

Научная статья

1.3.8. Физика конденсированного состояния (физико-математические науки)

УДК 539.52

doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2024.02.006

**УСТОЙЧИВОСТЬ И ДЕФОРМАЦИОННОЕ ПОВЕДЕНИЕ КОМПОЗИТА НА ОСНОВЕ
ЯЧЕИСТОЙ СТРУКТУРЫ: МОЛЕКУЛЯРНАЯ ДИНАМИКА****Ильяс Илгизович Тувалев^{1†}, Рамиль Тухватович Мурзаев²**¹ Уфимский государственный нефтяной технический университет, ул. Первомайская, 14, 450000, Уфа, Россия^{1,2} Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, ул. Степана Халтурина, 39, 450001, Уфа, Россия¹ illumnus102@gmail.com[†], <https://orcid.org/0000-0002-9341-4178>² murzaevrt@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-2691-7031>

Аннотация. Композиционные материалы, состоящие из различных компонентов, объединенных физико-химическими связями, привлекают все большее внимание в связи с растущими требованиями к материалам. Поиск новых углеродных материалов, которые могли бы стать составной частью композитов, в настоящее время представляет большой интерес. В данной работе методом молекулярной динамики исследована устойчивость и деформационное поведение нового композитного материала на основе ячеистой углеродной структуры, заполненной никелем. Ячеистая углеродная структура представляет собой соты, стенки которых – это графеновые наноленты. В результате была создана атомистическая модель композита и исследованы его механические свойства при 0 К и 300 К. В частности, исследована устойчивость при сжатии и анализ прочности при растяжении. Показано как происходит перераспределение металла внутри ячеек графеновой матрицы: ГЦК решетка никеля трансформируется под действием графеновых стенок и атомы никеля укладываются слоями, повторяя «рисунок» графеновой матрицы. В процессе двухосного сжатия происходит дальнейшее изменение укладки атомов никеля внутри сотовых ячеек, что приводит к формированию слоев никеля параллельно стенкам ячеек. Одноосное растяжение проводилось для трех типов материала – чистого никеля, ячеистой структуры, заполненной никелем и композита после двухосного сжатия. Было показано, что прочность композита значительно возрастает по сравнению с чистым никелем, при этом прочность обеспечивается именно углеродной сеткой. Влияние температуры на прочность слабое, как и влияние анизотропии структуры. Полученные результаты демонстрируют новый вид композитного материала, обладающего высокой прочностью.

Ключевые слова: графен, ячеистый графен, композиты, механические свойства, молекулярная динамика.

Благодарности: Работа Тувалева И.И. поддержана Российским Научным Фондом (грант № 20-72-10112-П). Работа Мурзаева Р.Т. поддержана госзаданием молодежной лаборатории ИПСМ РАН.

Для цитирования: Тувалев И.И., Мурзаев Р.Т. Устойчивость и деформационное поведение композита на основе ячеистой структуры: молекулярная динамика // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2024. Т. 21, № 2. С. 188–198. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2024.02.006.

Original article

**STABILITY AND DEFORMATION BEHAVIOR OF CELLULAR
GRAPHENE COMPOSITE: MOLECULAR DYNAMICS****Ilyas I. Tuvalev^{1†}, Ramil T. Murzaev²**¹ Ufa State Petroleum Technological University, Pervomaiskaya Str., 14, Ufa, 450000, Russia^{1,2} Institute for Metals Superplasticity Problems of Russian Academy of Sciences, Khalturina Str., 39, Ufa, 450001, Russia¹ illumnus102@gmail.com[†], <https://orcid.org/0000-0002-9341-4178>² murzaevrt@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-2691-7031>

Abstract. Composite materials, consisting of different components combined together by physical and chemical bonds, are attracting increasing attention due to the growing demands on new functional materials. The search for new carbon materials that could become components of composite materials is currently of great interest. In this work, the stability and deformation behavior of a new composite material based on a nickel-filled cellular carbon structure have been studied using the molecular dynamics method. Cellular carbon structure is a honeycomb aerogel combined of graphene nanoribbons. As a result, an atomistic model of the composite has been constructed and its mechanical properties have been studied at 0 K and 300 K. In particular, compressive stability and tensile strength analysis have been studied. It is shown how the redistribution of the metal occurs inside the cells of the graphene matrix: the fcc lattice of nickel is transformed under the attraction of the graphene walls and the nickel atoms are stacked in layers, repeating the «pattern» of the graphene matrix. During the process of biaxial compression, a further change in the arrangement of nickel atoms inside the honeycomb cells occurs, leading to the formation of nickel layers parallel to the cell walls. Uniaxial tensile tests have been performed on three types of materials: pure nickel, a nickel-filled cellular structure, and a composite after biaxial compression. It has been shown that the strength of the composite increases significantly compared to pure nickel, and the strength is provided by the carbon network. The effect of temperature on the strength is weak, as is the influence of structure anisotropy. The results obtained demonstrate a new type of composite material with high strength.

Keywords: graphene, cellular graphene, composites, mechanical properties, molecular dynamics.

Acknowledgements: The work of I.T. is supported by the grant of Russian Science Foundation (No. 20-72-10112). Work of R.M. is supported by the State Assignment of IMSP RAS (Young Scientist Laboratory).

For citation: Tuvalev, I. I. & Murzaev, R. T. (2024). Stability and deformation behavior of cellular graphene composite: molecular dynamics. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedenia (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 21(2), 188–198. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2024.02.006.

Введение

Недавние достижения в области композитных материалов произвели революцию в их применении в различных отраслях промышленности. Композиты позволяют сочетать свойства разнородных материалов для достижения превосходных характеристик и при этом обладают уникальными свойствами, недостижимыми для однокомпонентных материалов.

Одним из перспективных направлений исследований в последние годы стали композиты на основе металла и графена, которые демонстрируют высокую прочность, коррозионностойкость, и др. [1-2]. Графен даже в небольших концентрациях (0,1 %), в качестве компонента в композиционном материале способен существенно улучшить физико-механические свойства однокомпонентного исходного материала [3].

По данным [4] значительное улучшение механических свойств графенового композита было достигнуто даже при низком содержании графена. Улучшение прочности на разрыв на 150 % и увеличение модуля Юнга почти в 10 раз были достигнуты при добавлении 1,8 об. % графена. Работа [5] показывает систематические тенденции в изменении механической жесткости композита в зависимости от концентрации наполнителя, его размера и формы, а также прочности взаимодействия между матрицей и наполнителем. Результаты показывают слабую зависимость увеличения жесткости

структуры при добавлении фуллеренов разного размера, но существенную зависимость жесткости от размера графена. Это свидетельствует о потенциале применения графена для создания композитов с улучшенными механическими характеристиками. Более подробное обсуждение возможностей применения графена для упрочнения композитов было рассмотрено в работе [6].

Графен сам по себе является одним из самых прочных из когда-либо созданных человеком материалов [7-8], при этом он обладает уникальной способностью к изгибу и растяжению без потери устойчивости. Однако его применение ограничено проблемами, такими как высокая стоимость синтеза и отсутствие эффективных методов массового производства. Очень большое значение имеет появление дефектов в графене, наличие которых приводит к уменьшению его прочности [9]. При этом использование графена в композитах имеет несомненное преимущество: его использование в составе композита не требует фиксации двумерной геометрии. Более того, на основе графена могут быть разработаны новые двумерные материалы.

В 2016 впервые были получены новые углеродные сотовые структуры. В данных работах сообщают об исключительно устойчивом аллотропе углерода, который представляет собой графеновые соты, полученного осаждением сублимированного в вакууме графита [10]. Данные аллотропные структуры получены на осно-

ве данных низкотемпературной электронографии и электронной микроскопии. Эти структуры могут быть как периодическими, так и случайными и строятся из sp^2 -связанных атомов углерода. Подобные структуры можно рассматривать как трехмерный графен. Они демонстрируют хорошее поглощение различных газов, недостижимые в других формах углерода, таких как фуллериты или нанотрубки. Эти сотовые конструкции можно использовать не только для хранения различных газов и жидкостей, но и в качестве матрицы для новых композитов [11], о чем прямо говорили экспериментаторы в своих работах.

При изучении новых материалов, синтезировать которые на практике затруднительно или пока невозможно, роль молекулярной динамики (МД) неопределима. Эта точка зрения отражена в работах группы Старостенкова М.Д., где метод МД применяют для изучения различных аспектов материаловедения [12-14]. Например, в исследовании [15] показана эффективность МД в моделировании сложного поведения материала в уникальных условиях, таких как воздействие лазерного импульса. Эта работа не только подчеркивает адаптивность метода МД в различных сценариях, но и его точность в анализе сложных физических явлений на молекулярном уровне. Анализ возможности моделирования композитов на основе графена и металла представлен в работе [16].

Целью данной работы является исследование устойчивости и механических свойств нанокompозита на основе никеля и ячеистой графеновой структуры. В работе посредством молекулярной динамики исследована прочность такого композита при сжатии и растяжении.

Методика моделирования

Для проведения МД моделирования использовался программный пакет LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator) [21-23] широко распространенный и хорошо зарекомендовавший себя в сообществе вычислителей как универсальное и гибкое программное обеспечение для МД-моделирования.

В данной работе было подготовлено две исходные структуры: кристалл чистого никеля и композит – углеродная сотовая структура, заполненная никелем. Для сопоставления результатов композит и кристалл никеля создавались таким образом, чтобы их размеры были максимально приближенными. Далее композитная структура на основе ячеистой графеновой сет-

ки, заполненной никелем будет называться для простоты просто композитом.

Была использована собственная программа для создания исходной структуры композита [17]. Исходная ячеистая структура композита создавалась из графеновых нанолент, соединенных ковалентными связями под углом 120° . Подобные углеродные структуры (“honeycomb graphene aerogel”) были ранее неоднократно изучены и получены экспериментально [18-20]. Полости данной ячеистой структуры были заполнены кристаллами никеля таким образом, чтобы расстояние между стенкой графеновой ячейки и ближним слоем металла было не менее 1.8 \AA . При соблюдении данного расстояния наблюдается минимальное напряжение между атомами углерода и никеля. Полученная структура имела размеры $147 \times 149 \times 63 \text{ \AA}$ в плоскости X-Y-Z. Содержание углерода составило 34.9 % от общего числа атомов в структуре. Проекция полученного композита на плоскость XY показана на рис.1.

Подобно графену, ячеистая графеновая структура имеет два основных направления – зигзаг (вдоль оси Y) и кресло (вдоль оси X).

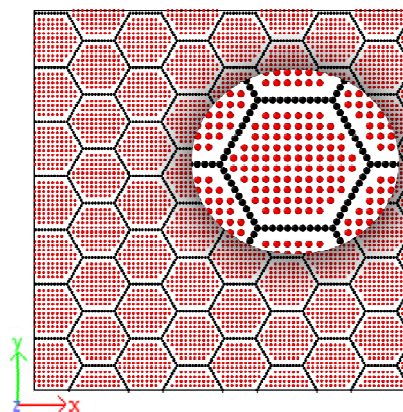


Рис.1. Композит на основе ячеистого графена, заполненного никелем в проекции на плоскость XY

Fig.1. Composite based on cellular graphene filled with nickel in projection onto the XY plane

В данной работе были использованы эмпирические потенциалы из библиотеки LAMMPS. Взаимодействие между атомами углерода определял парный потенциал AIREBO. Для взаимодействий никель – никель использовался EAM-FS потенциал Менделеева [24]. Взаимодействие между атомами углерода и никеля определялось парным эмпирическим потенциалом Морзе.

На всех этапах компьютерного эксперимента использовалась расчетная ячейка с периодическими граничными условиями во всех

трех направлениях. Для всех расчетов при моделировании использовался временной шаг 1 фс.

Для подготовки структур к дальнейшим испытаниям на растяжение исходные структуры подверглась процессу глубокой релаксации при температуре 0 К до достижения минимальных напряжений на стенках расчетной ячейки.

Для моделирования растяжения применена одноосная деформация со скоростью $5 \cdot 10^{-3} \text{ пс}^{-1}$. Во время моделирования растяжения применялся изотермически-изобарический ансамбль для поддержания температуры равной 0 или 300 К и давления равным 0 Па на стенах ячейки моделирования.

Результаты исследования

Релаксация структуры

На первоначальных этапах релаксации наблюдается изменение в укладке атомов никеля, заполняющих ячеистую углеродную структуру. Пример показан на рис.2, где представлена в увеличенном виде часть ячейки моделирования. Черным показаны атомы углерода, красным – атомы металла.

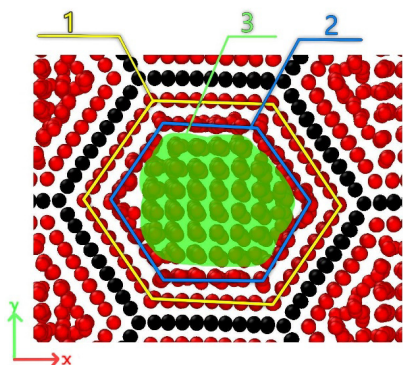


Рис.2. Часть расчетной ячейки в увеличенном виде после глубокой релаксации. Черным показаны атомы углерода, красным – атомы металла. Линии укладки атомов в разных слоях отмечены линиями разного цвета. Зеленым показана область, где атомы никеля сохранили первоначальное состояние

Fig.2. Part of the calculation cell in an enlarged form after deep relaxation. Carbon atoms are shown in black color, metal atoms are shown in red color. The lines of arrangement of atoms in different layers are marked with lines of different colors. Green color shows the area where the nickel atoms have retained their original state

В процессе релаксации меняется укладка слоев никеля вблизи стенок углеродной ячейки-

стой структуры. Желтый шестигранник 1 на рисунке выделяет атомы никеля, которые в процессе релаксации укладываются параллельно ближайшей графеновой стенке. Синий шестигранник 2 на рисунке выделяет атомы никеля, которые выстраиваются вблизи атомов шестигранника 1 в переходное аморфное состояние. И, наконец, область 3 выделяет атомы никеля, которые сохраняют свою изначальную укладку.

Таким образом, релаксация в основном меняет укладку атомов никеля лишь вблизи стенок углеродной структуры.

Деформация сжатия

После релаксации было исследовано деформационное поведение композита в условиях двусосного сжатия вдоль осей X и Y. В процессе сжатия решетка никеля продолжала меняться. Пример показан на рис.3, где представлена в увеличенном виде часть ячейки моделирования после сжатия до 10%.

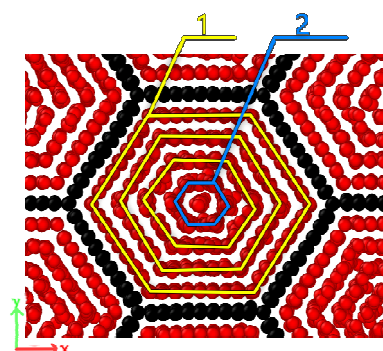


Рис.3. Часть расчетной ячейки в увеличенном виде после двусосного сжатия на 10 % вдоль X и Y. Черным показаны атомы углерода, красным – атомы металла. Линии укладки атомов в разных слоях отмечены линиями

Fig.3. Part of the calculation cell in an enlarged form after biaxial compression by 10 % along X and Y. Carbon atoms are shown in black color, metal atoms are shown in red color. The stacking lines of atoms in different layers are marked with lines

В процессе сжатия происходит дальнейшее изменение укладки слоев никеля внутри шестигранников. Желтыми линиями показана область 1, где слои никеля укладывались в шестигранники, постепенно упорядочиваясь, слой за слоем. Видно, что теперь большая часть вставленного в углеродную соту никеля имеет определенную укладку, следующую форме углеродной соты. Лишь в центре остается область 2, где атомы не уложены в столь идеальные слои,

однако видна тенденция к формированию еще одного уложенного в шестигранники слоя.

Полученный после сжатия композит снова релаксировался при 0 К. В результате структура не утратила устойчивости, и сформировавшаяся укладка слоев никеля сохранилась. Таким образом, сжатие на 10 % по оси X и Y позволяет упорядочить атомы никеля внутри углеродной сетки и управлять структурой композита.

Одноосное растяжение

Три структуры были исследованы на одноосное растяжение:

1. чистый кристалл никеля;
2. композит после релаксации (см. рис.2);
3. композит после сжатия с атомами никеля, уложенными в слои вдоль углеродных стенок (см. рис.3).

Каждая из рассматриваемых структур была предварительно отрелаксирована до достиже-

ния состояния с минимумом потенциальной энергии и минимальными напряжениями. Растяжение проводилось вдоль хиральности кресло графеновой стенки (ось X) в первом случае и вдоль хиральности зигзаг графеновой сетки (ось Y) во втором случае.

На рис.4 изображены графики зависимости напряжения от деформации для трех исследуемых структур для растяжения вдоль направления кресло (а) и зигзаг (б). Черной линией показана кривая напряжение-деформация для чистого никеля, красной линией – для структуры композита после релаксации, синей линией – для структуры композита, растянутой после сжатия. Кривая во всех трех случаях меняется нелинейно до предела текучести.

На рис.5 и 6 показана структура, полученная в процессе растяжения вдоль двух направлений при $\varepsilon = 0,55$ и вид при разрушении соответственно.

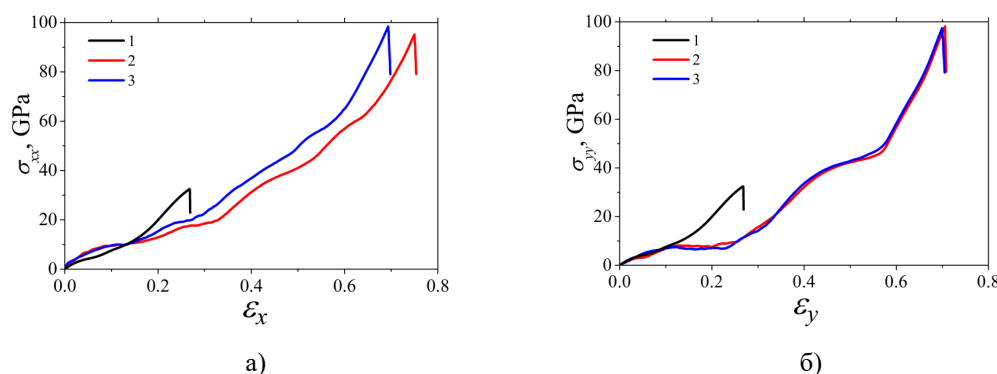


Рис.4. Зависимость напряжения от деформации при растяжении (а) вдоль направления кресло (X), и (б) вдоль направления зигзаг (Y) для трех исследуемых структур

Fig.4. Dependence of stress on tensile strain (a) along the chair direction (X), and (b) along the zigzag direction (Y) for the three structures under study

Из рис. 4а видно, что предварительное сжатие уменьшает деформацию разрыва композита (красная кривая лежит дальше, чем синяя) при растяжении вдоль направления кресло. При этом при растяжении в направлении зигзаг такого отличия не наблюдается. Кроме того, анизотропия структуры сама по себе на прочность практически не влияет. На всех кривых виден небольшой линейный участок до $\varepsilon = 0,05$, где происходит упругая деформация. Изменения наклона кривых объясняется изменением углеродной ячеистой структуры в процессе деформации.

Следует отметить наличие плато на кривой от $\varepsilon = 0,1$ до $\varepsilon = 0,15$ при растяжении в направлении кресло и от $\varepsilon = 0,1$ до $\varepsilon = 0,25$ при растя-

жении в направлении зигзаг. Это объясняется изменением решетки ячеистого графена, которое на первых этапах деформирования происходит относительно легко, что также ранее было описано на примере чистой ячеистой структуры.

На рисунке 5 показан композит во время растяжения вдоль оси X (а) и вдоль оси Y (б) при $\varepsilon = 0,55$. При растяжении вдоль направления кресло, ячеистая решетка трансформируется, происходит вытягивание сотовых ячеек вдоль направления растяжения. Часть атомных плоскостей металла укладывается вдоль стенок сот, а часть – в плоские слои в центре углеродной соты.

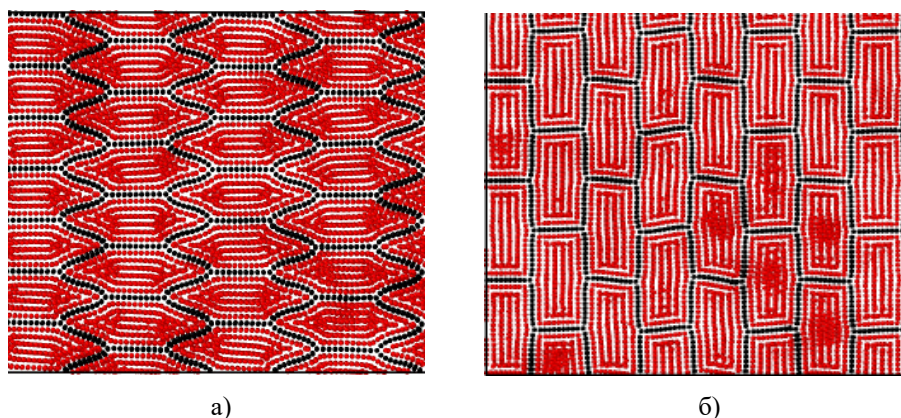


Рис.5. Проекция структуры на плоскость XY при растяжении при $\varepsilon = 0.55$ (а) вдоль направления кресло (X), (б) вдоль направления зигзаг (Y). Черным показаны атомы углерода, красным – атомы никеля

Fig.5. Projection of the structure onto the XY plane under tension at $\varepsilon = 0.55$ (a) along the chair direction (X), (b) along the zigzag direction (Y). Carbon atoms are shown in black color, nickel atoms are shown in red color

Как видно, при растяжении вдоль направления зигзаг атомы никеля укладывались в полосы вдоль направления растяжения и параллельно стенкам графеновой структуры, которые в свою очередь образовывали прямоугольники вместо шестигранников. На кривой напряжение-деформация (рис.4б) в промежутке относительного удлинения от 0,1 до 0,2, и в промежутке относительного удлинения от 0,45 до 0,55 рост напряжений замедляется. Но по завершению структурных изменений наступает период, для которого характерно ускоренное, по сравнению с предыдущим, увеличение напряжений без перестроек в промежутке относительного удлинения от 0,6 до 0,7. Сформированная структура уже является неравновесной, сильнонапряженной. В центре некоторых углеродных ячеек формируются зоны аморфного

металла. У композита при растяжении вдоль направления кресло поведение прямой отличается, поскольку у ячеистой структуры вдоль хиральности кресло меньший потенциал к перестроению. Подобное явление, когда различается характер растяжения в зависимости от хиральности, вдоль которой происходит растяжение, уже наблюдалось в статье [25], где исследовалось деформационное поведение углеродных сотовых структур без включений никеля.

Превышение напряжений ведет к формированию в композите трещин и дислокаций, после чего начинается резкое падение напряжения и разрушение графеновых пластин, что показано на рис.6. Разрыв в обоих случаях происходит вдоль направления растяжения на самых напряженных участках графеновой сетки.

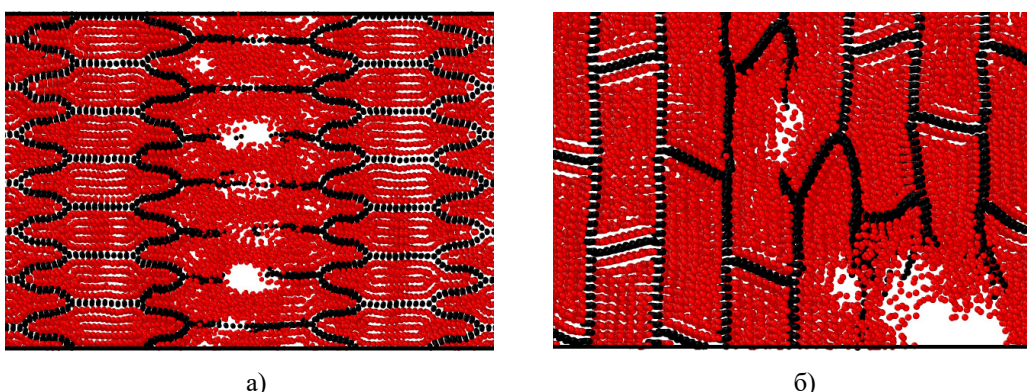


Рис.6. Композит в момент разрушения при растяжении а) вдоль направления кресло (ось X), б) вдоль направления зигзаг (ось Z). Черным показаны атомы углерода, красным – атомы никеля.

Показана часть расчетной ячейки

Fig.6. Composite at the moment of fracture in tension a) along the chair direction (X axis), b) along the zigzag direction (Z axis). Carbon atoms are shown in black color, nickel atoms are shown in red color. Part of the calculation cell is shown

Одноосное растяжение при 300 К

Для анализа влияния температуры на прочность композита проводились численные испытания на растяжения трех структур при комнатной температуре 300 К.

Предварительно отрелаксированные структуры подвергались выдержке при 300 К с последующей минимизацией энергий. После этого проводилось испытание на растяжение, при изотермически-изобарическом ансамбле, который поддерживал температуру 300 К, а давление на стенках расчетной ячейки нулевым. Далее представлены результаты одноосного растяжения при 300 К.

На рисунке 7 красной линией 1 изображена кривая напряжений для структуры без предварительного сжатия. Синяя линия 2 показывает напряжение для структуры с предварительным сжатием. Черная линия 3 изображает напряжения для никеля. Пунктирными линиями пока-

заны для сравнения кривые напряжение-деформация, полученные при температуре 0 К. Как видно, температура слабо влияет на ход кривых напряжение-деформация при растяжении композита. Тем не менее, предел прочности понижается на 15-20 ГПа по сравнению с пределом прочности при 0 К. Из важных отличий следует отметить, что если кривые напряжение-деформация для растяжения вдоль направления зигзаг при 0 К полностью совпадали, то при растяжении при 300 К наблюдается отличие в величине деформации разрыва. То есть, тепловые флуктуации приводят к тому, что сжатая структура становится более равновесной, менее напряженной и выдерживает большие растягивающие деформации. При этом, повышение температуры понижает деформацию, при которой происходит разрыв для предварительно несжатого композита.

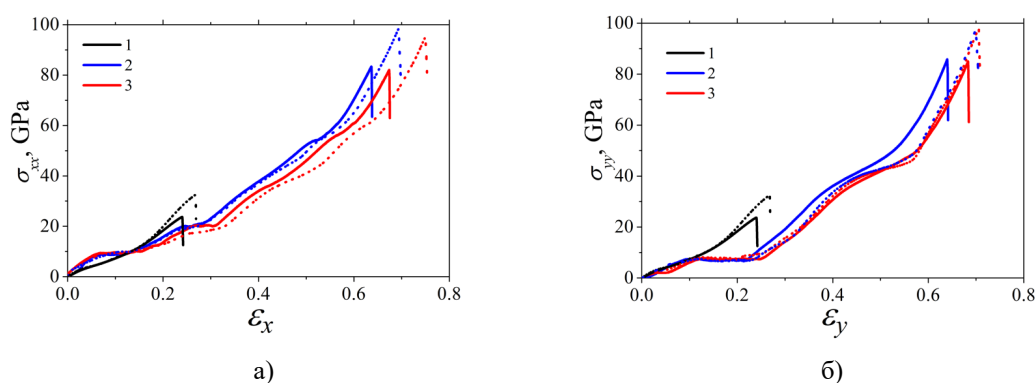


Рис.7. Зависимость давления от относительной деформации при 300К (а) при растяжении вдоль направления кресло (ось X) и (б) при растяжении вдоль направления зигзаг (ось Y) (сплошные линии). Пунктирной линией показаны кривые напряжение-деформация, полученные при температуре 0 К

Fig.7. Dependence of pressure on relative strain at 300K (a) when stretched along the chair direction (X-axis) and (b) when stretched along the zigzag direction (Y-axis) (solid lines). The dotted line shows the stress-strain curves obtained at 0 K

Структура в процессе растяжения при 300 К демонстрирует тот же характер деформации, что и при 0 К. Разрушение композита происходит аналогично тому, как это показано на рис.6 для растяжения при 0 К.

Обсуждение результатов

Начальные стадии релаксации демонстрируют способность никеля к структурной адаптации. Исходная ГЦК-решетка никеля меняется, и атомные слои укладываются параллельно стенкам ячейки структуры. В центре ячейки этот порядок укладки атомов никеля нарушен.

Данное явление, можно объяснить высокой энергией взаимодействия атомов никеля и графеновых стенок. Кристалл никеля в остальном не претерпевал изменений, как и графеновые стенки, что свидетельствует о том, что они находятся в стабильном состоянии устойчивого равновесия. Такое поведение предполагает высокую степень адаптивности композита в ответ на внешние условия. При двухосном сжатии еще больше атомов никеля укладываются параллельно стенкам графеновых ячеек.

Результаты одноосного растяжения показывают значительное улучшение механических характеристик композита над однокомпонент-

ным материалом, что можно увидеть из таблицы 1. Наблюдается некоторая разница в растяжении вдоль направления кресло и зигзаг. Однако наличие металла понижает анизотропию структуры по сравнению с чистой графеновой сеткой.

Хотя характер деформации при одноосном растяжении остается постоянным при 0 и

300 К, общая прочность композита снижается при температуре 300 К. Это понижение можно объяснить повышенной подвижностью дефектов и дислокаций при более высоких температурах. Предположительно, при дальнейшем увеличении температуры прочностные характеристики структуры продолжат снижаться.

Таблица 1. Критические значения деформации разрыва и прочность на разрушение

Table 1. Critical values of tensile strain and fracture strength

Структура	Направление растяжения	Деформация разрушения	Прочность на разрушение σ , ГПа
Никель	—	0,24	23,70
Композит после релаксации	кресло	0,74981	95,13023
	зигзаг	0,70	97,44
Композит после сжатия	кресло	0,69343	98,35553
	зигзаг	0,71	98,15

Выводы

Методом молекулярной динамики исследована устойчивость и прочность нового композитного материала на основе ячеистой углеродной структуры, заполненной никелем.

Результаты данного исследования показывают, что решетка никеля перестраивается при взаимодействии со стенками углеродной сотовой структуры. После релаксации структура находится в равновесном состоянии, что свидетельствует о том, что композит устойчив.

Композит демонстрирует существенное превосходство механических характеристик над однокомпонентным кристаллом никеля, а поведение структуры в процессе деформации сопоставимо с работами [25-29], где исследовалась прочность чистой углеродной ячеистой структуры.

Повышение температуры отрицательно влияет на механические характеристики композита.

Список литературы

1. Chen X., Fu K., Li Y. A theoretical modeling of strengthening mechanism in graphene-metal nanolayered composites // *International Journal of Engineering Science*. 2024. V. 195. 103988.

2. Zhang Q., Yang J., Dong S. Review on 3D-printed graphene-reinforced composites for structural applications // *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing*. 2023. V. 167. 107420.

3. Rafiee J., Wang Z., Song H., Yu Z.-Z., Koratkar N. Enhanced mechanical properties of nanocomposites at low graphene content // *ACS Nano*. 2009. V. 3, N 12. P. 3884–3890.

4. Zhao X., Zhang Q., Chen D., Lu P. Enhanced mechanical properties of graphene-based poly (vinyl alcohol) composites // *Macromolecules*. 2010. V. 43, N5. P. 2357–2363.

5. Weerasinghe A., Maroudas D., Ramasubramaniam A. Mechanical Properties of Graphene-Polymer Nanocomposites // *APS March Meeting Abstracts*. 2017. N 31735. P. 1–9.

6. Kumar A., Sharma K., Dixit A.R. A review on the mechanical properties of polymer composites reinforced by carbon nanotubes and graphene // *Carbon Letters*. 2021. V. 31, N 2. P. 149–165.

7. Lee C., Wei X., Kysar J.W., Hone J. Measurement of the elastic properties and intrinsic strength of monolayer graphene // *Science*. 2008. V. 321, N 5887. P. 385–388.

8. Dmitriev S.V., Baimova J.A., Savin A.S., Kivshar Yu.S. Ultimate strength, ripples, sound velocities, and density of phonon states of strained graphene // *Computational Materials Science*. 2012. V. 53, N 1. P. 194–203.

9. Baimova J.A., Bo L., Dmitriev S.V., Zhou K., Nazarov A. Effect of Stone-Thrower-Wales defect on structural stability of graphene at zero and finite temperatures // *Europhysics Letters*. 2013. V. 103, N 4. 46001
10. Krainyukova N.V., Zubarev E.N. Carbon honeycomb high capacity storage for gaseous and liquid species // *Physical review letters*. 2016. V. 116, N 5. 055501.
11. Yu C., Youn J.R., Song Y.S. Reversible thermo-electric energy harvesting with phase change material (PCM) composites // *J. Polym. Res.* 2021. V. 28. P. 279.
12. Yankovskaya U.I., Zakharov P.V., Markidonov A.V., Starostenkov M.D., Korznikova E.A. Mechanical properties of CNT-reinforced Pt under compression: molecular dynamics simulation // *Materials Physics and Mechanics*. 2023. V. 51, N 3. P. 167–174.
13. Markidonov A.V., Starostenkov M.D., Gostevskaya A.N., Lubyanyoy D.A., Zakharov P.V. Modeling by a Molecular Dynamics Method of Structural Changes of a BCC Metal Surface Layer with Short-Term High-Energy External Action // *Metal Science and Heat Treatment*. 2022. V. 64. P. 258–263
14. Cherednichenko A.I., Zakharov P.V., Starostenkov M.D., Eremin A.M., Dong G. Analysis of the EAM and MEAM Potentials for Modeling Localized States of the Ni₃Al and Pt₃Al Crystals // *Technical Physics Letters*. 2022. V. 48, N 6. P. 245–249.
15. Markidonov A.V., Starostenkov M.D., Gostevskaya A.N., Lubyanyoy D.A., Zakharov P.V. Molecular Dynamics Simulation of Reduction of the Surface Layer Porosity in a BCC Crystal Induced by Laser Pulses // *Physics of the Solid State*. 2023. V. 65. P. 53–57.
16. Safina L.R., Krylova K.A., Baimova J.A. Molecular dynamics study of the mechanical properties and deformation behavior of graphene/metal composites // *Materials Today Physics*. 2022. V. 28. 100851.
17. Сафина Л.Р., Тувалев И.И., Полякова П.В., Баймова Ю.А., Мурзаев Р.Т. Создание ячеистой сотовой структуры из листов графена с возможностью внедрения наночастиц металлов. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2023686248, 05 декабря 2023 г.
18. Baimova J.A., Shcherbinin S.A. Strength and Deformation Behavior of Graphene Aerogel of Different Morphologies // *Materials*. 2023. V. 16, N 23. 7388.
19. Zhang Z., Kutana A., Yang Y., Krainyukova N.V., Penev E.S., Yakobson B.I. Nanomechanics of carbon honeycomb cellular structures // *Carbon*. 2017. V. 113. P. 26–32.
20. Pang Z., Gu X., Wei Y., Yang R., Dresselhaus M.S. Bottom-up Design of Three-Dimensional Carbon-Honeycomb with Superb Specific Strength and High Thermal Conductivity // *Nano Lett.* 2016. V. 17, N 1. P. 179–185.
21. LAMMPS Molecular Dynamics Simulator: [Электронный ресурс] – Режим доступа <https://www.lammps.org>. Дата обращения: 09.04.2024.
22. Plimpton S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics // *Journal of computational physics*. 1995. V. 117, N 1. P. 1–19.
23. Thompson A.P., Aktulga H.M., Berger R., Bolintineanu D.S., Brown W.M. et al. LAMMPS-a flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales // *Computer Physics Communications*. 2022. V. 271. 108171.
24. Mendeleev M.I., Kramer M.J., Hao S.G., Ho K.M., Wang C.Z. Development of interatomic potentials appropriate for simulation of liquid and glass properties of NiZr₂ alloy // *Philosophical Magazine*. 2012. V. 92, N 35. P. 4454–4469.
25. Greshnyakov V.A., Pavlik V.V. Calculations of the structure and properties of autointercalated graphyne layers // *Letters on Materials*. 2023. V. 13, N 4. P. 323–328.
26. Safina L.R., Baimova J.A., Mulyukov R.R. Nickel nanoparticles inside carbon nanostructures: Atomistic simulation // *Mechanics of Advanced Materials and Modern Processes*. 2019. V. 5, N 1. P. 1–11.
27. Sozykin S.A., Bartashevich E.V. The adsorption modeling of bisphenol A derivatives on the surface of carbon materials // *Letters on Materials*. 2022. V. 12, N 4. P. 316–320.
28. Katin K.P., Kaya S., Maslov M.M. Graphene nanoflakes and fullerenes doped with aluminum: features of Al–C interaction and adsorption characteristics of carbon shell // *Letters on Materials*. 2022. V. 12, N 2. P. 148–152.

Информация об авторах

И. И. Тувалев – магистрант Уфимского государственного нефтяного технического университета; стажер-исследователь лаборато-

рии Института проблем сверхпластичности металлов РАН.

Р. Т. Мурзаев – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Института проблем сверхпластичности металлов РАН.

References

1. Chen, X., Fu K. & Li, Y. (2024). A theoretical modelling of strengthening mechanism in graphene-metal nanolayered composites. *International Journal of Engineering Science*, 195, 103988.
2. Zhang, Q., Yang, J. & Dong, S. (2023). Review on 3D-printed graphene-reinforced composites for structural applications. *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing*, 167, 107420.
3. Rafiee, J., Wang, Z., Song, H., Yu, Z.-Z. & Koratkar, N. (2009). Enhanced mechanical properties of nanocomposites at low graphene content. *ACS Nano*, 3(12), 3884–3890.
4. Zhao, X., Zhang, Q., Chen, D. & Lu, P. (2010). Enhanced mechanical properties of graphene-based poly (vinyl alcohol) composites. *Macromolecules*, 43(5), 2357–2363.
5. Weerasinghe, A., Maroudas, D. & Ramasubramaniam, A. (2017). Mechanical Properties of Graphene-Polymer Nanocomposites. *APS March Meeting Abstracts*, (31735), 1–9.
6. Kumar, A., Sharma, K. & Dixit, A. R. (2021). A review on the mechanical properties of polymer composites reinforced by carbon nanotubes and graphene. *Carbon Letters*, 31(2), 149–165.
7. Lee, C., Wei, X., Kysar, J. W. & Hone, J. (2008). Measurement of the elastic properties and intrinsic strength of monolayer graphene. *Science*, 321(5887), 385–388.
8. Dmitriev, S. V., Baimova, J. A., Savin, A. S. & Kivshar, Yu. S. (2012). Ultimate strength, ripples, sound velocities, and density of phonon states of strained graphene. *Computational Materials Science*, 53(1), 194–203.
9. Baimova, J. A., Bo, L., Dmitriev, S. V., Zhou, K. & Nazarov, A. (2013). Effect of Stone-Thrower-Wales defect on structural stability of graphene at zero and finite temperatures. *Europhysics Letters*, 103(4), 46001
10. Krainyukova, N. V. & Zubarev, E. N. (2016). Carbon honeycomb high capacity storage for gaseous and liquid species. *Physical Review Letters*, 116(5), 055501.
11. Yu, C., Youn, J. R. & Song, Y. S. (2021). Reversible thermo-electric energy harvesting with phase change material (PCM) composites. *J. Polym. Res.*, 28, 279.
12. Yankovskaya, U. I., Zakharov, P. V., Markidonov, A. V., Starostenkov, M. D. & Korznikova, E. A. (2023). Mechanical properties of CNT-reinforced Pt under compression: molecular dynamics simulation. *Materials Physics and Mechanics*, 51(3), 167–174.
13. Markidonov, A. V., Starostenkov, M. D., Gostevskaya, A. N., Lubyanyoy, D. A. & Zakharov, P. V. (2022). Modeling by a Molecular Dynamics Method of Structural Changes of a BCC Metal Surface Layer with Short-Term High-Energy External Action. *Metal Science and Heat Treatment*, 64, 258–263
14. Cherednichenko, A. I., Zakharov, P. V., Starostenkov, M. D., Eremin, A. M. & Dong, G. (2022). Analysis of the EAM and MEAM Potentials for Modeling Localized States of the Ni₃Al and Pt₃Al Crystals. *Technical Physics Letters*, 48(6), 245–249.
15. Markidonov, A. V., Starostenkov, M. D., Gostevskaya, A. N., Lubyanyoy, D. A. & Zakharov, P. V. (2023). Molecular Dynamics Simulation of Reduction of the Surface Layer Porosity in a BCC Crystal Induced by Laser Pulses. *Physics of the Solid State*, 65, 53–57.
16. Safina, L. R., Krylova, K. A. & Baimova, J. A. (2022). Molecular dynamics study of the mechanical properties and deformation behavior of graphene/metal composites. *Materials Today Physics*, 28, 100851.
17. Safina, L. R., Tuvalev, I. I., Polyakova, P. V., Baimova, Yu. A. & Murzayev, R. T. Sozdaniye yacheistoy sotovoy struktury iz listov grafena s vozmozhnost'yu vnedreniya nanochastiits metallov. Svidetel'stvo o gosudarstvennoy registratsii programmy dlya EVM № 2023686248, 05.12.2023. (In Russ.).
18. Baimova, J. A. & Shcherbinin, S. A. (2023). Strength and Deformation Behavior of Graphene Aerogel of Different Morphologies. *Materials*, 16(23), 7388.
19. Zhang, Z., Kutana, A., Yang, Y., Krainyukova, N. V., Penev, E. S. & Yakobson, B. I. (2017). Nanomechanics of carbon honeycomb cellular structures. *Carbon*, 113, 26–32.
20. Pang, Z., Gu, X., Wei, Y., Yang, R. & Dresselhaus, M. S. (2016). Bottom-up Design of Three-Dimensional Carbon-Honeycomb with Su-

perb Specific Strength and High Thermal Conductivity. *Nano Lett.*, 17(1), 179–185.

21. LAMMPS Molecular Dynamics Simulator: [Electronic resource] – Access mode <https://www.lammps.org>. Date of the application: 09.04.2024.

22. Plimpton, S. (1995). Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics. *Journal of computational physics*, 117(1), 1–19.

23. Thompson, A. P., Aktulga, H. M., Berger, R., Bolintineanu, D. S. & Brown, W. M. et al. (2022). LAMMPS—a flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales. *Computer Physics Communications*, 271, 108171.

24. Mendeleev, M. I., Kramer, M. J., Hao, S. G., Ho, K. M. & Wang, C. Z. (2012). Development of interatomic potentials appropriate for simulation of liquid and glass properties of NiZr₂ alloy. *Philosophical Magazine*, 92(35), 4454–4469.

25. Greshnyakov, V. A. & Pavlik, V. V. (2023). Calculations of the structure and properties of autointercalated graphyne layers. *Letters on Materials*, 13(4), 323–328.

26. Safina, L. R., Baimova, J. A. & Mulyukov, R. R. (2019). Nickel nanoparticles inside carbon nanostructures: Atomistic simulation. *Mechanics of Advanced Materials and Modern Processes*, 5(1), 1–11.

27. Sozykin, S. A. & Bartashevich, E. V. (2022). The adsorption modeling of bisphenol A derivatives on the surface of carbon materials. *Letters on Materials*, 12(4), 316–320.

28. Katin, K. P., Kaya, S. & Maslov, M. M. (2022). Graphene nanoflakes and fullerenes doped with aluminum: features of Al–C interaction and adsorption characteristics of carbon shell. *Letters on Materials*, 12(2), 148–152.

Information about the authors

I. I. Tuvalev – Undergraduate Student, Ufa State Petroleum Technological University; Research intern at the Institute for Metals Superplasticity Problems of the Russian Academy of Sciences.

R. T. Murzaev – Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Senior Researcher at the Institute for Metals Superplasticity Problems of the Russian Academy of Sciences.

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

Статья поступила в редакцию 09.04.2024; одобрена после рецензирования 17.05.2024; принята к публикации 27.05.2024.

The article was received by the editorial board on 09 Apr. 24; approved after reviewing 17 May 24; accepted for publication 27 May 24.