

АТОМИСТИЧЕН МОДЕЛ И СЦЕНАРИЙ НА ТЕРМИЧНО СКЪСВАНЕ НА МЕТАЛНИ МОНОАТОМНИ НАНОВЕРИЖКИ

Михаил Михайлов, Димчо Кашчиев
Институт по физикохимия, БАН

Представен е атомистичен модел и сценарий на спонтанно скъсване на моноатомна метална нановерижка, разположена върху атомно гладка кристална повърхност. Установен е тристъпален механизъм на скъсване на верижката, който включва: (i) формиране на активни за процеса атоми; (ii) генериране на единични, възстановими атомни ваканции; (iii) образуване на стабилни ваканционни димери, които необратимо прекъсват нановерижката. Предложена е система от кинетични уравнения, описващи развитието във времето на процесите (i-iii), и на тази основа аналитично и чрез атомистични Монте Карло симулации са определени важни, физически значими характеристики като вероятност за поява на единична атомна ваканция, вероятност за поява на ваканционна дупка и време на живот на нановерижката.

Докладът се базира на статията: *M. Michailov and D. Kashchiev, Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures, 70 (2015) p. 21–27.*