УДК 538.911 *Краткое сообщение*

Изучение механизмов коалесценции наночастиц на примере Pt и Pb

А.А. Череповская[1,2], Д.А. Рыжкова[1], Ю.Я. Гафнер[1], М.Д. Старостенков[2]
[1]ФГБОУ ВО «Хакасский государственный университет им. Н.Ф. Катанова»
655017, Россия, Республика Хакасия, Абакан, просп. Ленина, 90
[2]ФГБОУ ВО «Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова»
656038, Россия, Алтайский край, Барнаул, просп. Ленина, 46
arina.cherepovskaya@mail.ru

DOI: 10.26456/pcascnn/2026.18.515

Аннотация: В современных материаловедении и нанотехнологиях процессы коалесценции наночастиц играют ключевую роль, определяя стабильность и функциональные свойства наносистем. Коалесценция – слияние двух или более наночастиц в единую структуру – влияет на каталитическую активность, оптические и электрические характеристики материалов. В настоящей работе методом молекулярной динамики исследованы механизмы коалесценции на примере металлических наночастиц платины и свинца. Целью исследования являлось определение влияния взаимной кристаллографиической ориентации атомов, а также величины межатомного взаимодействия на процесс объединения. Изучалась коалесценция наночастиц *Pt* и *Pb* различного диаметра, расстояние между частицами изменялось от 1,5 до 0,5 нс, время моделирования соответствовало 500 пс. Реальный внешний вид и структура изучаемых наночастиц определялись при помощи визуализаторов OVITO и XMakemol. Анализ результатов показывает, что различные механизмы коалесценции определяются термически активированными процессами диффузии поверхностных атомов.

Ключевые слова: коалесценция, платина, свинец, наночастицы, структура, компьютерное моделирование, молекулярная динамика, сильная связь.

Череповская Арина Александровна – ассистент кафедры математики, физики и информационных технологий ФГБОУ ВО «Хакасский государственный университет им. Н.Ф. Катанова»; аспирант 1 года обучения ФГБОУ ВО «Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова»
Рыжкова Дарья Антоновна – к.ф.-м.н., доцент 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»
Старостенков Михаил Дмитриевич – д.ф.-м.н., профессор, главный научный сотрудник ФГБОУ ВО «Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова»

Short Communication

Study of nanoparticle coalescence mechanisms using Pt and Pb as an example

A.A. Cherepovskaya[1,2], D.A. Ryzhkova[1], Yu.Ya. Gafner[1], M.D. Starostenkov[2]
[1]Khakass State University, Abakan, Russia
[2]Polzunov Altai State Technical University, Barnaul, Russia

DOI: 10.26456/pcascnn/2026.18.515

Abstract: In modern materials science and nanotechnology, nanoparticle coalescence processes play a key role in determining the stability and functional properties of nanosystems. Coalescence, the fusion of two or more nanoparticles into a single structure, affects the catalytic activity, optical, and electrical characteristics of materials. In this work, mechanisms of coalescence (using the example of platinum and lead metal nanoparticles) are investigated by molecular dynamics method. The aim of the study was to determine the influence of the mutual crystallographic orientation of atoms, as well as the magnitude of the interatomic interaction on the unification process. Coalescence of *Pt* and *Pb* nanoparticles of different diameters was studied, the distance between the particles varied from 1,5 to

© А.А. Череповская, Д.А. Рыжкова, Ю.Я. Гафнер, М.Д. Старостенков, 2026

0,5 ns, and the simulation time corresponded to 500 ps. The actual appearance and structure of the studied nanoparticles were determined using OVITO and XMakemol visualizers. Analysis of the results shows that various coalescence mechanisms are determined by thermally activated diffusion of surface atoms.

Keywords: coalescence, platinum, lead, nanoparticles, structure, computer simulations, molecular dynamics, tight-binding.

Arina A. Cherepovskaya – assistant of the Department of Mathematics, Physics and Information Technology, Katanov Khakass State University; 1st year postgraduate student, Polzunov Altai State Technical University
Daria A. Ryzhkova – Ph. D., Docent of the Department of Mathematics, Physics and Information Technology, Katanov Khakass State University
Yury Ya. Gafner – Dr. Sc., Professor, Chief of the Department of Mathematics, Physics and Information Technology, Khakass State University
Mikhail D. Starostenkov – Dr. Sc., Professor, Chief Researcher, Altai State Technical University

Поступила в редакцию/received: 10.07.2026; после рецензирования/revised: 01.08.2026; принята/accepted: 03.08.2026.

1. Введение

В производстве современных технических устройств все более востребованными становятся металлические наночастицы (НЧ), поэтому актуальным является изучение процессов формирования их структуры и дальнейшей термической эволюции. Среди факторов, определяющих строение массивов НЧ, особое место занимает коалесценция – фундаментальный процесс, доминирующий при физических методиках синтеза. Детальное понимание механизмов такого объединения необходимо для прогнозирования и контроля термической и механической стабильности наночастиц, что напрямую влияет на их практическое применение [1, 2].

В настоящее время процесс коалесценции активно изучается различными научными группами с применением как экспериментальных методов исследования [3, 4], так и методов компьютерного моделирования [5-8]. Полученные результаты позволяют оценить степень объединения наночастиц (от полного слияния до частичного метастабильного соединения) [9], а также выявить влияние взаимной кристаллографической ориентации НЧ на кинетику и конечный результат процесса слияния [4]. Кроме того, в некоторых работах процесс объединения наночастиц объясняется различными механизмами – «механизм роста ориентированным прикреплением» [10] или через формирование «перешейка» [11]. Однако на сегодняшний день отсутствует единое описание начального механизма коалесценции НЧ. Кроме этого, следует учитывать, что процесс слияния существенно зависит от свойств материала наночастиц, тем не менее, данный аспект в настоящее время является недостаточно изученным.

В предыдущих работах [12, 13] нами были описаны механизмы коалесценции наночастиц Ag и Au. В настоящей работе для изучения

влияния величины атомного взаимодействия на процесс объединения НЧ нами были выбраны два металла – Pt и Pb, которые очень сильно различаются по температуре плавления, а, следовательно, и по величине межатомного взаимодействия.

2. Компьютерная модель

Исследование процессов коалесценции металлических наночастиц экспериментальными методами (например, при помощи трансмиссионной электронной микроскопии – ТЭМ) сопряжено с рядом объективных сложностей. К ним относятся отсутствие необходимой разрешающей способности (пространственной или временной) для захвата тонких механизмов объединения. Также для работы ТЭМ характерен поток высокоэнергетических электронов, которые могут вызывать в наночастице дополнительные диффузионные процессы. Поэтому, на наш взгляд, для определения таких тонких механизмов межатомного взаимодействия, возникающих на начальных стадиях коалесценции НЧ, будет более правильным использовать методы компьютерного моделирования.

Для исследования процесса коалесценции был использован метод молекулярной динамики (МД), который позволяет достаточно точно отследить временную эволюцию атомов. Для описания межатомного взаимодействия был применен модифицированный потенциал сильной связи TB-SMA [14]. Температура устанавливалась через среднюю кинетическую энергию атомов на основе скоростного алгоритма Верле с шагом по времени $h = 1$ фс. В качестве исходных объектов использовались наборы Pt и Pb наночастиц различного диаметра ($D =$ 6,0 нм и $D =$ 3,0 нм). Расстояние между частицами R изменялось от 1,5 нм до 0,5 нм. Также были рассмотрены три взаимных ориентации атомных плоскостей: в продолжении друг друга, параллельно/перпендикулярно друг другу. Параметры моделирования подбирались таким образом, чтобы максимально точно воспроизводить результаты электронно-микроскопических исследований.

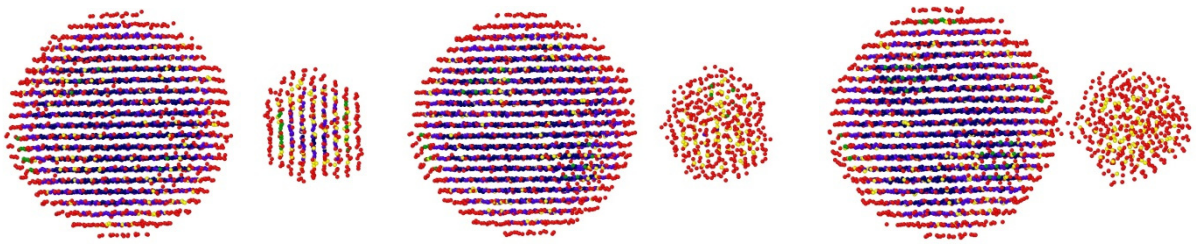
Для моделирования процессов термического воздействия была использована компьютерная программа MDNTP, разработанная Dr. Ralf Meyer, University Duisburg Germany. Структурные переходы были визуализированы при помощи программ XMakemol [15] и OVITO [16]. Все кластеры при температуре $T = 100$ К подвергались обязательной процедуре первичной термической релаксации для оптимизации их внутренней структуры и формы.

3. Результаты и обсуждение

Первый этап моделирования воспроизводил условия, при которых

наночастицы располагались на не нагретой подложке при отсутствии воздействия потока высокоэнергетических электронов, наблюдаемого при работе ТЭМ. То есть модельная система рассматривалась при комнатной температуре ($T = 300$ К) в состоянии примерного термодинамического равновесия (канонический NPT ансамбль). Для того чтобы более детально отследить все возможные атомные перемещения, обусловленные температурным воздействием, использовался временной шаг в 1,0 фс, а продолжительность моделирования была ограничена временным интервалом 500 пс. Затем, чтобы учесть воздействие потока высокоэнергетических электронов, характерного для работы ТЭМ, был проведен компьютерной анализ модельной системы при более высоких температурах.

Анализ полученных результатов начнем с наночастиц Pt. При температуре от 300 до 900 К для всех трех взаимных ориентаций атомных плоскостей (в продолжении друг друга, параллельно/перпендикулярно друг другу) коалесценция НЧ всегда происходила по механизму роста ориентированным прикреплением. Объединение наночастиц таким способом подтверждается и экспериментально в работе [17]. Если сравнить полученные данные моделирования с результатами проведенных ранее исследований [12, 13], то можно предположить, что величина межатомного взаимодействия оказывает влияние на механизм начальной стадии коалесценции.



а б в

Рис. 1. Мгновенные фотографии процесса слияния наночастиц Pb диаметром 6,0 нм и 3,0 нм через «перешеек» при $T = 400$ К, МД моделирование, а – $t = 3$ пс, б – $t = 50$ пс, в – $t = 500$ пс. Различными цветами показаны атомы, окружение которых соответствует определенному строению: синий – ГЦК; зеленый – ГПУ; желтый – аморфному; красный – атомы с координационным числом <12.

Далее рассмотрим процесс коалесценции наночастиц Pb. В данном случае процесс объединения происходит иным образом. Если рассматривать два варианта расположения атомных плоскостей Pb НЧ (перпендикулярно друг другу и в продолжении друг друга), то уже при комнатной температуре $T = 300$ К происходит коалесценция наночастиц

через механизм, условно называемый «перешеек» (neck). При повышении температуры до $T = 400$ К результаты аналогичны (см. рис. 1). Однако здесь стоит отметить, что малый кластер свинца ($D = 3{,}0$ нм) находится уже в достаточно расплавленном состоянии.

Если же рассматривать третий вариант расположения атомных плоскостей (параллельно друг другу), то при $T = 300$-400 К коалесценция НЧ свинца наблюдалась по механизму роста ориентированным прикреплением. И только при повышении температуры до $T = 500$ К наблюдалось образование «перешейка» между наночастицами. По всей видимости, это объясняется формированием жидкой оболочки у малой НЧ.

В результате, механизм коалесенции наночастиц свинца оказался практически полностью аналогичным случаю объединения наночастиц золота [13]. Единственным отличительным признаком было отсутствие видимого вращения Pb НЧ меньшего диаметра при ориентации атомных плоскостей перпендикулярно друг другу. Данный эффект обусловлен тем, что при температурах $T = 300$-400 К малый кластер свинца демонстрировал очень быстрый переход в расплавленное состоянии. Как следствие, вращение Pb НЧ меньшего диаметра уже не требовалась из-за снижения общей энергии объединенной системы.

4. Заключение

Таким образом, в представленной работе были рассмотрены механизмы объединения наночастиц Pt и Pb при процессах коалесценции в зависимости от взаимной ориентации атомных плоскостей. Результаты проведенного компьютерного моделирования показали, при высоких температурах частичное плавление и нарушение конфигурации может быть важно для коалесценции наночастиц через формирование «перешейка». Тогда как при низких температурах «механизм роста ориентированным прикреплением» является доминирующим, что подтверждается и работой [3].

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. **Theissmann, R.** Crystallographic reorientation and nanoparticle coalescence / R. Theissmann, M. Fendrich, R. Zinetullin et.al. // Physical Review B. – 2008. – V. 78. – I. 20. – P. 205413-1-205413-10. DOI: 10.1103/PhysRevB.78.205413.
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. **Palasantzas, G.** Coalescence aspects of cobalt nanoparticles during in situ high-temperature annealing / G. Palasantzas, T. Vystavel, S. A. Koch et.al. // Journal of Applied Physics. – 2006. – V. 99. – I. 2. – P. 024307-

1-024307-5. DOI: 10.1063/1.2163983.
4. **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 // Acta Microscopica. – 2018. – V. 28. – № 2. – P. 48-57.
5. **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.
6. **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.
7**. 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.
8. **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.
9**. Grammatikopoulos, P.** Computational modeling of nanoparticle coalescence / P. Grammatikopoulos, M. Sowwan, J. Kioseoglou // Advanced Theory and Simulations. – 2019. – V. 2. – Art.no. 1900013. – 26 p. DOI: 10.1002/adts.201900013.
10. **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.
11. **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.
12. **Череповская, А.А**. Начальная стадия процесса коалесценции на примере наночастиц Ag / А.А. Череповская, Д.А. Рыжкова // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2025. – Вып. 17. – С. 506-513. DOI: 10.26456/pcascnn/2025.17.506.
13. **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.
14. **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.
15. XMakemol - A program for visualizing atomic and molecular systems. – Режим доступа: www.url: https://manpages.ubuntu.com/manpages/bionic/man1/xmakemol.1.html.– 10.06.2026.
16. **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. DOI: 10.1088/0965-0393/18/1/015012.
17. **Kim, J.** Coalescence dynamics of platinum group metal nanoparticles revealed by liquid-phase transmission electron microscopy / J. Kim, D. Kang, S. Kang et. al. // iScience. – 2022. – V. 25. – I. 8. – Art. no. 104699. – 12 p. DOI: 10.1016/j.isci.2022.104699.
18. **Yun, K.** Effect of temperature on coalescence behavior of unsupported gold nanoparticles / K. Yun, J. Lee, H.-S. Nam // Electronic Materials Letters. – 2018. – V. 15. – I. 1. – P. 133-139. DOI: 10.1007/s13391-018-0090-6.

References:

1. Theissmann R., Fendrich M., Zinetullin R. et.al. Crystallographic reorientation and nanoparticle coalescence, *Physical Review B*, 2008, vol. 78, issue 20, pp. 205413-1-205413-10. DOI: 10.1103/PhysRevB.78.205413.
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. Palasantzas G., Vystavel T., Koch S. A. et.al. Coalescence aspects of cobalt nanoparticles during in situ high-temperature annealing, *Journal of Applied Physics*, 2006, vol. 99, issue 2, pp. 024307-1-024307-5. DOI: 10.1063/1.2163983.
4. Esparza R., Gutiérrez-Wing C., Pérez R., José-Yacamán M. Coalescence of Au nanoparticles: an in-situ Cs-corrected stem study at low voltage, *Acta Microscopica*, 2018, vol. 28, no. 2, pp. 48-57.
5. 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).
6. 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).
7. 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).
8. 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).
9. Grammatikopoulos P., Sowwan M., Kioseoglou J. Computational modeling of nanoparticle coalescence, *Advanced Theory and Simulations*, 2019, vol. 2, art.no. 1900013, 26p. DOI: 10.1002/adts.201900013.
10. 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.
11. 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.
12. Cherepovskaya A.A., Ryzhkova D.A. Nachal'naya stadiya protsessa koalestsentsii na primere nanochastits Ag [Initial stage of the coalescence process exemplifying on Ag nanoparticles], *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov [Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials]*, 2015, issue 17, pp. 506-513. DOI: 10.26456/pcascnn/2025.17.506. (In Russian).
13. 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.
14. 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.
15. XMakemol - A program for visualizing atomic and molecular systems. Available at: www.url: https://manpages.ubuntu.com/manpages/bionic/man1/xmakemol.1.html. (accessed 10.06.2026).
16. 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.
17. Kim J., Kang D., Kang S.et. al. Coalescence dynamics of platinum group metal nanoparticles revealed by liquid-phase transmission electron microscopy, *iScience*, 2022, vol. 25, issue 8, art. no. 104699, 12 p. DOI: 10.1016/j.isci.2022.104699.
18. Yun K., Lee J., Nam H.-S. Effect of temperature on coalescence behavior of unsupported gold nanoparticles, *Electronic Materials Letters*, 2018, vol. 15, issue 1, pp. 133-139. DOI: 10.1007/s13391-018-0090-6.