

Механічні властивості біметалевих нанодротів: дослідження методами комп'ютерного моделювання

Б. Наталіч, Д. Захарова, У. Швець, В. Борисюк

*Сумський державний університет
вул. Римського-Корсакова, 2, 40007 Суми, Україна
e-mail: v.borisyuk@phe.sumdu.edu.ua*

Проведено моделювання трьох зразків біметалевих нанодротів зі структурою ядро-оболонка під дією деформації розтягування і стискання методами класичної молекулярної динаміки. Розрахунки взаємодії між атомами в досліджуваних зразках були виконані з використанням моделі зануреного атому. Для вивчення механічних властивостей нанодротів були застосовані числові процедури деформації розтягування та стискання, під час яких отримані криві навантаження. Механічні напруження в зразках обчислені за допомогою теореми віріалу. Були розраховані модулі пружності для всіх досліджуваних нанодротів за розтягування та стискання.

Ключові слова: молекулярна динаміка, нанодріт, ядро-оболонка, деформація

1. Вступ

Стійкість матеріалу до механічних пошкоджень, що можуть бути спричинені різними чинниками: зовнішній вплив, механічний контакт деталей та компонент у певному механізмі тощо – є важливим параметром, який доцільно враховувати під час проектування новітніх пристроїв. Зазначена властивість стає ще більш вирішальною у випадку, коли йдеться про такі, що проектуються та створюються з використанням сучасних нанотехнологій та наноматеріалів, оскільки експериментальне дослідження механічних параметрів наноматеріалів є надзвичайно складним (див. [1–3]), а іноді і взагалі неможливим, завданням, зважаючи на надзвичайно маленькі розміри досліджуваних зразків. Зокрема, металеві наночастинки, зазвичай, характеризуються фізичними параметрами, що відрізняються від аналогічних значень, одержаних для відповідних металів [4].

У запропонованій роботі були розглянуті такі типи наноматеріалів, як біметалеві нанодроти зі структурою ядро-оболонка (англ. Core@Shell) [5–9]. Металеві нанодроти є розповсюдженими наноматеріалами, які завдяки своїм покращеним, порівнюючи з макроаналогами, властивостям, мають багато перспективних застосувань у

пристроях наноелектроніки. Останніми десятиліттями вони широко використовуються як провідники, як структурні елементи у логічних пристроях, в блоках пам'яті, як сенсори для детектування летючих біологічних і хімічних токсинів. Окрім цього, покращені механічні властивості, зокрема міцність та гнучкість, роблять металеві наноструктури перспективними матеріалами для підсилення композитних матеріалів [10–12].

Застосована в роботі методика дає змогу в рамках числового експерименту та теоретичних розрахунків одержати результати, які, зазвичай, потребують проведення значної кількості лабораторних випробувань. Одержані в роботі криві навантаження та механічні параметри можуть бути використані в подальших експериментальних та теоретичних дослідженнях фізичних властивостей металевих наночастинок, а також для проектування компонентів пристроїв наноелектроніки, які в процесі роботи зазнають механічного впливу (мембрани, приводи руху тощо).

2. Комп'ютерна модель міжатомної взаємодії в зразках біметалевих нанодротів зі структурою ядро-оболонка

Під час моделювання процесів деформації металевих нанодротів взаємодія між атомами була описана потенціалом міжатомної взаємодії, що відповідає методу зануреного атома (англ. ЕАМ (Embedded atom method)) [13, 14]. Підхід ЕАМ часто використовується для моделювання металевих наночастинок різного хімічного складу методами класичної молекулярної динаміки і, як відомо, реалістично відтворює основні структурні та фізичні властивості металів і сплавів.

У межах зазначеного потенціалу повна потенціальна енергія кристалу може бути представлена у вигляді суми двох доданків, перший із яких описує парну взаємодію, а другий – взаємодію через електронну густину:

$$U = \frac{1}{2} \sum_{i,j,i \neq j} \varphi(r_{ij}) + \sum_i F(\rho_i), \quad (1)$$

де $\varphi(r_{ij})$ – енергія парної взаємодії між атомами i і j на відстані r_{ij} ; $F(\rho_i)$ – енергія занурення, тобто енергія, необхідна для розміщення атома i в ділянці простору з електронної густиною ρ_i .

Кожний доданок рівняння (1) має аналітичний вираз, підібраний апроксимацією даних, що були розраховані квантово-механічними методами [13]. Відповідно до зазначеної апроксимації парну енергію взаємодії між парою атомів можна представити у вигляді:

$$\varphi(r) = \frac{A \cdot \exp \left[-\alpha \left(\frac{r}{r_e} - 1 \right) \right]}{1 + \left(\frac{r}{r_e} - \kappa \right)^{20}} - \frac{B \cdot \exp \left[-\beta \left(\frac{r}{r_e} - 1 \right) \right]}{1 + \left(\frac{r}{r_e} - \lambda \right)^{20}}, \quad (2)$$

де r_e – рівноважна відстань між парою атомів заданого типу; A , B , α , β , κ , λ – числові коефіцієнти.

Для розрахунку енергії занурення залежно від електронної густини $F(\rho_i)$ потрібно виконати такі кроки. Спочатку необхідно розрахувати електронну густину ρ_i :

$$\rho_i = \sum_{i,j \neq i} f(r_{ij}), \quad (3)$$

де $f(r_{ij})$ – функція, що задає локальну електронну густину поблизу атома i , яку обчислюють за формулою:

$$f(r) = \frac{f_e \cdot \exp \left[-\beta \left(\frac{r}{r_e} - 1 \right) \right]}{1 + \left(\frac{r}{r_e} - \lambda \right)^{20}}. \quad (4)$$

Вираз (4) має аналогічну форму, що і другий доданок у формулі (2), з такими самими значеннями коефіцієнтів β і λ . Далі, електронна густина $F(\rho_i)$ обчислюється за одним із трьох, наведеним нижче виразів, залежно від значення ρ_i :

$$F(\rho) = \sum_{i=0}^3 F_{ni} \left(\frac{\rho}{\rho_n} - 1 \right)^i, \quad \rho < \rho_n, \rho_n = 0,85\rho_e, \quad (5)$$

$$F(\rho) = \sum_{i=0}^3 F_i \left(\frac{\rho}{\rho_e} - 1 \right)^i, \quad \rho_n \leq \rho < \rho_0, \rho_0 = 1,15\rho_e, \quad (6)$$

$$F(\rho) = F_e \left[1 - \ln \left(\frac{\rho}{\rho_e} \right) \right] \cdot \left(\frac{\rho}{\rho_e} \right)^\eta, \quad \rho_0 \leq \rho. \quad (7)$$

Визначення функції електронної густини $F(\rho_i)$ у такий спосіб забезпечує більш точне відтворення фізичних і структурних властивостей матеріалу в усьому діапазоні значень ρ_i .

Сили взаємодії між атомами різних металів можуть бути обчислені за допомогою моделі ЕАМ для сплавів [13]. Відповідно до останньої парна енергія взаємодії $\varphi^{ab}(r_{ij})$ між атомами двох типів a і b може бути розрахована як:

$$\varphi^{ab}(r) = \frac{1}{2} \left(\frac{f^b(r)}{f^a(r)} \varphi^{aa}(r) + \frac{f^a(r)}{f^b(r)} \varphi^{bb}(r) \right). \quad (8)$$

Аналitична форма необхідних для моделювання функцій та числові значення коефіцієнтів, що входять до рівнянь (1)–(8), для різних металів подані в літературі [13,14].

У представлені роботі були досліджені зразки Ag@Pd, Pd@Ag і Pd@Pt біметалевих нанодротів зі структурою ядро-оболонка під час деформації. Були розглянуті випадки деформації розтягування та стискання з розрахунком механічних напружень і побудовою відповідних кривих навантаження. За цими залежностями обчислювали модуль пружності для кожного зразка. Так само під час моделювання були одержані поточні атомістичні конфігурації зразків у процесі деформації.

Вибір хімічного складу зразків зумовлений тим, що срібло, паладій і платина добре поєднуються в різних сполуках, оскільки мають гранецентровані кубічні кристалічні ґратки зі сталими $a_{Ag} = 0,4086$ нм, $a_{Pd} = 0,3890$ нм та $a_{Pt} = 0,3920$ нм

відповідно. Крім того, різні види наноструктур із використанням срібла та паладію широко застосовуються в наноелектроніці та можуть бути отримані різними методами [15–18].

Моделювання відбувалося для зразків біметалевих нанодротів Ag@Pd, Pd@Ag і Pd@Pt, що мали форму прямокутного паралелепіпеда довжиною 240 нм, 241 нм і 236 нм, відповідно. Для створення початкової конфігурації кожного зі зразків атоми металів ядра та оболонки розміщували у вузлах відповідної ідеальної кристалічної ґратки, з певним значенням сталої ґратки, так, щоб утворений біметалевий нанодріт мав форму паралелепіпеда та структуру ядро-оболонка. Після чого проводили витримку зразків протягом 10^4 ітерацій без застосування процедури деформації. За цей час атоми в ділянці контакту займали рівноважну конфігурацію відповідно до потенціалу міжатомної взаємодії. Загальний вид початкових атомістичних конфігурацій досліджуваних нанодротів показаний на рис. 1.

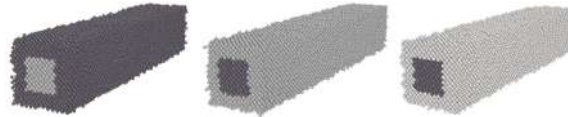


Рис. 1: Початкова атомістична конфігурація нанодротів Ag@Pd, Pd@Ag і Pd@Pt зліва направо відповідно.

У початковій конфігурації зразка атоми металів розміщувалися у вузлах гранецентрованої кубічної ґратки з відповідними значеннями сталої ґратки. Відстані між атомами у двох зовнішніх атомних шарах на кожному зразку були фіксованими, щоби запобігти релаксації під час деформації та забезпечити відповідні граничні умови.

Для вивчення динамічної поведінки системи під навантаженням до зразка була застосована процедура розтягування, для якої розраховували залежності напруження від деформації.

За деформації зразка механічні напруження обчислювалися з використанням теореми віріалу [19], як

$$\sigma_{ij} = \frac{1}{V} \sum_{\alpha=1}^N \left(\frac{1}{2} \sum_{\beta=1}^N r_{\alpha\beta}^i f_{\alpha\beta}^j - m^\alpha v_i^\alpha v_j^\alpha \right), \quad (9)$$

де i і j – компоненти декартових координат; α, β – атомні індекси; $r_{\alpha\beta}^i, f_{\alpha\beta}^j$ – відповідні векторні компоненти відстаней і сил між атомами α і β ; m – атомна маса; V – об'єм зразка.

Отже, обчисливши відповідні компоненти швидкостей і сил міжатомної взаємодії для заданої деформації ϵ , можна одержати криву навантаження $\sigma(\epsilon)$.

Моделювання було проведено з використанням термостату Берендсена [20] для підтримки температури зразків на рівні $T = 300$ К. Комп'ютерна схема моделювання деформації була розроблена з використанням програмного пакету для методів класичної молекулярної динаміки LAMMPS [21].

3. Моделювання деформації розтягування

Для вивчення механічних властивостей біметалевих нанодротів Ag@Pd, Pd@Ag і Pd@Pt була проведена вищеписана числова процедура моделювання розтягування та розраховані відповідні криві навантаження й атомістичні конфігурації системи за різних деформацій. Залежність механічних напружень від деформації наведена на рис. 2.

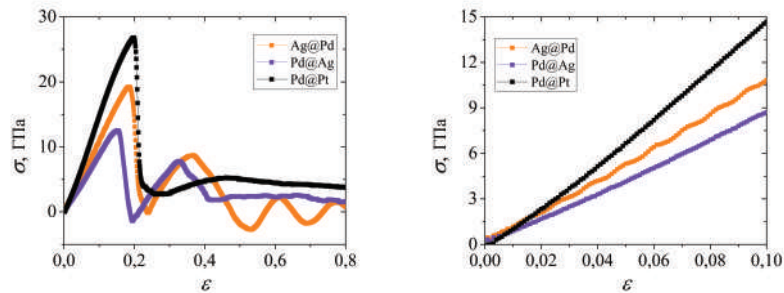


Рис. 2: Криві навантаження для біметалевих нанодротів Ag@Pd, Pd@Ag і Pd@Pt для моделювання деформації розтягування. Загальний вигляд (ліва панель) та збільшена ділянка, що відповідає пружній деформації, яка використовувалася для лінійної апроксимації (права панель)

Одержані криві навантаження (рис. 2) мають типову форму з лінійною ділянкою на початку, що відповідає пружній деформації зразків, та подальшою нелінійною частиною, що відповідає пластичній деформації. Критичне значення механічного напруження, після якого зразок зазнає пластичної деформації, для всіх розглянутих зразків було в межах значень деформації $0,1 \leq \epsilon \leq 0,2$. Лінійна апроксимація пружної частини кривих навантаження дає значення модуля пружності $E = 110$ ГПа, $E = 87,5$ ГПа, $E = 153,7$ ГПа для зразків Ag@Pd, Pd@Ag і Pd@Pt, відповідно. Одержані значення можна порівняти з довідковими значеннями модуля Юнга для чистих металів Ag, Pd та Pt, які становлять 83 ГПа, 121 ГПа та 168 ГПа відповідно [22].

Атомістичні конфігурації нанодротів під час деформації розтягування наведені на рис. 3–5. Так, після точки, що відповідає межі міцності, вздовж зразка з'являються декілька ділянок пластичної деформації (рис. 3). Нанодріт Ag@Pd зберігає структуру ядро-оболонка в більшій частині зразка під час пластичної деформації та подальшого руйнування. За збільшення значень деформації в одній із ділянок утворюється одиничний розрив, що призводить до руйнування зразка та послаблення механічних напружень. Однак у зразку залишаються нерелаксовані до вихідної ГЦК структури ділянки пластичної деформації (нижня панель на рис. 3).

Зразки Pd@Ag і Pd@Pt (рис. 4 і 5) так само зберігають структуру ядро-оболонка під час пластичної деформації. Зазначимо, що пластична деформація та руйнування зразків Pd@Ag і Pd@Pt розвиваються дещо за різними сценаріями. Так, для Pd@Ag нанодроту характерна окрема ділянка пластичної деформації (див. рис. 4), що надалі переходить до локальної ділянки руйнування оболонки зразка за значних деформацій. На відміну від цього, для Pd@Pt нанодроту вздовж зразка з'являються

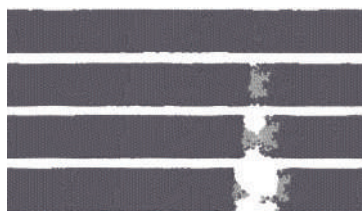


Рис. 3: Атомістичні конфігурації Ag@Pd нанодоту для деформації 0,1; 0,17; 0,18 і 0,19 зверху донизу відповідно

кілька ділянок пластичної деформації (див. рис. 5), де за більших значень деформації відбуваються характерні розриви оболонки.

Як видно з наведених вище рисунків, кристалічна структура з гранецентрованою кубічною ґраткою зберігається для більшої частини зразків, тоді як ділянки аморфного стану формуються в ділянці руйнування лише Ag@Pd нанодоту. Проте, на відміну від Ag@Pd нанодоту, для зразків Pd@Ag і Pd@Pt утворення пластичних ділянок, що передують руйнуванню, і саме руйнування зразка не спостерігаються. Натомість відбувається подальше збільшення деформації нанодотів із руйнацією лише оболонки обох зразків.



Рис. 4: Атомістичні конфігурації Pd@Ag нанодоту для деформації 0,1; 0,2; 0,3 і 0,4 зверху донизу відповідно.



Рис. 5: Атомістичні конфігурації Pd@Pt нанодоту для деформації 0,1; 0,2; 0,3 і 0,4 зверху донизу.

4. Моделювання деформації стискання

Для детальнішого дослідження механічних властивостей досліджуваних нанодотів було проведено моделювання деформації стискання. Відповідна комп'ютерна

процедура так само була реалізована з використанням програмного пакета LAMMPS [21].

Атомістичні конфігурації нанодротів під час деформації стискання наведені на рис. 6. Видно, що під час деформації стискання зразки так само зберігають структуру ядро-оболонка. Нанодроти Ag@Pd і Pd@Ag стискаються, не порушуючи зазначеної структури, тоді як для Pd@Pt нанодроту в одній із ділянок аморфного стану за більших деформацій утворюється одиничний розрив оболонки.

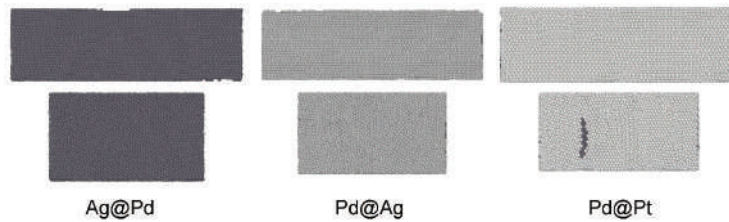


Рис. 6: Атомістичні конфігурації досліджуваних нанодротів за деформації 0,1 (верхня панель) і 0,2 (нижня панель)

Криві навантаження, одержані для деформації стискання, представлені на рис. 7. Можна бачити (рис. 7), що криві навантаження так само мають типовий вигляд із лінійною ділянкою пружної деформації та нелінійні ділянки, що відповідають пластичній деформації та руйнуванню. Водночас лінійна ділянка залежностей спостерігається за помітно менших значень деформації проти випадку деформації розтягування (див. залежності на рис. 2). Окрім цього, ділянки кривих навантаження для пластичної деформації так само суттєво відрізняються від відповідних залежностей, одержаних для розтягування.

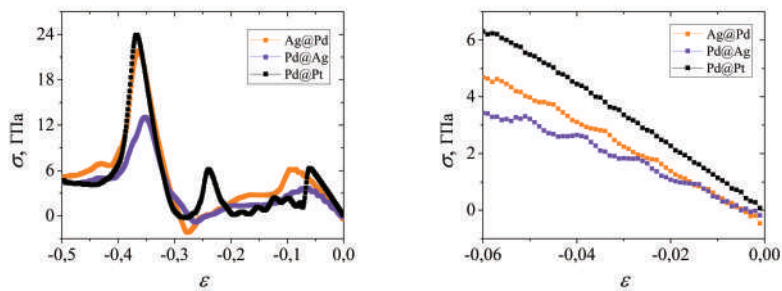


Рис. 7: Криві навантаження для біметалевих нанодротів Ag@Pd, Pd@Ag і Pd@Pt під час моделювання деформації стискання. Загальний вигляд (ліва панель) та збільшена ділянка, що відповідає пружній деформації, яка використовувалася для лінійної апроксимації (права панель)

Лінійна інтерполяція пружної частини кривих навантаження дає значення модуля пружності $E = 87,5$ ГПа, $E = 63,5$ ГПа, $E = 107,9$ ГПа для зразків Ag@Pd, Pd@Ag і Pd@Pt відповідно. Одержані значення пружних параметрів для стискання

відрізняються від значень для розтягування. Така поведінка, найімовірніше, зумовлена різними граничними умовами для процедур стискання та розтягування.

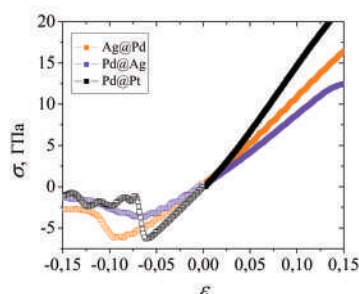


Рис. 8: Загальний вигляд кривих навантаження для біметалевих нанодротів Ag@Pd, Pd@Ag і Pd@Pt для деформацій розтягування та стискання

На рис. 8 наведені криві навантаження, одержані під час розтягування та стискання для того, щоби порівняти поведінки зразків за різних типів деформації, побудовані для низьких значень деформації $-0,15 \leq \epsilon \leq 0,15$. Як видно з рисунка, відносна величина кута нахилу лінійної частини зберігається для кожного з розглянутих Ag@Pd, Pd@Ag і Pd@Pt зразків під час розтягування та стискання. За такої умови для кожного із зазначених зразків спостерігається зменшення кута нахилу лінійної частини, і, відповідно, модуля пружності під час стискання проти розтягування.

Висновки

За результатами комп'ютерного моделювання для зразків біметалевих нанодротів Ag@Pd, Pd@Ag і Pd@Pt зі структурою ядро-оболонка були побудовані криві навантаження для деформації розтягування та стискання. Шляхом лінійної апроксимації пружних ділянок одержаних залежностей розраховані модулі пружності досліджуваних зразків.

Варто зазначити, що в загалом для розрахунків механічних параметрів певного зразка можна очікувати, що кінцевий результат залежатиме від багатьох чинників: розміри зразка, швидкість деформації, способи вимірювання, температура зразка, зовнішні умови тощо. Тому одержані під час моделювання результати не обов'язково збігатимуться з точними значеннями модуля пружності певного матеріалу. Така різниця може бути особливо помітною в разі дослідження механічних параметрів нанорозмірних зразків. Як відомо, зазвичай, нанорозмірні зразки матеріалів характеризуються дещо меншими значеннями механічних параметрів, порівнюючи зі зразками звичайних розмірів. Тому в наших дослідженнях так само можна очікувати на результати, що відрізнятимуться від наявних у літературі значень. Окрім цього, експериментально виміряні значення механічних параметрів біметалевих нанодротів зі структурою ядро-оболонка, аналогічних тим, які були досліджені в роботі, на сьогодні відсутні в літературі, тому розраховані значення параметрів можна порівняти з наявними аналогічними даними, одержаними з комп'ютерного моделювання, та

довідковими значеннями модулів пружності металів, що входять до складу зразків, які вивчалися.

Автори вдячні Міністерству освіти і науки України за фінансову підтримку (Проект N 0117U003923).

-
1. Elastic Properties of Freely Suspended MoS_2 Nanosheets. / A. Castellanos-Gomez, M. Poot, G. A. Steele [et al.] // *Adv. Mater.* – 2012. – Vol. 24. – P. 772-775. doi: <https://doi.org/10.1002/adma.201103965>.
 2. Measurement of the elastic properties and intrinsic strength of monolayer graphene / C. Lee, X. D. Wei, J. W. Kysar, J. Hone // *Science.* – 2008. – Vol. 321. – P. 385-388. doi: <https://doi.org/10.1126/science.1157996>.
 3. Dynamic mechanical behavior of multilayer graphene via supersonic projectile penetration / J. H. Lee, P. E. Loya, J. Lou, E. L. Thomas // *Science.* – 2014. – Vol. 346. – P. 1092-1096. doi: <https://doi.org/10.1126/science.1258544>.
 4. Navrotsky A. Energetics at the nanoscale: Impacts for geochemistry, the environment, and materials / A Navrotsky // *MRS Bull.* – 2016. – Vol. 41. – P. 139-145. doi: <https://doi.org/10.1557/mrs.2015.336>.
 5. Chaudhuri R. Gh. Core/shell nanoparticles: classes, properties, synthesis mechanisms, characterization, and applications / R. Gh. Chaudhuri, S. Paria // *Chem. Rev.* – 2012. – Vol. 112. – P. 2373-2433. doi: <https://doi.org/10.1021/cr100449n>.
 6. Surface Composition and Catalytic Evolution of Au_xPd_{1-x} ($x = 0.25, 0.50$ and 0.75) Nanoparticles Under CO/O_2 Reaction in Torr Pressure Regime and at $200^\circ C$. / S. Alayoglu, F. Tao, V. Altoe [et al.] // *Catal. Lett.* – 2011. – Vol. 141. – P. 633-640. doi: <https://doi.org/10.1007/s10562-011-0565-7>.
 7. Selective Hydrogen Production from Formic Acid Decomposition on Pd-Au Bimetallic Surfaces / W.-Y. Yu, G. M. Mullen, D. W. Flaherty, C. B. Mullins // *J. Am. Chem. Soc.* – 2014. – Vol. 136. – P. 11070-11078. doi: <https://doi.org/10.1021/ja505192v>.
 8. Two-Stage Melting of Au-Pd Nanoparticles / S. J. Mejia-Rosales, C. Fernandez-Navarro, E. Perez-Tijerina [et al.] // *J. Phys. Chem. B.* – 2006. – Vol. 110. – P. 12884-12889. doi: <https://doi.org/10.1021/jp0614704>.
 9. Crystal Structures and Growth Mechanisms of Au@Ag Core-Shell Nanoparticles Prepared by the Microwave-Polyol Method // M. Tsuji, N. Miyamae, S. Lim [et al.] // *Crys. Growth Des.* – 2006. – Vol. 6. – P. 1801-1807. doi: <https://doi.org/10.1021/cg060103e>.
 10. Park H. S. Modeling inelasticity and failure in gold nanowires / H. S. Park, J. A. Zimmerman // *Phys. Rev. B.* – 2005. – Vol. 72. – P. 054106. doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.72.054106>.
 11. Lieber Ch. M. Nanoscale science and technology: building a big future from small things / Ch. M. Lieber // *MRS Bull.* – 2003. – Vol. 28. – P. 486-491. doi: <https://doi.org/10.1557/mrs2003.144>.
 12. Kovtyukhova N. I. Nanowires as building blocks for self-assembling logic and memory circuits / N. I. Kovtyukhova, T. E. Mallouk // *Chemistry.* – 2002. – Vol. 8. –

- P. 4355-4363. doi: [https://doi.org/10.1002/1521-3765\(20021004\)8:19%3C4354::AID-CHEM4354%3E3.0.CO;2-1](https://doi.org/10.1002/1521-3765(20021004)8:19%3C4354::AID-CHEM4354%3E3.0.CO;2-1).
13. Atomic scale structure of sputtered metal multilayers / X. W. Zhou, H. N. G. Wadley, R. A. Johnson [et al.] // *Acta Mater.* – 2001. – Vol. 49. – P. 4005-4015. doi: [https://doi.org/10.1016/S1359-6454\(01\)00287-7](https://doi.org/10.1016/S1359-6454(01)00287-7).
 14. Growth of giant magnetoresistance multilayers: Effects of processing conditions during radio-frequency diode deposition / W. Zou, H. N. G. Wadley, X. W. Zhou [et al.] // *J. Vac. Sci. Tech., A.* – 2001. – Vol. 19. – P. 2414-2424. doi: <https://doi.org/10.1116/1.1387051>.
 15. Antibacterial metal-fiber hybrid with covalent assembly of silver and palladium nanoparticles on cellulose fibers / S. Y. Park, S.-Ye. Ryu, S.-Ye. Kwak // *International Conference on Biology, Environment and Chemistry IPCBEE (IACSIT Press, Singapore)* – 2011. – Vol. 1. – P. 183-186.
 16. Synthesis of biogenic Ag@Pd core-shell nanoparticles having anti-cancer/anti-microbial functions / W. I. Abdel-Fattaha, M. M. Eid, Sh. I. Abd El-Moez [et al.] // *Materials Research Express.* – 2017. – Vol. 183. – P. 28-36. doi: <https://doi.org/10.1016/j.lfs.2017.06.017>.
 17. Core-shell Au@Pd nanoparticles with enhanced catalytic activity for oxygen reduction reaction via core-shell Au@Ag/Pd constructions / D. Chen, Ch. Li, H. Liu [et al.] // *Sci. Rep.* – 2015. – Vol. 5. – P. 11949. doi: <https://doi.org/10.1038/srep11949>.
 18. Preparation and characterization of Ag-Pd bimetallic nano-catalysts in thermosensitive microgel nano-reactor // T. Zhang, L. Li, Zh. Ye [et al.] // *RSC Adv.* – 2018. – Vol. 8. – P. 18252-18259. doi: <https://doi.org/10.1039/C8RA02563K>.
 19. Tsai D. H. The virial theorem and stress calculation in molecular dynamics / D. H. Tsai // *J. Chem. Phys.* – 1979. – Vol. 70. – P. 1375-1382. doi: <https://doi.org/10.1063/1.437577>.
 20. Molecular Dynamics with Coupling to an External Bath / H. J. C. Berendsen, J. P. M. Postma, W. F. van Gunsteren // *J. Chem. Phys.* – 1984. – Vol. 81. – P. 3684-3690. doi: <https://doi.org/10.1063/1.448118>.
 21. Plimpton S. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics / S. Plimpton // *J. Comp. Phys.* – 1995. – Vol. 117. – P. 1-19. doi: <https://doi.org/10.1006/jcph.1995.1039>.
 22. URL: <https://www.webelements.com>.

References

1. A. Castellanos-Gomez, M. Poot, G. A. Steele, H. S. J. van der Zant, N. Agrait and G. Rubio-Bollinger, *Adv. Mater.* **24**, 772-775 (2012). doi: <https://doi.org/10.1002/adma.201103965>.
2. C. Lee, X. D. Wei, J. W. Kysar, *Science.* **321**, 385-388 (2008). doi: <https://doi.org/10.1126/science.1157996>.
3. J. H. Lee, P. E. Loya, J. Lou, E. L. Thomas, *Science.* **346**, 1092-1096 (2014). doi: <https://doi.org/10.1126/science.1258544>.
4. A. Navrotsky, *MRS Bull.* **41**, 139-145 (2016). doi: <https://doi.org/10.1557/mrs.2015.336>.

5. R. Gh. Chaudhuri, S. Paria, *Chem. Rev.* **112**, 2373-1433 (2012). doi: <https://doi.org/10.1021/cr100449n>.
6. S. Alayoglu, F. Tao, V. Altoe, C. Specht, Zh. Zhu, F. Aksoy, D. R. Butcher, R. J. Renzas, Zh. Liu and G. A. Somorjai, *Catal. Lett.* **141**, 633-640 (2011). doi: <https://doi.org/10.1007/s10562-011-0565-7>.
7. W.-Y. Yu, G. M. Mullen, D. W. Flaherty and C. B. Mullins, *J. Am. Chem. Soc.* **136**, 11070-11078 (2014). doi: <https://doi.org/10.1021/ja505192v>.
8. S. J. Mejia-Rosales, C. Fernandez-Navarro, E. Perez-Tijerina, JM Montejano-Carrizales and M. Jose-Yacamán, *J. Phys. Chem. B.* **110**, 12884-12889 (2006). doi: <https://doi.org/10.1021/jp0614704>.
9. M. Tsuji, N. Miyamae, S. Lim, K. Kimura, X. Zhang, S. Hikino and M. Nishio, *Crys. Growth Des.* **6**, 1801-1807 (2006). doi: <https://doi.org/10.1021/cg060103e>.
10. H. S. Park, J. A. Zimmerman, *Phys. Rev. B.* **72**, 054106 (2005). doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.72.054106>.
11. Ch. M. Lieber, *MRS Bull.* **28**, 486-491 (2003). doi: <https://doi.org/10.1557/mrs2003.144>.
12. N. I. Kovtyukhova, T. E. Mallouk, *Chemistry.* **8**, 4355-4363 (2002). doi: [https://doi.org/10.1002/1521-3765\(20021004\)8:19](https://doi.org/10.1002/1521-3765(20021004)8:19)
13. X. W. Zhou, H. N. G. Wadley, R. A. Johnson, D. J. Larson, N. Tabat, A. Cerezo, A. K. Petford-Long, G. D. W. Smith, P. H. Clifton, R. L. Martens and T. F. Kelly, *Acta Mater.* **49**, 4005-4015 (2001). doi: [https://doi.org/10.1016/S1359-6454\(01\)00287-7](https://doi.org/10.1016/S1359-6454(01)00287-7).
14. W. Zou, H. N. G. Wadley, X. W. Zhou, S. Ghosal, R. Kosut and D. Brownell, *J. Vac. Sci. Tech., A.* **19**, 2414-2424 (2001). <https://doi.org/10.1116/1.1387051>.
15. S. Y. Park, S.-Ye. Ryu, S.-Ye. Kwak, *International Conference on Biology, Environment and Chemistry IPCBEE (IACSIT Press, Singapore)* **1**, 183-186 (2011).
16. W. I. Abdel-Fattaha, M. M. Eid, Sh. I. Abd El-Moez, E. Mohamed and Gh. W. Alia, *Materials Research Express.* **183**, 28-36 (2017). doi: <https://doi.org/10.1016/j.lfs.2017.06.017>.
17. D. Chen, Ch. Li, H. Liu, F. Ye, J. Yanga. *Sci. Rep.* **5**, 11949 (2015). doi: <https://doi.org/10.1038/srep11949>.
18. T. Zhang, L. Li, Zh. Ye, Q. Tian, X. Guo, *RSC Adv.* **8**, 18252-18259 (2018). doi: <https://doi.org/10.1039/C8RA02563K>.
19. D. H. Tsai, *J. Chem. Phys.* **70**, 1375-1382 (1979). doi: <https://doi.org/10.1063/1.437577>.
20. H. J. C. Berendsen, J. P. M. Postma, W. F. van Gunsteren, *J. Chem. Phys.* **81**, 3684-3690 (1984). doi: <https://doi.org/10.1063/1.448118>.
21. S. Plimpton, *J. Comp. Phys.* **117**, 1-19 (1995). doi: <https://doi.org/10.1006/jcph.1995.1039>.
22. URL: <https://www.webelements.com>.

Статтю отримано: 07.02.2020
Прийнято до друку: 01.10.2020

Mechanical properties of bimetallic nanorods: a computer simulation study

B. Natalich, D. Zakharova, U. Shvets, V. Borysiuk

*Sumy State University
Rymyskogo-Korsakova St, 2, 40007 Sumy, Ukraine
e-mail: v.borysiuk@phe.sumdu.edu.ua*

The behavior of three different samples of bimetallic nanorods with core-shell structure, namely Ag@Pd, Pd@Ag and Pd@Pt under stretching and compression was simulated within classical molecular dynamics methods. Calculations of the interaction between atoms in the samples were carried out using the embedded atom method (EAM). Interatomic forces between atoms of different types were calculated within EAM model for alloys. Numerical procedures of stretching and compression were applied to investigate the mechanical properties of nanorods and to calculate strain-stress curves. Temperature was controlled by Berendsen thermostat. LAMMPS software for classical molecular dynamics simulation was used for calculations. During deformation, the mechanical stresses in the samples were calculated using the virial theorem. The elastic moduli for all samples under stretching and compression were calculated. Mechanic parameters were obtained by linear regression of the elastic part of the strain-stress curves for both stretching and compression. Obtained values during stretching are $E = 110$ GPa, $E = 87.5$ GPa and $E = 153.7$ GPa for Ag@Pd, Pd@Ag and Pd@Pt samples respectively. For tension, obtained values of elastic moduli are $E = 87.5$ GPa, $E = 63.5$ GPa and $E = 107.9$ GPa for Ag@Pd, Pd@Ag and Pd@Pt samples respectively. Obtained values of elastic parameters are relatively agreed for every sample in case of stretching and compression. It is worth to mention that in general case, calculated values of the elastic modulus may depend on many factors such as size and shape of the sample, measuring procedure, strain rate, etc., thus obtained in our work parameters can only be considered as approximate values that must be confirmed in further studies.

Key words: molecular dynamics simulations, nanorod, core-shell, strain-stress