УДК 539.21 *Оригинальная статья*

Коалесценция и спекание в тернарной наносистеме Pt+Cu+Pd: молекулярно-динамическое моделирование

В.В. Пуйтов, В.М. Самсонов, С.А. Васильев
ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»
170002, Россия, Тверь, Садовый пер., 35
samsonoff@inbox.ru

DOI: 10.26456/pcascnn/2026.18.455

Аннотация: С использованием программы LAMMPS и метода погруженного атома осуществлено молекулярно-динамическое моделирование спекания и коалесценции в системе из трёх монометаллических наночастиц (Pd_{1700} + Cu_{5100} + Pt_{1700}), центры масс которых располагались на одной прямой линии, в процессе равномерного нагрева системы до температуры 2300 К, отвечающей дочерней нанокапле, и последующего охлаждения (закалки) тернарной нанокапли до исходной температуры 300 К. Установлено, что в результате низкотемпературного спекания (нагрева до 500-900 К) формируется тернарный аналог Янус-структуры, а в результате затвердевания нанокапли – тернарный нанокристалл. Найдены и проанализированы температурные зависимости радиальных распределений атомных долей компонентов. Установлено, что как в процессе спекания твердых наночастиц, так и в процессе охлаждения (закалки) нанокапли имеет место переход атомов *Pd* в наружный атомный монослой, тогда как в ходе затвердевания нанокапли атомы *Pt* сегрегируют только ко второму от поверхности монослою и к центру наночастицы. Помимо химической сегрегации, т.е. пространственного разделения компонентов, в затвердевших нанокаплях наблюдалась структурная сегрегация, т.е. разделение на зёрна в виде полос с дефектной ГЦК структурой. Эти полосы отделены друг от друга границами, представленными атомами, идентифицированными программой Ovito как локальная ГПУ структура.

Ключевые слова: молекулярная динамика, LAMMPS, метод погруженного атома, спекание, коалесценция, поверхностная сегрегация

Пуйтов Владимир Владимирович – лаборант Управления научных исследований ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»
Самсонов Владимир Михайлович – д.ф.-м.н., профессор кафедры общей физики ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»
Васильев Сергей Александрович – к.ф.-м.н., доцент кафедры прикладной физики, ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Original paper

Coalescence and sintering in a ternary nanosystem Pt+Cu+Pd: molecular dynamics simulation

V.V. Puytov, V.M. Samsonov, S.A. Vasilyev
Tver State University, Tver, Russia

DOI: 10.26456/pcascnn/2026.18.455

Abstract: Using the LAMMPS soft-ware and the embedded atom method, molecular dynamics simulation has been performed of sintering and coalescence in a system of three monometallic nanoparticles (Pd_{1700} + Cu_{5100} + Pt_{1700}), whose centers of mass were located on the same straight line. The process was carried out during uniform heating of the system up to a temperature of 2300 K, corresponding to the daughter nanodroplet, and subsequent cooling (quenching) it to the initial temperature of 300 K. We found that as a result of low-temperature sintering (heating to 500-900 K), a ternary analogue of the Janus structure was formed. Solidification of the nanodroplet resulted in the ternary nanocrystal formation. Temperature dependences of radial distributions of atomic fractions of the components were found and analyzed. It was established that during both sintering solid nanoparticles and cooling (quenching) nanodroplets, *Pd* atoms migrate to the outer atomic monolayer, whereas in solidified nanodroplets, *Pt* atoms have segregated toward the second monolayer and the center of the nanoparticle. In addition to chemical segregation, i.e., the spatial separation of components, structural segregation was observed in the solidified nanodroplets. This segregation

© В.В. Пуйтов, В.М. Самсонов, С.А. Васильев, 2026

yields grains in the form of bands with a defective fcc structure, separated from each other by boundaries represented by atoms identified by the Ovito program as a local hcp structure.
Keywords: LAMMPS, molecular dynamics, embedded atom potential, sintering, coalescence, surface segregation.

Vladimir V. Puytov – Laboratory Assistant, Management of Scientific Research, Tver State University, ORCID: 0009-0008-6947-6847
Vladimir M. Samsonov – Dr. Sc., Full Professor, General Physics Department, Tver State University, ORCID: 0000-0003-2929-8069
Sergey A. Vasilyev – Ph. D., Docent, Department of Applied Physics, Tver State University, ORCID: 0000-0002-4918-8855

Поступила в редакцию/received: 19.07.2026; после рецензирования/revised: 30.08.2026; принята/accepted: 04.09.2026.

1. Введение и постановка задачи

Обычно коалесценцией называют процесс слияния капель с образованием дочерней капли большего размера, а спеканием – процесс образования агломерата из двух и более твердых частиц. Применительно к наночастицам процессы коалесценции и спекания четко не дифференцируются, хотя попытка такой дифференциации была предпринята в наших работах [1-3]. Нами было показано, что достаточно чёткое разграничение между процессами коалесценции металлических нанокапель и спекания твёрдых наночастиц возможно только при низких температурах, т.е. по крайней мере на 10 К ниже по сравнению с температурой плавления спекаемых наночастиц. Было также показано, что коалесценцию нанокапель можно рассматривать как быстро протекающее гидродинамическое явление: после формирования контакта между нанокаплями, их сближение и образование соединяющей их шейки, а также сфероизация происходят за характерное время менее 1 нс даже для достаточно крупных мономеров (исходных нанокапель), состоящих из 30000 атомов. В свою очередь, спекание твердых наночастиц (при температурах много меньших температуры плавления) является более медленным и многоплановым явлением, зависящим от многих факторов, включая температуру, форму наночастиц и их взаимную ориентацию. В компьютерных [1-6] и прямых [7-10] экспериментах низкотемпературное спекание завершалось формированием гантелеобразного монокристалла или двухзёренного кристалла. В частности, при температуре $T = 300$ К в наших молекулярно-динамических (МД) экспериментах [1-4] наблюдалось образование дочерних наночастиц гантелеобразной формы, которые практически не эволюционировали в течение 1-2 мкс. При более высоких температурах мы наблюдали формирование нанокристаллов в форме эллипсоидов, а в окрестности температуры плавления наблюдалось бифуркационное поведение системы из двух металлических наночастиц: одним и тем же термодинамическим и геометрическим характеристикам исходной системы из двух металлических наночастиц с определенной

вероятностью может отвечать как спекание, завершающееся формированием гантелеобразного нанокристалла, так и коалесценция, т.е. полное слияние наночастиц с образованием дочерней нанокапли [11].

Приведенные выше ссылки относятся к коалесценции и спеканию в монометаллических наносистемах. На протяжении последнего десятилетия повышенный интерес стал проявляться к коалесценции и спеканию в биметаллических наносистемах [12-17]. Например, в работе [14] было осуществлено МД моделирование синтеза наночастиц $Ni-Pt$ путём спекания наночастиц Ni и Pt. Особое внимание было уделено взаимосвязи между закономерностями спекания и эффектом понижения температуры плавления с уменьшением размера наночастиц. В работе [15] спекание наночастиц Ag и Cu интерпретировалось как модель, механизм аддитивной технологии. С использованием МД авторы моделировали спекание наночастиц Ag и Cu одинакового и различного размера с разориентацией (наклоном, скручиванием).

Переход к многокомпонентным наносплавам существенно расширяет вариативность как их свойств, так и областей практического применения. В работе [18] обсуждается проблема получения многокомпонентных сплавов с использованием спекания, и примечательно, что данная работа сочетает обсуждение методологических аспектов указанной проблемы, эксперимент и вычислительную термодинамику. Порошковое спекание – это низкоэнергетический метод обработки порошков, позволяющий получать изделия заданной формы. В соответствии с точкой зрения авторов указанной работы, инновационные технологии получения сплавов с контролируемой конечной микроструктурой следует проектировать на основе принципов материаловедения, позволяющих быстро спекать порошки при более низких температурах. Очевидно, это в полной мере относится и к спеканию нанопорошков.

К настоящему времени имеются лишь единичные работы, включая работу [19], которые посвящены атомистическому моделированию коалесценции и спекания в многокомпонентных системах (в данном случае – в четырёхкомпонентной). Исследования, связанные с атомистическим моделированием коалесценции и спекания в бинарных и многокомпонентных наносистемах, можно подразделить на два направления: 1) моделирование коалесценции и спекания монометаллических наночастиц, представленных различными металлами; 2) моделирование коалесценции и спекания бинарных и многокомпонентных наночастиц.

Работа [19] отвечает второму направлению, а данное исследование – первому. Поводом для него послужила наша недавняя работа [20],

посвященная МД моделированию сегрегации компонентов в ходе нагрева и последующего охлаждения тернарных наночастиц $Pt-Pd-Cu$ с исходным однородным распределением компонентов. Вполне естественно, что формирование тернарных наноструктур $Pt-Pd-Cu$ с использованием спекания и коалесценции монометаллических наночастиц Pt, Pd, и Cu также представляет интерес как с научной, так и с прикладной точек зрения. Следуя нашей работе [21], в наших МД экспериментах мы воспроизвели неизотермическое спекание наночастиц, т.е. спекание твердых наночастиц и последующий нагрев нанокапель в условиях равномерного повышения температуры от 300 К до температуры 2300 К, заведомо превышающей температуры плавления как компонентов, так и моделируемых наночастиц. После нагрева тернарные нанокапли $Pt_{1700}Pd_{1700}Cu_{5100}$ равномерно охлаждались (закалялись) до исходной температуры.

2. Метод моделирования

Для МД моделирования мы использовали метод погруженного атома (embedded atom method, EAM) и известную открытую программу LAMMPS [22]. При моделировании коалесценции и спекания использовались параметризации, предложенные в работе [23]. Точнее, в [23] предложены параметризации для 16 металлов, а также алгоритм, позволяющий рассчитывать параметризации любых перекрестных взаимодействий $A-B$ по параметризациям $A-A$ и $B-B$. Авторы работы [23] отмечают, что эти потенциалы хорошо воспроизводят основные свойства металлов и сплавов: постоянные решетки, упругие постоянные, объемные модули, энергии образования вакансий и энергии сублимации, а также теплоты растворения.

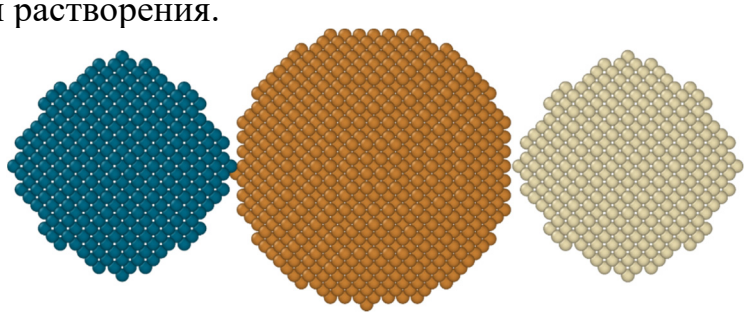

Рис. 1. Центральное сечение начальной МД-конфигурации: сине-зелёные сферы отвечают атомам Pd, коричневые – атомам Cu, светло-серые – атомам Pt.

В наших МД экспериментах мы использовали изотермическую МД и термостат Нозе-Гувера. Система из трех наночастиц помещалась в центр ячейки моделирования. Периодические граничные условия не использовались, поскольку в них нет необходимости. При этом система из трех монометаллических наночастиц занимала небольшую часть объема ячейки моделирования. На рис. 1 представлена исходная конфигурация

системы $Pt_{1700}+Pd_{1700}+Cu_{5100}$, отвечающая отрелаксированным фрагментам ГЦК решетки.

3. Результаты и обсуждение

Контакт между наночастицами устанавливается за очень малое время порядка 1 пс. На рис. 2-4 представлены как конфигурации («снимки») наночастиц, так и радиальные (по отношению к центру масс системы из трех спекаемых частиц) распределения атомных (мольных) долей компонентов n_i. Как показывают эти рисунки, в процессе спекания твёрдых наночастиц формируется дочерняя твёрдая наночастица, которую можно рассматривать как тернарный аналог Янус-структуры. Наглядно такую структуру демонстрирует рис. 2. Примечательно, что хотя исходные наночастицы *Pt* и *Pd* имели один и тот же размер и располагались на том же расстоянии от центральной частицы *Cu*, распределения $n_1(r)$ и $n_3(r)$ заметно различаются. В соответствии с этими распределениями, атомы *Pd* в среднем удалены от центра масс на большее расстояние, тогда как при этой температуре (900 К) заметно проявляется тенденция к диффузии атомов *Pt* в наночастицу *Cu*. Интересно также, что смачивающие слои *Cu* начинают обволакивать частицы *Pt* и *Pd*, т.е. начинает проявляться эффект смачивания в твердом состоянии [24, 25].

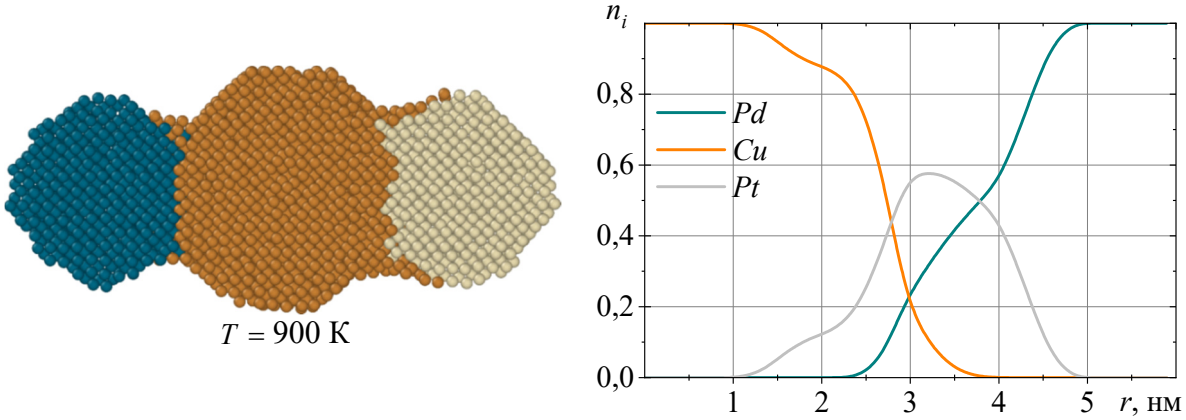

Рис. 2. Конфигурация моделируемой системы в момент времени $t=1{,}5$ нс (левая панель) и радиальные распределения мольных долей компонентов (правая панель).

Рис. 3 отвечает температуре $T=1300$ К, которая близка к температуре плавления объёмной фазы *Cu* (1356 К [26]). Соответственно, практически вся дочерняя наночастица, за исключением ГЦК «островка» (кластера) из атомов *Pd*, находится в расплавленном состоянии, что подтверждает результат CNA анализа с использованием программы Ovito [27]. Состоянию, отвечающему этому рисунку, предшествовало погружение наночастиц *Pd* и *Pt* в нанокаплю *Cu*. Менее выраженная диффузия атомов *Pd* в *Cu* (по сравнению с *Pt*) объясняется, очевидно, тенденцией к поверхностной сегрегации атомов *Pd*.

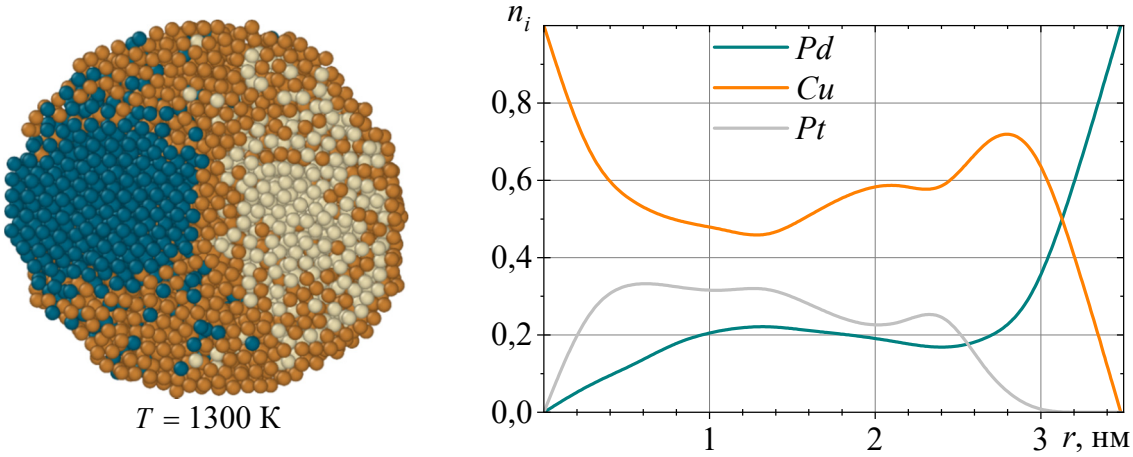

Рис. 3. Конфигурация моделируемой системы в момент времени $t = 2{,}5$ нс (левая панель) и радиальные распределения мольных долей компонентов (правая панель).

Рис. 4 соответствует полностью расплавленной дочерней наночастице, в которой, тем не менее, сохранилась некоторая асимметрия в локализации атомов Pd и Pt. В соответствии с рисунком на левой панели и графиками на правой панели этого рисунка, атомы Pd присутствуют в наружном монослое дочерней нанокапли, тогда как атомы Pt обнаруживаются, только начиная со второго (внутреннего) монослоя.

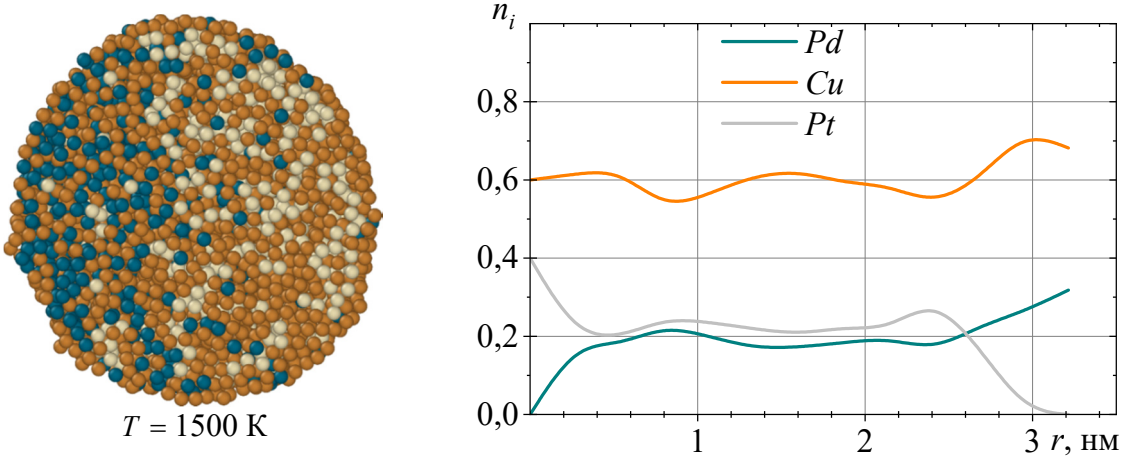

Рис. 4. Конфигурация моделируемой системы в момент времени $t = 3$ нс (левая панель) и радиальные распределения мольных долей компонентов (правая панель).

Вид затвердевшей нанокапли $Pt_{1700}Pd_{1700}Cu_{5100}$ и её центральное сечение с результатами CNA анализа представлены на рис. 5. В соответствии с левой панелью рис. 5, атомы Pd присутствуют в наружном атомном монослое, а атомы Pt – во втором и нижележащих атомных слоях. Особый интерес представляет структурная сегрегация в процессе затвердевания нанокапель. В соответствии с правой панелью рис. 5, конечная конфигурация представлена тремя ГЦК зёрнами в виде полос, разделённых границами из атомов, идентифицированных программой Ovito как локальная ГПУ структура. Ещё одно крупное ГЦК зерно имеет форму полусферы. Ранее мы наблюдали структурную сегрегацию в

наночастицах $Pt-Pd-Ni$ [28] и $Pd-Pt-Cu$ [20] в процессе охлаждения нанокапель, образовавшихся при плавлении тернарных наночастиц с исходным однородным распределением компонентов.

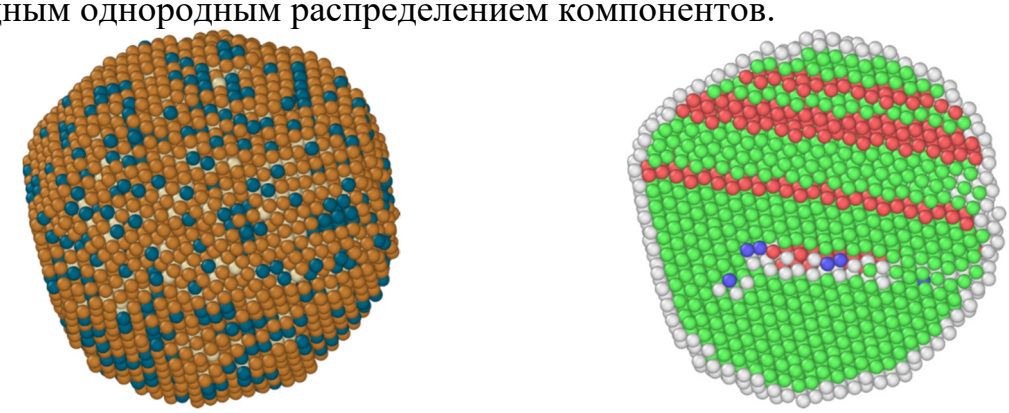

Рис. 5. Внешний вид МД конфигурации, отвечающей затвердевшей нанокапле $Pt_{1700}Pd_{1700}Cu_{5100}$ (левая панель) и её центральное сечение с результатами CNA анализа (правая панель). Температура T = 300 К, скорость охлаждения при закалке – 0,4 К/пс.

4. Заключение

Таким образом, мы осуществили МД моделирование неизотермического спекания в тернарной наносистеме $Pt+Cu+Pd$. С одной стороны, моделирование неизотермического спекания позволило воспроизвести поведение рассматриваемой системы при различных температурах, вплоть до высокотемпературной области, в которой наблюдалось плавление исходных наночастиц и коалесценция образующихся при этом нанокапель, в результате которой формируется тернарная дочерняя нанокапля с однородным, в некотором приближении, распределением компонентов. В дальнейшем вполне возможно осуществить обычно используемое изотермическое моделирование спекания/коалесценции при некоторых фиксированных температурах, представляющих особый интерес с точки зрения выяснения закономерностей и механизмов этих процессов. С другой стороны, именно неизотермическое спекание характерно для реальных процессов порошковой металлургии и 3D-печати.

К тернарным наносплавам $Pt-Pd-Cu$ в последние годы проявляется большой интерес как к перспективным нанокатализаторам [29, 30]. Одной из основных задач исследований в этом направлении является синтез наночастиц, в которых основную долю составляет более дешевый (неблагородный) металл, например Cu или Ni, но при этом атомы благородных металлов (Pt и Pd) присутствуют на поверхности наночастиц. В наших МД экспериментах формировались тернарные дочерние наночастицы $Pt_{1700}Pd_{1700}Cu_{5100}$, в которых доля атомов Cu составляет 60%. Однако атомы благородных металлов (Pt и Pd)

присутствовали в двух наружных монослоях как твердой дочерней наночастицы вплоть до начала ее плавления, так и затвердевшей нанокапли.

В затвердевших дочерних нанокаплях $Pt_{1700}Pd_{1700}Cu_{5100}$ атомы Pd присутствуют в наружном монослое, а атомы Pt – во втором (внутреннем) монослое, что также представляет особый интерес. С одной стороны, как отмечается, в обзоре [31] со ссылкой на работу [32], на каталитические свойства бинарных и тернарных наночастиц могут оказывать влияние атомы, находящиеся в шести наружных монослоях частиц. С другой стороны, использование избирательной коррозии (dealloying) [29], т.е. избирательного удаления атомов из наружного монослоя, позволит, очевидно, обогатить атомами Pt и наружный монослой наночастиц $Pt-Pd-Cu$. Таким образом, как путем спекания твердых наночастиц Pt, Pd и Cu, так и путем последующей закалки нанокапли могут быть получены тернарные наночастицы с различной морфологией, но в обоих случаях с атомами благородных металлов в их поверхностных слоях.

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. **Самсонов, В.М.** О механизмах коалесценции металлических нанокапель и спекания металлических наночастиц / В.М. Самсонов, И.В. Талызин, С.А. Васильев, М.И. Алымов // Доклады академии наук. – 2019. – Т. 489. – Вып. 5. – С. 465-468. DOI: 10.31857/S0869-56524895465-468.
2. **Самсонов, В.М.** О механизмах коалесценции нанокапель и спекания твердых наночастиц / В.М. Самсонов, И.В. Талызин, С.А. Васильев, М.И. Алымов // Коллоидный журнал. – 2020. – Т. 82. – Вып. 5. – С. 618-629. DOI: 10.31857/S0023291220050158.
3. **Samsonov, V.M.** When mechanisms of coalescence and sintering at the nanoscale fundamentally differ: Molecular dynamics study / V.M. Samsonov, I.V. Talyzin, V.V. Puytov et al. // The Journal of Chemical Physics. – 2022. – V. 156. – I. 21. – Art. № 214302. – 15 p. DOI: 10.1063/5.0075748.
4. **Samsonov, V.M.** Size dependence of the melting temperature and mechanisms of the coalescence/sintering on the nanoscale / V.M. Samsonov, M.I. Alymov, I.V. Talyzin, S.A. Vasilyev // Journal of Physics: Conference Series. – 2019. – V. 1352. – I. 1. – Art. № 012044. – 7 p. DOI: 10.1088/1742-6596/1352/1/012044.
5. **Сдобняков, Н.Ю.** Моделирование процессов коалесценции и спекания в моно- и биметаллических наносистемах. Монография / Н.Ю. Сдобняков, А.Ю. Колосов, С.С. Богданов. – Тверь: Издательство Тверского государственного университета, 2021. – 168 с. DOI: 10.26456/skb.2021.168.
6. **Колосов, А.Ю.** Моделирование процесса коалесценции наночастиц золота методом Монте-Карло А.Ю. Колосов, Н.Ю. Сдобняков, П.В. Комаров и др. // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2012. – Вып. 4. – С. 129-142.
7. **Surrey, A.** Quantitative measurement of the surface self-diffusion on Au nanoparticles by aberration-corrected transmission electron microscopy / A. Surrey, D. Pohl, L. Schultz, B. Rellinghaus // Nano Letters. – 2012. – V. 12. – I. 12. – P. 6071-6077. DOI: 10.1021/nl302280x.
8. **Yuk, J.M.** In situ atomic imaging of coalescence of Au nanoparticles on graphene: rotation and grain boundary migration / J.M. Yuk, M. Jeong, S.Y. Kim et al. // Chemical Communications. – 2013. – V. 49. – I. 98. – P. 11479-11481. DOI: 10.1039/C3CC46545D.
9. **Alymov, M.I.** Coagulation of gold nanoparticles in thin amorphous films under irradiation with a fast electron beam / M.I. Alymov, A.A. Timofeev, A.G. Gnedovets // Nanotechnologies in Russia. – 2013. – V. 8. – I. 11-12. – P. 727-736. DOI: 10.1134/S1995078013060037.

10. **Suliz, K.V.** Control of cluster coalescence during formation of bimetallic nanoparticles and nanoalloys obtained via electric explosion of two wires / K.V. Suliz, A.Yu. Kolosov, V.S. Myasnichenko et al. // Advanced Powder Technology. – 2022. – V. 33. – I 3. – Art. № 103518. – 15 p. DOI: 10.1016/j.apt.2022.103518.
11. **Пуйтов, В.В.** Закономерности и механизмы коалесценции нанокапель и спекания металлических наночастиц: молекулярно-динамическое моделирование / В.В. Пуйтов, А.А. Романов, В.М. Самсонов, И.В. Талызин // Известия Академии наук. Серия химическая. – 2022. – Т. 71. – Вып. 4. – С. 686-693.
12. **Nelli, D.** Tuning the coalescence degree in the growth of Pt–Pd nanoalloys / D. Nelli, M. Cerbeland, R. Ferrando, Ch. Minnai // Nanoscale advances. – 2021. – V. 3. – I. 3. – P. 836-846. DOI: 10.1039/d0na00891e.
13. **Grammatikopoulos, P.** Computational modeling of nanoparticle coalescence / P. Grammatikopoulos, M. Sowwan, J. Kioseoglou // Advanced Theory and Simulations. – 2019. – V. 2. – I. 6. – Art. № 1900013. – 26 p. DOI: 10.1002/adts.201900013.
14. **Toulkeridou, E.** On the melting point depression, coalescence, and chemical ordering of bimetallic nanoparticles: the miscible Ni–Pt system / E. Toulkeridou, J. Kioseoglou, P. Grammatikopoulos // Nanoscale Advances. – 2022. – V. 4. – I. 22. – P. 4819-4828. DOI: 10.1039/d2na00418f.
15. **Jamshideasli, D.** Molecular dynamics simulations of nanoparticle sintering in additive nanomanufacturing: insights from sintering mechanisms / D. Jamshideasli, N. Shamsaei, M. Mahjouri-Samani, S. Shao // Green Manufacturing Open. – 2024. – V. 2. – I. 4. – Art. № 16. – 20 p. DOI: 10.20517/gmo.2024.062001.
16. **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. № 109 936. – 12 p. DOI: 10.1016/j.commatsci.2020.109936.
17. **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.
18. **Naunheim, Y.** Multicomponent alloys designed to sinter / Y. Naunheim, C.A. Schuh // Nature Communications. – 2024. – V. 15. – Art. № 8028. – 9 p. DOI: 10.1038/s41467-024-52261-1.
19. **Sdobnyakov, N.** Coalescence behavior of Al-Li-Cu-Zr and Cu nanoparticles: structure formation under molecular dynamics simulation / N. Sdobnyakov, A. Kolosov, K. Savina et al. // Materials Letters. – 2026. – V. 409. – Art. № 140181. – 3 p. DOI: 10.1016/j.matlet.2026.140181.
20. **Самсонов, В.М.** Химическая и структурная сегрегация в тернарных наночастицах Pt-Pd-Cu: молекулярно-динамическое моделирование / В.М. Самсонов, Д.В. Жигунов, И.П. Синица и др. // Коллоидный журнал. – 2026. – Т. 88. – № 4. – С. 542-562. DOI: 10.31857/S0023291226040085.
21. **Чертков, Д.В.** Сравнительное молекулярно-динамическое моделирование коалесценции и спекания в системах Au-Au и Si-Si / Д.В. Чертков, В.В. Пуйтов, И.В. Талызин, В.М. Самсонов // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2025. – Вып. 17. – С. 522-536. DOI: 10.26456/pcascnn/2025.17.522.
22. **Thompson, A.P.** LAMMPS - a flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales / A.P. Thompson, H.M. Aktulga, R. Berger et al. // Computer Physics Communications. – 2022. – V. 271. – Art. № 108171. – 34 p. DOI: 10.1016/j.cpc.2021.108171.
23. **Zhou, X.W.** Misfit-energy-increasing dislocations in vapor-deposited CoFe/NiFe multilayers / X.W. Zhou, R.A. Johnson, H.N.G. Wadley // Physical Review B. – 2004. – V. 69. – I. 14. – P. 113-114. DOI: 10.1103/PhysRevB.69.144113.
24. **Missaen, J.M.** Solid state spreading in the Cu/Cu system / J.M. Missaen, R. Voytovych, B. Gilles, N. Eustathopoulos // Journal of Materials Science. – 2005. – V. 40. – I. 9-10. – P. 2377-2381. DOI: 10.1007/s10853-005-1962-3.
25. **Samsonov, V.M.** Solid-state wetting at the nanoscale: molecular dynamics and surface diffusion approach / V.M. Samsonov, A.G. Bembel, I.V. Popov et al. // Surface Innovations. – 2017. – V. 5. – I. 3. – P. 161-169. DOI: 10.1680/jsuin.17.00015.
26. Физические величины: Справочник / под ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова. – М.: Энергоатомиздат, 1991. – 1232 с.
27. **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.
28. **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. 399-414. DOI: 10.7868/S3034543X25040111.
29. **Wu, Z.-P.** Alloying-realloying enabled high durability for Pt-Pd-3d-transition metal nanoparticle fuel cell catalysts / Z.-P. Wu, Caracciolo D.T., Maswadeh Y. et al. // Nature Communications. – 2021. – V. 12.

– Art. № 859, 12 p. DOI: 10.1038/s41467-021-21017-6.
30. **Zhang, Y.** Composition-controlled synthesis of Pt–Pd–Cu ternary metal nanoparticles for an enhanced electrocatalytic hydrogen evolution reaction / Y. Zhang, H. Li, X. Yan et al. // Nanoscale. – 2025. – V. 17. – I. 23. – P. 14415-14423. DOI: 10.1039/D5NR01065A.
31. **Akbarzadeh, H.** Melting behavior of bimetallic and trimetallic nanoparticles: a review of MD simulation studies / H. Akbarzadeh, E. Mehrjouci, M. Abbaspour, A.N. Shamkhali // Topics in Current Chemistry. – 2021. – V. 379. – I. 3. – Art. № 22. 40 p. DOI: 10.1007/s41061-021-00332-y.
32. **Gilroy, K.D.** Bimetallic nanocrystals: Syntheses, properties, and applications / K.D. Gilroy, A. Ruditskiy, H.-C. Peng et al. // Chemical Reviews. – 2016. – V. 116. – I. 18. – P. 10414-10472. DOI: 10.1021/acs.chemrev.6b00211.

References:

1. Samsonov V.M., Talyzin I.V., Vasilyev S.A., Alymov M.I. Mechanisms of coalescence of metallic nanodroplets and sintering of metallic nanoparticles, *Doklady Physics*, 2019, vol. 64, issue 12, pp. 453-455. DOI: 10.1134/S1028335819120061.
2. Samsonov V.M., Talyzin I.V., Vasilyev S.A., Alymov M.I. On the mechanisms of coalescence of nanodroplets and sintering of solid particles, *Colloid Journal*, 2020, vol. 82, issue 5, pp. 573-583. DOI: 10.1134/S1061933X20050154.
3. Samsonov V.M., Talyzin I.V., Puytov V.V., Vasilyev S.A., Romanov A.A., Alymov M.I. When mechanisms of coalescence and sintering at the nanoscale fundamentally differ: Molecular dynamics study, *The Journal of Chemical Physics*, 2022, vol. 156, issue 21, art.no. 214302, 15 p. DOI: 10.1063/5.0075748.
4. Samsonov V.M., Alymov M.I., Talyzin I.V., Vasilyev S.A. Size dependence of the melting temperature and mechanisms of the coalescence/sintering on the nanoscale, *Journal of Physics: Conference Series*, 2019, vol. 1352, issue 1, art.no. 012044, 7 p. DOI: 10.1088/1742-6596/1352/1/012044.
5. Sdobnyakov N.Yu., Kolosov A.Yu., Bogdanov S.S. *Modelirovanie protsessov koalestsentsii i spekaniya v mono- i bimetallicheskikh nanosistemakh: monografiya* [Simulation of the processes of coalescence and sintering in mono- and bimetallic nanosystems: monograph]. Tver, Tver State University Publ., 2021, 168 p. DOI: 10.26456/skb.2021.168. (In Russian).
6. Kolosov A.Yu., Sdobnyakov N.Yu., Komarov P.V. et al. Modelirovanie protsessa koalestsentsii nanochastits zolota metodom Monte-Karlo [Simulation of the coalescence process of gold nanoparticles by Monte-Carlo method], *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov [Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials]*, 2012, issue 4, pp. 129-142. (In Russian).
7. Surrey A., Pohl D., Schultz L., Rellinghaus B. Quantitative measurement of the surface self-diffusion on Au nanoparticles by aberration-corrected transmission electron microscopy, *Nano Letters*, 2012, vol. 12, issue 12, pp. 6071-6077. DOI: 10.1021/nl302280x.
8. Yuk J.M., Jeong M., Kim S.Y. et al., In situ atomic imaging of coalescence of Au nanoparticles on graphene: rotation and grain boundary migration, *Chemical Communications*, 2013, vol. 49, issue 98, pp. 11479-11481. DOI: 10.1039/C3CC46545D.
9. Alymov M.I., Timofeev A.A., Gnedovets A.G. Coagulation of gold nanoparticles in thin amorphous films under irradiation with a fast electron beam, *Nanotechnologies in Russia*, 2013, vol. 8, issue 11-12, pp. 727-736. DOI: 10.1134/S1995078013060037.
10. Suliz K.V., Kolosov A.Yu., Myasnichenko V.S. et al. Control of cluster coalescence during formation of bimetallic nanoparticles and nanoalloys obtained via electric explosion of two wires, *Advanced Powder Technology*, 2022, vol. 33, issue 3, art. no. 103518, 15 p. DOI: 10.1016/j.apt.2022.103518.
11. Puytov V.V., Romanov A.A., Talyzin I.V., Samsonov V.M., Features and mechanisms of coalescence of nanodroplets and sintering of metal nanoparticles: molecular dynamics simulation, *Russian Chemical Bulletin*, 2022, vol. 71, issue 4, pp. 686-693. DOI: 10.1007/s11172-022-3466-6.
12. Nelli D., Cerbeland M., Ferrando R., Minnai Ch., Tuning the coalescence degree in the growth of Pt–Pd nanoalloys, *Nanoscale advances*, 2021, vol. 3, issue. 3, pp. 836-846. DOI: 10.1039/d0na00891e.
13. Grammatikopoulos P., Sowwan M., Kioseoglou J., Computational modeling of nanoparticle coalescence, *Advanced Theory and Simulations*, 2019, vol. 2, issue 6, art.no. 1900013, 26 p. DOI: 10.1002/adts.201900013.
14. Toulkeridou E., Kioseoglou J., Grammatikopoulos P., On the melting point depression, coalescence, and chemical ordering of bimetallic nanoparticles: the miscible Ni–Pt system, *Nanoscale advances*, 2022, vol. 4, issue 22, pp. 4819-4828. DOI: 10.1039/d2na00418f.
15. Jamshideasli D., Shamsaei N., Mahjouri-Samani M., Shao S., Molecular dynamics simulations of nanoparticle sintering in additive nanomanufacturing: insights from sintering mechanisms, *Green Manufacturing*

Open, 2024, vol. 2, issue 4, art.no. 16, 20 p. DOI: 10.20517/gmo.2024.062001.
16. Sdobnyakov N., Khort A., Myasnichenko V., et al. 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.
17. 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.
18. Naunheim Y., Schuh C.A., Multicomponent alloys designed to sinter, *Nature Communications*, 2024, vol. 15, art. № 8028, 9 p. DOI: 10.1038/s41467-024-52261-1.
19. Sdobnyakov N., Kolosov A., Savina K. et al. Coalescence behavior of Al-Li-Cu-Zr and Cu nanoparticles: structure formation under molecular dynamics simulation, *Materials Letters*, 2026, vol. 409, art.no. 140181, 3 p. DOI: 10.1016/j.matlet.2026.140181.
20. Samsonov V.M., Zhigunov D.V., Sinitsa I.P. et al., Chemical and structural segregation in ternary Pt-Pd-Cu nanoparticles: molecular dynamics simulation, *Colloid Journal*, 2026, vol. 88, issue 4, pp. 605-618. DOI: 10.1134/S1061933X26600296
21. Chertkov D.V., Pujtov V.V., Talyzin I.V., Samsonov V.M. Sravnitelnoe molekulyarno-dinamicheskoe modelirovanie koalestsentsii i spekaniya v sistemakh Au-Au i Si-Si [Comparative molecular dynamics simulation of coalescence and sintering in Au-Au and Si-Si systems], *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov* [*Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials*], 2025, issue 17, pp. 522-536. DOI: 10.26456/pcascnn/2025.17.522.
22. Thompson A.P., Aktulga H.M., Berger R. et al. LAMMPS - a flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales, *Computer Physics Communications*, 2022, vol. 271, art. no. 108171, 34 p. DOI: 10.1016/j.cpc.2021.108171.
23. Zhou X.W., Johnson R.A., Wadley H.N.G. Misfit-energy-increasing dislocations in vapor-deposited CoFe/NiFe multilayers, *Physical Review B*, 2004, vol. 69, issue 14, pp. 113-114. DOI: 10.1103/PhysRevB.69.144113.
24. Missaen J.M., Voytovych R., Gilles B., Eustathopoulos N., Solid state spreading in the Cu/Cu system, *Journal of Materials Science*, 2005, vol. 40, issue 9-10, pp. 2377-2381. DOI: 10.1007/s10853-005-1962-3.
25. Samsonov V.M., Bembel A.G., Popov I.V. et al. Solid-state wetting at the nanoscale: molecular dynamics and surface diffusion approach, *Surface Innovations*, 2017, vol. 5, issue 3, pp. 161-169. DOI: 10.1680/jsuin.17.00015.
26. *Fizicheskie velichiny: Spravochnik* [*Physical Quantities: Handbook*], ed. by I.S. Grigoriev, E.Z. Meilikhov. Moscow: Energoatomizdat Publ., 1991, 1232 p. (In Russian).
27. 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.
28. 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.
29. Wu Z.-P, Caracciolo D.T., Maswadeh Y. et al., Alloying-realloying enabled high durability for Pt-Pd-3d-transition metal nanoparticle fuel cell catalysts, *Nature Communications,* 2021, vol. 12, art. no. 859, 12 p. DOI: 10.1038/s41467-021-21017-6.
30. Zhang Y., Li H., Yan X. et al., Composition-controlled synthesis of Pt–Pd–Cu ternary metal nanoparticles for an enhanced electrocatalytic hydrogen evolution reaction, *Nanoscale*, 2025, vol. 17, issue 23, pp. 14415-14423. DOI: 10.1039/D5NR01065A.
31. Akbarzadeh H., Mehrjouci E., Abbaspour M., Shamkhali A.N. Melting behavior of bimetallic and trimetallic nanoparticles: a review of MD simulation studies, *Topics in Current Chemistry*, 2021, vol. 379, issue 3, art. no. 22, 40 p. DOI: 10.1007/s41061-021-00332-y.
32. Gilroy K.D., Ruditskiy A., Peng H.-C. et al., Bimetallic nanocrystals: Syntheses, properties, and applications, *Chemical Reviews*, 2016, vol. 116, issue 18, pp. 10414-10472. DOI: 10.1021/acs.chemrev.6b00211.