01,14

Молекулярно-динамическое исследование механических свойств кристаллических и аморфных наночастиц никеля

© Г.М. Полетаев [1], В.В. Коваленко [2]

[1] Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова,
Барнаул, Россия
[2] Сибирский государственный индустриальный университет,
Новокузнецк, Россия

E-mail: gmpoletaev@mail.ru

Поступила в Редакцию 14 мая 2025 г.
В окончательной редакции 22 июня 2025 г.
Принята к публикации 30 июля 2025 г.

Методом молекулярной динамики проведено исследование деформации сжатия наночастиц никеля с кристаллической и аморфной структурой. Показано, что с ростом скорости деформирования прочность наночастиц увеличивается, а при повышении температуры уменьшается. При деформации монокристаллических наночастиц имеет место анизотропия механических свойств. В частности, прочность при сжатии вдоль направлений [111] и [110] оказалась больше примерно на 30−40 % прочности при сжатии вдоль направления [112]. По мере уменьшения размера наночастиц, как монокристаллических, так и аморфных, их прочность возрастала, а также повышалось значение деформации, при которой достигалось максимальное напряжение. При этом значения прочности для аморфных частиц оказались в несколько раз ниже значений для монокристаллических частиц. При сжатии аморфных наночастиц в большинстве случаев наблюдался феномен уплотнения и частичной кристаллизации структуры вблизи мест приложения нагрузки.

Ключевые слова: компьютерное моделирование, сжатие, прочность, деформация, аморфная структура.

DOI: 10.61011/FTT.2025.08.61308.119-25

1. 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]. Наночастицы имеют высокие перспективы использования в таких областях, как микроэлектроника, оптоэлектроника и плазмоника [2,3], медицина и биология [4,5], химический катализ, изготовление газовых сенсоров [6,7]. Наряду с прочими уникальными свойствами наночастиц многообещающими с практической точки зрения являются также их механические свойства, которые часто существенно лучше, чем свойства соответствующих объемных материалов. Специальные экспериментальные исследования, обычно проводимые с использованием методов наноиндентирования [8,9], позволили выявить ряд ключевых особенностей. Так, было выяснено, что наночастицы могут быть намного прочнее объемных материалов. Прочность монокристаллических частиц может достигать гигантских значений — вплоть до нескольких десятков GPa [10–20]. Например, в экспериментальной работе [13], при сжатии путем наноиндентирования монокристаллических наночастиц никеля диаметром 210 nm был зафиксирована прочность в 34 GPa [13]. Уникальные механические свойства наночастиц в настоящее время уже используются, например, при разработке нанокомпозиционных материалов, где металлические наночастицы выступают в качестве наполнителя, для улучшения трибологических свойств смазочных материалов [21–24].

В ряде работ, выполненных как с помощью прямых экспериментов сжатия наночастиц, так и с помощью соответствующего компьютерного моделирования, было получено, что при уменьшении размера частиц их прочность увеличивается [13,16–20]. В настоящее время часть исследователей полагает, что этот эффект связан с уменьшением доступного объема для работы источника дислокаций при уменьшении размера монокристаллической частицы [25–28], то есть предполагается, что влияние размера частицы на ее прочность является особенностью кристаллических частиц. Однако данные работ, в которых выполнялось моделирование сжатия некристаллических частиц, разнятся: в одних размер частицы в пределах погрешности почти не влиял на прочность [29,30], в других это все же имело место [31]. В [31] авторы предположили, что наблюдение увеличения прочности малых некристаллических частиц возможно из-за образования более плотной структуры в местах сжатия.

Другим интересным наблюдением, касающимся деформации наночастиц, является увеличение вязкости разрушения при уменьшении размера наночастиц [32]. С помощью высокоразрешающей просвечивающей электронной микроскопии было обнаружено, что серебряные наночастицы размером менее 10 nm могут деформироваться аналогично жидким каплям при комнатной

температуре [33]. В работе [13] при наноиндентировании частиц никеля максимальное напряжение сжатия достигалось при деформации 10–20 %. В работах [34–36] было показано, что достаточно маленькие частицы, изготовленные из хрупких материалов, таких как кремний или оксид магния, также могут быть деформированы пластически.

Доступные экспериментальные результаты по механическим свойствам наночастиц были в основном получены путем сжатия и индентирования, что является единственным простым режимом нагрузки, применимым к наночастицам. Компьютерное моделирование на атомном уровне в этом случае является эффективным дополнением. Целью настоящей работы является сравнение механических свойств круглых наночастиц никеля с монокристаллической и аморфной структурой при деформации сжатия с помощью молекулярно-динамического моделирования. Наночастицы с аморфной структурой в настоящее время представляют большой интерес [37–39]. 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 в области катализа, биомедицины, оптики и электроники [40–42]. Главное внимание в настоящей работе уделено изучению влияния структуры (кристаллической или аморфной) и размера наночастиц на их прочность и вязкость разрушения. Помимо этого, в работе рассматривается влияние ориентации сжатия, температуры и скорости деформирования на механические свойства частиц. Рассматриваются также особенности протекания деформации в случае монокристаллических и аморфных наночастиц. Выбор частиц никеля в качестве примера обусловлен их широким практическим применением. Никель обладает высокой коррозионной стойкостью, повышенной пластичностью и ковкостью, является хорошим катализатором. Кроме того, для монокристаллических наночастиц никеля имеются данные экспериментальных исследований прочности [13], а также результаты моделирования другими авторами [20,43].

2. Описание модели

Взаимодействия атомов никеля друг с другом в молекулярно-динамической модели описывались с помощью потенциала метода погруженного атома (embedded atom method, EAM) из [44], который был создан с учетом экспериментальных данных и результатов расчетов *ab initio* 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, включая процессы пластической деформации, структурно-фазовых превращений, самодиффузии [44–49]. Он использовался нами ранее при исследовании плавления и кристаллизации наночастиц никеля [48,49].

Круглая металлическая частица в модели на первом этапе создавалась путем вырезания шара соответствующего размера из идеального кристалла никеля. Рассматривались частицы диаметром от 1.5 до 20 nm. Вокруг частицы имитировалось свободное пространство. Т.е. использовался канонический NPT-ансамбль (число атомов N, давление P и температура T остаются постоянными в течение моделирования). Для контролирования постоянства температуры использовался термостат Нозе–Гувера. Шаг интегрирования по времени в методе молекулярной динамики был равен 2 fs.

Известно, что для сравнительно малых наночастиц, содержащих менее 1000–1500 атомов (диаметром менее примерно 2.7–3.2 nm для никеля) гранецентрированная кубическая (ГЦК) структура не является энергетически наиболее выгодной, конкурируя, например, с икосаэдрической и декаэдрической структурами, особенно в случае произвольного (не „оптимального“ с точки зрения энергии атомов в частице) вырезания шара из изначального ГЦК-кристалла [50,51]. В настоящей работе при изучении деформации монокристаллических наночастиц, исходная структура всех частиц была ГЦК.

После создания исходной кристаллической круглой частицы проводилась структурная релаксация при постоянной температуре 500 K в течение 20 ps, в ходе которой устанавливалось равновесное состояние атомной структуры для заданной температуры. После релаксации частицы охлаждались до минимально возможной температуры, близкой к 0 K.

Частицы с аморфной структурой создавалась путем сверхбыстрого (со скоростью порядка 10^{16} K/s) охлаждения частиц, расплавленных при нагревании до температуры, значительно превышающей температуру плавления (как правило, 2000–2500 K). При охлаждении металла с такой скоростью гомогенная кристаллизация не успевает произойти, и образуется аморфная структура, характерная для переохлажденной жидкости [52]. После этапа сверхбыстрого охлаждения проводилась структурная релаксация при температуре 200 K в течение 50 ps, в результате которой происходила перестройка структуры и образовывалась метастабильная структура, устойчивая к структурной трансформации вплоть до температуры расстеклования. Качество аморфной структуры проверялось с помощью диаграмм радиального распределения атомов и по средней энергии атомов в наночастице. На рис. 1 изображены графики функций радиального распределения для кристаллической и аморфной наночастицы никеля. Одним из признаков аморфного состояния является отсутствие пика на распределениях в районе второй координационной сферы ГЦК-решетки. После релаксации частицы охлаждались до минимально возможной температуры, близкой к 0 K.

Сжатие наночастицы осуществлялось в модели путем движения виртуальных плоскостей по две стороны от частицы с постоянной скоростью (рис. 2). Взаимодействие

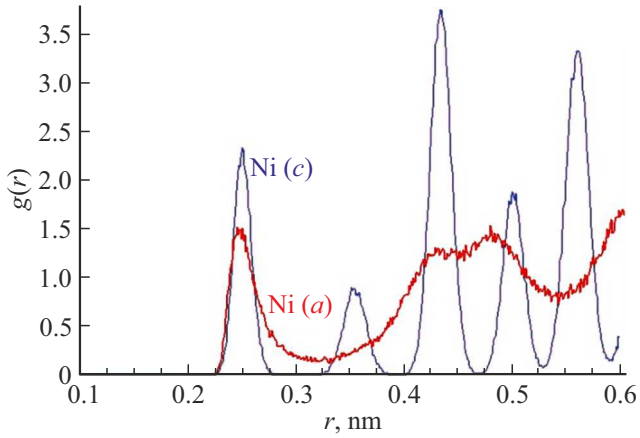

Рис. 1. Функции радиального распределения атомов для кристаллической (c) и аморфной (a) наночастицы никеля при температуре 200 K.

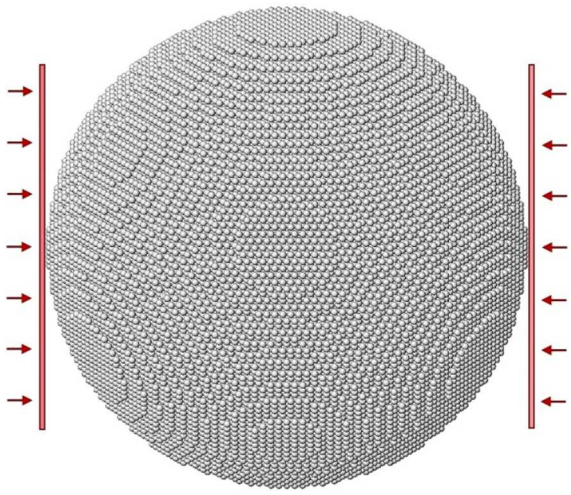

Рис. 2. Схема моделирования сжатия наночастицы никеля.

атомов с виртуальными границами задавалось как абсолютно упругое. Такой метод использовался в большинстве работ, посвященных молекулярно-динамическому моделированию сжатия наночастиц. Скорость движения плоских границ при этом обычно задается в пределах от 10 до 50 m/s [14,15,18,19], а начальная температура, как правило, задается как можно ниже — вблизи 0 K. Однако известно, что температура, а также скорость деформирования, особенно в области относительно больших значений, влияют на механические характеристики [53], поэтому в настоящей работе мы дополнительно провели исследование влияния скорости сжатия на них.

Напряжение при сжатии определялось как отношение суммарной силы, действующей на виртуальные плоские границы со стороны атомов, к суммарной площади пятна контакта. Площадь пятна контакта вычислялась как количество атомов у границы, умноженное на среднюю площадь, приходящуюся на один атом.

3. Результаты и обсуждение

На рис. 3 приведены примеры зависимостей напряжение-деформация при сжатии монокристаллических частиц никеля диаметром 10 nm со скоростью 10 m/s в направлениях [111], [110] и [112] (это три взаимно перпендикулярные оси) при начальной температуре 0 K. К особенностям данных зависимостей можно отнести наличие нескольких локальных пиков, связанных с подстройкой структуры в области пятна контакта, где происходит приложение нагрузки. Из-за этого также зачастую упругая область оказывается невыраженной — обычно наблюдается несколько локальных пиков до максимального напряжения, которое в некоторых работах определяют как твердость наночастицы [14–19]. Максимальные значения напряжения достигают очень больших значений, для направлений [111] и [110] в данном случае более 18 GPa. Также можно отметить сравнительно вязкий, нехрупкий характер деформации частиц: максимальные значения напряжения наблюдаются при очень больших значениях деформации в несколько процентов, а для направления [112] почти 12 %.

Для монокристаллических наночастиц, как и следовало ожидать, направление сжатия влияет на механические характеристики: при сжатии вдоль направлений [111] (перпендикулярно наиболее плотноупакованным плоскостям) и [110] (вдоль наиболее плотноупакованного направления) максимальное напряжение было всегда заметно больше напряжения, достигаемого при сжатии вдоль [112]. Следует сказать, что качественно аналогичный результат был также получен в [14] при исследовании сжатия монокристаллических частиц меди (которая, как и никель, тоже имеет ГЦК решетку). Отличие прочности при сжатии в указанных направлениях объясняется отличием т. н. приведенного сдвигового напряжения, определяемого как напряжение, провоцирующее

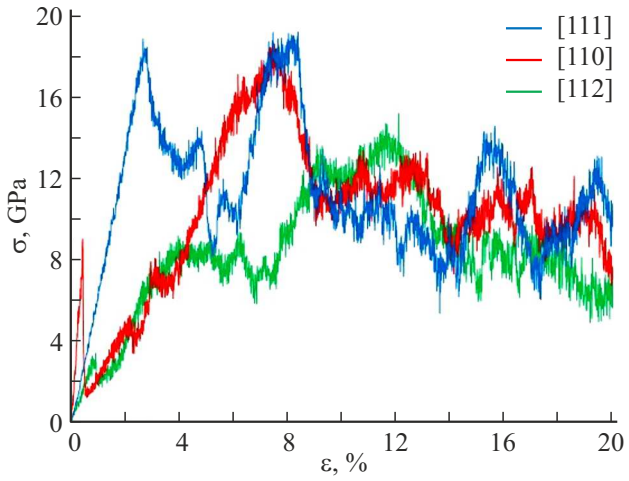

Рис. 3. Зависимости напряжение-деформация при сжатии монокристаллических частиц никеля диаметром 10 nm со скоростью 10 m/s в направлениях [111], [110] и [112] при начальной температуре 0 K.

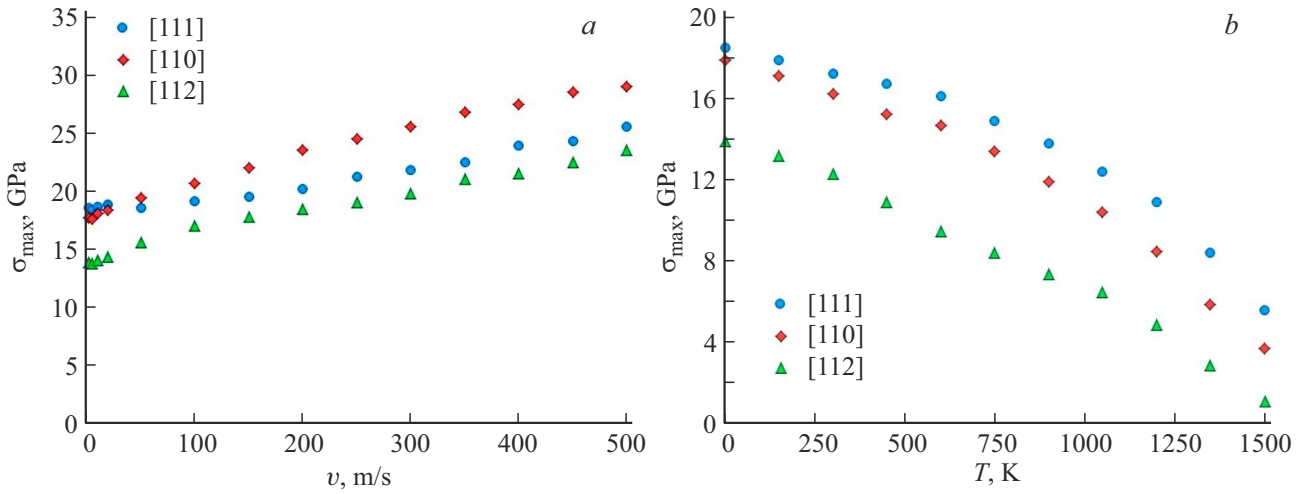

Рис. 4. Зависимости прочности монокристаллической наночастицы диаметром 10 nm: *a*) от скорости сжатия (при начальной температуре 0 K); *b*) от температуры (при скорости сжатия 10 m/s).

сдвиг в направлении распространения дислокаций в ГЦК кристалле, т.е. в направлении типа ⟨110⟩ в плоскости скольжения типа {111}.

Влиянию скорости деформирования и температуры на механические характеристики часто уделяется недостаточное внимание при молекулярно-динамическом моделировании сжатия наночастиц. Мы провели дополнительные исследования этого влияния на примере монокристаллических наночастиц никеля диаметром 10 nm при сжатии вдоль трех направлений — [111], [110] и [112]. На рис. 4, *a* изображены зависимости прочности частицы $\sigma_{\max}$ от скорости сжатия. Скорость варьировалась от 2 до 500 m/s. Максимальное значение скорости, которые мы рассмотрели, всего на порядок меньше скорости звука в никеле. Как можно видеть, увеличение скорости деформирования приводит к увеличению максимального напряжения частицы, которое может быть достигнуто при сжатии. Это является известной и экспериментально наблюдаемой закономерностью, которая объясняется конечной скоростью распространения упругих волн и дислокаций [53]. Для скорости деформации менее примерно 10 m/s ее влияние на величину $\sigma_{\max}$ снижалось и было не столь явным.

Температура также в значительной степени влияет на механические характеристики: как известно, с ростом температуры модули упругости уменьшаются, а пластическая деформация и образование дислокаций происходят при меньших значениях деформации [53]. Это же касается и деформации наночастиц. На рис. 4, *b* приведены зависимости прочности монокристаллической частицы диаметром 10 nm от температуры. Видно, что с ростом температуры прочность наночастицы падает.

При сравнении зависимостей на рис. 4, *a* и *b* можно заметить интересную особенность: при скорости деформации менее примерно 100 m/s прочность при сжатии вдоль [111] обычно немного выше, чем при сжатии вдоль [110], но при скоростях выше 100 m/s, наоборот, прочность при сжатии вдоль [110] становится выше, чем для [111]. При этом с ростом скорости деформации разница между значениями прочности для направлений [110] и [111] увеличивается. По-видимому, при таких высоких скоростях, которые всего на порядок меньше скорости звука, это связано с анизотропией распространения упругих волн в кристалле. Все дальнейшие исследования сжатия наночастиц были выполнены при скорости деформирования 10 m/s и начальной температуре 0 K.

На рис. 5, *a* изображены зависимости прочности $\sigma_{\max}$ от размера монокристаллической наночастицы. В первую очередь следует отметить, что по мере уменьшения размера частицы, действительно, наблюдается тенденция к росту прочности, о чем уже докладывалось в других исследованиях. Помимо размеров, которые обычно рассматриваются при моделировании сжатия наночастиц (порядка десятков nm), мы рассмотрели сравнительно малые частицы, диаметром вплоть до 1.5 nm, в которых развитие пластических сдвигов протекает иначе, чем в больших частицах — в них, как правило, практически нельзя застать дислокацию внутри частицы. Однако и для таких малых частиц, как видно на рис. 5, *a*, тенденция роста прочности с уменьшением размера сохраняется.

При диаметре частицы менее примерно 8 nm на рис. 5, *a* наблюдается заметно больший разброс значений прочности по сравнению с частицами большего размера. В первую очередь это обусловлено погрешностями вычисления напряжения в модели, которые увеличивались при уменьшении размера частиц из-за погрешности определения как площади пятна контакта, так и из-за роста влияния на погрешность в этом случае формы частицы и рельефа ее поверхности. Небольшие отклонения формы частицы от шарообразной или наличие атомных ступенек на поверхности приводили к заметным отклонениям получаемых значений.

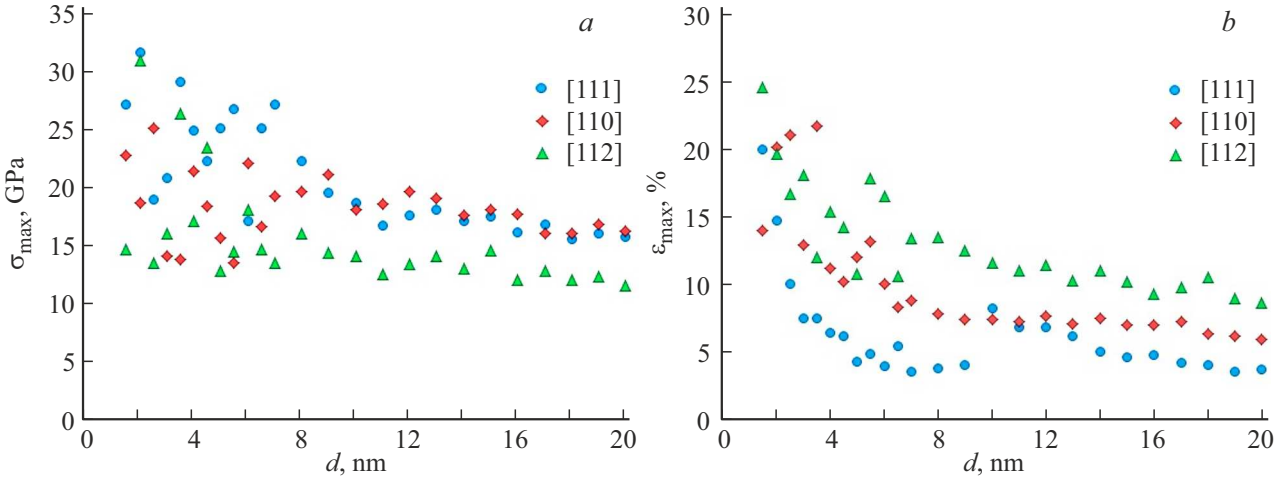

Рис. 5. Зависимости *a*) максимального напряжения и *b*) соответствующей деформации от размера монокристаллической наночастицы.

Как уже говорилось выше, исследования были проведены для круглых монокристаллических наночастиц, полученных в модели в результате вырезания шара из изначального ГЦК-кристалла. Однако, согласно [50,51], оптимальными частицами с точки зрения энергии при низких температурах являются либо икосаэдры при малых размерах, либо усеченные ГЦК-октаэдры при сравнительно больших размерах. Для таких идеальных частиц следует ожидать рекордных значений прочности, как, например, в работах [13,20], где для подобных идеальных монокристаллических частиц никеля были получены значения прочности примерно в полтора раза выше полученных в нашей работе. Например, в [13] при наноидентировании монокристаллических частиц никеля, имеющих форму усеченного октаэдра, были получены значения прочности от 10 GPa для частиц размером 880 nm до 34 GPa для частиц размером 210 nm. В работе [20], выполненной с помощью моделирования методом молекулярной динамики, прочность наночастиц никеля в форме усеченного октаэдра варьировалась от 20 GPa для частиц диаметром 20 nm до 35 GPa для частиц диаметром 5 nm. Вместе с тем, в работе [43] при молекулярно-динамическом моделировании сжатия наночастицы никеля диаметром 10 nm, имеющей форму шара, прочность была уже гораздо ниже — 13.5 GPa.

На рис. 5, *b* изображены зависимости значений деформации, при которых достигается максимальное напряжение ε_{max}, от размера частиц. По мере уменьшения размера частицы значения ε_{max} возрастают, что согласуется с результатами работ других авторов [32–36]. В частности, в экспериментальной работе [13] для монокристаллических частиц никеля максимальное напряжение достигалось при деформации 10–20 %, а в работе [43], выполненной с помощью молекулярно-динамического моделирования, для наночастиц никеля диаметром 10 nm максимальное напряжение достигалось при сжатии 5–15 %.

Как можно видеть на рис. 5, *b*, более сильный рост величины ε_{max} наблюдается при размерах частиц менее примерно 8 nm. Для величины ε_{max} при сжатии монокристаллической частицы, как и для прочности, также наблюдается анизотропия: наибольшие значения величины ε_{max} были получены при сжатии частиц вдоль направления [112], наименьшие — для направления [111].

На рис. 6 приведены изображения, иллюстрирующие основные этапы деформирования наночастиц при сжатии. На первом этапе происходило формирование плоских пятен контакта — областей приложения нагрузки. Структура „сминалась“ до некоторого значения площади контакта, далее следовал интервал упругой деформации, после которого, обычно резко, вместе с падением напряжения (рис. 3), вновь происходили увеличение площади контакта и временная ее фиксация с последующим новым интервалом упругой деформации. Следующим этапом, который наступал, как правило, перед достижением максимального значения напряжения, был кооперативный поворот всей структуры частицы, иногда на довольно существенный угол. В примере, изображенном на рис. 6, *b*, структура частицы диаметром 10 nm повернулась вокруг оси типа [112] на угол около 13°. Примечательно, что по мере уменьшения размера частицы доля этого этапа, этапа поворота, возрастала, как и угол, на который поворачивалась структура кристалла. После этапа поворота следовал этап образования и распространения дислокаций, которые, как правило, формировались от пятен контакта, то есть от мест приложения нагрузки (рис. 6, *c*). На рис. 6, *c* показан момент образования двух комплексов из двух частичных дислокаций с дефектом упаковки между ними. Причем на изображенном примере одни частичные дислокации из этих двух пар уже почти достигли поверхности частицы, а две другие еще находятся вблизи пятен контакта. При дальнейшем сжатии последуют отрыв этих частичных дислокаций и их выход на поверхность вслед

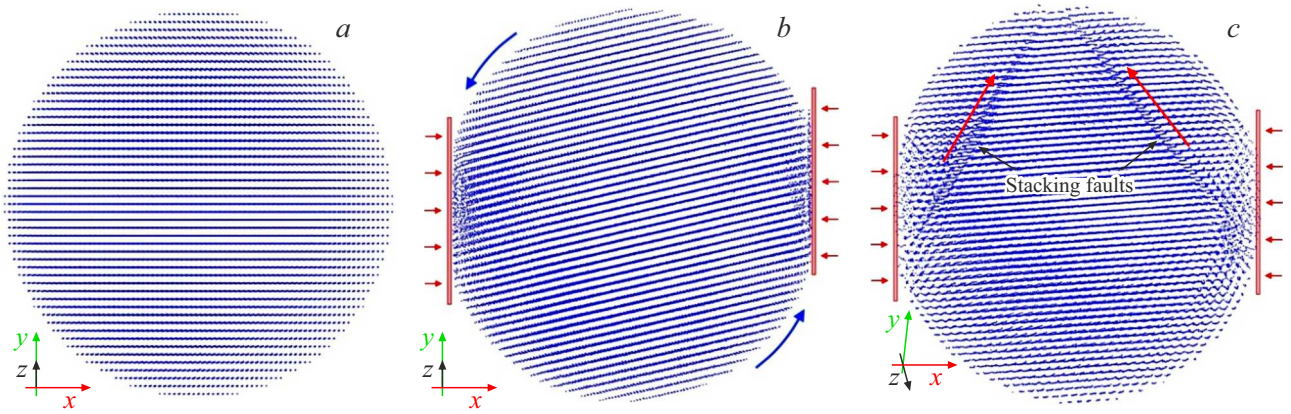

Рис. 6. Основные этапы пластической деформации монокристаллических наночастиц на примере сжатия 10-nm частицы: *a*) начальная структура частицы; *b*) поворот частицы (деформация 9.20 %); *c*) образование дислокаций от мест приложения нагрузки (деформация 13.75 %).

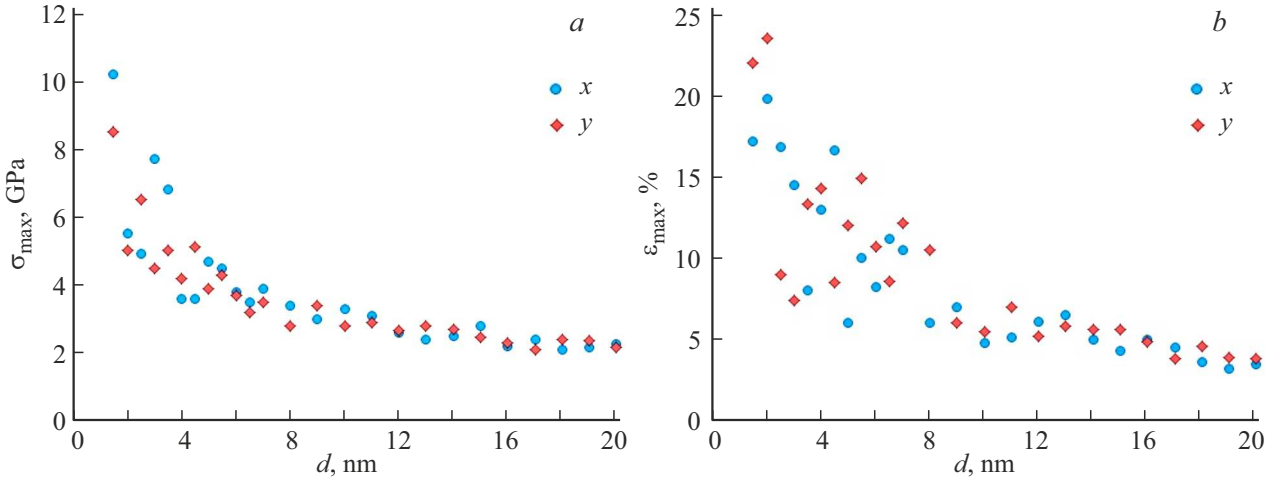

Рис. 7. Зависимости *a*) максимального напряжения и *b*) соответствующей деформации от размера аморфной наночастицы.

за первыми. Формирование дислокаций при сжатии наночастиц изучалось, например, в работах [14,15,19].

При изучении деформации наночастиц с аморфной структурой для них также были построены зависимости максимального напряжения и соответствующей деформации от размера частиц, которые приведены на рис. 7. Для каждой аморфной частицы сжатие проводилось вдоль двух разных взаимно перпендикулярных направлений. Как видно на рис. 7, *a*, несмотря на предположения авторов работ [25–28], что влияние размера является особенностью только кристаллических частиц, нами было получено, что размер влияет на прочность частиц и с аморфной структурой: по мере уменьшения размера аморфных частиц, как видно на рис. 7, *a*, прочность частиц увеличивалась. Причем это влияние сильнее проявлялось для относительно маленьких частиц, диаметром менее примерно 8 nm. Прочность аморфных частиц оказалась, что вполне ожидаемо, в несколько раз ниже прочности монокристаллических частиц. Только для сравнительно малых частиц, диаметром менее примерно 3 nm, она оказалась странно высокой, нехарактерной для „переохлажденной жидкости“.

На рис. 7, *b* изображена зависимость значений деформации, соответствующей максимальному напряжению, от размера аморфной частицы. Здесь вновь хорошо прослеживается влияние размера частицы: как и в случае кристаллической наночастицы, по мере уменьшения ее диаметра величина ε_{max} увеличивается. Интересно, что значения ε_{max} оказались даже ниже, чем в среднем для монокристаллических частиц (рис. 5, *b*).

Одной из возможных причин влияния размера частицы на ее прочность в случае аморфной структуры может служить предложенное еще авторами работы [31] вероятное уплотнение структуры и, соответственно, ее упрочнение вблизи пятен контакта, мест, где происходит наиболее интенсивное сжатие. При изучении изменения структуры аморфных частиц во время сжатия нами в большинстве случаев, действительно, был замечен интересный феномен: на некотором этапе, обычно при деформации более 8–10 %, вблизи пятен контакта про-

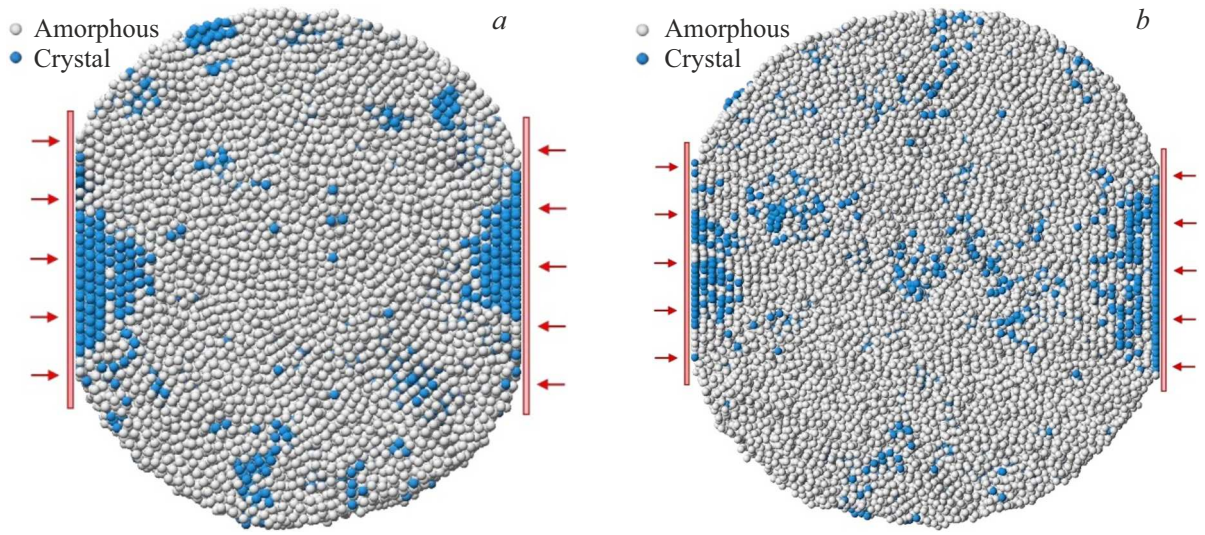

Рис. 8. Частичная кристаллизация вблизи мест приложения нагрузки при сжатии аморфных наночастиц. Показаны сечения частиц диаметром: *a*) 10 nm (деформация 12.13 %); *b*) 12 nm (деформация 11.90 %).

исходила частичная кристаллизация — вблизи мест приложения максимальной нагрузки формировалась кристаллическая структура. При этом наиболее плотноупакованные атомные плоскости типа (111) ориентировались, как правило, параллельно плоскости пятна. На рис. 8 изображены примеры подобной частичной кристаллизации вблизи „пятачков“ для частиц диаметром 10 и 12 nm.

Уплотнение структуры и формирование кристаллической фазы вблизи пятен контакта может оказывать влияние на повышение прочности аморфных наночастиц. Однако влияние размера частицы на долю кристаллической фазы в начале ее формирования и скорость ее роста в течение сжатия частицы оказалось неоднозначным, особенно для сравнительно малых частиц. Было замечено, что по мере уменьшения размера частицы вероятность образования кристаллической фазы снижалась, что, видимо, объясняется тем, что при малом размере частицы ее радиус становится близким к критическому радиусу зародыша кристаллической фазы (т. е. радиусу растущей кристаллической фазы, при котором она становится стабильной). Вместе с тем, малые аморфные частицы, как правило, показывали аномально высокую прочность (рис. 8, *a*). Также следует отметить, что в тех случаях, когда кристаллизация малых аморфных частиц все же происходила, их конечная структура, как правило, содержала меньше структурных дефектов по сравнению со структурой больших частиц после их кристаллизации, как это имело место, например, при исследовании нами кристаллизации наночастиц при охлаждении от расплавленного состояния в [49].

Таким образом, выясняется сложность и многофакторность влияния размера частицы на ее механические свойства. Для кристаллических частиц важным является объем, необходимый для образования и развития дислокаций, для аморфных — уплотнение и упрочнение, зачастую в сочетании с частичной кристаллизацией, структуры вблизи мест приложения нагрузки. Кроме этого, интересным и важным в данном случае вопросом является изучение факторов, влияющих на площадь самого пятна контакта, с учетом того, что эта площадь определяет значение вычисляемого напряжения.

4. Заключение

С помощью метода молекулярной динамики проведено исследование деформации сжатия наночастиц никеля с кристаллической и аморфной структурой. Изучено влияние размера наночастиц на их прочность и на значение деформации, при которой достигается максимальное напряжение. Кроме того, изучено влияние скорости деформирования, температуры и ориентации сжатия на механические характеристики монокристаллических наночастиц. Сделаны следующие выводы.

1. С ростом скорости деформирования прочность наночастиц увеличивается, а при повышении температуры уменьшается. Например, при увеличении скорости сжатия частиц диаметром 10 nm на 100 m/s (в диапазоне скоростей от 2 до 500 m/s) прочность повышалась примерно на 8–13 % в зависимости от ориентации сжатия. При увеличении температуры на 100 K (в диапазоне от 0 до 1000 K) прочность падала на 3–5 %.

2. При деформации монокристаллических наночастиц имеет место анизотропия механических свойств. В частности, прочность при сжатии вдоль направлений [111] и [110] была всегда заметно больше, примерно на 30–40 %, прочности при сжатии вдоль [112].

3. Были выделены следующие этапы деформации монокристаллических наночастиц при сжатии: формиро-

вание плоских „пятачков“ в местах контакта со сжимающими поверхностями, кооперативный поворот всей структуры частицы, образование вблизи „пятачков“ дислокаций и их распространение. По мере уменьшения размера монокристаллической частицы увеличивалась доля этапа поворота структуры.

4. По мере уменьшения размера наночастиц, как монокристаллических, так и аморфных, их прочность возрастала, а также повышалось значение деформации, при которой достигалось максимальное напряжение. При этом значения прочности для аморфных частиц оказались в несколько раз ниже значений для монокристаллических частиц.

5. При сжатии аморфных наночастиц в большинстве случаев наблюдался феномен уплотнения и частичной кристаллизации структуры вблизи мест приложения нагрузки, который особенно явно проявлялся при достижении деформации, как правило, значений более 8–10%. При дальнейшем сжатии частица обычно кристаллизовалась полностью с образованием нанокристаллической структуры.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

[1] Dekker Encyclopedia of Nanoscience and Nanotechnology, 3rd ed. / Eds J.A. Schwarz, S.E. Lyshevski, C.I. Contescu). CRC Press, Boca Raton (2014). 4200 p.

[2] C. Humbert, T. Noblet, L. Dalstein, B. Busson, G. Barbillon. Mater. **12**, *5*, 836 (2019). https://doi.org/10.3390/ma12050836

[3] Y. Mantri, J.V. Jokerst. ACS Nano **14**, *8*, 9408 (2020). https://doi.org/10.1021/acsnano.0c05215

[4] T.K. Jain, M.A. Morales, S.K. Sahoo, D.L. Leslie-Pelecky, V. Labhasetwar. Mol. Pharm. **2**, *3*, 194 (2005). https://doi.org/10.1021/mp0500014

[5] S.-Y. Shim, D.-K. Lim, J.-M. Nam. Nanomedicine **3**, *2*, 215 (2008). https://doi.org/10.2217/17435889.3.2.215

[6] K. Kodama, T. Nagai, A. Kuwaki, R. Jinnouchi, Y. Morimoto. Nature Nanotechnol. **16**, *2*, 140 (2021). https://doi.org/10.1038/s41565-020-00824-w

[7] S. Mitchell, R. Qin, N. Zheng, J. Pérez-Ramirez. Nature Nanotechnol. **16**, *2*, 129 (2021). https://doi.org/10.1038/s41565-020-00799-8

[8] C.E. Carlton, P.J. Ferreira. Micron **43**, *11*, 1134 (2012). https://doi.org/10.1016/j.micron.2012.03.002

[9] J. Deneen, W.M. Mook, A. Minor, W.W. Gerberich, C.B. Carter. J. Mater. Sci. **41**, *14*, 4477 (2006). https://doi.org/10.1007/s10853-006-0085-9

[10] W.W. Gerberich, W.M. Mook, C.R. Perrey, C.B. Carter, M.I. Baskes, R. Mukherjee, A. Gidwani, J. Heberlein, P.H. McMurry, S.L. Girshick. J. Mech. Phys. Solids **51**, *6*, 979 (2003). https://doi.org/10.1016/S0022-5096(03)00018-8

[11] D.D. Stauffer, A. Beaber, A. Wagner, O. Ugurlu, J. Nowak, K.A. Mkhoyan, S. Girshick, W. Gerberich. Acta Materialia **60**, *6–7*, 2471 (2012). https://doi.org/10.1016/j.actamat.2011.10.045

[12] M. Ramos, L. Ortiz-Jordan, A. Hurtado-Macias, S. Flores, J.T. Elizalde-Galindo, C. Rocha, B. Torres, M. Zarei-Chaleshtori, R.R. Chianelli. Mater. **6**, *1*, 198 (2013). https://doi.org/10.3390/ma6010198

[13] A. Sharma, J. Hickman, N. Gazit, E. Rabkin, Y. Mishin. Nature Commun. **9**, *1*, 4102 (2018). https://doi.org/10.1038/s41467-018-06575-6

[14] J. Bian, H. Zhang, X. Niu, G. Wang. Crystals **8**, *3*, 116 (2018). https://doi.org/10.3390/cryst8030116

[15] J.J. Bian, L. Yang, X.R. Niu, G.F. Wang. Phil. Mag. **98**, *20*, 1848 (2018). https://doi.org/10.1080/14786435.2018.1459059

[16] D. Mordehai, S.-W. Lee, B. Backes, D.J. Srolovitz, W.D. Nix, E. Rabkin. Acta Materialia **59**, *13*, 5202 (2011). https://doi.org/10.1016/j.actamat.2011.04.057

[17] W.-Z. Han, L. Huang, S. Ogata, H. Kimizuka, Z.-C. Yang, C. Weinberger, Q.-J. Li, B.-Y. Liu, X.-X. Zhang, J. Li, E. Ma, Z.-W. Shan. Adv. Mater. **27**, *22*, 3385 (2015). https://doi.org/10.1002/adma.201500377

[18] Y. Hong, N. Zhang, M.A. Zaeem. Acta Materialia **145**, 8 (2018). https://doi.org/10.1016/j.actamat.2017.11.034

[19] J. Amodeo, L. Pizzagalli. Comptes Rendus. Physique, Plasticity & Solid State Phys. **22**, *S3*, 35 (2021). https://doi.org/10.5802/crphys.70

[20] Y. Feruz, D. Mordehai. Acta Materialia **103**, 433 (2016). http://dx.doi.org/10.1016/j.actamat.2015.10.027

[21] D. Guo, G. Xie, J. Luo. J. Phys. D Appl. Phys. **47**, *1*, 013001 (2014). https://doi.org/10.1088/0022-3727/47/1/013001

[22] К.А. Крылова, Л.Р. Сафина, Р.Т. Мурзаев, С.А. Щербинин, Ю.А. Баимова, Р.Р. Мулюков. ФТТ **65**, *9*, 1579 (2023). https://doi.org/10.21883/FTT.2023.09.56256.101

[23] K.A. Krylova, L.R. Safina, R.T. Murzaev, J.A. Baimova, R.R. Mulyukov. Mater. **14**, *11*, 3087 (2021). https://doi.org/10.3390/ma14113087

[24] L.R. Safina, J.A. Baimova, R.R. Mulyukov. Mech. Adv. Mater. Mod. Processes **5**, *1*, 2 (2019). https://doi.org/10.1186/s40759-019-0042-3

[25] D. Kiener, A.M. Minor. Nano Lett. **11**, *9*, 3816 (2011). https://doi.org/10.1021/nl201890s

[26] F. Mompiou, M. Legros, A. Sedlmayr, D.S. Gianola, D. Caillard, O. Kraft. Acta Materialia **60**, *3*, 977 (2012). https://doi.org/10.1016/j.actamat.2011.11.005

[27] D.J. Dunstan, A.J. Bushby. Int. J. Plast. **40**, 152 (2013). https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2012.08.002

[28] P.S. Phani, K.E. Johanns, E.P. George, G.M. Pharr. Acta Materialia **61**, *7*, 2489 (2013). https://doi.org/10.1016/j.actamat.2013.01.023

[29] D. Kilymis, C. Gerard, L. Pizzagalli. TMS 2019 148th Annual Meeting & Exhibition Supplem. Proceed. The Minerals, Metals & Materials Series, 1347 (2019). https://doi.org/10.1007/978-3-030-05861-6_128

[30] H.K. Issa, A. Taherizadeh, A. Maleki. Ceram. Int. **46**, *13*, 21647 (2020). https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2020.05.272

[31] J. Zhao, S. Nagao, G.M. Odegard, Z. Zhang, H. Kristiansen, J. He. Nanoscale Res. Lett. **8**, *1*, 541 (2013). https://doi.org/10.1186/1556-276X-8-541

[32] A.R. Beaber, J.D. Nowak, O. Ugurlu, W.M. Mook, S.L. Girshick, R. Ballarini, W.W. Gerberich. Phil. Mag. **91**, *7–9*, 1179 (2011). https://doi.org/10.1080/14786435.2010.487474

[33] J. Sun, L. He, Y.C. Lo, T. Xu, H. Bi, L. Sun, Z. Zhang, S.X. Mao, J. Li. Nature Mater. **13**, *11*, 1007 (2014). https://doi.org/10.1038/nmat4105

[34] I. Issa, J. Amodeo, J. Réthore, L. Joly-Pottuz, C. Esnouf, J. Morthomas, M. Perez, J. Chevalier, K. Masenelli-Varlot. Acta Materialia **86**, 295 (2015). https://doi.org/10.1016/j.actamat.2014.12.001

[35] W.M. Mook, J.D. Nowak, C.R. Perrey, C.B. Carter, R. Mukherjee, S.L. Girshick, P.H. McMurry, W.W. Gerberich. Phys. Rev. B **75**, *21*, 214112 (2007). https://doi.org/10.1103/PhysRevB.75.214112
[36] W.W. Gerberich, D.D. Stauffer, A.R. Beaber, N.I. Tymiak. J. Mater. Res. **27**, *3*, 552 (2012). https://doi.org/10.1557/jmr.2011.348
[37] S.-X. Liang, L.-C. Zhang, S. Reichenberger, S. Barcikowski. Phys. Chem. Chem. Phys. **23**, *19*, 11121 (2021). https://doi.org/10.1039/D1CP00701G
[38] J. Sun, S.K. Sinha, A. Khammari, M. Picher, M. Terrones, F. Banhart. Carbon **161**, 495 (2020). https://doi.org/10.1016/j.carbon.2020.01.067
[39] Y. Qian, A. da Silva, E. Yu, C.L. Anderson, Y. Liu, W. Theis, P. Ercius, T. Xu. Nature Commun. **12**, *1*, 2767 (2021). https://doi.org/10.1038/s41467-021-22950-2
[40] Y. Pei, G. Zhou, N. Luan, B. Zong, M. Qiao, F. Tao. Chem. Soc. Rev. **41**, *24*, 8140 (2012). https://doi.org/10.1039/c2cs35182j
[41] Z. Jia, Q. Wang, L. Sun, Q. Wang, L.-C. Zhang, G. Wu, J.-H. Luan, Z.-B. Jiao, A. Wang, S.-X. Liang, M. Gu, J. Lu. Adv. Funct. Mater. **29**, *19*, 1807857 (2019). https://doi.org/10.1002/adfm.201807857
[42] Q. Chen, Z. Yan, L. Guo, H. Zhang, L.-C. Zhang, W. Wang. J. Mol. Liq. **318**, 114318 (2020). https://doi.org/10.1016/j.molliq.2020.114318
[43] A.M. Goryaeva, C. Fusco, M. Bugnet, J. Amodeo. Phys. Rev. Mater. **3**, *3*, 033606 (2019). https://doi.org/10.1103/PhysRevMaterials.3.033606
[44] G.P. Purja Pun, Y. Mishin. Phil. Mag. **89**, *34–36*, 3245 (2009). https://doi.org/10.1080/14786430903258184
[45] E.V. Levchenko, T. Ahmed, A.V. Evteev. Acta Materialia **136**, 74 (2017). https://doi.org/10.1016/j.actamat.2017.06.056
[46] G.M. Poletaev, Y.V. Bebikhov, A.S. Semenov, M.D. Starostenkov. Lett. Mater. **11**, *4*, 438 (2021). https://doi.org/10.22226/2410-3535-2021-4-438-441
[47] Г.М. Полетаев, Д.В. Дмитриенко, В.В. Дябденков, В.Р. Микрюков, М.Д. Старостенков. ФТТ **55**, *9*, 1804 (2013). [G.M. Poletaev, D.V. Dmitrienko, V.V. Diabdenkov, V.R. Mikrukov, M.D. Starostenkov. Phys. Solid State **55**, *9*, 1920 (2013). https://doi.org/10.1134/S1063783413090254]
[48] G.M. Poletaev, Y.Y. Gafner, S.L. Gafner. Lett. Mater. **13**, *4*, 298 (2023). https://doi.org/10.22226/2410-3535-2023-4-420-425
[49] G.M. Poletaev, Y.V. Bebikhov, A.S. Semenov. Mater. Chem. Phys. **309**, 128358 (2023). https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2023.128358
[50] J.M. Montejano-Carrizales, M.P. Iñ iguez, J.A. Alonso. J. Cluster Sci. **5**, *2*, 287 (1994). https://doi.org/10.1007/BF01170713
[51] F. Baletto, R. Ferrando, A. Fortunelli, F. Montalenti, C. Mottet. J. Chem. Phys. **116**, *9*, 3856 (2002). https://doi.org/10.1063/1.1448484
[52] A. Tilocca. J. Chem. Phys. **139**, *11*, 114501 (2013). https://doi.org/10.1063/1.4821150
[53] А.Д. Евстифеев, А.А. Груздков, Ю.В. Петров. ЖТФ **83**, *7*, 59 (2013). [A.D. Evstifeev, A.A. Gruzdkov, Y.V. Petrov. Tech. Phys. **58**, *7*, 989 (2013). https://doi.org/10.1134/S1063784213070086]

Редактор Е.В. Толстякова