



Тверской  
государственный  
университет

Физико-технический  
факультет



## **ЛУЧШИЙ НАУЧНЫЙ КОЛЛЕКТИВ**

*Конкурс на соискание премии  
Губернатора Тверской области  
для ученых за выдающиеся  
достижения в области науки и  
техники*



- **Самсонов Владимир Михайлович**, д.ф.-м.н., профессор, руководитель научного коллектива, ведущий специалист в области физико-химических основ нанотехнологий

РИНЦ: число публикаций – 299, число цитирований – 2467, индекс Хирша – 23.

Web of Science: число публикаций – 95, число цитирований – 532, индекс Хирша – 13.

Scopus: число публикаций – 118, число цитирований – 590, индекс Хирша – 13.

- **Сдобняков Николай Юрьевич**, к.ф.-м.н., доцент, ведущий специалист в области теории и компьютерного моделирования наносистем

РИНЦ: число публикаций – 235, число цитирований – 1276, индекс Хирша – 20.

Web of Science: число публикаций – 39, число цитирований – 209, индекс Хирша – 9.

Scopus: число публикаций – 43, число цитирований – 224, индекс Хирша – 9.

- **Васильев Сергей Александрович**, старший преподаватель, специалист в области изучения структурных превращений в металлических наночастицах

РИНЦ: число публикаций – 61, число цитирований – 170, индекс Хирша – 7.

Web of Science: число публикаций – 20, число цитирований – 5, индекс Хирша – 1.

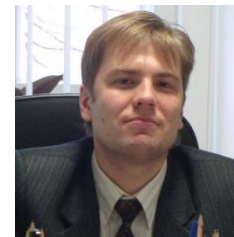
Scopus: число публикаций – 39, число цитирований – 436, индекс Хирша – 10.

- **Колосов Андрей Юрьевич**, научный сотрудник, специалист в области изучения процессов самоорганизации в металлических наночастицах.

РИНЦ: число публикаций – 63, число цитирований – 125, индекс Хирша – 6.

Web of Science: число публикаций – 8, число цитирований – 4, индекс Хирша – 1.

Scopus: число публикаций – 6, число цитирований – 8, индекс Хирша – 2.





## Surface segregation in binary Cu–Ni and Au–Co nanoalloys and the core–shell structure stability/instability: thermodynamic and atomistic simulations

V. M. Samsonov<sup>1</sup> · I. V. Talyzin<sup>1</sup> · A. Yu. Kartoshkin<sup>1</sup> · S. A. Vasilyev<sup>1</sup>

Received: 3 August 2018 / Accepted: 9 October 2018  
© Springer-Verlag GmbH Germany, part of Springer Nature 2018

### Abstract

An approach combining thermodynamic and atomistic (molecular dynamics) simulations has been applied to predict surface segregation in binary metal A–B nanoparticles (Cu–Ni and Au–Co ones). The thermodynamic simulation method based on the Butler equation was additionally justified and extended to stationary non-equilibrium states using the energetic variant of non-equilibrium thermodynamics. The results of thermodynamic and atomistic simulations agree with each other predicting segregation of Cu atoms to the surface of Cu–Ni nanoparticles and the surface segregation of Au in binary Au–Co nanoparticles. A hypothesis is put forward on correlation between stability/instability of A (core)/B (shell) nanostructures and the spontaneous surface segregation of one of the components of binary A–B nanoparticles. In accordance with this hypothesis, the core–shell structure A (core)/B (shell) will be stable if the component B spontaneously segregates to the surface of binary A–B nanoparticles. At the same time, a trend to the surface segregation of this component should result in the instability of the B (core)/A (shell) structures. The hypothesis in question agrees with our molecular dynamics results and with available experimental data on stability/instability of Co (core)/Au (shell) and Au (core)/Co (shell) nanostructures.

**Keywords** Surface segregation · Cu–Ni nanoalloys · Au–Co nanoalloys · Core–shell structure · Thermodynamic simulation · Molecular dynamics simulation

### Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов

УДК 539.219.2 : 519.7

Оригинальная статья

#### КОМПЬЮТЕРНЫЕ МОДЕЛИ ПРОЦЕССА ИЗБИРАТЕЛЬНОЙ

#### КОРРОЗИИ БИНАРНЫХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОЧАСТИЦ

В.С. Масниченко, В.М. Самсонов, Н.Ю. Слобняков, А.Г. Бембель, С.А. Васильев,

А.Ю. Колосов, К.Г. Савина, П.М. Ершов, Д.Н. Соколов

ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

170002, Россия, Тверь, Садовый пер., 35

vplabs@yandex.ru, samsonoff@inbox.ru, vsdobnyakov@mail.ru

DOI: 10.26456/pcasncp.2019.11.487

**Аннотация:** Для воспроизведения явления избирательной коррозии бинарных металлических наночастиц (на примере системы Au–Ag) разработаны две альтернативных компьютерных программы. Программа 1 последовательно удаляет из поверхностного слоя атомы заданного сорта, наиболее удаленные от геометрического центра частицы (мы моделировали частицы, состоящие из 1500 атомов Au и 1500 атомов Ag). Другая модель (программа 2) основывается на поиске и удалении атомов с наименьшими значениями энергии связи. Как и следовало ожидать, избирательная коррозия приводит к тому, что поверхностный слой частицы обогащается атомами одного из компонентов (в нашем случае атомами Au). Однако сердцевина частицы сохраняет структуру бинарного наносплава. Нами также установлено, что в результате избирательной коррозии формируется дефектная структура наночастицы. Соответственно, мы предполагаем, что именно эти дефекты (преимущественно вакансии) приводят к пористой структуре более крупных бинарных наночастиц Au–Ag в экспериментах по их избирательной коррозии.

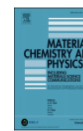
**Ключевые слова:** избирательная коррозия, метод молекулярной динамики, бинарные металлические наночастицы, сегрегация, дефекты, структуры ядро-оболочка.



Contents lists available at ScienceDirect

## Materials Chemistry and Physics

journal homepage: [www.elsevier.com/locate/matchemphys](http://www.elsevier.com/locate/matchemphys)



## Simulation of phase transformations in titanium nanoalloy at different cooling rates

Nickolay Yu. Sdobnyakov<sup>a,\*</sup>, Vladimir S. Myasnichenko<sup>a</sup>, Cheng-Hung San<sup>b</sup>, Yu-Tsung Chiu<sup>b</sup>, Pavel M. Ershov<sup>a</sup>, Viktor A. Ivanov<sup>c</sup>, Pavel V. Komarov<sup>a,d</sup>

<sup>a</sup> Tver State University, Sadoviy per, 35, Tver, 170002, Russia

<sup>b</sup> Industrial Technology Research Institute, 195, Sec. 4, Chung-Hsing Rd. Chung, Hsinchu, 31040, Taiwan

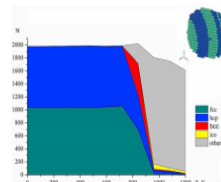
<sup>c</sup> Moscow State University, Leninskiy Gory, 1-2, Moscow, 119991, Russia

<sup>d</sup> Institute of Organo-Element Compounds of RAS, Vavilova st., 28, Moscow, 119991, Russia

### HIGHLIGHTS

- The cooling rate significantly affects the structure of nanoalloy Ti6Al4V after freezing.
- The magnitude of the cooling rate determines the associated processes of structure formation.
- Phase transformations in nanoalloy Ti6Al4V differ from those of the corresponding bulk phase.
- The amorphization temperature of Ti6Al4V with a diameter of 4 nm was determined.
- The amorphization temperature range weakly depends on the nanoparticle's cooling rate.

### GRAPHICAL ABSTRACT



ISSN 1027-4310, Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques, 2019, Vol. 13, No. 6, pp. 1185–1188. © Pleiades Publishing, Ltd., 2019. Russian Text © The Author(s), 2019, published in *Poverkhnosti*, 2019, No. 12, pp. 31–35.

## Complex Approach to Atomistic Simulation of the Size Dependences of the Temperature and the Heat of Melting of Co Nanoparticles: Molecular Dynamics and Monte Carlo Method

V. M. Samsonov<sup>a,\*</sup>, N. Yu. Sdobnyakov<sup>a,\*\*</sup>, I. V. Talyzin<sup>a</sup>, D. N. Sokolov<sup>a</sup>, V. S. Myasnichenko<sup>a</sup>, S. A. Vasilyev<sup>a</sup>, and A. Yu. Kolosov<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Tver State University, Tver, 170100 Russia

\*e-mail: samsonoff@inbox.ru

\*\*e-mail: nsdobnyakov@mail.ru

Received June 16, 2019; revised July 14, 2019; accepted July 19, 2019

**Abstract**—The size dependences of the temperatures of melting  $T_m$  and crystallization  $T_c$  of Co nanoparticles and also those of the heat (enthalpy) of melting  $\Delta H_m$  and crystallization  $\Delta H_c$  are studied using a complex approach to atomistic simulation combining the use of the molecular dynamic and Monte Carlo methods. It is established that  $T_m$  and  $T_c$  decrease linearly with increasing inverse particle radius. The phase transition heats  $\Delta H_m$  and  $\Delta H_c$  also decrease during the transition from the bulk phase to nanoparticles, but it seems this effect is non-scalable.

## Size dependence of the melting temperature and mechanisms of the coalescence/sintering on the nanoscale

V. M. Samsonov<sup>1</sup>, M. I. Alymov<sup>2</sup>, I. V. Talyzin<sup>1</sup> and S. A. Vasilyev<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Tver State University, Zhelyabova 33, Tver, 170100, Russia

<sup>2</sup>Merzhanov Institute of Structural Macrokineitics and Materials Science Russian Academy of Sciences, Academician Osipyan str. 8, Chernogolovka, Moscow Region, 142432, Russia

E-mail: samsonoff@inbox.ru

**Abstract.** We have proposed to use the nanoparticle (NP) melting temperature  $T_m$  to distinguish between the coalescence and sintering processes on the nanoscale. According to our molecular dynamics results, obtained on Au NPs, the coalescence of nanoproplets may be interpreted as a hydrodynamic phenomenon on the nanoscale, and the characteristic coalescence time  $\tau$  is a linear function of the initial particle radius  $r_0$ . In turn, the sintering of two crystalline NPs ( $T < T_m$ ) relates to a grain boundary formation as a result of an alignment of the crystallographic orientations of the sintering NPs, and in this case a dependence of  $\tau$  on  $r_0$  has not been revealed.

ISSN 1028-3358, Doklady Physics, 2019, Vol. 64, No. 12, pp. 453–455. © Pleiades Publishing, Ltd., 2019. Russian Text © The Author(s), 2019, published in *Doklady Akademii Nauk*, 2019, Vol. 489, No. 4.

### TECHNICAL PHYSICS

## Mechanisms of Coalescence of Metallic Nanodroplets and Sintering of Metallic Nanoparticles

V. M. Samsonov<sup>a,\*</sup>, I. V. Talyzin<sup>a,\*\*</sup>, S. A. Vasilyev<sup>a,\*\*\*</sup>, and Corresponding Member of the RAS M. I. Alymov<sup>a,\*\*\*\*</sup>

Received August 15, 2019

**Abstract**—The regularities and mechanisms of coalescence of Au nanodroplets and sintering of solid Au nanoparticles are investigated using molecular dynamics experiments and some theoretical models. It is established that the characteristic time of coalescence  $\tau$  is proportional to the radius  $r_0$  of the original nanodroplets. Both the conclusion and the quantitative estimations of the proportionality coefficient between  $\tau$  and  $r_0$  agree with Frenkel's theory (1946), yet this theory was proposed for describing the coalescence of macroscopic droplets.

Средневзвешенный импакт фактор публикаций научного коллектива – 2,021.



Поверхностные явления в металлических наночастицах и наносистемах: теория и компьютерный эксперимент

Исследование стабильности металлических нанокластеров и металлических гетероструктур на твердых поверхностях: атомистическое и термодинамическое моделирование

Разработка метаэвристических методов классификации и предсказания атомистической структуры металлических наночастиц и биметаллических наносплавов

Молекулярно-динамическое исследование термической стабильности металлической нанопроволоки и наносистем на основе квазиодномерных объектов

Влияние объемной диффузии и поверхностной сегрегации на структурную стабильность биметаллических нанопроволок и нанопленок

**Общий объем привлеченного финансирования в 2019 году: 8,1 млн. руб.**

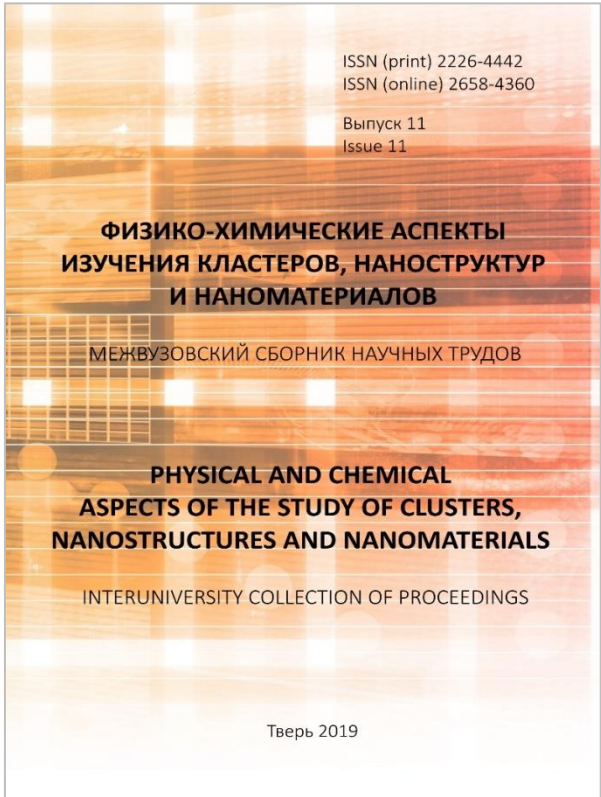


## Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов



<https://physchemaspects.ru> Входит в перечень ВАК

Индексирование: Web of Science, Ядро РИНЦ, DOAJ, Chemical Abstract, Ulrichsweb; Двухлетний импакт-фактор РИНЦ – 0,584

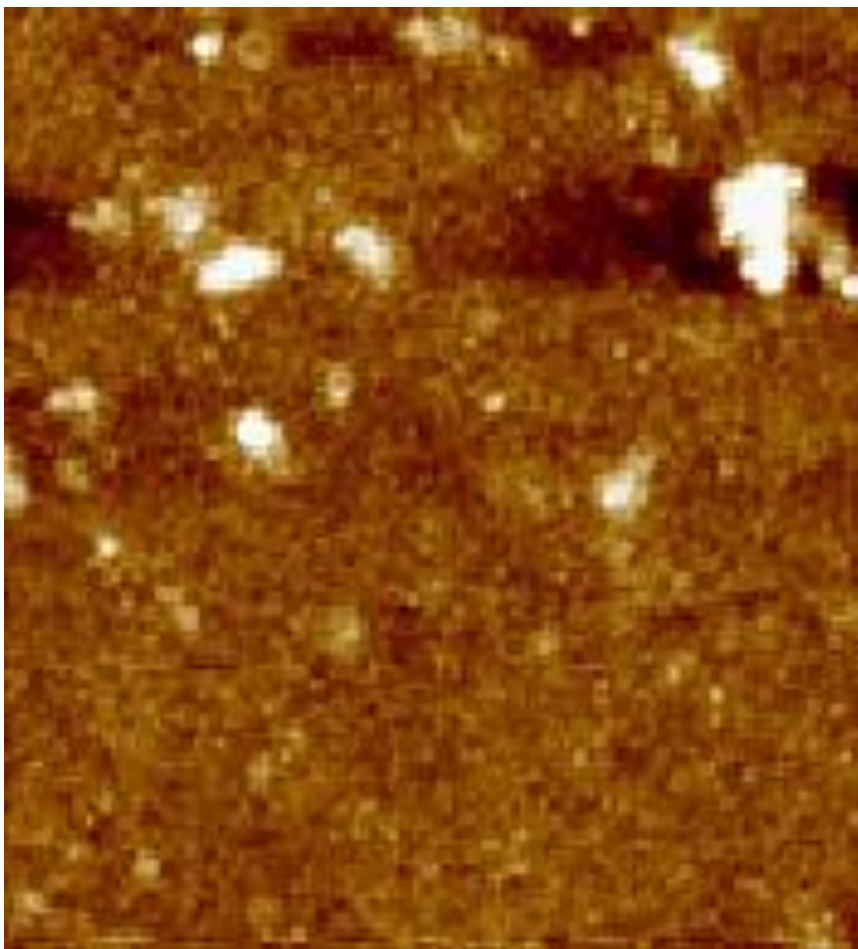


**Самсонов Владимир Михайлович,**  
главный редактор

**Сдобняков Николай Юрьевич,**  
заместитель главного редактора



## ЛАБОРАТОРИЯ МОЛОДЫХ УЧЕНЫХ "ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ НАНОТЕХНОЛОГИИ"



Исследование процессов пайки на нано- и микроуровне

Исследования топографии поверхности материалов

Исследование свойств полимеров и нанокompозитов на их основе

Исследования растекания металлов на гетерогенных поверхностях



- Разработка метаэвристических методов классификации и предсказания атомистической структуры металлических наночастиц и биметаллических наносплавов

### ЛАБОРАТОРИЯ "ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ НАНОТЕХНОЛОГИИ"

- Прогнозирование свойств моно-, би- и тернарных наносплавов

- Термостабильные фотовольтаические полимерные нанокомпозиты для солнечных батарей

- Поверхностные явления в металлических наночастицах и наносистемах: теория и компьютерный эксперимент