

Министерство науки и высшего образования
Российской Федерации
Федеральное государственное
бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Тверской государственный университет»

**ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ
ИЗУЧЕНИЯ КЛАСТЕРОВ,
НАНОСТРУКТУР
И НАНОМАТЕРИАЛОВ**

**PHYSICAL AND CHEMICAL ASPECTS
OF THE STUDY OF CLUSTERS,
NANOSTRUCTURES AND
NANOMATERIALS**

**FIZIKO-HIMIČESKIE ASPEKTY
IZUČENIÂ KLASTEROV,
NANOSTRUKTUR I NANOMATERIALOV**

выпуск 12

ТВЕРЬ 2020

УДК 620.22:544+621.3.049.77+539.216.2:537.311.322: 530.145

ББК Ж36:Г5+В379

Ф50

Рецензирование статей осуществляется на основании Положения о рецензировании статей и материалов для опубликования в журнале «Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов».

Официальный сайт издания в сети Интернет:

<https://www.physchemaspects.ru>

Ф50 Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов [Текст]. – Тверь: Твер. гос. ун-т, 2020. – Вып. 12. – 908 с.

Зарегистрирован Федеральной службой по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций, свидетельство о регистрации СМИ ПИ № ФС77-47789 от 13.12.2011.

Издание составлено из оригинальных статей, кратких сообщений и обзоров теоретического и экспериментального характера, отражающих результаты исследований в области изучения физико-химических процессов с участием кластеров, наноструктур и наноматериалов физики, включая межфазные явления и нанотермодинамику. Журнал предназначен для научных и инженерно-технических работников, преподавателей ВУЗов, студентов и аспирантов. Издание подготовлено на кафедре общей физики Тверского государственного университета.

Переводное название: Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials

Транслитерация названия: Fiziko-himičeskie aspekty izučeniâ klasterov, nanostruktur i nanomaterialov

УДК 620.22:544+621.3.049.77+539.216.2:537.311.322: 530.145

ББК Ж36:Г5+В379

Print ISSN 2226-4442

Online ISSN 2658-4360

© Коллектив авторов, 2020

© Тверской государственный университет, 2020

КРИСТАЛЛИЗАЦИЯ БИМЕТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОЧАСТИЦ: ВЛИЯНИЕ РАЗМЕРНОГО НЕСООТВЕТСТВИЯ АТОМОВ И ВНЕШНЕГО ДАВЛЕНИЯ

В.С. Мясниченко¹, П.М. Ершов¹, С.С. Богданов¹, К.Г. Савина¹, П.В. Матренин²,
Н.Ю. Сдобняков¹

¹ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

170002, Россия, Тверь, Садовый пер., 35

²ФГБОУ ВО «Новосибирский государственный технический университет»

630073, Россия, Новосибирск, пр-т К. Маркса, 20

viplabs@yandex.ru

DOI: 10.26456/pcascnn/2020.12.274

Аннотация: В данной работе проведено молекулярно-динамическое моделирование процесса кристаллизации из расплава биметаллических наночастиц *Co–Au* различного состава. Исследовалось влияние размерного несоответствия радиусов атомов, входящих в биметаллическую систему, а также внешнего давления на конечные конфигурации, охлажденные до температуры 100К. Установлено, что удельная потенциальная энергия для биметаллической наночастицы *Co–Au* увеличивается с увеличением внешнего давления. Кроме того, при увеличении внешнего давления происходят структурные изменения, а именно нелинейным образом меняется среднее число икосаэдрических атомов внутри кластера. Зависимость удельной потенциальной энергии биметаллических наночастиц *Co–Au* различного состава от коэффициента размерного несоответствия ξ носит более сложный характер. Минимум для обогащенного золотом состава и эквиатомного состава наблюдается при значении $\xi=1,09$ и $\xi=1,15$ соответственно.

Ключевые слова: биметаллические наночастицы, метод молекулярной динамики, структурное превращение, икосаэдр, внешнее давление, размерное несоответствие.

1. Введение

В последние годы исследованию структурных характеристик металлических наночастиц (НЧ) в процессах плавления и кристаллизации уделяется большое внимание в связи с возможными новыми практическими приложениями в области наноэлектроники [1]. Ранее нами в [2, 3] было изучено влияние внешнего давления на температуру фазовых переходов в биметаллических серебросодержащих НЧ эквиатомного состава. Было установлено, что на температурный диапазон структурной стабильности биметаллических НЧ (наносплавов) оказывают совокупное влияние следующие факторы: размер, начальная геометрическая форма и состав НЧ, тип и степень атомного упорядочения, наличие внешнего давления. Внешнее давление может использоваться как фактор, повышающий устойчивость наноматериалов [4], по сравнению со свободными НЧ [5]. Уже разработаны технологии интенсивного деформирования под давлением и получения наноструктурного состояния, в котором наноструктурные материалы характеризуются достаточно высокой прочностью и

пластичностью [6, 7]. Однако остается еще ряд открытых вопросов в описании причин и механизмов формирования таких структурно-фазовых состояний [8, 9].

Как правило, в биметаллических НЧ важным параметром, оказывающим влияние на закономерности структурных превращений, является размерное несоответствие компонентов [10]. Например, для НЧ типа «ядро – оболочка» размерное несоответствие может быть причиной деформации границы раздела, при этом межфазная деформация может увеличивать каталитическую активность биметаллических НЧ указанного типа [11, 12]. Кроме того, размерное несоответствие для биметаллических НЧ [13] может существенным образом изменять характер сегрегационных явлений и позволяет проявлять структурное упорядочение, нехарактерное для массивной фазы. Однако ещё в работе [14] показано, что, например, для НЧ $Cu-Au$ (с атомным размерным несоответствием 13%) не характерно идеальное упорядочение типа «ядро – оболочка».

Целью настоящей работы является исследование структурных превращений в процессе кристаллизации при наличии внешнего давления и при условии различного размерного несоответствии компонентов биметаллической НЧ $Au-Co$ различного состава.

2. Методика моделирования и используемый потенциал межатомного взаимодействия

Молекулярно-динамическое (МД) моделирование проводилось с использованием авторского программного обеспечения ClusterEvolution, апробированного ранее, в том числе для биметаллических наносплавов [14, 15]. Нами был рассмотрен биметаллический наносплав $Au-Co$ стехиометрических составов A_3B, AB, AB_3 с общим числом атомов 200. Шаг по времени в МД эксперименте составлял 1 фс. Компьютерный эксперимент заключался в охлаждении начальной конфигурации от 1000 К до 100 К со скоростью изменения температуры 10^{13} К·с⁻¹. Далее мы повторяли эксперимент при наличии внешнего давления 4 ГПа и внешнего давления 10 ГПа. Выполнялась серия по 20 экспериментов для каждого значения давления. Для вычисления общей потенциальной энергии, а также действующих между атомами сил, использовалось следующее аналитическое выражение полуэмпирического потенциала сильной связи:

$$U = \sum_{i=1}^N \left\{ \sum_{j \neq i}^N A \exp \left(-p \left(\frac{r_{ij}}{r_0} - 1 \right) \right) - \left[\sum_{j \neq i}^N \zeta^2 \exp \left(-2q \left(\frac{r_{ij}}{r_0} - 1 \right) \right) \right]^{1/2} \right\}, \quad (1)$$

где r_{ij} – расстояние между атомами i и j в кластере, r_0 – равновесное расстояние между ближайшими соседями в ГЦК решетке, A, ζ, p, q – свободные параметры, которые подбираются по экспериментальным

значениям энергии когезии, плотности, параметру решетки, независимым упругим постоянным в соответствующей кристаллической структуре [16].

Перекрестные параметры были рассчитаны с использованием правила Лоренца-Бертло [17]. Таким образом, для варьирования степени размерного несоответствия в модели достаточно изменять параметр r_0 для моносвязей золота и пересчитывать по формуле для смешанных связей:

$$r_0(AB) = [r_0(A) + r_0(B)] / 2. \quad (2)$$

3. Анализ полученных результатов

В каждой серии из 20 компьютерных экспериментов выбирались 5 конечных конфигураций, обладающих наименьшими потенциальными энергиями по серии. Далее проводился анализ получаемых при охлаждении атомных структур (каждой из отобранных конфигураций) в ClusterEvolution и дополнительно в программном пакете OVITO [18]. Выполнялась идентификация икосаэдрической (ИК) фазы, а также кристаллических ГЦК, ГПУ и ОЦК фаз. Выявлено, что число ИК атомов является хорошим топологическим деструктором для наносплава рассматриваемой нуклеарности. Образуются три основных структурных мотива: простой икосаэдр с одним ИК ядром, икосаэдр второго порядка либо цепочки ИК ядер (общим количеством ≤ 13) и фаза Лавеса (несколько ИК количеством более 13 в пересечении с полиэдрами Франка-Каспера).

На рис. 1 и 2 приведены графики удельной, на атом, потенциальной энергии биметаллической частицы $Co-Au$ при различных значениях внешнего давления P и коэффициента (фактора) размерного несоответствия $\xi = r_0(Au) / r_0(Co)$. В работе были использованы следующие коэффициенты размерного несоответствия: 1,03; 1,09; 1,15; 1,21. Рассчитанные значения усреднялись по пяти конечным конфигурациям в каждой серии при 100К. Одна серия соответствует одной точке на графике.

Установлено, что для эквиатомного состава удельная потенциальная энергия увеличивается с ростом внешнего давления по закону близкому к линейному (см. рис. 1) на интервале до 10 ГПа. При этом с ростом доли атомов Au зависимость удельной потенциальной энергии от внешнего давления проявляет несколько нелинейный характер. Увеличение доли атомов Au при каждом фиксированном значении давления нелинейно увеличивает удельную потенциальную энергию.

Приведенная на рис. 2 зависимость удельной потенциальной энергии биметаллической частицы $Co-Au$ различного состава от коэффициента размерного несоответствия ξ носит более сложный характер. Видим, что минимум удельной потенциальной энергии зависит от состава НЧ. При увеличении доли атомов Au минимум потенциальной энергии смещается в сторону более низких значений коэффициента размерного несоответствия.

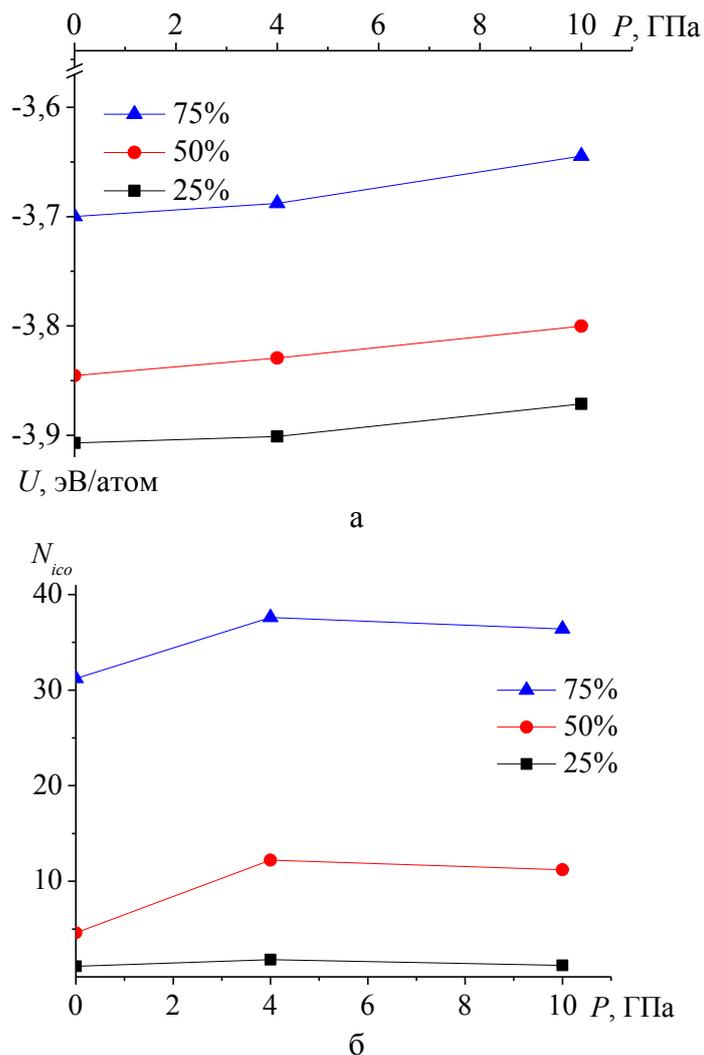


Рис. 1. Зависимость от внешнего давления P удельной потенциальной энергии (а) и среднего числа ИК атомов (б) для биметаллических наносплавов $Co-Au$. На графиках указана доля атомов Au .

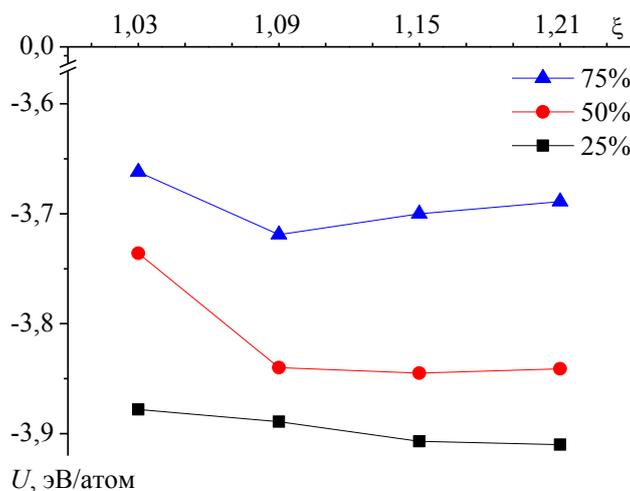


Рис. 2. Зависимость удельной потенциальной энергии биметаллических частиц $Co-Au$ различного состава от коэффициента размерного несоответствия ξ при нулевом внешнем давлении. На графиках указана доля атомов Au .

Биметаллические частицы Au_3Co (см. рис.3 а) показывают разнообразие внутренней структуры, они наиболее стабильны при значении размерного несоответствия $\xi=1,09$. Частицы $Co-Au$ эквиатомного состава (см. рис. 3 б) наиболее стабильны при значении размерного несоответствия $\xi=1,15$ и обладают несколькими ядрами ИК симметрии. Полученный нами при релаксации до нуля температур глобальный минимум показан на рис. 4. Изомер в приповерхностном слое имеет семь ядер ИК симметрии, включая 2×2 сдвоенных ядер (общий атом в паре) и три отдельных ядра. При уменьшении доли атомов Au до 25 % биметаллические НЧ имеют простую икосаэдрическую форму (см. рис. 3 в). Минимальное значение удельной потенциальной энергии, на рассмотренном интервале коэффициента размерного несоответствия ξ , в этом случае соответствует значению $\xi=1,21$.

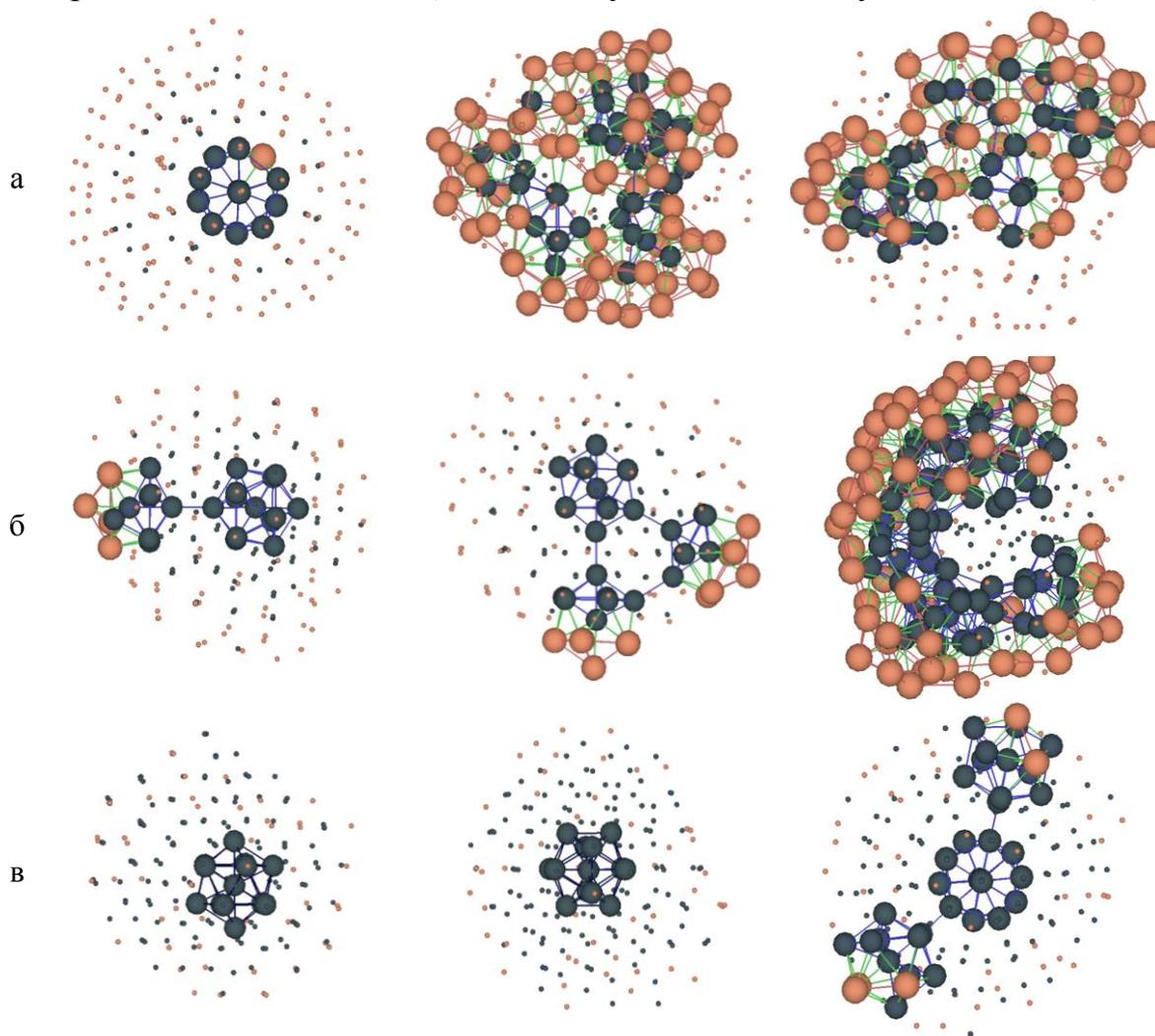


Рис. 3. Ядра икосаэдрической симметрии в кластерах $Au_{150}Co_{50}$ (а), $Au_{100}Co_{100}$ (б) и $Au_{100}Co_{150}$ (в): при $\xi=1,09$ слева, $\xi=1,15$ по центру и $\xi=1,21$ справа. Атомы показаны в половинном масштабе: кобальт – синим, золото – коричневым цветом.

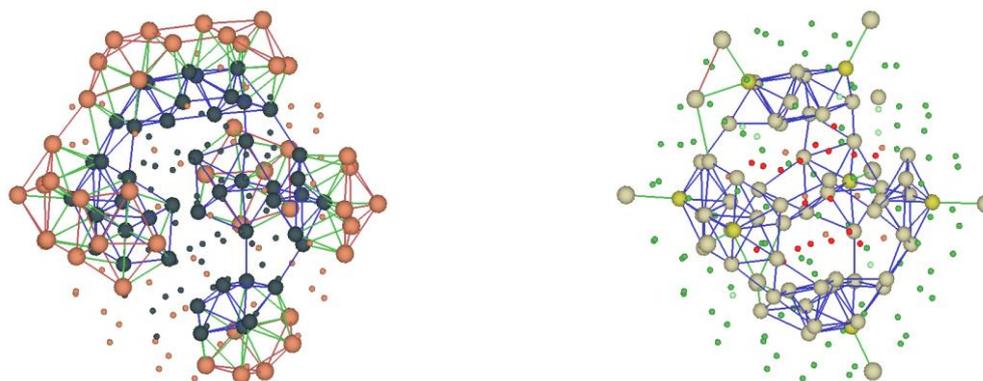


Рис. 4. Оптимальная структура кластера эквиатомного состава $Au_{100}Co_{100}$: ИК ядра слева (цветовое обозначение соответствует рис. 3) и оси симметрии пятого порядка справа (центральные ИК атомы закрашены жёлтым). Атомы показаны в масштабе 30%.

4. Заключение

Таким образом, при формировании структурно-фазового состава в биметаллических наносистемах внешнее давление можно рассматривать как управляющий параметр, сравнимый по доступности, например, со скоростью изменения температуры. Выбор бинарной системы с определённым соотношением атомных радиусов в сочетании с регулированием величины внешнего давления позволяет получать биметаллические наносплавы различной структуры и фазового состава. Соответственно, получаемые НЧ будут обладать различными физико-химическими характеристиками.

Для системы $Au-Co$ характерны три основных структурных мотива: простой икосаэдр с единым ядром, цепочки икосаэдров и структура с фазами Лавеса. Расширение полученных закономерностей на другие системы металлов потребует дополнительных исследований. Компьютерное моделирование и экспериментальное исследование [19] процессов, происходящих под действием высокого давления в биметаллических НЧ, позволяет расширить наши представления о механизмах структурно-фазовых превращений.

Исследования выполнены при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках выполнения государственного задания в сфере научной деятельности (проект № 0817-2020-0007). Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научных проектов № 20-37-70007 и № 20-33-90192. Acknowledgments: The reported study was funded by RFBR according to the research projects № 20-37-70007 and № 20-33-90192.

Библиографический список:

1. Сдобняков, Н.Ю. Изучение термодинамических и структурных характеристик

наночастиц металлов в процессах плавления и кристаллизации: теория и компьютерное моделирование: монография / Н.Ю. Сдобняков, Д.Н. Соколов. – Тверь: Тверской государственный университет, 2018. – 176 с.

2. **Мясниченко, В.С.** Влияние внешнего давления на температуру фазовых переходов в биметаллических серебросодержащих наночастицах / В.С. Мясниченко, В.В. Кулагин, Д.Н. Соколов, Н.Ю. Сдобняков, Л. Кирилов // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2016. – Вып. 8. – С. 259-265.

3. **Богданов, С.С.** Особенности процесса кристаллизации в биметаллических наноструктурах под внешним давлением / С.С. Богданов, В.С. Мясниченко, А.Ю. Колосов, Д.Н. Соколов, Ю.Н. Акимова, А.С. Антонов, Н.Ю. Сдобняков // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2019. – Вып. 11. – С. 422-430. DOI: 10.26456/pcascnn/2019.11.422.

4. **Sdobnyakov, N.Yu.** On the mechanical stability conditions for nanoparticles in vacuum and under an external pressure / N.Yu. Sdobnyakov, V.M. Samsonov, A.N. Bazulev // Journal of Physics: Conference Series. – 2019. – V. 1352. – № 1. – P. 012045-1-012045-4. DOI: 10.1088/1742-6596/1352/1/012045.

5. **Samsonov, V.M.** A thermodynamic approach to mechanical stability of nanosized particles / V.M. Samsonov, N.Yu. Sdobnyakov // Central European Journal of Physics. – 2003. – V. 1. – I. 2. – P. 344-354. DOI: 10.2478/BF02476301.

6. **Estrin, E.** Extreme grain refinement by severe plastic deformation: A wealth of challenging science / E. Estrin, A. Vinogradov // Acta Materialia. – 2013. – V. 61. – I. 3. – P. 782-817. DOI: 10.1016/j.actamat.2012.10.038.

7. **Васильев, Л.С.** Неравновесные кооперативные явления и процессы при интенсивном пластическом деформировании металлов и сплавов. I. Деформационно-индуцированные структурные превращения / Л.С. Васильев, А.В. Корзников // Деформация и разрушение материалов. – 2014. – № 3. – С. 2-11.

8. **Васильев, Л.С.** Влияние давления на процессы формирования и эволюции наноструктуры в пластически деформируемых металлах и сплавах / Л.С. Васильев, Л.С. Ломаев // Физика металлов и металловедение. – 2019. – Т. 120. – № 6. – С. 654-660. DOI: 10.1134/S0015323019060147.

9. **Васильев, Л.С.** К теории предельных состояний наноструктур деформированных твердых тел / Л.С. Васильев // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2009. – Т. 136. – Вып. 2 (8). – С. 254-264.

10. **Li, G.G.** Overcoming the interfacial lattice mismatch: geometry control of gold–nickel bimetallic heteronanostructures / G.G. Li, D.A. Blom, S. Pandey, et al. // Particle & Particle Systems Characterization. – 2017. – V. 35. – I. 5. – Art. № 1700361. – 7 p. DOI: 10.1002/ppsc.201700361.

11. **Huang, J.** Highly catalytic Pd–Ag bimetallic dendrites / J. Huang, S. Vongehr, S. Tang, H. Lu, X. Meng // The Journal of Physical Chemistry C. – 2010. – V. 114. – I. 35. – P. 15005-15010. DOI: 10.1021/jp104675d.

12. **Guo, S.** Tuning nanoparticle catalysis for the oxygen reduction reaction / S. Guo, S. Zhang, S. Sun // Angewandte Chemie International Edition. – 2013. – V. 52. – I. 33. – P. 8526-8544. DOI: 10.1002/anie.201207186.

13. **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.

14. **Myasnichenko, V.S.** Research of the Cu–Au nanocluster form and structure dependence on cooling rate with various concentrations of components / V.S. Myasnichenko,

- M.D. Starostenkov // IEEE 2nd Russia school and seminar on fundamental problems of micro/nanosystems technoligis (MNST), Novosibirsk, 09-11 December 2010: papers. – Novosibirsk, 2010. – P. 23-25. DOI: 10.1109/MNST.2010.5687129.
15. **Myasnichenko, V.S.** Formation of fivefold axes in the FCC-metal nanoclusters / V.S. Myasnichenko, M.D. Starostenkov // Applied Surface Science. – 2012. – V. 260. – P. 51-53. DOI: 10.1016/j.apsusc.2012.03.039.
16. **Cleri, F.** Tight binding potentials for transition metals and alloys / F. Cleri, V. Rosato // Physical Reveiw B. – 1993. – V. 48. – I. 1. – P. 22-33. DOI: 10.1103/PhysRevB.48.22.
17. **Paz Borbón, L.O.** Computational studies of transition metal nanoalloys / L.O. Paz Borbón // Doctoral Thesis accepted by University of Birmingham, United Kingdom. – Springer-Verlag: Berlin, Heidelberg, 2011. – 155 p.
18. **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.
19. **Васильев, Л.С.** Методы исследования структурно-фазовых превращений в наноматериалах, деформируемых под давлением / Л.С. Васильев, Л.С. Ломаев // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. – 2019. – № 2. – С. 63-85. DOI: 10.15593/perm.mech/2019.2.06.

References:

1. **Sdobnyakov, N.Yu.** Izuchenie termodinamicheskikh i strukturnykh kharakteristik nanochastits metallov v protsessakh plavleniya i kristallizatsii: teoriya i komp'yuternoe modelirovanie: monografiya [Study of thermodynamic and structural characteristics of metal nanoparticles in melting and crystallization processes: theory and computer modeling: monograph] / N.Yu. Sdobnyakov, D.N. Sokolov. – Tver: Tverckoi gosudarstvennyi universitet, 2018. – 176 p. (In Russian).
2. **Myasnichenko, V.S.** Vliyanie vneshnego davleniya na temperaturu fazovykh perekhodov v bimetallicheskih serebrosoderzhashchikh nanochastitsakh [Effect of external pressure on the phase transition temperature in bimetallic argentic nanoparticles] / V.S. Myasnichenko, V.V. Kulagin, D.N. Sokolov, N.Yu. Sdobnyakov, L. Kirilov // Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials. – 2016. – I. 8. – P. 259-265. (In Russian).
3. **Bogdanov, S.S.** Osobennosti protsessa kristallizatsii v bimetallicheskih nanostrukturakh pod vneshnim davleniem [The features of the crystallization process in bimetallic nanostructures under external pressure] / S.S. Bogdanov, V.S. Myasnichenko, A.Yu. Kolosov, D.N. Sokolov, Yu.N. Akimova, A.S. Antonov, N.Yu. Sdobnyakov // Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials. – 2019. – I. 11. – P. 422-430. DOI: 10.26456/pcascnn/2019.11.422. (In Russian).
4. **Sdobnyakov, N.Yu.** On the mechanical stability conditions for nanoparticles in vacuum and under an external pressure / N.Yu. Sdobnyakov, V.M. Samsonov, A.N. Bazulev // Journal of Physics: Conference Series. – 2019. – V. 1352. – № 1. – P. 012045-1-012045-4. DOI: 10.1088/1742-6596/1352/1/012045.
5. **Samsonov, V.M.** A thermodynamic approach to mechanical stability of nanosized particles / V.M. Samsonov, N.Yu. Sdobnyakov // Central European Journal of Physics. – 2003. – V. 1. – I. 2. – P. 344-354. DOI: 10.2478/BF02476301.
6. **Estrin, E.** Extreme grain refinement by severeplastic deformation: A wealth of challenging science / E. Estrin, A. Vinogradov // Acta Materialia. – 2013. – V. 61. – I. 3. – P. 782-817.

DOI: 10.1016/j.actamat.2012.10.038.

7. **Vasilev, L.S.** Neravnovesnye kooperativnye yavleniya i protsessy pri intensivnom plasticheskom deformirovanii metallov i splavov. I. Deformatsionno-indutsirovannye strukturnye prevrashcheniya [Non-equilibrium cooperative phenomena and processes during severe plastic deformation of metals and alloys. I. Deformation-induced structural transformations] / L.S. Vasilev, A.V. Korznikov // Deformatsiya i razrushenie materialov. – 2014. – № 3. – P. 2-11. (In Russian).

8. **Vasilev, L.S.** Influence of pressure on the processes of formation and evolution of the nanostructure in plastically deformed metals and alloys / L.S. Vasilev, S.L. Lomaev // The Physics of Metals and Metallography. – 2019. – V. 120. – I. 6. – P. 600-606. DOI: 10.1134/S0031918X19060140.

9. **Vasil'ev, L.S.** On the theory of limiting states of deformed nanostructured solids / L.S. Vasil'ev // Journal of Experimental and Theoretical Physics. – 2009. – V. 109. – I. 2. – P. 213-220. DOI: 10.1134/S1063776109080056.

10. **Li, G.G.** Overcoming the interfacial lattice mismatch: geometry control of gold–nickel bimetallic heteronanostructures / G.G. Li, D.A. Blom, S. Pandey, et al. // Particle & Particle Systems Characterization. – 2017. – V. 35. – I. 5. – Art. № 1700361. – 7 p. DOI: 10.1002/ppsc.201700361.

11. **Huang, J.** Highly catalytic *Pd*–*Ag* bimetallic dendrites / J. Huang, S. Vongehr, S. Tang, H. Lu, X. Meng // The Journal of Physical Chemistry C. – 2010. – V. 114. – I. 35. – P. 15005-15010. DOI: 10.1021/jp104675d.

12. **Guo, S.** Tuning nanoparticle catalysis for the oxygen reduction reaction / S. Guo, S. Zhang, S. Sun // Angewandte Chemie International Edition. – 2013. – V. 52. – I. 33. – P. 8526-8544. DOI: 10.1002/anie.201207186.

13. **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.

14. **Myasnichenko, V.S.** Research of the *Cu*–*Au* nanocluster form and structure dependence on cooling rate with various concentrations of components / V.S. Myasnichenko, M.D. Starostenkov // IEEE 2nd Russia school and seminar on fundamental problems of micro/nanosystems technolgis (MNST), Novosibirsk, 09-11 December 2010: papers. – Novosibirsk, 2010. – P. 23-25. DOI: 10.1109/MNST.2010.5687129.

15. **Myasnichenko, V.S.** Formation of fivefold axes in the FCC-metal nanoclusters / V.S. Myasnichenko, M.D. Starostenkov // Applied Surface Science. – 2012. – V. 260. – P. 51-53. DOI: 10.1016/j.apsusc.2012.03.039.

16. **Cleri, F.** Tight binding potentials for transition metals and alloys / F. Cleri, V. Rosato // Physical Reveiw B. – 1993. – V. 48. – I. 1. – P. 22-33. DOI: 10.1103/PhysRevB.48.22.

17. **Paz Borbón, L.O.** Computational studies of transition metal nanoalloys / L.O. Paz Borbón // Doctoral Thesis accepted by University of Birmingham, United Kingdom. – Springer-Verlag: Berlin, Heidelberg, 2011. – 155 c.

18. **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.

19. **Vasilev, L.S.** Metody issledovaniya strukturno-fazovykh prevrashchenii v nanomaterialakh, deformiruemykh pod davleniem [Research methods of structural and phase transformations in nanomaterials deformed under pressure] / L.S. Vasilev, S.L. Lomaev // PNRPU Mechanics Bulletin. – 2019. – № 2. – P. 63-85. DOI: 10.15593/perm.mech/2019.2.06. (In Russian).

**CRYSTALLIZATION OF BIMETALLIC NANOPARTICLES: EFFECT OF ATOMIC SIZE
MISMATCH AND EXTERNAL PRESSURE**

V.S. Myasnichenko¹, P.M. Ershov¹, S.S. Bogdanov¹, K.G. Savina¹, P.V. Matrenin²,
N.Yu. Sdobnyakov¹

¹*Tver State University, Tver, Russia*

²*Novosibirsk State Technical University, Novosibirsk, Russia*

DOI: 10.26456/pcascnn/2020.12.274

Abstract: In this work, molecular dynamics simulation is carried out of crystallization of bimetallic *Co–Au* nanoparticles from the melt with various compositions. The effects of the dimensional mismatch between the atomic radii and external pressure on the final configurations cooled up to the temperature 100 K was studied. It was found that the specific potential energy for the bimetallic *Co–Au* nanoparticle increases with an increase in external pressure. Besides, as the external pressure increases, structural changes occur, namely, the average number of icosahedral atoms inside the cluster changes in a nonlinear character. The dependence of the specific potential energy of bimetallic *Co–Au* nanoparticles of various compositions on the coefficient of the dimensional mismatch ξ is more complex. The minimum for the gold-enriched composition and equiatomic composition is observed at the values $\xi=1,09$ and $\xi=1,15$, respectively.

Keywords: *bimetallic nanoparticles, molecular dynamics, structural transformation, icosahedron, external pressure, size mismatch.*

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

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

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

Савина Ксения Геннадьевна – студентка 4 курса кафедры общей физики ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Павел Викторович Матренин – к.т.н., старший преподаватель кафедры «Системы электроснабжения предприятий» ФГБОУ ВО «Новосибирский государственный технический университет»

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

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

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

Sergei S. Bogdanov – postgraduate student, General Physics Department, Tver State University

Ksenia G. Savina – 4th year student, General Physics Department, Tver State University

Pavel V. Matrenin – Ph. D., Senior Lecturer of the «Power Supply Systems of Enterprises» Department, Novosibirsk State Technical University

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

Поступила в редакцию/received: 04.10.2020; после рецензирования/revised: 04.11.2020; принята/accepted 15.11.2020.