УДК 536.421.1 + 536.911 *Оригинальная статья*

Металлические нанозвёзды как новый объект для атомистического моделирования

Д.Н. Соколов, В.С. Мясниченко, О.В. Полев, К.Г. Савина, М.Г. Гостинцев, Н.Ю. Сдобняков

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

DOI: 10.26456/pcascnn/2025.17.485

Аннотация: Исследована термическая стабильность золотых нанозвёзд, которые имели два типа начальной морфологии: большой додецикосакрон, большой вывернутый плосконосый икосододекаэдр. Начальные конфигурации нанозвёзд были получены с помощью программы Atomsk с последующей релаксацией структуры. Моделирование термоиндуцированного воздействия проводилось методом Монте-Карло (схема Метрополиса). Межатомное взаимодействие описывалось потенциалом сильной связи. Определены критические температуры дестабилизации, которые увеличиваются с увеличением размера для обоих типов начальной морфологии, а также установлены закономерности структурной сегрегации в процессе термоиндуцированного воздействия вплоть до температуры плавления. Несмотря на доминирование локальной ГЦК структуры в центральной части нанозвёзд, характер распределения локального ГПУ структуры различается для рассмотренных типов начальной морфологии вплоть до температуры плавления. Показано, что термическое разрушение начинается с «множественных лучей» нанозвёзд, где локальная плотность атомов ниже, чем в среднем по поверхности. Результаты позволяют прогнозировать стабильность анизотропных наночастиц для фототермальных приложений.

Ключевые слова: метод Монте-Карло, потенциал сильной связи, золотые нанозвезлы, термическая стабильность, локальная плотность, кристаллические фазы, плазмонные наноструктуры.

Соколов Денис Николаевич – 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»
Полев Олег Валерьевич – студент 2 курса магистратуры кафедры общей физики ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»
Савина Ксения Геннадьевна – аспирант 3 года обучения кафедры общей физики ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»
Гостинцев Михаил Георгиевич – студент 4 курса 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

Metallic nanostars as a new object for atomistic simulation

D.N. Sokolov, V.S. Myasnichenko, O.V. Polev, K.G. Savina, M.G. Gostintsev, N.Yu. Sdobnyakov

Tver State University, Tver, Russia

DOI: 10.26456/pcascnn/2025.17.485

Abstract: The thermal stability of gold nanostars with two types of initial morphology: a great dodecicosacron and a great inverted snub icosidodecahedron was studied. The initial nanostar configurations were obtained using the Atomsk program, followed by structural relaxation. Thermally induced stress was simulated using the Monte Carlo method (Metropolis scheme). Interatomic interactions were described by the tight-binding potential. Critical destabilization temperatures, which increase with increasing size for both types of the initial morphology, were determined. Patterns of structural segregation during thermally induced stress up to the melting temperature were also

© Д.Н. Соколов, В.С. Мясниченко, О.В. Полев, К.Г. Савина, М.Г. Гостинцев, Н.Ю. Сдобняков, 2025

established. Despite the dominance of the local FCC structure in the central part of the nanostars, the nature of the distribution of local HCP structure differs for the considered types of the initial morphology up to the melting temperature. Thermal degradation was shown to begin with «multiple rays» of nanostars, where the local atomic density is lower than the surface average one. The results allow us to predict the stability of anisotropic nanoparticles for photothermal applications.
Keywords: Monte Carlo method, tight-binding potential, gold nanostars, thermal stability, local density, crystalline phases, plasmonic nanostructures.

Denis N. Sokolov – Ph. D., Researcher, General Physics Department, Tver State University, ORCID: 0000-0003-2411-0143
Vladimir S. Myasnichenko – Researcher, General Physics Department, Tver State University
Oleg V. Polev – 2nd year graduate student, General Physics Department, Tver State University
Kseniya G. Savina – 3rd year postgraduate student, General Physics Department, Tver State University, ORCID: 0000-0002-4916-4968
Michael G. Gostintsev – 4th year student, General Physics Department, Tver State University
Nickolay Yu. Sdobnyakov – Dr. Sc., Docent, Professor, General Physics Department, Tver State University, ORCID: 0000-0003-1749-0336

Поступила в редакцию/received: 07.07.2025; после рецензирования/revised: 16.09.2025; принята/accepted: 17.09.2025.

1. Введение

Металлические наночастицы с нетривиальной анизотропной морфологией – ключевые элементы современных нанофотонных и каталитических систем. Их уникальные оптические и каталитические свойства привлекают особое внимание. Геометрия и размер таких наночастиц существенно влияют на положение локализованного поверхностного плазмонного резонанса (ЛПР), что позволяет тонко настраивать спектры их поглощения и рассеяния света [1]. Это критично для их in vivo биомедицинского применения. Однако термическая стабильность нанозвёзд при эксплуатационных температурах (≥500 K) остаётся малоизученной, что ограничивает их использование в катализе и энергетике.

Среди анизотропных форм особый интерес представляют:

1. *Наноклетки* (nanocages), включая металлические – полые структуры с настраиваемым (в ближней ИК-области) ЛПР [2] за счёт резонанса их тонких стенок. Такая комбинация высокой удельной поверхности и настраиваемого усиления локального поля делает их перспективными для оптических сенсоров, методов поверхностно-усиленной комбинационной спектроскопии (SERS – surface-enhanced Raman spectroscopy) и биомедицинских технологий, включая фото-термическую терапию и диагностическую визуализацию. Золотые наноклетки могут синтезироваться методом гальванического замещения серебряных нанокубов.

2. *Нанорамки (nanoframes)* – трёхмерные каркасы с повышенной удельной поверхностью, получаемые удалением материала из твёрдых наночастиц [3]. Их трёхмерная рамочная структура обеспечивает большую

удельную поверхность, а также выраженные каталитические и плазмонные свойства. Разработаны многочисленные стратегии их синтеза, позволяющие варьировать форму, размеры и состав для оптимизации под конкретные задачи в катализе и сенсорике.

3. *Нанозвёзды (nanostars)* – частицы с ветвистой структурой поверхности, где «горячие точки» ЛПР локализованы на вершинах «лучей» [1, 4-6]. Подобные характеристики обеспечивают исключительно сильное оптическое усиление, делая нанозвёзды особенно перспективными для SERS технологий, мультиплексного анализа, оптоэлектроники и фототермальной терапии. Химическая устойчивость золотых нанозвёзд обусловила их популярность как модельной системы, однако активно исследуются и биметаллические конструкции, в частности платиномодифицированные золотые нанозвёзды, которые демонстрируют повышенную эффективность в комбинированных терапевтических подходах [7].

Методы синтеза нанозвёзд основаны преимущественно на коллоидной химии, но важную роль играют и теоретические исследования. Так, расчёты в рамках метода функционала плотности показали роль лиганда в анизотропном росте ветвей [8], а численные симуляции позволили выявить корреляцию между морфологическими параметрами (число и длина «лучей», объём ядра) и положением плазмонных резонансов [9]. Отдельные работы показали пороговый характер морфологических перестроек нанозвёзд под действием лазерного излучения [10].

Важным фактором практического применения остаётся стабильность: моделирование показало, что кривизна концов «лучей» определяет склонность нанозвёзд к (само)агрегации и старению, а стабильность зависит также от ионного состава раствора и поверхностной химии [11]. Современные исследования рассматривают кривизну поверхности как универсальный критерий, определяющий не только эффективность усиления локального поля, но и адсорбционные свойства, каталитическую активность и применимость в диагностике и терапии [12].

Развитие методов характеризации позволило получить более полное представление о нанозвёздах. Так, использование анализа перемещения наночастиц дополнило традиционные методы электронной микроскопии и спектроскопии, позволив количественно оценить концентрацию, гидродинамические размеры и влияние условий синтеза на морфологию [13]. В смежных направлениях развиваются FDTD-симуляции (FDTD – finite-difference time-domain, метод конечных разностей во временной области) плазмонных систем, которые применимы к оптимизации формирования «горячих точек» в нанозвёздах [14]. Также показано, что

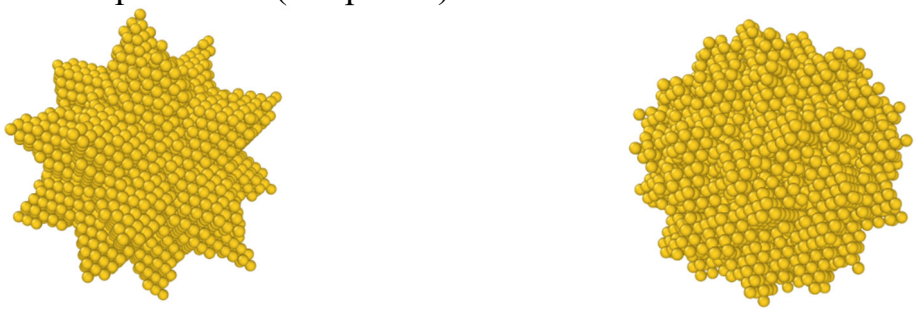
сочетание затравочного синтеза $Au-Cu$ наноструктур с одиночными спектроскопическими измерениями и FDTD-моделированием позволяет напрямую связать морфологию нанозвёзд с их плазмонными свойствами [15]. Литературные источники последних лет подчёркивают, что золотые нанозвёзды представляют собой относительно новый, но активно развивающийся класс наноструктур. Их уникальная морфология и плазмонные свойства, в сочетании с возможностью повышения стабильности и функциональности, открывают широкие перспективы для фундаментальных и прикладных исследований в материаловедении, биомедицине и смежных областях [16].

Целью настоящей работы является исследование процесса термической дестабилизации Au-нанозвёзд методом Монте-Карло с установлением взаимосвязи между их начальной морфологией и эволюцией формы поверхности нанозвёзд, изменением их локальной плотности, а также эволюцией их локальной структуры.

2. Методика и параметры компьютерного эксперимента

2.1 Генерация начальных конфигураций нанозвёзд

Объекты исследования – монометаллические нанозвёзды на основе золота. Для построения моделей нанозвёзд были выбраны два типа звёздных многогранников (см. рис. 1):



а б

Рис. 1. Примеры начальных конфигураций, построены на основе моделей звёздных многогранников: а – большой додецикосакрон (great dodecicosacron), б – большой вывернутый плосконосый икосододекаэдр (great inverted snub icosidodecahedron).

– *Great dodecicosacron* GDI (симметрия Ih [5,3], 60 граней, 32 вершины) – тип выбран как модель с высокой степенью анизотропии и острыми выступами.

– *Great inverted snub icosidodecahedron* GISI (симметрия I [5,3]+, 92 граней, 60 вершин) – модель с квазикристаллической структурой и большим количеством вершин. Критерии выбора размеров: для каждого типа многогранников сгенерированы конфигурации с числом атомов от ~300 до ~4300, что соответствует диаметру ядра 2-8 нм и общему диаметру 5-12 нм. Данный диапазон выбран для детального анализа размерных эффектов. Для GDI это были следующие значения нуклеарности: 356, 536,

1276, 2956 и 4208 атомов, для GISI: 284, 596, 1606, 2464 и 4316 атомов.

Построение моделей было произведено с помощью программы Atomsk [17]. Последующая релаксация структуры выполнена в ПО Metropolis [18] с учетом критерия достижения сходимости энергии.

2.2 Параметры моделирования и методика анализа данных

Компьютерное моделирование процесса термоиндуцированного воздействия осуществлялось с помощью ПО Metropolis [18], основанного на атомистическом методе Монте-Карло (схема Метрополиса [19]). Для достижения цели исследования производился нагрев нанозвёзд в температурном диапазоне от 300 K до 1200 K с шагом 10 K. Общее число шагов – 10^8, число шагов для релаксации – $9 \cdot 10^7$. Взаимодействие между атомами описывалось потенциалом сильной связи [20] (см. Таблицу 1).

Таблица 1. Параметры потенциала сильной связи [20].

A, эВ	ζ, эВ	p	q	r_0, Å	r_{cutoff}, Å
0,2061	1,790	10,229	4,036	2,8838	7,55

Исследование термической стабильности нанозвёзд также можно проводить на основе анализа поведения калорических зависимостей потенциальной части удельной внутренней энергии. Для анализа структуры и верификации структурных изменений использовалось ПО Ovito [21].

3. Обсуждение результатов

На рис. 2 представлены калорические зависимости потенциальной части удельной внутренней энергии, соответствующих двум типам начальной морфологии. В отличие от металлических наноклеток [22, 23] для нанозвёзд идентифицикация морфологических (изменение формы, деградация «лучей» нанозвёзд) и структурных превращений является затруднительным без использования дополнительных инструментов, в частности ПО Ovito [21], особенно с увеличением их размера.

В качестве примера на рис. 3 представлены атомные конфигурации золотых нанозвёзд наибольшего из рассматриваемых размеров для исходных типов начальной морфологии: GDI (4208 атомов) и GISI (4316 атомов). Были выделены 4 этапа в эволюции атомных конфигураций (слева направо): конфигурация, соответствующая началу дестабилизации «лучей» нанозвёзд (на рис. 2 это соответствует небольшому подъему значений энергии), двукратное уменьшение длины «лучей» нанозвёзд, начало фазы выравнивания поверхности нанозвёзд, окончание фазы выравнивания поверхности нанозвёзд, т.е. превращение в квазисферическую наночастицу (на рис. 2 два последних этапа также идентифицируются по началу и

окончанию увеличения значений энергии от линейной аппроксимации соответствующей части калорической зависимости).

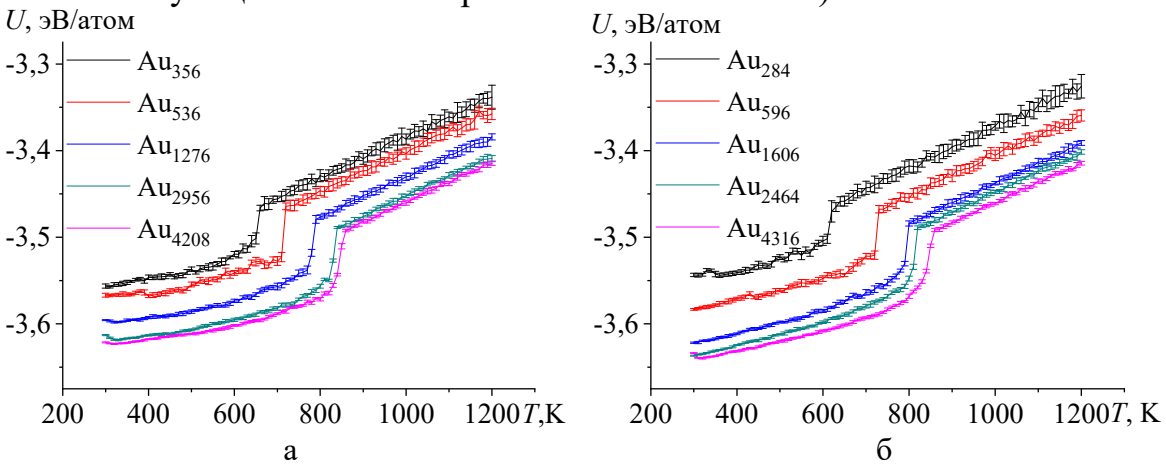


Рис. 2. Калорические зависимости потенциальной части удельной внутренней энергии золотых нанозвёзд различного размера: а – GDI, б – GISI.

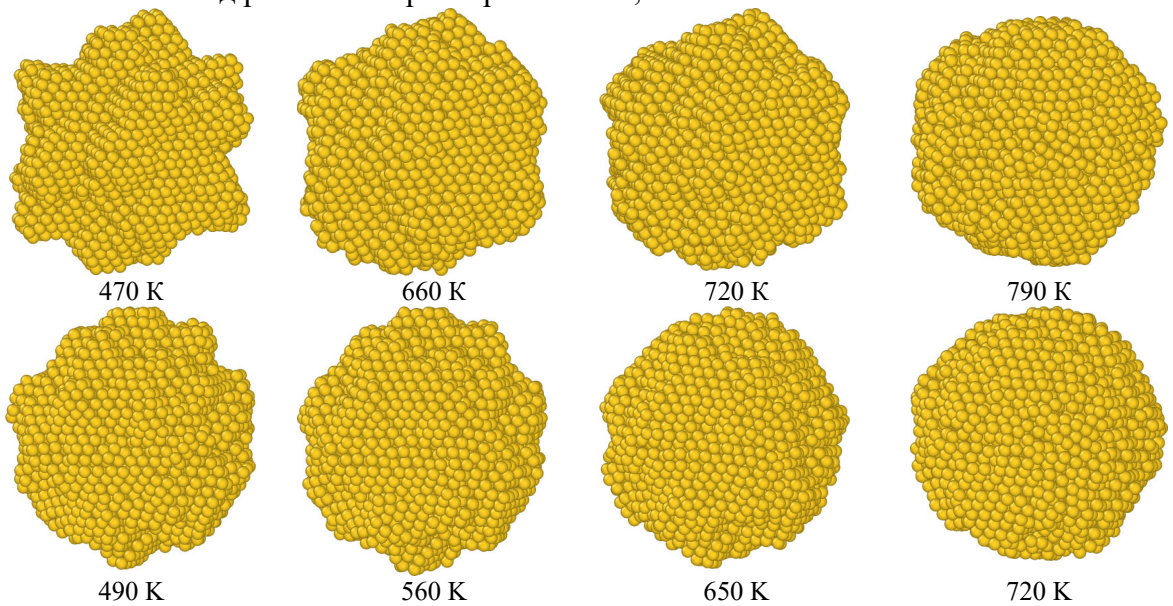


Рис. 3. Эволюция формы поверхности нанозвёзд при термическом воздействии: верхний ряд – начальная морфология GDI, нижний рад – GISI (указана температура, при которой получены конфигурации).

Таблица 2. Оценка температур дестабилизации T_d золотых нанозвёзд.

Начальная морфология GDI		Начальная морфология GISI	
Число частиц	T_d, К	Число частиц	T_d, К
356	350	284	320
536	380	596	340
1276	420	1606	430
2956	440	2464	450

Анализ рис. 3 позволяет сделать вывод о том, что температура начала дестабилизации формы нанозвёзд (а именно дестабилизация формы

их «лучей»), а также температура, при которой нанозвезда окончательно превращается в наночастицу, зависят от начальной морфологии нанозвёзд. В Таблице 2 представлены оценки температуры дестабилизации T_d для различных температур и начальной морфологии. Отметим, что размерная зависимость этой величины носит нелинейный характер.

Используя метод сопоставления полиэдрических шаблонов [24], реализованный в ПО Ovito [21] интересно проследить закономерности структурной сегрегации в золотых нанозвёздах на рис. 4 в качестве примера представлены соответствующие конфигурации, отвечающие различным начальным морфологиям GDI (4208 атомов) и GISI (4316 атомов) при различных температурах. Видно, что при температуре 420 К (данная температура ниже температуры начала дестабилизации для данного размера нанозвёзды) для исходной морфологии GDI в лучах нанозвёзды формируются участки с локальной ГПУ структурой, далее при увеличении температуры происходит постепенное исчезновение ГПУ фазы и вплоть до температуры плавление наблюдается локальная ГЦК структура, при этом в центральной части наночастицы присутствуют и нераспознанные атомы. Несколько иная ситуация для начальной морфологии GISI: при температуре 300 К доля локального ГПУ окружения в лучах нанозвёзды гораздо выше, чем для случая GDI. С деградацией «лучей» нанозвёзды на поверхности образуются протяженные «зоны» локальной ГПУ структурой вплоть до превращения нанозвёзды в квазисферическую наночастицу.

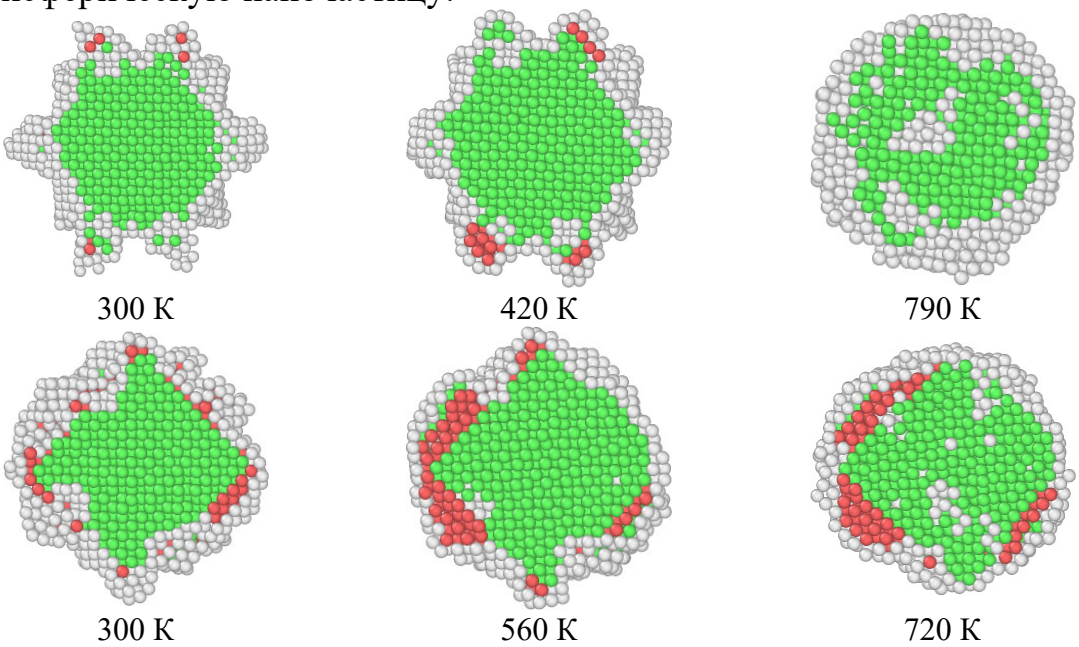


Рис. 4. Структурная эволюция нанозвёзд при термическом воздействии: верхний ряд – начальная морфология GDI, нижний ряд – GISI (указана температура, при которой получены конфигурации). Зеленые атомы образуют локальную ГЦК структуру, красные – ГПУ, белые атома являются нераспознанными ПО [21].

Очевидно, что изучение профиля локальной плотности и температурной зависимости средней величины локальной плотности может дать дополнительную информацию о структурных превращениях в золотых нанозвёздах. На рис. 5, 6 представлены соответствующие зависимости.

Для анализа профилей плотности нанозвёзд с различным типом начальной морфологии были выбраны средние размеры (кривые профилей в этом случае более показательны в части их температурной трансформации см. рис. 5), а также две температуры: начальная (300 К) и температура, соответствующая началу дестабилизации «лучей» нанозвёзд (см. Таблицу 2). Именно падение величины плотности как в объеме, так и на поверхности рассматриваемых нанозвёзд, а также уменьшение амплитуды ее осцилляции говорят о деградации их структуры (см. рис. 6). Кроме того, видно, что с повышением температуры структура нанозвёзд становится более компактной.

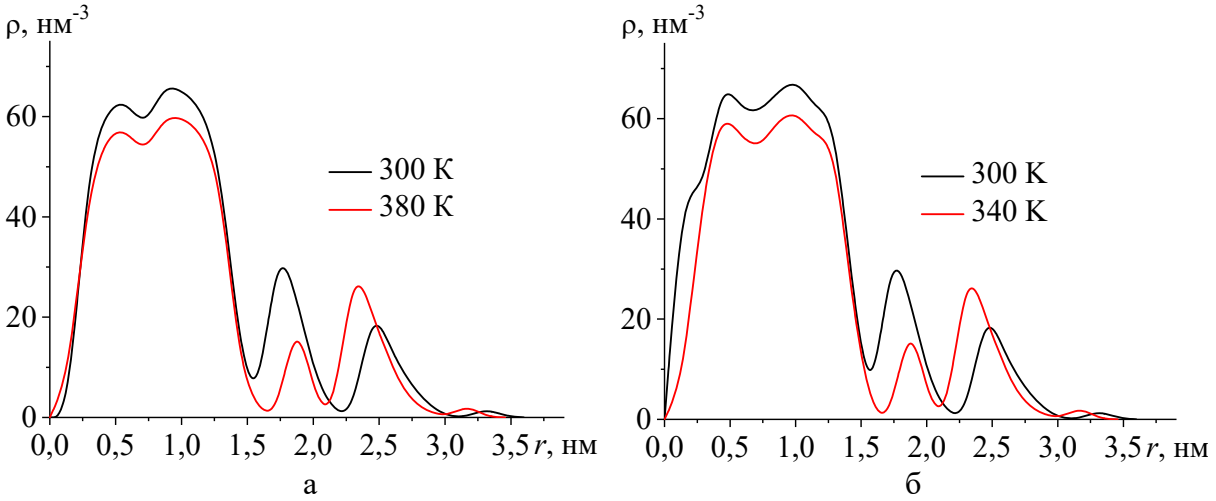


Рис. 5. Изменение профиля локальной плотности при различных температурах для золотых нанозвёзд: а – GDI (536 атомов), б – GISI (596 атомов).

Согласно рис. 6, графики температурной зависимости средней величины локальной плотности для двух альтернативных исходных морфологий, отвечающие максимальному из рассматриваемых размеров, принципиально различны: для GDI нанозвезды наблюдается минимум величины локальной плотности при 600 К (соответствует фазе резкой деградации «лучей» нанозвезды) и максимум при 990 К (наночастица находится в расплавленном состоянии), причем точке перегиба графика локальной плотности соответствует температуре плавления; для GISI нанозвезды величина локальной плотности практически линейно увеличивается вплоть до температуры плавления, а в жидкой имеет слабовыраженный максимум также при температуре 990 К. Данный факт, можно объяснить разницей в начальной морфологии строения «лучей»

нанозвёзд (более сложный рельеф поверхности для исходной морфологии GDI) и различным диффузионным поведением, в результате которого по разному формируются единичные вакансии в процессе деградации «лучей» нанозвёзд.

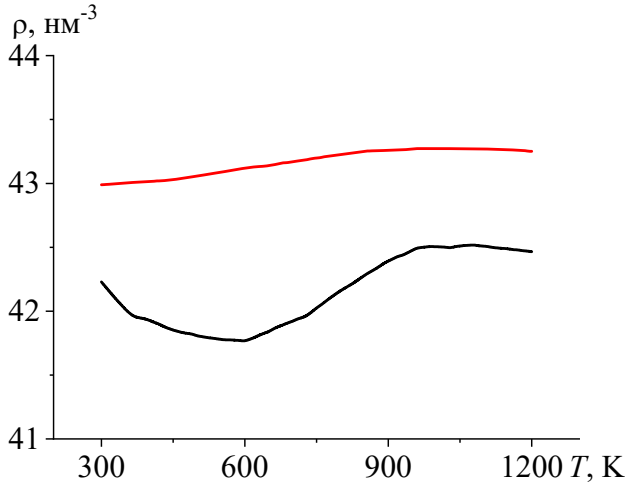


Рис. 6. Температурные зависимости средней локальной плотности золотых нанозвёзд, отвечающие двум альтернативным начальным морфологиям: черная кривая – GDI (4208 атомов), красная кривая – GISI (4316 атомов).

4. Заключение

Полученные результаты позволяют прогнозировать стабильность анизотропных наночастиц, к которым можно отнести нанозвёзды, начальная конфигурация которых соответствует двум типам начальной морфологии: большой додецикосакрон, большой вывернутый плосконосый икосододекаэдр. Очевидно, что степень стабильности таких объектов обуславливается как формой «лучей» нанозвёзд, так и количеством атомов, которые образуют эти лучи. Кроме того, размерный эффект также влияет на величину температур, отвечающих различным этапам трансформации нанозвёзд: этап начала дестабилизации «лучей» нанозвёзд; этап, при котором происходит двукратная деградация размера «лучей»; этапы, соответствующие началу и окончанию фазы выравнивания поверхности нанозвёзд. В дальнейшем интересно было бы выяснить, влияет ли исходная форма нанозвёзд на размерный эффект температуры плавления полученных наночастиц золота [25-27], а также распространить предложенные методики на другие металлические системы, в том числе биметаллические.

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

Библиографический список:

1. **Ngo, N.M.** Plasmonic nanostars: systematic review of their synthesis and applications / N.M. Ngo, H.-V. Tran, T.R. Lee // ACS Applied Nano Materials. – 2022. – V. 5. – I. 10. – P. 14051-14091. DOI:

10.1021/acsanm.2c02533.
2. **Skrabalak, S.E.** Gold nanocages: synthesis, properties, and applications / S.E. Skrabalak, J. Chen, Y. Sun et al. // Accounts of Chemical Research. – 2008. – V. 41. – I. 12. – P. 1587-1595. DOI: 10.1021/ar800018v.
3. **Lu, X.** Fabrication of cubic nanocages and nanoframes by dealloying Au/Ag alloy nanoboxes with an aqueous etchant based on Fe(NO3)3 or NH4OH / X. Lu, L. Au, J. McLellan et al. // Nano Letters. – 2007. – V. 7. – I. 6. – P. 1764-1769. DOI: 10.1021/nl070838l.
4. **Becerril-Castro, I.B.** Gold nanostars: synthesis, optical and SERS analytical properties / I.B. Becerril-Castro, E. Camacho-Leon, J.L. Torres-Castro et al. // Analysis & Sensing. – 2022. – V. 2. – I. 3. – Art. № e202200005. – 16 p. DOI: 10.1002/anse.202200005.
5. **Lan, T.** Gold nanostars: synthesis, modification and application / T. Lan, D. Cui, T. Liu et al. // Nano Biomedicine & Engineering. – 2023. – V. 15. – I. 3. – P. 330-341. DOI: 10.26599/NBE.2023.9290025.
6. **Хлебцов, Н.Г.** Синтез и плазмонная настройка золотых и золотосеребряных наночастиц / Н.Г. Хлебцов, Л.А. Дыкман, Б.Н. Хлебцов // Успехи химии. – 2022. – Т. 91. – № 10. – Ст. № RCR5058. – 30 с. DOI: 10.57634/RCR5058.
7. **Huang, Y.-F.** Near infrared-activatable platinum-decorated gold nanostars for synergistic photothermal/ferroptotic therapy in combating cancer drug resistance / Y.-F. Huang, A.C. Valle, C.-K. Yeh, et al. // Advanced Healthcare Materials. – 2020. – V. 9. – I. 20. – P. 2000864-1-2000864-11. DOI: 10.1002/adhm.202000864.
8. **Eshun, G.B.** Controlled synthesis and computational analysis of gold nanostars for the treatment of fusarium oxysporum / G.B. Eshun, F.J. Osonga, T. Erdogan et al. // RSC Advances. – 2023. – V. 13. – I. 31. – P. 21781-21792. DOI: 10.1039/D3RA04088G.
9. **Morton, W.** Modeling Au nanostar geometry in bulk solutions / W. Morton, C. Joyce, J. Taylor, et al. // Journal of Physical Chemistry C. – 2023. – V. 127. – I. 3. – P. 1680-1686. DOI: 10.1021/acs.jpcc.2c07520.
10. **Zarkov, S.V.** Numerical modeling of plasmonic properties of gold nanostars to prove the threshold nature of their modification under laser pulse / S.V. Zarkov, A.V. Pavlikov, V.V. Kurlov et al. // Optical Engineering. – 2020. – V. 59. – I. 6. – P. 061628-1-061628-8. DOI: 10.1117/1.OE.59.6.061628.
11. **Xi, W.** How to accurately predict solution-phase gold nanostar stability / W. Xi, H.T. Phan, A.J. Haes // Analytical and Bioanalytical Chemistry. – 2018. – V. 410. – I. 24. – P. 6113-6123. DOI: 10.1007/s00216-018-1115-6.
12. **Xi, Z.** Role of surface curvature in gold nanostar properties and applications / Z. Xi, Y. Li, J. Wang et al. // ACS Biomaterials Science & Engineering. – 2023. – V. 10. – I. 1. – P. 38-50. DOI: 10.1021/acsbiomaterials.3c00249.
13. **Le, N.T.** Gold nanostar characterization by nanoparticle tracking analysis / N.T. Le, D. Vo, M. Le et al. // ACS Omega. – 2022. – V. 7. – I. 49. – P. 44677-44688. DOI: 10.1021/acsomega.2c03275.
14. **Kon, I.** Numerical FDTD-based simulations for SERS-active planar plasmonic surfaces / I. Kon, A. Zyubin, I. Samusev // Nanophotonics, Micro/Nano Optics, and Plasmonics VIII, 2023. – V. 12322. – Art. № 1232210. – 5 p. DOI: 10.1117/12.2637655.
15. **Velázquez-Salazar, J.J.** Controlled overgrowth of five-fold concave nanoparticles into plasmonic nanostars and their single-particle scattering properties / J.J. Velázquez-Salazar, L. Bazán-Díaz, Q. Zhang, et al. // ACS Nano. – 2019. – V. 13. – I. 9. – P. 10113-10128. DOI: 10.1021/acsnano.9b03084.
16. **Zhang, F.** Engineering plasmonic Au nanostars: enhanced plasmonic properties, preparation and biomedical application / F. Zhang, Y. Sun, J. Liu, Y. Zhao, et al. // Materials Today Bio. – 2025. – V. 33. – P. 102022-1-102022-15. DOI: 10.1016/j.mtbio.2025.102022.
17. Atomsk. – Режим доступа: www.url: https://atomsk.univ-lille.fr. – 01.09.2025.
18. **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.
19. **Metropolis, N.** The Monte Carlo method / N. Metropolis, S. Ulam // Journal of the American Statistical Association. – 1949. – V. 44. – I. 247. – P. 335-341. DOI: 10.2307/2280232.
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. **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.
22. **Соколов, Д.Н.** О структурной стабильности моно- и бинарных металлических наноклеток / Д.Н. Соколов, О.В. Полев, В.С. Мясниченко, К.Г. Савина, Н.Ю. Сдобняков // Физико-химические

аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2023. – Вып. 15. – С. 602-613. DOI: 10.26456/pcascnn/2023.15.602.
23. **Соколов, Д.Н.** О стабильности и релаксации структуры металлических наноклеток / Д.Н. Соколов, В.С. Мясниченко, О.В. Полев, К.Г. Савина, Н.Ю. Сдобняков // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2024. – Вып. 16. – С. 543-556. DOI: 10.26456/pcascnn/2024.16.543.
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. **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.
26. **Сдобняков, Н.Ю.** Исследование термодинамических характеристик нанокластеров золота с использованием многочастичного потенциала Гупта / Н.Ю. Сдобняков, П.В. Комаров, Д.Н. Соколов, В.М. Самсонов // Физика металлов и металловедение. – 2011. – Т. 111. – № 1. – С. 15-22.
27. **Tam, N.T.** Thermodynamic nanoarchitectonics of gold nanoparticles: shape and size dependence of melting temperature and mean-square displacement / N.T. Tam, L.T. Lam, H.K. Hieu // Applied Physics A. – 2025. – V. 131. – I. 7. – Art. № 547. – 8 p. DOI: 10.1007/s00339-025-08682-w.

References:

1. Ngo N.M., Tran H.-V., Lee T.R. Plasmonic nanostars: systematic review of their synthesis and applications, *ACS Applied Nano Materials*, 2022, vol. 5, issue 10, pp. 14051-14091. DOI: 10.1021/acsanm.2c02533.
2. Skrabalak S.E., Chen J., Sun Y. et al. Gold nanocages: synthesis, properties, and applications, *Accounts of Chemical Research*, 2008, vol. 41, issue 12, pp. 1587-1595. DOI: 10.1021/ar800018v.
3. Lu X., Au L., McLellan J. et al. Fabrication of cubic nanocages and nanoframes by dealloying Au/Ag alloy nanoboxes with an aqueous etchant based on Fe(NO3)3 or NH4OH, *Nano Letters*, 2007, vol. 7, issue 6, pp. 1764-1769. DOI: 10.1021/nl070838l.
4. Becerril-Castro I.B., Camacho-Leon E., Torres-Castro J.L. et al. Gold nanostars: synthesis, optical and SERS analytical properties, *Analysis & Sensing*, 2022, vol. 2, issue 3, art. no. e202200005, 16 p. DOI: 10.1002/anse.202200005.
5. Lan T., Cui D., Liu T. et al. Gold nanostars: synthesis, modification and application, *Nano Biomedicine & Engineering*, 2023, vol. 15, issue 3, pp. 330-341. DOI: 10.26599/NBE.2023.9290025.
6. Khlebtsov N.G., Dykman L.A., Khlebtsov B.N. Synthesis and plasmonic tuning of gold and gold–silver nanoparticles, *Russian Chemical Reviews*, 2022, vol. 91, issue 10, art. no. RCR5058, 29 p. DOI: 10.57634/RCR5058.
7. Huang Y.-F., Valle A.C., Yeh C.-K. et al. Near infrared-activatable platinum-decorated gold nanostars for synergistic photothermal/ferroptotic therapy in combating cancer drug resistance, *Advanced Healthcare Materials*, 2020, vol. 9, issue 20, pp. 2000864-1–2000864-11. DOI: 10.1002/adhm.202000864.
8. Eshun G.B., Osonga F.J., Erdogan T., Golcu A., Sadik O.A. et al. Controlled synthesis and computational analysis of gold nanostars for the treatment of Fusarium oxysporum, *RSC Advances*, 2023, vol. 13, issue 31, pp. 21781-21792. DOI: 10.1039/D3RA04088G.
9. Morton W., Joyce C., Taylor J. et al. Modeling Au nanostar geometry in bulk solutions, *Journal of Physical Chemistry C*, 2023, vol. 127, issue 3, pp. 1680-1686. DOI: 10.1021/acs.jpcc.2c07520.
10. Zarkov S.V., Pavlikov A.V., Kurlov V.V. et al. Numerical modeling of plasmonic properties of gold nanostars to prove the threshold nature of their modification under laser pulse, *Optical Engineering*, 2020, vol. 59, issue 6, pp. 061628-1-061628-8. DOI: 10.1117/1.OE.59.6.061628.
11. Xi W., Phan H.T., Haes A.J. How to accurately predict solution-phase gold nanostar stability, *Analytical and Bioanalytical Chemistry*, 2018, vol. 410, issue 24, pp. 6113-6123. DOI: 10.1007/s00216-018-1115-6.
12. Xi Z., Li Y., Wang J. et al. Role of surface curvature in gold nanostar properties and applications, *ACS Biomaterials Science & Engineering*, 2023, vol. 10, issue 1, pp. 38-50. DOI: 10.1021/acsbiomaterials.3c00249.
13. Le N.T., Vo D., Le M. et al. Gold nanostar characterization by nanoparticle tracking analysis, *ACS Omega*, 2022, vol. 7, issue 49, pp. 44677-44688. DOI: 10.1021/acsomega.2c03275.
14. Kon I., Zyubin A., Samusev I. Numerical FDTD-based simulations for SERS-active planar plasmonic surfaces, Nanophotonics, *Micro/Nano Optics, and Plasmonics VIII*, 2023, vol. 12322, art. no. 1232210, 5 p. DOI: 10.1117/12.2637655.
15. Velázquez-Salazar J.J., Bazán-Díaz L., Zhang Q. et al. Controlled overgrowth of five-fold concave nanoparticles into plasmonic nanostars and their single-particle scattering properties, *ACS Nano*, 2019, vol. 13,

issue 9, pp. 10113-10128. DOI: 10.1021/acsnano.9b03084.
16. Zhang F., Sun Y., Liu J., Zhao Y. et al. Engineering plasmonic Au nanostars: enhanced plasmonic properties, preparation and biomedical application, *Materials Today Bio*, 2025, vol. 33, pp. 102022-1-102022-15. DOI: 10.1016/j.mtbio.2025.102022.
17. Atomsk. Available at: www.url: https://atomsk.univ-lille.fr (accessed 01.09.2025).
18. Sokolov D.N., Sdobnyakov N.Yu., Kolosov A.Yu., Ershov P.M., Bogdanov S.S. *Metropolis.* Certificate RF, no. 2019661915, 2019. (In Russian).
19. Metropolis N., Ulam S. The Monte Carlo method, *Journal of the American Statistical Association*, 1949, vol. 44, issue 247, pp. 335–341. DOI: 10.2307/2280232.
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. 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.
22. Sokolov D.N., Polev O.V., Myasnichenko V.S., Savina K.G., Sdobnyakov N.Yu. O strukturnoj stabil'nosti mono- i binarnykh metallicheskikh nanokletok [On the structural stability of mono- and binary metallic nanocages,], *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov [Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials]*, 2023, issue 15, pp. 602-613. DOI: 10.26456/pcascnn/2023.15.602. (In Russian).
23. Sokolov D.N., Myasnichenko V.S., Polev O.V., Savina K.G., Sdobnyakov N.Yu. O stabilnosti i relaksatsii struktury metallicheskikh nanokletok [On the stability and structure relaxation of metallic nanocages], *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov [Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials]*, 2024, issue 16, pp. 543-556. DOI: 10.26456/pcascnn/2024.16.543. (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. 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).
26. Sdobnyakov N.Yu., Komarov P.V., Sokolov D.N., Samsonov V.M. Study of the thermodynamic characteristics of gold nanoclusters using a Gupta multiparticle potential, *The Physics of Metals and Metallography*, 2011, vol. 111. issue 1. pp. 13-20. DOI: 10.1134/S0031918X11010121.
27. Tam N.T., Lam L.T., Hieu H.K. Thermodynamic nanoarchitectonics of gold nanoparticles: shape and size dependence of melting temperature and mean-square displacement, *Applied Physics* A, 2025, vol. 131, issue 7, art. no. 547, 8 p. DOI: 10.1007/s00339-025-08682-w.