

УДК 544.77

**МАКРОСКОПИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ НУКЛЕАЦИИ ПРИ КОНДЕНСАЦИИ
ПАРОВ МЕДИ В СРЕДЕ ИНЕРТНОГО ГАЗА**© 2019 г. А. Е. Коренченко^{a, b, *}, А. Г. Воронцов^c, А. А. Жукова^a^aПервый Московский государственный медицинский университет им. И.М. Сеченова,
Москва, Россия^bИнститут металлургии УрО РАН, Екатеринбург, Россия^cЮжно-Уральский государственный университет (НИУ), Челябинск, Россия

*e-mail: akorenchenko@gmail.com

Поступила в редакцию 18.05.2019 г.

После доработки 05.06.2019 г.

Принята к публикации 28.06.2019 г.

В рамках вычислительной схемы, подходящей для описания конденсации, проведен статистический анализ результатов молекулярно-динамических расчетов газофазной “самосборки” нанокластеров при конденсации паров металла. Выявлены закономерности столкновений и роста малых кластеров меди. Определены параметры взаимодействия кластеров с атомами металла, позволяющие перенести информацию в макроскопическую модель нуклеации. Результаты могут быть использованы при описании нуклеации для прогнозирования распределения наночастиц по размерам в промышленном производстве металлических нанопорошков.

Ключевые слова: нуклеация, конденсация, пары меди.

DOI: 10.1134/S0235010619060082

ВВЕДЕНИЕ

Использование термодинамических моделей нуклеации не позволяет добиться количественного согласия с экспериментом [1, 2], так что данные могут различаться на порядки [3]. Популярный в последние десятилетия метод Кинетического Монте Карло (КМК) [4, 5] позволяет приблизиться к масштабам реального эксперимента, однако скорости процессов адсорбции и десорбции атомов на зародыши, диффузии мономеров к их поверхности определяются коэффициентами, значения которых подбираются так, чтобы наилучшим образом описать результаты эксперимента, или МД-симуляции [6, 7]. Подбор коэффициентов является слабым местом этих подходов, т.к. не может быть строго обоснован. В [8] проведен анализ одиночных актов взаимодействия атомов аргона и кластеров железа и статистическими методами получены значения коэффициентов термической аккомодации и теплоотдачи для кластеров, содержащих различное количество атомов. Эти коэффициенты могут быть использованы для определения теплоты конденсации в макроскопическом масштабе, однако построение кластеров в [8] производится искусственным путем – состояние кластера задается единожды и не меняется при моделировании. Стадия зародышеобразования в работах [4–8] не рассматривается, поэтому нет возможности учесть, например, появление устойчивых изомерных форм, “магических” размеров кластеров и т.д.

Цель настоящей работы – построение численной статистической модели, описывающей столкновения кластеров с атомами меди, и пригодной для использования в макроскопическом масштабе.

СХЕМА МД ЭКСПЕРИМЕНТА (ПОЛУЧЕНИЕ СТАТИСТИЧЕСКИХ ДАННЫХ)

Исследование формирования наночастиц проводилось методом молекулярной динамики в пакете LAMMPS [9]. Система состояла из атомов буферного газа (Ar) и атомов меди. Детали расчетов, связанные с особенностями потенциалов взаимодействия, геометрией ячейки и выбором величины межатомного расстояния Δ , на котором атомы рассматриваются как принадлежащие одному кластеру, обсуждаются в [10–12].

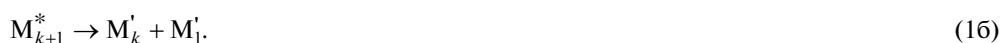
В МД исследовании взаимодействий кластеров и атомов меди анализировались энергетические соотношения между ними до и после взаимодействия, причем как в лабораторной системе отсчета (ЛСО), так и в системе центра масс кластера.

Температура аргона выбиралась в интервале $300 \text{ K} \leq T_{\text{Ar}} \leq 1500 \text{ K}$, размеры ячейки подбирались так, чтобы плотность пара металла соответствовала экспериментальным значениям и находилась в диапазоне $0.1 \leq \rho \leq 0.3 \text{ кг/м}^3$. Термостатирование системы происходило только для атомов инертного газа. В начальный момент времени температура аргона и атомарного металлического пара были одинаковы, атомы имели равномерное распределение по пространству и максвелловское – по скоростям. Эволюция атомной системы рассматривалась в течение времен порядка 0.5 мс с шагом, равным 3 фс.

СТАТИСТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ КОНДЕНСАЦИИ

Описание состояний кластеров и атомов

Макроскопическая модель конденсации должна описывать процессы взаимодействия атомов и кластеров в системах, содержащих число частиц, сравнимое с числом Авогадро. В этих условиях возможно описание только самых общих закономерностей, поэтому количество используемых параметров должно быть, по возможности, минимальным. Анализ эволюции системы проводился на основе законов сохранения энергии и импульса, предположения о беспорядочности теплового движения и допустимости элементарных процессов вида:



Здесь M_k – кластер, содержащий k атомов металла. Штрихи в (16) означают, что и атом, и кластер могут изменить свое энергетическое состояние после взаимодействия. В модели учитываются только столкновения кластер-атом (1a) и распады на кластер и атом (16), т.е. коагуляцией, происходящей вследствие столкновений малых кластеров между собой, и распадом на два кластера пренебрегается. Следует отметить, что k -атомный кластер в левой части (1a) может находиться в равновесии со средой, а может быть возбужденным в той или иной степени. Скорости атомов внутри кластеров могут в 10 и более раз превышать тепловые, внутренние степени свободы в этом случае являются “перегретыми” и нуждаются в отводе тепла. При определенных условиях при столкновении кластер – атом металла может образоваться долгоживущий кластер [11], который может быть “перегретым”, но таким, что времени его существования будет достаточно для того, чтобы, сталкиваясь с атомами аргона, охладиться и затем продолжить рост. В этом случае реакция (16) не реализуется. В других обстоятельствах при таких столкновениях может образоваться короткоживущий кластер, который вскоре распадется по (16). Часто при этом атом уносит часть избытка внутренней энергии, т.е. происходит “охлаждение” кластера.

Состояние k -атомного кластера описывалось двумя величинами: кинетической энергией его центра масс в ЛСО T_k и внутренней энергией ε_k , которая представляет собой сумму кинетической и потенциальной энергии каждого атома кластера, вычисленную в системе центра масс кластера и поделенную на количество атомов, так что энергия кластера в ЛСО равна $T_k + k\varepsilon_k$. Одиночные атомы металла и аргона характеризуются кинетической энергией, возможным изменением состояния атома – возбуждением электронных уровней или ионизацией – пренебрегается.

Вероятности протекания реакций (1а) и (1б)

В работе [11] было показано, что вероятность того, что кластер просуществует достаточное время, чтобы успеть “охладиться” столкновениями с атомами аргона и присоединить атом металла, определяется только внутренней энергией этого кластера. В [11] были построены зависимости этой вероятности от ε_k , основанные на данных МД-моделирования и представляющие собой ступеньки, в которых вероятность плавно изменяется от 1 в области низких энергий до 0 в области высоких энергий. На основании анализа, приведенного в [11], был заполнен массив $P^n(k, n)$, в котором целочисленные индексы отвечают: k – за количество атомов в кластере, n – за значение внутренней энергии кластера $\varepsilon_k = n\delta$, $\delta = 0.01$ эВ, значение элемента массива $P^n(k, n)$ равно вероятности того, что кластер, содержащий k атомов, с внутренней энергией $n\delta$ будет долгоживущим. Таким образом, в работе [11] были получены статистические данные, определяющие вероятность протекания отдельно реакции (1а) – $P^n(k, n)$, и вероятность последовательного протекания реакций (1а + 1б) – $(1 - P^n(k, n))$.

Определение количества долгоживущих кластеров и их энергетических характеристик

Определим закономерности энергообмена при столкновении кластер-атом металла. Зная внутреннюю энергию кластера и кинетические энергии центра масс k -атомного кластера и атома металла в ЛСО, определим внутреннюю энергию получившегося $(k + 1)$ -атомного кластера. Законы сохранения импульса и энергии в лабораторной системе отсчета запишутся как

$$\begin{cases} mV_1^{\text{ЛСО}} + kmV_k^{\text{ЛСО}} = (k + 1)mV_{k+1}^{\text{ЛСО}}, & (2a) \\ T_1^{\text{ЛСО}} + T_k^{\text{ЛСО}} + k\varepsilon_k = T_{k+1}^{\text{ЛСО}} + (k + 1)\varepsilon_{k+1}, & (2б) \end{cases}$$

где $T_1^{\text{ЛСО}}$, $T_k^{\text{ЛСО}}$, $T_{k+1}^{\text{ЛСО}}$ – кинетические энергии центра масс атома и кластеров в ЛСО, m – масса атома металла, ε_k и ε_{k+1} – внутренние энергии кластеров, $V_1^{\text{ЛСО}}$, $V_k^{\text{ЛСО}}$ – скорости центров масс атома и k -атомного кластера до взаимодействия, $V_{k+1}^{\text{ЛСО}}$ – скорость $(k + 1)$ -атомного кластера после взаимодействия.

Реализуется следующая последовательность вычислений:

- выражая из (2) энергию ε_{k+1} , получаем

$$\varepsilon_{k+1} = \frac{m}{2} \frac{k}{(k + 1)^2} \left((V_1^{\text{ЛСО}})^2 + (V_k^{\text{ЛСО}})^2 - 2V_1^{\text{ЛСО}}V_k^{\text{ЛСО}} \cos \varphi \right) + \frac{k}{k + 1} \varepsilon_k, \quad (3)$$

- подстановкой (3) в (2б) получаем значение кинетической энергии $T_{k+1}^{\text{ЛСО}}$.

Как видно из (3), внутренняя энергия образованного кластера зависит, помимо всего прочего, от φ — угла между векторами скоростей $V_1^{\text{ЛСО}}$ и $V_k^{\text{ЛСО}}$. Ввиду беспорядочности теплового движения можно считать, что относительные скорости распределены равномерно по всем направлениям, поэтому вероятность того, что φ заключен в интервале $(\varphi, \varphi + d\varphi)$, составит

$$P(\varphi, \varphi + d\varphi) = \frac{\sin \varphi}{2} d\varphi. \quad (4)$$

Таким образом, внутренняя и кинетическая энергии частицы, полученной в реакции (1а), определяются через энергетические характеристики частиц исходных частиц.

Обозначим $Z_{k+1,n}$ количество столкновений кластер — атом металла, в результате которых образуется $(k + 1)$ -атомный кластер с внутренней энергией $\varepsilon_{k+1} = n\delta$, определенной из (3). Значение $Z_{k+1,n}$ может быть определено по формулам молекулярно-кинетической теории [16]. Тогда для определения числа образованных в реакции (1а) долгоживущих кластеров нужно умножить $Z_{k+1,n}$ на вероятность $P^{\text{д}}(k + 1, n)$. Таким образом, модель позволяет можно оценить не только состояние, но и количество частиц, получившихся в единицу времени после реакции (1а).

*Определение количества распадов (1б)
и энергетических характеристик продуктов распада*

Образованные в реакции (1а) $(k + 1)$ -атомные кластеры в количестве $Z_{k+1,n}(1 - P^{\text{д}}(k + 1, n))$ не будут долгоживущими и вскоре распадутся на k -атомный кластер и атом (реакция (1б)), не успев столкнуться с другими частицами. Для описания энергетического эффекта реакции (1б) следует определить внутреннюю энергию ε_k образованного k -атомного кластера, кинетическую энергию движения его центра масс, кинетическую энергию отделившегося атома и угол разлета, считая известными кинетическую энергию движения центра масс $(k + 1)$ -атомного кластера в ЛСО T_{k+1} и его внутреннюю энергию ε_{k+1} . На две известных величины в реакции (1б) приходится 4 неизвестных, поэтому для их определения нужно привлечь 2 дополнительных условия.

Анализ результатов МД-моделирования показывает, что взаимодействие между кластером и атомом металла занимает интервал времени значительно больший, чем, если бы, атом просто пролетал через кластер. За время, проведенное внутри кластера, налетевший атом взаимодействует с другими атомами кластера и энергия перераспределяется между ними так, что их состояния уравниваются. За это предположение говорит, например, факт, что, согласно результатам МД-расчетов, вылетающий из кластера атом металла не обязательно будет тем же, который налетел. Поэтому, в основу анализа энергообмена в реакции (1б) положим два предположения:

1) Будем считать, что средняя кинетическая энергия вылетающего атома в системе центра масс $(k + 1)$ -атомного кластера (далее, Ц-система) определяется только внутренней энергией этого кластера. Это предположение подтверждается результатами МД-моделирования. На рис. 1 показаны зависимости вероятности того, что кластер является долгоживущим (левая шкала) и средней кинетической энергии атома меди (правая шкала) от внутренней энергии 6-ти атомного кластера. Как видно из рисунка, график для $T_1(\varepsilon_6)$ слева ограничен энергией, при которой вероятность образования долгоживущего кластера становится равной 1, так как для долгоживущих кластеров реакция (1б) не реализуется. Интервалы, показанные на графике, соответствуют разбросу данных, они малы для низких значений внутренней энергии и возрастают почти

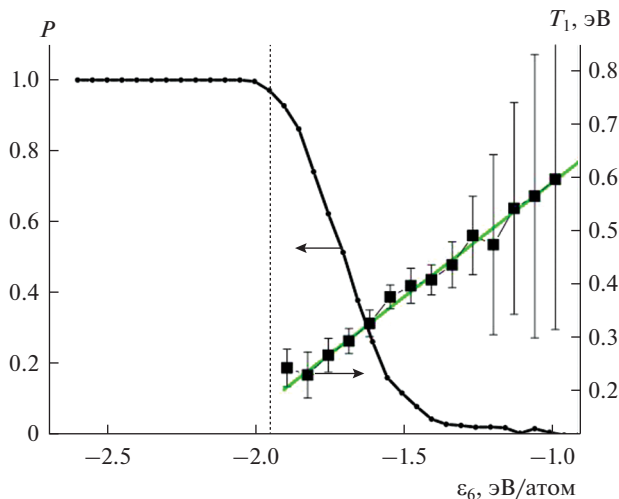


Рис. 1. Зависимость вероятности того, что 6-ти атомный кластер является долгоживущим (левая шкала) и средняя кинетическая энергия вылетающего атома меди (правая шкала) от внутренней энергии кластера.

до 100% вблизи верхней границы существования кластера. График хорошо аппроксимируется линейной зависимостью, показанной сплошной линией.

На рис. 2 изображены графики зависимости средней кинетической энергии вылетевшего атома меди, вычисленной в Ц-системе, от внутренней энергии для кластеров, содержащих различное количество атомов. Данные, отмеченные пустыми символами, получены при различных значениях температуры смеси паров меди и аргона, закрашенными кругами показано среднее значение. Как видно из рисунка, зависимости, полученные для различных начальных температур газовой смеси, практически совпадают, разброс данных мал для кластеров с низкой энергией и возрастает при увеличении энергии. На основании приведенного анализа был сформирован массив $T_1(k, n)$, в котором k есть количество атомов в кластере, n характеризует внутреннюю энергию кластера, значение элемента массива равно среднему значению кинетической энергии вылетающего атома в Ц-системе.

2) Предположим, что направление, в котором вылетает атом в Ц-системе, является произвольным, не связанным с направлением движения центра масс этого кластера. Это означает, что после образования $(k + 1)$ -атомного кластера в реакции (1a) в нем происходит уравнивание не только энергий атомов в Ц-системе, но и направлений, в которых движутся атомы. Поэтому прямая, на которой лежат скорости разлетающихся частиц из правой части (1б) в Ц-системе, может быть произвольно ориентирована относительно направления скорости центра масс $(k + 1)$ -атомного кластера из левой части (1б). Тогда угол α между ними будет распределен как

$$P(\alpha, \alpha + d\alpha) = \frac{\sin \alpha}{2} d\alpha. \quad (5)$$

Результаты МД-моделирования, показанные на рис. 3 подтверждают это предположение. На рис. 3 закрашенными квадратами показана функция распределения угла α между скоростью димера и атома меди, образовавшихся при распаде 3-х атомного кластера. Как видно из рисунка, формы графиков функций похожи между собой, отличие молекулярно-динамической функции от теоретической (5) составляет около 10%.

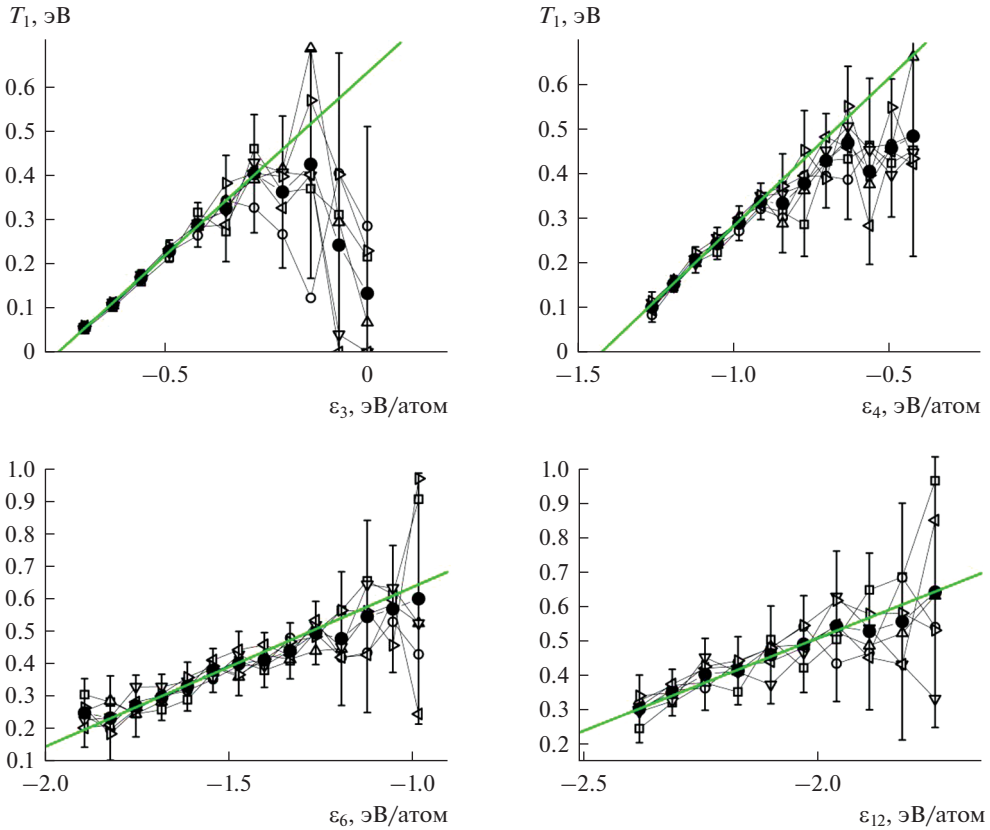


Рис. 2. Зависимости энергии атома меди (реакция (16)) от внутренней энергии кластера, полученные при различных температурах газовой смеси и для кластеров, содержащих различное количество атомов. \square – 300; \circ – 500; \triangle – 750; ∇ – 1000; \triangleleft – 1250; \triangleright – 1500 К.

В принятых предположениях результаты распада возбужденного кластера (16) описываются следующим образом. Законы сохранения импульса и энергии, записанные в Ц-системе, выглядят как

$$\begin{cases} 0 = m_1 V_1 + m_k V_k, \\ (k+1) \varepsilon_{k+1} = T_1 + T_k + k \varepsilon_k. \end{cases} \quad (6a)$$

$$(k+1) \varepsilon_{k+1} = T_1 + T_k + k \varepsilon_k. \quad (6б)$$

Здесь и далее переменные без верхнего индекса определяются в Ц-системе. В (6) предполагается, что атом удалился на достаточное расстояние от кластера, так, что энергией их взаимодействия можно пренебречь. Реализуется следующая последовательность вычислений:

- определяем T_1 из массива $T_1(k+1, n)$, $n = \lceil \varepsilon_{k+1} / \delta \rceil$. Из (6a) получим $T_k = T_1 / k$. Из закона сохранения энергии (6б) определим внутреннюю энергию k -атомного кластера

$$\varepsilon_k = \frac{(k+1)}{k} \varepsilon_{k+1} - \frac{T_1(k+1, n)}{k^2},$$

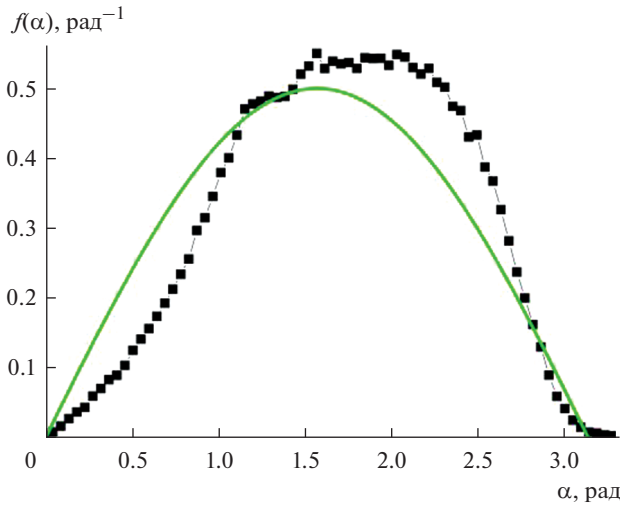


Рис. 3. Функции распределения угла между скоростями разлета частиц в Ц-системе 3-х атомного кластера и скоростью центра масс распадающегося кластера; ■ – полученная из молекулярно-динамических расчетов; — — теоретическая (5).

• скорость атома в ЛСО выражается формулой $V_1^{\text{ЛСО}} = V_1 + V_{k+1}^{\text{ЛСО}}$. Тогда кинетическая энергия атома в ЛСО будет равна

$$T_1^{\text{ЛСО}} = \frac{m_1 (V_1^{\text{ЛСО}})^2}{2} = \frac{m_1 (V_1^2 + (V_{k+1}^{\text{ЛСО}})^2 + 2V_1 V_{k+1}^{\text{ЛСО}} \cos \alpha)}{2}, \tag{7a}$$

где угол α распределен как (5). Кинетическая энергия центра масс k -атомного кластера в ЛСО

$$T_k^{\text{ЛСО}} = \frac{m_1 (V_k^2 + (V_{k+1}^{\text{ЛСО}})^2 - 2V_k V_{k+1}^{\text{ЛСО}} \cos \alpha)}{2}. \tag{7б}$$

Таким образом можно проследить перемещение кластеров по осям энергии – внутренней и кинетической энергии центра масс, а также изменение числа атомов, происходящее в результате столкновений кластер–атом металла.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На основе данных МД-моделирования проведен анализ зарождения и роста кластеров меди, исследованы взаимодействия кластеров с атомами меди и получены следующие результаты.

1. Предложена математическая модель взаимодействия между атомом меди и медным кластером, пригодная для описания макроскопических систем. В качестве параметров взаимодействия выбраны внутренняя энергия кластера и кинетические энергии центра масс кластера и атома.

2. Модель основана на предположении, что кластер, образованный при взаимодействии атома и кластера металла, с вероятностью, зависящей от внутренней энергии, может существовать достаточное время, чтобы продолжить рост (долгоживущий). Указанные вероятности определены из результатов МД-моделирования и хранятся в

двумерном массиве $P^d(k, n)$, где k – количество атомов в кластере, $n = [\varepsilon_k/\delta]$ – параметр, зависящий от внутренней энергии, δ – шаг по энергии, в настоящей модели выбрано $\delta = 0.01$ эВ.

3. Часть кластеров, образованных при взаимодействии атома и кластера металла, с вероятностью $1 - P^d(k, n)$ распадается, не успев столкнуться с другими частицами. Модель позволяет оценить энергии продуктов распада с помощью предположения о том, что за время, проведенное внутри кластера, налетевший атом взаимодействует с другими атомами кластера и энергия перераспределяется между ними так, что их состояния уравниваются. Тогда средняя кинетическая энергия атома меди, вылетевшего при распаде, в системе отсчета, связанной с центром масс распадающегося кластера, будет определяться его внутренней энергией. На основании результатов МД-моделирования был сформирован массив $T_1(k, n)$, в котором k есть количество атомов в кластере, n характеризует внутреннюю энергию кластера, значение элемента массива равно среднему значению кинетической энергии вылетающего атома.

Описание “в среднем” не дает возможности предсказать энергетические соотношения в отдельно взятом акте взаимодействия, но, ожидается, что такой подход правдоподобно опишет начальный этап газофазной нуклеации в макроскопических системах.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Korenchenko A. E., Gel'chunskii B. R. Mathematical simulation of the formation of metallic nanoparticles during the condensation of molten metal vapors // Russian metallurgy. 2011. № 8. P. 723–728.
2. Вараксин А. Ю. Кластеризация частиц в турбулентных и вихревых двухфазных потоках // ТВТ. 2014. 52. № 5. С. 777–789.
3. Фисенко С. П. Микроструктура поля пересыщения при гомогенной нуклеации в парогазовой смеси // Журн. технической физики. 2013. 83. № 5. С. 35–40.
4. Goudeli E., Pratsinis S. E. Gas-Phase Manufacturing of Nanoparticles: Molecular Dynamics and Mesoscale Simulations // Partic Sci Techno. 2016. 34. № 4. P. 483–493.
5. Gorshkov V., Kuzmenko V., Privman V. Modeling of Growth Morphology of Core-Shell Nanoparticles // J. Phys. Chem. C. 2014. 118. P. 24959.
6. Heath Turner C., Lei Yu, Yuping Bao. Modeling the Atomistic Growth Behavior of Gold Nanoparticles in Solution // Nanoscale. 2016. 8. № 17. P. 9354–9365.
7. Paramita Haldar, Abhijit Chatterjee. Seeking kinetic pathways relevant to the structural evolution of metal nanoparticles // Modell. Simul. Mater. Sci. Eng. 2015. 23. P. 025002.
8. Ленёв Д. Ю., Норман Г. Э. Молекулярное моделирование термической аккомодации атомов аргона на кластерах атомов железа // ТВТ. 2019. 57. № 4. С. 534–542.
9. Plimpton S. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics // J. Computational Physics. 1995. 117. P. 1–19.
10. Коренченко А. Е., Воронцов А. Г., Гельчинский Б. Р., Жукова А. А. Определение радиусов малых кластеров меди на основе моделирования процесса газофазной конденсации // ТВТ. 2019. 57. № 2. С. 304–307.
11. Воронцов А. Г., Коренченко А. Е., Гельчинский Б. Р. Анализ стабильности малых металлических кластеров при конденсации паров металла // ТВТ. 2019. 57. № 3. С. 404–407.
12. Korenchenko A. E., Vorontsov A. G., Gel'chinskii B. R., Sannikov G. P. Statistical analysis of dimer formation in supersaturated metal vapor based on molecular dynamics simulation // Physica A. 2018. 496. P. 147–155.
13. Foiles S. M., Baskes M. I., Daw M. S. Embedded-atom-method functions for the fcc metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and their alloys. Phys. Rev. B. 1986. 33. P. 7983–7991.
14. Morse M. D. Clusters of transition-metal atoms // Chem. Revs. 1986. 86. P. 1049–1109.

15. Коренченко А. Е., Воронцов А. Г., Гельчинский Б. Р. Статистический анализ образования и релаксации атомных кластеров по данным молекулярно-динамического моделирования газофазной нуклеации металлических наночастиц // ТВТ. 2016. **54**. № 2. С. 243–248.

16. IUPAC, Compendium of Chemical Terminology; 2nd ed. the “Gold Book”, 1997.

Macroscopic Model of Nucleation in Condensation of Copper Vapors in an Inert Gas

A. E. Korenchenko^{1,2}, A. G. Vorontsov³, A. A. Zhukova¹

¹First Moscow State Medical University named after I.M. Sechenov, Moscow, Russia

²Institute of Metallurgy, Ural Branch of RAS, Yekaterinburg, Russia

³South Ural State University (NRU), Chelyabinsk, Russia

In the framework of a computational scheme suitable for describing condensation, a statistical analysis of the results of molecular dynamics calculations of gas-phase “self-assembly” of nanoclusters during condensation of metal vapor was carried out. The patterns of collisions and growth of small copper clusters are revealed. The interaction parameters of clusters with metal atoms are determined, which allow transferring information to a macroscopic model of nucleation. The results can be used in the description of nucleation to predict the size distribution of nanoparticles in the industrial production of metal nanopowders.

Keywords: nucleation, condensation, copper vapor

REFERENCES

1. Korenchenko A.E., Gel'chunskii B.R. Mathematical simulation of the formation of metallic nanoparticles during the condensation of molten metal vapors // Russian metallurgy. 2011. № 8. P. 723–728.

2. Varaksin A.YU. Klasterizatsiya chastits v turbulentykh i vikhrevykh dvukhfaznykh potokakh [Particle clustering in turbulent and vortex two-phase flows] // TVT. 2014. **52**. № 5. P. 777–789. (in Russian).

3. Fisenko S.P. Mikrostruktura polya peresyshcheniya pri gomogennoy nukleatsii v parogazovoy smesi [The microstructure of the supersaturation field during homogeneous nucleation in a vapor-gas mixture] // Zhurnal tekhnicheskoy fiziki. 2013. **83**. № 5. P. 35–40. (in Russian).

4. Goudeli E., Pratsinis S.E. Gas-Phase Manufacturing of Nanoparticles: Molecular Dynamics and Mesoscale Simulations // Particul Sci Techno. 2016. **34**. № 4. P. 483–493.

5. Gorshkov V., Kuzmenko V., Privman V. Modeling of Growth Morphology of Core-Shell Nanoparticles // J. Phys. Chem. C. 2014. **118**. P. 24959.

6. Heath Turner C., Lei Yu, Yuping Bao. Modeling the Atomistic Growth Behavior of Gold Nanoparticles in Solution // Nanoscale. 2016. **8**. № 17. P. 9354–9365.

7. Paramita Haldar, Abhijit Chatterjee Seeking kinetic pathways relevant to the structural evolution of metal nanoparticles // Modell. Simul. Mater. Sci. Eng. 2015. **23**. P. 025002.

8. Lenov D.Yu., Norman G.E. Molekulyarnoye modelirovaniye termicheskoy akkomodatsii atomov argona na klasterakh atomov zheleza [Norman Molecular modeling of thermal accommodation of argon atoms on clusters of iron atoms] // TVT. 2019. **57**. № 4. P. 534–542. (in Russian).

9. Plimpton S. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics // J. Computational Physics. 1995. **117**. P. 1–19.

10. Korenchenko A.Ye., Vorontsov A.G., Gel'chinskiy B.R., Zhukova A.A. Opredeleniye radiusov malykh klasterov medi na osnove modelirovaniya protsessa gazofaznoy kondensatsii [Determination of the radii of small copper clusters based on modeling of the gas-phase condensation process] // TVT. 2019. **57**. № 2. P. 304–307. (in Russian).

11. Vorontsov A.G., Korenchenko A.Ye., Gel'chinskiy B.R. Analiz stabil'nosti malykh metallicheskikh klasterov pri kondensatsii parov metalla [Analysis of the stability of small metal clusters during condensation of metal vapor] // TVT. 2019. **57**. № 3. P. 404–407. (in Russian).

-
12. Korenchenko A.E., Vorontsov A.G., Gel'chinskii B.R., Sannikov G.P. Statistical analysis of dimer formation in supersaturated metal vapor based on molecular dynamics simulation // *Physica A*. 2018. **496**. P. 147–155.
 13. Foiles S.M., Baskes M.I., Daw M.S. Embedded-atom-method functions for the fcc metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and their alloys. *Phys. Rev. B*. 1986. **33**. P. 7983–7991.
 14. Morse M.D. Clusters of transition-metal atoms // *Chem. Revs.* 1986. **86**. P. 1049–1109.
 15. Korenchenko A.Ye., Vorontsov A.G., Gel'chinskiy B.R. Statisticheskiy analiz obrazovaniya i relaksatsii atomnykh klasterov po dannym molekulyarno-dinamicheskogo modelirovaniya gazofaznoy nukleatsii metallicheskih nanochastits [Statistical analysis of the formation and relaxation of atomic clusters according to molecular dynamics modeling of gas-phase nucleation of metal nanoparticles] // *TVT*. 2016. **54**. № 2. P. 243–248. (in Russian).
 16. IUPAC, Compendium of Chemical Terminology; 2nd ed. the “Gold Book”, 1997.