УДК 538.913: 544.774.2:544.412 *Оригинальная статья*

Может ли наличие полости изменить характер структурных превращений в цикле термоиндуцированного воздействия на примере тернарных наночастиц Ag-Ni-Pd?

Е.С. Митинев, К.Г. Савина, О.В. Полев, М.Г. Гостинцев, А.Ю. Колосов, Д.Н. Соколов, И.А. Взглядов, И.С. Дмитриев, П.М. Ершов, Н.Ю. Сдобняков

ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

170002, Россия, Тверь, Садовый пер., 35

nsdobnyakov@mail.ru

DOI: 10.26456/pcascnn/2026.18.271

Аннотация: Сравнительное молекулярно-динамическое исследование было проведено для тернарных наночастиц *Ag-Ni-Pd* эквиатомного состава двух типов начальных конфигураций: наночастица с полостью в центральной области и наночастица без полости. Цикл термоиндуцированного воздействия (нагревание и охлаждение) проведен со скоростью 0,3 К/пс. Выявлены определенные особенности структурного поведения таких объектов исследования в процессе нагревания и последующего плавления. В частности, доля атомов, образующих локальную ГПУ-структуру, значительно выше для начальной конфигурации наночастицы с полостью в температурном диапазоне от 660 К вплоть до температуры плавления. Температурные зависимости удельной внутренней энергии в процессе охлаждения для двух обозначенных начальных конфигураций практически идентичны, но при этом процесс формирования ядра из никеля имеет свои особенности с точки зрения числа зарождаемых отдельных кластеров и их последующей внутренней коалесценции. Кроме того, анализ методом сопоставления полиэдральных шаблонов показывает, что существуют различия для двух обозначенных начальных конфигураций в формировании ГЦК- и ГПУ-локальных окружений атомами *Ag*, *Ni* и *Pd* тернарного сплава в конце термоиндуцированного цикла воздействия при температуре 300 К. Таким образом, наличие искусственно созданной полости или объемного дефекта в тернарных наночастицах *Ag-Ni-Pd* эквиатомного состава влияет как на параметры фазовых переходов, отвечающих плавлению и кристаллизации, но в большей степени на закономерности химической и структурной сегрегации.

Ключевые слова: метод молекулярной динамики, MDSym, потенциал сильной связи, тернарные наночастицы, полость, фазовый переход, сегрегация, локальная структура.

Митинев Егор Сергеевич – аспирант 2 года обучения кафедры общей физики ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Савина Ксения Геннадьевна – аспирант 4 года обучения кафедры общей физики ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Полев Олег Валерьевич – аспирант 1 года обучения кафедры общей физики ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Гостинцев Михаил Георгиевич – студент 1 курса магистратуры кафедры общей физики ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

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

Соколов Денис Николаевич – к.ф.-м.н., научный сотрудник кафедры общей физики ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Взглядов Иван Алексеевич – студент 4 курса кафедры общей физики ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Дмитриев Иван Сергеевич – студент 4 курса кафедры общей физики ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Ершов Павел Михайлович – младший научный сотрудник кафедры общей физики ФГБОУ ВО «Тверской

© Е.С. Митинев, К.Г. Савина, О.В. Полев, М.Г. Гостинцев, А.Ю. Колосов, Д.Н. Соколов, И.А. Взглядов, И.С. Дмитриев, П.М. Ершов, Н.Ю. Сдобняков, 2026

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

Original paper

Can the presence of a cavity alter the nature of structural transformations during a cycle of thermally induced treatment, taking Ag-Ni-Pd ternary nanoparticles as an example?

E.S. Mitinev, K.G. Savina, O.V. Polev, M.G. Gostintsev, A.Yu. Kolosov, D.N. Sokolov, I.A. Vzglyadov, I.S. Dmitriev, P.M. Ershov, N.Yu. Sdobnyakov
Tver State University, Tver, Russia

DOI: 10.26456/pcascnn/2026.18.271

Abstract: A comparative molecular dynamics study was conducted on equiatomic *Ag-Ni-Pd* ternary nanoparticles with two types of initial configurations: a nanoparticle containing a central cavity and a nanoparticle without a hollow core. A cycle of thermally induced treatment (heating and cooling) was performed at a rate of 0,3 K/ps. Specific features of the structural behavior of these objects during heating and subsequent melting were identified. In particular, the fraction of atoms forming a local hcp structure is significantly higher for the nanoparticle with a hollow core in the temperature range from 660 K up to the melting point. The temperature dependencies of specific internal energy during cooling are virtually identical for the two initial configurations; however, the process of nickel core formation exhibits distinct characteristics regarding the number of nucleated clusters and their subsequent internal coalescence. Furthermore, polyhedral template matching analysis reveals differences between the two initial configurations regarding the formation of local fcc and hcp environments by the constituent elements (*Ag, Ni, Pd*) of the ternary alloy at the end of the thermal cycle (at 300 K). Thus, the presence of an artificially created cavity or bulk defect in equiatomic *Ag-Ni-Pd* ternary nanoparticles influences not only the parameters of phase transitions associated with melting and crystallization but, to a greater extent, the patterns of chemical and structural segregation.

Keywords: molecular dynamics method, MDSym, tight-binding potential, ternary nanoparticles, cavity, phase transition, segregation, local structure.

Egor S. Mitinev – 2nd year postgraduate student, General Physics Department, Tver State University
Kseniya G. Savina – 4th year postgraduate student, General Physics Department, Tver State University, ORCID: 0000-0002-4916-4968
Oleg V. Polev – 1st year postgraduate student, General Physics Department, Tver State University
Michael G. Gostintsev – 1st year graduate student, General Physics Department, Tver State University
Andrei Yu. Kolosov – Ph. D., Researcher, General Physics Department, Tver State University, ORCID: 0000-0003-3805-0567
Denis N. Sokolov – Ph. D., Researcher, General Physics Department, Tver State University, ORCID: 0000-0003-2411-0143
Ivan A. Vzglyadov – 4th year student, General Physics Department, Tver State University
Ivan S. Dmitriev – 4th year student, General Physics Department, Tver State University
Pavel M. Ershov – Junior Researcher, General Physics Department, Tver State University, ORCID: 0000-0002-7083-214X
Nickolay Yu. Sdobnyakov – Dr. Sc., Docent, Professor, General Physics Department, Tver State University, ORCID: 0000-0003-1749-0336

Поступила в редакцию/received: 01.06.2026; после рецензирования/revised: 21.07.2026; принята/accepted: 27.07.2026.

1. Введение и постановка задачи

К настоящему времени проектирование и синтез многокомпонентных металлических полых наноструктур привлекают большое внимание благодаря их структурным и композиционным преимуществам для применения в электрокатализе [1, 2]. Известно, что тернарные наночастицы $Ag-Ni-Pd$ с различным химическим

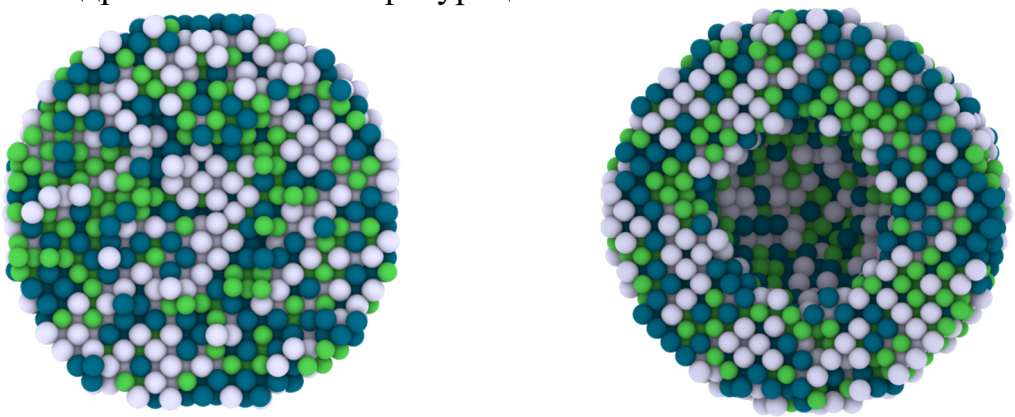
упорядочением (Янус-структуры, структуры ядро-оболочка) представляют интерес по причине зависимости каталитических свойств от химического упорядочения [3], соответственно подход, связанный с использованием полых тернарных наночастиц может быть эффективным для улучшения каталитических характеристик, прежде всего за счет увеличения их «рабочей» поверхности. Также наличие крупной полости, сравнимой с толщиной стенок наночастиц, позволяет исследовать эффект Киркиндалла на наноуровне [4]. Очевидно, что наличие внутренней полости создает дополнительную поверхность раздела фаз, что увеличивает общую поверхностную энергию объекта и активизирует диффузию атомов металлов при нагреве. Исследование различий гистерезиса плавления и кристаллизации, а также эволюции локальной структуры тернарных наночастиц критически важно для определения температурных границ их стабильности и прогнозирования рабочих температурных интервалов наноматериалов [5-8]. Именно за счет физико-химических характеристик компонентов тернарных наночастиц $Ag-Ni-Pd$, а также развитой морфологии поверхности полые наночастицы $Ag-Ni-Pd$ востребованы в качестве высокоэффективных катализаторов, элементов газовых сенсоров и наноконтейнеров [9].

2. Методология компьютерного моделирования

В данной работе объектами исследования были выбраны две различные начальные морфологии (см. рис. 1) тернарных наночастиц эквиатомного состава $Ag-Ni-Pd$, содержащих 4500 атомов. Предметом исследования являлось выявление особенностей протекания фазовых переходов, отвечающих плавлению и кристаллизации, а также закономерностей структурных превращений цельных тернарных наночастиц эквиатомного состава $Ag-Ni-Pd$, а также соответствующего аналога, ядро которого представляло собой сферическую полость. Конечные конфигурации были получены после цикла термоиндуцированного воздействия (нагревание-охлаждение) в диапазоне температур 300-1800 К для скорости 0,3 К/пс.

Моделирование было проведено в авторской программе MDSym [10]. Параметры для монометаллических связей потенциала сильной связи взяты из работы [11], перекрестные параметры рассчитывались по правилу Лоренца-Бертло (энергетические параметры находились как средние геометрические для двух компонент, пространственные – как средние арифметические) (см. Таблицу 1). В авторской программе MDSym [10] реализован мягкий стохастический термостат, представляющий собой термостат Нозе-Гувера с добавлением случайного шума для улучшения эргодичности [12, 13]. В такой реализации термостата кинетическая

энергия хорошо контролируется даже на ранних стадиях моделирования, что в данном случае является важным фактором именно из-за наличия полости в ядре начальной конфигурации.



а б

Рис. 1. Используемые типы морфологий для тернарных наночастиц состава $Ag-Ni-Pd$: а – наночастица без полости, б – наночастица с ядром в виде полости (полость обозначена более темной окраской). Цветовое обозначение атомов: зелёные – никель, синие – палладий, серые – серебро.

Таблица 1. Параметры для потенциала сильной связи [11].

Связь	A , эВ	ς , эВ	p	q	r_0 , Å
Pd-Pd	0,1746	1,718	10,867	3,742	2,7511
Pd-Ag	0,134	1,4226	10,8975	3,4405	2,8201
Pd-Ni	0,081	1,3558	13,933	2,4655	2,6215
Ag-Ag	0,1028	1,178	10,928	3,139	2,889
Ag-Ni	0,0622	1,1227	13,9635	2,164	2,6904
Ni-Ni	0,0376	1,07	16,999	1,189	2,4918

Для точного определения температур фазовых переходов и анализа локального окружения в тернарных наночастицах $Ag-Ni-Pd$ (выявления кристаллических фаз ГЦК, ГПУ, ОЦК и квазикристаллической ИК-фазы) использовался метод сопоставления полиэдрических шаблонов (polyhedral template matching), реализованный в программе OVITO [14].

3. Результаты и обсуждение

На первом этапе исследования идентифицировать фазовые структурные переходы можно с использованием температурных зависимостей удельной внутренней энергии, которые представлены на рис. 2. С одной стороны, начиная с температуры 835 К (заметим, что эта температура существенно выше температуры для биомедицинских применений) кривые $u(T)$, отвечающие двум различным начальным конфигурациям, вплоть до завершения охлаждения, ведут себя практически одинаково. С другой стороны, в серии компьютерных

экспериментов подтверждается устойчивое наличие слабого температурного сдвига кривой, отвечающей нагреванию наночастицы, содержащей ядро в виде полости, вправо, а кривой, отвечающей охлаждению наночастицы, влево относительно соответствующих кривых, полученных для наночастицы, не содержащей полости. Этот эффект будет рассмотрен при анализе локальной структуры наночастицы.

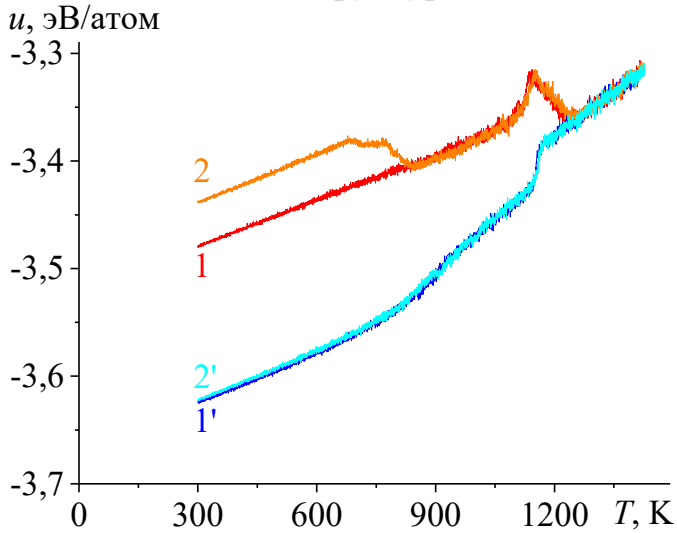


Рис. 2. Сравнение температурных зависимостей удельной внутренней энергии в процессах нагревания и охлаждения тернарных наночастиц $Ag-Ni-Pd$: 1 – с начальной конфигурацией рис 1 а, 2 – с начальной конфигурацией рис 1 б. Штрих относится к процессу охлаждения.

На рис. 3 представлены зависимости идентифицированных кристаллических и квазикристаллических фаз. Очевидно, что в процессе нагревания в диапазоне от 660 К до температуры плавления для начальной конфигурации наночастица с ядром в виде полости в процессе ее закрытия наблюдается конкуренция в процессе формирования ГЦК- и ГПУ-локальных структур. В частности, в температурном интервале 785-815 К наблюдается наибольшая доля ГПУ-локальной фазы (около 19%), при том, что наночастицы без полости даже при температуре близкой к температуре плавления (1090-1100 К) эта доля составляет только 9%. Такая зависимость подтверждается данными, представленными на рис. 4 (при температуре 1090-1100 К доля локальных ГПУ-фаз все равно больше именно для случая начальной конфигурации с полостью). Можно предположить, что именно закрытие исходной полости вызывает локальный ГПУ-отклик, так как закрытие полости происходит в процессе диффузии в ещё твёрдой наночастице (отметим, что именно поэтому на температуру фазового перехода, отвечающего плавлению, это не оказывает заметного влияния), то логично предположить, что временный рост доли ГПУ-локальной фазы соответствует перестройке плотноупакованных плоскостей и дефектам упаковки вокруг схлопывающейся внутренней

поверхности. Процесс охлаждения тоже имеет свои особенности. Для наночастицы без полости доля локальных ГПУ- и ГЦК-фаз практически совпадает вплоть до конечной температуры 300 К и в итоговой конфигурации доля локальной ГПУ-фазы чуть больше. В то время как для начальной конфигурации наночастицы с ядром в виде полости при температуре ниже 900 К доминирующей локальной фазой становится ГЦК-фаза вплоть до окончания моделирования. Этот эффект, хотя и слабо, проявляется на температурных зависимостях удельной внутренней энергии около 900 К в виде небольшого расхождения кривых и изменения их наклона.

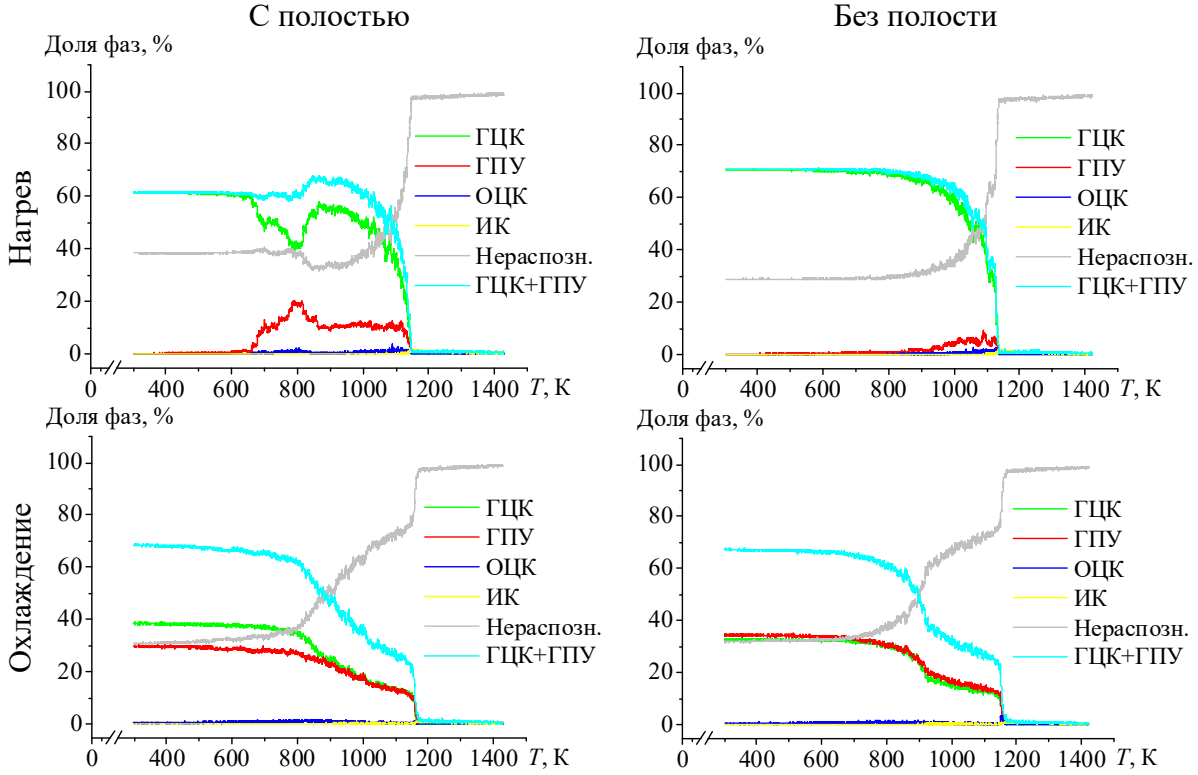


Рис. 3. Температурные зависимости распознанных кристаллических и квазикристаллических фаз при нагревании и последующем охлаждении. Реализован метод сопоставления полиэдральных шаблонов в ПО OVITO [14].

Рассмотрим более подробно локальную структуру конфигураций наночастиц (см. рис. 5). Непосредственно перед плавлением (1100 К) с точки зрения присутствия кристаллических фаз более стабильной является наночастица с начальной конфигурацией с ядром в виде полости. При этом есть еще одна закономерность в соотношении локальных кристаллических фаз отдельными компонентами тернарной наночастицы $Ag-Ni-Pd$: атомы формирующие оболочку наночастицы (в нашем случае это атомы серебра) формируют меньше упорядоченных локальных фаз, чем атомы палладия, которые формируют периферийную область (то есть находятся и не в ядре, и не на поверхности) и соответственно наибольшую долю формируют

именно атомы никеля, которые формируют ядро наночастицы. Таким образом, нами впервые отмечены закономерности сегрегационного поведения и закономерность формирования упорядоченных кристаллических фаз для многокомпонентных наночастиц.

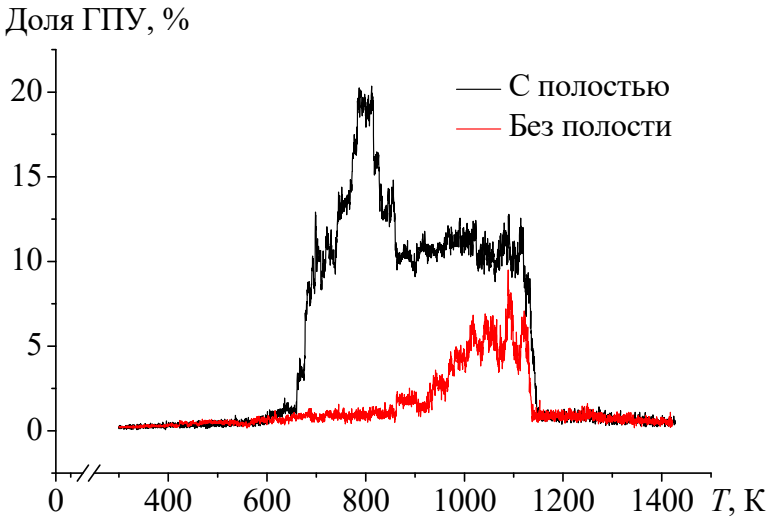


Рис. 4. Температурная зависимость доли ГПУ-локального окружения в процессе нагревания.

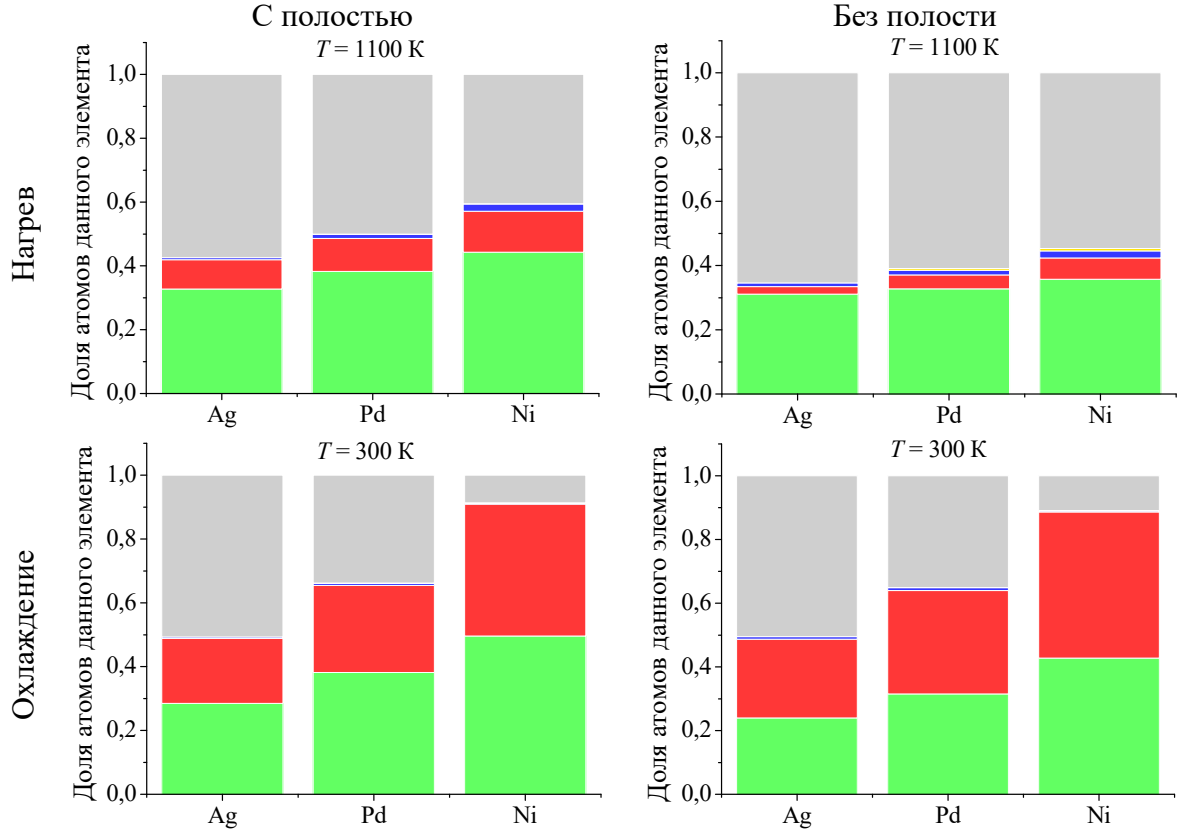
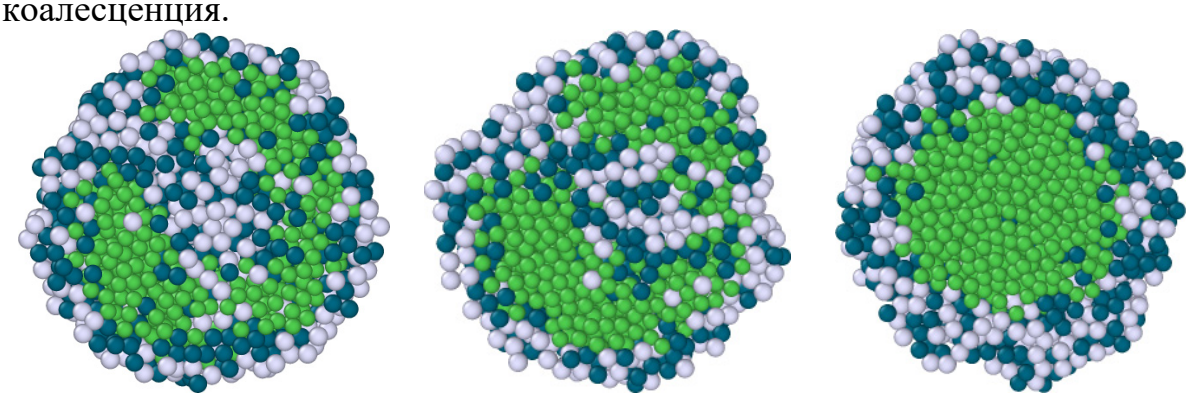


Рис. 5. Распределение локальных идентифицируемых фаз по элементам тернарных наночастиц $Ag-Ni-Pd$ при различных температурах. Цветовое обозначение соответствует рис. 3.

Перейдем теперь к рассмотрению закономерностей химической

сегрегации. Напомним, что начальные конфигурации отвечали эквиатомному распределению компонентов (см. рис. 1). Общая закономерность выглядит следующим образом: в процессе нагревания формируется ядро, обогащенное атомами никеля, а также оболочка, обогащенная атомами серебра, в то время как атомы палладия занимают промежуточное пространственное положение – периферийную область. Особый интерес представляет формирование отдельных внутренних кластеров, обогащенных атомами никеля и их последующая внутренняя коалесценция.



1174 K 1190 K 1259 K

Рис. 6. Переход от зарождения никель-обогащенных квазиядер к формированию структуры ядро-оболочка в процессе нагревания. Показано экваториальное сечение наночастицы $Ag-Ni-Pd$. Цветовое обозначение соответствует рис. 1.

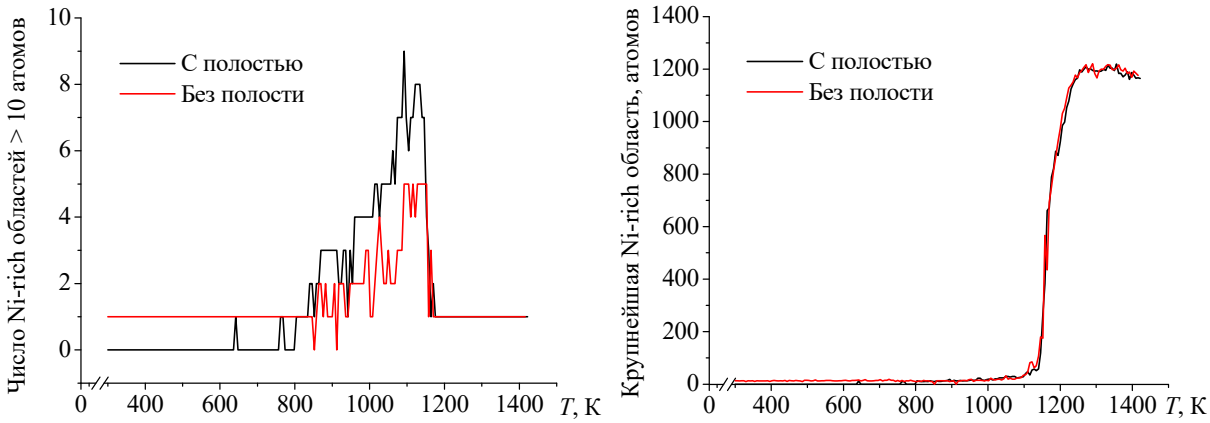


Рис. 7. Число (а) и размер (б) никель-обогащенных (Ni-rich) квазиядер.

На рис. 6 представлены атомные конфигурации тернарной наночастицы $Ag-Ni-Pd$ (с начальной конфигурацией, соответствующей рис. 1 б) при различных температурах. На данных конфигурациях отчетливо видно зарождение трех крупных квазиядер. Однако необходимо отметить, что это кинетический путь к равновесной, энергетически выгодной структуре ядро-оболочка, а не образование трёх устойчивых квазиядер. Количественные закономерности процесса зарождения никель-обогащенных квазиядер представлены на рис. 7. Несмотря на различия в

размерах отдельных никель-обогащенных квазиядер (см. рис. 7 а) для двух типов используемых начальных конфигураций, температурный сценарий образования ядра из никеля абсолютно идентичен (см. рис. 7 б).

4. Заключение

В реальных наночастицах всегда присутствуют дефекты структуры, в том числе могут присутствовать объемные дефекты в виде полостей. Кроме того, для ряда практических приложений, в частности, в катализе наличие искусственно созданной полости в многокомпонентных металлических наночастицах является технологической необходимостью [15, 16]. Таким образом, в рамках данного исследования было проведено сравнительное молекулярно-динамическое исследование для тернарных наночастиц $Ag-Ni-Pd$ эквиатомного состава двух типов начальных конфигураций: наночастица с ядром в виде полости и наночастица без полости. Несмотря на имеющиеся некоторые различия в поведении этих двух наносистем, которые могут показаться несущественными, например, при анализе температурных зависимостей удельной внутренней энергии в процессах нагревания и охлаждения (идентифицируемая температура плавления по пику температурной производной du/dT при 1116 K для начальной морфологии без полости и 1132 K для начальной морфологии с полостью) в данной работе описаны существенно разные сценарии структурной сегрегации. При этом несмотря на тот факт, что закономерности химической сегрегации в целом совпадают при анализе конечных конфигураций, полученных при нагревании, промежуточные атомные конфигурации, отвечающие рассматриваемому температурному диапазону, имеют свои особенности. Процесс охлаждения в меньшей степени интересен с точки зрения химической сегрегации, сформированная структура $Ni@(Pd_{rich}-Ag)@(Pd-Ag_{rich})$ остается стабильной после кристаллизации (индекс rich показывает, что поверхность наночастицы обогащена атомами серебра, а третий/четвертый монослой атомами палладия). Вместе с тем, «наследственность» начальной морфологии проявляется в структурной сегрегации, о чем свидетельствует анализ конечных конфигураций после цикла термоиндуцированного воздействия.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках государственной программы в области научно-исследовательской деятельности (проект № 0817-2026-0006).

Библиографический список:

1. **Kim, Y.** One-pot synthesis of ternary alloy hollow nanostructures with controlled morphologies for electrocatalysis / Y. Kim, Y.W. Lee, S. Lee et al. // ACS Applied Materials & Interfaces. – 2021. – V. 13. – I. 38. – P. 45538-45545. DOI: 10.1021/acsami.1c13171.

2. **Li, Z.** Ultra-small hollow ternary alloy nanoparticles for efficient hydrogen evolution reaction / Z. Li, C. Yu, Y. Kang et al. // National Science Review. – 2021. – V. 8. – I. 7. – Art. № nwaa204. – 13 p. DOI: 10.1093/nsr/nwaa204.
3. **Wang, J.** Transition from core-shell to janus segregation pattern in AgPd nanoalloy by Ni doping for the formate oxidation / J. Wang, F. Chen, Q. Tang et al. // Applied Catalysis B: Environmental. – 2020. – V. 270. – Art. № 118861. – 13 p. DOI: 10.1016/j.apcatb.2020.118861.
4. **El Mel, A.-A.** The Kirkendall effect and nanoscience: hollow nanospheres and nanotubes / A.-A. El Mel, R. Nakamura, C. Bittencourt // Beilstein Journal of Nanotechnology. – 2015. – V. 6. – P. 1348-1361. DOI: 10.3762/bjnano.6.139.
5. **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.
6. **Samsonov, V.** Chemical and structural segregation in Pt-Pd-Ni ternary nanosystems: molecular dynamics simulation / V. Samsonov, N. Nepsha, N. Sdobnyakov et al. // Materials Chemistry and Physics. – 2025. – V. 340. – Art. № 130827. – 11 p. DOI: 10.1016/j.matchemphys.2025.130827.
7. **Nepsha, N.I.** Atomistic simulation of segregation in ternary Pt–Pd–Ni nanoalloy / N.I. Nepsha, N.Yu. Sdobnyakov, V.M. Samsonov et al. // Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. – 2024. – V. 18. – I. 6. – P. 1388-1394. DOI: 10.1134/S1027451024701295.
8. **Самсонов, В.М.** О взаимосвязи между спонтанной сегрегацией компонентов в тернарных наночастицах Pt-Pd-Ni и стабильностью наноструктур ядро-оболочка: молекулярно-динамическое исследование / В.М. Самсонов, И.В. Талызин, А.А. Романов и др. // Коллоидный журнал. 2025. – Т. 87. – № 4. – С. 398-413. DOI: 10.7868/S3034543X25040111.
9. **Akin, M.** GCE surface coating with PdNiAg nanocatalysts to ensure high performance and stability in alcohol oxidation / M. Akin, M. Bekmezci, C. Catal et al. // RSC Advances. – 2025. – V. 15. – I. 35. – P. 28555-28564. DOI: 10.1039/d5ra02762d.
10. **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.
11. **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.
12. **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.
13. **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.
14. **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.
15. **Sun, L.** Noble-metal-based hollow mesoporous nanoparticles: synthesis strategies and applications / L. Sun, H. Lv, J. Feng et al. // Advanced Materials. – 2022. – V. 34. – Art. № 2201954. – 16 p. DOI: 10.1002/adma.202201954.
16. **Akbarzadeh, H.** Stability of Pd@void@M (M=Ni, Ag, and Pt) yolk shell nanoparticles controlled by structural factors: a molecular dynamics perspective / H. Akbarzadeh, E. Mehrjouei, A.N. Shamkhali et al. // Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects. – 2021. – V. 610. – Art. 125920. – 12 p. DOI: 10.1016/j.colsurfa.2020.125920.

References:

1. Kim Y., Lee Y.W., Lee S. et al. One-pot synthesis of ternary alloy hollow nanostructures with controlled morphologies for electrocatalysis, *ACS Applied Materials & Interfaces*, 2021, vol. 13, issue 38, pp. 45538-45545. DOI: 10.1021/acsami.1c13171.
2. Li Z., Yu C., Kang Y. et al. Ultra-small hollow ternary alloy nanoparticles for efficient hydrogen evolution reaction, National Science Review, 2021, vol. 8, issue 7, art. no. nwaa204, 13 p. DOI: 10.1093/nsr/nwaa204.
3. Wang J., Chen F., Tang Q. et al. Transition from core-shell to janus segregation pattern in AgPd nanoalloy by Ni doping for the formate oxidation, *Applied Catalysis B: Environmental*, 2020, vol. 270, art. no. 118861, 13 p. DOI: 10.1016/j.apcatb.2020.118861.
4. El Mel A.-A., Nakamura R., Bittencourt C. The Kirkendall effect and nanoscience: hollow nanospheres and nanotubes, *Beilstein Journal of Nanotechnology*, 2015, vol. 6, pp. 1348-1361. DOI: 10.3762/bjnano.6.139.

5. 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).
6. Samsonov V., Nepsha N., Sdobnyakov N. et al. Chemical and structural segregation in Pt-Pd-Ni ternary nanosystems: molecular dynamics simulation, *Materials Chemistry and Physics*, 2025, vol. 340, art. no. 130827, 11 p. DOI: 10.1016/j.matchemphys.2025.130827.
7. Nepsha N.I., Sdobnyakov N.Yu., Samsonov V.M. et al. Atomistic simulation of segregation in ternary Pt–Pd–Ni nanoalloy, *Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques*, 2024, vol. 18, issue 6, pp. 1388-1394. DOI: 10.1134/S1027451024701295.
8. Samsonov V.M., Talyzin I.V., Romanov A.A. et al. On the relation between spontaneous segregation of components in ternary Pt–Pd–Ni nanoparticles and stability of core–shell nanostructures: molecular dynamics study, *Colloid Journal*, 2025, vol. 87, issue 4, pp. 547-559. DOI: 10.1134/S1061933X25600605.
9. Akin M., Bekmezci M., Catal C. et al. GCE surface coating with PdNiAg nanocatalysts to ensure high performance and stability in alcohol oxidation, *RSC Advances*, 2025, vol. 15, issue 35, pp. 28555-28564. DOI: 10.1039/d5ra02762d.
10. Sdobnyakov N.Yu., Kolosov A.Yu., Sokolov D.N., Savina K.G. *MDSym.* Certificate RF, no. 2025683621, 2025. (In Russian).
11. 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.
12. 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.
13. 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.
14. 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.
15. Sun L., Lv H., Feng J. et al. Noble-metal-based hollow mesoporous nanoparticles: synthesis strategies and applications, *Advanced Materials*, 2022, vol. 34, art. no. 2201954, 16 p. DOI: 10.1002/adma.202201954.
16. Akbarzadeh H., Mehrjouei E., Shamkhali A.N. et al. Stability of Pd@void@M (M=Ni, Ag, and Pt) yolk shell nanoparticles controlled by structural factors: a molecular dynamics perspective, *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, 2021, vol. 610, art. no. 125920, 12 p. DOI: 10.1016/j.colsurfa.2020.125920.