

I N T E R N A T I O N A L C O N F E R E N C E

**ФИЗИКА И ТЕХНОЛОГИЯ  
ПЕРСПЕКТИВНЫХ  
МАТЕРИАЛОВ – 2023**



**PHYSICS AND TECHNOLOGY  
OF ADVANCED  
MATERIALS – 2023**

Уфа, 2-6 октября 2023 г.

Ufa, 2-6 October, 2023



**СБОРНИК ТРУДОВ  
BOOK OF ABSTRACTS**

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РФ  
РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК  
ИНСТИТУТ ПРОБЛЕМ СВЕРХПЛАСТИЧНОСТИ МЕТАЛЛОВ РАН  
УФИМСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ НАУКИ И ТЕХНОЛОГИЙ  
УФИМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ НЕФТЯНОЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ

**ФИЗИКА И ТЕХНОЛОГИЯ  
ПЕРСПЕКТИВНЫХ МАТЕРИАЛОВ – 2023**

**(PHYSICS AND TECHNOLOGY OF ADVANCED MATERIALS – 2023)**

*Сборник трудов  
Международной конференции  
(г. Уфа, 2 – 6 октября 2023 г.)*

Уфа  
РИЦ УУН<sub>И</sub>Т  
2023

УДК 620.1/.2+539.3/.5+621.7  
ББК 30.3+30.121+30.68  
Ф50

**Физика и технология перспективных материалов–2023:**

Ф50    сборник трудов Международной конференции (г. Уфа, 2-6 октября 2023 г. / отв. ред. А.А. Назаров. — Уфа: РИЦ УУНиТ, 2023. – 420 с.  
ISBN 978-5-7477-5738-7

В сборнике представлены последние достижения в области физики и технологии обработки перспективных материалов. Представленные доклады посвящены широкому кругу проблем современного материаловедения: получение новых материалов различной природы и различного назначения, изучение электронной, атомной структуры, микроструктуры, физических, физико-химических и механических свойств материалов, исследование структурных, фазовых превращений в материалах в процессах обработки, а также их применение, повышение ресурса деталей и конструкций, используемых в промышленности и т.д.

Сборник предназначен для интересующихся проблемами современного материаловедения.

**Physics and Technology of Advanced Materials-2023:**

abstracts of the International Conference (Ufa, 2-6 October, 2023). – Ufa, Ufa University of Science and Technology, 2023. - 420 p.

The book presents the latest achievements in the field of physics and technology of processing of advanced materials. The presented reports are devoted to a wide range of problems of the modern materials science, such as development of new materials of various origins and for various purposes, research on the electronic, atomic structure, microstructure, physical, physicochemical and mechanical properties of materials, study of structural, phase transformations in materials in treatment processes, as well as their application, increase of the resource of parts and structures used in industry, etc.

The collection can be of interest for everyone interested in the problems of modern materials science.

УДК 620.1/.2+539.3/.5+621.7  
ББК 30.3+30.121+30.68

ISBN 978-5-7477-5738-7

© УУНиТ, 2023

© ИПСМ РАН, 2023

# МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ ПРИ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ И РАССТЕКЛОВАНИИ НАНОЧАСТИЦ НИКЕЛЯ

**Г.М. Полетаев<sup>1,2</sup>, А.В. Санников<sup>1,2</sup>, Ю.Я. Гафнер<sup>1</sup>, С.Л. Гафнер<sup>1</sup>, И.В. Зоря<sup>3</sup>**

<sup>1</sup>*Хакасский государственный университет им. Н.Ф. Катанова, Абакан*

<sup>2</sup>*Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова, Барнаул*

<sup>3</sup>*Сибирский государственный индустриальный университет, Новокузнецк*

[gmpoletaev@mail.ru](mailto:gmpoletaev@mail.ru)

Металлические наночастицы обладают рядом уникальных свойств, обусловленных высокой долей свободной поверхности, квантово-механическими и топологическими эффектами, благодаря чему они имеют высокие перспективы их использования в таких областях, как микроэлектроника, оптоэлектроника и плазмоника, медицина и биология, химический катализ, изготовление газовых сенсоров и др [1]. При исследовании путей синтеза и обработки металлических наночастиц большое внимание уделяется управлению фазового состояния, размером и формой частиц из-за их критического влияния на полезные свойства. Ввиду этого большое значение приобретает исследование механизмов фазовых переходов в наночастицах и факторов, влияющих на кинетику переходов и образование конечной структуры. В частности, большой интерес представляют частицы с высоким уровнем беспорядка атомной структуры: аморфной или нанокристаллической структурой [2]. Они имеют высокие значения запасенной энергии, обладают уникальной электронной структурой [3], а также обладают набором полезных механических свойств, в частности сравнительно высокой прочностью наряду с высокой пластичностью и вязкостью разрушения [4].

Настоящая работа посвящена исследованию с помощью метода молекулярной динамики факторов, влияющих на характеристики нанокристаллической структуры, формирующейся при быстром охлаждении наночастиц никеля от расплава и при расстекловании в результате нагревания от низких температур частиц с аморфной структурой. Рассматривалось влияние скорости изменения температуры и размера частиц на особенности образующейся структуры, величину запасенной энергии, температуру начала кристаллизации и расстеклования.

Взаимодействия атомов никеля друг с другом в молекулярно-динамической модели описывались с помощью EAM потенциала из работы [5], где он был создан авторами с учетом экспериментальных данных и результатов *ab initio* расчетов различных свойств никеля. Данный потенциал хорошо зарекомендовал себя при проведении различных молекулярно-динамических исследований и прошел успешную апробацию по широкому спектру механических и структурно-энергетических свойств [5, 6], включая процессы плавления и кристаллизации и самодиффузию в расплаве [6].

Наночастица никеля в модели создавалась путем вырезания шара соответствующего размера из идеального кристалла с последующей релаксацией структуры. Диаметр частиц варьировался от 1.5 до 11 нм. Для частиц диаметром менее 1.5 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 частиц каждого размера проводилось моделирование нагревания с постоянной скоростью от монокристаллического состояния до температуры значительно превышающей температуру плавления, обратное охлаждение от расплава до нормальных температур (для моделирования кристаллизации) и нагревание аморфной частицы от низких до средних температур (для моделирования расстеклования). Для проведения последней серии



компьютерных экспериментов аморфные частицы создавались путем сверхбыстрого охлаждения (порядка  $10^{16}$ – $10^{17}$  К/с) расплавленных частиц.

Изменение температуры при нагревании и охлаждении осуществлялось с постоянной скоростью путем соответствующего изменения модулей скоростей всех атомов в модели. В работе рассматривалось три скорости  $\Delta T/\Delta t$ :  $5 \cdot 10^{11}$ ,  $10^{12}$  и  $5 \cdot 10^{12}$  К/с. Известно, что при охлаждении расплавов со скоростью выше  $10^{13}$ – $10^{14}$  К/с гомогенная кристаллизация не успевает произойти даже в чистых металлах и в таком случае получают металлические стекла [7].

Результаты моделирования показали, что формированием нанокристаллической структуры и, соответственно, запасенной энергией, в наночастицах никеля можно управлять путем варьирования скорости охлаждения: при скорости охлаждения выше  $10^{13}$  К/с в используемой модели кристаллизация не успевала произойти, при скорости от  $10^{12}$  К/с до  $5 \cdot 10^{12}$  К/с частица никеля кристаллизовалась с образованием нанокристаллической структуры с высокой плотностью границ зерен и других дефектов (рис. 1а,б). При скорости  $5 \cdot 10^{11}$  К/с и менее кристаллизация проходила с образованием низкоэнергетических границ зерен (с высокой плотностью сопряженных узлов: специальных границ, двойников) (рис. 1в).

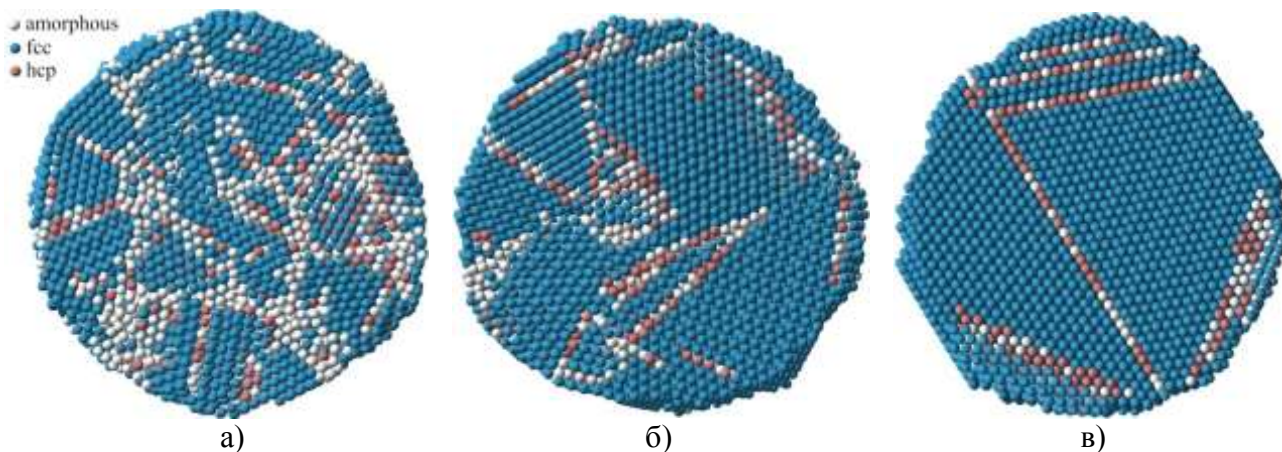


Рис. 1. Атомная структура частиц никеля диаметром 8 нм в срезе, полученная в результате кристаллизации при разной скорости охлаждения: а)  $5 \cdot 10^{12}$  К/с, б)  $10^{12}$  К/с, в)  $5 \cdot 10^{11}$  К/с

Было выяснено, что температуры плавления, кристаллизации и расстеклования обратно пропорциональны диаметру частицы (с учетом поправки, учитывающей конечную ширину поверхностного слоя): по мере уменьшения размера частицы и, соответственно, увеличения доли свободной поверхности температуры плавления при нагреве и кристаллизации при охлаждении уменьшаются, а температура расстеклования растет. Кроме того, температуры начала кристаллизации при охлаждении от расплава и при нагревании аморфных частиц зависели от скорости изменения температуры: чем ниже была эта скорость, тем раньше начинался процесс кристаллизации.

Плавление нанокристаллической частицы, из-за высокого содержания границ зерен и других дефектов, происходило при значительно более низких температурах по сравнению с монокристаллической частицей. При этом, чем выше была запасенная энергия в нанокристаллической частице, тем больше отличалась ее температура плавления от температуры плавления монокристаллической частицы.

Основное отличие механизмов кристаллизации при охлаждении от расплава и при расстекловании при нагревании от стеклообразного состояния заключалось в преимущественном формировании в первом случае устойчивых кристаллических зародышей в объеме частицы, тогда как при расстекловании (при сравнительно более низких температурах) зародыши начинали образовываться чаще вблизи поверхности частицы.

*Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 23-12-20003, <https://rscf.ru/project/23-12-20003/>) при паритетной финансовой поддержке Правительства Республики Хакасия.*

#### Литература

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. S.-X. Liang, L.-C. Zhang, S. Reichenberger, S. Barcikowski // Phys. Chem. Chem. Phys. 2021. V.23. P. 11121–11154.
3. Y. Pei, G. Zhou, N. Luan, B. Zong, M. Qiao, F. Tao // Chem. Soc. Rev. 2012. V.41. P. 8140–8162.
4. K.S. Kumar, H. Van Swygenhoven, S. Suresh // Acta Materialia. 2003. V.51. P. 5743–5774.
5. G.P. Purja Pun, Y. Mishin // Philosophical Magazine. 2009. V.89. P. 3245–3267.
6. E.V. Levchenko, T. Ahmed, A.V. Evteev // Acta Materialia. 2017. V.136. P. 74–89.
7. L. Zhong, J. Wang, H. Sheng, Z. Zhang and S. X. Mao // Nature. 2014. V.512. P. 177–180.

*Научное издание*

**ФИЗИКА И ТЕХНОЛОГИЯ  
ПЕРСПЕКТИВНЫХ МАТЕРИАЛОВ – 2023**

**(PHYSICS AND TECHNOLOGY OF ADVANCED MATERIALS – 2023)**

*Сборник трудов  
Международной конференции  
(г. Уфа, 2 – 6 октября 2023 г.)*

*За достоверность информации, изложенной в статьях,  
ответственность несут авторы.  
Статьи публикуются в авторской редакции*

Подписано в печать 18.09.2023 г. Формат 60х84/8.  
Усл. печ. л. 24,15. Уч.-изд. л. 25,2.  
Тираж 300 экз. (1-й завод 25 экз.). Изд. № 81. Заказ 243.

*Редакционно-издательский центр  
Уфимского университета науки и технологий  
450008, Башкортостан, г. Уфа, ул. Карла Маркса, 12.*

*Отпечатано в отделе полиграфии  
редакционно-издательского центра  
Уфимского университета науки и технологий  
450008, Башкортостан, г. Уфа, ул. Карла Маркса, 12.*