УДК 538.911 *Оригинальная статья*

Начальная стадия процесса коалесценции на примере наночастиц Ag

А.А. Череповская, Д.А. Рыжкова
ФГБОУ ВО «Хакасский государственный университет имени Н.Ф. Катанова»
655017, Россия, Республика Хакасия, Абакан, просп. Ленина, 90
arina.cherepovskaya@mail.ru

DOI: 10.26456/pcascnn/2025.17.506

Аннотация: Понимание процессов формирования и эволюции массивов металлических наночастиц является очень важной задачей, поскольку они все чаще используются в различных технических устройствах. Размер и форма наночастиц, а также расстояние между ними имеют большое влияние на их свойства. Коалесценция является одним из основных процессов, которые отвечают за изменение данных геометрических параметров массива наночастиц. В случае металлических наночастиц было обнаружено, что их слияние зависит от взаимной кристаллической ориентации, в результате чего реализуются различные механизмы объединения. Влияние кристаллической ориентации наночастиц на механизм коалесценции было подтверждено результатами молекулярно-динамических экспериментов. Изучался процесс коалесценции наночастиц серебра различного диаметра, расстояние между частицами изменялось от 0,5 до 1,5 нм, время моделирования соответствовало 200 пс. Реальный внешний вид и структура изучаемых наночастиц определялись при помощи визуализаторов OVITO и XMakemol. Анализ результатов показывает, что в случае наночастиц серебра коалесценция в большинстве случаев протекает по механизму роста ориентированным прикреплением.
Ключевые слова: серебро, наночастицы, структура, коалесценция, компьютерное моделирование, сильная связь.

Череповская Арина Александровна – магистрант направления подготовки «Современные цифровые технологии в образовании», ФГБОУ ВО «Хакасский государственный университет им. Н.Ф. Катанова»
Рыжкова Дарья Антоновна – старший преподаватель кафедры математики, физики и информационных технологий, ФГБОУ ВО «Хакасский государственный университет им. Н.Ф. Катанова»

Original paper

Initial stage of the coalescence process exemplifying on Ag nanoparticles

A.A. Cherepovskaya, D.A. Ryzhkova
Khakass State University, Abakan, Russia

DOI: 10.26456/pcascnn/2025.17.506

Abstract: Understanding the formation and evolution of metal nanoparticle arrays is a very important task, as they are increasingly used in various technical devices. The size and shape of nanoparticles, as well as the distance between them, have a great influence on their properties. Coalescence is one of the main processes that are responsible for changing these geometric parameters of the nanoparticle array. In the case of metal nanoparticles, it was found that their aggregation depends on their mutual crystalline orientation, resulting in various mechanisms of association. The influence of the crystalline orientation of nanoparticles on the coalescence mechanism was confirmed by molecular dynamics simulations. The coalescence of silver nanoparticles of various diameters was studied; the distance between the particles varied from 0,5 to 1,5 nm, and the simulation time corresponded to 200 ps. The actual appearance and structure of the studied nanoparticles were determined using OVITO and XMakemol visualizers. Analysis of the results showed that, in the case of silver nanoparticles, coalescence in most cases occurs by the oriented attachment growth mechanism.
Keywords: silver, nanoparticles, structure, coalescence, computer simulations, tight-binding.

Arina A. Cherepovskaya – Master of Science of specialty «Modern digital technologies in education», Khakass State University ORCID: 0009-0000-3482-2051
Daria A. Ryzhkova – Senior Lecturer, Department of Mathematics, Physics and Information Technology, Khakass State University ORCID: 0000-0002-1986-5165

Поступила в редакцию/received: 01.06.2025; после рецензирования/revised: 27.06.2025; принята/accepted: 28.06.2025.

1. Введение

Коалесценция металлических наночастиц (НЧ) является одним из методов изготовления микро- и наноразмерных электрических устройств. Кристаллические дефекты, такие как дефекты упаковки и границы зерен, сильно влияют на электрические свойства этих коалесцированных структур. Поэтому необходимо понимание механизма коалесценции в металлических наноструктурах, которые отличаются от процессов спекания НЧ [1]. Коалесценция является ключом к применению НЧ в электрических устройствах с точки зрения их стабильности и надежности. Ниже температуры плавления поверхностная диффузия, как ожидается, будет доминирующим механизмом переноса массы для коалесценции НЧ и, таким образом, именно поверхностные процессы будут контролировать коалесценцию [2].

В последние годы различными научными группами продемонстрированы результаты исследований процесса коалесценции массивов металлических НЧ как на твердотельной подложке под действием электронного луча, так и методами компьютерного моделирования [3-8]. Стоит отметить, что в данных работах процесс объединения НЧ объясняется различными механизмами. Например, в работе [9] показано объединение НЧ Au, которое достигается за счёт энергетического воздействия потока электронов, малого расстояния между частицами, а также наличием на поверхности подложки атомарного слоя золота, являющегося катализатором «прыжкообразной коалесценции». В работе [10] показано, что слияние НЧ обусловлено перемещением атомов от частицы к частице, возникновением атомных цепочек с последующим образованием «перешейка» для материального обмена. В то же время в работе [11] привели объяснение, что слияние НЧ может протекать за счёт образования не материальных, а энергетических связей, возникающих из-за образования плазмонов, индуцированных потоком электронов (плазмонное притяжение).

Таким образом, нет однозначного описания работы механизма коалесценции металлических НЧ на твердой поверхности. Кроме того, важно понимать, что коалесценция частиц зависит от свойств материала НЧ, чему не уделяется внимания в приведённых работах. Целью нашей работы стало изучение поведения массивов НЧ Ag, в которых имеет место процесс коалесценции.

2. Компьютерная модель

Для имитации процесса коалесценции был использован метод молекулярной динамики (МД), позволяющий на атомном уровне достаточно подробно рассмотреть возможные механизмы такого

объединения. Для описания межатомного взаимодействия был применен модифицированный потенциал сильной связи TB-SMA [12]. В качестве исходных объектов использовались наборы НЧ Ag различного диаметра и находящиеся на разных расстояниях R друг от друга (R = 0,5-1,5 нм). Параметры моделирования были подобраны так, чтобы максимально точно имитировать результаты электронно-микроскопических исследований. Для моделирования процессов термического воздействия была использована компьютерная программа MDNTP, разработанная Dr. Ralf Meyer, University Duisburg Germany. Температура была определена с использованием средней кинетической энергии атомов, рассчитанной на основе скоростного алгоритма Верле с шагом по времени h = 1 фс. Структурные переходы были идентифицированы с помощью визуализаторов XMakemol [13] и OVITO [14]. Все кластеры при температуре T = 100 К подвергались обязательной процедуре первичной термической релаксации для оптимизации их внутренней структуры и формы.

3. Результаты и обсуждение

На первом этапе моделировалась ситуация нахождения НЧ на не нагретой подложке и без воздействия потока высокоэнергетических электронов, характерных для работы трансмиссионной электронной микроскопии (ТЭМ). Таким образом, модельная система находилась при комнатной температуре T = 300 К в состоянии примерного термодинамического равновесия (канонический NPT ансамбль). Для более точного определения всех возможных атомных перемещений под действием температурного фактора использовался временной шаг в 1,0 фс, а весь диапазон моделирования ограничивался t = 200 пс.

В качестве наиболее характерного и наглядного примера из всего набора модельных НЧ Ag приведем данные для НЧ Ag диаметром D = 6,0 нм и D = 3,0 нм с исходным идеальным ГЦК строением. Из данных моделирования был сделан вывод, что объединение данных НЧ происходит по механизму роста ориентированным прикреплением. То есть, до времени примерно t = 100 пс кластеры плавно сближаются друг с другом (начальное расстояние между ними составляло 1,5 нм), а затем происходит очень быстрое их слияние в течение буквально нескольких пикосекунд.

При этом было видно, что малый кластер серебра фактически встраивается в атомные плоскости большого Ag кластера. То есть для того, чтобы коалесценция НЧ Ag происходила по механизму роста ориентированным прикреплением [10, 15], необходимо согласование кристаллографических плоскостей обоих НЧ, что может быть, в частности,

достигнуто небольшим вращением одного из кластеров, замеченным в [16]. Отметим, что при выбранной температуре ($T = 300$ К) диффузионные процессы являются достаточно подавленными и времени $t = 200$ пс оказывается недостаточным для объединения исходных НЧ Ag в единый кластер.

Далее попробуем учесть воздействие потока высокоэнергетических электронов, возникающего при работе ТЭМ. В действительности при бомбардировке НЧ такими электронами происходит локальное выделение энергии, которое аналогично подводу к НЧ энергии термического характера kT. Поэтому для учета этого воздействия в первом приближении будет достаточно просто увеличить температуру модельной системы. Исходя из этого предположения было проанализировано поведение модельной системы при $T = 500$; 600; 800 и 900 К и было найдено, что только в случае высоких температур наблюдалась коалесценция НЧ Ag через механизм, условно называемый «перешеек» (neck). При $T = 500$ К такой механизм объединения НЧ Ag еще не фиксировался (см. рис.1).

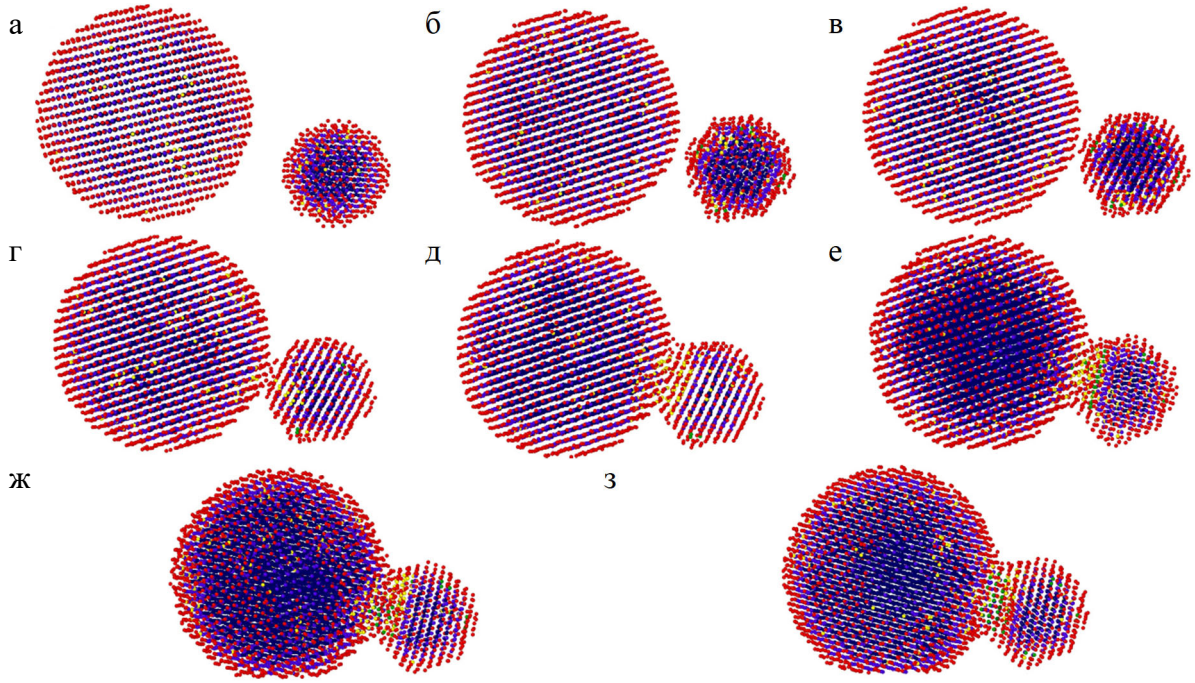


Рис. 1. Мгновенные фотографии процесса слияния НЧ Ag диаметром 6,0 нм и 3,0 нм через механизм роста ориентированным прикреплением при $T = 500$ К, МД моделирование, а – $t = 1$ пс, б – $t = 90$ пс, в – $t = 94$ пс, г – $t = 96$ пс, д – $t = 100$ пс, е – $t = 125$ пс, ж – $t = 170$ пс, з – $t = 200$ пс. Различными цветами показаны атомы, окружение которых соответствует определенному строению: синий – ГЦК; зеленый – ГПУ; желтый – аморфному; красный – атомы с координационным числом <12.

Однако с ростом температуры данный механизм становился все более отчетливей и при $T = 900$ К он уже наблюдался в полном объеме (см. рис. 2). Экспериментальная работа [10] подтверждает возможность

образования такого перешейка при объединении НЧ *Ag* диаметрами $D = 5$ нм и $D = 11$ нм уже при температуре прогрева подложки до 200°C и дозе облучения электронами 14063 $e \cdot Å^{-2} \cdot c^{-1}$ (e – заряд электрона), что согласуется и с нашими оценками.

Проведенное нами компьютерное моделирование по коалесценции НЧ *Ag* также показало влияние начального расположения атомных плоскостей на процессы объединения НЧ. Так как используемый нами потенциал межатомного взаимодействия [12] тестировался по характеристикам объемного серебра, находящегося в кристаллическом состоянии, то имитация процесса испарения НЧ *Ag* оказалась технически невозможной, можно было только фиксировать изменения, происходящие в кристаллическом или аморфном (расплав) состояниях. Таким образом, мы не могли полностью смоделировать ситуацию реального эксперимента, описанную в [17]. Тем не менее полученных данных по коалесценции НЧ *Ag* в равновесных условиях (*NPT* канонический ансамбль), подразумевающих неизменное количество атомов в модельных кластерах и их объем, оказалось достаточно для того чтобы сделать некоторые выводы.

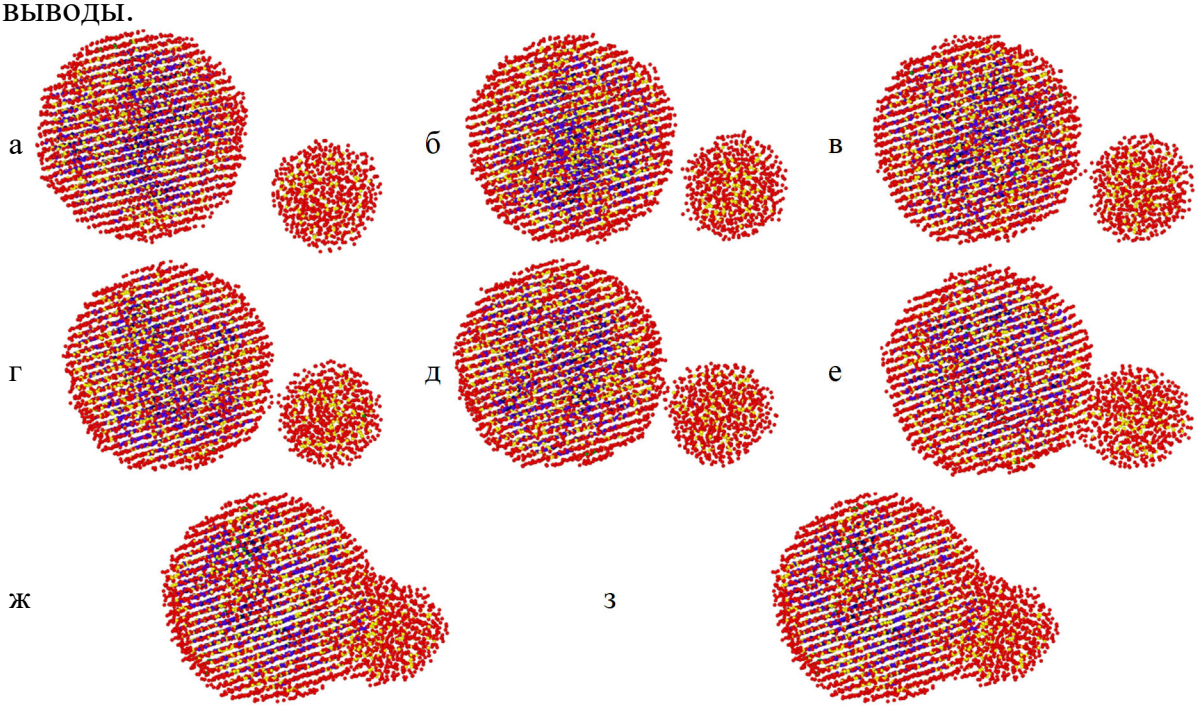
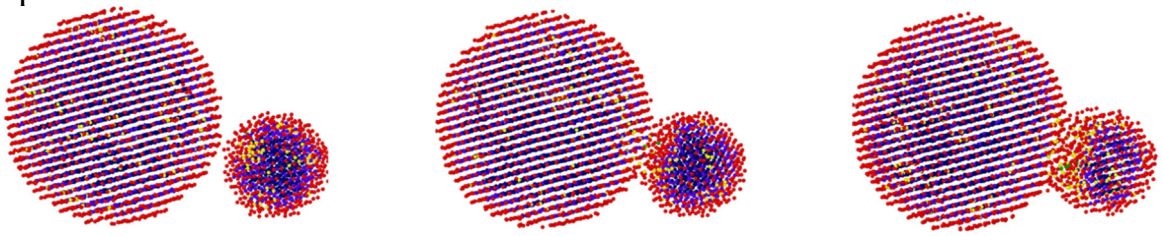


Рис. 2. Мгновенные фотографии процесса слияния НЧ *Ag* диаметром 6,0 нм и 3,0 нм через «перешеек» при $T = 900$ К, МД моделирование, а – $t = 1$ пс, б – $t = 75$ пс, в – $t = 76$ пс, г – $t = 78$ пс, д – $t = 80$ пс, е – $t = 85$ пс, ж – $t = 100$ пс, з – $t = 200$ пс. Цветовое обозначение соответствует рис. 1.

Рассмотрим рис. 1 более подробно. Здесь показана ситуация объединения двух НЧ *Ag* при температуре $T = 500$ К с небольшим углом рассогласования атомных плоскостей близким к 0°. Видно, что аналогично

НЧ *Au* [17] перед объединением малый *Ag* нанокластер немного вращается в пространстве, меняя ориентацию своих атомных плоскостей и только после этого начинается процесс коалесценции. Однако, когда порядок расположения атомных плоскостей в малой НЧ *Ag* начинает нарушаться, после соединения НЧ *Ag* происходит согласование направлений расположений атомов как в большой, так и в малой НЧ *Ag* (см. рис. 3) в полном соответствии с теорией роста кристаллов Косселя-Странского.



а б в

Рис. 3. Мгновенные фотографии процесса слияния НЧ *Ag* диаметром 6,0 нм и 3,0 нм через «механизм роста ориентированным прикреплением» при $T = 600$ К, МД моделирование, а – $t = 90$ пс, б – $t = 95$ пс, в – $t = 100$ пс. Цветовое обозначение соответствует рис. 1.

Существенным моментом в коалесценции НЧ *Ag* было практически полное отсутствие объединения НЧ *Ag* по механизму «перешеек». Такой способ слияния НЧ *Ag* наблюдался нами только при очень высокой температуре. Еще раз отметим, что все полученные при МД моделировании результаты были получены при условии термодинамического равновесия, не подразумевающего процесс испарения.

4. Заключение

Таким образом, в представленной работе были рассмотрены механизмы объединения НЧ *Ag* при процессах коалесценции в зависимости от взаимной ориентации атомных плоскостей. Результаты проведенного компьютерного моделирования показали, что объединение НЧ *Ag* происходит в основном через механизм роста ориентированным прикреплением. Полученные данные схожи с данными, полученными в [17] для НЧ *Au* , но только при низком уровне термической энергии.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 25-22-20029, https://rscf.ru/project/25-22-20029/) при паритетной финансовой поддержке Правительства Республики Хакасия.

Библиографический список:

1. **Samsonov, V.M.** When mechanisms of coalescence and sintering at the nanoscale fundamentally differ:

Molecular dynamics study / V.M. Samsonov, I.V. Talyzin, V.V. Puytov et. al. // Journal of Chemical Physics. – 2022. – V. 156. – I. 21. – Art. no. 214302. – 52 p. DOI: 10.1063/5.0075748.
2. **Ingham, B**. How nanoparticles coalesce: an in situ study of Au nanoparticle aggregation and grain growth / B. Ingham, T.H. Lim, C.J. Dotzler et.al.// Chemistry of Materials. – 2011. – V.23. – I.14. – P. 3312-3317. DOI: 10.1021/cm200354d.
3. **Колосов, А.Ю.** Моделирование процесса коалесценции наночастиц золота методом Монте-Карло / А.Ю. Колосов, Н.Ю. Сдобняков, П.В. Комаров и др. // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. − 2012. − Вып. 4. − С. 129-142.
4. **Колосов, А.Ю.** Моделирование процесса коалесценции наночастиц золота методом Монте-Карло / А.Ю. Колосов, Н.Ю. Сдобняков, П.В. Комаров и др. // Нанотехника. – 2013. – № 2 (34). – С. 65-71.
5. **Колосов, А.Ю.** Об оценке двугранного угла между наночастицами металлов в процессе коалесценции / А.Ю. Колосов, Д.Н. Соколов, Н.Ю. Сдобняков и др. // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2016. – Вып. 8. – С. 172-179. DOI: 10.26456/pcascnn/2016.8.172.
6. **Колосов, А.Ю.** О закономерностях формирования моно- и биметаллических наночастиц в процессе коалесценции / А.Ю. Колосов, В.С. Мясниченко, С.С. Богданов и др. // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2018. – Вып. 10. – С. 359-367. DOI: 10.26456/pcascnn/2018.10.359.
7. **Сдобняков, Н.Ю.** Моделирование процессов коалесценции и спекания в моно- и биметаллических наносистемах / Н.Ю. Сдобняков, А.Ю. Колосов, С.С. Богданов. – Тверь: Издательство Тверского государственного университета, 2021. – 168 с. DOI: 10.26456/skb.2021.168.
8. **Kolosov, A.Yu.** Investigation into the structure and features of the coalescence of differently shaped metal nanoclusters / A.Yu. Kolosov, N.Yu. Sdobnyakov, V.S. Myasnichenko, D.N. Sokolov // Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. – 2016. – V. 10. – № 6. – P. 1292–1299. DOI: 10.1134/S102745101605075X.
9. **Wan, N.** A 'jump-to-coalescence' mechanism during nanoparticle growth revealed by in situ aberration-corrected transmission electron microscopy observations / N. Wan, L. Shuang-ying, X. Jun, M. Martini // Nanotechnology. – 2016. – V 27. – № 20.–Art. no. 205605. – 8 p. DOI: 10.1088/0957-4484/27/20/205605.
10. **Shengnan, Y.** In situ TEM observation of the atomic transport process during the coalescence of Au nanoparticles / Y. Shengnan, Y. Wenjuan, D. Ziliang et. al. // Nano Letters. – 2023. – V. 22. – I. 20. – P. 8115-8121. DOI: 10.1021/acs.nanolett.2c02491.
11. **Scholl, J.A.** Observation of quantum tunneling between two plasmonic nanoparticles / J. A. Scholl, A. García-Etxarri, A. L. Koh, J. A. Dionne // Nano Letters. – 2013. – V. 13. –I. 2. – P. 564-569. DOI: 10.1021/nl304078v.
12. **Rapallo, A.** Global optimization of bimetallic cluster structures. I. Size-mismatched Ag-Cu, Ag-Ni, and Au-Cu systems / A. Rapallo, G. Rossi, R. Ferrando et al. // The Journal of Chemical Physics. – 2005. – V. 122. – I. 19. – P. 194308-1-194308-13. DOI: 10.1063/1.1898223.
13. XMakemol - A program for visualizing atomic and molecular systems. – Режим доступа: www.url: https://manpages.ubuntu.com/manpages/bionic/man1/xmakemol.1.html.– 10.05.2025.
14. **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.
15. **Farshad, M.**Kinetics of nanoparticle nucleation, growth, coalescence and aggregation: A theoretical study of $(Ag)_n$ nanoparticle formation based on population balance modulated by ligand binding/ M. Farshad, J. Rasaiah // Chemical Physics. – 2023. – V. 573. – Art. no. 112002. – 8 p. DOI:10.1016/j.chemphys.2023.112002.
16. **Esparza, R.** Coalescence of Au nanoparticles: an in-situ Cs-corrected stem study at low voltage / R. Esparza, C. Gutiérrez-Wing, R. Pérez, M. José-Yacamán //ActaMicroscopica. – 2018. – V. 28. – № 2. – P. 48-57.
17. **Gafner, Yu.Ya.** Mechanisms of Au and Ag nanoparticle array evolution studied by *in-situ* TEM and molecular dynamics simulation / Yu.Ya. Gafner, D.G. Gromov, R.L. Volkov et. al.// Surface and Interface. – 2024. – V. 54 – Art. no. 105165. – 11 p. DOI: 10.1016/j.surfin.2024.105165.

References:

1. Samsonov V.M., Talyzin I.V., Puytov V.V. et al. When mechanisms of coalescence and sintering at the nanoscale fundamentally differ: Molecular dynamics study, The Journal of Chemical Physics, 2022, vol. 156, issue 21, art.no. 214302, 52 p. DOI: 10.1063/5.0075748.
2. Ingham B., Lim T.H., Dotzler C.J. et.al. How nanoparticles coalesce: an in situ study of Au nanoparticle aggregation and grain growth, *Chemistry of Materials*, 2011, vol. 23, issue 14, pp. 3312-3317. DOI: 10.1021/cm200354d.

3. Kolosov A.Yu., Sdobnyakov N.Yu., Komarov P.V. et al. Modelirovanie protsessa koalestsentsii nanochastits zolota metodom Monte-Karlo [Simulation of the coalescence process of gold nanoparticles by Monte-Carlo method], *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov [Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials],* 2012, issue 4, pp. 129-142. (In Russian).
4. Kolosov A.Yu., Sdobnyakov N.Yu., Komarov P.V. et al. Modelirovanie protsessa koalestsentsii nanochastits zolota metodom Monte-Karlo [Simulation of the coalescence process of gold nanoparticles by Monte-Carlo method], *Nanotekhnika [Nanotechnics],* 2013, vol. 2, issue 34, pp. 65-71. (In Russian).
5. Kolosov A.Yu., Sokolov D.N., Sdobnyakov N.Yu. et al. Ob otsenke dvugrannogo ugla mezhdu nanochastitsami metallov v protsesse koalestsentsii [About assessment of dihedral angle between metal nanoparticles in the coalescence process], *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov [Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials],* 2016, issue 8, pp. 172-179. DOI: 10.26456/pcascnn/2016.8.172. (In Russian).
6. Kolosov A.Yu., Myasnichenko V.S., Bogdanov S.S. et al. O zakonomernostyakh formirovaniya mono- i bimetallicheskikh nanochastits v protsesse koalestsentsii [On the regularities of formation of mono- and bimetallic nanoparticles in the coalescence process], *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov [Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials],* 2018, issue 10, pp. 359-367. DOI: 10.26456/pcascnn/2018.10.359. (In Russian).
7. Sdobnyakov N.Yu., Kolosov A.Yu., Bogdanov S.S. Modelirovanie protsessov koalestsentsii i spekaniya v mono- i bimetallicheskikh nanosistemakh: monografiya [Simulation of the processes of coalescence and sintering in mono- and bimetallic nanosystems: monograph]. Tver, Tver State University Publ., 2021, 168 p. DOI: 10.26456/skb.2021.168. (In Russian).
8. Kolosov A.Yu., Sdobnyakov N.Yu., Myasnichenko V.S., Sokolov D.N. Investigation into the structure and features of the coalescence of differently shaped metal nanoclusters, *Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques*, 2016, vol. 10, no. 6, pp. 1292-1299. DOI: 10.1134/S102745101605075X.
9. Wan N., Shuang-ying L., Jun X., Martini M. A 'jump-to-coalescence' mechanism during nanoparticle growth revealed by in situ aberration-corrected transmission electron microscopy observations, *Nanotechnology,* 2016, vol. 27, no. 20, art. no. 205605, 8 p. DOI: 10.1088/0957-4484/27/20/205605.
10. Shengnan Y., Wenjuan Y., Ziliang D. et.al. In situ tem observation of the atomic transport process during the coalescence of Au nanoparticles, *Nano Letters*, 2023, vol. 22, issue 20, pp. 8115-8121. DOI: 10.1021/acs.nanolett.2c02491.
11. Scholl J.A., García-Etxarri A., Koh A.L., Dionne J.A. Observation of quantum tunneling between two plasmonic nanoparticles, *Nano Letters,* 2013,vol. 13, issue 2, pp. 564-569. DOI: 10.1021/nl304078v.
12. Rapallo A., Rossi G., Ferrando R. et al. Global optimization of bimetallic cluster structures. I. Size-mismatched Ag-Cu, Ag-Ni, and Au-Cu systems, *The Journal of Chemical Physics*, 2005, vol. 122, issue 19, pp. 194308-1-194308-13. DOI: 10.1063/1.1898223.
13. XMakemol - A program for visualizing atomic and molecular systems. Available at: www.url: https://manpages.ubuntu.com/manpages/bionic/man1/xmakemol.1.html. (accessed 10.05.2025).
14. 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.
15. Esparza R., Gutiérrez-Wing C., Pérez R., José-Yacamán M. Coalescence of Au nanoparticles: an in-situ Cs-corrected stem study at low voltage, *ActaMicroscopica*, 2018,vol. 28, no. 2, pp. 48-57.
16. Farshad M., Rasaiah J. Kinetics of nanoparticle nucleation, growth, coalescence and aggregation: A theoretical study of $(Ag)_n$ nanoparticle formation based on population balance modulated by ligand binding, *Chemical Physics*, 2023, vol. 573, art. no. 112002, 8 p. DOI: 10.1016/j.chemphys.2023.112002.
17. Gafner Yu.Ya., Gromov D.G., Volkov R.L. et. al. Mechanisms of Au and Ag nanoparticle array evolution studied by in-situ TEM and molecular dynamics simulation, *Surface and Interface*, 2024, vol. 54, art. no. 105165, 11 p. DOI: 10.1016/j.surfin.2024.105165.