

Научная статья

1.3.8. Физика конденсированного состояния (физико-математические науки)

УДК 539.3

doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2023.02.007

ВЫБОР ПОТЕНЦИАЛА МЕЖАТОМНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ СИСТЕМЫ ТИТАН-УГЛЕРОД

Елизавета Андреевна Рожнова^{1†}, Лилия Ришатовна Сафина², Юлия Айдаровна Баимова³

^{1,3} Уфимский университет науки и технологий, ул. З. Валиди, 32, 450076, Уфа, Россия

^{2,3} Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, ул. Степана Халтурина, 39, 450001, Уфа, Россия

¹ rozhnova.elizavetaa@mail.ru[†], <https://orcid.org/0000-0002-6448-314X>

² saflia@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-6682-3278>

³ julia.a.baimova@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-5953-1186>

Аннотация. Анализ применимости межатомных потенциалов для решения задач различной направленности представляет большой интерес, поскольку именно межатомный потенциал определяет результат моделирования. В данной работе методом молекулярной динамики исследуется взаимодействие листа графена с наночастицей титана с использованием двух разных межатомных потенциалов – потенциала Морзе и потенциала Терсоффа. Следует отметить, что потенциал Терсоффа описывает все три вида взаимодействий в системе (C-C, C-Ti, Ti-Ti), а потенциал Морзе используется для описания взаимодействия C-Ti, а взаимодействие C-C описано потенциалом AIREBO. При этом рассматривается два набора параметров потенциала Морзе, по-разному воспроизводящих взаимодействие в системе. Разница в параметрах потенциалов возникает при их подгонке под решение определенных задач. Морфология рассмотренного материала выбрана исходя из задачи дальнейшего моделирования композитного материала на основе листов графена и наночастиц металла. Показано, что один из применяемых наборов параметров Морзе хорошо воспроизводит осаждение графена на металлическую подложку, однако не может воспроизводить взаимодействие графена и наночастицы. Анализ производится на основе вычисления энергии взаимодействия в системе и структурных состояний. Наилучшее отображение реального физического взаимодействия наночастицы титана и графена позволяет получить потенциал Терсоффа, однако второй набор параметров потенциала Морзе также может быть использован для проведения подобных расчетов. Взаимодействие наночастицы титана и графена является достаточно сильным и наночастица титана легко прикрепляется к чешуйке графена, после чего «обволакивается» чешуйкой графена.

Ключевые слова: графен, наночастица титана, межатомные потенциалы, молекулярная динамика, потенциал Морзе, потенциал Терсоффа.

Благодарности: Работа Сафиной Л.Р. и Баимовой Ю.А. поддержана Российским Научным Фондом (грант № 20-72-10112). Работа Рожновой Е.А. поддержана госзаданием молодежной лаборатории ИПСМ РАН.

Для цитирования: Рожнова Е.А., Сафина Л.Р., Баимова Ю.А. Выбор потенциала межатомного взаимодействия для моделирования системы титан-углерод // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2023. Т. 20, № 2. С. 201–208. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2023.02.007.

Original article

INTERATOMIC POTENTIAL FOR THE SIMULATION OF Ti-CARBON SYSTEM

Elizaveta A. Rozhnova^{1†}, Liliya R. Safina², Julia A. Baimova³

^{1,3} Ufa University of Science and Technology, Valdy Str., 32, Ufa, 450076, Russia

^{2,3} Institute for Metals Superplasticity Problems of Russian Academy of Sciences, Khalturina Str., 39, Ufa, 450001, Russia

¹ rozhnova.elizavetaa@mail.ru[†], <https://orcid.org/0000-0002-6448-314X>

² saflia@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-6682-3278>

³ julia.a.baimova@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-5953-1186>

Abstract. An analysis of the applicability of interatomic potentials for solving different physical problems is of great interest, since especially interatomic potential determines the simulation results. In this work, the interaction of a graphene with a titanium nanoparticle is studied by molecular dynamics using two different interatomic potentials, the Morse potential and the Tersoff potential. It should be noted that Tersoff potential describes all three types of interactions in the system (C-C, C-Ti, Ti-Ti), while Morse potential is used just for description of C-Ti interactions, and C-C interaction is reproduced by AIREBO potential. In this case, two different sets of parameters of the Morse potential are considered, which differently reproduce the interaction in the system. This difference in the parameter sets appears since various parameter sets are used for solving various problems. The morphology of the considered material is chosen based on the problem of further modeling of a composite material based on graphene and metal nanoparticles. It is shown that one of the used sets of Morse parameters well reproduces the deposition of graphene on a metal substrate, but cannot reproduce the interaction of graphene and nanoparticles. The best representation of the real physical interaction between a titanium nanoparticle and graphene allows one to obtain the Tersoff potential, however, the second set of Morse potential parameters can also be used to perform such calculations. Tersoff potential shows better representation of real physical interaction between Ti nanoparticle and graphene flake, although one of the Morse parameter sets also can be effectively used for such calculations. Interaction between Ti nanoparticle and graphene flake is quite strong and Ti nanoparticle can be easily attached to graphene, after that graphene starts to cover the nanoparticle.

Keywords: graphene, titanium nanoparticle, interatomic potentials, molecular dynamics, Morse potential, Tersoff potential.

Acknowledgments: The work of J.B. and L.S. is supported by the grant of Russian Science Foundation (No. 20-72-10112). Work of E.R. is supported by the State Assignment of IMSP RAS (Young Scientist Laboratory).

For citation: Rozhnova, E. A., Safina, L. R. & Baimova, J. A. (2023). Interatomic potential for the simulation of Ti-carbon system. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 20(2), 201–208. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2023.02.007.

Введение

Графен представляет собой двумерный углеродный материал, обладающий превосходными механическими свойствами [1], высокой подвижностью электронов [2] и уникальной теплопроводностью [3]. Более того, в результате объединения графена и других материалов в единую структуру можно получить композит с абсолютно новыми свойствами. В последние годы большое количество исследований посвящено армированию металлической матрицы графеном с целью оптимизации их механических свойств.

Титановые сплавы и композиты с титановой матрицей благодаря их легкому весу, высокой удельной прочности и превосходной коррозионной стойкости находят применение в аэрокосмической и химической промышленности, в авиа- и кораблестроении. Как экспериментально, так и численно показано, что композиты, армированные графеном, обладают улучшенной прочностью, изгибной жесткостью, износостойкостью. В последние годы изучение титановых композитов направлено на их применение для создания автомобилей, биомедицинских материалов [4] и др. Использование легких композитов на основе титана снижает расходы авиационного топлива, приводит к экономии энергии [5].

Теплопроводность металл-матричных композитов на основе Ti повышается с увеличением количества графена, что подтверждено экспериментами [6, 7]. Композиты Ti/графен превосходят большинство композитов Ti/углеродные нанотрубки по теплопроводности. Кроме того, теплопроводность и удельная теплоемкость композитного материала резко возрастают с увеличением содержания графена [8, 9]. В работе [10] показано, что при присоединении 8 атомных слоев графена к композиту Ti/графен, теплопроводность достигла 440 МВт/м² К.

Метод молекулярной динамики (МД) является эффективным инструментом моделирования наноструктур. Однако вопрос о применимости различных потенциалов для моделирования всегда решается именно с точки зрения возможности применить конкретный потенциал для изучения данного процесса [11, 12].

Например, для одного и того же металла может существовать несколько наборов параметров межатомного потенциала. Более того, когда рассматривается взаимодействие металла и одного из полиморфов углерода или других неметаллических атомов необходим поиск более точных потенциалов межатомного взаимодействия [13, 14].

Целью данной работы является анализ различных потенциалов межатомного взаимодей-

ствия, представленных в литературе для описания взаимодействия в системе Ti/графен. В частности, исследуется применимости потенциала Морзе с двумя разными наборами параметров и потенциала Терсоффа для моделирования взаимодействия в системе титан-углерод на примере взаимодействия наночастицы титана и листа графена.

Методика моделирования

Взаимодействие между атомами углерода воспроизводится потенциалом AIREBO. Он хорошо апробирован и активно применяется для изучения углеродных структур [15].

Потенциал состоит из трех частей:

$$E = \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} \left[E_{ji}^{REBO} + E_{ij}^{LJ} + \sum_{k \neq i, j} \sum_{l \neq i, j, k} E_{kijl}^{tors} \right], \quad (1)$$

где E_{ji}^{REBO} – энергия ковалентного взаимодействия, E_{ij}^{LJ} – энергия Ван-дер-Ваальса, E_{kijl}^{tors} – энергия поворота плоскостей.

Для описания взаимодействия атомов Ti-C применяется потенциал Морзе.

$$U(r) = D_e \left[\left(1 - e^{-\alpha(r-R_e)} \right)^2 - 1 \right], \quad (2)$$

где r – расстояние между атомами, D_e – энергия разрыва связи, R_e – равновесная длина связи, α – жесткость связи.

Преимуществом данного потенциала является то, что он быстро убывает с расстоянием, что позволяет уменьшить ошибки вычисления, связанные с введением в модель радиуса обрезания. Данный потенциал достаточно хорошо описывает взаимодействие атомов металлов, а также взаимодействие атомов металлов и неметаллов, и его параметры для многих элементов известны [16-19].

Параметры потенциала Морзе для Ti-C были выбраны из двух источников: Морзе I [20] и Морзе II [21]. Параметры потенциалов представлены в Табл.1.

Межатомный потенциал Терсоффа [22] является самым простым и быстрым из углеродных потенциалов. Потенциал Терсоффа записывается в следующей форме:

$$U = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V_{ij}. \quad (3)$$

При этом потенциал Терсоффа можно представить как модифицированный изотропный потенциал Морзе:

$$V_{ij} = Ae^{-2\lambda r_{ij}} - Be^{-\lambda r_{ij}}, \quad (4)$$

где $Ae^{-2\lambda r_{ij}}$ – слагаемое, отвечающее за отталкивание, $Be^{-\lambda r_{ij}}$ – слагаемое, отвечающее за притяжение. В данной работе используются потенциалы, предложенные в [23, 24].

Таблица 1. Параметры потенциала Морзе

Table 1. Parameters of the Morse potential

Набор параметров потенциала [Parameter set]	D_e , эВ [eV]	R_e , Å	α , 1/Å
[Морзе I] [Morse I]	0,0137	2,867	1,900
[Морзе II] [Morse II]	0,982	1,892	2,283

Следует отметить, что в случае использования потенциала Морзе для описания взаимодействия Ti-C, для описания взаимодействия между атомами металла выбран потенциал EAM [25], а для описания взаимодействия C-C используется потенциал AIREBO. При использовании потенциала Терсоффа все взаимодействия в системе описываются одним потенциалом.

Рассматривается следующая система моделирования: наночастица Ti диаметром 3,5 нм на плоскости графена размером 4,0×4,0 нм, как показано на рис.1. Частица размещалась над центром листа. Расстояние между листом графена и наночастицей 2,7 Å. Данная система исследовалась при постоянной температуре 300 К, чтобы проследить динамику взаимодействия наночастиц титана с графеном при использовании разных потенциалов. Используются свободные граничные условия.

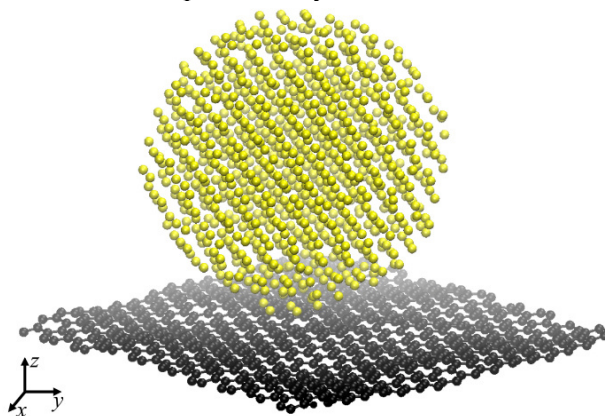


Рис.1. Исходная структура наночастицы Ti на поверхности графена

Fig.1. The initial structure of the Ti nanoparticle on the graphene surface

Результаты и обсуждение

На рис.2 представлен график зависимости потенциальной энергии от времени, полученный с использованием трех разных потенциалов, а также примеры структуры в разные моменты времени.

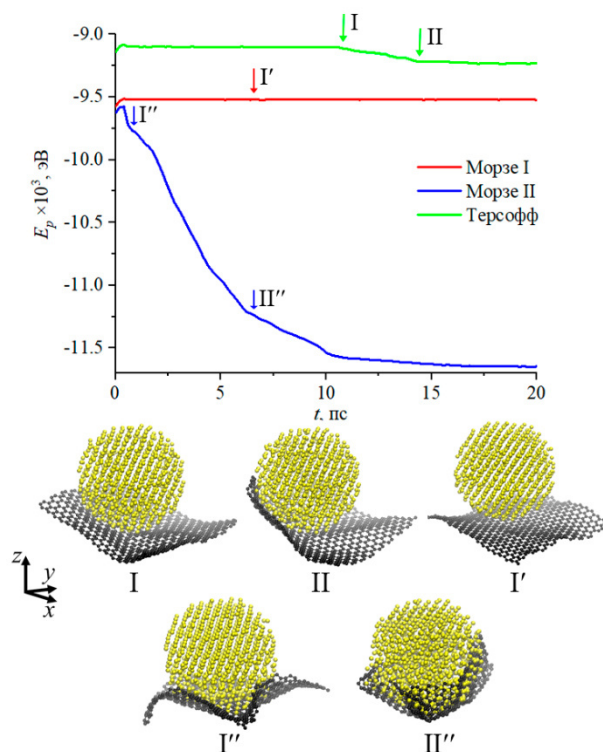


Рис.2. График зависимости потенциальной энергии от времени. Изображения структуры в ключевых моментах времени I, II (для потенциала Терсоффа), I' (для потенциала Морзе I), I'', II'' (для потенциала Морзе II)

Fig.2. Potential energy as the function of time.

Snapshots of the structure at key points I, II (for the Tersoff potential), I' (for the Morse I potential), I'', II'' (for the Morse II potential)

Расстояние между листом графена и наночастицей в процессе моделирования остается практически неизменным для всех межатомных потенциалов и колеблется около 2,5 Å, в то время как начальное расстояние составляло 2,7 Å.

Как видно, при использовании потенциала Морзе I система сразу приходит в равновесие, и потенциальная энергия системы почти не меняется. Система I' показана в одном состоянии, поскольку ее структурная конфигурация практически не меняется: частица сразу прикрепляется к листу графена, и происходят только тепловые колебания самого листа графена, а также поверхностных атомов наночастицы Ti, кото-

рые не приводят к существенным изменениям структуры.

В системе, моделируемой с помощью потенциала Морзе II, изменения происходят абсолютно иначе – уже на 1 пс происходит прилегание графена к наночастице. Более того, происходит полное объединение частицы Ti и листа графена. При этом сама наночастица теряет дальний кристаллический порядок, сминается листом графена. Атомы Ti притягиваются к графену, а в некоторых случаях проникают сквозь графен и присоединяются к нему с обратной стороны. При этом потенциальная энергия постоянно падает, причем довольно резко. В равновесие система приходит после 17 пс, когда графен полностью облепил наночастицу. Такое поведение является нефизичным. Во-первых, сквозь графен не могут проникать даже атомы водорода, в силу высокой электронной плотности атомов в гексагонах. Во-вторых, несмотря на то, что взаимодействие в Ti воспроизводится потенциалом ЕАМ наночастица является слишком «мягкой», в то время как сам металл обладает высокой прочностью и потенциал должен достаточно хорошо это воспроизводить. Более того, графен, который хорошо сминается, не может образовывать настолько жесткие складки, облепляя и сминая наночастицу Ti. Данный результат объясняется тем, что данные параметры потенциала Морзе разрабатывались для того, чтобы моделировать сильную химическую связь между титаном и графеном, для моделирования осаждения графена на подложку металла.

При использовании потенциала Терсоффа во время выдержки наблюдаются колебания поверхностных атомов металла, однако при этом сохраняется кристаллический порядок атомов. Изменения в данной системе происходят более медленно: наночастица Ti находится на листе графена в равновесном положении, в то время как края листа графена колеблются в результате тепловых колебаний. При $t = 10$ пс происходит переход в новое равновесное состояние – наночастица Ti прикрепляется к листу графена более основательно (структура I). В течение следующих 5 пс происходит постепенное примыкание наночастицы к листу графена до установления равновесия в системе (структура II). Как видно, лист графена плотно прилегает с одной стороны наночастицы. Как показал дальнейшее моделирование, полного примыкания графена к наночастице не происходит,

поскольку лист графена достаточно жесткий, чтобы образовать подобную складку. Для того, чтобы произошло полное оборачивание наночастицы, лист графена должен быть намного больше наночастицы. Аналогичные результаты были показаны для наночастицы Ni при взаимодействии с графеном [26].

На рис.3 показаны итоговые структуры, полученные моделированием с двумя разными наборами потенциалов Морзе II (а) и потенциала Терсоффа (б).

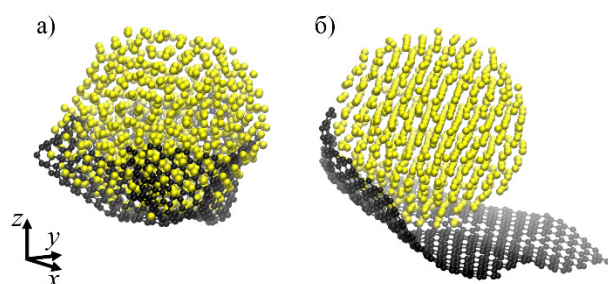


Рис.3. Итоговые структуры: модель с потенциалом (а) Морзе II, (б) Терсофф

Fig.3. Snapshots of the final structures: a model with the (a) Morse II and (b) Tersoff potential

Как показали ранние исследования, взаимодействие между титаном и графеном, действительно, должно быть достаточно сильным, из-за связи между их *d*-орбиталями [27, 28].

Заключение

В данной работе методом молекулярной динамики исследовано взаимодействие наночастицы Ti с листом графена, с использованием двух разных межатомных потенциалов – Терсоффа и Морзе.

Параметры потенциала сильно влияют на формирование итоговой структуры, поэтому их выбор играет ключевую роль в получении реалистичных результатов. В работе рассмотрены два разных набора параметров потенциала Морзе для моделирования взаимодействия Ti-C, по-разному воспроизводящих взаимодействие в системе.

Потенциал Терсоффа воспроизводит сразу все виды взаимодействий в системе. Показано, что набор параметров Морзе II не может хорошо воспроизводить взаимодействие графена и наночастицы, в то время как набор параметров Морзе I может быть использован для проведения расчетов. Однако, наилучшее отображение реального физического взаимодействия нано-

частицы Ti и графена позволяет получить потенциал Терсоффа.

Список литературы

1. Lee C., Li Q., Kalb W., Liu X.Z., Berger H., Carpick R.W., Hone J. Frictional characteristics of atomically thin sheets // *Science*. 2010. V. 328(5974). P. 76–80.
2. Pavithra C.L., Sarada B.V., Rajulapati K.V., Rao T.N., Sundararajan G. A new electrochemical approach for the synthesis of copper-graphene nanocomposite foils with high hardness // *Sci. Rep.* 2014. V. 4. P. 1–7.
3. Pop E., Varshney V., Roy A.K. Thermal properties of graphene: Fundamentals and applications // *MRS Bull.* 2012. V. 37(12). P.1273–1281.
4. Zhao X., Liu R. Recent progress and perspectives on the toxicity of carbon nanotubes at organism, organ, cell, and biomacromolecule levels. // *Environ. Int.* 2012. V. 40(1). P. 244–255.
5. Cao H., Liang Y. The microstructures and mechanical properties of graphene-reinforced titanium matrix composites // *J. Alloys Compd.* 2020. V. 812. P. 152057.
6. Kanjwal M.A., Leung W.W.-F. Titanium based composite-graphene nanofibers as high-performance photocatalyst for formaldehyde gas purification // *Ceram. Int.* 2019. V. 45. P. 5617–5626.
7. Yang W.-Z., Huang W.-M., Wang Z.-F., Shang F.-J., Huang W., Zhang B.-Y. Thermal and Mechanical Properties of Graphene–Titanium Composites Synthesized by Microwave Sintering // *Acta Metall. Sin. (Engl. Lett.)*. 2016. V. 29. P. 707–713.
8. Yang L., Sun L., Bai W., Li L. Thermal conductivity of Cu-Ti/diamond composites via spark plasma sintering // *Diam. Relat. Mater.* 2019. V. 94. P. 37–42.
9. Zhang Z.Y., Zhu Y., Liang Y.L. Preparation and thermal properties of graphene nanosheet/Ti composite // *IOP Conf. Ser. Mater. Sci. Eng.* 2017. V. 248. P. 012011.
10. Zheng H., Jaganandham, K. Thermal Conductivity and Interface Thermal Conductance in Composites of Titanium with Graphene Platelets // *J. Heat Transf.* 2014.V. 136. P. 06130.
11. Чередниченко А.И., Захаров П.В., Старостенков М.Д., Ерёмин А.М., Донг Г. Анализ ЕАМ и МЕАМ потенциалов для моделирования локализованных состояний кристаллов Ni₃Al и Pt₃Al // *Фундаментальные проблемы современ-*

ного материаловедения. 2021. Т. 18, № 2. С. 188–195.

12. Oluwajobi A., Chen X. The effect of interatomic potentials on the molecular dynamics simulation of nanometric machining // *Int. J. Autom. Comput.* 2011. V. 8. P. 326.

13. Янковская У.И., Захаров П.В., Старостенков М.Д., Маркидонов А.В., Корзникова Е.А. Поведение платины, армированной углеродной нанотрубкой, при сжимающей нагрузке // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2022. Т. 19, № 3. С. 295–303.

14. Poletaev G.M., Zorya I.V., Kulabukhova N.A., Novoselova D.V., Starostenkov M.D. The study of hydrogen interaction with palladium and nickel nanoparticles by the method of molecular dynamics // *Izvestiya Ferrous Metallurgy*. 2017. V. 60(6). P. 463–468.

15. Рысаева Л.Х., Баимова Ю.А., Лисовенко Д.С., Крылова К.А., Дмитриев С.В., Городцов В.А. Упругие свойства фуллерита // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2016. Т. 13, № 1. С. 105–109.

16. Poletaev G.M., Zorya I.V., Rakitin R.Yu., Iliina M.A. Interatomic potentials for describing impurity atoms of light elements in fcc metals // *Mater. Phys. Mech.* 2019. V. 42(4). P. 380–388.

17. Poletaev G.M., Starostenkov M.D. Mutual diffusion at the interface in a two-dimensional Ni-Al system // *Tech. Phys. Lett.* 2003. V. 29(6). P. 454–455.

18. Poletaev, G.M., Zorya, I.V., Novoselova, D.V., Starostenkov, M.D. Molecular dynamics simulation of hydrogen atom diffusion in crystal lattice of fcc metals // *Int. J. Mater. Res.* 2017. V. 108(10). P. 785–790.

19. Wang X., Xiao W., Wang J., Sun L., Shi J., Guo H., Liu Y., Wang L. Enhanced interfacial strength of graphene reinforced aluminum composites via X (Cu, Ni, Ti)-coating: Molecular dynamics insights // *Advanced Powder Technology*. 2021. V. 32(7). P. 2585–2590.

20. Xia K., Zhan H., Zhang X., Li Z. Atomistic Investigation of the Titanium Carbide MXenes under Impact Loading // *Nanomaterials*. 2022. V. 12(14). P. 2456.

21. Zhu Y., Zhang Y.C., Qi S.H., Xiang Z. Molecular dynamics study on the impact of the cutting depth to the titanium nanometric cutting // *Applied Mechanics and Materials*. Trans Tech Publications Ltd. 2014. V. 536. P. 1431–1434.

22. Tersoff J. Empirical interatomic potential for carbon, with applications to amorphous carbon // *Phys. Rev. Lett.* 1988. V. 61(25). P. 2879–2882.

23. Plummer G., Tucker G.J. Bond-order potentials for the Ti_3AlC_2 and Ti_3SiC_2 MAX phases // *Physical Rev. B*. 2019. V. 100(21). P. 214114.

24. Plummer G., Rathod H., Srivastava A. et al. On the origin of kinking in layered crystalline solids // *Materials Today*. 2021. V. 43. P. 45–52.

25. Mendeleev M.I., Underwood T.L., Ackland G.J. Development of an interatomic potential for the simulation of defects, plasticity, and phase transformations in titanium // *The Journal of Chemical Physics*. 2016. V. 145(15). P. 154102.

26. Сафина Л.Р., Баимова Ю.А. Выбор потенциала межатомного взаимодействия для моделирования системы никель-углерод // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2019. Т. 16, № 1. С. 30–35.

27. Montazeriç A., Panahi B. MD-based estimates of enhanced load transfer in graphene/metal nanocomposites through Ni coating // *Appl. Surf. Sci.* 2019. V. 457. P. 1072–1080.

28. Inoue S., Matsumura Y. Influence of metal coating on single-walled carbon nanotube: Molecular dynamics approach to determine tensile strength // *Chem. Phys. Lett.* 2009. V. 469. P. 125–129.

Информация об авторах

Е. А. Рожнова – студент Уфимского университета науки и технологий.

Л. Р. Сафина – младший научный сотрудник Института проблем сверхпластичности металлов РАН.

Ю. А. Баимова – доктор физико-математических наук, профессор РАН, ведущая лабораторией Института проблем сверхпластичности металлов РАН.

References

1. Lee, C., Li, Q., Kalb, W., Liu, X. Z., Berger, H., Carpick, R. W. & Hone, J. (2010). Frictional characteristics of atomically thin sheets. *Science*, 328(5974), 76–80.

2. Pavithra, C. L., Sarada, B. V., Rajulapati, K. V., Rao, T. N. & Sundararajan, G. (2014). A new electrochemical approach for the synthesis of copper-graphene nanocomposite foils with high hardness. *Sci. Rep.*, 4, 1–7.

3. Pop, E., Varshney, V. & Roy, A. K. (2012). Thermal properties of graphene: Funda-

- mentals and applications. *MRS Bull.*, 37(12), 1273–1281.
4. Zhao, X. & Liu, R. (2012). Recent progress and perspectives on the toxicity of carbon nanotubes at organism, organ, cell, and biomacromolecule levels. *Environ. Int.*, 40(1), 244–255.
5. Cao, H. & Liang, Y. (2020). The microstructures and mechanical properties of graphene-reinforced titanium matrix composites. *Journal of Alloys and Compounds*, 812, 152057.
6. Kanjwal, M. A. & Leung, W. W.-F. (2019). Titanium based composite-graphene nanofibers as high-performance photocatalyst for formaldehyde gas purification. *Ceram. Int.*, 45, 5617–5626.
7. Yang, W.-Z., Huang, W.-M., Wang, Z.-F., Shang, F.-J., Huang, W. & Zhang, B.-Y. (2016). Thermal and Mechanical Properties of Graphene-Titanium Composites Synthesized by Microwave Sintering. *Acta Metall. Sin. (Engl. Lett.)*, 29, 707–713.
8. Yang, L., Sun, L., Bai, W. & Li, L. (2019). Thermal conductivity of Cu-Ti/diamond composites via spark plasma sintering. *Diam. Relat. Mater.*, 94, 37–42.
9. Zhang, Z. Y., Zhu, Y. & Liang, Y. L. (2017). Preparation and thermal properties of graphene nanosheet/Ti composites. *IOP Conf. Ser. Mater. Sci. Eng.*, 248, 012011.
10. Zheng, H. & Jaganandham, K. (2014). Thermal Conductivity and Interface Thermal Conductance in Composites of Titanium with Graphene Platelets. *J. Heat Transf.*, 136, 06130.
11. Cherednichenko, A. I., Zakharov, P. V., Starostenkov, M. D., Eremin, A. M. & Dong, G. (2021). Analysis of EAM and MEAM potentials for modeling localized states of Ni₃Al and Pt₃Al crystals. *Fundamental'nye problemy sovremenogo materialovedenia (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 18(1), 188–195. (In Russ.)
12. Oluwajobi, A. & Chen, X. (2011). The effect of interatomic potentials on the molecular dynamics simulation of nanometric machining. *Int. J. Autom. Comput.*, 8, 326.
13. Yankovskaya, U. I., Zakharov, P. V., Starostenkov, M. D., Markidonov, A. V. & Korznikova, E. A. (2022). Behavior of platinum reinforced with carbon nanotubes under compressive load. *Fundamental'nye problemy sovremenogo materialovedenia (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 19(1), 295–303. (In Russ.)
14. Poletaev, G. M., Zorya, I. V., Kulabukhova, N. A., Novoselova, D. V. & Starostenkov, M. D. (2017). The study of hydrogen interaction with palladium and nickel nanoparticles by the method of molecular dynamics. *Izvestiya Ferrous Metallurgy*, 60(6), 463–468.
15. Rysaeva, L. K., Baimova, J. A., Lisovenko, D. S., Krylova, K. A., Dmitriev, S. V. & Gorodtsov, V. A. (2016). The elastic properties of fullerite. *Fundamental'nye problemy sovremenogo materialovedenia (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 13(1), 105–109. (In Russ.)
16. Poletaev, G. M., Zorya, I. V., Rakitin, R. Yu. & Iliina, M. A. (2003). Interatomic potentials for describing impurity atoms of light elements in fcc metals. *Mater. Phys. Mech.*, 42(4), 380–388.
17. Poletaev, G. M. & Starostenkov, M. D. (2003). Mutual diffusion at the interface in a two-dimensional Ni-Al system. *Tech. Phys. Lett.*, 29(6), 454–455.
18. Poletaev, G. M., Zorya, I. V., Novoselova, D. V. & Starostenkov, M. D. (2017). Molecular dynamics simulation of hydrogen atom diffusion in crystal lattice of fcc metals. *Int. J. Mater. Res.*, 108(10), 785–790.
19. Wang, X., Xiao, W., Wang, J., Sun, L., Shi, J., Guo, H., Liu, Y. & Wang, L. (2021). Enhanced interfacial strength of graphene reinforced aluminum composites via X (Cu, Ni, Ti)-coating: Molecular-dynamics insights. *Advanced Powder Technology*, 32(7), 2585–2590.
20. Xia, K., Zhan, H., Zhang, X. & Li, Z. (2022). Atomistic Investigation of the Titanium Carbide MXenes under Impact Loading. *Nanomaterials*, 12(14), 2456.
21. Zhu, Y., Zhang, Y. C., Qi, S. H. & Xiang, Z. (2014). Molecular dynamics study on the impact of the cutting depth to the titanium nanometric cutting. *Applied Mechanics and Materials. Trans Tech Publications Ltd*, 536, 1431–1434.
22. Tersoff, J. (1988). Empirical interatomic potential for carbon, with applications to amorphous carbon. *Physical Review Letters*, 61(25), 2879–2882.
23. Plummer, G. & Tucker, G. J. (2019). Bond-order potentials for the Ti₃AlC₂ and Ti₃SiC₂ MAX phases. *Physical Review B*, 100(21), 214114.
24. Plummer, G., Rathod, H. & Srivastava, A. et al. (2021). On the origin of kinking in layered crystalline solids. *Materials Today*, 43, 45–52.
25. Mendeleev, M. I., Underwood, T. L. & Ackland, G. J. (2016). Development of an interatomic potential for the simulation of defects, plasticity, and phase transformations in titanium. *The Journal of Chemical Physics*, 145(15), 154102.

26. Safina, L. R. & Baimova, J. A. (2019). The search of interatomic potential for the simulation of nickel-carbon system. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 16(1), 30–35. (In Russ.).

27. Montazeriç, A. & Panahi, B. (2019). MD-based estimates of enhanced load transfer in graphene/metal nanocomposites through Ni coating. *Appl. Surf. Sci.*, 457, 1072–1080.

28. Inoue, S. & Matsumura, Y. (2009). Influence of metal coating on single-walled carbon nanotube: Molecular dynamics approach to determine tensile strength. *Chem. Phys. Lett.*, 469, 125–129.

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

Статья поступила в редакцию 12.04.2023; одобрена после рецензирования 19.05.2023; принята к публикации 26.05.2023.

The article was received by the editorial board on 12 Apr. 23; approved after reviewing 19 May 23; accepted for publication 26 May 23.

Information about the authors

E.A. Rozhnova – Student of Ufa University of Science and Technology.

L. R. Safina – Junior Researcher at the Institute for Metals Superplasticity Problems of the Russian Academy of Sciences.

J. A. Baimova – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor of the Russian Academy of Sciences, Head of Laboratory at the Institute for Metals Superplasticity Problems of the Russian Academy of Sciences.