

## Расчетные данные по никелевому кластеру сферической формы

С.В. Поляков, В.О. Подрыга

ИПМ им. М.В. Келдыша РАН

Предлагаемый набор данных относится к расчетам термодинамического равновесия никелевого кластера сферической формы при нормальных условиях ( $T=273.15$  ,  $p=101325$  Pa). В качестве примера выбран сферический кластер, вписанный в куб с размерами  $24 \times 24 \times 24$ , измеряемыми в единицах ребра решетки, равного  $a=0.35314$  нм. Расчет проводился с помощью метода молекулярной динамики. Подробности процедуры расчета представлены в работе

В.О. Подрыга, С.В. Поляков. Молекулярно-динамическое моделирование процесса установления термодинамического равновесия нагретого никеля. // Препринты ИПМ им.М.В.Келдыша. 2014. № 41. 20 с. URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2014-41>.

Набор данных представляет собой архив, в котором содержатся данные в текстовом и бинарном форматах, в том числе в формате пакета научной визуализации TecPlot.