

**ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕРМОДИНАМИКИ И  
СТРУКТУРЫ МАЛЫХ КЛАСТЕРОВ В ПЛОТНЫХ  
ПАРАХ ЗОЛОТА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ  
ЕАМ-ПОТЕНЦИАЛА**

*Жуховицкий Д.И.,\* Жаховский В.В.*

*ОИВТ РАН, Москва, Россия*

*\*dmr@ihed.ras.ru*

С помощью атомистического моделирования исследованы кластеры, содержащие до 26 атомов, в плотных докритических парах золота. Для этого разработан новый ЕАМ-потенциал для золота, применимый как к легчайшим кластерам, так и к сплошному веществу. Для фазовой границы пар—жидкость найдено отношение длины Толмена к радиусу молекулярной ячейки в жидкости. При полученном значении 0.16 классическая теория нуклеации с поправкой Толмена практически идентична двухпараметрической модели «горячих» кластеров, т.е. малые кластеры могут быть описаны как макроскопические капли жидкого металла. Обе модели хорошо согласуются с результатами численного моделирования. Показано, что легчайшие кластеры имеют структуру, близкую к свободно сочлененной цепи, т.е. их можно рассматривать как квазифракталы с фрактальной размерностью близкой к двум. Структурный переход кластера из компактного в квазицепочечное состояние является кроссовером при характерной температуре порядка 2500 К [1].

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта в форме субсидии на проведение крупного научного проекта по приоритетным направлениям научно-технологического развития №13.1902.21.0035.

- 
1. Zhukhovitskii D.I., Zhakhovsky V.V. // J. Chem. Phys. 2020. V. 152. No. 22. P. 224705.