

不同势下铱团簇结构和熔化行为的 分子动力学模拟^{*}

刘建廷 段海明[†]

(新疆大学物理科学与技术学院, 乌鲁木齐 830046)

(2008 年 10 月 17 日收到, 2008 年 12 月 5 日收到修改稿)

采用分子动力学方法及淬火技术, 结合 Gupta 势和 Sutton-Chen 势, 模拟研究了包含 13, 14, 55, 56, 147 及 148 个原子数的铱团簇的熔化行为. 结果表明, Gupta 势和 Sutton-Chen 势对所研究的 Ir 团簇的基态几何结构和熔化行为给出了基本一致的描述. 两种不同势给出了完全相同的基态几何结构, 两种势给出的 Ir 团簇熔点及预熔化区间随团簇尺寸的变化关系基本一致. 对于小 Ir_n 团簇 ($n = 13, 14$) 两类势均表现出比热峰值相对于均方根键长涨落饱和值滞后的现象. 但是, 包含相同原子数的 Ir 团簇在 Gupta 势下的熔点均高于在 Sutton-Chen 势下的熔点, 出现该区别的主要原因是 Gupta 势所给出的包含相同原子数的 Ir 团簇基态与第一激发态的能量差均高于在 Sutton-Chen 势下的相应值.

关键词: 铱团簇, 分子动力学, Gupta 势和 Sutton-Chen 势, 熔化

PACC: 6146, 3640B

1. 引 言

团簇, 作为几个到几千个原子的聚集体, 以其独特的物理化学性质而受到人们的广泛关注^[1-5]. 由于金属团簇的熔化特性对微电子器件和催化剂的性能有重要影响, 所以近几十年来人们对金属团簇的熔化问题进行了大量的实验和理论研究^[6-11]. 在理论研究方面, 分子动力学模拟方法已成为深入了解团簇动力学性质的有力工具. 在分子动力学模拟中, 原子间相互作用势函数的选取尤为重要. 人们发展了不同的相互作用势, 如两体势 Lennard-Jones 势、Morse 势及多体势 Gupta 势、Sutton-Chen 势、EAM 势等. 这些势都可以很好地描述各自适合的团簇体系的热力学性质^[12-16]. 近来, Doye^[17]发现, 用不同势描述某些团簇时会得到完全不同的基态几何结构, 而 Liu 等人^[18]采用三种不同的势描述钽团簇的动力学特性时发现只有其中一种势比较适合描述钽团簇的熔化行为.

过渡金属铱对催化剂的性能有重要影响, 受到研究者的广泛关注^[19]. 目前对 Ir 团簇熔化行为的

研究比较少, 而对 Ir 团簇采用分子动力学方法结合多种势的系统研究尚未见报道. 本文即运用分子动力学模拟结合 Gupta 势与 Sutton-Chen 势对比研究了 Ir_n ($n = 13, 14, 55, 56, 147, 148$) 团簇的熔化特性, 通过探讨不同势函数对 Ir 团簇熔化行为的描述, 有助于给出 Ir 团簇熔化过程中准确的热力学行为, 这对进一步的理论及实验研究都有一定的参考价值.

2. 势模型和计算方法

2.1. 势函数

材料中原子间的相互作用从根本上决定着材料的各种性质, 这种作用可通过原子间相互作用势函数来描述. 为了研究 Ir 团簇的熔化行为, 本文采用的第一种势是 Gupta 势^[20], Gupta 势是基于紧束缚模型二阶矩近似的嵌入原子势, 这种多体相互作用势适合用来研究过渡金属单质或合金的热力学特性. Gupta 势可以写成原子间的 Born-Mayer 形式的排斥项和多体吸引项之和:

^{*} 国家自然科学基金(批准号: 10347010, 10864005), 教育部留学回国人员科研启动基金资助的课题.

[†] E-mail: dlhm@xju.edu.cn

$$V = \sum_i \left(\sum_{j \neq i} A \exp \left[-p \left(\frac{r_{ij}}{r_0} - 1 \right) \right] - \sqrt{\sum_{j \neq i} \xi^2 \exp \left[-2q \left(\frac{r_{ij}}{r_0} - 1 \right) \right]} \right), \quad (1)$$

式中, r_{ij} 为 i, j 原子间距, A, ξ, p, q, r_0 均为参数. 对铱团簇各势参数的取值为^[21]: $A = 0.1156 \text{ eV}$, $\xi = 2.289 \text{ eV}$, $p = 16.980$, $q = 2.691$, $r_0 = 2.71 \text{ \AA}$.

本文采用的另一种相互作用势是 Sutton-Chen 势^[22]. Sutton-Chen 势是由 Finnis 和 Sinclair 两人在经验多体势的基础上为描述金属的内聚能发展而来. Finnis-Sinclair 势是相对短程势, 在 fcc 晶体中可延伸到第三近邻, 其长程修正构成了 Sutton-Chen 势. Sutton-Chen 势描述原子多体系统的结合能为

$$U = \epsilon \left[\frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^n - \lambda \sum_i \sqrt{\sum_{j \neq i} \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^m} \right], \quad (2)$$

上式第一项代表不同原子芯之间的排斥作用, 第二项表示由于原子 i 镶嵌于一定密度的电子中所引起的相互吸引作用. 式中, r_{ij} 为 i, j 原子的间距, ϵ, λ, n, m 均为参数, 对铱团簇各势参数的取值为^[23] $\epsilon = 0.0024489 \text{ eV}$, $\lambda = 334.94$, $n = 14$, $m = 6$.

2.2. 分子动力学

本文采用恒温分子动力学方法, 温度由 Berendsen 标度方法^[24]控制. 积分牛顿方程的时间步长取 1 fs , 体系从基态结构出发(可由分子动力学模拟退火结合最速下降法得到), 温度从 500 K 模拟到 3000 K , 升温步长为 25 K , 每个温度点上进行 2×10^6 步分子动力学模拟.

2.3. 分析方法

体系的热容量 C_v 按下式计算:

$$C_v = \frac{E_{T_2} - E_{T_1}}{2Nk_B T^2}, \quad (3)$$

式中, k_B 为 Boltzmann 常数, E_i 为体系的总能量, N 为团簇所含原子数, \dots_T 表示热力学统计平均.

每个温度点上的 Lindemann 因子(均方根键长涨落) δ 按下式计算:

$$\delta = \frac{1}{N} \sum_i \delta_i, \quad \delta_i = \frac{1}{N-1} \sum_{j \neq i} \left(\frac{r_{ij}^2 - r_{ij}^2}{r_{ij}} \right)^2. \quad (4)$$

在熔化过程中, 为更加细致地研究不同温度点

上团簇结构随时间的变化, 我们采用了原子等价指数^[25] (AEI), 它包含所有原子的结构信息, 定义如下:

$$\sigma_i(t) = \sum_j |r_i(t) - r_j(t)|, \quad (5)$$

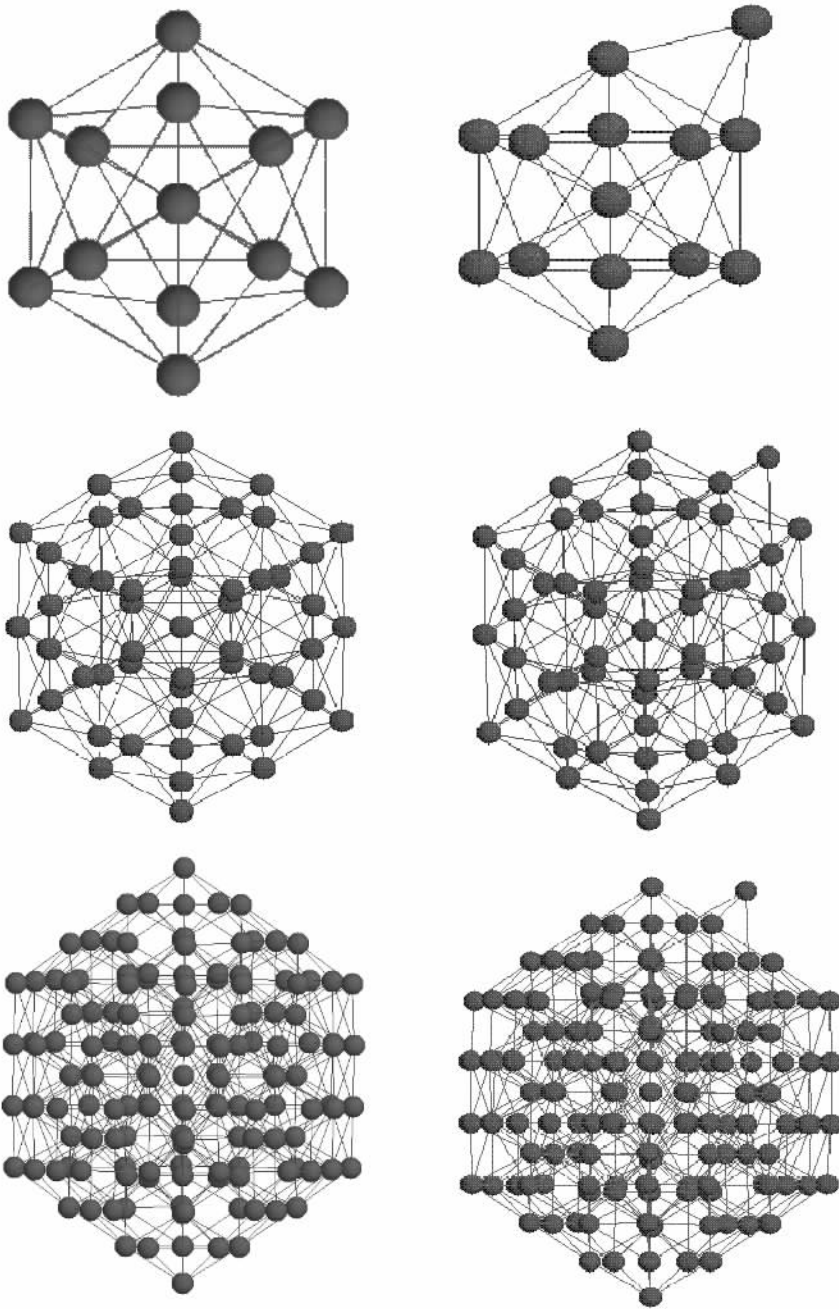
这里 $r_i(t)$ 是 i 原子在 t 时刻的位置. 在给定温度点上对 Ir_n ($n = 13, 14, 55, 56$) 团簇在 2 ns 的总模拟时间段内每 1 ps 提取一次团簇构型(坐标)即可得到团簇 AEI 曲线图.

为进一步描述 Ir 团簇的熔化行为, 探究在团簇熔化过程中给定温度下的结构演化特性, 可采用淬火技术^[26] (利用最速下降法将团簇构型弛豫到势能曲面的近邻局域极小), 在每个温度点上对各 Ir_n ($n = 13, 14, 55, 56, 147, 148$) 团簇每 1000 步提取团簇坐标进行淬火从而得到 2000 个淬火构型. 利用淬火构型的能量(势能)来描述两种势下 Ir 团簇势能曲面特性, 得到淬火构型在势能曲面上的分布图.

3. 结果、分析和讨论

3.1. 团簇基态结构

利用分子动力学模拟退火技术结合最速下降法得到 Ir_n ($n = 13, 14, 55, 56, 147, 148$) 团簇的基态几何结构, 具体实现过程如下: 从任一稳定结构(可先用随机数产生再用最速下降法弛豫得到)出发, 初始温度取为 3000 K 以确保 Ir 团簇完全熔化, 退火速率取 95% , 共退火 100 步. 在每个温度点上, 对包含确定原子数的团簇进行 2×10^6 步分子动力学模拟(时间步长取为 1 fs). 最后, 对末温(约 17.8 K) 构型进行最速下降法弛豫即得到 Ir 团簇基态几何结构. 我们使用该方法得到具有相同尺寸 ($n = 13, 14, 55, 56, 147, 148$) 且由 Gupta 势描述的 Co 团簇的基态几何结构和能量与 Zhan 等人^[27] 所给出的结果完全一样, 说明了该方法的有效性. 如图 1 所示, 两种势给出了完全相同的团簇基态几何结构. 表 1 给出了两种势下基态 Ir_n ($n = 13, 14, 55, 56, 147, 148$) 团簇的平均束缚能 (E_b) 及对称性, 其中 $E_b(n) = -E(n)/n$. 由表 1 可见, 随着所含原子数的增加两种势下 Ir 团簇的平均束缚能总体上都在增加, 但相比 Ir 块体的平均束缚能(内聚能 6.94 eV) 还有差距. 此外, 对包含相同原子数的 Ir 团簇两种势下团簇平均束缚能均相差约 0.1 eV .

图 1 Ir_n ($n = 13, 14, 55, 56, 147, 148$) 团簇的基态几何结构表 1 Ir_n ($n = 13, 14, 55, 56, 147, 148$) 团簇的
平均束缚能 (E_b) 及对称性

原子数 n	13	14	55	56	147	148
$E_b(n)$ eV						
Gupta 势	5.06	5.04	5.77	5.76	6.09	6.08
Sutton-Chen 势	4.93	4.93	5.67	5.66	5.99	6.00
对称性	I_h	C_{3v}	I_h	C_{3v}	I_h	C_s

3.2. 团簇的熔化行为

图 2(a)–(f) 给出两种势下 Ir_n ($n = 13, 14, 55,$

$56, 147, 148$) 团簇的比热 (C_v) 和 Lindemann 因子 (δ) 随温度的变化关系曲线, 图 3(a)–(h) 分别给出两种势下 Ir_{13} , Ir_{14} , Ir_{55} 及 Ir_{56} 团簇在不同温度点上的原子等价指数 (AEI) 曲线, 图 4(a)–(d) 给出两种势下 Ir_n ($n = 13, 14$) 团簇在不同温度点上淬火构型的势能分布图。

对 Ir_{13} 团簇, 两种不同势下团簇基态几何结构均为正二十面体 (图 1), 它包含两类等价原子 (1 个中心原子和 12 个表面原子)。Gupta 势下, 图 2(a) 和图

(a)表明,在 1600 K 时,团簇处于类固态,AEI 显示两层明显分区(对应中心及表面两类原子),在该温度之前,Lindemann 因子变化缓慢,随着温度的增加,Lindemann 因子显著变化(振荡式增大).在 2025 K,Lindemann 因子达到饱和,但 AEI 仍显示不同分区,而此时比热峰值也未显露,出现了比热峰值相对于 Lindemann 因子饱和值滞后的现象.我们认为,出现这种滞后现象的主要原因是具有二十面体的 Ir_{13} 团

簇结构相当稳定,尽管温度在逐渐上升,但 Ir_{13} 团簇始终处于势能曲面上基态及基态邻近的区域(中心原子并未失去其平衡位置,AEI 仍显示明显分区),这一点可由图 4(a)明显看出,在 2025 K,尽管 Lindemann 因子已达饱和,但团簇淬火构型仍基本处于基态.到 2425 K,比热的峰值出现,AEI 已无明显分区,此时 Ir_{13} 团簇完全熔化,可定义该温度为 Ir_{13} 团簇的熔点.

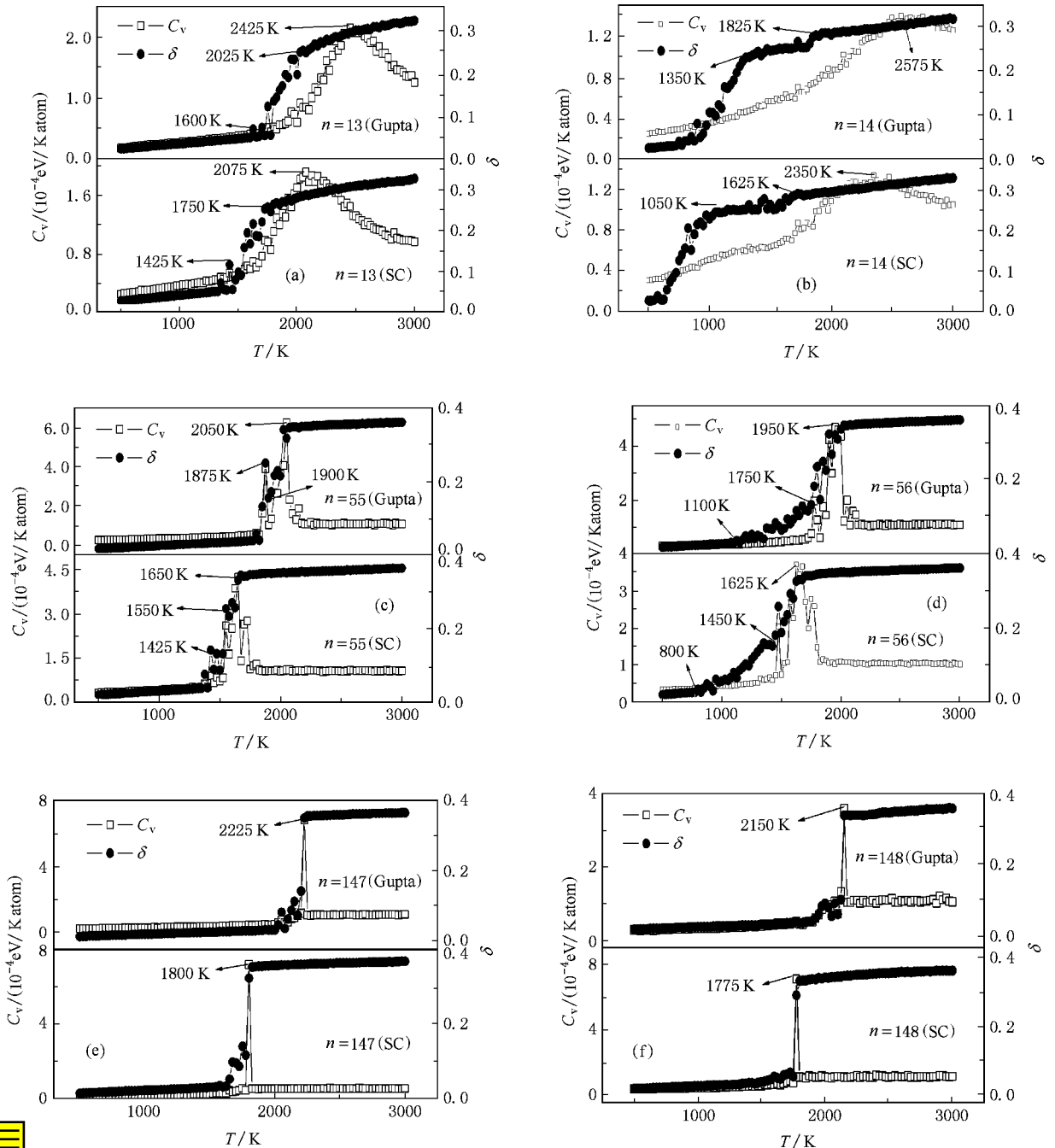


图2 两种势下 Ir_n ($n=13, 14, 55, 56, 147, 148$) 团簇的比热 (C_v) 和 Lindemann 因子 (δ) 随温度的变化关系曲线

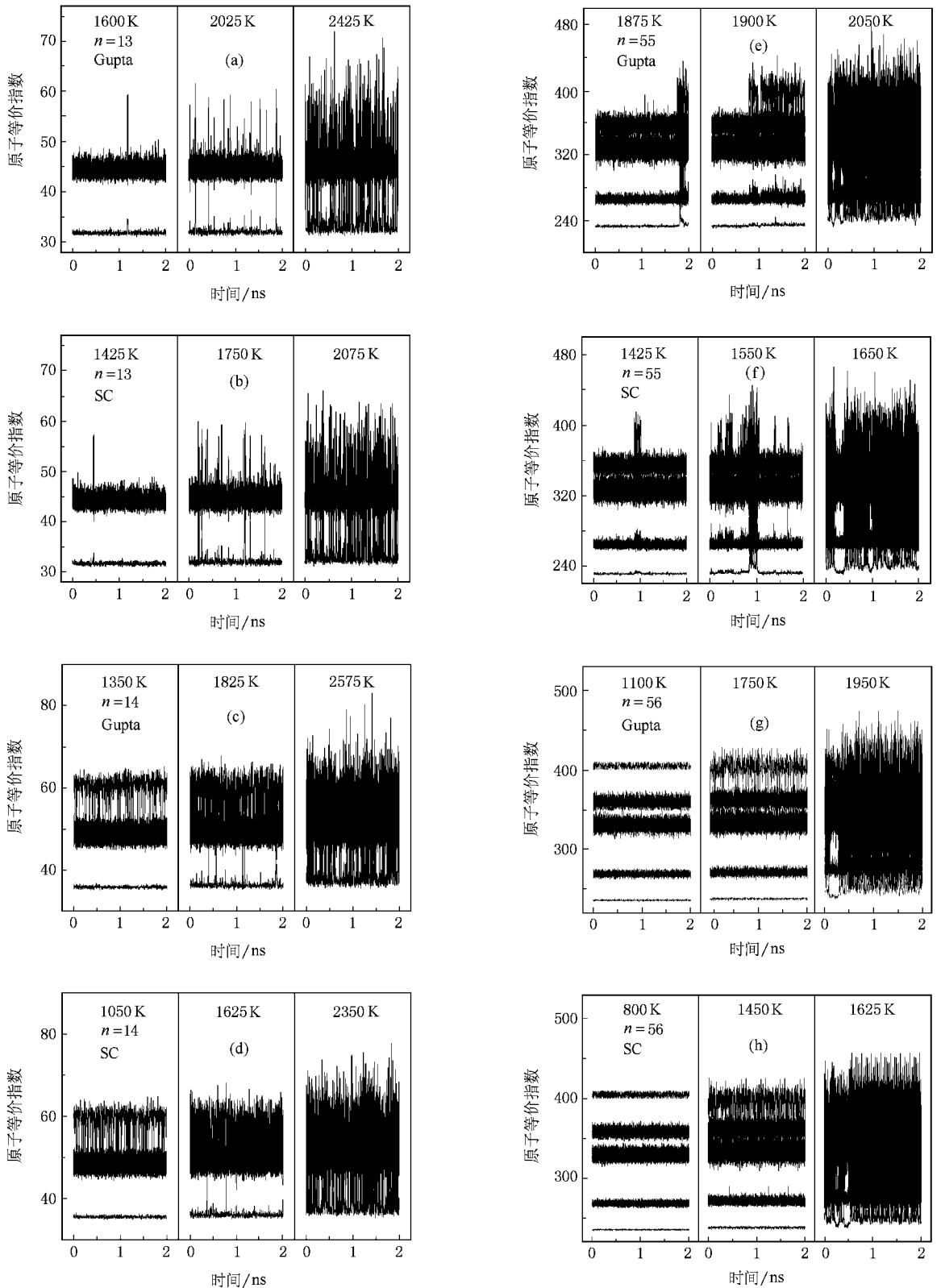


图 3 两种势下 Ir_n ($n = 13, 14, 55, 56$) 团簇在不同温度点上的原子等价指数 (AEI) 曲线

Sutton-Chen 势下 Ir_{13} 团簇的熔化行为与 Gupta 势下相类似. 由图 3(a) 和图 3(b) 可见, 1425 K 时, 团簇

处于类固态, AEI 显示明显分区, 在该温度之前 Lindemann 因子变化迟缓. 到 1750 K, Lindemann 因子

达到饱和值,但 AEI 仍显示不同区域,团簇淬火构型基本处于基态(图 4(b)),同时比热峰值也未出现,存在与 Gupta 势下相同的滞后现象.至 2075 K,比热

峰值出现,AEI 已无明显分区,对应 Ir_{13} 团簇完全熔化.

尽管 Ir_{14} 团簇的结构可视为在 Ir_{13} 团簇的表面增

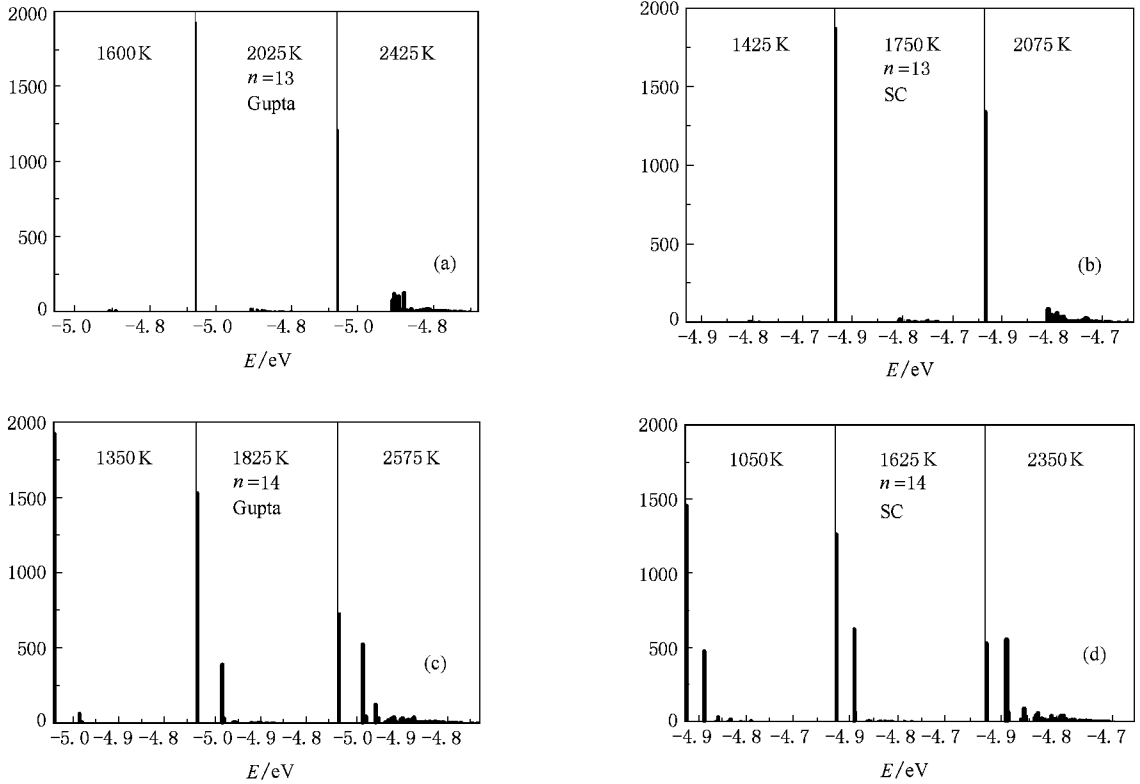


图 4 两种势下 Ir_n ($n=13, 14$) 团簇在不同温度点上淬火构型的势能分布图

加一个原子而得到(图 1),但它们的熔化行为却有很大的不同.由图 2(b)和图 3(c)可见, Ir_{14} 团簇在 Gupta 势下的熔化经历了两个过程:表面熔化(750—1825 K)和整体预熔化(1825—2575 K).在 1350 K, AEI 显示最外层单个原子与外部的其他 12 个原子交换位置非常频繁,最外层原子已失去其平衡位置,除中心原子之外的外部 13 个原子已经不能区分,然而,中心原子却在很长温度区间里始终处于平衡位置, Ir_{14} 团簇发生表面熔化,中心原子处于固相而表面原子处于液相,体现了团簇在空间尺度上的固液共存态.在 1825 K,中心原子开始与外部原子交换位置,并且随着温度的增加交换频率增大, AEI 分区逐渐模糊,显现整体预熔化.到 2575 K, AEI 曲线已无分区,比热峰值出现,团簇完全熔化.此外,图 2(b)显示,在 1825 K 时体系 Lindemann 因子已达到饱和,但 AEI 仍显示不同区域,同时比热峰值也未出现,同样发生了比热峰值相对于 Lindemann 因子饱和值滞后的现象,出现该滞后现象的原因也类同以上 Ir_{13} 团簇,尽管 Lindemann 因子已达饱和,但团簇

却仍基本处于势能曲面基态邻近区域(绝大多数团簇淬火构型处于基态,见图 4(c)).

Sutton-Chen 势下 Ir_{14} 团簇的熔化行为也与在 Gupta 势下相类似.从图 2(b)和图 3(d)可见, Ir_{14} 团簇的熔化也经历了两个过程:表面熔化(575—1625 K)和整体预熔化(1625—2350 K),并且同样存在比热峰值相对于 Lindemann 因子饱和值滞后的现象.

图 1 显示,两种势下 Ir_{55} 团簇基态几何结构均为相同的二十面体,该结构由四类等价原子构成,可分成三层:1 个中心(层)原子,12 个中间层原子和 42 个外层原子.由图 2(c)和图 3(e)可见,在 Gupta 势下, Ir_{55} 团簇在其预熔化区间(1800—2050 K)里,尽管随着温度的增加不同层原子之间交换位置愈加频繁,但从 AEI 上(在明显的时间段内)仍可以分辨出各不同的层,表明 Ir_{55} 团簇不存在表面熔化的预熔化现象,而是体现出在时间尺度上的固液共存(整体预熔化)状态.比热曲线峰值出现在 2050 K,同温度下 Lindemann 因子也达到饱和, AEI 同样显示在该温度

点上团簇原子已无分层,团簇完全熔化。

Sutton-Chen 势下 Ir_{55} 团簇的熔化亦类同于 Gupta 势,图 2(c) 和图 3(f) 亦显示 Ir_{55} 团簇也发生了在时间尺度上固液共存的整体预熔化现象(无表面熔化),预熔化区间为 1375—1650 K,同样,在熔点 1650 K 处,比热曲线出现峰值,同时,Lindemann 因子也达到饱和。

Ir_{56} 团簇可看成在 Ir_{55} 团簇表面增加一个原子(图 1),类似于 Ir_{14} 团簇,在两种势下 Ir_{56} 团簇的熔化同样经历了两个过程:在 Gupta 势下的熔化过程中存在着表面熔化(1100—1750 K)和整体预熔化(1750—1950 K)(图 2(d)).由图 3(g) 可见,在 1100 K,AEI 显示明显分区,随温度升高,外层原子之间开始交换位置并愈加频繁,至 1750 K,外层(表面)原子已无平衡位置,然而,内部原子却仍处于平衡位置, Ir_{56} 团簇发生表面熔化,中心原子处于固相而表面原子处于液相,体现了团簇在空间尺度上的固液共存态.1750 K 之后,内部原子开始与其表面(外部)原子交换位置,并且随着温度升高交换频率增大,AEI 分区逐渐模糊,显现整体预熔化.到 1950 K,AEI 曲线已无分区,比热峰值出现,团簇完全熔化.而在 Sutton-Chen 势下的熔化过程中也存在着表面熔化(800—1450 K)和整体预熔化(1450—1625 K),并且,两种势下,在团簇熔点处,比热峰值和 Lindemann 因子饱和值同时出现(见图 2(d) 及图 3(h)).

Ir_{147} 团簇在两种势下的基态几何结构均为多层嵌套的 I_h 结构(图 1).在两种势下都存在与 Ir_{55} 团簇相类似的整体预熔化行为(图 2(e)),Gupta 势下预熔化区间为 2025—2225 K,Sutton-Chen 势下预熔化区间为 1625—1800 K.同样,对 Ir_{147} 团簇,两种势下,在比热峰值出现团簇完全熔化时,Lindemann 因子也达到饱和值。

Ir_{148} 团簇在两种势下的基态几何结构均为 C_s 结构(图 1).由图 2(f) 可见,Gupta 势下 Ir_{148} 团簇的预熔化区间为 1900—2150 K,Sutton-Chen 势下预熔化区间为 1550—1775 K.同样,对 Ir_{148} 团簇,两种势下,在比热峰值出现团簇完全熔化时,Lindemann 因子也达到饱和值。

图 5(a)(b) 给出两种势下 Ir_n ($n = 13, 14, 55, 56, 147, 148$) 团簇熔点和预熔化区间随团簇尺寸的变化关系,由图 5(a) 可见,对所研究 Ir 团簇体系,包含相同原子数的 Ir 团簇的熔点随团簇尺寸非单调变化,且两种势下变化趋势相同.同图可见,相比较

大尺寸团簇($n > 50$),小尺寸团簇($n = 13, 14$) 体现出更高的熔点,我们认为,这是由小尺寸($n < 50$) 团簇的异常熔化现象造成的,这种小尺寸团簇的异常熔化现象也在其他的元素中被观察到,如对锡团簇的研究表明:包含 10—30 个原子数的锡团簇具有高于锡晶体的熔点^[28].图 5(b) 显示出两种势下 Ir 团簇的预熔化温度区间随团簇尺寸的变化关系非常一致,总体上均呈现(向晶体过渡的)递减趋势.此外,包含相同原子数的 Ir 团簇在 Gupta 势下的熔点均高于在 Sutton-Chen 势下的相应值,为究其原因,可以考察不同温度点上团簇淬火构型的势能分布图,图 4(a)—(d) 给出两种势下 Ir_{13} 及 Ir_{14} 团簇在不同温度点上淬火构型的势能分布图,对其他较大尺寸的 Ir_n ($n = 55, 56, 147, 148$) 团簇,有类似的分布图,都表现为随温度的升高,分布图中基态比率降低,激发态比率增大;不同之处在于:对较大尺寸 Ir_n ($n = 55, 56, 147, 148$) 团簇,在其预熔化区间内某温度点上的淬火构型势能分布图中基态比率明显小于小尺寸团簇($n = 13, 14$).由淬火构型的势能分布图可得各 Ir_n ($n = 13, 14, 55, 56, 147, 148$) 团簇的基态与第一激发态能量之差,所得结果列于表 2 中,同表中也列出两

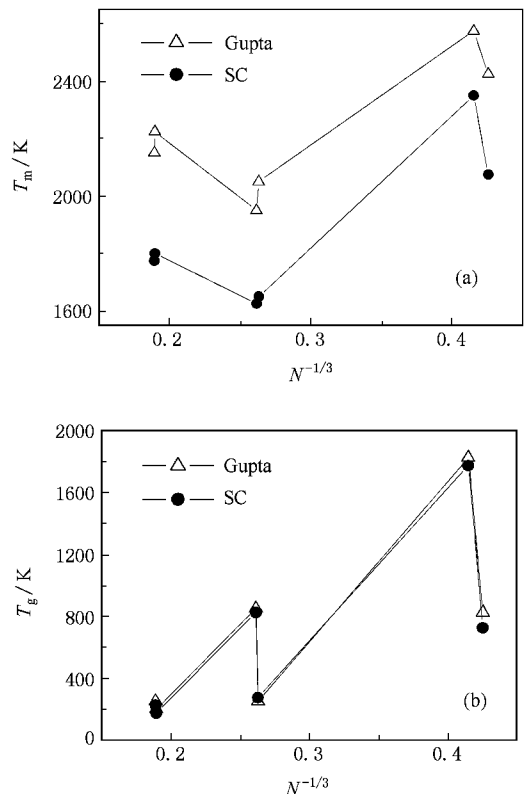


图 5 两种势下 Ir 团簇熔点和预熔化区间随团簇尺寸的变化

种势下各 Ir 团簇的预熔化区间(T_g)、熔点(T_m)及熔点差(ΔT_m).由表 2 可见,Gupta 势下包含相同原子

数的 Ir 团簇基态与第一激发态的能量差都高于在 Sutton-Chen 势下的相应值,我们认为这就是出现以

表 2 Ir 团簇在 Gupta 势和 Sutton-Chen 势下的预熔化区间(T_g)、熔点(T_m)、团簇的熔点差(ΔT_m),及基态与第一激发态能量差值(ΔE)

N	T_g /K(Gupta)	T_g /K(SC)	T_m /K(Gupta)	T_m /K(SC)	ΔT_m /K	ΔE /eV(Gupta)	ΔE /eV(SC)
13	1600—2425	1350—2075	2425	2075	350	1.9136	1.6484
	825	725					
14	750—2575	575—2350	2575	2350	225	0.7642	0.5278
	1825	1775					
55	1800—2050	1375—1650	2050	1650	400	1.5950	1.3585
	250	275					
56	1100—1950	800—1625	1950	1625	325	0.1176	0.1008
	850	825					
147	2025—2225	1625—1800	2225	1800	425	1.7493	1.3818
	200	175					
148	1900—2150	1550—1775	2150	1775	375	0.8858	0.7747
	250	225					

上差异的主要原因.

4. 结 论

本文采用恒温分子动力学方法结合 Gupta 势和 Sutton-Chen 势模拟研究了 Ir_n($n = 13, 14, 55, 56, 147, 148$)团簇的基态几何结构和熔化行为,主要结果如下:

1. Gupta 势和 Sutton-Chen 势给出的团簇基态几何结构(对称性)完全一致.

2. 两种势下,包含相同原子数的 Ir 团簇的熔点都随团簇尺寸非单调变化,且变化趋势相同.

3. 两种势下, Ir 团簇预熔化区间随团簇尺寸的变化趋势完全相同,均呈现非单调变化但总体上随团簇尺寸增大而减小的趋势.

4. 对于小团簇(Ir₁₃与 Ir₁₄),两类势均给出比热峰值比 Lindemann 因子(δ)曲线饱和值滞后的现象,而对于较大团簇(Ir₅₅, Ir₅₆, Ir₁₄₇与 Ir₁₄₈), δ 曲线饱和值与热容曲线峰值同时出现.

5. 包含相同原子数目的 Ir 团簇在 Gupta 势下的熔点均高于在 Sutton-Chen 势的熔点,我们认为出现该区别的主要原因是包含相同原子数的 Ir 团簇基态与第一激发态的能量差在 Gupta 势下的值都高于在 Sutton-Chen 势下的相应值.

[1] Wang G H 2003 *Cluster Physics* (Shanghai:Shanghai technology Press) p1—9(in Chinese)[王广厚 2003 团簇物理学(上海:上海科学技术出版社)第 1—9 页]

[2] Jesser W A, Shneck R Z, Gile W W 2004 *Phys. Rev. B* **69** 144121

[3] Aguado A, López J M 2005 *Phys. Rev. B* **72** 205420

[4] Zhou G R, Gao Q M 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 1499(in Chinese)[周国荣、高秋明 2007 物理学报 **56** 1499]

[5] Zhang K W, Meng L J, Li J 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 4347(in Chinese)[张凯旺、孟利军、李俊 2008 物理学报 **57** 4347]

[6] Yang Q W, Zhu R Z 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 4245(in Chinese)[杨全文、朱如曾 2005 物理学报 **54** 4245]

[7] Silva R, Alcaniz J S 2003 *Phys. Lett. A* **313** 393

[8] Neal C M, Starace A K, Jarrold M F 2007 *Phys. Rev. B* **76** 054113

[9] Wu Z H, Wang X Q, Yang Y Y 2007 *Chin. Phys.* **16** 405

[10] Li G J, Wang Q, Li H T *et al* 2008 *Chin. Phys. B* **17** 3343

[11] Cawkwell M J, Nguyen-Manh D, Pettifor D G *et al* 2006 *Phys. Rev. B* **73** 064104

[12] Duan H M, Ding F, Rosén A, Harutyunyan A R *et al* 2007 *Chem. Phys.* **333** 57

[13] Zhang W, Zhang F S, Zhu Z Y 2006 *Phys. Rev. B* **74** 033412

[14] Li T X, Ji Y L, Yu S W *et al* 2000 *Solid State Commun.* **116** 547

[15] Alavi S, Thompson D L 2006 *J. Phys. Chem. A* **110** 1518

[16] Li G J, Wang Q, Li D G *et al* 2008 *Phys. Lett. A* **372** 6764

[17] Doye J P K 2006 *Comp. Mater. Sci.* **35** 227

- [18] Liu Z L , Cai L C , Chen X R *et al* 2008 *Phys. Rev. B* **77** 024103
- [19] Verstraete M J , Charlier J C 2005 *Appl. Phys. Lett.* **86** 191917
- [20] Gupta R P 1981 *Phys. Rev. B* **23** 6265
- [21] Cleri F , Rosato V 1993 *Phys. Rev. B* **48** 22
- [22] Joswig J O , Spingborg M 2003 *Phys. Rev. B* **68** 085408
- [23] Mansoori G A 2006 *Principles of Nanotechnology* (Shang hai :Fu dan university press) p57
- [24] Berendsen H J C , Postma J P M , Van Gunsteren W F *et al* 1984 *J. Chem. Phys.* **81** 3684
- [25] Bonačić-Koutecky V , Jellinek J , Wiechert M *et al* 1997 *J. Chem. Phys.* **107** 6321
- [26] Uppenbrink J , Wales D J 1993 *J. Chem. Phys.* **98** 5720
- [27] Zhan L , Chen J Z Y , Liu W K *et al* 2005 *J. Chem. Phys.* **122** 244707
- [28] Shvartsburg A A , Jarrold M F 2000 *Phys. Rev. Lett.* **85** 2530

Molecular dynamics simulation of structures and melting behaviours of iridium clusters with different potentials^{*}

Liu Jian-Ting Duan Hai-Ming[†]

(College of Physical Science and Technology ,Xinjiang University ,Urumqi 830046 , China)

(Received 17 October 2008 ; revised manuscript received 5 December 2008)

Abstract

The molecular dynamics method and quenching technique combined with the Gupta potential and the Sutton-Chen potential are used to study the melting properties of Ir_n ($n = 13 , 14 , 55 , 56 , 147$ and 148) clusters . Our results show that the structures and melting behaviors of these clusters described by both potentials are generally in agreement with each other : the same ground state geometrical structure and the same trend of variation of the melting point and the pre-melting interval with cluster size are obtained for both potentials , and for the small Ir_n ($n = 13 , 14$) clusters , the peak value of heat capacity is delayed from the saturation value of Lindemann index . While , for each of these iridium clusters , the melting point from the Gupta potential is higher than that from the Sutton-Chen potential , and we attribute the main reason to the higher energy gaps between the ground state and the first excited state of these iridium clusters from the Gupta potential than those from the Sutton-Chen potential .

Keywords : iridium clusters , molecular dynamics , Gupta potential , Sutton-Chen potential , melting

PACC : 6146 , 3640B

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos . 10347010 ,10864005) and the Scientific Research Starting Foundation for Returned Overseas Chinese Scholars , Ministry of Education , China .

[†] Corresponding author . E-mail : dhm@xju.edu.cn