

Научная статья

1.3.8. Физика конденсированного состояния (физико-математические науки)

УДК 538.9

doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2023.04.011

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ МЕЖДУ АТОМАМИ Al–C НА МЕЖФАЗНОЙ ГРАНИЦЕ АЛЮМИНИЙ-УГЛЕРОДНАЯ НАНОЧАСТИЦА

Виктор Витальевич Решетняк^{1†}, Артемий Витальевич Аборкин²

^{1,2} Владимирский государственный университет имени Александра Григорьевича и Николая Григорьевича Столетовых, ул. Горького, 87, 600000, Владимир, Россия

¹ viktor.reshetnyak84@gmail.com[†], <https://orcid.org/0000-0003-2643-0087>

² aborkin@vlsu.ru, <https://orcid.org/0000-0003-4979-7164>

Аннотация. Предложена аналитическая модель взаимодействия между атомами Al и C на межфазных границах, образованных алюминием и углеродными наночастицами. Модель удобна для практического использования при расчете свободной энергии межфазной границы, которая является существенной для нанокompозитов и определяет их механические, теплофизические и другие свойства. В работе рассмотрены наночастицы различной структуры, нашедшие применение при разработке алюмоматричных композитов: фуллерены различных диаметров, однослойные углеродные нанотрубки металлического и полупроводникового типов, различных радиусов и хиральности, графен и графит. Предложенная в работе модель использует потенциал Леннарда-Джонса и предполагает приближенный учет влияния локальной структуры наночастицы на взаимодействие пар атомов алюминия и углерода путем введения дополнительных параметров. В настоящей работе в качестве величины, определяющей глубину и расположение потенциальной ямы, принята средняя локальная кривизна поверхности наночастицы. Работа дополнена исследованием межфазного взаимодействия в рамках теории функционала плотности. Путем сравнения результатов вычислений, выполненных с использованием приближений различного уровня точности, установлены границы применимости предложенного потенциала и показана возможность его применения для исследования межфазного взаимодействия в нанокompозитах на основе алюминия и наноуглерода.

Ключевые слова: потенциал межатомного взаимодействия, алюминий, углеродные нанотрубки, фуллерены, графен, графит, композит, межфазная граница, DFT.

Благодарности: Работа выполнена в рамках государственного задания в сфере научной деятельности Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (тема FZUN-2020-0015, госзадание ВлГУ).

Для цитирования: Решетняк В.В., Аборкин А.В. Взаимодействие между атомами Al–C на межфазной границе алюминий-углеродная наночастица // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2023. Т. 20, № 4. С. 515–523. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2023.04.011.

Original article

INTERACTION BETWEEN Al–C ATOMS AT THE ALUMINUM-CARBON NANOPARTICLE INTERFACE

Victor V. Reshetniak^{1†}, Artemy V. Aborkin²

^{1,2} Vladimir state university named after Alexander and Nikolay Stoletovs, Gorkogo Str., 87, Vladimir, 600000, Russia

¹ viktor.reshetnyak84@gmail.com[†], <https://orcid.org/0000-0003-2643-0087>

² aborkin@vlsu.ru, <https://orcid.org/0000-0003-4979-7164>

Abstract. An analytical model of the interaction between Al and C atoms at the interfaces formed by aluminum and carbon nanoparticles is proposed. The model is convenient for practical use in calculating the free energy of the interface, which is essential for nanocomposites and determines their mechanical, thermophysical and other proper-

ties. The paper considers nanoparticles of various structures that used in the development of aluminum matrix composites: fullerenes of various diameters, single-layer carbon nanotubes of metallic and semiconductor types, of various radii and chirality, graphene and graphite. The proposed model uses the Lennard-Jones potential and assumes an approximate account of the influence of the local structure of the nanoparticle on the interaction of pairs of aluminum and carbon atoms by introducing additional parameters. In this paper, we use the average local curvature of the nanoparticle surface as the value determining the depth and location of the potential well. The work is supplemented by the study of interphase interaction within the framework of the density functional theory. By comparing the results of calculations performed using approximations of various levels of accuracy, the limits of applicability of the proposed potential are established and the possibility of its application for the study of interfacial interaction in nanocomposites based on aluminum and nanocarbon is shown.

Keywords: interatomic potential, aluminium, carbon nanotubes, fullerenes, graphene, graphite, composite, interface, DFT.

Acknowledgements: The work was carried out within the framework of the state task in the field of scientific activity of the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (subject FZUN-2020-0015, state task of VISU).

For citation: Reshetniak, V. V. & Aborkin, A. V. (2023). Interaction between Al–C atoms at the aluminum-carbon nanoparticle interface. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 20(4), 515–523. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2023.04.011.

Введение

Углеродные частицы различной структуры широко используются при разработке композиционных материалов с требуемыми свойствами. В частности, значительный интерес проявляется к алюмоматричным композитам, использующим в качестве наполнителя различные структурные модификации углерода. Ключевым при создании нанокомпозитов считается вопрос обеспечения взаимодействия между матрицей и наполнителем. Особенно острым вопросом межфазного взаимодействия оказывается для наночастиц малого размера, не более 10 нм. При этом нанокомпозит характеризуется развитой межфазной поверхностью, свободной энергией которой нельзя пренебречь [1, 2]. Используя концепцию поверхностных напряжений [3] в работе [1] были получены аналитические выражения для распределения полей упругих деформаций и напряжений несоответствия в веществе матрицы со сферическим нановключением. Конечные выражения, определяющие распределение напряжений и деформаций, зависят от «упругих модулей межфазной границы», которые возникают из условия термодинамического равновесия при дифференцировании свободной энергии межфазной границы, являются параметрами задачи и могут быть определены подгонкой под известные экспериментальные данные или результаты атомистического моделирования [1, 2]. Перспективной представляется также разработка упрощенных аналитических моделей деформации

межфазной границы [2], удобных для практического использования при оценке конечных механических свойств композиционного материала.

Построение как численных атомистических моделей, так и упрощенных аналитических выражений для описания межфазной границы возможно только при использовании потенциалов межатомного взаимодействия – функций, определяющих зависимость потенциальной энергии системы от расстояния между парами атомов. Состояния электронной подсистемы при этом не рассчитываются, а их изменение при взаимодействии атомов учитывается с помощью параметров потенциала. Потенциал Леннарда-Джонса, простейший из потенциалов межатомного взаимодействия, дающий качественно верную картину физических процессов в конденсированных веществах, имеет вид

$$u(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]. \quad (1)$$

Потенциал содержит два слагаемых, положительное и отрицательное, определяющих короткодействующее отталкивание и дальнедействующее притяжение атомов. Параметры ε и σ определяют глубину и положение потенциальной ямы. Вид потенциала (1) не имеет строгого физического обоснования для атомов конденсированных веществ с химическими связями, однако качественно верная зависимость энергии пары атомов от расстояния (наличие потенциальной ямы, отталкивание на малых расстояниях и притяжение на больших) позволяет

использовать потенциал и для конденсированных веществ. При этом необходимо учитывать, что значения параметров потенциала определяются электронной структурой не отдельного атома, а системы химически связанных атомов. Поэтому параметры не являются универсальными, и должны быть определены для конкретной системы с учетом локального окружения взаимодействующих атомов, например, с помощью подгонки под результаты экспериментов или *ab initio* расчетов.

Возможно применение более современных потенциалов, функциональный вид которых учитывает тип химических связей, включает зависимость от взаимного расположения трех и более соседних частиц [4]. Имеющий место перенос заряда при образовании полярной связи также может быть автоматически рассчитан в ходе моделирования и учтен с использованием кулоновских поправок к потенциалу [5]. Такие потенциалы сравнительно более универсальны и могут быть использованы в численных исследованиях, однако, их использование для аналитических оценок свойств интерфейса невозможно, а корректная параметризация, предполагающая подгонку десятков и даже сотен параметров, весьма затруднительна.

Несмотря на одинаковый химический состав, различным аллотропным модификациям углерода присущи различные физико-химические свойства. При исследовании межфазного взаимодействия углеродных наночастиц с алюминием эти различия проявляются в зависимости потенциала межатомного взаимодействия от структуры поверхности наночастиц. Настоящая работа посвящена исследованию межатомного взаимодействия Al–C на межфазной поверхности, образованной алюминием и углеродными наночастицами: фуллеренами или углеродными нанотрубками различного диаметра и хиральности. Следует заметить, что несмотря на значительное количество работ, посвященных теоретическому и экспериментальному исследованию межфазного взаимодействия в таких системах (см. работы [6–8] и цитируемую в них литературу), данный вопрос исследован недостаточно. При этом имеются факты, свидетельствующие о возможности существования такой зависимости. В частности, хорошо известно, что для фуллеренов C_{60} , расположенных на алюминиевой подложке, характерно более сильное межатомное взаимодействие Al–C, чем для графена [7, 8], причем глубина потенциальной ямы отличается

на порядок ($4,86 \cdot 10^{-3}$ эВ для графена и $5,22 \cdot 10^{-2}$ эВ для C_{60}), а ее положение – более чем на 1 Å ($4,15$ Å для графена и $3,04$ Å для C_{60}). Данные [9] о зависимости электронной структуры углеродных нанотрубок от их радиуса и хиральности также свидетельствуют в пользу предположения о зависимости химической активности атомов углерода от кривизны поверхности наночастицы.

Исследования настоящей работы позволили сформулировать метод приближенного учета влияния локальной структуры поверхности наночастицы на межатомное взаимодействие Al–C. Метод использует малость средней локальной кривизны поверхности наночастицы (ввиду $R \gg l_0$), является универсальным и позволяет определить значения параметров потенциала (1) для углеродных нанотрубок и фуллеренов любой структуры, но не слишком малого радиуса. Для тестирования предложенной модели межатомного взаимодействия выполнена серия вычислений *ab initio*. В рамках теории функционала плотности (DFT) определены значения энергий и межатомных расстояний Al–C для различных углеродных частиц, расположенных на подложке Al(111). При этом было рассмотрено 10 различных углеродных структур: фуллерены различного радиуса (C_{60} , C_{180} и C_{240}), графен, УНТ с полупроводниковым (УНТ(8,0) и УНТ(10,0)) и металлическим типом проводимости (УНТ(4,4), УНТ(5,5), УНТ(6,6), УНТ(3,12)). Напомним, что однослойная УНТ хиральностью (n, m) радиусом ~ 1 нм имеет полупроводниковый тип проводимости при выполнении условия $n - m \neq 3q$, где n, m, q – целые числа [9]. В отличие от углеродных нанотрубок, для которых могут быть характерны различная хиральность и радиус, среди фуллеренов при создании композиционных материалов на основе алюминия обычно используются C_{60} , в то время как C_{180} и C_{240} менее распространены. В то же время, известны попытки создания нанокompозитов на основе луковичных структур [10], структура которых представляет собой совокупность концентрических сферических углеродных оболочек (фуллеренов) различного диаметра.

Результаты вычислений, выполненных в настоящей работе в рамках DFT и модели парного взаимодействия, дополненные данными для C_{60} [8] и графена [7], хорошо согласуются друг с другом при значениях средней кривизны $\kappa \leq 0,24$.

Детали вычислений

На идеальной кристаллической пленке Al(111) толщиной 4 атомных слоя размещалась углеродная наночастица. Расчет выполнялся для орторомбической кристаллической ячейки, на границах которой задавались периодические граничные условия, а алюминиевая пленка была ориентирована в плоскости XY. Высота ячейки задавалась равной 40 Å, при этом крайние верхние атомы углерода и нижние атомы алюминия были отделены от горизонтальных границ ячеек расстоянием, не менее чем 9,5 Å. Длина и ширина ячейки, а также хиральности нанотрубок подбирались исходя из условия минимизации возникающих напряжений несоответствия. Для УНТ типа «зиг-заг» размер ячейки алюминиевой пленки задавался равным 6×8, причем нанотрубка была ориентирована вдоль оси X. Для всех остальных частиц рассматривалась пленка 7×8, нанотрубки при этом были ориентированы вдоль оси Y. Максимальное несоответствие параметров ячеек нанотрубки и алюминия при этом не превышало 2,2%. Взаимное расположение пленки и наночастицы схематически представлено на рис. 1.

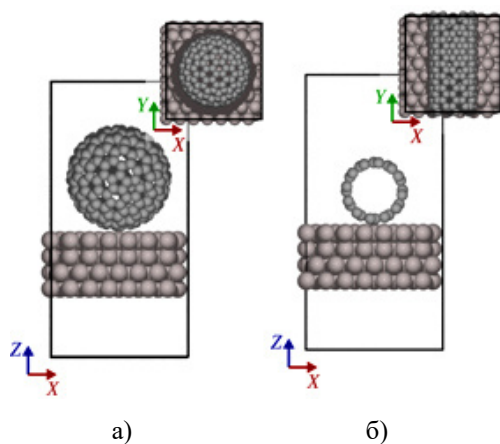


Рис.1. Расположение наночастиц на подложке: а) C_{240} -Al(111), б) CNT(6,6)-Al(111)

Fig.1. Location of nanoparticles on the substrate: а) C_{240} -Al(111), б) CNT(6,6)-Al(111)

Задание исходных позиций атомов и параметров ячейки для пленки Al(111) выполнялось с использованием программы ASE [11], в качестве входных данных в которой задавались предварительно рассчитанные в рамках выбранной квантовомеханической модели атомные позиции и параметры элементарной ячейки кристалла алюминия. Затем выполнялась оптимизация позиций атомов алюминия с фиксиро-

ванными параметрами ячейки, после чего на подложке размещалась углеродная наночастица и позиции атомов снова оптимизировались.

Все квантовомеханические расчеты осуществлялись с использованием программы CP2K [12] в рамках теории функционала плотности. Для учета обмена и корреляции электронов использовался потенциал Пердью-Бурке-Эрнцерхофа (PBE) [13]. Расчет волновой функции, в который были включены все электроны, проводился с использованием базисного набора роб-TZVP [14]. Численное интегрирование по зоне Бриллюэна выполнялось на сетке Монхорста-Пака. Для расчета параметров элементарной ячейки кристалла алюминия был выбран размер сетки 8×8×8, а расчет характеристик пленки осуществлялся на сетке 2×2×1. В настоящей работе расчеты проводились для углеродных нанотрубок и фуллеренов большого радиуса (C_{180} и C_{240}), в то время как данные для графена и фуллеренов C_{60} были получены нами ранее, с использованием аналогичных условий моделирования [7, 8]. Важно подчеркнуть, что надежность модели подтверждается сравнением с экспериментами (см. [7, 8] и цитируемую там литературу).

Результаты вычислений *ab initio* использовались для тестирования предложенной в настоящей работе эмпирической модели межатомного взаимодействия. Предполагалось, что взаимодействие атомов углерода и алюминия описывается потенциалом (1), параметры которого σ и ϵ являются функциями кривизны. Взаимодействие между атомами углерода рассчитывалось с использованием потенциала Терсоффа, а для атомов алюминия использовалась модель погруженного атома EAM. В ходе тестирования модели выполнялось сравнение рассчитанных *ab initio* и с использованием эмпирических потенциалов параметров систем: энергий связи частиц с подложками, а также расстояний от центров масс фуллеренов или оси нанотрубок до поверхностей подложек. При использовании эмпирического потенциала оптимизация позиций атомов и расчет энергии взаимодействия частицы с подложкой выполнялись в программе LAMMPS [15]. На границах ячейки задавались периодические граничные условия.

Результаты и обсуждение

Обобщение существующей упрощенной модели межатомного взаимодействия Al-C, параметризованной для графена [7] и фуллеренов

C_{60} [8], на случай УНТ и сферических частиц произвольного радиуса требует учета влияния локальной структуры поверхности на взаимодействие атомов. Поскольку использование потенциала (1) в чистом виде не допускает учета подобных эффектов, необходима модификация потенциала (1), которая требует введения дополнительных предположений. С этой целью в настоящей работе было использовано предположение о возможности приближенного учета зависимости потенциала от локального окружения пары взаимодействующих атомов путем введения единственного дополнительного параметра, характеризующего структуру – средней кривизны поверхности в точке контакта наночастицы с подложкой κ . При анализе кривизны наночастицы в качестве масштаба длины следует выбрать длину связи C–C, $l_0 \approx 1,42 \text{ \AA}$. Поскольку для сферических наночастиц радиуса R главные кривизны совпадают, $\kappa_1 = \kappa_2 = l_0/R$, для фуллеренов безразмерная средняя кривизна

$$\kappa = \frac{\kappa_1 + \kappa_2}{2} = \frac{l_0}{R}. \quad (2)$$

Для углеродной нанотрубки того же радиуса $\kappa_1 = l_0/R$, $\kappa_2 = 0$ и

$$\kappa = \frac{l_0}{2R}. \quad (3)$$

При построении потенциала считалось, что зависимость каждого из параметров (1) можно описать непрерывной функцией κ . Поскольку в большинстве практически значимых случаях справедливо $\kappa \ll 1$, функции $\varepsilon(\kappa)$ и $\sigma(\kappa)$ можно разложить в ряд Тейлора, пренебрегая слагаемыми второго и более высоких порядков малости:

$$\varepsilon(\kappa) = \varepsilon_0(1 + c_1\kappa), \quad \sigma(\kappa) = \sigma_0(1 + c_2\kappa). \quad (4)$$

Параметры $\varepsilon_0 = 4,86 \cdot 10^{-3} \text{ эВ}$ и $\sigma_0 = 3,70 \text{ \AA}$ соответствуют значению $\kappa = 0$, которое реализуется в случае графена и графита [7], а для фуллеренов C_{60} , поверхность которых характеризуется кривизной $\kappa = 0,4$, значения параметров $\varepsilon = 5,22 \cdot 10^{-2} \text{ эВ}$ и $\sigma = 2,70 \text{ \AA}$ [8]. Используя эти значения для решения системы уравнений (4) легко определить значения параметров $c_1 = 24,7$ и $c_2 = -0,68$.

Правомерность предположения о непрерывной функциональной зависимости параметров потенциала от κ неочевидна, требует обсуждения и проверки. Косвенно о возможности такой зависимости свидетельствуют следующие факты. Согласно [16] возможна классификация наноструктур по кристаллографической размерности и типам химических связей между

атомами, которые было предложено охарактеризовать по степени гибридизации атомных орбиталей. В терминологии органической химии степень гибридизации принимает целые значения, 1 (sp), 2 (sp^2) или 3 (sp^3) для дигональных, тригональных и тетрагональных атомов соответственно, и полностью определяется взаимным пространственным расположением связей данного атома углерода с соседними. В [16] для учета возможности реализации промежуточных структур используется дробная степень гибридизации sp^n ($1 < n < 2$) или sp^m ($2 < m < 3$). При этом для атомов углерода в фуллерене или нанотрубке произвольного радиуса степень гибридизации $2 < m < 3$ определяется углом пирамидизации системы углерод-углеродных связей, образованных данным атомом с его ближайшими соседями. Таким образом, для фуллерена или углеродной нанотрубки степень гибридизации атома углерода может быть представлена в виде непрерывной функции средней кривизны поверхности наночастицы в точке расположению данного атома. Об этом также свидетельствуют экспериментальные исследования электронной структуры углеродных нанотрубок и фуллеренов [9, 17]. В случае $\kappa = 0$ (графен) значение степени гибридизации $m = 2$, для фуллеренов и нанотрубок конечного радиуса характерна некоторая промежуточная степень гибридизации. Для атомов поверхности (111) алмаза степень гибридизации $m = 3$, а локальную кривизну можно определить как кривизну поверхности сферы, описанной около тетраэдра, образованного данным поверхностным атомом тремя его ближайшими соседями. Тогда получим, что третьей степени гибридизации атомов соответствует $\kappa = 2/3$ (рис. 2).

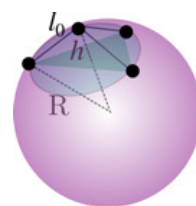


Рис.2. Связь локальной структуры, образованной данным атомом углерода и его ближайшими соседями, с локальной кривизной

Fig.2. Relation of the local structure formed by a given carbon atom and its nearest neighbors to local curvature

Важно заметить, что как для углеродных нанотрубок, так и для фуллеренов различного диаметра зависимость избыточной энергии атомов углерода от средней локальной кривизны углеродных наночастиц носит монотонный и непрерывный характер [18]. Непрерывны и

монотонны также зависимости энергий верхней занятой и нижней не занятой молекулярных орбиталей (НОМО и LUMO) от кривизны УНТ и сферических фуллеренов, C_{60} , C_{180} и C_{240} [19, 20].

Изложенные соображения не могут считаться доказательством правомерности принятых допущений, границы применимости которых требуют дополнительного исследования. С этой целью в настоящей работе был выполнен анализ энергии связи наночастицы с поверхностью Al(111) w и равновесного расстояния от поверхности до ближайших атомов углерода l .

Значения w и l вычислялись с использованием моделей различного уровня точности, а затем сравнивались. Расчеты проводились в рамках DFT и с использованием потенциала (1) с параметрами, рассчитанными согласно (4). Результаты вычислений, дополненные данными [7, 8] для графита и фуллерена C_{60} , представлены в табл.1. и на рис.3. Нижние индексы DFT и LJ введены для обозначения использованного метода расчета. Точки обозначены красным, желтым или зеленым цветом в зависимости от величины погрешности δ расчетов с использованием потенциала (1) относительно DFT.

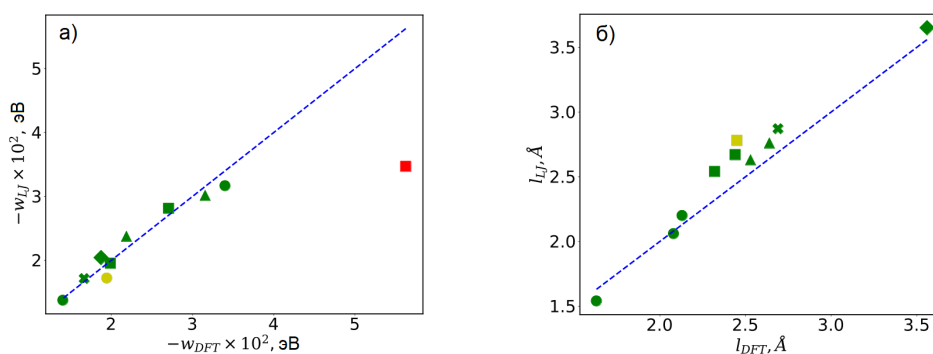


Рис.3. Сравнение результатов расчетов с использованием DFT (по оси x) и эмпирического потенциала (по оси y). а) средняя энергия связи, приходящаяся на 1 атом углерода; б) расстояние от частицы до поверхности алюминия. Символами \bullet обозначены данные для фуллеренов, \blacksquare – для УНТ типа «кресло», \blacktriangle – УНТ типа «зиг-заг», \times – УНТ (3,12), \blacklozenge – для графена. Отклонение точек от прямых линий $y = x$ характеризует величину погрешности δ эмпирической модели, рассчитанной относительно результатов *ab initio* вычислений. Зеленым цветом обозначены точки, для которых $\delta < 10\%$, желтым – $10\% \leq \delta < 20\%$, красным – $\delta > 20\%$

Fig.3. Comparison of the results of calculations using DFT (along the x -axis) and the empirical potential (along the y -axis). а) average binding energy per carbon atom; б) the distance from the particle to the aluminum surface. Symbols \bullet denote data for fullerenes, \blacksquare – for CNT «chair» type, \blacktriangle – for CNT «zig-zag», \times – for CNT (3,12), \blacklozenge – for graphene. The deviation of points from straight lines $y = x$ characterizes the error δ of the empirical model calculated relative to the results of *ab initio* calculations. Points for which $\delta < 10\%$ are marked in green, $10\% \leq \delta < 20\%$ in yellow, $\delta > 20\%$ in red

Таблица 1. Сравнение результатов вычислений взаимодействия наночастицы с подложкой Al(111) в рамках DFT и эмпирической модели

Table 1. Comparison of the results of calculations of the interaction of a nanoparticle with an Al(111) substrate in the framework of DFT and the empirical model

Тип	κ	w_{DFT} , мЭВ	w_{LJ} , мЭВ	l_{DFT} , Å	l_{LJ} , Å
C_{60} [25]	0,40	-34	-32	1,63	1,54
C_{180}	0,24	-19	-17	2,08	2,06
C_{240}	0,20	-14	-14	2,13	2,20
CNT (4,4)	0,26	-56	-35	2,32	2,4
CNT (5,5)	0,21	-27	-28	2,44	2,67
CNT (6,6)	0,17	-20	-20	2,45	2,78
CNT (8,0)	0,22	-32	-30	2,53	2,63
CNT (10,0)	0,18	-22	-24	2,64	2,76
CNT (3,12)	0,13	-17	-17	2,69	2,87
Графен [24]	0,00	-19	-20	3,56	3,65

Из рис.3 и табл.1 видно, что при выполнении условия $k \leq 0,24$, предложенная модель межатомного взаимодействия позволяет с хорошей точностью воспроизвести энергию связи и равновесное расстояние между углеродной наночастицей и поверхностью Al(111). При этом для углеродных нанотрубок типа «кресло» точность модели несколько ниже, чем для нанотрубок «зиг-заг» и фуллеренов. Поскольку электронная структура наночастицы достаточно сложно зависит от расположения атомов и электростатического потенциала ионной и электронной подсистем, можно предположить, что средняя кривизна поверхности наночастицы не позволяет в точности определить параметры потенциала (1). Более точное описание межатомного взаимодействия в системе алюминий-углерод требует введения дополнительных параметров и предположений. В то же время, полученные данные убедительно свидетельствуют о применимости модели для фуллеренов и нанотрубок большего диаметра. С уменьшением кривизны к точность расчета энергии растет, и является приемлемой уже для однослойных УНТ (5,5) и (8,0), а также для фуллеренов C_{60} и C_{180} . Точность вычисления межатомных расстояний остается в допустимых пределах для всех рассмотренных в настоящей работе структур. Для УНТ (4,4) расстояние между поверхностями частицы и алюминия воспроизводится с погрешностью $\delta_l = 8,7 \%$, а энергия связи – с погрешностью $\delta_w = 38,3 \%$.

Выводы

Предложенная аналитическая модель может быть применена для описания взаимодействия пар атомов Al–C на межфазных границах в алюмоматричных композитах с графеном или графитом, фуллеренами и углеродными нанотрубками различного радиуса и хиральности. Модель основана на использовании потенциала Ленарда-Джонса (1), а зависимость межатомного взаимодействия от локальной структуры поверхности наночастицы учитывается путем введения двух дополнительных параметров потенциала (4) и средней кривизны поверхности частицы. Применение модели для расчета взаимодействия наночастиц с подложкой позволяет получить хорошее согласие с результатами *ab initio* вычислений для углеродных нанотрубок и фуллеренов, средняя кривизна поверхности которых $\kappa \leq 0,24$. При этом приме-

нение потенциала для нанотрубок типа «кресло» дает несколько худшие результаты, по сравнению с расчетами для фуллеренов и других рассмотренных в работе наночастиц.

Материалы, представленные в данной статье, докладывались на XXII Международной научно-технической конференции «Проблема и перспективы развития литейного, сварочного и кузнечно-штамповочного производств» (11-13 августа 2023 г., г. Барнаул).

Список литературы

1. Sharma P., Ganti S., Bhate N. Effect of surfaces on the size-dependent elastic state of nanoinhomogeneities // *Applied Physics Letters*. 2003. V. 82, N 4. P. 535–537.
2. Reshetniak V., Reshetniak O., Aborkin A., Nederkin V., Filippov A. Effect of the Interface on the Compressibility of Substances with Spherical Nano-Inhomogeneities on the Example of Al/C₆₀ // *Nanomaterials*. 2022. V. 12, N 12. P. 2045.
3. Gurtin M.E., Weissmüller J., Larche F. A general theory of curved deformable interfaces in solids at equilibrium // *Philosophical Magazine A*. 1998. V. 78, N 5. P. 1093–1109.
4. Kaplan I.G. Intermolecular interactions: physical picture, computational methods and model potentials. John Wiley & Sons, 2006. 367 p.
5. Liang T., Shan T.-R., Cheng Y.-T., Devine B.D., Noordhoek M. et al. Classical atomistic simulations of surfaces and heterogeneous interfaces with the charge-optimized many body (COMB) potentials // *Materials Science and Engineering: R: Reports*. 2013. V. 74, N 9. P. 255–279.
6. Nasiri S., Wang F., Yang M., Guénolé J., Li Q. et al. Atomistic aspects of load transfer and fracture in CNT-reinforced aluminium // *Materialia*. 2022. V. 22. P. 101376.
7. Reshetniak V.V., Aborkin A.V. Aluminum-carbon interaction at the aluminum-graphene and aluminum-graphite interfaces // *Journal of Experimental and Theoretical Physics*. 2020. V. 130. P. 214–227.
8. Reshetnyak V.V., Reshetniak O.B., Aborkin A.V., Filippov A.V. Interatomic Interaction at the Aluminum-Fullerene C₆₀ Interface // *Journal of Experimental and Theoretical Physics*. 2022. V. 134, N 1. P. 69–84.
9. Dresselhaus M.S., Dresselhaus G., Eklund P.C. *Science of fullerenes and carbon nanotubes: their properties and applications*. Elsevier, 1996. 965 p.

10. Евдокимов И.А., Ваганов В.Е., Решетняк В.В., Бланк В.Д., Пивоваров Г.И. и др. Структура и свойства наноструктурных композиционных материалов системы алюминий-ионии // Конструкции из композиционных материалов. 2013. № 1. С. 43–48.

11. Larsen A.H., Mortensen J.J., Blomqvist J., Castelli I.E., Christensen R. et al. The atomic simulation environment – a python library for working with atoms // *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2017. V. 29, N 27. P. 273002.

12. Kühne T.D., Iannuzzi M., Ben M.D., Rybkin V.V., Seewald P. et al. CP2K: An electronic structure and molecular dynamics software package-Quickstep: Efficient and accurate electronic structure calculations // *The Journal of Chemical Physics*. 2020. V. 152, N 19.

13. Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized gradient approximation made simple // *Physical review letters*. 1996. V. 77, N 18. P. 3865.

14. Peintinger M.F., Oliveira D.V., Bredow T. Consistent Gaussian basis sets of triple-zeta valence with polarization quality for solid-state calculations // *Journal of Computational Chemistry*. 2013. V. 34, N 6. P. 451–459.

15. Plimpton S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics // *Journal of computational physics*. 1995. V. 117, N 1. P. 1–19.

16. Belenkov E.A., Greshnyakov V.A. Classification of structural modifications of carbon // *Physics of the Solid State*. 2013. V. 55. P. 1754–1764.

17. Haddon R.C. The fullerenes: powerful carbon-based electron acceptors // *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A: Physical and Engineering Sciences*. 1993. V. 343, N 1667. P. 53–62.

18. Holec D., Hartmann M.A., Fischer F.D., Rammerstorfer F.G., Mayrhofer P.H. et al. Curvature-induced excess surface energy of fullerenes: density functional theory and Monte Carlo simulations // *Physical Review B*. 2010. V. 81, N 23. P. 235403.

19. Casella G., Bagno A., Saielli G. Spectroscopic signatures of the carbon buckyonions $C_{60}@C_{180}$ and $C_{60}@C_{240}$: a dispersion-corrected DFT study // *Physical Chemistry Chemical Physics*. 2013. V. 15, N 41. P. 18030–18038.

20. Shiraishi M., Ata M. Work function of carbon nanotubes // *Carbon*. 2001. V. 39, N 12. P. 1913–1917.

Информация об авторах

В. В. Решетняк – кандидат физико-математических наук, доцент Владимирского государственного университета имени Александра Григорьевича и Николая Григорьевича Столетовых.

А. В. Аборкин – кандидат технических наук, доцент Владимирского государственного университета имени Александра Григорьевича и Николая Григорьевича Столетовых.

References

1. Sharma, P., Ganti, S. & Bhate, N. (2003). Effect of surfaces on the size-dependent elastic state of nano-inhomogeneities. *Applied Physics Letters*, 82(4), 535–537.

2. Reshetniak, V., Reshetniak, O., Aborkin, A., Nederkin, V. & Filippov, A. (2022). Compressibility of Substances with Spherical Nano-Inhomogeneities on the Example of Al/C_{60} . *Nanomaterials*, 12(12), 2045.

3. Gurtin, M. E., Weismüller, J. & Larche, F. (1998). A general theory of curved deformable interfaces in solids at equilibrium. *Philosophical Magazine A*, 78(5), 1093–1109.

4. Kaplan, I. G. (2006). Intermolecular interactions: physical picture, computational methods and model potentials. John Wiley & Sons. P. 367.

5. Liang, T., Shan, T.-R., Cheng, Y.-T., Devine, B. D. & Noordhoek, M. et al. (2013). Classical atomistic simulations of surfaces and heterogeneous interfaces with the charge-optimized many body (COMB) potentials. *Materials Science and Engineering: R: Reports*, 74(9), 255–279.

6. Nasiri, S., Wang, F., Yang, M., Guénolé, J. & Li, Q. et al. (2022). Atomistic aspects of load transfer and fracture in CNT-reinforced aluminium. *Materialia*, 22, 101376.

7. Reshetniak, V. V. & Aborkin, A. V. (2020). Aluminum-carbon interaction at the aluminum-graphene and aluminum-graphite interfaces. *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 130, 214–227.

8. Reshetnyak, V. V., Reshetniak, O. B., Aborkin, A. V. & Filippov, A. V. (2022). Interatomic Interaction at the Aluminum-Fullerene C_{60} Interfa. *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 134(1), 69–84.

9. Dresselhaus, M. S., Dresselhaus, G. & Eklund, P. C. (1996). Science of fullerenes and carbon nanotubes: their properties and applications. Elsevier. P. 965.

10. Evdokimov, I. A., Vaganov, V. E., Reshetnyak, V. V., Blank, V. D. & Pivovarov, G. I. et al. (2013). Struktura i svoystva nanostrukturnykh kompozitsionnykh materialov sistemy alyuminiy-oniony. *Konstruktii iz kompozitsionnykh materialov*, (1), 43–48. (In Russ.).
11. Larsen, A. H., Mortensen, J. J., Blomqvist, J., Castelli, I. E. & Christensen R. et al. (2017). The atomic simulation environment – a python library for working with atoms. *Journal of Physics: Condensed Matter.*, 29(27), 273002.
12. Kühne, T. D., Iannuzzi, M., Ben, M. D., Rybkin, V. V. & Seewald, P. et al. (2020). CP2K: An electronic structure and molecular dynamics software package-Quickstep: Efficient and accurate electronic structure calculations. *The Journal of Chemical Physics*, 152(9).
13. Perdew, J. P., Burke, K. & Ernzerhof, M. (1996). Generalized gradient approximation made simple. *Physical review letters*, 77(18), 3865.
14. Peintinger, M. F., Oliveira, D. V. & Bredow, T. (2013). Consistent Gaussian basis sets of triple-zeta valence with polarization quality for solid-state calculations. *Journal of Computational Chemistry*, 34(6), 451–459.
15. Plimpton, S. (1995). Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics. *Journal of computational physics*, 117(1), 1–19.
16. Belenkov, E. A. & Greshnyakov, V. A. (2013). Classification of structural modifications of carbon. *Physics of the Solid State*, 55, 1754–1764.
17. Haddon, R. C. (1993). The fullerenes: powerful carbon-based electron acceptors. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A: Physical and Engineering Sciences*, 343(1667), 53–62.
18. Holec, D., Hartmann, M. A., Fischer, F. D., Rammerstorfer, F. G. & Mayrhofer, P. H. et al. (2010). Curvature-induced excess surface energy of fullerenes: density functional theory and Monte Carlo simulations. *Physical Review B*, 81(23), 235403.
19. Casella, G., Bagno, A. & Saielli, G. (2013). Spectroscopic signatures of the carbon buckyonions C₆₀@C₁₈₀ and C₆₀@C₂₄₀: a dispersion-corrected DFT study. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 15(41), 18030–18038.
20. Shiraishi, M. & Ata, M. (2001). Work function of carbon nanotubes. *Carbon*, 39(12), 1913–1917.

Information about the authors

V. V. Reshetniak – Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Assistant professor, Vladimir state university named after Alexander and Nikolay Stoletovs.

A. V. Aborkin – Candidate of Technical Sciences, Assistant professor, Vladimir state university named after Alexander and Nikolay Stoletovs.

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

Статья поступила в редакцию 25.07.2023; одобрена после рецензирования 21.08.2023; принята к публикации 04.09.2023.

The article was received by the editorial board on 25 July 23; approved after reviewing 21 Aug. 23; accepted for publication 04 Sept. 23.