

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ РАЗМЕРНОЙ ГРАНИЦЫ ПЕРЕХОДА НАНОКЛАСТЕРОВ СЕРЕБРА С НАЧАЛЬНОЙ АМОРФНОЙ СТРУКТУРОЙ К ГЦК ФАЗЕ

Д.А. Рыжкова, С.Л. Гафнер, Ю.Я. Гафнер, А.А. Череповская
ФГБОУ ВО «Хакасский государственный университет имени Н.Ф. Катанова»
655017, Россия, Абакан, пр. Ленина, 90
bashkova.daria@yandex.ru

DOI: 10.26456/pcascnn/2022.14.490

Аннотация: Методом молекулярной динамики с использованием потенциала сильной связи (ТВ-SMA – second moment approximation of tight-binding potential) производился поиск границ устойчивости структурных модификаций нанокластеров серебра диаметром 3,0–7,0 нм с целью определения размерной границы возможного термически индуцированного структурного перехода от исходной аморфной морфологии к ГЦК фазе. Полученные данные сравнивались с результатами предыдущих исследований для наночастиц Ag размерами до 2,0 нм с начальным ГЦК и аморфным строением. Показано, что моделируемые Ag нанокластеры можно условно разделить на три категории. Для первой ($N < 100$ атомов) – характерно частичное сохранение исходной морфологии. Для второй ($d < 4,0$ нм) – наблюдается конкуренция между икосаэдрической и декаэдрической структурами. И для третьей ($d > 4,0$ нм) – фиксировалось преобладание смешенной ГЦК/ГПУ фазы. При этом размерной границей перехода от начальной аморфной морфологии к ГЦК строению, свойственному объёмному веществу, является диаметр около 7,0 нм.

Ключевые слова: нанокластеры, серебро, компьютерное моделирование, структура, сильная связь, фазовые переходы, структурная стабильность.

1. Введение

Металлические нанокластеры (МНК) представляют собой важный класс материалов, обладающий свойствами, часто отличными от свойств объёмных образцов. Так с уменьшением размера МНК изменяется соотношение между внутренней и поверхностной энергиями кластера в пользу последней. Это обуславливает переход от структуры, свойственной объёмному веществу к иным возможным политипным модификациям. Например, при достаточно малых размерах МНК, стремление к минимизации поверхностной энергии приводит к образованию икосаэдрических (Ih) или декаэдрических (Dh) морфологий [1], за счет оптимизации плотноупакованных {111}-подобных граней и внутренней деформации самого МНК [2]. Здесь следует сказать, что в отличие от квазисферического икосаэдра, декаэдр обладает значительно меньшей стабильностью, поэтому во втором случае, как правило, говорят о его различных усечённых формах [3, 4].

Изменение внутренней структуры нанокластеров, в большинстве случаев, происходит между двумя геометрическими семействами Ih – ГЦК и Dh – ГЦК, а при достижении МНК достаточно малых размеров становятся возможными сложные многоступенчатые переходы с

образованием асимметрий, дефектов и гибридной геометрии, которые обусловлены не только оптимизацией поверхности, но и согласованным движением внутренних атомов [5]. Так, в работе [6] подробно рассматривались механизмы преобразования декаэдрической структуры к ГЦК или ГПУ морфологиям через ассиметрично искаженные геометрические мотивы, названные «миграцией оси» и «миграцией двойной плоскости» (см. рис. 1). Первый представляет собой смещение плоскостей $\{111\}$ в двух или более частях кластера, которые сдвигают ось пятого порядка без дополнительных вращений, не изменяя ее характера. Второй – основан на вращении вокруг оси пятого порядка двух противоположных секторов и одновременного скольжения $\{111\}$ плоскостей атомов из других трех секторов.

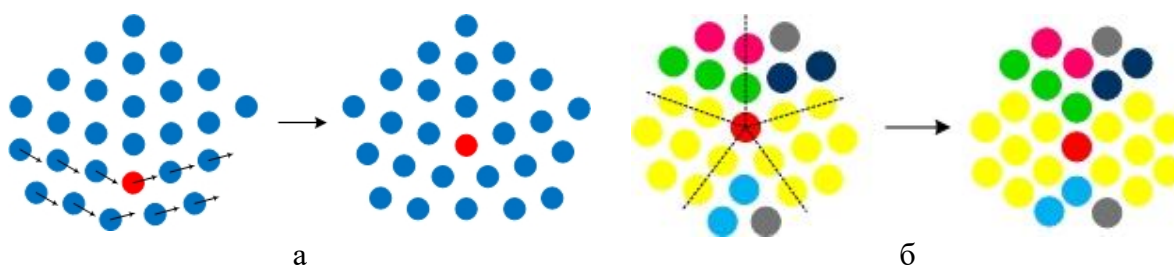


Рис. 1. Изменение структуры нанокластеров путем: а) «миграции оси» 5-го порядка (красный атом) за счет за счет скольжения плоскостей $\{111\}$, б) «миграция двойной плоскости» – вращение вокруг оси 5-го порядка (красный атом) двух противоположных секторов (желтые атомы) и скольжения других (зеленый и синий атомы) [6].

Характер переключения между кристаллическими структурами зависит от размера частиц и их химического состава [6-9]. В наших предыдущих работах подробно исследовались политипные превращения ГЦК нанокластеров серебра диаметром до 2,0 нм, количество атомов в которых соответствовало ряду «магических» чисел [10]. Было показано, что нанокластеры, содержащие более 200 атомов, не претерпевают спонтанной реконфигурации внутреннего строения, т.е. остаются термически стабильными вплоть до температуры плавления. При меньшем числе атомов МНК, имеют место термически индуцированные изменения структуры кластера, протекающие по различным сценариям, приводящие, главным образом, к образованию Ih, Dh, ГПУ модификаций и различных гибридных морфологий.

Далее нами проводились сравнительные исследования изученного набора кластеров, исходная структура которых была изменена с ГЦК на аморфную [11-14]. Было показано, что начальное строение МНК оказывает значительное влияние на характер будущей термической эволюции. Для частиц с числом атомов $N < 100$ наблюдалась явная конкуренция между тремя возможными сценариями: сохранением аморфной структуры и формированием Ih или Dh конфигураций. При $N > 100$ атомов начальная

морфология уже не сохранялась, и имел место переход к I_h или D_h построению.

Таким образом, исходя из указанных выше результатов, основной задачей данного исследования являлось нахождение размерной границы, при которой нанокластеры серебра, обладающие начальной аморфной морфологией, самопроизвольно изменяют свое строение на ГЦК структуру, характерную для объемного материала.

2. Компьютерная модель

Компьютерное моделирование нанокластеров серебра проводилось методом молекулярной динамики с использованием модифицированного потенциала сильной связи TB-SMA [15]. Для определения температуры системы был использован скоростной алгоритм Верле [16] с шагом по времени 1 фс. Создание нанокластеров с исходной аморфной морфологией проходило в несколько этапов. Первичные частицы были получены путем вырезания из идеальной ГЦК решетки. Далее они были подвергнуты процедуре релаксации при 20 К и ступенчатому нагреву до полного разрушения дальнего порядка в них, а затем – резкому охлаждению до начальной температуры с целью «замораживания» разупорядоченной фазы. Дополнительно была произведена выборка для исключения остаточных зародышей кристаллической фазы в частицах. После формирования нанокластеры серебра подверглись повторной процедуре ступенчатого нагрева до температуры 1000 К с шагом 20 К (в области структурных переходов – 5 К). На каждом фиксированном этапе частицы выдерживались в течение 1 нс.

Моделирование проводилось с использованием компьютерной программы MDNTP, разработанной Dr. Ralf Meyer, University Duisburg Germany. Наличие структурных переходов определялось по калорическим кривым зависимости удельной (в расчете на один атом) потенциальной энергии нанокластеров от температуры и программы-визуализатора OVITO [17].

3. Результаты и обсуждения

Анализируя результаты проведенного моделирования (см. рис. 2), можно увидеть несколько основных тенденций. Первая связана с ожидаемым увеличением доли ГЦК/ГПУ структур с ростом размеров нанокластеров. Вторая – с параллельным уменьшением вероятности возникновения D_h конфигурации, а третья – представляет собой пик I_h морфологии для частиц с размерами около 3,8 нм. Рассмотрим их более подробно.

Начнем с МНК Ag , содержащего 791 атом (диаметром около 3,0 нм).

Здесь мы видим конкурирование между Ih и Dh структурами, что в целом подтверждает тенденцию, наблюдавшуюся ранее для частиц, содержащих от 100 до 200 атомов [11-14]. Однако здесь же впервые возникает смешанная ГЦК/ГПУ структура. Говоря о последней, нужно сказать, что для исследуемого ансамбля частиц сложно получить какую-либо структуру в «чистом» виде. Исследуемые нанокластеры представляют собой различного рода комбинации в форме двойникования (см. рис. 3 а) или слоистых структур (см. рис. 3 б), но в целом, они характеризуются преобладанием ГЦК фазы.

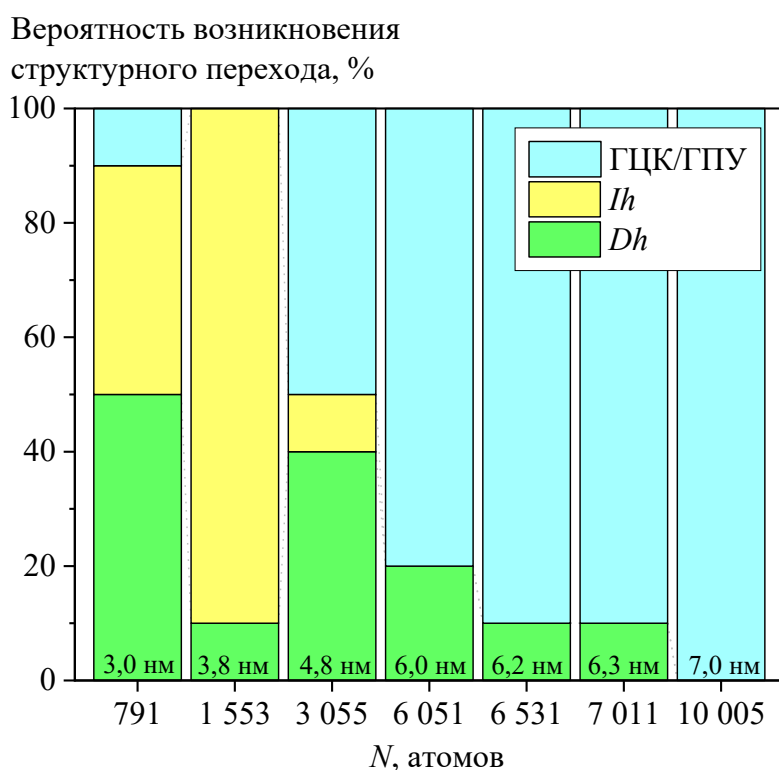


Рис. 2. Нормированная гистограмма вероятности возникновения структурного перехода для частиц Ag диаметрами от 3,0 до 7,0 нм.

При переходе к МНК, содержащему 1553 атома ($D \approx 3,8$ нм) наблюдается резкий скачок доли Ih конфигураций (см. рис. 2, 3 в). Такое поведение, на наш взгляд, можно объяснить влиянием «магического» числа. Так, рассматривая ряд «магических» чисел с габитусом икосаэдра в качестве критических можно выделить МНК, содержащие 561 атом. Таким образом, можно ожидать, что вероятность появления Ih конфигурации с ростом размеров кластеров будет снижаться. Однако такая тенденция характерна для частиц, обладающей некоторой регулярной структурой. Например, для МНК с $N = 923$ и 1415 для переключения между габитусом кубоктаэдра и икосаэдра необходимо осуществить термическое возбуждение ($T \approx 1000$ К) с последующим охлаждением [18]. Для

исследуемых нами частиц, изначально обладающих разупорядоченным квазисферическим строением достаточно энергии, сообщенной в ходе нагрева, для перехода к Ih модификации в интервале температур около 200-300 К.

Для следующего ансамбля частиц, состоящих из 3055 атомов ($D \approx 4,8$ нм) доля ГЦК/ГПУ структур составляет уже 50%, конкурируя с Dh конфигурацией. При этом Dh частицы относительно крупного размера ($D \approx 6,0$ нм) характеризуются достаточно «правильным» строением (см. рис. 3г) в то время как ГЦК/ГПУ структуры отличаются наличием вкраплений аморфной фазы (см. рис. 3 д).

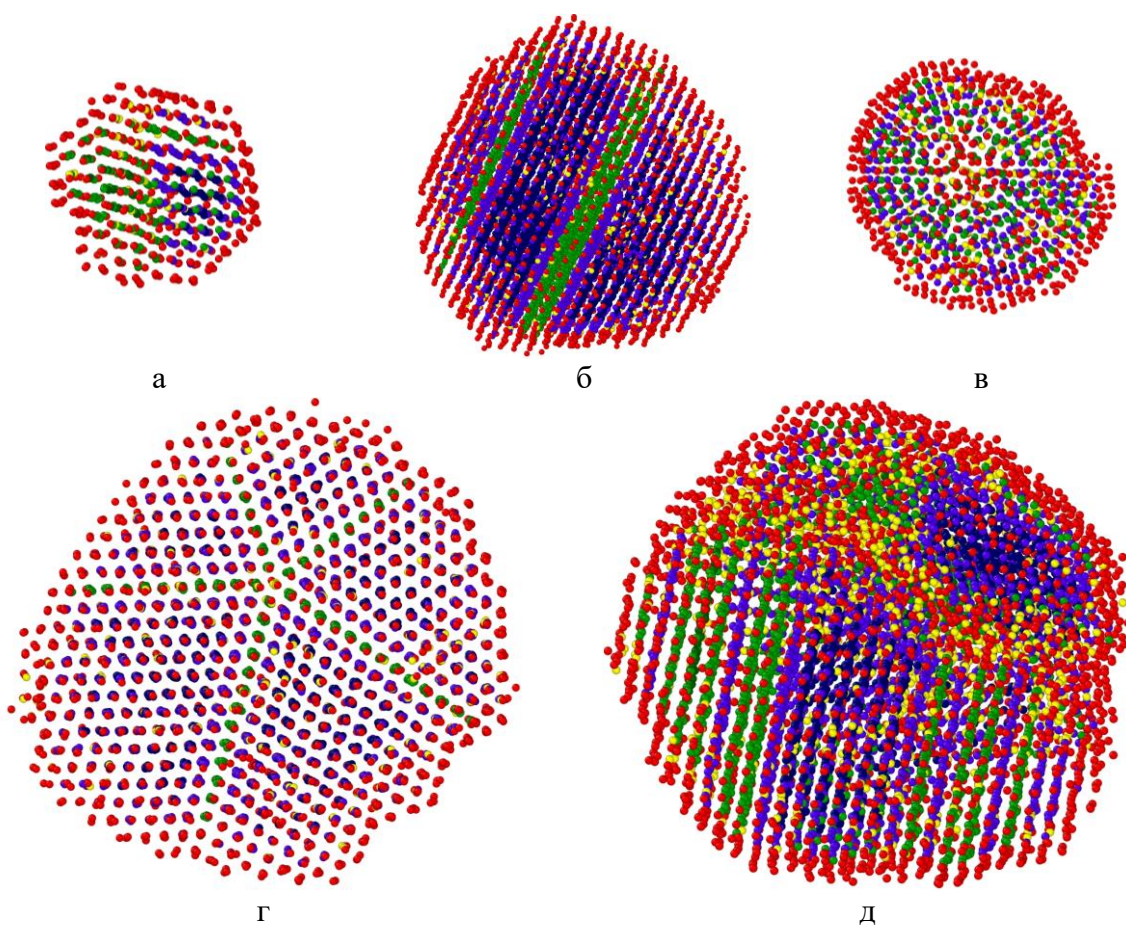


Рис. 3. Примеры кристаллических структур МНК Ag: а) смешенная ГЦК/ГПУ структура ($d \approx 3,0$ нм, $N = 791$ атом); б) слоистая ГЦК/ГПУ структура ($d \approx 6,3$ нм, $N = 7011$ атомов); в) Ih конфигурация ($d \approx 3,8$ нм, $N = 1553$ атома); г) и д) Dh и дефектная ГЦК/ГПУ конфигурации ($d \approx 6,3$ нм, $N = 7011$ атомов). Обозначения: синий цвет – атомы, окружение которых соответствует ГЦК строению; зеленый цвет – атомы, окружение которых соответствует ГПУ строению; желтый цвет – атомы, окружение которых соответствует аморфному строению; красный цвет – атомы с координационным числом < 12 .

При достижении нанокластерами размеров порядка 7,0 нм ($N = 10005$

атомов) происходит формирование ГЦК/ГПУ структуры в 100% случаев. Первые зародыши ГЦК фазы формируются в приповерхностном слое около $T=100$ К, постепенно увеличиваясь и проникая вглубь нанокластера до достижения некоторого критического значения, когда в интервале температур от 200 до 300 К происходит переход «аморфное» строение – «кристаллическое». При этом нанокластеры могут характеризоваться различной степенью дефектности, которая постепенно уменьшается в процессе дальнейшего нагрева до температур около 600 К.

Таким образом, в случае начальной аморфной морфологии можно выделить три группы нанокластеров серебра в зависимости от размера. Первая группа ($N < 100$ атомов) характеризуется частичным сохранением аморфной конфигурации, вторая – конкурированием Ih или Dh структур (до $D \approx 4,0$ нм), и третья – преобладанием смешанной ГЦК/ГПУ фазы, характерной для структуры объемного серебра, с полным переходом к ней при диаметре частиц около 7,0 нм.

4. Заключение

Нанокластеры обладают рядом уникальных физико-химических свойств, которые обеспечивают им широкий спектр применений в электронике, катализе, плазмонных приложениях, медицине и т.д. Управлять данными свойствами можно изменяя их характеристики, например, размеры или внутреннее строение. При этом хорошо известно, что с уменьшением диаметра нанокластеров вклад поверхности в полную энергию увеличивается, что приводит к изменению формы частиц. Так в случае нанокластеров ГЦК металлов это может привести к возникновению кубоктаэдрической, икосаэдрической или декаэдрической модификации. При этом из-за флуктуации поверхностных атомов, колебания которых менее ограничены ближайшими соседями в сравнении с внутренними атомами, с течением времени может произойти релаксация нанокластеров и изменение их геометрии. Другим фактором, оказывающим влияние на структуру, являются различного рода термические воздействия, которые в процессе эксплуатации наночастиц могут оказать критическое влияние на их свойства.

Основной целью данного исследования являлся поиск границ термической устойчивости структурных модификаций нанокластеров серебра различного размера, в частности, нахождение размерной границы, при которой нанокластеры серебра, обладающие начальной аморфной морфологией, изменяют свое строение на ГЦК структуру, характерную для объемного материала. Для этого методом молекулярной динамики с использованием модифицированного потенциала сильной связи TB-SMA исследовались нанокластеры Ag , обладающие начальным аморфным

строением, диаметрами от 3,0 до 7,0 нм. Полученные данные сравнивались с результатами предыдущих исследований для серебряных наночастиц размерами до 2,0 нм с начальными ГЦК и аморфными строениями. Было показано, что для случая начальной аморфной морфологии в зависимости от термически индуцированного структурного перехода нанокластеры Ag можно разбить на три группы. В качестве размерной границы, при которой исследуемые нанокластеры изменяют начальное аморфное строение на структуру свойственную объемному серебру, установлен диаметр частиц около 7,0 нм.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 19-48-190002). Гафнер Ю.Я. также благодарит НОЦ «Енисейская Сибирь» за помощь в проведении исследований.

Библиографический список

1. **Baletto, F.** Structural properties of nanoclusters: energetic, thermodynamic, and kinetic effects / F. Baletto, R. Ferrando // *Reviews of Modern Physics*. – 2005. – V. 77. – I. 1. – P. 371-423. DOI: 10.1103/RevModPhys.77.371.
2. **Settem, M.** On the effect of relative stabilities of FCC-like and HCP-like atoms on structure of FCC silver nanoclusters / M. Settem, M. Islam, A.K. Kanjarla // *Computational Materials Science*. – 2018. – V. 148. – P. 266-271. DOI: 10.1016/j.commatsci.2018.02.051.
3. **Ino, S.** Stability of multiply-twinned particles / S. Ino // *Journal of the Physical Society of Japan*. – 1969. – V. 27. – I. 4. – P. 941-953. DOI: 10.1143/JPSJ.27.941.
4. **Marks, L.D.** Surface structure and energetics of multiply twinned particles / L.D. Marks // *Philosophical Magazine A*. – 1984. – V. 49. – I. 1. – P. 81-93. DOI: 10.1080/01418618408233431.
5. **Baletto, F.** Structural properties of sub-nanometer metallic clusters / *Journal of Physics: Condensed Matter* // F. Baletto. – 2019. – V. 31. – I. 11. – Art. №113001. – 42 p. DOI: 10.1088/1361-648X/aaf989.
6. **Pavan, L.** Metallic nanoparticles meet metadynamics / L. Pavan, K. Rossi, F. Baletto // *The Journal of Chemical Physics*. – 2015. – V. 143. – Art. № 184304. – 4 p. DOI: 10.1063/1.4935272.
7. **Gould, A.** Influence of composition and chemical arrangement on the kinetic stability of 147-atom Au–Ag bimetallic nanoclusters / A. Gould, A.J. Logsdail, C.R.A. Catlow // *The Journal of Physical Chemistry C*. – 2015. – V. 119. – I. 41. – P. 23685-23697. DOI: 10.1021/acs.jpcc.5b03577.
8. **Gould, A.L.** Controlling structural transitions in AuAg nanoparticles through precise compositional design / A.L. Gould, K. Rossi, C.R.A. Catlow, F. Baletto, A.J. Logsdail // *The Journal of Physical Chemistry Letters*. – 2016. – V. 7. – I. 21. – P. 4414-4419. DOI: 10.1021/acs.jpcclett.6b02181.
9. **Rossi, K.** The effect of size and composition on structural transitions in monometallic nanoparticles / K. Rossi, L. Pavan, Y.Y. Soon, F. Baletto // *The European Physical Journal B*. – 2018. – V. 91. – I. 2. – Art. № 33. – 8 p. DOI: 10.1140/epjb/e2017-80281-6.
10. **Gafner, Y.** On measuring the structure stability for small silver clusters to use them in plasmonics / Y. Gafner, S. Gafner, D. Bashkova // *Journal of Nanoparticle Research*. – 2019. – V. 21. – Art. № 243. – 15 p. DOI: 10.1007/s11051-019-4691-2.
11. **Рыжкова, Д.А.** Исследование термической стабильности малых нанокластеров серебра с начальной аморфной субструктурой / Д. А. Рыжкова, С. Л. Гафнер, Ю. Я. Гафнер // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. – 2021. – Т. 18. – № 1. – С. 17-23. DOI: 10.25712/ASTU.1811-1416.2021.01.002.
12. **Рыжкова, Д.А.** Термическая стабильность строения малых ГЦК-магических размеров кластеров серебра с начальной аморфной конфигурацией / Д. А. Рыжкова, Ю. Я. Гафнер // *Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов*. – 2020. – Вып. 12. – С. 486-492. DOI: 10.26456/pcascnn/2020.12.486.
13. **Рыжкова, Д.А.** Устойчивость внутреннего строения нанокластеров Ag₅₅ и Ag₁₄₇ при вариации начальной морфологии / Д. А. Рыжкова, С. Л. Гафнер, Ю. Я. Гафнер // *Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов*. – 2021. – Вып. 13. – С. 604-611. DOI:

10.26456/pcascnn/2021.13.604.

14. **Рыжкова, Д.А.** Роль «магических» ГПУ чисел в устойчивости внутреннего строения нанокластеров Ag_{89} и Ag_{153} / Д. А. Рыжкова, С. Л. Гафнер, Ю. Я. Гафнер // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2021. – Вып. 13. – С. 593-603. DOI: 10.26456/pcascnn/2021.13.593.

15. **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.

16. **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. DOI: 10.1103/PhysRev.159.98.

17. **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. – № 1. – Art. № 015012. – 7 p. DOI: 10.1088/0965-0393/18/1/015012.

18. **Kuzmin, V.I.** Structure of silver clusters with magic numbers of atoms by data of molecular dynamics / V.I. Kuzmin, D.L. Tytik, D.K. Belashchenko, A.N. Sirenko // *Colloid Journal*. – 2008. – V. 70. – I. 3. – P. 284-296. DOI: 10.1134/S1061933X08030058.

Reference

1. Baletto F., Ferrando R. Structural properties of nanoclusters: energetic, thermodynamic, and kinetic effects, *Reviews of Modern Physics*, 2005, vol. 77, issue 1, pp. 371-423. DOI: 10.1103/RevModPhys.77.371.

2. Settem M., Islam M., Kanjarla A.K. On the effect of relative stabilities of FCC-like and HCP-like atoms on structure of FCC silver nanoclusters, *Computational Materials Science*, 2018, vol. 148, pp. 266-271. DOI: 10.1016/j.commatsci.2018.02.051.

3. Ino S. Stability of multiply-twinned particles, *Journal of the Physical Society of Japan*, 1969, vol. 27, issue 4, pp. 941-953. DOI: 10.1143/JPSJ.27.941.

4. Marks L.D. Surface structure and energetics of multiply twinned particles, *Philosophical Magazine A*, 1984, vol. 49, issue 1, pp. 81-93. DOI: 10.1080/01418618408233431.

5. Baletto F. Structural properties of sub-nanometer metallic clusters, *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2019, vol. 31, no. 11, art. no. 113001. 42 p. DOI: 10.1088/1361-648X/aaf989.

6. Pavan L., Rossi K., Baletto F. Metallic nanoparticles meet metadynamics, *The Journal of Chemical Physics*, 2015, vol. 143, art. no. 184304, 4 p. DOI: 10.1063/1.4935272.

7. Gould A., Logsdail A.J., Catlow C.R.A. Influence of composition and chemical arrangement on the kinetic stability of 147-atom Au–Ag bimetallic nanoclusters, *The Journal of Physical Chemistry C*, 2015, vol. 119, issue 41, pp. 23685-23697. DOI: 10.1021/acs.jpcc.5b03577.

8. Gould A.L., Rossi K., Catlow C.R.A., Baletto F., Logsdail A.J. Controlling structural transitions in AuAg nanoparticles through precise compositional design, *The Journal of Physical Chemistry Letters*, 2016, vol. 7, issue 21, pp. 4414-4419. DOI: 10.1021/acs.jpcclett.6b02181.

9. Rossi K., Pavan L., Soon Y.Y., Baletto F. The effect of size and composition on structural transitions in monometallic nanoparticles, *The European Physical Journal B*, 2018, vol. 91, issue 2, art. no. 33, 8 p. DOI: 10.1140/epjb/e2017-80281-6.

10. Gafner Y., Gafner S., Bashkova D. On measuring the structure stability for small silver clusters to use them in plasmonics, *Journal of Nanoparticle Research*, 2019, vol. 21, art. № 243, 15 p. DOI: 10.1007/s11051-019-4691-2.

11. Ryzhkova D.A., Gafner Yu.Ya., Gafner S. L. Issledovanie termicheskoy stabil'nosti malyh nanoklasterov serebra s nachal'noj amorfnoy substrukuroj [Thermal stability of the small size silver clusters structure with initial amorphous morphology], *Fundamental'nye problem sovremennogo materialovedenia [Basic Problems of Material Science]*, 2021, vol. 18, no. 1, pp. 17-23. DOI: 10.25712/ASTU.1811-1416.2021.01.002. (In Russian).

12. Ryzhkova D.A., Gafner Yu.Ya. Termicheskaya stabil'nost' stroeniya malyh GCK-magicheskikh razmerov klasterov serebra s nachal'noj amorfnoy konfiguraciej [Thermal stability of small FCC-magic size silver clusters structure with the initial amorphous configuration], *Fiziko-himicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov [Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials]*, 2020, issue 12, pp. 486-492. DOI: 10.26456/pcascnn/2020.12.486. (In Russian).

13. Ryzhkova D.A., Gafner S.L., Gafner Yu.Ya. Ustojchivost' vnutrennego stroeniya nanoklasterov Ag_{55} i Ag_{147} pri variacii nachal'noj morfologii [Structural stability of Ag_{55} and Ag_{147} nanoclusters with a change in the initial morphology], *Fiziko-himicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov [Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials]*, 2021, issue 13, pp. 604-611. DOI: 10.26456/pcascnn/2021.13.604. (In Russian).

14. Ryzhkova D.A., Gafner S.L., Gafner Yu.Ya. Rol' «magicheskikh» GPU chisel v ustojchivosti vnutrennego stroeniya nanoklasterov Ag_{89} i Ag_{153} [Role of «magic» HCP numbers in stability of the internal structure of Ag_{89} and Ag_{153}], *Fiziko-himicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov [Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials]*, 2021, issue 13, pp. 593-603. DOI: 10.26456/pcascnn/2021.13.593. (In Russian).
15. 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.
16. Verlet L. Computer «experiments» on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules, *Physical Review*, 1967, vol. 159, issue 1, pp. 98-103. DOI: 10.1103/PhysRev.159.98.
17. Stukowski A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO – the open visualization tool, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2010, vol. 18, no. 1, art. no. 015012, 7 p. DOI: 10.1088/0965-0393/18/1/015012.
18. Kuzmin V.I., Tytik D.L., Belashchenko D.K., Sirenko A.N. Structure of silver clusters with magic numbers of atoms by data of molecular dynamics, *Colloid Journal*, 2008, vol. 70, issue 3, pp. 284-296. DOI: 10.1134/S1061933X08030058.

Original paper

**MOLECULAR DYNAMICS STUDY OF THE SIZE LIMIT OF THE TRANSITION OF SILVER
NANOCLUSTERS WITH AN INITIAL AMORPHOUS SUBSTRUCTURE INTO FCC PHASE**

D.A. Ryzhkova, S.L. Gafner, Yu.Ya. Gafner, A.A. Cherepovskaya
N.F. Katanov Khakas State University, Abakan, Russia

DOI: 10.26456/pcascnn/2022.14.490

Abstract: Silver nanoclusters with diameter of 3,0 to 7,0 nm were studied by the molecular dynamics method using the tight binding potential TB-SMA (second moment approximation of tight-binding potential). A search was made for the stability limits of structural modifications of these nanoclusters for determination of the size limit of the thermally induced structural transition from the initial amorphous morphology to the fcc phase. The new data were compared with the results of previous studies for *Ag* nanoparticles up to 2,0 nm in size with initial fcc and amorphous structures. It is shown that the studied nanoclusters can be conditionally divided into three categories. The first one ($N < 100$ atoms) is characterized by partial preservation of the original morphology. For the second one ($d < 4,0$ nm), there is competition between the icosahedral and decahedral structures. And for the thirds ($d > 4,0$ nm), the mixed fcc/hcp phase predominates. In this case, the size limit of the transition from the initial amorphous morphology to the structure characteristic for the bulk matter is a diameter of about 7,0 nm.

Keywords: nanoclusters, silver, computer simulation, structure, tight binding, phase transitions, structural stability.

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

Гафнер Светлана Леонидовна – д.ф.-м.н., доцент, профессор кафедры математики, физики и информационных технологий ФГБОУ ВО «Хакасский государственный университет им. Н.Ф. Катанова»

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

Череповская Арина Александровна, студентка 5 курса направления подготовки «Математика-Физика» ФГБОУ ВО «Хакасский государственный университет им. Н.Ф. Катанова»

Daria A. Ryzhkova – postgraduate student, Assistant of the Department of Mathematics, Physics and Information Technology, KatanovKhakas State University

Svetlana L. Gafner – Dr. Sc., Docent, Professor of the Department of Mathematics, Physics and Information Technology, N.F. Katanov Khakas State University

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

Arina A. Cherepovskaya, student of the Department of Mathematics, Physics and Information Technology, N.F. Katanov Khakas State University

Поступила в редакцию/received: 05.09.2022; после рецензирования/revised: 27.09.2022; принята/accepted 01.10.2022.