Исследование процессов кристаллизации наночастиц Si-Al и Si-Au методом молекулярной динамики

А. И. Зеленина1,2, И.С. Гордеев1,2, Л.Н. Колотова2

1Московский физико-технический институт  
(национальный исследовательский университет)  
2Объединённый институт высоких температур РАН

Кремниевые наночастицы, легированные золотом и алюминием, демонстрируют различные свойства, важные для создания биосенсоров, поддержания флуоресценции, высокоскоростной обработки данных, в нелинейной оптике. Все физические свойства наночастиц объясняются особенностями кристаллической структуры [1].

В данной работе было проведено исследование кристаллизации расплавленных трёхмерных частиц. В результате расчётов получены объекты, имеющие сложную зернистую структуру. Была рассчитана пороговая скорость охлаждения, необходимая для кристаллизации [2] в широком диапазоне концентрации примесных металлов. В данной работе также рассмотрены некоторые свойства кристаллической структуры.

Полученные данные согласуются с изображениями, полученными в ходе эксперимента для Si-Au наночастиц. Результаты работы позволят создавать реальные объекты с физическими свойствами, заданными наперёд. Все расчёты проведены с использованием нового потенциала (разработанного для пакета LAMMPS [3]), который был создан в прошлом году и корректно описывает подобные системы [4].

Литература

1. *Larin A.O.[et al.]* Plasmonic nanosponges filled with silicon for enhanced white light emission // Nanoscale. 2020. V. 12. P. 1013–1021.

2. *Makarov S. [et al.]* Resonant silicon nanoparticles with controllable crystalline states and nonlinear optical responses // Nanoscale. 2018. V. 10. P. 11403–11409.

3. *Plimpton S.J.* Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics // Journal of Computational Physics. 1995. V. 117. P. 1-19.

4. *Starikov S. [et al.]* Optimized interatomic potential for study of structure and phase transitions in Si-Au and Si-Al systems // Computational Materials Science. 2020. V. 184. P. 109891.