



УДК 538.953

DOI 10.17073/0368-0797-2026-4-403-411



Оригинальная статья

Original article

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЕФОРМАЦИИ НАНОЧАСТИЦ АУСТЕНИТА С НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРОЙ

И. В. Зоря¹, Г. М. Полетаев², Р. Ю. Ракитин³,
Ю. В. Бебихов⁴, А. С. Семенов⁴

¹ Сибирский государственный индустриальный университет (Россия, 654007, Кемеровская обл. – Кузбасс, Новокузнецк, ул. Кирова, 42)

² Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова (Россия, 656038, Алтайский край, Барнаул, пр. Ленина, 46)

³ Алтайский государственный университет (Россия, 656038, Алтайский край, Барнаул, пр. Комсомольский, 100)

⁴ Политехнический институт Северо-Восточного федерального университета им. М.К. Аммосова (Россия, 678170, Республика Саха (Якутия), Мирный, ул. Тихонова, 5)

✉ zorya.i@mail.ru

Аннотация. С помощью молекулярно-динамического моделирования проведено исследование деформации сжатия наночастиц аустенита с нанокристаллической структурой при низких температурах. Авторы изучали влияние размера наночастицы (от 2 до 20 нм) и размера кристаллических зерен (от 2 до 8 нм) на ее прочность и на значение деформации сжатия, при которой достигается максимальное напряжение. Выделены особенности протекания пластической деформации в случае наночастиц с нанокристаллической структурой. Основное сжатие наночастицы осуществлялось в модели путем движения виртуальных плоскостей по две стороны от частицы с постоянной скоростью 10 м/с при начальной температуре 0 К. Прочность наночастиц уменьшается при уменьшении среднего размера зерна в них. По мере уменьшения размера самих нанокристаллических частиц, как и в случае монокристаллических, их прочность возрастает. В работе также выяснено, что с уменьшением размера частиц повышается значение деформации, при которой достигается максимальное напряжение при сжатии наночастиц. Уменьшение размера зерен приводит к уменьшению прочности, что связано с основным механизмом пластической деформации металлических частиц с нанокристаллической структурой – зернограницным проскальзыванием. На первом этапе деформирования, как правило, происходит поворот всей структуры частицы до достижения максимального значения проекции вектора напряжения на преимущественную плоскость сдвига, которая в случае нанокристаллической структуры определялась взаимной ориентацией границ зерен. Вытянутые примерно вдоль одной плоскости границы зерен представляли в данном случае преимущественную плоскость сдвига.

Ключевые слова: молекулярная динамика, наночастица, нанокристаллическая структура, прочность, аустенит

Для цитирования: Зоря И.В., Полетаев Г.М., Ракитин Р.Ю., Бебихов Ю.В., Семенов А.С. Молекулярно-динамическое моделирование деформации наночастиц аустенита с нанокристаллической структурой. *Известия вузов. Черная металлургия*. 2026;69(4):403–411.

<https://doi.org/10.17073/0368-0797-2026-4-403-411>

MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION OF DEFORMATION OF AUSTENITE NANOPARTICLES WITH A NANOCRYSTALLINE STRUCTURE

I. V. Zorya¹, G. M. Poletaev², R. Yu. Rakitin³,
Yu. V. Bebikhov⁴, A. S. Semenov⁴

¹ Siberian State Industrial University (42 Kirova Str., Novokuznetsk, Kemerovo Region – Kuzbass 654007, Russian Federation)

² Polzunov Altai State Technical University (46 Lenina Ave., Barnaul, Altai Territory 656038, Russian Federation)

³ Altai State University (100 Komsomolskii Ave., Barnaul, Altai Territory 656038, Russian Federation)

⁴ Mirny Polytechnic Institute (branch) of Ammosov North-Eastern Federal University (5 Tikhonova Str., Mirny, Republic of Sakha (Yakutia) 678170, Russian Federation)

✉ zorya.i@mail.ru

Abstract. Molecular dynamics simulation was used to study the compressive deformation of austenite nanoparticles with a nanocrystalline structure at low temperatures. The authors studied the influence of nanoparticle size (from 2 to 20 nm) and crystalline grain size (from 2 to 8 nm) on their strength and on the value of compressive deformation at which maximum stress is achieved. The characteristics of plastic deformation in the case of nanoparticles with a nanocrystalline structure are highlighted. Uniaxial compression of the nanoparticle was simulated in the model by moving virtual planes on both sides of the particle with a constant velocity of 10 m/s at an initial temperature of 0 K. The study demonstrated that the nanoparticles strength decreases with decreasing average grain size. While the size of the nanocrystalline particles themselves decreases, as with single-crystal particles, their strength increases. The authors also found that with decreasing particle size, the value of deformation, at which maximum stress is achieved during nanoparticle compression, increases. A decrease in grain size leads to a decrease in strength, which is associated with the primary mechanism of plastic deformation of metal particles with a nanocrystalline structure: grain boundary sliding. During the first stage of deformation, the entire particle structure typically rotated until the maximum value of the stress vector projection onto the preferred shear plane was reached. In the case of a nanocrystalline structure, this was determined by the relative orientation of the grain boundaries. Grain boundaries, roughly aligned along the same plane, represented the preferred shear plane in this case.

Keywords: molecular dynamics, nanoparticle, nanocrystalline structure, strength, austenite

For citation: Zorya I.V., Poletaev G.M., Rakitin R.Yu., Bebikhov Yu.V., Semenov A.S. Molecular dynamics simulation of deformation of austenite nanoparticles with a nanocrystalline structure. *Izvestiya. Ferrous Metallurgy*. 2026;69(4):403–411.

<https://doi.org/10.17073/0368-0797-2026-4-403-411>

ВВЕДЕНИЕ

В последние десятилетия большое внимание уделяется металлическим наночастицам благодаря их уникальным физическим, химическим и оптическим свойствам [1], которые находят применение в различных областях, таких как микроэлектроника, оптоэлектроника и плазмоника [2; 3], химический катализ, изготовление газовых сенсоров [4; 5], медицина и биология [6; 7]. Металлические наночастицы зачастую также имеют улучшенные механические свойства по сравнению с соответствующими объемными материалами [8–12]. Это, помимо прочих приложений, делает наночастицы перспективными для улучшения трибологических свойств смазочных материалов, а также для использования в качестве наполнителя в композиционных материалах [11]. С помощью методов наноиндентирования экспериментально было выяснено, что прочность монокристаллических наночастиц при их сжатии может достигать гигантских значений – вплоть до нескольких десятков ГПа [8–10]. Например, в работе [10], при сжатии монокристаллических наночастиц никеля диаметром 210 нм была зафиксирована прочность 34 ГПа.

В настоящее время известно, что прочность монокристаллических частиц увеличивается при

уменьшении их размера: это было показано как экспериментально, так и с помощью компьютерного моделирования [10; 13–18]. Другим интересным наблюдением, касающимся деформации наночастиц, является увеличение вязкости разрушения при уменьшении их размера [19]. В экспериментальной работе [10] при наноиндентировании частиц никеля максимальное напряжение сжатия, например, достигалось при деформации 10–20 %. В работе [20] с помощью высоко-разрешающей просвечивающей электронной микроскопии было показано, что серебряные наночастицы размером менее 10 нм при сжатии при комнатной температуре ведут себя аналогично жидким каплям, а в работах [21–23] показано, что достаточно маленькие частицы, изготовленные из очень хрупких материалов (таких как кремний или оксид магния), могут быть деформированы пластически.

Помимо частиц с кристаллической структурой в настоящее время большой интерес представляют частицы с высоким уровнем беспорядка атомной структуры: аморфной или нанокристаллической структурой [24–27]. Такие частицы характеризуются высокой степенью неравновесности структуры и сравнительно большими значениями избыточной (или запасенной) энергии; они, как правило, обладают уникальной

электронной структурой, а также набором полезных механических свойств, в частности, сравнительно высокими пластичностью и вязкостью разрушения. Наночастицы с нанокристаллической структурой можно получить с помощью охлаждения расплавленных наночастиц с достаточно высокой скоростью порядка $10^{10} - 10^{12}$ К/с [28 – 30]. При таких скоростях охлаждения не успевает произойти подавление роста одних зерен другими и образуется множество мелких зерен со средним размером (всего около нескольких нанометров). Основными механизмами пластической деформации в случае нанокристаллической структуры являются не образование и скольжение дислокаций (так называемое внутриверхнее скольжение), а сдвиги зерен относительно друг друга вдоль межзеренных границ – зернограничное проскальзывание.

Целью настоящей работы является исследование механических свойств круглых наночастиц с нанокристаллической структурой при деформации сжатия при низких температурах с помощью молекулярно-динамического моделирования. Главное внимание уделено изучению влияния размера наночастицы и среднего размера зерна в ней на ее прочность и вязкость разрушения. Рассматриваются особенности протекания деформации. В качестве металла был выбран аустенит в связи с его широким практическим применением.

ОПИСАНИЕ МОДЕЛИ

Для описания межатомных взаимодействий в молекулярно-динамической модели использовался ЕАМ потенциал из работы [31], где он был получен на основе сопоставления с экспериментальными данными и *ab initio* расчетами различных свойств аустенита. Данный потенциал хорошо воспроизводит широкий спектр механических и структурно-энергетических свойств, прошел успешную апробацию при моделировании различных процессов, включая процессы плавления, пластической деформации, диффузии [30 – 36].

При создании модели наночастицы желательно создать зерна в ней примерно одинакового размера. Это необходимо для исследования влияния размера зерен на механические свойства наночастицы. Процедура создания наночастицы заключалась в следующем. На первом этапе в прямоугольной расчетной ячейке идеального кристалла аустенита, в зависимости от заданного среднего размера зерен, определялись центры будущих зерен. Они располагались в узлах наподобие узлов большой решетки с ГПУ упаковкой: в этом случае все зерна имели одинаковый размер. Структура вокруг каждого центра в сферах, диаметр которых составлял 0,8 от заданного размера зерна, ближайшего расстояния между центрами, поворачивалась в пространстве на случайные углы. После этого при зафиксированной структуре внутри сфер остальная структура (области

вблизи межзеренных границ) подвергалась плавлению и затем моделированию кристаллизации при выдерживании в течение 300 пс при температуре 1500 К. Затем фиксация структуры в центрах зерен отключалась и проводились релаксация еще в течение 20 пс при температуре 100 К и последующее охлаждение до 0 К. Размер зерен варьировался от 2 до 8 нм. Зерна размером меньше 2 нм были слишком нестабильны: при деформации или нагревании происходила рекристаллизация, сопровождающаяся ростом зерен.

На следующем этапе из полученной расчетной ячейки с нанокристаллической структурой вырезалась круглая наночастица заданного диаметра. Диаметр частицы варьировался от 2 до 20 нм. Очевидно, что при вырезании частицы средний размер зерна, в связи с обрезанием некоторых зерен, становился меньше (для таких частиц делался соответствующий перерасчет среднего размера). После вырезания круглой частицы вновь проводились структурная релаксация в течение 20 пс при температуре 100 К и последующее охлаждение до 0 К. Низкая температура и небольшая продолжительность релаксации были обусловлены потребностью избежать ранней рекристаллизации на данном этапе, поскольку это бы привело к росту среднего размера зерна.

Примеры частиц с нанокристаллической структурой с размерами зерен 2,9 и 4,8 нм показаны на рис. 1. Вокруг частицы имитировалось свободное пространство. Ииспользовался NPT канонический ансамбль. Шаг интегрирования по времени в методе молекулярной динамики составлял 2 фс.

Сжатие наночастицы осуществлялось в модели путем движения виртуальных плоскостей по две стороны от частицы с постоянной скоростью (рис. 1). Взаимодействие 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 м/с, а начальная температура, как правило, задается 0 К [15; 16; 37; 38]. В работе [18] при исследовании механических свойств монокристаллических наночастиц никеля, в частности, было показано, что с ростом скорости деформирования прочность наночастиц увеличивается, а при повышении температуры – уменьшается. В настоящей работе все исследования проведены при скорости сжатия 10 м/с и начальной температуре 0 К. Напряжение при сжатии наночастиц определялось как отношение суммарной силы, действующей на виртуальные плоские границы со стороны атомов, к суммарной площади контакта.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Полученные структуры наночастиц, содержащие зерна размером всего несколько нанометров и соот-

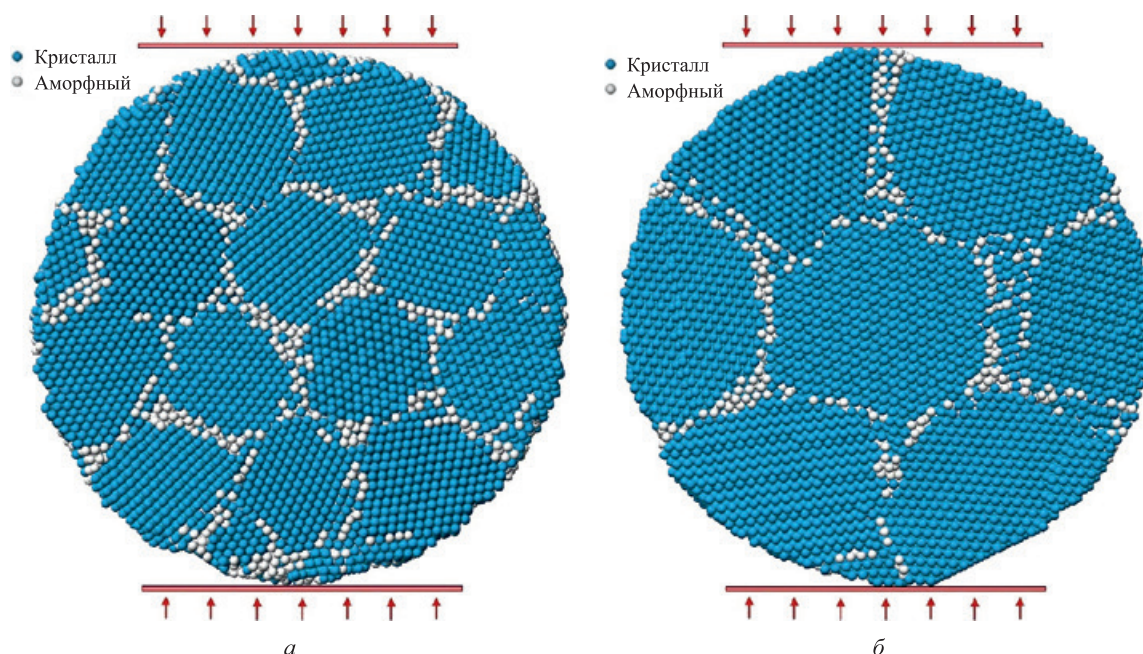


Рис. 1. Сечение нанокристаллической частицы диаметром 12 нм со средним размером зерна 2,9 нм (а) и 4,8 нм (б)

Fig. 1. Cross section of nanocrystalline particle with diameter of 12 nm and average grain size of 2.9 nm (a) and 4.8 nm (b)

ветствующую высокую плотность границ зерен и других дефектов, очевидно, являются неустойчивыми при повышении температуры. Перед проведением основных исследований в настоящей работе была проанализирована устойчивость структуры полученных частиц в зависимости от температуры. Установлено, что при низких температурах, близких к 0 К, при которых проводилось моделирование сжатия, средний размер зерна в рассматриваемом диапазоне значений остается относительно стабильным.

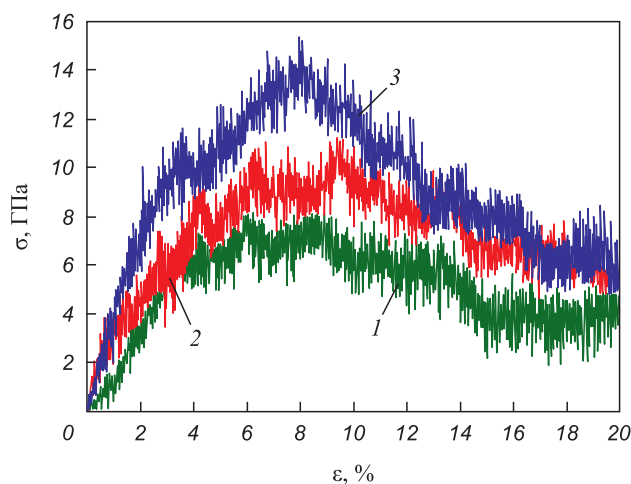


Рис. 2. Зависимости напряжение – деформация при сжатии нанокристаллической наночастицы аустенита диаметром 12 нм с размером зерна 2,5 (1), 3,8 (2) и 5,7 нм (3)

Fig. 2. Stress-strain dependencies during compression of austenite nanocrystalline nanoparticle with diameter of 12 nm and grain size of 2.5 (1), 3.8 (2) and 5.7 nm (3)

На рис. 2 приведены примеры зависимостей напряжение – деформация при сжатии нанокристаллической наночастицы аустенита диаметром 12 нм с размерами зерен 2,5, 3,8 и 5,7 нм. К особенностям всех приведенных зависимостей можно отнести наличие нескольких локальных пиков, связанных с подстройкой структуры в области пятен контакта, где происходит приложение нагрузки. Хорошо видно, что прочность частицы увеличивается по мере роста среднего размера зерна. Для приведенных на рис. 2 примеров: для частиц размером 2,5, 3,8 и 5,7 нм – примерно 7,4, 10,3 и 14,0 ГПа соответственно.

Второе, что обращает на себя внимание на рис. 2 – сравнительно вязкий, нехрупкий характер деформации частиц: максимальные значения напряжения достигаются при сравнительно очень больших значениях деформации – 6 – 10 %. Однако это не является особенностью нанокристаллической структуры в данном случае: такой вязкий характер деформации наблюдался также при сжатии кристаллических наночастиц в реальных экспериментах [10; 20].

Еще одной особенностью получаемых зависимостей напряжение – деформация являются, к сожалению, довольно большие погрешности и большие осцилляции, обусловленные сравнительно малыми размерами как самих наночастиц, так и площади пятен контакта. Эти погрешности увеличивались при уменьшении размера наночастиц.

На рис. 3 показаны зависимости максимального напряжения $\sigma_{\max}$ и соответствующего ему значения деформации $\epsilon_{\max}$ от среднего размера зерна δ для наночастицы диаметром 12 нм. Одноосное сжатие каждой

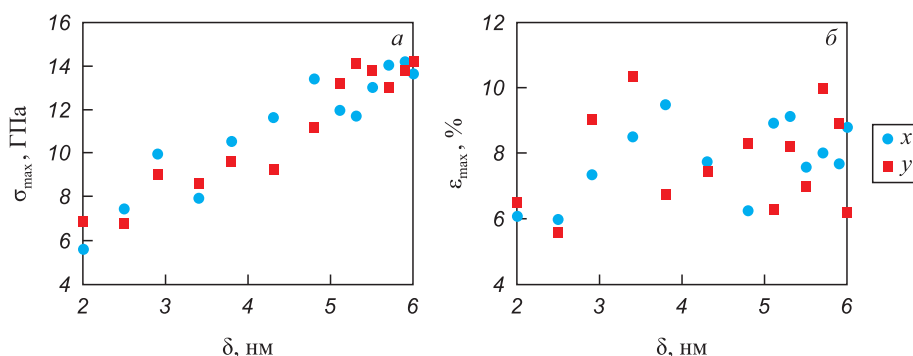


Рис. 3. Зависимости максимального напряжения $\sigma_{\max}$ (а) и соответствующего ему значения деформации $\epsilon_{\max}$ (б) от среднего размера зерна δ для наночастицы диаметром 12 нм

Fig. 3. Dependencies of the maximum stress $\sigma_{\max}$ (a) and corresponding value of deformation $\epsilon_{\max}$ (б) on average grain size δ for nanoparticle with diameter of 12 nm

частицы для более полного анализа осуществлялось дважды вдоль взаимно перпендикулярных осей x и y . На рис. 3, а, где изображена зависимость $\sigma_{\max}(\delta)$, хорошо видно, что по мере уменьшения среднего размера зерна прочность снижается: от 14 ГПа при $\delta = 6$ нм до примерно 6 ГПа при $\delta = 2$ нм. Такой характер зависимости объясняется тем, что для нанокристаллической структуры с размером зерен всего около нескольких нанометров пластическая деформация осуществляется главным образом не за счет образования и движения дислокаций внутри зерен, а за счет скольжения зерен относительно друг друга вдоль межзеренных границ. При этом уменьшение размера зерен и увеличение плотности границ между ними приводит соответственно к снижению затрат энергии на осуществление пластических сдвигов и облегчению протекания пластической деформации.

В то же время для деформации, при которой наблюдалось достижение максимального напряжения, не было замечено отчетливой зависимости от размера

зерна (рис. 3, б). Для всех рассматриваемых размеров зерен величина $\epsilon_{\max}$ находилась в пределах 6 – 10 %. Это любопытный результат, противоречащий аналогичной зависимости для объемных нанокристаллических материалов, где по мере снижения среднего размера зерна возрастают пластичность и вязкость разрушения. По всей видимости, в данном случае более сильное влияние на вязкость разрушения и величину $\epsilon_{\max}$ оказывает особенность любых наночастиц, связанная со сравнительно малой площадью пятен контакта и процессами, связанными с «протинанием» структуры вблизи них.

На рис. 4, а изображена зависимость максимального напряжения $\sigma_{\max}$ от размера наночастицы d , содержащей зерна со средним размером 3 нм (для частиц менее 6 нм зерна в действительности были уже меньше 3 нм). В настоящее время ряд исследователей полагает, что влияние размера кристаллических частиц на их прочность связано с уменьшением доступного объема для работы источника дислокаций при уменьшении раз-

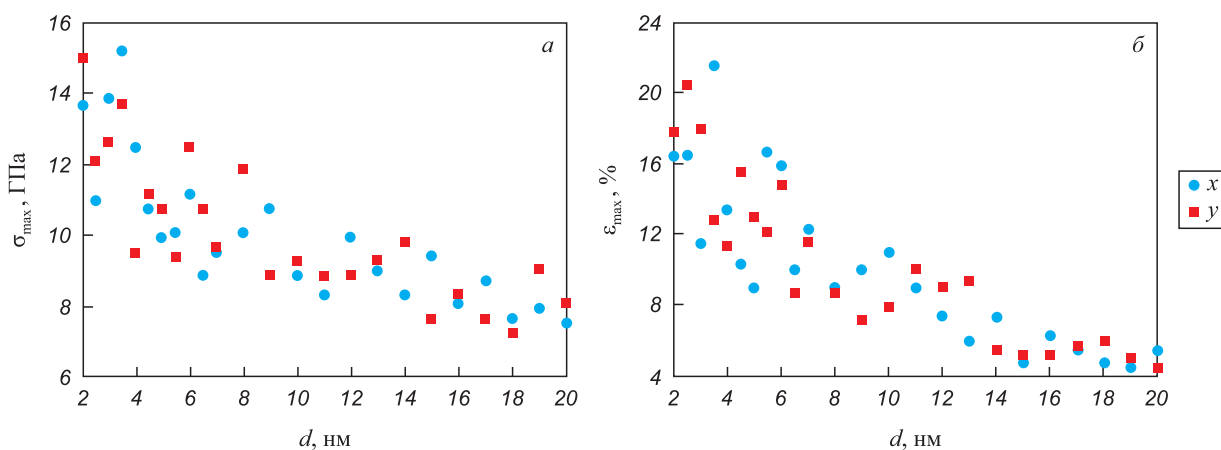


Рис. 4. Зависимости максимального напряжения $\sigma_{\max}$ (а) и соответствующего ему значения деформации $\epsilon_{\max}$ (б) от размера наночастицы со средним размером зерна 3 нм

Fig. 4. Dependencies of the maximum stress $\sigma_{\max}$ (a) and corresponding value of deformation $\epsilon_{\max}$ (б) on average grain size δ for nanoparticle with diameter of 3 nm

мера монокристаллической частицы [13 – 17]. Однако, как видно на рис. 4, *а*, для частиц с нанокристаллической структурой, в которых деформация осуществляется преимущественно не за счет дислокаций, а за счет зернограничного проскальзывания, также отчетливо наблюдается рост прочности с уменьшением размера частицы. Даже для частиц меньше 6 нм, в которых средний размер зерен фактически был уже меньше 3 нм, прочность возрастала по мере уменьшения размера частицы.

Можно заметить, что при уменьшении диаметра наночастиц разброс определяемых в модели значений прочности увеличивался. В первую очередь это обусловлено погрешностями вычисления напряжения, которые возрастали 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.

На рис. 4, *б* изображена зависимость деформации, при которой достигалась максимальная прочность, от размера наночастицы d . Как можно видеть, по мере уменьшения размера частицы $\epsilon_{\max}$ возрастает, что согласуется с результатами работ других авторов [19 – 23]. Полученные значения $\epsilon_{\max}$ варьируются от 5 % для частиц диаметром 20 нм до 20 % для частиц диаметром 2 нм. Для сравнения, в экспериментальной работе [10] для монокристаллических частиц никеля максимальное напряжение достигалось при деформации 10 – 20 %, а в работе [39], выполненной с помощью молекулярно-динамического моделирования, для наночастиц никеля

диаметром 10 нм максимальное напряжение достигалось при сжатии 5 – 15 %.

На рис. 5 изображены сечения частиц диаметром 12 нм с зернами размером 2,9 и 4,8 нм после деформации 12 и 10 % соответственно. Начальная структура тех же частиц до деформации показана на рис. 1. Как можно видеть, в результате сжатия произошел поворот всей структуры наночастиц примерно на 9° в случае зерен размером 2,9 нм и на 11° в случае зерен размером 4,8 нм. В работе [18] при исследовании деформации монокристаллических частиц никеля также отмечалось, что на первом этапе деформации происходит поворот структуры всей частицы. Как правило, этот поворот более выражен в случае сравнительно малых частиц и происходит до тех пор, пока проекция вектора напряжения на плоскость сдвига не становилась максимальной (то есть когда угол между плоскостью сдвига и направлением сжатия не достигал около 45°). После этого в случае монокристаллической частицы в работе [18] следовал этап образования дислокаций от пятен контакта. В рассматриваемом в настоящей работе случае основным механизмом пластической деформации являлось зернограничное проскальзывание, в связи с этим плоскость сдвига определялась не кристаллографической ориентацией, а ориентацией границ зерен. Вытянутые примерно вдоль одной плоскости границы зерен представляли в данном случае преимущественную плоскость скольжения.

Следует также отметить, что, как и в случае сжатия аморфных частиц в работе [18], в настоящей работе для нанокристаллических частиц также наблюдался феномен уплотнения структуры вблизи пятен контакта и ее переориентация таким образом, что наиболее плотноупакованные атомные плоскости типа (111) станови-

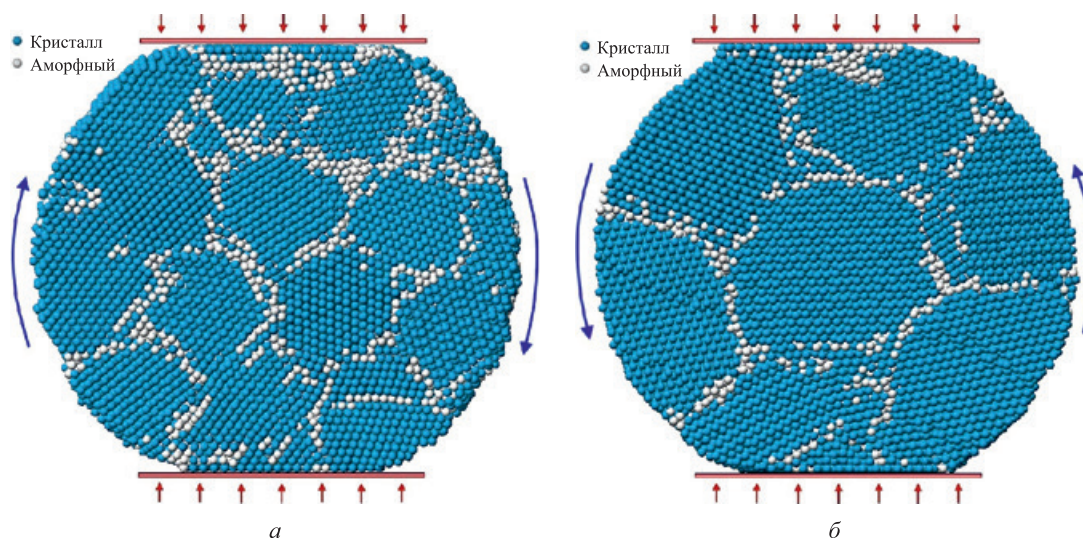


Рис. 5. Сечения нанокристаллических частиц диаметром 12 нм в момент сжатия со средним размером зерна 2,9 нм, сжатие 12 % (*а*) и 4,8 нм, сжатие 10 % (*б*)

Fig. 5. Cross sections of nanocrystalline particles with diameter of 12 nm at the moment of compression with average grain size of 2.9 nm, compression of 12 % (*a*) and 4.8 nm, compression of 10 % (*b*)

лись параллельными плоскости контакта. По мере увеличения деформации этот эффект становился все более выраженным.

Таким образом, выясняются сложность и многофакторность влияния размера и внутренней структуры наночастицы на ее механические свойства. Для кристаллических частиц, согласно данным работ [13 – 17], важным является объем, необходимый для образования и развития дислокаций, для аморфных – как было показано в работе [18], уплотнение и упрочнение, (зачастую в сочетании с частичной кристаллизацией) структуры вблизи мест приложения нагрузки. В случае частиц с нанокристаллической структурой механизм деформации еще больше усложняется вследствие работы сразу нескольких процессов: зернограничного проскальзывания, поворота зерен, рекристаллизации. Кроме этого, как выяснено в настоящей работе, на прочность оказывает влияние размер зерен: прочность снижается по мере уменьшения среднего размера зерна. Интересным и важным вопросом также является изучение факторов, влияющих на площадь пятна контакта, с учетом того, что эта площадь определяет значение вычисляемого напряжения.

Выводы

С помощью метода молекулярной динамики проведено исследование деформации сжатия наночастиц аустенита с нанокристаллической структурой при низких температурах. Изучено влияние размера частицы и размера кристаллических зерен на ее прочность и на значение деформации, при которой достигается максимальное напряжение. Выделены особенности протекания пластической деформации в случае наночастиц с нанокристаллической структурой. Прочность частиц уменьшается при уменьшении среднего размера зерна в них. Для частицы аустенита диаметром 12 нм прочность снижается более чем в два раза при уменьшении размера зерен от 6 до 2 нм – от 14 до 6 ГПа. По мере уменьшения размера нанокристаллических наночастиц, как и в случае монокристаллических, их прочность возрастает. Для частиц с нанокристаллической структурой со средним размером зерна примерно 3 нм прочность увеличилась от 8 ГПа для частиц диаметром 20 нм до 15 ГПа для частиц диаметром 2 нм, причем в последнем случае зерна были даже меньше 3 нм.

В работе также установлено, что с уменьшением размера частиц повышается значение деформации, при которой достигается максимальное напряжение при сжатии наночастиц: для рассмотренных нанокристаллических частиц – от 5 % для частиц диаметром 20 нм до 20 % для частиц диаметром 2 нм. Пластическая деформация в наночастицах с нанокристаллической структурой протекала преимущественно за счет зернограничного проскальзывания. При этом на первом этапе, как правило, происходил поворот всей структуры

частицы до достижения максимального значения проекции вектора напряжения на преимущественную плоскость сдвига, которая в случае нанокристаллической структуры определялась взаимной ориентацией границ зерен. Вытянутые примерно вдоль одной плоскости границы зерен представляли в данном случае преимущественную плоскость сдвига.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ / REFERENCES

1. Dekker Encyclopedia of Nanoscience and Nanotechnology. Schwarz J.A., Lyshevski S.E., Contescu C.I. eds. Boca Raton: CRC Press; 2014;4200.
2. Humbert C., Noblet T., Dalstein L., Busson B., Barbillon G. Sum-frequency generation spectroscopy of plasmonic nanomaterials: A review. *Materials*. 2019;12(5):836. <https://doi.org/10.3390/ma12050836>
3. Mantri Y., Jokerst J.V. Engineering plasmonic nanoparticles for enhanced photoacoustic imaging. *ACS Nano*. 2020;14(8):9408–9422. <https://doi.org/10.1021/acs.nano.0c05215>
4. Kodama K., Nagai T., Kuwaki A., Jinnouchi R., Morimoto Y. Challenges in applying highly active Pt-based nanostructured catalysts for oxygen reduction reactions to fuel cell vehicles. *Nature Nanotechnology*. 2021;16(2):140–147. <https://doi.org/10.1038/s41565-020-00824-w>
5. Mitchell S., Qin R., Zheng N., Pérez-Ramírez J. Nanoscale engineering of catalytic materials for sustainable technologies. *Nature Nanotechnology*. 2021;16(2):129–139. <https://doi.org/10.1038/s41565-020-00799-8>
6. Jain T.K., Morales M.A., Sahoo S.K., Leslie-Pelecky D.L., Labhasetwar V. Iron oxide nanoparticles for sustained delivery of anticancer agents. *Molecular Pharmaceutics*. 2005;2(3):194–205. <https://doi.org/10.1021/mp0500014>
7. Shim S.-Y., Lim D.-K., Nam J.-M. Ultrasensitive optical bio-diagnostic methods using metallic nanoparticles. *Nanomedicine*. 2008;3(2):215–232. <https://doi.org/10.2217/17435889.3.2.215>
8. Carlton C.E., Ferreira P.J. In situ TEM nanoindentation of nanoparticles. *Micron*. 2012;43(11):1134–1139. <https://doi.org/10.1016/j.micron.2012.03.002>
9. Deneen J., Mook W.M., Minor A., Gerberich W.W., Carter C.B. In situ deformation of silicon nanospheres. *Journal of Materials Science*. 2006;41:4477–4483. <https://doi.org/10.1007/s10853-006-0085-9>
10. Sharma A., Hickman J., Gazit N., Rabkin E., Mishin Y. Nickel nanoparticles set a new record of strength. *Nature Communications*. 2018;9(1):4102. <https://doi.org/10.1038/s41467-018-06575-6>
11. Guo D., Xie G., Luo J. Mechanical properties of nanoparticles: Basics and applications. *Journal of Physics D: Applied Physics*. 2014;47:013001. <https://doi.org/10.1088/0022-3727/47/1/013001>
12. Ramos M., Ortiz-Jordan L., Hurtado-Macias A., Flores S., Elizalde-Galindo J., Rocha C., Torres B., Zarei-Chaleshtori M., Chianelli R. Hardness and elastic modulus on six-fold symmetry gold nanoparticles. *Materials*. 2013;6(1):198–205. <https://doi.org/10.3390/ma6010198>
13. Mordehai D., Lee S.-W., Backes B., Srolovitz D.J., Nix W.D., Rabkin E. Size effect in compression of single-crystal gold microparticles. *Acta Materialia*. 2011;59(13):5202–5215. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2011.04.057>

14. Han W.-Z., Huang L., Ogata S., Kimizuka H., Yang Z.-C., Weinberger C., Li Q.-J., Liu B.-Y., Zhang X.-X., Li J., Ma E., Shan Z.-W. From “smaller is stronger” to “size-independent strength plateau”: Towards measuring the ideal strength of iron. *Advanced Materials*. 2015;27(22):3385–3390. <https://doi.org/10.1002/adma.201500377>
15. Hong Y., Zhang N., Zaeem M.A. Metastable phase transformation and deformation twinning induced hardening-stiffening mechanism in compression of silicon nanoparticles. *Acta Materialia*. 2018;145:8–18. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2017.11.034>
16. Amodeo J., Pizzagalli L. Modeling the mechanical properties of nanoparticles: A review. *Comptes Rendus. Physique, Plasticity and Solid State Physics*. 2021;22(S3):35–66. <https://doi.org/10.5802/crphys.70>
17. Feruz Y., Mordehai D. Towards a universal size-dependent strength of face-centered cubic nanoparticles. *Acta Materialia*. 2016;103:433–441. <http://dx.doi.org/10.1016/j.actamat.2015.10.027>
18. Poletaev G., Sannikov A., Gafner Y., Gafner S., Zorya I. Mechanical properties of crystalline and amorphous nickel nanoparticles: Molecular dynamics simulation. *Journal of Nanoparticle Research*. 2025;27:153. <https://doi.org/10.1007/s11051-025-06354-7>
19. Beaber A.R., Nowak J.D., Ugurlu O., Mook W.M., Girshick S.L., Ballarini R., Gerberich W.W. Smaller is tougher. *Philosophical Magazine*. 2011;91(7-9):1179–1189. <https://doi.org/10.1080/14786435.2010.487474>
20. Sun J., He L., Lo Y.-C., Xu T., Bi H., Sun L., Zhang Z., Mao S.X., Li J. Liquid-like pseudoelasticity of sub-10-nm crystalline silver particles. *Nature Materials*. 2014;13:1007–1012. <https://doi.org/10.1038/nmat4105>
21. Issa I., Amodeo J., Réthoré J., Joly-Pottuz L., Esnouf C., Morthomas J., Perez M., Chevalier J., Masenelli-Varlot K. In situ investigation of MgO nanocube deformation at room temperature. *Acta Materialia*. 2015;86:295–304. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2014.12.001>
22. Mook W.M., Nowak J.D., Perrey C.R., Carter C.B., Mukherjee R., Girshick S.L., McMurphy P.H., Gerberich W.W. Compressive stress effects on nanoparticle modulus and fracture. *Physical Review B*. 2007;75:214112. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.75.214112>
23. Gerberich W.W., Stauffer D.D., Beaber A.R., Tymiak N.I. A brittleness transition in silicon due to scale. *Journal of Materials Research*. 2012;27(3):552–561. <https://doi.org/10.1557/jmr.2011.348>
24. 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;23(19):11121–11154. <https://doi.org/10.1039/D1CP00701G>
25. 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;161:495–501. <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2020.01.067>
26. 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;15:5575–5580. <https://doi.org/10.1007/s12274-022-4173-1>
27. 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;12:2767. <https://doi.org/10.1038/s41467-021-22950-2>
28. Kumar K.S., Van Swygenhoven H., Suresh S. Mechanical behavior of nanocrystalline metals and alloys. *Acta Materialia*. 2003;51:5743–5774. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2003.08.032>
29. Meyers M.A., Mishra A., Benson D.J. Mechanical properties of nanocrystalline materials. *Progress in Materials Science*. 2006;51(4):427–556. <https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2005.08.003>
30. Зоря И.В., Полетаев Г.М., Бебихов Ю.В., Семенов А.С. Молекулярно-динамическое исследование влияния примеси углерода на процесс кристаллизации наночастиц аустенита при быстром охлаждении. *Известия вузов. Черная металлургия*. 2024;67(4):440–448. <https://doi.org/10.17073/0368-0797-2024-4-440-448>
- Zorya I.V., Poletaev G.M., Bebikhov Yu.V., Semenov A.S. Molecular dynamics study of the influence of carbon impurity on austenite nanoparticles crystallization during rapid cooling. *Izvestiya. Ferrous Metallurgy*. 2024;67(4):440–448. <https://doi.org/10.17073/0368-0797-2024-4-440-448>
31. Lau T.T., Först C.J., Lin X., Gale J.D., Yip S., Van Vliet K.J. Many-body potential for point defect clusters in Fe–C alloys. *Physical Review Letters*. 2007;98:215501. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.98.215501>
32. Oila A., Bull S.J. Atomistic simulation of Fe–C austenite. *Computational Materials Science*. 2009;45(2):235–239. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2008.09.013>
33. Poletaev G.M., Bebikhov Yu.V., Semenov A.S., Starostenkov M.D. Self-diffusion in melts of Ni–Al and Ti–Al systems: Molecular dynamics study. *Letters on Materials*. 2021;11(4):438–441. <https://doi.org/10.22226/2410-3535-2021-4-438-441>
34. Poletaev G.M., Gafner Y.Y., Gafner S.L. Molecular dynamics study of melting, crystallization and devitrification of nickel nanoparticles. *Letters on Materials*. 2023;13(4):298–303.
35. Poletaev G.M., Starostenkov M.D. Mutual diffusion at the interface in a two-dimensional Ni–Al system. *Technical Physics Letters*. 2003;29(6):454–455. <https://doi.org/10.1134/1.1589555>
36. Poletaev G.M., Novoselova D.V., Kaygorodova V.M. The causes of formation of the triple junctions of grain boundaries containing excess free volume in fcc metals at crystallization. *Solid State Phenomena*. 2016;247:3–8. <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/SSP.247.3>
37. Bian J., Zhang H., Niu X., Wang G. Anisotropic deformation in the compressions of single crystalline copper nanoparticles. *Crystals*. 2018;8(3):116. <https://doi.org/10.3390/cryst8030116>
38. Bian J.J., Yang L., Niu X.R., Wang G.F. Orientation-dependent deformation mechanisms of bcc niobium nanoparticles. *Philosophical Magazine*. 2018;98(20):1848–1864. <https://doi.org/10.1080/14786435.2018.1459059>
39. Goryaeva A.M., Fusco C., Bugnet M., Amodeo J. Influence of an amorphous surface layer on the mechanical properties of metallic nanoparticles under compression. *Physical Review Materials*. 2019;3:033606. <https://doi.org/10.1103/PhysRevMaterials.3.033606>

Сведения об авторах

Information about the Authors

Ирина Васильевна Зоря, д.ф.-м.н., доцент, директор архитектурно-строительного института, Сибирский государственный индустриальный университет

ORCID: 0000-0001-5748-813X

E-mail: zorya.i@mail.ru

Геннадий Михайлович Поletaев, д.ф.-м.н., профессор, ведущий научный сотрудник, Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова

ORCID: 0000-0002-5252-2455

E-mail: gmpoletaev@mail.ru

Ракитин Роман Юрьевич, к.ф.-м.н., доцент, проректор по цифровому развитию, Алтайский государственный университет

ORCID: 0000-0002-6341-2761

E-mail: movehell@gmail.com

Юрий Владимирович Бебихов, д.ф.-м.н., доцент, заведующий кафедрой электроэнергетики и автоматизации промышленного производства, Политехнический институт Северо-Восточного федерального университета им. М. К. Аммосова

ORCID: 0000-0002-8366-4819

E-mail: bebikhov.yura@mail.ru

Александр Сергеевич Семенов, д.ф.-м.н., директор, Политехнический институт Северо-Восточного федерального университета им. М. К. Аммосова

ORCID: 0000-0001-9940-3915

E-mail: as.semenov@s-vfu.ru

Irina V. Zorya, Dr. Sci. (Phys.-Math.), Assist. Prof., Director of the Institute of Architecture and Civil Engineering, Siberian State Industrial University

ORCID: 0000-0001-5748-813X

E-mail: zorya.i@mail.ru

Gennadii M. Poletaev, Dr. Sci. (Phys.-Math.), Prof., Leading Researcher, Polzunov Altai State Technical University

ORCID: 0000-0002-5252-2455

E-mail: gmpoletaev@mail.ru

Roman Yu. Rakitin, Cand. Sci. (Phys.-Math.), Assist. Prof., Vice-Rector for Digital Development, Altai State University

ORCID: 0000-0002-6341-2761

E-mail: movehell@gmail.com

Yurii V. Bebikhov, Dr. Sci. (Phys.-Math.), Assist. Prof., Head of the Chair of Electric Power Engineering and Industrial Automation, Mirny Polytechnic Institute (branch) of Ammosov North-Eastern Federal University

ORCID: 0000-0002-8366-4819

E-mail: bebikhov.yura@mail.ru

Aleksandr S. Semenov, Dr. Sci. (Phys.-Math.), Director, Mirny Polytechnic Institute (branch) of Ammosov North-Eastern Federal University

ORCID: 0000-0001-9940-3915

E-mail: as.semenov@s-vfu.ru

Вклад авторов

Contribution of the Authors

И. В. Зоря – постановка задачи, анализ литературных источников, обработка результатов, написание основного текста статьи.

Г. М. Поletaев – постановка задачи, разработка компьютерной модели, анализ литературных источников, обработка результатов, редактирование финальной версии статьи.

Р. Ю. Ракитин – проведение расчетов и получение результатов, получение рисунков и графиков для статьи.

Ю. В. Бебихов – проведение расчетов и получение результатов, получение рисунков и графиков для статьи.

А. С. Семенов – проведение расчетов и получение результатов, получение рисунков и графиков для статьи.

I. V. Zorya – problem statement, literary analysis, processing of results, writing the text.

G. M. Poletaev – problem statement, development of a computer model, analysis of literary sources, processing of results, editing the article final version.

R. Yu. Rakitin – performing calculations, obtaining results, drawing figures and graphs.

Yu. V. Bebikhov – performing calculations, obtaining results, drawing figures and graphs.

A. S. Semenov – performing calculations, obtaining results, drawing figures and graphs.

Поступила в редакцию 06.02.2026

После доработки 24.03.2026

Принята к публикации 10.04.2026

Received 06.02.2026

Revised 24.03.2026

Accepted 10.04.2026