

I. Штаблавий, Н. Попільовський, Ю. Никируй, С. Мудрий

Селективне лазерне спікання аморфних наночастинок: моделювання методом молекулярної динаміки

Кафедра фізики металів Львівського національного університету імені Івана Франка, Львів, Україна,
ihor.shtablavyi@lnu.edu.ua

В роботі досліджено процес рідкофазного спікання аморфних наночастинок на основі заліза методом молекулярної динаміки. Для моделювання використано пакет для класичної молекулярної динаміки LAMMPS. Візуальний аналіз атомних конфігурацій наночастинок під час їхнього швидкого охолодження дозволив виявити ефект самоочищення частинок. Для аналізу атомної структури наночастинок після спікання використали парціальні парні кореляційні функції та функції розподілу координаційних чисел. В результаті аналізу основних структурних параметрів, які отримали з використанням вказаних функцій встановили відмінності атомного складу та структури об'єму та поверхні наночастинок.

Ключові слова: Селективне лазерне плавлення, наночастинок, рідкофазне спікання, метод молекулярної динаміки, парні кореляційні функції, функції розподілу координаційних чисел.

Подано до редакції 27.10.2023; прийнято до друку 19.01.2024.

Вступ

Нові технологічні та інженерні рішення вимагають матеріалів з унікальним поєднанням механічних, електричних, магнітних властивостей. Як відомо, властивості матеріалів крім атомного складу залежать також і від фазового складу та атомної структури. Застосовуючи різні методи синтезу матеріалів з однаковим атомним складом можна отримати кінцевий продукт з різними фізичними властивостями. Класичні методи отримання полікристалічних матеріалів використовують залежність розміру зерна від швидкості кристалізації та термічної обробки в кристалічному стані [1, 2]. Зважаючи на це, можна отримати дрібнокристалічний матеріал для якого характерні висока міцність та пластичність [3-8]. Проте, полікристалічна будова матеріалів спряжена з наявністю границь зерен, які можуть негативно впливати на властивості внаслідок гальмування руху дислокацій, міжкристалітної корозії та ін. На відміну від полікристалічних матеріалів, бездефектні монокристали мають набагато кращі властивості, проте їхнє отримання із заданими

розмірами та конфігурацією є складним технологічним процесом. Іншою негативною особливістю монокристалів є анізотропія властивостей, яка є небажаною для багатьох інженерних рішень.

На відміну від моно- та полікристалічних матеріалів, для аморфних металевих сплавів характерна відсутність зеренної структури а відповідно границь зерен а також аморфні сплави є ізотропними за своїми властивостями. Зважаючи на це їхні фізичні властивості значно перевершують властивості традиційних металевих сплавів [9-11], тому такі матеріали можуть замінити традиційні в технологіях майбутнього. Проте основним недоліком аморфних матеріалів є необхідність забезпечення високих швидкостей охолодження при їхньому отримання, що можливо лише у випадку обмеження їхніх геометричних розмірів [12-14]. Незважаючи на інтенсивний пошук сплавів для аморфізації яких необхідна менша швидкість охолодження, на даний час діаметр об'ємних аморфних сплавів знаходиться в межах 30-80 мкм [15-17]. Тому для виготовлення об'ємних виробів з аморфних сплавів було

запропоновано використати методи термопластичного формування [18], хоча й ці методи не дають змоги виготовляти вироби будь-якої конфігурації та розмірів. Зважаючи на це, необхідно розвивати інші технології для отримання об'ємних виробів на основі аморфних сплавів.

В останні роки все більшого поширення набувають адитивні технології виробництва [19-21] що пов'язано з можливістю швидкого виготовлення виробів практично будь-якої конфігурації за допомогою одного пристрою (3D-принтера). На відміну від технологій 3D-друку полімерними матеріалами, друк металевих виробів не є таким доступним. Причиною цього є значна активність розплавлених металів по відношенню до кисню повітря, а також у багатьох випадках незадовільні механічні властивості матеріалів відразу після 3D-друку. Основним чином механічні властивості погіршуються через полікристалічний характер матеріалів і дефекти з'єднання частинок у випадку їх лазерного спікання. Рішенням цієї проблеми може стати використання аморфних металевих сплавів для 3D-друку [22, 23]. Формування аморфних матеріалів за допомогою адитивних технологій дозволяє уникнути полікристалічної структури, а також дає можливість формувати об'ємні аморфні сплави таких розмірів та форми, які неможливо отримати традиційними методами.

Однак основною проблемою при формуванні аморфних матеріалів цим методом є їх кристалізація після лазерного плавлення. Уникнути кристалізації можна за умови швидкого відведення тепла від частинок, що спікаються, а також шляхом вибору оптимальних термодинамічних умов спікання. Вивчення цієї проблеми експериментальними методами не завжди є можливим з зв'язку зі значною швидкістю фазових перетворень. Тому, методи комп'ютерного моделювання можна використати для дослідження процесів спікання аморфних частинок на атомному рівні і таким чином оптимізувати умови експерименту шляхом отримання попередніх результатів щодо процесу 3D друку.

Одним з найефективніших методів моделювання структури та властивостей матеріалів є метод молекулярної динаміки (МД). Цей метод неодноразово був використаний для моделювання структури та властивостей як об'ємних так і нанорозмірних матеріалів. Метод МД використовували також і для моделювання процесу спікання однокомпонентних [24-27] та двокомпонентних кристалічних наночастинок [28, 29]. Нам на жаль не вдалося знайти роботи де було б проведено моделювання процесу спікання аморфних наночастинок. У роботі [24] встановлено що процес спікання наночастинок може бути розділений на три етапи. На першому етапі відбувається швидке формування з'єднувальної шийки між частинками в основному за рахунок інтенсивних поверхневої дифузії атомів. Другий етап відповідає стабільному росту шийки, яка на третьому етапі швидко росте. Механічні властивості методом МД вивчено в роботі [28], а кінетику спікання наночастинок алюмінію досліджено в [26], де показано, що час необхідний для

коалесценції двох частинок складає 30 пс. В роботі [27] проведено масштабне моделювання процесу лазерного спікання масиву наночастинок заліза розміщених на підкладці.

У даній роботі методом молекулярно-динамічного моделювання було вивчено процес спікання аморфних наночастинок на основі заліза та умови їх подальшої аморфізації після охолодження. Дослідження проводили при різних температурах. Отримано результати, які можуть бути використані для оптимізації процесу 3D друку аморфних матеріалів експериментальними методами.

I. Методика моделювання

Дослідження процесу спікання наночастинок здійснювали методом молекулярної динаміки використовуючи вільний відкритий пакет для класичної молекулярної динаміки LAMMPS [30]. Для візуалізації отриманих результатів було використано інструменти OVITO [31], які дають змогу не лише здійснювати візуалізацію процесу моделювання а також проводити деякі розрахунки. Для обчислення сил взаємодії між атомами було використано модифікований потенціал зануреного атома (MEAM) [32, 33] який часто використовують для моделювання систем на основі Al, Si, Mg, Cu, та Fe. Початкові швидкості атомів для кожної з досліджених температур обчислювали відповідно до розподілу Максвела-Больцмана. Інтегрування рівнянь руху здійснювали з кроком 2 фс. Моделювання проводили в ізотермічно-ізохорному ансамблі (NVT) з використанням ортогональної комірки моделювання. Густина сплавів задавали відповідно до експериментальних значень. Сталу температуру підтримували за допомогою термостата Носе-Гувера та баростата з параметром амортизації температури 0,1 пс. Просторова конфігурація атомів реєструвалася, як правило, на кожному сотому наступному кроці часу. Тривалість моделювання була рівною $5 \cdot 10^5$ часових кроків.

Моделювання складалося з двох етапів. На першому етапі було створено кубічні комірки з атомами складу $Fe_{77}Cu_3Si_{20}$, $Fe_{78}Cu_2Si_{20}$ та $Fe_{79}Cu_1Si_{20}$, зі структурою яка відповідає аморфним сплавам даного складу. Для цього вказані сплави нагрівали до температури вище точки плавлення після чого швидко охолоджували. В цьому випадку використовували періодичні граничні умови. З отриманих атомних конфігурацій вирізали сферичні частинки необхідного діаметра, з яких формували комплекси з двох та трьох частинок (Рис. 1) для моделювання процесу спікання на другому етапі досліджень. В цьому випадку розмір комірки був набагато більшим за діаметр частинки а також не використовували періодичні граничні умови.

Моделювання процесу спікання здійснювали за температур в інтервалі 300—1800 К з кроком 100 К. Для атомних конфігурацій за різних температур вивчали зміну парціальних міжатомних відстаней та координаційних чисел.

II. Результати та обговорення

Моделювання процесу спікання здійснювали для аморфних частинок з атомним складом $\text{Fe}_{77}\text{Cu}_3\text{Si}_{20}$, $\text{Fe}_{78}\text{Cu}_2\text{Si}_{20}$ та $\text{Fe}_{79}\text{Cu}_1\text{Si}_{20}$ розміром чотири нанометри. Процес спікання розпочинали за температури 1811К, тобто за температури вище точки плавлення заліза, після чого температуру знижували до кімнатної зі швидкістю 10 К/с з метою відтворення режимів спікання в умовах наближених до реальних. Аналіз атомних конфігурацій та зміщень атомів (Рис. 2 а, б) свідчить про те, що процес об'єднання частинок відбувається вже на початку моделювання і протягом перших семи пікосекунд моделювання відбувається формування шийки між двома частинками. Протягом наступних 700 пікосекунд відбувається об'єднання двох частинок що супроводжується зменшенням поверхневої енергії [34] та переходом до рівноважного стану частинки за даної температури. Подібні процеси відбуваються з частинками з атомним складом $\text{Fe}_{78}\text{Cu}_2\text{Si}_{20}$ та $\text{Fe}_{79}\text{Cu}_1\text{Si}_{20}$.

Процес спікання частинок може бути описаний в межах моделі в'язкої течії [35] відповідно до якої він

може бути поділений на чотири етапи. На першому етапі відбувається контакт між частинками за рахунок переміщень атомів в результаті чого починається формування з'єднувальної шийки. Другий етап можна назвати етапом попереднього росту шийки між частинками і він може тривати протягом 10-20пс залежно від матеріалу частинок та температури спікання. На третьому етапі відбувається остаточне формування шийки (може тривати 20-80 пс). Під час четвертого етапу відбувається завершення дифузійного перемішування частинок і вони остаточно об'єднуються.

Якісну інформацію про механізм спікання частинок можна отримати з аналізу векторів зміщення атомів різного сорту (Рис. 2 в, г). Для такого аналізу в межах об'єму частинки будують сукупність векторів кожен з яких належить певній частинці, початок вектора відповідає положенню атомів на попередньому кроці моделювання, а кінець – наступному. Відповідно, стрілка вказує напрям переміщення, а довжина вектора відповідає величині переміщення атома. На рисунку 2(в) показано розподіл векторів зміщення всіх атомів для наночастинок з атомним

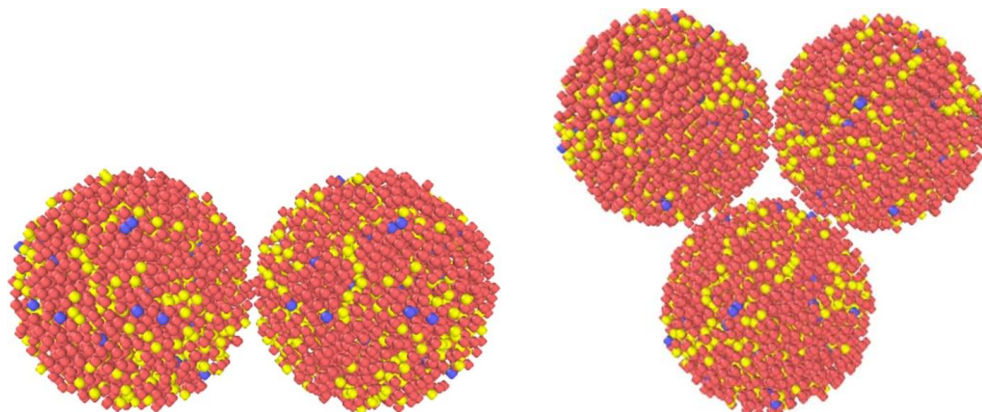


Рис. 1. Початкові конфігурації атомів в комірках для моделювання.

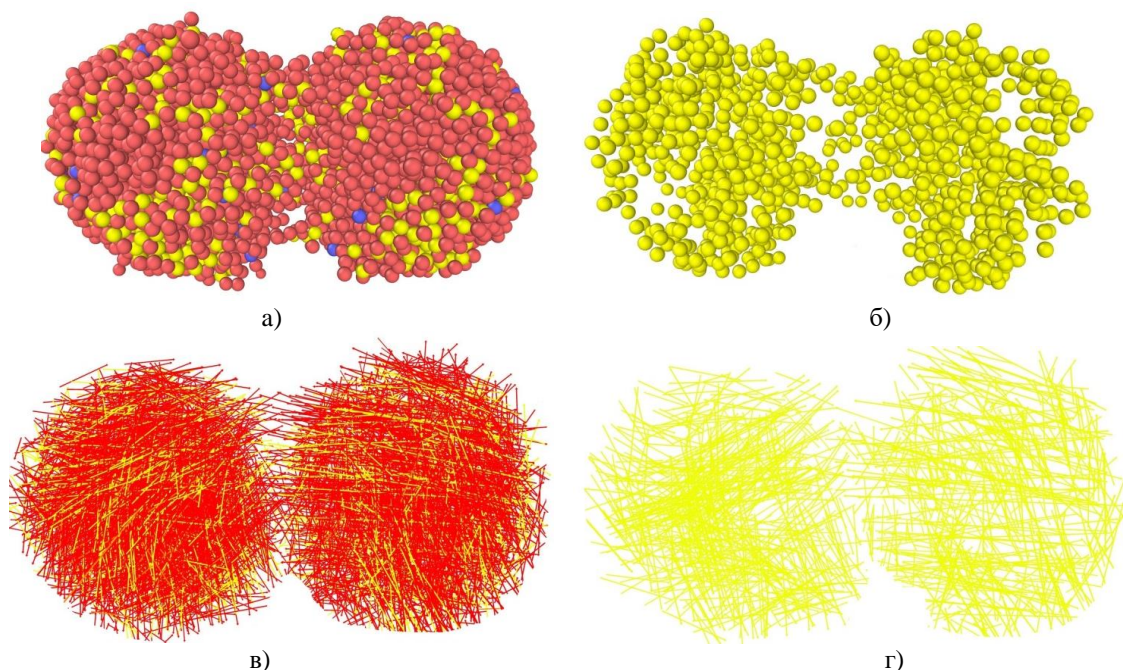


Рис. 2. Візуалізація процесу рідкофазного спікання двох наночастинок $\text{Fe}_{77}\text{Cu}_3\text{Si}_{20}$ за температури 1811К (а – атомні конфігурації для всіх атомів та б – для кремнію, в, та г відповідні зображення атомних переміщень).

складом $Fe_{77}Cu_3Si_{20}$ за температури 1811К а на рисунку 2(г) – вектори зміщення лише для атомів кремнію. Як бачимо, поверхневі атоми рухаються в основному вздовж поверхні частинок, а між частинками переміщення атомів які належать кожній з частинок мають напрям від однієї частинки до іншої. Крім того атоми кремнію зміщаються на більші відстані порівняно з атомами заліза. Атоми міді, яких є невелика кількість майже не беруть участі в дифузійному перемішуванні частинок, а переміщуються в межах об'єму кожної з частинок аж до їхнього повного об'єднання. Для частинок з атомним складом $Fe_{79}Cu_1Si_{20}$, де вміст міді є меншим, переміщення атомів кремнію в околі шийки з'єднання між частинками є найбільшим порівняно з іншими наночастинками.

Моделювання об'єднання частинок було продовжено симуляцією їхнього охолодження з заданою швидкістю до кімнатної температури. Як

бачимо з атомних конфігурацій (Рис. 3), на кінцевому етапі охолодження відбувається сегрегація атомів кремнію та міді на поверхні частинок. Як було виявлено, ступінь сегрегації зменшується для наночастинок з більшим вмістом міді.

Аналіз атомних конфігурацій методом візуалізації дає змогу лише якісно описати атомну структуру наночастинок під час спікання. Для кількісного аналізу структури використовують загальні та парціальні парні кореляційні функції (ПКФ), які дають змогу інтерпретувати топологічний та хімічний ближній порядок розміщення атомів. Відповідно до найпростішого трактування [36], парна кореляційна функція є густиною імовірності розміщення атомів на певній відстані до деякого атома який знаходиться в початку координат. Для кристалічних матеріалів з ідеальною структурою для яких характерний дальній порядок розміщення атомів ця функція має вигляд вузьких максимумів, положення яких відповідає

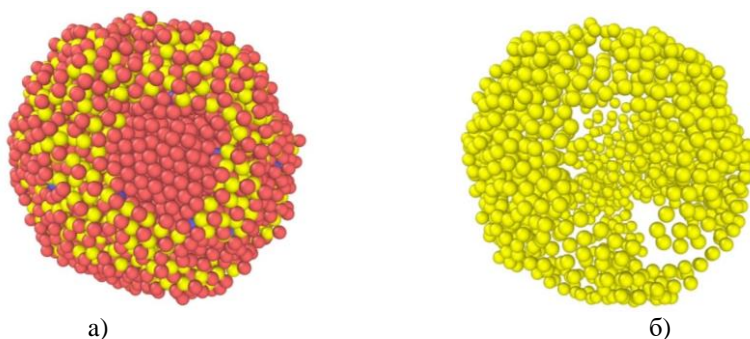


Рис. 3. Конфігурація атомів в частинках з атомним складом $Fe_{79}Cu_1Si_{20}$ за температури 300К (а– атомні конфігурації для всіх атомів та б – для атомів кремнію.

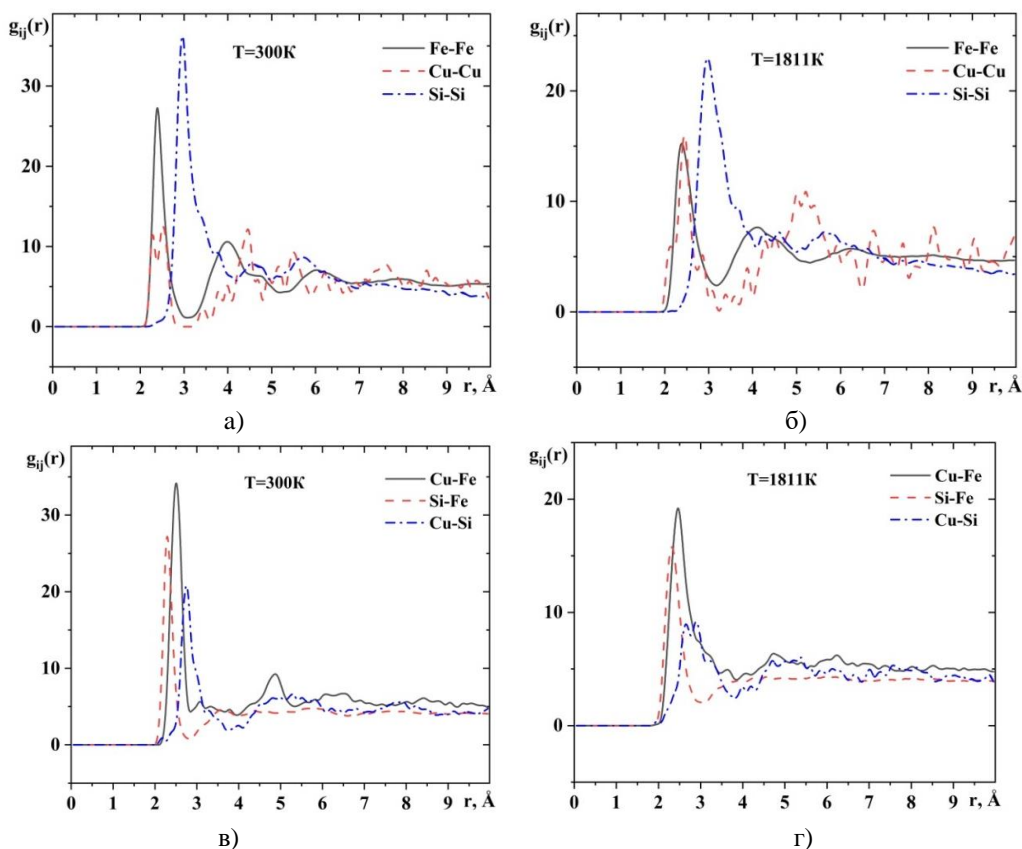


Рис. 4. Парціальні парні кореляційні функції для наночастинок $Fe_{77}Cu_3Si_{20}$ за температур 300К та 1811К.

відстаням між атомами, які знаходяться в різних координаційних сферах. Для неупорядкованих систем парні кореляційні функції мають вигляд неперервних функцій, положення максимумів яких вказує на найбільш імовірні відстані між атомами. Парні кореляційні функції обчислені для досліджених наночастинок за всіх температур не проявляють ознак наявності слідів дальнього порядку. На рисунку 4 як приклад наведено парціальні ПКФ для наночастинок з атомним складом $Fe_{77}Cu_3Si_{20}$. Аналогічні функції отримані нами для іншого вмісту атомів в наночастинках мають подібний вигляд, тому, можна стверджувати, що за кімнатної температури досліджувані частинки є аморфними. Необхідно зазначити також, що висота максимумів ПКФ на цьому рисунку є завищеною внаслідок більшого об'єму модельної комірки порівняно з розміром наночастинок.

Неочікуваною особливістю парціальних парних

кореляційних функцій для кремнію є значне зміщення положення першого максимуму в сторону більших відстаней порівняно з чистим кремнієм. Таке зміщення можливе у випадку формування розчину кремнію та заліза, внаслідок чого кремній переважно оточений атомами заліза що збільшує відстані між самими атомами кремнію.

З метою аналізу температурної залежності найбільш імовірних міжатомних відстаней для досліджених частинок було побудовано відповідні залежності, які наведені на рисунку 5.

Тенденція зміни найбільш імовірних міжатомних відстаней для наночастинок з різним атомним складом є подібною. Зокрема відстані між парами атомів зменшуються зі зниженням температури, лише міжатомні відстані Cu-Cu змінюються немонотонно. На нашу думку збільшення міжатомних відстаней між атомами міді при охолодженні до температури близько 1000 К зумовлені їхнім розчиненням в залізі,

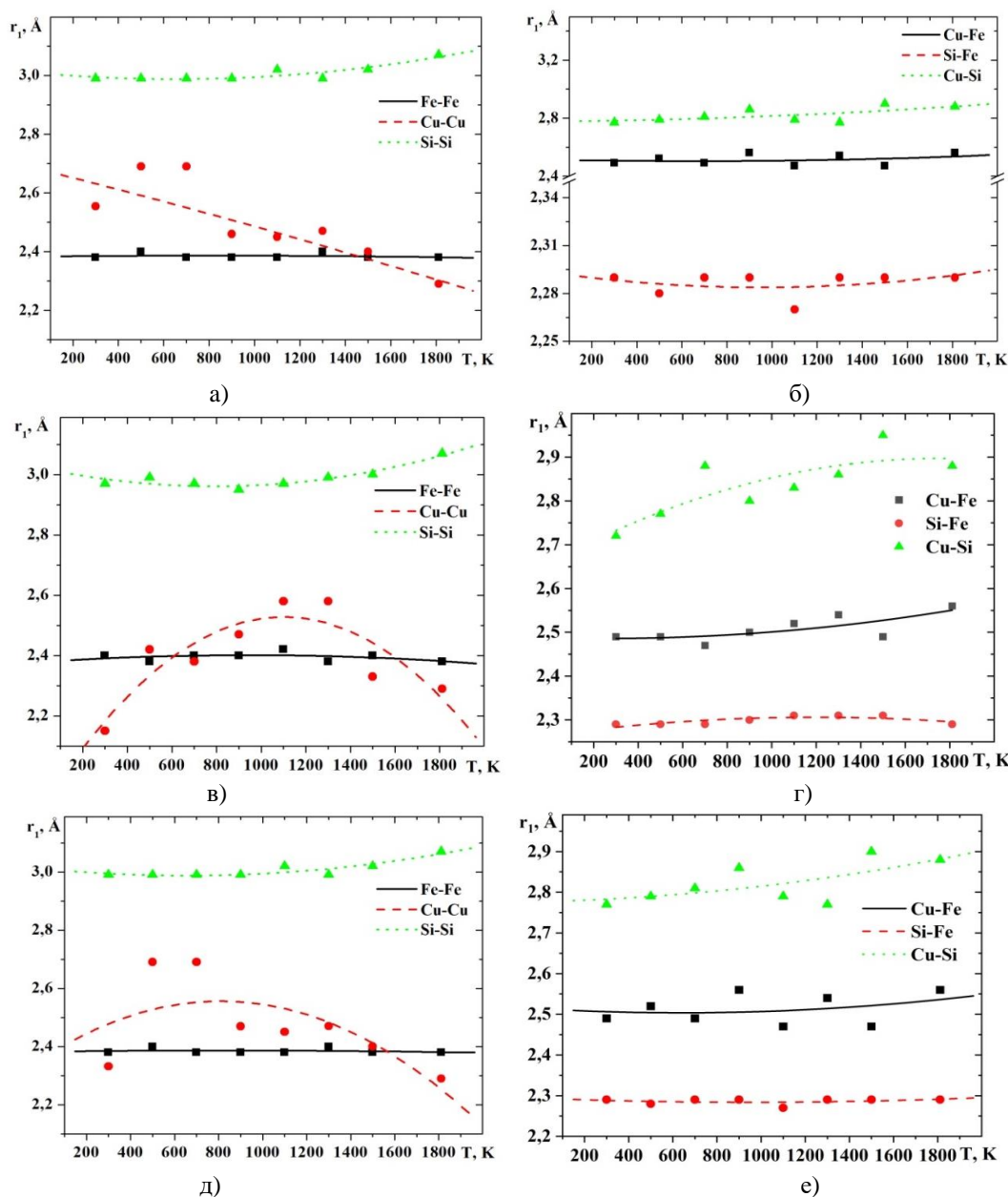


Рис. 5. Найбільш імовірні парціальні міжатомні відстані залежно від температури для наночастинок з атомним складом $Fe_{77}Cu_3Si_{20}$ (а, б), $Fe_{78}Cu_2Si_{20}$ (в, г) та $Fe_{79}Cu_1Si_{20}$ (д, е).

після чого спостерігається виділення міді в кластери з їхньою подальшою сегрегацією. В цьому випадку відстані між ними знов зменшуються.

Особливої уваги заслуговує аналіз відстаней між атомами кремнію. Як бачимо, відразу після спікання наночастинок ці відстані є набагато більшими за відстані між атомами в рідкому та кристалічному кремнії (Таблиця 1). Як впливає з наших припущень, кремній перебуває а розчині з залізом, в результаті чого в першій координаційній сфері кремнію є в основному атоми заліза. Цей факт підтверджують малі відстані між атомами заліза та кремнію (Рис. 5, б, г, е).

Детальні висновки про атомний розподіл в наночастинках можна зробити в результаті узагальненого аналізу візуалізації наночастинок на атомному рівні (Рис. 3), парціальних міжатомних відстаней (Рис. 5) та парціальних координаційних чисел (Рис 6 та 7).

Профіль функцій розподілу парціальних координаційних чисел (Рис. 6) вказує на переважаюче сусідство атомів Fe-Fe, Si-Si та часткове Cu-Si. Необхідно зазначити також, що в наночастинках після спікання наявна невелика кількість структурних одиниць з переважаючим сусідством атомів заліза та кремнію. Атоми заліза своєю чергою, формують два

типи впорядкування. Один тип з координаційним числом близьким до восьми, а інший – з координаційним числом один, або два, що можливе при формуванні ланцюжкової структури заліза. Вказані особливості відображені також на температурних залежностях найбільш імовірних значень координаційних чисел (Рис. 7). Як бачимо з температурою всі координаційні числа змінюються незначно, лише для атомів кремнію спостерігається різке зменшення координаційного числа під час швидкого охолодження наночастинок від температури близької 1000 К. Необхідно зазначити, що вказану зміну координаційного числа кремнію можна пояснити на основі попередньо встановленої сегрегації кремнію на поверхні наночастинок. Проте, слід уточнити, що в результаті сегрегації кремнію в ньому розчиняється невелика частина заліза, що веде до збільшення міжатомних відстаней та зменшення парціальних координаційних чисел Si-Si.

Описані структурні зміни можна пояснити в рамках ефекту самоочищення наночастинок. Вперше цей ефект спостерігали у випадку легування напівпровідникових наночастинок і пояснювали

Таблиця 1.

Атомні радіуси та координаційні числа компонент наночастинок					
Хім. елемент	r (емп)[37], Å	r (обч)[38], Å	r (рідк)[39], Å	Z (кр) [40]	Z (рідк) [39]
Залізо	1,4	1,51	1,24	12	10,6
Мідь	1,35	1,45	1,285	12	11,3
Кремній	1,1	1,11	1,23	4	6,4

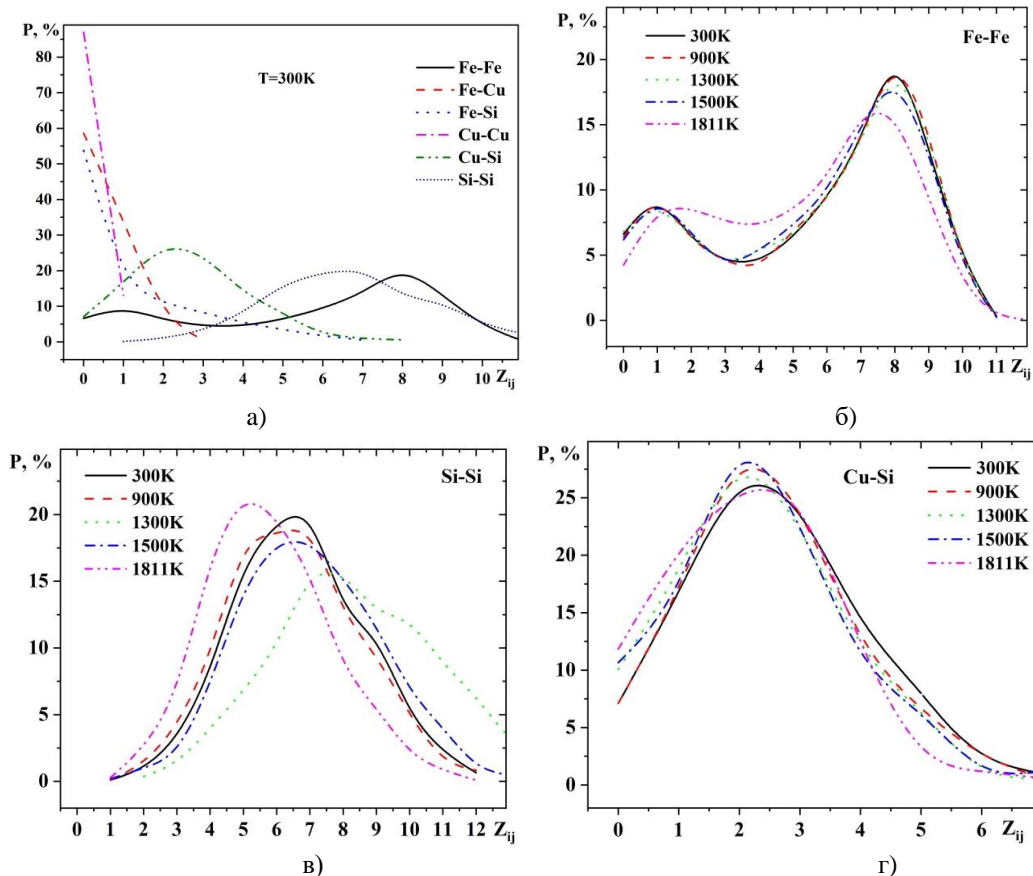


Рис. 6. Розподіл парціальних координаційних чисел для частинок Fe₇₇Cu₃Si₂₀ за різних температур.

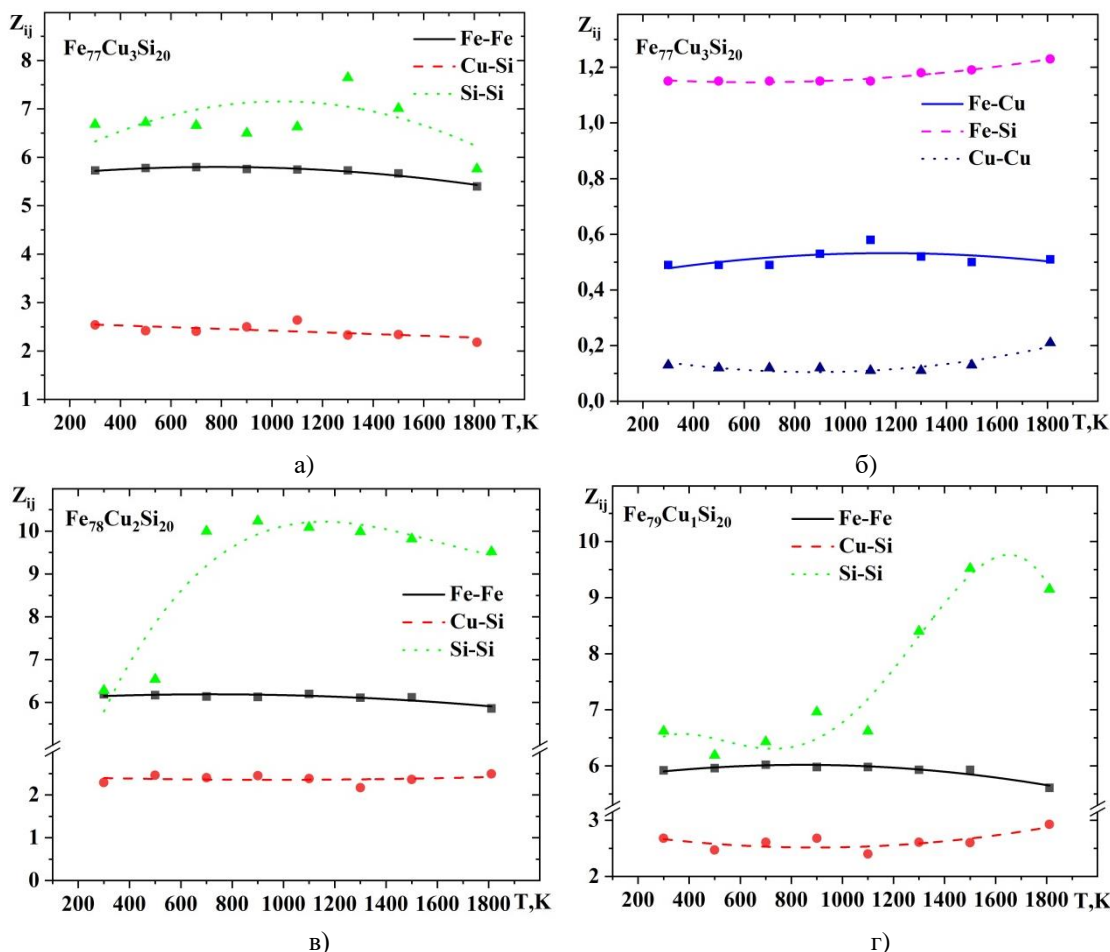


Рис. 7. Температурна залежність парціальних координаційних чисел для наночастинок після спікання.

підвищенню енергії формування розчину при зменшенні розміру частинок [41-43]. Збільшення кількості легуючої домішки і об'ємі наночастинок вело до зменшення цієї енергії, що сприяє формуванню розчинів.

Як бачимо з результатів наших досліджень, атоми кремнію а також міді «виштовхуються» з об'єму наночастинок в результаті ефекту самоочищення, формуючи атомарний розчин на поверхні сформованої в результаті спікання наночастинок. Проте, вказане явище не веде до кристалізації наночастинок під час швидкого їхнього охолодження.

Висновки

В роботі методом молекулярної динаміки досліджено процес спікання наночастинок в результаті швидкого нагрівання та охолодження. Показано, що в результаті рідкофазного спікання наночастинок відбувається сегрегація атомів кремнію та міді на поверхні наночастинок та формування поверхневого розчину цих атомів та заліза. В результаті цього, атоми заліза схильні до формування двох типів атомного впорядкування. Один тип

відповідає структурі неупорядкованого заліза з координаційним числом вісім, а інший – відповідає ланцюжковій структурі та наявний у поверхневому розчині з кремнієм та міддю.

Сегрегація атомів на поверхні наночастинок може бути пояснена ефектом самоочищення наночастинок, який зумовлений залежністю енергії формування розчину від розміру наночастинок.

Робота виконана за підтримки Національного фонду досліджень України (проект № 2022.01/0171).

Штаблавий І. – доктор фізико-математичних наук, професор кафедри фізики металів Львівського національного університету імені Івана Франка;
Попільовський Н. – аспірант кафедри фізики металів Львівського національного університету імені Івана Франка;
Никируй Ю. – кандидат фізико-математичних наук, доцент кафедри фізики металів Львівського національного університету імені Івана Франка;
Мудрий С. – доктор фізико-математичних наук, завідувач кафедри фізики металів Львівського національного університету імені Івана Франка.

- [1] V. Anthony, Teran and Andreas Bill, *Time-evolution of grain size distributions in random nucleation and growth crystallization processes*, Phys. Rev. B, 81(7), 075319 (2010); <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.81.075319>.
- [2] M. El Wahabi, L. Gavard, F. Montheillet, J.M. Cabrera, J.M. Prado, *Effect of initial grain size on dynamic recrystallization in high purity austenitic stainless steels*, Acta Materialia, 53(17), 4605 (2005); <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2005.06.020>.
- [3] J. Pelleg, Grain Size Effect on Mechanical Properties. In: Mechanical Properties of Silicon Based Compounds: Silicides (Engineering Materials, Springer, Cham, 2019); https://doi.org/10.1007/978-3-030-22598-8_13.
- [4] R.B. Figueiredo, T.G. Langdon, *Effect of grain size on strength and strain rate sensitivity in metals*. J Mater Sci, 57, 5210 (2022); <https://doi.org/10.1007/s10853-022-06919-0>.
- [5] M. Naghizadeh, H. Mirzadeh, *Effects of Grain Size on Mechanical Properties and Work-Hardening Behavior of AISI 304 Austenitic Stainless Steel*, Steel research international, 90(10), 1900153 (2019); <https://doi.org/10.1002/srin.201900153>.
- [6] J. M. Maita, S. Rommel, J. R. Davis, H. Ryou, J. A. Wollmershauser, E. P. Gorzkowski, B. N. Feigelson, M. Aindow, S. Lee, *Grain size effect on the mechanical properties of nanocrystalline magnesium aluminate spinel*, Acta Materialia, 251, 118881 (2023); <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2023.118881>.
- [7] Y. Qin, P. Wen, D. Xia, H. Guo, M. Voshage, L. Jauer, Y. Zheng, J. H. Schleifenbaum, Y. Tian, *Effect of grain structure on the mechanical properties and in vitro corrosion behavior of additively manufactured pure Zn*, Additive Manufacturing, 33, 101134 (2020); <https://doi.org/10.1016/j.addma.2020.101134>.
- [8] K. Zhou, B. Liu, Y. Yao, K. Zhong, *Effects of grain size and shape on mechanical properties of nanocrystalline copper investigated by molecular dynamics*, Materials Science and Engineering: A, 615, 92 (2014); <https://doi.org/10.1016/j.msea.2014.07.066>.
- [9] L.-C. Zhang, Z. Jia, F. Lyu, S.-X. Liang, *A review of catalytic performance of metallic glasses in wastewater treatment: Recent progress and prospects*, Prog. Mater. Sci., 105, 100576 (2019); <https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2019.100576>.
- [10] M. Jakab, J. Scully, *On-demand release of corrosion-inhibiting ions from amorphous Al–Co–Ce alloys*, Nature Mater, 4, 667 (2005); <https://doi.org/10.1038/nmat1451>.
- [11] Y.C. Li, C. Zhang, W. Xing, S.F. Guo, L. Liu, *ACS Design of Fe-Based Bulk Metallic Glasses with Improved Wear Resistance*, Appl. Mater. Interfaces, 10, 43144 (2018); <https://doi.org/10.1021/acsami.8b11561>.
- [12] A. L. Greer, Physical Metallurgy (Fifth Edition), Chapter 4 - Metallic Glasses, (Elsevier, Amsterdam, 2014); <https://doi.org/10.1016/B978-0-444-53770-6.00004-6>.
- [13] K. Russew, L. Stojanova, Most Important Methods for Production of Amorphous Metallic Alloys. In: Glassy Metals (Springer, Berlin, Heidelberg, 2016); https://doi.org/10.1007/978-3-662-47882-0_2.
- [14] Si. Yamaura, W. Zhang, A. Inoue, Introduction to Amorphous Alloys and Metallic Glasses. Novel Structured Metallic and Inorganic Materials (Springer, Singapore, 2019); https://doi.org/10.1007/978-981-13-7611-5_1.
- [15] Y. Yokoyama, E. Mund, A. Inoue, L. Schultz, *Production of Zr₅₅Cu₃₀Ni₅Al₁₀ Glassy Alloy Rod of 30 mm in Diameter by a Cap-Cast Technique*, Mater. Trans., 48, 3190 (2007); <https://doi.org/10.2320/matertrans.MRP2007164>.
- [16] W.H. Wang, *Roles of minor additions in formation and properties of bulk metallic glasses*, Prog. Mater. Sci. 52, 540 (2007); <https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2006.07.003>.
- [17] N. Nishiyama, K. Takenaka, H. Miura, N. Saidoh, Y. Zeng, A. Inoue, *The world's biggest glassy alloy ever made*, Intermetallics, 30, 19 (2012); <https://doi.org/10.1016/j.intermet.2012.03.020>.
- [18] J. Schroers, *Processing of Bulk Metallic Glass*, Adv. Mater. 22, 1566 (2010); <https://doi.org/10.1002/adma.200902776>.
- [19] O. Diegel, Comprehensive Materials Processing, 10.02 - Additive Manufacturing: An Overview, (Elsevier, Amsterdam, 2014); <https://doi.org/10.1016/B978-0-08-096532-1.01000-1>.
- [20] E. Tempelman, H. Shercliff and B. Ninaber van Eyben, Manufacturing and Design Understanding the principles of how things are made (Elsevier, Amsterdam, 2014); <https://doi.org/10.1016/C2011-0-08438-7>.
- [21] D. Godec, J. Gonzalez-Gutierrez, A. Nordin, E. Pei, J. Ureña Alcázar, A Guide to Additive Manufacturing (Springer, Cham, 2022); <https://doi.org/10.1007/978-3-031-05863-9>.
- [22] Y. Shen, Y. Li, C. Chen, H. -L. Tsai, *3D printing of large, complex metallic glass structures*, Materials & Design, 117, 213 (2017); <https://doi.org/10.1016/j.matdes.2016.12.087>.
- [23] C. Zhang, D. Ouyang, S. Pauly, L. Liu, *3D printing of bulk metallic glasses*, Materials Science and Engineering: R: Reports, 145, 100625 (2021); <https://doi.org/10.1016/j.mser.2021.100625>.
- [24] Z. J. Liu, Q. Cheng, Y. Wang, Y. Li, J. Zhang, *Sintering neck growth mechanism of Fe nanoparticles: A molecular dynamics simulation*, Chemical Engineering Science, 218, 115583 (2020); <https://doi.org/10.1016/j.ces.2020.115583>.
- [25] J. Guo, P. Ji, L. Jiang, G. Lin Y. Meng, *Femtosecond laser sintering Al nanoparticles: A multiscale investigation of combined molecular dynamics simulation and two-temperature model*, Powder Technology, 407, 117682 (2022); <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2022.117682>.
- [26] S. Kurian, R. Mirzaeifar, *Selective laser melting of aluminum nano-powder particles, a molecular dynamics study*, Additive Manufacturing, 35, 101272 (2020); <https://doi.org/10.1016/j.addma.2020.101272>.

- [27] K. Peng, H. Huang, H. Xu, Y. Kong, L. Zhu, Z. Liu, *A molecular dynamics study of laser melting of densely packed stainless steel powders*, International Journal of Mechanical Sciences, 243, 108034 (2023); <https://doi.org/10.1016/j.ijmecsci.2022.108034>.
- [28] A. Abedini, A. Montazeri, A. Malti, A. Kardani, *Mechanical properties are affected by coalescence mechanisms during sintering of metal powders: Case study of Al-Cu nanoparticles by molecular dynamics simulation*, Powder Technology, 405, 117567 (2022); <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2022.117567>.
- [29] J. Nandy, N. Yedla, P. Gupta, H. Sarangi, S. Sahoo, *Sintering of AlSi10Mg particles in direct metal laser sintering process: A molecular dynamics simulation study*, Materials Chemistry and Physics, 236, 121803 (2019); <https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2019.121803>.
- [30] <https://www.lammps.org>.
- [31] <https://www.ovito.org/>.
- [32] M. I. Baskes, J. S. Nelson, and A. F. Wright, *Semiempirical modified embedded-atom potentials for silicon and germanium*, Phys. Rev. B, 40(9), 6085 (1989); <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.40.6085>.
- [33] B. Jelinek, S. Groh, M. F. Horstemeyer, J. Houze, S. G. Kim, G. J. Wagner, A. Moitra, and M. I. Baskes, *Modified embedded atom method potential for Al, Si, Mg, Cu, and Fe alloys*, Phys. Rev. B, 85(24), 245102 (2012); <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.85.245102>.
- [34] A. Malti, A. Kardani, A. Montazeri, *An insight into the temperature-dependent sintering mechanisms of metal nanoparticles through MD-based microstructural analysis*, Powder Technol., 386, 30 (2021); <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2021.03.037>.
- [35] W.D. Kingery, M. Berg, *Study of the initial stages of sintering solids by viscous flow, evaporation-condensation, and self-diffusion*, J. Appl. Phys., 26 (10), 1205 (1955); <https://doi.org/10.1063/1.1721874>.
- [36] J. P. Hansen, I. R. McDonald, *Theory of Simple Liquids (Fourth Edition)* (Elsevier, Amsterdam, 2013); <https://doi.org/10.1016/C2010-0-66723-X>.
- [37] J.C. Slater, *Atomic Radii in Crystals*, The Journal of Chemical Physics., 41(10), 3199 (1964); <https://doi.org/10.1063/1.1725697>.
- [38] E. Clementi, D.L. Raimondi, W.P. Reinhardt, *Atomic Screening Constants from SCF Functions. II. Atoms with 37 to 86 Electrons*, The Journal of Chemical Physics., 47(4), 1300 (1967); <https://doi.org/10.1063/1.1712084>.
- [39] Y. Waseda, *The Structure of Non-Crystalline Materials: Liquids and Amorphous Solids* (McGraw-Hill International Book Company, New York, 1980);
- [40] B. E. Douglas, S. -M. Ho, *Structure and Chemistry of Crystalline Solids* (Springer, New York, 2006); <https://doi.org/10.1007/0-387-36687-3>.
- [41] A. L. Efros and M. Rosen, *The Electronic Structure of Semiconductor Nanocrystals*, Annu. Rev. Mater. Sci., 30, 475 (2000); <https://doi.org/10.1146/annurev.matsci.30.1.475>.
- [42] S.C. Erwin, L. Zu, M.I. Haftel, et al., *Doping semiconductor nanocrystals*, Nature, 436, 91 (2005); <https://doi.org/10.1038/nature03832>.
- [43] G. M. Dalpian and J.R. Chelikowsky, *Self-Purification in Semiconductor Nanocrystals*, Phys. Rev. Lett., 96, 226802 (2006); <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.96.226802>.

I. Shtablavyi, N. Popilovskyi, Yu. Nykyruy, and S. Mudry

Selective laser sintering of amorphous nanoparticles: Molecular dynamics simulations

Department of Metal Physics, Ivan Franko National University of Lviv, Lviv, Ukraine, ihor.shtablavyi@lnu.edu.ua

The paper investigates the process of liquid-phase sintering of amorphous iron-based nanoparticles by the method of molecular dynamics simulations. The classical molecular dynamics package LAMMPS was used for modeling. Visual analysis of the atomic configurations of nanoparticles during their rapid cooling revealed the self-purification effect of the particles. Partial pair correlation functions and coordination number distribution functions were used to analyze the atomic structure of nanoparticles after sintering. As a result of the analysis of the main structural parameters, which were obtained using the specified functions, differences in the atomic composition and structure of the volume and surface of nanoparticles were established.

Keywords: Selective laser melting, nanoparticles, liquid phase sintering, molecular dynamics method, pair correlation functions, coordination number distribution functions.