

УДК 669.3:536.422.4

Оригинальная статья

## **ВЛИЯНИЕ АТОМОВ ЗОЛОТА НА СТРОЕНИЕ НАНОЧАСТИЦ Cu-Au ПРИ МОДЕЛИРОВАНИИ ПРОЦЕССА ГАЗОФАЗНОГО СИНТЕЗА**

Ю.Я. Гафнер, Д.А. Рыжкова

ФГБОУ ВО «Хакасский государственный университет имени Н.Ф. Катанова»  
655017, Россия, Республика Хакасия, Абакан, пр. Ленина, 90

*yugafner@khsu.ru*

DOI: 10.26456/pcascnn/2022.14.399

**Аннотация:** Численным анализом на основе метода молекулярной динамики рассмотрен процесс формирования из высокотемпературной газовой среды бинарных нанокластеров Cu-Au разного целевого состава. Основное внимание было уделено изучению вопроса формирования кристаллической структуры в таких кластерах и определения ее типа. Показано, что рост процентного содержания атомов золота в первичной газовой среде существенно влияет на образование внутреннего строения имитируемых наночастиц. При относительно небольшой добавке происходит полное исчезновение кластеров с ГЦК строением с формированием наночастиц практически только с пятичастичной симметрией с подавляющим преобладанием  $Dh$  конфигурации. Если испарять оба прекурсора с равной скоростью, то рост процентного содержания в газовой смеси атомов золота приводит к тому, что кластеры CuAu часто оказываются неспособными сформировать какую-либо явно различимую кристаллическую форму, из-за чего примерно каждый четвертый кластер фиксировался в аморфном состоянии. Сделан вывод, что причиной данного явления может быть разделение атомов разного сорта, характерное для бинарных наночастиц моделируемого химического состава.

**Ключевые слова:** *нанотехнологии, нанопорошки, компьютерное моделирование, сильная связь, наночастицы, медь, золото.*

### **1. Введение**

Синтез наночастиц из газовой среды является очень перспективной областью фундаментальных исследований благодаря своему возможному высокому производственному потенциалу. Этому способствует широкая вариативность внутренней структуры (аморфная, кристаллическая, полиморфная, кинетически или термодинамически стабильная) получаемых наночастиц, а также самый широкий спектр их внешней формы. Произведенные по какой-либо технологии наночастицы являются далее объектом повышенного внимания многих технических областей из-за своей способности к существенной модификации физико-химических свойств промышленных материалов. Например, имеющееся у таких частиц различное внутреннее строение значительно влияет на их температуру плавления, магнитные или электронные свойства [1].

Также изменение формы синтезированных нанообъектов может стать очень важным в плане создания наночастиц с большим соотношением площади поверхности к объему, что является чрезвычайно востребованным при катализе разнообразных химических реакций. Если же речь идет о наночастицах применяемых в термоэлектронных

устройствах, то здесь необходимы частицы с высокой плотностью фазовых границ и т.д.

Обычные эмпирические исследования газофазного синтеза не могут в полной мере раскрыть весь потенциал данной методики ввиду сложности решаемой проблемы, из-за чего требуется подробное фундаментальное изучение особенностей формирования и роста частиц, процессов образования их внутренней структуры, роли кинетических и термодинамических факторов. Детализированное рассмотрение данных особенностей невозможно без определения реальной кинетики происходящих реакций, определяемой плотностью исходного атомного пара, скоростью течения буферного газа, теплового профиля системы и других технологических особенностей, наблюдаемых в камере синтеза [1].

В системах, которые требуют более одного газового прекурсора, морфология конечного продукта сильно зависит от реакционной кинетики между атомами различных химических элементов, что, в свою очередь, ведет к формированию гомогенных смешанных систем или нанокомпозитов. В таких системах, представляющих огромный технологический интерес, обычно используют несколько металлических прекурсоров с различной способностью к смешиванию, что приводит к образованию наночастиц самого разного вида: смешанного состава, Янус подобных, ядро-оболочечных и т.д.

В данной работе на основе методик компьютерного моделирования был рассмотрен синтез бинарных металлических наночастиц из высокотемпературной газовой фазы. В качестве прекурсоров были использованы образцы меди и золота с разным процентным соотношением в моделируемой области. На основе полученных в ходе проведения численного эксперимента результатов были сделаны выводы об особенностях внутреннего строения синтезированных частиц и их возможной кристаллической структуре.

## **2. Компьютерная модель**

В представленной работе мы рассмотрим некоторые характерные тенденции, полученные методом компьютерного моделирования при исследовании процесса газофазного синтеза бинарных наночастиц *Cu-Au*. В качестве основы численного анализа был применен стандартный метод молекулярной динамики (МД), позволяющий имитировать поведение модельной системы с высокой точностью на временном промежутке до десятков наносекунд даже в случае ансамбля из нескольких тысяч атомов.

Однако для достижения физически корректных результатов, прежде всего, необходимо использование достаточно адекватного потенциала межатомного взаимодействия. На основе проведенных ранее расчетов, как

в нашей группе, так и другими авторами [2], применением ЕАМ потенциала (метод погруженного атома) в данном случае все же не удастся получить правильную картину как основных нуклеационных процессов, так и процессов дальнейшей термической эволюции сформированных наночастиц.

При анализе макроскопических систем или наночастиц большого размера такой способ построения потенциальной энергии ансамбля взаимодействующих атомов способен дать достаточно корректные результаты. Но при имитации поведения сверхмалых нанокластеров, полученных на самых ранних стадиях газофазного синтеза (стадия нуклеации), лежащая в его основе схема перестает быть физически корректной. Это сказывается, в частности, на расчетах удельной энергии связи атомов, из-за чего при применении ЕАМ потенциала температуры плавления малых наночастиц перестают зависеть от их размера, то есть энергии связи атомов оказывается практически одинаковыми, несмотря на различное число координационных сфер в кластерах разного диаметра.

Так как расчет характеристик относительно больших систем (несколько тысяч атомов) в наносекундном диапазоне квантово-механическими методами практически невозможен, то был использован подход на основе модифицированного потенциала сильной связи TB-SMA [3] с радиусом взаимодействия до пятой координационной сферы включительно.

Метод основан на том, что большая группа свойств переходных металлов может быть полностью определена из плотности состояний внешних  $d$ -электронов. Второй момент плотности состояния есть  $\mu_2$ , и экспериментально установлено, что энергия когезии металлов пропорциональна ширине плотности состояний, которая в приближении вторых моментов есть просто  $\sqrt{\mu_2}$ . Если принимаются во внимание только  $dd\sigma$ -,  $dd\pi$ - и  $dd\delta$ - орбитали, то, согласно данной модели, зонная энергия атома  $i$  может быть записана как

$$E_B^i = - \left( \sum_j \xi_{\alpha\beta}^2 \cdot e^{-2 \cdot q_{\alpha\beta} (r_{ij}/r_0^{\alpha\beta} - 1)} \right)^{1/2}, \quad (1)$$

которая зависит только от расстояния между атомами  $i$  и  $j$ , т.е.  $r_{ij}$ , и формально является тем же самым, что и функция погружения в методе погруженного атома. Кроме того, модель имеет слагаемое, отвечающее за отталкивающее взаимодействие, в виде суммы борн-майеровских парных ионных потенциалов:

$$E_R^i = \sum_j A_{\alpha\beta} \cdot e^{-p_{\alpha\beta} (r_{ij}/r_0^{\alpha\beta} - 1)}, \quad (2)$$

где  $\alpha$  и  $\beta$  – различные типы атомов. Таким образом, полная энергия системы имеет вид:

$$E_c = \sum_i (E_R^i + E_B^i). \quad (3)$$

Значения величин  $\xi_{\alpha\beta}$ ,  $p_{\alpha\beta}$ ,  $A_{\alpha\beta}$ ,  $q_{\alpha\beta}$  и  $r_0^{\alpha\beta}$ , а также радиус обрезания потенциала  $r_c$ , определяют параметры элементов системы. Величины  $\xi_{\alpha\beta}$ ,  $p_{\alpha\beta}$ ,  $A_{\alpha\beta}$  и  $q_{\alpha\beta}$  находятся подгонкой к экспериментальным значениям энергии когезии, параметру решетки, объемному модулю  $B$  и упругим постоянным  $C_{44}$  и  $C'$ . Именно такой метод, в котором ион-ионное взаимодействие описано с учетом зонного характера связи и короткодействующего парного потенциала отталкивания, на наш взгляд, способен достаточно адекватно описать некоторые характерные особенности металлических бинарных систем.

Основываясь на этой модели, мы сосредоточились на вопросе определения влияния ряда начальных условий на первичную стадию синтеза бинарных наночастиц *Cu-Au* методом конденсации, а именно на анализе внутреннего строения получаемых нанокластеров. Более подробно о методике проведенного моделирования изложено в [4,5].

### **3. Результаты и обсуждение**

Многолетние экспериментальные исследования доказали хорошую смешиваемость меди и золота. Это означает, что при условии большого значения термической энергии в макроскопических образцах атомы золота и меди могут перемешиваться в любом соотношении из-за чего может быть достигнут любой требуемый целевой состав бинарной композиции *Cu-Au*. В случае же низкой величины термической энергии сплавы *Cu-Au* формируют либо тетрагональную сверхструктуру  $L1_0$  для стехиометрического состава *CuAu*, либо кубическую сверхструктуру  $L1_2$  для стехиометрии *CuAu<sub>3</sub>* и *Cu<sub>3</sub>Au*. То есть в макроскопическом случае фазовая диаграмма внутреннего строения в материаловедении полностью известна. Но если рассматривать интересующий нас наноуровень, то полная фазовая диаграмма бинарного наносплава *Cu-Au* до сих пор не определена. Данный факт значительно лимитирует создание необходимого внутреннего и внешнего строения наночастиц *Cu-Au* столь востребованного в различных областях как современной промышленности, так и будущих технологий.

Рассмотрим лишь некоторые основные экспериментальные результаты, полученные в данном направлении. Так за последнее время был апробирован целый ряд методов синтеза наносистем *Cu-Au* с целью создания наночастиц различной формы и состава. Химическими методами

удалось синтезировать наночастицы  $Cu-Au$  со сферической, пентагональной, стержнеобразной, кубической и другими формами. К примеру, в работе [6] совместным восстановлением солей золота и меди было произведено формирование бинарных наночастиц  $Cu-Au$  достаточно больших размеров (45–200 нм) с наличием пятичастичных структур. Электрохимическим способом также были синтезированы декаэдрические и икосаэдрические частицы наносплава  $Cu-Au$  и т.д. [7].

Помимо рассмотренных выше химических методик производства наночастиц  $Cu-Au$  возможен и иной подход, основанный уже на физических принципах которые теоретически дают лучший контроль состава при изготовлении биметаллических наночастиц. Среди таких методик можно отметить ионную имплантацию, термическое испарение в условиях сверхвысокого вакуума [8] и метод лазерного осаждения. Применением таких физических методов были получены наночастицы  $Cu-Au$  уже намного меньшего размера (1,0–4,5 нм) с декаэдрическим или октоэдрическим строением при испарении лазером макроскопических образцов  $CuAu$ ,  $Cu_3Au$  и  $CuAu_3$  [9].

Подводя некоторый итог этому краткому анализу можно сказать, что в проведенных экспериментах фиксировалось самая разная морфология  $Cu-Au$  наночастиц без четкого понимания того, какая именно структура может формироваться в результате того или иного метода синтеза. Поэтому в представленной работе мы попробуем определить методом компьютерного моделирования возможную связь различного процентного содержания атомов золота в исходной газовой фазе и формирующемся при этом внутреннем строении синтезированных наночастиц  $Cu-Au$ .

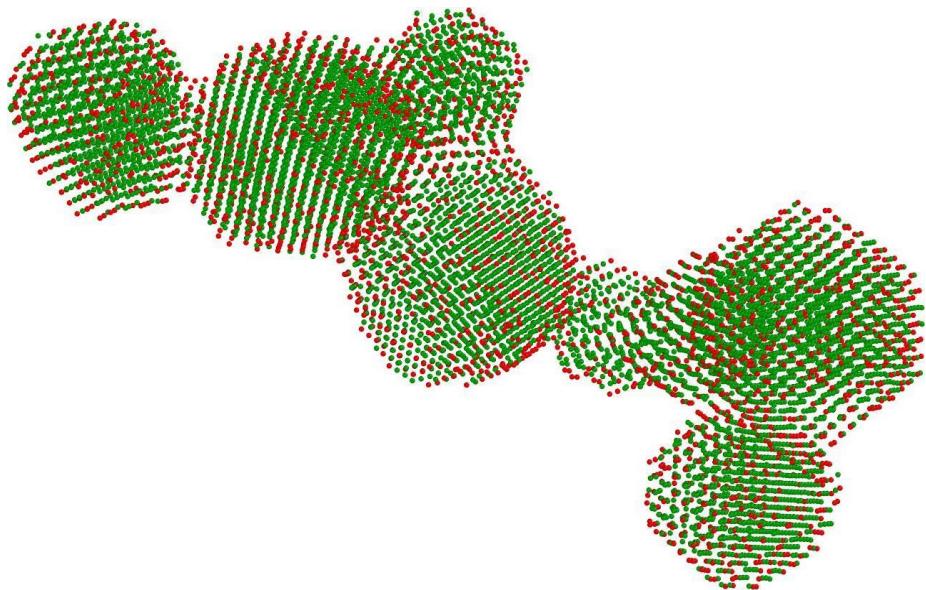


Рис. 1. Бинарная наночастица  $Cu-Au$  целевого состава  $Cu_3Au$ . Зеленым цветом показаны атомы меди, красным – атомы золота.

Для анализа возьмем два типичных стехиометрических состава  $Cu_3Au$  и  $CuAu$  с повышающимся процентным содержанием золота. В качестве базовых данных приведем результаты по конденсации из газовой среды атомов чистой меди, проведенного нами при аналогичных условиях моделирования. В этом случае были получены следующие соотношения между возможными типами атомного построения  $Cu$  наночастиц. Примерно 26 % кластеров обладали классической для макроскопического случая ГЦК структурами, у 20% внутреннее строение соответствовало икосаэдрической ( $Ih$ ) конфигурации, а 54% так же относились к пятичастичному строению, но уже к декаэдрической модификации ( $Dh$ ).

При добавлении в исходный атомный пар второго химического элемента (см. рис. 1), а именно золота в объеме 25%, наблюдались следующие характерные изменения: резко, практически до нуля, сокращался процент кластеров с ГЦК структурой с соответствующим ростом до 80% декаэдрической фазы. Процент наночастиц с икосаэдрическим строением остается примерно неизменным.

Рассмотрим теперь иную стехиометрическую конфигурацию с целевым составом  $CuAu$ . Рост процентного содержания золота в начальной газовой смеси до 50% приводит к драматическим изменениям строения получаемых при моделировании наночастиц. Во-первых, наблюдается некоторый рост (до 3,5%) числа кластеров с ГЦК построением атомов в образующейся из расплава кристаллической структуре. Во-вторых, почти в два раза (до 38,4%) происходит увеличение кластеров с икосаэдрическим строением. В-третьи, фиксируется взрывное (до 24%) увеличение числа кластеров с аморфной фазой, в основном за счет уменьшения (до 34%) процента кластеров с декаэдрической модификацией.

Таким образом, по результатам проведенного компьютерного моделирования процессов конденсации из газовой среды бинарной газовой смеси  $Cu-Au$  с разным целевым составом в сравнении с данными аналогичного моделирования для случая чистой меди можно сделать вывод, что влияние процентного содержания золота на структуре получаемых наночастиц носит достаточно сложный характер.

При относительно небольшой добавке (25%) происходит полное исчезновение кластеров с ГЦК строением с формированием наночастиц практически только с пятичастичной симметрией с подавляющим преобладанием  $Dh$  конфигурации. Если же испарять оба прекурсора с равной скоростью, то рост процентного содержания в газовой смеси атомов золота приводит, прежде всего, к тому, что кластеры  $CuAu$  часто оказываются неспособными сформировать какую-либо явно различимую кристаллическую форму, из-за чего примерно каждый четвертый кластер фиксировался в аморфном состоянии. Полученный результат может быть

объяснен только на основе анализа кинетических процессов, приводящих к выдавливанию атомов золота к поверхности бинарной наночастицы, что наблюдалась нами в более ранних работах.

#### **4. Заключение**

Формирование определенной внутренней структуры является ключевым аспектом любой методики синтеза наночастиц, которое определяется температурно-зависимым процессом их роста. После стадии первичного образования кластеров именно скорость охлаждения играет решающую роль как в диффузионно-индущированной перестройке атомного строения, так и процессах объединения первичных кластерных фрагментов друг с другом. Теперь стало понятно, что на все это накладывается и ряд других факторов, например максимальная температура системы, концентрация прекурсоров, химическая композиция буферного газа и т.д. В этом контексте синтез из газовой фазы является одним из основных физических методов получения нанопорошков имеющим ряд четко регулируемых начальных параметров позволяющих определять целый набор конечных физико-химических свойств синтезируемых наночастиц [10-12].

В представленной работе методом компьютерного моделирования был проведен анализ внутреннего строения бинарных наночастиц *Cu-Au* разного целевого состава. Частицы были сформированы при имитации синтеза из высокотемпературной газовой фазы, получаемой методом испарения первичных веществ пучком электронов высоких энергий. Данные численного анализа явно показали зависимость между формирующими в наночастицах структурным типом и концентрацией атомов золота. А именно было показано, что рост данной величины может привести как к полному образованию кластеров только с пятичастичной симметрией, запрещенной законами кристаллографии в объемных телах, так и к существенному проценту аморфных наночастиц при еще большем увеличении концентрации атомов золота в первичной газовой среде.

*Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-29-20018, <https://rscf.ru/project/22-29-20018/> при паритетной финансовой поддержке Правительства Республики Хакасия.*

#### **Библиографический список:**

1. Schulz, C. Gas-phase synthesis of functional nanomaterials: Challenges to kinetics, diagnostics, and process development / C. Schulz, T. Dreier, M. Fikri, H. Wiggers // Proceedings of the Combustion Institute. – 2019. – V. 37. – I. 1. – P. 83-108. DOI: 10.1016/j.proci.2018.06.231.
2. Samsonov, V.M. Melting temperature and binding energy of metal nanoparticles: size dependences, interrelation between them, and some correlations with structural stability of nanoclusters / V.M. Samsonov, S.A. Vasilyev, K.K. Nebyvalova et al. // Journal of Nanoparticle Research. – 2020. – V. 22. – I. 8. – Art. № 247.

- 15 p. DOI: 10.1007/s11051-020-04923-6.
3. Cleri, F. Tight binding potentials for transition metals and alloys / F. Cleri, V. Rosato // Physical Review B. – 1993. – V. 48. – I. 1. – P. 22-33. DOI: 10.1103/PhysRevB.48.22.
4. Гафнер, Ю.Я. Некоторые новые результаты моделирования процессов газофазного синтеза наночастиц Cu-Au / Ю.Я. Гафнер, С.Л. Гафнер, Ю.А. Куликова // Физико-химические аспекты изучения кластеров, nanoструктур и наноматериалов. – 2020. – Вып. 12. – С. 384-393. DOI: 10.26456/pcascnn/2020.12.384.
5. Gafner, Yu.Ya. The role of gold atom concentration in the processes of formation of Cu-Au nanoparticles from the gas phase / Yu.Ya. Gafner, S.L. Gafner, D.A. Ryzkova, A.V. Nomoev // Beilstein Journal of Nanotechnology. – 2021. – V. 12. – P. 72-81. DOI: 10.3762/bjnano.12.6.
6. He, R. Facile synthesis of pentacle gold-copper alloy nanocrystals and their plasmonic and catalytic properties / R. He, Y.-C. Wang, X. Wang et al. // Nature Communications. – 2014. – V. 5. – Art. № 4327. – 23 p. DOI: 10.1038/ncomms5327.
7. Prunier, H. New insights into the mixing of gold and copper in a nanoparticle from a structural study of Au-Cu nanoalloys synthesized via a wet chemistry method and pulsed laser deposition / H. Prunier, J. Nelayah, Ch. Ricolleau et.al. // Physical Chemistry Chemical Physics. – 2015. – V. 17. – P. 28339-28346. DOI: 10.1039/c5cp01491c.
8. Wilson, A. Epitaxial growth of bimetallic Au-Cu nanoparticles on TiO<sub>2</sub>(110) followed in situ by scanning tunneling microscopy and grazing-incidence x-ray diffraction / A. Wilson, R. Bernard, A. Vlad et.al. // Physical Review B. – 2014. – V. 90. – I. 7. – P. 075416-1-075416-10. DOI: 10.1103/PhysRevB.90.075416.
9. Tran, D.T. Truncated-octahedral copper-gold nanoparticles / D.T. Tran, I.P. Jones, R.L. Johnston, J.A. Preece, C.R. van den Brom // Journal of Physics: Conference Series. – 2010. – V. 241. – Art. № 012086. – 4 p. DOI: 10.1088/1742-6596/241/1/012086.
10. Grammatikopoulos, P. Nanoparticle design by gas-phase synthesis / P. Grammatikopoulos, S. Steinhauer, J. Vernieres, V. Singh, M. Sowwan // Advances in Physics: X. – 2016. – V. 1. – № 1. – P. 81-100. DOI: 10.1080/23746149.2016.1142829.
11. Huttel, Y. Gas-phase synthesis of nanoparticles: present status and perspectives / Y. Huttel, L. Martínez, A. Mayoral, I. Fernández // MRS Communications. – 2018. – V. 8. – I. 3. – P. 947-954. DOI: 10.1557/mrc.2018.169.
12. Vernières, J. Gas phase synthesis of multifunctional Fe-based nanocubes / J. Vernières, S. Steinhauer, J. Zhao et al. // Advanced Functional Materials. – 2017. – V. 27. – I. 11. – Art. № 1605328. – 30 p. DOI: 10.1002/adfm.201605328.hal-02045474.

#### References:

1. Schulz C., Dreier T., Fikri M., Wiggers H. Gas-phase synthesis of functional nanomaterials: Challenges to kinetics, diagnostics, and process development, *Proceedings of the Combustion Institute*, 2019, vol. 37, issue 1, pp. 83-108. DOI: 10.1016/j.proci.2018.06.231.
2. Samsonov V.M., Vasilyev S.A., Nebyvalova K.K. et al. Melting temperature and binding energy of metal nanoparticles: size dependences, interrelation between them, and some correlations with structural stability of nanoclusters, *Journal of Nanoparticle Research*, 2020, vol. 22, issue 8, art. no. 247, 15 p. DOI: 10.1007/s11051-020-04923-6.
3. Cleri F., Rosato V. Tight binding potentials for transition metals and alloys, *Physical Review B*, 1993, vol. 48, issue 1, pp. 22-33. DOI: 10.1103/PhysRevB.48.22.
4. Gafner Yu.Ya., Gafner S.L., Kulikova Yu.A. Nekotorye novye rezul'taty modelirovaniya protsessov gazofaznogo sinteza nanochastits Cu-Au [Some new results of modeling the processes of the gas-phase synthesis of Cu – Au nanoparticles], *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasteroval, nanostruktur i nanomaterialov* [Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials], 2020, issue 12, pp. 384-393. DOI: 10.26456/pcascnn/2020.12.384.
5. Gafner Yu.Ya., Gafner S.L., Ryzkova D.A., Nomoev A.V. The role of gold atom concentration in the processes of formation of Cu-Au nanoparticles from the gas phase, *Beilstein Journal of Nanotechnology*, 2021, vol. 12, pp. 72-81. DOI: 10.3762/bjnano.12.6.
6. He R., Wang Y.-C., Wang X. et al. Facile synthesis of pentacle gold-copper alloy nanocrystals and their plasmonic and catalytic properties, *Nature Communications*, vol. 5, art. no. 4327, 23 p. DOI: 10.1038/ncomms5327.
7. Prunier H., Nelayah J., Ricolleau Ch. et.al. New insights into the mixing of gold and copper in a nanoparticle from a structural study of Au–Cu nanoalloys synthesized via a wet chemistry method and pulsed laser deposition, *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2015, vol. 17, pp. 28339-28346. DOI: 10.1039/c5cp01491c.

8. Wilson A., Bernard R., Vlad A. et.al. Epitaxial growth of bimetallic Au-Cu nanoparticles on TiO<sub>2</sub>(110) followed *in situ* by scanning tunneling microscopy and grazing-incidence x-ray diffraction, *Physical Review B*, 2014, vol. 90, issue 7, pp. 075416-1-075416-10. DOI: 10.1103/PhysRevB.90.075416.
9. Tran D.T., Jones I.P., Johnston R.L., Preece J.A., van den Brom C.R. Truncated-octahedral copper-gold nanoparticles, *Journal of Physics: Conference Series*, 2010, vol. 241, art. no. 012086, 4 p. DOI: 10.1088/1742-6596/241/1/012086.
10. Grammatikopoulos P., Steinhauer S., Vernieres J., Singh V., Sowwan M. Nanoparticle design by gas-phase synthesis, *Advances in Physics: X*, 2016, V. 1, no. 1, pp. 81-100. DOI: 10.1080/23746149.2016.1142829
11. Huttel Y., Martínez L., Mayoral A., Fernández I. Gas-Phase Synthesis of Nanoparticles: present status and perspectives, *MRS Communications*, 2018, vol. 8, issue 3, pp. 947-954. DOI: 10.1557/mrc.2018.169
12. Vernières J., Steinhauer S., Zhao J. et al. Gas phase synthesis of multifunctional Fe-based nanocubes, *Advanced Functional Materials*, 2017, vol. 27, issue 11, art. no. 1605328, 30 p. DOI: 10.1002/adfm.201605328.hal-02045474.

*Original paper*

## **INFLUENCE OF GOLD ATOMS ON THE STRUCTURE OF Cu-Au NANOPARTICLES AT SIMULATION OF THE PROCESS OF GAS-PHASE SYNTHESIS**

Yu.Ya. Gafner, D.A. Ryzhkova

*Katanov Khakas State University, Abakan, Russia*

DOI: DOI: 10.26456/pcascnn/2022.14.399

**Abstract:** The article considers the process of formation of binary Cu-Au nanoclusters with different target composition from a high-temperature gaseous medium. The molecular dynamics method was used. The main attention was paid to studying formation of the crystal structure in such clusters and determination its type. It is shown that an increase in the percentage of gold atoms in the primary gaseous medium significantly affects the formation of the internal structure of simulated nanoparticles. With a relatively small increase in the proportion of gold atoms, there is a complete disappearance of clusters with the fcc structure. The formation of nanoparticles with, as a rule, five-particle symmetry is observed. In this case, the *Dh* configuration prevails. If both precursors are evaporated at the same rate, then an increase in the percentage of gold atoms in the gas mixture leads to the fact that CuAu clusters are often unable to form any clearly distinguishable crystalline form, due to which approximately every fourth cluster was fixed in the amorphous state. We concluded that the cause of this phenomenon may be the separation of atoms of different types, which is typical for binary nanoparticles of the studied chemical composition.

**Keywords:** *nanotechnologies, nanopowders, computer simulation, tight-binding model, nanoparticles, copper, gold.*

*Гафнер Юрий Яковлевич – д.ф.-м.н., профессор, заведующий кафедрой математики, физики и информационных технологий ФГБОУ ВО «Хакасский государственный университет им. Н.Ф. Катанова»*

*Рыжкова Дарья Антоновна – аспирант 3 курса обучения, ассистент кафедры математики, физики и информационных технологий ФГБОУ ВО «Хакасский государственный университет им. Н.Ф. Катанова»*

*Yury Ya. Gafner – Dr. Sc., Professor, Chief of the Department of Mathematics, Physics and Information Technology, Katanov Khakas State University*

*Daria A. Ryzhkova – 3<sup>th</sup> year postgraduate student, Assistant of the Department of Mathematics, Physics and Information Technology, Katanov Khakas State University*

Поступила в редакцию/received: 11.06.2022; после рецензирования/revised: 02.07.2022; принята/accepted 11.07.2022.