

<u>ИПМ им.М.В.Келдыша РАН</u> • <u>Электронная библиотека</u> <u>Препринты ИПМ</u> • <u>Препринт № 1 за 2020 г.</u>



ISSN 2071-2898 (Print) ISSN 2071-2901 (Online)

<u>Демин М.М., Алексашкина А.А.,</u> <u>Королева О.Н.</u>

Атомистическое моделирование характеристик золота в области фазового перехода плавление–кристаллизация

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Демин М.М., Алексашкина А.А., Королева О.Н. Атомистическое моделирование характеристик золота в области фазового перехода плавление–кристаллизация // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2020. № 1. 18 с. http://doi.org/10.20948/prepr-2020-1

URL: http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2020-1

Ордена Ленина ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ имени М.В.Келдыша Российской академии наук

М.М. Демин, А.А. Алексашкина, О.Н. Королева

Атомистическое моделирование характеристик золота в области фазового перехода плавление–кристаллизация

М.М. Демин, А.А. Алексашкина, О.Н. Королева

Атомистическое моделирование характеристик золота в области фазового перехода плавление–кристаллизация

В температурной области фазового перехода плавление-кристаллизация с помощью молекулярно-динамического моделирования (МДМ) определяются равновесные свойства кристаллического и расплавленного золота. Определены зависимости удельной теплоты плавления равновесной барические И температуры плавления, температурные зависимости плотности, линейного коэффициента линейного размера образца, расширения, энтальпии, теплоемкости. Полученные зависимости свойств золота аппроксимированы полиномами невысоких степеней. Результаты сравнения полученных характеристик золота с экспериментальными данными показывают приемлемое качественное и количественное совпадение. Представлена численная И графическая информация о полученных свойствах и результатах сравнения с данными экспериментов.

Ключевые слова: атомистическое моделирование, фазовые превращения, золото, равновесные теплофизические свойства.

Mikhail Mikhailovich Demin, Anna Andreevna Aleksashkina, Olga Nikolaevna Koroleva

Atomistic modeling of gold characteristics in the region of the meltingcrystallization phase transition

In the temperature region of the melting-crystallization phase transition, the equilibrium properties of crystalline and molten gold are determined using molecular dynamics modeling (MDM). The pressure dependences of the specific heat of melting and the equilibrium melting temperature, the temperature dependences of the density, linear size of the sample, coefficient of linear expansion, enthalpy, and specific heat are determined. The obtained dependences of the properties of gold are approximated by polynomials of low degrees. The results of comparing the obtained characteristics of gold with experimental data show acceptable qualitative and quantitative agreement. Numerical and graphical information on the obtained properties and results of comparison with experimental data is presented.

Key words: atomistic modeling, phase transformations, gold, equilibrium thermophysical properties

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проект № 19-07-01001.

1. Введение

Из всех металлов золото является наиболее известным и широко используемым материалом в научных исследованиях [1], промышленном производстве [2] и, в последнее время, в проблемах биомедицины [3,4]. Специфические особенности золота вызывают интерес не только в различных приложениях, но и большой фундаментальный – в связи с быстрым развитием новых наноразмерных материалов [5]. Наночастицы золота обладают уникальными свойствами [6,7], что послужило основой для их возможного использования в целях тераностики в наномедицине [8].

Операции обработки металлов, в том числе золота, осуществляются в широком температурном диапазоне (от 300 K до (3-4)10³ K), в котором определяющую роль играют фазовые переходы І-го рода (плавлениекристаллизация, испарение-конденсация). Исследования кинетики и динамики фазовых превращений осуществляются в основном методами математического интерес для моделирования [9]. Особый исследований представляют механизмы плавления-кристаллизации золота. Как известно, в области фазового перехода возникает перегрев-переохлаждение твердой фазы, вещество изменяет свою структуру. Эти явления связаны с изменениями в фононной подсистеме золота, поэтому для математического моделирования нагреваохлаждения золота необходимо знать характеристики фононной подсистемы золота, такие как: барические зависимости температуры и теплоты плавления, температурные зависимости теплоемкости, плотности, коэффициента линейного расширения.

Экспериментальный подход определения свойств материалов, являющийся традиционным, имеет ряд ограничений, прежде всего по диапазону условий измерений, особенно в области плавления. В силу этого актуально использование теоретического подхода для получения свойств исследуемого материала, основным инструментом которого является метод молекулярной динамики (ММД).

Цель настоящей работы состоит в получении барических зависимостей температуры и теплоты плавления, температурных зависимостей теплоемкости, плотности, коэффициента линейного расширения золота в температурном диапазоне, включающем область плавления (T~ 300–2000 K).

2. Постановка задачи

Определение свойств фононной подсистемы золота в настоящей работе основано на атомистическом подходе.

2.1. Математическая формулировка задачи

Метод молекулярной динамики основан на представлении рассматриваемого объекта в виде совокупности частиц, для которых записываются уравнения Ньютона. Для каждой частицы рассматривается масса

m_i, скорость *v_i* и радиус-вектор *r_i*. Получается система из 2N обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ):

$$\begin{cases} m_i \frac{d\vec{v}_i}{dt} = \vec{F}_i + F_i^{ext} \\ \frac{d\vec{r}_i}{dt} = \vec{v}_i \end{cases}, \quad i = 1...N, \qquad (1)$$

где $\vec{F}_i = -\frac{\partial U(\vec{r}_1...\vec{r}_N)}{\partial \vec{r}_i}$ – сила взаимодействия между частицами, \vec{F}_i^{ext} – сила

взаимодействия с внешними полями, $U(\vec{r}_1,...,\vec{r}_N)$ – потенциальная энергия системы N частиц.

2.2. Начальные и граничные условия

В начальный момент времени рассматриваемый объект представляет собой кристалл при температуре T. Скорости частиц в начальный момент задаются как случайные величины, соответствующие распределению Максвелла при удвоенной температуре 2T. Перед началом моделирования производится процедура релаксации такого объекта с включенным термостатом [10] и баростатом [11]. Достаточно быстро часть кинетической энергии переходит в потенциальную, температура становится равной T, а давление устанавливается равным нулю P=0.

В качестве граничных условий используются периодические условия. При периодических граничных условиях по *Ox* считают, что частица, вышедшая через правую границу, заменяется частицей, имеющей такую же скорость, но вошедшей через левую границу.

В дальнейшем система ОДУ (1) решается с помощью конечно-разностной схемы Верле [12]. В этом методе координаты частиц вычисляются на целых временных слоях, а скорости – на полуцелых.

2.3. Потенциал взаимодействия частиц

При использовании атомистических моделей для исследования различных свойств веществ важнейшую роль играет выбор потенциалов взаимодействия между частицами, поскольку от него непосредственно зависит достоверность получаемых результатов. В данном исследовании используется одна из модификаций потенциала погруженного атома EAM [13]. В потенциалах EAM кроме парных взаимодействий учитывается коллективное взаимодействие частиц. В итоге потенциальная энергия металла представляется в виде суммы двух потенциалов: потенциала погружения i-го атома, зависящего от эффективной плотности в области нахождения центра атома и парного потенциала. Не все используемые потенциалы EAM позволяют хорошо описывать одновременно и кристаллическую и жидкую фазы металла. Потенциал погруженного атома, используемый в данной работе, был разработан для золота и протестирован авторами в [13].

Свойства фононной подсистемы золота, характеризующие плавление, такие как барические зависимости температуры плавления и теплоты перехода плавления И температурных зависимостей теплоемкости, плотности, коэффициента линейного расширения, моделировались в диапазоне значений температуры 300 ≤ T ≤ 2000 К с использованием широко распространенного пакета приложений LAMMPS (крупномасштабный атомно-молекулярный массивно-параллельный симулятор) [14]. Он реализует поддержку многих парных и многочастичных потенциалов ближнего действия, можно записывать атомарные конфигурации в текстовый файл, а также встроенные термостаты и баростаты. Скорость и давление для ансамбля частиц регулировались с помощью термостата и баростата Берендсена [10].

3. Результаты моделирования

Результаты вычислений для удобства дальнейшего использования аппроксимированы многочленами степени *m*

$$P_{\rm m}({\bf x}) = \sum_{k=0}^{m} a_k x^k , \qquad (2)$$

где *a_k* – коэффициенты многочлена.

Погрешность аппроксимации вычислялась по критерию наименьших квадратов

$$\Delta\left(P_m(t_j), \mathbf{y}_j\right) = \sqrt{\frac{1}{n+1} \sum_{j=0}^n \left(P_m(t_j) - \mathbf{y}_j\right)^2} \to \min,$$
(3)

где y_j – значения показателя по результатам вычислений для аргументов t_j (j=0,...,n).

3.1. Расчет равновесной температуры плавления

Для вычисления равновесной температуры плавления золота проводился эксперимент, основанный на одновременном существовании твердой и жидкой расчетной области. Расчетная область выбиралась фаз В В виде параллелепипеда, с размерами 20×10×10 элементарных ячеек. При этом половина образца представлялась в твердом кристаллическом виде, а вторая половина – в виде жидкости. Золото имеет гранецентрированную кубическую решетку (постоянная кристаллической решетки 0.406 нм), поэтому в такой области содержится 8000 частиц. По всем трем осям задаются периодические граничные условия.

Перед началом моделирования проводилась процедура релаксации, которая заключается в следующем. Для достижения релаксации при $T_0=300$ К задаются начальные скорости частиц, соответствующие максвелловскому

распределению при температуре 2*T*₀=600 К. Баростатом Берендсена поддерживалось нулевое давление. Через несколько пикосекунд равновесная температура образца становится равной 300 К.

Предварительно для определения температуры плавления T_m проводилось несколько экспериментов, в результате которых получалось приблизительное значение температуры плавления T_m ~ 1320 К. До этой температуры затем нагревался весь образец, после чего одна половина образца удерживается термостатом при этой температуре, а другая нагревается до 2000 К. На рис. 1 подготовленный образец. левой стороны области показан С видна кристаллическая решетка золота, здесь вещество в твердой фазе. С правой стороны можно наблюдать хаотическое расположение молекул, означающее, что вещество находится в жидкой фазе.



Рис. 1. Расчетная область, подготовленная для определения температуры плавления золота.

Далее в подготовленном образце нагретая часть охлаждается термостатом до температуры 1320 К. Все это время баростатом поддерживается нулевое давление. Затем запускается релаксационный расчет с выключенным термостатом при данной температуре, после чего отключается еще и баростат, и продолжается расчет до установления фазового равновесия. Вначале образец немного начнет кристаллизоваться и поэтому нагреется. После наступления фазового равновесия температура будет флуктуировать около равновесной температуры плавления. В данном случае температура получилась равной 1332 К. Справочное значение равновесной температуры плавления составляет $T_m = 1333,4$ К [15]. Полученное значение отличается от справочного на 0.1%.

Аналогично проводятся расчеты равновесной температуры плавления при давлениях: 5, 10, 30, 50, 80 и 100 кбар. На рис. 2 показана барическая зависимость температуры плавления. Результаты МДМ равновесной температуры плавления $T_m(P)$ были аппроксимированы линейной зависимостью (2).

$$T_m(P) = a_0 + a_1 \times P.$$

Значения коэффициентов *a_k* и погрешностей аппроксимации по критерию наименьших квадратов (3) представлены в таблице 1.

Таблица 1

Значения коэффициентов функции, аппроксимирующей *T_m*(*P*) по результатам вычислений, и величина погрешности аппроксимации

k	a_k
0	1332
1	6.489
$\Delta(P_m(P_i), \mathbf{y}_i)$	4.876



Рис. 2. Барическая зависимость температуры плавления золота. 1 - справочные данные [15], 2 - результаты моделирования

Сравнение результатов вычисления со справочными данными [15] показывает, полное совпадение при 0≤Р≤10 кбар. При давлении Р=30 кбар температура плавления, полученная из вычислений несколько выше справочной, погрешность составляет ~1,9%, при Р=50 кбар – ~ 3%. Данные сравнения показывают, что при давлении в пределах 50 кбар справочные значения температур плавления золота практически совпадают с полученными в ходе вычислительных экспериментов.

3.2. Расчет удельной теплоты плавления

Удельная теплота плавления Au рассчитывалась из данных моделирования как разность энтальпий твердой и жидкой фаз при одних и тех же температуре и давлении. Расчетная область выбиралась в виде параллелепипеда с размерами 15×15×15 элементарных ячеек, в области содержится 13500 частиц. По всем трем осям задаются периодические граничные условия.

Перед началом моделирования проводилась процедура релаксации при температуре T=300 K и нулевом давлении. Далее с помощью термостата с включенным баростатом область нагревалась до температуры плавления T_m=1332 K при нулевом давлении, и производился релаксационный расчет с вычислением энтальпии системы. Вычислялось среднее значение энтальпии твердого тела.

После процедуры релаксации подготовленный образец при температуре 300 К нагревался до 2000 К, чтобы произошло полное превращение твердой фазы в жидкость. После этого образец быстро охлаждается до температуры плавления T_m=1332 К. При этом весь образец из-за быстрого охлаждения все равно остается жидкостью. Далее в течение релаксационного расчета вычисляется энтальпия в каждый момент времени и находится ее среднее значение. Расчеты повторялись для других значений давления, заданного и поддерживаемого баростатом.



Рис. 3. Барическая зависимость удельной теплоты плавления, маркером показано справочное значение [14].

На рис. 3 показана полученная по результатам моделирования как разность энтальпий твердой и жидкой фаз барическая зависимость теплоты плавления золота. Известно справочное [15] значение только при давлении P=0, которое равно $L_m = 12,680$ КДж/моль. Для нулевого давления расчетное значение, составляющее $L_m = 12,894$ КДж/моль, отличается от справочного значения на ~1.7%. Для давления P=0 отличие значений незначительно. Для давлений, отличных от нулевого значения, данных нет.

Результаты МДМ удельной теплоты плавления золота $L_m(P)$ были аппроксимированы линейной зависимостью (2).

$$L_m(P) = a_0 + a_1 \times P.$$

Значения коэффициентов *a_k* и погрешностей аппроксимации по критерию наименьших квадратов (3) представлены в таблице 2.

Таблица 2

Значения коэффициентов функции, аппроксимирующей *L_m(P)* по результатам моделирования, и величина погрешности аппроксимации

k	a_k
0	12.894
1	0.041
$\Delta(P_m(P_i), y_i)$	0.05

3.3. Расчет плотности, линейного расширения и удельной теплоемкости золота

Для понимания природы процессов, происходящих при нагреве золота и переходе из твердого в жидкое состояние, особый интерес представляют исследования теплофизических характеристик. Из серии молекулярнодинамических расчетов в рамках одного вычислительного эксперимента определялись температурные зависимости коэффициента линейного расширения $\alpha(T)$, плотности $\rho(T)$ и удельной теплоемкости $C_p(T)$ золота.

Использовалась кубическая расчетная область 30×30×30 элементарных ячеек, содержащая ГЦК-кристалл из 108 000 частиц (при меньших размерах возникают слишком большие флуктуации). Задаются периодические граничные условия. Процедура релаксации, предшествующая моделированию, осуществлялась при температуре 300 К и нулевом давлении.

Далее производился медленный нагрев образца с постоянной скоростью равной примерно 0.5 К/пс. Нагрев продолжается до температуры 2000 К, при которой образец был полностью расплавлен. Снимались температурные зависимости: плотности $\rho(T)$, энтальпии H(T) и линейного размера L(T). Эксперимент проводился при постоянном нулевом давлении P = 0.

3.4. Плотность

В данной работе получена температурная зависимость плотности золота в температурном диапазоне $300 \text{ K} \le T \le 2000 \text{ K}$ из МДМ. Результаты моделирования после необходимой статистической обработки представлены на рисунке 4. Плотность расплава кремния при равновесной температуре плавления ($T_m = 1332$ K) оказывается меньше, чем плотность кристаллов при этой же температуре, т.е. золото, подобно остальным металлам, плавится с уменьшением плотности, как это и отражается в справочных данных [16].

На рисунке 4 хорошо заметно уменьшение плотности при перегреве твердой фазы ($T > T_m$). Величина скачка плотности на фазовом переходе твердое тело-жидкость хорошо соответствует справочным данным. Значение плотности при равновесной температуре плавления отличается от справочных данных в твердой фазе на 1,4%, а жидкой – на 1,1%. Величина изменения плотности на фазовом переходе в расчете составляет – 6%, согласно справочным данным [16] – 6,4%.



Рис. 4. Температурная зависимость плотности. Маркеры – данные эксперимента [16].

Полученные результаты в расчетах удобнее использовать в виде аналитической зависимости вида (2).

Для твердой и жидкой фаз получены зависимости второй степени

$$\rho(T) = a_0 + a_1 \times T + a_2 T^2.$$

Значения коэффициентов *a_k* и погрешностей аппроксимации по критерию наименьших квадратов (3) представлены в таблице 3.

Таблица З

k	Твердая фаза	Жидкая фаза
	a_k	a_k
0	19.453	19.351
1	-8.41×10 ⁻⁴	-1.9×10 ⁻³
2	-1.79×10 ⁻⁷	9.516×10 ⁻⁸
$\Delta(P_m(P_i), y_i)\%$	0.375	0.835

Значения коэффициентов функции, аппроксимирующей ρ(T) по результатам моделирования, и величина погрешности аппроксимации

3.5. Коэффициент линейного расширения

Изменение линейного размера образца L(T) тесно связано с изменением плотности. Согласно результатам МДМ при температуре плавления T_m линейный размер расплавленного образца оказался больше линейного размера твердотельного образца $L_{liq}(T) > L_{sol}(T)$ (рис. 5), в то время как соотношение плотности расплава и твердой фазы золота $\rho_{liq}(T) < \rho_{sol}(T)$ оказалось обратным (рис. 4), что является показателем понижения плотности золота во время плавления и соответствует экспериментальным данным [16].

На рисунке 5 видно, что $L_{sol}(T)$ продолжает увеличиваться при перегреве твердой фазы. Полученные перегревы составили $\Delta T \sim 333$ К. Увеличение линейного размера образца при $T=T_m$ составляет 2,0%.

Температурные зависимости L(T), полученные из вычислительных экспериментов, были аппроксимированы полиномами квадратичными зависимостями $\tilde{L}(T)$ вида (2) для твердой и жидкой фаз. Коэффициенты линейного расширения $\alpha(T)$ при давлении P вычислялись согласно соотношению

$$\alpha(\mathbf{T}) = \frac{1}{\tilde{L}(T)} \left(\frac{\partial \tilde{L}(T)}{\partial T} \right)_{P}.$$
(4)

Температурные зависимости были аппроксимированы степенными полиномами (2). Для твердой и жидкой фаз получены линейные зависимости:

$$\alpha(T) = a_0 + a_1 \times (T - T_0).$$

Значения коэффициентов *a_k* и погрешностей аппроксимации по критерию наименьших квадратов (3) представлены в таблице 4.



Рис. 5. Температурная зависимость линейного размера образца золота по результатам МДМ.



Рис. 6. Температурная зависимость коэффициента линейного расширения. Маркерами показаны справочные данные [15].

Значения коэффициентов функций, аппроксимирующих коэффициент линейного расширения золота по результатам моделирования, и величина погрешности аппроксимации

	a_k		
k	Solid, T ₀ =300K	Liquid, $T_0=1332K$	
0	1.635×10^{-5}	3.277×10 ⁻⁵	
1	7.635×10 ⁻⁹	-1.883×10 ⁻⁹	
$\Delta(P_m(T_j), y_j) \%$	6.986×10 ⁻³	0.019	

Графическое представление результатов моделирования коэффициента линейного расширения золота в температурном диапазоне 300-2000 К и справочные данные [15] приведены на рисунке 6. Полученные результаты показывают качественное соответствие данным экспериментов.

С ростом температуры коэффициент линейного расширения золота (рис. 6) возрастает в твердой фазе, что соответствует справочным данным. В жидкой фазе коэффициент линейного расширения золота имеет тенденцию к понижению.

3.6. Удельная теплоемкость

Как известно, удельная теплоемкость является мерой поглощения энергии веществом при его нагревании. Полная теплоемкость C(T,N) определяется теплоемкостью решетки $C_{lat}(T)$ и теплоемкостью свободных носителей $C_e(T,N)$ (электронов и дырок), поскольку перенос тепловой энергии в твердом теле осуществляется свободными носителями заряда и фононами

$$C(T,N) = C_{lat}(T) + C_e(T,N), \qquad (5)$$

где *N* – концентрация носителей заряда.

Температурная зависимость теплоемкости решетки $C_{lat}(T)$ при постоянном давлении P в данной работе определялась по значениям энтальпии H(T) (рис. 7), полученным в ходе рассмотренного выше вычислительного МДМ эксперимента. Значения H(T) были аппроксимированы для жидкой и твердой фаз полиномами $\tilde{H}(T)$ (2). Температурная зависимость теплоёмкости $C_{lat}(T)$ определялась дифференцированием $\tilde{H}(T)$:

$$C_{lat}(T) = \left(\frac{\partial \tilde{H}(T)}{\partial T}\right)_{P}.$$
(6)

На рис. 8 показана теплоемкость золота в сравнении со справочными данными.



Рис. 7. Температурная зависимость энтальпии.



Рис. 8. Зависимость удельной теплоемкости при постоянном нулевом давлении от температуры. 1 – эксперимент, 2 – моделирование

В области фазового перехода в золоте при равновесной температуре плавления *T_m* происходит положительный скачок энтальпии (рис. 7),

составляющий 4,12%. При перегреве твердой фазы, составляющем $\Delta T \sim 282$ К, энтальпия продолжает увеличиваться (рис. 7). Эта энергия расходуется в основном на тепловые колебания решетки. Увеличение амплитуды колебаний связано с уменьшением прочности химической связи кристаллической решетки.

Зависимость была аппроксимирована полиномами (2) в твердой и жидкой фазах:

$$C_{lat}(T) = R(B_0 + B_1T + B_2T^2 + B_3T^3)_{k=s,l},$$

где индекс k=s,l означает принадлежность к твёрдой и жидкой фазам соответственно, $R=8,3145 \square \mathcal{M} \mathcal{M} / (MOND \times K)$. В табл. 5 приводятся параметры аппроксимации.

Таблица 5

Значения коэффициентов функций, аппроксимирующих удельную теплоемкость золота по результатам моделирования

	Solid	Liquid
T _{min} ,[K]	300	1346
T_{max} , [K]	1332	2000
B ₀	2.6906	3.995
<i>B</i> ₁	0,0018	3.693×10 ⁻⁴
<i>B</i> ₂	-2.212×10 ⁻⁶	-2.926×10 ⁻⁷
<i>B</i> ₃	1.11×10 ⁻⁹	1.153×10 ⁻¹¹

4. Заключение

В работе с молекулярно-динамического помощью подхода В температурной области, связанной с плавлением И кристаллизацией микроструктур (300 К÷2000 К), получены равновесные свойства золота. Определены барические зависимости удельной теплоты плавления $L_m(P)$ и равновесной температуры плавления $T_m(P)$, являющейся границей равновесия двух фаз золота – твердой и жидкой. Определены также температурные зависимости плотности $\rho(T)$, линейного размера образца L(T), коэффициента линейного расширения $\alpha(T)$, энтальпии H(T), теплоемкости решетки $C_{lat}(T)$. МДМ проводилось с потенциалом погруженного атома [13]. Сравнение рассчитанных характеристик золота с данными экспериментов показало хорошее совпадение. Представлена численная и графическая информация о полученных свойствах и результатах сравнения с данными экспериментов. Полученные зависимости свойств золота аппроксимированы полиномами невысоких степеней.

Библиографический список

- Shafeev G.A., Rakov I.I., Ayyyzhy K.O., Mikhailova G.N., Troitskii A.V., Uvarov O.V. Generation of Au nanorods by laser ablation in liquid and their further elongation in external magnetic field // Applied Surface Science, 466, 477–482 (2019). doi:10.1016/j.apsusc.2018.10.062
- Jendrzej Sandra, Gökce Bilal, Epple Matthias, Barcikowski Stephan. How Size Determines the Value of Gold - Economic Aspects of Wet Chemical and Laser-Based Metal Colloid Synthesis // ChemPhysChem., 18, 1-9 (2017). DOI: 10.1002/cphc.201601139
- 3. Elahi N., Kamali M., Baghersad M. H. Recent biomedical applications of gold nanoparticles: A review // Talanta, **184**, 537-556, (2018) https://doi.org/10.1016/j.talanta.2018.02.088
- 4. Zhang X. Gold Nanoparticles: Recent Advances in the Biomedical Applications // Springer, **72** (3), 771–775 (2015).
- Barcikovski S., Hahn A., Kabashin A.V., Chichkov B.N. Properties of nanoparticles generated during femtosecond laser machiningin air and water // Appl. Phys. A, 87, 47–55 (2007). DOI: 10.1007/s00339-006-3852-1
- 6. Maximova K., Aristov A., Sentis M., Kabashin A.V. Size-controllable synthesis of bare gold nanoparticles by femtosecond laser fragmentation in water // Nanotechnology, **26**, 065601 (8pp) (2015).
- Abrica-González Paulina, Zamora-Justo J. A., Chavez-Sandoval Blanca Estela, Balderas-López José Abraham. Measurement of the Optical Properties of Gold Colloids by Photoacoustic Spectroscopy // Int. J. Thermophysics, **39**(8), 93 (2018) DOI: 10.1007/s10765-018-2412-1
- Xue X., Liang X.-J. Multifunctional Nanoparticles for Theranostics and Imaging. Nanostructure Science and Technology // Y. Ge et al. (Eds.) in *Nanomedicine, Nanostructure Science and Technology,* Springer Science+Business Media New York, 101–115 (2014). doi:10.1007/978-1-4614-2140-5_6
- 9. Мажукин В.И., Шапранов А.В., Пережигин В.Е., Королева О.Н., Мажукин А.В. Кинетические стадии плавления и кристаллизации сильно перегретых и переохлажденных металлов // Математическое моделирование, **28** (12), 83-94, (2016).
- 10.Berendsen H.J.C., Postma J.P.M., Van Gunsteren W.F., DiNola A., Haak J.R. Molecular dynamics with coupling to an external bath // J. Chem. Phys., 81 (1984) 3684-3690.
- 11.Allen M.P. and Tildesley D.J. Computer Simulation of Liquids, Oxford: Clarendon Press (2002)
- 12.Verlet L. Computer "Experiments" on Classical Fluids. I. Thermodynamically Properties of Lennard-Jones Molecules // Phys. Rev., **159**, 98-103 (1967).

- 13.Zhakhovskii V.V., Inogamov N.A., Petrov Yu.V., Ashitkov S.I., Nishihara K. Molecular dynamics simulation of femtosecond ablation and spallation with different interatomic potentials // *Appl. Surf. Sci.*, **255**, 9592-9596 (2009)
- 14.Plimpton S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics // J. Comput. Phys., **117**(1), 1-19 (1995)
- 15. Физические величины. / Справочник под ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова, М.: Энергоатомиздат (1991).
- 16.Зиновьев В.Е. Теплофизические свойства металлов при высоких температурах // «Металлургия» (1989).

1.	Введение	3	
2.	Постановка задачи	3	
	2.1. Математическая формулировка задачи	3	
	2.2. Начальные и граничные условия	4	
	2.3. Потенциал взаимодействия частиц	4	
3.	Результаты моделирования	5	
	3.1. Расчет равновесной температуры плавления	5	
	3.2. Расчет удельной теплоты плавления	8	
	3.3. Расчет плотности, линейного расширения и удельной		
	теплоемкости золота	9	
	3.4. Плотность	10	
	3.5. Коэффициент линейного расширения.	11	
	3.6. Удельная теплоемкость.	13	
4.	Заключение	15	
Би	Библиографический список16		
	• •		