

## МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ КОНЦЕНТРАЦИИ ВАКАНСИЙ НА МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА $\alpha$ -Ti, АРМИРОВАННОГО УГЛЕРОДНЫМИ НАНОТРУБКАМИ, ПРИ ОДНООСНОМ РАСТЯЖЕНИИ

Устина Ильдусовна Янковская<sup>1</sup>, Михаил Дмитриевич Старостенков<sup>2</sup>,  
Александр Сергеевич Нарасеев<sup>3</sup>, Сергей Владимирович Ганин<sup>4</sup>, Павел Васильевич Захаров<sup>5</sup>

<sup>1, 3, 4, 5</sup> Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, ул. Политехническая, д.29 литер Б, вн. тер. г. муниципальный округ Академическое, г. Санкт-Петербург, 195251, Россия.

<sup>2</sup> Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова, проспект Ленина, д. 46, г. Барнаул, 656038, Россия.

<sup>1</sup> zalaevau@gmail.com (ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-6434-0747>)

<sup>2</sup> genphys@mail.ru (ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-6326-7613>)

<sup>3</sup> narseev.as@mail.ru

<sup>4</sup> ganin\_sv@spbstu.ru (ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-2307-9319>)

<sup>5</sup> zakharovpvl@rambler.ru (ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-6410-1594>)

**Аннотация.** Целью данного исследования являлось проведение сравнительного анализа влияния концентрации точечных дефектов (вакансий) и армирования углеродными нанотрубками (УНТ) на деформационное поведение и механические свойства монокристалла титана ( $\alpha$ -Ti) при одноосном растяжении. Исследование выполнено методом молекулярной динамики в программном комплексе LAMMPS. Для всех моделей проведено одноосное растяжение с постоянной скоростью деформации при температуре 300 К. Определены ключевые механические характеристики: предел прочности, предел текучести и модуль Юнга. Установлено немонотонное влияние вакансий на прочность  $\alpha$ -Ti. Показано, что концентрация вакансий равная 0,5% приводит к дисперсионному упрочнению матрицы (предел прочности = 14.75 ГПа, для бездефектного кристалла = 14.43 ГПа). Введение УНТ стабилизирует предел прочности на уровне ~12 ГПа для всех концентраций вакансий, нивелируя их влияние. Обнаружено, что модуль Юнга композита возрастает с увеличением доли вакансий (до 103.13 ГПа при 1.0%), что свидетельствует о доминирующей роли УНТ в упругой деформации. Выявлено, что разрушение композита происходит по механизму интерфазного отслоения на границе раздела, что приводит к снижению предела текучести. Для моделей с внедренной УНТ ключевым фактором, определяющим механические свойства композита, является прочность границы раздела «матрица-УНТ».

**Ключевые слова:** углеродные нанотрубки, армирование, моделирование, механические свойства, метод молекулярной динамики, вакансии, предел прочности, одноосное растяжение, титан, LAMMPS

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

**Для цитирования:** Янковская У.И., Старостенков М.Д., Нарасеев А.С., Ганин С.В., Захаров П.В. Молекулярно-динамическое моделирование влияния концентрации вакансий и углеродных нанотрубок на механические свойства Ti при одноосном растяжении // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2025. Т. 22, № 4. С. 445-455. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2025.04.007.

---

Original article

## MOLECULAR DYNAMICS MODELING OF THE EFFECT OF VACANCY CONCENTRATION ON THE MECHANICAL PROPERTIES OF CNT-REINFORCED $\alpha$ -TI UNDER UNIAXIAL TENSION

**Ustina I. Yankovskaya<sup>1</sup>, Michael D. Starostenkov<sup>2</sup>, Alexander S. Naraseev<sup>3</sup>, Sergey V. Ganin<sup>4</sup>  
Pavel V. Zakharov<sup>5</sup>**

<sup>1, 3, 4, 5</sup> Peter the Great St.Petersburg Polytechnic University, 195251, Saint Petersburg, Russia

<sup>2</sup> Altai State Technical University named after I.I. Polzunov, 656038, Barnaul, Russia

<sup>1</sup> zalaevau@gmail.com (ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-6434-0747>)

<sup>2</sup> genphys@mail.ru (ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-6326-7613>)

<sup>3</sup> narseev.as@mail.ru

<sup>4</sup> ganin\_sv@spbstu.ru (ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-2307-9319>)

<sup>5</sup> zakharovpvl@rambler.ru (ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-6410-1594>)

**Abstract.** The aim of this study was to conduct a comparative analysis of the influence of point defect (vacancy) concentration and carbon nanotube (CNT) reinforcement on the deformation behavior and mechanical properties of a titanium single crystal under uniaxial tension. The study was performed using the molecular dynamics method in the LAMMPS software package. For all models, uniaxial stretching was performed with a constant strain rate at a temperature of 300 K. Key mechanical characteristics were determined: tensile strength, yield strength, and Young's modulus. A non-monotonic effect of vacancies on the strength of  $\alpha$ -Ti has been established. It has been shown that a vacancy concentration of 0.5% leads to dispersion strengthening of the matrix (ultimate strength = 14.75 GPa, for a defect-free crystal = 14.43 GPa). The introduction of CNTs stabilizes the ultimate strength at a level of ~12 GPa for all vacancy concentrations, leveling their influence. It was found that the Young's modulus of the composite increases with an increase in the proportion of vacancies (up to 103.13 GPa at 1.0%), which indicates the dominant role of CNTs in elastic deformation. It was found that the composite destruction occurs by the mechanism of interphase delamination at the interface, which leads to a decrease in the yield strength. For models with embedded CNT, the key factor determining the mechanical properties of the composite is the strength of the matrix-CNT interface.

**Keywords:** carbon nanotubes, reinforcement, modeling, mechanical properties, molecular dynamics method, vacancies, tensile strength, uniaxial tension, titanium, LAMMPS.

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

**For citation:** Yankovskaya U.I., Starostenkov M.D., Naraseev A.S., Ganin S.V. & Zakharov P.V. (2025). Molecular Dynamics Simulation of the Effect of Vacancy and Carbon Nanotube Concentration on Mechanical Properties of Ti under Uniaxial Tension. *Fundamental'nye problemy sovremenennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 22(4), 445-455. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2025.04.007.

### Введение

Титан и его сплавы являются критически важными конструкционными материалами в аэрокосмической, медицинской и энергетической отраслях благодаря уникальному сочетанию высокой удельной прочности, коррозионной стойкости и биосовместимости [1]. Однако эксплуатация титановых деталей в экстремальных условиях – под действием высоких механических нагрузок, повышенных температур и радиационного облучения – приводит к накоплению структурных дефектов, в первую очередь, точечных (вакансий) [2]. Высокая концентрация вакансий служит источником зарож-

дения дислокаций, микропор и трещин, что в конечном итоге инициирует преждевременное разрушение материала и ограничивает срок его службы [3].

Традиционными методами повышения прочности и радиационной стойкости металлов являются легирование и термомеханическая обработка. Однако эти подходы зачастую недостаточно эффективны для подавления негативного влияния высокой концентрации точечных дефектов. Одним из наиболее перспективных путей создания материалов нового поколения является дисперсное упрочнение за счет введения наноразмерных армирующих элементов, таких как углеродные нанотрубки [4]. Они об-

ладают исключительными прочностными характеристиками и модулем упругости, что делает их идеальными кандидатами для создания металл-матричных нанокомпозитов с улучшенными механическими свойствами [5].

В работах [6, 7] демонстрируется механизм миграции вакансий к УНТ и их "захват". Ряд экспериментальных и теоретических работ был посвящен исследованию композитов на основе алюминия, меди и никеля, армированных УНТ [8 - 13]. Молекулярно-динамическое моделирование для этих систем показало, что УНТ не только эффективно перераспределяют нагрузку, но и могут влиять на поведение дефектов кристаллической решетки, например, способствуя миграции вакансий к своей поверхности [11-13]. В отличие от хорошо изученных систем (таких как Al или Cu), взаимодействие дефектной титановой матрицы с углеродными нанотрубками исследовано в значительно меньшей степени. Особую сложность представляет прогнозирование механических свойств такого композита в зависимости от исходной дефектности матрицы, что требует детального изучения на атомарном уровне. Авторами [14, 15] исследована система Ti-УНТ, особое внимание уделено дефектности матрицы.

Целью данной работы является молекулярно-динамическое исследование влияния концентрации вакансий и армирования углеродными нанотрубками на механические свойства и механизм деформации монокристалла титана

при одноосном растяжении. Для достижения этой цели были смоделированы процессы одноосного растяжения бездефектного монокристалла  $\alpha$ -Ti и определены его эталонные механические характеристики. Далее исследованы влияния различной концентрации вакансий (от 0,1% до 1%) на предел прочности, предел текучести и модуль Юнга титановой матрицы.

## Материалы и методы

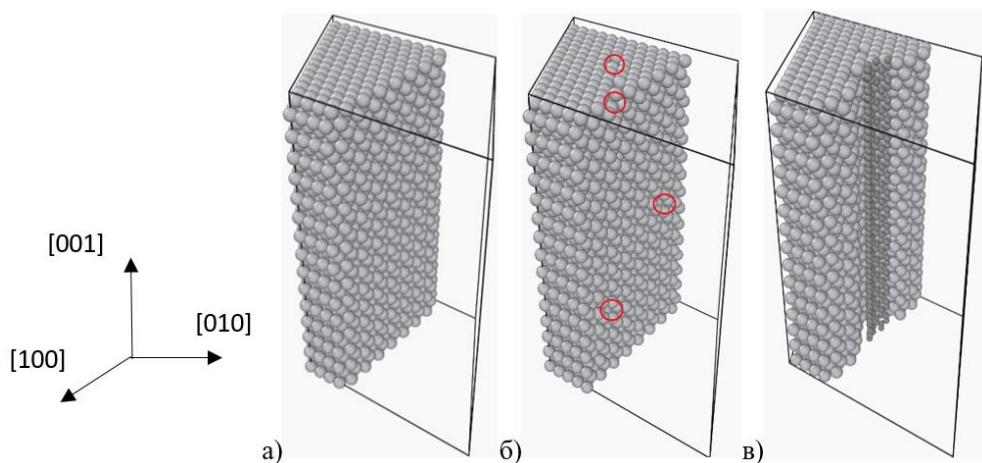
**Имитационная модель.** В рамках данного исследования методом молекулярной динамики были изучены три группы атомистических моделей на основе  $\alpha$ -Ti с гексагональной плотноупакованной (ГПУ) кристаллической решеткой:

1. Бездефектный монокристалл Ti.

2. Кристалл с точечными дефектами, в котором атомы были случайным образом удалены для создания заданной объемной концентрации вакансий: 0,1%, 0,2%, 0,3%, 0,4%, 0,5%, 0,6%, 0,7%, 0,8%, 0,9% и 1,0%.

3. Композитная система, состоящая из дефектной титановой матрицы (с концентрацией вакансий, указанной выше), армированной одной однослойной углеродной нанотрубкой (УНТ) типа «зигзаг» с хиральными индексами (10,0).

Все начальные атомарные конфигурации, созданные с использованием программного пакета собственной разработки [16], представлены на рисунке 1.



**Рис.1.** Срез модели  $\alpha$ -Ti: а) идеальный кристалл; б) с точечными дефектами (вакансии 0,5%, вакансии обозначены красными кругами); в) с точечными дефектами (вакансии – 0,5%) и внедренной УНТ.

**Fig. 1.** Section of the  $\alpha$ -Ti model: a) ideal crystal; b) with point defects (vacancies 0.5%, vacancies are indicated by red circles); c) with point defects (vacancies – 0.5%) and embedded CNT.

Все расчеты были выполнены в программном комплексе LAMMPS [17]. Визуализация результатов осуществлялась с помощью программного обеспечения OVITO [18].

#### Выбор потенциалов взаимодействия.

Для описания межатомных взаимодействий использовались следующие потенциалы:

- для титановой матрицы — потенциал EAM (Embedded Atom Method), адекватно описывающий металлическую связь и пластическую деформацию [19].
- для углеродной нанотрубки — потенциал AIREBO, хорошо воспроизводящий упруго-прочностные характеристики ковалентных углеродных структур.
- взаимодействие на границе раздела «титан–углерод» описывалось потенциалом Леннард–Джонса, параметры которого были подобраны в соответствии с данными работ авторов [20, 21].

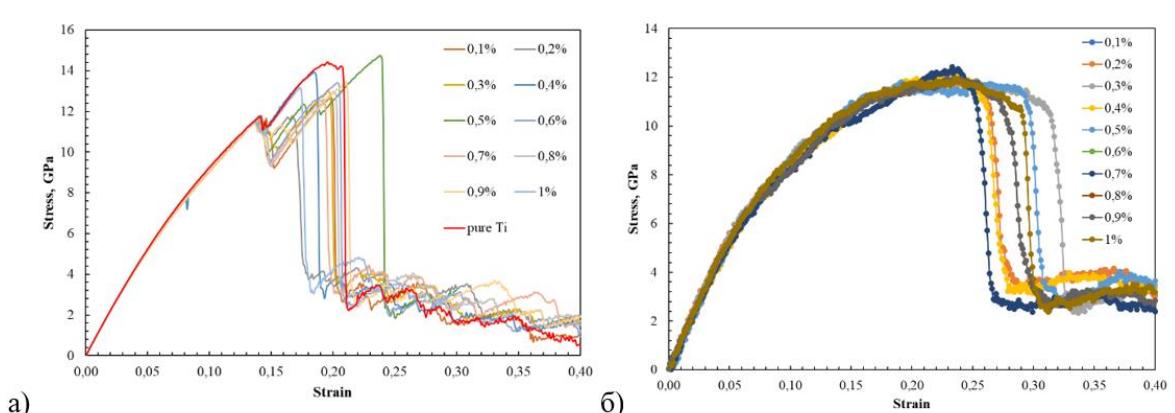
Процедура одноосной нагрузки для каждой модели состояла из трех последовательных этапов. Минимизация энергии системы проводилась алгоритмом сопряженных градиентов для достижения равновесного состояния и снятия начальных внутренних напряжений. Далее изотермо-изобарическая (NPT) релаксация, в ко-

торой система релаксировала в течение 50 пс при температуре 300 К и нулевом давлении для стабилизации термодинамического состояния. И уже далее следовало одноосное растяжение, в котором к релаксированной модели вдоль заданного кристаллографического направления ([001]) прикладывалась одноосная деформация с постоянной скоростью  $10^{-9}$  пс<sup>-1</sup> при температуре 300 К (контролируемой термостатом Нозе–Гувера). Временной шаг интегрирования уравнений движения составлял 0,5 фс.

Для анализа результатов фиксировались параметры деформации, на основе которых строились диаграммы «напряжение–деформация». Атомарная конфигурация визуализировалась и анализировалась в OVITO при помощи DXA анализа.

#### Результаты и обсуждение

Для количественной оценки влияния дефектов и армирования на механический отклик материала были построены кривые зависимости напряжения от деформации при одноосном растяжении. На рисунке 2 представлены сравнительные кривые для рассматриваемых моделей.



**Рис. 2.** Кривые напряжения-деформации а) «чистый»  $\alpha$ -Ti в сравнении с моделями с различным процентным содержанием вакансий; б) модель Ti с различным процентным содержанием вакансий, армированная УНТ.

**Fig. 2.** Stress-strain curves of a) “pure”  $\alpha$ -Ti compared to models with different percentages of vacancies; b) Ti model with different percentages of vacancies, reinforced with CNTs.

Кривые демонстрируют классическое поведение: упругий участок, переход в пластическую область и последующее разрушение. Визуальный анализ графиков позволяет выявить существенные различия в поведении моделей. В результате исследования было отмечено, что введение 0,5% вакансий приводит к увеличе-

нию прочности исследуемого кристалла. Наблюдаемое увеличение предела текучести и предела прочности при концентрации вакансий 0,5% согласуется с общепринятыми представлениями о дисперсионном упрочнении [22]. Согласно классической теории, точечные дефекты и их наноразмерные кластеры создают

поля упругих напряжений, которые являются эффективными барьерами для движения дислокаций [23]. Для преодоления этих барьеров требуется повышение прикладываемого напряжения, что макроскопически проявляется как рост предела текучести. Данный эффект широко документирован в контексте радиационного упрочнения материалов [24], а также подтвержден атомистическим моделированием [25]. При низких концентрациях дефектов упрочняющий эффект преобладает над процессом зарождения повреждений, в то время как при более высоких концентрациях ( $>0.5\%$ ) начинает доминировать механизм объединения вакансий в поры, что и приводит к последующему падению прочности.

Сравнивая результаты одноосного нагружения модели с вакансиями и внедренными УНТ отмечается падение прочности металлической матрицы. Исследования показывают, что УНТ могут повышать твёрдость и прочность [11, 13], но их эффективность зависит от дис-

персности и качества интерфейса, а дефекты потенциально снижают эффективность УНТ, создавая локальные точки напряжения. Предполагается, что в данном случае доминирующим механизмом разрушения является декогезия на границе раздела фаз «матрица-УНТ». Нанотрубка выступает как концентратор напряжений, инициирующий преждевременное зарождение трещины в условиях слабой адгезии. Наличие вакансий в матрице усугубляет этот процесс, мигрируя к интерфейсу и дополнительно ослабляя его. Полученный результат наглядно демонстрирует, что ключевым фактором, определяющим эффективность армирования, является не столько прочность самого наполнителя, сколько прочность его сцепления с матрицей.

Для детальной характеристики были определены ключевые механические свойства: модуль Юнга, предел текучести и предел прочности. Значения этих параметров для всех исследованных систем суммированы в таблице 1.

**Таблица 1.** Механические свойства  $\alpha$ -Ti и  $\alpha$ -Ti с различной процентной долей вакансий.

**Table 1.** Mechanical properties of  $\alpha$ -Ti and  $\alpha$ -Ti with different percentages of vacancies

	Чистый $\alpha$ -Ti	$\alpha$ -Ti с вакансиями									
		0,1%	0,2%	0,3%	0,4%	0,5%	0,6%	0,7%	0,8%	0,9%	1%
Предел прочности, ГПа	14,43	12,65	11,77	12,99	13,95	14,75	13,34	12,59	12,98	13,42	13,16
Предел текучести, ГПа	11,27	11,08	10,67	10,98	11,13	12,20	10,52	10,44	10,63	10,43	10,81
Модуль Юнга, ГПа	94,41	91,82	91,78	91,28	90,23	93,28	90,18	90,54	90,28	90,43	90,28

По данным таблицы отмечается наличие нелинейного влияния вакансий на предел прочности. Наблюдается немонотонная зависимость предела прочности от концентрации вакансий. При концентрации 0,1–0,2% наблюдается ожидаемое снижение прочности. Однако последующий рост значения предела прочности с достижением максимума 14,75 ГПа при концентрации 0,5%, с последующим спадом, может свидетельствовать о сложной конкуренции двух процессов, таких как упрочняющий механизм (при низких и средних концентрациях (~0,3–0,5%) вакансии и их мелкие кластеры эффективно блокируют движение дислокаций, играя роль дисперсионных упрочнителей, что требует приложения большего напряжения для продолжения деформации) и разупрочняющий механизм (при высоких концентрациях ( $>0.6\%$ )

преобладает процесс объединения вакансий в субнаноразмерные поры, которые становятся зародышами трещин и инициируют преждевременное разрушение) [22].

Значения модуля Юнга для всех исследованных моделей с вакансиями остаются в узком диапазоне ~90–93 ГПа, демонстрируя незначительное снижение по сравнению с бездефектным кристаллом.

Предел текучести монотонно снижается при увеличении концентрации вакансий, за исключением 0,5%. Это указывает на то, что точечные дефекты облегчают начало пластической деформации, выступая в качестве центров зарождения дислокаций. Локальное увеличение предела текучести при 0,5% также коррелирует с пиком предела прочности, что дополнительно подтверждает гипотезу об упрочняющей роли вакансий в этой точке.

Механические свойства моделей с вакансиями и внедренной УНТ представлены в таблице 2.

**Таблица 2.** Механические свойства  $\alpha$ -Ti различной процентной долей вакансий+УНТ

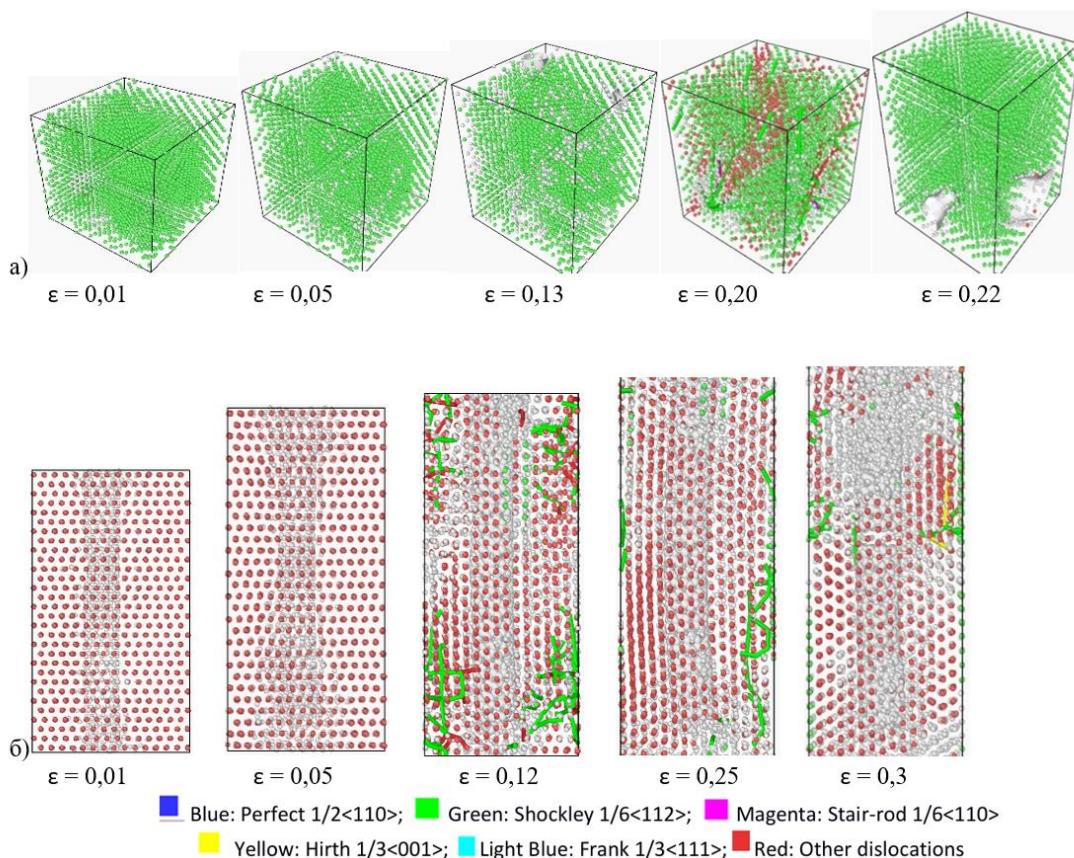
**Table 2.** Mechanical properties of  $\alpha$ -Ti with different percentages of vacancies + CNTs

$\alpha$ -Ti(вакансии)+УНТ	Предел прочности, ГПа	Предел текучести, ГПа	Модуль Юнга, ГПа
0,1%	11,96	11,35	94,92
0,2%	11,80	11,39	98,38
0,3%	11,87	11,13	92,3
0,4%	12,11	11,19	93,17
0,5%	11,80	11,2	95,65
0,6%	12,42	10,11	96,29
0,7%	12,42	10,15	97,97
0,8%	11,94	10,07	100,47
0,9%	11,94	10,04	100,87
1%	11,96	10,55	103,13

По данным таблицы 2 наблюдается стабилизация значений предела прочности для всех исследованных концентраций вакансий. В отличие от значений таблицы 1, где предел прочности варьировался от  $\sim 11,77$  до  $\sim 14,75$  ГПа, система с УНТ демонстрирует значительно меньший разброс данных. Это указывает на то, что УНТ нивелирует влияние концентрации вакансий, выступая как стабилизирующий структурный элемент. Система перестает быть чувствительной к колебаниям содержания точечных дефектов. Модуль Юнга системы увеличивается при росте концентрации вакансий. Зна-

чение для системы с 1% вакансий превышает модуль упругости бездефектного образца. На основании данного результата можно утверждать, что углеродная нанотрубка играет ключевую роль в восприятии упругой нагрузки. Высокий модуль упругости УНТ "компенсирует" разупрочняющее влияние вакансий в матрице и доминирует в упругой деформации композита, повышая общую жесткость системы.

*Механизмы разрушения.* На рисунке 3 приведена эволюция дислокаций для моделей без УНТ и с УНТ под действием растягивающей нагрузки.



**Рис. 3.** Этапы одноосного растяжения кристалла а)  $\alpha$ -Ti с 0,5% вакансиями; б)  $\alpha$ -Ti с 0,5% вакансиями+УНТ под действием растягивающей нагрузки.

**Fig. 3.** Stages of uniaxial tension of a crystal a)  $\alpha$ -Ti with 0.5% vacancies; b)  $\alpha$ -Ti with 0.5% vacancies + CNT under the action of a tensile load

Из рисунка 3 (а) отмечается, что приложение нагрузки вызывает упругую деформацию решетки. Вакансии, как несовершенства решетки, создают вокруг себя локальные поля упругих напряжений. Механизм дисперсионного упрочнения, обусловленный вакансиями, заключается в блокировке движения дислокаций и затруднении их зарождения. Это требует повышения напряжения для пластической деформации, что и вызывает наблюдаемый при концентрации  $\sim 0,5\%$  рост предела текучести и прочности. При дальнейшем увеличении концентрации вакансий ( $>0,6\%$ ) их роль меняется на противоположную: они начинают способствовать зарождению дислокаций. Образование дислокационной петли в идеальной решетке требует значительных энергетических затрат. Дислокации, пришедшие в движение, взаимодействуют с вакансиями. Они могут поглощать

их, менять свою структуру (например, формировать ступеньки) или обходить их, изгинаясь. Под действием нагрузки и благодаря повышенной подвижности атомов вакансии мигрируют, образуют поры. Растущие поры служат концентриаторами напряжений, что приводит к локальному зарождению новых дислокаций и их скоплению вокруг пор. Дислокационная активность вокруг трещины обеспечивает ее рост. Разрушение происходит путем слияния микропор и распространения трещины через весь кристалл.

Что касается модели с УНТ, то мы получаем доминирующий элемент – границу раздела. Вакансии концентрируются в местах начального утончения УНТ при деформации. Пластическая деформация начинается не в объеме матрицы, а на интерфейсе. При сравнительно низком напряжении происходит отслоение – разрыв связи между атомами Ti и C. Это объясняет

снижение и стабилизацию предела текучести в композитных системах – разрушение интерфейса требует меньшего напряжения, чем пластическое течение упрочненной дисперсными частицами матрицы. Образовавшиеся в этих местах полости (зоны отслоения) являются сверхэффективными концентраторами напряжений. Дислокации, зародившиеся в матрице, движутся к этим зонам и не могут передать нагрузку на УНТ. Происходит быстрое слияние зон отслоения вдоль всей поверхности нанотрубки, формируя непрерывную трещину. Вакансии в матрице, мигрируя к этой трещине, ускоряют ее рост.

### Выводы

На основе проведенного молекулярно-динамического моделирования одноосного растяжения дефектного монокристалла  $\alpha$ -Ti, армированного углеродной нанотрубкой, были сформулированы следующие выводы:

1. Установлено сложное нелинейное влияние концентрации вакансий на механические свойства монокристалла  $\alpha$ -Ti. Обнаружено, что при концентрации 0,5% вакансии и их кластеры выступают в роли дисперсионных упрочнителей, повышая предел прочности и предел текучести, что превышает аналогичные показатели бездефектного кристалла. Этот эффект объясняется блокировкой движения дислокаций полями упругих напряжений вокруг дефектов.
2. Введение УНТ в дефектную матрицу приводит к стабилизации предела прочности для всех исследованных концентраций вакансий. Это свидетельствует о том, что УНТ нивелирует влияние вакансий, и механические свойства системы начинают определяться не объемом матрицы, а прочностью границы раздела.
3. Показано, что высокий модуль упругости УНТ доминирует в упругой деформации композита, что проявляется в росте модуля Юнга системы с увеличением концентрации вакансий. Этот результат доказывает, что УНТ эффективно воспринимает упругую нагрузку, однако для реализации ее упрочняющего потенциала необходимо обеспечить прочное сцепление с матрицей.

Определены конкурирующие механизмы влияния вакансий. В объеме матрицы вакансии могут как упрочнить материал (образуя барьеры для дислокаций), так и разупрочнить его. На границе с УНТ мигрирующие вакансии высту-

пают исключительно как ослабители интерфейса, снижая адгезию и способствуя интерфазному разрушению.

### Список литературы

1. Leyens C., Peters M. Titanium and Titanium Alloys: Fundamentals and Applications. Wiley-VCH. 2003. DOI: 10.1002/9783527678125
2. Zafari A., Xia K., Ghasemi A. Mechanical properties of titanium through various manufacturing processes // Progress in Materials Science. 2022. V. 129. P. 100972. DOI: 10.1016/j.pmatsci.2022.100972
3. Zheng H., Li Y., Wang H. The formation and evolution of vacancy defects in  $\alpha$ -Ti under irradiation: A molecular dynamics study // Journal of Nuclear Materials. 2021. V. 543. P. 152577. DOI: 10.1016/j.jnucmat.2020.152577
4. Chen D., Wang J., Wang Y. Effect of vacancy defects on the mechanical properties of titanium: A molecular dynamics study // Computational Materials Science. 2020. V. 171. P. 109254. DOI: 10.1016/j.commatsci.2019.109254.
5. Bakshi S. R., Agarwal A. An analysis of the factors affecting strengthening in carbon nanotube reinforced aluminum composites // Carbon. 2021. V. 174. P. 292-304. DOI: 10.1016/j.carbon.2020.12.023.
6. Zhang Y., Li X. Carbon nanotubes as vacancy traps in nickel-based superalloys: A molecular dynamics study // Computational Materials Science. V. 183. P. 109798. DOI: 10.1016/j.commatsci.2020.109798
7. Wang L. Revealing the healing effect of carbon nanotubes on the damaged aluminum matrix: A molecular dynamics study // Nanotechnology. V. 32(15). P. 155701. DOI: 10.1088/1361-6528/abd6f2
8. Srinivasan V., Kunjiappan S., Palanisamy P. A brief review of carbon nanotube reinforced metal matrix composites for aerospace and defense applications. // International Nano Letters. 2021. V. 11(6). P. 381–386. DOI: 10.1007/s40089-021-00328-y.
9. Monteiro B. Simões S. Recent Advances in Hybrid Nanocomposites for Aerospace Applications // Metals. 2024. V. 14. P. 1283. DOI: 10.3390/met14111283.
10. Zecchi S., Cristoforo G., Piatti E., Torsello D., Ghigo G., Tagliaferro A., Rosso C., Bartoli M. Review of Recent Advancements in Carbon Nanotubes for Aerospace Applications // Microm-

- achines. 2025. V. 16. P. 53. DOI: 10.3390/mi16010053.
11. Янковская У.И., Захаров П.В. Молекулярно-динамическое моделирование одноосной нагрузки на композит при различных углах ориентации УНТ // Измерения, автоматизация и моделирование в промышленности и научных исследованиях. 2024. с. 38-39.
12. Янковская У.И., Старostenков М.Д., Медведев Н.Н., Захаров П.В. Методы моделирования композитов, армированных углеродными нанотрубками: обзор и перспективы // Компьютерные исследования и моделирование. 2024. т. 16. № 5. с. 1143-1162.
13. Yankovskaya U.I., Starostenkov M.D., Markidonov A.V., Kazakov A.M., Korznikova E.A., Zakharov P.V. Enhanced mechanical properties of Ni3Al composites reinforced with single-walled and multi-walled carbon nanotubes: An atomistic modeling study // Journal of Micromechanics and Molecular Physics. 2024. V. 09, No. 02n03. pp. 99-105.
14. Deng C. Interfacial strengthening and mechanical properties of carbon nanotube reinforced titanium matrix composites: A molecular dynamics study // Materials Today Communications. 2023. V. 34. P. 105098. DOI: 10.1016/j.mtcomm.2022.105098
15. He L., Zhao Y. Tensile behavior and strengthening mechanisms of carbon nanotube reinforced titanium nanocomposites: Insights from molecular dynamics simulations // Applied Surface Science. V. 578. P. 151936. DOI: 10.1016/j.apsusc.2021.151936
16. Захаров П.В., Нарсеев А.С., Янковская У.И. Программа создания структуры металломатричного композита армированного углеродными нанотрубками Свидетельство о регистрации программы для ЭВМ RU 2025611925, 23.01.2025
17. Plimpton S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics // J. Comput. Phys. 1995. V. 117. P. 1-19
18. Stukowski A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO—the Open Visualization Tool // Model. Simul. Mater. Sci. Eng. 2010. V. 18. P. 015012.
19. 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 // J. Chem. Phys. 2016. V. 145(15). P. 154102. DOI: 10.1063/1.4964654.
20. Hwang J. Y., Lim B., Tiley J., Banerjee R., Hong S. Interface analysis of ultra-high strength carbon nanotube/nickel composites processed by molecular level mixing // Carbon. 2013. V. 57. P. 282-287. DOI: 10.1016/j.carbon.2013.01.075.
21. Rong Z.C., Hao P.D., Tang M., Chen P., Li F., Yi J., Şopu D., Eckert Jürgen, Liu Y.C. First-Principles Study of the Intrinsic Properties of the fcc /hcp-Ti Boundary in CNT/Ti Composites Prepared by High Pressure Torsion // Physica status solidi (b). P. 258. DOI: 10.1002/pssb.202100093.
22. Cottrell A. H., Bilby B. A. Dislocation theory of yielding and strain ageing of iron // Proceedings of the Physical Society. Section A. 1949. V. 62, № 1. P. 49.
23. Odette G. R., Lucas G. E. Embrittlement of nuclear reactor pressure vessels // J.O.M. 2001. V. 53, № 7. P. 18-22.
24. Meslin E. Characterization of neutron-irradiated ferritic model alloys and a RPV steel from combined APT, SANS, TEM and PAS analyses // Journal of Nuclear Materials. 2010. V. 406, № 1. P. 73-83.
25. Osetsky Y. N., Bacon D. J. Void and precipitate strengthening in  $\alpha$ -iron: what can we learn from atomic-level modelling? // Materials Science and Engineering: A. 2003. V. 357(1-2). P. 1-11.

### Информация об авторах

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

М.Д. Старostenков – доктор физико-математических наук, профессор, главный научный сотрудник Алтайского государственного технического университета

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

С.В. Ганин – кандидат технических наук, доцент, директор - Высшая школа физики и технологий материалов Санкт-Петербургского политехнического университета.

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

## References

1. Bakshi, S. R., & Agarwal, A. (2021). An analysis of the factors affecting strengthening in carbon nanotube reinforced aluminum composites. *Carbon*, 174, 292–304. <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2020.12.023>.
2. Chen, D., Wang, J., & Wang, Y. (2020). Effect of vacancy defects on the mechanical properties of titanium: A molecular dynamics study. *Computational Materials Science*, 171, 109254. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2019.109254>.
3. Cottrell, A. H., & Bilby, B. A. (1949). Dislocation theory of yielding and strain ageing of iron. *Proceedings of the Physical Society. Section A*, 62(1), 49. <https://doi.org/10.1088/0370-1298/62/1/308>.
4. Deng, C. (2023). Interfacial strengthening and mechanical properties of carbon nanotube reinforced titanium matrix composites: A molecular dynamics study. *Materials Today Communications*, 34, 105098. <https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2022.105098>.
5. He, L., & Zhao, Y. (2022). Tensile behavior and strengthening mechanisms of carbon nanotube reinforced titanium nanocomposites: Insights from molecular dynamics simulations. *Applied Surface Science*, 578, 151936. <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2021.151936>.
6. Hwang, J. Y., Lim, B., Tiley, J., Banerjee, R., & Hong, S. (2013). Interface analysis of ultra-high strength carbon nanotube/nickel composites processed by molecular level mixing. *Carbon*, 57, 282–287. <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2013.01.075>.
7. Leyens, C., & Peters, M. (2003). Titanium and titanium alloys: Fundamentals and applications. Wiley-VCH. <https://doi.org/10.1002/9783527678125>.
8. 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. <https://doi.org/10.1063/1.4964654>.
9. Meslin, E. (2010). Characterization of neutron-irradiated ferritic model alloys and a RPV steel from combined APT, SANS, TEM and PAS analyses. *Journal of Nuclear Materials*, 406(1), 73–83. <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2010.05.017>.
10. Monteiro, B., & Simões, S. (2024). Recent advances in hybrid nanocomposites for aerospace applications. *Metals*, 14(11), 1283. <https://doi.org/10.3390/met14111283>.
11. Odette, G. R., & Lucas, G. E. (2001). Embrittlement of nuclear reactor pressure vessels. *JOM*, 53(7), 18–22. <https://doi.org/10.1007/s11837-001-0081-0>.
12. Osetsky, Y. N., & Bacon, D. J. (2003). Void and precipitate strengthening in  $\alpha$ -iron: what can we learn from atomic-level modelling? *Materials Science and Engineering: A*, 357(1–2), 1–11. [https://doi.org/10.1016/S0921-5093\(03\)00180-1](https://doi.org/10.1016/S0921-5093(03)00180-1).
13. Plimpton, S. (1995). Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics. *Journal of Computational Physics*, 117(1), 1–19. <https://doi.org/10.1006/jcph.1995.1039>.
14. Rong, Z. C., Hao, P. D., Tang, M., Chen, P., Li, F., Yi, J., Şopu, D., Eckert, J., & Liu, Y. C. (2021). First-principles study of the intrinsic properties of the fcc /hcp-Ti boundary in CNT/Ti composites prepared by high pressure torsion. *Physica Status Solidi (B)*, 258(8), 2100093. <https://doi.org/10.1002/pssb.202100093>.
15. Srinivasan, V., Kunjiappan, S., & Palanisamy, P. (2021). A brief review of carbon nanotube reinforced metal matrix composites for aerospace and defense applications. *International Nano Letters*, 11(6), 381–386. <https://doi.org/10.1007/s40089-021-00328-y>.
16. Stukowski, A. (2010). Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO—the Open Visualization Tool. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 18(1), 015012. <https://doi.org/10.1088/0965-0393/18/1/015012>.
17. Wang, L. (2021). Revealing the healing effect of carbon nanotubes on the damaged aluminum matrix: A molecular dynamics study. *Nanotechnology*, 32(15), 155701. <https://doi.org/10.1088/1361-6528/abd6f2>.
18. Yankovskaya, U. I., & Zakharov, P. V. (2024). Molecular dynamics simulation of uniaxial loading on a composite at different angles of CNT orientation [Молекулярно-динамическое моделирование одноосной нагрузки на композит при различных углах ориентации УНТ]. *Measurements, Automation and Modeling in Industry and Scientific Research*, 38–39.
19. Yankovskaya, U. I., Starostenkov, M. D., Medvedev, N. N., & Zakharov, P. V. (2024). Modeling methods for composites reinforced with carbon nanotubes: Review and prospects [Методы моделирования композитов, армированных углеродными нанотрубками: обзор и

- перспективы]. Computer Research and Modeling, 16(5), 1143–1162.
20. Yankovskaya, U. I., Starostenkov, M. D., Markidonov, A. V., Kazakov, A. M., Korznikova, E. A., & Zakharov, P. V. (2024). Enhanced mechanical properties of Ni3Al composites reinforced with single-walled and multi-walled carbon nanotubes: An atomistic modeling study. *Journal of Micromechanics and Molecular Physics*, 9(2n03), 99–105.
21. Zafari, A., Xia, K., & Ghasemi, A. (2022). Mechanical properties of titanium through various manufacturing processes. *Progress in Materials Science*, 129, 100972. <https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2022.100972>.
22. Zakharo, P.V., Narseev, A.S., Yankovskaya, U.I. Program for the Creation of a Metal-Matrix Composite Reinforced with Carbon Nanotubes. Certificate of Registration of a Computer Program RU 2025611925, January 23, 2025
23. Zecchi, S., Cristoforo, G., Piatti, E., Torsello, D., Ghigo, G., Tagliaferro, A., Rosso, C., & Bartoli, M. (2025). Review of recent advancements in carbon nanotubes for aerospace applications. *Micromachines*, 16(1), 53. <https://doi.org/10.3390/mi16010053>
24. Zhang, Y., & Li, X. (2021). Carbon nanotubes as vacancy traps in nickel-based superalloys: A molecular dynamics study. *Computational Materials Science*, 183, 109798. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2020.109798>
25. Zheng, H., Li, Y., & Wang, H. (2021). The formation and evolution of vacancy defects in  $\alpha$ -Ti under irradiation: A molecular dynamics study. *Journal of Nuclear Materials*, 543, 152577. <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2020.152577>

#### Information about the authors

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

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

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

S.V. Ganin – Candidate of Technical Sciences, Associate Professor, Director - Higher School of Materials Physics and Technology, St. Petersburg Polytechnic University

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

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

Статья поступила в редакцию 15.10.2025; одобрена после рецензирования 24.11.2025; принятая к публикации 01.12.2025.

The article was received by the editorial board on 15 Oct. 2025; approved after reviewing 24 Nov. 2025; accepted for publication 01 Dec. 2025.