

**ПРОБЛЕМА ПОЛУЧЕНИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ФАЗ В
ПРОЦЕССЕ ОХЛАЖДЕНИЯ БИНАРНЫХ НАНОЧАСТИЦ
Au-Co И Ti-V**

К.Г. Савина, Р.Е. Григорьев, А.Д. Веселов, С.С. Богданов, П.М. Ершов, С.А. Вересов,
Д.Р. Зорин, В.С. Мясниченко, Н.Ю. Сдобняков
ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»
170002, Россия, Тверь, Садовый пер., 35
nsdobnyakov@mail.ru

DOI: 10.26456/pcascnn/2023.15.543

Аннотация: Рассмотрены процессы структурообразования в бинарных наночастицах *Co-Au* и *Ti-V*, а также факторы, влияющие на процесс кристаллизации. В качестве объектов исследования выступали бинарные наночастицы *Co-Au* и *Ti-V*, содержащие $N=400, 800, 1520$ и 5000 атомов, эквиатомного состава. Компьютерный эксперимент проводился методом молекулярной динамики. Межатомное взаимодействие описывалось потенциалом сильной связи. По результатам серий компьютерных экспериментов было установлено, что основными факторами, влияющими на возможность получения кристаллических фаз являются: скорость охлаждения бинарных наночастиц, их размер и размерное несоответствие атомов, входящих в состав, а также характер взаимодействия атомов металлов. Проявление стабильности/нестабильности в бинарных наночастицах может быть связано с закономерностями образования кристаллических фаз. При этом склонность к сегрегации одного из компонентов в бинарной системе может быть не основным фактором определяющим стабильность/нестабильность такой системы.

Ключевые слова: метод молекулярной динамики, потенциал сильной связи, бинарные наночастицы, кобальт, золото, титан, ванадий, размерное несоответствие, кристаллизация.

1. Введение

Металлические наночастицы, состоящие из двух или более металлов, обладают уникальными оптическими, электрическими и каталитическими свойствами. Более того, в области гетерогенного катализа бинарные наночастицы представляют собой перспективный тип катализатора, поскольку свойства материала могут быть связаны с элементами, образующими наночастицы. Поэтому интеграция двух или более металлов в одну и ту же частицу весьма желательна. Хорошим примером этого эффекта может служить сплав магнитных металлов, таких как *Co*, с немагнитными материалами, которые приносят каталитические или оптические эффекты в конечный продукт. Более того, наблюдение гигантского магнитосопротивления в системах, построенных из магнитных и немагнитных твердых тел, возобновило интерес к этим материалам.

Актуальность исследований бинарных наночастиц *Co-Au* была в достаточной мере описана в работе [1, 2] при исследовании закономерностей структурообразования для системы ядро-оболочка. Многообразие структурообразования в данной системе проявляется как

формированием зародышей так называемых трехслойных систем ядро–оболочка (onion-like structure) [3, 4], так и появлением дефектов – полостей, которые могут активно мигрировать по объему наночастицы или происходить процесс их самопроизвольного залечивания. При этом как отмечается нами в [1] дефекты – полости могут появляться как в ядре, так и на границе двух компонентов наночастицы. Данный механизм может быть обусловлен размерным несоответствием атомов, входящих в наночастицу. Номинальное несоответствие решетки между *Co* и *Au* составляет порядка 14,2%, но при этом оказывается [5], что механизм залечивания дефектов/полостей как раз связан с нанометровым диапазоном размеров.

В настоящее время проблема прогнозирования стабильной пространственной структуры металлических кластеров, в том числе бинарных наносплавов является актуальной задачей, как с фундаментальной, так и прикладной точек зрения. В отличие от бинарной наносистемы *Ti–Al* [6, 7] наносистема *Ti–V* в некоторых случаях проявляет нестабильность, а также при определенных условиях охлаждения может быть подвержена распаду. Косвенным подтверждением такого поведения могут служить результаты расчетов концентрационных зависимостей энтальпии смешения для титансодержащих сплавов [8]: энтальпия смешения ОЦК фазы не имеет локального минимума; энтальпия смешения ГПУ фазы имеет слабо нелинейный характер. Кроме того, в работе [9] отмечается динамическая нестабильность титанобогащенных наносплавов *Ti–V* именно на основе анализа концентрационных зависимостей энтальпии смешения. Причем данный эффект наблюдается именно при низких температурах и подтверждается так же данными работ [10, 11].

В данной работе предпринята попытка установить, описать и сравнить специфические закономерности структурообразования в вышеперечисленных бинарных наночастицах, определить основные факторы, влияющие на процесс кристаллизации.

2. Постановка задачи и методика эксперимента

В качестве объектов исследования выступали бинарные наночастицы *Co–Au* и *Ti–V*, содержащие $N = 400, 800, 1520$ и 5000 атомов. Для исследования использовались бинарные наночастицы эквиатомного состава. Компьютерный эксперимент проводился методом молекулярной динамики (МД), с использованием авторского программного обеспечения ClusterEvolution [12].

Исследуемые бинарные наночастицы (см. рис. 1) нагревались до температуры, на 50 К выше температуры плавления более тугоплавкого

металла в системе, а затем охлаждались до 0,1 К. Шаг по времени в МД эксперименте составлял 1 фс. Для моделирования межатомного взаимодействия использовался многочастичный потенциал сильной связи [13]. Перекрестные параметры были рассчитаны с использованием модифицированного правила Лоренца-Бертло [14]. Кроме того, использовался программный комплекс OVITO [15] для анализа наличия кристаллических фаз (ГЦК, ГПУ) методом сопоставления полиэдрических шаблонов, который основан на поочередном отображении локальной окрестности атома на каждую геометрическую структуру идеальной формы.

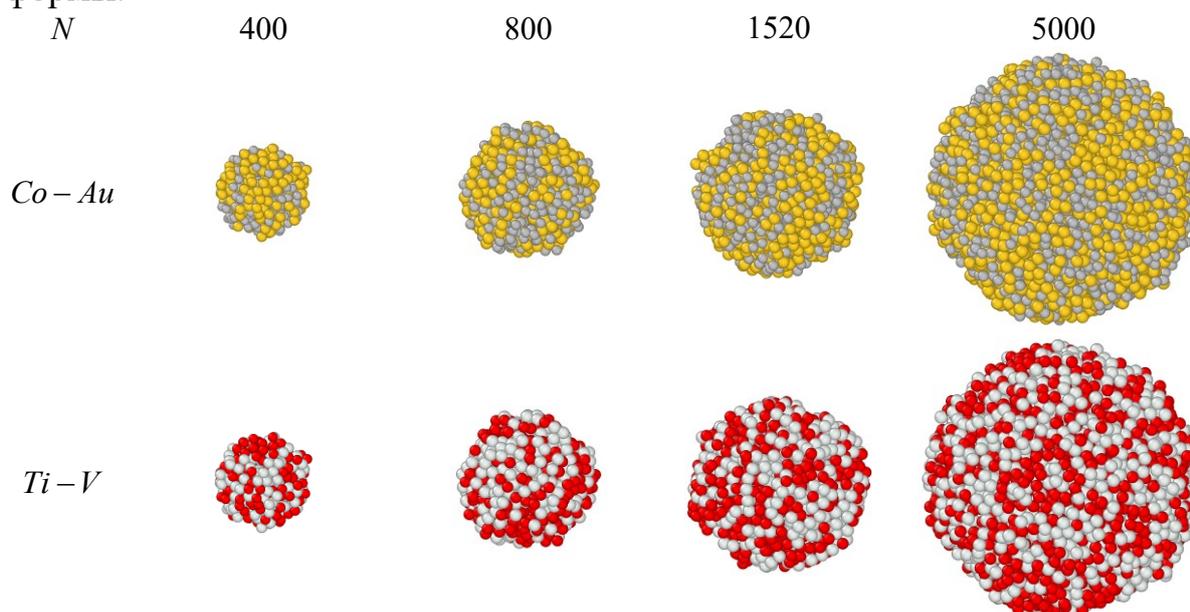


Рис. 1. Начальные конфигурации бинарных наночастиц эквиатомного состава *Co–Au* и *Ti–V*, содержащие $N = 400, 800, 1520$ и 5000 атомов. Желтые атомы – золото, серые – серебро, светло-серые – титан, красные – ванадий.

3. Результаты и обсуждение

Сценарии структурообразования бинарных наночастиц *Co–Au* и *Ti–V* в зависимости от различных факторов имеют как схожие черты, так и принципиальные различия. Ранее нами подробно изучались процессы структурообразования для бинарных наночастиц *Co–Au*, *Au–Ag*, *Ti–Al*, *Ti–V*, полученных при кристаллизации, отличающихся составом компонент и размером наночастиц [16]. Полученные данные для температур кристаллизации рассматриваемых наночастиц представлены в Таблице 1.

На рис. 2 представлены конечные конфигурации наночастиц *Co–Au* и *Ti–V*, полученные при кристаллизации. Для обеих систем наблюдается поверхностная сегрегация соответственно атомов *Au* и *Ti*. В качестве примера на рис. 2 представлены также сечения бинарных наночастиц

Au–Co эквиатомного состава разных размеров. С увеличением размера наночастицы фиксируются небольшие зоны из атомов кобальта или ванадия, которые окружены атомами золота или титана соответственно. Возможно, в дальнейшем, следует ожидать формирование более сложной структуры, чем ядро-оболочка – onion-like структуры, в том числе множественные зоны, представленные одной фазой. Кроме того, с увеличением числа атомов, в том числе происходит рост числа слоев оболочки из золота, однако для *Ti–V* подобный эффект не наблюдается.

Таблица 1. Температура кристаллизации* бинарных наночастиц *Ti–V* и *Co–Au* различного размера и состава.

<i>N</i>	Состав <i>Ti–V</i> , %				
	0-100	25-75	50-50	75-25	100-0
400	563	609	621	638	695
800	575	646	661	672	724
1520	592	667	701	698	730
5000	621	701	736	730	745
<i>N</i>	Состав <i>Co–Au</i> , %				
	0-100	25-75	50-50	75-25	100-0
400	448	519	667	828	925
800	460	552	707	862	971
1520	491	718	736	868	977
5000	534	799	874	897	995

* Представлены усредненные результаты серии экспериментов. С уменьшением размера системы погрешность расчетов (разброс значений в серии экспериментов) может достигать 5%. Результаты работы [16] получены с меньшей выборкой и соответствуют одному из выбранных расчетов.

Процессы сегрегации также удобно проследить на рис. 3, где представлено распределение по атомам с выделением определенного сорта атомов. С целью более детального рассмотрения процессов кристаллизации наночастицы исследовались на наличие кристаллических фаз с использованием метода сопоставления полиэдрических шаблонов. Было установлено (см. рис. 4), что в бинарных наночастицах эквиатомного состава образуются множественные малые ядра икосаэдрической симметрии, а также цепочки из них.

С ростом размера нанокластера (уже при $N = 400$) идентифицируется структура из пересекающихся плоскостей атомов ГПУ фазы. Атомы титана формируют некристаллические фазы, включая ИК, в то время как атомы ванадия в основном формируют ГПУ структуру. Причем ванадий с точки

зрения кристаллизации проявляет себя хуже в сплавах с титаном, чем, например, алюминий. Для бинарных наночастиц в системе $Ti-Al$ наблюдается ярко выраженная фазовая сегрегация ГЦК и ГПУ фаз [16].

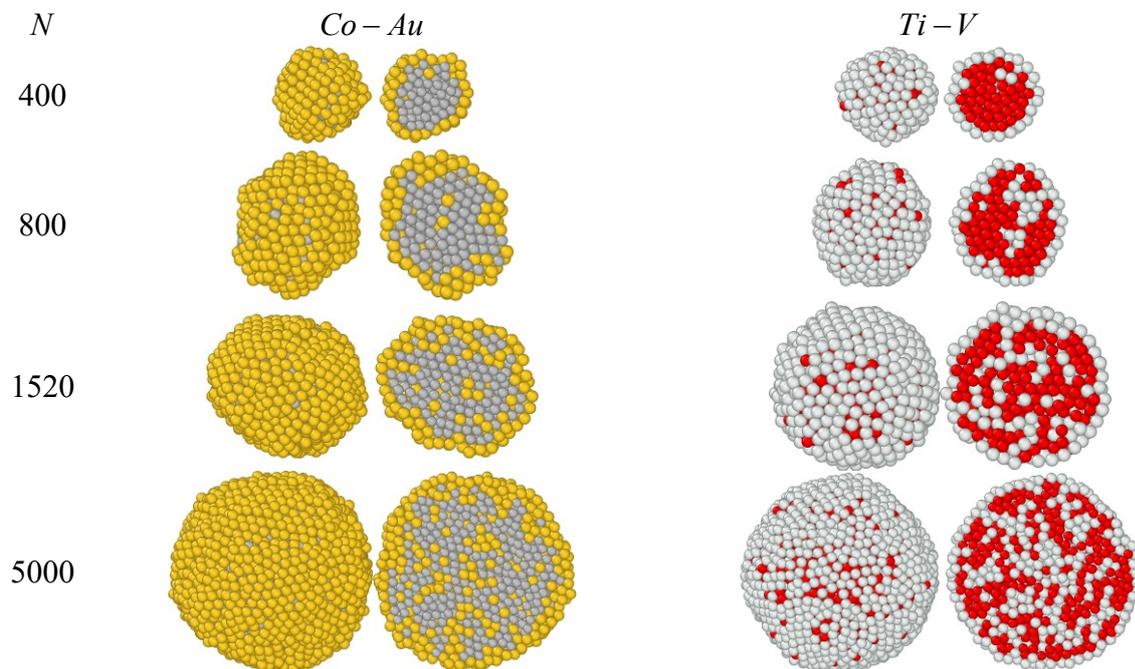


Рис. 2. Конечные конфигурации бинарных наночастиц эквимолярного состава $Co-Au$ и $Ti-V$, содержащие $N = 400, 800, 1520$ и 5000 атомов (левый столбец представлены объемные конфигурации, правый столбец – сечение плоскостью). Желтые атомы – золото, серые – серебро, светло-серые – титан, красные – ванадий.

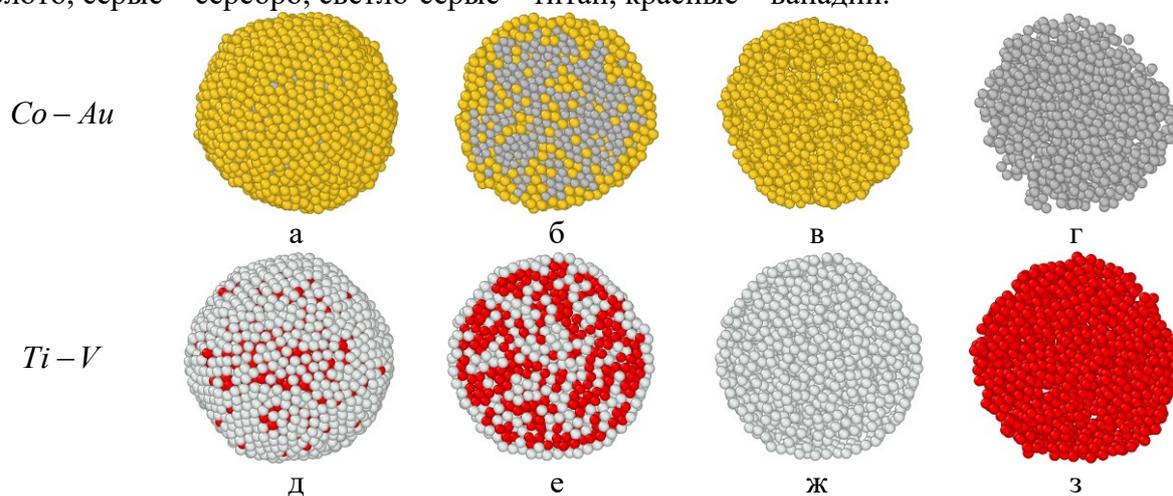


Рис. 3. Конечные конфигурации (объемные и центральные сечения) бинарных наночастицы $Co-Au$ и $Ti-V$ эквимолярного состава, содержащие $N = 5000$ атомов, распределение по атомам с выделением определенного сорта атомов (в-г, ж-з). Цвета сортов атомов соответствуют рис. 2.

Однако с увеличением размера наночастиц до $N = 5000$ доля атомов, образующих кристаллические фазы, заметно уменьшается (см. рис. 4). Отсутствие кристаллизации так же подтверждается поведением

калорической кривой. На основе анализа поведения калорических зависимостей потенциальной части удельной внутренней энергии возможно определить температуру кристаллизации для бинарной наночастицы $Co-Au$ размером $N=800$ атомов (см. рис. 5). На данном графике могут быть выделены температуры, отвечающие началу T_{start} и концу T_{end} процесса соответствующего фазового перехода. В тоже время для системы $Co-Au$ размером $N=1520$ атомов характерный скачок на графике не наблюдается (см. рис. 6).

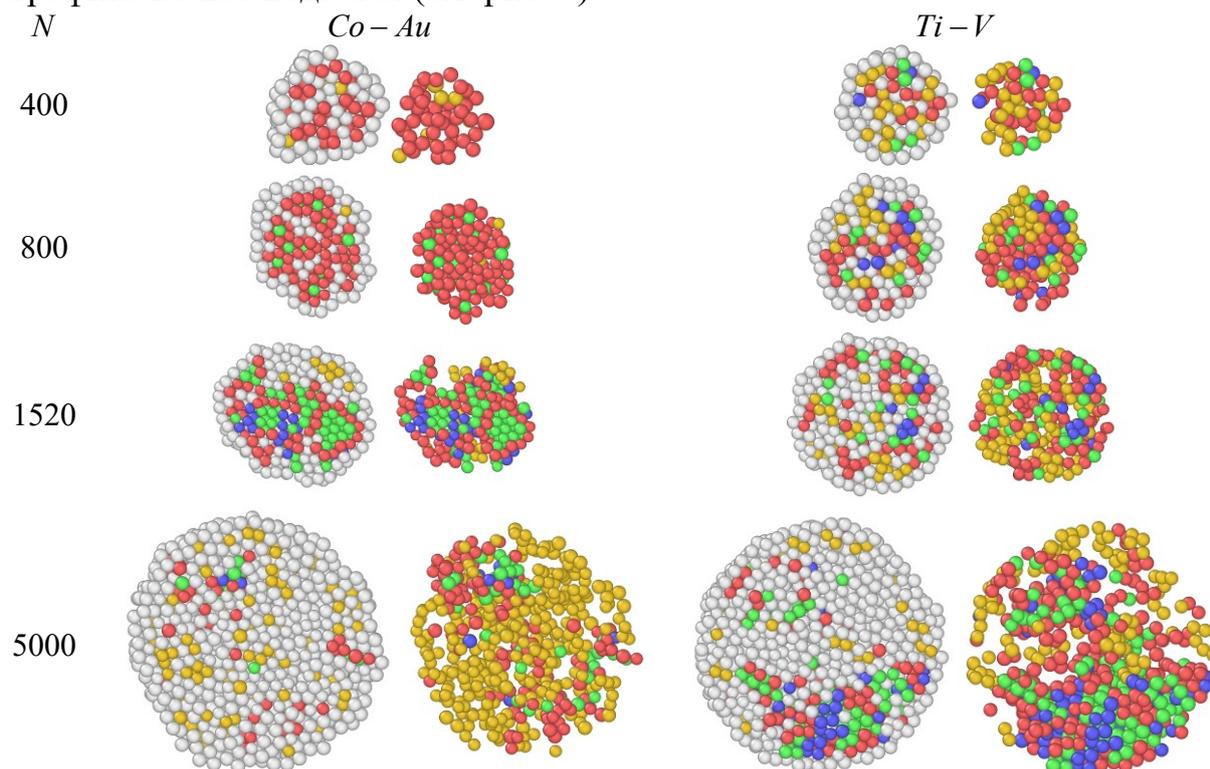


Рис. 4. Конечные конфигурации бинарных наночастиц эквиатомного состава $Co-Au$ и $Ti-V$, содержащие $N=400, 800, 1520$ и 5000 атомов в сечении плоскостью. Цветовое обозначение атомов соответствует соотнесённым им упорядоченным фазам: зеленые – ГЦК, красные – ГПУ, синие – ОЦК, желтые – ИК ядра, белые – нераспознанные (справа – конфигурации только с распознанными атомами).

Скорость охлаждения – это параметр, изменение которого позволяет управлять конечной структурой охлажденных многокомпонентных наночастиц. На рис. 6 представлены температурные зависимости потенциальной части удельной внутренней энергии для системы $Co-Au$ размером $N=1520$ атомов для трех различных скоростей охлаждения. Видно, что при скоростях охлаждения $0,3$ К/пс и $0,6$ К/пс не удалось идентифицировать фазовый переход. Таким образом, определение оптимальной скорости охлаждения для определенного состава и размера бинарных наночастиц является задачей, требующей отдельного изучения.

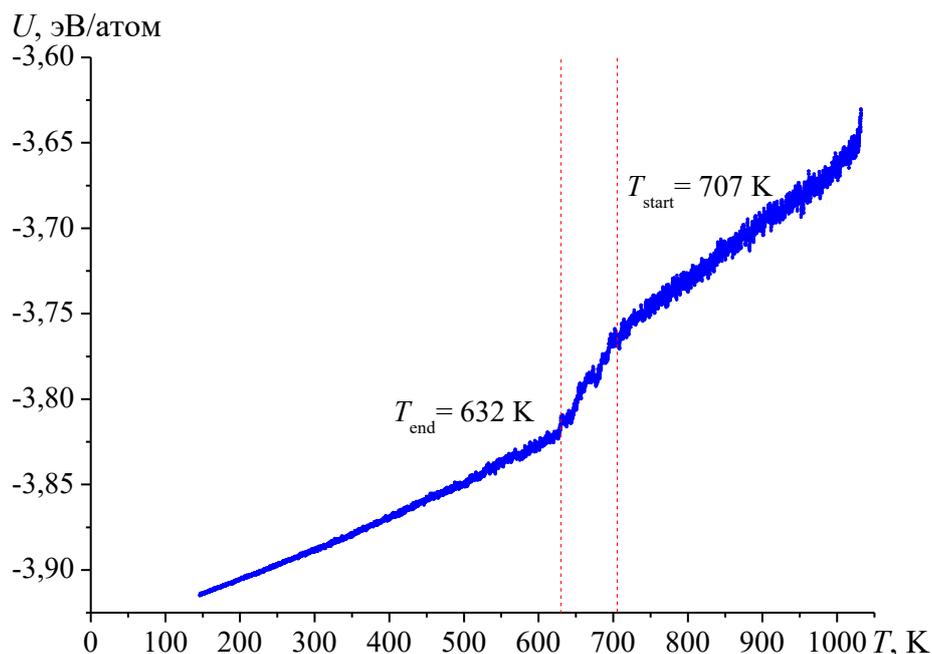


Рис. 5. Типичная температурная зависимость потенциальной части удельной внутренней энергии наночастицы $Co-Au$ ($N=800$).

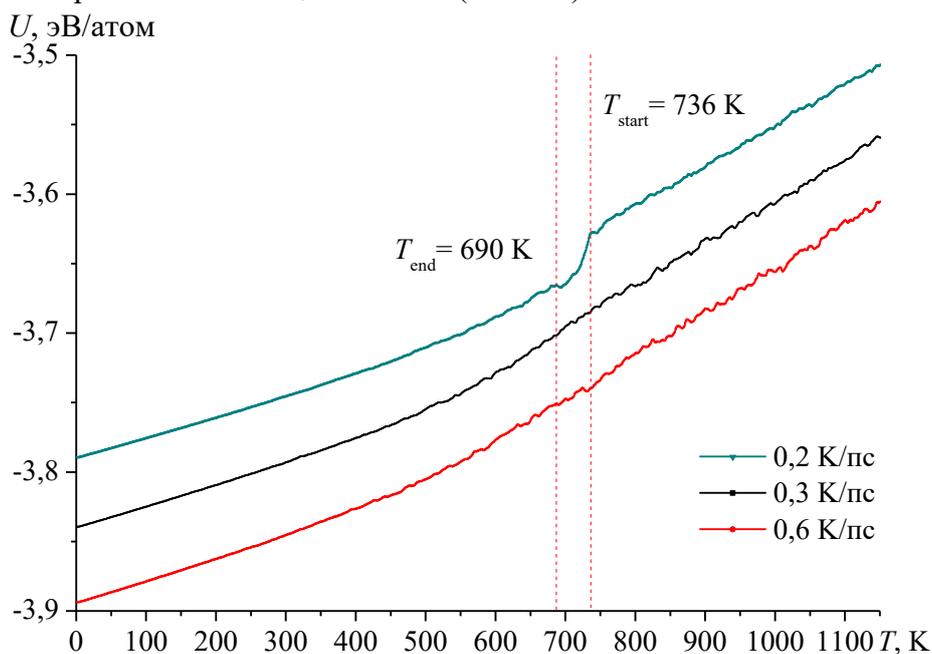


Рис. 6. Температурная зависимость потенциальной части удельной внутренней энергии наночастицы $Co-Au$ эквиатомного состава ($N=1520$) при различных скоростях охлаждения.

4. Заключение

На основе серии молекулярно-динамических экспериментов нами были изучены процессы структурообразования в бинарных наночастицах $Co-Au$ и $Ti-V$ эквиатомного состава и различного размера. Анализ структуры наночастиц, полученных в процессе охлаждения показывает,

что с увеличением размера наночастиц до $N=5000$ доля атомов, образующих кристаллические фазы, заметно уменьшается. Отсутствие кристаллизации в системе $Co-Au$ так же подтверждается поведением калорических зависимостей потенциальной части удельной внутренней энергии. Нестабильность характерна для бинарных наночастиц $Ti-V$, что подтверждается данными для макроскопических сплавов.

По результатам серий компьютерных экспериментов было установлено, что основными факторами, влияющими на возможность получения кристаллических фаз, являются: скорость охлаждения бинарных наночастиц, их размер и размерное несоответствие атомов, входящих в состав. В частности, влиянию скорости охлаждения на процессы кристаллизации были посвящены работы [17, 18], а размерный эффект рассматривался более подробно в [19, 20]. Еще одним фактором является природа взаимодействия атомов металлов (для бинарных наночастиц в системе $Ti-Al$ наблюдается ярко выраженная фазовая сегрегация ГЦК и ГПУ фаз, тогда как в системе $Ti-V$ подбор условий компьютерного эксперимента для идентификации кристаллических фаз достаточно проблематичен). В этой системе получаемые в процессе кристаллизации структуры представлены в основном атомами ИК и ГПУ фаз. На процесс кристаллизации также влияет процентное соотношение компонентов в бинарной наночастице, сложнее всего получить кристаллические фазы в системах эквиатомного состава, тогда как для монометаллических наночастиц и зеркальных составов (25-75% и 75-25%) проще подобрать оптимальные условия эксперимента. Еще одним немаловажным фактором является разница в температурах плавления входящих в систему металлов. Так для системы $Co-Au$ эта разница составляет 431 К, а для $Ti-V$ – 242 К. Таким образом, варьируя состав (а именно соотношение более и менее тугоплавких металлов) возможно влиять на процесс структурообразования при кристаллизации и последующем охлаждении в исследуемых бинарных наночастицах.

Исследования выполнены при поддержке Минобрнауки РФ в рамках выполнения государственного задания в сфере научной деятельности (проект № 0817-2023-0006).

Библиографический список:

1. **Сдобняков, Н.Ю.** К проблеме стабильности/нестабильности биметаллических структур Co (ядро)/ Au (оболочка) и Au (ядро)/ Co (оболочка): атомистическое моделирование / Н.Ю. Сдобняков, В.М. Самсонов, А.Ю. Колосов и др. // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2019. – Вып. 11. – С. 520-534. DOI: 10.26456/pcascnn/2019.11.520.
2. **Самсонов, В.М.** О факторах стабильности/нестабильности биметаллических наноструктур ядро–оболочка / В.М. Самсонов, Н.Ю. Сдобняков, А.Ю. Колосов и др. // Известия РАН. Серия физическая. – 2021. – Т. 85. – № 9. – С. 1239-1244. DOI: 10.31857/S0367676521090246.
3. **Bertier, F.** Ageing of out-of-equilibrium nanoalloys by a kinetic mean-field approach / F. Bertier, A. Tadjine, V. Legrand // Physical Chemistry Chemical Physics. – 2015. – V. 17. – I. 42. – P. 28193-28199. DOI: 10.1039/C5CP00600G.

4. **Nelli, D.** Core-shell vs. multi-shell formation in nanoalloy evolution from disordered configurations / D. Nelli, R. Ferrando // *Nanoscale*. – 2019. – V. 11. – I. 27. – P. 13040-13050. DOI: 10.1039/C9NR02963J.
5. **Bhattarai, N.** Structure and composition of Au/Co magneto-plasmonic nanoparticles / N. Bhattarai, G. Casillas, S. Khanal et al. // *MRS Communications*. – 2013. – V. 3. – I. 3. – P. 177-183. DOI: 10.1557/mrc.2013.30.
6. **Мясниченко, В.С.** Зависимость температуры стеклования биметаллических кластеров на основе титана от скорости охлаждения / В.С. Мясниченко, П.М. Ершов, Д.Н. Соколов и др. // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. – 2020. – Т. 17. – № 3. – С. 355-362. DOI: 10.25712/ASTU.1811-1416.2020.03.012.
7. **Myasnichenko, V.S.** Simulation of crystalline phase formation in titanium-based bimetallic clusters / V.S. Myasnichenko, N.Yu. Sdobnyakov, P.M. Ershov et al. // *Journal of Nano Research*. – 2020. – V. 61. – P. 32-41. DOI: 10.4028/www.scientific.net/JNanoR.61.32.
8. **Uesugi, T.** Enthalpies of solution in Ti-X (X = Mo, Nb, V and W) alloys from first-principles calculations / T. Uesugi, S. Miyamae, K. Higashi // *Materials Transactions*. – 2013. – V. 54. – № 4. – P. 484-492. DOI: 10.2320/matertrans.MC201209.
9. **Skripnyak, N.V.** Mixing enthalpies of alloys with dynamical instability: bcc Ti-V system / N.V. Skripnyak, A.V. Ponomareva, M.P. Belov et al. // *Acta Materialia*. – 2000. – V. 188. – P. 145-154. DOI: 10.1016/j.actamat.2020.01.056.
10. **Souvatzis, P.** Entropy driven stabilization of energetically unstable crystal structures explained from first principles theory / P. Souvatzis, O. Eriksson, M.I. Katsnelson, S.P. Rudin // *Physical Review Letters*. – 2008. – V. 100. – I. 9. – Art. № 095901. – 4 p. DOI: 10.1103/PhysRevLett.100.095901.
11. **Skripnyak, N.V.** Ab initio calculations of elastic properties of alloys with mechanical instability: application to bcc Ti-V alloys / N.V. Skripnyak, A.V. Ponomareva, M.P. Belov, I.A. Abrikosov // *Materials & Design*. – 2018. – V. 140. – P. 357-365. DOI: 10.1016/j.matdes.2017.11.071.
12. **Свидетельство № 2011615692 Российская Федерация.** Молекулярнодинамическое моделирование и биоинспирированная оптимизация бинарных и тройных металлических наноструктур (КластерЭволюшн) / В.С. Мясниченко; заявитель и правообладатель ФГБОУ ВО «Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова». – № 2011613732; заявл. 23.05.2011; зарегистрировано в реестре программ для ЭВМ 20.06.2011. – 1 с.
13. **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.
14. **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.
15. **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.
16. **Мясниченко, В.С.** Закономерности структурообразования в биметаллических наночастицах с разной температурой кристаллизации / В.С. Мясниченко, П.М. Ершов, К.Г. Савина и др. // *Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов*. – 2021. – Вып. 13. – С. 568-579. DOI: 10.26456/pcasenn/2021.13.568
17. **Самсонов, В.М.** О влиянии скоростей нагрева и охлаждения на плавление и кристаллизацию металлических нанокластеров / В.М. Самсонов, И.В. Талызин, М.В. Самсонов // *Журнал технической физики*. – 2016. – Т. 86. – Вып.6. С. 149-152.
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. **Самсонов, В.М.** Сравнительный анализ размерной зависимости температур плавления и кристаллизации наночастиц серебра: молекулярная динамика и метод Монте-Карло / В.М. Самсонов, Н.Ю. Сдобняков, В.С. Мясниченко и др. // *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования*. – 2018. – № 12. – С. 65-69. DOI: 10.1134/S0207352818120168.
20. **Сдобняков, Н.Ю.** О взаимосвязи между размерными зависимостями температур плавления и кристаллизации для металлических наночастиц / Н.Ю. Сдобняков, Д.Н. Соколов, А.Н. Базулев и др. // *Расплавы*. – 2012. – №5. – С. 88-94.

References:

1. Sdobnyakov N.Yu., Samsonov V.M., Kolosov A.Yu. et al. To the problem of stability/instability of bimetallic

- structures Co (core)/ Au(shell) and Au (core)/ Co (shell): atomistic simulation, *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov [Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials]*, 2019, issue 11, pp. 520-534. DOI: 10.26456/pcascnn/2019.11.520. (In Russian).
2. Samsonov V.M., Sdobnyakov N.Yu., Kolosov A.Yu. et al. Factors of the stability/instability of bimetallic core-shell nanostructure, *Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics*, 2021, vol. 85, issue 9, pp. 950-954. DOI: 10.3103/S1062873821090240.
 3. Bertier F., Tadjine A., Legrand B. Ageing of out-of-equilibrium nanoalloys by a kinetic mean-field approach, *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2015, vol. 17, issue 42, pp. 28193-28199. DOI: 10.1039/C5CP00600G.
 4. Nelli D., Ferrando R. Core-shell vs. multi-shell formation in nanoalloy evolution from disordered configurations, *Nanoscale*, 2019, vol. 11, issue 27, pp. 13040-13050. DOI: 10.1039/C9NR02963J.
 5. Bhattarai N., Casillas G., Khanal S. et al. Structure and composition of Au/Co magneto-plasmonic nanoparticles, *MRS Communications*, 2013, vol. 3, issue 3, pp. 177-183. DOI: 10.1557/mrc.2013.30.
 6. Myasnichenko V.S., Ershov P.M., Sokolov D.N. et al. Zavisimost' temperatury steklovaniya bimetallicheskih klasterov na osnove titana ot skorosti okhlazhdeniya [Dependence of glass transition temperature titanium-based bimetallic clusters on the cooling rate], *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya [Basic Problems of Material Science]*, 2020, vol. 17, no. 3, pp. 355-362. DOI: 10.25712/ASTU.1811-1416.2020.03.012. (In Russian).
 7. Myasnichenko V.S., Sdobnyakov N.Yu., Ershov P.M. Simulation of crystalline phase formation in titanium-based bimetallic clusters, *Journal of Nano Research*, 2020, vol. 61, pp. 32-41. DOI: 10.4028/www.scientific.net/JNanoR.61.32.
 8. Uesugi T., Miyamae S., Higashi K. Enthalpies of solution in Ti-X (X = Mo, Nb, V and W) alloys from first-principles calculations, *Materials Transactions*, 2013, vol. 54, no. 4, pp. 484-492. DOI: 10.2320/matertrans.MC201209.
 9. Skripnyak N.V., Ponomareva A.V., Belov M.P. et al. Mixing enthalpies of alloys with dynamical instability: bcc Ti-V system, *Acta Materialia*, 2000, vol. 188, pp. 145-154. DOI: 10.1016/j.actamat.2020.01.056.
 10. Souvatzis P., Eriksson O., Katsnelson M.I., Rudin S.P. Entropy driven stabilization of energetically unstable crystal structures explained from first principles theory, *Physical Review Letters*, 2008, vol. 100, issue 9, art. no. 095901, 4 p. DOI: 10.1103/PhysRevLett.100.095901.
 11. Skripnyak N.V., Ponomareva A.V., Belov M.P., Abrikosov I.A. Ab initio calculations of elastic properties of alloys with mechanical instability: application to bcc Ti-V alloys, *Materials & Design*, 2018, vol. 140, pp. 357-365. DOI: 10.1016/j.matdes.2017.11.071.
 12. Myasnichenko V.S. *Molekulyarnodinamicheskoe modelirovanie i bioinspirirovannaya optimizatsiya binarnykh i trojnykh metallicheskih nanostruktur (KlasterEvoluyshn)* [Molecular dynamic modeling and bioinspired optimization of binary and ternary metal nanostructures (ClusterEvolution)]. Certificate RF, no. 2011615692, 2011. (In Russian).
 13. 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.
 14. 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.
 15. 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.
 16. Myasnichenko V.S., Ershov P.M., Savina K.G. et al. Zakonomernosti strukturoobrazovaniya v bimetallicheskih nanochastitsakh s raznoj temperaturoj kristallizatsii [Regularities of structure formation in bimetallic nanoparticles with different crystallization temperatures], *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov [Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials]*, 2021, issue 13, pp. 568-579. DOI: 10.26456/pcascnn/2021.13.568. (In Russian).
 17. Samsonov V.M., Talyzin I.V., Samsonov M.V. On the effect of heating and cooling rates on the melting and crystallization of metal nanoclusters, *Technical Physics*, 2016, vol. 61, issue 6, pp. 946-949. DOI: 10.1134/S1063784216060207.
 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. Samsonov V.M., Sdobnyakov N.Yu., Myasnichenko V.S. et al. A Comparative analysis of the size dependence of the melting and crystallization temperatures in silver nanoparticles via the molecular dynamics and Monte-Carlo methods, *Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Technique*, 2018,

vol. 12, no. 6, pp. 1206-1209. DOI: 10.1134/S1027451018050671.

20. Sdobnyakov N.Yu., Sokolov D.N., Bazulev A.N. et al. Relation between the size dependences of the melting and crystallization temperatures of metallic nanoparticles, *Russian Metallurgy (Metally)*, 2013, no. 2, pp. 100-105. DOI: 10.1134/S0036029513020110.

Original paper

**THE PROBLEM OF OBTAINING CRYSTALLINE PHASES DURING COOLING BINARY
NANOPARTICLES Au-Co AND Ti-V**

K.G. Savina, R.E. Grigoryev, A.D. Veselov, S.S. Bogdanov, P.M. Ershov, S.A. Veresov, D.R. Zorin,
V.S. Myasnichenko, N.Yu. Sdobnyakov
Tver State University, Tver, Russia

DOI: 10.26456/pcascnn/2023.15.543

Abstract: The processes of structure formation in *Co-Au* and *Ti-V* metal nanoparticles as well as factors affecting the crystallization process are considered. The objects of the study were *Co-Au* and *Ti-V* binary nanoparticles containing $N = 400, 800, 1520$ and 5000 atoms with the equiatomic composition. The computer experiment was carried out using method of molecular dynamics. The interatomic interaction was described by the tight-binding potential. According to the results of a series of computer experiments, it was found that the main factors influencing the possibility of obtaining crystalline phases are: the cooling rate of binary nanoparticles, their size and the size mismatch of atoms included in the composition, as well as the nature of the interaction of metal atoms. The manifestation of stability/instability in binary nanoparticles may be due to patterns of formation of crystalline phases. Moreover, the tendency to segregate one of the components in a binary system may not be the main factor determining the stability/instability of such a system.

Keywords: molecular dynamics method, tight binding potential, binary nanoparticles, cobalt, gold, titanium, vanadium, dimensional mismatch, crystallization.

Савина Ксения Геннадьевна – аспирант 1 года обучения кафедры общей физики ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Григорьев Роман Евгеньевич – аспирант 2 года обучения кафедры общей физики, ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Веселов Алексей Дмитриевич – научный сотрудник кафедры общей физики, ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

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

Ершов Павел Михайлович – научный сотрудник кафедры общей физики, ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Вересов Сергей Александрович – аспирант 2 года обучения кафедры общей физики ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Зорин Данила Романович – студент 4 курса кафедры общей физики ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

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

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

Kseniya G. Savina – 1st year postgraduate student, General Physics Department, Tver State University

Roman E. Grigoryev – 2nd year postgraduate student, General Physics Department, Tver State University

Alexei D. Veselov – Researcher, General Physics Department, Tver State University

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

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

Sergey A. Veresov – 2nd year postgraduate student, General Physics Department, Tver State University

Danila R. Zorin – 4th year student, General Physics Department, Tver State University

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

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

Поступила в редакцию/received: 06.09.2023; после рецензирования/revised: 10.10.2023; принята/accepted: 15.10.2023.