

УДК 536.42

**ИССЛЕДОВАНИЕ РАЗМЕРНЫХ ЗАВИСИМОСТЕЙ ТЕМПЕРАТУР
ПЛАВЛЕНИЯ И КРИСТАЛЛИЗАЦИИ И УДЕЛЬНОЙ
ИЗБЫТОЧНОЙ ПОВЕРХНОСТНОЙ ЭНЕРГИИ НАНОЧАСТИЦ
НИКЕЛЯ ВБЛИЗИ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА
ПЛАВЛЕНИЕ/КРИСТАЛЛИЗАЦИЯ**

П.М. Ершов¹, А.Ю. Колосов¹, В.С. Мясниченко¹, Д.Н. Соколов¹, А.А. Хорт^{2,3},
С.С. Богданов¹, А.Н. Шиманская⁴, Н.Ю. Сдобняков¹

¹ФГБОУ ВО «Тверской государственной университет»
170102, Тверь, Садовый пер., 35

²ГНУ «Институт тепло- и массообмена имени А.В. Лыкова НАН Беларуси»
220072, Республика Беларусь, Минск, ул. П. Бровки, 15

³НИЦ «Конструкционные керамические наноматериалы», ФГАОУ ВО «Национальный
исследовательский технологический университет «МИСиС»
119049, Москва, Ленинский пр., 4

⁴УО «Белорусский государственный технологический университет»
220006, Республика Беларусь, Минск, ул. Свердлова, 13а
viplabs@yandex.ru, nsdobnyakov@mail.ru

DOI: 10.26456/pcascnn/2018.10.242

Аннотация: Применен метод Монте-Карло для исследования размерных зависимостей температур плавления и кристаллизации наночастиц никеля, области их гистерезиса и изменения удельной избыточной поверхностной энергии в процессе прямого и обратного фазового перехода – плавление/кристаллизация. Результаты моделирования для нанокластеров никеля свидетельствуют о наличии температурных областей плавления и кристаллизации, что целом хорошо коррелирует с результатами моделирования для других металлов. Моделирование проведено с использованием модели погруженного атома и потенциала сильной связи Клери-Розато. Результаты трех серий компьютерных экспериментов для размерных зависимостей температур плавления и кристаллизации, выполненные с использованием двух указанных межатомных потенциалов в программном пакете LAMMPS и в собственных программных продуктах, имеют заметное согласие между собой.

Ключевые слова: наночастицы никеля, метод Монте-Карло, потенциал Гупта, размерные зависимости, температуры плавления и кристаллизации, удельная избыточная поверхностная энергия.

1. Введение

Исследование физико-химических характеристик наночастиц и наноструктурированных материалов отвечает одному из наиболее бурно развивающихся направлений современной науки. К настоящему времени уже очевидно, что изолированные наночастицы, а также наносистемы могут обладать специфическим набором физико-химических характеристик, в том числе и термодинамических характеристик, существенно отличающихся от характеристик соответствующих объемных фаз. Изучение соответствующих размерных зависимостей актуально как с фундаментальной, так и с прикладной точек зрения. Заметим, что закономерности и механизмы последовательных фазовых переходов

плавление/кристаллизация в металлических наночастицах не являются в полной мере изученными. В [1, 2] рассматривались закономерности гистерезиса плавления и кристаллизации металлических наночастиц, что, в частности, является отличительной особенностью фазовых переходов первого рода в нанокластерах металлов. Существующие работы, посвященные исследованию прямого и обратного фазового перехода – плавление/кристаллизация, описывают, как правило, лишь исследования соответствующих размерных зависимостей или только структурных превращений в наночастицах. Отметим также, что большинство работ по моделированию фазовых переходов в наночастицах в качестве метода моделирования используют метод молекулярной динамики (МД).

На наш взгляд, перспективным с прикладной точки зрения является изучение вида и параметров петли гистерезиса, т.е. температурных зависимостей потенциальной части внутренней энергии, отвечающих нагреву и охлаждению наночастицы. Такой анализ позволяет определить целый комплекс термодинамических характеристик металлических нанокластеров: температуры плавления и кристаллизации, теплоты указанных процессов, теплоты испарения и сублимации, соответствующие теплоемкости, удельную избыточную поверхностную энергию. Кроме того, с прикладной точки зрения важным аспектом изучения фазовых переходов являются закономерности типа структура – свойства, которые необходимы для обоснования тех или иных режимов в технологических процессах (сегрегация, коалесценция, нанопайка и др.) с участием наночастиц и наноструктурированных материалов.

2. Постановка задачи

Целью настоящей работы являлось проведение компьютерного моделирования методом Монте-Карло (МК) [3] прямого и обратного фазового перехода – плавление/кристаллизация для нанокластеров никеля различного размера. В ходе моделирования исследовались размерные зависимости температур плавления и кристаллизации (в том числе область гистерезиса и фазы начала и конца плавления и кристаллизации соответственно), а также фиксировалось изменение удельной избыточной поверхностной энергии в процессе прямого и обратного фазового перехода. Полученные МК результаты (первая серия компьютерных экспериментов) сравниваются с имеющимися данными, полученными методом молекулярной динамики, в том числе с использованием нашего программного обеспечения ClusterEvolution (вторая серия экспериментов) и результатами использования пакета LAMMPS [4] (третья серия экспериментов).

Для описания взаимодействия атомов нами использовался

многочастичный потенциал Гупта [5], параметры которого взяты из работы [6].

Как правило, для обнаружения фазовых переходов 1 рода (плавления и кристаллизации) в процессе компьютерного эксперимента металлические нанокластеры подвергаются последовательным циклам нагрева и охлаждения. Для обнаружения фазового перехода первого рода нами использовались два основных подхода:

- анализ наклона температурной зависимости потенциальной части внутренней энергии нанокластера. При условии постепенного непрерывного изменения температуры резкое изменение наклона кривой в виде излома свидетельствует о наличии теплового эффекта, т.е. выделении или поглощении тепла;
- анализ температурной или кинетической зависимости первого координационного числа. Данные зависимости также имеют излом, обусловленный резким изменением объема исследуемого нанокластера.

3. Обсуждение результатов и выводы

На рис. 1 представлена визуализация нанокластеров никеля в различных стадиях последовательного нагревания и охлаждения.

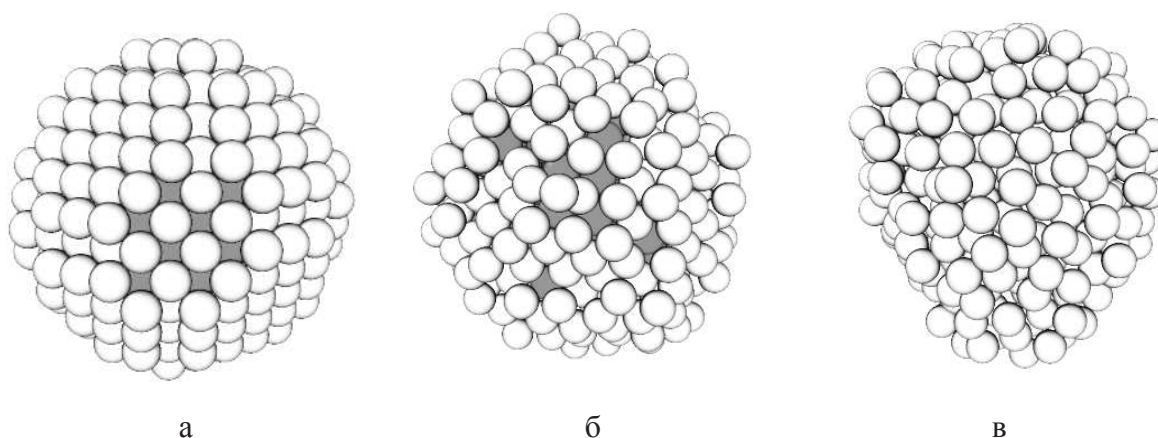


Рис. 1. Структура моделируемых кластеров ($N=456$) (а) – исходная конфигурация 293 К, (б) – в области плавления 1187 К, (в) – в области последующей кристаллизации 1052 К. Атомы ГЦК структуры на рисунке показаны темным цветом.

На рис. 2. представлены соответствующие размерные зависимости температур плавления и кристаллизации нанокластеров никеля различного размера, с использованием альтернативных подходов к атомистическому моделированию: метода Монте-Карло и метода молекулярной динамики (в том числе LAMMPS реализации с использованием EAM потенциала [7]). Данные МК прогнозируют макроскопическую температуру плавления (без учета нелинейности соответствующей размерной зависимости) 1862 К (т.е.

на 8 % выше экспериментального значения), в то время как данные работы [8] – 2091 К, работы [9] – 1917 К. Альтернативные молекулярно-динамические результаты по данным [10] также представлены на рис. 2. По данным [10] для макроскопического значения температуры плавления получено значение 1760 К, для температуры кристаллизации значения получены лишь для двух размеров, они одинаковы и составляют 640 К, что ниже всех результатов, представленных на рис. 2.

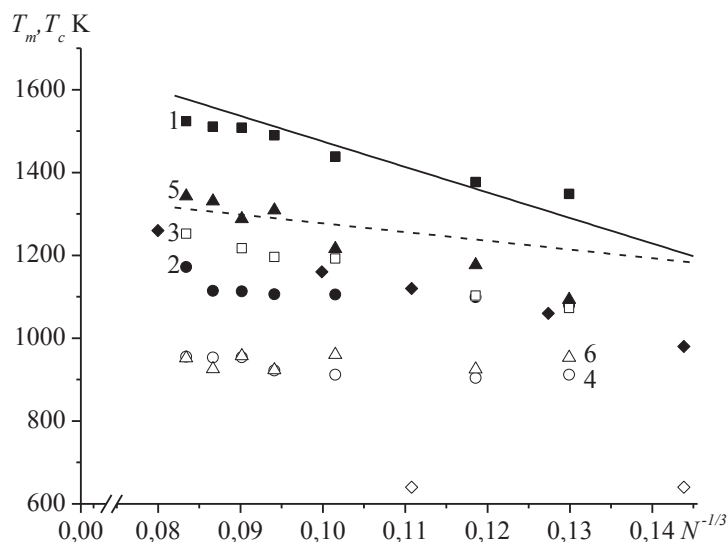


Рис. 2. Размерные зависимости температур плавления (МК – кривая 1, МД – кривая 2) и кристаллизации (МК – кривая 3, МД – кривая 4) нанокластеров никеля $N = 456, 600, 956, 1200, 1364, 1536, 1724$. Кривые 5, 6 отвечают использованию LAMMPS для значений температур начала плавления и начала кристаллизации соответственно. Макроскопическое значение температуры плавления никеля 1728 К. Сплошная и пунктирные линии аппроксимации результатов работы, полученные методом молекулярной динамики [8]. Символами $\blacklozenge, \blacklozenge$ показаны молекулярно-динамические результаты работы [10] для плавления и кристаллизации соответственно.

Анализ калорических кривых показывает (см. рис. 3), что при моделировании фазовых переходов плавление/кристаллизации методом молекулярной динамики для наночастиц никеля, по сравнению с другими металлами (золото, медь, алюминий, кобальт), является более характерным наличие области плавления и области кристаллизации. Это позволяет говорить о температурах начала и конца соответствующего процесса. И если авторами в [8] для наночастиц никеля практически не фиксируется разница между температурой начала и окончания процессов плавления и кристаллизации, то в более ранней работе [9] такой температурный диапазон может изменяться от нескольких градусов до порядка 180 К.

Результаты моделирования методом Монте-Карло лишь отчасти подтверждают эту концепцию, т.е. удастся фиксировать некоторую ширину области плавления и области кристаллизации. Однако ширина

этой области в пределах 25–100 К и получаемые результаты для наночастиц никеля в целом хорошо коррелируют с результатами моделирования для других металлов, перечисленных выше. Интересным является тот факт, что результаты, полученные с помощью LAMMPS, предсказывают достаточно широкий диапазон температур начала и окончания процессов плавления и кристаллизации для наночастиц никеля, но при этом такой интервал температур практически отсутствует, например, для наночастиц золота.

На рис. 3. для сравнения представлен гистерезис калорических зависимостей потенциальной частиц удельной внутренней энергии наночастиц никеля с числом частиц $N = 956$.

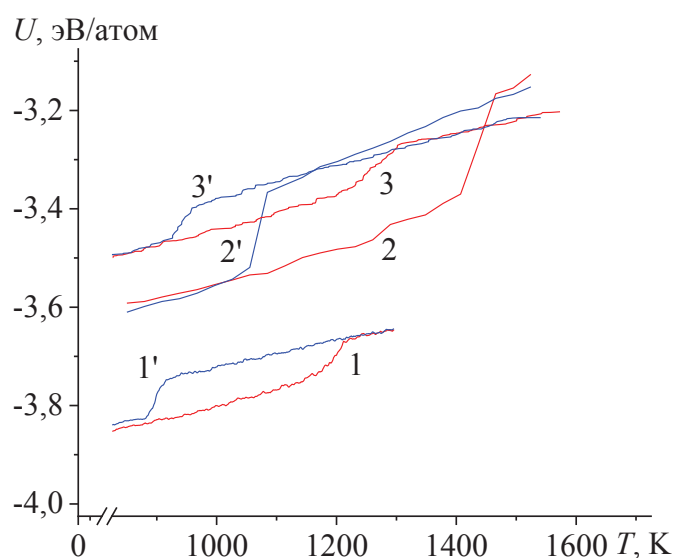


Рис. 3. Калорические зависимости потенциальной частиц удельной внутренней энергии наночастиц никеля ($N = 956$): 1 – метод молекулярной динамики, 2 – метод Монте-Карло, 3 – LAMMPS. Красным цветом показаны кривые, отвечающие плавлению, а синим кристаллизации.

Для расчета избыточной энергии Ψ изучаемых систем использованы вычисленные значения потенциальной части внутренней энергии кластеров и оценка для энергии эквивалентного количества атомов, находящихся в массивной фазе. Впервые описанный здесь подход был апробирован нами в [11]. Исходя из определения [12] избыточная энергия Ψ для кластера, состоящего из N атомов, может быть представлена в виде

$$\Psi = U_c(N) - U_{tot}, \quad (1)$$

где $U_c(N)$ – полная энергия кластера, состоящего из N атомов, U_{tot} – энергия того же числа атомов в фазе сравнения, в качестве которой в данном случае может рассматриваться массивная металлическая фаза ($U_{tot} = NU_1$, U_1 – энергия в расчете на один атом массивной фазы). Величина $U_c(N)$, фигурирующая в формуле (1), соответствует средней энергии

равновесного состояния системы. Для определения U_{tot} , может быть использована средняя энергия атомов кластера, находящихся в центре моделированной частицы. Вводя в рассмотрение радиус малого объекта, мы можем оценить удельную избыточную поверхностную энергию $\varepsilon(R) = \Psi/4\pi R^2$ (расчетные значения представлены в Таблице 1). При анализе распределения энергии атомов на предмет оценки принадлежности конкретного атома к объемной части кластера или поверхностной области кластера может быть определен некий эффективный размер кластера для определения зависимости $\varepsilon(R)$. Как правило, за верхнюю границу размера кластера целесообразно принять его радиус инерции, т.к. при таких оценках учитывается степень отклонения формы частицы от сферической. Также одним из наиболее простых способов оценки эффективного размера кластера, но при этом дающим вполне адекватные значения, является использование соотношения, которое впервые апробировано нами в [12] для нанокристаллов: $N = n_{\infty}V = n_{\infty} \cdot (4/3)\pi R^3$. Здесь N – число атомов в кластере, n_{∞} – плотность числа атомов в единице объема для массивной фазы, V – объем материнской фазы, содержащий заданное число частиц. Описанные выше два способа оценки размера нанокластера дают результаты, совпадающие по порядку величины.

Таблица 1. Значение удельной избыточной поверхностной энергии для кластеров никеля различного размера¹

| Размер | ε , Дж/м ² | | |
|------------|-----------------------------------|-----------------|----------------------|
| | До плавления | После плавления | После кристаллизации |
| $N = 456$ | 2,906±0,601 | 2,283±0,026 | 2,723±0,126 |
| $N = 600$ | 3,018±0,067 | 2,305±0,016 | 2,501±0,108 |
| $N = 956$ | 3,220±0,081 | 2,255±0,027 | 2,739±0,123 |
| $N = 1200$ | 3,241±0,093 | 2,340±0,038 | 2,745±0,127 |
| $N = 1364$ | 3,662±0,096 | 2,336±0,029 | 2,747±0,136 |
| $N = 1536$ | 3,397±0,097 | 2,283±0,026 | 2,850±0,138 |
| $N = 1724$ | 3,420±0,093 | 2,219±0,023 | 2,854±0,140 |

¹ Представленные результаты получены при разных температурах в связи с наличием зависимости $T_m(N), T_c(N)$ и различными значениями для температурной ширины для процессов плавления и кристаллизации $\Delta T_m(N), \Delta T_c(N)$ соответственно.

Используя соотношение Гиббса-Гельмгольца можно оценивать поверхностное натяжение наночастиц соответствующего размера N

$$\varepsilon(N, T) = \sigma(N, T) - T \left(\frac{d\sigma}{dT} \right)^{\infty}. \quad (2)$$

Для сравнения получаемых результатов с имеющимися достоверными данными о макроскопическом значении поверхностного натяжения нами использовался обзор [13], а для температурной производной

поверхностного натяжения данные работы [14]. Сравнение получаемых значений по поверхностному натяжению с макроскопическим значением, в дальнейшем позволяет получить соответствующую размерную зависимость и установить размер, для которого осуществляется переход от наноразмера к макроскопической фазе. Оценка коэффициента пропорциональности в формуле Русанова для поверхностного натяжения [15] позволяет оценивать стабильность наночастиц по отношению к флуктуациям объема [16, 17].

Таким образом, комплексное изучение размерных зависимостей температур плавления и кристаллизации, удельной избыточной поверхностной энергии для металлических наночастиц позволяет изучать как технологические условия использования наночастиц определенного размера, так и исследовать их механическую и термическую стабильность [18, 19].

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты № 17-53-04010 Бел_мол_а, № 18-38-00571 мол_а, № 18-03-00132 а) и Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований (проект № X17PM-032).

Библиографический список:

1. **Самсонов, В.М.** Молекулярно-динамическое исследование плавления и кристаллизации наночастиц / В.М. Самсонов, С.С. Харечкин, С.Л. Гафнер, Л.В. Редель, Ю.Я. Гафнер // Кристаллография. – 2009. – Т. 54. – № 3. – С. 530-536.
2. **Гафнер, С.Л.** Структурные переходы в малых кластерах никеля / С.Л. Гафнер, Л.В. Редель, Ж.В. Головенько и др. // Письма в Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2009. – Т. 89. – Вып. 7. – С. 425-431.
3. **Metropolis, N.** The Monte Carlo method / N. Metropolis, S. Ulam // Journal of the American Statistical Association. – 1949. – V. 44. – № 247. – P. 335-341.
4. LAMMPS Molecular dynamics simulator. – Режим доступа: [www.url: http://lammps.sandia.gov](http://lammps.sandia.gov). – 15.11.2018.
5. **Gupta, R.P.** Lattice relaxation at a metal surface / R.P. Gupta // Physical Review B. – 1981. – V. 23. – I. 12. – P. 6265-6270.
6. **Cleri, F.** Tight-binding potentials for transition metals and alloys / F. Cleri, V. Rosato // Physical Review B. – 1993. – V. 48. – I. 1. – P. 22-33.
7. **Daw, M.S.** Semiempirical, quantum mechanical calculation of hydrogen embrittlement in metals / M.S. Daw, M.I. Baskes // Physical Review Letters. – 1983. – V. 50. – I. 17. – P. 1285-1288.
8. **Самсонов, В.М.** О влиянии скоростей нагрева и охлаждения на плавление и кристаллизацию металлических нанокластеров / В.М. Самсонов, И.В. Талызин, М.В. Самсонов // Журнал технической физики. – 2016. – Т. 86. – Вып. 6. – С. 149-152.
9. **Самсонов, В.М.** О фазовых переходах первого рода в кластерах никеля / В.М. Самсонов, А.Г. Бембель, О.В. Шакуло // Вестник ТвГУ. Серия: Физика. – 2011. – Вып. 13. – С. 82-93.
10. **Qi, Y.** Melting and crystallization in *Ni* nanoclusters: The mesoscale regime / Y. Qi,

- T. Çağın, W.L. Johnson, W. A. Goddard III // The Journal of Chemical Physics. – V. 115. – № 1. – P. 385-394.
11. **Сдобняков, Н.Ю.** Исследование термодинамических характеристик нанокластеров золота с использованием многочастичного потенциала Гупта / Н.Ю. Сдобняков, П.В. Комаров, Д.Н. Соколов, В.М. Самсонов // Физика металлов и металловедение. – 2011. – Т. 111. – № 1. – С. 15-22.
12. **Samsonov, V.M.** Surface tension in small droplets and nanocrystals / V.M. Samsonov, A.N. Bazulev, N.Yu. Sdobnyakov // Journal of Physical Chemistry. – 2003. – V. 77. – Suppl. 1. – P. 158-162.
13. **Хоконов, Х.Б.** Поверхностные явления в расплавах и возникающих в них твердых фазах / Х.Б. Хоконов // В кн.: Поверхностные явления в расплавах и возникающих из них твердых фазах. – Кишинев: Штиинца, 1974. – С. 190-261.
14. **Alchagirov, A.B.** Surface energy and surface tension of solid and liquid metals. Recommended Values / A.B. Alchagirov, B.B. Alchagirov, T.M. Taova, Kh.B. Khokonov // Transitions JWRI. – 2001. – V. 30. – P. 287-291.
15. **Русанов, А.И.** Термодинамика поверхностных явлений / А.И. Русанов. – Л.: Изд-во ЛГУ, 1960. – 181 с.
16. **Samsonov, V.M.** A thermodynamic approach to mechanical stability of nanosized particles / V.M. Samsonov, N.Yu. Sdobnyakov // Central European Journal of Physics. – 2003. – V. 1. – I. 2. – P.344-354.
17. **Samsonov, V.M.** On thermodynamic stability conditions for nanosized particles / V.M. Samsonov, N.Yu. Sdobnyakov, A.N. Bazulev // Surface Science. – 2003. – V. 532-535. – P. 526-530.
18. **Андриевский, Р.А.** Термическая стабильность наноматериалов / Р.А. Андриевский // Успехи химии. – 2002. – Т. 71. – Вып. 10. – С. 967-981.
19. **Андриевский, Р.А.** Термическая стабильность консолидированных металлических наноматериалов / Р.А. Андриевский // Успехи химии. – 2014. – Т. 83. – Вып. 4. – С. 365-375.

References:

1. **Samsonov, V.M.** Molekulyarno-dinamicheskoe issledovanie plavleniya i kristallizacii nanochastic / V.M. Samsonov, S.S. Kharechkin, S.L. Gafner, L.V. Redel, Yu.Ya. Gafner // Kristallografiya. – 2009. – V. 54. – no. 3. – P. 530-536.
2. **Gafner, S.L.** Strukturnye perekhody v malyh klasterah nikelya / S.L. Gafner, L.V. Redel, Zh.V. Goloven'ko i dr. // Pis'ma v Zhurnal eksperimental'noj i teoreticheskoy fiziki. – 2009. – V. 89. – I. 7. – P. 425-431.
3. **Metropolis, N.** The Monte Carlo method / N. Metropolis, S. Ulam // Journal of the American Statistical Association. – 1949. – V. 44. – № 247. – P. 335-341.
4. LAMMPS Molecular dynamics simulator. – Режим доступа: [www.url: http://lammmps.sandia.gov](http://lammmps.sandia.gov). – 15.11.2018.
5. **Gupta, R.P.** Lattice relaxation at a metal surface / R.P. Gupta // Physical Review B. – 1981. – V. 23. – I. 12. – P. 6265-6270.
6. **Cleri, F.** Tight-binding potentials for transition metals and alloys / F. Cleri, V. Rosato // Physical Review B. – 1993. – V. 48. – I. 1. – P. 22-33.
7. **Daw, M.S.** Semiempirical, quantum mechanical calculation of hydrogen embrittlement in metals / M.S. Daw, M.I. Baskes // Physical Review Letters. – 1983. – V. 50. – I. 17. – P. 1285-1288.

8. **Samsonov, V.M.** O vliyaniy skorostej nagreva i ohlazhdeniya na plavlenie i kristallizatsiyu metallicheskih nanoklastero / V.M. Samsonov, I.V. Talyzin, M.V. Samsonov // Zhurnal tekhnicheskoy fiziki. – 2016. – V. 86. – I. 6. – P. 149-152.
9. **Samsonov, V.M.** O fazovyh perekhodah pervogo roda v klasterah nikelya / V.M. Samsonov, A.G. Bembel, O.V. Shakulo // Vestnik TvGU. Seriya: Fizika. – 2011. – I. 13. – P. 82-93.
10. **Qi, Y.** Melting and crystallization in *Ni* nanoclusters: The mesoscale regime / Y. Qi, T. Çağın, W.L. Johnson, W. A. Goddard III // The Journal of Chemical Physics. – V. 115. – № 1. – P. 385-394.
11. **Sdobnyakov, N.Yu.** Issledovanie termodinamicheskikh harakteristik nanoklastero zolota s ispol'zovaniem mnogochastichnogo potentsiala Gupta / N.Yu. Sdobnyakov, P.V. Komarov, D.N. Sokolov, V.M. Samsonov // Fizika metallov i metallovedenie. – 2011. – V. 111. – no. 1. – P. 15-22.
12. **Samsonov, V.M.** Surface tension in small droplets and nanocrystals / V.M. Samsonov, A.N. Bazulev, N.Yu. Sdobnyakov // Journal of Physical Chemistry. – 2003. – V. 77. – Suppl. 1. – P. 158-162.
13. **Khokonov, Kh.B.** Poverhnostnye yavleniya v rasplavah i vznikayushchih v nih tverdyh fazah / Kh.B. Khokonov // V kn.: Poverhnostnye yavleniya v rasplavah i vznikayushchih iz nih tverdyh fazah. – Kishinev: Shtiinca, 1974. – P. 190-261.
14. **Alchagirov, A.B.** Surface energy and surface tension of solid and liquid metals. Recommended values / A.B. Alchagirov, B.B. Alchagirov, T.M. Taova, Kh.B. Khokonov // Transitions JWRI. – 2001. – V. 30. – P. 287-291.
15. **Rusanov, A.I.** Termodinamika poverhnostnyh yavlenij / A.I. Rusanov. – L.: Izd-vo LGU, 1960. – 181 p.
16. **Samsonov, V.M.** A thermodynamic approach to mechanical stability of nanosized particles / V.M. Samsonov, N.Yu. Sdobnyakov // Central European Journal of Physics. – 2003. – V. 1. – I. 2. – P.344-354.
17. **Samsonov, V.M.** On thermodynamic stability conditions for nanosized particles / V.M. Samsonov, N.Yu. Sdobnyakov, A.N. Bazulev // Surface Science. – 2003. - V. 532-535. – P. 526-530.
18. **Andrievskiy, R.A.** Termicheskaya stabil'nost' nanomaterialov / R.A. Andrievskiy // Uspekhi himii. – 2002. – V. 71. – I. 10. – P. 967-981.
19. **Andrievskiy, R.A.** Termicheskaya stabil'nost' konsolidirovannyh metallicheskih nanomaterialov / R.A. Andrievskiy // Uspekhi himii. – 2014. – V. 83. – I. 4. – P. 365-375.

**INVESTIGATION OF SIZE DEPENDENCES OF MELTING AND CRYSTALLIZATION
TEMPERATURES AND SPECIFIC EXCESS SURFACE ENERGY OF NICKEL
NANOPARTICLES UNDER MELTING / CRYSTALLIZATION PHASE TRANSITION**

P.M. Ershov¹, A.Yu. Kolosov¹, V.S. Myasnichenko¹, D.N. Sokolov¹, A.A. Khort^{2,3}, S.S. Bogdanov¹,
H.N. Shimanskaya⁴, N.Yu. Sdobnyakov¹

¹*Tver State University*

²*A.V. Luikov Heat and Mass Transfer Institute of NAS of Belarus*

³*Scientific Investigation Center «Structural Ceramic Nanomaterials»,
National University of Science and Technology «MISIS»*

⁴*Belarusian State Technological University*

DOI: 10.26456/pcascnn/2018.10.242

Abstract: The Monte Carlo method was used to study size dependences of the melting and crystallization temperatures of nickel nanoparticles, their hysteresis area, and changes in the specific

excess surface energy during the direct and reverse melting/crystallization phase transition. Simulation results for nickel nanoclusters indicate the presence of melting and crystallization temperature regions, which generally correlates well with simulation results for other metals. We employed simulation by using the embedded atom model and tight-binding Cleri-Rosato potential. Results of three series of computer experiments for the size dependences of the melting and crystallization temperatures made using the two interatomic potentials in the software package LAMMPS and our own softwares were found to be in good accordance between themselves.

Keywords: nickel nanoparticles, Monte-Carlo method, Gupta potential, size dependences, melting and crystallization temperatures, specific excess surface energy.

Ершов Павел Михайлович – аспирант кафедры общей физики ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Колосов Андрей Юрьевич – научный сотрудник кафедры общей физики ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Мясниченко Владимир Сергеевич – научный сотрудник кафедры общей физики ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Хорт Александр Александрович – к.т.н., старший научный сотрудник, ГНУ «Институт тепло- и массообмена имени А.В. Лыкова НАН Беларуси», НИЦ «Конструкционные керамические наноматериалы», ФГАОУ ВО «Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»

Соколов Денис Николаевич – к.ф.-м.н., научный сотрудник ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Богданов Сергей Сергеевич – аспирант кафедры общей физики ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Шиманская Анна Николаевна – к.т.н., ассистент, научный сотрудник кафедры технологии стекла и керамики, УО «Белорусский государственный технологический университет»

Сдобняков Николай Юрьевич – к.ф.-м.н., доцент кафедры общей физики ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Pavel M. Ershov – postgraduate student of the General Physics Department, Tver State University

Andrey Yu. Kolosov – Researcher of the General Physics Department, Tver State University

Vladimir S. Myasnichenko – Researcher of the General Physics Department, Tver State University

Denis N. Sokolov – Ph. D., Researcher, Tver State University

Alexander A. Khort – Ph. D., Senior Researcher, A.V. Luikov Heat and Mass Transfer Institute of NAS of Belarus, Scientific Investigation Center «Structural Ceramic Nanomaterials», National University of Science and Technology «MISIS»

Sergey S. Bogdanov – postgraduate student of the General Physics Department, Tver State University

Hanna N. Shymanskaya – Ph. D., Assistant Lecturer, Researcher of the Department of Glass and Ceramics Technology, Belarusian State Technological University

Nickolay Yu. Sdobnyakov – Ph. D., Docent of the General Physics Department, Tver State University