

УДК 532.6:546.22

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ И ФУНКЦИИ РАДИАЛЬНОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ НАНОЧАСТИЦЫ СЕРЕБРА С ПРИМЕНЕНИЕМ ЧИСЛЕННЫХ МЕТОДОВ

Д.Г. Цыдыпов^{1,2}, А.В. Номоев^{1,2}, Б.З. Гармаев¹¹Институт физического материаловедения СО РАН²Бурятский государственный университет имени Доржи Банзарова

Известно, что работоспособность микроэлектронных устройств на основе наноструктур серебра зависит от их теплофизических свойств. Поэтому актуально исследование теплофизических свойств наноструктур серебра в зависимости от их размеров и структуры. В данной работе изучена термическая стабильность сферических наночастиц серебра с помощью компьютерного моделирования методом молекулярной динамики. В ходе работы были получены температурные зависимости потенциальной части внутренней энергии наночастицы серебра при изменении размера наночастицы для различных потенциалов, отвечающих методу «погруженного атома». Используя численные методы обработки данных, включая метод локальных регрессий LOESS и нахождение первой производной температурной зависимости потенциальной части внутренней энергии наночастицы, определены значения температур начала и завершения плавления. Также построены и проанализированы размерные зависимости температуры плавления, удельной теплоты плавления наночастицы серебра для различных потенциалов «погруженного атома». Определены потенциалы «погруженного атома», которые обеспечивают лучшее согласие с табличными значениями макроскопических температуры плавления и удельной теплоты плавления. Кроме того, построена и проанализирована функция радиального распределения для наночастицы серебра при различных температурах и для разных размеров наночастицы.

Ключевые слова: наночастица серебра, термостабильность, температура плавления, удельная теплота плавления, функция радиального распределения, метод молекулярной динамики.

DOI: 10.17212/1727-2769-2023-3-20-31

Введение

Как правило, наночастицы серебра имеют диаметр от 1 до 100 нм и обладают уникальными свойствами, которые отличаются от свойств объемного серебра [1]. Наночастицы серебра применяют в чернилах, микроэлектронике и медицине [2].

Метод молекулярной динамики (МД) – это метод, в котором временная эволюция системы взаимодействующих атомов или частиц отслеживается интегрированием их уравнений движения [3].

Для описания взаимодействия между атомами в веществе используются межатомные потенциалы [4]. Одним из методов для описания межатомного взаимодействия является метод «погруженного атома» (embedded atom method, EAM) [5]. Этот метод основан на идее теории функционала плотности. Основываясь на идее теории функционала плотности, полная электронная энергия произвольно упорядоченных ядер может быть записана как однозначный функционал полной элек-

Работа выполнена по проекту государственного задания № 0270-2021-0002 «Физические характеристики, особенности строения, фазовые диаграммы и функциональные свойства композитных структур и материалов».

тронной плотности. В данном методе полная электронная плотность в металле представляется в виде линейной суперпозиции вкладов отдельных атомов.

В методе «погруженного атома» энергия одного атома в атомной структуре определяется выражением [4]

$$E_i = F(\rho_i) + \frac{1}{2} \sum_j \phi_{ij},$$

$$\rho_i = \sum_j \rho_j,$$

где F – функция «погружения»; ρ_i – плотность электронов в i -м месте; ϕ – энергия парного взаимодействия.

Таким образом, энергия каждого атома системы определяется как сумма энергии парного взаимодействия этого атома с другими атомами системы плюс функция «погружения». Функция «погружения» учитывает влияние соседних атомов на парное взаимодействие. Функция «погружения» зависит от полной электронной плотности всех атомов, кроме одного атома, для которого рассчитывается энергия.

1. Реализация моделирования МД-методом

Исследовались сферические наночастицы серебра с различными диаметрами, обладающие гранецентрированной кубической (ГЦК) решеткой. В ходе моделирования в качестве потенциалов для описания взаимодействий между атомами серебра использовались: ЕАМ-потенциал для металлов с ГЦК кристаллической решеткой, разработанный Шенгом и соавторами [6]; ЕАМ-потенциал для системы медь/серебро, применимый для наночастиц серебра, разработанный Уильямсом и соавторами [7]; ЕАМ-потенциал, разработанный Чжоу и соавторами, который также применим для наночастиц серебра [8].

Для уравнивания и нагрева системы до требуемой температуры использовался термостат Нозе-Гувера (канонический ансамбль NVT). При таком методе моделирования система может обмениваться энергией с окружающей средой (термостатом). Временной шаг был установлен равным 1 фс.

Сначала выполнялось уравнивание наночастицы при 300 К в течение 500 пс. Затем был произведен нагрев наночастицы серебра от 300 К до 1600 К со скоростью нагрева 2,6 К/пс, для чего потребовалось моделирование длительно-стью в 500 пс, что является достаточным для наблюдения за поведением структурных и фазовых изменений наночастицы.

2. Результаты и обсуждение

Рассмотрим термическую стабильность наночастиц серебра. В ходе работы были получены температурные зависимости потенциальной части внутренней энергии наночастицы серебра при изменении размера наночастицы для различных потенциалов, отвечающих методу «погруженного атома», и обработаны в компьютерной программе Origin. На рис. 1, а представлена температурная зависимость потенциальной части внутренней энергии наночастицы серебра до применения метода локальных регрессий LOESS для сглаживания зависимости. Метод LOESS позволяет сгладить ряд значений, используя простую линейную либо полиномиальную зависимость y от x [9]. На рис. 1, б показана температурная зависимость потенциальной части внутренней энергии наночастицы после применения в программе Origin метода LOESS.

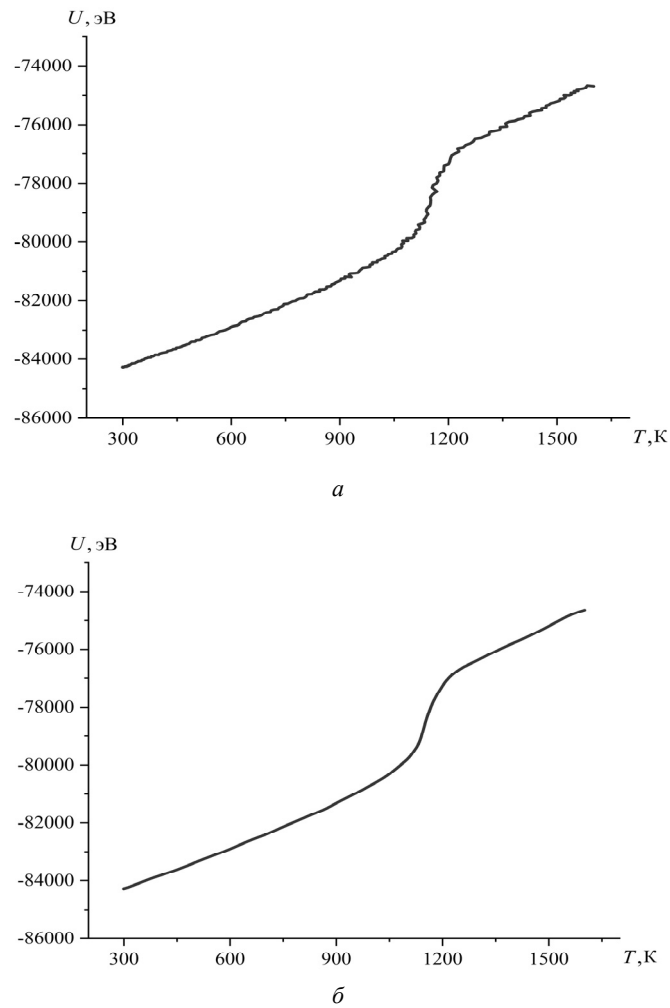


Рис. 1 – Температурная зависимость потенциальной части внутренней энергии наночастицы до применения метода LOESS (а) и после применения метода LOESS (б)

Fig. 1 – Temperature dependence of the potential part of the internal energy of a nanoparticle before applying the LOESS method (a) and after applying the LOESS method (b)

В ходе работы температуру плавления определяли по скачку температурной зависимости потенциальной части внутренней энергии наночастицы. В качестве температуры плавления принималось значение, соответствующее середине интервала между температурами начала и завершения плавления.

После применения метода LOESS в программе Origin проводилось построение графика производной первого порядка температурной зависимости потенциальной части внутренней энергии наночастицы для дальнейшего определения значений температур начала T_1 и завершения T_2 плавления.

На рис. 2, а показан график производной первого порядка температурной зависимости потенциальной части внутренней энергии наночастицы до применения метода LOESS, с помощью которого невозможно определить значения температур начала и завершения плавления. Большой статистический разброс можно

объяснить тем, что наночастица, состоящая из атомов, не успевает прийти в равновесное состояние в процессе ее нагрева. Шаг по температуре – неравномерный, изменяется в интервале от 0,3 до 12,1 К, максимальный перепад по энергии на одном шаге равен 353,1 эВ/К.

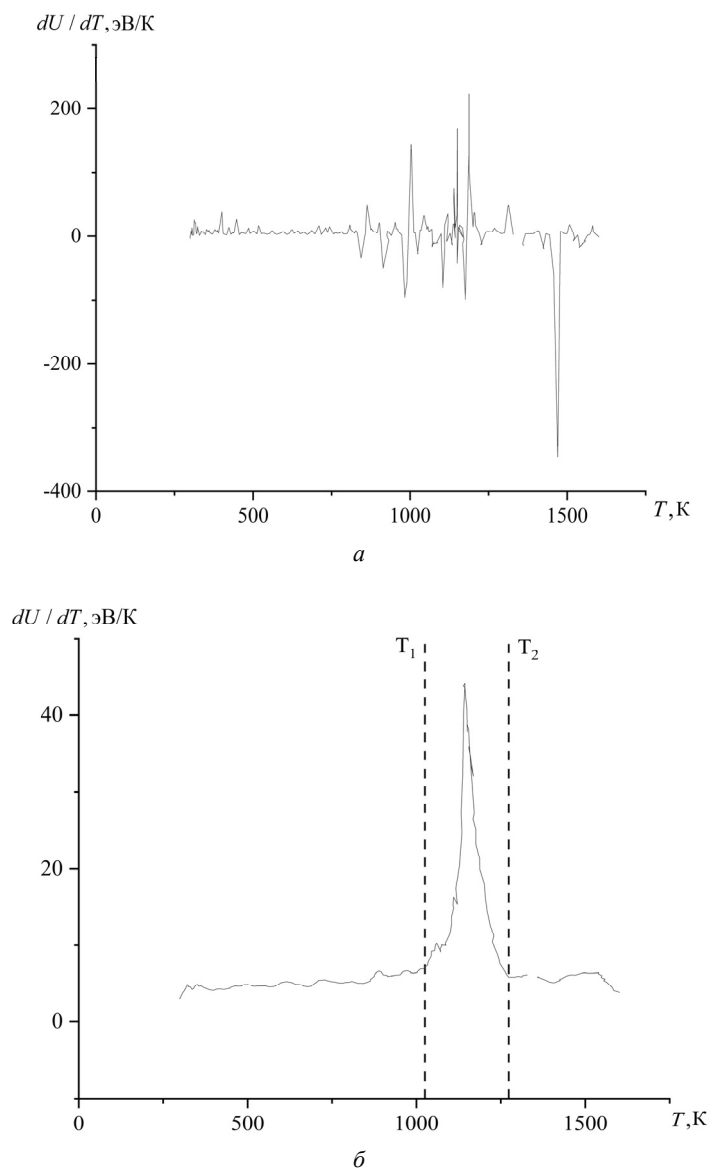


Рис. 2 – Производная первого порядка температурной зависимости потенциальной части внутренней энергии наночастицы до применения метода LOESS (а) и после применения метода LOESS (б). T_1 и T_2 – температуры начала и завершения плавления соответственно

Fig. 2 – The first order derivative of the temperature dependence of the potential part of the internal energy of a nanoparticle before the LOESS method (a) and after the LOESS method (б). T_1 and T_2 are the temperatures of the beginning and end of melting, respectively

На рис. 2, б представлен график производной первого порядка температурной зависимости потенциальной части внутренней энергии наночастицы после применения метода LOESS. Использование метода LOESS позволяет отфильтровать тепловые флуктуации и определить значения температур начала T_1 и завершения T_2 плавления. Значения T_1 и T_2 определялись по резкому изменению производной.

Для потенциалов [6], [7] и [8] были рассчитаны температурные зависимости потенциальной части внутренней энергии наночастицы серебра для различных размеров (радиус от 1,5 до 6,5 нм) наночастицы и определена температура плавления для каждого размера наночастицы для дальнейшего построения размерных зависимостей температуры плавления для каждого используемого ЕАМ-потенциала.

Зависимость температуры плавления сферических наночастиц от размера определяется известной формулой Томсона [10]:

$$T_m = T_0 \left(1 - \frac{2\sigma_{sl}v_s}{\lambda_0 R} \right), \quad (1)$$

где T_m – температура плавления наночастицы; T_0 – макроскопическое значение температуры плавления твердой фазы; λ_0 – макроскопическое значение удельной теплоты плавления твердой фазы; R – радиус частицы; σ_{sl} – межфазное натяжение на границе раздела кристалла с собственным расплавом; v_s – удельный объем твердой фазы. Таким образом, формула Томсона (1) предсказывает линейную зависимость между температурой плавления наночастицы и ее обратным радиусом ($1/R$).

Основываясь на результатах, полученных МД-методом, можно найти макроскопическое значение температуры плавления серебра для каждого используемого ЕАМ-потенциала, проведя линейную экстраполяцию зависимостей температуры плавления от обратного радиуса ($1/R$) к $R \rightarrow \infty$ (рис. 3).

Макроскопическое значение температуры плавления серебра $T_m^{(\infty)} = 1382$ К при использовании потенциала [6] (отклонение от табличного значения (1235 К) составляет 11,9 %). При использовании потенциала [7] $T_m^{(\infty)} = 1409$ К (отклонение составляет 14,1 %). Для потенциала [8] $T_m^{(\infty)} = 1256$ К (отклонение составляет 1,7 %). Таким образом, лучшее совпадение с табличным значением макроскопической температуры плавления наблюдается при использовании потенциала [8]. Разброс в значениях макроскопической температуры плавления, определенных при использовании потенциалов [6], [7] и [8], можно объяснить различием полученных параметров потенциалов, входящих в состав трех функций: функцию «погружения» F , плотность электронов ρ и энергию парного взаимодействия ϕ .

Еще одной важной характеристикой для исследования термической стабильности наночастиц является теплота плавления. Способ определения теплоты плавления описан в [12–15].

В данной работе для нахождения удельной теплоты плавления использовалось следующее выражение:

$$\lambda = \frac{\Delta U}{m}, \quad (2)$$

где ΔU – энергия, необходимая для разрушения кристаллической структуры при температуре, соответствующей началу плавления; m – масса частицы.

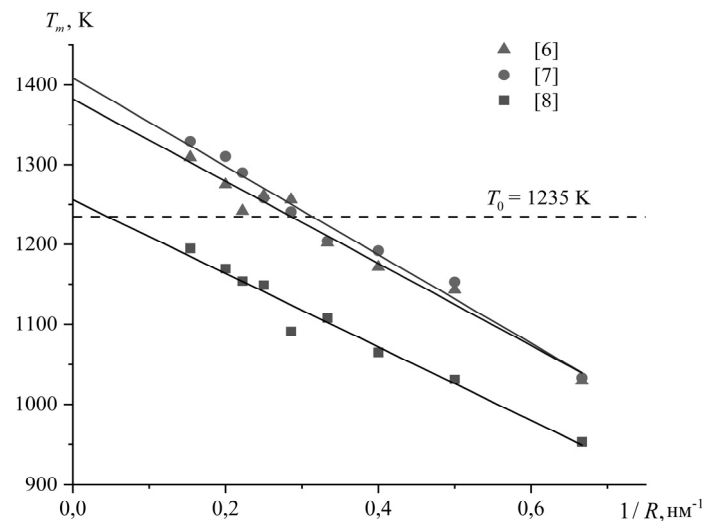


Рис. 3 – Зависимости температуры плавления наночастицы серебра от обратного радиуса ($1/R$) для различных ЕАМ-потенциалов. Штриховой линии соответствует табличное значение макроскопической температуры плавления серебра $T_0 = 1235 \text{ K}$ [11]

Fig. 3 – Dependences of the melting temperature of a silver nanoparticle on the reciprocal radius ($1/R$) for various EAM potentials. The dashed line corresponds to the tabular value of the macroscopic melting temperature of silver $T_0 = 1235 \text{ K}$ [11]

На рис. 4 представлены рассчитанные с использованием формулы (2) зависимости удельной теплоты плавления наночастицы серебра от обратного радиуса ($1/R$) с использованием различных ЕАМ-потенциалов.

Ранее вывод о том, что зависимость теплоты плавления от обратного радиуса ($1/R$) близка к линейной, был сделан в работах [12–16]. Поэтому, чтобы найти макроскопическое значение удельной теплоты плавления серебра для каждого используемого ЕАМ-потенциала, проведена линейная экстраполяция зависимостей удельной теплоты плавления от обратного радиуса ($1/R$) к $R \rightarrow \infty$ (рис. 4).

Макроскопическое значение удельной теплоты плавления серебра $\lambda^{(\infty)} = 74,9 \text{ кДж/кг}$ при использовании потенциала [6] (отклонение от табличного значения ($87,3 \text{ кДж/кг}$ [11]) составляет $14,2 \%$). Для потенциала [7] $\lambda^{(\infty)} = 70,8 \text{ кДж/кг}$ (отклонение равно $18,9 \%$). При использовании потенциала [8] $\lambda^{(\infty)} = 66,7 \text{ кДж/кг}$ (отклонение равно $23,6 \%$). Таким образом, параметры потенциала [6] обеспечивают лучшее согласие с табличным значением макроскопической удельной теплоты плавления.

На рис. 5 показана функция радиального распределения для наночастицы серебра с радиусом $R = 2,5 \text{ нм}$ при разных температурах при использовании потенциала [6]. При температуре 300 K функция радиального распределения имеет острые пики, соответствующие ближайшим и более удаленным атомам. С повышением температуры пики функции радиального распределения размываются, так как структура становится менее упорядоченной. Размытие пиков означает, что уменьшается вероятность появления атома в координационных сферах. Для потенциалов [7] и [8] вид функции радиального распределения для наночастицы серебра с радиусом $R = 2,5 \text{ нм}$ при разных значениях температуры не отличается от вида функции радиального распределения, показанной на рис. 5.

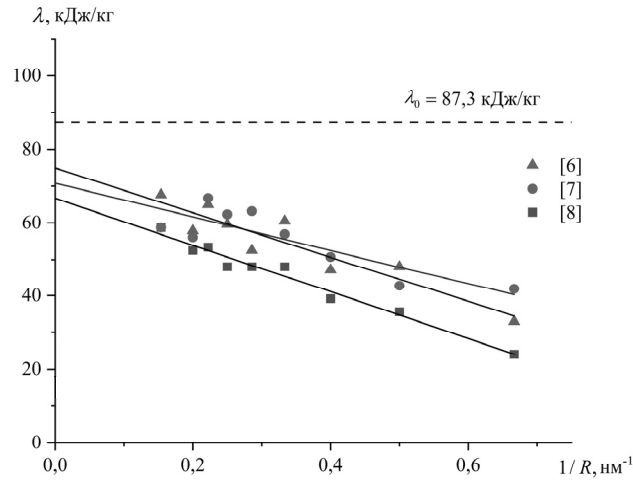


Рис. 4 – Зависимости удельной теплоты плавления наночастицы серебра от обратного радиуса ($1/R$) для различных ЕАМ-потенциалов. Штриховой линии соответствует табличное значение макроскопической удельной теплоты плавления серебра $\lambda_0 = 87,3$ кДж/кг [11]

Fig. 4 – Dependences of the specific heat of fusion of a silver nanoparticle on the reciprocal radius ($1/R$) for various EAM potentials. The dashed line corresponds to the tabular value of the macroscopic specific heat of fusion of silver $\lambda_0 = 87.3$ kJ/kg [11]

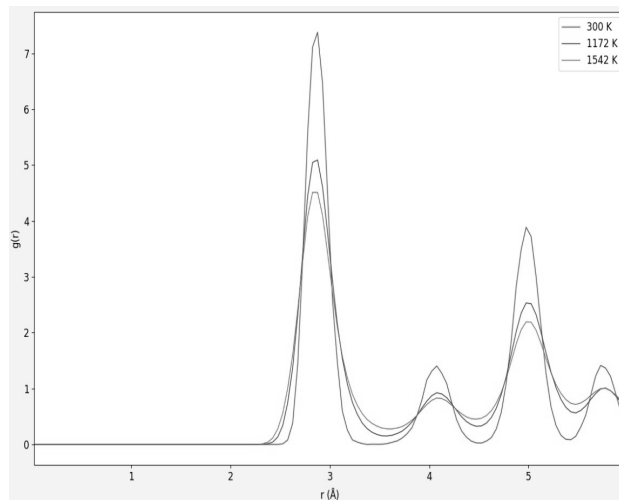


Рис. 5 – Функция радиального распределения для наночастицы серебра с радиусом $R = 2,5$ нм для потенциала [6] при разных температурах: 300 К (наночастица находится в твердом состоянии), 1172 К (в процессе плавления наночастицы), 1542 К (наночастица находится в жидком состоянии)

Fig. 5 – The radial distribution function for a silver nanoparticle with radius $R = 2.5$ nm for the potential [6] at different temperatures: 300 K (the nanoparticle is in the solid state), 1172 K (in the process of melting the nanoparticle), 1542 K (the nanoparticle is in the liquid state)

На рис. 6 представлена функция радиального распределения для разных размеров наночастицы серебра при температуре $T = 300$ К при использовании потенциала [6]. При уменьшении размера наночастицы наблюдается уменьшение высоты пиков функции радиального распределения, начиная со второй координатной сферы. Известно [17], что чем меньше размер наночастицы, тем сильнее влияние поверхностного натяжения на наноструктуру. Это не только приводит к тому, что поверхностные атомы становятся менее упорядоченными, но и влияет на подповерхностные атомы. Соответственно увеличивается доля неупорядоченных атомов, и упорядоченность наноструктуры становится хуже. Для потенциалов [7] и [8] функция радиального распределения для разных размеров наночастицы серебра при температуре $T = 300$ К имеет такой же вид, как и у функции радиального распределения для потенциала [6].

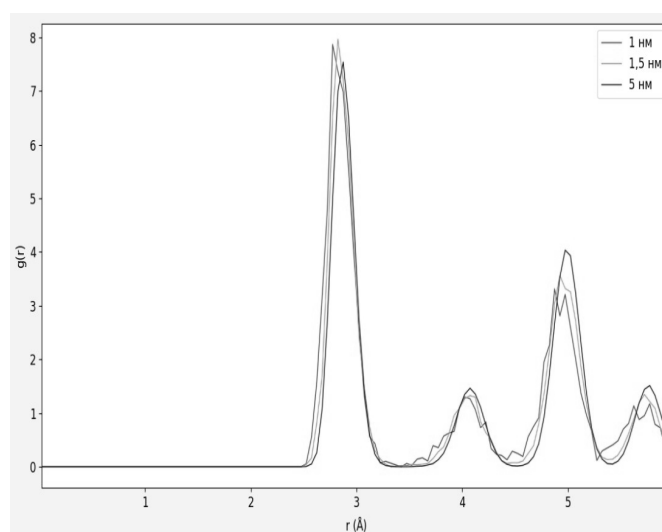


Рис. 6 – Функция радиального распределения для разных размеров наночастицы серебра ($R = 1$ нм; 1,5 нм; 5 нм) при температуре $T = 300$ К при использовании потенциала [6]

Fig. 6 – The radial distribution function for different sizes of silver nanoparticles ($R = 1$ нм; 1.5 нм; 5 нм) at temperature $T = 300$ K when using the potential [6]

Заключение

В данной работе была изучена термостабильность наночастицы серебра для разных размеров наночастицы с использованием различных ЕАМ-потенциалов с помощью моделирования МД-методом. Применение численных методов обработки данных позволило определить значения температур начала и завершения плавления. В ходе работы были получены размерные зависимости температуры плавления наночастицы для разных ЕАМ-потенциалов; установлено, что наименьшее отклонение (1,7 %) от табличного значения макроскопической температуры плавления серебра [11] наблюдается при использовании потенциала [8]. Также в настоящей работе были получены размерные зависимости удельной теплоты плавления наночастицы для различных ЕАМ-потенциалов; определено, что наименьшее отклонение (14,2 %) от табличного значения макроскопической удельной теплоты плавления серебра [11] наблюдается при использовании потен-

циала [6]. Полученные в настоящей работе результаты показывают, что нужно тщательно подбирать потенциал для наночастиц. Так, потенциал [8] обеспечивает лучшее согласие с табличным значением макроскопической температуры плавления серебра, но также дает наибольшее отклонение от табличного значения макроскопической удельной теплоты плавления серебра. Также в ходе работы построена функция радиального распределения для наночастицы серебра при разных температурах; по построенным зависимостям можно заметить, что с повышением температуры пики функции радиального распределения размываются. Кроме того, построена функция радиального распределения для разных размеров наночастицы; по построенным зависимостям видно, что при уменьшении размера наночастицы наблюдается уменьшение высоты пиков функции радиального распределения, начиная со второй координационной сферы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Silver nanoparticles: properties, synthesis, characterization, applications and future trends / S.T. Galatage, A.S. Hebalkar, S.V. Dhobale, O.R. Mali, P.S. Kumbhar, S.V. Nikade, S.G. Killedar // Silver micro-nanoparticles – properties, synthesis, characterization, and applications / ed. by S. Kumar, P. Kumar, C.S. Pathak. – London: IntechOpen, 2021. – Ch. 4. – P. 1–19. – DOI: 10.5772/intechopen.99173.
2. **Tran Q.H., Nguyen V.Q., Le A.** Silver nanoparticles: synthesis, properties, toxicology, applications and perspectives // *Advances in Natural Sciences: Nanoscience and Nanotechnology*. – 2018. – Vol. 4 (3). – P. 1–20. – DOI: 10.1088/2043-6262/4/3/033001.
3. **Подрыга В.О.** Моделирование процесса установления термодинамического равновесия нагретого металла // *Математическое моделирование*. – 2011. – Т. 23, № 9. – С. 105–119.
4. **Chistyakova N.V., Tran T.M.H.** A study of the applicability of different types of interatomic potentials to compute elastic properties of metals with molecular dynamics methods // *AIP Conference Proceedings*. – 2016. – Vol. 1772: Prospects of Fundamental Sciences Development (PFSD-2016): XIII International Conference of Students and Young Scientists, 26–29 April 2016, Tomsk, Russia: proceedings. – P. 060019-1–060019-7. – DOI: 10.1063/1.4964599.
5. **Daw M.S., Foiles S.M., Baskes M.I.** The embedded-atom method: a review of theory and applications // *Materials Science Reports*. – 1993. – Vol. 9 (7–8). – P. 251–310. – DOI: 10.1016/0920-2307(93)90001-U.
6. Highly optimized embedded-atom-method potentials for fourteen fcc metals / H. Sheng, M.J. Kramer, A. Cadien, T. Fujita, M.W. Chen // *Physical Review B*. – 2011. – Vol. 83 (13). – P. 134118-1–134118-20. – DOI: 10.1103/PhysRevB.83.134118.
7. **Williams P.L., Mishin Y., Hamilton J.C.** An embedded-atom potential for the Cu–Ag system // *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. – 2006. – Vol. 14 (5). – P. 817–833. – DOI: 10.1088/0965-0393/14/5/002.
8. **Zhou X.W., Johnson R.A., Wadley H.N.G.** Misfit-energy-increasing dislocations in vapor-deposited CoFe/NiFe multilayers // *Physical Review B*. – 2004. – Vol. 69 (14). – P. 144113-1–144113-10. – DOI: 10.1103/PhysRevB.69.144113.
9. OriginLab Corporation: website. – URL: <https://www.originlab.com/doc/origin-help/smoothing> (accessed: 08.09.2023).
10. **Thomson W. LX.** On the equilibrium of a vapour at a curved surface of liquid // *Philosophical Magazine. Series 4*. – 1871. – Vol. 42 (282). – P. 448–452. – DOI: 10.1080/14786447108640606.
11. **Енохович А.С.** Справочник по физике. – М.: Просвещение, 1978. – 415 с.
12. Расчет размерных зависимостей теплоты плавления наночастиц металлов / Н.Ю. Сдобняков, П.В. Комаров, А.Ю. Колосов, Н.В. Новожилов, Д.Н. Соколов, Д.А. Кульпин // *Конденсированные среды и межфазные границы*. – 2013. – Т. 15, № 3. – С. 337–344.

13. Соколов Д.Н., Сдобняков Н.Ю., Комаров П.В. Расчет размерных зависимостей теплоты плавления наночастиц металлов // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2011. – Вып. 3. – С. 229–238.
14. 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. – DOI: 10.7868/S0367676516050161.
15. Молекулярно-динамическое исследование размерной зависимости теплоты плавления металлических нанокластеров / В.М. Самсонов, С.А. Васильев, А.Г. Бембель, Т.Е. Самсонов, В.Л. Скопич // Физика твердого тела. – 2014. – Т. 56, вып. 12. – С. 2289–2292.
16. Расчет размерных зависимостей теплот плавления и кристаллизации наночастиц металлов / Н.Ю. Сдобняков, Д.Н. Соколов, В.С. Мясниченко, А.Н. Базулев // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2014. – Вып. 6. – С. 342–348.
17. Melting behavior of Ag nanoparticles and their clusters / D. Feng, Y. Feng, S. Yuan, X. Zhang, G. Wang // Applied Thermal Engineering. – 2017. – Vol. 111 (7). – P. 1457–1463. – DOI: 10.1016/j.applthermaleng.2016.05.087.

DETERMINATION OF THERMOPHYSICAL PROPERTIES AND THE RADIAL DISTRIBUTION FUNCTION OF A SILVER NANOPARTICLE USING NUMERICAL METHODS

Tsydypov D.G.^{1,2}, Nomoev A.V.^{1,2}, Garmaev B.Z.¹

¹*Institute of Physical Material Science, SB RAS, Ulan-Ude, Russia*

²*Buryat State University, Ulan-Ude, Russia*

The performance of microelectronic devices based on silver nanostructures depends on their thermophysical properties. Therefore, it is important to study the thermophysical properties of silver nanostructures depending on their size and structure. In this work, the thermal stability of spherical silver nanoparticles was studied using computer simulation by the molecular dynamics method. In the course of this work, the temperature dependences of the potential part of the specific internal energy of silver nanoparticles were obtained with a change in the size of the nanoparticle for various potentials corresponding to the “embedded atom” method. Using numerical data processing methods, the temperatures of the beginning and end of melting were determined. Also, size dependences of the melting temperature and specific heat of fusion of silver nanoparticles were plotted and analyzed for different potentials of the “embedded atom”. Potentials that provide the best agreement with the tabular values of the macroscopic melting temperature and specific heat of fusion were determined. In addition, the radial distribution function for a silver nanoparticle was constructed and analyzed at different temperatures and for different sizes of the nanoparticle.

Keywords: silver nanoparticle, thermal stability, melting temperature, specific heat of fusion, radial distribution function, molecular dynamics method.

DOI: 10.17212/1727-2769-2023-3-20-31

REFERENCES

1. Galatage S.T., Hebalkar A.S., Dhobale S.V., Mali O.R., Kumbhar P.S., Nikade S.V., Kildar S.G. Silver nanoparticles: properties, synthesis, characterization, applications and future trends. *Silver micro-nanoparticles – properties, synthesis, characterization, and applications*. London, IntechOpen, 2021, ch. 4, pp. 1–19. DOI: 10.5772/intechopen.99173.
2. Tran Q.H., Nguyen V.Q., Le A. Silver nanoparticles: synthesis, properties, toxicology, applications and perspectives. *Advances in Natural Sciences: Nanoscience and Nanotechnology*, 2018, vol. 4 (3), pp. 1–20. DOI: 10.1088/2043-6262/4/3/033001.

3. Podryga V.O. Molecular dynamics method for simulation of thermodynamic equilibrium. *Mathematical Models and Computer Simulations*, 2011, vol. 3 (3), pp. 382–388. DOI: 10.1134/S2070048211030112. Translated from *Matematicheskoe modelirovanie*, 2011, vol. 23, no. 9, pp. 105–119.
4. Chistyakova N.V., Tran T.M.H. A study of the applicability of different types of interatomic potentials to compute elastic properties of metals with molecular dynamics methods. *AIP Conference Proceedings*, 2016, vol. 1772, pp. 060019-1–060019-7. DOI: 10.1063/1.4964599.
5. Daw M.S., Foiles S.M., Baskes M.I. The embedded-atom method: a review of theory and applications. *Materials Science Reports*, 1993, vol. 9 (7–8), pp. 251–310. DOI: 10.1016/0920-2307(93)90001-U.
6. Sheng H., Kramer M.J., Cadieu A., Fujita T., Chen M.W. Highly optimized embedded-atom-method potentials for fourteen fcc metals. *Physical Review B*, 2011, vol. 83 (13), pp. 134118-1–134118-20. DOI: 10.1103/PhysRevB.83.134118.
7. Williams P.L., Mishin Y., Hamilton J.C. An embedded-atom potential for the Cu–Ag system. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2006, vol. 14 (5), pp. 817–833. DOI: 10.1088/0965-0393/14/5/002.
8. Zhou X.W., Johnson R.A., Wadley H.N.G. Misfit-energy-increasing dislocations in vapor-deposited CoFe/NiFe multilayers. *Physical Review B*, 2004, vol. 69 (14), pp. 144113-1–144113-10. DOI: 10.1103/PhysRevB.69.144113.
9. *OriginLab Corporation*. Website. Available at: <https://www.originlab.com/doc/origin-help/smoothing> (accessed 08.09.2023).
10. Thomson W. L.X. On the equilibrium of a vapour at a curved surface of liquid. *Philosophical Magazine. Series 4*, 1871, vol. 42 (282), pp. 448–452. DOI: 10.1080/14786447108640606.
11. Enokhov A.S. *Spravochnik po fizike* [Handbook of physics]. Moscow, Prosveshchenie Publ., 1978. 415 p.
12. Sdobnyakov N.Yu., Komarov P.V., Kolosov A.Yu., Novozhilov N.V., Sokolov D.N., Kulpin D.A. Raschet razmernykh zavisimostei teploty plavleniya nanochastits metallov [The calculation of the size dependencies of the heat of fusion for metal nanoparticles]. *Kondensirovannyye sredy i mezhfaznye granitsy = Condensed Matter and Interphases*, 2013, vol. 15, no. 3, pp. 337–344.
13. Sokolov D.N., Sdobnyakov N.Yu., Komarov P.V. Raschet razmernykh zavisimostei teploty plavleniya nanochastits metallov [The calculation of the size dependencies of the heat of fusion for metal nanoparticles]. *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov = Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials*, 2011, iss. 3, pp. 229–238.
14. Samsonov V.M., Sdobnyakov N.Yu., Vasilyev S.A., Sokolov D.N. On the size dependence of the heats of melting of metal nanoclusters. *Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics*, 2016, vol. 80 (5), pp. 494–496. DOI: 10.3103/S1062873816050166. Translated from *Izvestiya Rossiiskoi akademii nauk. Seriya fizicheskaya*, 2016, vol. 80, no. 5, pp. 547–550. DOI: 10.7868/S0367676516050161.
15. Samsonov V.M., Vasilyev S.A., Bembel A.G., Samsonov V.M., Skopich V.L. Molecular dynamics investigation of the size dependence of the heat of melting of metal nanoclusters. *Physics of the Solid State*, 2014, vol. 56 (12), pp. 2369–2373. DOI: 10.1134/S1063783414120270. Translated from *Fizika tverdogo tela*, 2014, vol. 56, iss. 12, pp. 2289–2292.
16. Sdobnyakov N.Yu., Sokolov D.N., Myasnichenko V.S., Bazulev A.N. Raschet razmernykh zavisimostei teplot plavleniya i kristallizatsii nanochastits metallov [Calculation of the heat of fusion and the heat of freezing size dependencies for metal nanoparticles]. *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov = Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials*, 2014, iss. 6, pp. 342–348.
17. Feng D., Feng Y., Yuan S., Zhang X., Wang G. Melting behavior of Ag nanoparticles and their clusters. *Applied Thermal Engineering*, 2017, vol. 111 (7), pp. 1457–1463. DOI: 10.1016/j.applthermaleng.2016.05.087.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ



Цыдыпов Дамдин Галсанович – родился в 1997 году, инженер лаборатории физики композитных материалов ФГБУН «Институт физического материаловедения СО РАН», научный сотрудник лаборатории физики наносистем ФГБОУ ВО «Бурятский государственный университет имени Доржи Банзарова». Область научных интересов: математическое моделирование, нанотехнологии и материалы. Опубликовано одна научная работа. (Адрес: 670047, Россия, Улан-Удэ, Сахьяновой, 6. E-mail: damdinkatsydyapov@gmail.com).

Tsydyapov Damdin Galsanovich (b. 1997) – engineer, Laboratory of Physics of Composite Materials, Institute of Physical Materials Science SB RAS, a researcher, laboratory of physics of nanosystems, Buryat State University. His research interests are currently focused on mathematical modeling, nanotechnologies and materials. He is the author of 1 scientific paper. (Address: 6, Sakhyanova Street, Ulan-Ude, 670047, Russia. E-mail: damdinkatsydyapov@gmail.com).



Номоев Андрей Валерьевич – родился в 1961 году, д-р физ.-мат. наук, доцент, профессор кафедры общей и теоретической физики, заведующий лабораторией физики наносистем ФГБОУ ВО «Бурятский государственный университет имени Доржи Банзарова», заведующий лабораторией физики композитных материалов ФГБУН «Институт физического материаловедения СО РАН». Область научных интересов: нанотехнологии и материалы. Опубликовано более 200 научных работ. (Адрес: 670047, Россия, Улан-Удэ, Сахьяновой, 6. E-mail: nomoevav@mail.ru).

Nomoev Andrey Valeryevich (b. 1961) – Doctor of Sciences (Phys. & Math.), associate professor, professor at the Department of General and Theoretical Physics; Head of the Laboratory of Physics of Nanosystems, Buryat State University; Head of the Laboratory of Physics of Composite Materials, Institute of Physical Materials Science SB RAS. His research interests are currently focused on nanotechnologies and materials. He is the author and co-author of over 200 scientific papers. (Address: 6, Sakhyanova Street, Ulan-Ude, 670047, Russia. E-mail: nomoevav@mail.ru).



Гармаев Байр Заятуевич – родился в 1980 году, канд. физ.-мат. наук, старший научный сотрудник лаборатории физики композитных материалов ФГБУН «Институт физического материаловедения СО РАН». Область научных интересов: нанотехнологии и материалы, радиофизика и цифровая обработка сигналов. Опубликовано более 70 научных работ. (Адрес: 670047, Россия, Улан-Удэ, Сахьяновой, 6. E-mail: bair.garmaev@gmail.com).

Garmaev Bair Zayatyevich (b. 1980) – Candidate of Sciences (Phys. & Math.), senior researcher, laboratory of physics of composite materials, Institute of Physical Materials Science SB RAS. His research interests are currently focused on nanotechnologies and materials, radio physics and digital signal processing. He is the author and co-author of over 70 scientific papers. (Address: 6, Sakhyanova Street, Ulan-Ude, 670047, Russia. E-mail: bair.garmaev@gmail.com).

Статья поступила 4 июня 2023 г.
Received June 4, 2023

To Reference:

Tsydyapov D.G., Nomoev A.V., Garmaev B.Z. Opredelenie teplofizicheskikh svoistv i funktsii radial'nogo raspredeleniya nanochastitsy serebra s primeneniem chislennykh metodov [Determination of thermophysical properties and the radial distribution function of a silver nanoparticle using numerical methods]. *Doklady Akademii nauk vysshei shkoly Rossiiskoi Federatsii* = *Proceedings of the Russian higher school Academy of sciences*, 2023, no. 3 (60), pp. 20–31. DOI: 10.17212/1727-2769-2023-3-20-31.