Министерство образования и науки
Российской Федерации
Федеральное государственное
бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Тверской государственный университет»

**ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ
ИЗУЧЕНИЯ КЛАСТЕРОВ,
НАНОСТРУКТУР
И НАНОМАТЕРИАЛОВ**

МЕЖВУЗОВСКИЙ СБОРНИК НАУЧНЫХ ТРУДОВ

выпуск 9

ТВЕРЬ 2017

УДК 620.22:544+621.3.049.77+539.216.2:537.311.322: 530.145

ББК Ж36:Г5+В379

Ф50

Рецензирование статей осуществляется на основании Положения об рецензировании статей и материалов для опубликования в Межвузовском сборнике научных трудов «Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов».

Официальный сайт издания в сети Интернет:

www.physchemaspects.ru

Ф50 Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов [Текст]: межвуз. сб. науч. тр. / под общей редакцией В.М. Самсонова, Н.Ю. Сдобнякова. – Тверь: Твер. гос. ун-т, 2017. – Вып. 9. – 592 с.

ISBN 978-5-7609-1275-6

Зарегистрирован Федеральной службой по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций, свидетельство о регистрации СМИ ПИ № ФС 7747789 от 13.12.2011.

Сборник составлен из оригинальных статей теоретического и экспериментального характера, отражающих результаты исследований в области изучения физико-химических процессов с участием кластеров, наноструктур и наноматериалов физики, включая межфазные явления и нанотермодинамику. Сборник предназначен для научных и инженерно-технических работников, преподавателей ВУЗов, студентов и аспирантов. Издание подготовлено на кафедре общей физики Тверского государственного университета.

УДК 620.22:544+621.3.049.77+539.216.2:537.311.322: 530.145

ББК Ж36:Г5+В379

ISBN 978-5-7609-1275-6

ISSN 2226-4442

© Коллектив авторов, 2017

© Тверской государственной
университет, 2017

УДК 544.77.03:536.421.1

КОМПЛЕКСНОЕ ПРИМЕНЕНИЕ АТОМИСТИЧЕСКОГО И ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ К ИССЛЕДОВАНИЮ РАЗМЕРНОЙ ЗАВИСИМОСТИ ТЕМПЕРАТУРЫ ПЛАВЛЕНИЯ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОЧАСТИЦ

В.М. Самсонов, И.В. Талызин, С.А. Васильев, А.Ю. Картошкин
ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»
170002, Россия, Тверь, Садовый переулок, 35
samsonoff@inbox.ru

DOI: 10.26456/pcascnn/2017.9.411

Аннотация: Работа посвящена обсуждению методологии, сочетающей термодинамическое и атомистическое (молекулярно-динамическое) моделирование плавления наночастиц, а также изложению конкретных результатов по размерной зависимости температуры плавления наночастиц Ni и Ag . На примере размерной зависимости температуры плавления сделан вывод о том, что, хотя некоторые аспекты как термодинамического, так и атомистического моделирования являются дискуссионными, комплексное применение обоих подходов позволяет получить более достоверные результаты и сделать обоснованные суждения о степени достоверности имеющихся экспериментальных данных.

Ключевые слова: термодинамическое моделирование, атомистическое моделирование, размерная зависимость температуры плавления, наночастицы Ni , наночастицы Ag .

1. Термодинамические модели плавления наночастиц и их сопоставление с результатами МД моделирования

В данной работе нами предпринята попытка обоснования целесообразности применения комплексного подхода к проблеме размерной зависимости температуры плавления, сочетающего термодинамическое и атомистическое моделирование. Начало термодинамическому моделированию плавления малых объектов было положено известной формулой Томсона для их температуры плавления T_m :

$$T_m = T_m^{(\infty)} \left(1 - \frac{2\sigma_{sl} v_s}{\lambda_m^{(\infty)} R} \right), \quad (1)$$

где $T_m^{(\infty)}$ – макроскопическая температура плавления (температура плавления соответствующей объемной фазы), R – радиус частицы, σ_{sl} – межфазное натяжение на границе между кристаллом и собственным расплавом, $\lambda_m^{(\infty)}$ – удельная теплота плавления объемной фазы, v_s – удельный объем твердой фазы. Имеется целый ряд аналогов этой формулы, представленных в ряде работ и монографий (см., например, [1-3]). В нашей работе [4] был предложен аналог формулы (1)

$$T_m = T_m^{(\infty)} (1 - \alpha L_{ch} / R), \quad (2)$$

учитывающий отклонение формы частицы от сферической. Здесь α –

фактор асферичности, равный отношению площади поверхности частицы к площади равновеликого по объему шара, $L_{ch} = 2\sigma_{sl}v_s / \lambda_m^{(\infty)}$ – параметр, имеющий размерность длины и интерпретируемый нами в [4] как некоторая характеристическая длина.

Формула (1) вытекает из условия равенства химического потенциала $\mu_s(P_s, T_m)$ кристаллического ядра частицы и оболочки расплава $\mu_l(P_l, T_m)$ толщиной $\delta = R - r$, где r – радиус кристаллического ядра, P_s – давление в этом ядре радиуса r , P_l – давление в жидкой оболочке. Приводя давление P_s к давлению P_l [5, 6]:

$$\mu_s(P_l, T_m) + \frac{2\gamma_{sl}}{r} + \frac{\partial \gamma_{sl}}{\partial r} = \mu_l(P_l, T_m)$$

и полагая далее $P_l = \text{const}$, $\partial \gamma_{sl} / \partial r = 0$, получим формулу

$$T_m = T_m^{(\infty)} \left(1 - \frac{2\sigma_{sl}v_s}{\lambda_m^{(\infty)}} \frac{1}{r} \right), \quad (3)$$

интерпретирующую T_m как температуру термодинамического равновесия между кристаллическим ядром и оболочкой расплава. С феноменологической точки зрения, основанием для такой геометрической модели частицы, является то обстоятельство, что поверхностное натяжение расплава γ_l меньше поверхностного натяжения γ_s твердой поверхности и, соответственно, плавление начинается с поверхности [7]. Таким образом, формула (3) отвечает модели плавления частицы, связанного с возникновением и последующим ростом жидкой оболочки, т.е. модели плавления, начинающегося с предплавления. Отметим, что формула (3) предсказывает положительность производной dT_m / dr , что физически не адекватно как из общих соображений, так и с точки зрения отмеченных ниже результатов атомистического моделирования. Действительно, радиус кристаллического ядра r не увеличивается, а уменьшается с ростом температуры ($dT_m / dr < 0$). Полагая в (3) $r = R$, т.е. $\delta = R - r = 0$, получим формулу Томсона (1). Как отмечается в [1], была также предложена модель плавления без жидкой оболочки. В этом случае в формуле (1) межфазное натяжение σ_{sl} следует заменить на разность $\sigma_s - \sigma_l$ поверхностных натяжений твердого тела σ_s и расплава σ_l .

Формула (1) предсказывает уменьшение температуры плавления с уменьшением размера объекта и линейную зависимость T_m от обратного радиуса частицы R^{-1} или пропорциональной ему величины $N^{-1/3}$, и эти предсказания согласуются в целом с имеющимися экспериментальными данными, а также с результатами атомистического моделирования, включая наши МД результаты [8-11]. Как видно из рис. 1 а, при $N < 1500 - 2000$ жидкообразная оболочка на поверхности наночастиц Ni не

обнаруживается, и имеют место выраженные скачки на температурной зависимости удельной когезионной энергии нанокластера (см. рис. 1 б), отвечающие температурам плавления T_m и кристаллизации T_c . Однако для мезоскопических металлических наночастиц содержащих несколько тысяч атомов и более, скачок u при $T = T_m$ является размытым, и формирование жидкообразной оболочки (см. рис. 2 а) сопровождается изменением формы петли гистерезиса (см. рис. 2 б).

Рис. 1. Конфигурация наночастицы Ni , содержащей 500 атомов, при $T = 1310$ К (а) и соответствующая петля гистерезиса плавления-кристаллизации (б). Программа LAMMPS, метод погруженного атома, потенциал [12].

Рис. 2. Конфигурация наночастицы Ni , содержащей 7000 атомов, при $T = 1580$ К (а) и соответствующая петля гистерезиса плавления-кристаллизации (б). Программа LAMMPS, метод погруженного атома, потенциал [12].

Учитывая, это, мы пришли к выводу о целесообразности введения в рассмотрение температуры начала плавления $T_m^{(b)}$ и температуры его

завершения $T_m^{(f)}$, определив при этом T_m как $(T_m^{(b)} + T_m^{(f)})/2$.

Формирование жидкообразной оболочки наблюдалось в наших МД экспериментах на наночастицах серебра уже при $N = 1500$ (см. рис. 3), что согласуется с результатами работы [13], авторы которой назвали $T_m^{(b)}$ температурой предплавления, а температуру $T_m^{(f)}$ – температурой плавления частицы.

Рис. 3. МД конфигурация наночастицы Ag, содержащей 1500 атомов, при $T = 830$ K (наша компьютерная программа, потенциал сильной связи [14]).

Термодинамические модели плавления наночастиц не учитывают гистерезис плавления-кристаллизации, количественной мерой которого является разность температур $\Delta T = T_m - T_c$. В работах [15, 16] с использованием молекулярно-динамического моделирования мы изучали влияние скоростей нагрева и охлаждения на величину гистерезиса плавление-кристаллизация. Естественно, что уменьшение скорости изменения температуры $\dot{T}$ уменьшало ΔT . Однако, как отмечалось еще в 50-х гг. В.И. Даниловым [17], даже для объемных фаз вблизи температуры плавления всегда существует некоторый перегрев кристалла и некоторое переохлаждение жидкости, хотя, эти эффекты порядка 1 K не регистрируются экспериментально [17]. В [15], чтобы минимизировать вклад гистерезиса в T_m , мы использовали альтернативный метод регистрации температуры плавления в компьютерных экспериментах: твердая частица выдерживалась (релаксировала) при фиксированных температурах. При этом анализ локальной структуры демонстрировал флуктуационные переходы от кристаллического состояния к жидкоподобному и наоборот. При температуре $T_m^{(eq)}$, названной нами квазиравновесной температурой плавления, вероятности кристаллического и жидкоподобного состояний становятся одинаковыми. Очевидно, именно $T_m^{(eq)}$ следует сравнивать с равновесной температурой плавления,

отвечающей формуле Томсона (1). Сделанное в [15] заключение о «мерцаниях» структуры металлических наночастиц между твердым и жидким состояниями согласуется с мнением А.И. Русанова [18] о том, что из-за своего малого размера наночастица меняет фазовое состояние практически мгновенно, и трудно представить состояние равновесия фаз внутри частицы.

2. Сравнение размерных зависимостей температур плавления, найденных с использованием МД и термодинамического моделирования

На рис. 4 представлены размерные зависимости T_m , $T_m^{(eq)}$ и T_c , построенные с использованием наших МД результатов для наночастиц Ni . Здесь же представлены МД результаты из работы [19]. Видно, что все представленные на рисунке зависимости отвечают уменьшению температуры плавления с ростом $N^{-1/3}$, т.е. с уменьшением размера частиц. Достаточно отчетливо рис. 4 демонстрирует линейную зависимость T_m и $T_m^{(eq)}$ от $N^{-1/3}$, что можно рассматривать как подтверждение формулы Томсона (1).

Рис. 4. Размерные зависимости температуры плавления T_m ($\blacktriangle$), равновесной температуры плавления $T_m^{(eq)}$ ($\bullet$) и температуры кристаллизации T_c ($\blacktriangledown$) для наночастиц Ni . Линейная экстраполяция $T_m(N^{-1/3})$ и $T_m^{(eq)}(N^{-1/3})$ к $N^{-1/3} = 0$ дает значения 2085 К и 1728 К, соответственно. Табличное значение температуры плавления Ni (штриховая линия) равно 1726 К [20]. Пунктирная линия, состоящая из точек $\circ$, отвечает МД результатам из работы [19] (экстраполяция к $N^{-1/3} = 0$ отвечает значению 1588 К).

Как и следовало ожидать, прямая $T_m^{(eq)}(N^{-1/3})$ располагается между зависимостями $T_m(N^{-1/3})$ и $T_c(N^{-1/3})$, и результат экстраполяции $T_m^{(eq)}$ к

$N^{-1/3} = 0$ дает значение 1728 К, которое гораздо лучше согласуется с табличным значением 1726 К температуры плавления объемного Ni, чем экстраполяция значений T_m , отвечающих МД результатам работы [19]. Соответственно, именно МД результаты для $T_m^{(eq)}$ следует сравнивать с расчетами по формуле (1).

Из рис. 5 видно, что МД результаты для $T_m^{(eq)}$ (прямая 1) очень хорошо согласуются с термодинамической зависимостью $T_m^{(eq)}(N^{-1/3})$, отвечающей $\sigma_{sl}=378$ мН/м² [21]. При расчетах с использованием другого значения $\sigma_{sl}=255$ мН/м², также представленного в [21], имеет место гораздо худшее согласие с МД результатами.

Рис. 5. Сравнение размерной зависимости равновесной температуры плавления наночастиц никеля, полученной в МД экспериментах (прямая 1), с результатами расчетов по формуле Томсона (1): линии 2 отвечает $\sigma_{sl}=378$ мН/м² [21], линии 3 – значению $\sigma_{sl}=255$ мН/м² [21].

На рис. 6 представлены размерные зависимости температур плавления и кристаллизации частиц Ag, построенные нами с использованием результатов МД экспериментов, причем МД результаты отвечают $T_m^{(eq)}$. Как и следовало ожидать, температура плавления (прямые 1 и 2) выше температуры кристаллизации. Результаты полученные с помощью программы LAMMPS, лучше согласуются как с макроскопическим значением температуры плавления Ag, равной 1234 К [20], так и с независимыми МД результатами других авторов [13]. Как видно из рис. 7, наши МД результаты, представленные прямой 1 на рис. 7, удовлетворительно согласуются с расчетами по формуле (1) с

использованием представленного в [12] экспериментального значения $\sigma_{sl}=143 \text{ мН/м}^2$.

Рис. 6. Размерные зависимости температуры плавления T_m (линии 1-2) и температуры кристаллизации T_c для частиц серебра. Точки $\bullet$ отвечают результатам, полученным с использованием программы LAMMPS и потенциала [22] ($T_m^{(\infty)} = 1218 \text{ K}$), точки $\blacktriangle$ – с использованием нашей программы и потенциала сильной связи ($T_m^{(\infty)} = 1119 \text{ K}$). Символами $\times$ представлены МД результаты по температуре плавления частиц Ag из работы [13]. Соответствующими полыми точками без линий представлены температуры кристаллизации. Макроскопическое значение температуры плавления Ag равно 1234 K [20].

Рис. 7. Сравнение МД результатов (прямая 1) для температуры плавления наночастиц серебра, полученных с использованием программы LAMMPS ($T_m^{(\infty)} = 1227 \text{ K}$) с расчетами по формуле Томсона (прямая 2) с использованием значения $\sigma_{sl}=143 \text{ мН/м}^2$ [21] и с имеющимися экспериментальными значениями T_m : ($\blacksquare$ – данные работы [23], $\blacktriangle$ – [24], $\bullet$ – [25]). Экстраполяция экспериментальных данных к $d^{-1} = 0$ дает значения 513 K, 932 K и 878 K, соответственно.

Вместе с тем, экспериментальные данные по размерной зависимости температуры плавления частиц Ag , представленные на том же рисунке, плохо согласуются как с МД результатами, так и с зависимостью 1, полученной с использованием формулы Томсона (1). Эти данные предсказывают гораздо более низкие значения $T_m(d)$, где $d = 2R$ – диаметр частицы, но эти экспериментальные данные для T_m могут быть не вполне надежными. В частности, их экстраполяция к $d^{-1} = 0$ дает существенно заниженные значения $T_m^{(\infty)}$. Таким образом, мы выдвигаем гипотезу, что по крайней мере применительно к плавлению наночастиц Ag результаты атомистического моделирования, включая наши результаты, представленные на рис. 7 и результаты работы [13] являются более адекватными.

Как уже отмечалось выше, межфазное натяжение σ_{sl} границы между кристаллом и собственным расплавом является параметром, который очень трудно определяется как теоретически [26], так и экспериментально. В одной из своих последних статей [27] Б.В. Дерягин назвал поверхностное натяжение твердого тела σ_s и межфазное натяжение σ_{sl} фиктивными и не определяемыми экспериментально параметрами. Не соглашаясь в целом с этим мнением, нельзя не согласиться с тем, что в нем все же присутствует доля истины. Соответственно, достоверность экспериментальных результатов для σ_{sl} , включая межфазное натяжение на границе с собственным расплавом, должна дополнительно подтверждаться. В частности, можно воспользоваться результатами МД моделирования для нахождения характерной длины L_{ch} , фигурирующей в формуле (1), а затем оценить σ_{sl} .

Таблица 1. Сравнение значений межфазного натяжения на границе кристалл-расплав, полученных с использованием результатов наших МД экспериментов (LAMMPS), с имеющимися экспериментальными данными [21]

Межфазная граница	$T_m^{(\infty)}$, К		σ_{sl} , мДж/м ²	
	МД	[20]	МД	[21]
$Ni(s) - Ni(l)$	1782	1728	446	378 225
$Ag(s) - Ag(l)$	1228	1234	230	143

В Таблице 1 значения межфазного натяжения, найденные нами с использованием результатов атомистического моделирования, сравниваются с двумя соответствующими экспериментальными значениями, взятыми из обзора [21]. Видно, что расчетные и экспериментальные значения удовлетворительно согласуются друг с

другом. Вместе с тем, можно сделать вывод, что для никеля экспериментальное значение $\sigma_{sl}=378$ мДж/м² является более достоверным, чем значение $\sigma_{sl}=255$ мДж/м².

Следующим шагом в оценке достоверности значений σ_{sl} может быть оценка равновесного угла смачивания θ , фигурирующего в уравнении Юнга

$$\cos \theta = (\sigma_s - \sigma_{sl}) / \sigma_l$$

или, в общем случае, параметра $K = (\sigma_s - \sigma_{sl}) / \sigma_l$, который можно назвать безразмерным коэффициентом растекания. При $K \leq 1$ параметр K равен $\cos \theta$. К сожалению, экспериментальные данные для θ являются весьма скудными. Однако было установлено, что, как правило, грани монокристаллов и поверхности поликристаллов характеризуются неполным смачиванием собственным расплавом [28]. Результаты оценки параметра K и краевого угла θ с использованием различных значений σ_{sl} представлены в таблице 2. Согласно Таблице 2, все использованные для оценок значения σ_{sl} предсказывают конечные значения θ для капель расплава Ni на поверхности кристаллического Ni . Однако значение $\sigma_{sl}=143$ мДж/м² для серебра приводит к значению $K > 1$, которое представляется неадекватным.

Таблица 2. Значения коэффициента растекания K и равновесного угла смачивания θ поверхности твердого металла собственным расплавом, найденные с использованием различных значений σ_{sl}

Металл	σ_s , мДж/м ² [29]	σ_l , мДж/м ² [29]	σ_{sl} , мДж/м ²	K	θ , град.
<i>Ni</i>	1920	1770	378 [21]	0,87	29
			225 [21]	0,96	17
			446 (МД)	0,83	34
<i>Ag</i>	1155	920	143 [21]	1,1	-
			230 (МД)	1,0	0,0

3. Заключение

В данной работе мы наметили и частично обосновали методологию комплексного использования атомистического и термодинамического моделирования на примере исследования размерной зависимости температуры плавления. Ранее [30] комплексный подход, сочетающий применение методов Монте-Карло и молекулярной динамики применялся нами для исследования размерной зависимости теплоты плавления наночастиц. Комплексные подходы открывают дополнительные возможности для получения достоверных теоретических результатов и продуктивного анализа имеющихся экспериментальных данных.

Авторы выражают признательность Н.Ю. Сдобнякову за ссылки на работы, посвященные экспериментальному определению температуры плавления наночастиц серебра. Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ в рамках выполнения ГЗ в сфере научной деятельности (проект № 3.5506.2017/БЧ) и РФФИ (грант № 17-43-690186).

Библиографический список:

1. **Peters, K.F.** Melting of *Pb* nanocrystals / K.F. Peters, J.B. Cohen, Y.-W. Chung // *Physical Review B*. – 1998. – V. 57. – I. 21. – P. 13430-13438.
2. **Buffat, P.** Size effect on the melting temperature of gold particles / P. Buffat, J. Borel // *Physical Review A*. – 1976. – V. 13. – № 6. – P. 2287-2298.
3. **Гусев, А.И.** Наноматериалы, наноструктуры, нанотехнологии / А.И. Гусев. – М.: Физматлит, 2005. – С. 200-212.
4. **Самсонов, В.М.** Размерная зависимость температуры плавления металлических нанокластеров с позиций термодинамического подобия / В.М. Самсонов, С.А. Васильев, А.Г. Бембель // *Физика металлов и металловедение*. – 2016. – Т. 117. – № 8. – С. 775–781.
5. **Русанов, А.И.** Лекции по термодинамике поверхностей / А.И. Русанов. – СПб.: Лань, 2013. – 240 с.
6. **Щербаков, Л.М.** Термодинамика поверхностных явлений: Учебное пособие / Л.М. Щербаков, В.М. Самсонов. – Калинин: КГУ, 1986. – 86 с.
7. **Скрипов, В.П.** Спонтанная кристаллизация переохлажденных жидкостей / В.П. Скрипов, В.П. Коверда. – М.: Наука, 1984. – С. 104-107.
8. **Сдобняков, Н.Ю.** О взаимосвязи размерных зависимостей температур плавления и кристаллизации наночастиц металлов / Н.Ю. Сдобняков, С.В. Репчак, В.М. Самсонов и др. // *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования*. – 2011. – № 5. – С. 109-112.
9. **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.
10. **Самсонов, В.М.** Комплексный подход к компьютерному моделированию плавления и кристаллизации нанокластеров золота / В.М. Самсонов, Н.Ю. Сдобняков, А.Г. Бембель и др. // *Вестник национального исследовательского ядерного университета «МИФИ»*. – 2013. – Т. 2. – №4. – С. 448-451.
11. **Самсонов, В.М.** Сравнительное молекулярно-динамическое исследование плавления и кристаллизации нанокластеров никеля и золота / В.М. Самсонов, А.Г. Бембель, О.В. Шакуло, С.А. Васильев // *Кристаллография*. – 2014. – Т. 59. – № 4. – С. 641-647.
12. **Adams, J.B** Self-diffusion and impurity diffusion of FCC metals using the 5 – frequency model and the embedded atom method / J.B Adams, S.M. Foiles, W.G. Wolfer // *Journal of Materials Research*. – 1989. – V. 4. – I. 1. – P. 102-112.
13. **Alarifi, H.A.** Determination of complete melting and surface premelting points of silver nanoparticles by molecular dynamics simulation / H.A. Alarifi, M. Atis, C. Özdoğan et al. // *Journal of Physical Chemistry C*. 2013. – V. 117. – I. 23. – P. 12289-12298.
14. **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.

15. **Самсонов, В.М.** О влиянии скоростей нагрева и охлаждения на плавление и кристаллизацию металлических нанокластеров / В.М. Самсонов, И.В. Талызин, М.В. Самсонов // Журнал технической физики. – 2016. – Т. 86. – Вып. 6. – С. 149-152.

16. **Самсонов, В.М.** О причинах гистерезиса плавления и кристаллизации наночастиц / В.М. Самсонов, С.А. Васильев, И.В. Талызин, Ю.А. Рыжков // Письма в Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2016. – Т. 103. – Вып. 2. – С. 100-105.

17. **Данилов, В.И.** Основные физические факторы кристаллизации. / В.И. Данилов // Строение и кристаллизация жидкости. – Киев: изд-во АН УССР, 1956. – С. 473-482

18. **Русанов, А.И.** Удивительный мир наноструктур / А.И. Русанов // Журнал общей химии. – 2002. – Т. 72. – Вып.4. – С.532-549.

19. **Qi, Y.** Melting and crystallization in *Ni* nanoclusters: The mesoscale regime / Y. Qi, T. Cagin, W.L. Johnson, W.A. Goddard // The Journal of Chemical Physics. – 2001. – V.114. – No 1. – P.385-394.

20. Физические величины. Справочник / под ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова. – М.: Энергоатомиздат, 1991. – 1232 с.

21. **Шебзухова, М.А.** Межфазное натяжение кристаллической наночастицы в жидкой материнской фазе в однокомпонентной металлической системе / М.А. Шебзухова, З.А. Шебзухов, А.А. Шебзухов // Физика твердого тела. – 2012. – Т. 54. – Вып.1. – С. 173-181.

22. **Sheng, H.W.** Highly optimized embedded-atom-method potentials for fourteen fcc metals / H. W. Sheng, M. J. Kramer, A. Cadien, T. Fujita, M. W. Chen // Physical Review B. – 2011. – V. 83. – I. 13. – P. 134118-1-134118-20

23. **Kim, N.H.** Preparation of silver nanoparticles having low melting temperature through a new synthetic process without solvent / N.H. Kim, J.-Y. Kim, K.J. Jin // Journal of Nanoscience and Nanotechnology. – 2007. – V. 7. – № 11. – P. 3805-3809.

24. **Asoro, M.A.** Scale effects on the melting behavior of silver nanoparticles / M.A. Asoro, D. Kovar, J. Damiano, P.J. Ferrera // Microscopy and Microanalysis. – 2010. – V. 16. – Supp. 2. – P. 1802-1803.

25. **Little, S.A.** Optical detection of melting point depression for silver nanoparticles via in situ real time spectroscopic ellipsometry / S.A. Little, T. Begou, R.W. Collins, S. Marsillac // Applies Physics Letters. – 2012. – V. 100. – I. 5. – P. 051107-1-051107.

26. **Картай, Г.** A model for solid-liquid interfacial energies of pure metals / G. Kartay // Transactions of Joining and Welding Research Institute. – 2001. – V. 30. – P. 245-250.

27. **Дерягин, Б.В.** Определение натяжения смачивающей пленки по высоте капиллярного бегемота столба жидкости и построение на его основе теории смачивания и капиллярности / Б.В. Дерягин // Коллоидный журнал. – 1994. – Т. 56. – № 1. – С. 47-49.

28. **Найдич, Ю.В.** Капиллярные явления в процессах роста и плавления кристаллов / Ю.В. Найдич, В.М. Перевертайло, Н.Ф. Григоренко. – Киев: Наукова Думка, 1983. – 100 с.

29. **Alchagirov, A.B.** Surface energy and surface tension of solid and liquid metals. Recommended values / A.B. Alchagirov, B.B. Alchagirov, T.M. Taova, Kh.B. Khokonov // Transactions of Joining and Welding Research Institute. – 2001. – V. 30. – P. 287-291.

30. **Самсонов, В.М.** О размерной зависимости теплоты плавления металлических нанокластеров / В.М. Самсонов, Н.Ю. Сдобняков, С.А. Васильев, Д.Н. Соколов // Известия РАН. Серия физическая. – 2016. – Т. 80. – № 5. – С. 547-550.