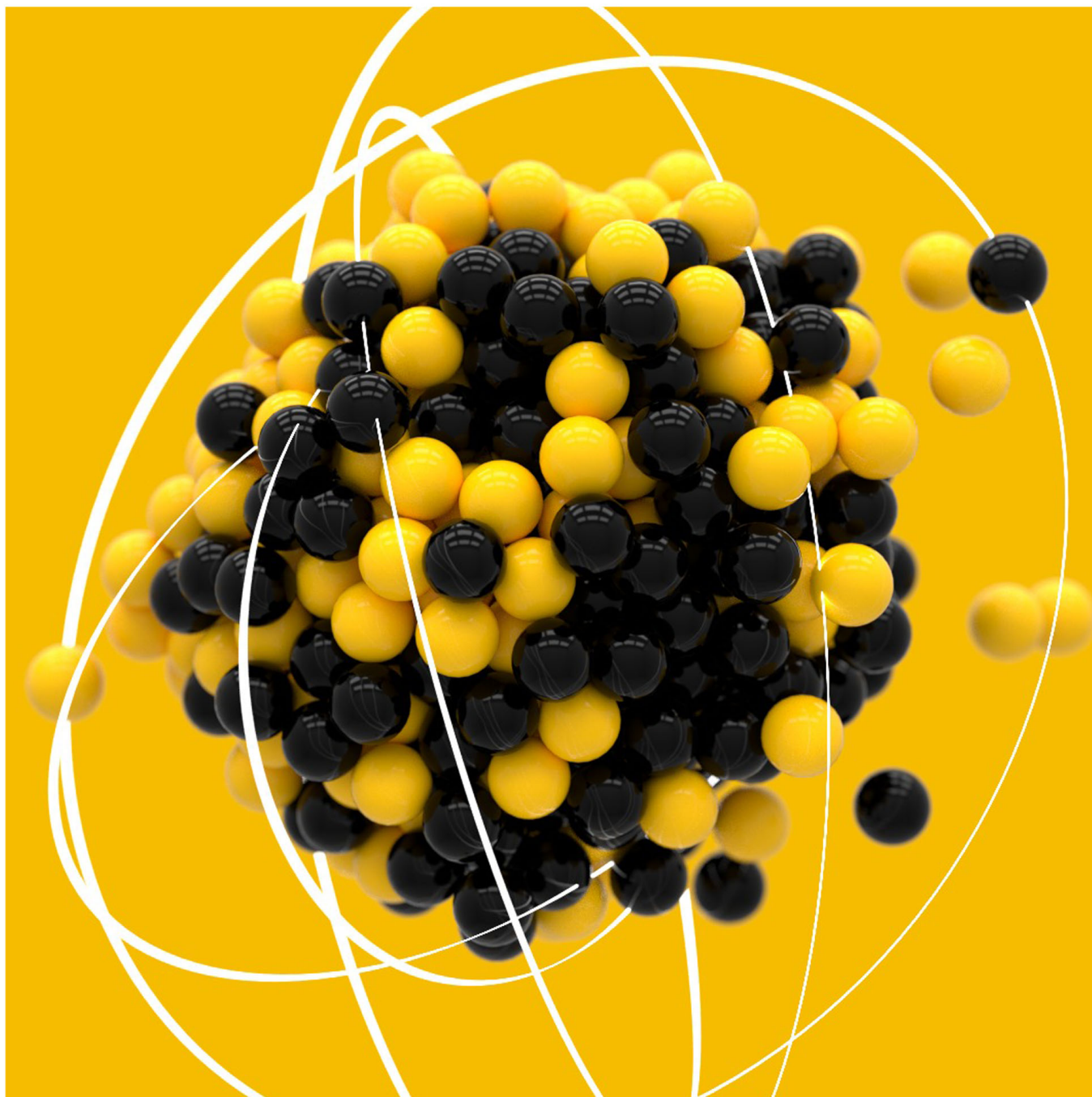




ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ

ИЗУЧЕНИЯ КЛАСТЕРОВ, НАНОСТРУКТУР И НАНОМАТЕРИАЛОВ

Выпуск 16, 2024

PHYSICAL AND CHEMICAL ASPECTS OF THE STUDY OF
CLUSTERS, NANOSTRUCTURES AND NANOMATERIALS

Issue 16, 2024

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

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

**PHYSICAL AND CHEMICAL ASPECTS
OF THE STUDY OF CLUSTERS,
NANOSTRUCTURES AND
NANOMATERIALS**

**FIZIKO-HIMIČESKIE ASPEKTY
IZUČENIÂ KLASTEROV,
NANOSTRUKTUR I NANOMATERIALOV**

выпуск 16

ТВЕРЬ 2024

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

ББК Ж36:Г5+В379

Ф50

Рецензирование статей осуществляется на основании Положения о рецензировании статей и материалов для опубликования в журнале «Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов».

Официальный сайт издания в сети Интернет:

<https://www.physchemaspects.ru>

Ф50 Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов [Текст]. – Тверь: Издательство Тверского государственного университета, 2024. – Вып. 16. – 1088 с.

Зарегистрирован Федеральной службой по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций, свидетельство о регистрации СМИ ПИ № ФС77-47789 от 13.12.2011.

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

Переводное название: Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials

Транслитерация названия: Fiziko-himičeskie aspekty izučeniâ klasterov, nanostruktur i nanomaterialov

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

ББК Ж36:Г5+В379

Print ISSN 2226-4442

Online ISSN 2658-4360

© Коллектив авторов, 2024

© Тверской государственный университет, 2024

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ

Самсонов Владимир Михайлович – профессор кафедры общей физики ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет», профессор, д.ф.-м.н. (главный редактор), Тверь, Россия

Сдобняков Николай Юрьевич – доцент кафедры общей физики ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет», д.ф.-м.н., доцент (заместитель главного редактора, ответственный секретарь), Тверь, Россия

Алымов Михаил Иванович – директор ФГБУН «Институт структурной макрокинетики и проблем материаловедения имени А.Г. Мержанова Российской академии наук», член-корреспондент Российской академии наук, профессор, д.т.н., Москва, Россия

Базулев Анатолий Николаевич – доцент кафедры общей физики ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет», к.ф.-м.н., доцент, Тверь, Россия

Байдаков Владимир Георгиевич – научный руководитель ФГБУН «Институт теплофизики УрО РАН», профессор, д.ф.-м.н., Екатеринбург, Россия

Белов Алексей Николаевич – профессор Института интегральной электроники ФГАОУ ВО «Национальный исследовательский университет «Московский институт электронной техники», д.т.н., Москва, Россия

Борознина Наталья Павловна – доцент, профессор кафедры судебной экспертизы и физического материаловедения ФГАОУ ВО «Волгоградский государственный университет», д.ф.-м.н., Волгоград, Россия

Бродская Елена Николаевна – ведущий научный сотрудник отдела коллоидной химии, руководитель группы «Компьютерное моделирование: структура и термодинамические свойства» Института химии ФГБОУ ВО «Санкт-Петербургский государственный университет», член-корреспондент РАН, профессор, д.ф.-м.н., Санкт-Петербург, Россия

Володин Владимир Алексеевич – ведущий научный сотрудник лаборатории функциональной диагностики низкоразмерных структур для нанoeлектроники ФГБУН «Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН», доцент, профессор, д.ф.-м.н., Новосибирск, Россия

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

Гельчинский Борис Рафаилович – руководитель отдела материаловедения ФГБУН «Институт металлургии УрО РАН», д.ф.-м.н., Екатеринбург, Россия

Дулесов Александр Сергеевич – профессор кафедры цифровых технологий и дизайна Инженерно-технологического института ФГБОУ ВО «Хакасский государственный университет имени Н.Ф. Катанова», доцент, д.т.н., Абакан, Россия

Kaplay George – Doctor of Science, Vice-director of the University of Miskolc, Miskolc, Hungary

Карамурзов Барасби Сулейманович – советник Президента Российского союза ректоров, академик Российской академии образования, д.т.н., профессор, Нальчик, Россия

Коваль Николай Николаевич – главный научный сотрудник лаборатории плазменной эмиссионной электроники ФГБУН «Институт сильноточной электроники СО РАН», д.т.н., профессор, Томск, Россия

Комаров Павел Вячеславович – ведущий научный сотрудник лаборатории физической химии полимеров ФГБУН «Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова Российской академии наук», д.ф.-м.н., доцент, Москва, Россия

Ларин Сергей Владимирович – заместитель директора по научной работе ФГБУН «Институт высокомолекулярных соединений Российской академии наук», к.ф.-м.н., Санкт-Петербург, Россия

Ложкомоев Александр Сергеевич – ведущий научный сотрудник, заведующий лабораторией нанобиоинженерии ФГБУН «Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук», д.т.н., Томск, Россия

Мирзоев Александр Аминулаевич – главный научный сотрудник, профессор кафедры физики наноразмерных систем ФГАОУ ВО «Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет)», д.ф.-м.н., Челябинск, Россия

Носков Борис Анатольевич – профессор кафедры коллоидной химии, Институт химии ФГБОУ ВО «Санкт-Петербургский государственный университет», д.х.н., Санкт-Петербург, Россия

Полоцкий Алексей Александрович – ведущий научный сотрудник лаборатории № 7 – теории и моделирования полимерных систем ФГБУН «Институт высокомолекулярных соединений РАН», д.ф.-м.н., профессор РАН, Санкт-Петербург, Россия

Попель Петр Станиславович – профессор кафедры физики, технологии и методики обучения физике и технологии ФГБОУ ВО «Уральский государственный педагогический университет», профессор, д.ф.-м.н., Екатеринбург, Россия

Ребров Евгений Викторович – Professor of Chemical Engineering, School of Engineering, University of Warwick, д.т.н., профессор, Coventry, United Kingdom

Русанов Анатолий Иванович – Академик Российской академии наук, заведующий кафедрой коллоидной химии ФГБОУ ВО «Санкт-Петербургский государственный университет», д.х.н., Санкт-Петербург, Россия

Саравана Кумар – научный сотрудник института производственных технологий национального Тайбэйского технологического университета, Ph. D., Тайбей, Тайвань

Сехат Али Акбари – научный сотрудник кафедры материаловедения и инженерии Университета Вирджинии, Ph. D., Шарлотсвилл, США

Скворцова Зоя Николаевна – заведующая лабораторией физико-химической механики твердых тел кафедры коллоидной химии химического факультета ФГБОУ ВО «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова», профессор, д.х.н., Москва, Россия

Sobczak Natalia – Doctor of Science, professor, Head of the Department of Metallurgical Processes at the Institute of Metallurgy and Materials Sciences of Polish Academy of Sciences, Krakow, Poland

Старов Виктор Михайлович – Visiting professor of the department of chemical engineering Loughborough University, Professor, Dr. Sci., Loughborough, Great Britain

Страумал Борис Борисович – заведующий лабораторией поверхностей раздела в металлах ФГБУН «Институт физики твердого тела РАН», д.ф.-м.н. профессор, Черноголовка, Россия

Сультман Михаил Геннадьевич – заведующий кафедрой биотехнологии, химии и стандартизации ФГБОУ ВО «Тверской государственный технический университет», профессор, д.х.н., Тверь, Россия

Тарасевич Юрий Юрьевич – заведующий лабораторией «Математическое моделирование и информационные технологии в науке и образовании» ФГБОУ ВО «Астраханский государственный университет», профессор, д.ф.-м.н., Астрахань, Россия

Терещенко Олег Евгеньевич – заведующий лабораторией физики и технологии гетероструктур ФГБУН «Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН», профессор РАН, д.ф.-м.н., Новосибирск, Россия

Углов Владимир Васильевич – заведующий кафедрой физики твердого тела и нанотехнологий физического факультета Белорусского государственного университета, д.ф.-м.н., профессор, Минск, Беларусь

Хохлов Алексей Ремович – Академик Российской академии наук, профессор, заведующий Лабораторией физической химии полимеров Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Институт элементоорганических соединений им. А. Н. Несмеянова Российской академии наук»; заведующий кафедрой физики полимеров и кристаллов ФГБОУ ВО «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова», д.ф.-м.н., Москва, Россия

Цыбуля Сергей Васильевич – заведующий кафедрой физических методов исследования твердого тела ФГАОУ ВО «Новосибирский национальный исследовательский государственный университет», д.ф.-м.н., профессор, Новосибирск, Россия

Соколов Денис Николаевич – технический редактор, научный сотрудник кафедры общей физики ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет», к.ф.-м.н., Тверь, Россия

EDITORIAL BOARD

Vladimir M. Samsonov – Chief editor, Full Professor at the General Physics Department, Tver State University, Dr. Sci., Tver, Russia

Nikolay Yu. Sdobnyakov – Deputy editor, executive secretary of the Editorial Board, Associate Professor at the General Physics Department, Tver State University, Docent, Dr. Sci., Tver, Russia

Mikhail I. Alymov – Director of the Merzhanov Institute of Structural Macrokinetics and Materials Science RAS, Corresponding Member of RAS, Professor, Dr. Sci., Moscow, Russia

Anatoly N. Bazulev – Associate Professor at the General Physics Department, Tver State University, Docent, Ph. D., Tver, Russia

Vladimir G. Baidakov – Scientific advisor of the Institute of thermal physics Ural Branch of RAS, Dr. Sci., Professor, Ekaterinburg, Russia

Alexey N. Belov – Professor of the Institute of Integrated Electronics, National Research University of Electronic Technology, Dr. Sci., Professor, Moscow, Russia

Natalya P. Boroznina – Professor of the Department of Forensic Examination and Physical Materials Science of the Volgograd State University, Dr. Sci., Associate Professor, Volgograd, Russia

Elena N. Brodskaya – Principal researcher of the Department of Colloid Chemistry, Head of the Computer Modeling: structure and thermodynamic properties group of the Institute of Chemistry of the St. Petersburg State University, Dr. Sci., Professor, St. Petersburg, Russia

Vladimir A. Volodin – Leading Researcher of the Laboratory of Functional Diagnostics of Low-Dimensional Structures for Nanoelectronics, Rzhzanov Institute of Semiconductor Physics, Siberian Branch of RAS, docent, professor, Dr. Sci., Novosibirsk, Russia

Yuri Ya. Gafner – Chief of the Department of Mathematics, Physics and Information Technology, Katanov Khakass State University, Professor, Dr. Sci., Abakan, Russia

Boris R. Gelchinski – Head of Material Science Department, Institute of Metallurgy, Ural Division of the RAS, Dr. Sci., Ekaterinburg, Russia

Alexander S. Dulesov – Full Professor at the Department of Digital Technologies and Design of the Institute of Engineering and Technology, N.F. Katanov Khakas State University, Professor, Dr. Sci., Abakan, Russia

George Kaptay – Doctor of Science, Vice-director of the University of Miskolc, Miskolc, Hungary

Barasbi S. Karamurзов – Advisor to the President of the Russian Union of Rectors, academician of RAE, Dr. Sci., Professor, Nalchik, Russia

Nickolay N. Koval' – Chief Scientist of the Laboratory of Plasma Emission Electronics, Institute of High Current Electronics Siberian Branch of RAS, Dr. Sci., Professor, Tomsk, Russia

Pavel V. Komarov – Principal Researcher, Laboratory of Physical Chemistry of Polymers, Institute of Organoelement Compounds of RAS, Associate Professor, Dr. Sci., Moscow, Russia

Sergey V. Larin – Vice Director of the Institute of Macromolecular Compounds of RAS, Ph. D., St. Petersburg, Russia

Alexander S. Lozhkomoev – Leading Researcher, Head of the Laboratory of Nanobioengineering, Institute of Strength Physics and Materials Science of Siberian Branch of RAS, Dr. Sci., Tomsk, Russia

Alexander A. Mirzoev – Chief Researcher, Professor of the Department of Physics of Nanoscale Systems, South Ural State University (National Research University), Dr. Sci., Chelyabinsk, Russia

Boris A. Noskov – Professor of the Department of Colloidal Chemistry, Institute of Chemistry, St. Petersburg State University, Dr. Sci., St. Petersburg, Russia

Alexey A. Polotsky – Principal researcher of Laboratory No. 7 of Theory and Modeling of Polymer Systems, Institute of macromolecular compounds of RAS, Dr. Sci., St. Petersburg, Russia

Petr S. Popel – Full Professor at the Physics, Technology and Methods of Teaching Physics and Technology Department, Ural State Pedagogical University, Professor, Dr. Sci., Ekaterinburg, Russia

Evgenii V. Rebrov – Professor of Chemical Engineering, School of Engineering, University of Warwick, Dr. Sci., Professor, Coventry, U.K.

Anatoly I. Rusanov – Head of the Colloid Chemistry Department, St. Petersburg University, Academician of RAS, Professor, Dr. Sci., St. Petersburg, Russia

M. Saravana Kumar – Post Doctoral Research Associate, Graduate Institute of Manufacturing Technology, National Taipei University of Technology, Ph. D., Taipei, Taiwan

Ali Akbari Sehat – Research Associate, Materials Science and Engineering Department, University of Virginia, Ph. D., Charlottesville, USA

Zoya N. Skvortsova – Full Professor at the Colloid Chemistry Department, M.V. Lomonosov Moscow State University, Professor, Dr. Sci., Moscow, Russia

Natalia Sobczak – Doctor of Science, professor, Head of the Department of Metallurgical Processes at the Institute of Metallurgy and Materials Sciences of Polish Academy of Sciences, Krakow, Poland

Victor M. Starov – Visiting professor of the department of chemical engineering Loughborough University, Professor, Dr. Sci., Loughborough, Great Britain

Boris B. Straumal – Head of the Laboratory of Internal Boundaries in Metals, Institute of Solid State Physics of RAS, Dr. Sci., Professor, Chernogolovka, Russia

Mikhail G. Sulman – Head of the Department of Biotechnology, Chemistry and Standardization, Tver State Technical University, Dr. Sci., Professor, Tver, Russia

Yuri Yu. Tarasevich – Head of the Laboratory of Mathematical Modeling and Information Technologies in Science and Education, Astrakhan State University, Professor, Dr. Sci., Astrakhan, Russia

Oleg E. Tereshchenko – Head of the Laboratory of Physics and Technology of Heterostructures, Rzhanov Institute of Semiconductor Physics, Siberian Branch of RAS, Professor of RAS, Dr. Sci., Novosibirsk, Russia

Vladimir V. Uglov – Chief of the Department of Solid State Physics and Nanotechnologies, Belarusian State University, Dr. Sci., Professor, Minsk, Belarus

Alexei R. Khokhlov – Head of the Laboratory for Physical Chemistry of Polymers, A. N. Nesmeyanov Institute of Organoelement Compounds of RAS, Head of the polymer and crystal department of Moscow State University, Member of RAS, Dr. Sci., Professor, Moscow, Russia

Sergey V. Tsybulya – Head of the Department of Physical Methods of Solid State Research, Novosibirsk National Research State University, Dr. Sci., Professor, Novosibirsk, Russia

Denis N. Sokolov – Technical editor, Researcher, General Physics Department, Tver State University, Ph. D., Tver, Russia

УДК 536.421.1 + 536.911

Оригинальная статья

О стабильности и релаксации структуры металлических наноклеток

Д.Н. Соколов, В.С. Мясниченко, О.В. Полев, К.Г. Савина, Н.Ю. Сдобняков

ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

170002, Россия, Тверь, Садовый пер., 35

nsdobnyakov@mail.ru

DOI: 10.26456/pcascnn/2024.16.543

Аннотация: Рассмотрена проблема термической стабильности моно- и бинарных металлических наноклеток, состоящих из атомов золота и серебра с одинаковой нуклеарностью в 3000 атомов. Начальные конфигурации наноклеток были получены в ПО ClusterEvolution путём вырезания из икосаэдра большего размера. Моделирование процесса нагрева для исследования термической стабильности/нестабильности было проведено в ПО Metropolis, использовался метод Монте-Карло и схема Метрополиса. Межатомное взаимодействие описывалось потенциалом сильной связи. Исследовано влияние состава, характерных размеров (внутреннего и внешнего радиусов), а также формы внутренней поверхности в начальной конфигурации на термическую стабильность наноклеток. Определена температура полного коллапса внутренней полости наноклеток. Представлены и проанализированы результаты расчётов температурной зависимости средней локальной плотности и профили локальной плотности при различных температурах, соответствующие различным начальным конфигурациям, а также температурная эволюция долей кристаллических структур в них.

Ключевые слова: атомистическое моделирование, метод Монте-Карло, потенциал сильной связи, металлические наноклетки, термическое воздействие, стабильность/нестабильность, локальная плотность, кристаллические фазы.

1. Введение

Прогресс в развитии нанотехнологий расширяет и круг возможных объектов исследования, имеющих уникальные физико-химические свойства. В последние годы одним из таких «новых» объектов исследования являются металлические наноклетки [1-4]. В частности, наноклетки, состоящие из атомов (одного или нескольких) благородных металлов, являются перспективными объектами исследований, в том числе за счёт возможного их применения в катализе, медицине и других областях нанотехнологий. Основная особенность металлических наноклеток заключается в наличии некоторого остова и полостей как в центральной части наноклетки, так и на гранях её поверхности. Одним из основных факторов, препятствующих широкому практическому распространению таких объектов является необходимость обеспечения их стабильности по отношению к деградации структуры во всём исследуемом диапазоне температур. С прогностической точки зрения компьютерное моделирование структуры и структурных превращений в металлических наноклетках может успешно дополнить лабораторный эксперимент. При этом необходимо решить две подготовительные задачи. Первая задача состоит в адекватном подборе параметров расчётной схемы для

прогнозирования свойств и определения характеристик наноклеток [5]. Вторая задача заключается в задании диапазона (размерного, температурного и т.д.) для металлических наноклеток для исследования их стабильности и релаксации структуры. Следуя [5], с учетом достаточной апробации метода Монте-Карло [6] для изучения структуры и структурных превращений в моно- и бинарных металлических наночастицах [7-11], в данной работе акцент будет смещен на более глубокое изучение условий, при которых металлические наноклетки являются структурно стабильными, а также физических механизмов, доминирующих в процессе их релаксации. Очевидно, что свойства и практическое применение наноклеток (объектов, имеющих в структуре искусственные поры различной конфигурации) будут зависеть от температурного диапазона стабильности их структуры, последовательности её частичной (залечивание внутренних полостей или полостей на поверхности) или полной деградации. Наличие подтверждённого диапазона структурной стабильности наноклеток открывает перспективы их использования как рабочих элементов лекарственных средств [12, 13] или катализе [14].

В отличие от [5] в данной работе объекты исследования представляют собой не пористые наночастицы с отверстиями на всех гранях, а имеют замкнутую поверхность. В литературе для таких частиц также встречается термин *hollow core – shell* [15, 16]. С точки зрения термической стабильности нас будет интересовать процесс коллапса [16] внутренней полости наноклеток, а также процесс релаксации их структуры. Это связано с тем, что одним из важных критериев термической стабильности моно- и бинарных металлических наноклеток является толщина их стенок [17, 18].

2. Методика построения начальных конфигураций и параметры компьютерного эксперимента

В данной работе объектами исследования были выбраны моно- и бинарные сферические наноклетки, состоящие из атомов золота и серебра и обладающие одинаковой нуклеарностью, равной 3000 атомов. Все начальные конфигурации наноклеток были получены в ПО ClusterEvolution [19] путём вырезания из базового икосаэдра в 10179 атомов. При этом использовалось два набора начальных конфигураций: набор 1 соответствует конфигурациям после процедуры релаксации в ПО ClusterEvolution [19] (цифровой индекс введен для удобства различать наноклетки по их параметрам); набор 2, который не подвергался релаксации (структуры, отмеченные индексом s2, соответствуют более низкой минимальной координации атомов на внутренней поверхности по сравнению с типом структур s1). Использование сразу двух наборов

начальных конфигураций позволяет тщательно исследовать закономерности проявления стабильности/нестабильности наноклеток.

Геометрические характеристики, описывающие начальные конфигурации, приведены в Таблице 1. Используемые в Таблице 1 обозначения: R_{in} , R_{out} – внутренний и внешний радиусы наноклетки, R_g – радиус гирации наноклетки с учётом атомных масс, S , V_{in} – общая площадь поверхности (включает площади поверхности по внешнему и внутреннему радиусам) и объем полости соответственно.

Таблица 1. Геометрические параметры моно- и бинарных наноклеток.

Набор	Наноклетка	R_{in} , Å	R_{out} , Å	R_g , Å	S , нм ²	V_{in} , нм ³
1	Au_1	9,41	23,40	18,66	84,58	3,51
	Au_2	12,00	24,02	19,61	98,65	7,56
	Au_3	15,10	25,00	20,85	112,45	14,29
	Au_4	17,20	25,88	22,28	136,12	22,23
	Ag_1	9,50	23,49	18,75	85,80	3,54
	Ag_2	12,05	24,12	19,70	99,61	7,61
	Ag_3	15,18	25,11	20,93	113,67	14,42
	Ag_4	17,30	25,99	22,38	137,72	22,69
	$Au-Ag_1$	9,49	23,49	19,00	87,35	3,53
	$Au-Ag_2$	12,03	24,10	19,58	98,29	7,58
	$Au-Ag_3$	14,82	24,86	20,75	111,60	13,66
	$Au-Ag_4$	17,32	25,85	22,27	135,60	22,32
2	Au_{1s1}	6,97	23,06	17,97	76,05	1,43
	Au_{2s2}	8,40	23,12	18,32	80,75	2,68
	Au_{3s2}	10,95	23,35	18,90	88,98	5,42
	Au_{4s1}	19,50	26,75	23,38	142,10	33,00
	Ag_{1s1}	7,11	23,19	18,05	77,09	1,49
	Ag_{2s2}	8,90	23,23	18,36	81,99	2,96
	Ag_{3s2}	11,00	23,55	18,98	90,10	5,58
	Ag_{4s1}	19,90	27,28	23,94	147,14	33,39
	$Au-Ag_{1s1}$	7,17	23,20	18,03	76,95	1,45
	$Au-Ag_{2s2}$	8,95	23,27	18,33	81,65	3,00
	$Au-Ag_{3s2}$	10,87	23,61	18,99	89,92	5,42
	$Au-Ag_{4s1}$	19,98	27,34	23,94	146,70	33,56

Таблица 2. Параметры потенциала сильной связи.

Тип связи	A , эВ	ζ , эВ	p	q	r_0 , Å
<i>Au</i>	0,2061	1,790	10,229	4,036	2,8838
<i>Ag</i>	0,1028	1,178	10,928	3,139	2,8890
<i>Au – Ag</i>	0,1456	1,452	10,579	3,588	2,8864

Для проведения компьютерного моделирования процесса нагрева использовалось ПО Metropolis [20], в котором реализован атомистический метод Монте-Карло с алгоритмом Метрополиса [21]. Взаимодействие между атомами описывалось потенциалом сильной связи [22], параметры которого приведены в Таблице 2. Перекрёстные параметры были найдены с использованием правила Лоренца-Бертло, апробированного в [23, 24].

Исследование термической стабильности наноклеток можно проводить на основе анализа поведения калорических зависимостей удельной потенциальной энергии. Для получения таких калорических зависимостей производился нагрев наноклеток от температуры 300 К до 1200 К с шагом 10 К (общее число шагов – 10^8 , число шагов для релаксации – $9 \cdot 10^7$).

Для анализа структуры и верификации структурных изменений, в том числе коллапса структуры как полного залечивания полости, используется ПО Ovito [25]. В частности, именно ПО Ovito позволяет идентифицировать различия в структуре внутренней поверхности, описанных выше типов s1 и s2 (см. рис. 1).

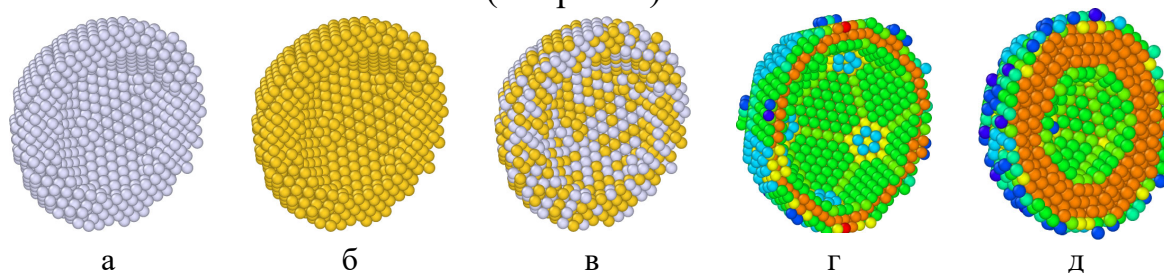


Рис. 1. Примеры начальных конфигураций (а, б, в – конфигурации соответствует набору 1 наноклеток с максимальным внешним радиусом, здесь серые атомы – серебро, желтые – золота; г, д – конфигурации, полученные использованием инструмента coordination analysis [25], цвет обозначает координационное число; конфигурациям на вкладках г – $Au - Ag_{4s1}$ и д – $Au - Ag_{4s2}$ отвечает среднее координационное число 9,85 и 10,82 соответственно).

3. Обсуждение результатов

На рис. 2 представлены калорические зависимости удельной потенциальной энергии для моно- и бинарных наноклеток. Интерес представляет температурный интервал до температуры плавления (очевидно, что данная температура за счёт размерного эффекта [26] ниже

макроскопической). Любые резкие изменения удельной потенциальной энергии до температуры плавления, отвечающей выбранному размеру, можно интерпретировать, прежде всего, как изменение структуры наноклетки, в том числе и как коллапс наноклетки. В качестве примера на рис. 3 приведена эволюция структуры наноклеток, а в Таблице 3 представлены значения температур, отвечающие коллапсу наноклетки (т.е. полному залечиванию её внутренней полости). Именно эта температура определяет температурный интервал стабильности наноклетки и отвечает технологической границе её использования. Выше данной температуры, наноклетка превращается в наночастицу, термоиндуцированные превращения в которой происходят с учётом размерного эффекта термодинамических характеристик [24, 26].

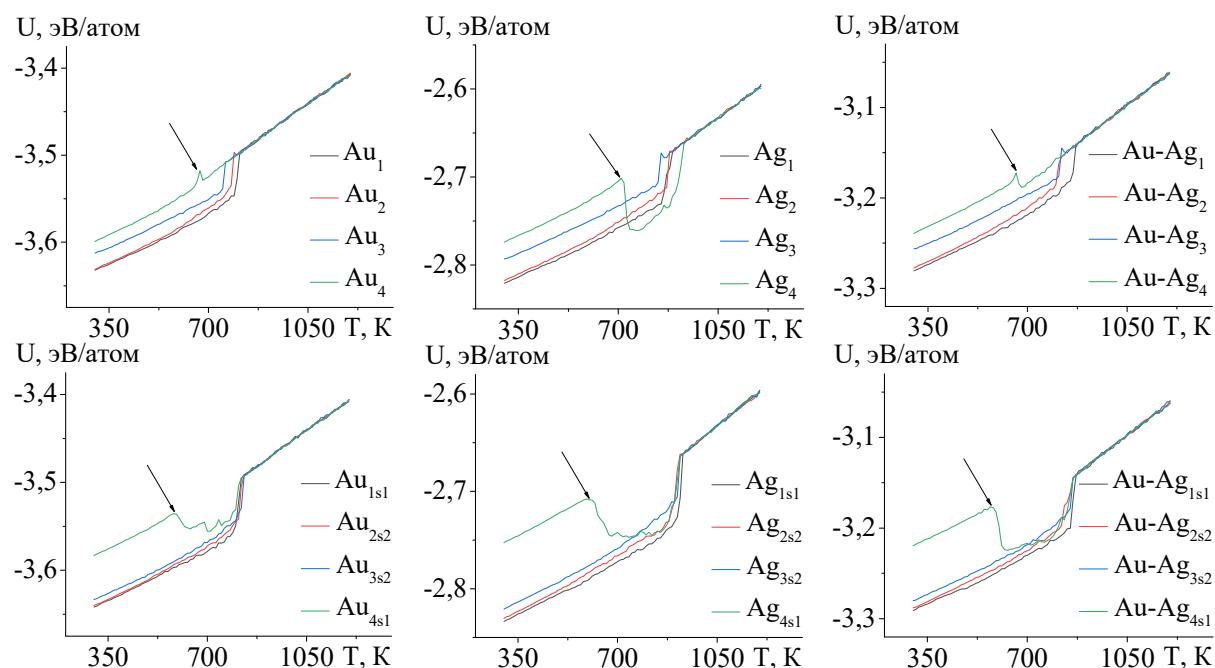


Рис. 2. Калорические зависимости удельной потенциальной энергии (стрелкой указаны примеры характерных резких изменений в поведении зависимостей).

Анализ значений T_c показывает, что для набора 1 данная температура для наноклеток серебра выше, чем для наноклеток золота при соответствующих размерах полости. При этом для бинарных наноклеток толщиной до 9 Å значения T_c смещаются ближе к величине температуры, соответствующей наноклеткам золота, а с увеличением их толщины – к величине соответствующей наноклеткам серебра. В то же время, если для наноклеток золота с уменьшением толщины наноклетки температура коллапса уменьшается, то для наноклеток серебра и бинарных наноклеток зависимость носит немонотонный характер. Если для наибольшей толщины, т.е. конфигураций Ag_1 и $Au-Ag_1$ температуры коллапса

совпадают, то в случае наименьшей толщины достаточно близкими становятся температуры коллапса для конфигураций Au_4 и $Au-Ag_4$.

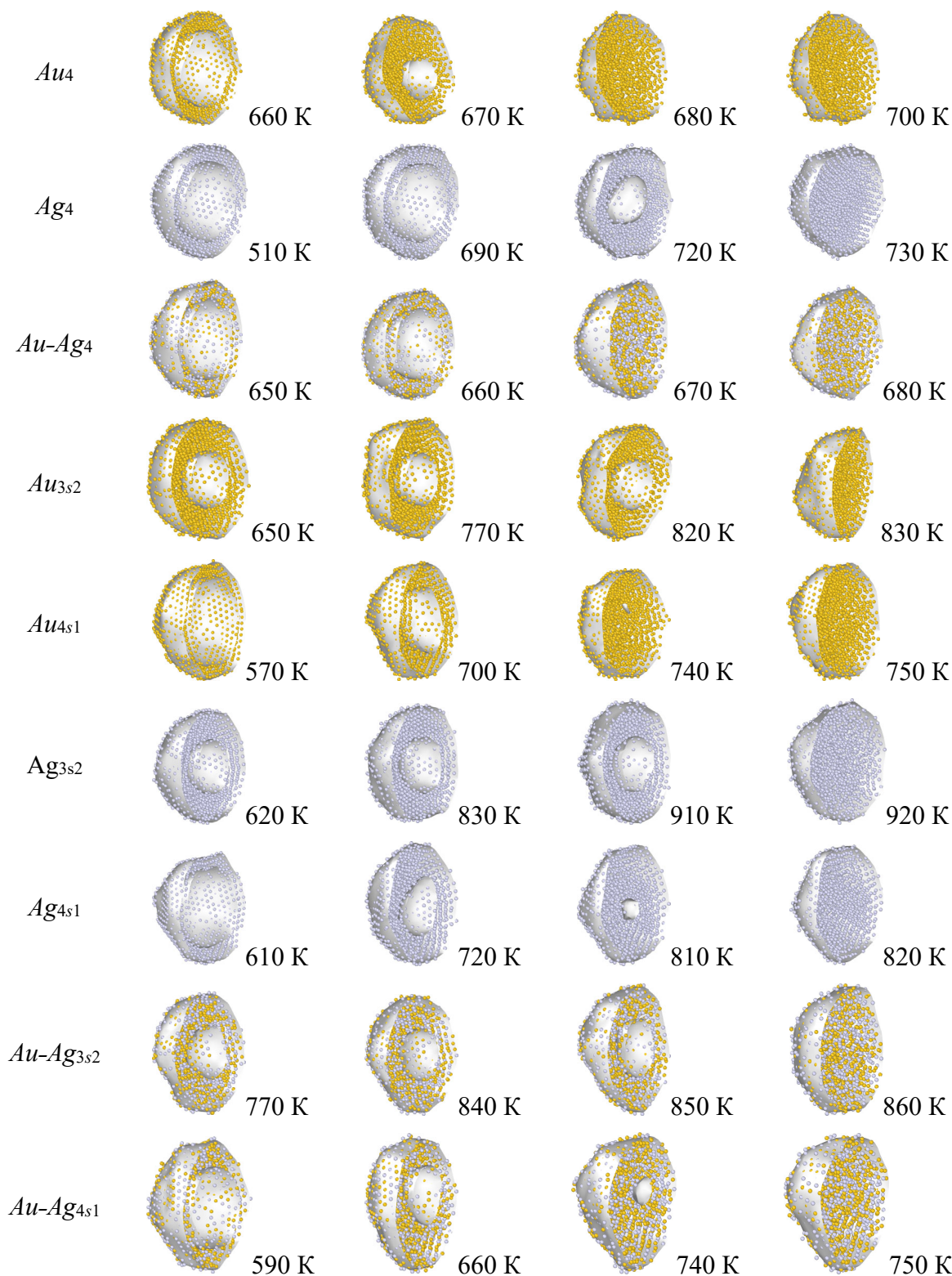


Рис. 3. Эволюция структуры наноклеток при термическом воздействии (положение наноклетки в сечении выбрано с учётом лучшей визуализации полости, а также применён модификатор surface mesh [25], размер атомов уменьшен до 50%).

Таблица 3. Температура коллапса внутренней полости наноклеток T_c .

Наноклетка	$h = R_{out} - R_{in}, \text{\AA}$	T_c, K	Наноклетка	$h = R_{out} - R_{in}, \text{\AA}$	T_c, K
Au_1	13,99	810	Au_{1s1}	16,09	590
Au_2	12,02	790	Au_{2s2}	14,72	820
Au_3	9,90	770	Au_{3s2}	12,40	830
Au_4	8,68	680	Au_{4s1}	6,95	740
Ag_1	13,99	870	Ag_{1s1}	16,08	520
Ag_2	12,07	890	Ag_{2s2}	14,33	820
Ag_3	9,93	860	Ag_{3s2}	12,55	920
Ag_4	8,69	730	Ag_{4s1}	7,38	810
$Au - Ag_1$	14,00	870	$Au - Ag_{1s1}$	16,03	480
$Au - Ag_2$	12,07	820	$Au - Ag_{2s2}$	14,32	830
$Au - Ag_3$	10,04	830	$Au - Ag_{3s2}$	12,74	860
$Au - Ag_4$	8,53	670	$Au - Ag_{4s1}$	7,36	750

Для набора 2 ситуация несколько меняется. Например $T_c(Au_{1s1}) > T_c(Ag_{1s1})$, хотя с уменьшением толщины наноклетки неравенство меняет знак. Но при этом обе зависимости носят немонотонный характер по отношению к толщине наноклетки. Структура $Au - Ag_{1s1}$ является самой термически нестабильной, коллапс происходит уже при 480 К, что существенно ниже температуры для конфигураций Au_{1s1} и Ag_{1s1} . Примечательно, что для набора 2 конфигурациям типа Au_{3s2} , Ag_{3s2} , $Au - Ag_{3s2}$ соответствует наибольшее значение T_c , а самой термически стабильной является конфигурация Ag_{3s2} . Отметим, что в целом диапазон термической стабильности для исследованных типов структур (в данном случае величина T_c характеризует полный переход от наноклетки к наночастице) является достаточно широким для их технологического использования (напомним, что начальные конфигурации нагревались от температуры в 300 К).

Кроме того, представляет интерес изучение самого процесса залечивания полости в наноклетке. Этот процесс может иметь ступенчатый характер, т.е. характеризоваться резкими изменениями формы полости, её объёма, а также локальной структуры, образуемой атомами стенки

наноклетки. В качестве примера на рис. 4 показана структурная трансформация в процессе залечивания поры в наноклетке Au_{4s1} . Видно, что по мере деградации полости кристаллическая структура наночастицы восстанавливается. Доминируют в данном случае ГЦК и ГПУ структуры.

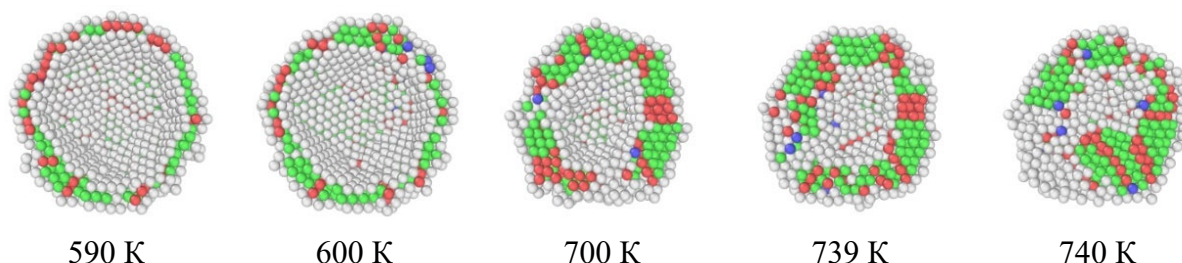


Рис. 4. Структурная эволюция наноклетки Au_{4s1} при термическом воздействии. Зеленые атомы образуют ГЦК структуру, красные – ГПУ, синие – ОЦК, желтые – ИК ядра, белые атома являются нераспознанными ПО [25].

С целью анализа соотношения кристаллических структур в наноклетках Au_4 и Au_{4s1} до коллапса и в дальнейшем в полученной наночастице до температуры плавления построены соответствующие диаграммы (см. рис. 5). Для наноклетки Au_4 температура коллапса фактически совпадает с температурой плавления (резкий спад доли кристаллических структур на рис. 5 а). В диапазоне 700-800 К в наночастице присутствуют не более 3% кристаллических фаз. При этом для наноклетки Au_{4s1} видно, что в том же температурном диапазоне 700-800 К активно происходит процесс структурообразования. При этом после коллапса наноклетки Au_{4s1} (740 К) доля кристаллических структур даже несколько возрастает. При температуре 800-810 К происходит плавление наночастицы, полученной в результате коллапса наноклетки Au_{4s1} .

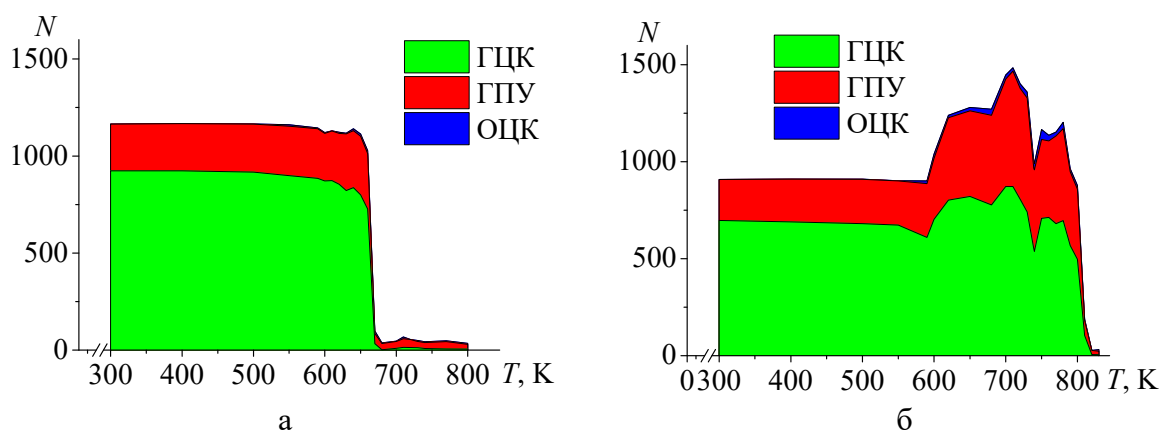


Рис. 5. Диаграмма изменения числа распознанных атомов N , образующих кристаллические структуры в наноклетках а – Au_4 , б – Au_{4s1} .

Очевидно, что изучение средней величины и профиля локальной

плотности может дать дополнительную информацию о структурных превращениях в наноклетках. Приведенная локальная плотность наноклетки в зависимости от расстояния до центра инерции может быть определена с помощью соотношения

$$\rho^* = \rho a^3 = \Delta N(r) / \Delta V(r) \cdot a^3,$$

где $\Delta N(r)$ – количество атомов в объеме $\Delta V(r) = V(r + \Delta r) - V(r)$, r – радиальная координата, т.е. расстояние от геометрического центра частицы, совпадающего с её центром масс, a – эффективный атомный диаметр.

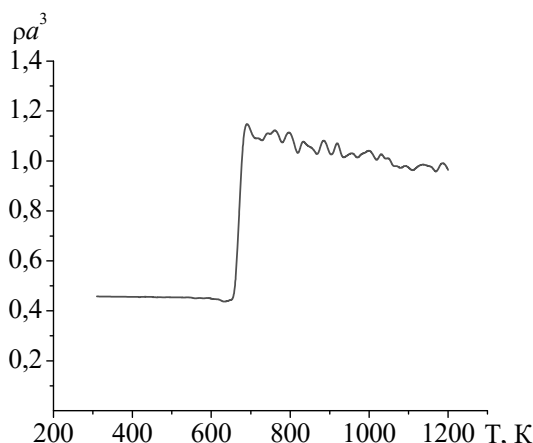


Рис. 5. Температурная зависимость средней локальной плотности наноклетки Au_4 , расчёт по всему объему включая пору НК.

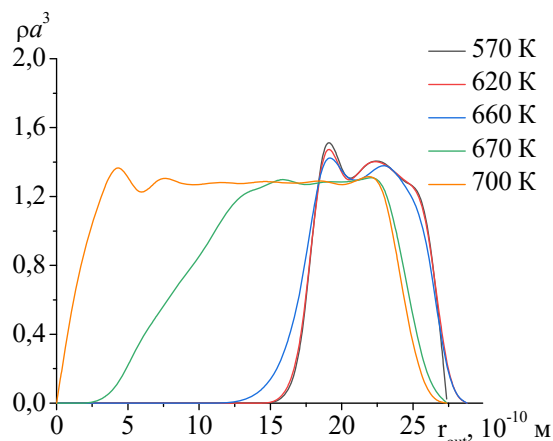


Рис. 6. Изменение профиля локальной плотности при различных температурах для наноклетки Au_4 .

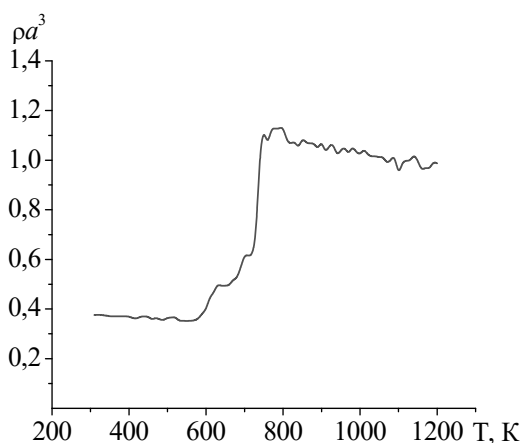


Рис. 7. То же для Au_{4s1} .

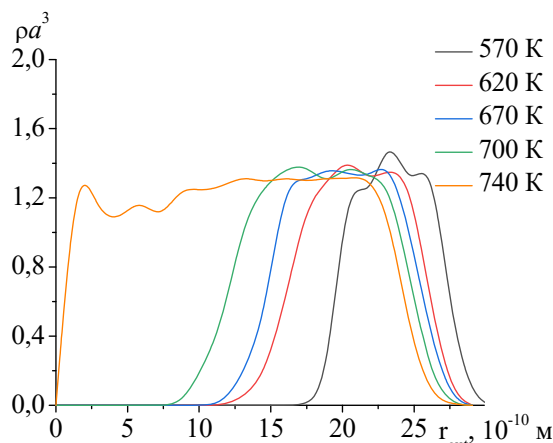


Рис. 8. То же для Au_{4s1} .

На рис. 5, 7 представлены расчеты средней локальной плотности на примере наноклетки золота. График позволяет идентифицировать фазовый переход, отвечающий плавлению, а также установить температурный диапазон, в котором можно считать, что наноклетка структурно стабильна.

Для более глубокого изучения эволюции структуры наноклетки, в том числе в близком к температуре плавления диапазоне, имеет смысл изучение распределения локальной плотности (см. рис. 6, 8) по расстоянию от центра масс наноклетки. Сравнение зависимостей, представленных на рис. 5-8, позволяет оценить степень влияния форм начальных конфигураций (одинаковой нуклеарности и близкой толщины) на эволюцию структуры НК в процессе термоиндуцированного воздействия.

Видно, что температурные зависимости средней локальной плотности и профили локальной плотности при различных температурах, соответствующие начальным конфигурациям Au_4 и Au_{4s1} , имеют некоторые отличия. В частности, начальные значения приведённой плотности для конфигураций Au_4 ($\rho a^3 > 0,4$) и Au_{4s1} ($\rho a^3 < 0,4$) несколько отличаются, но при этом при температуре $T=1200$ К как и следовало ожидать стремятся к значению $\rho a^3 \sim 1$. Что касается профилей локальной плотности при различных температурах, то они отличаются количеством локальных экстремумов, в случае твёрдой фазы соответствующих атомным слоям. Ширина профиля наглядно показывает толщину наноклетки, а расположение левой границы профиля – наличие в ней поры при данной температуре.

Таким образом, форма и размер внутренней поверхности, а также толщина наноклетки (количество полных атомных слоёв) могут быть факторами, управляющими по отношению к температурному диапазону структурной стабильности полой наноклетки. При этом форма (заполненность атомных слоёв) внешней поверхности на термическую стабильность наноклетки влияет в меньшей степени.

4. Заключение

Полученные результаты позволяют прогнозировать соотношения между размером моно- и бинарных наноклеток и температурным интервалом их структурной стабильности. Механизм релаксации связан с последовательностью деградации внутренней структуры (залечивание внутренней полости, миграция объемных пор) и внешней поверхности (разрушение пор на гранях). В дальнейшем интерес представляет сравнение механизмов деградации наноклеток и таких структур, как полое ядро-оболочка (hollow core-shell) [15] и выяснение степени влияния полостей в гранях на температурный диапазон структурной стабильности металлических наноклеток.

Исследования выполнены при поддержке Минобрнауки РФ в рамках выполнения государственного задания в сфере научной деятельности (проект № 0817-2023-0006).

Библиографический список:

1. **Skrabalak, S.E.** Gold nanocages: synthesis, properties, and applications / S.E. Skrabalak, J. Chen, Y. Sun et al. // *Accounts of Chemical Research*. – 2008. – V. 41. – I. 12. – P. 1587-1595. DOI: 10.1021/ar800018v.
2. **Skrabalak, S.E.** Facile synthesis of Ag nanocubes and Au nanocages / S.E. Skrabalak, L. Au, X. Li, Y. Xia // *Nature Protocols*. – 2007. – V. 2. – I. 9. – P. 2182-2190. DOI: 10.1038/nprot.2007.326.
3. **Zhang, Y.** Seed-mediated synthesis of Au nanocages and their electrocatalytic activity towards glucose oxidation / Y. Zhang, F. Xu, Y. Sun et al. // *Chemistry – A European Journal*. – 2010. – V. 16. – I. 30. – P. 9248-9256. DOI: 10.1002/chem.200903552.
4. **Lu, X.** Fabrication of cubic nanocages and nanoframes by dealloying Au/Ag alloy nanoboxes with an aqueous etchant based on $\text{Fe}(\text{NO}_3)_3$ or NH_4OH / X. Lu, L. Au, J. McLellan et al. // *Nano Letters*. – 2007. – V. 7. – I. 6. – P. 1764-1769. DOI: 10.1021/nl070838l.
5. **Соколов, Д.Н.** О структурной стабильности моно- и бинарных металлических наноклеток / Д.Н. Соколов, О.В. Полев, В.С. Мясниченко, К.Г. Савина, Н.Ю. Сдобняков // *Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов*. – 2023. – Вып. 15. – С. 602-613. DOI: 10.26456/pcascnn/2023.15.602.
6. **Соколов, Д.Н.** Новые возможности высокопроизводительных расчетов наносистем с использованием программного обеспечения Metropolis / Д.Н. Соколов, Н.Ю. Сдобняков, К.Г. Савина и др. // *Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов*. – 2021. – Вып. 13. – С. 624-638. DOI: 10.26456/pcascnn/2021.13.624.
7. **Myasnichenko, V.** Simulated annealing method for metal nanoparticle structures optimization / V. Myasnichenko, L. Kirilov, R. Mikhov, S. Fidanova, N. Sdobnyakov // In: *Advanced Computing in Industrial Mathematics. BGSIAM 2017. Studies in Computational Intelligence*; ed. by K. Georgiev, M. Todorov, I. Georgiev. – 2019. – V. 793. – P. 277-289. DOI: 10.1007/978-3-319-97277-0_23.
8. **Myasnichenko, V.** Monte Carlo approach for modeling and optimization of one-dimensional bimetallic nanostructures / V. Myasnichenko, N. Sdobnyakov, L. Kirilov, R. Mikhov, S. Fidanova // *Lecture Notes in Computer Science. Conference paper: International Conference on Numerical Methods and Applications*, 20-24 August 2018. Borovets, Bulgaria. – 2019. – V. 11189. – P. 133-141. DOI: 10.1007/978-3-030-10692-8_15.
9. **Myasnichenko, V.** Structural instability of gold and bimetallic nanowires using Monte Carlo simulation / V. Myasnichenko, N. Sdobnyakov, L. Kirilov, R. Mikhov, S. Fidanova // In: *Recent Advances in Computational Optimization. Studies in Computational Intelligence*; ed. by S. Fidanova. – Cham: Springer, 2020. – V. 838. – P. 133-145. DOI: 10.1007/978-3-030-22723-4_9.
10. **Myasnichenko, V.** Representation of initial temperature as a function in simulated annealing approach for metal nanoparticle structures modeling / V. Myasnichenko, S. Fidanova, R. Mikhov, L. Kirilov, N. Sdobnyakov // *Advances in High Performance Computing. HPC 2019. In: Studies in Computational Intelligence*; ed. by I. Dimov, S. Fidanova. – Cham: Springer, 2021. – V. 902. – P. 61-72. DOI: 10.1007/978-3-030-55347-0_6.
11. **Mikhov, R.** Influence of the temperature on simulated annealing method for metal nanoparticle structures optimization / R. Mikhov, V. Myasnichenko, S. Fidanova, L. Kirilov, N. Sdobnyakov // *Advanced Computing in Industrial Mathematics. BGSIAM 2018. In: Studies in Computational Intelligence*; ed. by In: I. Georgiev, H. Kostadinov, E. Lilkova. – Cham: Springer, 2021. – V. 961. – P. 278-290. DOI: 10.1007/978-3-030-71616-5_25.
12. **Skrabalak, S.E.** Gold nanocages for cancer detection and treatment / S.E. Skrabalak, L. Au, X. Lu et al. // *Nanomedicine*. – 2007. – V. 2. – I. 5. – P. 657-668. DOI: 10.2217/17435889.2.5.657
13. **Chen, J.** Immuno gold nanocages with tailored optical properties for targeted photothermal destruction of cancer cells / J. Chen, D. Wang, J. Xi et al. // *Nano Letters*. – 2007. – V. 7. – I. 5. – P. 1318-1322. DOI: 10.1021/nl070345g.
14. **Zeng, J.** A comparison study of the catalytic properties of Au-based nanocages, nanoboxes, and nanoparticles / J. Zeng, Q. Zhang, J. Chen, Y. Xia // *Nano Letters*. – 2010. – V. 10. – I. 1. – P. 30-35. DOI: 10.1021/nl903062e.
15. **El-Toni, A.M.** Design, synthesis and applications of core-shell, hollow core, and nanorattle multifunctional nanostructures / A.M. El-Toni, M.A. Habila, J.P. Labis et al. // *Nanoscale*. – 2016. – V. 8. – I. 5. – P. 2510-2531. DOI: 10.1039/C5NR07004J.
16. **Huang, R.** Diverse melting modes and structural collapse of hollow bimetallic core-shell nanoparticles: a perspective from molecular dynamics simulations / R. Huang, G.-F. Shao, X.-M. Zeng, Y.-H. Wen // *Scientific Reports*. – 2014. – V. 4. – Art. № 7051. – 7 p. DOI: 10.1038/srep07051.
17. **Vara, M.** Understanding the stability of Pt-based nanocages under thermal stress using in situ electron microscopy / M. Vara, X. Wang, J. Howe et al. // *ChemNanoMat*. – 2018. – V. 4. – I. 1. – P. 112-117. DOI: 10.1002/cnma.201700298.
18. **Shao, S.** Understanding the impact of wall thickness on thermal stability of silver-gold nanocages / S. Shao,

- X. Zhu, V. Ten et al. // The Journal of Physical Chemistry C. – 2022. – V. 126. – I. 16. – P. 7337-7345. DOI: 10.1021/acs.jpcc.2c01433.
19. **Свидетельство № 2011615692 Российская Федерация.** Молекулярнодинамическое моделирование и биоинспирированная оптимизация бинарных и тройных металлических наноструктур (КластерЭволюшн) / В.С. Мясниченко; заявитель и правообладатель ФГБОУ ВО «Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова». – № 2011613732; заявл. 23.05.2011; зарегистрировано в реестре программ для ЭВМ 20.06.2011. – 1 с.
20. **Свидетельство № 2019661915 Российская Федерация.** Metropolis / Д.Н. Соколов, Н.Ю. Сдобняков, А.Ю. Колосов, П.М. Ершов, С.С. Богданов; заявитель и правообладатель Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Тверской государственный университет». – № 2019660847; заявл. 30.08.2019; зарегистрировано в реестре программ для ЭВМ 11.09.2019. – 1 с.
21. **Metropolis, N.** The Monte Carlo method / N. Metropolis, S. Ulam // Journal of the American Statistical Association. – 1949. – V. 44. – I. 247. – P. 335-341. DOI: 10.2307/2280232.
22. **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.
23. **Paz Borbón, L.O.** Computational studies of transition metal nanoalloys / L.O. Paz Borbón // Doctoral Thesis accepted by University of Birmingham, United Kingdom. – Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 2011. – 155 p. DOI: 10.1007/978-3-642-18012-5.
24. **Сдобняков, Н.Ю.** Моделирование процессов коалесценции и спекания в моно- и биметаллических наносистемах. Монография / Н.Ю. Сдобняков, А.Ю. Колосов, С.С. Богданов. – Тверь: Издательство Тверского государственного университета, 2021. – 168 с. DOI: 10.26456/skb.2021.168.
25. **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. – I. 1. – P. 015012-1-015012-7. DOI: 10.1088/0965-0393/18/1/015012.
26. **Сдобняков, Н.Ю.** Изучение термодинамических и структурных характеристик наночастиц металлов в процессах плавления и кристаллизации: теория и компьютерное моделирование: монография / Н.Ю. Сдобняков, Д.Н. Соколов. – Тверь: Тверской государственный университет, 2018. – 176 с.

References:

1. Skrabalak S.E., Chen J., Sun Y. et al. Gold nanocages: synthesis, properties, and applications, *Accounts of Chemical Research*, 2008, vol. 41, issue 12, pp. 1587-1595. DOI: 10.1021/ar800018v.
2. Skrabalak S.E., Au L., Li L., Xia Y. Facile synthesis of Ag nanocubes and Au nanocages, *Nature Protocols*, 2007, vol. 2, issue 9, pp. 2182-2190. DOI: 10.1038/nprot.2007.326.
3. Zhang Y., Xu F., Sun Y. et al. Seed-mediated synthesis of Au nanocages and their electrocatalytic activity towards glucose oxidation, *Chemistry – A European Journal*, 2010, vol. 16, issue 30, pp. 9248-9256. DOI: 10.1002/chem.200903552.
4. Lu X., Au X., McLellan J. et al. Fabrication of cubic nanocages and nanoframes by dealloying Au/Ag alloy nanoboxes with an aqueous etchant based on Fe(NO₃)₃ or NH₄OH, *Nano Letters*, 2007, vol. 7, issue 6, pp. 1764-1769. DOI: 10.1021/nl070838l.
5. Sokolov D.N., Polev O.V., Myasnichenko V.S., Savina K.G., Sdobnyakov N.Yu. O strukturnoj stabil'nosti mono- i binarnykh metallicheskich nanokletok [On the structural stability of mono- and binary metallic nanocages.], *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov [Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials]*, 2023, issue 15, pp. 602-613. DOI: 10.26456/pcascnn/2023.15.602. (In Russian).
6. Sokolov D.N., Sdobnyakov N.Yu., Savina K.G., Kolosov A.Yu., Myasnichenko V.S. Novye vozmozhnosti vysokoproizvoditel'nykh raschetov nanosistem s ispol'zovaniem programmnogo obespecheniya Metropolis [New opportunities for high-performance simulations of nanosystem using Metropolis software], *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov [Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials]*, 2021, issue 13, pp. 624-638. DOI: 10.26456/pcascnn/2021.13.624. (In Russian).
7. Myasnichenko V., Kirilov L., Mikhov R., Fidanova S., Sdobnyakov N. Simulated annealing method for metal nanoparticle structures optimization, *Advanced Computing in Industrial Mathematics*. BGSIAM 2017. Studies in Computational Intelligence, ed. by K. Georgiev, M. Todorov, I. Georgiev, 2019, vol. 793, pp. 277-289. DOI: 10.1007/978-3-319-97277-0_23.
8. Myasnichenko V., Sdobnyakov N., Kirilov L., Mikhov R., Fidanova S. Monte Carlo approach for modeling and optimization of one-dimensional bimetallic nanostructures, *Lecture Notes in Computer Science. Conference*

- paper: *International Conference on Numerical Methods and Applications*, 20-24 August 2018, Borovets, Bulgaria, 2019, vol. 11189, pp. 133-141. DOI: 10.1007/978-3-030-10692-8_15.
9. Myasnichenko V., Sdobnyakov N., Kirilov L., Mikhov R., Fidanova S. Structural instability of gold and bimetallic nanowires using Monte Carlo simulation, *Recent Advances in Computational Optimization. Studies in Computational Intelligence*, ed. by S. Fidanova. Cham, Springer, 2020, vol. 838, pp. 133-145. DOI: 10.1007/978-3-030-22723-4_9.
10. Myasnichenko V., Fidanova S., Mikhov R., Kirilov L., Sdobnyakov N. Representation of initial temperature as a function in simulated annealing approach for metal nanoparticle structures modeling, *Advances in High Performance Computing. HPC 2019. Studies in Computational Intelligence*, ed. by I. Dimov, S. Fidanova. Cham, Springer, 2021, vol. 902, pp. 61-72. DOI: 10.1007/978-3-030-55347-0_6.
11. Mikhov R., Myasnichenko V., Fidanova S., Kirilov L., Sdobnyakov N. Influence of the temperature on simulated annealing method for metal nanoparticle structures optimization, *Advanced Computing in Industrial Mathematics. BGSIAM 2018, Studies in Computational Intelligence*, ed. by In: I. Georgiev, H. Kostadinov, E. Lilkova. Cham, Springer, 2021, vol. 961, pp. 278-290. DOI: 10.1007/978-3-030-71616-5_25.
12. Skrabalak S.E., Au L., Lu X. et al. Gold nanocages for cancer detection and treatment, *Nanomedicine*, 2007, vol. 2, issue 5, pp. 657-668. DOI: 10.2217/17435889.2.5.657
13. Chen J., Wang D., Xi J. et al. Immuno gold nanocages with tailored optical properties for targeted photothermal destruction of cancer cells, *Nano Letters*, 2007, vol. 7, issue 5, pp. 1318-1322. DOI: 10.1021/nl070345g.
14. Zeng J., Zhang Q., Chen J., Xia Y. A comparison study of the catalytic properties of Au-based nanocages, nanoboxes, and nanoparticles, *Nano Letters*, 2010, vol. 10, issue 1, pp. 30-35. DOI: 10.1021/nl903062e.
15. El-Toni A.M., Habila M.A., Labis J.P. et al. Design, synthesis and applications of core-shell, hollow core, and nanorattle multifunctional nanostructures, *Nanoscale*, 2016, vol. 8, issue 5, pp. 2510-2531. DOI: 10.1039/C5NR07004J.
16. Huang R., Shao G.-F., Zeng X.-M., Wen Y.-H. Diverse melting modes and structural collapse of hollow bimetallic core-shell nanoparticles: a perspective from molecular dynamics simulations, *Scientific Reports*, 2014, vol. 4, art. no. 7051, 7 p. DOI: 10.1038/srep07051.
17. Vara M., Wang X., Howe J. et al. Understanding the stability of Pt-based nanocages under thermal stress using in situ electron microscopy, *ChemNanoMat*, 2018, vol. 4, issue 1, pp. 112-117. DOI: 10.1002/cnma.201700298.
18. Shao S., Zhu X., Ten V. et al. Understanding the impact of wall thickness on thermal stability of silver-gold nanocages, *The Journal of Physical Chemistry C*, 2022, vol. 126, issue 16, pp. 7337-7345. DOI: 10.1021/acs.jpcc.2c01433.
19. Myasnichenko V.S. *Molekulyarnodinamicheskoe modelirovanie i bioinspirirovannaya optimizatsiya binarnykh i trojnykh metallicheskih nanostruktur (KlasterEvolushn)* [Molecular dynamic modeling and bioinspired optimization of binary and ternary metal nanostructures (ClusterEvolution)]. Certificate RF, no. 2011615692, 2011. (In Russian).
20. Sokolov D.N., Sdobnyakov N.Yu., Kolosov A.Yu., Ershov P.M., Bogdanov S.S. *Metropolis*. Certificate RF, no. 2019661915, 2019. (In Russian).
21. Metropolis N., Ulam S. The Monte Carlo method, *Journal of the American Statistical Association*, 1949, vol. 44, issue 247, pp. 335-341. DOI: 10.2307/2280232.
22. 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.
23. Paz Borbón L.O. *Computational studies of transition metal nanoalloys*. Doctoral Thesis accepted by University of Birmingham, United Kingdom. Berlin, Heidelberg, Springer-Verlag, 2011, 155 p. DOI: 10.1007/978-3-642-18012-5.
24. Sdobnyakov N.Yu., Kolosov A.Yu., Bogdanov S.S. *Modelirovanie protsessov koalestsentsii i spekaniya v mono- i bimetallicheskih 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).
25. 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, issue 1, pp. 015012-1-015012-7. DOI: 10.1088/0965-0393/18/1/015012.
26. Sdobnyakov N.Yu., Sokolov D.N. *Izuchenie termodinamicheskikh i strukturnykh kharakteristik nanochastits metallov v protsessakh plavleniya i kristallizatsii: teoriya i komp'yuternoe modelirovanie: monografiya* [Study of the thermodynamic and structural characteristics of metal nanoparticles in the processes of melting and crystallization: theory and computer modeling: monograph]. Tver, Tver State University Publ., 2018, 176 p. (In Russian).

On the stability and structure relaxation of metallic nanocages

D.N. Sokolov, V.S. Myasnichenko, O.V. Polev, K.G. Savina, N.Yu. Sdobnyakov

Tver State University, Tver, Russia

DOI: 10.26456/pcascnn/2024.16.543

Abstract: The problem of the thermal stability of mono- and binary metallic nanocages consisting of gold and silver atoms with the same nuclearity of 3000 atoms is considered. The initial configurations of nanocages were obtained in the ClusterEvolution software by cutting them out of a larger icosahedron. The heating process for studying the thermal stability/instability was simulated in the Metropolis software using the Monte Carlo method and the Metropolis scheme. The interatomic interaction was described by the tight-binding potential. The influence of the composition, characteristic dimensions (inner and outer radii), and the shape of the inner surface in the initial configuration on the thermal stability of nanocages was studied. The temperature of complete collapse of the internal cavity of nanocages was determined. The results of calculations of the temperature dependence of the average local density and the local density profiles at different temperatures corresponding to different initial configurations, as well as the temperature evolution of the fractions of crystalline structures in them, are presented and analyzed.

Keywords: *atomistic simulation, Monte Carlo method, tight-binding potential, metal nanocages, thermal effects, stability/instability, local density, crystalline phases.*

Соколов Денис Николаевич – к.ф.-м.н., научный сотрудник кафедры общей физики ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Мясниченко Владимир Сергеевич – научный сотрудник кафедры общей физики, ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Полев Олег Валерьевич – студент 1 курса магистратуры кафедры общей физики ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Савина Ксения Геннадьевна – аспирант 2 года обучения кафедры общей физики ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Сдобняков Николай Юрьевич – д.ф.-м.н., доцент кафедры общей физики ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Denis N. Sokolov – Ph. D., Researcher, General Physics Department, Tver State University

Vladimir S. Myasnichenko – Researcher, General Physics Department, Tver State University

Oleg V. Polev – 1st year graduate student, General Physics Department, Tver State University

Kseniya G. Savina – 2nd year postgraduate student, General Physics Department, Tver State University

Nickolay Yu. Sdobnyakov – Dr. Sc., Docent, General Physics Department, Tver State University

Поступила в редакцию/received: 07.08.2024; после рецензирования/revised: 11.09.2024; принята/accepted: 18.09.2024.

СОДЕРЖАНИЕ

ПРЕДИСЛОВИЕ

1. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ НАНОЧАСТИЦ, НАНОСИСТЕМ И НАНОМАТЕРИАЛОВ

7

А.С. Антонов, Н.Ю. Сдобняков, В.А. Анофриев, М.С. Афанасьев, Е.М. Семенова, В.В. Макаев

Комплексный подход к изучению фрактальных структур на поверхности железа

A.S. Antonov, N.Yu. Sdobnyakov, V.A. Anofriev, M.S. Afanasiev, E.M. Semenova, V.V. Makaev

Comprehensive approach to studying fractal structures on iron surfaces

7

З.А. Ахматов, А.Х. Хоконов, И.Н. Сергеев, М.Г. Амбарцумов

Исследование интеркалированного калием графита методом спектроскопии комбинационного
рассеяния

Z.A. Akhmatov, A.Kh. Khokonov, I.N. Sergeev, M.G. Ambartsumov

Study of potassium intercalated graphite by Raman spectroscopy

24

Е.В. Барабанова, Н.М. Оспельников, А.И. Иванова

Влияние примеси *Bi* на электрофизические свойства твердых растворов ниобата натрия

E.V. Barabanova, N.M. Ospelnikov, A.I. Ivanova

Effect of *Bi*-doping on the electrophysical properties of sodium niobate solid solutions

33

В.П. Безверхний, А.Ю. Гагарина, Е.Н. Муратова, А.И. Максимов, В.А. Мошников

Исследование оптических свойств легированных металлами перовскитных нанокристаллов $CsPbX_3$

V.P. Bezverkhnii, A.Y. Gagarina, E.N. Muratova, A.I. Maximov, V.A. Moshnikov

Investigation of optical properties of metal-doped $CsPbX_3$ perovskite nanocrystals

41

Л.А. Бобрева, Р.А. Титов, М.В. Смирнов, И.В. Бирюкова, С.М. Маслобоева, А.Ю. Пятыхев,

Н.В. Сидоров, М.Н. Палатников

Сравнительные исследования особенностей структуры кристаллов $LiNbO_3:Er:Zn$ разного генезиса

L.A. Bobreva, R.A. Titov, M.V. Smirnov, I.V. Biryukova, S.M. Masloboeva, A.Yu. Pyatyshev, N.V. Sidorov,
M.N. Palatnikov

Comparative studies of structural features of $LiNbO_3:Er:Zn$ crystals of different genesis

48

Л.А. Бобрева, М.В. Смирнов, Р.А. Титов, И.В. Бирюкова, С.М., Маслобоева, А.Ю. Пятыхев,

О.В. Палатникова, Н.В. Сидоров, М.Н. Палатников

Сравнительные исследования фотолюминесцентных и оптических свойств, концентрации OH^- -групп в
кристаллах двойного легирования $LiNbO_3:Er:Zn$

L.A. Bobreva, M.V. Smirnov, R.A. Titov, I.V. Biryukova, S.M., Masloboeva, A.Yu. Pyatyshev,
O.V. Palatnikova, N.V. Sidorov, M.N. Palatnikov

Comparative studies of photoluminescent and optical properties, concentration of OH^- groups in double-doped
 $LiNbO_3:Er:Zn$ crystals

60

Н.Н. Большакова, А.И. Иванова, Н.Ю. Дружинина, Е.М. Семенова, С.С. Шипилов

Процессы переключения аланинсодержащих кристаллов триглицинсульфата

N.N. Bolshakova, A.I. Ivanova, N.Yu. Druginina, E.M. Semenova, S.S. Shipilov

Switching processes in alanine doped triglycine sulfate crystals

72

А.М. Гусева, А.И. Синкевич, С.Д. Сметанникова, Е.М. Семенова, Ю.Г. Пастушенко

Анализ параметров доменной структуры монокристаллов $RFe_{11}Ti$ ($R = Y, Gd, Ho, Er$) по данным
магнитно-силовой микроскопии

A.M. Guseva, A.I. Sinkevich, S.D. Smetannikova, E.M. Semenova, Yu.G. Pastushenkov

Analysis of domain structure parameters of $RFe_{11}Ti$ ($R = Y, Gd, Ho, Er$) single crystals based on magnetic
force microscopy data

85

Г.Г. Дунаева, А.Ю. Карпенков

К вопросу об исследовании процессов перемагничивания одноосных магнитных материалов из анализа
трансформации их доменной структуры: эксперимент и компьютерное моделирование

G.G. Dunaeva, A.Yu. Karpenkov

Towards the investigation of the magnetization processes of uniaxial magnetic materials by means of the
analysis of transformation of their domain structure: experiment and computer modeling

96

Д.А. Зерница, В.Г. Шепелевич

Особенности структуры и свойства сплавов системы $Sn-Zn-Si-Al$, полученных методом сверхбыстрой
кристаллизации из расплава

D.A. Zernitsa, V.G. Shepelevich

Structural features and properties of the $Sn-Zn-Si-Al$ system alloys obtained by the method of rapid
solidification from the melt

110

**Физико-химические аспекты изучения кластеров,
наноструктур и наноматериалов. – 2024. – Вып. 16**

<i>А.Д. Зигерт, Н.Б. Кузьмин, Е.М. Семенова, А.Ю. Карпенков, А.И. Иванова, Н.Ю. Сдобняков</i> Корреляция магнитных характеристик и фрактальной размерности магнитооптических изображений постоянных магнитов <i>A.D. Zigert, N.B. Kuz'min, E.M. Semenova, A.Yu. Karpenkov, A.I. Ivanova, N.Yu. Sdobnyakov</i> Correlation of magnetic characteristics and fractal dimension of magneto-optical images of permanent magnets	119
<i>В.И. Иванов, А.В. Мяготин</i> Голографический метод диагностики наночастиц в плотных наносuspensions <i>V.I. Ivanov, A.V. Myagotin</i> The holographic method for diagnostics of nanoparticles in dense nanosuspensions	128
<i>В.И. Иванов, И.Н. Егоришин</i> Модуляционный метод светоиндуцированной псевдо-призмы в наносuspension <i>V.I. Ivanov, I.N. Egorshin</i> A modulation method of light-induced pseudo-prism in nanosuspension	134
<i>Ю.Ф. Иванов, Ю.Х. Ахмадеев, А.А. Клопотов, Н.А. Прокопенко, Е.А. Петрикова, О.В. Крысина, В.В. Шугуров, А.Н. Шмаков, В.Ю. Лавров</i> Рентгеновские дифракционные исследования процесса роста тонких пленок высокоэнтропийного сплава $TiNbZrTaHfCu$ in situ с использованием синхротронного излучения <i>Yu.F. Ivanov, Yu.Kh. Akhmadeev, A.A. Klopotov, N.A. Prokopenko, E.A. Petrikova, O.V. Krygina, V.V. Shugurov, A.N. Shmakov, V.Yu. Lavrov</i> X-ray diffraction studies of the growth process of thin films of high-entropy $TiNbZrTaHfCu$ alloy in situ using synchrotron radiation	140
<i>А.И. Иванова, А.В. Дудилова, О.Е. Журавлев, А.Д. Кафтанов</i> Применение ионных жидкостей в исследованиях микроструктуры диэлектриков методом сканирующей электронной микроскопии <i>A.I. Ivanova, A.V. Dudilovskaya, O.E. Zhuravlev, A.D. Kaftanov</i> Application of ionic liquids in scanning electron microscopy studies of dielectric microstructure	154
<i>Ю.В. Кабиров, А.А. Утоплов, Н.В. Лянгузов, Е.Н. Сидоренко, Н.В. Пруцакова, Е.В. Чебанова</i> Термоэдс магниторезистивных композитов на основе $La_{0.7}Sr_{0.3}MnO_3$ <i>Yu.V. Kabirov, A.A. Utoplov, N.V. Lyanguzov, E.N. Sidorenko, N.V. Prutsakova, E.V. Chebanova</i> Thermopower of magnetoresistive composites based on $La_{0.7}Sr_{0.3}MnO_3$	164
<i>И.Л. Кислова, Д.А. Киселев, А.Л. Холкин, А.В. Солнышкин, О.А. Мухин, Г.Г. Колков</i> Особенности динамического пьезоэлектрического отклика и локальная доменная структура в кристаллах PZN-PT <i>I.L. Kislova, D.A. Kiselev, A.L. Kholkin, A.V. Solnyshkin, O.A. Mukhin, G.G. Kolkov</i> Features of the dynamic pyroelectric response and the local domain structure in PZN-PT crystals	171
<i>Н.С. Кожевникова, Е.А. Богданова, В.М. Скачков, И.В. Бакланова, А.П. Тютюнник, Л.Ю. Булдакова, М.Ю. Янченко, А.А. Юшков</i> Ex-situ модифицирование наноструктурированного гидроксиапатита коллоидными частицами CdS <i>N.S. Kozhevnikova, E.A. Bogdanova, V.M. Skachkov, I.V. Baklanova, A.P. Tyutyunnik, L.Yu. Buldakova, M.Yu. Yanchenko, A.A. Yushkov</i> Ex-situ modification of nanostructured hydroxyapatite by colloidal CdS particles	183
<i>Д.А. Кравченко, А.Ю. Колосов, Д.Н. Соколов, Н.И. Непша, С.С. Богданов, Н.Ю. Сдобняков</i> Комплексный подход к исследованию структуры тернарного сплава $CoCrMo$: растровая электронная микроскопия и атомистическое моделирование <i>D.A. Kravchenko, A.Yu. Kolosov, D.N. Sokolov, N.I. Nepsha, S.S. Bogdanov, N.Yu. Sdobnyakov</i> An integrated approach to studying the structure of ternary $CoCrMo$ alloy: scanning electron microscopy and atomistic simulation	198
<i>М.Н. Лапушкин</i> Адсорбция бария на поверхности $GaN(0001)$ <i>M.N. Lapushkin</i> Adsorption of barium on surface of $GaN(0001)$	210
<i>Д.В. Мамеев, О.В. Малышкина, А.И. Иванова</i> Пористая керамика системы ниобата калия натрия <i>D.V. Mamaev, O.V. Malyshkina, A.I. Ivanova</i> Porous ceramics of sodium potassium niobate system	219

<i>Е.В. Медяник, Ф.Ф. Малявин, В.А. Лапин, А.А. Кравцов, В.Е. Супрунчук, Л.В. Тарала</i> Исследование влияния спекающих добавок и условий вакуумного спекания на оптические свойства керамики <i>LuAG:Er</i> 1 ат.%	
<i>E.V. Medyanik, F.F. Malyavin, V.A. Lapin, A.A. Kravtsov, V.E. Suprunchuk, L.V. Tarala</i> Study of the influence of sintering additives and vacuum sintering conditions on optical properties of <i>LuAG:Er</i> (1 at.%) ceramics	229
<i>О.Д. Новик, Н.Д. Гаврилова, О.В. Малышкина</i> Low-frequency impedance spectroscopy of polymers and crystals with a hydrogen-bond network. Quantum collective excitations of nuclei in molecules	
<i>О.Д. Новик, Н.Д. Гаврилова, О.В. Малышкина</i> Низкочастотная импедансная спектроскопия полимеров и кристаллов с сеткой водородных связей. Квантовые коллективные возбуждения ядер в молекулах	239
<i>П.А. Ракунов, М.Б. Ляхова, Е.М. Семенова, А.Ю. Карпенков</i> Магнитные свойства и процессы перемагничивания сплавов <i>Sm-Gd-Zr-Co-Cu-Fe</i>	
<i>P.A. Rakunov, M.B. Lyakhova, E.M. Semenova, A.Yu. Karpenkov</i> Magnetic properties and magnetic reversal processes of the <i>Sm-Gd-Zr-Co-Cu-Fe</i> alloys	258
<i>А.Ю. Саломатина, А.Ю. Федотов, О.Ю. Северюхина, Ф.А. Виноградов</i> Исследование магнитных свойств нанокompозита <i>Co-Fe</i>	
<i>A.Yu. Salomatina, A.Yu. Fedotov, O.Yu. Severyukhina, F.A. Vinogradov</i> Study of <i>Co-Fe</i> nanocomposite magnetic properties	267
<i>Н.В. Сидоров, Л.А. Бобрева, М.Н. Палатников, А.Ю. Пятыешев, М.К. Тарабрин, А.А. Бушунов</i> Особенности дефектной структуры кристаллов <i>LiNbO₃:Cu</i> и их проявление в спектре ИК-поглощения в области валентных колебаний атомов водорода <i>OH⁻</i> -групп	
<i>N.V. Sidorov, L.A. Bobreva, M.N. Palatnikov, A.Yu. Pyatyshev, M.K. Tarabrin, A.A. Bushunov</i> Features of the defect structure of <i>LiNbO₃:Cu</i> crystals and their manifestation in the IR absorption spectrum in the region of stretching vibrations of hydrogen atoms <i>OH⁻</i> -group	277
<i>М.В. Старицын, В.П. Пронин, И.И. Хинич, А.Н. Крушельницкий, С.В. Сенкевич, Е.Ю. Кантелов, И.П. Пронин</i> Эффект каналирования электронов в кристаллической решетке лучистых сферолитов	
<i>M.V. Staritsyn, V.P. Pronin, I.I. Khinich, A.N. Krushelnitsky, S.V. Senkevich, E.Yu. Kaptelov, I.P. Pronin</i> Effect of electron channeling in the crystal lattice of radiant spherulites	289
<i>Н.А. Теплякова, Н.В. Сидоров, М.Н. Палатников</i> Кластеры в структуре нестехиометрических кристаллов ниобата лития	
<i>N.A. Teplyakova, N.V. Sidorov, M.N. Palatnikov</i> Clusters in the structure of non-stoichiometric lithium niobate crystals	301
<i>А.А. Утоплов, Н.В. Пруцакова, А.Г. Рудская, А.В. Назаренко, М.В. Белокобыльский, Ю.В. Кабиров</i> Магниторезистивность композитов <i>LSMO/(Cu₂O, Ag)</i>	
<i>A.A. Utoplov, N.V. Prutsakova, A.G. Rudskaya, A.V. Nazarenko, M.V. Belokobylsky, Yu.V. Kabirov</i> Magnetoresistance of <i>LSMO/(Cu₂O, Ag)</i> composites	307
2. ТЕОРИЯ НАНОСИСТЕМ	318
<i>А.М. Апеков, И.Г. Шебзухова, Л.А. Хамукова</i> Межфазная энергия кристаллов алюминия на границе с неполярными органическими жидкостями	
<i>A.M. Apekov, I.G. Shebzukhova, L.A. Khatukova</i> Interphase energy of aluminum crystals at the boundary with nonpolar organic liquids	318
<i>В.О. Белавин, Ю.В. Брылкин, С.В. Залетаев, А.Л. Кусов, В.В. Павликов, А.А. Потапов, В.А. Царькова</i> Проблемы количественной оценки площади контакта пар трения	
<i>V.O. Belavin, Yu.V. Brylkin, S.V. Zaletaev, A.L. Kusov, V.V. Pavlikov, A.A. Potapov, V.A. Tsarkova</i> Problems of quantitative assessment of the friction couple contact area	327
<i>И.Н. Беляева, Н.И. Корсунов, Н.А. Чеканов, А.Н. Чеканов</i> Расчет спектра полупроводника арсенида галлия с треугольной потенциальной функцией методом степенных рядов	
<i>I.N. Belyaeva, N.I. Korsunov, N.A. Chekanov, A.N. Chekanov</i> Calculation of the spectrum of a gallium arsenide semiconductor with a triangular potential function by the power series method	337
<i>Д.О. Голов, Н.А. Петров, А.Н. Цирулев</i> Вариационный квантовый алгоритм для малоразмерных систем в базисе Паули	
<i>D.O. Golov, N.A. Petrov, A.N. Tsirulev</i> Variational quantum algorithm for low-dimensional systems in the Pauli basis	343

<i>В.В. Ионин, В.А. Михалевский, А.А. Бурцев, А.В. Киселев, А.А. Невзоров, Н.Н. Елисеев, А.А. Лотин</i> Моделирование распространения излучения в фотонной интегральной схеме на основе полимерного волновода и наночастиц фазоизменяемого материала <i>V.V. Ionin, V.A. Mikhalevsky, A.A. Burtsev, A.V. Kiselev, A.A. Nevzorov, N.N. Eliseev, A.A. Lotin</i> Modelling of radiation propagation in a photonic integrated circuit based on a polymer waveguide and phase-change material nanoparticles	351
<i>А.Ю. Колосов, С.А. Вересов, С.В. Серов, Д.Н. Соколов, К.Г. Савина, Р.Е. Григорьев, Н.Ю. Сдобняков</i> Размерный эффект в четырехкомпонентных наночастицах <i>Au-Cu-Pd-Pt</i> и их стабильность <i>A.Yu. Kolosov, S.A. Veresov, S.V. Serov, D.N. Sokolov, K.G. Savina, R.E. Grigoriev, N.Yu. Sdobnyakov</i> Size effect in four-component <i>Au-Cu-Pd-Pt</i> nanoparticles and their stability	361
<i>Р.А. Магомедов, Э.Н. Ахмедов</i> Расчёт изобар уравнения состояния диоксида углерода и метана в интервале давлений от 2 до 20 МПа <i>R.A. Magomedov, E.N. Akhmedov</i> Calculation of state equation isobars of carbon dioxide and methane in pressure interval from 2 to 20 MPa	373
<i>У.А. Малышкин</i> Geometric preferential attachment with choice-based edge step <i>Ю.А. Малышкин</i> Геометрическое предпочтительное присоединение с добавлением ребер, основанном на выборе вершины	381
<i>В.М. Самсонов, И.В. Талызин, Д.В. Жигунов</i> Сегрегация компонентов как необходимое условие эвтектической природы сплава и наносплава <i>V.M. Samsonov, I.V. Talyzin, D.V. Zhigunov</i> Segregation of components as a necessary condition for the eutectic nature of an alloy and nanoalloy	387
<i>Н.Ю. Сдобняков, А.Ю. Колосов, Д.Н. Соколов, К.Г. Савина, Н.И. Непша, Я.П. Савельев, Г.Д. Ломоносов</i> К проблеме апробации параметров потенциала сильной связи: влияние соотношения между парным и многочастичным взаимодействиями на процесс структурообразования в бинарных наночастицах <i>Pd-Pt</i> <i>N.Yu. Sdobnyakov, A.Yu. Kolosov, D.N. Sokolov, K.G. Savina, N.I. Nepsha, Ya.P. Savel'ev, G.D. Lomonosov</i> To the problem of tight binding potential parameters approbation: influence of the ratio between pair and many-body interaction on the process of the structure formation in binary <i>Pd-Pt</i> nanoparticles	399
<i>А.В. Твардовский</i> Модельные предпосылки для вывода адсорбционного уравнения Дубинина-Радзхкевича <i>A.V. Tvardovsky</i> Model prerequisites for derivation of the Dubinin-Radzhkevich adsorption equation	409
<i>А.В. Твардовский</i> Уравнение межфазного адсорбционного равновесия <i>A.V. Tvardovsky</i> Equation of interphase adsorption equilibrium	419
<i>А.В. Шишулин, А.В. Шишулина, А.В. Купцов</i> К вопросу о плавлении мезопористых материалов <i>A.V. Shishulin, A.V. Shishulina, A.V. Kuptsov</i> Several notes on the melting behavior of mesoporous materials	427
<i>А.В. Шишулин, А.В. Шишулина, А.В. Купцов</i> Особенности фазовых равновесий «жидкость – твердое тело» в наночастицах системы Si_x-Ge_{1-x} при различном взаимном расположении фаз <i>A.V. Shishulin, A.V. Shishulina, A.V. Kuptsov</i> Peculiarities of «liquid – solid» phase equilibria in Si_x-Ge_{1-x} nanoparticles for various mutual arrangements of phases	437
3. ПЕРВОПРИНЦИПНОЕ И АТОМИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ	448
<i>Д.В. Беспалов, О.А. Голованова</i> Квантово-химический расчёт соединения магния(II) с триптофаном: синтез, строение, свойства <i>D.V. Bespalov, O.A. Golovanova</i> Quantum-chemical calculation of magnesium(II) compound with tryptophan: synthesis, structure, properties	448
<i>Ю.Я. Гафнер, Д.А. Рыжкова, С.Л. Гафнер, А.А. Череповская</i> Определение размерной границы устойчивости ГЦК фазы наночастиц серебра <i>Yu.Ya. Gafner, D.A. Ryzhkova, S.L. Gafner, A.A. Cherepovskaya</i> Determination of the size limit of stability of the fcc phase of <i>Ag</i> nanoparticles	457

<i>И.В. Каракеян, В.В. Пуйтов, И.В. Талызин, В.М. Самсонов</i> Икосаэдрические металлические нанокластеры: низкотемпературные структуры или структуры, предшествующие плавлению? <i>I.V. Karakeyan, V.V. Puitov, I.V. Talyzin, V.M. Samsonov</i> Icosahedral metallic nanoclusters: low-temperature structures or pre-melting ones?	468
<i>Р.В. Комаров, М.Д. Малышев, П.О. Бабуркин</i> Studying the interaction of polyacrylonitrile oligomer chains with carbon fillers <i>П.В. Комаров, М.Д. Малышев, П.О. Бабуркин</i> Изучение взаимодействия олигомерных цепей полиакрилонитрила с углеродными наполнителями	481
<i>А.В. Котомкин, Ю.Д. Орлов</i> Взаимосвязь строение-свойство для фторалканов <i>A.V. Kotomkin, Yu.D. Orlov</i> Structure – property relationship for the fluorine alkanes	493
<i>Ю.А. Кузнецов, М.Н. Лапушкин</i> Адсорбция Au на W(100): расчет <i>Yu.A. Kuznetsov, M.N. Lapushkin</i> Au adsorption on W(100): calculation	501
<i>Г.П. Михайлов</i> Расчет электронного спектра поглощения нанокластера (TiO ₂) ₁₅ , допированного атомом азота <i>G.P. Mikhailov</i> Calculation of the electronic absorption spectrum of a nanocluster (TiO ₂) ₁₅ doped with a nitrogen atom	510
<i>Н.И. Непша, Д.Н. Соколов, А.Ю. Колосов, К.Г. Савина, Р.Е. Григорьев, Н.Ю. Сдобняков</i> О проблеме устойчивости/неустойчивости в тернарных наночастицах Cu-Fe-Ni типа ядро-оболочка <i>N.I. Nepsha, D.N. Sokolov, A.Yu. Kolosov, K.G. Savina, R.E. Grigoryev, N.Yu. Sdobnyakov</i> On the problem of stability/instability in core-shell ternary Cu-Fe-Ni nanoparticles	517
<i>К.Г. Савина, А.Д. Веселов, Р.Е. Григорьев, С.А. Вересов, П.М. Еришов, Д.Р. Зорин, Н.Ю. Сдобняков</i> Структурные превращения в бинарных наночастицах Ti-V: размерный эффект и эффект изменения состава <i>K.G. Savina, A.D. Veselov, R.E. Grigoryev, S.A. Veresov, P.M. Ershov, D.R. Zorin, N.Yu. Sdobnyakov</i> Structural transformations in binary Ti-V nanoparticles: size effect and effect of composition change	532
<i>Д.Н. Соколов, В.С. Мясниченко, О.В. Полев, К.Г. Савина, Н.Ю. Сдобняков</i> О стабильности и релаксации структуры металлических наноклеток <i>D.N. Sokolov, V.S. Myasnichenko, O.V. Polev, K.G. Savina, N.Yu. Sdobnyakov</i> On the stability and structure relaxation of metallic nanocages	543
<i>А.А. Череповская, С.Л. Гафнер, Ю.Я. Гафнер, Д.А. Рыжкова</i> Анализ термической устойчивости внутреннего строения наночастиц Ag-Cu <i>A.A. Cherepovskaya, S.L. Gafner, Yu.Ya. Gafner, D.A. Ryzhkova</i> Analysis of thermal stability of the internal structure of Ag-Cu nanoparticles	557
4. ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ НАНОТЕХНОЛОГИЙ	565
<i>А.К. Ахмедов, А.Ш. Асваров, Э.К. Мурлиев, З.В. Шомахов</i> Прозрачные проводящие слои с высокой подвижностью свободных носителей заряда на основе оксида индия, легированного вольфрамом <i>A.K. Akhmedov, A.Sh. Asvarov, E.K. Murliev, Z.V. Shomakhov</i> High-mobility transparent conductive layers based on indium oxide doped with tungsten	565
<i>А.К. Ахмедов, А.Ш. Асваров, Э.К. Мурлиев, З.В. Шомахов</i> Особенности локализации примеси Al, Ga и In в слоях на основе ZnO <i>A.K. Akhmedov, A.Sh. Asvarov, E.K. Murliev, Z.V. Shomakhov</i> Some features of localization of Al, Ga and In impurities in ZnO layers	575
<i>С.А. Бибанаева, В.М. Скачков, Н.А. Сабирзянов</i> Сорбционная очистка растворов синтетическими цеолитами <i>S.A. Bibanaeva, V.M. Skachkov, N.A. Sabirzyanov</i> Sorption purification of solutions with synthetic zeolites	584
<i>А.Н. Болотов, О.О. Новикова</i> О природе аномально высокого значения предела текучести наноструктурированной магнитной жидкости <i>A.N. Bolotov, O.O. Novikova</i> On the nature of anomalously high value of yield stress of nanostructured magnetic fluid	592

<i>А.А. Бурцев, А.В. Киселев, В.А. Михалевский, В.В. Ионин, А.А. Невзоров, Н.Н. Елисеев, А.А. Лотин</i> Особенности кинетики лазерной кристаллизации тонких пленок халькогенидных фазоизменяемых материалов <i>GeTe</i> и <i>Ge₂Sb₂Te₅</i>	
<i>A.A. Burtsev, A.V. Kiselev, V.A. Mikhalevsky, V.V. Ionin, A.A. Nevzorov, N.N. Eliseev, A.A. Lotin</i> Kinetics of laser-induced crystallization of <i>GeTe</i> and <i>Ge₂Sb₂Te₅</i> chalcogenide phase-change material thin films	603
<i>А.А. Бурцев, В.А. Михалевский, А.А. Невзоров, А.В. Киселев, М.Р. Конникова, В.В. Ионин, Н.Н. Елисеев, А.А. Лотин</i> Получение наночастиц фазоизменяемого материала <i>Ge₂Sb₂Te₅</i> методом прямого лазерно-индуцированного переноса	
<i>A.A. Burtsev, V.A. Mikhalevsky, A.A. Nevzorov, A.V. Kiselev, M.R. Konnikova, V.V. Ionin, N.N. Eliseev, A.A. Lotin</i> Synthesis of phase-change material <i>Ge₂Sb₂Te₅</i> nanoparticles by laser-induced forward transfer techniques	612
<i>О.В. Девицкий</i> Импульсное лазерное напыление полупроводниковых тонких пленок III-V: обзор	
<i>O.V. Devitsky</i> Pulsed laser deposition OF III-V semiconductor thin films: review	621
<i>О.В. Девицкий</i> Способы снижения плотности образования капель на поверхности тонких пленок при импульсном лазерном напылении: обзор	
<i>O.V. Devitsky</i> Methods for reducing droplet formation density on the surface of thin semiconductor films by pulse laser deposition: review	631
<i>В.В. Измайлов, М.В. Новоселова</i> О профильных характеристиках технических поверхностей применительно к нанощероховатости	
<i>V.V. Izmailov, M.V. Novoselova</i> On the profile characteristics of technical surfaces as applied to nanoroughness	643
<i>А.В. Киселев, В.А. Михалевский, А.А. Невзоров, А.А. Бурцев, В.В. Ионин, Н.Н. Елисеев, А.А. Лотин</i> Моделирование ячеек адаптивного фазосдвигающего фильтра с оптическим управлением на основе многослойных структур фазоизменяемых материалов	
<i>A.V. Kiselev, V.A. Mikhalevsky, A.A. Nevzorov, A.A. Burtsev, V.V. Ionin, N.N. Eliseev, A.A. Lotin</i> Modelling of adaptive phase-shifting filter cells with optical control based on multilayer structures of phase-change materials	651
<i>О.Е. Корольков, А.А. Мисоченко, В.В. Столяров</i> Электростимулированная пластичность титана при растяжении	
<i>O.E. Korolkov, A.A. Misochenko, V.V. Stolyarov</i> Electrostimulated plasticity of titanium under tension	658
<i>В.Г. Кульков, В.В. Кулькова</i> Внутреннее трение на границах зерен в нанокристаллическом материале с порами	
<i>V.G. Kul'kov, V.V. Kul'kova</i> Internal friction at grain boundaries in nanocrystalline material with pores	670
<i>В.В. Малащенко</i> Динамическое торможение дислокаций в состаренных алюминиевых сплавах в условиях лазерного облучения	
<i>V.V. Malashenko</i> Dynamic drag of dislocations in aged aluminum alloys under laser irradiation	679
<i>В.А. Полухин, С.Х. Эстемирова</i> Металлические мембраны для очистки водорода: проблемы, тенденции и перспективы применения	
<i>V.A. Polukhin, S.Kh. Estemirova</i> Metal membranes for hydrogen purification: problems, trends and prospects of application	686
<i>Д.А. Рыжкова, А.А. Череповская</i> Модификация перовскитных и сенситизированных красителем солнечных элементов плазмонными наночастицами	
<i>D.A. Ryzhkova, A.A. Cherepovskaya</i> Modification of perovskite and dye-sensitized solar cells with plasmonic nanoparticles	711
<i>А.В. Солнышкин, Н.В. Востров, С.И. Гудков, А.Н. Белов</i> Температурная эволюция диэлектрических характеристик пленок PVDF и P(VDF-TrFE), изготовленных методом 4D-печати	
<i>A.V. Solnyshkin, N.V. Vostrov, S.I. Gudkov, A.N. Belov</i> Temperature evolution of dielectric characteristics of PVDF and P(VDF-TrFE) films produced by 4D printing	720

<i>В.В. Столяров</i> Размерные эффекты трения в чистом титане <i>V.V. Stolyarov</i> Size effects of friction in pure titanium	729
<i>А.А. Фроня, А.Т. Саакян</i> Структурирование поверхности кремниевых пластин гигантскими импульсами низкочастотного YAG:ND лазера <i>A.A. Fronya, A.T. Sahakyan</i> Surface structuring of silicon wafers with low-frequency giant pulses YAG:ND laser	738
5. НАНОХИМИЯ	746
<i>А.В. Блинов, М.А. Пирогов, М.А. Ясная, А.А. Аскерова, И.М. Шевченко, С.В. Артюшин</i> Исследование влияния гиалуроновой кислоты на структуру наноразмерного карбоната магния <i>A.V. Blinov, M.A. Pirogov, M.A. Yasnaya, A.A. Askerova, I.M. Shevchenko, S.V. Artyushin</i> Synthesis and investigation of nanoscale magnesium carbonate stabilized with hyaluronic acid	746
<i>А.А. Блинова, А.А. Гвозденко, З.А. Рехман, А.В. Блинов, М.А. Тараванов, Е.Д. Назаретова</i> Разработка и оптимизация методики синтеза наночастиц селена, стабилизированных метилцеллюлозой <i>A.A. Blinova, A.A. Gvozdenko, Z.A. Rekhman, A.V. Blinov, M.A. Taravanov, E.D. Nazaretova</i> Development and optimization of the synthesis procedure of selenium nanoparticles stabilized by methylcellulose	758
<i>Е.А. Богданова, Т.Г. Хонина, Н.А. Сабирзянов</i> Исследование транспортных свойств гидроксиапатита и его кремнийзамещенных производных <i>E.A. Bogdanova, T.G. Khonina, N.A. Sabirzyanov</i> Investigation of transport properties of hydroxyapatite and its silicon-substituted derivatives	767
<i>Е.А. Богданова, В.М. Скачков, К.В. Неведова</i> Изучение возможности получения биокмпозитов на основе наноразмерного гидроксиапатита, упрочненного оксидом титана и фторидом кальция <i>E.A. Bogdanova, V.M. Skachkov, K.V. Nefedova</i> Study of the possibility of obtaining composites based on nanoscale hydroxyapatite reinforced with titanium oxide and calcium fluoride	779
<i>К.Д. Буй, С.С. Налимова, З.В. Шомахов, А.М. Гукетлов, С.С. Бузовкин, А.А. Рыбина</i> Покрyтия из наностержней гетероструктуры ZnO/Zn ₂ SnO ₄ для эффективного детектирования ацетона <i>C.D. Bui, S.S. Nalimova, Z.V. Shomakhov, A.M. Guketlov, S.S. Buzovkin, A.A. Rybina</i> ZnO/Zn ₂ SnO ₄ nanorod heterostructure coatings for effective detection of acetone	794
<i>С.А. Герк, О.А. Голованова</i> Влияние гиалуроновой кислоты на структуру наногидроксиапатита и морфологические характеристики их композиций <i>S.A. Gerk, O.A. Golovanova</i> Influence of hyaluric acid on the structure of nanohydroxyapatite and morphological characteristics of their compositions	805
<i>И.Е. Глазов, В.К. Крутько, О.Н. Мусская, А.И. Кулак</i> Стабилизация аморфного фосфата кальция в структуре гидроксиапатита при жидкофазном синтезе <i>I.E. Glazov, V.K. Krut'ko, O.N. Musskaya, A.I. Kulak</i> Stabilization of amorphous calcium phosphate in the structure of hydroxyapatite during liquid-phase synthesis	815
<i>О.А. Голованова, В.М. Киселев</i> Морфология нанокристаллических структур гидроксиапатита по данным фрактального анализа <i>O.A. Golovanova, V.M. Kiselev</i> Morphology of nanocrystalline structures of hydroxyapatite based on fractal analysis	826
<i>О.А. Голованова</i> Синтез наногидроксиапатита модифицированного ионами лантана и церия: состав и свойства <i>O.A. Golovanova</i> Synthesis of nanohydroxyapatite modified with lanthanum and cerium ions: composition and properties	837
<i>А.Е. Дорошенко, В.К. Крутько, О.Н. Мусская, А.И. Кулак</i> Электрохимическое и биомиметическое осаждение кальцийфосфатов на титановых сплавах <i>A.E. Doroshenko, V.K. Krut'ko, O.N. Musskaya, A.I. Kulak</i> Electrochemical and biomimetic deposition of calcium phosphates on titanium alloys	848
<i>О.А. Дюдюн, А.А. Комарова, К.С. Эльбекьян</i> Получение коллоидных суспензий и водных дисперсий фуллеренов и исследование их физико-химических свойств <i>O.A. Dyudyun, A.A. Komarova, K.S. Elbekyan</i> Obtaining fullerene dispersions and investigation of their physical and chemical properties	857

<i>А.Н. Заритовский, Е.Н. Котенко, С.В. Гришук, В.А. Глазунова, Г.К. Волкова</i> Изучение каталитического синтеза углеродных наноструктур при микроволновом пиролизе целлюлозы <i>A.N. Zaritovskii, E.N. Kotenko, S.V. Grishchuk, V.A. Glazunova, G.K. Volkova</i> Studying catalytic synthesis of carbon nanostructures during microwave-assisted pyrolysis of cellulose	864
<i>Е.С. Карташинская</i> Описание термодинамических параметров комплексообразования алканов и полиароматических углеводородов в рамках полумпирических методов <i>E.S. Kartashynska</i> Description of complexation thermodynamic parameters for alkanes and polyaromatic hydrocarbons in the framework of semiempirical methods	873
<i>Н.А. Клычков, В.В. Симаков, И.В. Синёв, В.В. Ефанова, А.М. Захареви</i> Влияние паров воды на проводимость и отклик к парам этанола газочувствительных наноструктурированных слоёв ZnO при комнатной температуре <i>N.A. Klychkov, V.V. Simakov, I.V. Sinev, V.V. Efanova, A.M. Zakharevich</i> The effect of water vapor on the conductivity and response of gas-sensitive nanostructured ZnO layers to ethanol vapors at room temperature	891
<i>Н.А. Клычков, В.В. Симаков, И.В. Синёв</i> Влияние глубоких поверхностных акцепторных состояний на температурную зависимость проводимости слоёв оксида цинка <i>N.A. Klychkov, V.V. Simakov, I.V. Sinev</i> The effect of deep surface acceptor states on the temperature-dependent conductivity of zinc oxide nanoparticles	906
<i>В.К. Крутько, Л.Ю. Маслова, В.А. Сучек, О.Н. Мусская, А.И. Кулак</i> Высвобождение цисплатина из биоинертных матриц в смеси с гидроксипатитом <i>V.K. Krut'ko, L.Yu. Maslova, V.A. Suchok, O.N. Musskaya, A.I. Kulak</i> Release of cisplatin from bioinert templates in mixture with hydroxyapatite	922
<i>С.Ю. Меньшиков, А.Н. Малышев, В.С. Курмачева, С.А. Федоров, М.О. Тонкушина, А.А. Остроушко</i> Воздействие FeSO ₄ , наноразмерного серебра и кластера {Mo ₇₂ Fe ₃₀ } на окисление этиленгликоля H ₂ O ₂ <i>S.Yu. Menshikov, A.N. Malyshev, V.S. Kurmacheva, S.A. Fedorov, M.O. Tonkushina, A.A. Ostroushko</i> The effect of FeSO ₄ , nanoscale silver and {Mo ₇₂ Fe ₃₀ } cluster on the oxidation of ethylene glycol by H ₂ O ₂	933
<i>О.Н. Мусская, В.К. Крутько, И.Е. Глазов, Е.Н. Крутько, А.И. Кулак</i> Жидкофазный синтез фосфатов магния в присутствии галловой кислоты <i>O.N. Musskaya, V.K. Krut'ko, I.E. Glazov, E.N. Krutsko, A.I. Kulak</i> Liquid-phase synthesis of magnesium phosphates in the presence of gallic acid	942
<i>А.А. Нагдалян, П.С. Леонтьев, А.Б. Голик, А.С. Аскерова, А.М. Серов, А.В. Татов</i> Исследование процесса полимерной стабилизации смешанного оксида железа амилопектином <i>A.A. Nagdalian, P.S. Leontiev, A.B. Golik, A.S. Askerova, A.M. Serov, A.V. Tatov</i> Investigation of the process of polymer stabilization of mixed iron oxide with amylopectin	951
<i>Ю.В. Рех, С.А. Бибанаева, М.С. Валова, В.М. Скачков, О.В. Федорова, Н.А. Сабирзянов</i> Сорбция катионов La ³⁺ цеолитами из водных растворов <i>Y.V. Rekh, S.A. Bibanaeva, M.S. Valova, V.M. Skachkov, O.V. Fedorova, N.A. Sabirzyanov</i> Sorption of La ³⁺ cations by zeolites from aqueous solutions	960
<i>Д.С. Ряшенцев, М.Е. Беленков, Л.Ю. Коваленко</i> Структурные разновидности 2D нитрида бора <i>D.S. Ryashentsev, M.E. Belenkov, L.Y. Kovalenko</i> Structural varieties of 2D boron nitride	971
<i>К.И. Сабанин, В.М. Скачков, И.С. Медянкина, Е.А. Богданова, Н.А. Сабирзянов</i> Исследование влияния оксидов титана и циркония на прочностные характеристики наноразмерного гидроксипатита <i>K.I. Sabanin, V.M. Skachkov, I.S. Medyankina, E.A. Bogdanova, N.A. Sabirzyanov</i> Investigation of the effect of titanium and zirconium oxides on the strength characteristics of nanoscale hydroxyapatite	981
<i>М.Ш. Сатторов, Ю.М. Спивак, Ю.М. Коцур, А. Кузнецов, Е.В. Флисюк, В.А. Мошников</i> Спектроскопия наночастиц пористого кремния, импрегнированных лекарственной субстанцией малобена <i>M.Sh. Sattorov, Yu.M. Spivak, Yu.M. Kotsur, A. Kuznetsov, E.V. Flisyuk, V.A. Moshnikov</i> Spectroscopy of porous silicon nanoparticles impregnated with a drug maloben substance	995

<i>В.М. Скачков, Е.А. Богданова, С.А. Бибанаева, А.Г. Широкова</i> Разработка материала на основе гидроксипатита и алюмосиликатных цеолитов со связующим агентом для формирования биоактивных покрытий <i>V.M. Skachkov, E.A. Bogdanova, S.A. Bibanaeva, A.G. Shirokova</i> Development of a material based on hydroxyapatite and aluminosilicate zeolites with a binding agent for the formation of bioactive coatings	1004
<i>В.Е. Супрунчук, А.А. Кравцов, Л.В. Тарала, Е.В. Медяник, Ф.Ф. Малявин, В.А. Лапин, Д.П. Бедраков</i> Синтез керамического порошка иттрий-алюминиевого граната, легированного рутением <i>V.E. Suprunchuk, A.A. Kravtsov, L.V. Tarala, E.V. Medyanik, F.F. Malyavin, V.A. Lapin, D.P. Bedrakov</i> Synthesis of yttrium aluminum garnet ceramic powder doped with ruthenium	1016
<i>М.О. Тонкушина, И.Д. Гагарин, Б.Т.М.А. Шарадгах, В.Р. Гаврилюк, К.А. Пиунов, А.А. Остроушко</i> Формирование гибридных носителей на основе альбумина и полиоксометаллата для адресной доставки лекарств <i>M.O. Tonkushina, I.D. Gagarin, B.T.M.A. Sharadgah, V.R. Gavriluk, K.A. Piunov, A.A. Ostroushko</i> Formation of hybrid carriers based on albumin and polyoxometalate for targeted drug delivery	1025
<i>Т.И. Чупахина, А.М. Упорова, О.И. Гырдасова, Л.Ю. Булдакова, Ю.А. Деева, И.В. Бакланова, М.Ю. Янченко</i> Твердые растворы $Sr_2Ti_{1-x}Mn_xO_4$ ($x = 0; 0,01; 0,025; 0,05; 0,1$) со структурой K_2NiF_4 <i>T.I. Chupakhina, A.M. Uporova, O.I. Gyrdasova, L.Y. Buldakova, Y.A. Deeva, I.V. Baklanova, M.Y. Yanchenko</i> Solid $Sr_2Ti_{1-x}Mn_xO_4$ ($x = 0; 0,01; 0,025; 0,05; 0,1$) solutions with K_2NiF_4 structure	1035
<i>А.Г. Широкова, С.А. Бибанаева, Е.А. Богданова, В.М. Скачков, О.В. Корякова</i> Исследование физико-химических свойств композитов, полученных механохимическим синтезом наноразмерного гидроксипатита и синтетических цеолитов <i>A.G. Shirokova, S.A. Bibanaeva, E.A. Bogdanova, V.M. Skachkov, O.V. Koryakova</i> Study of the physico-chemical properties of composites obtained by mechanochemical synthesis of nanoscale hydroxyapatite and synthetic zeolites	1046
<i>З.В. Шомахов, С.С. Налимова, О.Д. Зырянова, В.М. Кондратьев, З.Х. Калажиков, К.Д. Буй, В.А. Мошников</i> Газочувствительность нанокompозитов WO_x/WS_2 при комнатной температуре и ультрафиолетовом облучении <i>Z.V. Shomakhov, S.S. Nalimova, O.D. Zyryanova, V.M. Kondratev, Z.Kh. Kalazhikov, C.D. Bui, V.A. Moshnikov</i> Gas sensitivity of WO_x/WS_2 nanocomposites at room temperature under ultraviolet irradiation	1060
<i>Н.А. Шостак</i> Особенности определения параметров кристаллической решетки из льдоподобных ассоциатов молекул воды при гидратообразовании <i>N.A. Shostak</i> Features of determining the parameters of crystal lattice of ice-like associates of water molecules during hydrate formation	1071
Содержание	1079

Редакционная коллегия выражает благодарность:

– Исаеву Антону Владимировичу – начальнику отдела информационных ресурсов и технологий Администрации города Твери за участие в подготовке выпуска журнала;
– Карпенкову Алексею Юрьевичу – к.ф.-м.н., заведующему кафедрой физики конденсированного состояния ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет» за дизайн-макет обложки выпуска журнала.

Учредитель – Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Тверской государственный университет»

Научное издание

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ ИЗУЧЕНИЯ КЛАСТЕРОВ, НАНОСТРУКТУР И НАНОМАТЕРИАЛОВ

**ПЕРЕВОДНОЕ НАЗВАНИЕ: PHYSICAL AND CHEMICAL ASPECTS OF THE
STUDY OF CLUSTERS, NANOSTRUCTURES AND NANOMATERIALS**

**ТРАНСЛИТЕРАЦИЯ НАЗВАНИЯ: FIZIKO-HIMIČESKIE ASPEKTY IZUČENÍÁ
KLASTEROV, NANOSTRUKTUR I NANOMATERIALOV**

Самсонов Владимир Михайлович – главный редактор;

*Сдобняков Николай Юрьевич – заместитель главного редактора, ответственный
секретарь.*

Адрес редакции: 170002, Россия, г. Тверь, Садовый пер., д. 35, ауд. 217.

*Зарегистрирован Федеральной службой по надзору в сфере связи, информационных
технологий и массовых коммуникаций, свидетельство о регистрации СМИ
ПИ № ФС77-47789 от 13.12.2011.*

Индекс издания в каталоге «Издания органов научно-технической информации» – 57378.
Каталожная цена – 15000 рублей.

выпуск 16

Дата выхода в свет 15.12.2024

Печатается с оригиналов авторов

Подписано в печать 15.11.2024. Формат 60 × 84 ¹/₁₆.

Усл. печ. л. 63,24. Тираж 500 экз. Заказ № 257.

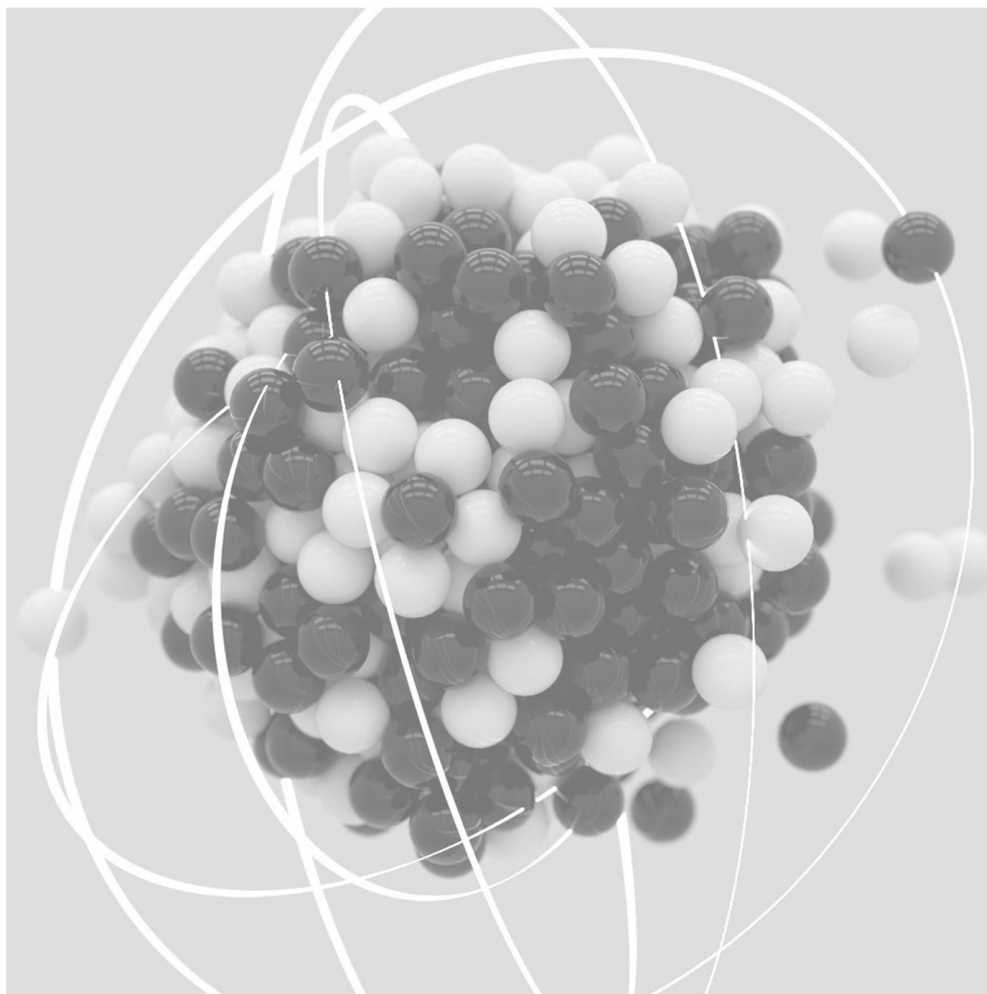
Издатель – Федеральное государственное бюджетное
образовательное учреждение высшего образования
«Тверской государственный университет».

Адрес: Россия, 170100, г. Тверь, ул. Желябова, д. 33.

Издательство Тверского государственного университета.

Адрес: 170100, г. Тверь, Студенческий пер., 12, корпус Б.

Тел. (4822) 35-60-63.



ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ
ИЗУЧЕНИЯ КЛАСТЕРОВ, НАНОСТРУКТУР
И НАНОМАТЕРИАЛОВ

Выпуск 16, 2024