

МОДЕЛЬ ГЕТЕРОГЕННОГО ЗАРОДЫШЕОБРАЗОВАНИЯ НА КУБИЧЕСКИХ НАНОЧАСТИЦАХ

В.К. Черепанова^{1,2}, А.Н. Черепанов²

¹Новосибирский государственный технический университет

²Институт теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича
СО РАН

На основе термодинамического подхода предложена математическая модель гетерогенного зарождения твердой фазы на высокоактивированных смачиваемых наноподложках кубической формы. В соответствии с классическим подходом к описанию процесса гетерогенной нуклеации предполагается, что критические зародыши имеют форму сферического сегмента и могут располагаться на всех шести гранях кубической частицы-затравки. В рамках предложенной модели нами получены новые выражения для энергии образования и скорости зарождения центров кристаллизации на кубических ультрадисперсных затравках, в которых учитывается влияние размерных и капиллярных эффектов. Численные эксперименты были проведены для расплава алюминия, модифицированного наночастицами нитрида титана TiN. Результаты расчетов показывают, что смачиваемость поверхности наночастицы-затравки оказывает наибольшее влияние на процесс гетерогенной нуклеации. Увеличение дисперсности нанозатравок повышает скорость зарождения твердой фазы, а учет размерной зависимости поверхностного натяжения на границе зародыш – расплав существенно влияет на процессы зародышеобразования только при соотношении параметра Толмена к критическому радиусу $2\delta/R_0 > 0.01$. Проведенное исследование представляет интерес для построения математической модели гетерогенной кристаллизации, описывающей процессы структурообразования в металлах и сплавах, модифицированных тугоплавкими наночастицами.

Ключевые слова: гетерогенное зародышеобразование, наночастицы, наномодифицирование, капиллярные эффекты, измельчение зерна, кубические подложки, математическая модель.

DOI: 10.17212/1727-2769-2019-1-7-17

Введение

Исследование процессов зарождения твердой кристаллической фазы в расплаве, содержащем наноразмерные частицы, имеет важное значение для понимания механизмов структурообразования при затвердевании наномодифицированных металлов и сплавов. В последние годы все большее внимание уделяется новой технологии обработки металлов и сплавов с помощью модифицирования расплава нанопорошками тугоплавких соединений с характерным размером частиц ~100 нм (наномодифицирование) [1–3]. Эти частицы характеризуются высокой удельной поверхностью, хорошо смачиваются расплавом и могут служить активными центрами для образования твердой фазы.

Одной из основных задач при литье металлов и их сплавов является получение тонкой и однородной зеренной структуры с целью уменьшения дефектов и улучшения свойств отливок. Для этого можно использовать наночастицы-нуклеанты, которые специально вводят в расплав. На таких частицах-подложках будет

Исследование частично выполнено в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы (проект АААА-А17-117030610136-3).

происходить гетерогенное зародышеобразование, протекание которого зависит от формы подложки, ее смачиваемости, размеров и сопряжения атомных решеток подложки и материала зародыша [4–7]. Для понимания механизма измельчения зерна в затвердевшем металле требуется изучение нуклеационной эффективности частиц-подложек с учетом влияния условий затвердевания.

Существует несколько подходов к описанию процесса гетерогенной нуклеации. Прежде всего, это классический подход, основы которого были изложены еще Фольмером [8], развитый Тернбаллом [4] для описания гетерогенной нуклеации на плоской подложке. Гетерогенное зародышеобразование на подложках различной кривизны было в свое время подробно рассмотрено Флетчером [5] на основе классического подхода, им было показано, что геометрический фактор и угол смачивания играют здесь ключевую роль. В основе классического подхода к описанию процесса гетерогенной нуклеации лежит предположение о том, что критический зародыш имеет форму сферического сегмента, однако на хорошо смачиваемых подложках возможно использование адсорбционного механизма нуклеации [6]. Максвеллом и Хеллавеллом [7] была предложена модель зарождения и роста зерен в бинарных металлических сплавах, они исследовали влияние конкуренции между гетерогенной нуклеацией и диффузионным ростом на размер образующегося кристаллического зерна. Связь между размером зерна и критическим переохлаждением привела в том числе к созданию модели «свободного роста» [9]. Среди работ, опубликованных за последние 10 лет, можно проследить развитие всех вышеупомянутых подходов к описанию влияния процесса гетерогенной нуклеации на улучшение структуры сплавов, прежде всего на уменьшение зерна [10–17 и др.]. Однако проблема зарождения твердой фазы на наноразмерных частицах-подложках, введенных в металлический расплав, по-прежнему остается актуальной, поскольку для прогнозирования влияния такого рода наномодификаторов на структуру и свойства отливки необходимо изучение особенностей зарождения твердой фазы на экзогенной наночастице-подложке в зависимости от ее размерных, морфологических, капиллярных и других свойств.

Необходимо развитие аналитических и численных моделей для описания гетерогенного зародышеобразования на нанозатравках и дальнейшего роста кристаллического зерна в наномодифицированных сплавах. Ниже на основе термодинамического подхода, изложенного нами ранее в [15–17], проведено численное исследование процесса гетерогенного зародышеобразования в переохлажденном расплаве на кубической наночастице с учетом капиллярных и размерных эффектов.

1. Постановка задачи

Для определения скорости гетерогенного зародышеобразования примем, что наночастицы-затравки имеют форму куба, грани которого характеризуются углом смачивания $0^\circ < \theta < 90^\circ$. В соответствии с представлениями Ребиндера [18] тугоплавкие наночастицы являются потенциальными центрами кристаллизации, т.е. являются затравками, на поверхности которых группируются отдельные кластеры, трансформирующиеся при определенных условиях в зародыши твердой фазы. Рассмотрим кинетику образования такого зародыша, считая, что он имеет форму сферического сегмента (рис. 1). Формирующиеся на грани кубической наночастицы зародыши должны иметь диаметр контактного пятна не больше длины l_p ребра кубической частицы [4, 5]:

$$2R_c \sin \theta \leq l_p, \quad (1)$$

где R_c – критический радиус зародыша.

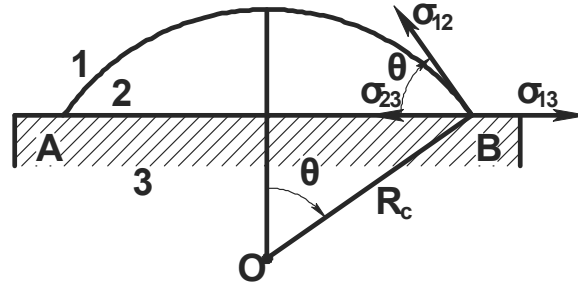


Рис. 1 – Схема зародыша твердой фазы на плоской грани наночастицы:

1 – расплав, 2 – зародыш, 3 – наночастица

Fig. 1 – Diagram of solid phase nucleus on the flat facet of the nanoparticle:

1 – melt; 2 – nucleus; 3 – nanoparticle

Выражение для свободной энергии Гиббса образования зародыша в данном случае имеет вид

$$\Delta G = \sigma_{12}S_{12} + (\sigma_{23} - \sigma_{13})S_{23} - \frac{\kappa\rho\Delta T}{T_s}V_c. \quad (2)$$

Здесь $\Delta T = T_s - T$ – переохлаждение; T_s – температура кристаллизации; T – текущая температура; ρ – плотность расплава; κ – теплота кристаллизации; σ_{23} – поверхностное натяжение зародыш – подложка; σ_{13} – поверхностное натяжение расплав – подложка; S_{12} – площадь поверхности зародыша; V_c – его объем; S_{23} – площадь поверхности контакта зародыша с подложкой; σ_{12} – поверхностное натяжение расплав – зародыш, величина которого с учетом размерного фактора определяется формулой $\sigma_{12} = \sigma_{12}^\infty(1 - 2\delta/R)$ [19], где δ – параметр Толмена, характеризующий размер межфазного переходного слоя, равный по порядку величины диаметру атома расплава, σ_{12} – поверхностное натяжение для плоской поверхности, R – радиус кривизны поверхности натяжения.

После подстановки в (2) выражений для величин σ_{12} , S_{12} , S_{23} , V_c , пренебрегая членами второго порядка малости относительно величины $2\delta/R \ll 1$, получим

$$\Delta G = \pi\sigma_{12}^\infty R^2 \left(1 - \frac{2\delta}{R} - \frac{2R}{3R_0}\right) (1 - \cos\theta)^2 (2 + \cos\theta). \quad (3)$$

Здесь $R_0 = 2\sigma_{12}^\infty T_s / (\kappa\rho\Delta T)$ – радиус критического зародыша при гомогенном зародышеобразовании [8]. При $2\delta/R_0 \rightarrow 0$ и $R = R_0$ соотношение (3) принимает известный вид свободной энергии Гиббса для зародыша на плоской поверхности без учета размерных эффектов [8].

Критический радиус гетерогенного зародыша R_c определяется из условия

$$\frac{d\Delta G}{dR} = \pi\sigma_{12}^\infty (1 - \cos\theta)^2 (2 + \cos\theta) \left(2R - 2\delta - \frac{2R^2}{R_0}\right) = 0.$$

Отсюда получим при $4\delta / R_0 \ll 1$:

$$R_c = \frac{R_0}{2} \left\{ 1 + \sqrt{1 - \frac{4\delta}{R_0}} \right\} \approx R_0 \left(1 - \frac{\delta}{R_0} \right). \quad (4)$$

Тогда для критической свободной энергии Гиббса ΔG^* с точностью до малой величины δ / R_0 первого порядка из (3) с учетом (4) будем иметь

$$\Delta G^* = \frac{1}{3} \pi \sigma_{12}^\infty R_0^2 \left(1 - \frac{6\delta}{R_0} \right) (1 - \cos \theta)^2 (2 + \cos \theta). \quad (5)$$

Полученное выражение (5) при $\delta = 0$ совпадает с известным выражением для критического значения свободной энергии сфероидального зародыша на плоской подложке [8].

Подставив (4) в условие (1), с учетом выражения для величины R_0 получим соотношение, связывающее переохлаждение ΔT с краевым углом смачивания θ и размером частицы l_p , с точностью до малой величины равной $2\delta \sin \theta / l_p$:

$$\Delta T \geq B \sin \theta / l_p,$$

где $B = 4\sigma_{12}^\infty T_s / (\text{кр})$. При заданных значениях θ и l_p оно определяет минимальное переохлаждение для формирования зародыша на плоской грани наночастицы.

Вероятность образования критического зародыша на одной из граней наночастицы пропорциональна величине $\exp(-\Delta G^* / k_B T)$, где k_B – константа Больцмана. По теореме сложения вероятностей совместимых событий число критических зародышей, образовавшихся на всех гранях кубической нанозатравки, определим по формуле

$$n = n_f \left[6 \exp \left(-\frac{\Delta G^*}{k_B T} \right) - \exp \left(-\frac{6\Delta G^*}{k_B T} \right) \right]. \quad (6)$$

Здесь n_f – число поверхностных атомов грани, приходящихся на единицу объема расплава:

$$n_f = n_p (l_p / l_c)^2, \quad (7)$$

где n_p – число наночастиц-затравок в единице объема расплава; l_p – размер ребра затравки; l_c – межатомное расстояние материала затравки. Величину n_p определим через массовую концентрацию затравок в расплаве m_p , %, плотность материала затравок ρ_p и плотность расплава ρ :

$$n_p = m_p \rho / (100 \rho_p l_p^3). \quad (8)$$

Пренебрегая вторым членом в квадратных скобках в (6) по сравнению с первым, получим

$$n = 6 n_f \exp \left(-\Delta G^* / (k_B T) \right). \quad (9)$$

Скорость гетерогенного возникновения зародышей определяется следующим соотношением [20]:

$$I = nn_s v_{ls}. \quad (10)$$

Здесь n_s – число атомов расплава, граничащих с зародышем, v_{ls} – частота скачков атомов через границу раздела жидкость – кластер.

Для сфероидального сегмента-зародыша значение n_s определим по формуле [20]

$$n_s = 2\pi R_c^2 (1 - \cos \theta) / l_a^2, \quad (11)$$

где l_a – диаметр атома расплава. Частоту скачков v_{ls} оценим из соотношения

$$v_{ls} = D / l_a^2. \quad (12)$$

Здесь D – коэффициент диффузии в жидкости, определяемый уравнением Аррениуса,

$$D = D_0 \exp(-E/k_B T), \quad (13)$$

где D_0 – эмпирическая константа; E – энергия активации процесса диффузии в расплаве.

Теперь выражение для скорости гетерогенного зародышеобразования на кубической нанозатравке (10) с учетом выражений (7–9, 11–13) примет следующий вид:

$$I = n_p \frac{12\pi D_0}{l_a^4} \left(\frac{l_p}{l_c} \right)^2 R_c^2 (1 - \cos \theta) \exp \left[\frac{-(E + \Delta G^*)}{k_B T} \right], \quad (14)$$

где $0^\circ < \theta < 90^\circ$, свободная энергия Гиббса ΔG^* определяется формулой (5), а величина R_c – формулой (4).

2. Результаты и обсуждение

Численные расчеты проведены для алюминия, модифицированного нитридом титана, имеющего форму кристаллов, близкую к кубической. Теплофизические характеристики металла и исходные данные приняты следующими [21]: $T_s = 933$ К, $\rho = 2600$ кг/м³, $\kappa = 4 \cdot 10^5$ Дж/кг, $D_0 = 10^{-7}$ м²/с, $E = 4,2 \cdot 10^{-20}$ Дж, $\sigma_{12}^\infty = 0,093$ Дж/м², $l_a = 2,86 \cdot 10^{-10}$ м, $l_c = 4235 \cdot 10^{-10}$ м, $l_p = (30 \dots 90) \cdot 10^{-9}$ м, $m_p = 0,1$ % по массе, $\rho_p = 5440$ кг/м³, $k_B = 1,38 \cdot 10^{-23}$ Дж · К⁻¹. Значения переохлаждения и угла смачивания варьировались с учетом экспериментальных данных [22].

На рис. 2 приведены зависимости критической энергии Гиббса ΔG^* (а) и скорости образования зародышей в единице объема расплава I (б) от краевого угла смачивания θ . В данном случае размер наночастицы составлял $l_p = 4,23 \cdot 10^{-8}$ м, переохлаждение $\Delta T = 2$ К, расчеты проводились при трех значениях относитель-

ного параметра $2\delta/R_0 = 0; 0,007; 0,05$. Из формулы (5) следует, что учет размерного фактора в выражении для поверхностного натяжения должно приводить к уменьшению значения энергии образования гетерогенного зародыша, что, в свою очередь, способствует увеличению скорости образования зародышей. Графики, построенные для первых двух случаев, когда влияние размерного фактора на поверхностное натяжение на границе расплав-зародыш не учитывалось ($\delta = 0$), либо когда параметр Толмена принимался равным по порядку величины диаметру атома расплава ($\delta = l_a$, $2\delta/R_0 = 0,007$), совпадают (кривые 1 на рис. 2, а и б). Таким образом, можно считать, что при очень малом значении $2\delta/R_0 < 0,01$ размерный фактор в выражении для поверхностного натяжения практически не влияет на свободную энергию и скорость образования зародышей. Значение безразмерного параметра $2\delta/R_0 = 0,05$ можно считать предельным, поскольку при выводе формулы (4) на эту величину накладывалось условие малости $4\delta/R \ll 1$. Кривые 2 на рис. 2, а и б иллюстрируют максимально возможное влияние размерного фактора на критическую энергию Гиббса и скорость зародышеобразования. На графиках видно, что наибольшие скорости зародышеобразования $I \gg 10^{10} \text{ с}^{-1} \text{ м}^{-3}$ имеют место при углах смачивания $\theta < 12$ град.

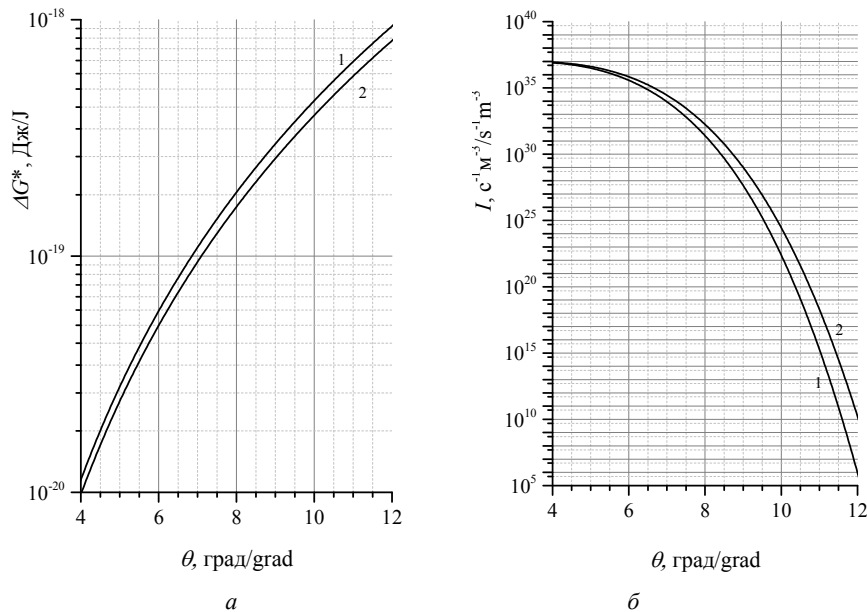


Рис. 2 – Зависимость энергии образования критического зародыша (а) и скорости зародышеобразования (б) от угла смачивания при $2\delta/R_0 = 0,007$ – кривая 1, $2\delta/R_0 = 0,05$ – кривая 2

Fig. 2 – Dependences of critical Gibbs energy (a) and nucleation rate (b) on the wetting angle at $2\delta/R_0 = 0.007$ – curve 1, $2\delta/R_0 = 0.05$ – curve 2

Зависимость скорости зародышеобразования от размера наноподложки (рис. 3) также рассчитывалась при трех значениях параметра Толмена, угол смачивания был выбран равным $\theta = 10^\circ$, переохлаждение $\Delta T = 2$ К. Анализ расчетных кривых

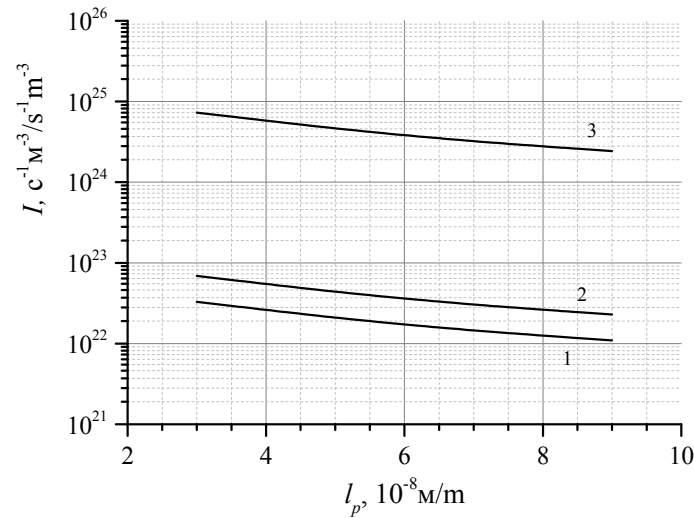


Рис. 3 – Зависимость скорости зародышеобразования от размера наноподложки при $2\delta/R_0 = 0$ – кривая 1, $2\delta/R_0 = 0,007$ – кривая 2, $2\delta/R_0 = 0,05$ – кривая 3

Fig. 3 – Dependence of the nucleation rate on the size of nanosubstrate at $2\delta/R_0 = 0$ – curve 1, $2\delta/R_0 = 0.007$ – curve 2, $2\delta/R_0 = 0.05$ – curve 3

показывает, что малый параметр Толмена ($2\delta/R_0 < 0,01$) слабо влияет на скорость зародышеобразования (кривые 1 и 2), а уменьшение размера кубической наноподложки при фиксированном значении массовой доли материала подложек в расплаве приводит к ее росту.

Заключение

Предложена математическая модель гетерогенного зарождения твердой фазы на высокоактивированных смачиваемых нанозатравках. Получены аналитические выражения для критического радиуса, энергии образования и скорости зарождения центров кристаллизации на ультрадисперсных затравках (наночастицах), позволяющие исследовать влияние размерных и капиллярных эффектов на процессы зародышеобразования в переохлажденном расплаве. Установлено, что учет размерной зависимости поверхностного натяжения на границе зародыш – расплав существенно влияет на процессы зародышеобразования при соотношении параметра Толмена к критическому радиусу $2\delta/R_0 > 0,01$. Увеличение дисперсности нанозатравок повышает скорость зарождения твердой фазы. Однако наибольшее влияние на эту величину оказывает смачиваемость частиц. Это обуславливает необходимость плакирования частиц соответствующими металлами, которые повышают смачиваемость и адсорбционные свойства их поверхности.

ЛИТЕРАТУРА

1. Упрочнение металлических, полимерных и эластомерных материалов ультрадисперсными порошками / М.Ф. Жуков, И.Н. Черский, А.Н. Черепанов, Н.А. Коваленко, В.П. Сабуров, Г.В. Галевский, О.А. Андрианова, Г.Г. Крушенко. – Новосибирск: Наука, 1999. – 307 с. – (Низкотемпературная плазма; т. 14).

2. Модифицирование сталей и сплавов дисперсными инокуляторами / В.П. Сабуров, Е.Н. Еремин, А.Н. Черепанов, Г.Н. Миннеханов. – Омск: Изд-во ОмГТУ, 2002. – 212 с.
3. Нанопорошковые технологии в машиностроении / В.В. Москвичев, Г.Г. Крушенко, А.Е. Буров, И.В. Усков, Е.Н. Федорова. – Красноярск: Изд-во СФУ, 2013. – 186 с.
4. **Turnbull D.** Theory of catalysis of nucleation by surface patches // *Acta Metallurgica*. – 1953. – Vol. 1 (1). – P. 8–14.
5. **Fletcher N.H.** Size effect in heterogeneous nucleation // *The Journal of Chemical Physics*. – 1958. – Vol. 29 (3). – P. 572–576.
6. **Чалмерс Б.** Теория затвердевания. – М.: Металлургия, 1968. – 288 с.
7. **Maxwell I., Hellawell A.** A simple model for grain refinement during solidification // *Acta Metallurgica*. – 1975. – Vol. 23 (2). – P. 229–237.
8. **Фольмер М.** Кинетика образования новой фазы. – М.: Наука, 1986. – 206 с.
9. **Greer A.L.** Overview: application of heterogeneous nucleation in grain-refining of metals // *The Journal of Chemical Physics*. – 2016. – Vol. 145 (21). – P. 211704. – DOI: 10.1063/1.4968846.
10. **Qian M.** Heterogeneous nucleation on potent spherical substrates during solidification // *Acta Materialia*. – 2007. – Vol. 55 (3). – P. 943–953.
11. A novel method to achieve grain refinement in aluminum / K. Wang, H. Jiang, Q. Wang, B. Ye, W. Ding // *Metallurgical and Materials Transactions A*. – 2016. – Vol. 47. – P. 4788–4794. – DOI: 10.1007/s11661-016-3668-3.
12. Heterogeneous nucleation and grain growth of inoculated aluminium alloys: an integrated study by in-situ X-radiography and numerical modeling / Y. Xu, D. Casari, Q. Du, R.H. Mathiesen, L. Arnberg, Y. Li // *Acta Materialia*. – 2017. – Vol. 140. – P. 224–239. – DOI: 10.1016/j.actamat.2017.08.053.
13. **Liu Z.** Review of grain refinement of cast metals through inoculation: theories and developments // *Metallurgical and Materials Transactions A*. – 2017. – Vol. 48. – P. 4755–4776. – DOI: 10.1007/s11661-017-4275-7.
14. **Черепанов А.Н., Попов В.Н., Солоненко О.П.** Объемная кристаллизация капли никеля, содержащей тугоплавкие наночастицы, при соударении с подложкой // *ПМТФ*. – 2006. – Т. 47, № 1. – С. 29–34.
15. **Cherepanov A., Cherepanova V., Manolov V.** To theory of crystallization of nanomodified alloy // *AIP Conference Proceedings*. – 2017. – Vol. 1893. – Art. 030114. – DOI: 10.1063/1.5007572.
16. **Cherepanova V.K., Cherepanov A.N.** On heterogeneous nucleation in a supercooled melt // *Journal of Physics: Conference Series*. – 2018. – Vol. 1105, N 1. – P. 012050. – DOI: 10.1088/1742-6596/1105/1/012050.
17. On crystallization of a metal inoculated with nanoparticles / A. Cherepanov, V. Cherepanova, V. Manolov, L. Yovkov // *Journal of Physics: Conference Series*. – 2018. – Vol. 1115, N 4. – P. 042042. – DOI: 10.1088/1742-6596/1115/4/042042.
18. **Ребиндер П.А.** Модифицирование металлов // *Качественная сталь*. – 1939. – № 3. – С. 31–34.
19. **Tolman R.C.** The effect of droplet size on surface tension // *The Journal of Chemical Physics*. – 1949. – Vol. 17, N 3. – P. 333–337.
20. **Флемингс М.** Процессы затвердевания. – М.: Мир, 1977. – 423 с.
21. **Зиновьев В.Е.** Теплофизические свойства металлов при высоких температурах. – М.: Металлургия, 1989. – 384 с.
22. **Popov S., Manolov V., Cherepanov A.** Mathematical modeling of crystallization of metal alloys // *Comptes rendus de l'Academie bulgare des Science*. – 2012. – Vol. 65, N 4. – P. 441–448.

MODEL OF HETEROGENOUS NUCLEATION ON CUBIC NANOPARTICLES

Cherepanova V.K.^{1,2}, Cherepanov A.N.²

¹ Novosibirsk State Technical University, Novosibirsk, Russia

² Khristianovich Institute of Theoretical and Applied Mechanics SB RAS,
Novosibirsk, Russia

A mathematical model of heterogeneous nucleation of a solid phase on highly activated wetted nanosubstrates of cubic form is proposed. This model is based on the classical thermodynamic approach. In accordance with the classical approach to describing the process of heterogeneous nucleation, it is assumed that critical nuclei have the shape of a spherical segment, and can be located on all six faces of a cubic seed particle. In the framework of the proposed model, we have obtained new expressions for the energy of formation and the rate of nucleation of crystallization centers on cubic nanoseeds which take into account the influence of size and capillary effects. Numerical experiments were carried out for an aluminum melt modified with nanoparticles of titanium nitride (TiN). The results of calculations show that the wettability of the surface of the nanoparticle has the greatest influence on the process of heterogeneous nucleation. An increase in the dispersion of nanosubstrates increases the nucleation rate of the solid phase. Taking into account the size dependence of the surface tension at the nucleus-melt interface significantly affects the nucleation processes only when the ratio of the Tolmen parameter to the critical radius is $2\delta/R_0 > 0.01$. This study is of interest for the development of a mathematical model of heterogeneous crystallization describing the processes of structure formation in metals and alloys modified by refractory nanoparticles.

Keywords: heterogeneous nucleation, nanoparticles, nanomodification, capillary effects, grain refinement, cubic substrates, mathematical model.

DOI: 10.17212/1727-2769-2019-1-7-17

REFERENCES

1. Zhukov M.F., Cherskii I.N., Cherepanov A.N., Kovalenko N.A., Saburov V.P., Galevskii G.V., Andrianova O.A., Krushenko G.G. *Uprochnenie metallicheskih, polimernykh i elastomernykh materialov ul'tradispersnymi poroshkami* [Polymeric and elastomeric materials by ultradispersed powders of plasma-chemical synthesis]. Novosibirsk, Nauka Publ., 1999. 307 p.
2. Saburov V.P., Eremin E.N., Cherepanov A.N., Minnekhanov G.N. *Modifitsirovanie staley i splavov dispersnymi inokulyatorami* [Modification of steels and alloys by dispersed inoculators]. Omsk, Omsk State Technical University Publ., 2002. 212 p.
3. Moskvichev V.V., Krushenko G.G., Burov A.E., Uskov I.V., Fedorova E.N. *Nanoporoshkovye tekhnologii v mashinostroenii* [Nanopowder technologies in mechanical engineering]. Krasnoyarsk, SFU Publ., 2013. 186 p.
4. Turnbull D. Theory of catalysis of nucleation by surface patches. *Acta Metallurgica*, 1953, vol. 1 (1), pp. 8–14.
5. Fletcher N.H. Size effect in heterogeneous nucleation. *The Journal of Chemical Physics*, 1958, vol. 29 (3), pp. 572–576.
6. Chalmers B. *Principles of solidification*. New York, Wiley, 1964 (Russ. ed.: Chalmers B. *Teoriya zatverdevaniya*. Moscow, Metallurgiya Publ., 1968. 288 p.).
7. Maxwell I., Hellawell A. A simple model for grain refinement during solidification. *Acta Metallurgica*, 1975, vol. 23 (2), pp. 229–237.
8. Volmer M. *Kinetik der phasenbildung*. Dresden, Leipzig, T. Steinkopff, 1939. 220 p. (Russ. ed.: Fol'mer M. *Kinetika obrazovaniya novoi fazy*. Moscow, Nauka Publ., 1986. 206 p.).
9. Greer A.L. Overview: application of heterogeneous nucleation in grain-refining of metals. *The Journal of Chemical Physics*, 2016, vol. 145 (21), p. 211704. DOI: 10.1063/1.4968846.
10. Qian M. Heterogeneous nucleation on potent spherical substrates during solidification. *Acta Materialia*, 2007, vol. 55 (3), pp. 943–953.

11. Wang K., Jiang H., Wang Q., Ye B., Ding W. A novel method to achieve grain refinement in aluminum. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 2016, vol. 47, pp. 4788–4794. DOI: 10.1007/s11661-016-3668-3.
12. Xu Y., Casari D., Du Q., Mathiesen R.H., Arnberg L., Li Y. Heterogeneous nucleation and grain growth of inoculated aluminium alloys: an integrated study by in-situ X-radiography and numerical modeling. *Acta Materialia*, 2017, vol. 140, pp. 224–239. DOI: 10.1016/j.actamat.2017.08.053.
13. Liu Z. Review of grain refinement of cast metals through inoculation: theories and developments. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 2017, vol. 48, pp. 4755–4776. DOI: 10.1007/s11661-017-4275-7.
14. Cherepanov A.N., Popov V.N., Solonenko O.P. Volume crystallization of a nickel droplet containing refractory nanoparticles upon its impact onto a substrate. *Journal of Applied Mechanics and Technical Physics*, 2006, vol. 47, no. 1, pp. 22–26. DOI: 10.1007/s10808-006-0003-6. Translated from *Prikladnaya mekhanika i tekhnicheskaya fizika*, 2006, vol. 47, no. 1, pp. 29–34.
15. Cherepanov A., Cherepanova V., Manolov V. To theory of crystallization of nanomodified alloy. *AIP Conference Proceedings*, 2017, vol. 1893, no. 1, art. 030114. DOI: 10.1063/1.5007572.
16. Cherepanova V.K., Cherepanov A.N. On heterogeneous nucleation in a supercooled melt. *Journal of Physics: Conference Series*, 2018, vol. 1105, no. 1, p. 012050. DOI: 10.1088/1742-6596/1105/1/012050.
17. Cherepanov A., Cherepanova V., Manolov V., Yovkov L. On crystallization of a metal inoculated with nanoparticles. *Journal of Physics: Conference Series*, 2018, vol. 1115, no. 4, p. 042042. DOI: 10.1088/1742-6596/1115/4/042042.
18. Rebinder P.A. Modifitsirovanie metallov [Metal modification]. *Kachestvennaya stal' – Fine steel*, 1939, no. 3, pp. 31–34. (In Russian).
19. Tolman R.C. The effect of droplet size on surface tension. *The Journal of Chemical Physics*, 1949, vol. 17, no. 3, pp. 333–337.
20. Flemings M.C. *Solidification processing*. New York, McGraw-Hill, 1974. 364 p. (Russ. ed.: Flemings M. *Protsessy zatverdevaniya*. Moscow, Mir Publ., 1977. 423 p.).
21. Zinov'ev V.E. *Teplofizicheskie svoystva metallov pri vysokikh temperaturakh* [Thermophysical properties of metals at high temperatures]. Moscow, Metallurgiya Publ., 1989. 384 p.
22. Popov S., Manolov V., Cherepanov A. Mathematical modeling of crystallization of metal alloys. *Comptes rendus de l'Academie bulgare des Science*, 2012, vol. 65, no. 4, pp. 441–448.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ



Черепанова Вера Корнилевна – родилась в 1969 году, д-р физ.-мат. наук, доцент, профессор кафедры общей физики Новосибирского государственного технического университета, научный сотрудник ИТПМ СО РАН. Область научных интересов: процессы тепло- и массообмена, фазовые равновесия и превращения, численное моделирование минералообразующих процессов и фазовых превращений минералов. Опубликовано 50 научных работ. (Адрес: 630073, Россия, г. Новосибирск, пр. К. Маркса, 20. E-mail: vera_cherepanova@mail.ru).

Cherepanova Vera Kornilievna (b. 1969) – Doctor of Sciences (Phys.&Math.), Associate Professor at NSTU, researcher at ITAM SB RAS. Her research interests are currently focused on processes of heat and mass transfer, phase equilibria and transitions, numerical modeling of mineral formation processes and phase transitions of minerals. She is author of 50 scientific papers. (Address: Address: 20, Karl Marx Av., Novosibirsk, 630073, Russia. E-mail: vera.k.cherepanova@gmail.com).



Черепанов Анатолий Николаевич – родился в 1938 году, д-р физ.-мат. наук, профессор, главный научный сотрудник ИТПМ СО РАН. Область научных интересов: математическое моделирование в естественных науках, механика технологических процессов, новые конструкционные материалы и покрытия, фазовые равновесия и превращения, газо- и гидродинамика технических и природных систем. Опубликовано 250 научных работ. (Адрес: 630090, Россия, Новосибирск, ул. Терешковой, дом 6. E-mail: ancher@itam.nsc.ru).

Cherepanov Anatoliy Nikolaevich (b. 1938) – Doctor of Sciences (Phys.&Math.), Professor, principal researcher at ITAM SB RAS. His research interests are currently focused on mathematical modeling in natural sciences, mechanics of technological processes, new constructional materials and coverings, phase equilibria and transitions, gaso-and hydrodynamics of technical and natural systems. He is author of 250 scientific papers. (Address: 6 house, Tereshkova street, Novosibirsk, 630090, Russia. E-mail: ancher@itam.nsc.ru).

*Статья поступила 07 марта 2019 г.
Received March 07, 2019*

To references:

Cherepanova V.K., Cherepanov A.N. Model' geterogennogo zarodysheobrazovaniya na kubicheskikh nanochastitsakh [Model of heterogenous nucleation on cubic nanoparticles]. *Doklady Akademii nauk vysshei shkoly Rossiiskoi Federatsii – Proceedings of the Russian higher school Academy of sciences*, 2019, no. 1 (42), pp. 7–17. DOI: 10.17212/1727-2769-2019-1-7-17.