ISSN 1727-0227

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ
"УДМУРТСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР
УРАЛЬСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК"

ХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА И МЕЗОСКОПИЯ

ХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА И МЕЗОСКОПИЯ, 2024, Том 26, № 1

Том 26, № 1

Ижевск-2024

ХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА И МЕЗОСКОПИЯ

Журнал основан в 1999 году, выходит 4 раза в год.
Учредитель и Издатель – Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
"Удмуртский федеральный исследовательский центр
Уральского отделения Российской академии наук" (УдмФИЦ УрО РАН)

CHEMICAL PHYSICS AND MESOSCOPY

The journal was founded in 1999 and is published 4 times per year.
Founder and Publisher – Federal State Budgetary Institution of Science
"Udmurt Federal Research Center
of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences" (UdmFRC UB RAS)

Главный редактор
академик РАН **А.М. Липанов**, Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН

Редакционная коллегия:
М.Ю. Альес – заместитель главного редактора, д.ф.-м.н., профессор, УдмФИЦ УрО РАН,

В.И. Кодолов – заместитель главного редактора, д.х.н., профессор, ИжГТУ имени М.Т. Калашникова,

А.К. Аржников, А.А. Берлин, А.В. Вахрушев, О.Ю. Гончаров, В.Б. Дементьев, А.И. Карпов, М.А. Корепанов, А.И. Коршунов, В.И. Ладьянов, Н.В. Митюков, Г.М. Михеев, С.М. Молин, В.В. Кодолова-Чухонцева, В.Ю. Трубицын, В.В. Устинов, И.Н. Шабанова, Ю.К. Шелковников

Editor in Chief
academician of RAS **A.M. Lipanov**, Institute of Applied Mathematics named after M.V. Keldysh RAS

Editorial Board:
M.Yu. Alies Deputy Editor in Chief, Dr. Phys.-Math. Sci., UdmFRC UB RAS,

V.I. Kodolov Deputy Editor in Chief, Dr. Chem. Sci., Kalashnikov ISTU,

A.K. Arzhnikov, A.A. Berlin, A.V. Vakhrushev, O.Yu. Goncharov, V.B. Dementyev, A.I. Karpov, M.A. Korepanov, A.I. Korshunov, V.I. Ladyanov, N.V. Mityukov, G.M. Mikheev, S.M. Molin, V.V. Kodolova-Chukhontseva, V.Yu. Trubitsin, V.V Ustinov, I.N. Shabanova, Yu.K. Shelkovnikov

Журнал "Химическая физика и мезоскопия" публикует результаты оригинальных исследований, соответствующих научному профилю журнала, по следующим направлениям:
- процессы горения и взрыва
- математическое моделирование физико-химических процессов
- кластеры, кластерные системы и материалы
- межфазные слои и процессы взаимодействия в них
- квантово-химические расчеты
- нелинейные кинетические явления
- наноэлектронные приборы и устройства

The journal "Chemical Physics and Mesoscopy" publishes the results of original research, corresponding to the scientific profile of the journal, in the following areas:
- combustion and explosion processes
- mathematical modeling of physical and chemical processes
- clusters, cluster systems and materials
- interphase layers and interaction processes in them
- quantum chemical calculations
- nonlinear kinetic phenomena
- nanoelectronic devices and devices

Адрес редакции: 426067, г. Ижевск, ул. Т. Барамзиной, 34, 8(3412)20-35-14, e-mail: xfm@udman.ru
Editorial office address: 34, T. Baramzina St., Izhevsk, 426067, Russian Federation, 8(3412)20-35-14, e-mail: xfm@udman.ru

ISSN 1727-0227 (Print), ISSN 1727-0529 (Online)

ISSN 1727-0227
9 771727 022002

© УдмФИЦ УрО РАН, 2024

СОДЕРЖАНИЕ

А. Г. Князева, О. Н. Крюкова
Особенности инициирования подвижным источником энергии реакций в плоском слое, расположенном на подложке…… 5

М. Р. Королева, В. С. Волков
Численное моделирование течения двухкомпонентной жидкости по трубе со статическим смесителем…….. 22

А. А. Кочурова, А. Ю. Русаев, С. А. Груздь
Исследование влияния химического состава воздушной среды на аэродинамику полета малых летательных аппаратов…….. 31

А. М. Липанов, С. А. Карсканов
Исследование сжимаемых ламинарных потоков в трехмерном прямоугольном канале…… 42

Г. М. Полетаев, В. В. Коваленко
Исследование расстеклования аморфных наночастиц титана в вакууме и в алюминиевой оболочке: молекулярно-динамическое моделирование……. 50

С. В. Суворов, О. Ю. Северюхина
Изменение размеров фуллеритов C_{60} при их осаждении на подложку твердого тела…… 60

С. Л. Барботько, О. С. Вольный, М. М. Боченков, О. П. Коробейничев, А. Г. Шмаков, О. О. Тужиков, Б. А. Буравов, А. Аль-Хамзави, О. И. Тужиков, Е. А. Соснин, А. А. Палецкий, А. А. Чернов, А. Р. Сагитов, И. В. Куликов, Е. В. Карпов, С.А. Трубачев
Армированные композитные материалы на основе фосфорсодержащих связующих с перспективными физико-механическими и пожаробезопасными свойствами…… 69

С. Б. Базарова, И. Г. Симаков, Ч. Ж. Гулгенов, Т. Ч. Очиров
Определение диэлектрических свойств воды в тонком слое……. 85

Д. К. Жиров
Испытания индустриального масла И-20А с нанододисперсными добавками шунгита и серпентина на машине трения…….. 95

Г. А. Прибытков, А. В. Барановский, В. В. Коржова, И. А. Фирсина, К. О. Акимов, В. П. Кривопалов
Исследование продуктов синтеза в механоактивированных смесях титанидов меди с углеродом…… 103

Т. М. Сабирова, А. Н. Бельтюков
Электронно-зондовый микроанализ археологического цветного металла (на примере находок V–VI вв. н. э. из погребений Варнинского могильника)……... 112

В. Вал. Соболев, Л. И. Жданова
Фундаментальные оптические функции и параметры элементарных полос переходов криокристаллов N_2 и O_2 …… 120

РЕФЕРАТЫ……..……. 130

Требования к оформлению статей…… 133

CONTENTS

Anna G. Knyazeva, Olga N. Kryukova
Peculiarities of the Reaction Initiation by a Moving Energy Source in a Thin Layer Located on a Substrate…… 5

Maria R. Koroleva, Vladimir S. Volkov
Numerical Modeling of the Two-Component Liquid Flow through a Pipe with a Static Mixer….. 22

Anastasia A. Kochurova, Alexander Y. Rusaev, Svetlana A. Gruzd
Investigation of the Influence of the Chemical Composition of the Air Environment on the Flight Aerodynamics of Small Aircrafts……. 31

Alexey M. Lipanov, Sergey A. Karskanov
Investigation of Compressible Laminar Flows in a Three-Dimensional Rectangular Channel…….. 42

Gennady M. Poletaev, Viktor V. Kovalenko
Study of Devitrification of Amorphous Titanium Nanoparticles in Vacuum and in an Aluminum Shell: Molecular Dynamics Simulation……..…….. 50

Stepan V. Suvorov, Olesya Yu. Severyukhina
The Change in the Size of C_{60} Fullerites during Their Deposition on a Solid Substrate……. 60

Sergey L. Barbot'ko, Oleg S. Volnyj, Mikhail M. Bochenkov, Oleg P. Korobeinichev, Andrey G. Shmakov, Oleg O. Tuzhikov, Boris A. Buravov, Ali Al-Hamzawi, Oleg I. Tuzhikov, Egor A. Sosnin, Alexander A. Paletsky, Anatoly A. Chernov, Albert R. Sagitov, Ilya V. Kulikov, Evgeny V. Karpov, Stanislav A. Trubachev
Reinforced Composite Materials Based on Phosphorus-Containing Binders with Promising Mechanical and Fireproof Properties…….. 69

Sayana B. Bazarova, Ivan G. Simakov, Chingis Zh. Gulgenov, Tumen Ch. Ochirov
Determination of the Dielectric Properties of a Liquid in a Nanosized Layer……. 85

Dmitriy K. Zhirov
The Testing of Industrial Oil I-20A with Nano-Dispersed Additives of Shungite and Serpentine on a Friction Machine…….. 95

Gennady A. Pribytkov, Anton V. Baranovskiy, Victoria V. Korzhova, Irina A. Firsina, Kirill O. Akimov, Vladimir P. Krivopalov
Study of Synthesis Products in Mechanoactivated Mixtures of Copper Titanides with Carbon……. 103

Tatiana M. Sabirova, Artemii N. Beltiukov
Electron Probe Microanalysis of Archaeological Non-Ferrous Metal (Using Finds of the 5th–6th Centuries AD from the Burials of the Varninskiy Burial Ground)……. 112

Valentin Val. Sobolev, Lyudmila I. Zhdanova
Fundamental Optical Functions and Parameters of Elementary Transition Bands of N_2 and O_2 Cryocrystals……. 120

ABSTRACT…….…….... 130

Requirements for the design of articles ……... 133

https://doi.org/10.62669/17270227.2024.1.5

УДК 538.911

1.3.8 – Физика конденсированного состояния (технические, физико-математические науки)

Исследование расстеклования аморфных наночастиц титана в вакууме и в алюминиевой оболочке: молекулярно-динамическое моделирование

Г. М. Полетаев[1], В. В. Коваленко[2]

[1] Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова, Россия, 656038, Алтайский край, г. Барнаул, пр. Ленина, 46

[2] Сибирский государственный индустриальный университет, Россия, 654006, г. Новокузнецк, ул. Кирова, 42

Аннотация. Методом молекулярной динамики проведено исследование процесса расстеклования наночастиц титана в вакууме и в алюминиевой оболочке при нагревании со скоростью $5 \cdot 10^{11}$ К/с. Показано, что изменение температуры расстеклования по сравнению с массивным образцом обратно пропорционально диаметру частицы: по мере уменьшения размера частицы и, соответственно, увеличения доли атомов вблизи границы раздела температура расстеклования растет. Наличие алюминиевой оболочки приводит к значительному повышению температуры расстеклования наночастиц титана – для рассматриваемых размеров наночастиц (диаметром от 1.75 до 11 нм) разница составила около 200 К. Механизмы зарождения кристаллической фазы в частицах в вакууме и в алюминиевой оболочке существенно отличаются: в первом случае кристаллические зародыши формируются вблизи поверхности, во втором – напротив, в объеме частицы.

Ключевые слова: молекулярная динамика, наночастица, расстеклование, кристаллизация, аморфный металл.

✉ *Геннадий Полетаев, e-mail: gmpoletaev@mail.ru*

Study of Devitrification of Amorphous Titanium Nanoparticles in Vacuum and in an Aluminum Shell: Molecular Dynamics Simulation

Gennady M. Poletaev[1], Viktor V. Kovalenko[2]

[1] Polzunov Altai State Technical University (46, Lenin St., Barnaul, Altai Territory, 656038, Russian Federation)

[2] Siberian State Industrial University (42, Kirov St., Novokuznetsk, 654006, Russian Federation)

Summary. The process of the devitrification of titanium nanoparticles in a vacuum and in an aluminum shell was studied at heating rate of $5 \cdot 10^{11}$ K/s by the molecular dynamics method. Additional consideration of the influence of the aluminum shell is related to the solution of the issue of reducing the temperature of the initiation of the high-temperature synthesis reaction in the Ti-Al system in mixtures subjected to preliminary mechanical activation. It is shown that the change in the devitrification temperature compared to a bulk sample is inversely proportional to the particle diameter: as the particle size decreases and, accordingly, the proportion of atoms near the interface increases, the devitrification temperature increases. The presence of an aluminum shell leads to a significant increase in the devitrification temperature of titanium nanoparticles - for the considered sizes of nanoparticles (diameter from 1.75 to 11 nm) the difference was about 200 K. Thus, a decrease in the size of titanium particles and the presence of an aluminum shell increase the temperature range for the existence of the amorphous phase of titanium. The mechanisms of the nucleation of the crystalline phase in particles in a vacuum and in an aluminum shell are significantly different: in the first case, crystal nuclei are formed near the surface; in the second, on the contrary, in the bulk of the particle.

Keywords: molecular dynamics, nanoparticle, devitrification, crystallization, amorphous metal.

✉ *Gennady Poletaev, e-mail: gmpoletaev@mail.ru*

ВВЕДЕНИЕ

Металлическим наночастицам в последние десятилетия уделяется большое внимание благодаря их уникальным физическим, химическим и оптическим свойствам, обусловленным высокой долей свободной поверхности, квантово-механическими и топологическими эффектами [1]. Наряду с металлическими наночастицами в кристаллическом состоянии в настоящее время большой интерес представляют частицы с аморфной структурой [2 – 5]. Атомы в аморфных частицах находятся в неравновесном состоянии и имеют более высокую энергию Гиббса по сравнению с атомами в кристалле, обладают уникальной электронной структурой, что делает их перспективными, например, в области катализа [6 – 8]. Аморфные металлы, или металлические стекла, обладают сочетанием необычных магнитных и механических свойств. В частности, они имеют высокую прочность наряду с высокой пластичностью и вязкостью разрушения [9, 10].

При исследовании путей синтеза и обработки металлических наночастиц большое внимание уделяется управлению фазовым состоянием, размером и формой частиц из-за их критического влияния на полезные свойства [11 – 14]. Ввиду этого большое значение приобретает исследование стабильности фазового состояния и механизмов фазовых переходов в наночастицах и факторов, влияющих на кинетику переходов и температуру их инициации.

В настоящее время известно, что температура плавления наночастиц по мере уменьшения их размера снижается из-за роста доли поверхности по отношению к объему, что было показано как экспериментально [15 – 17], так и с помощью компьютерного моделирования [18 – 20]. С помощью моделирования было выяснено, что температура кристаллизации при охлаждении от расплавленного состояния также зависит от размера и формы частиц, то есть от доли поверхности [18, 21], и снижается при увеличении этой доли.

Вместе с тем слабоизученным остается механизм и кинетика, так называемого, расстеклования наночастиц – потери аморфного состояния в результате их кристаллизации при нагреве. Настоящая работа посвящена изучению на атомном уровне с помощью молекулярно-динамического моделирования процесса расстеклования аморфных наночастиц титана в вакууме и в алюминиевой оболочке. Рассмотрение дополнительно влияния алюминиевой оболочки связано с решением также вопроса снижения температуры инициации реакции высокотемпературного синтеза в системе Ti-Al в смесях, подвергнутых предварительной механоактивации [22 – 24]. В процессе механоактивации формируются, так называемые, механокомпозиты, представляющие собой матрицу из более пластичного компонента (в данном случае алюминия), в объеме которой находятся наноразмерные частицы более хрупкого компонента смеси (титана) [23, 24]. Такая система характеризуется высокой степенью неравновесности из-за высокой концентрации дефектов и даже наличия аморфной фазы, образующейся в результате интенсивной деформации. Отмечается, что начало реакции горения в такой неравновесной системе начинается при температурах, существенно ниже температуры плавления алюминия [23, 24].

Одним из преимуществ компьютерного моделирование является возможность исследования влияния одного из факторов (наличия высокой плотности границ зерен, дислокаций, внутренних напряжений, аморфного состояния) на рассматриваемый процесс. В [25] было показано, что аморфное состояние алюминия в меньшей степени приводит к интенсификации взаимной диффузии, чем аморфное состояние титана. Однако при повышении температуры, очевидно, может произойти расстеклование аморфной фазы титана и ее влияние на воспламенение окажется минимальным. Вместе с тем, наличие межфазной границы Ti-Al может влиять на температуру расстеклования и повышать температурный интервал существования аморфной фазы. Указанный вопрос, помимо рассмотрения аморфных наночастиц титана в вакууме, также рассматривается в настоящей работе.

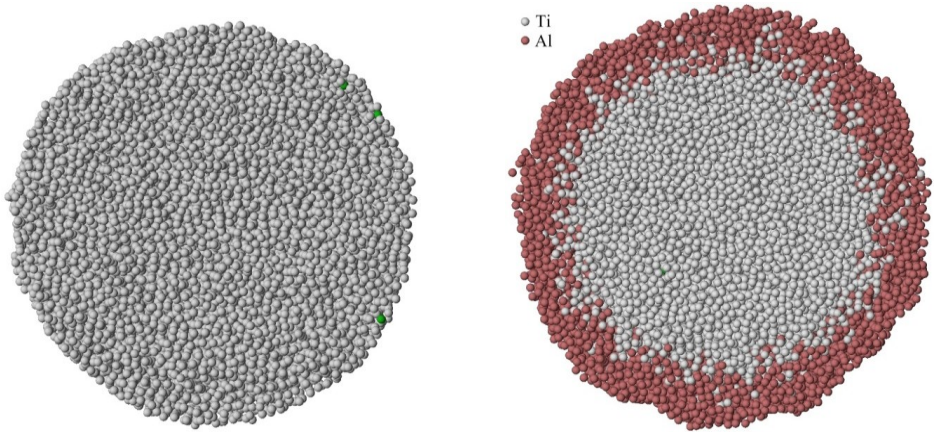
ОПИСАНИЕ МОДЕЛИ

Для описания межатомных взаимодействий в системе Ti-Al использовались EAM потенциалы из работы [26], где они были получены на основе сопоставления с экспериментальными данными и *ab initio* расчетами для различных свойств и структур металлов Ti, Al и интерметаллидов Ti_3Al и TiAl. Они хорошо зарекомендовали себя при проведении различных исследований и прошли успешную апробацию по широкому спектру механических и структурно-энергетических свойств сплавов системы Ti-Al [26 – 30]. В частности, используемые нами потенциалы показывают хорошее согласие с экспериментальными данными по температуре плавления Ti и Al: в молекулярно-динамической модели они получились равными 1995 и 990 К соответственно (справочные значения: 1943 и 933 К).

Частица титана на первом этапе создавалась путем вырезания шара соответствующего размера из идеального кристалла. Рассматривались частицы диаметром от 1.75 до 11 нм. Для частиц диаметром менее 1.75 нм сложно было определить момент начала

кристаллизации, а для частиц с диаметром более 11 нм влияние свободной поверхности уже было сравнительно небольшим. Вокруг частицы имитировалось свободное пространство. Для моделирования слоя алюминия вокруг титановой частицы создавалась оболочка, содержащая примерно столько же атомов, сколько содержала частица. Изначально оболочка тоже вырезалась из кристалла алюминия. Данной толщины оболочки было достаточно и дальнейшее ее увеличение не влияло на результаты.

Аморфная структура частиц создавалась путем сверхбыстрого (порядка 10^{16}–10^{17} К/с) охлаждения частиц, расплавленных при нагревании до 3000 К, до температуры близкой к 0 К. При охлаждении металла с такой скоростью гомогенная кристаллизация не успевает произойти и образуется аморфная структура. Качество аморфной структуры проверялось с помощью диаграмм радиального распределения атомов и по средней энергии атомов в наночастице (об этом подробнее будет сказано в следующем разделе). Кроме того, разрушение кристаллической структуры частиц, как и их кристаллизация, как правило, были хорошо видны визуально, а также при использовании визуализатора кристаллических фаз. На рис. 1 изображены примеры срезов аморфных частиц титана диаметром 9 нм в вакууме и в алюминиевой оболочке.



a) *b*)

Рис. 1. Аморфные наночастицы Ti диаметром 9 нм в вакууме (*a*) и в алюминиевой оболочке (*b*). Изображены срезы частиц

Fig. 1. Amorphous Ti nanoparticles with a diameter of 9 nm in vacuum (*a*) and in aluminum shell (*b*). Sections of particles are shown

Для частиц каждого размера проводилось моделирование нагревания с постоянной скоростью $5 \cdot 10^{11}$ К/с. В [21] было показано, что скорости изменения температуры 10^{13} К/с уже достаточно для протекания гомогенной кристаллизации. Однако, чем ниже скорость, тем точнее определение температуры начала фазового перехода. С другой стороны, чем дольше компьютерный эксперимент, тем выше взаимная диффузия на границе раздела Ti-Al, которая тоже влияет на погрешность определения температуры расстеклования. Скорость в диапазоне $5 \cdot 10^{11}$ – $5 \cdot 10^{12}$ К/с оказалась в данном случае оптимальной.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

В качестве основной характеристики состояния структуры наночастиц была выбрана средняя потенциальная энергия атомов титана. На рис. 2 показаны зависимости средней энергии атомов титана от температуры для частиц диаметром 7 и 9 нм в вакууме и в алюминиевой оболочке. Пунктирной линией также показаны зависимости для монокристаллической частицы.

Резкие падения средней энергии атомов на графиках, очевидно, соответствуют фазовому переходу – расстеклованию, то есть кристаллизации аморфных частиц при нагревании. Фазовые переходы плавление-кристаллизация, как известно, происходят не мгновенно, фронт кристалл-жидкость движется с конечной скоростью, зависящей от температуры и, как правило, составляет около нескольких десятков метров в секунду

[31 – 33]. В связи с вышесказанным мы определяли температуру расстеклования по моменту начала фазового перехода (показаны стрелками на рисунке).

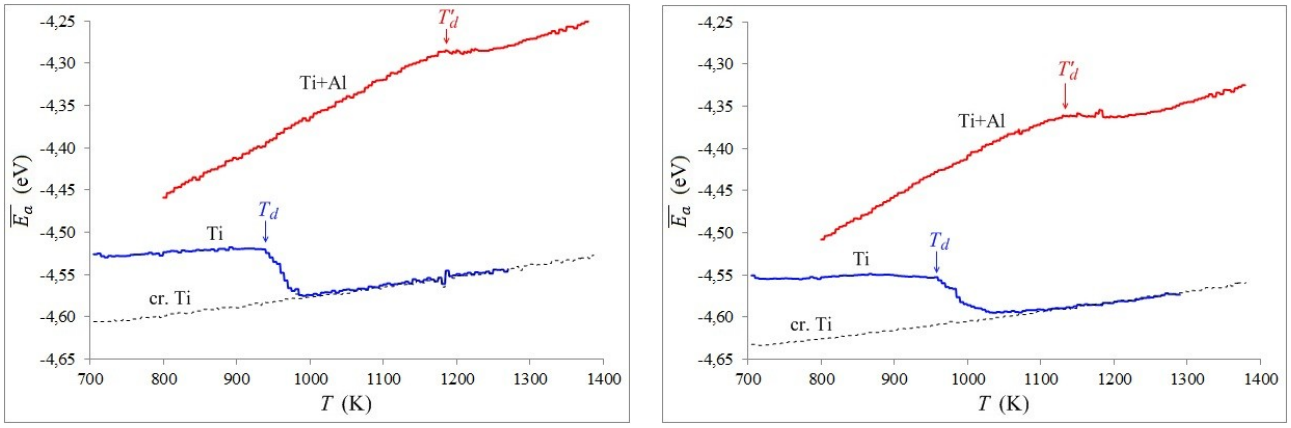


Рис. 2. Зависимости средней потенциальной энергии атомов Ti от температуры при нагревании со скоростью $5 \cdot 10^{11}$ К/с аморфной частицы Ti в вакууме и в алюминиевой оболочке: *a*) диаметром 7 нм; *b*) диаметром 9 нм. Пунктиром показана зависимость для монокристаллической частицы. T_d – температура расстеклования аморфной частицы в вакууме, T'_d – в алюминиевой оболочке

Fig. 2. Dependences of the average potential energy of Ti atoms on temperature during heating at a rate of $5 \cdot 10^{11}$ K/s of an amorphous Ti particle in vacuum and in an aluminum shell: *a*) with a diameter of 7 nm; *b*) with a diameter of 9 nm. The dotted line shows the dependence for a single-crystal particle. T_d – devitrification temperature of an amorphous particle in vacuum, T'_d – in an aluminum shell

Для частиц в вакууме (нижние графики на рис. 2) расстеклование начиналось при температуре примерно 940 К для частицы диаметром 7 нм и 930 К для частицы диаметром 9 нм. Эти значения выше экспериментальных: согласно [34], для сплавов с высоким содержанием титана данная температура составляет около 700 – 800 К. Однако, известно, что в молекулярно-динамической модели требуется сравнительно длительный процесс зарождения центров кристаллизации и начало данного процесса «задерживается» при постепенном изменении температуры, и, чем выше скорость изменения температуры, тем выше «задержка» [21]. Кроме этого, используемый потенциал имеет некоторую погрешность описания процесса расстеклования, что также оказывает влияние на определение температуры перехода.

После расстеклования и кристаллизации всей частицы в вакууме средняя энергия атомов почти совпадала с энергией монокристаллической частицы. Рассматриваемая скорость повышения температуры была достаточно низкой для формирования минимальной плотности дефектов при кристаллизации, границы зерен если и формировались, то, как правило, низкоэнергетические – с высокой плотностью совпадающих узлов, часто двойники.

Графики изменения средней энергии атомов титана для частиц в алюминиевой оболочке расположены выше на рис. 2. Это связано с тем, что часть атомов титана диффундировала в алюминий, потенциальная энергия таких атомов выше, чем в объеме частицы. Диффузией также объясняется больший наклон зависимостей по сравнению с зависимостями для частиц в вакууме. Для того, чтобы снизить влияние взаимной диффузии Ti и Al, компьютерные эксперименты начинались не с 700 К, как для частиц Ti в вакууме, а с 800 К. Это изменение практически не влияло на получаемые значения температуры расстеклования, так как оно начиналось при наличии алюминиевой оболочки при температуре значительно больше стартовой температуры. Падение средней энергии атомов титана в процессе расстеклования частиц в алюминиевой оболочке меньше по сравнению с частицами в вакууме, что снова объясняется вкладом диффундировавших в алюминий атомов титана. После кристаллизации рост энергии по мере повышения температуры становился менее интенсивным, уменьшался наклон зависимостей. Это объясняется снижением интенсивности взаимной диффузии при кристаллическом состоянии титана.

Наличие алюминиевой оболочки, как видно по графикам на рис. 2, действительно, в значительной степени влияет на температуру расстеклования – она начинается при гораздо большей температуре: примерно 1180 и 1130 К для частиц диаметром 7 и 9 нм соответственно.

Для математического описания влияния свободной поверхности наночастиц на их температуру плавления часто используют формулу, основанную на предположении, что изменение температуры фазового перехода пропорционально отношению площади поверхности к объему частицы, то есть для круглой частицы это изменение должно быть пропорционально $N^{-1/3}$ или d^{-1}, где N – количество атомов в частице, а d – ее диаметр. Мы использовали это же предположение для температуры расстеклования, добавив поправку δ, учитывающую конечную толщину приповерхностного слоя частицы или диффузионной зоны в случае алюминиевой оболочки:

$$T_d(d) = T_d^0 - \frac{A}{d-\delta}. \quad (1)$$

Здесь T_d и T_d^0 – температуры расстеклования частицы и массивного материала; A – параметр, отвечающий за степень влияния поверхности частицы на ее расстеклование.

Формулу (1) мы использовали для построения аппроксимационных кривых зависимостей температуры расстеклования наночастиц титана в вакууме и в алюминиевой оболочке от их диаметра (пунктирные линии на рис. 3). Параметры A и δ подбирались таким образом, чтобы как можно лучше описывать зависимости, полученные в результате моделирования. На рис. 3 маркерами отмечены значения, полученные в нашей модели. Как видно, они достаточно хорошо совпадают с аппроксимационными кривыми, что полностью подтверждает ведущую роль границы раздела (свободной поверхности или межфазной границы) в процессе расстеклования наночастиц. Значения величин для формулы (1) для частиц титана в вакууме: T_d^0=850 К, A_d=−600 К·нм, δ=0.4 нм; в алюминиевой оболочке: T_d^0=980 К, A_d=−970 К·нм δ=1.4 нм.

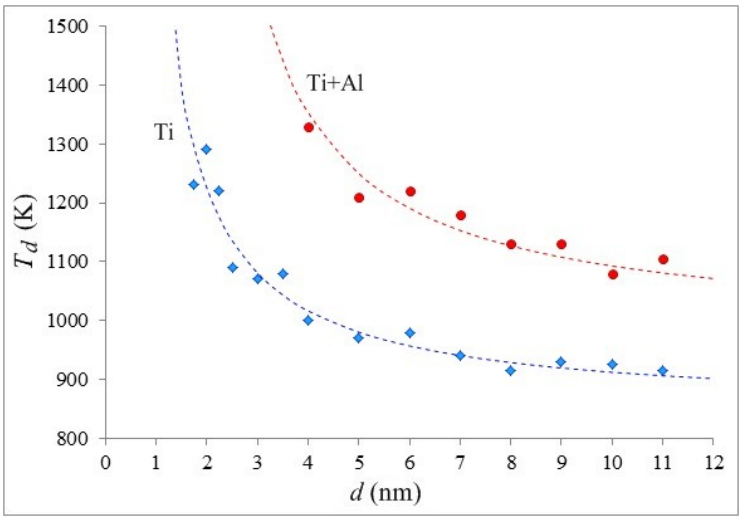


Рис. 3. Температура расстеклования частицы титана в вакууме и в алюминиевой оболочке в зависимости от ее диаметра. Маркеры – результаты модели, пунктирные линии – аппроксимация

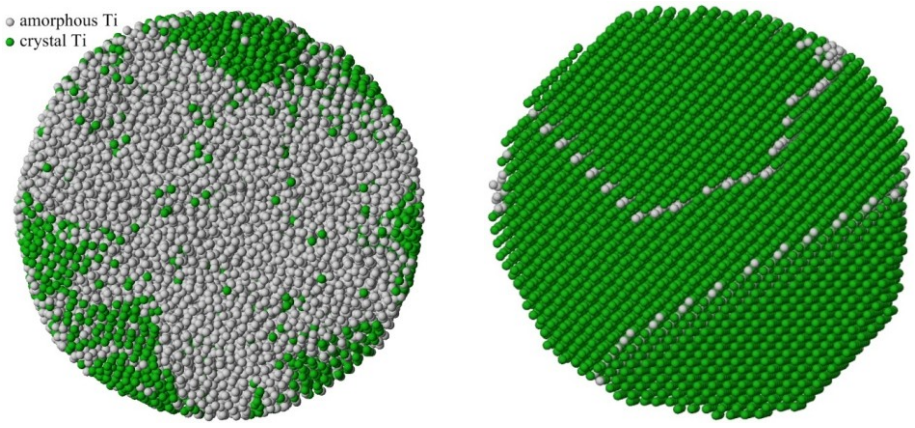
Fig. 3. The devitrification temperature of a titanium particle in a vacuum and in an aluminum shell depending on its diameter. Markers – model results, dotted lines – approximation

Как можно видеть, влияние алюминиевой оболочки на температуру расстеклования частиц титана довольно сильное – в случае наличия оболочки для рассматриваемых размеров частиц температура расстеклования примерно на 200 К выше, чем для частиц в вакууме. При учете диффузионной зоны и размытия границы частицы, величина δ увеличилась на 1 нм, что примерно соответствует картине, которая наблюдалась при моделировании.

Величина A в формуле (1), то есть параметр, отвечающий за степень влияния границы раздела частицы на изменение температуры расстеклования по сравнению с массивным

образцом, оказалась отрицательная. Таким образом, если температура плавления наночастиц уменьшается по мере уменьшения размера частиц, то температура расстеклования, напротив, растет. Это можно объяснить следующим образом. Потенциальные ямы, в которых находятся атомы, на поверхности или вблизи дефектов менее глубокие и более широкие, размытые, вследствие менее правильного расположения соседних атомов, тепловых колебаний и диффузии. Поэтому наличие дефектов и границ раздела снижает вероятность зарождения центров (зародышей) кристаллизации. Однако, с другой стороны, для их образования необходимо наличие определенной подвижности атомов, то есть самодиффузии, которая как раз интенсивнее вблизи поверхности. Это хорошо видно на рис. 4, где механизм кристаллизации при расстекловании изучался с помощью визуализатора кристаллических фаз. Данный визуализатор определяет принадлежность каждого атома к той или иной кристаллической структуре путем анализа расположения соседних атомов.

На рис. 4 хорошо видно, что зарождение кристаллической структуры происходит при расстекловании с поверхности, что объясняется сравнительно большим вкладом самодиффузии вблизи поверхности в данном случае. После кристаллизации в объеме частицы, как видно на приведенном примере, сформировались три зерна, разделенных границами зерен со сравнительно низкой энергией (с высокой плотностью совпадающих узлов).



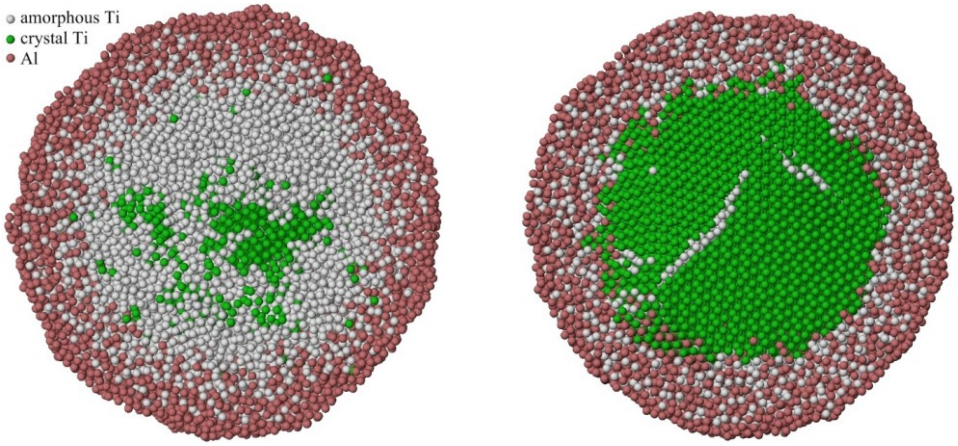
a) *b*)

Рис. 4. Атомная структура среза частицы титана диаметром 9 нм в разные моменты процесса расстеклования: *a*) в момент образования центров кристаллизации при достижении температуры 890 К; *b*) после завершения кристаллизации. Зеленым цветом выделены атомы, ближайшее окружение которых соответствует кристаллической структуре, серым – аморфной

Fig. 4. Atomic structure of a cut of a titanium particle with a diameter of 9 nm at different moments of the devitrification process: *a*) at the moment of formation of crystallization centers when the temperature reaches 890 K; *b*) after crystallization is completed. Atoms whose immediate environment corresponds to a crystalline structure are highlighted in green, while amorphous ones are highlighted in gray

В случае наличия алюминиевой оболочки механизм расстеклования менялся кардинально (рис. 5) – зародыши кристаллизации формировались не вблизи границы раздела, а, как правило, наоборот, в объеме «ядра» титановой частицы. Здесь фактор высокой подвижности вблизи границы пропадает, а на первое место выходит образование сравнительно более глубоких и узких потенциальных ям в объеме «ядра» частицы. Кроме того, атомы алюминия, как и наличие диффузионной зоны вообще, приводит к размытию потенциальных ям и к снижению вероятности появления зародышей кристаллизации вблизи межфазной границы.

Полученный результат, то есть увеличение температурного диапазона существования аморфной фазы металлических наночастиц в оболочке другого металла, по всей видимости, можно качественно распространить и на другие бинарные системы. Причем, большее влияние оболочки на повышение температуры расстеклования, по-видимому, следует ожидать при большей разнице радиусов атомов двух металлов.



a) *b*)

Рис. 5. Атомная структура среза частицы титана диаметром 9 нм в алюминиевой оболочке в разные моменты процесса расстеклования: *a*) в момент образования центров кристаллизации при достижении температуры 1120 К; *b*) после завершения кристаллизации

Fig. 5. Atomic structure of a cut of a titanium particle with a diameter of 9 nm in an aluminum shell at different moments of the devitrification process: *a*) at the moment of formation of crystallization centers when the temperature reaches 1120 K; *b*) after crystallization is completed

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Методом молекулярной динамики проведено исследование процесса расстеклования наночастиц титана в вакууме и в алюминиевой оболочке при нагревании со скоростью $5 \cdot 10^{11}$ К/с. В работе показано, что изменение температуры расстеклования по сравнению с массивным образцом обратно пропорционально диаметру частицы (с учетом поправки, учитывающей конечную ширину поверхностного слоя или диффузионной зоны в случае наличия алюминиевой оболочки): по мере уменьшения размера частицы и, соответственно, увеличения доли атомов вблизи границы раздела температура расстеклования растет. Наличие алюминиевой оболочки приводит к существенному повышению температуры расстеклования наночастиц титана – для рассматриваемых размеров наночастиц разница составила около 200 К. Таким образом, уменьшение размера частиц титана и наличие алюминиевой оболочки повышают температурный интервал существования аморфной фазы титана. Механизмы зарождения кристаллической фазы в частицах в вакууме и в алюминиевой оболочке существенно отличаются: в первом случае кристаллические зародыши формируются вблизи поверхности, во втором – напротив, в объеме частицы.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (FZMM-2023-0003).

The study was supported by Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (FZMM-2023-0003).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Dekker encyclopedia of nanoscience and nanotechnology. Third ed. / Ed. by J.A. Schwarz, S.E. Lyshevski, C.I. Contescu. Boca Raton: CRC Press, 2014. 4200 p.

2. Liang S.-X., Zhang L.-C., Reichenberger S., Barcikowski S. Design and perspective of amorphous metal nanoparticles from laser synthesis and processing // Physical Chemistry Chemical Physics, 2021, vol. 23, pp. 11121-11154. https://doi.org/10.1039/D1CP00701G

3. Sun J., Sinha S. K., Khammari A., Picher M., Terrones M., Banhart F. The amorphization of metal nanoparticles in graphitic shells under laser pulses // Carbon, 2020, vol. 161, pp. 495-501. https://doi.org/10.1016/j.carbon.2020.01.067

REFERENCES

1. *Dekker encyclopedia of nanoscience and nanotechnology*. Third ed. / Ed. by J.A. Schwarz, S.E. Lyshevski, C.I. Contescu. Boca Raton: CRC Press, 2014. 4200 p.

2. Liang S.-X., Zhang L.-C., Reichenberger S., Barcikowski S. Design and perspective of amorphous metal nanoparticles from laser synthesis and processing. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2021, vol. 23, pp. 11121-11154. https://doi.org/10.1039/D1CP00701G

3. Sun J., Sinha S. K., Khammari A., Picher M., Terrones M., Banhart F. The amorphization of metal nanoparticles in graphitic shells under laser pulses. *Carbon*, 2020, vol. 161, pp. 495-501. https://doi.org/10.1016/j.carbon.2020.01.067

4. He D. S., Huang Y., Myers B. D., Isheim D., Fan X., Xia G.-J., Deng Y., Xie L., Han S., Qiu Y., Wang Y.-G., Luan J., Jiao Z., Huang L., Dravid V. P., He J. Single-element amorphous palladium nanoparticles formed via phase separation // Nano Research, 2022, vol. 15, pp. 5575-5580. https://doi.org/10.1007/s12274-022-4173-1

5. Qian Y., Silva A., Yu E., Anderson C.L., Liu Y., Theis W., Ercius P., Xu T. Crystallization of nanoparticles induced by precipitation of trace polymeric additives // Nature Communications, 2021, vol. 12, 2767. https://doi.org/10.1038/s41467-021-22950-2

6. Pei Y., Zhou G., Luan N., Zong B., Qiao M., Tao F. Synthesis and catalysis of chemically reduced metal-metalloid amorphous alloys // Chemical Society Reviews, 2012, vol. 41, pp. 8140-8162. https://doi.org/10.1039/c2cs35182j

7. Jia Z., Wang Q., Sun L., Wang Q., Zhang L. C., Wu G., Luan J. H., Jiao Z. B., Wang A., Liang S. X., Gu M., Lu J. Metallic glass catalysts: attractive in situ self-reconstructed hierarchical gradient structure of metallic glass for high efficiency and remarkable stability in catalytic performance // Advanced Functional Materials, 2019, vol. 29, 1807857. https://doi.org/10.1002/adfm.201970131

8. Chen Q., Yan Z., Guo L., Zhang H., Zhang L.-C., Wang W. Role of maze like structure and Y_2O_3 on Al-based amorphous ribbon surface in MO solution degradation // Journal of Molecular Liquids, 2020, vol. 318, 114318. https://doi.org/10.1016/j.molliq.2020.114318

9. Yang B.J., Yao J.H., Zhang J., Yang H.W., Wang J.Q., Ma E. Al-rich bulk metallic glasses with plasticity and ultrahigh specific strength // Scripta Materialia, 2009, vol. 61, pp. 423-426. https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2009.04.035

10. Schroers J., Johnson W.L. Ductile bulk metallic glass // Physical Review Letters, 2004, vol. 93, 255506. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.93.255506

11. Wagener P., Jakobi J., Rehbock C., Chakravadhanula V.S.K., Thede C., Wiedwald U., Bartsch M., Kienleand L., Barcikowski S. Solvent-surface interactions control the phase structure in laser-generated iron-gold core-shell nanoparticles // Scientific Reports, 2016, vol. 6, 23352. https://doi.org/10.1038/srep23352

12. Ziefub A.R., Reichenberger S., Rehbock C., Chakraborty I., Gharib M., Parak W.J., Barcikowski S. Laser fragmentation of colloidal gold nanoparticles with high-intensity nanosecond pulses is driven by a single-step fragmentation mechanism with a defined educt particle-size threshold // The Journal of Physical Chemistry C, 2018, vol. 122, pp. 22125-22136. https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.8b04374

13. Amikura K., Kimura T., Hamada M., Yokoyama N., Miyazaki J., Yamada Y. Copper oxide particles produced by laser ablation in water // Applied Surface Science, 2008, vol. 254, pp. 6976-6982. https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2008.05.091

14. Barcikowski S., Compagnini G. Advanced nanoparticle generation and excitation by lasers in liquids // Physical Chemistry Chemical Physics, 2013, vol. 15, pp. 3022-3026. https://doi.org/10.1039/C2CP90132C

15. Buffat P., Borel J.-P. Size effect on the melting temperature of gold particles // Physical Review A, 1976, vol. 13, 2287. https://doi.org/10.1103/PhysRevA.13.2287

16. Allen G.L., Bayles R.A., Gile W.W., Jesser W.A. Small particle melting of pure metals // Thin Solid Films, 1986, vol. 144, pp. 297-308. https://doi.org/10.1016/0040-6090(86)90422-0

4. He D. S., Huang Y., Myers B. D., Isheim D., Fan X., Xia G.-J., Deng Y., Xie L., Han S., Qiu Y., Wang Y.-G., Luan J., Jiao Z., Huang L., Dravid V. P., He J. Single-element amorphous palladium nanoparticles formed via phase separation. *Nano Research*, 2022, vol. 15, pp. 5575-5580. https://doi.org/10.1007/s12274-022-4173-1

5. Qian Y., Silva A., Yu E., Anderson C.L., Liu Y., Theis W., Ercius P., Xu T. Crystallization of nanoparticles induced by precipitation of trace polymeric additives. *Nature Communications*, 2021, vol. 12, 2767. https://doi.org/10.1038/s41467-021-22950-2

6. Pei Y., Zhou G., Luan N., Zong B., Qiao M., Tao F. Synthesis and catalysis of chemically reduced metal-metalloid amorphous alloys. *Chemical Society Reviews*, 2012, vol. 41, pp. 8140-8162. https://doi.org/10.1039/c2cs35182j

7. Jia Z., Wang Q., Sun L., Wang Q., Zhang L. C., Wu G., Luan J. H., Jiao Z. B., Wang A., Liang S. X., Gu M., Lu J. Metallic glass catalysts: attractive in situ self-reconstructed hierarchical gradient structure of metallic glass for high efficiency and remarkable stability in catalytic performance. *Advanced Functional Materials*, 2019, vol. 29, 1807857. https://doi.org/10.1002/adfm.201970131

8. Chen Q., Yan Z., Guo L., Zhang H., Zhang L.-C., Wang W. Role of maze like structure and Y_2O_3 on Al-based amorphous ribbon surface in MO solution degradation. *Journal of Molecular Liquids*, 2020, vol. 318, 114318. https://doi.org/10.1016/j.molliq.2020.114318

9. Yang B.J., Yao J.H., Zhang J., Yang H.W., Wang J.Q., Ma E. Al-rich bulk metallic glasses with plasticity and ultrahigh specific strength. *Scripta Materialia*, 2009, vol. 61, pp. 423-426. https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2009.04.035

10. Schroers J., Johnson W.L. Ductile bulk metallic glass. *Physical Review Letters,* 2004, vol. 93, 255506. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.93.255506

11. Wagener P., Jakobi J., Rehbock C., Chakravadhanula V.S.K., Thede C., Wiedwald U., Bartsch M., Kienleand L., Barcikowski S. Solvent-surface interactions control the phase structure in laser-generated iron-gold core-shell nanoparticles. *Scientific Reports*, 2016, vol. 6, 23352. https://doi.org/10.1038/srep23352

12. Ziefub A.R., Reichenberger S., Rehbock C., Chakraborty I., Gharib M., Parak W.J., Barcikowski S. Laser fragmentation of colloidal gold nanoparticles with high-intensity nanosecond pulses is driven by a single-step fragmentation mechanism with a defined educt particle-size threshold. *The Journal of Physical Chemistry C,* 2018, vol. 122, pp. 22125-22136. https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.8b04374

13. Amikura K., Kimura T., Hamada M., Yokoyama N., Miyazaki J., Yamada Y. Copper oxide particles produced by laser ablation in water. *Applied Surface Science*, 2008, vol. 254, pp. 6976-6982. https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2008.05.091

14. Barcikowski S., Compagnini G. Advanced nanoparticle generation and excitation by lasers in liquids. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2013, vol. 15, pp. 3022-3026. https://doi.org/10.1039/C2CP90132C

15. Buffat P., Borel J.-P. Size effect on the melting temperature of gold particles. *Physical Review A*, 1976, vol. 13, 2287. https://doi.org/10.1103/PhysRevA.13.2287

16. Allen G.L., Bayles R.A., Gile W.W., Jesser W.A. Small particle melting of pure metals. *Thin Solid Films*, 1986, vol. 144, pp. 297-308. https://doi.org/10.1016/0040-6090(86)90422-0

17. Castro T., Reifenberger R., Choi E., Andres R.P. Size-dependent melting temperature of individual nanometer-sized metallic clusters // Physical Review B, 1990, vol. 42, 8548. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.42.8548

18. Qi Y., Cagin T., Johnson W.L., Goddard III W.A. Melting and crystallization in Ni nanoclusters: the mesoscale regime // The Journal of Chemical Physics, 2001, vol. 115, pp. 385-394. https://doi.org/10.1063/1.1373664

19. Чепкасов И .В., Гафнер Ю. Я., Высотин М. А., Редель Л. В. Исследование процессов плавления наночастиц Pt-Pd различного типа // Физика твердого тела. 2017. Т. 50, № 10, С. 2050-1055. https://doi.org/10.21883/FTT.2017.10.44979.042

20. Poletaev G. M., Bebikhov Y. V., Semenov A. S. Molecular dynamics study of the formation of the nanocrystalline structure in nickel nanoparticles during rapid cooling from the melt // Materials Chemistry and Physics, 2023, vol. 309, 128358. https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2023.128358

21. Nguyen T.D., Nguyen C.C., Tran V.H. Molecular dynamics study of microscopic structures, phase transitions and dynamic crystallization in Ni nanoparticles // RSC Advances, 2017, vol. 7, pp. 25406-25413. https://doi.org/10.1039/C6RA27841H

22. Boldyrev V.V., Tkacova K. Mechanochemistry of solids: past, present, and prospects // Journal of Materials Synthesis and Processing, 2000, vol. 8, pp. 121-132. https://doi.org/10.1023/A:1011347706721

23. Filimonov V.Y., Loginova M.V., Ivanov S.G., Sitnikov A.A., Yakovlev V.I., Sobachkin A.V., Negodyaev A.Z., Myasnikov A.Y. Peculiarities of phase formation processes in activated Ti+Al powder mixture during transition from combustion synthesis to high-temperature annealing // Combustion Science and Technology, 2020, vol. 192, pp. 457-470. https://doi.org/10.1080/00102202.2019.1571053

24. Логинова М. В., Яковлев В. И., Филимонов В. Ю., Ситников А. А., Собачкин А. В., Иванов С. Г., Градобоев А. В. Формирование структурных состояний в механоактивированных порошковых смесях Ti+Al, подвергнутых гамма-облучению // Письма о материалах. 2018. Т. 8, № 3. С. 129-134. https://doi.org/10.22226/2410-3535-2018-2-129-134

25. Полетаев Г. М., Бебихов Ю. В., Семенов А. С., Ситников А. А. Молекулярно-динамическое исследование влияния ориентации межфазной границы на интенсивность растворения титана в кристаллическом и аморфном алюминии // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 2021. Т. 163, № 4. С. 537-544. https://doi.org/10.31857/S0044451023040119

26. Zope R.R., Mishin Y. Interatomic potentials for atomistic simulations of the Ti-Al system // Physical Review B, 2003, vol. 68, 024102. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.68.024102

27. Kim Y.-K., Kim H.-K., Jung W.-S., Lee B.-J. Atomistic modeling of the Ti-Al binary system // Computational Materials Science, 2016, vol. 119, pp. 1-8. https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2016.03.038

28. Pei Q.-X., Jhon M.H., Quek S.S., Wu Z. A systematic study of interatomic potentials for mechanical behaviours of Ti-Al alloys // Computational Materials Science, 2021, vol. 188, 110239. https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2020.110239

29. Полетаев Г.М. Самодиффузия в жидких и твердых сплавах системы Ti-Al: молекулярно-динамическое моделирование // Журнал экспериментальной и

17. Castro T., Reifenberger R., Choi E., Andres R.P. Size-dependent melting temperature of individual nanometer-sized metallic clusters. *Physical Review B*, 1990, vol. 42, 8548. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.42.8548

18. Qi Y., Cagin T., Johnson W.L., Goddard III W.A. Melting and crystallization in Ni nanoclusters: the mesoscale regime. *The Journal of Chemical Physics*, 2001, vol. 115, pp. 385-394. https://doi.org/10.1063/1.1373664

19. Chepkasov I. V., Gafner Y. Y., Vysotin M. A., Redel L. V. A study of melting of various types of Pt-Pd nanoparticles. *Physics of the Solid State*, 2017, vol. 59, pp. 2076-2081. https://doi.org/10.1134/S1063783417100109

20. Poletaev G. M., Bebikhov Y. V., Semenov A. S. Molecular dynamics study of the formation of the nanocrystalline structure in nickel nanoparticles during rapid cooling from the melt. *Materials Chemistry and Physics*, 2023, vol. 309, 128358. https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2023.128358

21. Nguyen T.D., Nguyen C.C., Tran V.H. Molecular dynamics study of microscopic structures, phase transitions and dynamic crystallization in Ni nanoparticles. *RSC Advances*, 2017, vol. 7, pp. 25406-25413. https://doi.org/10.1039/C6RA27841H

22. Boldyrev V.V., Tkacova K. Mechanochemistry of solids: past, present, and prospects. *Journal of Materials Synthesis and Processing*, 2000, vol. 8, pp. 121-132. https://doi.org/10.1023/A:1011347706721

23. Filimonov V.Y., Loginova M.V., Ivanov S.G., Sitnikov A.A., Yakovlev V.I., Sobachkin A.V., Negodyaev A.Z., Myasnikov A.Y. Peculiarities of phase formation processes in activated Ti+Al powder mixture during transition from combustion synthesis to high-temperature annealing. *Combustion Science and Technology*, 2020, vol. 192, pp. 457-470. https://doi.org/10.1080/00102202.2019.1571053

24. Loginova M. V., Yakovlev V. I., Filimonov V. Yu., Sitnikov A. A., Sobachkin A. V., Ivanov S. G., Gradoboev A. V. Formirovanie strukturnykh sostoyaniy v mekhanoaktivirovannykh poroshkovykh smesyakh Ti+Al, podvergnutykh gamma-oblucheniyu [Formation of structural states in mechanically activated powder mixtures Ti+Al exposed to gamma irradiation]. *Pis'ma o materialakh* [Letters on Materials], 2018, vol. 8, pp. 129-134. (In Russian) https://doi.org/10.22226/2410-3535-2018-2-129-134

25. Poletaev G. M., Bebikhov Yu.V., Semenov A. S., Sitnikov A. A. Molecular dynamics investigation of the effect of the interface orientation on the intensity of titanium dissolution in crystalline and amorphous aluminum. *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 2023, vol. 136, no. 4, pp. 477-483. https://doi.org/10.1134/S1063776123040118

26. Zope R.R., Mishin Y. Interatomic potentials for atomistic simulations of the Ti-Al system. *Physical Review B*, 2003, vol. 68, 024102. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.68.024102

27. Kim Y.-K., Kim H.-K., Jung W.-S., Lee B.-J. Atomistic modeling of the Ti-Al binary system. *Computational Materials Science*, 2016, vol. 119, pp. 1-8. https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2016.03.038

28. Pei Q.-X., Jhon M.H., Quek S.S., Wu Z. A systematic study of interatomic potentials for mechanical behaviours of Ti-Al alloys. *Computational Materials Science*, 2021, vol. 188, 110239. https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2020.110239

29. Poletaev G. M. Self-diffusion in liquid and solid alloys of the Ti-Al system: molecular-dynamics simulation. *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 2021, vol. 133, no. 4,

теоретической физики. 2021. Т. 160, № 4. С. 527-533. https://doi.org/10.31857/S0044451021100096

30. Gafner Y., Gafner S., Redel L., Poletaev G. Estimation of the structure of binary Ag-Cu nanoparticles during their crystallization by computer simulation // Journal of Nanoparticle Research, 2023, vol. 25, 205. https://doi.org/10.1007/s11051-023-05850-y

31. Chan W.-L., Averback R.S., Cahill D.G., Ashkenazy Y. Solidification velocities in deeply undercooled silver // Physical Review Letters, 2009, vol. 102, 095701. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.102.095701

32. Zhang H.Y., Liu F., Yang Y., Sun D.Y. The molecular dynamics study of vacancy formation during solidification of pure metals // Scientific Reports, 2017, vol. 7, 10241. https://doi.org/10.1038/s41598-017-10662-x

33. Poletaev G.M., Zorya I.V. Influence of light impurities on the crystal-melt interface velocity in Ni and Ag. Molecular dynamics simulation // Technical Physics Letters, 2020, vol. 46, pp. 575-578. https://doi.org/10.1134/S1063785020060231

34. Susic M.V. Kinetics of devitrification (crystallization) of amorphous titanium // Materials Chemistry and Physics, 1985, vol. 12, pp. 99-109. https://doi.org/10.1016/0254-0584(85)90048-3

pp. 455-460. https://doi.org/10.1134/S1063776121090041

30. Gafner Y., Gafner S., Redel L., Poletaev G. Estimation of the structure of binary Ag-Cu nanoparticles during their crystallization by computer simulation. *Journal of Nanoparticle Research,* 2023, vol. 25, 205. https://doi.org/10.1007/s11051-023-05850-y

31. Chan W.-L., Averback R.S., Cahill D.G., Ashkenazy Y. Solidification velocities in deeply undercooled silver. *Physical Review Letters*, 2009, vol. 102, 095701. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.102.095701

32. Zhang H.Y., Liu F., Yang Y., Sun D.Y. The molecular dynamics study of vacancy formation during solidification of pure metals. *Scientific Reports*, 2017, vol. 7, 10241. https://doi.org/10.1038/s41598-017-10662-x

33. Poletaev G.M., Zorya I.V. Influence of light impurities on the crystal-melt interface velocity in Ni and Ag. Molecular dynamics simulation. *Technical Physics Letters,* 2020, vol. 46, pp. 575-578. https://doi.org/10.1134/S1063785020060231

34. Susic M.V. Kinetics of devitrification (crystallization) of amorphous titanium. *Materials Chemistry and Physics*, 1985, vol. 12, pp. 99-109. https://doi.org/10.1016/0254-0584(85)90048-3

Поступила 12.10.2023; после доработки 27.11.2023; принята к опубликованию 04.12.2023
Received October 12, 2024; received in revised form November 27, 2023; accepted December 4, 2023

Информация об авторах

Полетаев Геннадий Михайлович,
доктор физико-математических наук, профессор, ведущий научный сотрудник, заведующий кафедрой высшей математики, АлтГТУ, Барнаул, Российская Федерация, e-mail: gmpoletaev@mail.ru

Коваленко Виктор Викторович,
доктор физико-математических наук, профессор, СибГИУ, Новокузнецк, Российская Федерация

Information about the authors

Gennady M. Poletaev,
Dr. Sci. (Phys.-Math.), Professor, Leading Researcher, Head of the Department of Higher Mathematics, Altai State Technical University, Barnaul, e-mail: gmpoletaev@mail.ru

Viktor V. Kovalenko,
Dr. Sci. (Phys.-Math.), Professor, Siberian State Industrial University, Novokuznetsk, Russian Federation