УДК 539.216:536.71 *Оригинальная статья*

Структура четырехкомпонентных наносплавов Ni-Cu-Fe-Co при термоиндуцированном воздействии: атомистическое моделирование

А.Ю. Колосов, К.Г. Савина, Д.Н. Соколов, Н.И. Непша, Н.А. Шорохов, Д.А. Кравченко, Р.Е. Григорьев, Н.Ю. Сдобняков

ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

170002, Россия, Тверь, Садовый пер., 35

nsdobnyakov@mail.ru

DOI: 10.26456/pcascnn/2025.17.674

Аннотация: Проведено комплексное исследование четырехкомпонентных наночастиц *Ni-Cu-Fe-Co* эквиатомного состава размером 5 нм. Моделирование производилось методом молекулярной динамики с применением потенциала сильной связи. Установлено, что данная наносистема обладает высокой стабильностью: кристаллизация происходила во всех случаях с образованием преимущественно локальной ГЦК-структуры, чередующейся с локальной ГПУ-структурой. При скорости охлаждения выше 0,5 К/пс доля локальной ГЦК-структуры снижалась на 5% за счет увеличения локальных ГПУ-областей и появления локальных включений ОЦК-окружения. При этом объемная доля ОЦК-решетки не превышала 2%. Показано, что рассматриваемые наносистемы склонны к формированию иерархических, лабиринтоподобных структур с выраженной сегрегацией меди на поверхность. Таким образом, установлено, что для четырехкомпонентных наночастиц *Ni-Cu-Fe-Co* эквиатомного состава характерно образование медной оболочки с включениями кобальта и железа.

Ключевые слова: метод молекулярной динамики, LAMMPS, MDSym, потенциал сильной связи, четырехкомпонентные наночастицы, сегрегация, никель, медь, кобальт, железо, локальная плотность.

Колосов Андрей Юрьевич – к.ф.-м.н., научный сотрудник кафедры общей физики ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Савина Ксения Геннадьевна – аспирант 3 года обучения 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»

Непша Никита Игоревич – научный сотрудник кафедры общей физики ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Шорохов Никита Александрович – студент 4 года обучения кафедры общей физики, ФГБОУ ВО «Тверской государственный технический университет»

Кравченко Дарья Алексеевна – аспирант 2 года обучения кафедры общей физики, ФГБОУ ВО «Тверской государственный технический университет»

Григорьев Роман Евгеньевич – аспирант 4 года обучения 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

Structure of quaternary Ni-Cu-Fe-Co nanoalloys under thermally induced effect: atomistic simulation

A.Yu. Kolosov, K.G. Savina, D.N. Sokolov, N.I. Nepsha, N.A. Shorokhov, D.A. Kravchenko, R.E. Grigoryev, N.Yu. Sdobnyakov

Tver State University, Tver, Russia

DOI: 10.26456/pcascnn/2025.17.674

Abstract: A comprehensive study of equiatomic four-component *Ni-Cu-Fe-Co* nanoparticles of 5 nm in size was conducted. Simulations were performed using molecular dynamics simulations and the tight-binding potential. This nanosystem was found to be highly stable: crystallization occurred in all cases with the formation of a predominantly local FCC structure alternating with a local hcp structure.

© А.Ю. Колосов, К.Г. Савина, Д.Н. Соколов, Н.И. Непша, Н.А. Шорохов, Д.А. Кравченко, Р.Е. Григорьев, Н.Ю. Сдобняков, 2025

At cooling rates above 0,5 K/ps, the proportion of the local FCC structure decreased by 5% due to an increase in local HCP surroundings and the appearance of local inclusions of a BCC environment. The volume fraction of the BCC lattice did not exceed 2%. The nanosystems under study are shown to be prone to the formation of hierarchical, labyrinthine structures with pronounced copper segregation on the surface. Thus, it was established that equiatomic quaternary *Ni-Cu-Fe-Co* nanoparticles are characterized by the formation of a copper shell with inclusions of cobalt and iron.
Keywords: molecular dynamics, LAMMPS, MDSym, tight-binding potential, quaternary nanoparticles, segregation, nickel, copper, cobalt, iron, local density.

Andrei Yu. Kolosov – Ph. D., Researcher, General Physics Department, Tver State University, ORCID: 0000-0003-3805-0567
Kseniya G. Savina – 3rd year postgraduate student, General Physics Department, Tver State University, ORCID: 0000-0002-4916-4968
Denis N. Sokolov – Ph. D., Researcher, General Physics Department, Tver State University, ORCID: 0000-0003-2411-0143
Nikita I. Nepsha – Researcher, General Physics Department, Tver State University, ORCID: 0000-0001-6203-3236
Nikita A. Shorokov – 4th year student, General Physics Department, Tver State University
Daria A. Kravchenko – 2nd year postgraduate student, General Physics Department, Tver State University
Roman E. Grigoryev – 4th year postgraduate 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: 12.07.2025; после рецензирования/revised: 27.08.2025; принята/accepted: 02.09.2025.

1. Введение и постановка задачи

Проблема химической и структурной сегрегации в четырехкомпонентных наночастицах [1-3], в том числе состава $Ni-Cu-Fe-Co$, обусловливает необходимость комплексного рассмотрения ряда ключевых факторов, включая взаимное влияние составляющих элементов на морфологические особенности наночастиц, их кристаллическую структуру, а также физико-химические характеристики, которые могут существенно варьироваться в зависимости от состава поверхности. Возможные различия между составом ядра и поверхности в подобных наночастицах тесно коррелируют с процессами сегрегации. Указанные процессы оказывают значительное воздействие на такие параметры, как каталитическая активность, магнитные свойства, коррозионная устойчивость и другие функциональные характеристики, что определяет актуальность данных наноматериалов для широкого спектра применений, включая катализ, магнитные материалы и сверхпроводники [4, 5].

Ключевой характеристикой многокомпонентных систем выступает их предрасположенность к фазовой нестабильности, обусловленной различиями в термодинамических параметрах, таким как энергия когезии, атомный радиус и поверхностная энергия. В процессе синтеза наночастиц зачастую применяются методы быстрого охлаждения или газофазной конденсации, что способствует формированию метастабильных структур с равномерным распределением компонентов по объему. Однако

последующая атомная миграция приводит к локальному перераспределению элементов. В частности, компоненты с меньшей поверхностной энергией или более низкой атомной плотностью склонны к обогащению поверхности, формируя своеобразную «оболочку», тогда как элементы с большей массой или более высокой когезионной энергией концентрируются в ядре наночастицы [6].

Химическая сегрегация в системах $Ni-Cu-Fe-Co$ определяется различиями в физических характеристиках составляющих элементов. Например, никель и железо обладают высокой энергией когезии, что способствует их устойчивости в объемной фазе, тогда как медь, имеющая относительно более низкую энергию когезии и более высокий атомный радиус, может иметь тенденцию мигрировать на поверхность [4]. Подобное распределение ведет к появлению структурных неоднородностей: формируются ядро-оболочка или градиентные структуры, где химический состав меняется от центра к периферии. Эти изменения оказывают существенное влияние на магнитные свойства наночастиц, поскольку магнитные моменты элементов зависят как от их локального окружения, так и от взаимодействия между соседними атомами [8]. Кроме того, размерное несоответствие атомов также играет важную роль в процессах сегрегации [1].

С точки зрения структурной сегрегации, важным аспектом является возможность формирования многофазных структур даже при однородном химическом составе в объеме. При достижении равновесия атомы могут реорганизоваться таким образом, что образуются локальные зоны с различной кристаллической или квазикристаллической структурой, которая определяется разными межатомными расстояниями [9].

Исследования бинарных наночастиц на основе Ni, Cu, Fe и Co выявили, что их магнитные и структурные свойства существенно зависят от состава и метода синтеза. Например, в сплавах $Cu-Ni$, $Cu-Fe$ и $Cu-Co$, полученных методом механического легирования и последующего изотермического отжига, наблюдается различное поведение: в то время как формирование твердого раствора $Cu-Ni$ приводит к ухудшению магнитных свойств, осаждение Fe и Co из пересыщенных твердых растворов в системах $Cu-Fe$ и $Cu-Co$ значительно улучшает магнитные характеристики, особенно при диспергировании наночастиц Co в матрице Cu [9]. Теоретические исследования магнитных свойств бинарных сплавов между Fe, Co, Ni и Cu показали, что образование магнитных моментов в этих системах тесно связано с локальным химическим и магнитным окружением, причем в сплавах на основе Fe наблюдаются переходы между высокоспиновыми и низкоспиновыми состояниями [10]. В многокомпонентных системах, таких как наноструктурированные

механические сплавы $Cu-Fe-Co$, полученные методом высокоэнергетического механического легирования, достигается нанокристаллическая структура с улучшенными магнитными свойствами, что расширяет их потенциальные области применения [11].

В предыдущих исследованиях мы уже подробно изучали бинарные наносистемы на основе Ni, Cu, Fe и Co с использованием как экспериментальных методов, так и методов компьютерного моделирования. В частности, в работах [12, 13] был проведен синтез наночастиц $Cu-Ni$ методом экзотермического горения в растворах, а также выполнено моделирование методом Монте-Карло, что позволило выявить особенности формирования структуры и взаимодействия компонентов в наночастицах. В другой работе было проведено сравнительное атомистическое моделирование структуры и структурных превращений в наносплавах $Ni-Ag$ и $Ni-Cu$ [14], что позволило установить закономерности структурных изменений при различных условиях. Эти исследования предоставили ценные данные о механизмах формирования и стабильности бинарных наночастиц, что является основой для дальнейших исследований многокомпонентных систем.

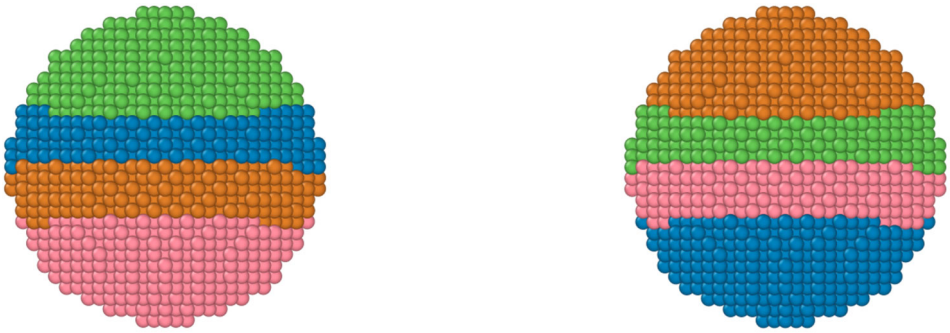
Отдельно следует отметить, что сегрегация в 4-компонентных системах $Ni-Cu-Fe-Co$ может быть значительно сложнее, чем в биметаллических или трехкомпонентных аналогах. Взаимодействие между четырьмя различными типами атомов порождает широкий спектр возможных микроструктур, включая смешанные системы, системы с выраженной структурной неоднородностью и явления, схожие с эффектами высокоэнтропийных сплавов [15]. При этом даже незначительные изменения в относительном содержании компонентов или в условиях синтеза могут приводить к кардинально различным режимам сегрегации, что требует применения комплексного подхода для их изучения и последующего контроля.

2. Методология компьютерного моделирования

В данной работе объектом исследования являлись четырехкомпонентные наночастицы $Ni-Cu-Fe-Co$ эквиатомного состава размером 5 нм, состоящие из 6000 атомов. Рассматривались наночастицы с разделенным (сегрегированным) распределением элементов в двух вариантах (см. рис. 1). Начальная структура соответствовала гранецентрированной кубической (ГЦК) решетке. Моделирование проводилось методом молекулярной динамики с использованием открытого ПО LAMMPS [16] и собственной разработки MDSym [17].

Для интегрирования уравнений движения применялся скоростной алгоритм Верле, а также периодические граничные условия. В LAMMPS

использовался термостат Нозе-Гувера [18], в MDSym – мягкий стохастический термостат, представляющий собой термостат Нозе-Гувера с добавлением случайного шума для улучшения эргодичности [19]. После релаксации в течение 15 пс наночастицы $Ni-Cu-Fe-Co$ нагревались от 300 до 1800 К, затем охлаждались до 300 К со скоростями 0,5 К/пс и 1 К/пс. Межатомные взаимодействия описывались потенциалом сильной связи (ПСС) с параметрами, приведенными в Таблице 1 [20, 21]. Для расчета перекрестных параметров ПСС использовалось правило Лоренца-Бертло, апробированное в том числе [1-3, 22].



а б

Рис. 1. Начальные конфигурации эквиатомных четырехкомпонентных наночастиц $Ni-Cu-Fe-Co$ с сегрегированным распределением элементов, а – вариант 1 (никель и кобальт по краям, медь и железо в центре), б – вариант 2 (медь и железо по краям, никель и кобальт в центре). Зеленые атомы – никель, синие – железо, коричневые – медь, розовые – кобальт.

Таблица 1. Параметры потенциала сильной связи [20, 21].

Связь	A, эВ	ς, эВ	p	q	r_0, Å
$Co-Co$	0,095	1,488	11,604	2,286	2,5131
$Cu-Cu$	0,0855	1,224	10,96	2,278	2,556
$Fe-Fe$	0,1184	1,5418	10,7613	2,0379	2,4824
$Ni-Ni$	0,0376	1,07	16,999	1,189	2,4918
$Co-Cu$	0,0901	1,3496	11,282	2,282	2,5346
$Co-Fe$	0,1061	1,5147	11,1826	2,162	2,4978
$Co-Ni$	0,0598	1,2618	14,3015	1,7375	2,5025
$Cu-Fe$	0,1006	1,3737	10,8607	2,158	2,5192
$Cu-Ni$	0,0567	1,1444	13,9795	1,7335	2,5239
$Fe-Ni$	0,0667	1,2844	13,8802	1,6135	2,4871

Анализ локальных кристаллических фаз (ГЦК, ГПУ, ОЦК), а также икосаэдрических (ИК) ядер осуществлялся методом сопоставления полиэдральных шаблонов с помощью ПО OVITO [23]. Данный метод сравнивает локальную окрестность атома с геометрическими шаблонами идеальных структур. Если шаблон совпадает, вычисляется среднеквадратичное отклонение (RMSD – root mean square deviation), показывающее степень расхождения с идеальной структурой. Пороговое

значение RMSD в данном случае установлено на 0,155.

3. Результаты и обсуждение

На рис. 2 и 3 представлены калорические кривые (панели а, в) и распределения локальной плотности (панели б, г) для наночастиц $Ni-Cu-Fe-Co$ эквиатомного состава, моделируемых в вариантах 1 и 2 соответственно. Данные на панелях а и б соответствуют скорости нагрева/охлаждения 0,5 К/пс, тогда как панели в и г отражают результаты при скорости 1 К/пс.

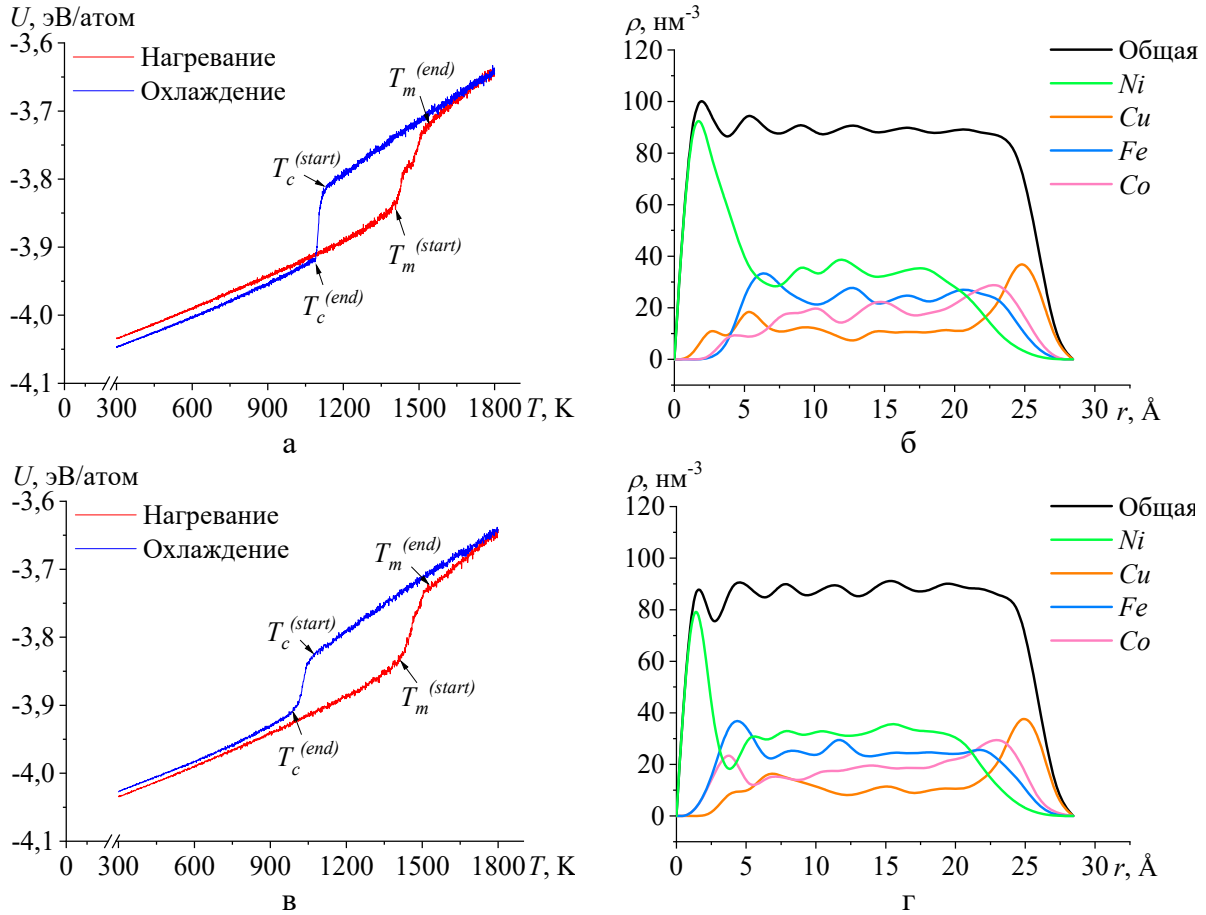


Рис. 2. Зависимость потенциальной части удельной внутренней энергии от температуры (а, в) и зависимости локальной плотности распределения компонентов от радиуса инерции (б, г) для наночастиц $Ni-Cu-Fe-Co$ (вариант начальной конфигурации 1). Панели а, б соответствуют скорости 0,5 К/пс, в, г – 1 К/пс.

Исследование полученных наночастиц $Ni-Cu-Fe-Co$ позволило выявить закономерности протекания фазовых переходов (включая установления температур плавлении и кристаллизации, температурного интервала протекания соответствующего фазового перехода) и эволюции структурных характеристик. Были определены температуры плавления и кристаллизации, потенциальная энергия конечных структур, а также зависимость локальной плотности распределения от радиуса инерции,

построены пространственные карты элементов для описания процессов сегрегации.

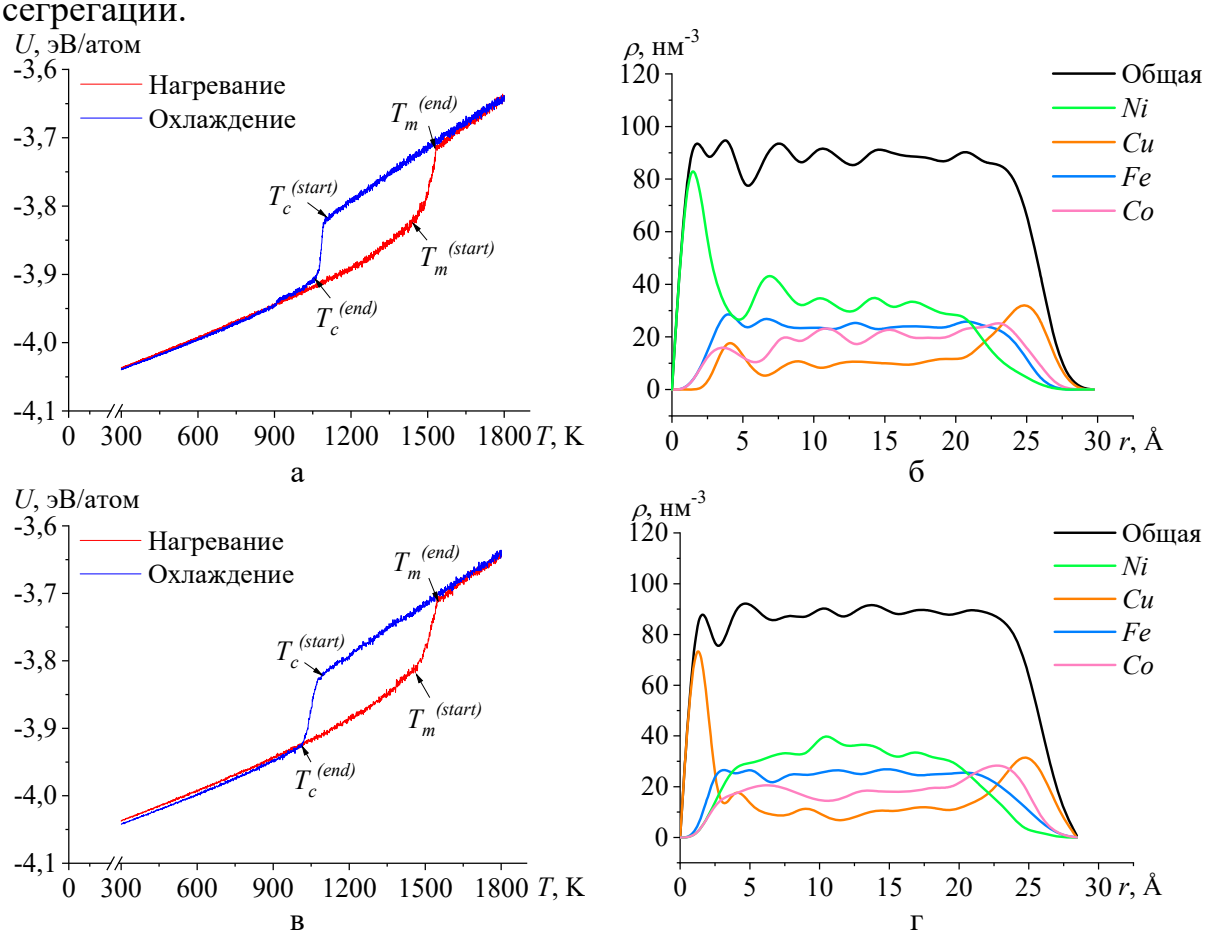


Рис. 3. Зависимость потенциальной части удельной внутренней энергии от температуры (а, в) и зависимости локальной плотности распределения компонентов от радиуса инерции (б, г) для наночастиц $Ni-Cu-Fe-Co$ (вариант начальной конфигурации 2). Панели а, б соответствуют скорости 0,5 К/пс, в, г – 1 К/пс.

Анализ полученных данных показывает, что скорость изменения температуры оказывает влияние на процессы плавления и кристаллизации. При увеличении скорости нагрева наблюдается рост температуры начала плавления $T_m^{(start)}$, однако по результатам серии расчетов для данной наносистемы это увеличение не превышает 2% как для варианта 1, так и для варианта 2. В то же время температура кристаллизации $T_c^{(start)}$ снижается примерно на 5% с ростом скорости охлаждения, что указывает на кинетическое влияние скорости на процесс кристаллизации. Кроме того, с увеличением скорости изменения температуры наблюдается возрастание величины $\Delta T = T_m - T_c$, что свидетельствует о расширении гистерезисной петли температур и, соответственно, замедлении процессов плавления и кристаллизации. Данные, полученные на основе анализа калорических кривых, усреднены по серии расчетов и указаны в Таблице 2.

При своем охлаждении наночастицы $Ni-Cu-Fe-Co$ демонстрируют

атомную сегрегацию: на поверхности формируется слой, богатый медью (65% поверхностных атомов) и кобальтом (19%), с меньшим содержанием железа (11%), в то время как внутренние слои преимущественно состоят из никеля, железа и кобальта. Можно сказать, что сформировалась иерархическая структура, напоминающая лабиринт, с медным покрытием.

Таблица 2. Параметры гистерезиса процессов плавления и кристаллизации, полученные на основе анализа калорических кривых потенциальной части удельной внутренней энергии (данные усреднены по серии расчетов).

$Ni-Cu-Fe-Co$ (вариант 1)							
V, К/пс	$T_m^{(start)}$, К	$T_m^{(end)}$, К	ΔT_m, К	$T_c^{(start)}$, К	$T_c^{(end)}$, К	ΔT_c, К	$\Delta T = T_m - T_c$, К
0,5	1406	1507	101	1135	1087	48	271
1	1409	1512	103	1073	992	81	336
$Ni-Cu-Fe-Co$ (вариант 2)							
0,5	1438	1537	99	1104	1054	50	334
1	1453	1554	101	1096	1018	78	357

Анализ калорических кривых показал, что исходная структура наночастиц сохраняла стабильность для всех рассмотренных типов начальных конфигураций наночастиц (см. рис 1). Отсутствие характерных скачков на калорических кривых вблизи температур плавления указывает на отсутствие существенных перестроек кристаллической решетки, в том числе начала предплавления [1]. В течение всего процесса нагревания вплоть до температуры плавления наночастицы сохраняли исходную локальную ГЦК-структуру.

Окончательные атомные конфигурации наносистем $Ni-Cu-Fe-Co$ при температуре 300 К представлены на рис. 4 и 5. Для наносистем эквиатомного состава характерно формирование структур с локальным ГЦК-окружением; доля этой локальной фазы при скорости охлаждения 0,5 К/пс составляет приблизительно 51%. При этом в структуре наночастиц наблюдаются дефекты в виде ГПУ-плоскостей, причем среднее содержание областей с локальным ГПУ-упорядочением не превышает 20%. Повышение скорости кристаллизации приводит к уменьшению доли областей с локальным ГЦК-упорядочением до 45% и увеличению доли локально ГПУ-упорядоченных областей до 23%. Также наблюдается формирование отдельных областей с локальным ОЦК-окружением (см. рис. 4).

Во всех исследованных наносистемах характерным структурным дефектом является формирование пятизеренного ГЦК-нанокристалла (penta-twinned structure [24]), на границах зерен которого локализуются атомы с локальным ГПУ-упорядочением. Увеличение скорости кристаллизации способствует росту концентрации подобных дефектов.

Представленные на рис. 4 и 5 визуализации подтверждаются анализом локальных плотностей распределения.

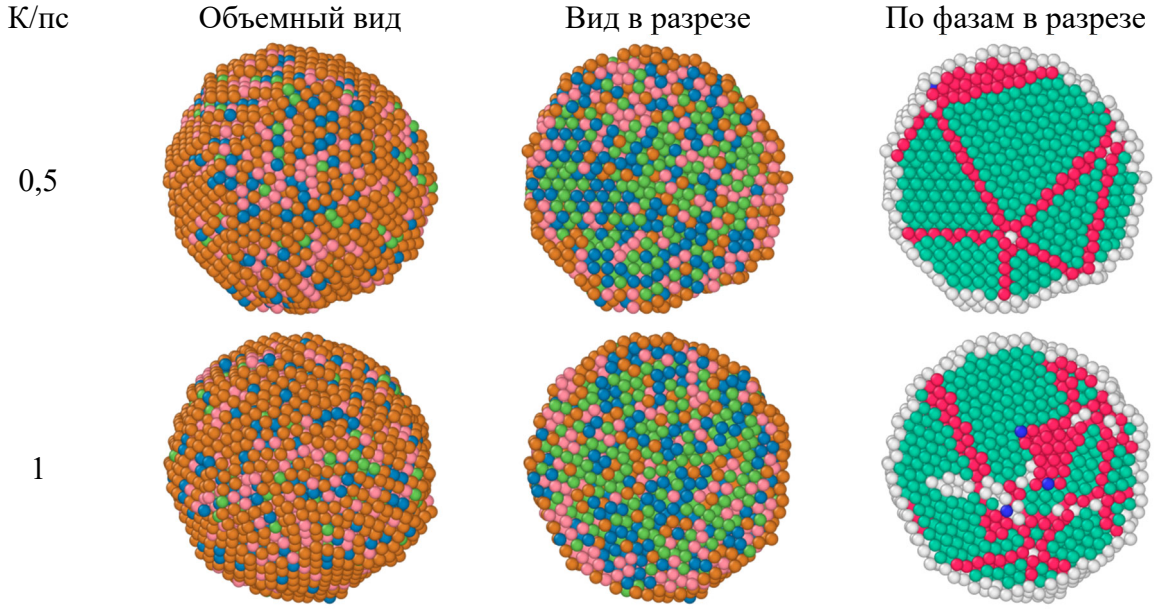


Рис. 4. Мгновенные конфигурации наносистемы $Ni-Cu-Fe-Co$, содержащие 6000 атомов (вариант начальной конфигурации 1), при конечной температуре 300 К. Показаны: объемный вид, вид в разрезе (обозначения соответствуют рис. 1), а также распределение по фазам, где зеленый цвет – локальная ГЦК структура, красный цвет – локальная ГПУ структура, синий цвет – локальная ОЦК структура, серые атомы были не идентифицированы программой OVITO [23].

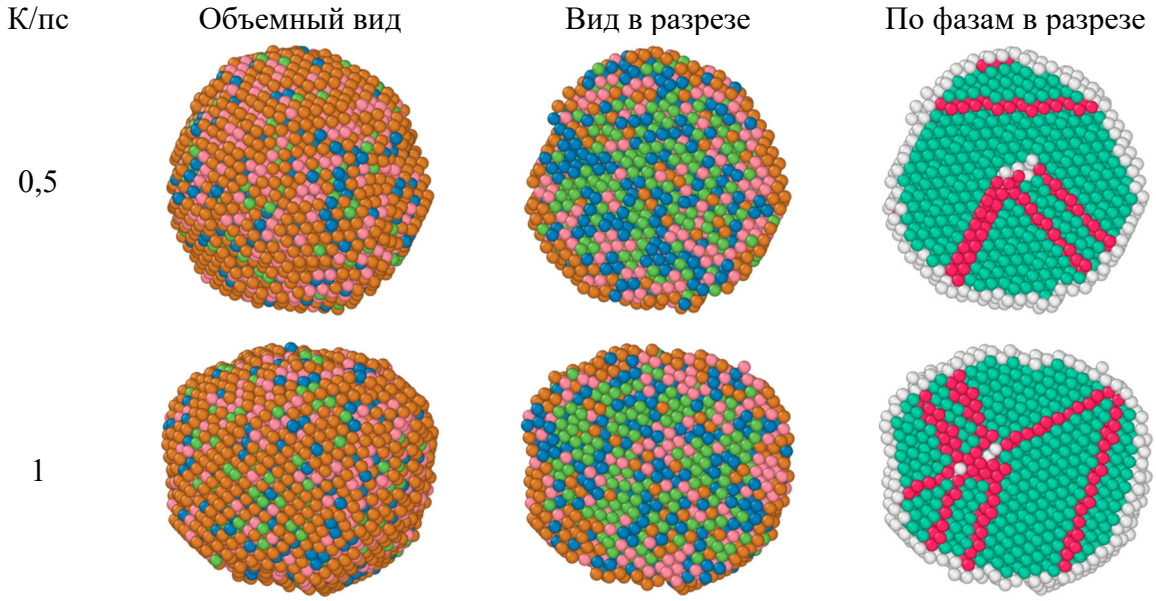
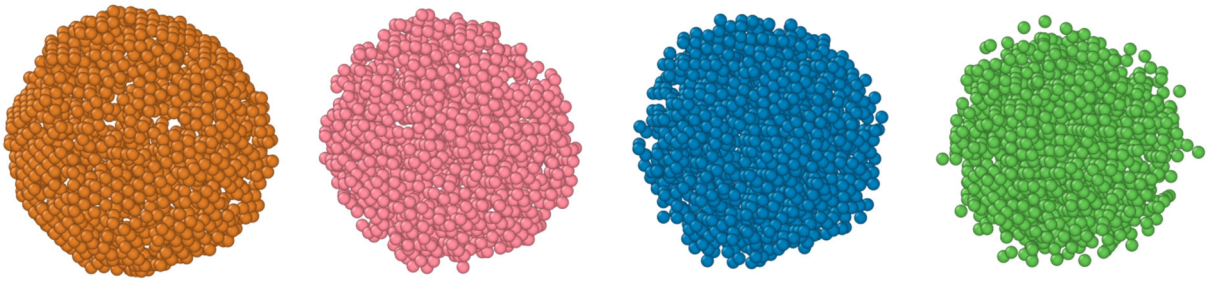


Рис. 5. Мгновенные конфигурации наносистемы $Ni-Cu-Fe-Co$, содержащие 6000 атомов (вариант начальной конфигурации 2), при конечной температуре 300 К. Показаны: объемный вид, вид в разрезе (обозначения соответствуют рис. 1), а также распределение по фазам (обозначения соответствуют рис. 4).

Для более детального исследования сегрегационного поведения атомов в четырехкомпонентных наночастицах $Ni-Cu-Fe-Co$ на рис. 6 в

качестве примера показаны элементные карты наносистемы, состоящей из 6000 атомов для скорости 0,5 К/пс при конечной температуре 300 К. Полученные нами элементные карты имеют схожие черты с экспериментальными данными (данные энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии) по анализу высокоэнтропийных наночастиц $Fe-Co-Ni-Cu$, синтезированных в [25] методом термического разложения.



а б В г

Рис. 6. Элементные карты конечной конфигурации наносистемы $Ni-Cu-Fe-Co$ (вариант начальной конфигурации 1) для скорости 0,5 К/пс. Цветовые обозначения соответствуют рис. 1.

4. Заключение

Проведенное молекулярно-динамическое моделирование позволило детально исследовать особенности структурных превращений в четырехкомпонентных наночастицах $Ni-Cu-Fe-Co$ эквиатомного состава в процессе фазовых переходов. Установлено, что температуры начала плавления и кристаллизации зависят от скорости изменения температуры. Увеличение скорости охлаждения приводит к существенному понижению температуры кристаллизации и увеличению разности между температурами плавления (T_m) и кристаллизации (T_c), что свидетельствует о значительном влиянии кинетических факторов на механизм кристаллизации.

Химическая и структурная сегрегация также демонстрируют устойчивую зависимость от скорости охлаждения наночастиц. На поверхности формируется оболочка, обогащенная медью и кобальтом, в то время как внутренняя область преимущественно состоит из железа и никеля. Структурные характеристики также изменяются: доля различных локальных кристаллических фаз (ГЦК, ГПУ, ОЦК) варьируется в зависимости от скорости охлаждения, отражая связанные с этим структурные перестройки, особенно между локальными ГЦК и ГПУ фазами. Полученные локальные плотности распределения компонентов в четырехкомпонентных наночастицах $Ni-Cu-Fe-Co$ подтверждают данные, визуализированные в ПО OVITO [23]. Из полученных данных можно сделать вывод, что рассматриваемая четырехкомпонентная

наносистема обладает высокой термической и структурной стабильностью.

Таким образом, результаты исследования способствуют более глубокому пониманию природы фазовых переходов в многокомпонентных наночастицах и подчеркивают необходимость учета размерных, температурных факторов, а также начальной морфологии при выборе условий и методов их синтеза. Сделанные выводы также имеют принципиальное значение для определения направлений применения таких наноструктур в области физического материаловедения, включая нанотехнологии с учетом диапазонов их структурной стабильности и закономерностей сегрегации при термоиндуцированном воздействии. Кроме того, исследование закономерностей химической и структурной сегрегации в четырехкомпонентных наносплавах открывает возможности исследований наносплавов при добавлении большего числа компонентов [26].

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 24-23-00039, https://rscf.ru/en/project/24-23-00039/).

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. **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/pcascnn/2022.14.371.
3. **Sdobnyakov, N.Yu.** Atomistic simulation of thermoinduced structural transformations in four-component Cu–Au–Pt–Pd nanoalloys with different morphologies / N.Yu. Sdobnyakov, V.M. Samsonov, S.V. Serov et al. // Colloid Journal. 2025. – V. 87. – I. 4. – P. 560-571.DOI: 10.1134/S1061933X25600526.
4. **Liao, H.** Surface segregation in bimetallic nanoparticles: A critical issue in electrocatalyst engineering / H. Liao, A. Fisher, Z.J. Xu // Small. – 2015. – V. 11. – I. 27. – P. 3221-3246. DOI: 10.1002/smll.201403380.
5. **Bohra, M.** Surface segregation in chromium-doped NiCr alloy nanoparticles and its effect on their magnetic behavior / M. Bohra, P. Grammatikopoulos, R.E. Diaz et al. // Chemistry of Materials. – 2015. – V. 27. – I. 9. – P. 3216-3225. DOI: 10.1021/acs.chemmater.5b00837.
6. **Ferrari, A.** Surface segregation in Cr-Mn-Fe-Co-Ni high entropy alloys / A. Ferrari, F. Körmann // Applied Surface Science. – 2020. – V. 533. – Art. № 147471. – 7 p. DOI: 10.1016/j.apsusc.2020.147471.
7. **Eom, N.** General trends in core-shell preferences for bimetallic nanoparticles / N. Eom, M.E. Messing, J. Johansson, K. Deppert // ACS Nano. – 2021. – V. 15. – I. 5. – P. 8883-8895. DOI: 10.1021/acsnano.1c01500.
8. **James, P.** Calculated magnetic properties of binary alloys between Fe, Co, Ni, and Cu / P. James, O. Eriksson, B. Johansson, I.A. Abrikosov // Physical Review B. – 1999. – V. 59. – I. 1. – P. 419-430. DOI: 10.1103/physrevb.59.419.
9. **Mondal, B.N.** Magnetic properties of binary Cu_{50}-(Ni, Fe and Co)$_{50}$ alloys prepared by ball milling and isothermal annealing / B.N. Mondal, A. Basumallick, P.P. Chattopadhyay // Materials Chemistry and Physics. – 2008. – V. 110. – I. 2-3. – P. 490-493. DOI: 10.1016/j.matchemphys.2008.03.005.
10. **Biserova-Tahchieva, A.** Synthesis and characterization of nanostructured mechanical Cu-Fe-Co alloy / A. Biserova-Tahchieva, I. López-Jiménez, N. Llorca-Isern // Materials Science Forum. – 2018. – V. 941. – P. 1232-1237. DOI: 10.4028/www.scientific.net/msf.941.1232.
11. **Романовский, В.И.** Особенности синтеза наночастиц Cu-Ni: эксперимент и компьютерное моделирование / В.И. Романовский, А.Ю. Колосов, А.А. Хорт и др. // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2020. – Вып. 12. – С. 293-309. DOI: 10.26456/pcascnn/2020.12.293.

12. **Romanovski, V.** Bimetallic CuNi nanoparticle formation: solution combustion synthesis and molecular dynamic approaches / V. Romanovski, N. Sdobnyakov, S. Roslyakov et al. // Inorganic Chemistry. – 2024. – V. 63. – I. 52. – P. 24844-24854. DOI: 10.1021/acs.inorgchem.4c04260.
13. **Sdobnyakov, N.** Solution combustion synthesis and Monte Carlo simulation of the formation of CuNi integrated nanoparticles / N. Sdobnyakov, A. Khort, V. Myasnichenko et al. // Computational Materials Science. – 2020. – V. 184. – Art. № 109936. – 12 p. DOI: 10.1016/j.commatsci.2020.109936.
14. **Kolosov, A.Yu.** Comparative atomistic simulation of structure and structural transformations in Ni-Ag and Ni-Cu nanoalloys / A.Yu. Kolosov, K.G. Savina, N.I. Nepsha et al. // Physics of the Solid State. – 2024. – V. 66. – I. 12. – P. 2027-2032. DOI: 10.61011/PSS.2024.12.60180.6394PA.
15. **Malekan, M.** Kinetics study and fragility of $(Cu_{50}Zr_{43}Al_7)_{98}Y_2$ bulk metallic glass / M. Malekan, A. Jalali // Thermochimica Acta. – 2024. – V. 740. – Art. № 179836. – 10 p. DOI: 10.1016/j.tca.2024.179836.
16. LAMMPS Molecular Dynamics Simulator. – Режим доступа: www.url: http://lammps.sandia.gov. – 02.05.2025.
17. **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.
18. **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.
19. **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.
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. **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.
24. **Gao, P.-Y.** The structure of small penta-twinned gold particles / P.-Y. Gao, W. Kunath, H. Gleiter, K. Weiss // Scripta Metallurgica. – 1988. – V. 22. – I. 5. – P. 683-686. DOI: 10.1016/S0036-9748(88)80182-0.
25. **Jia, M.** Fe-Co-Ni-Cu high entropy magnetic nanoparticles with high magnetothermal properties / M. Jia, D. Liang, Q. Du et al. // Scripta Materialia. – 2024. – V. 247. – Art. № 116119. – 6 p. DOI: /10.1016/j.scriptamat.2024.116119.
26. **Mao, A.** Plasma arc discharge synthesis of multicomponent Co-Cr-Cu-Fe-Ni nanoparticles / A. Mao, H. Xiang, X. Ran et al. // Journal of Alloys and Compounds. – 2019. – V. 775. – P. 1177-1183. DOI: 10.1016/j.jallcom.2018.10.170

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. 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. (In Russian).
3. Sdobnyakov N.Yu., Samsonov V.M., Serov S.V.et al. Atomistic simulation of thermoinduced structural transformations in four-component Cu–Au–Pt–Pd nanoalloys with different morphologies, Colloid Journal, 2025, vol. 87, issue 4, pp. 560-571. DOI: 10.1134/S1061933X25600526.
4. Liao H., Fisher A., Xu Z.J. Surface segregation in bimetallic nanoparticles: A critical issue in electrocatalyst engineering, *Small*, 2015, vol. 11, issue 27, pp. 3221-3246. DOI: 10.1002/smll.201403380.
5. Bohra M., Grammatikopoulos P., Diaz R.E. et al. Surface segregation in chromium-doped NiCr alloy

nanoparticles and its effect on their magnetic behavior, *Chemistry of Materials*, 2015. vol. 27, issue 9, pp. 3216-3225. DOI: 10.1021/acs.chemmater.5b00837.
6. Ferrari A., Körmann F. Surface segregation in Cr-Mn-Fe-Co-Ni high entropy alloys, *Applied Surface Science*, 2020, vol. 533, art. no 147471, 7 p. DOI: 10.1016/j.apsusc.2020.147471.
7. Eom N. Messing M.E., Johansson J., Deppert K. General trends in core-shell preferences for bimetallic nanoparticles, *ACS Nano*, 2021, vol. 15, issue 5, pp. 8883-8895. DOI: 10.1021/acsnano.1c01500.
8. James P., Eriksson O., Johansson B., Abrikosov I.A. Calculated magnetic properties of binary alloys between Fe, Co, Ni, and Cu, *Physical Review B*, 1999, vol. 59, issue 1, pp. 419-430. DOI: 10.1103/physrevb.59.419.
9. Mondal B.N., Basumallick A., Chattopadhyay P.P. Magnetic properties of binary Cu_{50}-(Ni, Fe and Co)$_{50}$ alloys prepared by ball milling and isothermal annealing, *Materials Chemistry and Physics*, 2008, vol. 110, issue 2-3, pp. 490-493. DOI: 10.1016/j.matchemphys.2008.03.005.
10. Biserova-Tahchieva A., López-Jiménez I., Llorca-Isern N. Synthesis and characterization of nanostructured mechanical Cu-Fe-Co alloy, *Materials Science Forum*, 2018, vol. 941, pp. 1232-1237. DOI: 10.4028/www.scientific.net/msf.941.1232.
11. Romanovskii V.I., Kolosov A.Yu., Khort A.A. et al. Osobennosti sinteza nanochastits Cu-Ni: eksperiment i kompyuternoe modelirovanie [Features of Cu-Ni nanoparticle synthesis: experiment and computer simulation], *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov [Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials]*, 2020, issue 12, pp. 293-309. DOI: 10.26456/pcascnn/2020.12.293.
12. Romanovski V., Sdobnyakov N., Roslyakov S. et al. Bimetallic CuNi nanoparticle formation: solution combustion synthesis and molecular dynamic approaches, *Inorganic Chemistry*, 2024, vol. 63, issue 52, pp. 24844-24854. DOI: 10.1021/acs.inorgchem.4c04260.
13. Sdobnyakov N., Khort A., Myasnichenko V., Podbolotov K., Romanovskaia E., Kolosov A., Sokolov D., Romanovski V. Solution combustion synthesis and Monte Carlo simulation of the formation of CuNi integrated nanoparticles, *Computational Materials Science*, 2020, vol. 184, art. no 109936, 12 p. DOI: 10.1016/j.commatsci.2020.109936.
14. Kolosov A.Yu., Savina K.G., Nepsha N.I. et al. Comparative atomistic simulation of structure and structural transformations in Ni-Ag and Ni-Cu nanoalloys, *Physics of the Solid State*, 2024, vol. 66, issue 12, pp. 2027-2032. DOI: 10.61011/PSS.2024.12.60180.6394PA.
15. Malekan M., Jalali A. Kinetics study and fragility of $(Cu_{50}Zr_{43}Al_7)_{98}Y_2$ bulk metallic glass, *Thermochimica Acta*, 2024, vol. 740, art. no 179836, 10 p. DOI: 10.1016/j.tca.2024.179836.
16. LAMMPS Molecular Dynamics Simulator. Available at: www.url: http://lammps.sandia.gov. (accessed 02.05.2025).
17. Sdobnyakov N.Yu., Kolosov A.Yu., Sokolov D.N., Savina K.G. *MDSym.* Certificate RF, no. 2025683621, 2025. (In Russian).
18. 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.
19. 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.
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. 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.
24. Gao P.-Y., Kunath W., Gleiter H., Weiss K. The structure of small penta-twinned gold particles, *Scripta Metallurgica*, 1988, vol. 22, issue 5, pp. 683-686. DOI: 10.1016/S0036-9748(88)80182-0.
25. Jia M., Liang D., Du Q. et al. Fe-Co-Ni-Cu high entropy magnetic nanoparticles with high magnetothermal properties, *Scripta Materialia*, 2024, vol. 247, art. № 116119, 6 p. DOI: /10.1016/j.scriptamat.2024.116119.
26. Mao A., Xiang H., Ran X. et al. Plasma arc discharge synthesis of multicomponent Co-Cr-Cu-Fe-Ni nanoparticles, *Journal of Alloys and Compounds*, 2019, vol. 775, pp. 1177-1183. DOI: 10.1016/j.jallcom.2018.10.170.