

УДК 669.017.165 : 616.314-7

Оригинальная статья

Комплексный подход к исследованию структуры тернарного сплава CoCrMo: растровая электронная микроскопия и атомистическое моделирование

Д.А. Кравченко, А.Ю. Колосов, Д.Н. Соколов, Н.И. Непша, С.С. Богданов,
Н.Ю. Сдобняков

*ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»
170002, Россия, Тверь, Садовый пер., 35
nsdobnyakov@mail.ru*

DOI: 10.26456/pcascnn/2024.16.198

Аннотация: На примере тернарного наносплава *CoCrMo* проведено сравнительное исследование с применением экспериментальной методики растровой электронной микроскопии и атомистического моделирования методом молекулярной динамики. С использованием технологии селективного лазерного плавления на основе порошка *PP-KX28M6* был изготовлен образец, для которого идентифицирован неоднородный состав поверхности относительно присутствия кобальта и хрома, т.е. были обнаружены участки, одновременно обогащенные и обедненные данными элементами, что говорит о возможности формирования различных интерметаллидов на их основе. В процессе атомистического моделирования три наночастицы тернарного наносплава *CoCrMo* с числом атомов 10000, 15000 и 30000 были подвергнуты последовательному циклу нагревания и охлаждения, в том числе с идентификацией фазовых переходов, отвечающих плавлению и кристаллизации соответственно. Определены соответствующие температуры начала и завершения фазового перехода. Описаны закономерности структурной и поверхностной сегрегации в тернарном наносплаве *CoCrMo*. Отмечено, что для наночастиц, содержащих 10000 атомов, формируется лишь оболочка из атомов кобальта без формирования ядра, в то время как для наночастиц, содержащих 15000 и 30000 атомов формировалась луковичная структура. Атомы хрома формируют или ядро наночастицы как при $N=10000$ или периферийную область как при $N=15000$ и 30000. Атомы молибдена ведут себя индифферентно, т.е. распределены равномерно по всему объему исследуемых наночастиц.

Ключевые слова: *тернарный сплав CoCrMo, технология селективного лазерного плавления, микроструктура поверхности, метод молекулярной динамики, структурная и поверхностная сегрегация.*

1. Введение

В настоящее время технология селективного лазерного плавления (SLM – selective laser melting) активно применяется как для получения макроскопических образцов [1], так и для создания металлических наноструктур и наночастиц [2-4]. SLM позволяет использовать для производства изделий новые принципы построения, такие как биомиметический подход [2], заключающийся в имитации биологических структур и их созданных эволюцией конструкционных и структурных преимуществ; топологическая оптимизация, позволяющая снижать вес изделий без ущерба для других свойств. Активное развитие и широкий спектр возможных применений делает технологию селективного лазерного плавления перспективным объектом для исследования, в том числе

© Д.А. Кравченко, А.Ю. Колосов, Д.Н. Соколов, Н.И. Непша, С.С. Богданов, Н.Ю. Сдобняков, 2024

применительно к наноразмерным объектам. В этой связи интерес представляют исследования процессов структурообразования, а также определение термодинамических характеристик многокомпонентных порошков, включая размерные эффекты [5]. Комплексный подход, сочетающий экспериментальное исследование структуры наночастиц и атомистическое моделирование закономерностей структурообразования на примере бинарных систем, апробировался нами в [6, 7]. Целью данной работы являлось исследование структуры тернарного сплава *CoCrMo* методом электронной микроскопии (на примере образца, напечатанного на SLM принтере) и с использованием атомистического моделирования (на примере наночастицы *CoCrMo*, полученной в результате последовательного цикла нагрева и охлаждения).

2. Методика SLM печати

Экспериментальная методология получения образца была подробно описана в [8]. В качестве SLM принтера использовалась модель 3DLAM Mini от компании 3DLAM со следующими параметрами: мощность лазерного излучения – до 200 Вт, применяется иттербиевый волоконный лазер с длиной волны излучения 1070 нм; высота порошкового слоя – 25 мкм, глубина проникновения луча – 1 слой, температура пятна лазера в точке плавления от 1360 до 1500°C, диаметр пятна расплава 33 микрона, фактический размер зерен порошка составляет 2,7-7,5 мкм, при этом компания производитель заявляет наличие фракций до 45 мкм.

Для порошка ПР-KX28M6 изготовителем был заявлен состав, приведенный в Таблице 1.

Таблица 1. Химический состав порошка ПР-KX28M6.

<i>Fe</i>	<i>C</i>	<i>Co</i>	<i>Cr</i>	<i>Ni</i>	<i>Mo</i>
< 0,75	< 0,16	63,0 – 69,0	26,0 – 30,0	< 0,10	5,0 – 7,0

3. Результаты исследования микроструктуры

В [8] микроструктура образцов исследовалась на растровом электронном микроскопе JEOL JSM-6610LV в режимах вторичных и отраженных электронов. Исследования напечатанного образца в режиме вторичных электронов и в режиме отраженных электронов при ускоряющем напряжении 15 кВ представлены на рис. 1.

Образцы имеют гомогенную структуру с минимальным количеством межзеренных границ. Есть основания полагать, что полученный сплав *CoCrMo* обладает относительно равномерным распределением компонентов в объеме образца на макроскопическом уровне. Элементный анализ поверхности образца (см. рис. 1; с использованием системы рентгеновского энергодисперсионного микроанализа Oxford INCA Energy

350), показал в достаточной мере неоднородный состав поверхности относительно присутствия кобальта и хрома, т.е. были обнаружены участки, одновременно обогащенные и обедненные данными элементами, что может быть косвенным признаком формирования интерметаллидов на их основе. Подобный результат в частности наблюдался в работе [9]. Энергодисперсионный микроанализ в [9] показал, что основной массе материала кобальт, хром и молибден распределены равномерно. Однако необходимо отметить, что как при использовании порошка, полученного «ручным» механическим перемешиванием, так и порошка, полученного механическим легированием, фиксируются отдельные включения частиц хрома и молибдена, а также их соединений с кобальтом и без него. Таким образом, на наноуровне структура тернарного сплава *CoCrMo* является более сложной. С прогностической точки зрения именно атомистическое моделирование позволяет уточнить закономерности структурной и поверхностной сегрегации на масштабах порядка 10 нанометров.

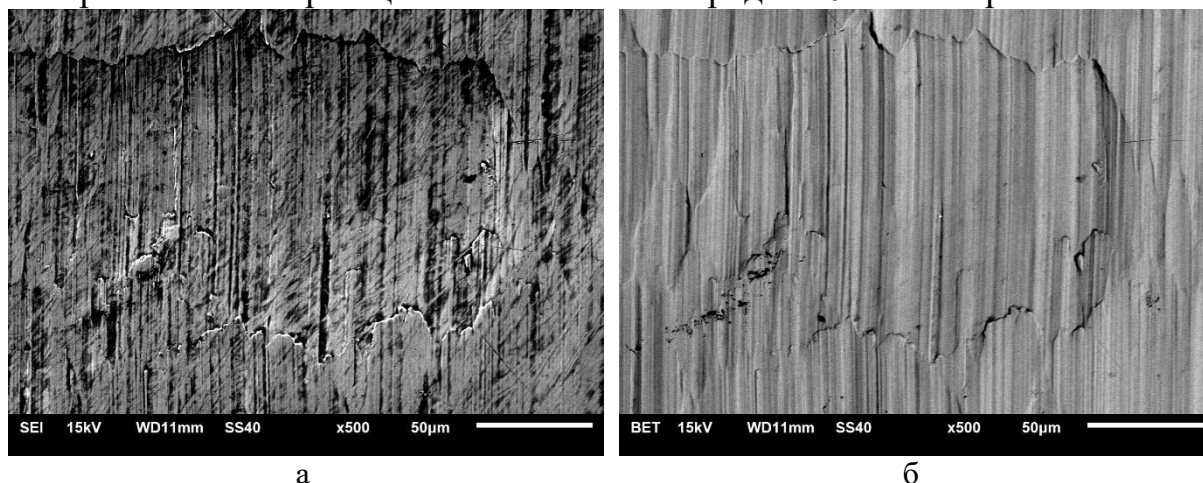


Рис. 1. Микроструктура напечатанного образца из порошка ПР-КХ28М6 в режимах вторичных электронов (а) и отраженных электронов (б).

4. Методика атомистического моделирования

Для проведения молекулярно-динамического (МД) эксперимента (цикла последовательного нагревания и охлаждения) для тернарных частиц *CoCrMo*, состоящих из 10000 (диаметр наночастицы $d=9,2$ нм), 15000 ($d=12$ нм) и 30000 ($d=15,5$ нм) атомов (элементный состав представлен в Таблице 2), использовалось ПО LAMMPS [10] с потенциалом сильной связи [11, 12]. В исходном состоянии использовались наночастицы тернарного сплава *CoCrMo* с равномерным распределением компонентов, конфигурациях которых была создана в ПО Metropolis [13, 14]. С целью изучения закономерностей формирования конечной структуры в МД экспериментах использовалась достаточно высокая скорость изменения температуры – 1 К/пс. Такие скорости уже

доступны в экспериментальных исследованиях. Как отмечено в [15] при ионно-ассистированном осаждении металлическая пленка формируется в условиях гипервысоких скоростей охлаждения, поскольку скорость «кристаллизации» (охлаждения каскадов) достигает 10^{12} - 10^{13} К/с [15], хотя для SLM технологии пока технологически доступны скорости 10^8 К/с [16].

Таблица 2. Композиция тернарного сплава *CoCrMo* для атомистического моделирования.

<i>Cr</i> , ат. %	<i>Co</i> , ат. %	<i>Mo</i> , ат. %
29	63	8

Для нахождения перекрестных параметров межатомного взаимодействия использовалось так называемое правило Лоренца-Бертло – когда параметры A, ζ находятся как средние геометрические величины, а параметры p, q, r_0 как средние арифметические (см. Таблицу 3).

Таблица 3. Параметры потенциала сильной связи [11, 12].

Связь	A , эВ	ζ , эВ	p	q	r_0 , Å
<i>Co-Co</i>	0,0950	1,4880	11,6040	2,2860	2,5131
<i>Mo-Mo</i>	0,2043	2,5097	10,0154	2,0511	2,7253
<i>Cr-Cr</i>	0,0407	1,1012	13,1852	0,8993	2,4981
<i>Co-Mo</i>	0,1393	1,9325	10,8097	2,1685	2,6192
<i>Co-Cr</i>	0,0622	1,2801	12,3946	1,5926	2,5056
<i>Mo-Cr</i>	0,0912	1,6624	11,6003	1,4752	2,6117

Такой подход апробирован, в частности для бинарных частиц в [5, 17], а для тернарных и многокомпонентных в [18-20] Параметр обрезки потенциала сильной связи r_{cut} соответствует условиям, предложенным в работах [11, 12].

В процессе МД моделирования наночастицы нагревались до 1700 К, а затем охлаждались до 300 К, начальная температура составляла 300 К. Время релаксации наночастицы перед каждым нагреванием и охлаждением составляло 15 пс. В программе LAMMPS [10] использовался классический алгоритм МД, в качестве алгоритма интегрирования уравнений движения использовался метод Верле [21]. Для термостатирования был выбран алгоритм Нозе-Гувера [22]. Анализ структуры тернарных наночастиц проводился методом сопоставления полиэдральных шаблонов (polyhedral template matching), реализованным в ПО Ovito [23].

5. Анализ результатов атомистического моделирования

На рис. 2 представлены калорические зависимости потенциальной части удельной внутренней энергии, отвечающие процессам нагревания (кривая 1) и охлаждения (кривая 2), для наночастиц различного размера

тернарного сплава $CoCrMo$ (см. Таблицу 2). В выбранном температурном интервале происходили фазовые переходы, отвечающие соответственно плавлению и кристаллизации. Отметим некоторые особенности поведения зависимостей $U(T)$. Во-первых, полученные в результате кристаллизации конфигурации отвечают более низким значениям удельной энергии, причем с уменьшением размера системы различие достигает 0,1 эВ/атом. Во-вторых, для всех трех рассмотренных наночастиц характерно некоторое увеличение значений удельной энергии в конце процесса плавления, что особенно заметно на рис. 2 а. В-третьих, как и следовало ожидать [5-7, 17-20], фазовые переходы, отвечающие плавлению и кристаллизации, происходят в некотором интервале температур (см. Таблицу 3). Причем величины ΔT_m и ΔT_c ведут себя немонотонно при изменении размера наночастиц. Отметим также определенную сложность при оценке значений теплот фазовых переходов, в частности если для величины H_c визуальна понятна тенденция её уменьшения с увеличением размера, то с величиной H_m не все так однозначно.

Таблица 3. Характерные температуры, описывающие фазовые переходы (плавление (melting) и кристаллизация (crystallization)) в наночастицах тернарного сплава $CoCrMo$.

N	$T_m^{(start)}$, К	$T_m^{(end)}$, К	$T_c^{(start)}$, К	$T_c^{(end)}$, К	ΔT_m , К	ΔT_c , К
10000	1475	1560	1000	895	85	105
15000	1540	1590	990	830	50	160
30000	1570	1640	970	855	70	115

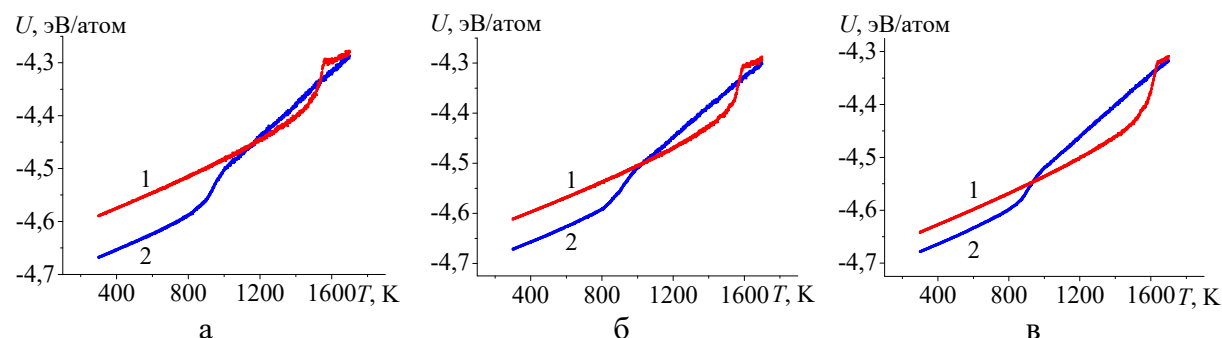


Рис. 2. Зависимости $U(T)$ наночастиц тернарного сплава $CoCrMo$: а – 10000 атомов, б – 15000 атомов, в – 30000 атомов.

С целью идентификации закономерностей структурной и поверхностной сегрегации были проанализированы конечные конфигурации наночастиц тернарного сплава $CoCrMo$ с использованием ПО Ovito [23]. На рис. 3 представлено распределение элементов в наночастице тернарного сплава $CoCrMo$, а также определены локальные фазы. Исходя из анализа элементного состава наночастиц можно констатировать, что после плавления наночастиц $CoCrMo$ сформировалась оболочка из атомов кобальта, также атомы кобальта присутствуют в

центральной части наночастиц. К процессу кристаллизации и последующего охлаждения оболочка из кобальта оказалась устойчива: для размера наночастицы из 10000 атомов оболочка содержит до 6 монослоев, в то время как для 15000 и 30000 атомов 3-4 монослоя. Конфигурации наночастиц, состоящих из 15000 и 30000 атомов соответствуют луковичной структуре (onion-like structure [24]), для наночастицы, состоящей из 10000 атомов числа атомов кобальта в центральной части не хватило для построения ядра. Отметим, что атомы молибдена распределены практически равномерно по объему наночастицы, а атомы хрома или формируют ядро наночастицы (см. рис. 3 б) или внутренний периферийный слой (см. рис. 3 д, з), но при этом они также могут находиться в центральной части наночастицы (см. рис. 3 з).

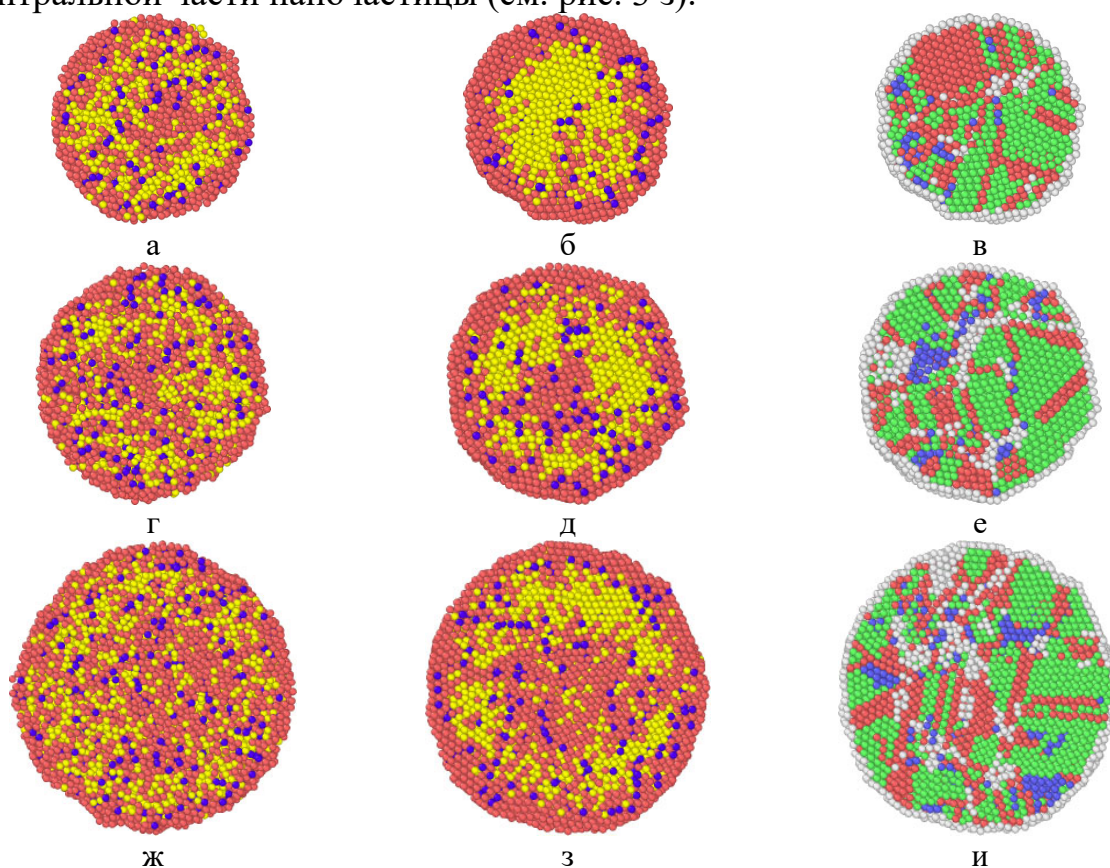


Рис. 3. Конфигурации (экваториальные сечения) наночастиц тернарного сплава *CoCrMo*: а, б, в – 10000 атомов, г, д, е – 15000 атомов, ж, з, и – 30000 атомов. Вкладки а, б, г, д, ж, з соответствуют распределению атомов в начале и в конце процесса охлаждения соответственно (розовым цветом показаны атомы кобальта, фиолетовым – молибдена, желтым – хрома), а вкладки в, е, и – распределению локальных фаз (зеленым цветом отмечены локальные ГЦК структуры, красным – ГПУ, синим – ОЦК, белым показаны атомы, принадлежность которых не удалось идентифицировать к вышеуказанным локальным структурам).

Полученные закономерности (наличие ОЦК фазы, неравномерное распределение локальных ГЦК и ГПУ фаз в объеме частицы) могут как раз

свидетельствовать об образовании различных интерметаллидов, идентификация которых была произведена в [9]. Отличительной особенностью идентификации локальных структур для наночастиц тернарного сплава *CoCrMo* (в отличие от результатов [5, 6, 18-20]) является наличие атомов, принадлежность которых не удалось идентифицировать к кристаллическим локальным структурам (ГЦК, ГПУ и ОЦК) не только на поверхности наночастиц, но и в её центральной части. Этот эффект может также свидетельствовать о наличии специфических фаз, в частности эpsilon-фазы [9], которые не могут быть идентифицированы ПО [23].

Интерес представляет пространственное распределение локальных фаз в наночастицах тернарного сплава *CoCrMo*. На рис. 4 показаны распределения, соответствующие конфигурациям рис. 3 в, е, и. Атомы, неидентифицированные в ПО [23], удалены. Доля неидентифицированных атомов практически не зависит от размера наночастицы тернарного сплава *CoCrMo* и составляет порядка 25% от общего числа атомов. При этом распределение кристаллических фаз (ГЦК, ГПУ, ОЦК) меняется нелинейно. Так доля атомов, формирующих локальную ГЦК структуру, с ростом числа атомов изменяется следующим образом – 38, 41 и 35%; локальную ГПУ структуру – 32, 26 и 30%; локальную ОЦК структуру – 5, 8 и 10% соответственно. Визуально атомы, формирующие локальные ГЦК и ГПУ фазы формируют остов наночастицы, связующим «элементом» которого являются именно атомы, формирующие локальную ОЦК фазу.

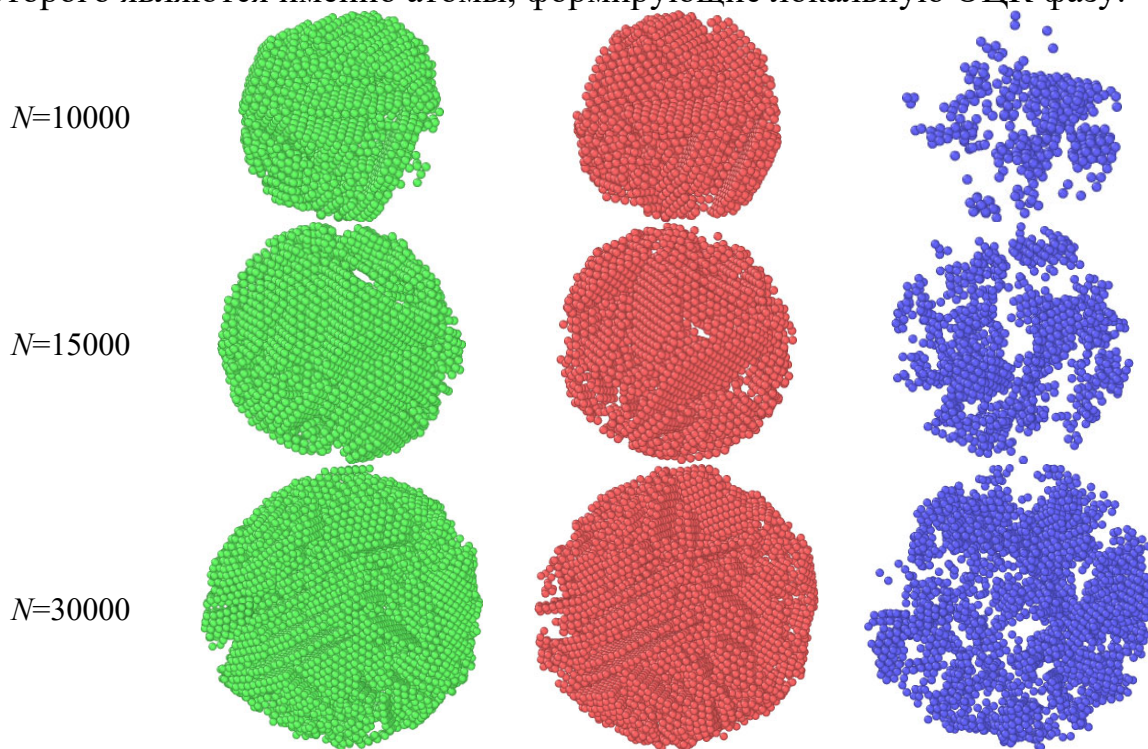


Рис. 4. Пространственное распределение локальных фаз в наночастицах тернарного сплава *CoCrMo*. Цветовое обозначение соответствует рис. 3.

6. Заключение

Как было показано в [25] закономерности поверхностной и структурной сегрегации могут быть обусловлены следующими факторами:

- относительной прочностью связей $A-A$, $B-B$ и $A-B$ между атомами (в данной случае используется терминология работы [24]). Если связь $A-A$ или $B-B$ сильнее, это способствует сегрегации (элемент, формирующий более сильные связи, будет иметь тенденцию сегрегировать к ядру частицы), тогда как более сильные $A-B$ связи будут способствовать тенденции к равномерному смешению;

- поверхностной энергией: металл с более низкой поверхностной энергией будет сегрегировать к поверхности наночастицы;

- атомным размером: он имеет отношение к ослаблению эффектов механического напряжения в наночастице, с тенденцией для более мелких атомов занимать положение в центре частицы;

- специфическими электронными эффектами для некоторых металлов (например, направленность связей);

- перераспределением заряда: перенос заряда между атомами означает, что более электроотрицательный атом будет иметь тенденцию к сегрегации на поверхность.

Не вступая в дискуссию о степени влияния и/или доминирующей роли каждого из этих факторов (методика исследований, описанная в данной работе, позволяет оценивать степень влияния на закономерности поверхностной сегрегации только факторов 1-3) для многокомпонентных наночастиц, в том числе для исследуемого в данной работе тернарного сплава $CoCrMo$, отметим, что размерный эффект, а также скорость нагревания и охлаждения могут существенно влиять на закономерности поверхностной сегрегации. В частности, «активация диффузионного механизма» на наш взгляд определяется именно скоростью нагревания и охлаждения. Таким образом, сценарии перемещения определенного сорта атомов могут быть не в полной мере реализованы в процессе моделирования. Этот эффект может быть частично нивелирован за счет длительного процесса релаксации в температурном интервале, отвечающем концу процесса кристаллизации (т.е. вблизи $T_c^{(end)}$), или при конечной температуре моделирования, что требует больших вычислительных затрат. Кроме того, важным результатом при исследовании наночастиц тернарного сплава $CoCrMo$ можно считать дополнительное подтверждение концепции, которая была высказана в [19, 20], о том, что для многокомпонентных наночастиц можно идентифицировать три типа атомов с точки зрения их участия в сегрегационных процессах: 1) сорт атомов, проявляющих тенденцию к поверхностной сегрегации; 2) атомы, формирующие ядро наночастицы, а

также ее периферийные области; 3) атомы, индифферентные к процессам сегрегации (их распределение либо остается тем же, что в начальной конфигурации, либо становится однородным по всему объему наночастицы). В данной работе к первому типу атомов принадлежали атомы кобальта, ко второму – атомы хрома и кобальта (с учетом размерного эффекта), а к третьему – атомы молибдена.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 24-23-00039, <https://rscf.ru/en/project/24-23-00039/>).

Библиографический список:

1. **Yang, L.** Additive manufacturing of metals: the technology, materials, design and production / L. Yang, K. Hsu, B. Baughman et al. // Springer Series in Advanced Manufacturing. – Cham: Springer, 2017. – VII+168 p. DOI: 10.1007/978-3-319-55128-9.
2. **Zglobicka, I.** 3D diatom-designed and selective laser melting (SLM) manufactured metallic structures / I. Zglobicka, A. Chmielewska, E. Topal et al. // Scientific Reports. – 2019. – V. 9. – Art. № 19777. – 9 p. DOI: 10.1038/s41598-019-56434-7.
3. **Li, K.** Additive manufacturing of a Co-Cr-W alloy by selective laser melting: In-situ oxidation, precipitation and the corresponding strengthening effects / K. Li, Z. Wang, K. Song et al. // Journal of Materials Science & Technology. – 2022. – V. 125. – P. 171-181. DOI: 10.1016/j.jmst.2022.01.036.
4. **Wang, Z.** Selective laser melting of nanostructured Al-Y-Ni-Co alloy / Z. Wang, S. Scudino, J. Eckert, K.G. Prashanth // Manufacturing Letters. – 2020. – V. 25. – P. 21-25. DOI: 10.1016/j.mfglet.2020.06.005.
5. **Богданов, С.С.** Закономерности структурообразования в бинарных наночастицах ГЦК металлов при термическом воздействии: атомистическое моделирование. Монография / С.С. Богданов, Н.Ю. Сдобняков. – Тверь: Издательство верского государственного университета, 2023. – 143 с.
6. **Sdobnyakov, N.** Solution combustion synthesis and Monte Carlo simulation of the formation of CuNi integrated nanoparticles / N. Sdobnyakov, A. Khort, V. Myasnichenko et al. // Computational Materials Science. – 2020. – V. 184. – Art. № 109936. – 12 p. DOI: 10.1016/j.commatsci.2020.109936.
7. **Талызин, И.В.** Идентификация сложных наноструктур ядро-оболочка по радиальным распределениям локальной плотности компонентов / И.В. Талызин, С.С. Богданов, В.М. Самсонов и др. // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2022. – Вып. 14. – С. 307-320. DOI: 10.26456/pcascnn/2022.14.307.
8. **Кравченко, Д.А.** Исследование структуры и свойств стоматологических коронок, изготовленных методом селективного лазерного плавления и по технологии литья в форме / Д.А. Кравченко, О.Н. Медведева // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2022. – Вып. 14. – С. 652-661. DOI: 10.26456/pcascnn/2022.14.652.
9. **Сапрыкина, Н.А.** Формирование сплава системы кобальт-хром-молибден методом селективного лазерного плавления / Н.А. Сапрыкина, А.А. Сапрыкин, Ю.П. Шаркеев и др. // Системы. Методы. Технологии. – 2021. – № 2 (50). – С. 31-37. DOI: 10.18324/2077-5415-2021-2-31-37.
10. LAMMPS Molecular Dynamics Simulator. – Режим доступа: [www.url: http://lammps.sandia.gov](http://lammps.sandia.gov). – 15.08.2024.
11. **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. DOI: 10.1103/PhysRevB.48.22.
12. **Karolewski, M.A.** Tight-binding potentials for sputtering simulations with fcc and bcc metals / M.A. Karolewski // Radiation Effects and Defects in Solids. – 2001. – V. 153. – I. 3. – P. 239-255. DOI: /10.1080/10420150108211842.
13. **Соколов, Д.Н.** Новые возможности высокопроизводительных расчетов наносистем с использованием программного обеспечения Metropolis / Д.Н. Соколов, Н.Ю. Сдобняков, К.Г. Савина и др. // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2021. – Вып. 13. – С. 624-638. DOI: 10.26456/pcascnn/2021.13.624.
14. **Свидетельство № 2019661915 Российская Федерация.** Metropolis / Д.Н. Соколов, Н.Ю. Сдобняков, А.Ю. Колосов, П.М. Ершов, С.С. Богданов; заявитель и правообладатель Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Тверской государственный университет». – № 2019660847; заявл. 30.08.2019; зарегистрировано в реестре программ для ЭВМ

11.09.2019. – 1 с.

15. **Ташлыкова-Бушкевич, Ия.И.** Нанорельеф поверхности тонких пленок сплавов Al–Mn и Al–Ni при ионно-ассистированном осаждении на стекло / Ия.И. Ташлыкова-Бушкевич, И.А. Столяр // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2023. – № 3. – С. 23-39. DOI: 10.31857/S1028096023030172.
16. **Wang, A.** Characterisation of the multiple effects of Sc/Zr elements in selective laser melted Al alloy / A. Wang, Y. Yan, Z. Chen et al. // Materials Characterization. – 2022. – V. 183. – Art. № 111653. – 9 p. DOI: 10.1016/j.matchar.2021.111653.
17. **Paz Borbón, L.O.** Computational studies of transition metal nanoalloys / L.O. Paz Borbón // Doctoral Thesis accepted by University of Birmingham, United Kingdom. – Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 2011. – 155 p. DOI: 10.1007/978-3-642-18012-5.
18. **Sdobnyakov, N.Yu.** Simulation of phase transformations in titanium nanoalloy at different cooling rates / N.Yu. Sdobnyakov, V.S. Myasnichenko, C.-H. San et al. // Materials Chemistry and Physics. – 2019. – V. 238. – Art. № 121895. – 9 p. DOI: 10.1016/j.matchemphys.2019.121895.
19. **Вересов, С.А.** К вопросу изучения процессов структурообразования в четырехкомпонентных наночастицах / С.А. Вересов, К.Г. Савина, А.Д. Веселов и др. // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2022. – Вып. 14. – С. 371-382. DOI: 10.26456/pcascnn/2022.14.371.
20. **Сдобняков, Н.Ю.** Комплексный подход к моделированию плавления и кристаллизации в пятикомпонентных металлических наночастицах: молекулярная динамика и метод Монте-Карло / Н.Ю. Сдобняков, А.Ю. Колосов, Д.Н. Соколов и др. // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2023. – Вып. 15. – С. 589-601. DOI: 10.26456/pcascnn/2023.15.589.
21. **Verlet, L.** Computer «experiments» on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules / L. Verlet // Physical Review. – 1967. – V. 159. – I. 1. – P. 98-103. DOI: 10.1103/PhysRev.159.98.
22. **Nosé, S.A.** Molecular dynamics method for simulations in the canonical ensemble / S.A. Nosé // Molecular Physics. – 1984. – V. 52. – I. 2. – P. 255-268. DOI: 10.1080/00268978400101201.
23. **Stukowski, A.** Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO – the open visualization tool / A. Stukowski // Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering. – 2010. – V. 18. – I. 1. – P. 015012-1-015012-7. DOI: 10.1088/0965-0393/18/1/015012.
24. **Suliz, K.V.** Control of cluster coalescence during formation of bimetallic nanoparticles and nanoalloys obtained via electric explosion of two wires / K.V. Suliz, A.Yu. Kolosov, V.S. Myasnichenko et al. // Advanced Powder Technology. – 2022. – V. 33. – I. 3. – Art. № 103518. – 15 p. DOI: 10.1016/j.appt.2022.103518.
25. **Ferrando, R.** Quantum effects on the structure of pure and binary metallic nanoclusters / R. Ferrando, A. Fortunelli, G. Rossi // Physical Review B. – 2005. – V. 72. – I. 8. – P. 085449-1-085449-9. DOI: 10.1103/PhysRevB.72.085449.

References:

1. Yang L., Hsu K, Baughman B., et al. *Additive manufacturing of metals: the technology, materials, design and production*, Springer Series in Advanced Manufacturing. Cham, Springer, 2017, VII+168 p. DOI: 10.1007/978-3-319-55128-9.
2. Zglobicka I., Chmielewska A., Topal E. et al. 3D diatom-designed and selective laser melting (SLM) manufactured metallic structures, *Scientific Reports*, 2019, vol. 9, art. no. 19777, 9 p. DOI: 10.1038/s41598-019-56434-7.
3. Li K., Wang Z., Song K. et al Additive manufacturing of a Co-Cr-W alloy by selective laser melting: In-situ oxidation, precipitation and the corresponding strengthening effects, *Journal of Materials Science & Technology*, 2022, vol. 125, pp. 171-181. DOI: 10.1016/j.jmst.2022.01.036.
4. Wang Z., Scudino S., Eckert J., Prashanth K.G. Selective laser melting of nanostructured Al-Y-Ni-Co alloy, *Manufacturing Letters*, 2020, vol. 25, pp. 21-25. DOI: 10.1016/j.mfglet.2020.06.005.
5. Bogdanov S.S., Sdobnyakov N.Yu. *Zakonomernosti strukturoobrazovaniya v binarnykh nanochastitsakh GTSK metallov pri termicheskom vozdeystvii: atomisticheskoe modelirovanie: monografiya* [Patterns of structure formation in binary nanoparticles of fcc metals under thermal influence: atomistic modeling: monograph]. Tver, Tver State University Publ., 2023, 143 p.
6. Sdobnyakov N., Khort A., Myasnichenko V. et al. Solution combustion synthesis and Monte Carlo simulation of the formation of CuNi integrated nanoparticles, *Computational Materials Science*, 2020, vol. 184, art. no. 109936, 12 p. DOI: 10.1016/j.commatsci.2020.109936.
7. Talyzin I.V., Samsonov V.M., Bogdanov S.S. et al. Identification of complex core-shell nanostructures from the radial distributions of the local density of components, *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov*,

- nanostruktur i nanomaterialov [Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials]*, 2022, issue 14, pp. 307-320. DOI: 10.26456/pcascnn/2022.14.307. (In Russian).
8. Kravchenko D.A., Medvedeva O.N. Studies of the structure and properties of dental crowns made by selective laser melting and according to the technology of casting, *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov [Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials]*, 2022, issue 14, pp. 652-661. DOI: 10.26456/pcascnn/2022.14.652. (In Russian).
9. Saprykina N.A., Saprykin A.A., Sharkeev Yu.P. et al. Formirovanie splava sistemy kobal't-khrom-molibden metodom selektivnogo lazernogo plavleniya [Formation of the cobalt-chromium-molybdenum system with the help of selective laser melting], *Sistemy. Metody. Tekhnologii [Systems. Methods. Technologies]*, 2021, no. 2 (50), pp. 31-37. DOI: 10.18324/2077-5415-2021-2-31-37. (In Russian).
10. LAMMPS Molecular Dynamics Simulator. Available at: www.url: http://lammps.sandia.gov. (accessed 15.08.2023).
11. Cleri F., Rosato V. Tight-binding potentials for transition metals and alloys, *Physical Review B*, 1993, vol. 48, issue 1, pp. 22-33. DOI: 10.1103/PhysRevB.48.22.
12. Karolewski M.A. Tight-binding potentials for sputtering simulations with fcc and bcc metals, *Radiation Effects and Defects in Solids*, 2001, vol. 153, issue 3, pp. 239-255. DOI: /10.1080/10420150108211842.
13. Sokolov D.N., Sdobnyakov N.Yu., Savina K.G., Kolosov A.Yu., Myasnichenko V.S. Novye vozmozhnosti vysokoproizvoditel'nykh raschetov nanosistem s ispol'zovaniem programmnogo obespecheniya Metropolis [New opportunities for high-performance simulations of nanosystem using Metropolis software], *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov [Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials]*, 2021, issue 13, pp. 624-638. DOI: 10.26456/pcascnn/2021.13.624. (In Russian).
14. Sokolov D.N., Sdobnyakov N.Yu., Kolosov A.Yu., Ershov P.M., Bogdanov S.S. *Metropolis*. Certificate RF, no. 2019661915, 2019. (In Russian).
15. Tashlykova-Bushkevich I.I., Stolyar I.A. Surface nanorelief of thin films of Al–Mn and Al–Ni alloys in the case of ion-assisted deposition on glass, *Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Technique*, 2023, vol. 17, issue 2, pp. 338-351. DOI: 10.1134/S1027451023020179.
16. Wang A., Yan Y., Chen Z. et al. // Characterisation of the multiple effects of Sc/Zr elements in selective laser melted Al alloy, *Materials Characterization*, 2022, vol. 183, art. no. 111653, 9 p. DOI: 10.1016/j.matchar.2021.111653.
17. Paz Borbón L.O. *Computational studies of transition metal nanoalloys*. Doctoral Thesis accepted by University of Birmingham, United Kingdom. Berlin, Heidelberg, Springer-Verlag, 2011, 155 p. DOI: 10.1007/978-3-642-18012-5.
18. Sdobnyakov N.Yu., Myasnichenko V.S., San C.-H., et al. Simulation of phase transformations in titanium nanoalloy at different cooling rates, *Materials Chemistry and Physics*, 2019, vol. 238, art. no. 121895, 9 p. DOI: 10.1016/j.matchemphys.2019.121895.
19. Veresov S.A., Savina K.G., Veselov A.D. et al. K voprosu izucheniya protsessov strukturoobrazovaniya v chetyrekhkomponentnykh nanochastitsakh [To the problem of investigating the processes of structure formation in four-component nanoparticles], *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov [Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials]*, 2022, issue 14, pp. 371-382. DOI: 10.26456/pcascnn/2022.14.371. (In Russian).
20. Sdobnyakov N.Yu., Kolosov A.Yu., Sokolov D.N. et al. Kompleksnyy podkhod k modelirovaniyu plavleniya i kristallizatsii v pyatikomponentnykh metallicheskih nanochastitsakh: molekulyarnaya dinamika i metod Monte-Karlo [Complex approach to the simulation of melting and crystallization in five-component metallic nanoparticles: molecular dynamics and the Monte Carlo method], *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov [Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials]*, 2023, issue 15, pp. 589-601. DOI: 10.26456/pcascnn/2023.15.589. (In Russian).
21. Verlet L. Computer «experiments» on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules, *Physical Review*, 1967, vol. 159, issue 1, pp. 98-103. DOI: 10.1103/PhysRev.159.98.
22. Nosé S.A. Molecular dynamics method for simulations in the canonical ensemble, *Molecular Physics*, 1984, vol. 52, issue 2, pp. 255-268. DOI: 10.1080/00268978400101201.
23. Stukowski A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO – the open visualization tool, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2010, vol. 18, issue 1, pp. 015012-1-015012-7. DOI: 10.1088/0965-0393/18/1/015012.
24. Suliz K.V., Kolosov A.Yu., Myasnichenko V.S. et al. Control of cluster coalescence during formation of bimetallic nanoparticles and nanoalloys obtained via electric explosion of two wires, *Advanced Powder Technology*, 2022, vol. 33, issue 3, art. no. 103518, 15 p. DOI: 10.1016/j.appt.2022.103518.
25. Ferrando R., Fortunelli A., Rossi G. Quantum effects on the structure of pure and binary metallic

nanoclusters, *Physical Review B*, 2005, vol. 72, issue 8, pp. 085449-1-085449-9. DOI: 10.1103/PhysRevB.72.085449.

Original paper

**An integrated approach to studying the structure of ternary CoCrMo alloy:
scanning electron microscopy and atomistic simulation**

D.A. Kravchenko, A.Yu. Kolosov, D.N. Sokolov N.I. Nepsha, S.S. Bogdanov, N.Yu. Sdobnyakov
Tver State University, Tver, Russia

DOI: 10.26456/pcascnn/2024.16.198

Abstract: A comparative study combining the experimental technique of scanning electron microscopy and atomistic simulation by (molecular dynamics) was carried out using of the ternary *CoCrMo* nanoalloy as an example. Employing the technology of selective laser melting based on the *PR-KH28M6* powder, a sample was made for which a non-uniform surface composition with respect to the presence of cobalt and chromium was identified, i.e. areas were simultaneously enriched and depleted in these elements, which indicates the possibility of forming various intermetallic compounds based on them. In the process of atomistic simulation, three nanoparticles of the ternary *CoCrMo* nanoalloy with the number of 10000, 15000 and 30000 atoms were subjected to a sequential cycle of heating and cooling, including the identification of phase transitions corresponding to melting and crystallization, respectively. The corresponding temperatures of the beginning and end of the phase transition were determined. The regularities of structural and surface segregation in the ternary *CoCrMo* nanoalloy are described. It is noted that for nanoparticles containing 10000 atoms, only a shell of cobalt atoms is formed without forming a core, while for nanoparticles containing 15000 and 30,000 atoms, an onion-like structure is formed. Chromium atoms form either the core of the nanoparticle as at $N=10000$ or the peripheral region as at $N=15000$ and 30000. Molybdenum atoms behave indifferently, i.e. are distributed uniformly throughout the entire volume of the nanoparticles under study.

Keywords: *ternary CoCrMo alloy, selective laser melting technology, surface microstructure, molecular dynamics method, structural and surface segregation.*

Кравченко Дарья Алексеевна – аспирант 1 года обучения кафедры общей физики, ФГБОУ ВО «Тверской государственный технический университет»

Колосов Андрей Юрьевич – к.ф.-м.н., научный сотрудник кафедры общей физики, ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

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

Непша Никита Игоревич – аспирант 4 года обучения кафедры общей физики, ФГБОУ ВО «Тверской государственный технический университет»

Богданов Сергей Сергеевич – к.ф.-м.н., научный сотрудник кафедры общей физики, ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

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

Daria A. Kravchenko – 1st year postgraduate student, General Physics Department, Tver State University

Andrei Yu. Kolosov – Ph. D., Researcher, General Physics Department, Tver State University

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

Nikita I. Nepsha – 4th year postgraduate student, General Physics Department, Tver State University

Sergei S. Bogdanov – Ph. D., Researcher, General Physics Department, Tver State University

Nickolay Yu. Sdobnyakov – Dr. Sc., Docent, General Physics Department, Tver State University

Поступила в редакцию/received: 17.09.2024; после рецензирования/revised: 07.10.2024; принята/accepted 10.10.2024.