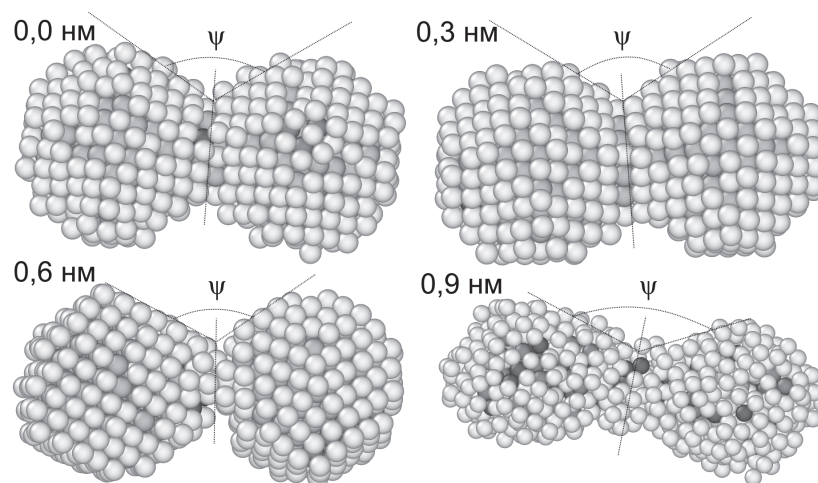


Рис. 2. Мгновенные конфигурации системы $Cu_{381} - Cu_{381}$ при различных начальных расстояниях между частицами.

Полученные зависимости двугранных углов манжеты от величины расстояния между нанокластерами в начальной конфигурации позволяют оценить размерную зависимость отношения энергии границы нанокластера к поверхностной энергии. С ростом относительного размера манжеты, значение этого параметра уменьшается. При определенном расстоянии между частицами формирование манжеты в компьютерном эксперименте не наблюдается. Впервые это было отмечено в [4]. Кроме того, в [4] установлено, что характер коалесценции показывает, что геометрические размеры манжеты (двугранный угол, «эффективная длина») зависят от расстояния между наночастицами в начальной конфигурации. Кроме того, от расстояния между наночастицами в начальной конфигурации зависит температура, при которой формируется манжета, а также температура, при которой происходит полное спекание наночастиц.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 16-33-00742-мол-а), а также при финансовой поддержке Минобрнауки (проект № 3.2448.2014/К).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Asoro M.A. Coalescence and sintering of Pt nanoparticles: *in situ* observation by aberration-corrected HAADF STEM. // Nanotechnology. – 2010, V. 21, P. 025701-1-025701-6.
2. Gupta R.P. Lattice relaxation at a metal surface. // Physical Review B. – 1981, V. 23, № 12, P. 6265-6270.
3. Metropolis N., Rosenbluth A.W., Rosenbluth M.N., et al. Equation of state calculations by fast computing machines. // Journal of Chemical Physics. – 1953, V. 21, № 16, P. 1087-1092.
4. Колосов А.Ю., Сдобняков Н.Ю., Комаров П.В., Соколов Д.Н., Зыков Т.Ю., Хашин В.А. Моделирование процесса коалесценции наночастиц золота методом Монте-Карло. // 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, 2012. Вып. 4, С. 129-142.