

Научная статья

1.3.8. Физика конденсированного состояния (физико-математические науки)

УДК 620.174

doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2026.01.010

МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА Ti_3Al , АРМИРОВАННОГО ФУЛЛЕРЕНОМ C_{60} , ПРИ ОДНООСНОЙ ДЕФОРМАЦИИ РАСТЯЖЕНИЯ: МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ**Александр Сергеевич Нарсеев¹, Устина Ильдусовна Янковская²,
Артем Владимирович Маркидонов³, Михаил Дмитриевич Старостенков⁴,
Павел Васильевич Захаров⁵**^{1, 2, 5} Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, ул. Политехническая, д.29 литера Б, вн. тер. г. муниципальный округ Академическое, 195251, г. Санкт-Петербург, Россия.³ Кузбасский гуманитарно-педагогический институт Кемеровского государственного университета, ул. Циолковского, 23, 654041, Новокузнецк, Россия³ Сибирский государственный индустриальный университет, ул. Кирова, 42, 654006, Новокузнецк, Россия⁴ Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова, пр. Ленина, 46, 656038, Барнаул, Россия¹ narseev.as@mail.ru² zalaevau@gmail.com (ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-6434-0747>)³ markidonov_artem@mail.ru (ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-4566-528X>)⁴ genphys@mail.ru, (ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-6326-7613>)⁵ zaharov_pv@spbstu.ru (ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-6410-1594>)

Аннотация. В данном исследовании представлено моделирование металлматричного композита Ti_3Al , армированного фуллеренами. Моделирование выполнялось с использованием методов молекулярной динамики (MD simulation), а расчёты проводились на суперкомпьютере СПбПУ. Методы молекулярной динамики были использованы для анализа поведения материала на атомном уровне с учётом межчастичных взаимодействий. Для более точного описания этих взаимодействий применялся гибридный потенциал (hybrid potential). Было проведено сравнение механических свойств «чистого» материала и композита, армированного фуллеренами, а также дополнительное сравнение с армированными материалами, содержащими разное количество вакансий. Оценивались такие характеристики, как предел текучести, временное сопротивление растяжению (ultimate tensile strength), деформация и нагрузка разрушения. Деформация прикладывалась вдоль кристаллографического направления, соответствующего индексу Миллера [100]. Для армирования в центр расчётной ячейки помещался фуллерен C_{60} . Результаты показали снижение механических свойств как в армированном материале, так и в материале с повышенной концентрацией вакансий. Уменьшение временного сопротивления растяжению в обоих случаях объясняется рядом факторов. В первую очередь, фуллерен проявлял благоприятное поведение при деформации сжатия, но оказывал негативное влияние при деформации растяжения из-за своих геометрических ограничений. Вакансии способствовали образованию дислокаций, что приводило к ускоренному разрушению металлической матрицы. Экспериментальные условия, в частности периодические граничные условия (periodic boundary conditions), наложенные на модель, также играли существенную роль. Полученные результаты показывают, что как дефектные структуры, так и армирующие элементы критически влияют на механические свойства материала.

Ключевые слова: металлматричный композит, титан-алюминид, армирование фуллеренами, моделирование методом молекулярной динамики, механические свойства, гибридный потенциал, периодические граничные условия, поведение при деформации, деформация растяжения, деформация сжатия, механизмы разрушения материала, межатомные взаимодействия, вычислительное материаловедение, фуллерен.

Благодарности. Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-22-20038 (<https://rscf.ru/project/24-22-20038/>) и гранта Санкт-Петербургского научного фонда № 24-22-20038.

Для цитирования: Нарсеев А.С., Янковская У.И., Маркидонов А.В., Старостенков М.Д., Захаров П.В. Оценка механических свойств Ti_3Al , армированного фуллереном C_{60} , при одноосной деформации растяжения: исследование методом молекулярной динамики // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2026. Т. 23, № 1. С. 88-95. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2026.01.010.

Original article

MECHANICAL PROPERTIES OF Ti_3Al REINFORCED WITH C_{60} FULLERENE UNDER UNIAXIAL TENSILE DEFORMATION: MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION

Alexander S. Narseev¹, Ustina I. Yankovskaya², Artem V. Markidonov³, Michael D. Starostenkov⁴, Pavel V. Zakharov⁵

^{1, 2, 5} Peter the Great St.Petersburg Polytechnic University, 195251, Saint Petersburg, Russia

³Kuzbass Humanitarian-Pedagogical Institute of Kemerovo State University 23 Tsiolkovsky St., 654041, Novokuznetsk, Russia

³Siberian State Industrial University 42 Kirova St., 654006, Novokuznetsk, Russia

⁴Polzunov Altai State Technical University 46 Lenin Ave., 656038, Barnaul, Russia

¹ narseev.as@mail.ru

² zalaevau@gmail.com (ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-6434-0747>)

³ markidonov_artem@mail.ru (ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-4566-528X>)

⁴ genphys@mail.ru, (ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-6326-7613>)

⁵ zaharov_pv@spbstu.ru (ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-6410-1594>)

Abstract. This study presents a simulation of a Ti_3Al metal-matrix composite reinforced with fullerenes. The simulation was performed using molecular dynamics methods, followed by calculations on the SPbPU supercomputer. Molecular dynamics techniques were employed to model the material's behavior at the atomic level, accounting for interparticle interactions. A hybrid potential was used for a more accurate description of these interactions. A comparison was made between the mechanical properties of the "pure" material and the fullerene-reinforced composite, with additional comparisons involving reinforced materials containing varying numbers of vacancies. Evaluated characteristics included yield strength, ultimate tensile strength, strain, and fracture load. Deformation was applied along the crystal direction corresponding to the [100] Miller index. For reinforcement, a C_{60} fullerene was placed at the center of the simulation cell. The results demonstrated a reduction in mechanical properties in both the reinforced material and the material with increased vacancy concentration. The decrease in ultimate tensile strength in both cases was attributed to several factors. Primarily, the fullerene exhibited favorable behavior under compressive strain but had a detrimental effect under tensile strain due to its dimensional constraints. Vacancies facilitated dislocation formation, leading to accelerated failure of the metallic matrix. The experimental conditions, particularly the periodic boundary constraints imposed on the model, also played a significant role. The findings indicate that both defect structures and reinforcing elements critically influence the mechanical properties of the material.

Keywords: metal-matrix composite (MMC), titanium aluminide (Ti_3Al), fullerene reinforcement (C_{60}), molecular dynamics (MD) simulation, mechanical properties hybrid potential, periodic boundary conditions, deformation behavior, tensile strain, compressive strain, material failure mechanisms, interatomic interactions, computational materials science, fullerene

Acknowledgments. The study was supported by the Russian Science Foundation grant No. 24-22-20038 (<https://rscf.ru/project/24-22-20038/>) and the St. Petersburg Science Foundation grant No. 24-22-20038.

For citation: Narseev A.S., Yankovskaya U.I., Markidonov A.V., Starostenkov M.D., Zakharov P.V. (2026). Evaluation of mechanical properties of C_{60} -fullerene reinforced $tial$ under uniaxial tensile deformation: a molecular dynamics study. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 23(1), 88-95. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2026.01.010.

Введение

Возрастающие требования к современным конструкционным материалам способствуют поиску новых решений. Одним из них является применение металломатричных композиционных материалов [1-6]. По своим свойствам они зачастую превосходят «чистые» металлы, обладая повышенной прочностью, термостойкостью, электропроводимостью, устойчивостью к коррозии и т.д.

Интересны для рассмотрения металлы на основе интерметаллических соединений в комбинации с низкоразмерными углеродными наноструктурами. С развитием технологий в сфере производства такие материалы все более прочно входят в промышленность [7, 8]. Рассматриваемый нами Ti_3Al известен благодаря своим прочностным характеристикам в сочетании с низкой плотностью, как следствие – легкостью. Рабочие температуры данного материала – 600 – 800 °С, что позволяет использовать

его в зонах повышенной температуры при производстве реактивных двигателей, компонентов турбин и гиперзвуковых летательных аппаратах [9]. В данной статье мы рассмотрим характеристики композита на основе Ti_3Al , его механические и структурные характеристики при одноосной деформации растяжения при различных температурах, ниже температуры плавления, рассмотрим изменение механических характеристик при армировании фуллереном C_{60} и при наличии дефектных структур в виде вакансий. Важно рассмотреть фундаментальные принципы зарождения дефектных структур в различных условиях и их вклад в характеристики композитов.

Механические характеристики композита рассмотрены нами при различном проценте вакансий в моделях (0.25%, 0.5%, 1%) при температуре 300 К методами молекулярной динамики. Экспериментальные методы исследования материалов не позволяют детально рассмотреть кинетику процессов на молекулярном уровне. С развитием суперкомпьютеров и увеличением вычислительных мощностей изучение многих явлений перешло в виртуальную среду. Молекулярная динамика считается общепринятым дополнением к экспериментам и широко используется в качестве вспомогательного инструмента для прогнозирования и оценки лабораторных изменений.

В данной работе мы впервые рассчитали эти характеристики для данного материала в комбинации с фуллереном в широком спектре условий моделирования. Акцентируем внимание, что фуллерены как армирующий элемент эффективно работают при сжатии, мы же рассматриваем именно растяжение. Это важно с позиции понимания поведения материала при таких нагрузках и изучения механизмов разрушения.

Материалы и методы

Для исследования механических свойств Ti_3Al , армированного фуллереном C_{60} , при одноосном растяжении было использовано молекулярно-динамическое (МД) моделирование. Этот метод предоставляет атомистический подход, позволяющий исследовать процессы на атомном уровне, такие как зарождение дислокаций, фазовые превращения и межфазные взаимодействия, которые играют ключевую роль в

механизме деформации металлматричных нанокompозитов.

Все расчёты проводились с использованием пакета LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator) [10]. Начальная модель создавалась при помощи AtomsK. Число атомов в модели составило 10654. Взаимодействия между ними в матрице Ti_3Al описывались с помощью потенциала Терсова. Для описания ковалентных связей между атомами углерода в фуллерене C_{60} использовался потенциал адаптивного межмолекулярного реактивного эмпирического порядка связей (AIREBO)

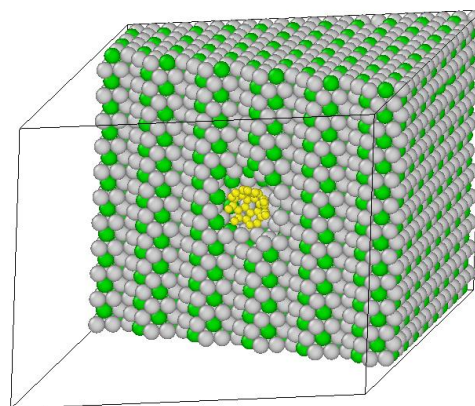


Рис.1. Модель композита Ti_3Al с фуллереном C_{60} до растяжения

Fig. 1. Model Ti_3Al

Модель (Рис.1) представляла собой монокристаллическую ячейку Ti_3Al с гексагональной структурой DO_{19} , в центре которой размещался фуллерен C_{60} . Периодические граничные условия применялись по всем направлениям для имитации объемного состояния материала. Система была предварительно релаксирована методом минимизации энергии, а затем подвергнута термодинамическому равновесию в ансамбле NPT при температуре 300 К и нулевом внешнем давлении с использованием термостата и баростата Носе–Гувера. Одноосное растяжение проводилось вдоль кристаллографического направления $[1010]$ при постоянной инженерной скорости деформации 10^{12} s^{-1} в ансамбле NVT. В течение деформации регистрировались атомные траектории, напряжения и структурные изменения. Для расчёта тензора напряжений на атомарном уровне использова-

лась формализм вирильного напряжения, что позволило получить такие характеристики, как модуль Юнга, предел текучести и предел прочности при растяжении.

Анализ и визуализация атомных конфигураций выполнялись с использованием программы OVITO [11]. Локальные механизмы деформации, такие как движение дислокаций, фазовые превращения и разрушение интерфейса, отслеживались с помощью модификатора Dislocation analysis (DXA). Предложенная модель позволяет проанализировать влияние фуллеренов C_{60} на механические свойства интерметаллического соединения Ti_3Al , устанавливая взаимосвязь между атомарными механизмами и макроскопическими характеристиками прочности.

Модели с вакансиями в металлической матрице создавались с использованием стандартных средств LAMMPS, путем удаления заданного процента атомов по псевдослучайному алгоритму из общего массива частиц. Это позволило создать реалистичные модели с точечными дефектными структурами.

Методика расчета

Механические напряжения рассчитываются на основе уравнения (1):

$$\sigma(r) = \frac{1}{\Omega} \sum_i \left(-m_i u_i \otimes u_i + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} r_{ij} \otimes f_{ij} \right) \quad (1)$$

где Ω – общий объем; m_i – масса атома i ; u_i – скорость i -го атома; r_{ij} – расстояние между векторами положения r_i и r_j атомов i и j , соответственно; f_{ij} – межатомная сила, действующая на атом i со стороны атома j . Ω рассчитывается в равновесном состоянии, а общий объем композита Ti_3Al рассчитывается как сумма объемов интерметаллида с отверстием и фуллереном. Моделирование растяжения проводилось до тех пор, пока деформация ε не достигнет предельных значений (около 60 %). Расчеты проводились в рамках канонического ансамбля NVT при температуре 300 К, с шагом по времени 0,5 фс.

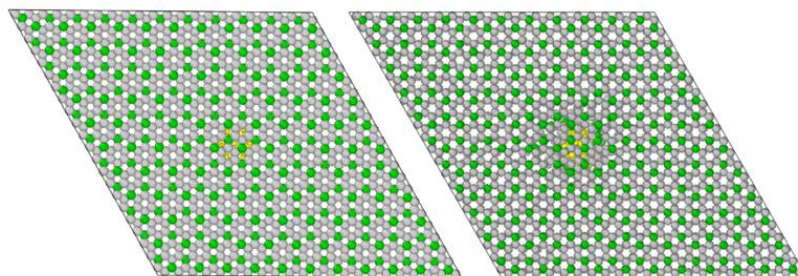


Рис. 2. Модель до(а) и после(б) релаксации.

Fig. 2. Model before (a) and after (b) relaxation

Каждая модель предварительно подвергалась релаксации. Данные процесс необходим для снятия первичных напряжений при введении дефектов в структуру и/или армирующего элемента в виде фуллерена C_{60} . Визуализация модели до и после релаксации представлена на рисунке 2. Это приводит к первоначальным смещениям атомов и некоторому разупорядочению структуры вблизи фуллерена. В дальнейшем данные позиции являются местом зарождения дислокаций.

Для проведения описанной методики расчета применялись ресурсы суперкомпьютерного центра «Политехнический». Расчет таких задач является достаточно трудоемким процессом в

силу большого количества частиц в модели и необходимости моделирования процесса растяжения с учетом реальных скоростей деформации материалов. Для реализации поставленных задач по расчету кривых деформации использовалось 3 вычислительных узла гетерогенного вычислительного кластера «Торнадо», каждый по 56 ядер. Данные вычислительные ресурсы позволили рассчитать каждую кривую деформации за 10 часов, что является приемлемым при решении такого масштаба задач.

Результаты и анализ

В рамках данного исследования были проведены молекулярно-динамические расчёты для оценки механических свойств композита Ti_3Al , армированного фуллеренами C_{60} , при одноосном растяжении. Особое внимание было уделено влиянию различных концентраций

вакансий (от 1% до 3,5% с шагом 0,5%) на поведение материала под нагрузкой. На Рис.3 представлены основные результаты в виде зависимости напряжения от деформации для серий моделей с различным содержанием вакансий.

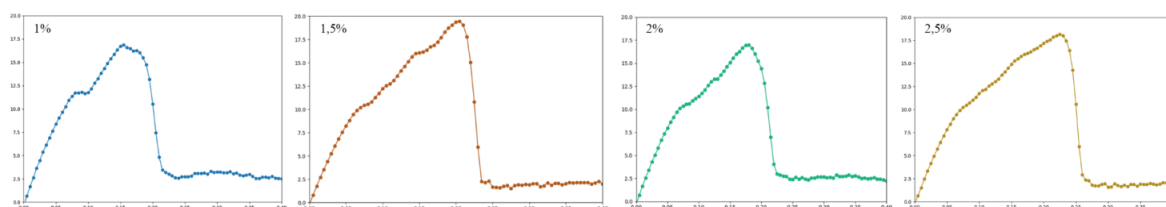


Рис. 3. Зависимости «напряжение-деформация» для моделей с разным числом вакансий: 1% (а), 1.5% (б), 2% (с), 2.5% (д)

Fig. 3. Stress-strain dependencies for models with varying vacancy concentrations: 1% (a), 1.5% (b), 2% (c), 2.5% (d)

Оценка результатов моделирования происходила согласно ГОСТу 1497-84 [12]. Анализ полученных кривых показывает, что начальный линейный участок всех зависимостей имеет схожий наклон, что указывает на сравнительно стабильный модуль упругости независимо от концентрации вакансий на ранней стадии деформации. Это свидетельствует о том, что упругое поведение материала в начальной стадии нагружения слабо зависит от дефектности структуры, даже не смотря на большой процент вакансий. В этом случае доминирующее влияние оказывает сама металлическая матрица.

Максимальное напряжение (предел прочности) варьируется в зависимости от концентрации вакансий. Наиболее высокая прочность наблюдается для образца с концентрацией вакансий 1.5% от числа атомов металлической матрицы, при этом пиковое напряжение достигает ~19.5 ГПа при относительной деформации около 0.21. С увеличением содержания вакансий прочность материала имеет тенденцию к снижению. Однако вплоть до 3% вакансий она превышает значение для бездефектного образца. И только при концентрации вакансий 3.5% пиковое напряжение уменьшается до ~16 ГПа, что чуть меньше кристалла без дефектов. Полученные результаты подтверждают известные данные об упрочнении материалов путем внедрения дефектов. В данном случае важную роль играет фуллерен, как дополнительный стопор для движения дислокационных сегментов (рис.4).

Предельная нагрузка разрушения, аналогично пределу прочности, изменялась не линейно, так при 1.5% и 2.5% вакансий имелись

пики упрочнения. Это связано с формированием дефектных структур вблизи фуллерена, препятствующих движению дислокационных сегментов, в виде дислокационных замков. У модели с 1% вакансий переход к пластичному разрушению происходит через зону текучести ($\sigma_{\text{тек}} = 11.7$ ГПа), также как и для образцов без внедренных дефектных структур. При дальнейшем деформировании материала в нем начинаются необратимые изменения, важно учитывать этот параметр при практическом использовании Ti_3Al с фуллереном.

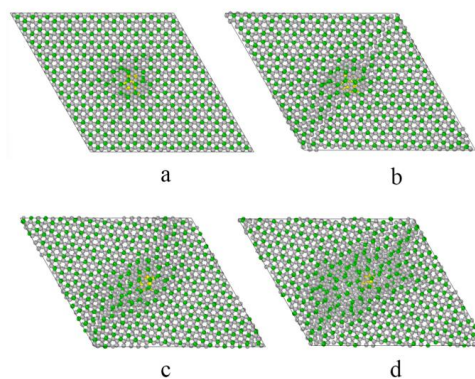


Рис.4. Процесс деформации композита с 1% вакансий, величина деформации: а) 0.04, б) 0.13 в) 0.15 г) 0.17

Рис.4. Deformation process of the composite with 1% vacancies, strain values: (a) 0.04, (b) 0.13, (c) 0.15, (d) 0.17

Особенности поведения после достижения пикового напряжения указывают на характер разрушения материала. Для образцов с меньшей концентрацией вакансий разрушение происходит более резко, что указывает на более хрупкий характер излома. В то же время при увеличении числа вакансий наблюдается более сглаженное падение напряжения, что может свидетельствовать о переходе от хрупкого к более пластичному разрушению, связанного с возможной релаксацией и перераспределением напряжений в дефектной структуре посредством движения образованных дислокаций.

Дополнительно стоит отметить, что присутствие фуллеренов оказывает частично армирующий эффект на структуру Ti_3Al , повышая как прочностные характеристики, так и пластичность по сравнению с неармированным Ti_3Al , что согласуется с данными из работ [13, 14]. Введение вакансий до 2.5% может оказывать дальнейший упрочняющий эффект и приводить к большей пластичности композита. Однако дальнейшее увеличение числа вакансий нивелирует этот эффект, приводя к деградации механических свойств. Расположение вакансий и фуллерена в материале может различным образом влиять на движение дислокаций, что не позволяет точно предсказать что произойдет при армировании: упрочнение или разупрочнение. Этот вопрос является открытым и будет рассмотрен в последующих работах.

Таким образом, результаты моделирования демонстрируют, что оптимизация концентрации вакансий является значимым фактором в разработке фуллерен-усиленных интерметаллических композитов Ti_3Al с заданными механическими свойствами. Можно отметить, что наилучшие характеристики достигаются при 1.5 процентном содержании вакансий. Прочностные характеристики нелинейно зависят от данного параметра. Это связано со сложностью и частичной случайностью процесса разрушения. На образование дислокаций в разной степени влияют различные параметры и в некоторых случаях вакансии создают в окружающей решётке растягивающие напряжения, что влияет на более удалённые атомы, которые тоже смещаются для восстановления равновесия. Упрочнение также происходит за счёт появления на границах субзёрен различных видов дислокаций. Это создаёт условия для упрочнения металла за счёт легирования границ зёрен

путем формирования новых интерметаллических фаз (интерметаллидное упрочнение) [15].

Выводы

Результаты данного исследования позволяют получить сведения о механических свойствах композитов армированных фуллеренами, что может помочь в разработке новых высокоэффективных материалов для различных областей применения. Учет влияния точечных дефектов позволяет прогнозировать изменения свойств таких композитов, например, при радиационном или ином высокоинтенсивном воздействии на материал. Значимость исследования в сочетании с другими работами на данную тему заключается в возможности оптимизации свойств материала путем подбора оптимального расположения, типа и процентного содержания фуллерена при нагрузке растяжения, что приведет к созданию новых композитных материалов с заданными механическими свойствами.

Список литературы

1. K. Shirvanimoghaddam, S. U. Hamim, M. Karbalaee Akbari, S. M. Fakhrhoseini, H. Khayyam, A. H. Pakseresht, E. Ghasali, M. Zabet, K. S. Munir, S. Jia, J. P. Davim, and M. Naebe, "Carbon fiber reinforced metal matrix composites: Fabrication processes and properties," *Compos. Part A Appl. Sci. Manuf.*, vol. 92, pp. 70-96, Jan. 2017. doi: 10.1016/j.compositesa.2016.10.032
2. A. Nieto, A. Agarwal, D. Lahiri, A. Bisht, and S. R. Bakshi, *Carbon Nanotubes: Reinforced Metal Matrix Composites*, 2nd ed. CRC Press, 2021. Online. Available: <https://doi.org/10.1201/9780429299582>
3. S. R. Bakshi, D. Lahiri, and A. Agarwal, "Carbon nanotube reinforced metal matrix composites—a review," *Int. Mater. Rev.*, vol. 55, no. 1, pp. 41-64, 2010. doi: 10.1179/095066009X12572530170543
<https://pubs.aip.org/aip/adv/article/8/8/085317/563839>
4. S. Mileiko, "Carbon-Fibre/Metal-Matrix Composites: A Review," *J. Compos. Sci.*, vol. 6, no. 10, p. 297, 2022. doi: 10.3390/jcs6100297.
5. U. I. Yankovaskaya, E. A. Korznikova, S. D. Korpusova, and P. V. Zakharov, "Mechanical Properties of the Pt-CNT Composite under Uniaxial Deformation: Tension and Compression," *Mate-*

rials, vol. 16, no. 11, p. 4140, 2023. doi: 10.3390/ma16114140.

6. J. Cao, F. Li, Q. Yang, K. Zhan, Z. Yang, Z. Wang, and B. Zhao, "A review on interfacial structure optimization and its mechanism on the properties of carbon reinforced metal-matrix composites," *Composite Interfaces*, vol. 30, no. 5, pp. 543–583, 2023. doi: 10.1080/09276440.2023.2179248.

7. L. Zhao, W. Zheng, Y. Hu, et al., "Heterostructured metal matrix composites for structural applications: a review," *J. Mater. Sci.*, vol. 59, pp. 9768–9801, 2024. doi: 10.1007/s10853-023-09300-x.

8. <https://mst.elsevierpure.com/en/publications/the-effect-of-microalloying-b-on-the-high-temperature-mechanical->

9. P. Plimpton, *Journal of Computational Physics*, 117(1), 1–19 (1995). doi: 10.1006/jcph.1995.1039

10. A. Stukowski, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 18(1), 015012 (2010). doi: 10.1088/0965-0393/18/1/015012

11. GOST 1497-84, "Methods for testing metals and alloys. Hardness testing methods," Moscow: Gosstandart, 1984.

12. I. A. Evdokimov, R. R. Khayrullin, R. Kh. Bagramov, S. A. Perfilov, A. A. Pozdnyakov, V. V. Aksenonkov, and B. A. Kulnitskiy, "Nanostructured strain-hardened aluminum-magnesium alloys modified by C60 fullerene obtained by powder metallurgy. Part 2. The effect of magnesium concentration on physical and mechanical properties," *Powder Metallurgy and Functional Coatings*, vol. 2020, no. 4, pp. 76–84. (In Russ.), 2020. doi: 10.17073/1997-308X-2020-4-76-84.

13. A. S. Erturk, Y. O. Yildiz, and M. Kirca, "Mechanical behavior of a novel carbon-based nanostructured aluminum material," *Comput. Mater. Sci.*, vol. 144, pp. 193–209, Mar. 2018. doi: 10.1016/j.commatsci.2017.12.033

14. P. Li, Y. Chen, X. Liu, X. H. Wang, F. R. Chen, Z. X. Qi, G. Zheng, H. G. Xiang, and G. Chen, "Strengthening in gradient TiAl alloys," *Journal of Materials Science & Technology*, vol. 166, pp. 98–105, Dec. 2023. doi: 10.1016/j.jmst.2023.04.067

Информация об авторах

А.С. Нарсеев – лаборант-исследователь кафедры физики Санкт-Петербургского политехнического университета.

У.И. Янковская – аспирант Алтайского государственного технического университета, старший преподаватель кафедры высшей математики Санкт-Петербургского политехнического университета.

А.В. Маркидонов – доктор физико-математических наук, доцент, заведующий кафедрой информатики и вычислительной техники им. В.К. Буторина Кузбасского гуманитарно-педагогического института Кемеровского государственного университета; профессор кафедры прикладной математики и информатики Сибирского государственного индустриального университета.

М.Д. Старостенков – доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник, профессор Алтайского государственного технического университета им. И.И. Ползунова

П.В. Захаров – доктор физико-математических наук, директор института физики и математики Санкт-Петербургского политехнического университета.

References

1. K. Shirvanimoghaddam, S. U. Hamim, M. Karbalaee Akbari, S. M. Fakhrehoseini, H. Khayyam, A. H. Pakseresht, E. Ghasali, M. Zabet, K. S. Munir, S. Jia, J. P. Davim, and M. Naebe, "Carbon fiber reinforced metal matrix composites: Fabrication processes and properties," *Compos. Part A Appl. Sci. Manuf.*, vol. 92, pp. 70–96, Jan. 2017. doi: 10.1016/j.compositesa.2016.10.032
2. Nieto, A. Agarwal, D. Lahiri, A. Bisht, and S. R. Bakshi, *Carbon Nanotubes: Reinforced Metal Matrix Composites*, 2nd ed. CRC Press, 2021. Online. Available: <https://doi.org/10.1201/9780429299582>
3. S. R. Bakshi, D. Lahiri, and A. Agarwal, "Carbon nanotube reinforced metal matrix composites—a review," *Int. Mater. Rev.*, vol. 55, no. 1, pp. 41–64, 2010. doi: 10.1179/095066009X12572530170543
4. S. Mileiko, "Carbon-Fibre/Metal-Matrix Composites: A Review," *J. Compos. Sci.*, vol. 6, no. 10, p. 297, 2022. doi: 10.3390/jcs6100297.
5. U. I. Yankovskaya, E. A. Korznikova, S. D. Korpusova, and P. V. Zakharov, "Mechanical Prop-

erties of the Pt-CNT Composite under Uniaxial Deformation: Tension and Compression," *Materials*, vol. 16, no. 11, p. 4140, 2023. doi: 10.3390/ma16114140.

6. J. Cao, F. Li, Q. Yang, K. Zhan, Z. Yang, Z. Wang, and B. Zhao, "A review on interfacial structure optimization and its mechanism on the properties of carbon reinforced metal-matrix composites," *Composite Interfaces*, vol. 30, no. 5, pp. 543–583, 2023. doi: 10.1080/09276440.2023.2179248.

7. L. Zhao, W. Zheng, Y. Hu, et al., "Heterostructured metal matrix composites for structural applications: a review," *J. Mater. Sci.*, vol. 59, pp. 9768–9801, 2024. doi: 10.1007/s10853-023-09300-x.

8. <https://mst.elsevierpure.com/en/publications/the-effect-of-microalloying-b-on-the-high-temperature-mechanical->

9. P. Plimpton, *Journal of Computational Physics*, 117(1), 1–19 (1995). doi: 10.1006/jcph.1995.1039

10. A. Stukowski, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 18(1), 015012 (2010). doi: 10.1088/0965-0393/18/1/015012

11. GOST 1497-84, "Methods for testing metals and alloys. Hardness testing methods," Moscow: Gosstandart, 1984.

12. I. A. Evdokimov, R. R. Khayrullin, R. Kh. Bagramov, S. A. Perfilov, A. A. Pozdnyakov, V. V. Aksenonkov, and B. A. Kulnitskiy, "Nanostructured strain-hardened aluminum-magnesium alloys modified by C_{60} fullerene obtained by powder metallurgy. Part 2. The effect of magnesium concentration on physical and mechanical properties," *Powder Metallurgy and Functional Coatings*, vol. 2020, no. 4, pp. 76–84. (In Russ.), 2020. doi: 10.17073/1997-308X-2020-4-76-84.

13. A. S. Erturk, Y. O. Yildiz, and M. Kirca, "Mechanical behavior of a novel carbon-based nanostructured aluminum material," *Comput. Mater. Sci.*, vol. 144, pp. 193–209, Mar. 2018. doi: 10.1016/j.commatsci.2017.12.033

P. Li, Y. Chen, X. Liu, X. H. Wang, F. R. Chen, Z. X. Qi, G. Zheng, H. G. Xiang, and G. Chen, "Strengthening in gradient TiAl alloys," *Journal of Materials Science & Technology*, vol. 166, pp. 98–105, Dec. 2023. doi: 10.1016/j.jmst.2023.04.067

Information about the authors

A.S. Narseev – laboratory assistant-researcher of the Department of Physics of the St. Petersburg Polytechnic University.

U.I. Yankovskaya – postgraduate student of the Altai State Technical University, senior lecturer of the Department of Higher Mathematics of the St. Petersburg Polytechnic University.

A.V. Markidonov – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor, Head of the Department of Informatics and Computer Engineering named after V.K. Butorin, Kuzbass Humanitarian Pedagogical Institute, Kemerovo State University; Professor of the Department of Applied Mathematics and Informatics, Siberian State Industrial University.

M.D. Starostenkov – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Chief Researcher, Professor, I.I. Polzunov Altai State Technical University

P.V. Zakharov – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Director of the Institute of Physics and Mathematics of the St. Petersburg Polytechnic University.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.
The authors declare that there is no conflict of interest.

Статья поступила в редакцию 04.04.2026; одобрена после рецензирования 23.02.2026; принята к публикации 02.03.2026.

The article was received by the editorial board on 04 Feb. 2026; approved after reviewing 23 Feb. 2026; accepted for publication 02 Mar. 2026.