УДК 538.953:538.911:539.2 *Оригинальная статья*

Особенности структурных превращений в четырехкомпонентных наносплавах Cu-Au-Pt-Pd: многооболочечная структура и сплав с равномерным распределением компонентов

С.В. Серов, К.Г. Савина, А.Ю. Колосов, Д.Н. Соколов, С.А. Вересов, Д.Р. Зорин, А.В. Зайцев, Н.Н. Симчук, Н.Ю. Сдобняков

ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

170002, Россия, Тверь, Садовый пер., 35

nsdobnyakov@mail.ru

DOI: 10.26456/pcascnn/2026.18.439

Аннотация: На примере двух начальных конфигураций – многооболочечной структуры и сплава с равномерным распределением компонентов – проведено молекулярно-динамическое исследование процессов структурообразования в четырехкомпонентных наночастицах *Cu-Au-Pt-Pd* (с общим количеством атомов 10000) в процессе последовательного цикла термоиндуцированного воздействия, включавшего фазовые переходы, отвечающие плавлению и кристаллизации. Термоиндуцированное воздействие осуществлялось при трёх скоростях 0,25 К/пс (типичная скорость), 0,5 К/пс (медианный скоростной режим) и 1 К/пс (высокая скорость). Для каждой начальной конфигурации были получены калорические зависимости потенциальной части удельной внутренней энергии при нагревании и охлаждении, а также определены параметры гистерезиса температур плавления и кристаллизации. Дополнительно описаны закономерности химической и структурной сегрегации в конфигурациях, соответствующих концу охлаждения. Кроме того, были построены и проанализированы распределения компонентов в конечных конфигурациях наночастиц *Cu-Au-Pt-Pd* с целью верификации гипотезы об определенном сегрегационном поведении компонентов. Показано, что закономерности локального кристаллического упорядочения и ширина температурного гистерезиса, отвечающего плавлению и кристаллизации, определяются главным образом скоростью термоиндуцированного воздействия, в то время как начальная морфология оказывает преимущественное влияние на распределение атомов между ГЦК- и ГПУ- локальными окружениями.

Ключевые слова: четырехкомпонентные наночастицы Cu-Au-Pt-Pd, многооболочечная структура, сплав с равномерным распределением компонентов, метод молекулярной динамики, потенциал сильной связи, сегрегационное поведение, фазовый переход плавление-кристаллизация.

Серов Сергей Викторович – 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»

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»

Вересов Сергей Александрович – аспирант 4 года обучения кафедры общей физики ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Зорин Данила Романович – аспирант 1 года обучения кафедры общей физики ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Зайцев Александр Витальевич – студент 4 курса кафедры общей физики ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Симчук Николай Николаевич – студент 4 курса кафедры общей физики ФГБОУ ВО «Тверской

© С.В. Серов, К.Г. Савина, А.Ю. Колосов, Д.Н. Соколов, С.А. Вересов, Д.Р. Зорин, А.В. Зайцев, Н.Н. Симчук, 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

Features of structural transformations in four-component Cu-Au-Pt-Pd nanoalloys: multi-shell structure and alloy with uniform distribution of components

S.V. Serov, K.G. Savina, A.Yu. Kolosov, D.N. Sokolov, S.A. Veresov, D.R. Zorin, A.V. Zaytsev, N.N. Simchuk, N.Yu. Sdobnyakov
Tver State University, Tver, Russia

DOI: 10.26456/pcascnn/2026.18.439

Abstract: Using two initial configurations (a multi-shell structure and an alloy with a uniform distribution of components) as an example, a molecular dynamics study was conducted to investigate the structure formation processes in quaternary *Cu-Au-Pt-Pd* nanoparticles (with a total of 10,000 atoms) during a sequential cycle of thermally induced exposure, including phase transitions corresponding to melting and crystallization. The thermally induced exposure was performed at three cooling/heating rates: 0,25 K/ps (typical rate), 0,5 K/ps (median rate), and 1 K/ps (high rate). For each initial configuration, the temperature dependences of the potential component of the specific internal energy were obtained during heating and cooling, and the hysteresis parameters of the melting and crystallization temperatures were determined. Additionally, the regularities of chemical and structural segregation in the configurations corresponding to the end of cooling are described. Furthermore, the component distributions in the final configurations of the *Cu-Au-Pt-Pd* nanoparticles were constructed and analyzed to verify the hypothesis of a specific segregation behavior of the components. It is shown that the patterns of local crystalline ordering and the width of the temperature hysteresis corresponding to melting and crystallization are determined mainly by the rate of thermally induced action, while the initial morphology has a predominant effect on the distribution of atoms between fcc and hcp local environments.

Keywords: quaternary Cu-Au-Pt-Pd nanoparticles, multi-shell structure, alloy with uniform distribution of components, molecular dynamics method, tight-binding potential, segregation behavior, melting-crystallization phase transition.

Sergei V. Serov – 2nd year postgraduate student, General Physics Department, Tver State University, ORCID: 0009-0004-6219-6309
Kseniya G. Savina – 4th year postgraduate student, General Physics Department, Tver State University, ORCID 0000-0002-4916-4968
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
Sergey A. Veresov – 4th year postgraduate student, General Physics Department, Tver State University
Danila R. Zorin – 1st year postgraduate student, General Physics Department, Tver State University
Alexander V. Zaytsev – 4th year student, General Physics Department, Tver State University
Nickolay N. Simchuk – 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: 17.07.2026; после рецензирования/revised: 23.08.2026; принята/accepted: 01.09.2026.

1. Введение

Последовательное развитие термодинамического подхода к наноразмерным системам сформировало важную основу для описания фазовых переходов, поверхностных явлений и факторов, определяющих стабильность/нестабильность металлических наночастиц [1]. Для

наносплавов эта задача особенно сложна: при фиксированном размере их свойства определяются не только стехиометрическим составом и типом кристаллического упорядочения, но и пространственным распределением компонентов. В результате для одного и того же состава могут реализоваться морфологии с равномерным распределением компонентов, сегрегированные и янусоподобные морфологии, а также структуры типа «ядро-оболочка» и многооболочечные структуры (onion-like structure), нередко близкие по энергии, но различающиеся кинетической устойчивостью и функциональными характеристиками [2].

Переход от бинарных к многокомпонентным наносплавам резко увеличивает число возможных конфигураций. Уже в пятикомпонентных высокоэнтропийных системах поверхностная сегрегация формирует сложные градиенты состава [3], а экспериментальный синтез четырехкомпонентных частиц подтверждает возможность совместной стабилизации металлов с существенно различающимися физико-химическими свойствами [4]. Результаты атомистического моделирования также показывают, что для четырехкомпонентных наночастиц конкурируют несколько сценариев структурообразования, зависящих от состава, размера и начального распределения атомов [5-8]. Поэтому увеличение числа компонентов расширяет не только разнообразие составов, но и набор доступных морфологий и путей перехода между ними.

Особое место среди таких конфигураций занимают многооболочечные структуры, в которых последовательное чередование обогащенных компонентами слоев создает несколько внутренних границ раздела. Их формирование описано для ряда многокомпонентных наносплавов, однако систематические сведения об устойчивости многооболочечной организации при нагревании и последующем охлаждении остаются ограниченными. Ранее при последовательных термоиндуцированных циклах четырехкомпонентных наночастиц $Cu-Au-Pt-Pd$ было установлено, что одинаковый состав не гарантирует одинакового конечного структурного состояния [9]. Это позволяет поставить более общий вопрос: может ли исходная морфология выступать самостоятельным фактором, определяющим структурную и энергетическую устойчивость наночастицы после цикла термического воздействия?

Основной массив данных об устойчивости оболочечных металлических наночастиц относится к бинарным системам ядро-оболочка. Для них установлены общие тенденции взаимного расположения компонентов [10], исследованы условия сохранения или инверсии ядра и оболочки при термическом воздействии [11], а также показана возможность морфологической нестабильности вследствие конкуренции поверхностных и межфазных энергий [12]. Однако эти

закономерности нельзя непосредственно переносить на многооболочечные четырехкомпонентные частицы: рост числа компонентов увеличивает количество конкурирующих границ раздела, каналов диффузии и вариантов поверхностной сегрегации. Поэтому сохранение исходной радиальной организации после плавления и кристаллизации требует отдельной проверки.

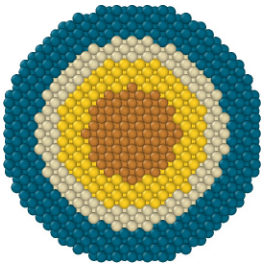
Наряду с начальной морфологией существенным кинетическим параметром является скорость охлаждения. Молекулярно-динамические (МД) эксперименты по затвердеванию (solidification) металлических наночастиц показали, что ее изменение влияет на зарождение кристаллической фазы и формирование конечного структурного мотива [13]. Для эквиатомных наносплавов $Au-Cu$ показано, что скорость нагрева совместно с размером частиц влияет на характер плавления, степень структурного разупорядочения и интенсивность атомной диффузии [14]. Для биметаллических нанокластеров $Au-Pd$ установлено, что конечная структура существенно зависит от скорости охлаждения: быстрое охлаждение может приводить к образованию неустойчивых разупорядоченных конфигураций, тогда как медленное способствует формированию стабильных структур с выраженным кристаллическим упорядочением [15]. Для наносплавов $Cu-Ag-Au$ снижение скорости охлаждения с 0,15 до 0,075 К/пс сопровождалось небольшим увеличением доли ГЦК-окружений и уменьшением долей ГПУ- и ОЦК-структур, тогда как содержание аморфной составляющей существенно не изменялось [16]. В тройных наносплавах $Pt-Ag-Au$ изменение скорости нагрева влияло на механизм плавления и температурный интервал изомеризации, сопровождающей фазовый переход [17].

Таким образом, для оценки устойчивости многокомпонентных наночастиц необходимо совместно учитывать химический состав, исходную морфологию и режим термоиндуцированного воздействия. Целью настоящей работы является установление роли начального распределения компонентов и скорости охлаждения в структурообразовании четырехкомпонентных наночастиц $Cu-Au-Pt-Pd$. Сопоставляются многооболочечная конфигурация и сплав с равномерным распределением компонентов; анализируется, сохраняются ли различия между ними после цикла нагревания–охлаждения и как скорость охлаждения влияет на локальное кристаллическое упорядочение, сегрегацию и показатели структурной и энергетической устойчивости.

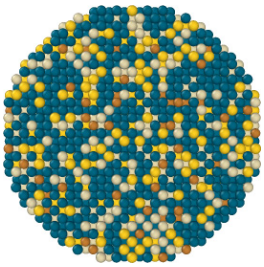
2. Выбор начальных конфигураций и параметры компьютерного эксперимента

Были исследованы две конфигурации (см. рис. 1)

четырёхкомпонентных наночастиц состава $Cu_{500}Au_{1500}Pt_{2000}Pd_{6000}$, отвечающие принципиально разным морфологиям: многооболочечная структура (onion-like structure) и структура с равномерным распределением компонентов, диаметры наночастиц составляли 6,1 и 6,9 нм соответственно. Такой выбор связан с различной степенью термической устойчивости многокомпонентных наночастиц с различной морфологией [6-9, 18]. Выбранные конфигурации подвергались циклу последовательного нагрева и охлаждения в интервале температур от 300 до 1500 К при трёх скоростях изменения температуры: 0,25 К/пс, 0,5 К/пс и 1 К/пс. Далее подробно анализировалась структура наночастиц, полученная в результате такого цикла термоиндуцированного воздействия.



$Cu_{500}@Au_{1500}@Pt_{2000}@Pd_{6000}$ (1)



$Cu_{500}-Au_{1500}-Pt_{2000}-Pd_{6000}$ (2)

Рис. 1. Используемые типы морфологий для четырехкомпонентных наночастиц состава $Cu_{500}Au_{1500}Pt_{2000}Pd_{6000}$. Здесь и далее цветовое обозначение: Коричневые атомы – медь, желтые – золото, серые – платина, синие – палладий.

Таблица 1. Параметры для потенциала сильной связи [20].

Связь	A, эВ	ζ, эВ	p	q	r_0, Å
Au-Au	0,2061	1,790	10,229	4,036	2,8838
Cu-Cu	0,0855	1,224	10,960	2,278	2,5560
Pd-Pd	0,1746	1,718	10,867	3,742	2,7511
Pt-Pt	0,2975	2,695	10,612	4,004	2,7746
Au-Cu	0,1328	1,4802	10,595	3,157	2,7199
Au-Pd	0,1897	1,7536	10,548	3,889	2,8175
Au-Pt	0,2476	2,1964	10,421	4,020	2,8292
Pd-Cu	0,1222	1,4501	10,914	3,010	2,6536
Pd-Pt	0,2279	2,1518	10,740	3,873	2,7629
Pt-Cu	0,1595	1,8162	10,786	3,141	2,6653

МД эксперимент был реализован с использованием собственного программного пакета MDSym [19] методом молекулярной динамики. Межатомное взаимодействие описывалось потенциалом сильной связи, параметры которого были определены в работе [20]. Для определения перекрестных параметров потенциала сильной связи использовали правило Лоренца–Бертло: энергетические параметры вычислялись как средние геометрические соответствующих величин для монокомпонентов, а

пространственные – как их средние арифметические соответственно [18, 21]. Все используемые значения представлены в Таблице 1. В основе используемого в программе MDSym способа термостатирования лежит модифицированный термостат Нозе–Гувера, дополненный случайным шумом, так называемый мягкий стохастический термостат [22]. Такая модификация введена для повышения эргодичности системы.

Для исследования закономерностей формирования локального окружения в наночастицах [23], то есть для выявления кристаллических фаз (ГЦК, ГПУ и ОЦК), применялся метод сопоставления полиэдрических шаблонов [24, 25], реализованный в программе OVITO с использованием модификатора Polyhedral Template Matching [26]. Также программа OVITO [26] позволяет проводить более прецизионную идентификацию температур фазовых переходов, включая область предплавления.

3. Результаты расчетов и обсуждение

Стабильность начальной морфологии, а также закономерности химической и структурной сегрегации обусловлены, в том числе характером гистерезиса температур плавления и кристаллизации, который идентифицируется на температурных зависимостях удельной потенциальной энергии наночастиц. На рис. 2 представлены типичные кривые.

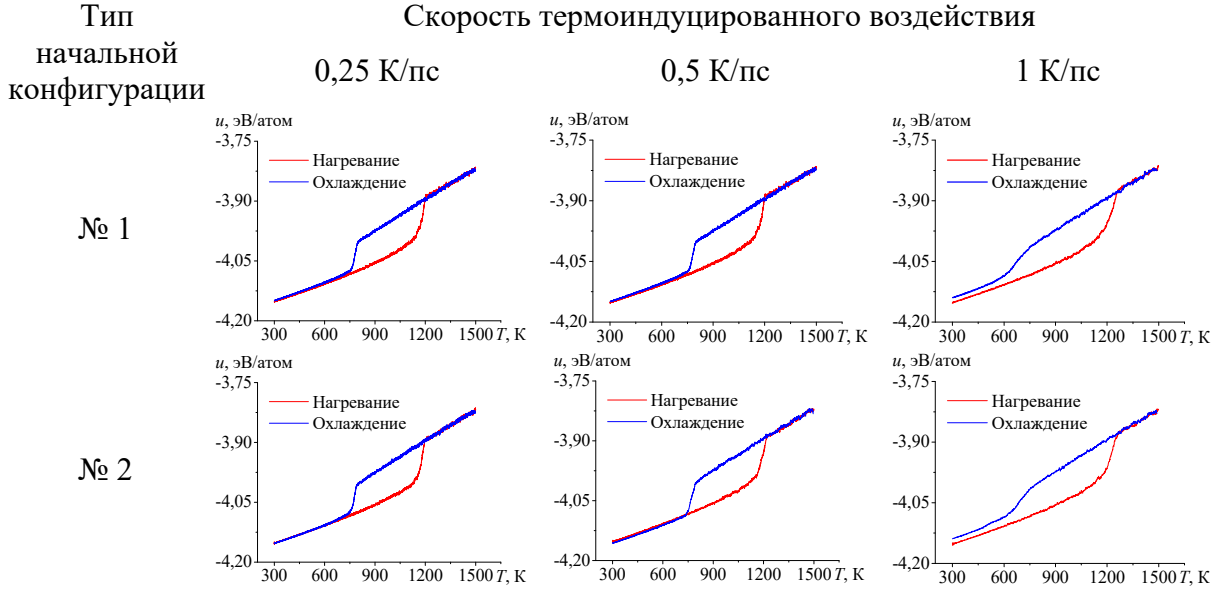


Рис. 2. Поведение типичных температурных зависимостей удельной потенциальной энергии наночастиц $Cu_{500}Au_{1500}Pt_{2000}Pd_{6000}$ при различной начальной морфологии и различных скоростях термоиндуцированного воздействия.

Примечательно, что при скоростях термоиндуцированного воздействия 0,25 К/пс и 0,5 К/пс величины удельной потенциальной

энергии, соответствующие начальным и конечным конфигурациям, практически совпадают, а для типа конфигурации № 2 (см. рис. 1) при скорости термоиндуцированного воздействия 0,25 К/пс конечное значение даже незначительно, но меньше. При скорости 1 К/пс наночастицам $Cu_{500}Au_{1500}Pt_{2000}Pd_{6000}$ различной морфологии недостаточно времени для достижения первоначального энергетического состояния, возможно, исходное энергетическое состояние может быть достигнуто после длительного дополнительного отжига при конечной температуре.

На основе данных по зависимостям удельной потенциальной энергии наночастиц определены параметры гистерезиса (см. Таблицу 2). Анализ данных (см. рис. 2 и Таблицу 2) показывает, что, во-первых, для многокомпонентных наночастиц $Cu_{500}Au_{1500}Pt_{2000}Pd_{6000}$ различной морфологии фазовые переходы, отвечающие плавлению и кристаллизации идентифицируются в некотором температурном диапазоне и с ростом скорости термоиндуцированного воздействия его ширина $\Delta T = T_m^{start} - T_c^{start}$ увеличивается, этот факт во многом определяет возможные сценарии химической сегрегации в процессе плавления и последующего нагревания, а также химической и структурной сегрегации в процессе кристаллизации и последующего охлаждения [18, 27]. Во-вторых, не проявились существенные различия (по порядку величин) для идентифицируемых температур начала плавления и кристаллизации для двух принципиально различных начальных морфологий (см. рис. 1). Кроме того, зависимость величин температур начала плавления и кристаллизации от скорости термоиндуцированного воздействия имеет нелинейный характер, хотя для наночастиц золота согласно [28] предсказан рост значений температуры плавления при увеличении скорости нагрева.

Таблица 2. Параметры гистерезиса температур плавления и кристаллизации наночастиц $Cu_{500}Au_{1500}Pt_{2000}Pd_{6000}$ (определены по данным рис. 2, погрешность в серии составляет не более 10 К).

Система	dT/dt, К/пс	T_m^{start}, К	T_c^{start}, К	$\Delta T = T_m^{start} - T_c^{start}$, К
$Cu_{500}@Au_{1500}@Pt_{2000}@Pd_{6000}$	0,25	1146	796	350
	0,5	1164	806	358
	1	1150	725	425
$Cu_{500}-Au_{1500}-Pt_{2000}-Pd_{6000}$	0,25	1135	789	346
	0,5	1157	794	363
	1	1152	742	410

Для многокомпонентных наночастиц очевидно, что закономерности усложняются за счет различия в температурах плавления и кристаллизации компонентов, различия в поверхностных энергиях и размерном эффекте

соответственно [18, 27]. Аналогичный эффект наблюдался нами в работе [8]. Так была установлена зависимость температуры кристаллизации от скорости охлаждения для *CuAuPtPd* различного размера (содержащих от 400 до 4000 атомов) именно стехиометрического состава $CuAu_3Pt_4Pd_{12}$ и показано, что при увеличении скорости охлаждения температура кристаллизации снижается, а температурный интервал, в котором происходит кристаллизация, увеличивается, при этом скорость нагревания на температуру плавления существенным образом не влияет (хотя некоторый нелинейный эффект в [8] присутствует). В данном случае мы полагаем, что с ростом размера системы проявление нелинейных эффектов не является артефактом. По-видимому, пространственный масштаб (радиус наночастиц), на котором атомам компонентов необходимо перемещаться, проявляя ту или иную закономерность сегрегационного поведения, оказывает влияние и на характер плавления и кристаллизации. При увеличении скорости изменения температуры от 0,25 до 1 К/пс ширина температурного гистерезиса $\Delta T = T_m^{start} - T_c^{start}$ возрастает на 75 К для многооболочечной конфигурации и на 64 К для конфигурации с равномерным распределением компонентов. При сравнении данных, отвечающих типичному и высокоскоростному режимам термоиндуцированного воздействия, температура начала плавления изменяется лишь на 4 и 17 К, тогда как температура начала кристаллизации снижается на 71 и 47 К соответственно. Следовательно, расширение петли гистерезиса связано преимущественно с кинетическим запаздыванием кристаллизации при охлаждении.

Перейдем теперь к анализу закономерностей химической и структурной сегрегации. На рис. 3 и 4 представлены конечные атомные конфигурации и результаты идентификации локального окружения соответственно.

Из рис. 3 видно, что характер химической сегрегации сложно оценить только по визуализации конечных конфигураций. Визуально прослеживается выход атомов золота в приповерхностную область, однако достоверно определить химический состав поверхности и количественное соотношение компонентов позволяют только дополнительные расчёты и радиальные распределения плотности [29], представленные на рис. 5. Анализ локального окружения по данным рис. 4 показывает, что в конечных конфигурациях преобладают ГЦК- и ГПУ-структуры.

Если объединить ГЦК- и ГПУ-локальные окружения в общую долю плотноупакованных (close-packed sttructure) локальных структур f_{cps}, различия между двумя начальными морфологиями становятся значительно менее выраженными (см. Таблица 3).

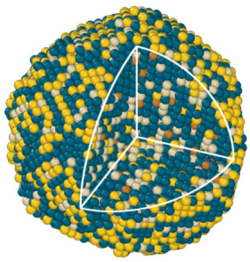
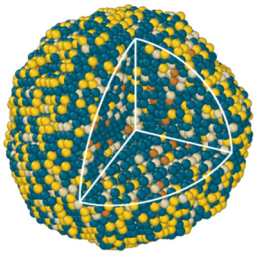
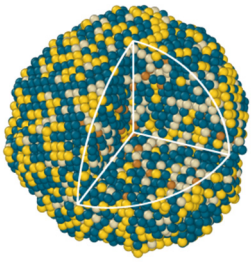
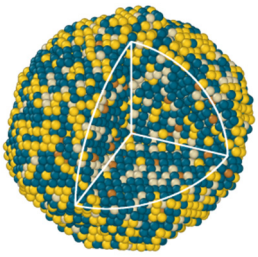
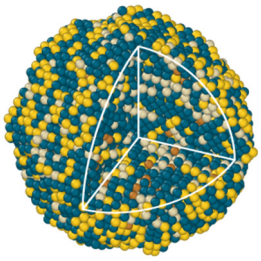
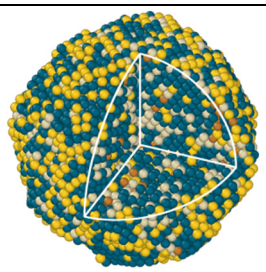
Тип начальной конфигурации	Скорость термоиндуцированного воздействия		
	0,25 К/пс	0,5 К/пс	1 К/пс
№ 1			
№ 2			

Рис. 3. Конечные конфигурации наночастиц $Cu_{500}Au_{1500}Pt_{2000}Pd_{6000}$ при различной начальной морфологии и различных скоростях термоиндуцированного воздействия.

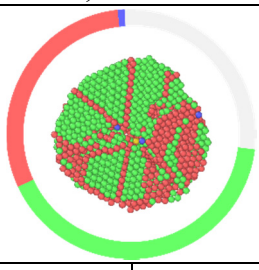
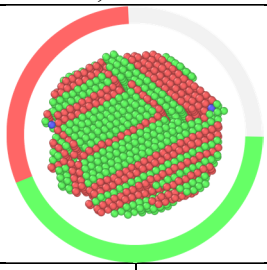
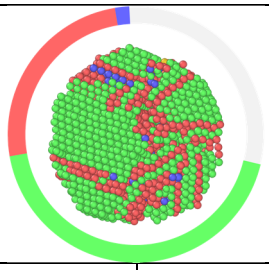
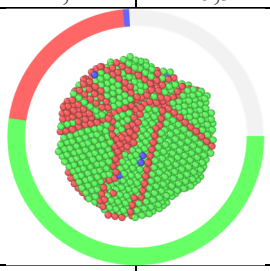
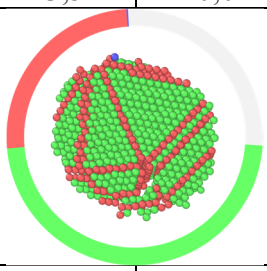
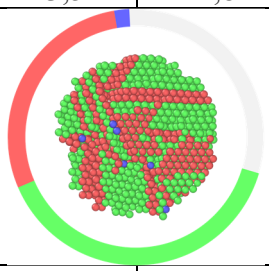
Тип начальной конфигурации	Скорость термоиндуцированного воздействия					
	0,25 К/пс		0,5 К/пс		1 К/пс	
№ 1						
	- 27,8%	- 30,2%	- 26,1%	- 30,3%	- 29,6%	- 25,1%
	- 41,1%	- 0,9%	- 43,5%	- 0,0%	- 43,5%	- 1,8%
№ 2						
	- 25,7%	- 21,0%	- 26,9%	- 25,4%	- 30,4%	- 28,7%
	- 52,5%	- 0,8%	- 47,5%	- 0,2%	- 39,0%	- 1,9%

Рис. 4. Соответствующие рис. 3 распределения по типам локального окружения в конечных конфигурациях наночастиц $Cu_{500}Au_{1500}Pt_{2000}Pd_{6000}$. Зелёным цветом обозначено локальное ГЦК-окружение, красным – ГПУ, синим – ОЦК, жёлтым – ядра икосаэдрической симметрии; светло-серый сектор диаграммы соответствует атомам с нераспознанным локальным окружением. При визуализации наночастиц нераспознанные атомы удалены. Доли менее 0,1% не оценивались.

При одинаковой скорости величина отличается не более чем на 2,2 процентного пункта (п.п.), хотя индивидуальные (с различными условиям МД эксперимента) доли ГЦК- и ГПУ-локальных окружений могут различаться существенно.

При скорости 0,25 К/пс конфигурация с равномерным распределением компонентов содержит на 11,4 п.п. больше ГЦК-окружений и на 9,2 п.п. меньше ГПУ-окружений, чем многооболочечная конфигурация. Следовательно, начальная морфология влияет преимущественно на распределение атомов между ГЦК- и ГПУ-окружениями, но значительно слабее – на суммарную долю плотноупакованных локальных структур. Наличие связи ГПУ-локальной структуры с дефектами упаковки требует дополнительного пространственного анализа их расположения. При скорости 1 К/пс величина составляет 68,6% для многооболочечной конфигурации и 67,7% для конфигурации с равномерным распределением компонентов. Одновременно сумма долей нераспознанных и ОЦК-окружений возрастает до 31,4 и 32,3% соответственно. Это указывает на менее выраженное плотноупакованное упорядочение конечных конфигураций при наиболее быстром термическом цикле.

Таблица 3. Доли ГЦК-, ГПУ- и плотноупакованных локальных окружений в конечных конфигурациях в процентах.

Скорость, К/пс	Конфигурация № 1			Конфигурация № 2			$\lvert\Delta f_{cps}\rvert$, п.п.
	ГЦК	ГПУ	f_{cps}	ГЦК	ГПУ	f_{cps}	
0,25	41,1	30,2	71,3	52,5	21,0	73,5	2,2
0,5	43,5	30,3	73,8	47,5	25,4	72,9	0,9
1	43,5	25,1	68,6	39,0	28,7	67,7	0,9

Пояснения к Таблице 3: $\lvert\Delta f_{cps}\rvert$ – абсолютное значение изменения доли плотноупакованных локальных структур между двумя начальными морфологиями при одинаковой скорости термоиндуцированного воздействия.

Анализируя данные рис. 5 можно сделать вывод о том, что характер химической сегрегации на поверхности наночастиц $Cu_{500}Au_{1500}Pt_{2000}Pd_{6000}$ различной начальной морфологии при различных скоростях термоиндуцированного воздействия практически не меняется. Что нельзя сказать о составе ядра. Для первой конфигурации при типичной для МД моделирования скорости охлаждения (0,25 К/пс) палладий доминирует в ядре, далее увеличение скорости охлаждения до 0,5 К/пс приводит к смешанному составу ядра (медь, платина) с постепенным вытеснением атомов палладия. При скорости охлаждения 1 К/пс золото вытесняет платину из ядра, а медь все еще присутствует в ядре. Вторая конфигурация при типичной для МД моделирования скорости охлаждения (0,25 К/пс) и для медианного скоростного режима (0,5 К/пс) содержит смешанное по

составу ядро (присутствуют все компоненты). Увеличение скорости охлаждения до 1 К/пс приводит к вытеснению атомов палладия и замещением их атомами платины. Кроме того, для количественного анализа поверхностной сегрегации было определено число поверхностных атомов каждого компонента. В Таблице 4 приведены количество поверхностных атомов и их доля относительно полного числа атомов соответствующего компонента. Эти значения характеризуют склонность отдельных компонентов к выходу на поверхность, но не отражают химический состав самой поверхности. Поэтому дополнительно был рассчитан нормированный состав поверхности, представленный в Таблице 5.

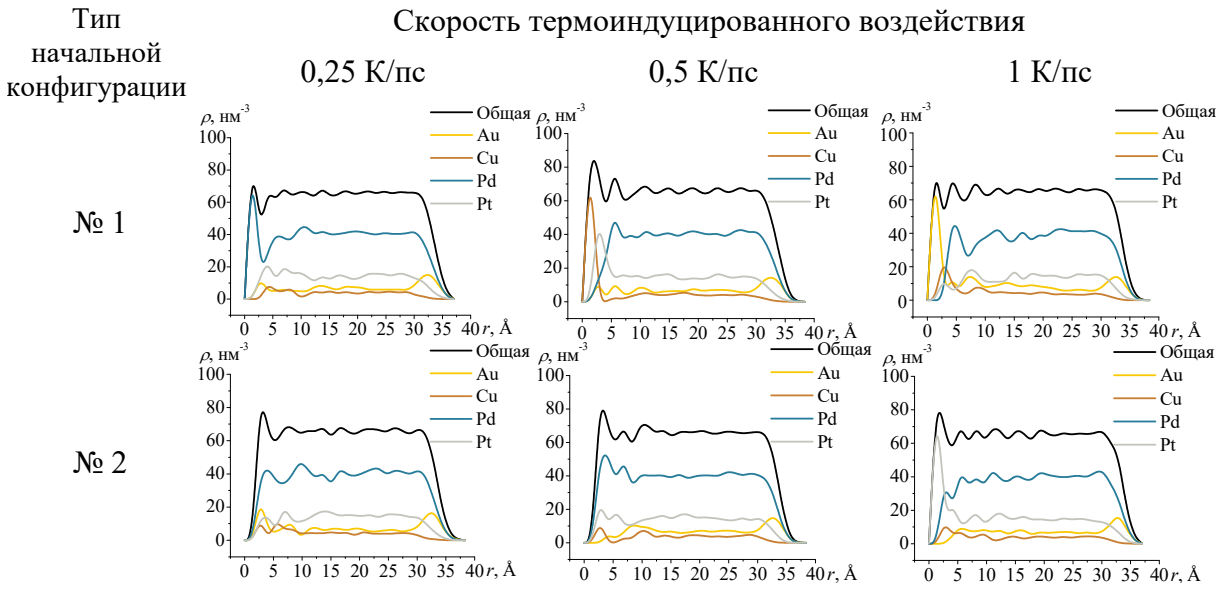


Рис. 5. Радиальные распределения плотностей компонентов в конечных конфигурациях наночастиц $Cu_{500}Au_{1500}Pt_{2000}Pd_{6000}$ при различной начальной морфологии и различных скоростях термоиндуцированного воздействия.

Таблица 4. Доля атомов каждого компонента, расположенных на поверхности η_i в процентах в конечных конфигурациях наночастиц $Cu_{500}Au_{1500}Pt_{2000}Pd_{6000}$ при различной начальной морфологии и различных скоростях термоиндуцированного воздействия.

Тип	Скорость термоиндуцированного воздействия											
	0,25 К/пс				0,5 К/пс				1 К/пс			
	Cu	*Au*	*Pt*	*Pd*	*Cu*	*Au*	*Pt*	*Pd*	*Cu*	*Au*	*Pt*	*Pd*
№ 1	1,60	50,87	10,15	17,60	2,80	51,00	10,45	17,30	1,00	46,13	10,35	18,82
№ 2	1,80	52,73	9,35	17,17	1,60	48,80	10,55	17,30	2,00	48,73	10,45	17,82

Пояснения к Таблице 4: $\eta_i = N_i^{surf} / N_i^{total} \cdot 100\%$, где N_i^{surf} – число поверхностных атомов данного компонента, N_i^{total} – полное число атомов данного компонента. Отметим, что величина $\sum_{i=1}^{4} \eta_i$ не нормирована на 100%.

В исследованных тетрарных наночастицах $Cu_{500}Au_{1500}Pt_{2000}Pd_{6000}$ общее количество поверхностных атомов составляет 2017-2049 (т.е. 20,17-20,49% всех атомов наночастицы). На поверхности находится 46,13-52,73% всех атомов Au, что свидетельствует об их наиболее выраженной склонности к поверхностной сегрегации. Вместе с тем основным компонентом поверхности остаётся Pd с содержанием 51,07-55,53 ат.%; доля Au составляет 34,04-39,22 ат.%, Pt – 9,27-10,35 ат.%, Cu – 0,25-0,69 ат.%. По сравнению с исходным составом поверхность обогащена золотом приблизительно в 2,3-2,6 раза и обеднена медью и платиной. Палладий сохраняет количественное преобладание вследствие его высокого содержания в наночастице. При одинаковой скорости различия между двумя начальными конфигурациями не превышают 2,6 п.п., а общей монотонной зависимости состава поверхности от скорости охлаждения не наблюдается. Таким образом, начальная морфология и скорость охлаждения не изменяют общего характера сегрегации: доли поверхностных атомов распределены по закону $Pd > Au > Pt > Cu$.

Таблица 5. Химический состав поверхности x_i^{surf} в процентах в конечных конфигурациях наночастиц $Cu_{500}Au_{1500}Pt_{2000}Pd_{6000}$ при различной начальной морфологии и различных скоростях термоиндуцированного воздействия.

Тип	Скорость термоиндуцированного воздействия											
	0,25 К/пс				0,5 К/пс				1 К/пс			
	Cu	*Au*	*Pt*	*Pd*	*Cu*	*Au*	*Pt*	*Pd*	*Cu*	*Au*	*Pt*	*Pd*
№ 1	0,39	37,59	10,00	52,02	0,69	37,76	10,32	51,23	0,25	34,04	10,18	55,53
№ 2	0,45	39,22	9,27	51,07	0,39	35,72	10,30	53,59	0,50	36,21	10,35	52,95

Пояснения к Таблице 5: $x_i^{surf} = N_i^{surf} \Big/ \Sigma N_j^{surf} \cdot 100\%$, где N_i^{surf} – число поверхностных атомов данного компонента, ΣN_i^{surf} – полное число атомов поверхности наночастицы. Значения округлены до 0,01 ат.%, сумма округлённых значений может отличаться от 100,00 на 0,01 п.п.

4. Заключение

В работе установлено, что фазовые переходы в наночастицах стехиометрического состава $CuAu_3Pt_{12}Pd_4$, содержащих 10 000 атомов, слабо зависят от начальной морфологии. При увеличении скорости температурного цикла от 0,25 до 1 К/пс ширина гистерезиса возрастает на 75 К для многооболочечной конфигурации и на 64 К для конфигурации с равномерным распределением компонентов. При этом температура начала плавления изменяется лишь на 4 и 17 К, тогда как температура начала кристаллизации снижается на 71 и 47 К соответственно. Следовательно, расширение петли гистерезиса обусловлено преимущественно кинетическим запаздыванием кристаллизации. При скоростях 0,25 и 0,5 К/пс конечные значения удельной потенциальной энергии близки к

исходным, тогда как при 1 К/пс система не успевает полностью восстановить первоначальное энергетическое состояние.

Начальная морфология влияет главным образом на соотношение ГЦК- и ГПУ-окружений, но значительно слабее – на суммарную долю плотноупакованных структур. При одинаковой скорости различие этой доли между конфигурациями не превышает 2,2 п.п. При повышении скорости до 1 К/пс суммарное содержание ГЦК- и ГПУ-окружений снижается до 68,6% для многооболочечной конфигурации и до 67,7% для конфигурации с равномерным распределением компонентов, что свидетельствует о менее полном формировании плотноупакованного порядка при быстром охлаждении.

Наиболее выраженную склонность к поверхностной сегрегации проявляют атомы Au : на поверхности находится 46,13-52,73% всех атомов золота. Вместе с тем вследствие высокой исходной концентрации основным компонентом поверхности остаётся Pd , содержание которого составляет 51,07-55,53 ат.%, тогда как доля Au равна 34,04-39,22 ат.%. По сравнению с исходным составом поверхность обогащена золотом приблизительно в 2,3-2,6 раза и обеднена медью и платиной. При одинаковой скорости различия в составе поверхности между двумя начальными конфигурациями не превышают 2,6 п.п.; общей монотонной зависимости от скорости охлаждения не обнаружено.

Таким образом, скорость температурного цикла определяет прежде всего полноту кристаллического упорядочения и величину гистерезиса, тогда как начальная морфология влияет преимущественно на распределение атомов между ГЦК- и ГПУ-окружениями. После цикла нагревания и охлаждения обе начальные конфигурации характеризуются близкими суммарными долями плотноупакованных структур и сходным характером поверхностной сегрегации, однако принципиальные различия сегрегационного поведения проявляются в ядре наночастиц $Cu_{500}Au_{1500}Pt_{2000}Pd_{6000}$.

Исследования выполнены при поддержке Минобрнауки РФ в рамках выполнения государственного задания в сфере научной деятельности (проект № 0817-2026-0006).

Библиографический список:

1. **Самсонов, В.М.** Нанотермодинамика на примере металлических наночастиц / В.М. Самсонов, С.А. Васильев, И.В. Талызин и др. // Журнал физической химии. – 2023. – Т. 97. – № 8. – С. 1167-1177. DOI: 10.31857/S004445372308023X.

2. **Ferrando, R.** Nanoalloys: from theory to applications of alloy clusters and nanoparticles / R. Ferrando, J. Jellinek, R.L. Johnston // Chemical Reviews. – 2008. – V. 108. – I. 3. – P. 845-910. DOI: 10.1021/cr040090g.

3. **Dahale, C.** Surface segregation in AgAuCuPdPt high entropy alloy: insights from molecular simulations / C. Dahale, S. Srinivasan, S. Mishra et al. // Molecular Systems Design & Engineering. – 2022. – V. 7. – I. 8. – P. 878-888. DOI: 10.1039/D2ME00045H.

4. **Tang, Z.** Facile aqueous-phase synthesis of Ag-Cu-Pt-Pd quadrometallic nanoparticles / Z. Tang, B.C. Yeo, S.S. Han et al. // Nano Convergence. – 2019. – V. 6. – Art. no. 38. – 7 p. DOI: 10.1186/s40580-019-0208-z.

5. **Lu, X.-Z.** Structural optimization and segregation behavior of quaternary alloy nanoparticles based on simulated annealing algorithm / X.-Z. Lu, G.-F. Shao, L.-Y. Xu et al. // Chinese Physics B. – 2016. – V. 25. – № 5. – P. 053601-1-053601-8. DOI: 10.1088/1674-1056/25/5/053601.
6. **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.
7. **Колосов, А.Ю.** Сценарии структурообразования в четырехкомпонентных наночастицах: атомистическое моделирование / А.Ю. Колосов, К.Г. Савина, С.А. Вересов и др. // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2023. – Вып. 15. – С. 432-443. DOI: 10.26456/pcascnn/2023.15.432.
8. **Колосов, А.Ю.** Размерный эффект в четырехкомпонентных наночастицах Au-Cu-Pd-Pt и их стабильность / А.Ю. Колосов, С.А. Вересов, С.В. Серов и др. // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2024. – Вып. 16. – С. 361-372. DOI: 10.26456/pcascnn/2024.16.361.
9. **Серов, С.В.** Структурные превращения в четырехкомпонентных наносплавах Cu–Au–Pt–Pd различной морфологии при последовательных термоиндуцированных циклах / С.В. Серов, Н.И. Непша, А.Ю. Колосов и др. // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2025. – Вып. 17. – С. 466-484. DOI: 10.26456/pcascnn/2025.17.466.
10. **Eom, N.** General trends in core-shell preferences for bimetallic nanoparticles / N. Eom, M.E. Messing, J. Johansson et al. // ACS Nano. – 2021. – V. 15. – I. 5. – P. 8883-8895. DOI: 10.1021/acsnano.1c01500.
11. **Samsonov, V.M.** On the problem of stability/instability of bimetallic core-shell nanostructures: molecular dynamics and thermodynamic simulations / V.M. Samsonov, I.V. Talyzin, A.Yu. Kartoshkin et al. // Computational Materials Science. – 2021. – V. 199. – Art. no. 110710. – 11 p. DOI: 10.1016/j.commatsci.2021.110710.
12. **Bochicchio, D.** Morphological instability of core-shell metallic nanoparticles / D. Bochicchio, R. Ferrando // Physical Review B. – 2013. – V. 87. – I. 16. – P. 165435-1-165435-13. DOI: 10.1103/PhysRevB.87.165435.
13. **Shibuta, Y.** A molecular dynamics study of cooling rate during solidification of metal nanoparticles / Y. Shibuta, T. Suzuki // Chemical Physics Letters. – 2011. – V. 502. – I. 1-3. – P. 82-86. DOI: 10.1016/j.cplett.2010.12.020.
14. **Van Dung, M.** Heating-rate and size-dependent melting, structural disorder, and diffusion in Au–Cu alloys: a molecular dynamics study / M. Van Dung // Physical Chemistry Chemical Physics. – 2026. – V. 28. – I. 11. – P. 6800-6810. DOI: 10.1039/D5CP04851F.
15. **Liu, H.B.** Structural transformation of Au–Pd bimetallic nanoclusters on thermal heating and cooling: a dynamic analysis / H.B. Liu, U. Pal, R. Perez, J.A. Ascencio // The Journal of Physical Chemistry B. – 2006. – V. 110. – I. 11. – P. 5191-5195. DOI: 10.1021/jp056060e.
16. **Cuba-Supanta, G.** The composition effect on the structural and thermodynamic properties of Cu–Ag–Au ternary nanoalloys: a study via molecular dynamics approach / G. Cuba-Supanta, P. Amao, F. Quispe-Huaynasi et al. // Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering. – 2024. – V. 32. – I. 4. – Art. № 045003. – 22 p. DOI: 10.1088/1361-651X/ad332f.
17. **Yıldırım, H.** Heating rate effects for the melting transition of Pt–Ag–Au nanoalloys / H. Yıldırım, A.K. Garip // Chinese Physics B. – 2021. – V. 30. – I. 10. – P. 108201-1-108201-7. DOI: 10.1088/1674-1056/abee09.
18. **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.
19. **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.
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. **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.
22. **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.
23. **Ackland, G.J.** Applications of local crystal structure measures in experiment and simulation / G.J. Ackland, A.P. Jones // Physical Review B. – 2006. – V. 73. – I. 5. – P. 054104-1-054104-7. DOI:

10.1103/PhysRevB.73.054104.
24. **Polak, W.Z.** Efficiency in identification of internal structure in simulated monoatomic clusters: comparison between common neighbor analysis and coordination polyhedron method / W.Z. Polak // Computational Materials Science. – 2022. – V. 201. – Art. № 110882. – 8 p. DOI: 10.1016/j.commatsci.2021.110882.
25. **Larsen, P.M.** Robust structural identification via polyhedral template matching / 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.
26. **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.
27. **Safaltin, Ş.** Molecular dynamics simulation of size, temperature, heating and cooling rates on structural formation of Ag-Cu-Ni ternary nanoparticles (Ag_{34}-Cu_{33}-Ni_{33}) / S. Safaltin, S. Gürmen // Computational Materials Science. – 2020. – V. 183. – Art. № 109842. – 12 p. DOI: 10.1016/j.commatsci.2020.109842.
28. **Chen, J.** Heating-rate and particle-size effects on melting process of Au nanoparticles / J. Chen, X. Fan, J. Liu et al. // The Journal of Physical Chemistry C. – 2020. – V. 124. – I. 13. – P. 7414-7420. DOI: 10.1021/acs.jpcc.9b10769.
29. **Талызин, И.В.** Идентификация сложных наноструктур ядро-оболочка по радиальным распределениям локальной плотности компонентов / И.В. Талызин, В.М. Самсонов, С.С. Богданов и др. // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2022. – Вып. 14. – С. 307-320. DOI: 10.26456/pcascnn/2022.14.307.

References:

1. Samsonov V.M., Vasilev S.A., Talyzin I.V. et al. Nanothermodynamics on the example of metallic nanoparticles, *Russian Journal of Physical Chemistry A*, 2023, vol. 97, issue 8, pp. 1751-1760. DOI: 10.1134/S003602442308023X.
2. Ferrando R., Jellinek J., Johnston R.L. Nanoalloys: from theory to applications of alloy clusters and nanoparticles, *Chemical Reviews*, 2008, vol. 108, issue 3, pp. 845-910. DOI: 10.1021/cr040090g.
3. Dahale C., Srinivasan S., Mishra S. et al. Surface segregation in AgAuCuPdPt high entropy alloy: insights from molecular simulations, *Molecular Systems Design & Engineering*, 2022, vol. 7, issue 8, pp. 878-888. DOI: 10.1039/D2ME00045H.
4. Tang Z., Yeo B.C., Han S.S. et al. Facile aqueous-phase synthesis of Ag–Cu–Pt–Pd quadrometallic nanoparticles, *Nano Convergence*, 2019, vol. 6, art. no. 38, 7 p. DOI: 10.1186/s40580-019-0208-z.
5. Lu X.-Z., Shao G.-F., Xu L.-Y. et al. Structural optimization and segregation behavior of quaternary alloy nanoparticles based on simulated annealing algorithm, *Chinese Physics B*, 2016, vol. 25, no. 5, pp. 053601-1-053601-8. DOI: 10.1088/1674-1056/25/5/053601.
6. Veresov S.A., Savina K.G., Veselov A.D. et al. K voprosu izucheniya protsessov strukturoobrazovaniya v chetyrekhkomponentnykh nanochastitsakh [To the problem of studying structure formation processes in quaternary 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).
7. Kolosov A.Yu., Savina K.G., Veresov S.A. et al. Stsenarii strukturoobrazovaniya v chetyrekhkomponentnykh nanochastitsakh: atomisticheskoe modelirovanie [Structure formation scenarios in quaternary nanoparticles: atomistic simulation], *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov [Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials]*, 2023, issue 15, pp. 432-443. DOI: 10.26456/pcascnn/2023.15.432. (In Russian).
8. Kolosov A.Yu., Veresov S.A., Serov S.V. et al. Razmernyi effekt v chetyrekhkomponentnykh nanochastitsakh Au–Cu–Pd–Pt i ikh stabil'nost' [Size effect in quaternary Au–Cu–Pd–Pt nanoparticles and their stability], *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov [Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials]*, 2024, issue 16, pp. 361-372. DOI: 10.26456/pcascnn/2024.16.361. (In Russian).
9. Serov S.V., Nepsha N.I., Kolosov A.Yu. et al. Strukturnye prevrashcheniya v chetyrekhkomponentnykh nanosplavakh Cu–Au–Pt–Pd razlichnoi morfologii pri posledovatelnykh termoindutsirovannykh tsiklakh [Structural transformations in quaternary Cu–Au–Pt–Pd nanoalloys of different morphology under successive thermally induced cycles], *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov [Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials]*, 2025, issue 17, pp. 466-484. DOI: 10.26456/pcascnn/2025.17.466. (In Russian).

10. Eom N., Messing M.E., Johansson J. et al. General trends in core–shell preferences for bimetallic nanoparticles, *ACS Nano*, 2021, vol. 15, issue 5, pp. 8883-8895. DOI: 10.1021/acsnano.1c01500.
11. Samsonov V.M., Talyzin I.V., Kartoshkin A.Yu. et al. On the problem of stability/instability of bimetallic core-shell nanostructures: molecular dynamics and thermodynamic simulations, *Computational Materials Science*, 2021, vol. 199, art. no. 110710, 11 p. DOI: 10.1016/j.commatsci.2021.110710.
12. Bochicchio D., Ferrando R. Morphological instability of core-shell metallic nanoparticles, *Physical Review B*, 2013, vol. 87, issue 16, pp. 165435-1-165435-13. DOI: 10.1103/PhysRevB.87.165435.
13. Shibuta Y., Suzuki T. A molecular dynamics study of cooling rate during solidification of metal nanoparticles, *Chemical Physics Letters*, 2011, vol. 502, issues 1–3, pp. 82-86. DOI: 10.1016/j.cplett.2010.12.020.
14. Van Dung M. Heating-rate and size-dependent melting, structural disorder, and diffusion in Au–Cu alloys: a molecular dynamics study, *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2026, vol. 28, issue 11, pp. 6800-6810. DOI: 10.1039/D5CP04851F.
15. Liu H.B., Pal U., Perez R., Ascencio J.A. Structural transformation of Au–Pd bimetallic nanoclusters on thermal heating and cooling: a dynamic analysis, *The Journal of Physical Chemistry B*, 2006, vol. 110, issue 11, pp. 5191-5195. DOI: 10.1021/jp056060e.
16. Cuba-Supanta G., Amao P., Quispe-Huaynasi F. et al. The composition effect on the structural and thermodynamic properties of Cu–Ag–Au ternary nanoalloys: a study via molecular dynamics approach, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2024, vol. 32, issue 4, art. no. 045003, 22 p. DOI: 10.1088/1361-651X/ad332f.
17. Yıldırım H., Garip A.K. Heating rate effects for the melting transition of Pt–Ag–Au nanoalloys, *Chinese Physics B*, 2021, vol. 30, issue 10, pp. 108201-1-108201-7. DOI: 10.1088/1674-1056/abee09.
18. 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).
19. Sdobnyakov N.Yu., Kolosov A.Yu., Sokolov D.N., Savina K.G. *MDSym.* Certificate RF, no. 2025683621, 2025. (In Russian).
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. 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.
22. 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.
23. Ackland G.J., Jones A.P. Applications of local crystal structure measures in experiment and simulation, *Physical Review B*, 2006, vol. 73, issue 5, pp. 054104-1-054104-7. DOI: 10.1103/PhysRevB.73.054104
24. Polak W.Z. Efficiency in identification of internal structure in simulated monoatomic clusters: comparison between common neighbor analysis and coordination polyhedron method, *Computational Materials Science*, 2022, vol. 201, art. no. 110882, 8 p. DOI: 10.1016/j.commatsci.2021.110882.
25. Larsen P.M., Schmidt S., Schiøtz J. Robust structural identification via polyhedral template matching, *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.
26. 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.
27. Safaltin Ş., Gürmen S. Molecular dynamics simulation of size, temperature, heating and cooling rates on structural formation of Ag-Cu-Ni ternary nanoparticles (Ag_{34}-Cu_{33}-Ni_{33}), *Computational Materials Science*, 2020, vol. 183, art. no. 109842, 12 p. DOI: 10.1016/j.commatsci.2020.109842.
28. Chen J., Fan X., Liu J. et al. Heating-rate and particle-size effects on melting process of Au nanoparticles, *The Journal of Physical Chemistry C*, 2020, vol. 124, issue 13, pp. 7414-7420. DOI: 10.1021/acs.jpcc.9b10769.
29. Talyzin I.V., Samsonov V.M., Bogdanov S.S. et al. Identifikatsiya slozhnykh nanostruktur yadro-obolochka po radialnym raspredeleniyam lokalnoj plotnosti komponentov [Identification of complex core-shell nanostructures from the radial distributions of the local density of components], *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov [Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials]*, 2022, issue 14, pp. 307-320. DOI: 10.26456/pcascnn/2022.14.307. (In Russian).