УДК 536.42+536.912 *Оригинальная статья*

Влияние термостата Нозе-Гувера на структурные превращения в тернарных наночастицах Ti-Al-V

П.М. Ершов, А.Ю. Колосов, В.С. Мясниченко, Д.Р. Зорин, А.Д. Белозерский, Д.Н. Соколов, Н.Ю. Сдобняков

ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

170002, Россия, Тверь, Садовый пер., 35

nsdobnyakov@mail.ru

DOI: 10.26456/pcascnn/2025.17.399

Аннотация: Важным критерием верификации результатов атомистического моделирования является не только адекватный выбор потенциала межатомного взаимодействия и его параметров, но также выбор методологии термостатирования. В данной работе предпринята попытка качественной оценки влияния выбора термостата при моделировании структурных превращений в тернарных наночастицах *Ti-Al-V*. В качестве базовых использовались два термостата: термостат Андерсена и мягкий стохастический термостат, представляющий собой термостат Нозе-Гувера с добавлением случайного шума для улучшения эргодичности. Установлено, что оба используемых термостата при совпадающих условиях моделирования для наночастиц тернарного сплава *Ti6Al4V* предсказывают аналогичные структурные превращения при использовании различных скоростей охлаждения (от 0,2 К/пс до 100 К/пс): при малых скоростях доминируют локальные ГЦК и ГПУ фазы, с увеличением скорости охлаждения происходит постепенное уменьшение доли идентифицируемых кристаллических фаз и появляются ядра икосаэдрической симметрии. Полученные закономерности структурных превращений отражаются на поведении температурной зависимости потенциальной части удельной внутренней энергии, которая используется для идентификации температуры кристаллизации. Кроме того, было установлено, что значения удельных внутренних энергий (в расчете на 1 атом) находятся в хорошем согласии.

Ключевые слова: метод молекулярной динамики, потенциал сильной связи, тернарные наночастицы Ti-Al-V, структурообразование, термостатирование, кристаллизация.

Ершов Павел Михайлович – научный сотрудник 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»

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

Зорин Данила Романович – магистр 2 года обучения кафедры общей физики ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Белозерский Алексей Дмитриевич – аспирант 4 года обучения кафедры общей физики ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Соколов Денис Николаевич – научный сотрудник кафедры общей физики ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

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

Original paper

Effect of Nosé-Hoover thermostat on structural transformations in ternary Ti-Al-V nanoparticles

P.M. Ershov, A.Yu. Kolosov, V.S. Myasnichenko, D.R. Zorin, A.D. Belozersky, D.N. Sokolov, N.Yu. Sdobnyakov

Tver State University, Tver, Russia

DOI: 10.26456/pcascnn/2025.17.399

Abstract: An important criterion for verifying atomistic simulation results is not only the appropriate selection of the interatomic interaction potential and its parameters, but also the choice of

thermostating methodology. This paper attempts to qualitatively assess the impact of the thermostat selection when modeling structural transformations in ternary Ti-Al-V nanoparticles. Two thermostats were used as basic ones: the Andersen thermostat and a soft stochastic thermostat, which is a Nose-Hoover thermostat with the addition of random noise to improve ergodicity. It was found that both thermostats, under the same simulation conditions for nanoparticles of the ternary *Ti6Al4V* alloy, predict similar structural transformations using different cooling rates (from 0,2 K/ps to 100 K/ps): at low rates, local FCC and HCP phases dominate, while with increasing cooling rate, the proportion of identifiable crystalline phases gradually decreases, and nuclei of icosahedral symmetry appear. The obtained patterns of structural transformations are reflected in the behavior of the temperature dependence of the potential part of the specific internal energy, which is used to identify the crystallization temperature. Furthermore, it was found that the values of the specific internal energies (per atom) are in good agreement.
Keywords: molecular dynamics method, tight-binding potential, ternary Ti-Al-V nanoparticles, structure formation, thermostating, crystallization.

Pavel M. Ershov – Researcher, General Physics Department, Tver State University
Andrei Yu. Kolosov – Ph. D., Researcher, General Physics Department, Tver State University, ORCID: 0000-0003-3805-0567
Vladimir S. Myasnichenko – Researcher, General Physics Department, Tver State University, ORCID: 0000-0003-4355-7055
Danila R. Zorin – 2nd year graduate student, General Physics Department, Tver State University
Alexei D. Belozersky – 4th year postgraduate student, General Physics Department, Tver State University
Denis N. Sokolov – Ph. D., Researcher, General Physics Department, Tver State University, ORCID: 0000-0003-2411-0143
Nickolay Yu. Sdobnyakov – Dr. Sc., Docent, Professor, General Physics Department, Tver State University, ORCID: 0000-0003-1749-0336

Поступила в редакцию/received: 14.07.2025; после рецензирования/revised: 20.09.2025; принята/accepted: 22.09.2025.

1. Введение и постановка задачи

Атомистическое моделирование к настоящему времени становится все более востребованным инструментом в качестве предварительного или дополняющего этапа лабораторного эксперимента [1]. При этом, как отмечается в [1], переход от монометаллических к бинарным и тем более многокомпонентным наночастицам приводит к большей вариативности свойств, за счет вариативности составов, начальных морфологий и особенности перекрестных взаимодействий компонентов. Интерес представляют отдельные практические приложения титансодержащих наносплавов [2, 3], которые обусловлены особенностями их локальной структуры, что является причиной их уникальных свойств [4].

В ряде наших работ [5-10] подробно обсуждаются закономерности структурных превращений в бинарных и тернарных титансодержащих наносплавах. Особое место среди тернарных сплавов системы $Ti-Al-V$ занимает тернарный сплав состава $Ti6Al4V$, где цифры 6 и 4 означают процентное содержание алюминия и ванадия соответственно. Отметим, что в наноразмерном состоянии сплав $Ti-Al-V$ также проявляет уникальные свойства, а именно является высокотемпературным наносплавом с памятью формы [11, 12]. Алюминий и ванадий в данном случае являются легирующими элементами (допантами) по отношению к

титану. Так согласно [8, 9] именно ванадий препятствует образованию кристаллических фаз в тернарном наносплаве $Ti6Al4V$, подобные закономерности отмечают и для других тернарных наносплавов [13], в которых, например, один элемент является допантом. В [11, 12] также отмечается именно важность состава тернарного наносплава для идентификации определенных физических характеристик.

Если ранее [1, 5-10] при моделировании бинарных и многокомпонентных металлических наночастиц мы акцентировали внимание на необходимости апробации параметров потенциала сильной связи как для монометаллических, так и для перекрестных связей, то в данной работе целью ставится оценка степени влияния выбора термостата на процесс структурообразования в тернарном сплаве $Ti6Al4V$. Если в ПО КластерЭволюшн [14] используется термостат Андерсена [15], то в авторском ПО MDSym [16] реализован мягкий стохастический термостат, представляющий собой термостат Нозе-Гувера [17] с добавлением случайного шума для улучшения эргодичности [18].

Термостат Андерсена [15] является одним из первых термостатов, предложенных для реализации молекулярно-динамического моделирования. Его использование позволило проводить расчёты в каноническом ансамбле (*NVT*). Термостатирование в алгоритме Андерсена осуществляется посредством стохастических сил, которые изменяют кинетическую энергию атомов. Между столкновениями система эволюционирует как микроканонический ансамбль, а движение атомов описывается законами Ньютона. Характеристикой связи между системой и термостатом является частота случайных столкновений. Время между столкновениями или количество столкновений в некотором (коротком) временном интервале определяется случайным образом по распределению Пуассона.

Термостат Нозе-Гувера [17] позволяет моделировать систему, которая асимптотически находится в *NVT*-ансамбле. Идея метода состоит во введении дополнительной динамической переменной, физический смысл которой соответствует силе трения, замедляющей или ускоряющей частицы до тех пор, пока температура, измеряемая через кинетическую энергию, не достигнет заданного значения. Термостат использует дополнительные степени свободы, которые добавляются к основному уравнению движения. Таким образом, происходит обмен кинетической энергией между моделируемой системой и тепловым резервуаром. Однако термостат Нозе-Гувера не является эргодичным для одиночного гармонического осциллятора, это означает, что каноническое распределение для одного гармонического осциллятора не может быть создано. Эта особенность являлась причиной разработки альтернативных

алгоритмов термостатирования, например, метода кинетических моментов [19], и ряда других.

2. Методология компьютерного моделирования

В данной работе в качестве объекта исследования для изучения структуры тернарных наночастиц $Ti6Al4V$ была выбрана сферическая частица, состоящая из 2869 атомов. Выбор размера был обусловлен возможностью сопоставления с результатами, полученными в [8, 9] с использованием ПО, разработанного В.С. Мясниченко [14]. Тернарную наночастицу нагревали до полного разупорядочения (т.е. выше температуры плавления с учетом размерного эффекта [10]), а затем охлаждали с различными скоростями. Для описания межатомного взаимодействия использовался потенциал сильной связи (ПСС), параметры которого представлены в Таблице 1 [20, 21]. Для вычисления перекрестных параметров использовалось правило Лоренца-Бертло [22], обоснованное в [23] и апробированное нами в [5-10]. Анализ наличия кристаллических фаз (ГЦК, ГПУ, ОЦК) проводился методом сопоставления полиэдрических шаблонов [24] с помощью программы OVITO [25], а также с использованием библиотеки mdapy [26]. Значение параметра обрезки RMSD (root-mean-square deviation) – 0,155.

Таблица 1. Параметры ПСС для наносистемы $Ti-Al-V$ [20, 21].

Связь	A, эВ	ζ, эВ	p	q	r_0, Å
$Ti-Ti$	0,1519	1,8112	8,62	2,39	2,951
$Ti-V$	0,1977	2,0466	7,7372	2,2893	2,7867
$Ti-Al$	0,1362	1,5439	8,616	2,453	2,9072
$V-V$	0,2572	2,3126	6,8543	2,1886	2,6223
$V-Al$	0,1772	1,7445	7,7332	2,3523	2,7428
$Al-Al$	0,1221	1,316	8,612	2,516	2,8634

3. Результаты и обсуждение

Как было показано нами ранее [9, 27], закономерности структурных превращений в тернарных наночастицах $Ti6Al4V$ зависят от скорости охлаждения. Кроме того, параметры гистерезиса плавления и кристаллизации также определяются скоростью термоиндуцированного воздействия. На рис. 1 представлены соответствующие калорические кривые, отображающие температурную зависимость потенциальной части удельной внутренней энергии.

В [9] нами было впервые предложено существование нескольких режимов структурообразования в тернарных наночастицах $Ti6Al4V$, в зависимости от скорости охлаждения: первый режим – при скорости охлаждения менее 0,4 К/пс; второй режим – в диапазоне скоростей от 0,4

до 1,6 К/пс; третий режим – при скорости охлаждения более 1,6 К/пс.

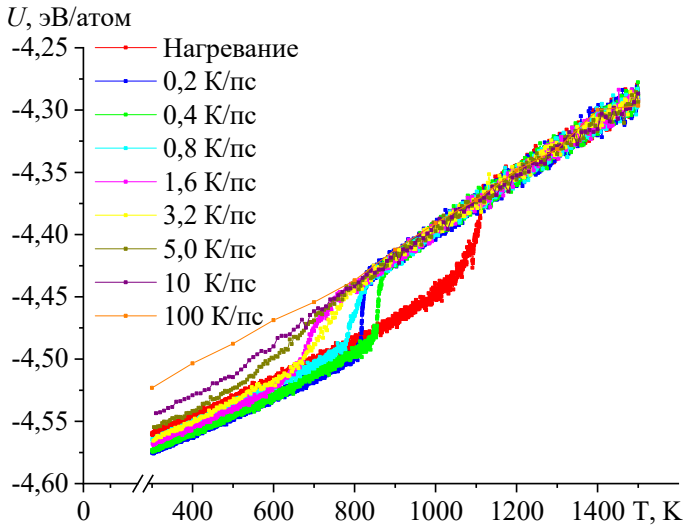


Рис. 1. Зависимость потенциальной части удельной внутренней энергии от температуры для наночастицы $Ti6Al4V$ при нагревании и при охлаждении с различными скоростями.

Анализируя данные рис. 1, можно видеть, что температура кристаллизации при скорости охлаждения 0,2 К/пс выше, чем при 0,4 К/пс. Однако дальнейшее увеличение скорости охлаждения приводит к нелинейному изменению температуры кристаллизации, а при скоростях выше 5 К/пс чётко выраженный скачок на калорической кривой, соответствующий объемной кристаллизации, не наблюдается.

Изменение характера кристаллизации, безусловно, связано с закономерностями формирования локальных кристаллических фаз. На рис. 2 и 3 представлены, соответственно, атомистическое распределение в конечных конфигурациях (объемный вид ядра и экваториальное сечение всей наночастицы), распределение локальных фаз и температурные зависимости числа атомов, для которых идентифицирована их принадлежность к определенной локальной структуре.

Полученные результаты в целом находятся в хорошем согласии с данными работ [9, 27]. Так, при малых скоростях охлаждения доминируют ГЦК и ГПУ локальные фазы. С ростом скорости охлаждения доля ГЦК-фазы уменьшается, появляются ядра икосаэдрической (ИК) симметрии, а доля атомов, которые не идентифицируются программой Ovito [25] как принадлежащие к какой-либо кристаллической фазе, резко возрастает.

Именно присутствие ИК-ядер и высокий уровень структурного беспорядка влияет на вид температурной зависимости потенциальной части удельной внутренней энергии – при высоких скоростях охлаждения чёткий скачок, соответствующий кристаллизации, не идентифицируется.

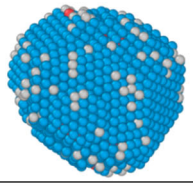
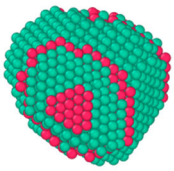
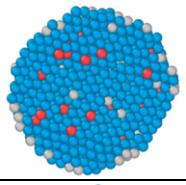
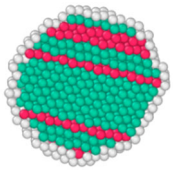
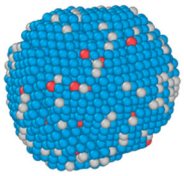
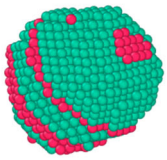
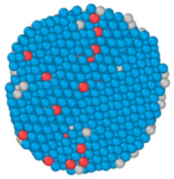
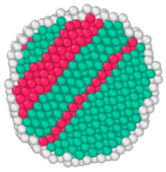
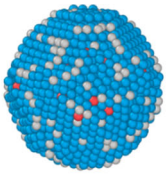
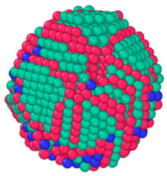
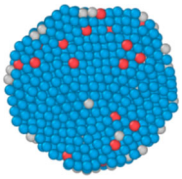
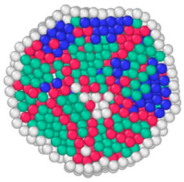
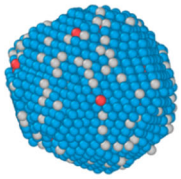
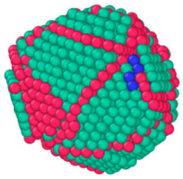
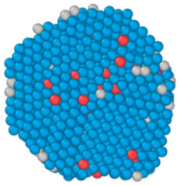
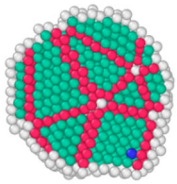
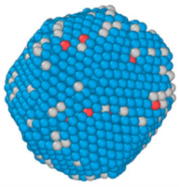
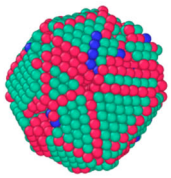
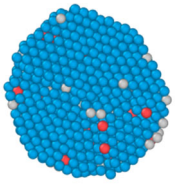
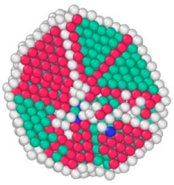
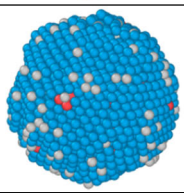
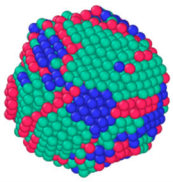
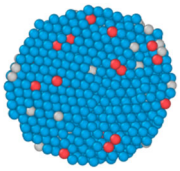
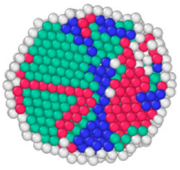
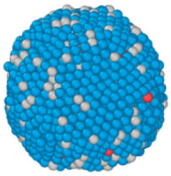
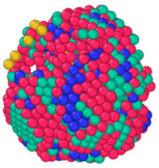
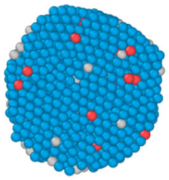
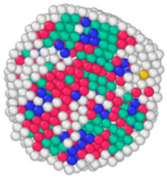
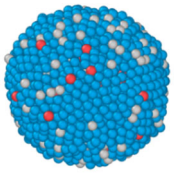
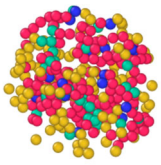
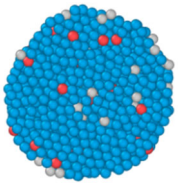
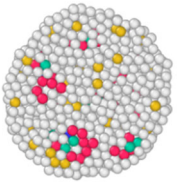
Скорость, К/пс	Объемный вид*	Распределение по локальным фазам*	Экваториальное сечение	Экваториальное сечение
0,2				
0,4				
0,8				
1,6				
3,2				
5				
10				
100				

Рис. 2. Конечные конфигурации НЧ *Ti6Al4V* при 300 К. Цветовые обозначения: голубой – атомы титана, серый – алюминий, светло-красный – ванадий; по локальным фазам зеленый цвет – ГЦК, темно-синий – ОЦК, темно-красный – ГПУ, желтый – ИК ядра, белые – нераспознанные. В столбцах, отмеченных (*) показана только центральная часть наночастицы, без поверхностных (нераспознанных) атомов.

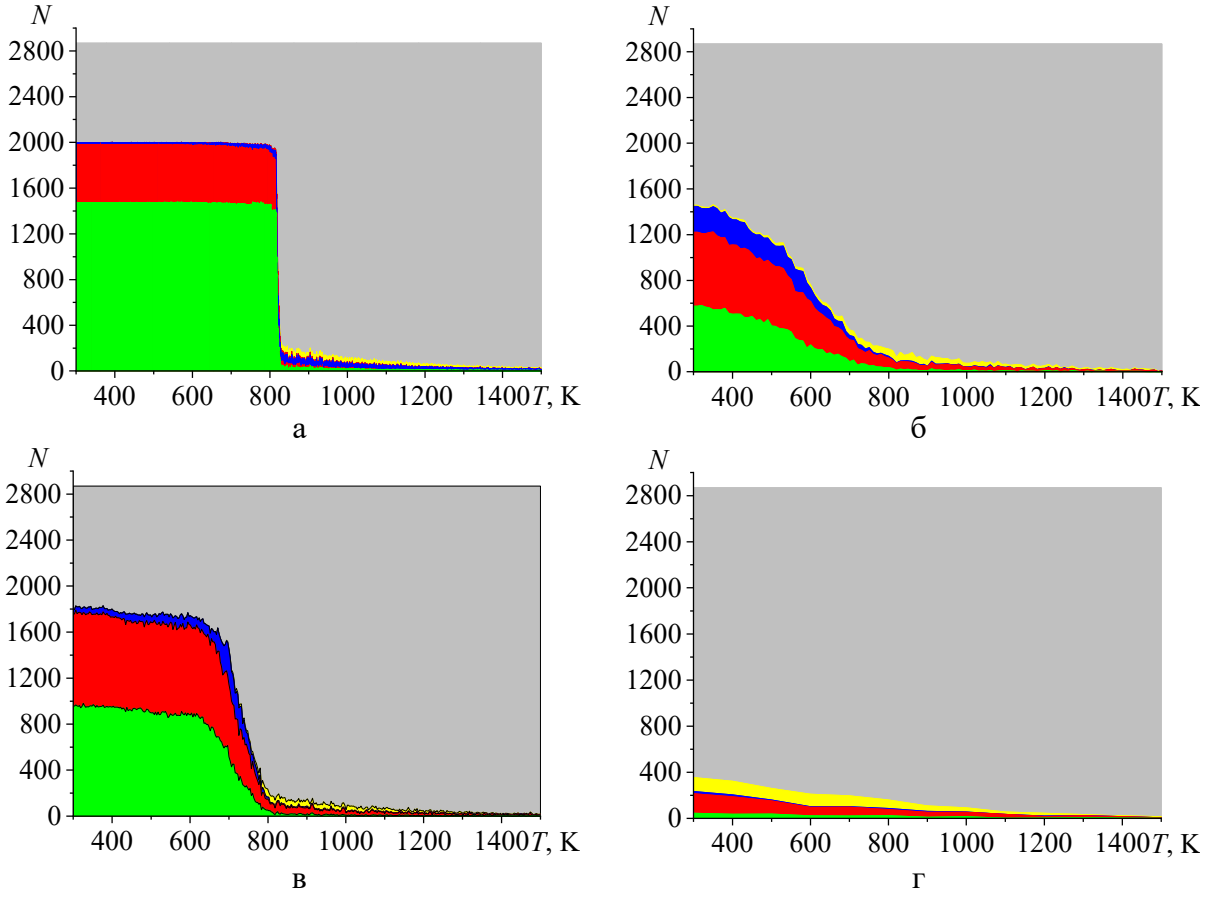


Рис. 3. Температурные зависимости числа атомов, для которых идентифицирована их принадлежность к определенной локальной структуре: зеленый цвет – ГЦК, красный – ГПУ, синий – ОЦК, желтый – ИК ядра, серый – атомы, которые ПО Ovito идентифицирует как нераспознанные, т.е. не принадлежащие ни одной из вышеперечисленных локальных структур. Панели соответствуют следующим скоростям охлаждения: а – 0,2 К/пс, б – 3,2 К/пс, в – 10 К/пс, г – 100 К/пс.

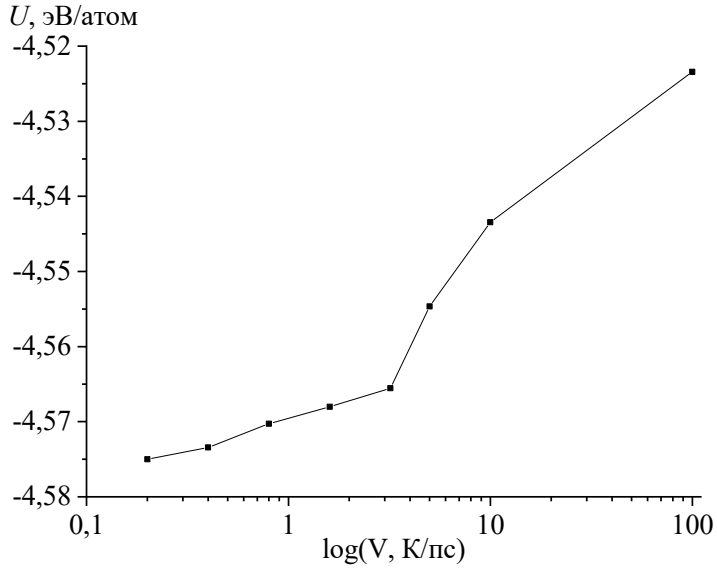


Рис. 4. Зависимость потенциальной части удельной внутренней энергии наночастицы $Ti6Al4V$, отвечающей конечной конфигурации T =300 К, от скорости охлаждения.

Идентифицируемые закономерности сегрегационного поведения атомов, входящих в тернарный наносплав $Ti6Al4V$ также совпадают с результатами [1, 9, 27]: атомы алюминия практически не присутствуют в ядре наночастицы, атомы ванадия могут присутствовать как на поверхности наночастицы, так и в ее центральной части. Важным критерием сопоставления результатов моделирования с альтернативным ПО [14, 16], использующим другие методы термостатирования, является оценка величин удельной внутренней энергии наночастицы $Ti6Al4V$ при различных скоростях охлаждения при температуре T =300 К. Во-первых, вид зависимости, представленной на рис. 4, качественно совпадает с оценками [9]. Во-вторых, значения удельной внутренней энергии U для полученных структур также находятся в хорошем согласии с результатами [9] при 300 К, т.е. совпадают в рамках погрешности расчёта. Данный факт свидетельствует о том, что оба термостата приводят систему в конфигурационно близкие состояния, соответствующие минимуму потенциальной энергии для заданных внешних условий. Однако кинетика (и особенно температура) процесса кристаллизации оказывается чувствительной к выбору алгоритма термостатирования.

4. Заключение

Адекватность расчетной схемы (выбор потенциала межатомного взаимодействия и его параметров [28], внешних условий, например давления [29, 30], методологии термостатирования) в атомистическом моделирования напрямую определяет закономерности структурных превращений [1]. Результаты данной работы можно рассматривать, как попытку на качественном уровне оценить степень влияния выбора термостата при моделировании структурных превращений в тернарном наносплаве $Ti6Al4V$. В качестве базовых использовались два термостата. Показано, что оба используемых термостата (термостат Андерсена [15] и модифицированный термостат Нозе-Гувера [17]) при совпадающих условиях моделирования для наночастиц тернарного сплава $Ti6Al4V$ предсказывают аналогичные структурные превращения в широком диапазоне скоростей охлаждения (от 0,2 К/пс до 100 К/пс). Если при малых скоростях доминируют локальные ГЦК и ГПУ фазы, то с увеличением скорости охлаждения до 5 К/пс происходит постепенное уменьшение доли идентифицируемых кристаллических фаз и появляются ядра икосаэдрической симметрии. Проанализировано поведение температурной зависимости потенциальной части удельной внутренней энергии, которая используется для идентификации температуры кристаллизации, а также установлено хорошее совпадение значений удельных внутренних энергий (в расчете на 1 атом), полученных при использовании двух термостатов.

Оба метода корректно описывают равновесные состояния системы и приводят к одним и тем же (мета)стабильным фазам. Таким образом, можно заключить, что для корректного сравнения результатов, полученных в разном программном обеспечении, в большей степени следует опираться на совпадение термодинамических и структурных параметров, в то время как кинетические параметры (температура кристаллизации, скорость релаксации) могут варьироваться в зависимости от реализации алгоритма молекулярной динамики.

Исследования выполнены при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках выполнения государственного задания в сфере научной деятельности (проект № 0817-2023-0006).

Библиографический список:

1. **Сдобняков, Н.Ю.** Моделирование структурных превращений в однокомпонентных и многокомпонентных металлических наносистемах: учебник / Н.Ю. Сдобняков. – Тверь: Тверской государственный университет, 2025. – 408 с. DOI:10.26456/sny.2025.408.
2. **Behera, A.** Ti-based nanoalloy in automobile industry / A. Behera, A. Behera // In: Micro and Nano Technologies, Nanotechnology in the Automotive Industry; ed. by H. Song et al. – Amsterdam: Elsevier, 2022. – Ch. 13. – P. 255-268. DOI: 10.1016/B978-0-323-90524-4.00013-X.
3. **Ifijen, I.H.** Titanium-based nanoparticles: innovations in energy applications, wastewater treatment, and tissue engineering for cardiac regeneration / I.H. Ifijen, U.U. Akobundu, J.U. Chukwu et al. // Discover Chemistry. – 2025. – V. 2. – I. 1. – Art. № 62. – 58 p. DOI: 10.1007/s44371-025-00142-x.
4. **Haghighi, N.R.** Size, morphology and optical properties of titanium-based colloidal nanoparticles prepared by dc electrical arc discharge in different liquids / N.R. Haghighi, R. Poursalehi // Procedia Materials Science. – 2015. – V. 11. – P. 661-665. DOI: 10.1016/j.mspro.2015.11.018.
5. **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.
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: DOI: 10.25712/ASTU.1811-1416.2020.03.012.
7. **Сдобняков, Н.Ю.** О структурных превращениях в наночастицах титан–алюминий / Н.Ю. Сдобняков, В.С. Мясниченко, Е.М. Давыденкова и др. // Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. – 2019. – Т. IX. – № 4. – С. 13-16.
8. **Sdobnyakov, N.Yu.** Effect of cooling rate on structural transformations in Ti-Al-V nanoalloy: molecular dynamics study / N.Yu. Sdobnyakov, V.M. Samsonov, V.S. Myasnichenko et al. // Journal of Physics: Conference Series. – 2021. – V. 2052. – Art. № 012038. – 4 p. DOI: 10.1088/1742-6596/2052/1/012038.
9. **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.
10. **Мясниченко, В.С.** Размерный эффект и структурные превращения в тернарных наночастицах Ti_x-Al_{96-x}-V_4 / В.С. Мясниченко, П.М. Ершов, С.А. Вересов и др. // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2023. – Вып. 15. – С. 495-506. DOI: 10.26456/pcascnn/2023.15.495.
11. **Bağ, Ö.** Influence of Al content on transformation temperature and activation energy of Ti–V–Al high temperature shape memory alloys / Ö. Bağ, S. Ergen, F. Yılmaz, U. Kölemen // Solid State Communications. – 2021. – V. 323. – Art. № 114104. – 5 p. DOI: 10.1016/j.ssc.2020.114104.
12. **Ergen, S.** Determination of phase transformation and activation energy in high temperature shape memory Ti-V-Al alloy / S. Ergen // Hittite Journal of Science and Engineering. – 2018. – V. 5. – I. 1. – P. 63-68. DOI: 10.17350/HJSE19030000066.
13. **Непша, Н.И.** Сценарии структурообразования в тернарных наночастицах на основе Pd-Pt при

наличии допанта Ni / Н.И. Непша, Д.Н. Соколов, Е.С. Митинев и др. // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2023. – Вып. 15. – С. 507-519. DOI: 10.26456/pcascnn/2023.15.507.
14. **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.
15. **Andersen, H.C.** Molecular dynamics at constant pressure and/or temperature / H.C. Andersen // The Journal of Chemical Physics. – 1980. – V. 72. – I. 4. – P. 2384-2393. DOI: 10.1063/1.439486.
16. **Свидетельство № 2025683621 Российская Федерация**. MDSym / Н.Ю. Сдобняков, А.Ю. Колосов, Д.Н. Соколов, К.Г. Савина; заявитель и правообладатель Сдобняков Н.Ю. – № 2025681911; заявл. 20.08.2025; зарегистрировано в реестре программ для ЭВМ 5.09.2025. – 1 с.
17. **Nosé, S.** A unified formulation of the constant temperature molecular dynamics methods / S. Nosé // The Journal of Chemical Physics. – 1984. – V. 81. – I. 1. – P. 511-519. DOI: 10.1063/1.447334.
18. **Leimkuhler, B.** A gentle stochastic thermostat for molecular dynamics / B. Leimkuhler, E. Noorizadeh, F. Theil // Journal of Statistical Physics. – 2009. – V. 135. – I. 2. – P. 261-277. DOI: 10.1007/s10955-009-9734-0.
19. **Hoover, W.G.** Kinetic moments method for the canonical ensemble distribution / W.G. Hoover, B.L. Holian // Physics Letters A. – 1996. – V. 211. – I. 5. – P. 253-257. DOI:10.1016/0375-9601(95)00973-6.
20. **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.
21. **Karolewski, M.A.** Tight-binding potentials for sputtering simulations with fcc and bcc metals / M.A. Karolewski // Radiation Effects and Defects in Solids. – 2001. – V. 153. – I. 3. – P. 239-255. DOI: 10.1080/10420150108211842.
22. **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.
23. **Сдобняков, Н.Ю.** Моделирование процессов коалесценции и спекания в моно- и биметаллических наносистемах. Монография / Н.Ю. Сдобняков, А.Ю. Колосов, С.С. Богданов. – Тверь: Изд-во ТвГУЕерского государственного университета, 2021. – 168 с.
24. **Larsen, P.M.** Robust structural identification via polyhedral template matching modelling / P.M. Larsen, S. Schmidt, J. Schiøtz // Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering. – 2016. – V. 24. – № 5. – Art. № 055007. – 18 p. DOI: 10.1088/0965-0393/24/5/055007.
25. **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.
26. **Wu, Y.-C.** mdapy: a flexible and efficient analysis software for molecular dynamics simulations / Y.-C. Wu, J.-L. Shao // Computer Physics Communications. – 2023. – V. 290. – Art. № 108764. DOI: 10.1016/j.cpc.2023.108764.
27. **Sdobnyakov, N.Yu.** Effect of cooling rate on structural transformations in Ti-Al-V nanoalloy: molecular dynamics study / N.Yu. Sdobnyakov, V.M. Samsonov, V.S. Myasnichenko et al. // Journal of Physics: Conference Series. – 2021. – V. 2052. – Art. № 012038. – 4 p.DOI: 10.1088/1742-6596/2052/1/012038.
28. **Massen, C.** Geometries and segregation properties of platinum–palladium nanoalloy clusters / C. Massen, T.V. Mortimer-Jones, R.L. Johnston // Journal of the Chemical Society, Dalton Transactions. – 2002. – I. 23. – P. 4375-4388. DOI: 10.1039/B207847C.
29. **Ji, M.** Ab initio molecular dynamics simulation on nano-system under external pressure / M. Ji, D.Y. Sun, X-G. Gong // Science in China. Series A Mathematics. – 2004. – V. 47. – I. 7. – P. 92-100. DOI: 10.1360/04za0008.
30. **Garip, A.K.** The local atomic pressures in 79 atom Pd-Ag-Pt truncated octahedron structure / A.K. Garip, T. Göcen // European Physical Journal Applied Physics. – 2022. – V. 97. – Art. no. 30. – 7 p. DOI: 10.1051/epjap/2022220030.

References:

1. Sdobnyakov N.Yu. *[Modelirovanie strukturnykh prevrashchenij v odnokomponentnykh i mnogokomponentnykh metallicheskikh nanosistemakh: uchebnik]* Simulation of structural transformations in single-component and multi-component metallic nanosystems: a textbook. Tver, Tver State University Publ., 2025, 408 p. DOI:10.26456/sny.2025.408. (In Russian).

2. Behera A., Behera A. Ti-based nanoalloy in automobile industry, *Micro and Nano Technologies, Nanotechnology in the Automotive Industry*, ed. by H. Song et al., Amsterdam, Elsevier, 2022, chapter 13, pp. 255-268. DOI: 10.1016/B978-0-323-90524-4.00013-X.
3. Ifijen I.H., Akobundu U.U., Chukwu J.U. et al. Titanium-based nanoparticles: innovations in energy applications, wastewater treatment, and tissue engineering for cardiac regeneration, Discover Chemistry, 2025, vol. 2, issue 1, art. no. 62, 58 p. DOI: 10.1007/s44371-025-00142-x.
4. Haghighi N.R., Poursalehi R. Size, morphology and optical properties of titanium-based colloidal nanoparticles prepared by dc electrical arc discharge in different liquids, *Procedia Materials Science*, 2015, vol. 11, pp. 661-665. DOI: 10.1016/j.mspro.2015.11.018.
5. 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.
6. Myasnichenko V.S., Ershov P.M., Sokolov D.N. et al. Zavisimost' temperatury steklovaniya bimetallicheskikh 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. Sdobnyakov N.Yu., Myasnichenko V.S., Davydenkova E.M. et al. O strukturnykh prevrashcheniyakh v nanochastitsakh titan–alyuminij [About structural transformations in titanium-containing nanoparticles], *Izvestiya Kabardino-Balkarskogo gosudarstvennogo universiteta [Proceedings of the Kabardino-Balkarian State University]*, 2019, vol IX, no. 4, pp. 13-16. (In Russian).
8. Sdobnyakov N.Yu., Samsonov V.M., Myasnichenko V.S. et al. Effect of cooling rate on structural transformations in Ti-Al-V nanoalloy: molecular dynamics study, *Journal of Physics: Conference Series*, 2021, vol. 2052, art. no. 012038, 4 p. DOI: 10.1088/1742-6596/2052/1/012038.
9. 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.
10. Myasnichenko V.S., Ershov P.M., Veresov S.A. et al. Razmernyj effekt i strukturnye prevrashcheniya v ternarnykh nanochastitsakh Tix–Al96-x–V4 [Size effect and structural transformations in ternary nanoparticles Tix–Al96-x–V4], *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov [Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials],* 2023, issue 15, pp. 495-506. DOI: 10.26456/pcascnn/2023.15.495.
11. Bağ Ö., Ergen S., Yılmaz F., Kölemen U. Influence of Al content on transformation temperature and activation energy of Ti–V–Al high temperature shape memory alloys, *Solid State Communications*, 2021, vol. 323, art. no. 114104, 5 p. DOI: 10.1016/j.ssc.2020.114104.
12. Ergen S. Determination of phase transformation and activation energy in high temperature shape memory Ti-V-Al alloy, *Hittite Journal of Science and Engineering*, 2018, vol. 5, issue 1, pp. 63-68. DOI: 10.17350/HJSE19030000066.
13. Nepsha N.I., Sokolov D.N., Mitinev E.S. et al. Stsenarii strukturoobrazovaniya v ternarnykh nanochastitsakh na osnove Pd-Pt pri nalichii dopanta Ni [Scenarios of structure formation in ternar nanoparticles based on Pd-Pt in the presence of Ni dopant], *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov [Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials],* 2023, issue 15, pp. 507-519. DOI: 10.26456/pcascnn/2023.15.507.
14. Myasnichenko V.S. *Molekulyarnodinamicheskoe modelirovanie i bioinspirirovannaya optimizatsiya binarnykh i trojnykh metallicheskikh nanostruktur (KlasterEvolyushn)* [Molecular dynamic modeling and bioinspired optimization of binary and ternary metal nanostructures (ClusterEvolution)]. Certificate RF, no. 2011615692, 2011. (In Russian).
15. Andersen H.C. Molecular dynamics at constant pressure and/or temperature, *The Journal of Chemical Physics*, 1980, vol. 72, issue 4, pp. 2384-2393. DOI: 10.1063/1.439486.
16. Sdobnyakov N.Yu., Kolosov A.Yu., Sokolov D.N., Savina K.G. *MDSym.* Certificate RF, no. 2025683621, 2025. (In Russian).
17. Nosé S. A unified formulation of the constant temperature molecular dynamics methods, *The Journal of Chemical Physics*, 1984, vol. 81, issue 1, pp. 511-519. DOI: 10.1063/1.447334.
18. Leimkuhler B., Noorizadeh E., Theil F. A gentle stochastic thermostat for molecular dynamics, *Journal of Statistical Physics*, 2009, vol. 135, issue 2, pp. 261-277. DOI: 10.1007/s10955-009-9734-0.
19. Hoover W.G., Holian B.L. Kinetic moments method for the canonical ensemble distribution, *Physics Letters A*, 1996, vol. 211, issue 5, pp. 253-257. DOI:10.1016/0375-9601(95)00973-6.
20. 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.
21. Karolewski M.A. Tight-binding potentials for sputtering simulations with fcc and bcc metals, *Radiation Effects and Defects in Solids*, 2001, vol. 153, issue 3, pp. 239-255. DOI: 10.1080/10420150108211842.
22. 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.
23. Sdobnyakov N.Yu., Kolosov A.Yu., Bogdanov S.S. *Modelirovanie protsessov koalestsentsii i spekaniya v mono- i bimetallicheskikh 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).
24. Larsen P.M., Schmidt S., Schiøtz J. Robust structural identification via polyhedral template matching modelling, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2016, vol. 24, no. 5, art.no. 055007, 18 p. DOI: 10.1088/0965-0393/24/5/055007.
25. 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.
26. Wu Y.-C., Shao J.-L. mdapy: a flexible and efficient analysis software for molecular dynamics simulations, *Computer Physics Communications*, 2023, vol. 290, art. no. 108764. DOI: 10.1016/j.cpc.2023.108764.
27. Sdobnyakov N.Yu., Samsonov V.M., Myasnichenko V.S. et al. Effect of cooling rate on structural transformations in Ti-Al-V nanoalloy: molecular dynamics study, *Journal of Physics: Conference Series*, 2021, vol. 2052, art. № 012038, 4 p. DOI: 10.1088/1742-6596/2052/1/012038.
28. Massen C., Mortimer-Jones T.V., Johnston R.L. Geometries and segregation properties of platinum–palladium nanoalloy clusters, *Journal of the Chemical Society, Dalton Transactions*, 2002, issue 23, pp. 4375-4388. DOI: 10.1039/B207847C.
29. Ji M., Sun D.Y., Gong X-G. Ab initio molecular dynamics simulation on nano-system under external pressure, *Science in China. Series A Mathematics*, 2004, vol. 47, issue 7, pp. 92-100. DOI: 10.1360/04za0008.
30. Garip A.K., Göcen T. The local atomic pressures in 79 atom Pd-Ag-Pt truncated octahedron structure, *European Physical Journal Applied Physics*, 2022, vol. 97, art. no. 30, 7 p. DOI: 10.1051/epjap/2022220030.