

## ДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КЛАСТЕРОВ СЕРЕБРА. ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Д.Л. Тытик<sup>а</sup>, В.И. Кузьмин<sup>б</sup>, А.Ф. Гадзаов<sup>б</sup>, Д.К. Белашенко<sup>в</sup>,  
А.Н. Сиренко<sup>в</sup>.

<sup>а</sup> *Институт физической химии и электрохимии РАН, 119991, Москва, Ленинский проспект, 31, ltm@phyche.ac.ru*

<sup>б</sup> *Московский государственный институт радиотехники, электроники и автоматики, 119454 г. Москва, проспект Вернадского, 78*

<sup>в</sup> *Национальный исследовательский технологический университет «Московский институт стали и сплавов», 119049, Москва, Ленинский пр-т, 4.*

Проведенное численное моделирование магических кластеров серебра (147, 309 и 561 атом) в вакууме показало различие в свойствах кластеров в зависимости от выбранного потенциала взаимодействия. Сравнительный анализ разных потенциалов выявил преимущество модели погруженного атома при изучении поведения наночастиц в области низких температур [1]. Молекулярно-динамическое (МД) моделирование магических кластеров серебра показывает, что вещество при низких температурах ( $< 700$  К) в нанометровом диапазоне размеров находится в особом фазовом состоянии со свойствами твердого тела и жидкости (регулярное строение, плотность близка к плотности расплава). Ранее в МД экспериментах был обнаружен стационарный режим колебаний атомов в магических кластерах серебра [2].

С целью изучения характеристик режима стационарных колебаний был проведен детальный анализ функций среднего квадрата смещения для всех атомов 147-атомного кластера. Использование методики обработки временных рядов [3] (разделение движения на колебательную и трендовую составляющие), позволило определить фононный спектр кластера. Обработка функций среднего квадрата смещения всех атомов по методу скользящего среднего привела к разбиению на группы атомов, которые движутся скоррелировано сотни пикосекунд вблизи правильных кристаллографических позиций.

### Литература

1. Белашенко Д.К., Сиренко А.Н., Тытик Д.Л. Влияние формы межчастичного потенциала на структурные превращения в металлических кластерах. // Российские нанотехнологии, 2009, том 4, № 9-10, СС.14-21.
2. Кузьмин В.И., Тытик Д.Л., Белашенко Д.К., Сиренко А.Н. Строение кластеров серебра с магическими числами атомов по данным молекулярной динамики. // Коллоидный журнал, том 70, №3, 2008, с.316-329.
3. Кузьмин В.И., Гадзаов А.Ф. Методы выявления почти-периодов в данных с трендом. // Естественные и технические науки. 2009., №2. СС. 302-305.