

Научная статья

1.3.8. Физика конденсированного состояния (физико-математические науки)

УДК 538.913; 539.8

doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2022.03.002

## ПОВЕДЕНИЕ ПЛАТИНЫ, АРМИРОВАННОЙ УГЛЕРОДНОЙ НАНОТРУБКОЙ, ПРИ СЖИМАЮЩЕЙ НАГРУЗКЕ

Устина Ильдусовна Янковская<sup>1</sup>, Павел Васильевич Захаров<sup>2†</sup>,  
Михаил Дмитриевич Старостенков<sup>3</sup>, Артем Владимирович Маркидонов<sup>4</sup>,  
Елена Александровна Корзникова<sup>5</sup>

<sup>1</sup> Алтайский государственный медицинский университет Минздрава России, пр. Ленина, 40, 656038, Барнаул, Россия

<sup>2</sup> Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, ул. Политехническая, 29, 195251, Санкт-Петербург, Россия

<sup>3</sup> Алтайский государственный технический университет им. Ползунова, пр. Ленина, 46, 656038, Барнаул, Россия

<sup>4</sup> Филиал Кузбасского государственного технического университета им. Т.Ф. Горбачева в г. Прокопьевске, ул. Ноградская, 19а, 653039, Прокопьевск, Россия

<sup>5</sup> Уфимский государственный авиационный технический университет, ул. К. Маркса, 12, 450008, Уфа, Россия

<sup>2</sup> Алтайский государственный гуманитарно-педагогический университет им. В.М. Шукшина, ул. Владимира Короленко, 53, 659333, Бийск, Россия

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

<sup>2</sup> zakharovpv1@rambler.ru<sup>†</sup>, <https://orcid.org/0000-0002-6410-1594>

<sup>3</sup> genphys@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-6326-7613>

<sup>4</sup> markidonov\_artem@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-4566-528X>

<sup>5</sup> elena.a.korznikova@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-5975-4849>

**Аннотация.** В данной работе посредством атомистического моделирования методом молекулярной динамики исследуются упругие свойства композита на основе Pt и УНТ, в случае внешнего интенсивного воздействия в ориентации кристалла <001> (одноосного сжатия) при четырех различных скоростях деформации. Результаты моделирования сравниваются с монокристаллом Pt. Модель представляла собой куб, содержащий более 5000 атома. Для формирования нанокompозита Pt-УНТ в монокристаллическую металлическую матрицу была помещена однослойная углеродная нанотрубка типа «зигзаг» с хиральными индексами (8,0), содержащая 320 атомов. Таким образом, объемная доля УНТ в композите Pt-УНТ составляет 5,8 %. Потенциалом взаимодействия всех частиц нанокompозита являлся многочастичный потенциал, полученный модифицированным методом погруженного атома. Механические напряжения рассчитываются на основе вириального напряжения. Результаты молекулярно-динамического моделирования получены в настоящей работе с использованием пакета программ LAMMPS. В работе было установлено повышение модуля Юнга и снижение прочности на сжатие нанокompозита Pt-УНТ по сравнению с чистой платиной. Предполагается, что модуль Юнга увеличился из-за высокой жесткости УНТ, а снижение прочности вероятно связано с укорачиванием атомных связей на границе Pt и CNT.

**Ключевые слова:** композит, УНТ, сжатие, молекулярная динамика, моделирование, интенсивное воздействие, модуль Юнга, LAMMPS, MEAM, скорость деформации.

**Благодарности:** ЕАК благодарит за поддержку проект РФФ № 21-12-00275. ПВЗ благодарит за поддержку Министерство просвещения РФ в рамках государственного задания АГПУ им. В.М. Шукшина на выполнение НИР № государственной регистрации темы 122050400046-8. Часть результатов работы получена с использованием вычислительных ресурсов Суперкомпьютерного центра Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.

**Для цитирования:** Янковская У.И., Захаров П.В., Старостенков М.Д., Маркидонов А.В., Корзникова Е.А. Поведение платины, армированной углеродной нанотрубкой, при сжимающей нагрузке // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2022. Т. 19, № 3. С. 295–303. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2022.03.002.

Original article

**BEHAVIOR OF PLATINUM REINFORCED WITH CARBON NANOTUBES UNDER COMPRESSIVE LOAD****Ustina I. Yankovskaya<sup>1</sup>, Pavel V. Zakharov<sup>2†</sup>, Mikhail D. Starostenkov<sup>3</sup>, Artem V. Markidonov<sup>4</sup>, Elena A. Korznikova<sup>5</sup>**<sup>1</sup> Altai State Medical University of the Ministry of Health of Russia, Lenin Pr., 40, Barnaul, 656038, Russia<sup>2</sup> Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, Polytechnicheskaya Str., 29, St. Petersburg, 195251, Russia<sup>3</sup> I.I. Polzunov Altai State Technical University, Lenin Pr., 46, Barnaul, 656038, Russia<sup>4</sup> Branch of the T.F. Gorbachev Kuzbass State Technical University in Prokopyevsk, Nogradskaya Str., 19a, Prokopyevsk, 653039, Russia<sup>5</sup> Ufa State Aviation Technical University, K. Marx Str., 12, Ufa, 450008, Russia<sup>†</sup> Shukshin Altai State University for Humanities and Pedagogical University, V. Korolenko Str., 53, 659333, Biysk, Russia<sup>1</sup> zalaevau@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-6434-0747><sup>2</sup> zakharovpvl@rambler.ru<sup>†</sup>, <https://orcid.org/0000-0002-6410-1594><sup>3</sup> genphys@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-6326-7613><sup>4</sup> markidonov\_artem@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-4566-528X><sup>5</sup> elena.a.korznikova@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-5975-4849>

**Abstract.** In this work, using atomistic modeling by the method of molecular dynamics, the authors reveal the elastic properties of a composite based on Pt and CNTs in the case of external action in the crystal orientation  $\langle 001 \rangle$  (uniaxial observation) at four different strain rates. The simulation results are compared with a Pt single crystal. A cube containing over 5,000 atoms has been discovered. To form a Pt-CNT nanocomposite, a single-layer carbon nanotube of the “zigzag” type with chiral indices (8,0) containing 320 atoms was placed in a single-crystal metal matrix. Thus, the volume fraction of CNTs in the Pt-CNT composite is 5.8 %. The interaction potential of all particles of the nanocomposite was represented by a multipart potential obtained by a modified atom immersion method. Mechanical stresses are calculated from the virial stress. The results of molecular dynamics simulation in this work using the LAMMPS software package. In the work, an increased Young pressure and a decrease in the compressive density of the Pt-CNT nanocomposite compared to platinum were found. It is assumed that the Young's modulus increases due to the high rigidity of CNTs; the decrease in rigidity is probably associated with the shortening of atomic bonds at the interface between Pt and CNT.

**Keywords:** composite, CNT, compression deformation, molecular dynamics, modeling, intense impact, Young's modulus, LAMMPS, MEAM, strain rate.

**Acknowledgments:** EAK thanks for the support of the project of the Russian Science Foundation No. 21-12-00275. PVZ thanks the Ministry of Education Support of the Russian Federation within the framework of the state task of the ASPU. V.M. Shukshin for the implementation of research work No. state shock registration of the topic 122050400046-8. The part of results of the work were obtained using computational resources of Peter the Great Saint-Petersburg Polytechnic University Supercomputing Center ([www.spbstu.ru](http://www.spbstu.ru)).

**For citation:** Yankovskaya, U. I., Zakharov, P. V., Starostenkov, M. D., Markidonov, A.V. & Korznikova, E. A. (2022). Behavior of platinum reinforced with carbon nanotubes under compressive load. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 3(19), 295–303. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2022.03.002.

**Введение**

Металлические композиты широко распространены в промышленности, например, в качестве сырья для различных типов конструктивных элементов. Хорошая коррозионная стойкость, высокая теплопроводность, низкая плотность и высокая жесткость – основные свойства этих материалов. Одними из наиболее перспективных материалов как функционального, так и конструкционного назначения являются композиты на основе металлической матрицы и низ-

коразмерных углеродных структур, например, углеродных нанотрубок (УНТ). Углеродные нанотрубки из-за их выдающейся прочности и жесткости [1] были признаны наиболее привлекательными армирующими элементами для металлических нанокompозитов.

Существуют фундаментальные проблемы при производстве металлических нанокompозитов, армированных УНТ с необходимыми механическими свойствами; это плохая дисперсия УНТ в металлических матрицах и относительно слабая адгезия на границе раздела металл-УНТ.

Чтобы справиться с этими проблемами, необходимы более обширные знания в атомистическом масштабе о характеристиках взаимодействия металл-УНТ и их влиянии на механическое поведение металлических нанокompозитов в условиях рабочей нагрузки.

В приведенных ниже работах рассматриваются различные материалы в качестве металлической матрицы для такого композита. В первую очередь это алюминиевые сплавы, например, в работах [2-4] были предприняты попытки диспергировать УНТ в алюминиевой матрице с использованием жидкофазных или твердотельных методов. Так в [2] доказали, что модуль Юнга достигает максимума около 103 ГПа при содержании УНТ 1,0%. Это значение на 41,3 % выше, чем у основного материала. Хорошая дисперсность УНТ сдерживает рост зерен Al при изготовлении композитов, вызывая упрочнение измельчения зерен. Композит Al-УНТ показал повышенную твердость по сравнению с образцами, не содержащими УНТ. Ли и др. в работе [5] использовали моделирование *ab initio*, основанное на теории функционала плотности, для исследования взаимодействий между листом графена и слоем алюминия (111) в системах C-Al NC для различных конфигураций интерфейса. Они получили дисперсионные соотношения и распределения электронной плотности для различных интерфейсных регистров и пришли к выводу, что прочностью связи на границе раздела C-Al NC можно управлять, вводя сжимающую плоскостную деформацию и/или удаляя некоторые атомные ряды вдоль определенных кристаллографических структур в направлении слоя Al (111). Такие изменения улучшили межфазную прочность от слабого вторичного взаимодействия C-Al до частично ковалентных связей.

В описанной работе [5] применялся метод атомистического моделирования для анализа свойств композита. С появлением суперкомпьютеров и высокопроизводительных численных инструментов несколько вычислительных методов были откалиброваны с использованием результатов экспериментальных испытаний и использованы для оценки механического поведения нанокompозитов. В наномасштабе распространено использование двух основных методов: методы *ab initio* и моделирование молекулярной динамики (МД).

Этой теме посвящено большое количество публикаций, которые акцентируются на компьютерном моделировании [6-13]. Благодаря

использованию атомарного разрешения МД также используется при разработке и тестировании новых композитных наноструктур с улучшенной межфазной адгезией и/или дисперсией нанонаполнителей. Например, используя МД, авторы [14] и [15] протестировали новые конструкции матриц в нанокompозитах графен-Al и графен-Ni соответственно. Чтобы улучшить передачу нагрузки в нанокompозитах графен-Cu, в работе [16] протестировали покрытие никелем графенового нанонаполнителя. В работе [17] использовался метод МД для проведения углубленного исследования морфологии взаимодействия между алюминием и графеном. Чтобы проверить влияние пористости на межфазную адгезию, исследователи в работе [18] использовали графдин в качестве нанонаполнителя в нано-композитах Cu. Кроме того применение метода молекулярной динамики позволяет изучить динамику кристаллической решетки при различных видах воздействия. В работах [19-21] рассматриваются биметаллические системы и их свойства, в том числе нелинейные возбуждения в решетке, что также может иметь место в композитах металл-УНТ.

В рассмотренных работах изучается поведение композитов металл-УНТ преимущественно при растяжении. Однако нанокompозиты, используемые в устройствах и системах, могут подвергаться как растяжению, так и сжатию. Поведение композитов УНТ-металл для большинства металлов при сжатии изучено гораздо меньше, чем при растяжении. Кроме того, УНТ при сжатии могут быть чувствительны к короблению и перегибу. В связи с этим в данной работе проведено исследование композита Pt-УНТ на сжатие. Выбор металлической матрицы в виде платины обусловлен ее уникальными свойствами и перспективами применения в медицине и электронике.

## Методы

При построении модели сначала формировался монокристалл Pt (структура созданного монокристалла Pt состояла из гранецентрированной кубической решетки с постоянной решетки  $a = 3,920 \text{ \AA}$ ). Кристалл имеет форму куба с размерами ребра  $43,1541 \text{ \AA}$ , количество атомов составляет 5324, направление осей соответствовало следующим кристаллографическим индексам:  $x - \langle 100 \rangle$ ,  $y - \langle 010 \rangle$ ,  $z - \langle 001 \rangle$ . Далее для моделирования нанокomp-

позита Pt-УНТ в монокристаллическую металлическую призму, вдоль оси  $z$  «просверлена» цилиндрическое отверстие диаметром  $D = 8,4 \text{ \AA}$  и удалены все атомы металла внутри заданного цилиндрического пространства (см. рис.1). В это отверстие помещалась однослойная углеродная нанотрубка типа «zigzag» с хиральными индексами (8,0): длиной  $L = 43,15 \text{ \AA}$ , диаметром  $D = 5,2 \text{ \AA}$  и количеством  $N = 320$  атомов. Таким образом объемная доля УНТ в композите Pt-УНТ составляет 5,8 %. Все построения структуры осуществлялись посредством программы AtomsK [22].

Моделирование деформирующей нагрузки проводилось методом молекулярной динамики (МД). Крупномасштабный атомно-

молекулярный массивно-параллельный симулятор (LAMMPS) использовался для моделирования МД [23]. Он обладает всем необходимым для данной работы функционалом для моделирования и последующего анализа деформации нанокompозита. Для описания взаимодействия Pt-Pt, C-C и Pt-УНТ был выбран MEAM потенциал. Межатомный потенциал системы Pt-УНТ в рассматриваемом композите был разработан на основе формализма второго модифицированного метода вложенного атома ближайшего соседа (2NN MEAM) [24]. Визуализация результатов расчетов и их графическое представление для дальнейшего анализа осуществлялась с помощью OVITO [25].

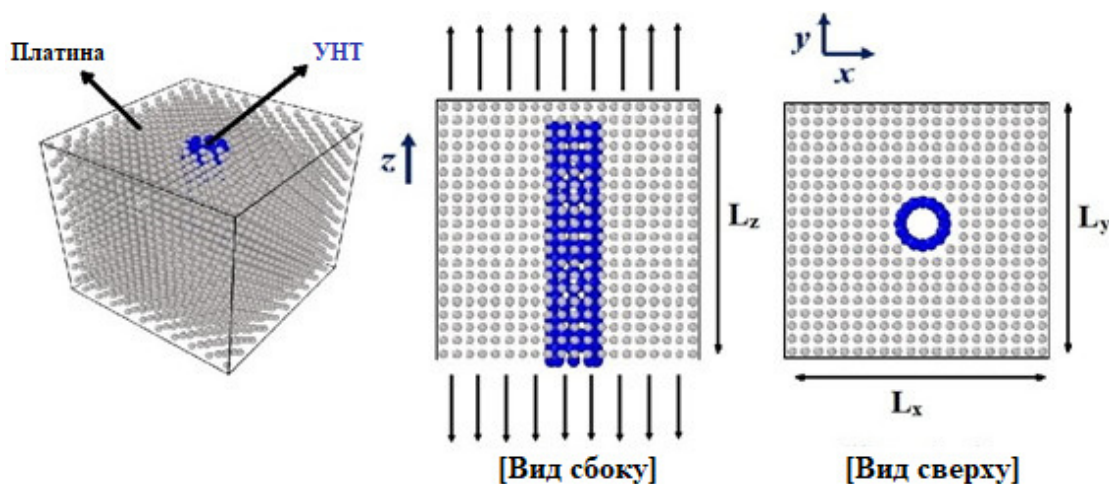


Рис.1. Модель кристалла Pt, армированного УНТ для моделирования методом МД

Fig.1. Model of a CNT-reinforced Pt crystal for modeling by the MD method

Моделирование деформирующей нагрузки началось с первоначального анализа уравнивания в течении 1 нс с временным шагом 1 фс и 20 000 временных шагов в ансамбле NPT с периодическими граничными условиями при температуре  $T = 300 \text{ K}$  и  $P = 0 \text{ Па}$ , чтобы стабилизировать систему Pt-УНТ перед запуском анализа пошагового смещения. Таким образом, внутренние остаточные напряжения были сняты, а энергия упала до минимального значения.

К композиту во время моделирования сжатия прикладывалась нагрузка в направлении оси  $z$  со скоростью деформации  $10^{-7}-10^{-9} \text{ пс}^{-1}$ , что меньше, чем типичная скорость деформации, используемая в других аналогичных моделях [26, 27]. Это производилось целенаправленно, чтобы прийти к компромиссу между скоростью и точностью счета. При моделировании одноосного сжатия композита использо-

вался канонический ансамбль NVT при температуре 300 К, временном шаге 0,5 фс при выполнении 500000 временных шагов.

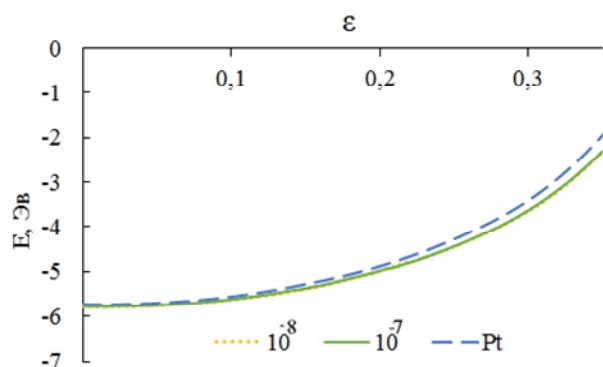
Механические напряжения рассчитываются на основе вириального напряжения следующим образом:

$$\sigma(r) = \frac{1}{\Omega} \sum_i \left[ -m_i \dot{\mathbf{u}}_i \times \dot{\mathbf{u}}_i + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} r_{ij} \times f_{ij} \right], \quad (1)$$

где  $\Omega$  — общий объем;  $m_i$  — масса атома  $i$ ;  $\dot{\mathbf{u}}_i$  — производная по времени, которая относится к вектору смещения атома  $i$  относительно исходного положения;  $r_{ij}$  — расстояние между векторами положения  $r_i$  и  $r_j$  атомов  $i$  и  $j$  соответственно;  $f_{ij}$  — межатомная сила, действующая на атом  $i$  со стороны атома  $j$  [28]. Моделирование сжатия выполнялось до тех пор, пока деформация  $\epsilon$  не достигала значения  $-0,35$ .

## Результаты и обсуждения

Ниже приведены результаты влияния скорости деформации сжатия на основные характеристики композита Pt-УНТ. Рассматривалось изменение энергии ( $E$ , эВ), напряжения ( $\sigma$ , ГПа) и модуля Юнга при деформации. Изменение потенциальной энергии в зависимости от деформации показано на рис.2.



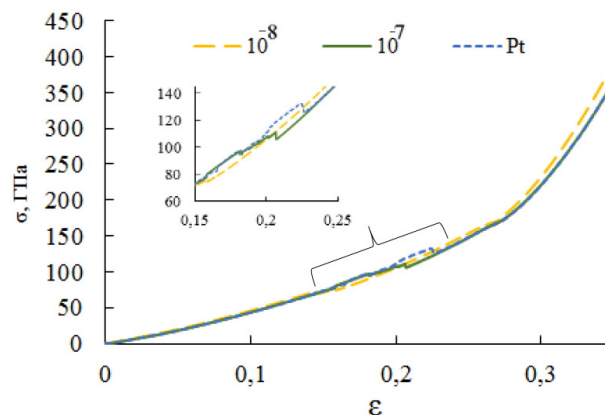
**Рис.2.** Изменение потенциальной энергии для чистой платины и Pt-УНТ при сжатии для различных скоростей

**Fig.2.** Change in potential energy for pure platinum and Pt-CNT during compression for different speeds

На рисунке выявлено возрастание потенциальной энергии в результате сжимающей нагрузки. Видно, кривые для всех скоростей деформации имеют параболическую (квадратичную) форму. При этом отметим, что скорость деформации не оказывает принципиального влияния на зависимость: кривые практически не различимы. Для сравнения приведена зависимость для чистой Pt при скорости  $10^{-9}$  пс<sup>-1</sup>. Очевидно, композит обладает несколько большей энергией связи на атом, чем чистый металл.

Кривая зависимости напряжения от деформации при различных скоростях при сжимающей нагрузке показана на рис.3. Мы видим, что начальная стадия напряжения возрастает практически линейно вплоть до 15 % независимо от скорости сжатия. На этом участке имеет смысл говорить о выполнении закона Гука и соответственно об упругой составляющей деформации. Далее при более высоких скоростях сжатия наблюдается снижение из-за возможного укорачивания атомных связей на границе металл-УНТ. И те скачки, которые наблюдаются в интервале  $0,15 \leq \epsilon \leq 0,23$ , говорят о некоторых фазовых изменениях в материале, при этом этот процесс влияет скорость деформации. С

уменьшением ее скорости фазовый переход смещается в сторону больших деформаций. Детальное изучение фазовых изменений будет предметом последующих работ в этом направлении.



**Рис.3.** Зависимость напряжения от деформации для скоростей ( $10^{-8}$ ,  $10^{-7}$ ) пс<sup>-1</sup> при сжимающей нагрузке

**Fig.3.** Stress versus strain for velocities ( $10^{-8}$ ,  $10^{-7}$ ) ps<sup>-1</sup> when compressed

Модули Юнга для рассматриваемых случаев скоростей деформации были рассчитаны с помощью регрессионного анализа. В таблице 1 приведены результаты расчета Модуля Юнга при одноосном сжатии композита Pt-УНТ при различных скоростях деформации.

**Таблица 1.** Модуль Юнга Pt-УНТ при различных скоростях деформации

**Table 1.** Young's modulus of Pt-CNT at different strain rates

Скорость деформации (пс <sup>-1</sup> )	Модуль Юнга (В, ГПа)
$10^{-7}$	496,1
$10^{-8}$	494
$10^{-9}$	561,5
$10^{-10}$	480,3

Получено, что при одноосном сжатии модуль Юнга увеличился с включением УНТ в кристалл платины, максимальное увеличение получено при скорости сжатия  $10^{-9}$  пс<sup>-1</sup>. По сравнению с чистой платиной эластичность нанокompозита Pt-УНТ уменьшилась за счет УНТ.

### Заключение

В данной работе МД-моделирование и потенциал МЕАМ использовались для изучения механического поведения нанокompозита Pt-УНТ и исследования влияния скорости деформации в случае одноосного сжатия. Результаты моделирования показали, что свойства материала зависят от скорости деформации: исследовано влияние скорости сжатия на энергию связи, модуль Юнга и упругое напряжение. Получен ряд результатов, свидетельствующих об увеличении модуля Юнга для композита Pt-УНТ в сравнении с чистой платиной при сжимающей нагрузке. Анализ влияния скорости деформации показал, что модуль упругости уменьшается при увеличении скорости деформации.

### Список литературы

1. Iijima S. Synthesis of Carbon Nanotubes // *Nature*. 1991. N 354. P. 56–58.
2. Deng C.F., Wang D.Z., Zhang X.X., Li A.B. Processing and properties of CNT reinforced Al composites // *Mater. Sci. Eng.* 2007. A. N 444(1–2). P. 138–45.
3. Mortazavi M., Majzoobi G.H., Golikand A.N., Reihani A.C., Mortazavi S.Z., Gorji M.S. Fabrication and mechanical properties of MWCNTs-reinforced aluminum composites by hot extrusion // *Rare. Metals*. 2012. N 31(4). P. 372–8.
4. Choi H., Wang L., Cheon D., Lee W. Preparation by mechanical alloying of Al powders with single-, double-, and multi-walled carbon nanotubes for carbon/metal nanocomposites // *Compos. Sci. Technol.* 2013. N 74. P. 91–8.
5. Lee W., Jang S., Kim M.J., Myoung J.M. Interfacial interactions and dispersion relations in carbon-aluminum nanocomposite systems // *Nanotechnology*. 2008. N 19. P. 285701.
6. Guo Y., Guo W. Structural transformation of partially confined copper nanowires inside defected carbon nanotubes // *Nanotechnology*. 2006. N 17. P. 4726.
7. Sun F.W., Li H. Torsional Strain Energy Evolution of Carbon Nanotubes and Their Stability with Encapsulated Helical Copper Nanowires // *Carbon*. 2011. N 49. P. 1408–1415.
8. Wang L., Zhang H.W., Deng X.M. The influence of tube length, radius and chirality on the buckling behavior of single-walled carbon nanotubes filled with copper atoms // *J. Phys: Condens. Matter*. 2009. N 21. P. 305301.
9. Guo S.H., Zhu B.E., Ou X.D., Pan Z.Y., Wang Y.X. Deformation of gold-filled single-walled carbon nanotubes under axial compression // *Carbon*. 2010. N 48. P. 4129–4135.
10. Wang L., Zhang H.W., Zheng Y.G., Wang J.B., Zhang Z.Q. Formation of two conjoint fivefold deformation twins in copper nanowires with molecular dynamics simulation // *J. Appl. Phys.* 2008. N 92. P. 041913.
11. Inoue S., Matsumura Y. Molecular dynamics simulation of metal coating on single-walled carbon nanotube // *Chem. Phys. Lett.* 2008. N 464. P. 160–165.
12. Inoue S., Matsumura Y. Influence of metal coating on single-walled carbon nanotube: Molecular dynamics approach to determine tensile strength // *Chem. Phys. Lett.* 2009. N 469. P. 125–129.
13. Song H.-Y., Zha X.-W. Molecular dynamics study of effects of nickel coating on torsional behavior of single-walled carbon nanotube // *Phys. B. Condens. Matter*. 2011. N 406. P. 992–995.
14. Zhang L., Zhu Y., Li N., Rong Y., Xia H., Ma H. Atomistic simulation of Al-graphene thin film growth on polycrystalline Al substrate // *Appl. Surf. Sci.* 2018. N 433. P. 540–545.
15. Yazdandoost F., Boroujeni A.Y., Mirzaeifa R. Nanocrystalline nickel-graphene nanoplatelets composite: Superior mechanical properties and mechanics of properties enhancement at the atomistic level // *Phys. Rev. Mat.* 2017. N 1. P. 076001.
16. Montazeri A., Panahi B. MD-based estimates of enhanced load transfer in graphene/metal nanocomposites through Ni coating // *Appl. Surf. Sci.* 2018. N 457. P. 1072–1080.
17. Kumar S. Graphene engendered 2-D structural morphology of aluminium atoms: Molecular dynamics simulation study // *Mater. Chem. Phys.* 2017. N 202. P. 329–339.
18. Roman R., Cranford S. Strength and Toughness of Graphdiyne/Copper Nanocomposites // *Adv. Eng. Mater.* 2014. N 16. P. 862–871.
19. Zakharov P.V., Starostenkov M.D., Korznikova E.A., Lutsenko I.S., Dmitriev S.V. Excitation of Soliton-Type Waves in Crystals of the A<sub>3</sub>B Stoichiometry // *Physics of the Solid State*. 2019. N 61(11). P. 2160–2166.
20. Zakharov P.V., Starostenkov M.D., Eremin A.M., Cherednichenko A.I. Discrete

breathers in the crystal CuAu // *Letters on Materials*. 2016. N 6(4). P. 294–299.

21. Zakharov P.V., Poletaev G.M., Starostenkov M.D., Cherednichenko A.I. Simulation of the shock waves propagation through the interface of bipartite bimetallic Ni-Al particles // *Letters on Materials*. 2017. N 7(3). P. 296–302.

22. Atomsk: A tool for manipulating and converting atomic data files Pierre Hirel // *Comput. Phys. Comm.* 2015. N 197. P. 212–219.

23. Information on LAMMPS Molecular Dynamics Simulator [Electronic resource] / Official site <http://lammps.sandia.gov>.

24. Jeong G.-U., Lee B.-J. Interatomic potentials for Pt-C and Pd-C systems and a study of structure-adsorption relationship in large Pt/graphene system // *Computational Materials Science*. 2020. N 185. P. 109946.

25. Stukowski A. Computational analysis methods in atomistic modeling of crystals // *J. Min. Metal & Mat. Soc.* 2013. N 66(3). P. 399–407.

26. Sankaranarayanan S., Bhethanabotla V., Joseph B. Molecular dynamics simulation of temperature and strain rate effects on the elastic properties of bimetallic pd-pt nanowires // *Phys. Rev. B*. 2007. No. 76(13).

27. Setoodeh A.R., Attariani H., Khosrownejad M. Nickel nanowires under uniaxial loads: A molecular dynamics simulation study // *Comput. Mater. Sci.* 2008. N 44(2). P. 378–84.

28. Lee S., Park J., Yang J., Lu W. Molecular dynamics simulations of the traction-separation response at the interface between pvdf binder and graphite in the electrode of li-ion batteries // *J. Electrochem. Soc.* 2014. N 161(9). P. A1218–A23.

29. Evazzade I., Lobzenko I., Golubev O., Korznikova E. Two-phase tension of a carbon nanotube // *Journal of Micromechanics and Molecular Physics*. 2014. N 5. P. 2050001.

30. Evazzade I., Lobzenko I.P., Saadatmand D., Korznikova E.A., Zhou K., Liu B., Dmitriev S.V. Graphene nanoribbon as an elastic damper // *Nanotechnology*. 2018. N 29. P. 215704.

31. Korznikova E.A., Rysaeva L.K., Savin A.V., Soboleva E.G., Ekomasov E.G., Ilgamov M.A., Dmitriev S.V. Chain model for carbon nanotube bundle under plane strain conditions // *Materials*. 2019. N 12. P. 3951.

32. Rysaeva L.K., Bachurin D.V., Murzaev R.T., Abdullina D.U., Korznikova E.A., Mulyukov R.R., Dmitriev S.V. Evolution of the carbon nanotube bundle structure under biaxial and shear

strains // *Facta Universitatis, Series: Mechanical Engineering*. 2020. N 18. P. 525–536.

33. Savin A.V., Korznikova E.A., Dmitriev S.V., Soboleva E.G. Graphene nanoribbon winding around carbon nanotube // *Computational Materials Science*. 2017. N 135. P. 99–108.

### Информация об авторах

У. И. Янковская – преподаватель Алтайского государственного медицинского университета Министерства здравоохранения Российской Федерации.

П. В. Захаров – доктор физико-математических наук, профессор Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, профессор.

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

А. В. Маркидонов – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой филиала Кузбасского государственного технического университета им. Т.Ф. Горбачева в г. Прокопьевске.

Е. А. Корznikova – доктор физико-математических наук, профессор Уфимского государственного авиационного технического университета.

### References

1. Iijima, S. (1991). Synthesis of Carbon Nanotubes. *Nature*, 354, 6348, 56–58.

2. Deng, C. F., Wang, D. Z., Zhang, X. X. & Li, A. B. (2007). Processing and properties of CNT reinforced Al composites. *Mater Sci Eng A*, 444(1–2), 138–45.

3. Mortazavi, M., Majzoobi, G. H., Golikand, A. N., Reihani, A. C., Mortazavi, S. Z. & Gorji, M. S. (2012). Fabrication and mechanical properties of MWCNTs-reinforced aluminum composites by hot extrusion. *Rare Metals*, 31(4), 372–8.

4. Choi, H., Wang, L., Cheon, D. & Lee, W. (2013). Preparation by mechanical alloying of Al powders with single-, double-, and multi-walled carbon nanotubes for carbon/metal nanocomposites. *Compos Sci. Technol.*, 74, 91–8.

5. Lee, W., Jang, S., Kim, M. J. & Myoung, J. M. (2008). Interfacial interactions and dispersion relations in carbon-aluminum nanocomposite systems. *Nanotechnology*, 19, 285701.



6. Guo, Y. & Guo, W. (2006). Structural transformation of partially confined copper nanowires inside defected carbon nanotubes. *Nanotechnology*, 17, 4726.
7. Sun, F. W. & Li, H. (2011). Torsional Strain Energy Evolution of Carbon Nanotubes and Their Stability with Encapsulated Helical Copper Nanowires. *Carbon*, 49, 1408–1415.
8. Wang, L., Zhang, H. W. & Deng, X. M. (2009). The influence of tube length, radius and chirality on the buckling behavior of single-walled carbon nanotubes filled with copper atoms. *J. Phys: Condens Matter*, 21, 305301.
9. Guo, S. H., Zhu, B. E., Ou, X. D., Pan, Z. Y. & Wang, Y. X. (2010). Deformation of gold-filled single-walled carbon nanotubes under axial compression. *Carbon*, 48, 4129–4135.
10. Wang, L., Zhang, H. W., Zheng, Y. G., Wang, J. B. & Zhang, Z. Q. (2008). Formation of two conjoint fivefold deformation twins in copper nanowires with molecular dynamics simulation. *J. Appl. Phys.*, 92, 041913.
11. Inoue, S. & Matsumura, Y. (2008). Molecular dynamics simulation of metal coating on single-walled carbon nanotube. *Chem. Phys. Lett.*, 464, 160–165.
12. Inoue, S. & Matsumura, Y. (2009). Influence of metal coating on single-walled carbon nanotube: Molecular dynamics approach to determine tensile strength. *Chem. Phys. Lett.*, 469, 125–129.
13. Song, H.-Y. & Zha, X.-W. (2011). Molecular dynamics study of effects of nickel coating on torsional behavior of single-walled carbon nanotube. *Phys. B. Condens. Matter*, 406, 992–995.
14. Zhang, L., Zhu, Y., Li N., Rong, Y., Xia, H. & Ma, H. (2018). Atomistic simulation of Al-graphene thin film growth on polycrystalline Al substrate. *Appl. Surf. Sci.*, 433, 540–545.
15. Yazdandoost, F., Boroujeni, A. Y. & Mirzaeifa, R. (2017). Nanocrystalline nickel-graphene nanoplatelets composite: Superior mechanical properties and mechanics of properties enhancement at the atomistic level. *Phys. Rev. Mat.*, 1, 076001.
16. Montazeri, A. & Panahi B. (2018). MD-based estimates of enhanced load transfer in graphene/metal nanocomposites through Ni coating. *Appl. Surf. Sci.*, 457, 1072–1080.
17. Kumar, S. (2017). Graphene engendered 2-D structural morphology of aluminium atoms: Molecular dynamics simulation study. *Mater. Chem. Phys.*, 202, 329–339.
18. Roman, R. & Cranford, S. (2014). Strength and Toughness of Graphdiyne/Copper Nanocomposites. *Adv. Eng. Mater.*, 16, 862–871.
19. Zakharov, P. V., Starostenkov, M. D., Korznikova, E. A., Lutsenko, I. S. & Dmitriev, S. V. (2019). Excitation of Soliton-Type Waves in Crystals of the A<sub>3</sub>B Stoichiometry. *Physics of the Solid State*, 61(11), 2160–2166.
20. Zakharov, P. V., Starostenkov, M. D., Eremin, A. M. & Cherednichenko, A. I. (2016). Discrete breathers in the crystal CuAu. *Letters on Materials*, 6(4), 294–299.
21. Zakharov, P. V., Poletaev, G. M., Starostenkov, M. D. & Cherednichenko A. I. (2017). Simulation of the shock waves propagation through the interface of bipartite bimetallic Ni-Al particles. *Letters on Materials*, 7(3), 296–302.
22. Atomsk: A tool for manipulating and converting atomic data files Pierre Hirel (2015). *Comput. Phys. Comm.*, 197, 212-219.
23. Information on LAMMPS Molecular Dynamics Simulator [Electronic resource] / Official site <http://lammps.sandia.gov>.
24. Jeong, G.-U. & Lee, B.-J. (2020). Interatomic potentials for Pt-C and Pd-C systems and a study of structure-adsorption relationship in large Pt/graphene system. *Computational Materials Science*, 185, 109946.
25. Stukowski, A. (2013). Computational analysis methods in atomistic modeling of crystals. *J Min Metal & Mat Soc.*, 66(3), 399–407.
26. Sankaranarayanan, S., Bhethanabotla, V. & Joseph, B. (2007). Molecular dynamics simulation of temperature and strain rate effects on the elastic properties of bimetallic Pd-Pt nanowires. *Phys. Rev. B.*, 76(13).
27. Setoodeh, A. R., Attariani, H. & Khosrownejad, M. (2008). Nickel nanowires under uniaxial loads: A molecular dynamics simulation study. *Comput. Mater. Sci.*, 44(2), 378–84.
28. Lee, S., Park, J., Yang, J. & Lu, W. (2014). Molecular dynamics simulations of the traction-separation response at the interface between pvdf binder and graphite in the electrode of Li-ion batteries. *J. Electrochem. Soc.*, 161(9), A1218–A23.
29. Evazzade, I., Lobzenko, I., Golubev, O. & Korznikova E. (2020). Two-phase tension of a carbon nanotube. *Journal of Micromechanics and Molecular Physics*, 5, 2050001.



30. Evazzade, I., Lobzenko, I. P., Saadatmand, D., Korznikova, E. A., Zhou, K., Liu, B. & Dmitriev, S. V. (2018). Graphene nanoribbon as an elastic damper. *Nanotechnology*, 29, 215704.

31. Korznikova, E. A., Rysaeva, L. K., Savin, A. V., Soboleva, E. G., Ekomasov, E. G., Ilgamov, M. A. & Dmitriev S. V. (2019). Chain model for carbon nanotube bundle under plane strain conditions. *Materials*, 12, 3951.

32. Rysaeva, L. K., Bachurin, D. V., Murzaev, R. T., Abdullina, D. U., Korznikova, E. A., Mulyukov, R. R. & Dmitriev, S. V. (2020). Evolution of the carbon nanotube bundle structure under biaxial and shear strains. *Facta Universitatis, Series: Mechanical Engineering*, 18, 525–536.

33. Savin, A. V., Korznikova, E. A., Dmitriev, S. V. & Soboleva E. G. (2017). Graphene nanoribbon winding around carbon nanotube. *Computational Materials Science*, 135, 99–108.

### Information about the authors

*U. I. Yankovskaya – Lecturer, Altai State Medical University of the Ministry of Health of the Russian Federation.*

*P. V. Zakharov – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor of the Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.*

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

*A. V. Markidonov – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Head of Department Branch of the T.F. Gorbachev Kuzbass State Technical University in Prokopyevsk.*

*E. A. Korznikova – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Ufa State Aviation Technical University.*

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

Статья поступила в редакцию 08.07.2022; одобрена после рецензирования 15.07.2022; принята к публикации 25.07.2022.

The article was received by the editorial board on 08 July 22; approved after reviewing on 15 July 22; accepted for publication on 25 July 22.