

УДК 539.21 : 536.42

**ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК
НАНОКЛАСТЕРОВ МЕТАЛЛОВ В ПРОЦЕССЕ
ПЛАВЛЕНИЯ/КРИСТАЛЛИЗАЦИИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ
МНОГОЧАСТИЧНОГО ПОТЕНЦИАЛА ГУПТА**

Д.Н. Соколов, А.П. Андрийчук, М.А. Харитонова, И.В. Карташов,
П.В. Комаров, Н.Ю. Сдобняков
Тверской государственный университет
17002, Тверь, Садовый пр., 35
nsdobnyakov@mail.ru

Аннотация: В данной работе проведено исследование структурных характеристик нанокластеров металлов на примере золота в процессе фазового перехода плавление/кристаллизация. Показано возможность определения температуры фазового перехода по температурной зависимости среднего значения первого координационного числа. Описан процесс формирования ГЦК/ГПУ структур при плавлении и кристаллизации нанокластеров золота.

Ключевые слова: нанокластеры золота, плавление и кристаллизация, метод Монте-Карло, потенциал Гупта, первое координационное число, локальная плотность, ГЦК структура, ГПУ структура.

1. Введение

Исследование термодинамических и структурных характеристик металлических наночастиц имеет как фундаментальное, так и прикладное значение. Причиной этому является перспектива их применения в различных отраслях нанотехнологий, медицины и энергетики. В свою очередь, для этого необходимо прогнозировать возможное влияние размерных эффектов на термодинамические характеристики. Кроме того, важным фактором, определяющим свойства изолированных наночастиц, является их структура и возможность ее сохранения при обратимых фазовых переходах.

В последнее время для исследования наносистем используются различные методы вычислительной физики. Наиболее популярными из них являются метод молекулярной динамики и метод Монте-Карло [1,2].

Как правило, фазовый переход первого рода обнаруживается по скачку (излому) на калорической кривой, т.е. зависимости потенциальной части удельной (в расчете на один атом) внутренней энергии $U(T)$ системы «наночастица – пар». Кроме того, своеобразным аналогом определения температуры плавления и кристаллизации можно считать подход, в рамках которого вместо скачка (излома) потенциальной части удельной внутренней энергии исследуется пик на температурной зависимости удельной теплоемкости $c_v = dU/dT$ [3]. Возрастание теплоемкости происходит в очень узкой температурной области вокруг точки фазового

перехода, что позволяет с достаточной точностью определять температуру плавления и кристаллизации кластера. Необходимо также отметить, что в настоящее время существуют также методы нетермодинамического исследования фазовых переходов в нанокластерах, в частности акустический метод [4], однако анализ и интерпретация получаемых в таких экспериментах результатов выходит за рамки данной работы. В нашей работе проведено исследование структурных характеристик нанокластера в окрестности фазового перехода и соответственно для идентификации фазового перехода целесообразно изучение такой важной структурной характеристики как первого координационного числа $\langle Z_1 \rangle$, скачок которого непосредственно связан со скачком удельного объема ν . В литературе такой подход встречается реже, в частности, в работе [5] температурные зависимости первого координационного числа приведены лишь для леннард-джонсовской наночастицы.

Другим подходом исследования фазового перехода кристалл/жидкость может служить исследование массива координат атомов нанокластера, получаемого в процессе моделирования. Из таких массивов можно извлечь следующую информацию об объекте: радиальные функции распределения, средние значения координационных чисел, локальную плотность, распределение кристаллических структур в нанокластере (ГЦК, ГПУ и т.д.). Задаче определения кристаллических структур в кластерах и жидкостях посвящено множество работ и в настоящее время существует следующие алгоритмы распознавания структур: анализ общих соседей (CNA – анализ) [6], анализ многогранников Вороного-Делоне [7], анализ распределения углов [8] и метод адаптивного шаблона [9]. Для исследования структуры металлических объектов можно использовать в частности программный продукт Ovito [10], который предоставляет широкий спектр алгоритмов для исследования структурных и других характеристик наносистем.

Целью данной работы является исследование структурных характеристик нанокластера золота при последовательном нагревании до температуры плавления, соответствующей данному числу атомов в нанокластере, и последовательному охлаждению до первоначальной температуры.

2. Методика исследования

В данной работе для исследования гистерезиса процесса плавления и кристаллизации нанокластеров золота применен метод Монте-Карло. Взаимодействие между атомами кластера задавалось многочастичным потенциалом Гупта [11]. Для частицы, содержащей N атомов, потенциал Гупта можно записать в виде

$$U = \sum_{i=1}^N \left\{ \sum_{j \neq i}^N A \exp \left(-p \left(\frac{r_{ij}}{r_0} - 1 \right) \right) - \left[\sum_{j \neq i}^N \zeta^2 \exp \left(-2q \left(\frac{r_{ij}}{r_0} - 1 \right) \right) \right]^{1/2} \right\}. \quad (1)$$

Фактически выражение (1) представляет разность двух слагаемых:

$$U = \sum_{i=1}^N \{ U^r(i) - U^a(i) \}, \quad (2)$$

здесь $U^r(i) = \sum_{j \neq i}^N A \exp \left(-p \left(\frac{r_{ij}}{r_0} - 1 \right) \right)$ – часть потенциала Гупта, описывающая

отталкивание и $U^a(i) = \left[\sum_{j \neq i}^N \zeta^2 \exp \left(-2q \left(\frac{r_{ij}}{r_0} - 1 \right) \right) \right]^{1/2}$ – притяжение

соответственно. В выражении (3) r_{ij} – расстояние между атомами i и j в кластере, параметр A – экспериментальное значение энергии когезии, r_0 – параметр кристаллической решётки, p и q – значения упругих постоянных кристаллической структуры при $T=0K$. Для атомов золота были взяты следующие параметры потенциала Гупта [12]: $A=0,206 \text{ эВ}$, $\zeta=1,790 \text{ эВ}$, $r_0=2,884 \text{ \AA}$, $p=10,229$ и $q=4,036$.

При построении атомистической модели наночастиц диаметра D был использован следующий алгоритм:

– строится гранецентрированная кубическая решетка большого размера с длиной ребра элементарной ячейки ($a=4,08 \text{ \AA}$ [13]) и углом между ребрами 90° ;

– выбираются координаты тех атомов, которые целиком принадлежат сфере диаметра D .

Такой алгоритм неизбежно приводит к появлению огранки наночастиц.

Для моделирования эволюции наночастиц при изменении их температуры и диаметра была использована расчетная схема, применявшаяся нами ранее [14-16]. В большом каноническом ансамбле случайное смещение, выбранного случайным образом i -го атома золота, из некоторого «старого» положения \mathbf{O} в «новое» \mathbf{N} определяется вероятностью перехода

$$P(\mathbf{O} \rightarrow \mathbf{N}) = \min \{ 1, \exp(\Delta U / k_B T) \}, \quad (3)$$

где ΔU – разность полных энергий (1), соответствующих положениям \mathbf{O} и \mathbf{N} , k_B – постоянная Больцмана.

Периодические граничные условия к ячейке моделирования не применялись, поскольку нас интересовало поведение только одной наночастицы, положение центра которой было фиксировано.

В случае нагревания нанокластера было выполнено 10^5 МК – макрошагов расчётной схемы (отнесённых на каждый силовой центр) и в случае охлаждения наночастицы – 10^6 МК. При этом 90% из них отводилось на уравнивание системы, которое определялось стабилизацией внутренней энергии (3). Шаг температуры и в том и другом случае был выбран $\sim 7K$, это позволяло системе плавно переходить из одного состояния в другое. Далее происходил расчёт средней внутренней энергии кластера в зависимости от температуры. По скачку калорической кривой $U(T)$ определялся фазовый переход первого рода.

После проведения серии расчётов, нами были исследованы массивы координат атомов нанокластера, из которых были получены следующие структурные характеристики: радиальная функция распределения, температурная зависимость среднего значения первого координационного числа, распределение атомов по количеству соседей, локальную плотность и температурную зависимость распределений доли ГЦК и ГПУ структур в нанокластере.

Для определения структур нанокластера, нами был реализован алгоритм анализа распределения по углам [8], который сравнительно прост, точен и устойчив при высоких температурах. Кратко изложим его здесь:

1. Выбираем некоторый атом i и вычисляем величину $r_0^2 = \sum_{j=1}^6 r_{ij}^2 / 6$, где j пробегает по 6 ближайшим к нему атомам;
2. Находим N_0 ближайших соседей, для которых $r_{ij}^2 < 1,45 r_0^2$ и N_1 с $r_{ij}^2 < 1,55 r_0^2$;
3. Вычисляем $\cos \theta_{jik}$ между всеми $N_0(N_0 - 1) / 2$ соседями;
4. Зная $\cos \theta_{jim}$, где θ_{jim} угол образованный атомами j, i, m , определяем $\chi_{i(k)}$ – количество попаданий соседей j и m в k -ый интервал (см. Таблицу 1);
5. Атомы, для которых $N_0 < 11$ или $\chi_{i(0)} > 0$ обозначаем как нераспознанные;
6. Если $\chi_{i(0)} = 7$, то атом принадлежит ГПУ структуре, если $\chi_{i(0)} = 6$, то атом принадлежит ГЦК структуре, если $\chi_{i(0)} = 3$, то атом относится к ГПУ структуре;
7. Зная $\chi_{i(k)}$, вычисляем отклонение от ожидаемого углового распределения δ (см. Таблицу 1);
8. Если $\delta > 0,1$, то структура не распознана;
9. Если $\delta_{bcc} < \delta_{cp}$ и $10 < N_1 < 13$, обозначаем атом как ГПУ;

10. Если $N_0 > 12$ то структура не распознана, в противном случае, если $\delta_{hcp} < \delta_{fcc}$ получим ГПУ, обратно $\delta_{fcc} < \delta_{hcp}$ даст ГЦК атом. Здесь δ вычисляется по следующим формулам:

$$\delta_{bcc_i} = 0,35 \chi_{i(4)} / (\chi_{i(5)} + \chi_{i(6)} + \chi_{i(7)} - \chi_{i(4)}), \quad (4)$$

$$\delta_{cp_i} = 0,61 \cdot |1 - \chi_{i(6)} / 24|, \quad (5)$$

$$\delta_{fcc_i} = 0,1 (|\chi_{i(0)} + \chi_{i(1)} - 6| + \chi_{i(2)}), \quad (6)$$

$$\delta_{bcc_i} = (|\chi_{i(0)} - 3| + |\chi_{i(0)} + \chi_{i(1)} + \chi_{i(2)} + \chi_{i(3)} - 9|) / 12. \quad (7)$$

По Таблице 1 можно определить принадлежность атомов j и m номеру интервала k в зависимости от значения $\cos(\theta_{jim})$.

Таблица 1. Соответствие номера интервала k и $\cos(\theta_{jim})$.

Номер интервала k	Соответствующий $\cos(\theta_{jim})$
0	$\cos \theta_{jim} \in [-1, 0; -0,945)$
1	$\cos \theta_{jim} \in [-0,945; -0,915)$
2	$\cos \theta_{jim} \in [-0,915; -0,755)$
3	$\cos \theta_{jim} \in [-0,755; -0,705]$
4	$\cos \theta_{jim} \in [-0,195; 0,195)$
5	$\cos \theta_{jim} \in [0,195; 0,245)$
6	$\cos \theta_{jim} \in [0,245; 0,795)$
7	$\cos \theta_{jim} \in [0,795; -1, 0)$

3. Результаты и обсуждение

Рассмотрим подробнее изменения, происходящие в структуре нанокластеров золота в процессе нагревая до температуры плавления с переходом до температур выше температуры фазового перехода для рассматриваемого размера нанокластера и дальнейшего охлаждения до исходной температуры.

На рис. 1 приведены корреляционные радиальные функции распределения нанокластера золота «до» и «после» плавления, а также «после» процесса кристаллизации. Анализ кривых показывает, что после плавления произошёл размыв пиков, что свидетельствует о переходе нанокластера в жидкое состояние. Визуализация нанокластеров по мгновенным конфигурациям атомов позволяет сделать вывод о том, что форма и внутренняя структура нанокластера не восстанавливается.

Другой важной характеристикой является среднее значение первого координационного числа $\langle Z_1 \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N Z_i$, которое определяют среднее

значение числа соседей вблизи каждого атома. Поэтому одной из задач проведенного исследования являлось определение области гистерезиса значения первого координационного числа (см. рис. 2). Аналогичный эффект наблюдается и для температур плавления T_m и кристаллизации T_c кластеров [17]. Для макроскопических кристаллических систем фазовые переходы твердое тело - жидкость и жидкость - твердое тело происходят при практически одинаковых температурах (т.е. квазиравновесная кристаллизация происходит при небольшом переохлаждении порядка 1K).

В случае наночастиц переход из твердого состояния в жидкое и наоборот происходит в конечной температурной области ширины $\Delta T = T_m - T_c$. Скачок $\langle Z_1 \rangle$ при плавлении нанокластера связан со скачком удельного объема ν . Анализируя рис. 2 видно, что в кластере, содержащем 1055 атомов при температуре $T_m \sim 1340K$ (соответствует температуре плавления для данного размера нанокластера) происходит скачок значения первого координационного числа с $Z_1 \sim 10,1$ до $Z_1 \sim 8,2$. Соответственно в процессе плавления нанокластера его структуры становится более «рыхлой».

При последующей кристаллизации наблюдается резкий рост среднего значения первого координационного числа практически до его первоначального значения. Отметим также, что на рис. 2 видна область гистерезиса значения первого координационного числа, при этом нами установлено, что с увеличением размера частиц ширина гистерезиса увеличивается, а в макроскопическом пределе должна, по-видимому, сократиться скачком. Факт существенной перестройки структуры нанокластера подтверждается также на гистограммах, определяющих долю атомов η , содержащих возле себя N соседних атомов до начала плавления и после завершения кристаллизации при одинаковой температуре (см. рис. 3-4).

С увеличением температуры происходит плавная перестройка атомов золота, приводящая к разрушению ГЦК структуры. Анализирую начальное (исходное) распределение атомов, имеющих определенное количество ближайших соседей (рис. 3), приходим к выводу, что почти половина всех атомов в структуре нанокластера имеет $N=12$ – «ядро» нанокластера, а доли атомов с $N=6,8,9$ практически равны между собой. Однако в процессе кристаллизации структура нанокластера золота существенно меняется (рис. 4). «Ядро» нанокластера становится размытым (число атомов с $N=12$ уменьшается, число атомов с $N=11$ возрастает, появляются атомы с $N=7,10$). Кроме того, структура вокруг самого «ядра» также перестраивается, т.е. первоначальная структура восстанавливается лишь частично.

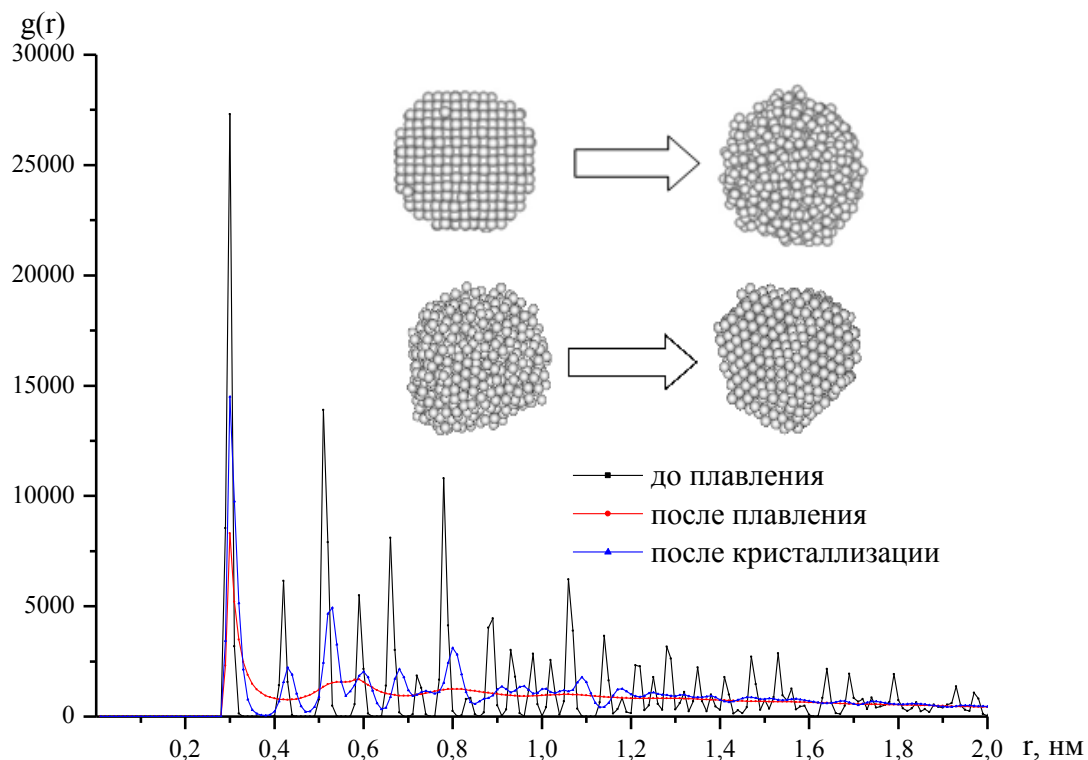


Рис. 1. Корреляционные радиальные функции для нанокластера золота, состоящего из 1055 атомов (до плавления $T = 674K$, после плавления $T = 1345K$, после кристаллизации $T = 872K$). Приведены также мгновенные конфигурации кластеров соответствующие данным температурам.

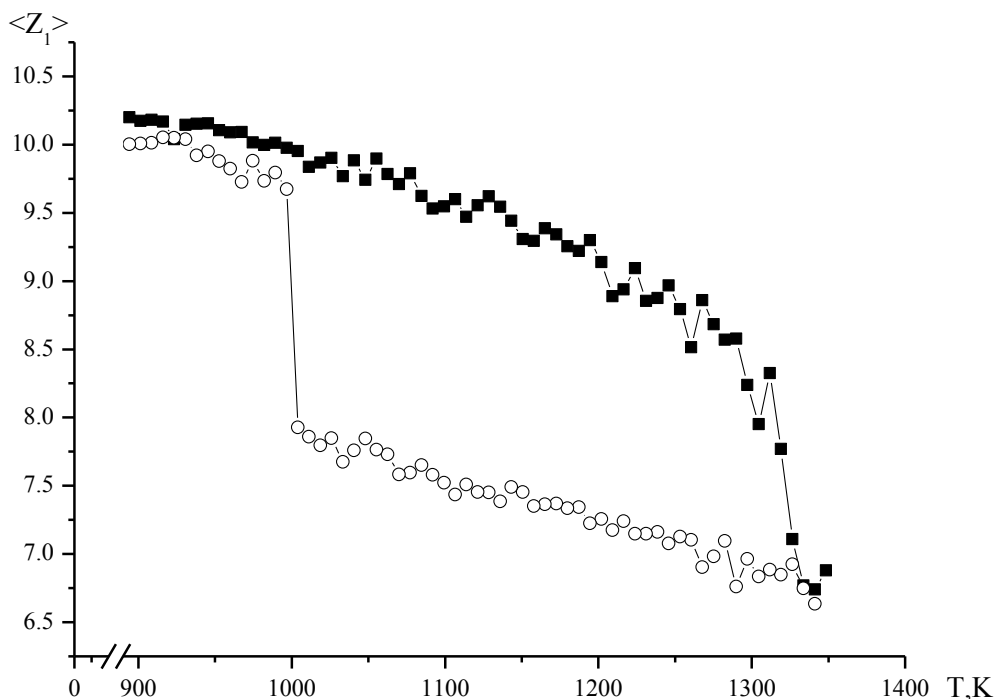


Рис. 2. Температурная зависимость среднего значения первого координационного числа, кластера состоящего из 1055 атомов. Сплошная кривая соответствует нагреванию, штриховая – охлаждению.

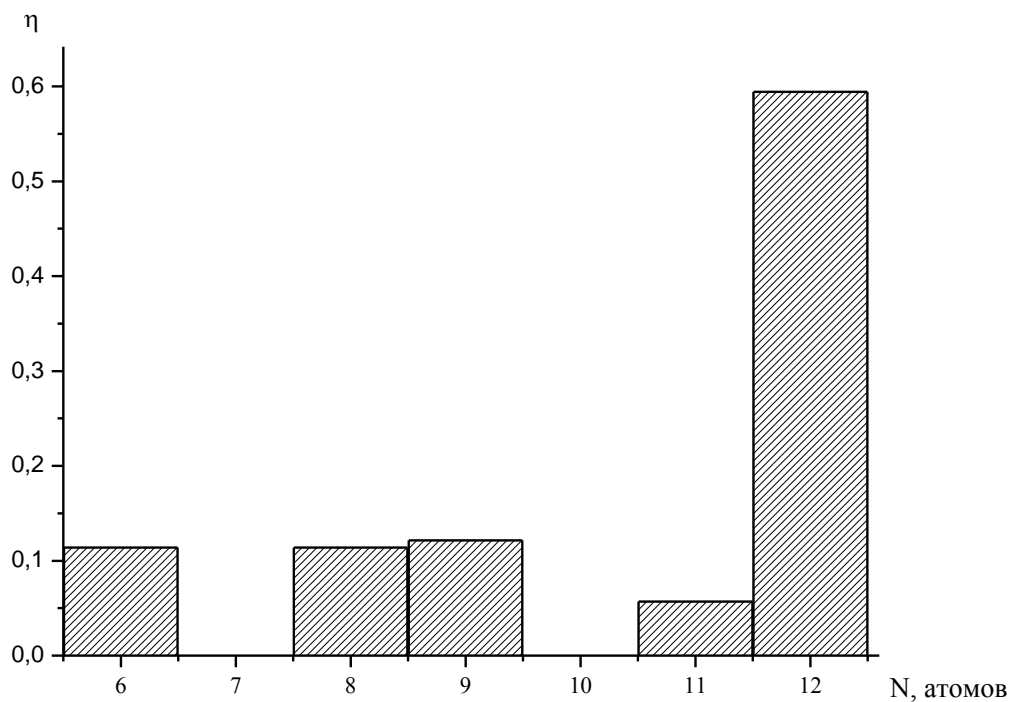


Рис. 3. Доля атомов η , содержащих возле себя N соседних атомов. Гистограмма соответствует начальной конфигурации кластера до плавления ($T = 293\text{ K}$).

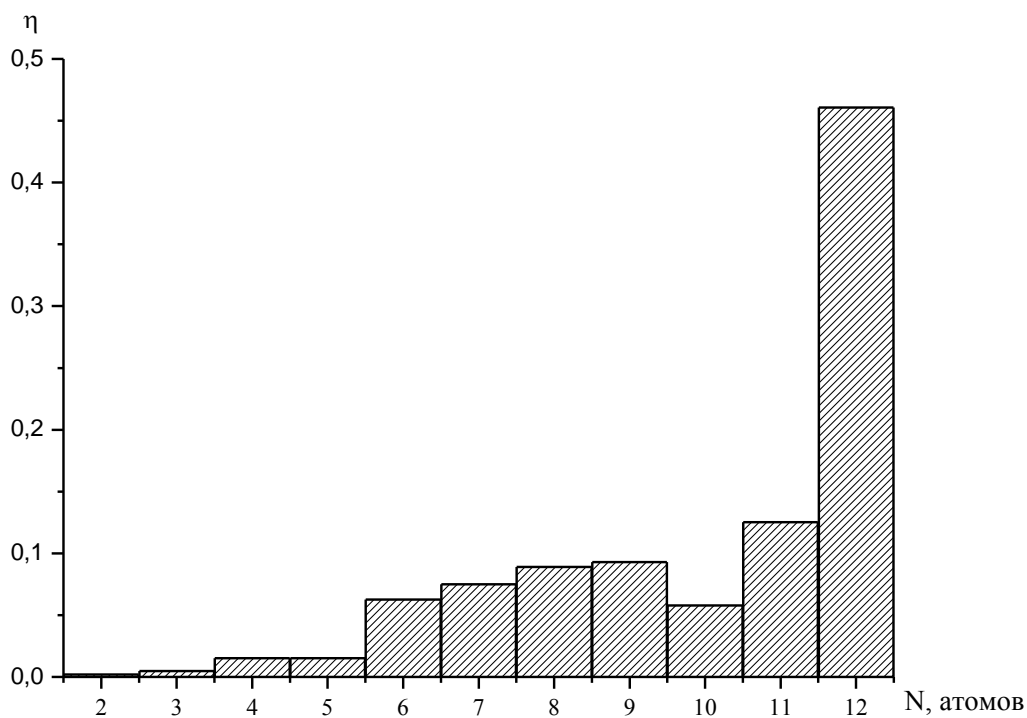


Рис. 4. Доля атомов η , содержащих возле себя N соседних атомов. Гистограмма соответствует системе, которую подвергли плавлению, а затем плавно охладили до температуры ($T = 872\text{ K}$).

Еще одним подтверждением, разрушения структуры служат графики приведенной локальной плотности атомов нанокластера золота в зависимости от расстояния до центра инерции. Приведенная локальная плотность определялась с помощью соотношения $\rho_{local} = \Delta N(r) / \Delta V(r) \cdot d^3$, где $\Delta N(r)$ – количество атомов в объёме $\Delta V(r) = V(r + \Delta r) - V(r)$, r – радиальная координата, т.е. расстояние от геометрического центра частицы, совпадающего с её центром масс, $d = r_0$ – эффективный атомный диаметр. Будем предполагать, что форма наночастицы близка к сферической, поэтому $V(r) = (4/3) \cdot \pi r^3$. Анализ зависимости локальной плотности $\rho_{local}(r)$ (см. рис. 5) показывает, что до плавления среднее значение локальной плотности $\bar{\rho}_{(s),local} \sim 1,21$, а после плавления $\bar{\rho}_{(l),local} \sim 0,98$, что соответствует существованию жидкой фазы.

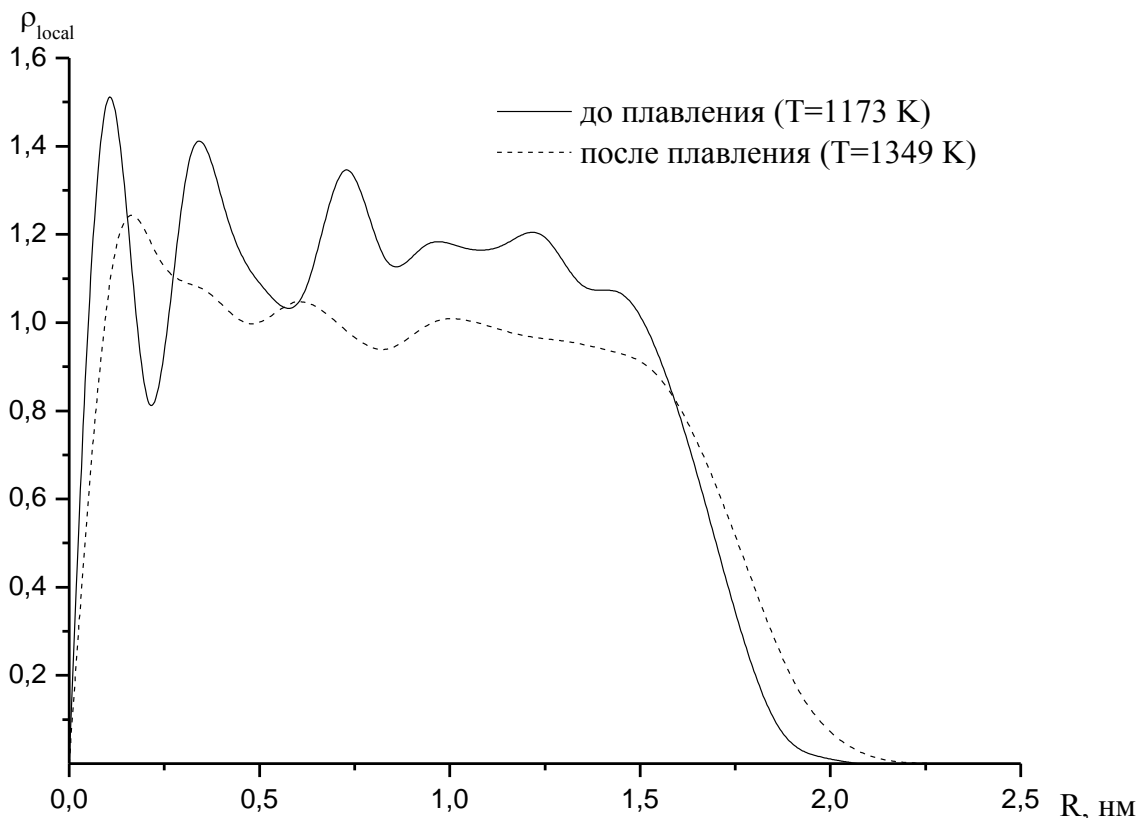


Рис. 5. Локальная плотность атомов кластера ρ_{local} от расстояния до центра инерции.

Данный результат представляется достаточно интересным. Во-первых, для массивной фазы ГЦК структуры приведенная плотность может быть найдена следующим образом $\rho_{bulk}^{(s)} = (4/a^3) \cdot d^3$, где a – параметр решетки для макроскопического кристалла золота. Таким образом, оценка

приведенной плотности для массивной фазы дает значение $\rho_{bulk}^{(s)} \sim 1,41$, т.е. $\rho_{bulk}^{(s)} > \bar{\rho}_{(s),local}$, что позволяет сделать вывод о том, что для нанокластеров вблизи точки плавления существует область «предплавления», т.е. нанокластер может обладать поверхностным слоем – «жидкой» шубой толщиной δ при температуре ниже температуры плавления характерного для данного размера нанокластера. Данная теория рассматривалась как в ряде наших предыдущих работ [18-20], так и другими авторами [21-24]. Во-вторых, для качественной оценки значения приведенной плотности макроскопической жидкой фазы можно воспользоваться критерием И.З. Фишера [25], согласно которому для простого флюида собственный объем атома равен половине объема, приходящегося на один атом жидкости при температуре плавления $\rho_{bulk}^{(l)} = 3/\pi \sim 0,96$.

На рис. 6 представлена температурная зависимость доли различных структур λ , полученных по методике, представленной в работе [8], в нанокластере золота, показывающая, что с увеличением температуры происходит уменьшение числа атомов образующих ГЦК решетку, появляются в структуре нанокластера образования с ГПУ структурой. При приближении к точке фазового перехода доля атомов с нераспознанной структурой резко возрастает, что также свидетельствует о начале плавления нанокластера, т.е. косвенно подтверждает существование области «предплавления».

На рис. 7 приведен обратный процесс – охлаждения системы. Анализ температурной зависимости доли различных структур λ показывает, что после прохождения области фазового перехода при охлаждении системы структура нанокластера восстанавливается, но при этом ГПУ структура практически наравне конкурирует с ГЦК структурой. Более наглядно структурные преобразования в нанокластерах обнаруживаются при визуальном исследовании. На рис. 8 представлены мгновенные конфигурации атомов в процессе нагревания кластера при различных температурах. Видно, что при температуре 293K нанокластер факторизуется на две части – внутренние атомы, представленные ГЦК структурой и поверхностные, которые невозможно распознать. В процессе нагревания на поверхности внутренних атомов появляются ГПУ атомы. Их наибольшая доля приходится на температурный интервал 1018–1319K и в среднем составляет $\sim 2,15\%$. В то же время, доля ГЦК атомов падает и в окрестности фазового перехода (1311K) скачком падает до нуля. После фазового перехода доля нераспознанных атомов колеблется около 100%, что свидетельствует о переходе нанокластера в жидкое состояние.

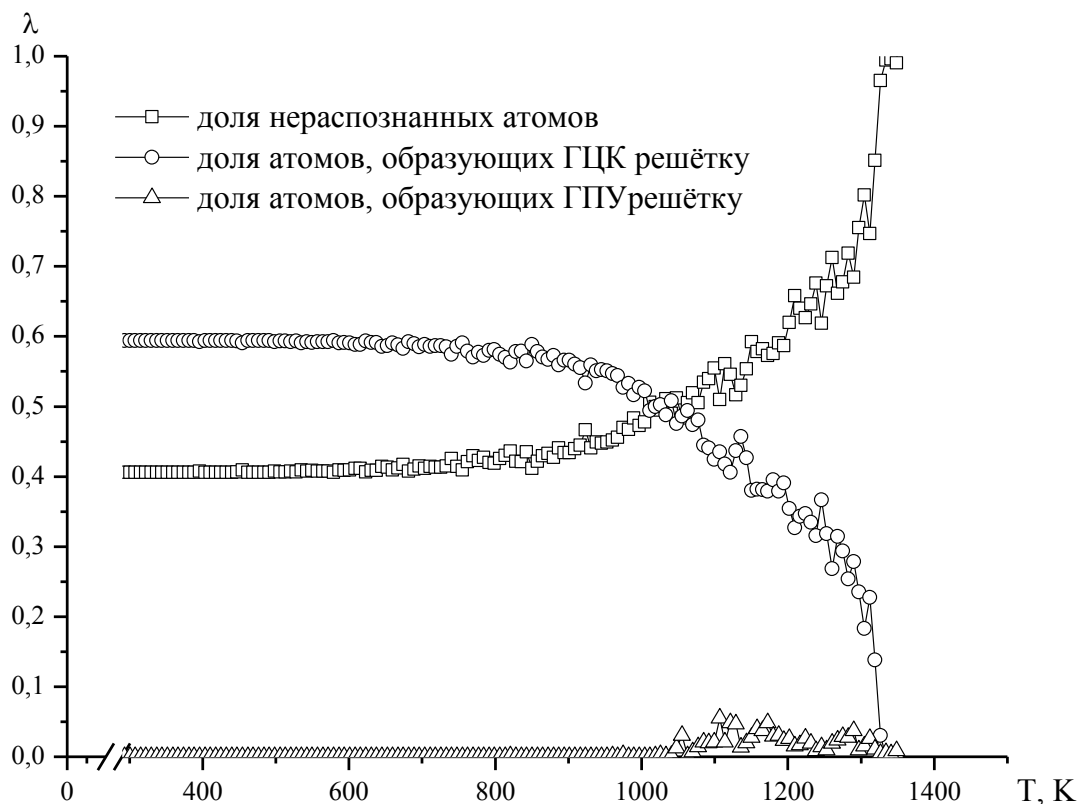


Рис. 6. Температурная зависимость доли различных структур λ в нанокластере золота, наблюдаемых в области фазового перехода (нагревание).

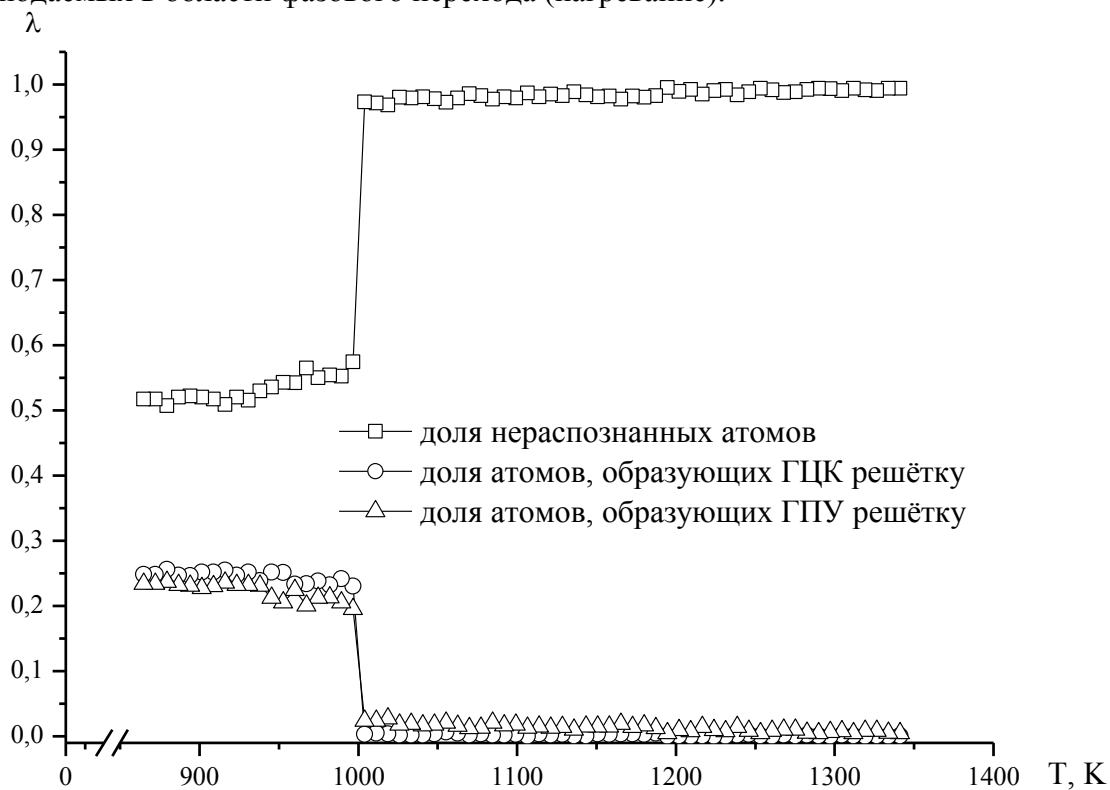


Рис. 7. Температурная зависимость доли различных структур λ в нанокластере золота, наблюдаемых в области фазового перехода (охлаждение).

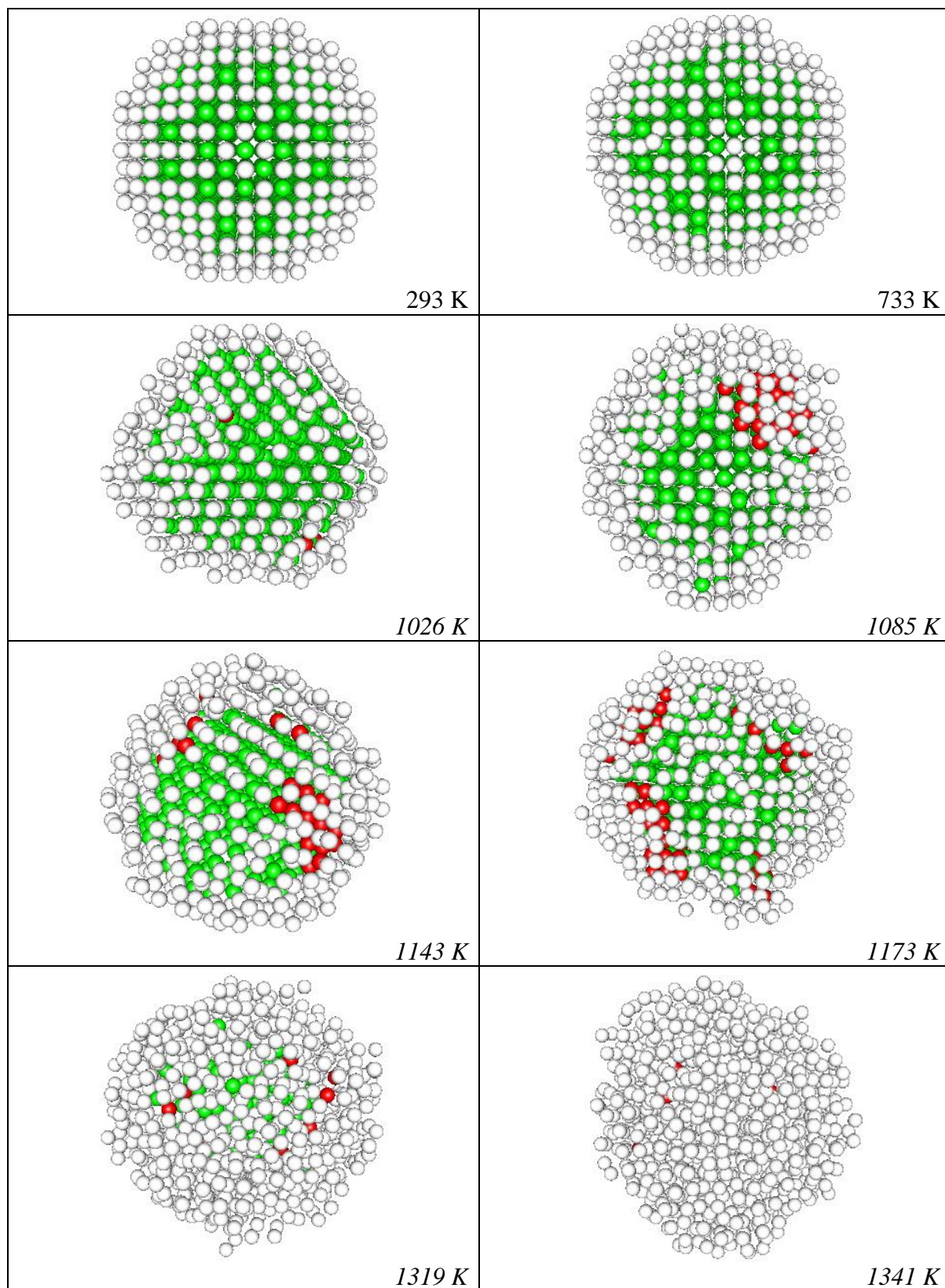


Рис. 8. Структурные превращения в нанокластере Au_{1055} в процессе нагревания. Зелёный цвет – ГЦК структура, красный цвет – ГПУ структура, белый цвет – структура не распознана.

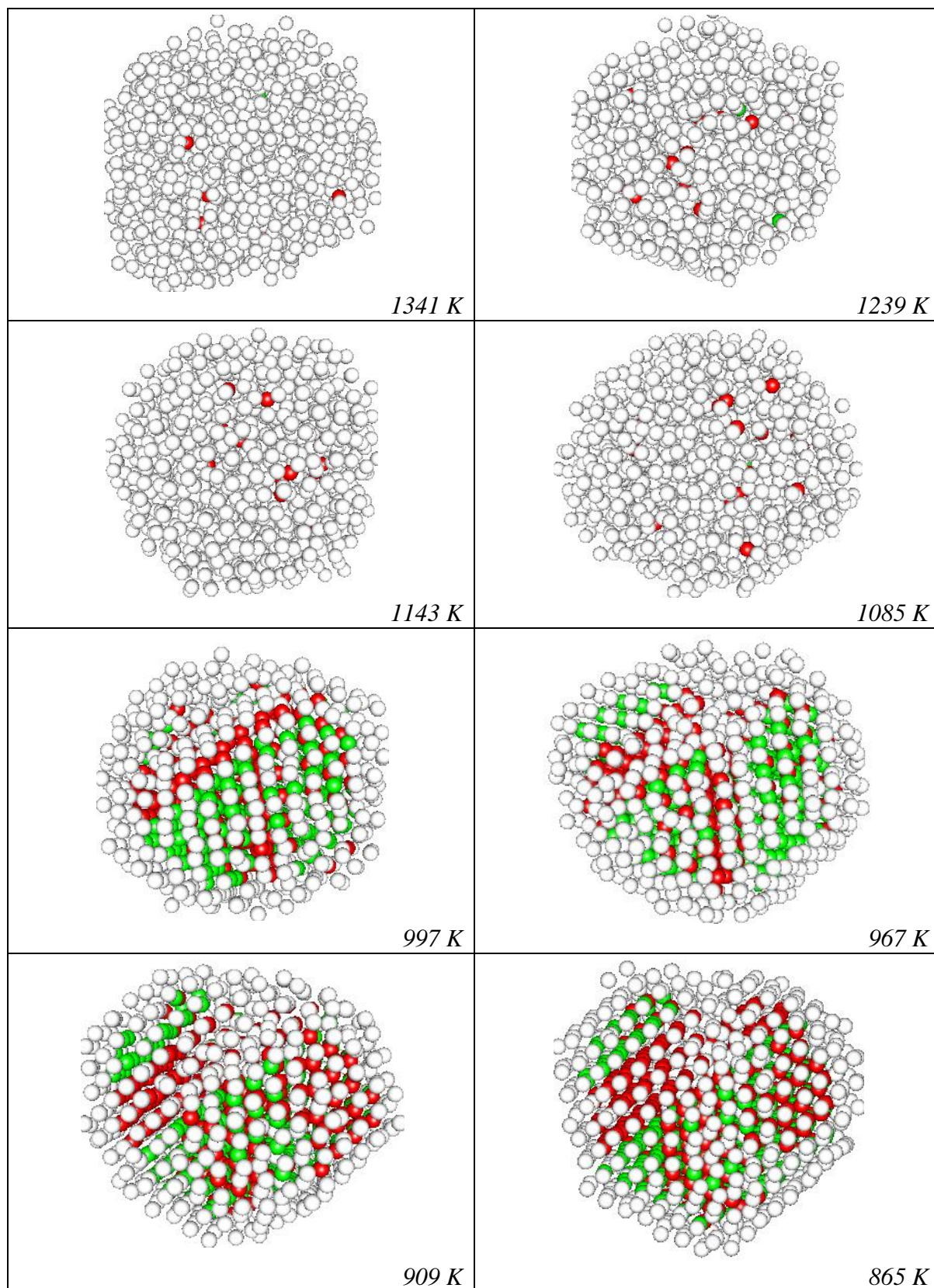


Рис. 9. Структурные превращения в нанокластере Au_{1055} в процессе охлаждения. Зелёный цвет – ГЦК структура, красный цвет – ГПУ структура, белый цвет – структура не распознана.

На рис. 9 представлен обратный процесс охлаждения того же нанокластера. Видно, что в интервале температур 1341–1085K появляются зародыши ГПУ структуры и небольшое количество ГЦК структуры. Однако при температуре 997K (окрестность точки кристаллизации) происходит резкое увеличение как ГПУ атомов, так и ГЦК атомов приблизительно в равном отношении (см. рис 7). При этом слои ГЦК структуры чередуются со слоями ГПУ структуры, т.е. четко формируются зоны, в которых представлена лишь одна определенная конфигурация атомов.

4. Выводы

На основе моделирования процессов плавления и кристаллизации нанокластеров золота методом Монте-Карло с использованием потенциала Гупта получены следующие результаты:

1. Получены корреляционные радиальные функции нанокластеров золота «до» и «после» плавления, а также после последующей кристаллизации и соответствующие мгновенные конфигурации кластеров. Изучен процесс эволюции структуры нанокластеров золота, построены гистограммы распределения числа атомов n , содержащих возле себя N соседних атомов «до» и «после» плавления.
2. Установлены температурные границы гистерезиса среднего значения первого координационного числа при плавлении и кристаллизации нанокластеров золота, при этом с увеличением размера кластера ширина области гистерезиса растет и при некотором критическом размере нанокластера резко уменьшается, что соответствует переходу от нанофазы к макроскопическому состоянию.
3. На основе сравнения приведенной плотности для массивной фазы и приведенной локальной плотности нанокластера установлено, для нанокластеров вблизи точки плавления существует область «предплавления», характеризующаяся наличием поверхностного слоя – «жидкой» шубы толщиной δ .
4. На примере нанокластера Au_{1055} показаны структурные превращения в процессе плавления и последующей кристаллизации, количественно определены температурные зависимости доли различных структур λ в нанокластере золота, наблюдаемых в области фазового перехода.
5. В области последующей кристаллизации системы наблюдается возникновение как ГЦК структур, так и ГПУ структур, при этом для исследованных нами систем установлен факт формирование отдельных зон – полосовых структур [26] (см. рис. 9) в которых представлена лишь одна определенная конфигурация атомов.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (гранты № 12-03-31593-мол-а и № 13-03-00119-а).

Авторы выражают признательность Мясниченко В.С. аспиранту кафедры общей физики ФГБОУ ВПО «Алтайский государственный технический университет им. П.И. Ползунова», программисту ФГБУН «Конструкторско-технологический институт научного приборостроения СО РАН» за ряд ценных замечаний.

Библиографический список:

1. **Verlet, L.** Computer «experiments» on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules / L. Verlet // *Physical Review*. – 1967. – V. 159. – I. 1. – P. 98-103.
2. **Metropolis, N.** The Monte Carlo Method / N. Metropolis, S. Ulam // *Journal of American Statistical Association*. – 1949. – V. 44. – № 247. – P. 335-341.
3. **Lindemann, F.A.** The calculation of molecular vibration frequencies / F.A. Lindemann // *Physikalische Zeitschrift*. – 1910. – 11. – S. 609-612
4. **Борисов, Б.Ф.** Акустические исследования плавления и кристаллизации наноструктурированного декана / Б.Ф. Борисов, А.В. Гартвик, А.Г. Горчаков, Е.В. Черная // *Физика твердого тела*. – 2009. – Т. 51. – № 4. – С. 777-782.
5. **Самсонов, В.М.** Молекулярно-динамическое исследование плавления и кристаллизации наночастиц / В.М. Самсонов, С.С. Харечкин, С.Л. Гафнер, Л.В. Редель, Ю.Я. Гафнер // *Кристаллография*. – 2009. – Т. 54. – № 3. – С. 530-536.
6. **Honeycutt, J.D.** Molecular dynamics study of melting and freezing of small Lennard-Jones clusters / J.D. Honeycutt, H.C. Andersen // *Journal of Physical Chemistry*. – 1987. – V. 91. – P. 4950.
7. **Медведев, Н.Н.** Метод Вороного-Делоне в исследовании структуры некристаллических систем, Издательство: НИЦ ОИГГМ СО РАН, Изд-во СО РАН, 2000 г.
8. **Ackland, G.J.** Applications of local crystal structure measures in experiment and simulation / G.J. Ackland, A.P. Jones // *Physical Review B*. – 2006. – V. 73. – I. 5. – P. 054101-1-054104-7.
9. **Сапожников, Ф.А.** Метод адаптивного шаблона для анализа кристаллических структур и дефектов при молекулярно-динамическом моделировании высокоскоростных деформаций / Ф.А.Сапожников, Г.В. Ионов, В.В. Дремов // *Химическая физика*. – 2008. – Т. 27. – № 3. – С. 63-70.
10. **Stukowski, A.** Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO - the open visualization tool / A. Stukowski // *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. – 2010. – V. 18. – V. 1. – P. 015012-1-015012-7.
11. **Gupta, R.P.** Lattice relaxation at a metal surface / R.P. Gupta // *Physical Review B*. – 1981. – V. 23. – № 12. – P. 6265-6270.
12. **Wilson, N.T.** A theoretical study of atom ordering in copper-gold nanoalloy cluster / N.T. Wilson, R.L. Johnson // *Journal of Material Chemistry*. – 2002. – V. 12. – P. 2913-2922.
13. **Физические величины. Справочник** / под ред. Григорьева И.С., Мейлихова Е.З. – М.: Энергоатомиздат, 1991. – 1232 с.
14. **Сдобняков, Н.Ю.** Исследование термодинамических характеристик нанокластеров золота с использованием многочастичного потенциала Гупта / Н.Ю. Сдобняков, П.В.

Комаров, Д.Н. Соколов, В.М. Самсонов // Физика металлов и металловедение. – 2011. – Т. 111. – №1. – С. 15-22.

15. **Колосов, А.Ю.** Моделирование процесса коалесценции наночастиц золота методом Монте-Карло / А.Ю. Колосов, Н.Ю. Сдобняков, П.В. Комаров, Д.Н. Соколов, Т.Ю. Зыков, В.А. Хашин // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов: межвуз. сб. науч. тр. / под общей редакцией В.М. Самсонова, Н.Ю. Сдобнякова. – Тверь: Твер. гос. ун-т, 2012. – Вып. 4. – С. 129-142.

16. **Соколов, Д.Н.** Моделирование фазового перехода плавление-кристаллизация нанокластеров кобальта методом Монте-Карло с использованием многочастичного потенциала Гупта / Д.Н. Соколов, Н.Ю. Сдобняков, П.В. Комаров // Вестник ТвГУ. Серия «Физика». – 2012. – Вып. 16. – С. 54-65.

17. **Сдобняков, Н.Ю.** Исследование гистерезиса плавления и кристаллизации нанокластеров золота с использованием многочастичного потенциала Гупта / Н.Ю. Сдобняков, Д.Н. Соколов, В.М. Самсонов, П.В. Комаров // Металлы. – 2012. – № 2. – С. 48-54.

18. **Сдобняков, Н.Ю.** О взаимосвязи размерных зависимостей температур плавления и кристаллизации наночастиц металлов / Н.Ю. Сдобняков, С.В. Репчак, В.М. Самсонов, А.Н. Базулев, Д.А. Кульпин, Д.Н. Соколов // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2011. – №5. – С. 109-112.

19. **Сдобняков, Н.Ю.** О взаимосвязи между размерными зависимостями температур плавления и кристаллизации для металлических наночастиц / Н.Ю. Сдобняков, Д.Н. Соколов, А.Н. Базулев, В.М. Самсонов, Т.Ю. Зыков, А.С. Антонов // Расплавы. – 2012. – №5. – С. 88-94.

20. **Сдобняков, Н.Ю.** О размерной зависимости температуры плавления наночастиц / Н.Ю. Сдобняков, В.М. Самсонов, А.Н. Базулев, Д.А. Кульпин // Известия РАН. Серия Физическая. – 2008. – Т. 72. – №10. – С.1448-1450.

21. **Юров, В.М.** Толщина поверхностного слоя металлов / В.М. Юров, В.Ч. Лауринас, С.А. Гученко, О.Н. Завацкая // Электронный научный журнал «Современные проблемы науки и образования». – 2012. – № 5. <http://www.science-education.ru/105-r6930>.

22. **Hanszen, K.-J.** Theoretische untersuchungen uber den schmelzpunkt kleiner kugelchen / K.-J. Hanszen // Zeitschrift für Physik A: Hadrons and Nuclei. – 1960. – V. 157. – I. 5. – P. 523-553.

23. **Wronski, C.R.W.** The size dependence of the melting point of small particles of tin / C.R.W. Wronski // British Journal Applied Physics. – 1967. – V. 18. – № 12. – P. 1731-1737.

24. **Coombes, C.J.** The melting of small particles of lead and indium / C.J. Coombes // Journal of Physics F: Metal Physics. – 1972. – V. 2. – №5. – P. 441-449.

25. **Фишер, И.З.** Статистическая теория жидкостей / И.З. Фишер. – М.: Физматгиз, 1961. – 280 с.

26. **Perevezentsev, V.N.** The theory of evolution of the microstructure of superplastic alloys and ceramics / V.N. Perevezentsev; ed. N. Ridley // Superplasticity. 60 years after Pearson. – London: Bourne Press, 1995. – P. 51-59.