

# 受限在两层石墨烯纳米片间的 Pd-Au-Pt 三金属 纳米粒子相变的分子动力学模拟研究

于有权<sup>1</sup>, 邵景玲<sup>2</sup>, 魏 松<sup>1</sup>, 朱小蕾<sup>1</sup>

(1. 南京工业大学化工学院, 材料化学工程国家重点实验室, 江苏 南京 210009)

(2. 盐城工学院化学化工学院, 江苏 盐城 224051)

[摘要] 本文通过分子动力学(MD)模拟研究了受限在两层石墨烯纳米片(graphene nanosheet, GNS)间的 Pd-Au-Pt 三金属纳米粒子在升温 and 降温过程的结构和相变特征. 原子位置和密度分布被用于分析不同组分的 Pd-Au-Pt 三金属纳米粒子的结构和相变特征. 结果表明,受限的 Pd-Au-Pt 纳米粒子有特殊的原子分布, Pt 原子趋向于分布在靠近石墨烯纳米片的附近, Au 原子则趋向于分布在远离石墨烯纳米片的中心层区域, 而 Pd 原子最为独特, 以随机的方式分布在受限的纳米粒子中. 我们也注意到,受限的 Pd-Au-Pt 三金属纳米粒子的结晶从受限的三金属纳米粒子与 GNS 的界面开始, 熔化起始于内层. 本文也揭示了受限 Pd-Au-Pt 纳米粒子相变的结构特征.

[关键词] 三金属纳米粒子, 石墨烯, 相变, 分子动力学模拟

[中图分类号] O643.1 [文献标志码] A [文章编号] 1001-4616(2019)02-0087-06

## Study on Phase Transitions of Pd-Au-Pt Trimetallic Nanoparticles Confined Between Two-Layer Graphene Nanosheets Based on Molecular Dynamics Simulation

Yu Youquan<sup>1</sup>, Shao Jingling<sup>2</sup>, Wei Song<sup>1</sup>, Zhu Xiaolei<sup>1</sup>

(1. State Key Laboratory of Materials-Oriented Chemical Engineering, College of Chemical Engineering, Nanjing Tech University, Nanjing 210009, China)

(2. School of Chemistry and Chemical Engineering, Yancheng Institute of Technology, Yancheng 224051, China)

**Abstract:** A molecular dynamics(MD) simulation is applied to investigate the structure and feature of phase transitions for the Pd-Au-Pt trimetallic nanoparticle confined between two-layer graphene nanosheets (GNSs) during heating and cooling process. Atomic position and density distribution are used to examine and reveal the structural and phase transition characteristics of the confined Pd-Au-Pt trimetallic nanoparticles with different compositions. The results demonstrate that the three kinds of metals in the confined Pd-Au-Pt nanoparticles exhibit special atomic distributions, that is, the Pt atoms tend to be located near the graphene nanosheets, and the Au atoms tend to be distributed in the central layer far away from graphene nanosheets, while the Pd atoms distribute throughout the confined nanoparticle in a random manner. It is also noted that the crystallization of confined Pd-Au-Pt trimetallic nanoparticles starts from the intersurface between a confined trimetallic nanoparticle and GNS, and the melting begins from the inner layer. The structure feature for the phase transition of the confined Pd-Au-Pt nanoparticle is revealed.

**Key words:** trimetallic nanoparticle, graphene, phase transition, molecular dynamics simulation

多年来,由于金属纳米粒子具有独特的热力学和结构性质,它们是纳米材料的一个重要研究对象,并被广泛用于催化、传感器、光电和微电子等领域<sup>[1-2]</sup>. 与单组分金属纳米粒子相比,多组分金属纳米粒子具有更好的稳定性和可控性. 由于金属纳米粒子表面/体积比较大,导致其游离态相对不稳定,因此将金属纳米粒子负载在碳纳米管<sup>[3]</sup>和石墨烯纳米片<sup>[4-5]</sup>等基底上,可得到具备优异性能和高稳定性的复合材料.

收稿日期:2018-05-17.

基金项目:国家自然科学基金项目(91434109、21276122).

通讯联系人:朱小蕾,博士,教授,研究方向:分子模拟. E-mail:xlzhu@njtech.cn

众所周知,通过实验方法探究复合材料的热力学和结构性质是非常困难和昂贵的.而分子动力学(molecular dynamics, MD)模拟技术是在原子层次上研究上述问题的有效工具之一.因此,人们广泛采用 MD 模拟探究负载纳米粒子的结构和动力学性质.例如运用分子动力学模拟的方法研究了负载在石墨片上的铂纳米粒子的形状和结构演变.他们观测到了铂纳米粒子的表面熔化现象、温度诱导的润湿现象和熔化前低温段的结构变化. Jalili 等人<sup>[7]</sup>运用分子动力学模拟的方法研究了负载在两层石墨片上的铜纳米粒子.结果表明,铜纳米粒子的熔点在 770 K 左右,远低于大块铜的熔点.他们还发现了能量曲线的滞后、铜纳米粒子结构随温度变化的不可逆及铜纳米粒子的表面熔化等现象. Wang 等人<sup>[8]</sup>运用分子动力学模拟的方法研究了受限在两层石墨烯纳米片间的金纳米粒子的热力学和结构性质.结果发现,受限的金纳米粒子的熔点随着棒状金纳米粒子的长度的增加而降低.受限的金纳米粒子熔化从最中间层开始,凝固从最外层开始.每一层的无序-有序的转变是受限金凝固的本质结构特征.而三金属纳米粒子在之前也有过一些报道,如 Wei 等人<sup>[9]</sup>使用 Monte-Carlo 和分子动力学模拟研究了不同组成和尺寸的 Ag-Pt-Ni 三元金属纳米团簇的结构和热力学性质. Zhao 等人<sup>[10]</sup>基于 Gupta 势,利用 Monte Carlo 和分子动力学模拟研究了二十面体 Au-Pd-Pt 三金属团簇的团簇组成和尺寸对其结构和熔化行为的影响. Wei 等人<sup>[11]</sup>使用分子动力学(MD)模拟研究了受限在扶手椅式单壁碳管中的 Pd-Au-Pt 三金属纳米粒子的结构、热学和动力学性质.然而,到目前为止, Pd-Au-Pt 三金属纳米粒子受限在两层石墨烯纳米片间的结构和相变行为的研究还未见报道.因此,本文通过 MD 模拟方法对受限在两层石墨烯纳米片间的 Pd-Au-Pt 三金属纳米粒子的热力学和动力学性质进行了研究.该研究为将来合成新颖的负载金属纳米催化剂提供了基础数据.

1 计算方法

我们运用分子动力学模拟方法研究受限在两层石墨烯纳米片(graphene nanosheet, GNS)间的 Pd-Au-Pt 三金属纳米粒子的升温 and 降温过程.我们研究的体系组成为: $(Pd_xAu_yPt_z)_N$ ,  $x$ 、 $y$  和  $z$  分别代表 Pd、Au 和 Pt 的组分比例,  $N$  为金属纳米粒子总原子数,分别对应于 715(5 层), 1430(10 层), 2145(15 层).为了方便描述,当  $N=1430$ ,  $n=10$ ,  $x=0.1$ ,  $y=0.1$ ,  $z=0.8$  时,体系被表示为 118-10,以此类推,其它体系的组成见表 1.

表 1 研究体系的组成  
Table 1 The composition of systems studied

$x=y$	118 <sup>a</sup>	117 <sup>b</sup>	226 <sup>c</sup>	225 <sup>d</sup>	334 <sup>e</sup>	333 <sup>f</sup>	442 <sup>g</sup>	441 <sup>h</sup>
$y=z$	811	711	622	522	433	333	244	144
$x=z$	181	171	262	252	343	333	424	414

<sup>a</sup> 受限在两层石墨烯纳米片间的组分为 Pd10% Au10% Pt80% 的三金属纳米粒子.  
<sup>b</sup> 受限在两层石墨烯纳米片间的组分为 Pd15% Au15% Pt70% 的三金属纳米粒子.  
<sup>c</sup> 受限在两层石墨烯纳米片间的组分为 Pd20% Au20% Pt60% 的三金属纳米粒子.  
<sup>d</sup> 受限在两层石墨烯纳米片间的组分为 Pd25% Au25% Pt50% 的三金属纳米粒子.  
<sup>e</sup> 受限在两层石墨烯纳米片间的组分为 Pd30% Au30% Pt40% 的三金属纳米粒子.  
<sup>f</sup> 受限在两层石墨烯纳米片间的组分为 Pd33% Au33% Pt33% 的三金属纳米粒子.  
<sup>g</sup> 受限在两层石墨烯纳米片间的组分为 Pd40% Au40% Pt20% 的三金属纳米粒子.  
<sup>h</sup> 受限在两层石墨烯纳米片间的组分为 Pd45% Au45% Pt10% 的三金属纳米粒子.

MD 方法模拟盒子在石墨烯纳米片所在平面的两个方向上采用周期性边界条件.我们还按照前人文献的方法<sup>[8]</sup>,将 GNS 近似处理成刚性结构,其原子位置固定.本文采用 12-6 Lennard-Jones(L-J)势函数描述 GNS 与金属间的相互作用,其相应势参数见表 2.采用 TB-SMA(the second-moment approximation of the tight-binding)势函数描述金属与金属间的相互作用,其详细势参数见表 3.

表 2 MD 模拟中的相关 L-J 势参数  
Table 2 The related L-J potential parameters in MD simulations

Pairs	$\varepsilon/\text{eV}$	$\sigma/\text{\AA}$	参考文献
Pd-C	0.033 50	2.926	[12]
Au-C	0.012 73	2.9943	[13]
Pt-C	0.040 92	2.936	[12]

表 3 MD 模拟中过渡金属的 TB-SMA 势参数

Table 3 The potential parameters of TB-SMA potential for transition metals in MD simulations

M-M	$A/\text{eV}$	$\xi/\text{eV}$	$p$	$q$	$r_0$
Pd-Pd <sup>a</sup>	0.174 6	1.718	10.867	3.742	2.752
Au-Au <sup>a</sup>	0.206 1	1.790	10.229	4.036	2.884
Pt-Pt <sup>a</sup>	0.297 5	2.695	10.612	4.004	2.775
Au-Pt <sup>b</sup>	0.247 6	2.196	10.421	4.020	2.830
Au-Pd <sup>b</sup>	0.189 7	1.754	10.548	3.889	2.818
Pt-Pd <sup>b</sup>	0.227 9	2.152	10.740	3.873	2.763

<sup>a</sup>TB-SMA 势参数来源于文献[14].

<sup>b</sup> $A_{\text{Au-Pt}} = (A_{\text{Au-Au}} A_{\text{Pt-Pt}})^{1/2}$ ,  $A_{\text{Au-Pd}} = (A_{\text{Au-Au}} A_{\text{Pd-Pd}})^{1/2}$ ,  $A_{\text{Pt-Pd}} = (A_{\text{Pt-Pt}} A_{\text{Pd-Pd}})^{1/2}$ ,  $\xi_{\text{Au-Pt}} = (\xi_{\text{Au-Au}} \xi_{\text{Pt-Pt}})^{1/2}$ ,  $\xi_{\text{Au-Pd}} = (\xi_{\text{Au-Au}} \xi_{\text{Pd-Pd}})^{1/2}$ ,  $\xi_{\text{Pt-Pd}} = (\xi_{\text{Pt-Pt}} \xi_{\text{Pd-Pd}})^{1/2}$ ,  $p_{\text{Au-Pt}} = (1/2)(p_{\text{Au-Au}} + p_{\text{Pt-Pt}})$ ,  $p_{\text{Au-Pd}} = (1/2)(p_{\text{Au-Au}} + p_{\text{Pd-Pd}})$ ,  $p_{\text{Pt-Pd}} = (1/2)(p_{\text{Pt-Pt}} + p_{\text{Pd-Pd}})$ ,  $q_{\text{Au-Pt}} = (1/2)(q_{\text{Au-Au}} + q_{\text{Pt-Pt}})$ ,  $q_{\text{Au-Pd}} = (1/2)(q_{\text{Au-Au}} + q_{\text{Pd-Pd}})$ ,  $q_{\text{Pt-Pd}} = (1/2)(q_{\text{Pt-Pt}} + q_{\text{Pd-Pd}})$ ,  $r_{\text{o(Au-Pt)}} \approx (1/2)(r_{\text{o(Au-Au)}} + r_{\text{o(Pt-Pt)}})$ ,  $r_{\text{o(Au-Pd)}} \approx (1/2)(r_{\text{o(Au-Au)}} + r_{\text{o(Pd-Pd)}})$ ,  $r_{\text{o(Pt-Pd)}} \approx (1/2)(r_{\text{o(Pt-Pt)}} + r_{\text{o(Pd-Pd)}})$ .

在相变模拟过程中,首先将受限在两层石墨烯纳米片间的每个体系在 1 800 K 下进行加热处理,弛豫时间 1.2 ns,使其充分熔化,混合均匀. 然后,将熔化的 Pd-Au-Pt 纳米粒子从 1 800 K 缓慢降温到 300 K,温度间隔为 50 K,时间步长 3 fs,且在接近凝固点前后,温度梯度减小为 20 K. 在每个温度下,所有体系先应用正则系综(NVT)恒温模拟 40 000 步,再应用微正则系综(NVE)恒能量模拟 40 000 步. 降温过程完成后,将 300 K 下的结构作为缓慢升温的初始结构,以相同的时间步长和温度梯度从 300 K 升温到 1 800 K,同样,接近熔点时温度间隔降为 20K.

## 2 结果与讨论

从图 1 可以看出,平行于石墨烯纳米片的 Pd-Au-Pt 纳米粒子中间部分的原子数量要小于靠近石墨烯纳米片的外侧部分,且随着 Pd-Au-Pt 纳米粒子尺寸的增加,此现象愈加明显,此现象是由于受限的三金属纳米粒子受到上下石墨烯纳米片的作用,导致三金属纳米粒子有向石墨烯纳米片靠近的趋势. 我们还观察到,在垂直于石墨烯纳米片方向上,受限的  $(\text{Pd}_{0.33}\text{Au}_{0.33}\text{Pt}_{0.33})_N$  (其中  $N=715, 1\ 430$  和  $2\ 145$ ) 中的 Pt 原子趋向于分布在靠近石墨烯纳米片的附近, Au 原子则趋向于分布在远离石墨烯纳米片中心层区域,这种分布主要由于 Pt 原子与 GNS 的相互作用大于 Au 原子与 GNS 的相互作用. 而 Pd 原子几乎随机地分布在受限的三金属纳米粒子中.

为了更好地揭示受限 Pd-Au-Pt 纳米粒子中不同金属原子的分布情况,图 2 给出了金属原子在垂直于石墨烯纳米片方向上的密度分布图. 从图 2(a) 可以清楚地看出,在接近石墨烯纳米片附近, Pt 原子(点线)具有较强的密度峰,表明 Pt 原子倾向于分布在石墨烯纳米片附近. 在远离石墨烯纳米片的中间层, Au 原子(虚线)具有较强的密度峰,表明 Au 原子倾向于分布在 Pd-Au-Pt 纳米粒子的中间层. 而从图 2(b) 可以看出, Pd 原子在最外层和次外层出现的几率(三角形)接近平均密度分布(点线), Pt 原子在最外层和次外层出现的几率(正方形)明显大于平均密度分布(点线),而 Au 原子在最外层和次外层出现的几率(圆形)则远小于平均密度分布(点线),结果与图 1 和图 2(a) 所得的结论一致. 造成上述特殊原子分布的原因除了金属和石墨烯纳米片的相互作用外,还有金属间的相互作用,它们之间存在某种竞争机制,使得 Pd-Au-Pt 纳米粒子呈现出如此有趣的原子分布. 这与游离 Pd-Au-Pt 纳米粒子原子分布和结构明显不同<sup>[15]</sup>,主要原因在于作为基板的石墨烯纳米片的受限作用.

为了进一步了解受限基板(石墨烯纳米片)对于 Pd-Au-Pt 纳米粒子相变前后结构的影响,我们分析了在升温 and 降温过程中,受限的  $(\text{Pd}_{0.33}\text{Au}_{0.33}\text{Pt}_{0.33})_{1430}$  纳米粒子在不同温度下垂直于石墨烯纳米片方向的密度分布(图 3). 从图中可以看出,无论是升温(图 3(b))还是降温过程(图 3(a)),受限的  $(\text{Pd}_{0.33}\text{Au}_{0.33}\text{Pt}_{0.33})_{1430}$  纳米粒子在熔化前(图 3(a)) 300 K, 700 K 和(b) 300 K, 700 K 都具有 10 个明显的峰,表明熔化前具有明显的有序分层结构. 并且我们还发现在熔化后(图 3(a)) 1 200 K, 1 800 K 和(b) 1 200 K, 1 800 K,受限的  $(\text{Pd}_{0.33}\text{Au}_{0.33}\text{Pt}_{0.33})_{1430}$  纳米粒子在接近石墨烯纳米片的外层依旧存在较为明显的具有一定强度的峰,这表明在熔化后,受限  $(\text{Pd}_{0.33}\text{Au}_{0.33}\text{Pt}_{0.33})_{1430}$  的纳米粒子的外层仍然存在层化结构. 这种高温层化现象出现的主

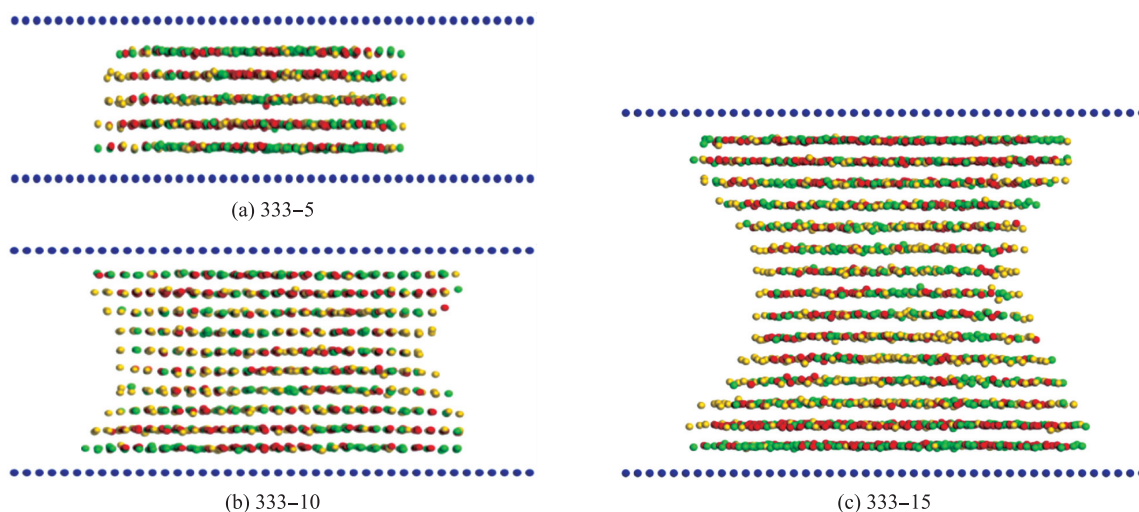


图 1 300 K 下,  $(\text{Pd}_{0.33}\text{Au}_{0.33}\text{Pt}_{0.33})_N$ -GNS( $N=715, 1430$  和  $2145$ ) 纳米粒子的结构图

(a)  $(\text{Pd}_{0.33}\text{Au}_{0.33}\text{Pt}_{0.33})_{715}$ -GNS; (b)  $(\text{Pd}_{0.33}\text{Au}_{0.33}\text{Pt}_{0.33})_{1430}$ -GNS;

(c)  $(\text{Pd}_{0.33}\text{Au}_{0.33}\text{Pt}_{0.33})_{2145}$ -GNS; 且图中白球、灰球、深灰球和黑球分别代表钯、金、铂和碳原子

Fig. 1 Images of  $(\text{Pd}_{0.33}\text{Au}_{0.33}\text{Pt}_{0.33})_N$ -GNS( $N=715, 1430$  and  $2145$ ) and  $(\text{Pd}_{0.25}\text{Au}_{0.5}\text{Pt}_{0.25})_{1430}$ -GNS

(a)  $(\text{Pd}_{0.33}\text{Au}_{0.33}\text{Pt}_{0.33})_{715}$ -GNS; (b)  $(\text{Pd}_{0.33}\text{Au}_{0.33}\text{Pt}_{0.33})_{1430}$ -GNS; (c)  $(\text{Pd}_{0.33}\text{Au}_{0.33}\text{Pt}_{0.33})_{2145}$ -GNS.

The white, gray, deep gray and black balls represent palladium, gold, platinum and carbon atoms respectively

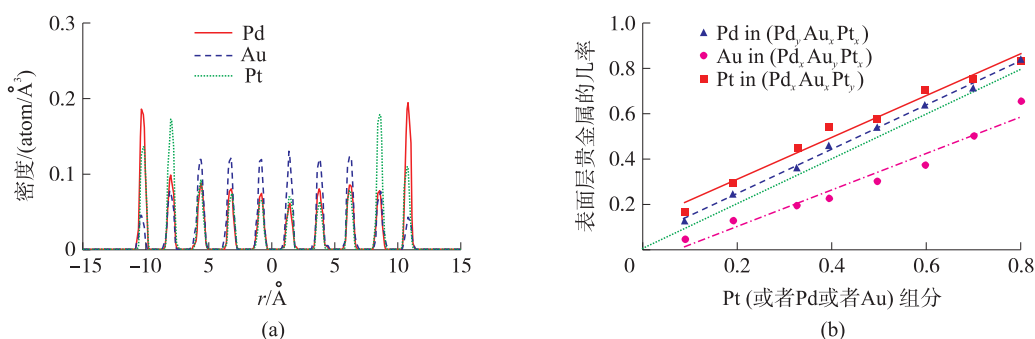


图 2 (a) 300 K 温度下, 受限下的  $(\text{Pd}_{0.33}\text{Au}_{0.33}\text{Pt}_{0.33})_{1430}$  纳米粒子垂直于石墨烯纳米片方向的密度分布图.

(b) 受限的  $(\text{Pd}_x\text{Au}_y\text{Pt}_x)_{1430}$ ,  $(\text{Pd}_x\text{Au}_y\text{Pt}_x)_{1430}$  和  $(\text{Pd}_y\text{Au}_x\text{Pt}_x)_{1430}$  ( $y=0.1, 0.2, 0.33, 0.4, 0.5, 0.6, 0.7$  和  $0.8; x=(1-y)/2$ ) 纳米粒子的 Pt (或 Pd 或 Au) 原子在最外层和次外层出现的几率与 Pt (或 Pd 或 Au) 组分的关系变化图, 点线代表平均分布

Fig. 2 (a) Density distribution for  $(\text{Pd}_{0.33}\text{Au}_{0.33}\text{Pt}_{0.33})_{1430}$  nanoparticles perpendicular to GNS at 300 K.

(b) The relationship between the Pt (or Pd or Au) probability in surface and subsurface layers and Pt (or Pd or Au)

composition in the confined  $(\text{Pd}_x\text{Au}_y\text{Pt}_x)_{1430}$ ,  $(\text{Pd}_x\text{Au}_y\text{Pt}_x)_{1430}$  and  $(\text{Pd}_y\text{Au}_x\text{Pt}_x)_{1430}$

( $y=0.1, 0.2, 0.33, 0.4, 0.5, 0.6, 0.7$  and  $0.8; x=(1-y)/2$ ). The point-dash line represents average distribution

要原因是石墨烯纳米片的受限作用. 另外, 我们从图 3 (a) 中还可以看到, 在降温过程中, 受限的  $(\text{Pd}_{0.33}\text{Au}_{0.33}\text{Pt}_{0.33})_{1430}$  纳米粒子的外层 (靠近石墨烯纳米片的区域) 的密度峰首先出现, 这表明成核和结晶过程起始于石墨烯纳米片和纳米粒子的界面附近. 同样从图 3 (b) 中可以得出熔化起始于纳米粒子的内层.

如上所述, 受限的 Pd-Au-Pt 纳米粒子在熔化后仍然存在层化结构, 这表明层化现象不是受限的 Pd-Au-Pt 纳米粒子相变的本质结构特征. 为了进一步探究 Pd-Au-Pt 纳米粒子相变的本质结构特征, 我们从图 4 的结构中可以看出,  $(\text{Pd}_{0.33}\text{Au}_{0.33}\text{Pt}_{0.33})_{1430}$  纳米粒子在熔化前 (图 4 (a) (b)) 的最外层和次外层原子排列呈现出有序的二维三角形结构, 而在熔化后 (图 4 (c) (d)), 最外层和次外层的原子排列呈现出杂乱无序的状态, 这表明受限的 Pd-Au-Pt 纳米粒子相变的本质结构特征是每一层中原子排列由有序到无序的转变.



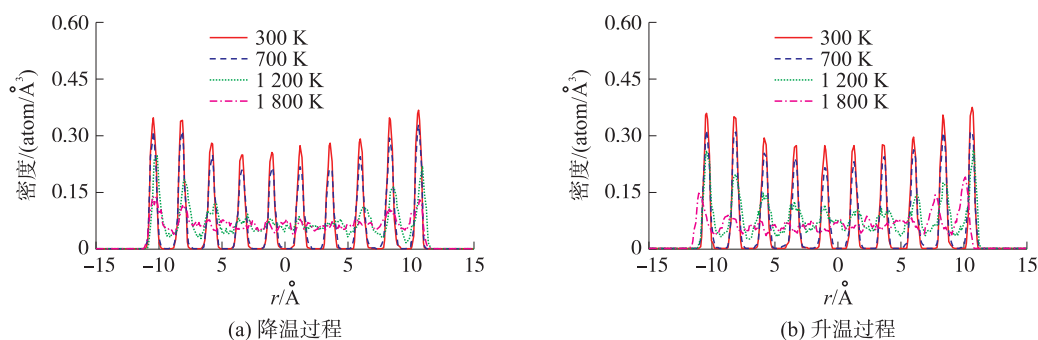


图3 受限的 $(\text{Pd}_{0.33}\text{Au}_{0.33}\text{Pt}_{0.33})_{1430}$ 在降温(a)和升温(b)过程中垂直于GNS方向的密度分布图

Fig. 3 Density function for the confined $(\text{Pd}_{0.33}\text{Au}_{0.33}\text{Pt}_{0.33})_{1430}$  perpendicular to GNS during the cooling(a) and heating(b) stages

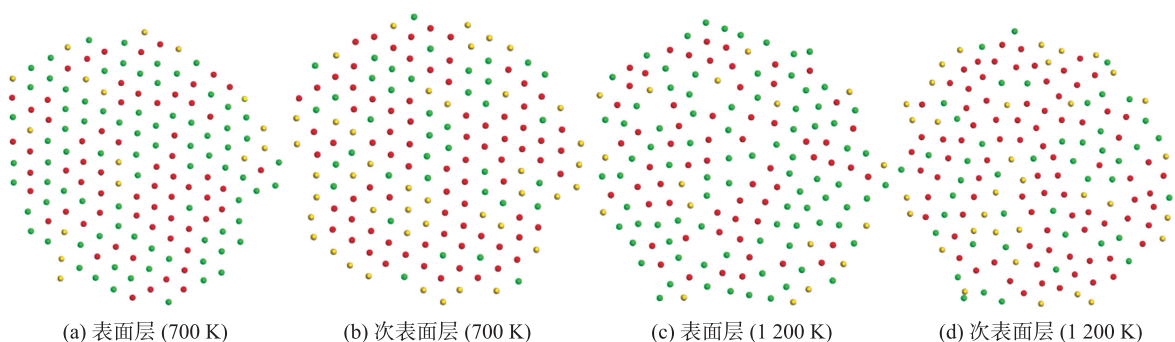


图4 在不同的温度下, $(\text{Pd}_{0.33}\text{Au}_{0.33}\text{Pt}_{0.33})_{1430}$ 纳米粒子在垂直于石墨烯方向的最外层和次外层的原子结构图

(a)和(b)分别对应于表面层(700 K)和次表面层(700 K),(c)和(d)分别对应于表面层(1 200 K)和次表面层(1 200 K).图中白球、灰球和深灰球分别代表钯、金、和铂原子

Fig. 4 The structure of surface and subsurface layer for $(\text{Pd}_{0.33}\text{Au}_{0.33}\text{Pt}_{0.33})_{1430}$  perpendicular to GNS at different temperatures (a) and (b) correspond to surface(700 K) and subsurface(700 K) layers, respectively, (c) and (d) correspond to surface(1 200 K) and subsurface(1 200 K) layers, respectively. The white, gray and deep gray balls represent palladium, gold and platinum atoms respectively

### 3 结论

我们通过分子动力学模拟对受限在两层石墨烯纳米片间的 Pd-Au-Pt 三金属纳米粒子的熔化和结晶过程进行了研究. 结构和密度分布图的分析结果表明, Pd-Au-Pt 三金属纳米粒子具有特殊的原子分布, 其中 Pt 原子趋向于分布在靠近石墨烯纳米片的附近, Au 原子则趋向于分布在远离石墨烯纳米片的中心层区域, 而 Pd 以随机的方式分布在整个受限的三金属纳米粒子中. 另一方面, 受限的三金属纳米粒子的结晶从受限的三金属纳米粒子与 GNS 的界面开始, 而熔化起始于纳米粒子的内层, 然后逐渐向外层拓展. 受限 Pd-Au-Pt 纳米粒子相变的结构特征是每一层中原子排列由有序到无序的结构转变. 本文的研究结果为负载金属纳米粒子的实验研究提供了基础数据.

#### [参考文献]

- [1] FAN F R, LIU D Y, WU Y F, et al. Epitaxial growth of heterogeneous metal nanocrystals: from gold nano-octahedra to palladium and silver nanocubes[J]. J Am Chem Soc, 2008, 130(20): 6949–6951.
- [2] WANG Y G, MEI D H, GLEZAKOU V A, et al. Dynamic formation of single-atom catalytic active sites on ceria-supported gold nanoparticles[J]. Nature communications, 2015, 6: 6511.
- [3] IJIMA S. Helical microtubules of graphitic carbon[J]. Nature, 1991, 354(6348): 56–58.
- [4] MATERIALS N. The rise of graphene[J]. Nature material, 2007, 6(3): 183–191.
- [5] GEIM A K. Graphene: status and prospects[J]. Science, 2009, 324(5934): 1530–1534.
- [6] HUANG S P, BALBUENA P. Platinum nanoclusters on graphite substrates: a molecular dynamics study[J]. Molecular physics, 2002, 100(13): 2165–2174.

- [ 7 ] JALILI S, MOCHANI C, AKHAVAN M, et al. Molecular dynamics simulation of a graphite-supported copper nanocluster: thermodynamic properties and gas adsorption[J]. Molecular physics, 2012, 110(5): 267–276.
- [ 8 ] WANG G, WU N H, CHEN J H, et al. Phase transitions and kinetic properties of gold nanoparticles confined between two-layer graphene nanosheets[J]. Journal of physics & chemistry of solids, 2016, 98: 183–189.
- [ 9 ] WEI C C, ZHAO Z, FISHER A, et al. Theoretical study on the structures and thermal properties of Ag-Pt-Ni trimetallic clusters[J]. Journal of cluster science, 2016, 27(6): 1–13.
- [ 10 ] ZHAO Z, LI M J, CHENG D J, et al. Understanding the structural properties and thermal stabilities of Au-Pd-Pt trimetallic clusters[J]. Chemical physics, 2014, 441: 152–158.
- [ 11 ] WEI H, WEI S, ZHU X L, et al. Investigation of structural, thermal, and dynamical properties of Pd-Au-Pt ternary metal nanoparticles confined in carbon nanotubes based on MD simulation[J]. Journal of physical chemistry C, 2017, 121(23): 12911–12920.
- [ 12 ] SANKARANARAYANAN S K R S, BHETHANABOTLA V R, JOSEPH B. Molecular dynamics simulations of the structural and dynamic properties of graphite-supported bimetallic transition metal clusters[J]. Physical review B, 2005, 72(19): 195405.
- [ 13 ] LUEDTKE W D, LANDMAN U. Slip diffusion and Lévy flights of an adsorbed gold nanocluster[J]. Physical review letters, 1999, 82(19): 3835–3838.
- [ 14 ] CLERI F, ROSATO V. Tight-binding potentials for transition metals and alloys.[J]. Physical review B condensed matter, 1993, 48(1): 22–23.
- [ 15 ] SHIBUTA Y, SUZUKI T. A molecular dynamics study of the phase transition in bcc metal nanoparticles.[J]. Journal of chemical physics, 2008, 129(14): 144102.

[ 责任编辑:顾晓天 ]