УДК 539.216:538.953:538.911 *Оригинальная статья*

Атомистическое моделирование сегрегации в четырехкомпонентных наночастицах Ni-Cu-Fe-Co с различными начальными конфигурациями

К.Г. Савина, С.В. Серов, А.Ю. Колосов, Д.Н. Соколов, Д.А. Кравченко, Р.Е. Григорьев, С.С. Богданов, Е.Е. Аракчеев, Н.Ю. Сдобняков

ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

170002, Россия, Тверь, Садовый пер., 35

nsdobnyakov@mail.ru

DOI: 10.26456/pcascnn/2026.18.466

Аннотация: В данной работе методом молекулярной динамики исследовались модельные четырехкомпонентные наночастицы *Ni-Cu-Fe-Co*, содержащие 4000 атомов, с различными начальными конфигурациями: частица со смешанным трехкомпонентным ядром и никелевой оболочкой, четырехоболочечная структура с концентрическими оболочками, наносплав с равномерным распределением компонентов, четырехслойная планарная структура, два симметричных варианта с семью слоями атомов. Межатомное взаимодействие описывалось потенциалом сильной связи. Молекулярно-динамический эксперимент проводился по следующей схеме: 1) нагрев от 300 до 1800 К, а затем охлаждение до 300 К с релаксацией на каждом шаге 10 пс, 2) релаксация 100 пс при температуре 300 К. Для первой стадии были выбраны две скорости термоиндуцированного воздействия. Установлены температурные диапазоны гистерезиса процессов плавления и кристаллизации. Закономерности сегрегации в четырехкомпонентных наночастицах *Ni-Cu-Fe-Co* с различными начальными конфигурациями описаны с использованием радиальных распределений плотностей. Оценены температурные параметры гистерезиса процессов плавления и кристаллизации. Полученные результаты свидетельствуют о вариативности свойств многокомпонентных наночастиц, обусловленной как начальными условиями (морфология, состав, размер), так и условиями молекулярно-динамического эксперимента (скорость термоиндуцированного воздействия, температурный интервал).

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

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

Серов Сергей Викторович – аспирант 2 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»

Кравченко Дарья Алексеевна – аспирант 3 года обучения кафедры общей физики, ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Григорьев Роман Евгеньевич – аспирант 4 года обучения кафедры общей физики, ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Богданов Сергей Сергеевич – к.ф.-м.н., научный сотрудник кафедры общей физики, ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Аракчеев Евгений Евгеньевич – студент 3 курса кафедры общей физики, ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

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

Original paper

© К.Г. Савина, С.В. Серов, А.Ю. Колосов, Д.Н. Соколов, Д.А. Кравченко, Р.Е. Григорьев, С.С. Богданов, Е.Е. Аракчеев, Н.Ю. Сдобняков, 2026

Atomistic simulation of segregation in quaternary Ni-Cu-Fe-Co nanoparticles with different initial configurations

K.G. Savina, S.V. Serov, A.Yu. Kolosov, D.N. Sokolov, D.A. Kravchenko, R.E. Grigoryev, S.S. Bogdanov, E.E. Arakcheev, N.Yu. Sdobnyakov

Tver State University, Tver, Russia

DOI: 10.26456/pcascnn/2026.18.466

Abstract: In this work, the molecular dynamics method was used to study modeling quaternary *Ni-Cu-Fe-Co* nanoparticles (containing 4000 atoms) with different initial configurations: a particle with a mixed three-component core and a nickel shell, a four-shell structure with concentric shells, a nanoalloy with a uniform distribution of components, a four-layer planar structure, two symmetrical variants with seven layers of atoms. The interatomic interaction was described by the tight-binding potential. The molecular dynamics experiment was carried out according to the following scheme: 1) heating from 300 to 1800 K, and then cooling to 300 K with relaxation at each step of 10 ps, 2) relaxation for 100 ps at temperature 300 K. For the first stage, two rates of thermally induced action were selected. The temperature ranges of hysteresis of the melting and crystallization processes were determined. Segregation patterns in quaternary *Ni-Cu-Fe-Co* nanoparticles with different initial configurations are described using radial density distributions. The temperature parameters of the hysteresis associated with melting and crystallization processes have been evaluated. The obtained results demonstrate the variability of the properties of multicomponent nanoparticles, determined by both the initial conditions (morphology, composition, size) and the conditions of the molecular dynamics experiment (rate of thermally induced action).

Keywords: molecular dynamics, MDSym, tight-binding potential, quaternary nanoparticles, segregation, nickel, copper, cobalt, iron, local density.

Kseniya G. Savina – 4th year postgraduate student, General Physics Department, Tver State University, ORCID: 0000-0002-4916-4968
Sergei V. Serov – 2nd year postgraduate student, General Physics Department, Tver State University, ORCID: 0009-0004-6219-6309
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
Daria A. Kravchenko – 3rd year postgraduate student, General Physics Department, Tver State University
Roman E. Grigoryev – 4th year postgraduate student, General Physics Department, Tver State University
Sergei S. Bogdanov – Ph. D., Researcher, General Physics Department, Tver State University
Evgenii E. Arakcheev – 3rd 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: 01.06.2026; после рецензирования/revised: 25.07.2026; принята/accepted: 30.07.2026.

1. Введение и постановка задачи

Переход от моно- и биметаллических наночастиц к многокомпонентным системам существенно расширяет набор возможных начальных распределений компонентов. При фиксированных размерах и общем составе частицы взаимное расположение атомов, характер межфазных границ и состав поверхности могут задавать различные сценарии структурообразования и, как следствие, приводить к различиям в физико-химических свойствах [1]. Поэтому начальную конфигурацию следует рассматривать как самостоятельный фактор, определяющий термическую эволюцию наносистемы.

Наиболее подробно многокомпонентные металлические

наночастицы исследованы для систем на основе благородных металлов [2-8]. На их примере показано, что перераспределение компонентов зависит не только от химического состава, но и от исходной морфологии, последовательности слоев и режима термического воздействия. Для наночастиц $Ni-Cu-Fe-Co$ сочетание атомистического моделирования и экспериментальных методов также выявило выраженную химическую и структурную сегрегацию [9].

Закономерности сегрегации и структурных превращений в бинарных наночастицах изучены достаточно подробно [10-14]. В частности, значительное внимание уделено системам $Cu-Ni$ [15-18]. В бинарном случае направление перераспределения атомов определяется соотношением поверхностных и когезионных энергий, размерным несоответствием атомов и характером перекрестного взаимодействия. При добавлении еще двух компонентов возникает конкуренция нескольких тенденций к сегрегации, а число метастабильных структурных состояний возрастает. Преимущества, установленные для бинарных наночастиц с контролируемым распределением компонентов, включают возможность направленного изменения состава поверхности, каталитической активности, магнитного отклика и термической устойчивости [19, 20]. При переходе к многокомпонентным системам эти свойства могут сочетаться и дополнительно настраиваться за счет выбора исходной архитектуры частицы [9, 21, 22].

Целью настоящей работы является с помощью молекулярно-динамического эксперимента установить степень влияния начального пространственного распределения компонентов на термоиндуцированные структурные превращения, а также описать закономерности сегрегации в четырехкомпонентных наночастицах $Ni-Cu-Fe-Co$.

2. Методология компьютерного моделирования

Компьютерное моделирование выполнялось методом молекулярной динамики в программном комплексе MDSym [23]. Модельная наночастица содержала 4000 атомов и имела состав $Ni_{2400}Co_{800}Fe_{600}Cu_{200}$, исходное положение атомов соответствовало гранецентрированной кубической решетке. Для оценки роли начального распределения компонентов были подготовлены шесть конфигураций (см. рис. 1): частица со смешанным трехкомпонентным ядром и никелевой оболочкой (см. рис. 1 панель 1 $(Cu_{200}-Fe_{600}-Co_{800})@Ni_{2400}$), четырехоболочечная структура с концентрическими оболочками (см. рис. 1 панель 2 $Cu_{200}@Fe_{600}@Co_{800}@Ni_{2400}$), наносплав с равномерным распределением компонентов (см. рис. 1 панель 3 $Cu_{200}-Fe_{600}-Co_{800}-Ni_{2400}$), четырехслойная

планарная структура (см. рис. 1 панель 4 $Cu_{200} / Fe_{600} / Co_{800} / Ni_{2400}$), два симметричных варианта с семью слоями (см. рис. 1 панели 5 $Cu_{100} / Fe_{300} / Co_{400} / Ni_{2400} / Co_{400} / Fe_{300} / Cu_{100}$ и 6 $Ni_{1200} / Co_{400} / Fe_{300} / Cu_{200} / Fe_{300} / Co_{400} / Ni_{1200}$ соответственно).

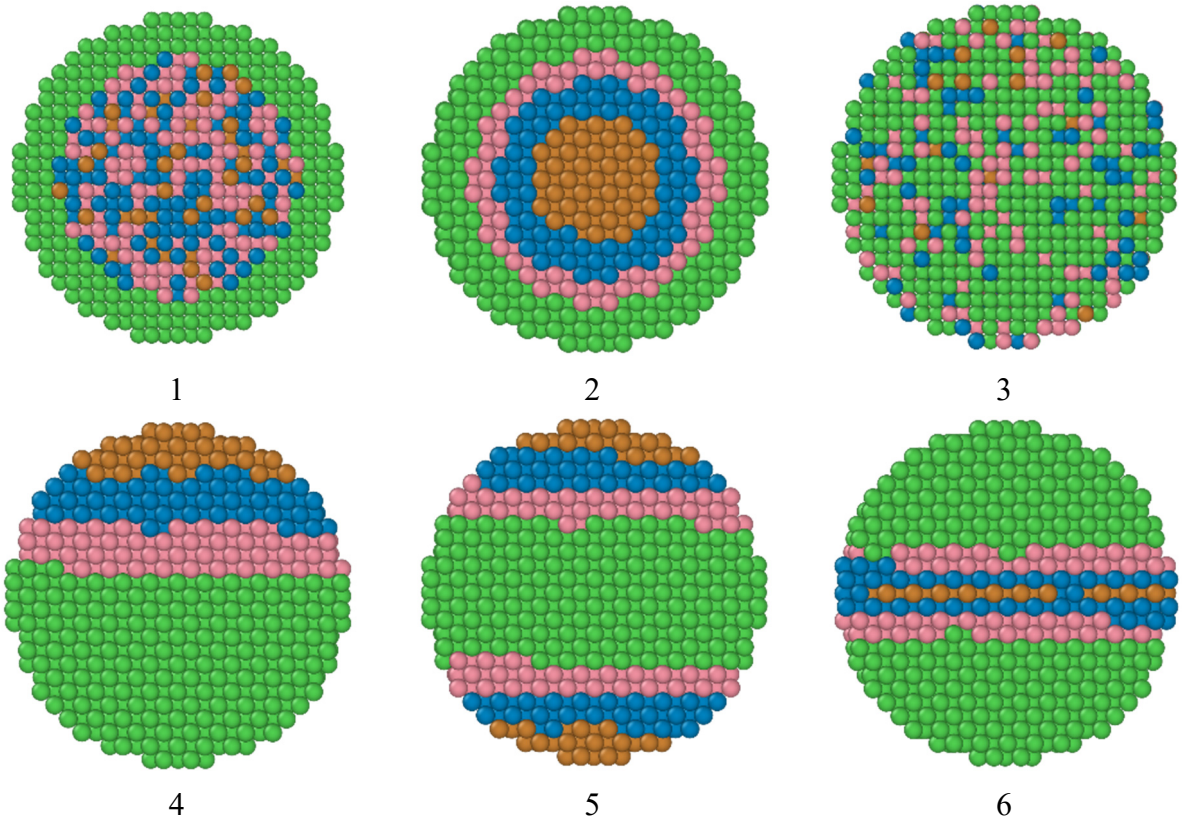


Рис. 1. Начальные конфигурации четырехкомпонентных наночастиц $Ni-Cu-Fe-Co$ с различным начальным пространственным распределением компонентов. Зеленые атомы – никель, синие – железо, коричневые – медь, розовые – кобальт.

Уравнения движения интегрировались скоростной схемой Верле с использованием периодических граничных условий. Температура поддерживалась мягким стохастическим термостатом, в котором динамика Нозе-Гувера дополнена случайной составляющей для повышения эргодичности [24]. Для каждой конфигурации был произведен нагрев от 300 до 1800 К, а затем охлаждение до 300 К, обе стадии проводились со скоростями 0,5 и 1 К/пс. После термического цикла конечные конфигурации релаксировали при 300 К в течение 100 пс. Межатомное взаимодействие описывалось потенциалом сильной связи с параметрами из работ [25, 26] (см. таблицу 1). Перекрестные параметры для разноименных атомных пар определялись по правилу Лоренца-Бертло, ранее апробированному для многокомпонентных металлических наносистем [1-7, 15-18, 27].

Структурное состояние частиц анализировалось в программном пакете OVITO [28] методом сопоставления полиэдральных шаблонов. Локальное окружение каждого атома сравнивалось с эталонными шаблонами ГЦК, ГПУ, ОЦК и икосаэдрической структуры; принадлежность к соответствующему типу фиксировалась при среднеквадратичном отклонении RMSD не выше 0,155. Атомы, для которых ни один шаблон не удовлетворял этому условию, относились к нераспознанным. Сегрегацию компонентов оценивали по радиальным распределениям локальной плотности, а температуры фазовых превращений определяли из анализа температурных зависимостей потенциальной части удельной внутренней энергии.

Таблица 1. Параметры потенциала сильной связи [25, 26].

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

3. Результаты и обсуждение

Для описания температурного гистерезиса плавления и кристаллизации, а также закономерностей химической сегрегации в тетрарных наночастицах $Ni-Cu-Fe-Co$ на рис. 2 представлены калорические кривые удельной потенциальной энергии и распределения локальной плотности для различных начальных конфигураций и скоростей термоиндуцированного воздействия - 0,5 К/пс и 1 К/пс.

Выявленные закономерности:

- Конфигурация № 1: при увеличении скорости термоиндуцированного воздействия доля атомов никеля в ядре увеличивается; характер кристаллизации также меняется: величина: ΔT_c возрастает (появляется наклон участка калорической кривой, отвечающего за кристаллизацию).

- Конфигурация № 2: при увеличении скорости термоиндуцированного воздействия меняется состав ядра конечной конфигурации – никель замещает железо; наклон участка калорической

кривой, отвечающего за кристаллизацию, меняется незначительно, но при этом увеличивается разность начального и конечного значения удельной потенциальной энергии.

- Конфигурации № 1 и 2 представляют оболочечные модели и после резкого скачка на калорической кривой, отвечающего плавлению, наблюдается спад значения удельной потенциальной энергии, связанный с разрушением никелевой оболочки. В данном случае атомы кобальта сегрегируют на поверхность, а атомы железа и меди занимают позиции во втором и третьем монослоях.

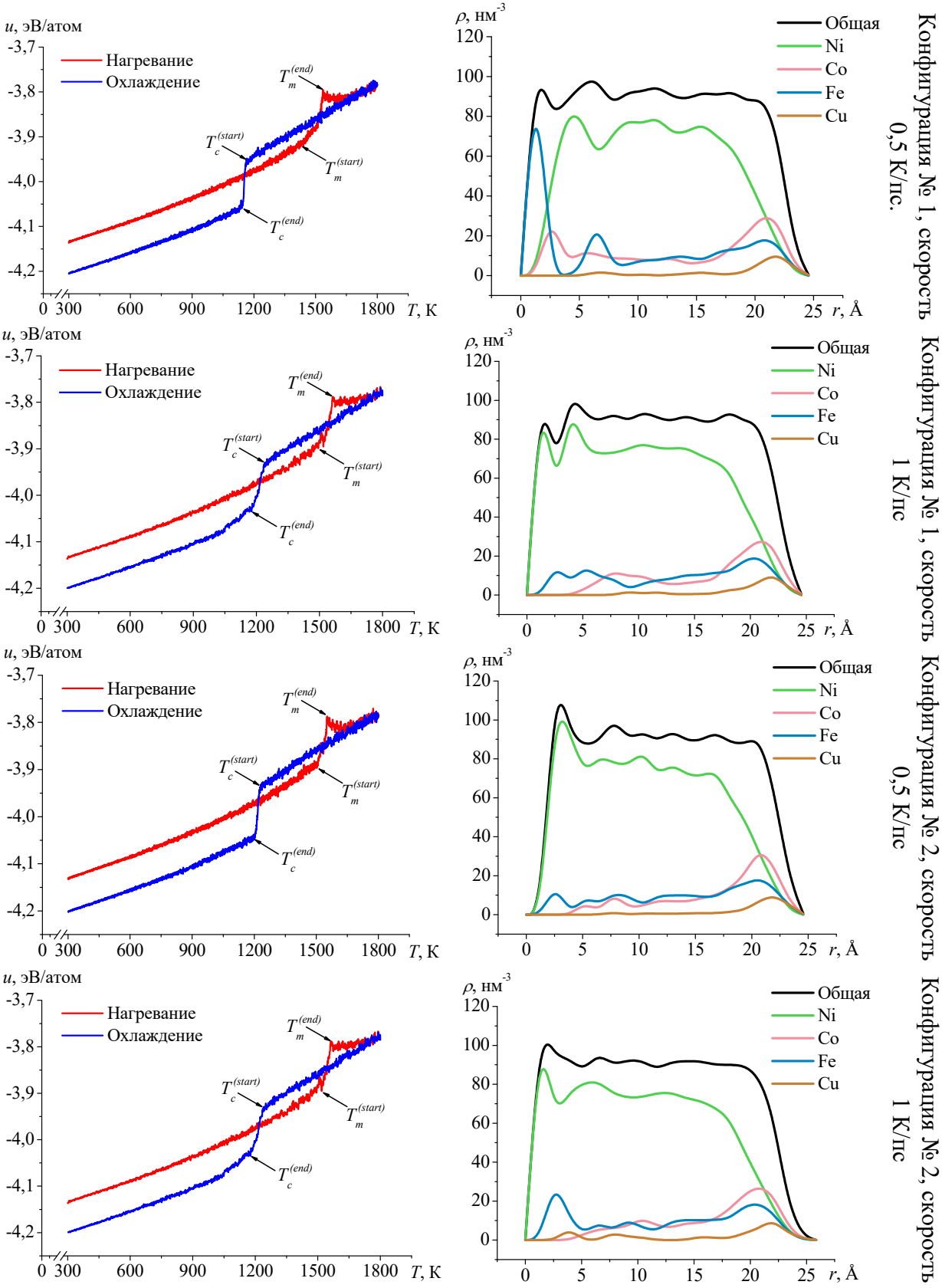
- Конфигурация № 3: при увеличении скорости термоиндуцированного воздействия также изменяется состав ядра, незначительное количество атомов железа присутствует в центральной части частицы. Увеличение скорости приводит к повышению $T_m^{(start)}$ с 1539 до 1573 К и небольшому снижению $T_c^{(start)}$ с 1167 до 1157 К. В результате ширина гистерезиса увеличивается с 372 до 416 К. Таким образом, влияние скорости на параметры гистерезиса является заметным.

- Конфигурация № 4: при увеличении скорости термоиндуцированного воздействия происходит некоторое перераспределение в составе ядра (атомы железа замещаются атомами кобальта); как и для конфигураций № 1 и 2 меняется наклон участка калорической кривой, отвечающего за кристаллизацию.

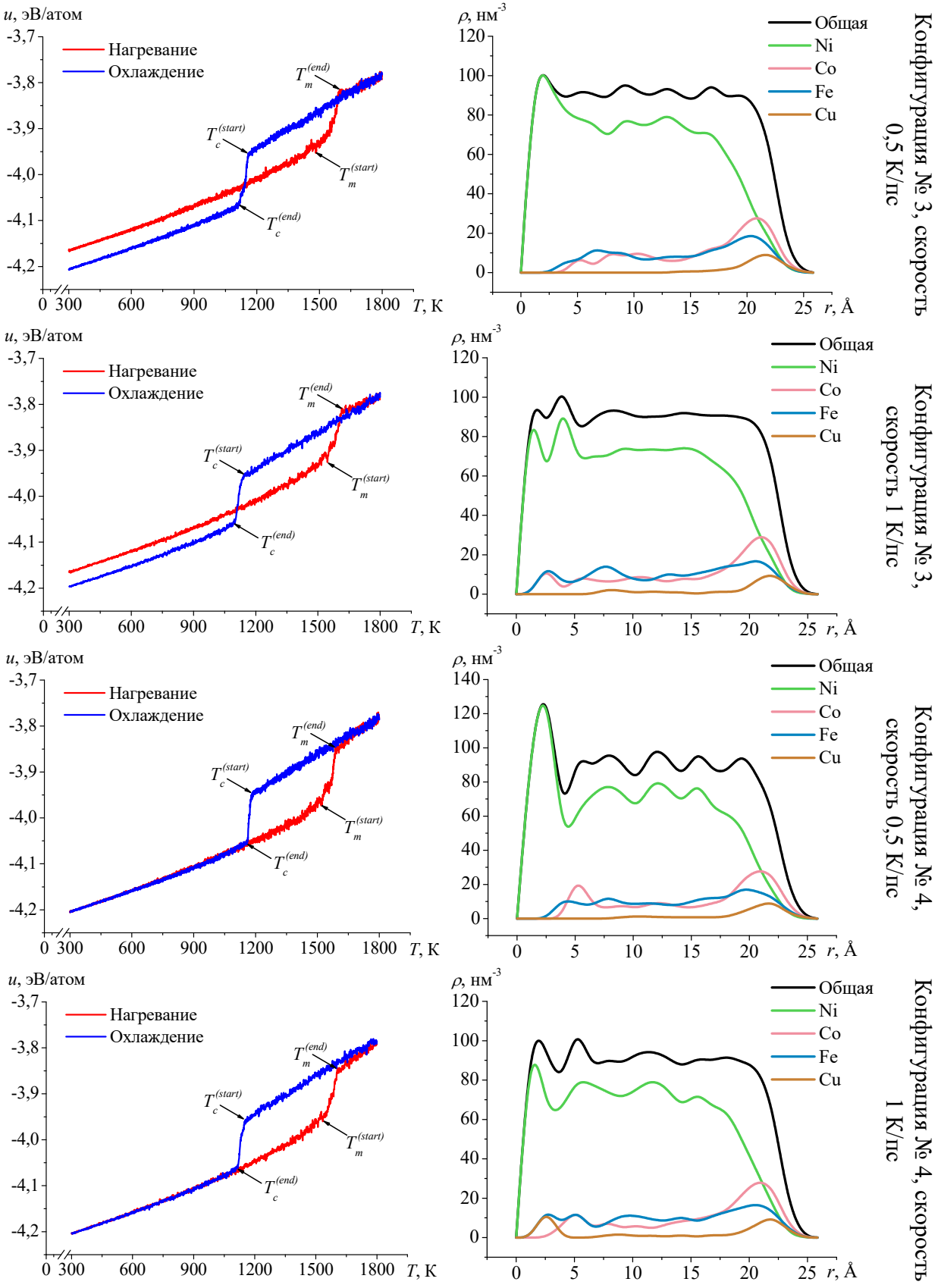
- Конфигурации № 5 и 6: для данных конфигураций скорость термоиндуцированного воздействия практически не влияет на характер химической сегрегации. При этом петля гистерезиса плавления и кристаллизации смещается в область низких температур с увеличением скорости термоиндуцированного воздействия.

Влияние скорости термоиндуцированного воздействия зависит от начальной морфологии наночастицы. Для конфигурации № 1 увеличение скорости приводит к уменьшению ширины гистерезиса, тогда как для конфигураций № 2-6 она возрастает. Наиболее схожий температурный отклик наблюдается для планарных слоистых конфигураций № 5 и 6: температура начала кристаллизации снижается, а ширина гистерезиса увеличивается. При этом общий характер химической сегрегации для данных конфигураций изменяется сравнительно слабо.

На рис. 3 показаны: объемный вид с разрезом (цветовые обозначения соответствуют рис. 1), распределение по локальным фазам (здесь зеленый цвет – локальная ГЦК-структура, красный цвет – локальная ГПУ-структура, синий цвет – локальная ОЦК-структура, серые атомы были не идентифицированы программой OVITO [28]), визуализация в объеме локальной ГПУ-структуры.


u, эВ/атом
Нагревание
Охлаждение
T, K
ρ, нм-3
Общая
Ni
Co
Fe
Cu
r, Å
Конфигурация № 1, скорость 0,5 К/пс.
Конфигурация № 1, скорость 1 К/пс
Конфигурация № 2, скорость 0,5 К/пс
Конфигурация № 2, скорость 1 К/пс

Продолжение



Продолжение

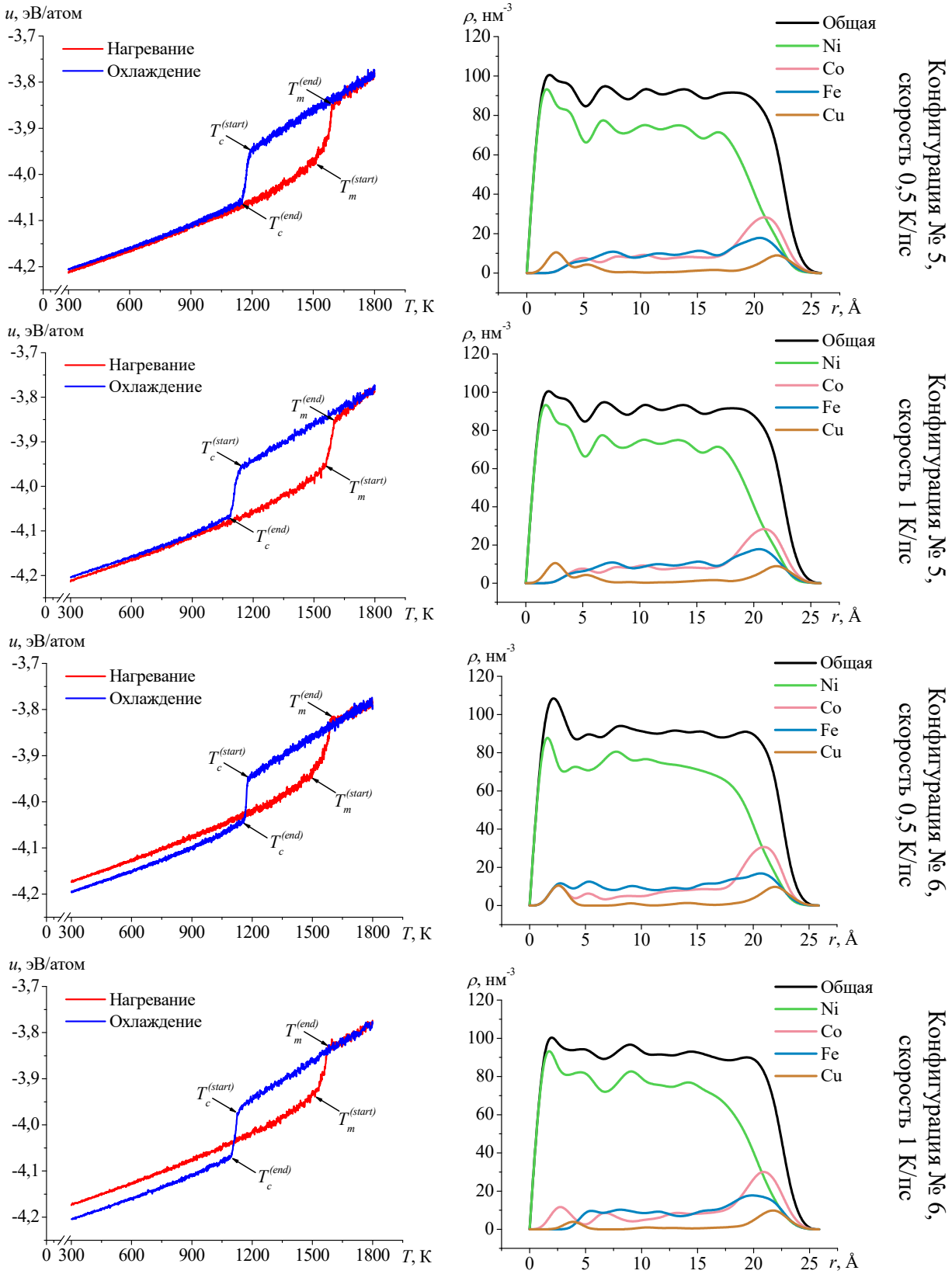
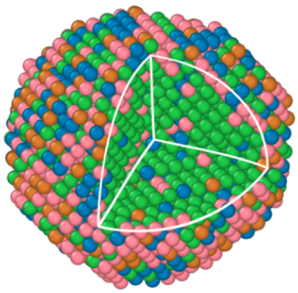
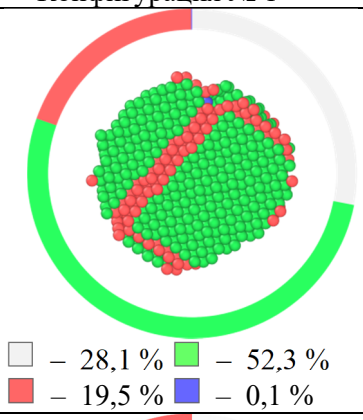
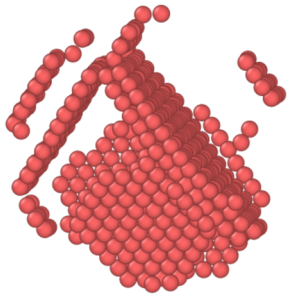
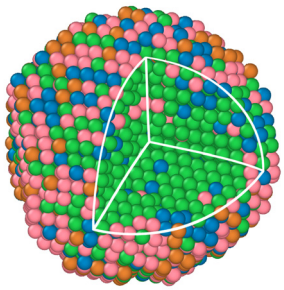
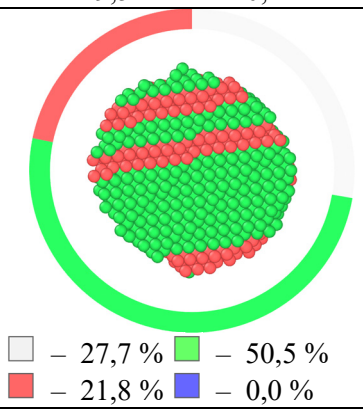
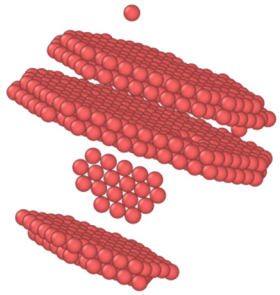
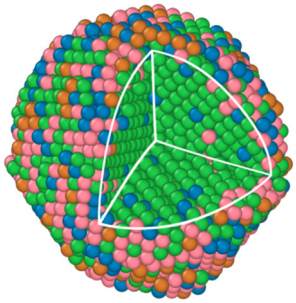
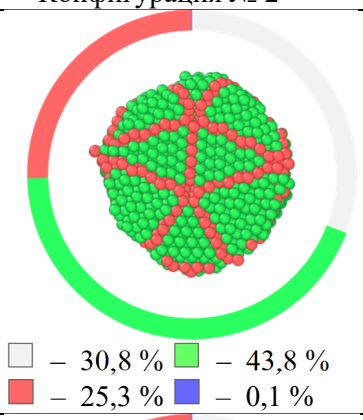
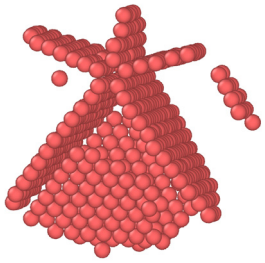
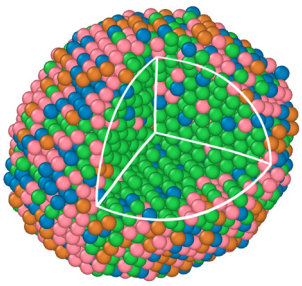
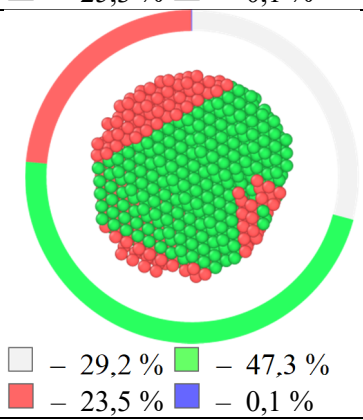
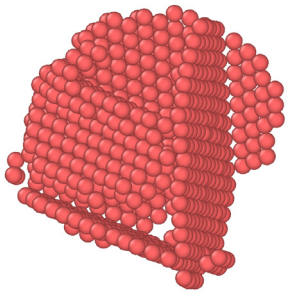


Рис. 2. Типичные зависимости потенциальной части удельной внутренней энергии от температуры (левая панель) и зависимости локальной плотности распределения компонентов от радиуса инерции (правая панель) для наночастиц $Ni-Cu-Fe-Co$.

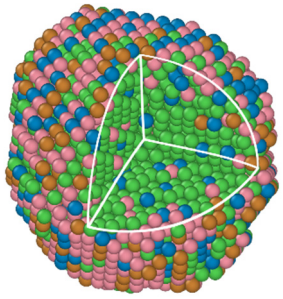
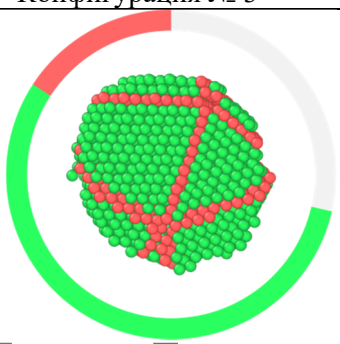
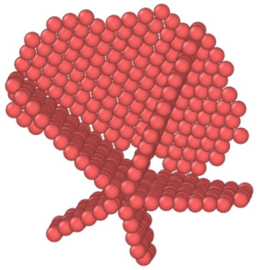
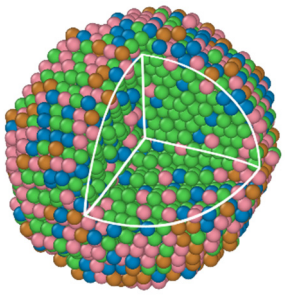
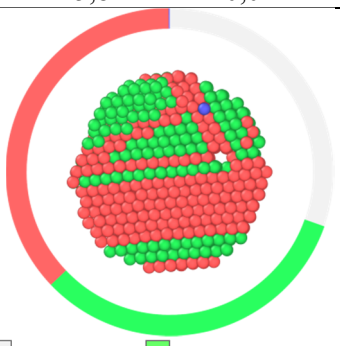
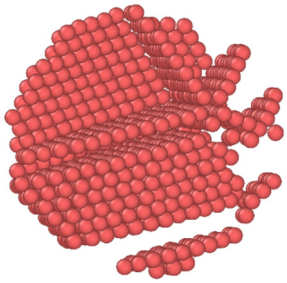
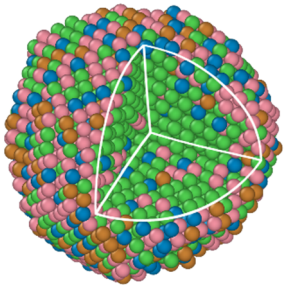
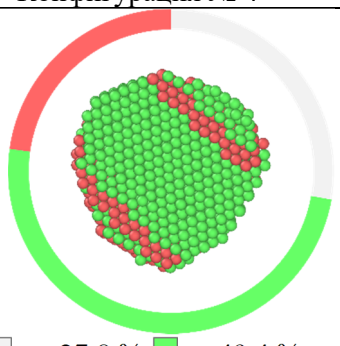
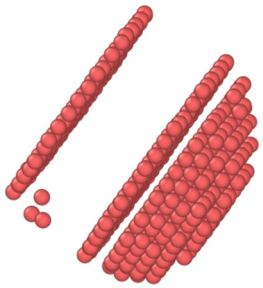
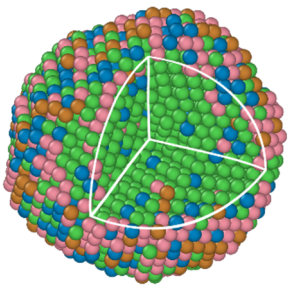
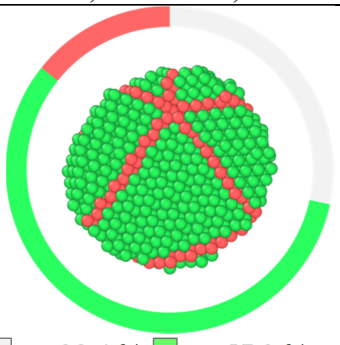
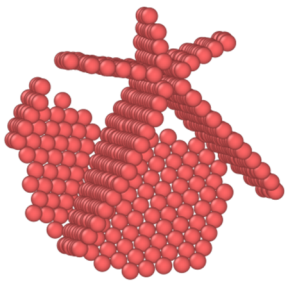
Таблица 2. Параметры гистерезиса процессов плавления и кристаллизации, полученные на основе анализа калорических кривых потенциальной части удельной внутренней энергии (данные усреднены по серии расчетов) наночастиц $Ni-Cu-Fe-Co$.

dT/dt, К/пс	$T_m^{(start)}$, К	$T_m^{(end)}$, К	ΔT_m, К	$T_c^{(start)}$, К	$T_c^{(end)}$, К	ΔT_c, К	$\Delta T = T_m^{(start)} - T_c^{(start)}$, К
Конфигурация 1							
0,5	1517	1538	21	1152	1134	18	365
1	1527	1558	31	1238	1200	38	289
Конфигурация 2							
0,5	1504	1548	44	1202	1176	26	302
1	1536	1566	30	1203	1158	45	333
Конфигурация 3							
0,5	1539	1594	55	1167	1128	39	372
1	1573	1615	42	1157	1114	43	416
Конфигурация 4							
0,5	1558	1602	44	1192	1167	25	365
1	1562	1605	43	1143	1109	34	419
Конфигурация 5							
0,5	1537	1597	60	1189	1155	34	348
1	1560	1605	45	1140	1102	38	420
Конфигурация 6							
0,5	1530	1581	51	1200	1171	29	330
1	1526	1582	56	1132	1084	48	394

Рис. 3 (первый столбец) наглядно показывает, что поатомная визуализация поверхности не дает представления о химической сегрегации и именно вырезание сегмента позволяет лучше идентифицировать различия между структурой поверхности, структурой 2-3 монослоев и структурой ядра. Анализ локальной структуры наночастиц $Ni-Cu-Fe-Co$ конечных конфигураций в большинстве случаев говорит о доминировании ГЦК-локального окружения. Лишь в одном случае (конфигурация № 3, скорость 1 К/пс) доля ГПУ-локального окружения превышает долю ГЦК. По-видимому, ОЦК-фаза должна рассматриваться как точечные дефекты. Доля неидентифицированных (поверхностных атомов) составляет около 30%. Именно конкуренция между ГЦК- и ГПУ-окружением послужила причиной отдельного рассмотрения изменчивости ГПУ-окружения в зависимости от начальной морфологии и скорости термоиндуцированного воздействия (см. столбец 3 на рис. 3). Наиболее симметричные ГПУ-структуры получены для конфигурации № 6 – это пересекающиеся плоскости, формирование которых идентифицируется для конфигураций № 2, 3 и 5 (но их формирование не было полностью завершено до конца моделирования). Для конфигурации № 1 и № 4 при скорости термоиндуцированного воздействия 1 и 0,5 К/пс соответственно образуются дискообразные непересекающиеся плоскости ГПУ-структуры. Кроме того, эти конфигурации ГПУ-структур не являются симметричными.

К/пс	Объемный вид с вырезанным сегментом	Локальная сегрегация в разрезе	Конфигурация локальной ГПУ-структуры
Конфигурация № 1			
0,5			
1			
Конфигурация № 2			
0,5			
1			

Продолжение

Конфигурация № 3			
0,5			
1			
Конфигурация № 4			
0,5			
1			

Продолжение

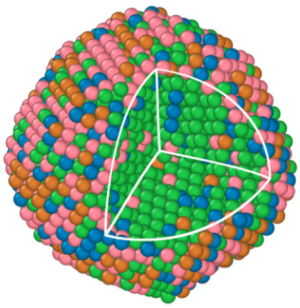
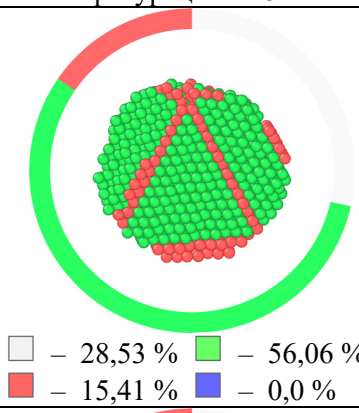
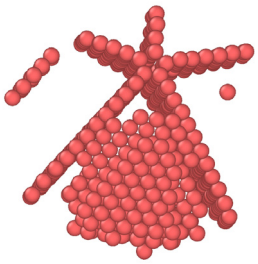
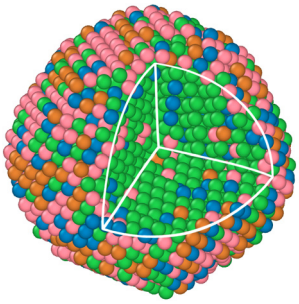
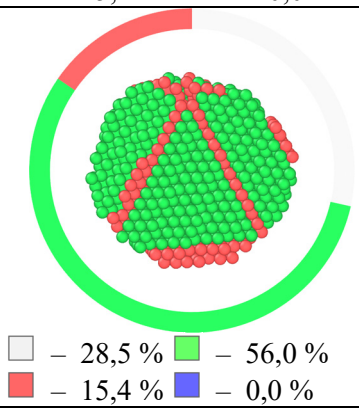
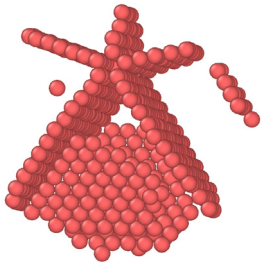
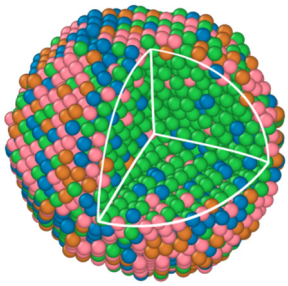
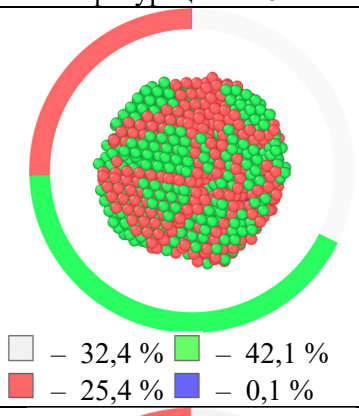
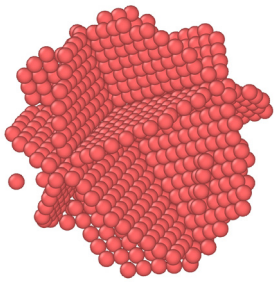
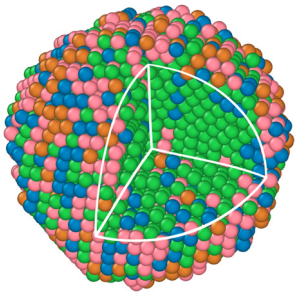
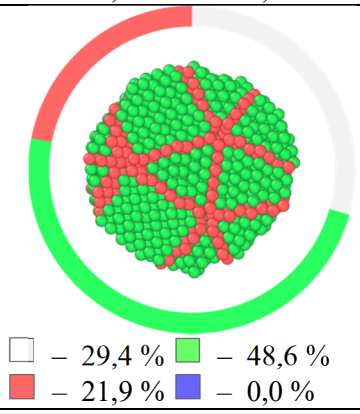
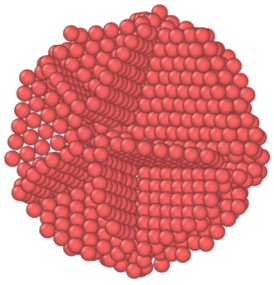
Конфигурация № 5			
0,5			
1			
Конфигурация № 6			
0,5			
1			

Рис. 3. Конечные конфигурации наночастиц $Ni–Cu–Fe–Co$ при температуре 300 К.

Причины такого поведения пока не могут быть объяснены закономерностями химической сегрегации, так как ГПУ-окружение формируется за счет разных компонентов тетрарной наночастицы. Такой тонкий эффект требует отдельного рассмотрения, в том числе с использованием промежуточных скоростей охлаждения. Очевидно, что при одинаковых условиях эксперимента, в том числе релаксации конечных конфигураций, требуется разное время для завершения формирования локальной структуры, причины пока остаются неясными.

4. Заключение

В работе рассмотрено шесть принципиально различных по построению начальных морфологий наночастиц $Ni-Cu-Fe-Co$. Цикл последовательного нагрева и охлаждения для двух скоростей термоиндуцированного воздействия (0,5 К/пс и 1 К/пс), а также релаксация конечных конфигураций привели наночастицы $Ni-Cu-Fe-Co$ в достаточно близкие с точки зрения химической сегрегации состояния, что нельзя сказать о закономерностях структурной сегрегации. Так, анализ методом полиэдральных шаблонов [28] показал, что после цикла нагревания и охлаждения в наночастицах $Ni-Cu-Fe-Co$ сохраняется преимущественно ГЦК-локальное окружение. Исключением является конфигурация № 3 при скорости 1 К/пс, для которой доля ГПУ-локальных структур составляет 37,0%, превышая долю ГЦК-окружений 32,5%. Увеличение скорости термического воздействия (с 0,5 К/пс до 1 К/пс) не вызывает единой для всех морфологий тенденции: доля ГПУ-локальных структур возрастает для конфигураций № 1 и особенно для конфигурации № 3, практически не изменяется для конфигурации № 5 и незначительно уменьшается для конфигураций № 2, 4 и 6. Плоскостное расположение ГПУ-локальных структур позволяет связать их преимущественно с дефектами упаковки и двойниковыми границами соответствующих ГЦК-областей. Пересекающиеся системы таких плоскостей могут соответствовать структурам множественного двойникования, однако их строгая идентификация требует анализа кристаллографических ориентаций.

Параметры гистерезиса плавления и кристаллизации наночастиц $Ni-Cu-Fe-Co$ также зависят от выбора начальной морфологии и скорости термоиндуцированного воздействия. Эта зависимость проявляется не только в изменении температур начала и окончания фазовых переходов, но и связана с изменением наклона участка калорической кривой удельной потенциальной энергии, описывающей кристаллизацию. В Таблице 3 представлены результаты оценки изменения энергетического состояния наночастиц $Ni-Cu-Fe-Co$. Различия в нём между конфигурациями свидетельствуют о конкуренции

термодинамического и кинетического факторов. Для конфигураций № 1-3 более медленное охлаждение обеспечивает более полную химическую и структурную релаксацию, вследствие чего конечная удельная потенциальная энергия снижается сильнее, тогда как для конфигурации № 6 снижение энергии происходит при 1 К/пс. Практическое отсутствие изменения удельной потенциальной энергии конфигурации № 4 может указывать на близость энергетических характеристик исходного и конечного метастабильных состояний. Положительное значение $\Delta u = u^{(end)} - u^{(start)}$ для конфигурации № 5 свидетельствует о разрушении энергетически выгодной исходной морфологии и формировании после кристаллизации менее выгодного метастабильного состояния.

Таблица 3. Сравнение начального и конечного энергетического состояния наночастиц $Ni-Cu-Fe-Co$ при температуре 300 К (цветовое обозначение показывает конфигурации близкие по изменению энергетического состояния).

Тип конфигурации	dT/dt, К/пс	$u^{(start)}$, эВ/атом	$u^{(end)}$, эВ/атом	$\Delta u = u^{(end)} - u^{(start)}$, эВ/атом
Конфигурация № 1	0,5	-4,13586	-4,20524	**-0,07004**
	1	-4,13628	-4,19988	**-0,06500**
Конфигурация № 2	0,5	-4,13054	-4,20119	**-0,07023**
	1	-4,13628	-4,19881	**-0,06499**
Конфигурация № 3	0,5	-4,16467	-4,20696	**-0,04068**
	1	-4,16553	-4,19660	**-0,03184**
Конфигурация № 4	0,5	-4,20371	-4,20567	**-0,00026**
	1	-4,20314	-4,20293	**-0,00031**
Конфигурация № 5	0,5	-4,21343	-4,20594	**+0,00599**
	1	-4,21378	-4,20395	**+0,00820**
Конфигурация № 6	0,5	-4,17202	-4,19435	**-0,02254**
	1	-4,17402	-4,20440	**-0,03206**

Таким образом, исследование многокомпонентных наночастиц на примере $Ni-Cu-Fe-Co$ показало вариативность как термодинамических свойств, так и структурных характеристик при цикле термоиндуцированного воздействия, включающего фазовые переходы плавления и кристаллизации.

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. **Сдобняков, Н.Ю.** Моделирование структурных превращений в однокомпонентных и многокомпонентных металлических наносистемах: учебник / Н.Ю. Сдобняков. – Тверь: Тверской государственный университет, 2025. – 408 с. DOI:10.26456/sny.2025.408.

2. **Вересов, С.А.** К вопросу изучения процессов структурообразования в четырехкомпонентных наночастицах / С.А. Вересов, К.Г. Савина, А.Д. Веселов и др. // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2022. – Вып. 14. – С. 371-382. DOI: 10.26456/pcascnn/2022.14.371.

3. **Sdobnyakov, N.Yu.** Atomistic simulation of thermoinduced structural transformations in four-component Cu–Au–Pt–Pd nanoalloys with different morphologies / N.Yu. Sdobnyakov, V.M. Samsonov, S.V. Serov et al. // Colloid Journal. 2025. – V. 87. – I. 4. – P. 560-571. DOI: 10.1134/S1061933X25600526.
4. **Сдобняков, Н.Ю.** Комплексный подход к моделированию плавления и кристаллизации в пятикомпонентных металлических наночастицах: молекулярная динамика и метод Монте-Карло / Н.Ю. Сдобняков, А.Ю. Колосов, Д.Н. Соколов и др. // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2023. – Вып. 15. – С. 589-601. DOI: 10.26456/pcascnn/2023.15.589.
5. **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.
6. **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.
7. **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.
8. **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.
9. **Kolosov, A.Yu.** Chemical and structural segregation in quaternary Ni-Cu-Fe-Co nanoparticles: atomistic simulation and experiment / A.Yu. Kolosov, N. Nepsha, D.N. Sokolov et al. // ACS Physical Chemistry Au. – 2026. – V. 6. – I. 1. – P. 163-173. DOI: 10.1021/acsphyschemau.5c00102.
10. **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.
11. **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.
12. **Самсонов, В.М.** Прогнозирование сегрегации в бинарных металлических наночастицах: термодинамическое и атомистическое моделирование / В.М. Самсонов, И.В. Талызин, А.Ю. Картошкин, М.В. Самсонов // Физика металлов и металловедение. – 2019. – Т. 120. – № 6. – С. 630-636. DOI: 10.1134/S0015323019060111.
13. **Samsonov, V.** Puzzles of surface segregation in binary Pt–Pd nanoparticles: molecular dynamics and thermodynamic simulations / V. Samsonov, A. Romanov, I. Talyzin et. al. // Metals. – 2023. – V. 13. – I. 7. – Art. № 1269. – 20 p. DOI: 10.3390/met13071269.
14. **Самсонов, В.М.** Поверхностная сегрегация в бинарных металлических наночастицах: атомистическое и термодинамическое моделирование / В.М. Самсонов, А.А. Романов, И.В. Талызин, Д.В. Жигунов, В.В. Пуйтов // Известия Российской академии наук. Серия физическая. – 2024. – Т. 88. – № 5. – С. 767-773. DOI: 10.31857/S0367676524050125.
15. **Романовский, В.И.** Особенности синтеза наночастиц Cu-Ni: эксперимент и компьютерное моделирование / В.И. Романовский, А.Ю. Колосов, А.А. Хорт и др. // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2020. – Вып. 12. – С. 293-309. DOI: 10.26456/pcascnn/2020.12.293.
16. **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.
17. **Sdobnyakov, N.** Solution combustion synthesis and Monte Carlo simulation of the formation of CuNi integrated nanoparticles / N. Sdobnyakov, A. Khort, V. Myasnichenko et al. // Computational Materials Science. – 2020. – V. 184. – Art. № 109936. – 12 p. DOI: 10.1016/j.commatsci.2020.109936.
18. **Kolosov, A.Yu.** Comparative atomistic simulation of structure and structural transformations in Ni-Ag and Ni-Cu nanoalloys / A.Yu. Kolosov, K.G. Savina, N.I. Nepsha et al. // Physics of the Solid State. – 2024. – V. 66. – I. 12. – P. 2027-2032. DOI: 10.61011/PSS.2024.12.60180.6394PA.
19. **Liao, H.** Surface segregation in bimetallic nanoparticles: A critical issue in electrocatalyst engineering / H. Liao, A. Fisher, Z.J. Xu // Small. – 2015. – V. 11. – I. 27. – P. 3221-3246. DOI: 10.1002/smll.201403380.
20. **Bohra, M.** Surface segregation in chromium-doped NiCr alloy nanoparticles and its effect on their magnetic behavior / M. Bohra, P. Grammatikopoulos, R.E. Diaz et al. // Chemistry of Materials. – 2015. – V. 27. – I. 9. – P. 3216-3225. DOI: 10.1021/acs.chemmater.5b00837.

21. **Jia, M.** Fe-Co-Ni-Cu high entropy magnetic nanoparticles with high magnetothermal properties / M. Jia, D. Liang, Q. Du et al. // Scripta Materialia. – 2024. – V. 247. – Art. № 116119. – 6 p. DOI: 10.1016/j.scriptamat.2024.116119.
22. **Mao, A.** Plasma arc discharge synthesis of multicomponent Co-Cr-Cu-Fe-Ni nanoparticles / A. Mao, H. Xiang, X. Ran et al. // Journal of Alloys and Compounds. – 2019. – V. 775. – P. 1177-1183. DOI: 10.1016/j.jallcom.2018.10.170.
23. **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.
24. **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.
25. **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.
26. **Karolewski, M.A.** Tight-binding potentials for sputtering simulations with fcc and bcc metals / M.A. Karolewski // Radiation Effects and Defects in Solids. – 2001. – V. 153. – I. 3. – P. 239-255. DOI: 10.1080/10420150108211842.
27. **Paz Borbón, L.O.** Computational studies of transition metal nanoalloys / L.O. Paz Borbón. – Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 2011. – 155 p. DOI: 10.1007/978-3-642-18012-5.
28. **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.

References:

1. Sdobnyakov N.Yu. *[Modelirovanie strukturnykh prevrashchenij v odnokomponentnykh i mnogokomponentnykh metallicheskikh nanosistemakh: uchebnik]* Simulation of structural transformations in single-component and multi-component metallic nanosystems: a textbook. Tver, Tver State University Publ., 2025, 408 p. DOI:10.26456/sny.2025.408. (In Russian).
2. Veresov S.A., Savina K.G., Veselov A.D. et al. K voprosu izucheniya protsessov strukturoobrazovaniya v chetyrekhkomponentnykh nanochastitsakh [To the problem of investigating the processes of structure formation in four-component nanoparticles], *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov [Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials]*, 2022, issue 14, pp. 371-382. DOI: 10.26456/pcascnn/2022.14.371. (In Russian).
3. Sdobnyakov N.Yu., Samsonov V.M., Serov S.V. et al. Atomistic simulation of thermoinduced structural transformations in four-component Cu–Au–Pt–Pd nanoalloys with different morphologies, Colloid Journal, 2025, vol. 87, issue 4, pp. 560-571. DOI: 10.1134/S1061933X25600526.
4. Sdobnyakov N.Yu., Kolosov A.Yu., Sokolov D.N. et al. Kompleksnyj podkhod k modelirovaniyu plavleniya i kristallizatsii v pyatikomponentnykh metallicheskikh nanochastitsakh: molekulyarnaya dinamika i metod Monte-Karlo [Complex approach to the simulation of melting and crystallization in five-component metallic nanoparticles: molecular dynamics and the Monte Carlo method], *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov [Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials]*, 2023, issue 15, pp. 589-601. DOI: 10.26456/pcascnn/2023.15.589. (In Russian).
5. Kolosov A.Yu., Savina K.G., Veresov S.A. et al. Stsenarii strukturoobrazovaniya v chetyrekhkomponentnykh nanochastitsakh: atomisticheskoe modelirovanie [Scenarios of structure formation in quaternary nanoparticles: atomistic modeling], *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).
6. 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).
7. Serov S.V., Nepsha N.I., Kolosov A.Yu. et al. Strukturnye prevrashcheniya v chetyrekhkomponentnykh nanosplavakh Cu-Au-Pt-Pd razlichnoj morfologii pri posledovatelnykh termoindutsirovannykh tsiklakh [Structural transformations in quaternary nanoalloys Cu-Au-Pt-Pd 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).
8. 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.
9. Kolosov A.Yu., Nepsha N., Sokolov D.N. et al. Chemical and structural segregation in quaternary Ni-Cu-Fe-Co nanoparticles: atomistic simulation and experiment, *ACS Physical Chemistry Au*, 2026, vol. 6, issue 1, pp. 163-173. DOI: 10.1021/acsphyschemau.5c00102.
10. 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.
11. 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.
12. Samsonov V.M., Talyzin I.V., Kartoshkin A.Y. et al. Prediction of segregation in binary metal nanoparticles: thermodynamic and atomistic simulations, *Physics of Metals and Metallography*, 2019, vol. 120, issue 6, pp. 578-583. DOI: 10.1134/S0031918X19060115.
13. Samsonov V., Romanov A., Talyzin I. et al. Puzzles of surface segregation in binary Pt–Pd nanoparticles: molecular dynamics and thermodynamic simulations, *Metals,* 2023, vol. 13, issue 7, art. no. 1269, 20 p. DOI: 10.3390/met13071269.
14. Samsonov V.M., Romanov A.A., Talyzin I.V. et al. Surface segregation in binary metallic nanoparticles: atomistic simulation and thermodynamic modeling, *Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics*, 2024, vol. 88, issue 5, pp. 739-744. DOI: 10.1134/s1062873824706512.
15. Romanovskii V.I., Kolosov A.Yu., Khort A.A. et al. Osobennosti sinteza nanochastits Cu-Ni: eksperiment i kompyuternoe modelirovanie [Features of Cu-Ni nanoparticle synthesis: experiment and computer simulation], *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov [Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials]*, 2020, issue 12, pp. 293-309. DOI: 10.26456/pcascnn/2020.12.293.
16. 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.
17. Sdobnyakov N., Khort A., Myasnichenko V., Podbolotov K., Romanovskaia E., Kolosov A., Sokolov D., Romanovski V. Solution combustion synthesis and Monte Carlo simulation of the formation of CuNi integrated nanoparticles, *Computational Materials Science*, 2020, vol. 184, art. no 109936, 12 p. DOI: 10.1016/j.commatsci.2020.109936.
18. Kolosov A.Yu., Savina K.G., Nepsha N.I. et al. Comparative atomistic simulation of structure and structural transformations in Ni-Ag and Ni-Cu nanoalloys, *Physics of the Solid State*, 2024, vol. 66, issue 12, pp. 2027-2032. DOI: 10.61011/PSS.2024.12.60180.6394PA.
19. Liao H., Fisher A., Xu Z.J. Surface segregation in bimetallic nanoparticles: A critical issue in electrocatalyst engineering, *Small*, 2015, vol. 11, issue 27, pp. 3221-3246. DOI: 10.1002/smll.201403380.
20. Bohra M., Grammatikopoulos P., Diaz R.E. et al. Surface segregation in chromium-doped NiCr alloy nanoparticles and its effect on their magnetic behavior, *Chemistry of Materials*, 2015, vol. 27, issue 9, pp. 3216-3225. DOI: 10.1021/acs.chemmater.5b00837.
21. Jia M., Liang D., Du Q. et al. Fe-Co-Ni-Cu high entropy magnetic nanoparticles with high magnetothermal properties, *Scripta Materialia*, 2024, vol. 247, art. no. 116119, 6 p. DOI: 10.1016/j.scriptamat.2024.116119.
22. Mao A., Xiang H., Ran X. et al. Plasma arc discharge synthesis of multicomponent Co-Cr-Cu-Fe-Ni nanoparticles, *Journal of Alloys and Compounds*, 2019, vol. 775, pp. 1177-1183. DOI: 10.1016/j.jallcom.2018.10.170.
23. Sdobnyakov N.Yu., Kolosov A.Yu., Sokolov D.N., Savina K.G. *MDSym.* Certificate RF, no. 2025683621, 2025. (In Russian).
24. 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.
25. 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.
26. Karolewski M.A. Tight-binding potentials for sputtering simulations with fcc and bcc metals, *Radiation Effects and Defects in Solids*, 2001, vol. 153, issue 3, pp. 239-255. DOI: 10.1080/10420150108211842.
27. Paz Borbón L.O. *Computational studies of transition metal nanoalloys*. Berlin, Heidelberg, Springer-Verlag, 2011, 155 p. DOI: 10.1007/978-3-642-18012-5.
28. 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.