

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВОЗМОЖНЫХ СТРУКТУРНЫХ ПЕРЕХОДОВ  
В НАНОКЛАСТЕРАХ АЛЮМИНИЯ И СВИНЦА

© 2015 г. В. С. Байдышев, Ю. Я. Гафнер, В. М. Самсонов\*, А. Г. Бембель\*

Хакасский государственный университет, Абакан

E-mail: ygafter@khsu.ru

\* Тверской государственный университет

Поступила в редакцию 11.04.2014 г.

Исследованы границы термической стабильности исходной ГЦК-фазы в кластерах алюминия и свинца диаметром до 3 нм методом молекулярной динамики с использованием модифицированного потенциала сильной связи ТВ-SMA. Показано, что под действием температурного фактора в малых кластерах Al и Pb происходит переход из начальной ГЦК-фазы в иные структурные модификации. С ростом размера наночастиц наблюдалось смещение температуры политипного перехода к температуре плавления кластера. Установлено, что для кластеров Al в отличие от кластеров Pb большую роль в формировании структуры играют геометрические “магические” числа.

DOI: 10.7868/S0023476115010038

## ВВЕДЕНИЕ

В последнее время большое внимание уделяется исследованию объектов, построенных из структурных элементов нанометрового масштаба, таких как нанокристаллы, тонкие пленки, наночастицы и нанокластеры. Необходимость обеспечения средств связи, электронной и компьютерной техники все большими качественными и количественными функциональными возможностями при сохранении или даже уменьшении размеров операционных устройств заставляет исследователей искать пути минимизации базовых структурных элементов, применяемых при их производстве. На современном этапе возможна разработка технологических блоков размером всего несколько десятков нанометров. Это, в свою очередь, стимулирует дальнейшее развитие физики наночастиц (нанокластеров), т.е. атомно-молекулярных соединений, содержащих от не-

скольких десятков атомов (молекул) до нескольких тысяч.

Хорошо известно, что металлические наночастицы могут проявлять необычные оптические, тепловые, химические и физические свойства. Основными критическими параметрами, влияющими на все эти физико-химические особенности поведения наночастицы, кроме размера, являются ее форма и структура, что требует от нанотехнологий целенаправленного контроля данных величин [1, 2].

При этом наночастицы могут иметь структуру, запрещаемую законами классической кристаллографической теории, такую как икосаэдр (*ih*) (рис. 1) и декаэдр (*dh*) [3]. Нанокластеры некоторых химических элементов, имеющих в объемном состоянии ГЦК (*fcc*) строение, часто наблюдаются экспериментально со структурой, имеющей подобную пятичастичную симметрию (ряд металлов и инертные газы). Однако после достижения определенного критического размера такие кластеры переходят к стандартному ГЦК-строению. При этом экспериментально, а также методами компьютерного моделирования обнаружено, что кроме классического перехода *ih* → *fcc* под действием размерного эффекта в малых кластерах возможны обратные переходы *fcc* → *ih*, происходящие под действием температурного фактора. Данные результаты доказывают наличие некоего энергетического барьера между структурными состояниями кластера, зависящего от размера частицы.

При решении задачи нахождения наиболее устойчивых атомных конфигураций, прежде всего, возникает вопрос о стабильности структуры

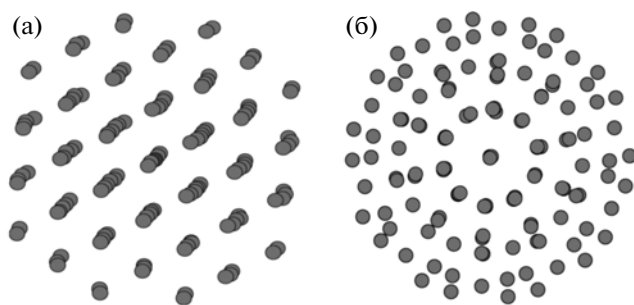


Рис. 1. Структура кластера  $Al_{135}$ , а – гранецентрированная кубическая (*fcc*),  $T = 50$  К, б – икосаэдрическая (*ih*),  $T = 52$  К.

кластеров различного размера. Некоторые указания на наличие выделенных стабильных структур можно получить из наблюдений экспериментальных спектров атомных кластеров, которые показывают при определенных значениях размера кластера (числа содержащихся в нем атомов  $N$ ) особенно четко выделенную интенсивность. Подобное поведение доказывает, что некоторые размеры кластера являются предпочтительными, эти величины получили название “магических” чисел [4, 5].

Для объяснения последовательности “магических” чисел используют различные подходы, например в [6] в спектре масс частиц натрия последовательность магических чисел объяснялась формированием замкнутых делокализованных электронных оболочек. В [7] структурные состояния кластеров исследовались в рамках кинетического подхода, в [8–10] показано, что структура кластеров определяется тенденцией к достижению плотнейшей упаковки атомов. При этом для ГЦК-кластеров выделенным является размер  $N = 19, 79, 135, 201, 675, \dots$ , а для кластеров икосаэдрического типа  $N = 13, 55, 147, 309, 561, 923, \dots$ . Результаты [8–10] были получены для систем, в которых взаимодействие между атомами имело центральный парный характер. В реальных металлах непарные вклады в энергию взаимодействия играют существенную роль, в результате чего последовательность магических чисел в них может несколько отличаться от предсказанной теоретически.

В соответствии с отмеченной выше основной целью представляемой работы сделана попытка ответить на вопрос о размерных границах устойчивости той или иной кристаллографической модификации в нанокластерах Al и Pb, а также определить роль геометрических “магических” чисел при возможных структурных переходах.

## КОМПЬЮТЕРНАЯ МОДЕЛЬ

В качестве имитационного был выбран метод классической молекулярной динамики (МД), хотя в большинстве аналогичных моделирований для подобных задач применялся метод *ab-initio*. Однако при таком подходе основное внимание исследователей было сосредоточено на определении структуры только в области очень низких температур, близких к 0 К, и ее зависимости от размера кластера. Вероятно, данный подход не может являться справедливым, так как нанокластеры, используемые в различных областях нанотехнологий, должны эксплуатироваться при значительно более высоких температурах и тепловой фактор может приводить к изменению равновесной структуры. Кроме этого, метод *ab-initio* имеет существенные ограничения по размеру модели-

руемых частиц, что и явилось критическим моментом в выборе методики моделирования.

Следовательно, именно метод МД является наиболее адекватным для выявления стабильных в широком интервале температур структур металлических кластеров с определенным диаметром. Однако уровень достоверности полученных результатов напрямую обусловлен выбором используемого потенциала межатомного взаимодействия. В связи с этим после анализа различных видов представления потенциальной энергии имитация процессов нагрева нанокластеров Al и Pb проводилась с использованием хорошо зарекомендовавших себя модифицированных потенциалов сильной связи (TB-SMA) [11] с фиксированным радиусом обрезания, соответствующим пятой координационной сфере. Потенциалы из группы сильной связи широко используются при компьютерном моделировании как макроскопических тел, так и нанообъектов, кроме того, потенциалы, предложенные Клери и Розато, прошли подробную успешную проверку по многим термодинамическим показателям [11] и на сегодняшний день являются одними из основных потенциалов для расчета свойств металлических наночастиц.

В качестве начальных объектов использовались свободные сферические ГЦК-кластеры, полученные при вырезании сферы из идеальной ГЦК-решетки. Нагрев кластеров проводился в рамках канонического ансамбля с использованием термостата Ноэ [12]. Температура в процессе моделирования определялась посредством средней кинетической энергии атомов, которая рассчитывалась на основе скоростного алгоритма Верлета с шагом по времени  $h = 1$  фс.

Для определения наиболее устойчивой кластерной структуры рассматривался ансамбль кластеров одинакового размера. Начало процесса нагревания сопровождалось релаксацией исходной фазы при начальной температуре, далее нагревание проводилось до значений, превышающих температуру плавления наночастицы. В ходе нагрева температура ступенчато изменялась с шагом в 10 К, а в области структурных переходов с шагом 4 К и при каждом ее значении кластеры выдерживались порядка 1 нс. Как показано в [13], выбранная скорость изменения температуры позволяет достаточно адекватно реализовать квазиравновесное состояние кластеров вплоть до  $D = 3.0$  нм.

В [14] на примере нанокластеров Ni показано, что структурный переход ГЦК–икосаэдр должен наблюдаться в некоторой окрестности температуры плавления нанокластеров  $T_m$ , отвечающей структурному переходу иного типа, при котором в нанокластере полностью исчезают признаки дальнейшей позиционной упорядоченности. С учетом этого на первом этапе исследований изуча-

лись размерные зависимости температуры плавления мезоскопических нанокластеров (МН) Al и Pb. Учитывая, что для МН характерен гистерезис плавления кристаллизации [15], исследовалась размерная зависимость температур кристаллизации  $T_c < T_m$ . Очевидно, структурный переход ГЦК–икосаэдр должен наблюдаться при некоторой характерной температуре, меньшей  $T_c$ . В свою очередь,  $T_m$ ,  $T_c$  определялись по соответствующим скачкам потенциальной части внутренней энергии нанокластеров. Применительно к нахождению  $T_m$  такой подход апробирован в [15, 16]. Структурные переходы определялись при помощи визуализаторов, а также на основе графиков функции радиального распределения и зависимости потенциальной части внутренней энергии от температуры.

Для проведения моделирования использовалась программа MDNTP, разработанная Dr. Ralf Meyer, Universität Duisburg Germany. Для повышения достоверности результатов структурные переходы в нанокластерах Pb изучались также с использованием другой, разработанной нами, компьютерной программы, которая предусматривает использование потенциала сильной связи, но иного термостата – термостата Берендсена [17].

## РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Учитывая отмеченное выше, изучению структурного перехода  $fcc \rightarrow ih$  предшествовало исследование размерных зависимостей  $T_m$  и  $T_c$  нанокластеров, т.е. их зависимостей от размера нанокластеров, который можно характеризовать их радиусом  $R$  или числом содержащихся в них атомов  $N$ . Для примера на рис. 2 представлены размерные зависимости  $T_m(R^{-1})$  и  $T_c(R^{-1})$  для нано-

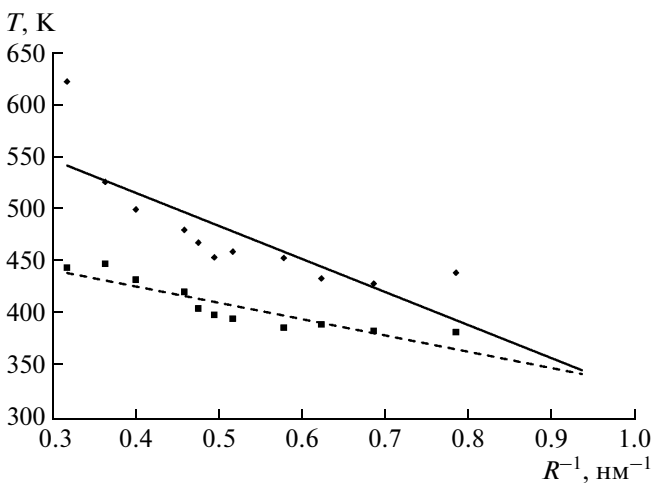


Рис. 2. Зависимости  $T_m$  (сплошная линия) и  $T_c$  (штриховая линия) наночастиц Pb от их обратного радиуса  $R^{-1}$ .

кластеров Pb. Выбор обратного радиуса  $R^{-1}$  в качестве независимой переменной обусловливается тем, что формула Томсона [16]:

$$\lambda_m \frac{T_0 - T_m}{T_0} = 2 \frac{\sigma_{sl}}{R} v_s, \quad (1)$$

предсказывает линейную зависимость  $T_m$  от обратного радиуса  $R^{-1}$ . Здесь  $T_0$  – макроскопическая температура плавления,  $\lambda_m$  – удельная теплота плавления соответствующей объемной фазы,  $v_s$  – удельный объем твердой фазы,  $\sigma_{sl}$  – межфазное натяжение на границе раздела кристалл–расплав.

Как видно из рис. 2, линейные зависимости  $T_m$  и  $T_c$  от  $R^{-1}$  выполняются в некотором грубом приближении, причем для нанокластеров Pb разброс результатов компьютерного эксперимента относительно прямолинейной зависимости  $T_m(R^{-1})$  является более заметным, чем для нанокластеров Ni и Cu [15]. Очевидно, это обусловливается более низкой макроскопической температурой плавления свинца  $T_0 = 600$  К [18].

Как видно из рис. 2, прямые  $T_m(R^{-1})$  и  $T_c(R^{-1})$  пересекаются при  $R_i \approx 1.05$  нм (использовалось обозначение данного характерного радиуса, введенное в [19]). Для нанокластеров Pb значению  $R_i \approx 1.05$  нм соответствует характерное значение числа атомов  $N_i \approx 211$ . Согласно [19], термодинамическое рассмотрение плавления и кристаллизации малых частиц приводит к выводу, что параметр  $R_i$  должен изменяться в пределах от 0.8 до 1.0 нм. Таким образом, полученное значение  $R_i$  хорошо согласуется как с термодинамической оценкой [19], так и экспериментальными данными [20], в соответствии с которыми  $R_i \approx 2$  нм (более или менее точное определение данного параметра по рисунку, представленному в [20], затруднительно ввиду еще большего разброса экспериментальных точек, чем это имеет место для результатов проводимых компьютерных экспериментов).

Назовем нанокластеры, для которых  $N > N_i$ , но еще наблюдаются размерные эффекты основных физических характеристик, в том числе термодинамических, мезоскопическими, т.е. промежуточными по размеру. Если линейно экстраполировать зависимость  $T_m(R^{-1})$  на макроскопическое значение температуры плавления свинца  $T_0 = 600$  К, то приходим к выводу, что МН свинца отвечает интервал размеров  $1 < R < 10$  нм. При  $N < N_i$  гистерезиса плавления и кристаллизации уже не наблюдается, а надежное определение  $T_m$  по результатам компьютерных экспериментов становится затруднительным ввиду того, что соответствующие скачки на калориметрической кривой становятся менее выраженными, а раз-

Сравнение результатов компьютерного моделирования для нанокластеров Pb радиусом  $R = 1.93$  нм ( $N = 1500$ ) с экспериментом и расчетом по формуле (1)

$T_m$ , К			
Настоящая работа	Эксперимент [20]	Расчет по формуле (1)	Макроскопическое значение [18]
480	470	589	600

брос значений  $T_m$  более существенным. Однако это не исключает обнаружения температуры перехода  $fcc \rightarrow ih$  и в этой области размеров.

В таблице значение  $T_m$ , полученное для нанокластеров Pb радиуса  $R = 1.93$  нм, сравнивается с соответствующим экспериментальным значением и результатом расчета по формуле Томсона (1). Необходимые для расчетов по формуле (1) значения  $\lambda_m$  и  $v_s$  взяты из [18], а значение  $\sigma_{sl}$  — из [21]. Как видно из таблицы, значение  $T_m = 480$  К, полученное на основе результатов компьютерных экспериментов, хорошо согласуется с экспериментом и заключено в пределах, ограниченных экспериментальным значением и расчетным, полученным с использованием формулы (1).

Далее исследовалась группа кластеров, размеры которых равны “магическим” числам икосаэдрической структуры ( $N = 13, 55, 147, 309, 561, 923$ ), включая нанокластеры, отвечающие  $N < N_i$ . В кластерах  $Al_{13}$  и  $Pb_{13}$  с числом атомов, соответствующим идеальной  $ih$ -структуре, уже на этапе первичной термической релаксации происходил структурный переход  $fcc \rightarrow ih$ . Этот результат согласуется с результатами других авторов. Например, в [22] в рамках *ab-initio* МД показано, что в  $Pb_{13}$  структура  $ih$  является энергетически более стабильной, чем  $fcc$ -построение атомов на величину  $\Delta E = 2.08$  эВ/кластер. Для кластеров  $Al_{13}$  энергия  $ih$  также оказалась меньше энергии  $fcc$  на величину  $\Delta E = 1$  эВ/кластер [23]. Используемый потенциал [11] дает значения разности энергий этих структур для кластеров Pb  $\Delta E = 1.70$  эВ/кластер и Al  $\Delta E = 1.46$  эВ/кластер, т.е. наблюдается количественное согласие с *ab-initio* расчетами [23, 24]. Таким образом, на основании данных [23, 24] и проведенного моделирования можно однозначно утверждать, что структурный переход  $fcc \rightarrow ih$  в кластерах  $Al_{13}$  и  $Pb_{13}$  является безбарьерным и поэтому может наблюдаться при любой температуре.

Следующим  $ih$ -кластером с полностью завершенной внешней оболочкой является кластер с числом атомов  $N = 55$ . Расчеты энергий различных структур, проведенные в [22], неожиданно показали, что для кластера  $Pb_{55}$   $fcc$ -структура является более стабильной, чем  $ih$ -структура, но ве-

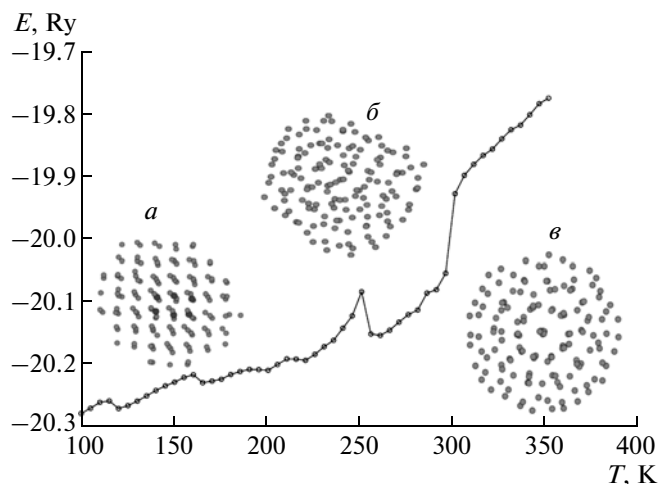


Рис. 3. Калориметрическая кривая нагрева кластера  $Pb_{147}$ , а –  $fcc$ -структура при  $T = 170$  К, б – аморфная структура при  $T = 250$  К, в –  $ih$ -структура при  $T = 254$  К.

личина энергетического барьера составила всего  $\Delta E = 0.1$  эВ/кластер, что в расчете на атом дает значение барьера значительно меньше величины тепловой энергии при расчетной температуре. Таким образом, результаты [22] представляются достаточно спорными, и полагаем, что при  $N = 55$  в свинце все же могут происходить структурные переходы под действием теплового фактора. Данное предположение подтверждается результатами проведенного МД-моделирования. Так, для кластеров  $Pb_{55}$  наблюдался структурный переход  $fcc \rightarrow ih$  при температуре  $T = 10$  К, а для кластеров  $Al_{55}$  и при еще более низких.

К сожалению, не известны работы, в которых были бы рассчитаны энергии основного состояния для  $Al_{55}$ . В приведенной модели энергия  $ih$ -структуры для  $Al_{55}$  и  $Pb_{55}$  всегда меньше энергии  $fcc$ -структуры, однако для кластеров Pb энергии данных видов построения атомов оказываются очень близки ( $\Delta E = 0.08$  эВ/кластер). При дальнейшем нагреве кластеров  $ih$ -структура сохранялась вплоть до  $T_m$ , причем для кластеров  $Al_{55}$   $T_m = 470$  К, для кластера  $Pb_{55}$   $T_m = 230$  К, начиная с которой потенциальная энергия сильно флуктуирует и кластеры постепенно переходят в жидкое состояние через аморфноподобную фазу, содержащую  $ih$ -фрагменты.

Поведение кластеров следующего “магического” размера  $Al_{147}$  и  $Pb_{147}$  существенно различается. Так, структурный переход  $fcc \rightarrow ih$  в кластерах  $Al_{147}$  наблюдался в самом начале моделирования в процессе термической релаксации первичного кластера, тогда как в кластерах  $Pb_{147}$  он происходил только при температуре не ниже  $T = 255$  К, что составляет примерно 0.8 от  $T_m$  кластеров данного размера. Типичная калориметрическая кривая нагрева для кластера  $Pb_{147}$  приведена на рис. 3,

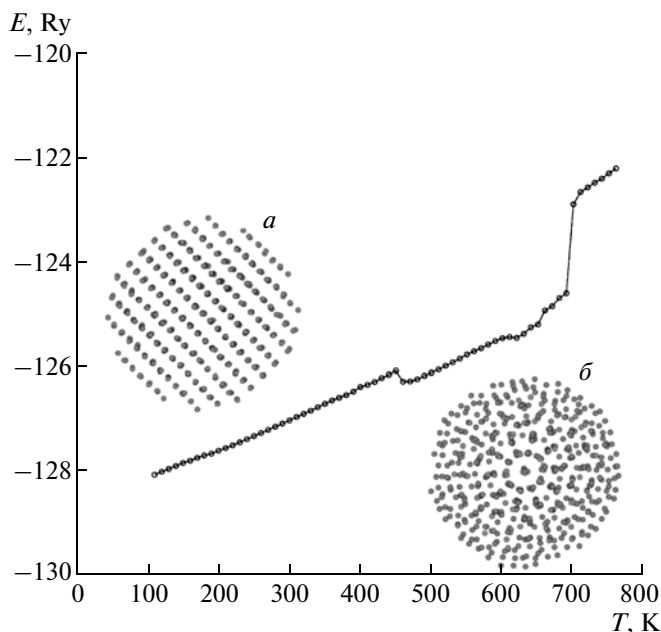


Рис. 4. Калориметрическая кривая нагрева кластера  $\text{Al}_{561}$ , а –  $fcc$ -структура при  $T = 300$  К, б –  $ih$ -структура при  $T = 460$  К.

из которого хорошо видно, что по мере нагревания в кластере происходит оптимизация структуры, но начальная  $fcc$ -фаза сохраняется до температуры 235 К, начиная с которой в интервале 235–250 К кластер перестраивается в  $ih$ -структуру через ряд промежуточных аморфноподобных фаз. Таким образом, для кластера  $\text{Pb}_{147}$  переход  $fcc \rightarrow ih$  протекает следующим образом:  $fcc \rightarrow$  аморфная структура  $\rightarrow ih$ .

При увеличении числа атомов барьер, который необходимо преодолеть для перехода от  $fcc$ -структуры к  $ih$ , растет. Так, для  $\text{Pb}$  он составляет 0.3 и 1.5 эВ/кластер для  $\text{Pb}_{147}$  и  $\text{Pb}_{309}$  соответственно [22]. В кластерах  $\text{Pb}$  магических размеров  $\text{Pb}_{309}$ ,  $\text{Pb}_{561}$ ,  $\text{Pb}_{923}$  превращения  $fcc \rightarrow ih$  не наблюдалось, начальная  $fcc$ -структура оставалась стабильной до  $T_m$ . Очевидно, температурных флуктуаций при размерах  $N \gg N_i$  уже не хватает для преодоления существующего энергетического барьера. Для кластеров  $\text{Al}_{309}$  структурный переход наблюдался при  $T = 310$  К ( $0.48 T_m$ ), для  $\text{Al}_{561}$  при  $T = 460$  К ( $0.7 T_m$ ) (рис. 4), для  $\text{Al}_{923}$  структурного перехода уже не наблюдалось. Таким образом, для нанокластеров  $\text{Al}$  энергетический барьер для структурного перехода  $fcc \rightarrow ih$  оказывается значительно меньшим, чем для нанокластеров  $\text{Pb}$  аналогичного размера.

В случае кластеров с числом атомов, близким к кластерам с полностью заполненной внешней оболочкой, ситуация оказалась не столь однозначной. Так, кластеры  $\text{Al}_{141}$  демонстрировали

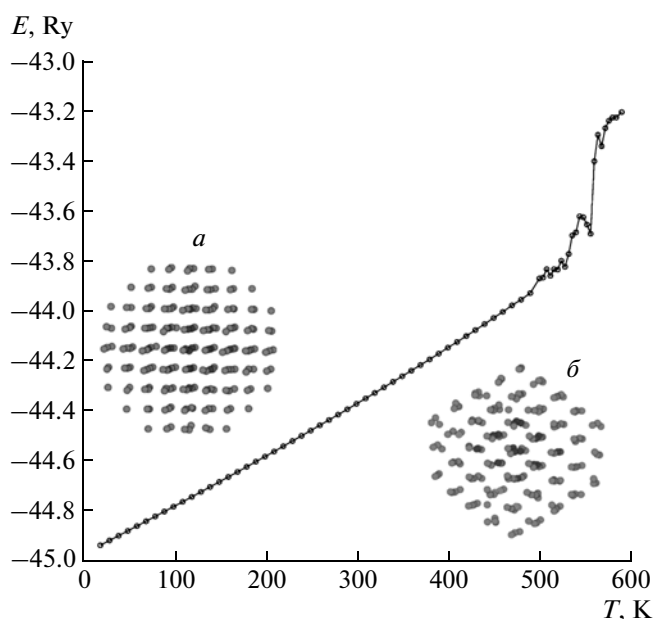


Рис. 5. Калориметрическая кривая нагрева кластера  $\text{Al}_{201}$ :  $fcc$ -структура при  $T = 150$  К (а) и при  $T = 300$  К (б).

различные сценарии поведения. В 60% случаев при  $T = 134$  К происходило формирование  $ih$ -структуры кластера, довольно устойчиво сохраняющейся до  $T_m$ . В 40% случаев энергия кластера увеличивалась, но первоначальная  $fcc$ -структура, несмотря на некоторое нарушение порядка укладки атомных слоев с образованием  $ih$ -фрагментов, сохранялась вплоть до  $T = 370$  К, и только дальнейшее нагревание приводило к формированию  $ih$ -структуры. Для кластера  $\text{Al}_{177}$  при  $T = 460$  К стабильной становится  $ih$ -структура, также сохраняющая свою устойчивость вплоть до  $T_m$ . Для кластеров  $\text{Al}_{321}$  (близким к магическому  $N = 309$ ) структурный переход наблюдался при  $T = 580$  К, близкой к  $T_m = 630$  К. Отметим, что для кластера  $\text{Al}$ , начиная с размера  $N \approx 600$  атомов, структурных переходов не происходило вообще, начальная  $fcc$ -структура оказывалась стабильной вплоть до  $T_m$ .

Для кластеров  $\text{Pb}_{141}$  поведение оказалось схожим с поведением  $\text{Al}_{141}$ , в 40% случаев переход осуществлялся при  $T = 170$  К, в 60% при  $T = 270$  К, близкой к  $T_m = 290$  К. В кластерах  $\text{Pb}_{177}$  наличие  $ih$ -структуры отмечалось только в области плавления при  $T = 285$  К ( $T_m = 300$  К). Дальнейшее увеличение размера кластера показало, что в свободных нанокластерах  $\text{Pb}$  с числом атомов больше  $N = 177$  структурный переход  $fcc \rightarrow ih$  отсутствует даже вблизи “магических” чисел  $ih$ -структуры.

Отдельную группу составляют кластеры, размеры которых равны “магическим” числам *fcc*-структуры ( $N = 19, 79, 135, 201$ ). Здесь можно отметить практически полное отсутствие структурных переходов типа *fcc* → *ih*. Так, для кластеров  $\text{Al}_{79}$ ,  $\text{Al}_{201}$ ,  $\text{Pb}_{79}$ ,  $\text{Pb}_{201}$  начальная *fcc*-структура являлась стабильной вплоть до разрушения кластеров в результате плавления (рис. 5). Однако для кластера  $\text{Al}_{135}$  наблюдался структурный переход *fcc* → *ih* при  $T = 52$  К (рис. 1). При дальнейшем нагреве *ih*-структура сохранялась вплоть до  $T_m$ . В кластерах  $\text{Pb}_{135}$  данный переход осуществлялся при  $T = 210$  К. Следовательно, для нанокластеров Al и Pb размером  $N = 135$  атомов формирующаяся структура определяется не только магическим числом *fcc*-структуры, но и какими-то другими факторами, которые еще предстоит изучить.

В [24] для кластеров  $\text{Al}_{19}$  проведенный расчет структуры с наименьшей энергией методом FM–LMTO–MD показал, что наиболее энергетически выгодной структурой данного кластера является структура двойного икосаэдра (*double icosahedron*). Аналогичный структурный переход *fcc* → *double ih* наблюдался в кластерах  $\text{Al}_{19}$  при  $T = 260$  К. Подобное превращение происходило в кластерах  $\text{Pb}_{19}$  при  $T = 168$  К, однако конечная структура не являлась двойным икосаэдром, а имела более сложное строение, что подтверждается результатами [25], согласно которым *double ih* также не является энергетически выгодной структурой для  $\text{Pb}_{19}$ .

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На основе проведенного компьютерного MD-анализа процессов термического воздействия можно утверждать, что в малых кластерах Al размером до 600 атомов и Pb размером до 200 атомов наиболее стабильной конфигурацией является структура с пентагональной симметрией. С дальнейшим ростом числа атомов ГЦК-построение оказывается более стабильным в полном соответствии с законами кристаллографии.

Кроме этого установлено, что для кластеров Al энергетический барьер структурного перехода *fcc* → *ih* оказывается значительно меньшим, чем для нанокластеров Pb. Также показано, что в случае нанокластеров Al весьма существенной оказывается роль геометрических “магических” чисел, чего не наблюдалось столь очевидно при моделировании кластеров Ni и Cu [14, 15, 26, 27].

Отметим, что исследование свойств металлических частиц с характерными нанометровыми размерами актуально и с фундаментальной, и с прикладной точек зрения, что обусловлено широкими перспективами их практического применения. Среди используемых сейчас или в ближайшем будущем наночастиц следует особо выделить

малые частицы, представляющие собой нанообъекты с различными типами пространственных структур. Знание деталей формирования кластерной структуры является определяющим для практического применения нанокластеров при создании новых материалов, так как различная кластерная структура приводит к наличию различных физико-химических свойств.

В настоящее время основной проблемой при внедрении нанотехнологий в промышленность является не столько само получение новых материалов, сколько определение роли воздействия термических эффектов и силовых полей (радиационных, деформационных и др.) в процессе эксплуатации наноматериалов, что неизбежно ведет к рекристаллизационным, релаксационным, сегрегационным и гомогенизационным процессам, а также к явлениям распада, фазовым превращениям, спеканиям и заплываниям нанопор (нанокapилляров), аморфизации и кристаллизации. Все это сказывается на физико-химических, физико-механических и других свойствах, влияя тем самым на эксплуатационные ресурсы наноматериалов. Проведенный анализ с учетом выявленных экспериментальных фактов позволяет обобщить сделанные ранее выводы и подробно описать процесс формирования структурных модификаций в малых нанокластерах Al и Pb при тепловом воздействии.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 13-02-98006-р\_сибирь\_a) и Российского научного Фонда (проект № 14-13-01425) (исследование размерных зависимостей температур плавления и кристаллизации).

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Panigrahi S., Kundu S., Ghosh S.K. et al. // J. Nanopart. Res. 2004. V. 6. P. 411.
2. Magnusson M.H., Deppertl K., Malm J.O. et al. // J. Nanopart. Res. 1999. V. 1. P. 243.
3. Kelsall R., Hamley I., Geoghegan M. Nanoscale science and technology. Chichester: Wiley & Sons. 2005. 456 p.
4. Demtröder W. Molekülphysik. Theoretische Grundlagen und experimentelle Methoden. München: Oldenbourg, 2003. 460 p.
5. Miehle W., Kandler O., Leisner T., Echt O. // J. Chem. Phys. 1989. V. 91. P. 5940.
6. Sugano S., Koizumi H. Microcluster. Physics. Berlin: Springer-Verlag, 1998. 422 p.
7. Wales D.J., Doye J.P.K. // Condens. Mater. 1998. V. 3. P. 344.
8. Soler J.M., Beltran M.R., Michaelian K. // Phys. Rev. B. 2000. V. 61. P. 5771.
9. Schebarchov D., Hendy S.C. // J. Chem. Phys. 2005. V. 123. P. 104701.
10. Smirnov M.B. // UFN. 1993. V. 163. № 10. P. 29.
11. Cleri F., Rosato V. // Phys. Rev. B. 1993. V. 48. P. 22.

12. *Nose S.* // J. Phys. Chem. 1984. V. 81. P. 511.
13. *Gornostyrev Yu.N., Kar'kin I.N., Katsnel'son M. I., Treflov A.V.* // Phys. Metals Metallogr. 2003. V. 96. № 2. P. 19.
14. *Гафнер С.Л., Редель Л.В., Головенько Ж.В. и др.* // Письма в ЖЭТФ. 2009. Т. 89. С. 425.
15. *Самсонов В.М., Харечкин С.С., Гафнер С.Л. и др.* // Кристаллография. 2009. Т. 54. № 3. С. 530.
16. *Самсонов В.М., Бембель А.Г.* // Ядерная физика и инжиниринг. 2013. Т. 4. С. 578.
17. *Allen M.P., Tildesley D.J.* Computer Simulation of Liquids. Oxford: Clarendon, 1990. 385 p.
18. *Скрипов В.П., Коверда В.П.* // Спонтанная кристаллизация переохлажденных жидкостей. М.: Наука, 1984. С. 98.
19. *Kofman R., Cheyssac P., Lereach Y., Stella A.* // Eur. Phys. J. D. 1999. V. 9. P. 441.
20. Физические величины. Справочник / Под ред. Григорьева И.С., Мейлихова Е.З. М.: Энергоатомиздат, 1991. 1232 с.
21. *Шебзухов М.А., Шебзухов В.А., Шебзухов А.А.* // ФТТ. 2012. Т. 54. С. 173.
22. *Wei C.M., Cheng C., Chang C.M.* // Phys. Chem. B. 2006. V. 110. P. 24642.
23. *Rao V.K., Khanna S.N., Jena P.* // Phys. Rev. B. 2000. V. 62. № 7. P. 4666.
24. *Yao Chang-hong, Song Bin, Cao Pei-lin* // Phys. Rev. B. 2004. V. 70. P. 195431.
25. *Li Xiao-Ping, Lu Wen-Cai, Zang Qing-Jun et al.* // J. Phys. Chem. A. 2009. V. 113. P. 6217.
26. *Gafner S.L., Redel L.V., Gafner Yu.Ya.* // Phys. Metals Metallogr. 2007. V. 104. № 3. P. 180.
27. *Gafner S.L., Redel L.V., Gafner Yu.Ya.* // J. Exp. Theor. Phys. 2009. V. 108. № 5. P. 784.