

**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, К.Г. Савина, А.Н. Базулев,
С.А. Вересов, С.В. Серов

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

DOI: 10.26456/pcascnn/2023.15.589

Аннотация: Исследованы фазовые переходы плавление и кристаллизация в пятикомпонентной металлической наносистеме *Au-Ag-Cu-Pd-Pt* эквиатомного состава. Комплексный подход к атомистическому моделированию обусловлен применением альтернативных методов компьютерного моделирования – метода молекулярной динамики и метода Монте-Карло. Межатомное взаимодействие описывалось потенциалом сильной связи. По результатам серий компьютерных экспериментов было установлено, что в пятикомпонентных наночастицах эквиатомного состава могут образовываться кристаллические фазы в процессе охлаждения. Определены температуры плавления и кристаллизации для исследуемых пятикомпонентных наночастиц. Полученные альтернативными методами значения находятся в хорошем согласии. Для пятикомпонентных наночастиц подтверждена концепция фиксирования температур, отвечающих началу и концу процесса фазового перехода. Определены металлы, входящие в состав пятикомпонентных наночастиц, атомы которых в процессе кристаллизации формируют центральную часть наночастицы (ядро) и периферийные области, включая поверхность наночастицы.

Ключевые слова: метод молекулярной динамики, метод Монте-Карло, потенциал сильной связи, пятикомпонентные наночастицы, структурообразование, температура плавления, температура кристаллизации.

1. Введение

На протяжении последнего десятилетия очень большой интерес проявляется к пятикомпонентным наносплавам. Основная причина заключается в том, что, в соответствии с существующими теоретическими представлениями, именно сплавы, состоящие из пяти и более компонентов могут проявлять свойства высокоэнтропийных сплавов, включая высокую механическую прочность [1]. В соответствии с выражением для конфигурационной энтропии [2], увеличение числа компонентов должно приводить к росту энтропии. Высокоэнтропийный сплав – сплав с хаотическим распределением компонентов, в некотором смысле – противоположность случаю выраженной сегрегации.

Вполне естественно, что рост интереса к объемным высокоэнтропийным сплавам стимулировал интерес к высокоэнтропийным наносплавам, т.е. высокоэнтропийным наночастицам [3]. Уже появились отдельные работы, связанные с атомистическим моделированием таких

наносплавов [4]. Разумеется, с увеличением числа компонентов наносплава проблема адекватности результатов атомистического моделирования встает более остро, чем применительно к монометаллическим и бинарным системам. Это в первую очередь касается адекватного воспроизведения взаимодействий между атомами различных сортов.

На проблемы, связанные с молекулярно-динамическим моделированием многокомпонентных систем обращали, в частности, внимание авторы, которые применяли методы нейронных сетей [5-7]. Однако применение метода нейронных сетей связано с использованием тысяч подгоночных параметров, не имеющих физического смысла. Соответственно, мы полагаем, что попытки, в том числе успешные, развития новых подходов к моделированию не исключают целесообразности даже приближенных подходов атомистического моделирования. Комплексный подход к атомистическому моделированию (сочетание методов молекулярной динамики (МД) и Монте-Карло (МК), применение альтернативных силовых полей) позволяет, на наш взгляд, преодолеть некоторые проблемы, связанные с атомистическим моделированием многокомпонентных наносплавов.

2. Методология моделирования

В данной работе в качестве объекта исследования для изучения структуры пятикомпонентных наночастиц нами была выбрана наносистема $Ag-Au-Cu-Pd-Pt$ с равномерным распределением компонентов и общим количеством атомов $N=2500$. Для описания межатомного взаимодействия использовался потенциал сильной связи (ПСС), параметры которого представлены в Таблице 1 [8]. Для вычисления перекрестных параметров используется правило Лоренца-Бертло, предложенное и апробированное в [9-11].

Таблица 1. Параметры ПСС для наносистемы $Ag_{500}-Au_{500}-Cu_{500}-Pd_{500}-Pt_{500}$.

Металл	A , эВ	ζ , эВ	p	q	r_0 , Å
<i>Au</i>	0,2061	1,790	10,229	4,036	2,8838
<i>Ag</i>	0,1028	1,178	10,928	3,139	2,8890
<i>Cu</i>	0,0855	1,224	10,960	2,278	2,5560
<i>Pd</i>	0,1746	1,718	10,867	3,742	2,7511
<i>Pt</i>	0,2975	2,695	10,612	4,004	2,7746
<i>Ag-Au</i>	0,1456	1,4521	10,579	3,588	2,8864
<i>Ag-Cu</i>	0,0938	1,2008	10,944	2,709	2,7225
<i>Ag-Pd</i>	0,1340	1,4226	10,898	3,441	2,8201
<i>Ag-Pt</i>	0,1749	1,7818	10,770	3,572	2,8318

Продолжение Таблицы 1

<i>Au – Cu</i>	0,1328	1,4802	10,595	3,157	2,7199
<i>Au – Pd</i>	0,1897	1,7536	10,548	3,889	2,8175
<i>Au – Pt</i>	0,2476	2,1964	10,421	4,020	2,8292
<i>Pd – Cu</i>	0,1222	1,4501	10,914	3,010	2,6536
<i>Pd – Pt</i>	0,2279	2,1518	10,740	3,873	2,7629
<i>Pt – Cu</i>	0,1595	1,8162	10,786	3,141	2,6653

Для изучения структуры пятикомпонентных наночастиц *Ag – Au – Cu – Pd – Pt* после охлаждения, а также для более точного определения температуры фазовых переходов, проводился анализ наличия кристаллических фаз (ГЦК, ГПУ, ОЦК) методом сопоставления полиэдрических шаблонов с помощью программы OVITO [12]. Как и ранее, для параметра обрезки RMSD (root-mean-square deviation), используемого в этом методе, мы использовали значение 0,155.

3. Описание результатов

В рамках МД моделирования (собственная разработка, впервые апробированная в [13]) осуществлялся нагрев до полного разупорядочения, после чего происходило охлаждение системы со скоростью 0,25 К/пс. Выбор скорости определялся возможностью идентифицировать кристаллические фазы в конечной конфигурации при температуре 300 К. На рис. 1 представлены калорические зависимости потенциальной части удельной внутренней энергии пятикомпонентной наночастицы $Ag_{500} - Au_{500} - Cu_{500} - Pd_{500} - Pt_{500}$. Как было предложено в [14] для процессов плавления и кристаллизации в наночастицах могут быть выделены температуры, отвечающие началу и концу процесса соответствующего фазового перехода. Видно, что величина $\Delta T_c = T_c^{start} - T_c^{end}$ существенно превышает значение $\Delta T_m = T_m^{end} - T_m^{start}$, т.е. в отличие от однокомпонентных, бинарных, тернарных и даже четырехкомпонентных для пятикомпонентных металлических наночастиц характерен «долгий» процесс кристаллизации. Очевидно, что с одной стороны это связано с различными температурами фазового перехода, характерными для соответствующих макроскопических компонент, с другой стороны, четырехкомпонентной [15] и пятикомпонентной наносистеме требуется больший температурный интервал, чтобы атомы компонент заняли соответствующие (энергетически выгодные) позиции при кристаллизации.

С практической точки зрения такое поведение рассматриваемой наносистемы может играть роль положительного эффекта (возможность изменения условий кристаллизации с целью получения конфигураций, обладающих определенной структурой). В то же время, технологически

может быть весьма затруднительно контролировать параметры эксперимента и соответственно реализацию определенного сценария структурообразования.

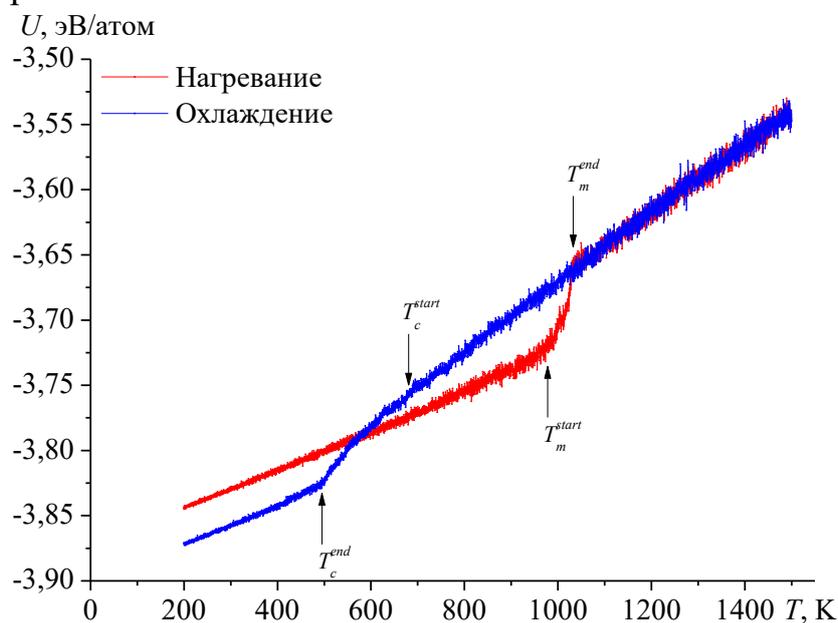


Рис. 1. Температурная зависимость потенциальной части удельной внутренней энергии наночастицы $Ag_{500} - Au_{500} - Cu_{500} - Pd_{500} - Pt_{500}$ в процессе нагревания и охлаждения: МД эксперимент.

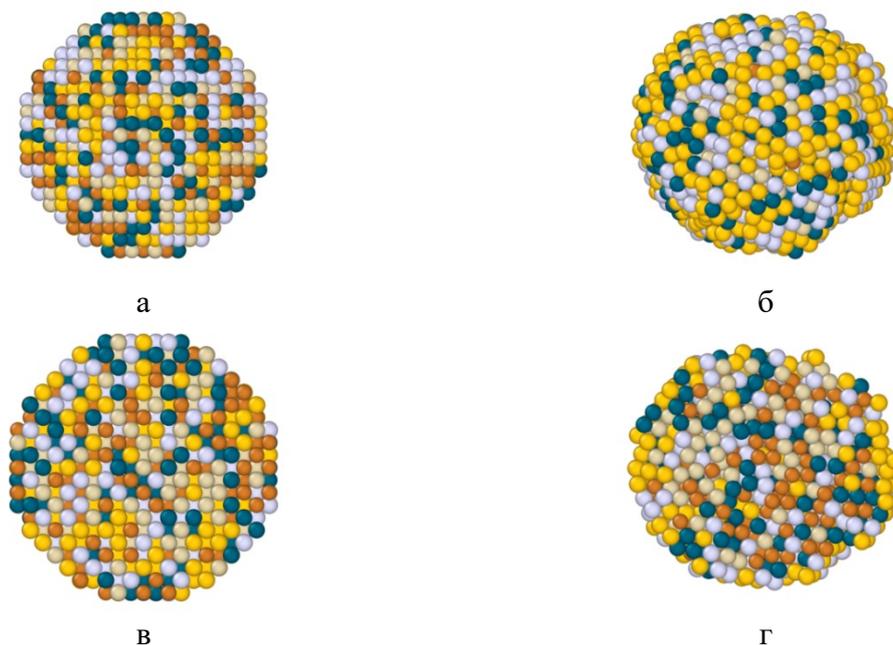


Рис. 2. Начальная (а, в) и конечная (б, г; после кристаллизации) конфигурации наночастицы эквиатомного состава $Ag_{500} - Au_{500} - Cu_{500} - Pd_{500} - Pt_{500}$. Здесь и далее белые атомы – серебро, желтые – золото, коричневые – медь, синие – палладий, серые – платина. Вкладки (в, г) отвечают экваториальному сечению наносистемы.

На рис. 2 представлены начальная (отвечающая равномерно распределенным компонентам) и конечная конфигурации (полученная при

температуре 300 К). Наблюдается поверхностная сегрегация атомов золота и серебра, в то время как атомы платины и меди формируют ядро пятикомпонентной наночастицы. Конкретное распределение компонентов по объему наночастицы можно проследить по вкладкам (в, г) рис. 2. Распределение атомов палладия в конечной конфигурации практически соответствует равномерному распределению.

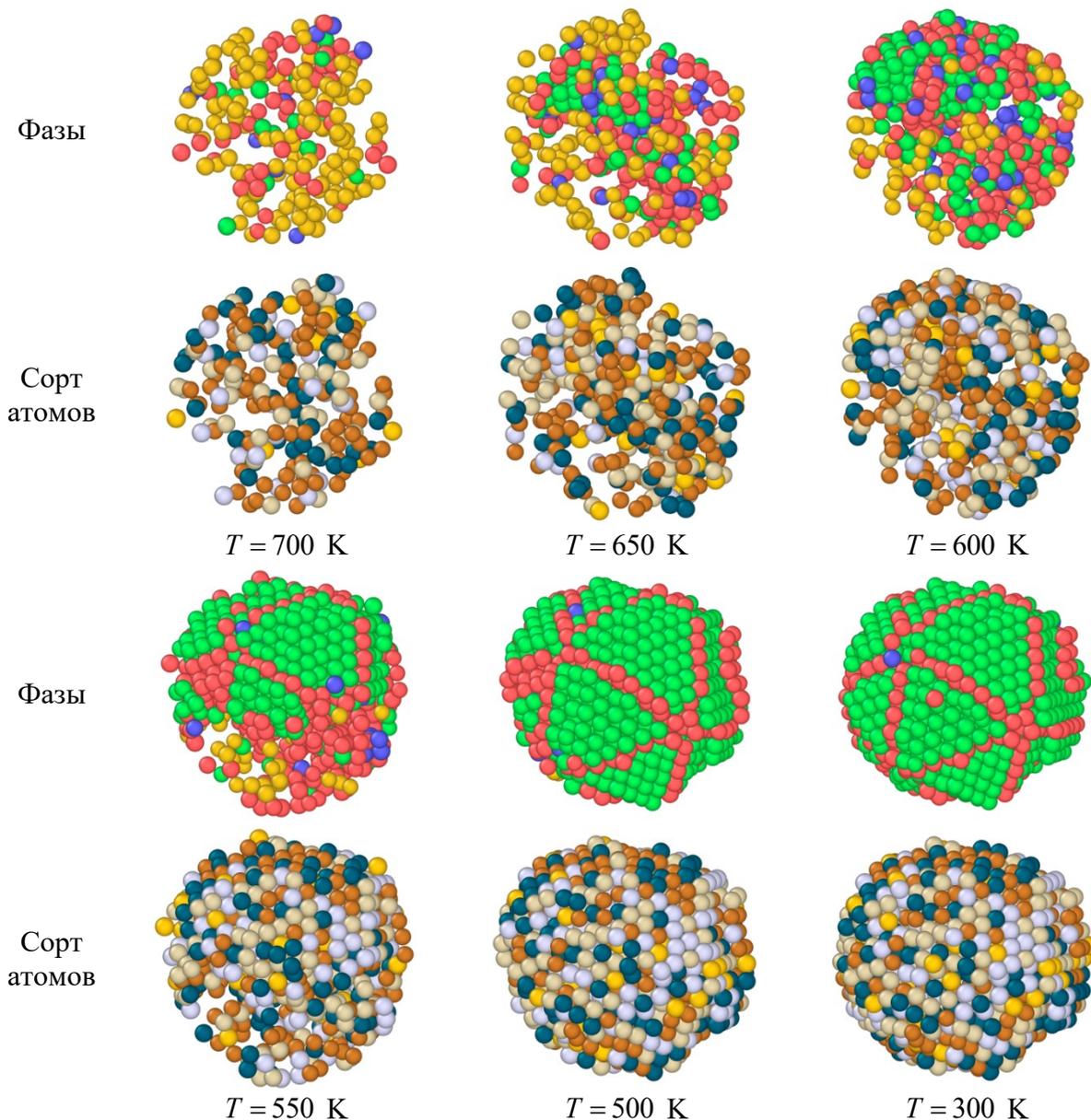


Рис. 3. Процесс кристаллизации пятикомпонентной наночастицы $Ag_{500} - Au_{500} - Cu_{500} - Pd_{500} - Pt_{500}$. Показаны только распознанные фазы, а также соответствующие им сорта атомов, участвующих в процессе кристаллизации. Зеленые атомы – ГЦК, красные – ГПУ, синие – ОЦК, желтые – ИК ядра. Цвета сортов атомов соответствуют рис. 2.

Интерес представляет более детальное изучение интервала температур $\Delta T_c = T_c^{start} - T_c^{end}$. На рис. 3 представлена эволюция структуры

$Ag_{500} - Au_{500} - Cu_{500} - Pd_{500} - Pt_{500}$ как по распознанным локальным фазам, так и по сортам атомов. Видно, что в начальном этапе формируются ИК ядра, а также идентифицируется локальная ОЦК структура, но в процессе охлаждения они замещаются активно образующимися атомами ГЦК структуры. ПО Ovito [12] позволяет визуализировать в объеме наночастицы один или несколько сортов атомов, именно поэтому для более точной интерпретации результатов рис. 2 и 3 на вкладках рис. 4. представлен только один выбранный сорт атомов. Хорошо видно (с учетом одинакового масштаба), что именно атомы золота и серебра в основном образуют оболочку в исследуемой наночастице, в то время как именно атомы меди платины и палладия формируют ядро и периферийную часть.

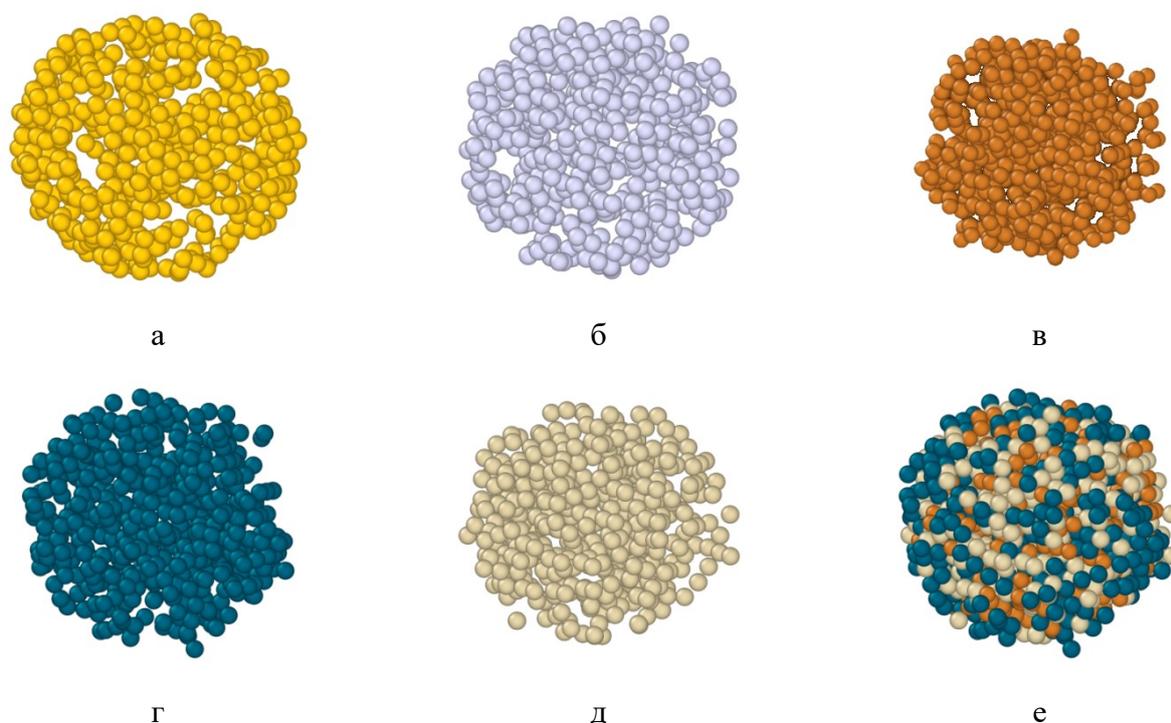


Рис. 4. Конечная конфигурация наночастицы эквиатомного состава $Ag_{500} - Au_{500} - Cu_{500} - Pd_{500} - Pt_{500}$ с выделением определенного сорта атомов (а-д). На вкладке (е) – показано ядро наночастицы, где выделены только атомы, меди, платины и палладия. Цвета сортов атомов соответствуют рис. 2. Картинки построены в одинаковом пространственном масштабе.

В МК моделировании на ПО Metropolis [16] также воспроизводился нагрев и охлаждение наночастицы эквиатомного состава $Ag_{500} - Au_{500} - Cu_{500} - Pd_{500} - Pt_{500}$. На рис. 5 представлены соответствующие зависимости потенциальной части удельной внутренней энергии. Отметим, что в целом рис. 1 и 5 находятся в хорошем согласии. Отличия как в температурах, отвечающих началу соответствующего фазового перехода (плавление, кристаллизация), так и в величинах $\Delta T_m = T_m^{end} - T_m^{start}$ и

$\Delta T_c = T_c^{start} - T_c^{end}$ можно считать несущественными и обусловленными в основном выбором шага МК моделирования и скорости охлаждения в МД моделировании. Соответствующие конфигурации с идентификацией по типам распознанных локальных фаз и сортов атомов представлены соответственно на рис. 6, 7. Полученные результаты в целом подтверждают закономерности сегрегации, отмеченные выше и выявленные в рамках МД моделирования.

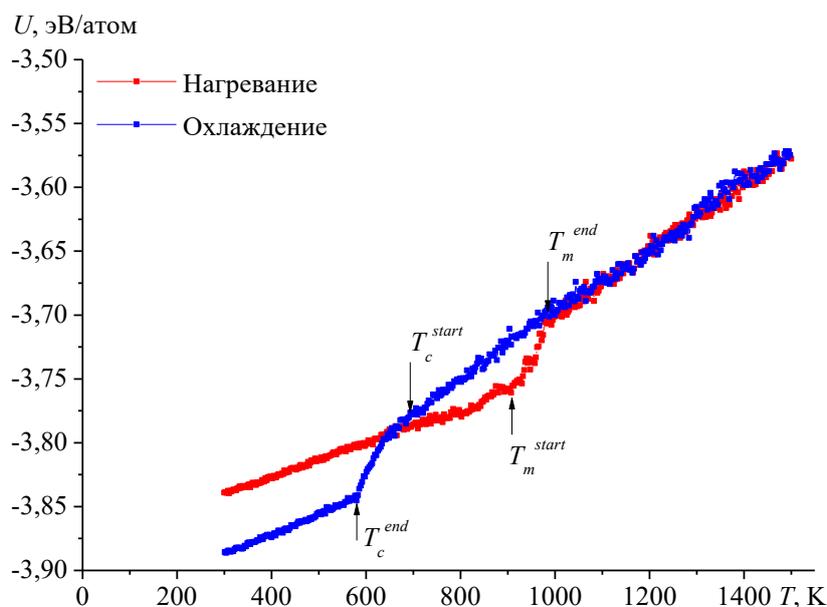


Рис. 5. Температурная зависимость потенциальной части удельной внутренней энергии наночастицы $Ag_{500} - Au_{500} - Cu_{500} - Pd_{500} - Pt_{500}$ в процессе нагрева и охлаждения: МК эксперимент.

Анализ калорических зависимостей потенциальной части внутренней энергии позволяет идентифицировать температуры начала процессов плавления и кристаллизации, а также температурный интервал, в котором для пятикомпонентных наночастиц эти процессы протекают (см. Таблицу 2). Видно, что полученные значения температур начала процессов плавления и кристаллизации при использовании альтернативных методов моделирования (МК и МД) согласуются друг с другом. Кроме того отметим, что МК позволяет получить конечные конфигурации, отвечающие более низкой удельной потенциальной энергии, что говорит о большей термической стабильности получаемых пятикомпонентных наночастиц. Кроме того, в случае если величина удельной потенциальной энергии в начальной конфигурации существенно больше, чем в конечной, это также указывает на тот факт, что начальная конфигурация не была оптимальной. Этот фактор можно воспринимать двояко. С одной стороны мы не можем получить в процессе кристаллизации идеальную структуру, отвечающую начальной конфигурации, с другой стороны, полученные в процессе кристаллизации

наночастицы будут в большей мере соответствовать структуре синтезируемых многокомпонентных наночастиц в прямом эксперименте.

Таблица 2. Температуры начала процессов плавления и кристаллизации, температурные интервалы протекания соответствующего фазового перехода для пятикомпонентной наночастицы $Ag_{500} - Au_{500} - Cu_{500} - Pd_{500} - Pt_{500}$.

Метод	T_m^{start} , К	T_c^{start} , К	ΔT_m , К*	ΔT_c , К*
МД	994±20	679±12	39	177
МК	906±18	692±14	79	112

* приведены данные для конкретных зависимостей

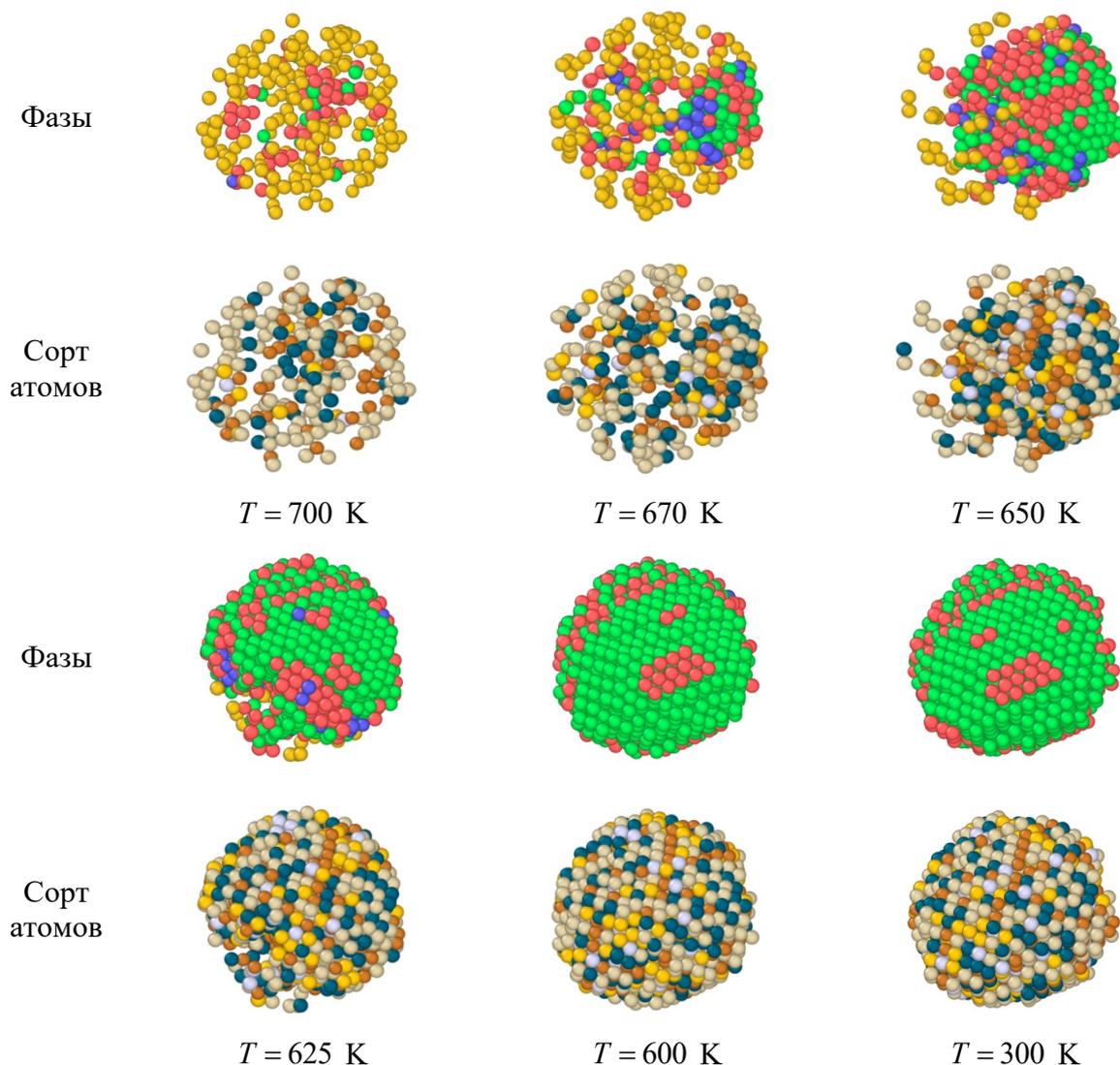


Рис. 6. Процесс кристаллизации пятикомпонентной наночастицы $Ag_{500} - Au_{500} - Cu_{500} - Pd_{500} - Pt_{500}$. Показаны только распознанные фазы, а также соответствующие им сорта атомов, участвующих в процессе кристаллизации. Зеленые атомы – ГЦК, красные – ГПУ, синие – ОЦК, желтые – ИК ядра. Цвета сортов атомов соответствуют рис. 2.

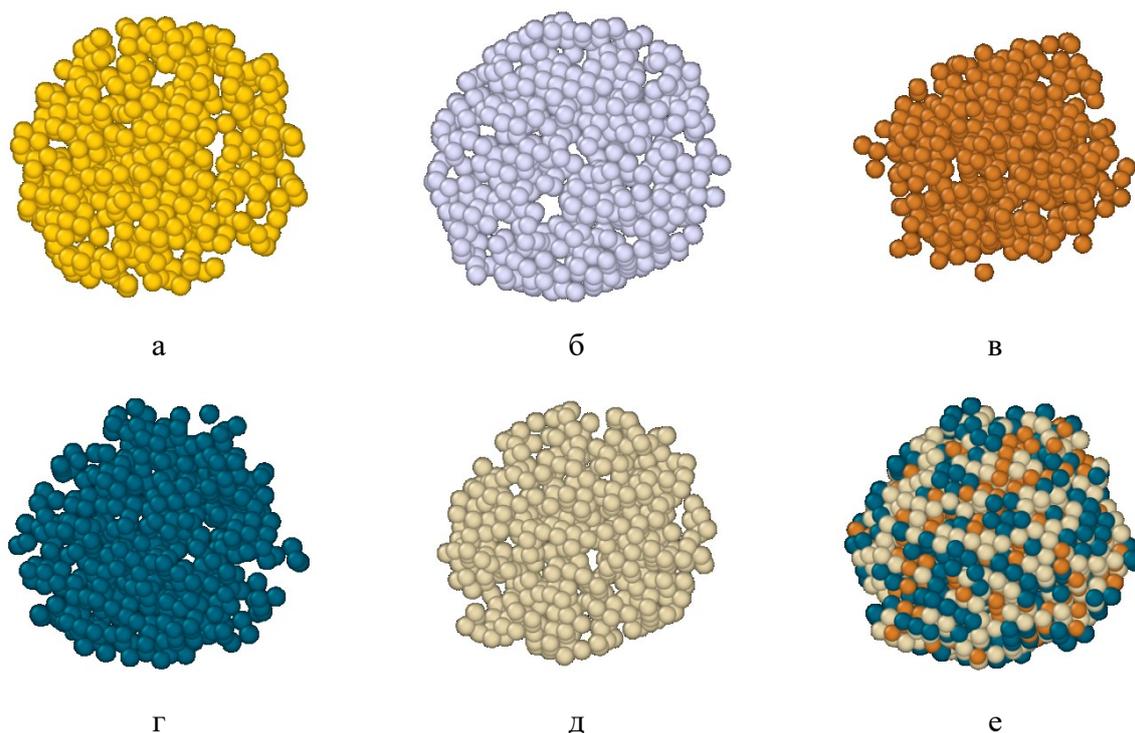


Рис. 7. Конечная конфигурация наночастицы эквиатомного состава $Ag_{500} - Au_{500} - Cu_{500} - Pd_{500} - Pt_{500}$ с выделением определенного сорта атомов (а-д). На вкладке (е) показано ядро наночастицы, где выделены только атомы, меди, платины и палладия. Цвета сортов атомов соответствуют рис. 2. Картинки построены в одинаковом пространственном масштабе.

4. Заключение

Для пятикомпонентных наночастиц $Ag - Au - Cu - Pd - Pt$ температурный диапазон ΔT_c , в котором происходит процесс кристаллизации, существенно шире, чем ΔT_m , что обуславливает вариативность в конечных структурах наночастиц $Ag - Au - Cu - Pd - Pt$. Также одним из существенных факторов, влияющих на возможность идентификации кристаллических фаз, является скорость охлаждения. Выше некоторого порогового значения скорости охлаждения (для МД – 0,25 К/пс) или ниже порогового значения для МК-шагов моделирования (10^8) затруднительно четко идентифицировать как фазовый переход, отвечающий кристаллизации, так и локальную кристаллическую структуру (с параметрами для ПО Ovito [12], которые мы использовали для изучения однокомпонентных, бинарных, тернарных и даже четырехкомпонентных металлических наночастиц [10, 11, 13, 15, 17]). Результаты (как величины температур, отвечающие началу соответствующего фазового перехода, так и конечные конфигурации, представленные на рис. 4 е и 7 е), отвечающие использованию альтернативных методов моделирования (МК и МД),

находятся в хорошем согласии друг с другом.

Для четырех- [15] и пятикомпонентных наночастиц в отличие от бинарных и тернарных можно выделить три типа сортов атомов с точки зрения их участия в сегрегационных процессах: 1) имеют тенденцию к поверхностной сегрегации; 2) формируют ядро наночастицы, а также периферийные области; 3) индифферентны к процессам сегрегации, их распределение или остается тем же, что в начальной конфигурации или становится равномерным по всему объему наночастицы.

В качестве дальнейшего направления развития изучения структурных превращений в пятикомпонентных металлических наночастицах следует отметить как учет размерного фактора, так и вариативность составов и начальных конфигураций (причем «конкуренция» размерных эффектов для каждого из компонентов может определять некоторые специфические особенности, идентифицируемые только при некоторых составах или начальных конфигурациях). Кроме того, важно апробировать результаты для других силовых полей, например, с использованием потенциала погруженного атома [18, 19]. Отметим также, что развитие экспериментальных методов синтеза таких как, например, совместный электрический взрыв проволок [20] и одновременное использование комплексного подхода к атомистическому моделированию позволяет получать и исследовать различные композиции многокомпонентных металлических наночастиц. При этом для анализа и идентификации мезоскопической и интегральной структуры многокомпонентных металлических наночастиц целесообразно использовать распределения радиальных плотностей компонентов [10, 21].

Исследования выполнены при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках выполнения государственного задания в сфере научной деятельности (проект № 0817-2023-0006). Авторы выражают признательность профессору В.М. Самсонову за обсуждение результатов.

Библиографический список:

1. **Шайсултанов, Д.Г.** Структура и механические свойства высокоэнтропийных сплавов системы CoCrFeNiX (X=Mn, V, Mn и V, Al и Cu): дисс. ... канд. техн. наук: 05.16.01 / Шайсултанов Дмитрий Георгиевич. – Белгород: УрФУ, 2015. – 142 с.
2. **Рогачев, А.С.** Структура, стабильность и свойства высокоэнтропийных сплавов / А.С. Рогачев // Физика металлов и металловедение. – 2020. – Т. 121. – № 8. – С. 807-841. DOI: 10.31857/S0015323020080094.
3. **Poliakov, M.** Amorphous/nanocrystalline high-entropy CoCrFeNiTi_x thin films with low thermal coefficient of resistivity obtained via magnetron deposition / M. Poliakov, D. Kovalev, S. Vadchenko et al. // Nanomaterials. – 2023. – V. 13. – I. 13. – Art. № 2004. – 15 p. DOI: 10.3390/nano13132004.
4. **Barbero, A.** Synthesis and structural properties of high-entropy nanoalloys made by physical and chemical routes / A. Barbero, C.M. Da Silva, N.O. Pena et al. // Faraday Discussions. – 2023. – V. 242. – P. 129-143. DOI: 10.1039/D2FD00118G.
5. **Ryltsev, R.E.** Deep machine learning potentials for multicomponent metallic melts: Development, predictability and compositional transferability / R.E. Ryltsev, N.M. Chetelkatchev // Journal of Molecular

- Liquids. – 2022. – V. 349. – Art. № 118181. DOI: 10.1016/j.molliq.2021.118181.
6. **Balyakin, I.A.** Ab initio molecular dynamics and high-dimensional neural network potential study of VZrNbHfTa melt / I.A. Balyakin, A.A. Yuryev, B.R. Gelchinski, A.A. Rempel // Journal of Physics: Condensed Matter. – 2020. – V. 32. – № 21. – Art. № 214006. – 15 p. DOI: 10.1088/1361-648X/ab6f87.
7. **Балякин, И.А.** Атомистический расчет температуры плавления высокоэнтропийного сплава Кантора CoCrFeMnNi / И.А. Балякин, А.А. Ремпель // Доклады Российской академии наук. Химия, науки о материалах. – 2022. – Т. 502. – С. 71-78. DOI: 10.31857/S2686953522010046.
8. **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.
9. **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.
10. **Bogdanov, S.** Molecular dynamics simulation of the formation of bimetallic core-shell nanostructures with binary Ni–Al nanoparticle quenching / S. Bogdanov, V. Samsonov, N. Sdobnyakov et al. // Journal of Materials Science. – 2022. – V. 57. – I. 28. – P. 13467-13480. DOI: 10.1007/s10853-022-07476-2.
11. **Мясниченко, В.С.** Моделирование процессов структурообразования в биметаллических наносплавах различного состава / В.С. Мясниченко, Н.Ю. Сдобняков, А.Ю. Колосов и др. // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2017. – Вып. 9. – С. 323-329. DOI: 10.26456/pcasenn/2017.9.323.
12. **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.
13. **Сдобняков, Н.Ю.** Моделирование процессов коалесценции и спекания в моно- и биметаллических наносистемах. Монография / Н.Ю. Сдобняков, А.Ю. Колосов, С.С. Богданов. – Тверь: Издательство Тверского государственного университета, 2021. – 168 с. DOI: 10.26456/skb.2021.168.
14. **Самсонов, В.М.** О фазовых переходах первого рода в кластерах никеля / В.М. Самсонов, А.Г. Бембель, О.В. Шакуло // Вестник ТвГУ. Серия: Физика. – 2011. – Вып. 13. – С. 82-93.
15. **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/pcasenn/2022.14.371.
16. **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.
17. **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.
18. **Daw, M.S.** Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals / M.S. Daw, M.I. Baskes // Physical Review B. – 1984. – V. 29. – I. 12. – P. 6443-6453. DOI: 10.1103/PhysRevB.29.6443.
19. **Samsonov, V.M.** On surface pre-melting of metallic nanoparticles: molecular dynamics study / V.M. Samsonov, I.V. Talyzin, S.A. Vasilyev et al. // Journal of Nanoparticle Research. – 2023. – V. 25. – I. 6. – Art. № 105. – 15 p. DOI: 10.1007/s11051-023-05743-0.
20. **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.
21. **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/pcasenn/2022.14.307.

References:

1. Shajisultanov D.G. *Struktura i mekhanicheskie svoystva vysokoentropijnykh splavov sistemy CoCrFeNiX (X=Mn, V, Mn i V, Al i Cu)* [Structure and mechanical properties of high-entropy alloys of the CoCrFeNiX system (X=Mn, V, Mn and V, Al and Cu)], Cand. tech. sci. diss.: 05.16.01, – Belgorod, UFU Publ., 2015, 142 p.

(In Russian).

2. Rogachev A.S. Structure, stability, and properties of high-entropy alloys, *The Physics of Metals and Metallography*, 2020, vol. 121, issue 8, pp. 733-764. DOI: 10.1134/S0031918X20080098.
3. Poliakov M., Kovalev D., Vadchenko S. et al. Amorphous/nanocrystalline high-entropy CoCrFeNiTi_x thin films with low thermal coefficient of resistivity obtained via magnetron deposition, *Nanomaterials*, 2023, vol. 13, issue 13, art. № 2004, 15 p. DOI: 10.3390/nano13132004.
4. Barbero A., Da Silva C.M., Pena N.O. et al. Synthesis and structural properties of high-entropy nanoalloys made by physical and chemical routes, *Faraday Discussions*, 2023, vol. 242, pp. 129-143. DOI: 10.1039/D2FD00118G.
5. Ryltsev R.E., Chtchelkatchev N.M. Deep machine learning potentials for multicomponent metallic melts: Development, predictability and compositional transferability, *Journal of Molecular Liquids*, 2022, vol. 349, art. no. 118181. DOI: 10.1016/j.molliq.2021.118181.
6. Balyakin I.A., Yuryev A.A., Gelchinski B.R., Rempel A.A. Ab initio molecular dynamics and high-dimensional neural network potential study of VZrNbHfTa melt, *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2020, vol. 32, no. 21, art. № 214006, 15 p. DOI: 10.1088/1361-648X/ab6f87.
7. Balyakin I.A., Rempel A.A. Atomistic calculation of the melting point of the high-entropy cantor alloy CoCrFeMnNi, *Doklady Physical Chemistry*, 2022. vol. 502, issue 1, pp. 11-17. DOI: 10.1134/S0012501622010018.
8. 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.
9. 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.
10. Bogdanov S., Samsonov V., Sdobnyakov N. et al. Molecular dynamics simulation of the formation of bimetallic core-shell nanostructures with binary Ni–Al nanoparticle quenching, *Journal of Materials Science*, 2022, vol. 57, issue 28, pp. 13467-13480. DOI: 10.1007/s10853-022-07476-2.
11. Myasnichenko V.S., Sdobnyakov N.Yu., Kolosov A.Yu. et al. Modelirovanie protsessov strukturoobrazovaniya v bimetallicheskih nanosplavakh razlichnogo sostava [Modeling of processes of structure formation in bimetallic nanoalloys of different composition], *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov [Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials]*, 2017, issue 9, pp. 323-329. DOI: 10.26456/pcascnn/2017.9.323. (In Russian).
12. 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.
13. Sdobnyakov N.Yu., Kolosov A.Yu., Bogdanov S.S. *Modelirovanie protsessov koalestsentsii i spekaniya v mono- i bimetallicheskih nanosistemakh: monografiya* [Simulation of the processes of coalescence and sintering in mono- and bimetallic nanosystems: monograph]. Tver, Tver State University Publ., 2021, 168 p. DOI: 10.26456/skb.2021.168. (In Russian).
14. Samsonov V.M., Bembel A.G., Shakulo O.V. O fazovykh perekhodakh pervogo roda v klasterakh nikelya [On first-order phase transitions in nickel clusters], *Vestnik Tverskogo gosudarstvennogo universiteta. Seriya: Fizika [Bulletin of the Tver State University. Series: Physics]*, 2011, issue 13, pp. 82-93. (In Russian).
15. 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.
16. Sokolov D.N., Sdobnyakov N.Yu., Kolosov A.Yu., Ershov P.M., Bogdanov S.S. *Metropolis*. Certificate RF, no. 2019661915, 2019. (In Russian).
17. 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.
18. Daw M.S., Baskes M.I. Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals, *Physical Review B*, 1984, vol. 29, issue 12, pp. 6443-6453. DOI: 10.1103/PhysRevB.29.6443.
19. Samsonov V.M., Talyzin I.V., Vasilyev S.A. et al. On surface pre-melting of metallic nanoparticles: molecular dynamics study, *Journal of Nanoparticle Research*, 2023, vol. 25, issue 6, art. no. 105, 15 p. DOI: 10.1007/s11051-023-05743-0.
20. 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. № 103518, 15 p. DOI: 10.1016/j.apt.2022.103518.

21. Talyzin I.V., Samsonov V.M., Bogdanov S.S. et al. Identifikatsiya slozhnykh nanostruktur yadro-obolochka po radial'nym raspredeleniyam lokal'noj plotnosti komponentov [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).

Original paper

**COMPLEX APPROACH TO THE SIMULATION OF MELTING AND CRYSTALLIZATION
IN FIVE-COMPONENT METALLIC NANOPARTICLES:
MOLECULAR DYNAMICS AND THE MONTE CARLO METHOD**

N.Yu. Sdobnyakov, A.Yu. Kolosov, D.N. Sokolov, K.G. Savina, A.N. Bazulev, S.A. Veresov,
S.V. Serov

Tver State University, Tver, Russia

DOI: 10.26456/pcascnn/2023.15.589

Abstract: The melting and crystallization phase transitions in the five-component metallic *Au-Ag-Cu-Pd-Pt* equiatomic nanosystem were investigated. The complex approach to atomistic modeling is due to the use of alternative methods of computer simulation – the molecular dynamics and Monte Carlo methods. The interatomic interactions were described by the tight-binding potential. According to the results of a series of computer experiments, it was established that five-component nanoparticles of equiatomic composition can form crystalline phases during cooling. Melting and crystallization temperatures for the investigated five-component nanoparticles were determined. The values obtained by alternative methods are in good agreement. For five-component nanoparticles, the concept of fixing the temperatures corresponding to the beginning and end of the phase transition process is confirmed. The metals that make up five-component nanoparticles, the atoms of which in the process of crystallization form the central part of the nanoparticle (core) and the peripheral regions, including the surface of the nanoparticle, are determined.

Keywords: molecular dynamics method, Monte Carlo method, tight binding potential, five-component nanoparticles, structure formation, melting point, crystallization temperature.

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

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

Базулев Анатолий Николаевич – к.ф.-м.н., доцент кафедры общей физики ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

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

Серов Сергей Викторович – студент 1 курса магистратуры кафедры общей физики ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Nickolay Yu. Sdobnyakov – Ph. D., Docent, 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

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

Anatolii N. Bazulev – Ph. D., Docent, General Physics Department, Tver State University

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

Sergei V. Serov – 1st year graduate student, General Physics Department, Tver State University

Поступила в редакцию/received: 07.09.2023; после рецензирования/revised: 14.10.2023; принята/accepted: 16.10.2023.