

Термостабильность каталитических нанокластеров $\text{Tm}_{147-561}:\text{Ni}, \text{Pd}$ (2D-спейсеров)

© Полухин Валерий Анатольевич,* Курбанова Эльмира Джумшудовна⁺
и Ригмант Людмила Климентьевна

Институт металлургии УрО РАН. Ул. Амундсена, 101. г. Екатеринбург, 620012. Россия.

Тел.: (343) 232-91-14. E-mail: kurbellya@mail.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: структурные трансформации, нанокластер, МД-моделирование, размерные эффекты, термостабильность.

Аннотация

В данной работе с использованием физически обоснованных потенциалов проведено компьютерное молекулярно-динамическое моделирование нагрева гранецентрированной кубической решетки (ГЦК) нанокластеров $\text{Tm}_{147-561}:\text{Ni}, \text{Pd}$ и были выявлены специфические терморазмерные эффекты потери структурной стабильности, инициированной изомеральной трансформацией ГЦК-кубиктаэдров в икосаэдры.

Содержание

1. Введение
2. Компьютерное моделирование и оценка межатомного взаимодействия в нанокластерах
3. Анализ результатов моделирования методом молекулярной динамики термической эволюции нанокластеров
4. Структурные трансформации