

**К проблеме апробации параметров потенциала сильной связи:
влияние соотношения между парным и многочастичным
взаимодействиями на процесс структурообразования в бинарных
наночастицах Pd-Pt**

Н.Ю. Сдобняков, А.Ю. Колосов, Д.Н. Соколов, К.Г. Савина, Н.И. Непша,
Я.П. Савельев, Г.Д. Ломоносов
ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»
170002, Россия, Тверь, Садовый пер., 35
nsdobnyakov@mail.ru

DOI: 10.26456/pcascnn/2024.16.399

Аннотация: Достоверность атомистического моделирования определяется корректностью постановки задачи, включая выбор потенциала межатомного взаимодействия и его параметризации. В данной статье проведена детальная апробация параметров потенциала сильной связи в части исследования влияния соотношения между парным и многочастичным взаимодействиями на процесс структурообразования в бинарных наночастицах *Pd-Pt*. Были выбраны три параметризации потенциала сильной связи для перекрестных параметров: набор (I) отвечал использованию правила Лоренца-Бертло, наборы (II) и (III) задавали законы масштабирования параметров парного взаимодействия и параметров многочастичного взаимодействия соответственно. Для наборов (I) и (III) установлена поверхностная сегрегация атомов палладия, в то время как использование набора (II) приводит к формированию Янус-структуры. Кроме того, установлены различия в формировании локальной структуры в бинарных наночастицах *Pd-Pt*. Набор (III) предсказывает доминирование локальной ОЦК структуры. Также были рассчитаны радиальные распределения локальной плотности атомов *Pd* и *Pt* в наночастице *Pd-Pt* при конечной температуре 300 К.

Ключевые слова: метод молекулярной динамики, потенциал сильной связи, парное взаимодействие, многочастичное взаимодействие, наночастицы *Pd-Pt*, структурообразование.

1. Введение и постановка задачи

Одной из важных методологических проблем атомистического моделирования является выбор потенциала и его параметров межатомного взаимодействия [1, 2]. Даже для монометаллических систем к настоящему времени нет единого подхода для адекватного описания всего комплекса физико-химических характеристик. Так, например, до сих пор встречаются работы, когда для наноразмерных металлических наночастиц используются парные потенциалы: потенциал Леннард-Джонса, потенциал Морзе и ряд других [3]. Кроме того, ранее нами использовался потенциал Шоммерса [4], который был разработан на основе комбинации теории псевдопотенциала с феноменологическим подходом и концепцией эффективного парного потенциала для повышения точности и расширения области применимости, в том числе для применения к поверхностям и наноструктурам. В [4] отмечалось, что различие между потенциалами Морзе и Шоммерса заключается в следующем: помимо иной глубины и положения

минимума, потенциал Морзе не содержит крупномасштабных осцилляций, обусловленных ион-электрон-ионным взаимодействием в металлических кристаллах. Аналогичным по форме потенциалом является потенциал Шиффа, который также апробировался нами [5] для исследования термодинамических характеристик, в частности размерной зависимости поверхностного натяжения твердых металлических наночастиц. Как показывает обзор источников последних лет, для описания металлических наночастиц, как правило, используют две наиболее популярные модели: потенциал сильной связи [6] или метод погруженного атома [7].

Наиболее системной работой, в которой обсуждается проблема поиска перекрестных параметров для описания бинарных металлических наночастиц, по-видимому, является [8]. В [8] предложена и отчасти апробирована концепция нахождения перекрестных параметров путем введения весовой функции:

$$P(\alpha - \beta) = wP(\alpha - \alpha) + (1 - w)P(\beta - \beta), \quad (1)$$

где P – параметр потенциала сильной связи [6], w – весовой коэффициент. В ряде работ, посвященных атомистическому моделированию металлических наночастиц, по умолчанию принимается значение $w=0,5$. Фактически такой выбор для соотношения (1) соответствует использованию для металлических систем, включая потенциал сильной связи [6], так называемого правила Лоренца-Бертло – когда параметры A , ζ находятся как средние геометрические величины, а p , q и r_0 как средние арифметические. Нами данный подход был развит еще в [1] и в дальнейшем применялся не только для бинарных [9], но и для многокомпонентных металлических наночастиц [10-12].

Таблица 1. Параметры потенциала сильной связи.

Металл	A , эВ	ζ , эВ	p	q	r_0 , Å
Pd [6]	0,1746	1,718	10,867	3,742	2,759
Pt [6]	0,2975	2,695	10,612	4,004	2,775
$Pd-Pt$ (I) [13]	0,2279	2,152	10,739	3,873	2,767
$Pd-Pt$ (II) [13]	0,35	2,2	10,74	3,87	2,76
$Pd-Pt$ (III) [13]	0,23	3,0	10,74	3,87	2,76

Таким образом, из представленного краткого обзора видно, что проблема выбора параметров для потенциала сильной связи даже для монометаллических связей до сих пор в полной мере не решена, а для перекрестных параметров такая задача является поисковой и универсальных алгоритмов решения до настоящего времени не имеется. В качестве примера приведем работу [13] (она цитируется в [8]), в которой для изучения процессов сегрегации в $Pd - Pt$ наносплаве предложены три набора параметров потенциала сильной связи (см. Таблицу 1).

Первый набор [13] для потенциала сильной связи отвечает значению параметра $w = 0,5$ в соотношении (1) для пространственных переменных, для энергетических параметров используется среднее геометрическое (т.е. использовано правило Лоренца-Бертло). Второй и третий наборы отвечают различным соотношениям между энергетическими параметрами. Для второго набора $A < \zeta$ (точнее условие выглядит так $A(Pd - Pt) > A(Pt - Pt) > A(Pd - Pd)$, т.е. задан закон масштабирования параметров парного взаимодействия), для третьего – $A > \zeta$ (точнее условие выглядит так $\zeta(Pd - Pt) > \zeta(Pt - Pt) > \zeta(Pd - Pd)$, т.е. задан закон масштабирования параметров многочастичного взаимодействия). Несмотря на то, что предельные случаи, т.е. варианты при которых гетероатомный параметр лежал вне значений для гомоатомных значений, очень упрощены, такие допущения позволяют дать представление об относительной роли парного и многочастичного взаимодействия в потенциале сильной связи.

Целью данной работы является продолжение впервые апробированных в [14] исследований, направленных на изучение влияния соотношения между парным и многочастичным взаимодействиями на процесс структурообразования в бинарных наночастицах $Pd - Pt$.

2. Методология моделирования и описание результатов

В [14] для моделирования наносистем $Pd - Pt$ применялся метод Монте-Карло [15]. В рамках компьютерного эксперимента наночастицы $Pd - Pt$ диаметром 5 нм с общим количеством атомов 4000 эквиатомного состава охлаждались из расплава при начальной температуре 1400 К. Шаг по температуре составлял 5 К, а общее количество шагов Монте-Карло 10^8 . Затем полученная структура анализировалась путем сопоставления полиэдрических шаблонов [16] при температуре 300 К (см. рис. 1).

Полученные в [14] результаты свидетельствуют о том, что при переходе от набора (I) к набору (II) изменяется пространственное распределение компонент: атомы палладия сегрегируют на поверхности, образуя «наросты», и не образуют структуру ядро-оболочка, как в случае набора (I). При этом анализ локальной структуры также демонстрирует доминирующее положение ГЦК и ГПУ фаз. Таким образом варьирование параметров парного взаимодействия существенно повлияет на сегрегационное поведение, но слабо влияет на структуру бинарных наночастиц $Pd - Pt$. В то же время при переходе от набора (I) к набору (III), т.е. при варьировании параметров многочастичного взаимодействия, закономерности структурной сегрегации практически не меняются – атомы Pd выходят на поверхность, однако, судя по рис. 1, соотношение атомов Pd и Pt на поверхности наночастицы близко к эквиатомному. Что касается

структуры наночастиц $Pd-Pt$, то доминирующей фазой является ОЦК, что очевидно не является характерным для бинарных металлических наночастиц $Pd-Pt$ [17].

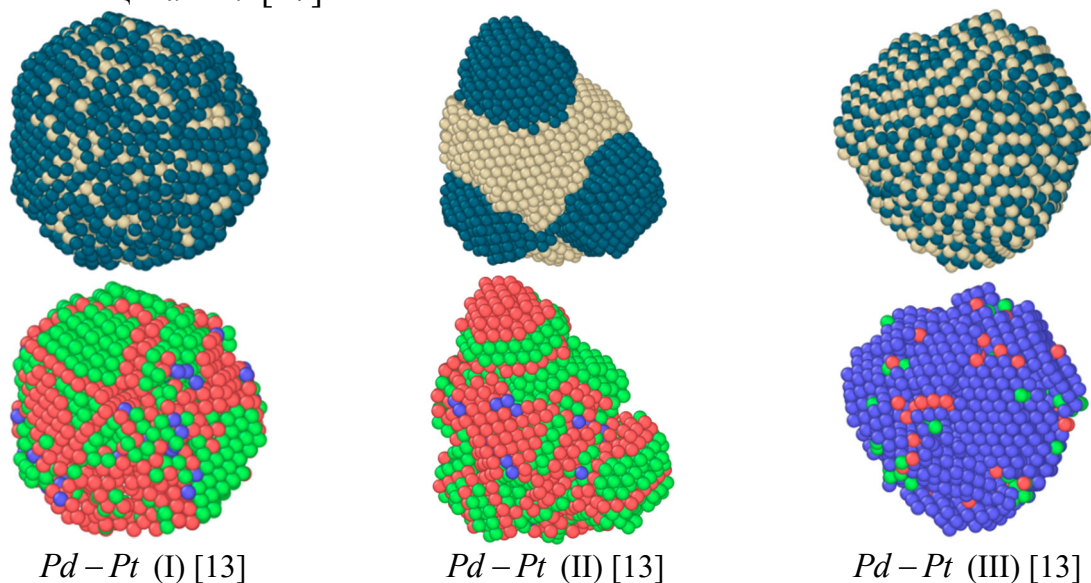


Рис. 1. Мгновенные конфигурации наночастиц $Pd-Pt$, полученные путем кристаллизации из расплава (верхняя строка). Желтые атомы – Pt , темно-зеленые – Pd . Анализ структуры методом сопоставления полиэдрических шаблонов (нижняя). Цветом обозначена принадлежность атомов к определенной локальной структуре: зеленый цвет – ГЦК, красный – ГПУ, синий – ОЦК.

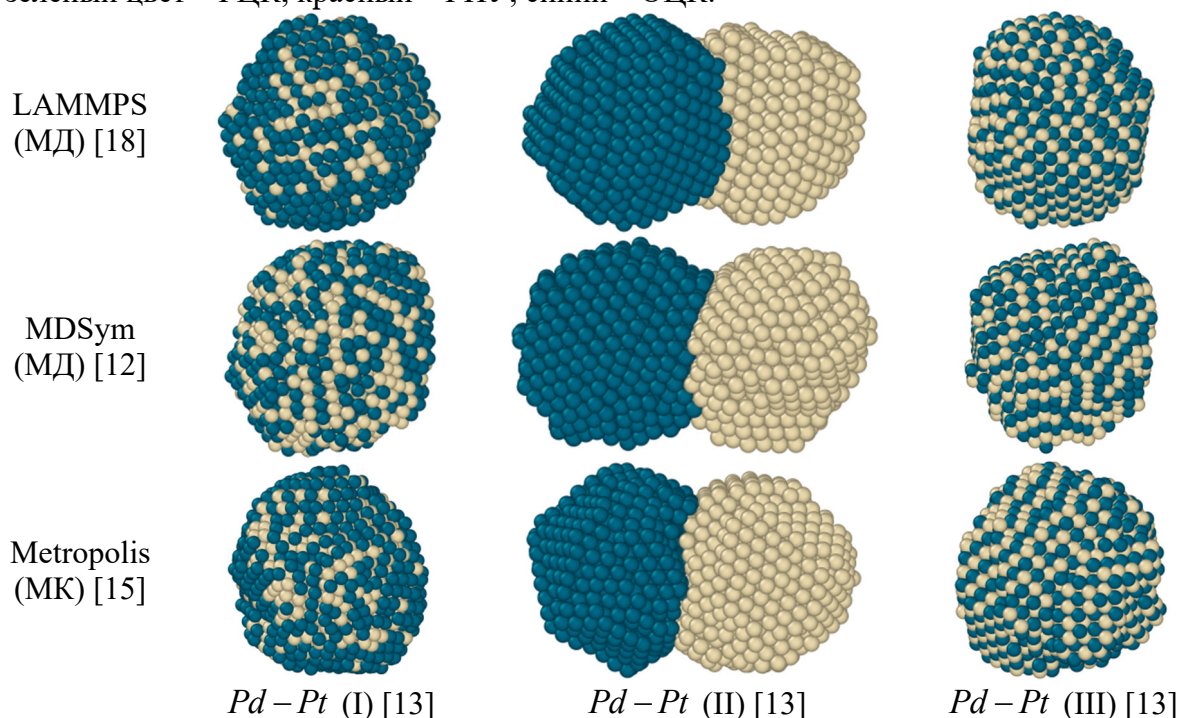


Рис. 2. Мгновенные конфигурации наночастиц $Pd-Pt$ эквимолярного состава (состоит из 2046 атомов, размер 4 нм), полученные путем кристаллизации из расплава.

Очевидно, что представленные на рис. 1 результаты, требуют верификации с использованием различных алгоритмов моделирования и

используемого ПО. На рис. 2 представлены конечные конфигурации при температуре 300 К, полученные с использованием как альтернативных методов атомистического моделирования (молекулярная динамика (МД) и метод Монте-Карло (МК)), так и альтернативного ПО [12, 15, 18]. Параметры МК моделирования соответствовали описанным выше в работе [14] Для МД моделирования (MDSym и LAMMPS) были использованы следующие параметры моделирования: скорость изменения температуры в процессах нагрева и охлаждения составляла 0,5 К/пс, начальная релаксация наночастиц в начале моделирования при постоянной температуре составляла 15 пс.

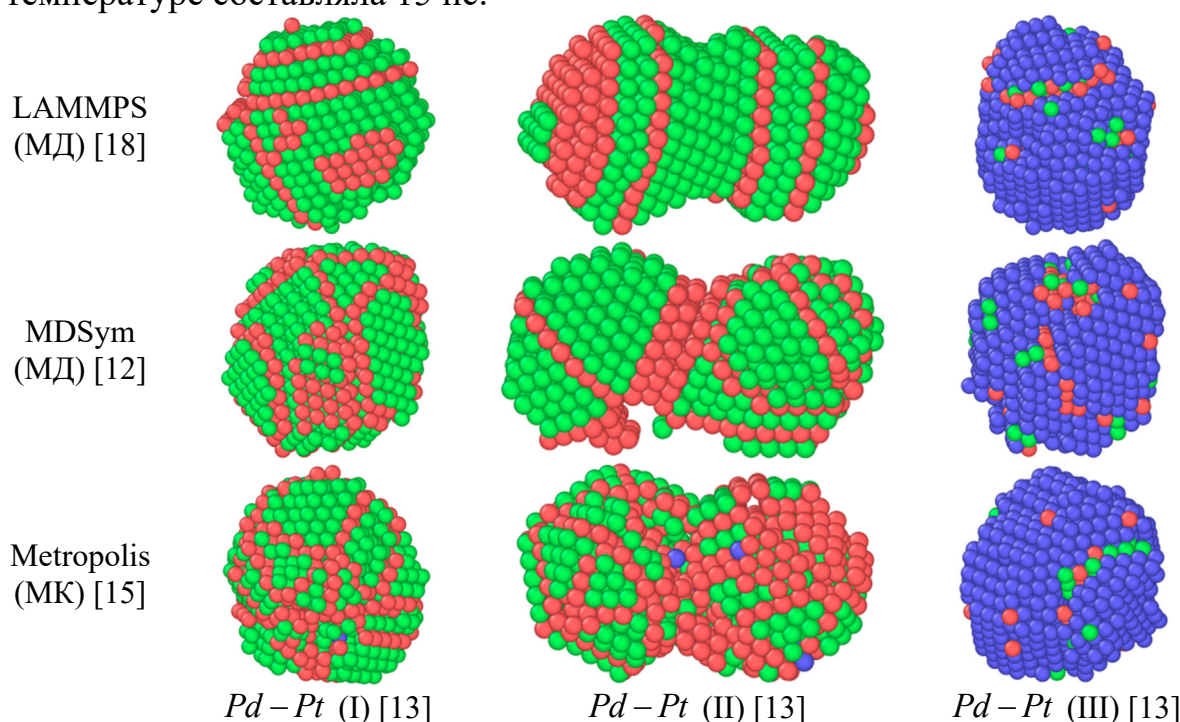


Рис. 3. Локальная структура наночастиц *Pd – Pt*, показанных на рис. 2. Обозначения фаз соответствуют рис. 1.

Видно, что оба метода МК и МД правильно предсказывают сегрегационное поведение атомов в бинарной наночастице *Pd – Pt*. Уменьшение размера бинарных наночастиц (5 нм в [14] и 4 нм в настоящей работе, что обусловлено более ярко выраженным размерным эффектом, в частности для поверхностного натяжения [19]) при использовании набора (II) демонстрирует формирование биметаллической наночастицы, соединенной манжетой (область соприкосновения), что в какой то мере может быть аналогом Янус структуры, которая характерна для *Co – Ag, Ni – Ag, Pt – Ag, Pt – Au* [20]. Видно, что платина в соединениях с золотом и серебром может образовывать Янусоподобные структуры (термин в [20] Janus-like structure). Такой термин используется в [20], поскольку в рассматриваемых наночастицах полного разделения компонентов не наблюдается, так как атомы серебра (или золота) также

сегрегируют на поверхность, образуя монослой. Для бинарных наночастиц эквиатомного состава, в которых присутствует палладий, как правило, характерно образование или структуры ядро-оболочка (термины в [20]: low level of core-shell, high level of core-shell), или наблюдается равномерное распределение компонентов. Исходя из данных [20], полученных на основе комбинированного МК и МД компьютерного эксперимента и альтернативного потенциала – потенциала погруженного атома, можно констатировать, что полученные данные по сегрегационному поведению атомов платины и палладия для набора (II) являются артефактом и не должны реализовываться в натурном эксперименте, а также не предсказываются в рамках, в том числе термодинамического моделирования [21].

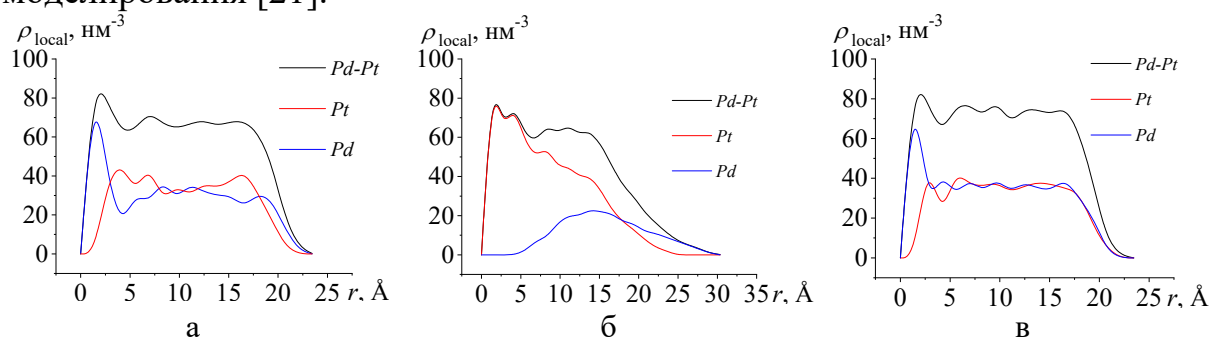


Рис. 4. Радиальные распределения локальной плотности атомов Pd и Pt в наночастице $Pd-Pt$ при конечной температуре 300 К: а – $Pd-Pt$ (I), б – $Pd-Pt$ (II), в – $Pd-Pt$ (III).

Данные рис. 3, как и рис. 1 позволяют также проследить изменения в структуре $Pd-Pt$ при переходе от набора (I) к наборам (II) и (III). Уменьшение размера исследуемых наночастиц приводит к частичному изменению их структуры. Так, сравнивая рис. 1 и рис. 2 можно сделать вывод о том, что с увеличением размера наночастиц атомы платины формируют всё еще одну область, тогда как атомы палладия концентрируются в несколько участков, как связанных, так и не связанных между собой.

Интерес представляет изучение радиальных распределений локальной плотности компонентов с использованием методики, изложенной в [22]. На рис. 4 представлены результаты расчетов в ПО Metropolis (метод МК) [15]. Очевидно, что именно рис. 4 а отвечает реальной ситуации с сегрегацией Pd . Рис. 4 б отвечает гантелеобразной форме наночастицы $Pd-Pt$ и не может адекватно описать закономерности сегрегации атомов в ней. Такая конфигурация больше соответствует начальной стадии процесса коалесценции или спекания.

4. Заключение

Необходимо отметить, что поисковые исследования при моделировании моно-, бинарных и многокомпонентных наночастиц

являются обязательным этапом исследований. И поскольку к настоящему времени эксперименты в области синтеза и изучения структуры и структурных превращений, а также определение физико-химических характеристик затруднительны и не могут быть проведены для непрерывного спектра размеров и композиций по составу, подбор и апробация потенциалов атомного взаимодействия может на данном этапе прогнозировать и обосновывать отдельные свойства металлических наночастиц, которые или не получены в эксперименте, или пока не в достаточной мере верифицированы. В нашем исследовании набор (II) предсказывает формирование Янус структуры, нехарактерной для бинарной системы $Pd-Pt$. Однако считать данный результат отрицательным преждевременно, т.к. необходимо убедиться в отсутствии такого эффекта в экспериментальных исследованиях, отвечающих разным размерам и составам, а также разным условиям: скорости охлаждения, наличию внешнего давления и т.п.

Исследования выполнены при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках выполнения государственного задания в сфере научной деятельности (проект № 0817-2023-0006).

Библиографический список:

1. 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.
2. Сдобняков, Н.Ю. Изучение термодинамических и структурных характеристик наночастиц металлов в процессах плавления и кристаллизации: теория и компьютерное моделирование: монография / Н.Ю. Сдобняков, Д.Н. Соколов. – Тверь: Издательство Тверского государственного университета, 2018. – 176 с.
3. Рит, М. Наноконструирование в науке и технике. Введение в мир нанорасчета / М. Рит; пер. с англ. – Москва-Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2005. – 160 с.
4. Сдобняков, Н.Ю. Исследование удельной свободной поверхностной энергии наночастиц алюминия с использованием потенциала Шоммера / Н.Ю. Сдобняков, А.Н. Базулев, В.М. Самсонов, Д.А. Кульпин, Д.Н. Соколов // Журнал структурной химии. – 2009. – Т. 50. – № 6. – С. 1223-1228.
5. Сдобняков, Н.Ю. Исследование размерной зависимости поверхностного натяжения твердых наночастиц на основе термодинамической теории возмущений / Н.Ю. Сдобняков, В.М. Самсонов // Известия ВУЗов: Химия и химическая технология. – 2003. – Т. 46. – Вып. 5. – С. 90-94.
6. 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.
7. Daw, M.S. Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals / M.S. Daw, M.I. Baskes // Physical Review B. – 1984. – V. 29. – I. 12. – P. 6443-6453. DOI: 10.1103/PhysRevB.29.6443.
8. 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.
9. Bogdanov, S. Molecular dynamics simulation of the formation of bimetallic core-shell nanostructures with binary Ni–Al nanoparticle quenching / S. Bogdanov, V. Samsonov, N. Sdobnyakov et al. // Journal of Materials Science. – 2022. – V. 57. – I. 28. – P. 13467-13480. DOI: 10.1007/s10853-022-07476-2.
10. Sdobnyakov, N.Yu. Simulation of phase transformations in titanium nanoalloy at different cooling rates / N.Yu. Sdobnyakov, V.S. Myasnichenko, C.-H. San et al. // Materials Chemistry and Physics. – 2019. – V. 238. – Art. № 121895. – 9 p. DOI: 10.1016/j.matchemphys.2019.121895.

11. **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.
12. **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.
13. **Massen, C.** Geometries and segregation properties of platinum–palladium nanoalloy clusters / C. Massen, T.V. Mortimer-Jones, R.L. Johnston // Journal of the Chemical Society, Dalton Transactions. – 2002. – I. 23. – P. 4375-4388. DOI: 10.1039/B207847C.
14. **Колосов, А.Ю.** Влияние парного и многочастичного взаимодействия на процесс структурообразования в бинарных наночастицах Pd-Pt / А.Ю. Колосов, Д.Н. Соколов, К.Г. Савина и др. // XIII Международная научная конференция «Химическая термодинамика и кинетика», 15-19 мая 2023, Великий Новгород: сборник научных трудов. – Великий Новгород: НовГУ им. Ярослава Мудрого, 2023. – С. 147-149.
15. **Свидетельство № 2019661915 Российская Федерация. Metropolis** / Д.Н. Соколов, Н.Ю. Сдобняков, А.Ю. Колосов, П.М. Ершов, С.С. Богданов; заявитель и правообладатель Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Тверской государственный университет». – № 2019660847; заявл. 30.08.2019; зарегистрировано в реестре программ для ЭВМ 11.09.2019. – 1 с.
16. **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.
17. **Nguyen, V.L.** New experimental evidences of Pt–Pd Bimetallic nanoparticles with core–shell configuration and highly fine-ordered nanostructures by high-resolution electron transmission microscopy / V.L. Nguyen, O. Michitaka, M. Takashi et. al. // The Journal of Physical Chemistry C. – 2012. – V. 116. – I. 22. – P. 12265-12274. DOI: 10.1021/jp303117y.
18. LAMMPS Molecular Dynamics Simulator. – Режим доступа: www.url: http://lammps.sandia.gov. – 15.08.2024.
19. **Samsonov, V.M.** Size dependence of the surface tension and the problem of Gibbs thermodynamics extension to nanosystems / V.M. Samsonov, N.Yu. Sdobnyakov, A.N. Bazulev // Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects. – 2004. – V. 239. – I. 1-3. – P. 113-117. DOI: 10.1016/j.colsurfa.2004.01.016.
20. **Eom, N.** General trends in core-shell preferences for bimetallic nanoparticles / N. Eom, M.E. Messing, J. Johnson, K. Deppert // ACS Nano. – 2021. – V. 15. – I. 5. – P. 8883-8855. DOI: 10.1021/acsnano.1c01500.
21. **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.
22. **Талызин, И.В.** Идентификация сложных наноструктур ядро-оболочка по радиальным распределениям локальной плотности компонентов / И.В. Талызин, С.С. Богданов, В.М. Самсонови др. // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2022. – Вып. 14. – С. 307-320. DOI: 10.26456/pcascnn/2022.14.307.

References:

1. Sdobnyakov N.Yu., Kolosov A.Yu., Bogdanov S.S. *Modelirovanie protsessov koalestsentsii i spekaniya v mono- i bimetallicheskih 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).
2. Sdobnyakov N.Yu., Sokolov D.N. *Izuchenie termodinamicheskikh i strukturnykh kharakteristik nanochastits metallov v protsessakh plavleniya i kristallizatsii: teoriya i komp'yuternoe modelirovanie: monografiya* [Study of the thermodynamic and structural characteristics of metal nanoparticles in the processes of melting and crystallization: theory and computer modeling: monograph]. Tver, Tver State University Publ., 2018, 176 p. (In Russian).
3. Rieth M. Nano-engineering in science and technology. An introduction to the world of nano-design, *Series on the Foundations of Natural Science and Technology*, vol. 6. 2003, Singapore, World Scientific Publishing Company, 164 p. DOI: 10.1142/5026.

4. Sdobnyakov N.Yu., Bazulev A.N., Samsonov V.M., Kul'pin D.A., Sokolov D.N. Study on the free surface energy per unit area of aluminum nanodroplets using the Schommers potential, *Journal of Structural Chemistry*, 2009, vol. 50, issue 6, pp. 1171-1176. DOI: 10.1007/s10947-009-0172-2.
5. Sdobnyakov N.Yu., Samsonov V.M. Issledovanie razmernoj zavisimosti poverkhnostnogo natyazheniya tverdykh nanochastits na osnove termodinamicheskoy teorii vozmushchenij [Study of the size dependence of surface tension of solid nanoparticles based on thermodynamic perturbation theory], *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedenii, seriya Khimiya i khimicheskaya tekhnologiya [ChemChemTech]*, 2003, vol. 46, issue 5, pp. 90-94. (In Russian).
6. 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.
7. Daw M.S., Baskes M.I. Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals, *Physical Review B*, 1984, vol. 29, issue 12, pp. 6443-6453. DOI: 10.1103/PhysRevB.29.6443.
8. 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.
9. Bogdanov S., Samsonov V., Sdobnyakov N. et al. Molecular dynamics simulation of the formation of bimetallic core-shell nanostructures with binary Ni–Al nanoparticle quenching, *Journal of Materials Science*, 2022, vol. 57, issue 28, pp. 13467-13480. DOI: 10.1007/s10853-022-07476-2.
10. Sdobnyakov N.Yu., Myasnichenko V.S., San C.-H., et al. Simulation of phase transformations in titanium nanoalloy at different cooling rates, *Materials Chemistry and Physics*, 2019, vol. 238, art. no 121895, 9 p. DOI: 10.1016/j.matchemphys.2019.121895.
11. 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).
12. Sdobnyakov N.Yu., Kolosov A.Yu., Sokolov D.N. et al. Kompleksnyj podkhod k modelirovaniyu plavleniya i kristallizatsii v pyatikomponentnykh metallicheskih 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).
13. Massen C., Mortimer-Jones T.V., Johnston R.L. Geometries and segregation properties of platinum–palladium nanoalloy clusters /, *Journal of the Chemical Society, Dalton Transactions*, 2002, issue 23, pp. 4375-4388. DOI: 10.1039/B207847C.
14. Kolosov A.Yu., Sokolov D.N., Savina K.G. et al. Vliyanie parnogo i mnogochastichnogo vzaimodejstviya na protsess strukturoobrazovaniya v binarnykh nanochastitsakh Pd-Pt [Influence of pair and many-body interactions on the process of structure formation in binary Pd-Pt nanoparticles], *Proceedings of the XIII International Scientific Conference «Chemical Thermodynamics and Kinetics»*, May 15-19, 2023, Veliky Novgorod. Veliky Novgorod, Novgorod State University named after Yaroslav the Wise Publ., 2023, pp. 147-149. (In Russian).
15. Sokolov D.N., Sdobnyakov N.Yu., Kolosov A.Yu., Ershov P.M., Bogdanov S.S. *Metropolis*. Certificate RF, no. 2019661915, 2019. (In Russian).
16. 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.
17. Nguyen V.L., Michitaka O., Takashi M. et al. New experimental evidences of Pt–Pd bimetallic nanoparticles with core–shell configuration and highly fine-ordered nanostructures by high-resolution electron transmission microscopy, *The Journal of Physical Chemistry C*, 2012, vol. 116, issue 22, pp. 12265-12274. DOI: 10.1021/jp303117y.
18. LAMMPS Molecular Dynamics Simulator. Available at: [www.url: http://lammps.sandia.gov](http://lammps.sandia.gov). (accessed 15.08.2024).
19. Samsonov V.M., Sdobnyakov N.Yu., Bazulev A.N. Size dependence of the surface tension and the problem of Gibbs thermodynamics extension to nanosystems, *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, 2004, vol. 239, issue 1-3, pp. 113-117. DOI: 10.1016/j.colsurfa.2004.01.016.
20. Eom N., Messing M.E., Johnson J., Deppert K. General trends in core-shell preferences for bimetallic nanoparticles, *ACS Nano*, 2021, vol. 15, issue 5, pp. 8883-8855. DOI: 10.1021/acsnano.1c01500.
21. 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.

22. Talyzin I.V., Samsonov V.M., Bogdanov S.S. et al. Identifikatsiya slozhnykh nanostruktur yadro-obolochka po radial'nym raspredeleniyam lokal'noj 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).

Original paper

**To the problem of tight binding potential parameters approbation: influence of the ratio
between pair and many-body interaction on the process of the structure formation
in binary Pd-Pt nanoparticles**

N.Yu. Sdobnyakov, A.Yu. Kolosov, D.N. Sokolov, K.G. Savina, N.I. Nepsha, Ya.P. Savel'ev,
G.D. Lomonosov

Tver State University, Tver, Russia

DOI: 10.26456/pcascnn/2024.16.399

Abstract: The reliability of the atomistic simulation is determined in terms of the correctness of the problem statement, including the choice of the interatomic interaction potential and its parameterization. In this paper, a detailed testing of the tight-binding potential parameters was carried out by means of studying the influence of the ratio between pair and many-body interactions on the process of the structure formation in binary *Pd-Pt* nanoparticles. Three parameterizations of the tight-binding potential for the cross parameters were selected: set (I) corresponded to the use of the Lorentz-Berthelot rule, sets (II) and (III) specified the scaling laws for the pair interaction parameters and the many-body interaction parameters, respectively. For sets (I) and (III), the surface segregation of palladium atoms was established, while the use of set (II) led to the formation of the Janus structure. In addition, differences in the formation of the local structure in binary *Pd-Pt* nanoparticles were established. Set (III) predicts the dominance of the local bcc structure. Radial distributions of the local density of *Pd* and *Pt* atoms in the *Pd-Pt* nanoparticles at a final temperature of 300 K were also calculated.

Keywords: *molecular dynamics method, tight-binding potential, pair interaction, many-body interaction, Pd-Pt nanoparticles, structure formation.*

Сдобняков Николай Юрьевич – д.ф.-м.н., доцент 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»

Савина Ксения Геннадьевна – аспирант 2 года обучения кафедры общей физики ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Непша Никита Игоревич – аспирант 4 года обучения кафедры общей физики ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Савельев Ярослав Павлович – студент 4 курса кафедры общей физики ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Ломоносов Георгий Денисович – студент 4 курса кафедры общей физики ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Nickolay Yu. Sdobnyakov – Dr. Sc., Docent, General Physics Department, Tver State University

Andrei Yu. Kolosov – Ph. D., Researcher, General Physics Department, Tver State University

Denis N. Sokolov – Ph. D., Researcher, General Physics Department, Tver State University

Kseniya G. Savina – 2nd year postgraduate student, General Physics Department, Tver State University

Nikita I. Nepsha – 4th year postgraduate student, General Physics Department, Tver State University

Yaroslav P. Savel'ev – 4th year student, General Physics Department, Tver State University

Georgii D. Lomonosov – 4th year student, General Physics Department, Tver State University

Поступила в редакцию/received: 07.09.2024; после рецензирования/ revised: 14.10.24; принята/accepted: 16.10.2024.