

УДК: 519.876, 538.913, 539.8

Методы моделирования композитов, армированных углеродными нанотрубками: обзор и перспективы

У. И. Янковская^{1,4,a}, М. Д. Старостенков², Н. Н. Медведев³,
П. В. Захаров¹

¹ФГАОУ ВО Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Россия, 195251, г. Санкт-Петербург, ул. Политехническая, д. 29

²Алтайский государственный технический университет им. И. И. Ползунова,
Россия, 656038, г. Барнаул, пр. Ленина, д. 46

³Бийский технологический институт (филиал) федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Алтайский государственный технический университет им. И. И. Ползунова»,
Россия, 659305, г. Бийск, ул. Трофимова, д. 27

⁴ФГБОУ ВО Алтайский государственный медицинский университет Министерства здравоохранения Российской Федерации,
Россия, 656038, г. Барнаул, пр. Ленина, д. 40

E-mail: ^a zalaevau@gmail.com

Получено 15.05.2024, после доработки — 11.07.2024.

Принято к публикации 29.08.2024.

Изучение структурной характеристики композитов и наноструктур имеет фундаментальное значение в материаловедении. Теоретическое и численное моделирование и симуляция механических свойств наноструктур является основным инструментом, позволяющим проводить комплексные исследования, которые сложно проводить только экспериментально. Одним из примеров наноструктур, рассматриваемых в данной работе, являются углеродные нанотрубки (УНТ), которые обладают хорошими тепловыми и электрическими свойствами, а также низкой плотностью и высоким модулем Юнга, что делает их наиболее подходящим армирующим элементом для композитов, для потенциального применения в аэрокосмической, автомобильной, металлургической и биомедицинской промышленности. В данном обзоре мы рассмотрели методы моделирования, механические свойства и применение композитов с металлической матрицей, армированных УНТ. Также рассмотрены некоторые методы моделирования, применимые при исследованиях композитов с полимерными и металлическими матрицами. Рассмотрены такие методы, как метод градиентного спуска, метод Монте-Карло, методы молекулярной статистики и молекулярной динамики. Было показано, что молекулярно-динамическое моделирование отлично подходит для создания различных систем композиционных материалов и изучения свойств композитов с металлической матрицей, армированных углеродными наноматериалами, в различных условиях. В данной работе кратко представлены наиболее часто используемые потенциалы, описывающие взаимодействие систем моделирования композитов. Правильный выбор потенциалов взаимодействия частей композитов напрямую влияет на описание изучаемого явления. Детализирована и обсуждена зависимость механических свойств композитов от объемной доли, диаметра, ориентации и количества УНТ. Показано, что объемная доля углеродных нанотрубок имеет существенное влияние на предел прочности и модуль Юнга. Диаметр УНТ оказывает большее значение на предел прочности, нежели на модуль упругости. Также приведен в пример работы, в которых изучается влияние длины УНТ на механические свойства композитов. В заключении нами предложены перспективы направления развития молекулярно-динамического моделирования в отношении композитов с металлической матрицей, армированных углеродными наноматериалами.

Ключевые слова: метод молекулярной динамики, моделирование, механические свойства, углеродная нанотрубка, армирование, композиты с металлической матрицей

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. Часть результатов работы была получена с использованием вычислительных ресурсов суперкомпьютерного центра Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого (www.scc.spbstu.ru).

© 2024 Устина Ильдусовна Янковская, Михаил Дмитриевич Старостенков, Николай Николаевич Медведев, Павел Васильевич Захаров

Статья доступна по лицензии Creative Commons Attribution-NoDerivs 3.0 Unported License.
Чтобы получить текст лицензии, посетите веб-сайт <http://creativecommons.org/licenses/by-nd/3.0/>
или отправьте письмо в Creative Commons, PO Box 1866, Mountain View, CA 94042, USA.

UDC: 519.876, 538.913, 539.8

Methods for modeling composites reinforced with carbon nanotubes: review and perspectives

U. I. Yankovskaya^{1,4,a}, M. D. Starostenkov², N. N. Medvedev³,
P. V. Zakharov¹

¹Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University,
29 Polytechnicheskaya st., St. Petersburg, 195251, Russia

²I. I. Polzunov Altai State Technical University,
46 Lenin pr., Barnaul, 656038, Russia

³Biysk Technological Institute (branch) of the Altai State Technical University,
27 Trofimova st., Biysk, 659305, Russia

⁴ASMU of the Ministry of Health of the Russian Federation,
40 Lenin pr., Barnaul, 656038, Russia

E-mail: ^a zalaevau@gmail.com

Received 15.05.2024, after completion — 11.07.2024.

Accepted for publication 29.08.2024.

The study of the structural characteristics of composites and nanostructures is of fundamental importance in materials science. Theoretical and numerical modeling and simulation of the mechanical properties of nanostructures is the main tool that allows for complex studies that are difficult to conduct only experimentally. One example of nanostructures considered in this work are carbon nanotubes (CNTs), which have good thermal and electrical properties, as well as low density and high Young's modulus, making them the most suitable reinforcement element for composites, for potential applications in aerospace, automotive, metallurgical and biomedical industries. In this review, we reviewed the modeling methods, mechanical properties, and applications of CNT-reinforced metal matrix composites. Some modeling methods applicable in the study of composites with polymer and metal matrices are also considered. Methods such as the gradient descent method, the Monte Carlo method, methods of molecular statics and molecular dynamics are considered. Molecular dynamics simulations have been shown to be excellent for creating various composite material systems and studying the properties of metal matrix composites reinforced with carbon nanomaterials under various conditions. This paper briefly presents the most commonly used potentials that describe the interactions of composite modeling systems. The correct choice of interaction potentials between parts of composites directly affects the description of the phenomenon being studied. The dependence of the mechanical properties of composites on the volume fraction of the diameter, orientation, and number of CNTs is detailed and discussed. It has been shown that the volume fraction of carbon nanotubes has a significant effect on the tensile strength and Young's modulus. The CNT diameter has a greater impact on the tensile strength than on the elastic modulus. An example of works is also given in which the effect of CNT length on the mechanical properties of composites is studied. In conclusion, we offer perspectives on the direction of development of molecular dynamics modeling in relation to metal matrix composites reinforced with carbon nanomaterials.

Keywords: molecular dynamics method, modeling, mechanical properties, carbon nanotube, reinforcement

Citation: *Computer Research and Modeling*, 2024, vol. 16, no. 5, pp. 1143–1162 (Russian).

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

1. Введение

Углеродные нанотрубки (УНТ) представляют собой цилиндрические структуры, состоящие из одного или нескольких слоев атомов углерода, которые образуют гексагональную решетку. Они имеют диаметр от нескольких десятков до нескольких сотен нанометров и длину до нескольких микрон [Salvetat et al., 1999; Ruoff, Lorents, 1995].

Существует два основных типа УНТ: одностенные нанотрубки (ОУНТ) и многостенные нанотрубки (МУНТ). Одностенные нанотрубки состоят из одного слоя атомов углерода, свернутого в цилиндр, а многостенные — из нескольких слоев, которые могут быть свернуты в разные формы, такие как спирали или гармошки [Бадамшина и др., 2010].

Принципиальная схема одностенных и многостенных углеродных нанотрубок из рулонного графенового листа подробно рассмотрена в работах [Vidu et al., 2014; Norizan et al., 2021].

Эти структуры обладают уникальными электрическими (УНТ могут вести себя как металлы или полупроводники в зависимости от их структуры и хиральности [Bulmer, Kaniyoor, Elliott, 2021]), термическими (углеродные нанотрубки обладают высокой теплопроводностью, что делает их подходящими для применения в материалах для теплоотвода и теплоизоляции [Li, Chou, 2003]), механическими (УНТ обладают высокой прочностью и жесткостью при сравнительно низком весе [Soni, Thomas, Kar, 2020; Dai, Sun, 2016]) и химическими (УНТ стойки к химическому воздействию, что позволяет использовать их в коррозионностойких покрытиях и композитах [Ryu et al., 2023]) свойствами, что делает их исключительно привлекательными для различного применения в науке и инженерии, в том числе и в качестве армирующих элементов для композитов. Эти свойства делают углеродные нанотрубки особенно ценными в создании новых материалов с улучшенными функциональными характеристиками для аэрокосмической промышленности, микроэлектроники, энергетики и многих других областей [Bulmer, Kaniyoor, Elliott, 2021]. Например, в качестве биомедицинского приложения УНТ обладают уникальными биосовместимыми свойствами, что позволяет использовать их для создания биосенсоров, биомаркеров и наноинкапсулированных лекарств [Wang et al., 2014]. Это может привести к улучшению диагностики и лечения различных заболеваний.

Существует несколько типов композитов, армированных УНТ, включая керамические, полимерные и металлические. Керамические композиты, армированные УНТ, включают в себя углеродную нанотрубку, встроенную в керамическую матрицу, такую как карбид кремния или карбид титана. Эти композиты обладают превосходной прочностью, устойчивостью к высоким температурам и износу, что делает их подходящими для использования в высокотемпературных приложениях, таких как газовые турбины и реактивные двигатели [Shin et al., 2011; Neo et al., 2020; Drissi-Habti, El Assami, Raman, 2021; Cuppoletti, 2011; Chen et al., 2017; El Assami, Drissi Habti, Raman, 2020; Леонов и др., 2019; Федосова и др., 2015; Зенкин, Атапин, Макаров, 2019].

Полимерные композиты, армированные УНТ, представляют собой материалы, в которых углеродные нанотрубки используются для усиления полимерных матриц, таких как эпоксидные смолы, полимеры на основе стирола, полиамиды и другие. Такие композиты обладают высокой прочностью, жесткостью, стабильностью размеров и устойчивостью к коррозии, что делает их пригодными для использования в автомобильной и аэрокосмической отраслях [Randjbaran et al., 2021; Praneeth et al., 2022; Arash, Wang, Varadan, 2014; Wang et al., 2019; Malagù et al., 2016].

Интерметаллические соединения, армированные углеродными нанотрубками, представляют собой новый класс материалов, который привлекает большое внимание в современных инженерных и технологических приложениях благодаря их уникальным свойствам и потенциалу для решения различных проблем. Большая часть научных трудов посвящена композитам с полимерной матрицей, армированным углеродными наночастицами, где из-за ограниченной структурной прочности материалов полимерной матрицы потенциальные выгоды действительно являются

наиболее впечатляющими. Однако в последние годы все чаще уделяется внимание исследованиям нанокompозитов с металлической матрицей, упрочненных дисперсными углеродными наночастицами. Одними из первых можно привести обзоры композитов с металлической матрицей, армированных УНТ, авторов [Bakshi, Lahiri, Agarwal, 2010; Hu et al., 2016], в которых говорится о композитах с металлической матрицей, армированных графеном. Металлические композиты, армированные УНТ, состоят из углеродных нанотрубок, интегрированных в металлическую матрицу, такую как алюминий, медь или никель [Jozwik, Polkowski, Wojar, 2015; Jong et al., 2019; Vardanyan, Urbassek, 2020; Zhigao et al., 2020; Шейнерман, 2022; Янковская, Шарапова, Захаров, 2022]. Системы алюминидов титана и алюминидов никеля привлекают внимание большого количества исследователей в области материаловедения. Например, в работе [Biswas et al., 2002] изучалось поведение горения NiAl в режиме теплового взрыва и показано, что этот композит предпочтителен в использовании в авиационной промышленности. Ni₃Al и NiAl — два важных алюминиды, которые встречаются в системе «никель – алюминий». Ni₃Al в последнее время привлёк значительное внимание в качестве возможного композита из-за его возможности сохранять свою прочность при высоких температурах.

УНТ в качестве армирования композитов на основе металлической матрицы (например, Cu, Al или Ni) являются одним из ключевых направлений современных исследований. В работах [Fu et al., 2018; Jiang et al., 2018; Ameri, Sadeghian, Kazeminezhad, 2016; Huang et al., 2017; Bor et al., 2018; Cha et al., 2005; Kim et al., 2013; Xiong et al., 2015; Zhang, Zhan, 2016; Chen et al., 2016; George et al., 2005; He et al., 2009; Kwon et al., 2009] авторами было показано, что добавление небольшого количества (различный процент объемной доли) углеродных наноматериалов значительно улучшает механические свойства композитов с металлической матрицей. Выделено, что прочные армирующие наноструктуры будут нести часть нагрузки на композиты и увеличивать эффективные модули упругости. Экспериментально показано, что взаимодействие углеродных наночастиц с дефектами металлической матрицы могут препятствовать зарождению трещин [Chen et al., 2015]. В работе [Kim et al., 2013] показано, что внедренные УНТ накладывают сильные ограничения на движение дислокаций, что потенциально увеличит предел текучести, прочность на излом и ударную вязкость. Авторами рассмотрено, что вначале разрушается металлическая матрица, УНТ действует как «мостики», который препятствует росту трещин в результате растягивающей деформации. Далее происходит разрушение стенок УНТ.

В работе [Park et al., 2015] приведено экспериментальное исследование испытаний на растяжение композита Al-УНТ, в результате которого было показано, что увеличение объемной доли УНТ значительно повышает прочность композита на разрушение (рис. 1).

Согласно работам [Zhou et al., 2017; Nayat et al., 2019] для синтеза нанокompозитов с металлической матрицей, армированных УНТ, разработаны различные производственные процессы, в результате которых можно столкнуться с рядом проблем, таких как распределение графена в металлических матрицах, агломерация графена, образование плохой межфазной связи между некоторыми металлическими матрицами и графеном, а также предпочтительная ориентация графена в некоторых производственных процессах.

Для изучения этих вопросов экспериментальным путем требуется длительный экспериментальный период и дорогостоящее оборудование. В этом случае атомистическое моделирование является одним из основных методов исследования структурных свойств композитов и наноструктур.

2. Методы моделирования композитов, армированных УНТ

Моделирование играет ключевую роль в разработке и оптимизации композиционных материалов, армированных углеродными нанотрубками. Цель моделирования состоит в том, чтобы

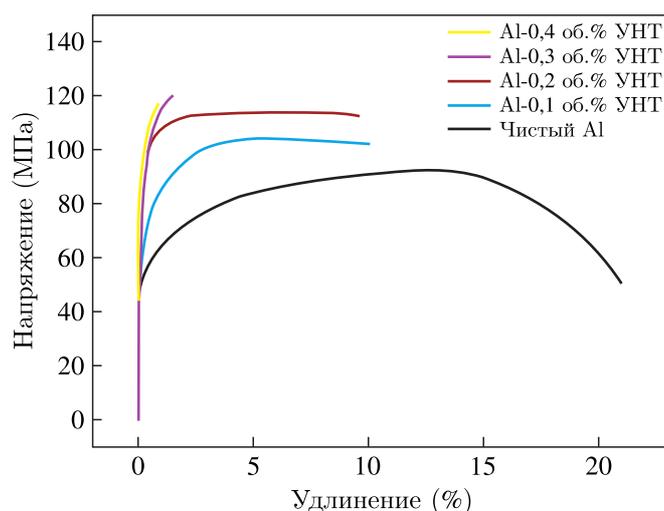


Рис. 1. Кривые напряжения/деформации при растяжении композитов Al и Al-УНТ при различных объемах включенных в композит углеродных нанотрубок

обеспечить понимание и контроль над свойствами композитов на наноуровне, что позволит создавать материалы с оптимальными характеристиками для конкретных приложений.

Моделирование помогает определить оптимальные концентрации и распределения нанотрубок в композите, а также способы их интеграции с другими материалами. Это позволяет создавать композиты с высокой прочностью, коррозионной стойкостью, электропроводностью, теплопроводностью и другими желаемыми свойствами.

Метод конечных элементов

Моделирование методом конечных элементов (FEM) является одним из распространенных методов для анализа композитов [Liu, Lomov, Gorbatikh, 2020]. FEM позволяет моделировать макроскопические свойства и поведение композитов на уровне изделия, что важно для проектирования и оптимизации конструкций [Риб и др., 2015].

FEM использует дискретизацию области на конечные элементы, которые представляют собой упрощенные модели реальной структуры. Элементы соединяются в узлах, которые имеют общие координаты и силы. Затем FEM решает систему уравнений, описывающих поведение элементов и узлов, чтобы получить информацию о распределении напряжений, деформаций и других параметров в композите [Коршунов и др., 2020; Галанин и др., 2007].

Преимущества использования FEM для анализа композитов включают возможность моделирования сложных структур, высокую точность результатов, возможность учета различных факторов (например, температуры, влажности, нагрузок), а также возможность оптимизации конструкции путем изменения свойств материалов или геометрии.

Тем не менее FEM также имеет некоторые ограничения, такие как высокие требования к вычислительным ресурсам и сложность настройки модели.

Метод градиентного спуска

Метод градиентного спуска — это итеративный метод оптимизации функции, который заключается в движении из начальной точки в направлении антиградиента функции.

Атомистическое моделирование методом градиентного спуска используется для оптимизации структуры материалов на атомном уровне. Этот метод позволяет найти конфигурацию атомов, соответствующую минимуму потенциальной энергии системы [Лурье, Соляев, 2014].

Суть метода заключается в следующем: сначала вычисляется градиент потенциальной энергии системы, т. е. вектор, указывающий направление наибольшего увеличения энергии. Затем система слегка изменяется в противоположном направлении, и процесс повторяется до тех пор, пока не будет достигнута минимальная энергия.

Метод молекулярной статики

Метод молекулярной статики используется для расчета свойств веществ на основе положений классической механики. Этот метод позволяет определить энергию, импульс, момент импульса и другие характеристики молекул и их взаимодействий. Он основан на решении уравнений движения молекул и их взаимодействия, а также на использовании законов сохранения энергии, импульса и момента импульса. Основными преимуществами метода молекулярной статики являются его точность и возможность получения детальной информации о свойствах молекул и их взаимодействиях [Брюханов, Городцов, Лисовенко, 2019]. Однако этот метод требует значительных вычислительных ресурсов и не всегда может быть применим для систем с большим числом частиц.

Метод Монте-Карло

Атомистическое моделирование методом Монте-Карло используется для исследования свойств веществ на атомном уровне. Этот метод основан на статистическом моделировании поведения атомов и молекул в системе.

Процесс моделирования начинается с задания начальных условий, таких как температура, давление и состав системы. Затем генерируются случайные позиции и скорости атомов, которые соответствуют заданным условиям. После этого атомы начинают двигаться в соответствии с законами классической механики, а их траектории отслеживаются до тех пор, пока они не покинут систему [Sdobnyakov et al., 2019; Тюрин, Чистякова, 2009].

Основной особенностью метода Монте-Карло является то, что он позволяет моделировать системы с большим количеством частиц, что делает его особенно полезным для изучения свойств конденсированных сред, таких как жидкости и твердые тела. Кроме того, метод Монте-Карло позволяет учитывать квантовые эффекты, такие как туннелирование и интерференция. Атомистическое моделирование методом Монте-Карло имеет свои ограничения и недостатки, которые важно учитывать при его применении. К ним относятся значительные вычислительные ресурсы, особенно для сложных моделей с большим количеством переменных [Pestana et al., 2023]; чувствительность к предположениям, сделанным в модели; метод Монте-Карло не всегда подходит для малых наборов данных [Kwan et al., 2023].

Чаще встречается комбинация метода Монте-Карло и метода молекулярной динамики.

Метод молекулярной динамики

Молекулярно-динамическое моделирование (МДМ) — это метод, используемый для изучения поведения и свойств материалов на молекулярном уровне при различных условиях, таких как температура, давление и химическое воздействие. Этот метод основан на использовании уравнений движения для каждой молекулы в системе и решении их численно с использованием компьютера.

МДМ позволяет предсказывать механические, термические и электрические свойства материалов на атомном уровне. Например, МДМ может помочь определить оптимальные концентрации нанотрубок в композитном материале, их распределение и взаимодействие с другими компонентами [Zhigao et al., 2020; Pedrielli et al., 2023; Huang et al., 2021; Heo et al., 2020; Gaikwad et al., 2022]. Это важно для создания композитов с определенными свойствами, такими как высокая прочность, коррозионная стойкость и электропроводность.

Метод молекулярной динамики активно используется в качестве метода предсказания поведения композитов под различными условиями эксплуатации. Моделирование позволяет оценить, как материал будет вести себя при высоких температурах, механических нагрузках и воздействии агрессивных сред [Yankovskaya et al., 2023].

Для осуществления моделирования широко используется высокопроизводительный вычислительный кластер и соответствующее программное обеспечение — открытый программный пакет для решения задач молекулярной динамики (LAMMPS) [Plimpton, Thompson, 2012]. Взаимодействие между каждым атомом в любой момент времени рассчитывается через потенциальную функцию, расчет скорости и координаты атомов производится через классическую механику Ньютона.

Одним из основных преимуществ МД-моделирования является возможность наблюдения микроскопических деталей эволюции системы с помощью метода визуализации, которые трудно наблюдать в натурном эксперименте. В настоящее время существует несколько методов анализа структуры материала: метод радиальной функции распределения [Yu et al., 2012], который позволяет находить относительную частоту тех или иных межатомных расстояний в веществе при данных условиях; метод координационного числа [Chen et al., 2011]; метод анализа ближайших соседей [Trautt et al., 2012]. Для визуализации и анализа наноструктур в основном применяется АТОМЕУЕ [Sansoz, Molinari, 2005], VMD [Pan et al., 1996] и OVITO [Aider, Wainwright, 1957].

Важно отметить, что МДМ требует значительных вычислительных ресурсов и может быть сложным в использовании. Однако с развитием технологий и программного обеспечения этот метод становится все более доступным и точным. В данной работе метод молекулярной динамики рассматривается как инструмент для разработки и оптимизации композитных материалов, армированных углеродными нанотрубками.

3. Принципы МД-моделирования композитов с металлической матрицей, армированных УНТ

Потенциалы взаимодействия

При атомистическом моделировании используются потенциалы взаимодействия для описания энергии и взаимодействия между атомами в системе. Эти потенциалы играют важную роль в атомистических симуляциях, позволяя исследовать свойства материалов на микроскопическом уровне.

На обеспечение достоверности результатов влияет выбор потенциалов межатомного взаимодействия. Далее представлены несколько общих потенциальных функций, используемых в композитах с металлической матрицей, армированных углеродными наноматериалами. В данном случае полная энергия композитов с металлической матрицей, армированной углеродными наноматериалами, обычно состоит из трех частей:

$$E_{total} = E_{M-M} + E_{C-C} + E_{M-C}, \quad (1)$$

где E_{M-M} и E_{C-C} описывают потенциальные энергии металлической матрицы и углеродных наноматериалов соответственно, а E_{M-C} — взаимодействие между атомами металла и углерода [Xing et al., 2021].

Метод погруженного атома (EAM) хорошо описывает взаимодействия между атомами металла в композите [Daw, Baskes, 1984]. В данном случае полная энергия металлической матрицы

композита может быть выражена следующим образом:

$$E^{EAM} = \sum_i F(\rho_i) + \frac{1}{2} \sum_{i,j (i \neq j)} \varphi_{ij}(R_{ij}), \quad (2)$$

$$\rho_i = \sum_{i,j (i \neq j)} f(r_{ij}),$$

где φ_{ij} — центральный потенциал двух тел, R_{ij} — расстояние между различными атомами i и j , $F(\rho_i)$ представляет собой внедренную энергию, а ρ_i — плотность электронного облака i -го атома.

Потенциал Морзе также подходит для описания взаимодействия между атомами металла в композите. В этом случае полная энергия металлической матрицы композита выражается следующим образом:

$$E^{Morse} = D_0 \left[e^{-2\alpha(r_{ij}-r_0)} - 2e^{-\alpha(r_{ij}-r_0)} \right], \quad (3)$$

где D_0 и α — глубина и ширина потенциальной ямы соответственно, r_0 — межатомное расстояние в равновесном состоянии [Dandekar, Shin, 2011].

Взаимодействие типа «углерод – углерод» чаще всего описывается потенциалом адаптивного межмолекулярного реактивного эмпирического порядка связей (AIREBO) [Stuart, Tutein, Harrison, 2000]. Данный потенциал состоит из трех элементов: потенциала реактивного эмпирического порядка связи (REBO), потенциала Леннарда – Джонса (LJ) и торсионного взаимодействия:

$$E^{AIREBO} = \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} \left[E_{ij}^{REBO} + E_{ij}^{LJ} + \sum_{k \neq i,j} \sum_{l \neq i,j,k} E_{kijl}^{TORSION} \right], \quad (4)$$

где E^{REBO} — потенциал реактивного эмпирического порядка связи, E^{LJ} — потенциал Леннарда – Джонса, $E^{TORSION}$ — потенциал торсионного взаимодействия.

Три члена в правой части описывают силы ковалентной связи, межмолекулярное взаимодействие и эффект двугранного угла соответственно.

При моделировании композитов, армированных углеродными нанотрубками, используются различные парные потенциалы взаимодействия для описания взаимодействия между УНТ и матрицей композита. В контексте исследования, проведенного в статье [Gaikwad et al., 2022], были проведены молекулярно-динамические исследования взаимодействия между углеродной нанотрубкой и матрицей композита. Хотя конкретные парные потенциалы взаимодействия не были упомянуты в данном контексте, можно предположить, что для моделирования взаимодействия между УНТ и матрицей композита могли использоваться различные эмпирические потенциалы взаимодействия, такие как потенциал Леннарда – Джонса, который широко используется для изучения наноразмерных структур, и полученные результаты хорошо совпадают с экспериментом [Zhang et al., 2020; Sidorenkov, Kolesnikov, Saletsky, 2016; Tsai, Jeng, 2019]:

$$E = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] r < r_c, \quad (5)$$

где ε — глубина потенциальной ямы, σ — расстояние, на котором межатомный потенциал равен нулю, r — расстояние между парой атомов.

Взаимодействия между атомами металла и атомами углерода также можно описать полем реактивной силы ReaxFF [Nielson et al., 2005]. Силовое поле ReaxFF часто используется, поскольку оно было проверено и протестировано на различных аллотропных формах углерода и может моделировать взаимодействия между несколькими атомами металлов, таких как Ni, и атомами углерода, что было успешно продемонстрировано в работах [Bejagam, Singh, Deshmukh, 2018; Zhang et al., 2017].

Моделирование взаимодействия между углеродными нанотрубками и матрицей композита с металлической матрицей представляет собой сложную задачу, поскольку это взаимодействие оказывает существенное влияние на механические, тепловые и электрические свойства нанокompозита. Взаимодействие между УНТ и металлической матрицей влияет на передачу нагрузки от матрицы к углеродной нанотрубке, что является ключевым фактором для определения эффективности усиления композита УНТ [Balandin, 2011; Nasiri, Zaiser, 2016].

4. Применение МДМ при изучении механических свойств композитов с металлической матрицей, армированных УНТ

Объемная доля, диаметр и размер УНТ, а также их пространственная ориентация в металломатричных композитах оказывают большое влияние на механические свойства композитов.

Влияние размера УНТ на механические свойства

Если рассматривать влияние размера углеродных нанотрубок на механические свойства композитов, то исследователи [Choi, Yoon, Lee, 2016; Park et al., 2018; Xiang et al., 2017] сравнили механизмы разрушения алюминиевых матриц, армированных короткими и длинными УНТ (рис. 2).

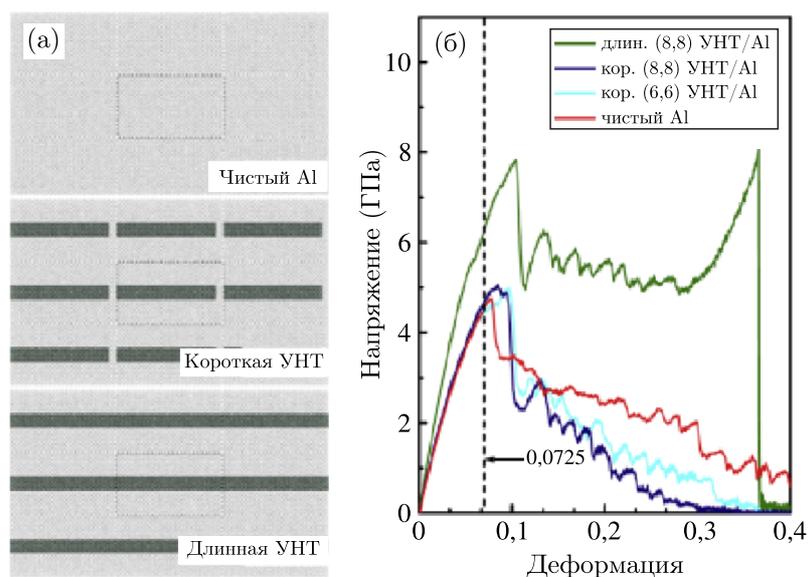


Рис. 2. Растяжение композита Al-CNT с использованием МД-моделирования: а) молекулярные модели чистого Al, армированного короткими УНТ, армированного длинными УНТ; и б) кривые напряжения – деформации при растяжении матричных композитов из чистого Al и Al, армированных короткими УНТ (8,8) (синий цвет), короткими УНТ (6,6) (голубой цвет) и длинными УНТ (8,8) (зеленый цвет) соответственно

В работе [Xiang et al., 2017] периодические граничные условия применялись во всех направлениях, а испытания на одноосное растяжение проводилось путем растяжения модели в направлении нагружения с постоянной скоростью деформации. Морфология разрушения композита, армированного длинными УНТ, характеризовалась авторами как пластическое разрушение УНТ и Al-матрицы, тогда как в случае армирования короткими УНТ разрушение свидетельствовало о выдергивании УНТ и разрыве Al-матрицы. Исследователи пришли к выводу, что добавление длинных (непрерывных) армирующих УНТ или коротких (прерывистых) УНТ для длин, превышающих критическую длину в матрице Al, действительно способствует усилению

механических свойств композита. При создании модели композита с длинными УНТ они рассматривали расположение УНТ в направлении нагрузки. Это означает, что длинные УНТ были зафиксированы на границах куба, рядом с окружающими их атомами Al, и растягиваются за счет постоянного смещения при одноосном растяжении. В этом случае получено, что УНТ не могут скользить (выдвигаться) внутри металлической матрицы и в конечном итоге разрушаются при деформации разрушения. Что касается моделирования одноосного разрушения композита Al-УНТ, армированного короткими углеродными нанотрубками (рассмотренного в той же работе [Xiang et al., 2017], то, как показано авторами, короткие УНТ вытягиваются и легко скользят по границе раздела композита Al-УНТ.

В представленной авторами модели взаимодействия между атомами Al и углерода определяются как несвязанные силы Ван-дер-Ваальса с помощью потенциала Морзе. Следовательно, короткие УНТ не прикреплены к окружающим их атомам Al ни сильными химическими связями на границе раздела и не зафиксированы в пограничных слоях. Как предположено авторами [Nasiri et al., 2020], единственная связь между Al и УНТ в этой модели — это слабые физические взаимодействия, которые исчезнут при сдвиговом напряжении менее 20 МПа. Поэтому короткие УНТ, какой бы длины они ни были, начинают скользить внутри матрицы и вытягиваться, как только матрица разрывается, и в конечном итоге не оказывают армирующего эффекта на матрицу Al.

Влияние объемной доли УНТ на механические свойства

В работе [Yan, Lei, Liu, 2018] показаны влияние объемной доли УНТ на механические свойства, поведение напряжения и деформации композитами с медной матрицей, армированных одностенных УНТ. По сравнению с чистой медью модуль Юнга и предел текучести ОУНТ/Cu (8,6 об. % ОУНТ) увеличиваются на 33,92 % (с 163,39 до 218,81 ГПа) и 20,68 % (с 8,77 до 10,58 ГПа) соответственно. Даже при небольшом количестве (0,075 об. %) ОУНТ для композита ОУНТ/Cu механические свойства можно значительно улучшить (~ 10–30 %).

Авторы работы [Pal et al., 2020] исследовали влияние объемной доли на композиты ОУНТ/Al (0–0,4 об. %), и были получены аналогичные выводы. Модуль Юнга, а также предел текучести композитов ОУНТ/Al увеличиваются с увеличением объемной доли УНТ от 0 до 0,4 об. %. Для 9 об. % ОУНТ/Al модуль Юнга композита может быть увеличен на 77 % по сравнению с чистым Al.

Для изучения композита Pt-УНТ авторами [Yankovskaya et al., 2023] были созданы модели, приведенные на рис. 3.

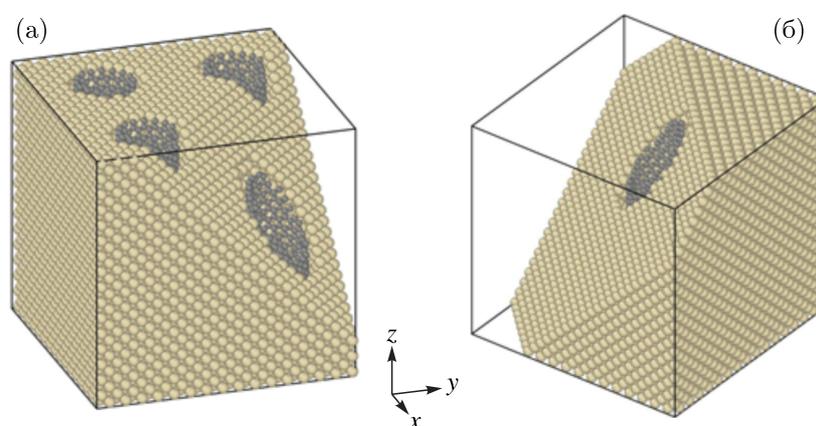


Рис. 3. Фрагмент модели кристалла Pt, усиленного УНТ: а) четыре УНТ в модельном блоке; б) модель с одной УНТ

На рис. 4 приведены результаты исследования механических свойств композита Pt-УНТ, где объемная доля УНТ варьировалась количеством углеродных нанотрубок. Механические свойства изучались под растягивающей и сжимающей нагрузкой. В [Yankovaskaya et al., 2023] получили, что внедрение 7,05 % объемной доли УНТ приводит к увеличению модуля упругости порядка 60 %.

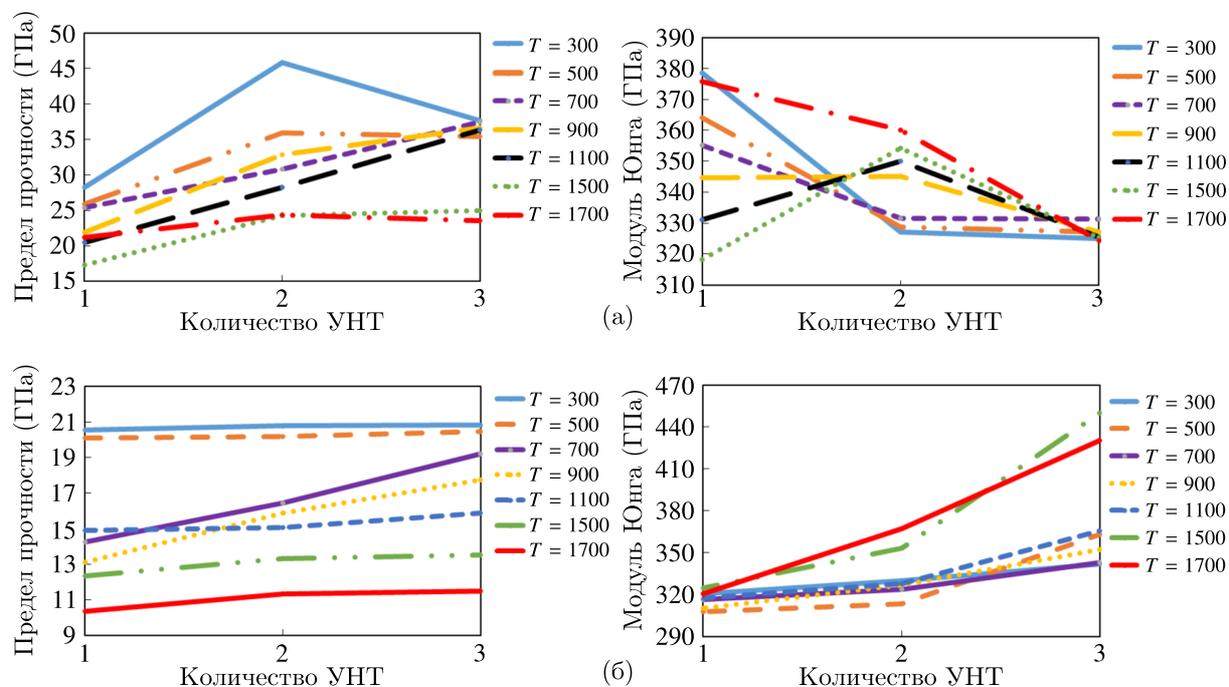


Рис. 4. Механические свойства (модуль Юнга и предел прочности) композита Pt-CNT с различным количеством УНТ (1, 2 и 3): а) сжимающая нагрузка; б) растягивающая нагрузка при различных температурах

Объемная доля УНТ в композите может быть представлена не только различным количеством одностенных УНТ, но и за счет увеличения количества трубчатых слоев. Согласно расчетам, приведенным в [Yan, Lei, Liu, 2018], модуль Юнга и предел текучести ДУНТ/Cu на 33,99 и 71,55 % выше, чем ОСУНТ/Cu. Для TWCNT/Cu улучшение этих двух показателей производительности составляет 72,3 и 172,68 %. По мере увеличения количества слоев прочность и площадь внешней поверхности УНТ увеличиваются, УНТ в композите могут выдерживать большее напряжение, передаваемое от металлической матрицы.

Влияние диаметра УНТ на механические свойства композита

Диаметр УНТ в металломатричных композитах, например Pt-УНТ, Ni₃Al-УНТ, является важным фактором, влияющим на механические свойства.

В работе [Choi, Yoon, Lee, 2016] авторами обнаружено, что модуль Юнга композитов, армированных углеродными нанотрубками типа «кресло» с хиральными индексами (4,4), (6,6) и (8,8), при растягивающей нагрузке увеличился на 31, 33 и 39 % соответственно по сравнению с чистым алюминием.

В работе [Patel, Sharma, Tiwari, 2020] при исследовании модуля сдвига композита Al-УНТ с различными диаметрами УНТ было обнаружено, что существует оптимальный диаметр для модуля сдвига композитов. По приведенным данным, оптимальный диаметр составляет 8,14 Å. Авторы считают, что, когда диаметр УНТ меньше приведенного значения, внедрение УНТ не способствует выполнению армирования композита. Если диаметр больше, это снижает устойчивость и приводит к нестабильности композита при деформации.

В работе [Yankovskaya et al., 2023] рассматривалось влияние диаметра УНТ на механические свойства композита Pt-УНТ. В таблице 1 один приведен результат этих измерений при сжимающей нагрузке.

Таблица 1. Результаты расчета механических свойств композита Pt-CNT при одноосном сжатии [Yankovskaya et al., 2023]

Диаметр УНТ (Å)	T (K)	Модуль Юнга (ГПа)	Прочностное напряжение (ГПа)	Деформация разрушения (%)
6,63	300	305,12	47,23	0,11
	500	308,14	46,10	0,10
	700	312,56	41,60	0,10
	900	314,21	37,16	0,10
	1100	309,57	29,67	0,09
	1500	313,25	29,28	0,07
9,93	300	327,12	45,85	0,11
	500	328,63	35,94	0,09
	700	331,52	30,79	0,08
	900	345,12	32,81	0,09
	1100	350,12	28,29	0,08
	1500	354,23	24,27	0,07
13,24	300	325,08	37,66	0,10
	500	327,18	35,38	0,10
	700	331,40	37,49	0,11
	900	327,18	36,60	0,11
	1100	325,52	36,30	0,11
	1500	325,19	24,95	0,08
16,55	300	378,62	28,26	0,09
	500	364,13	25,88	0,08
	700	355,11	25,45	0,08
	900	344,55	21,92	0,07
	1100	331,02	20,48	0,07
	1500	318,14	17,31	0,06

Авторами отмечено, что рост значений модуля Юнга в зависимости от температуры для всех диаметров составляет 3,5–3,7%. Получено, что максимальные значения модуля упругости наблюдается при диаметре 9,93 Å, предел прочности композита Pt-УНТ с меньшим диаметром нанотрубки на 23,6% выше, чем у композита с УНТ большего диаметра.

Влияние пространственной ориентации УНТ на механические свойства композита

При изготовлении композитов, в частности с металлической матрицей, УНТ располагаются хаотично. Парк и др. [Park et al., 2018] обнаружили, что ориентация УНТ может, очевидно, влиять на предел прочности по сравнению с ориентацией чистого Al, но незначительно влиять на модуль Юнга. Для изучения влияния угла наклона углеродных нанотрубок рассмотрены молекулярные имитационные модели композита УНТ-Al с различными углами наклона УНТ. Нагрузка применена вдоль оси Z . Показано, что углеродные нанотрубки, расположенные параллельно направлению нагрузки, имеют лучший эффект армирования.

На рис. 5 [Park et al., 2018] показаны кривые растяжения с разной степенью наклона УНТ (0° , 10° , 20° , 30° и 40°).

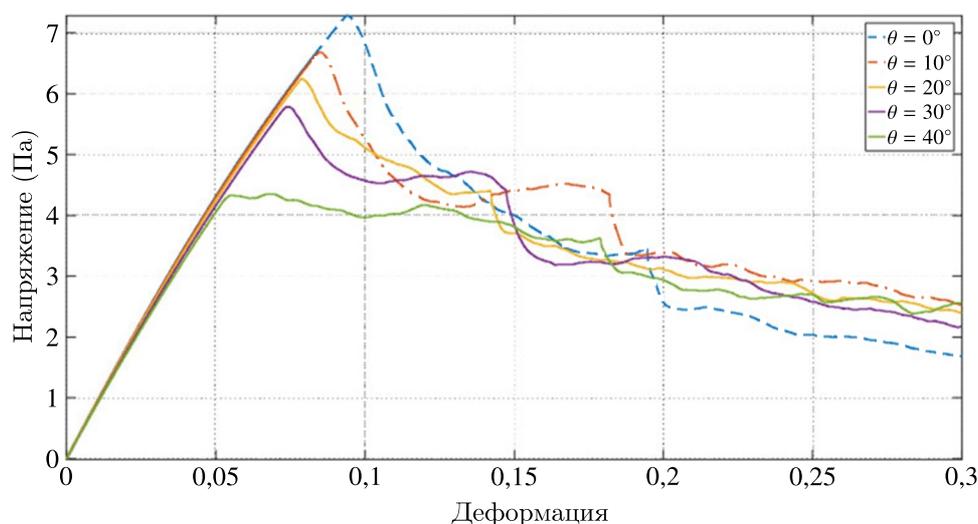


Рис. 5. Кривые измерения напряжения/деформации композита (6,6) УНТ-Ал с различными углами наклона (θ) УНТ

В работе указывается, что с увеличением угла наклона УНТ предел прочности резко снижается с 7,3 до 4,3 ГПа. Для наклонных УНТ прочность снижается из-за скольжения границ раздела и сужения Ал-матрицы. Однако в упругой области формы кривых растяжения до деформации 0,05 практически одинаковы, что соответствует тому же модулю Юнга 86 ГПа. Авторами сделан вывод, что ориентация УНТ в наименьшей степени влияет на изменения модуля Юнга, но существенно влияет на предел прочности.

5. Заключение

Из проведенного обзора исследований и разработок в области моделирования углеродных нанотрубок (УНТ) и их композитов можно выделить несколько ключевых выводов.

Методы моделирования. В исследованиях были представлены различные методы моделирования, такие как молекулярно-структурная механика, метод конечных элементов и молекулярно-динамический метод. Эти методы позволяют анализировать статические и динамические свойства УНТ и их композитов, а также изучать тепловые свойства нанотрубок и композитов.

Применение в композитах. Углеродные нанотрубки нашли широкое применение в композитах, таких как полимерные материалы, цементные материалы и другие инженерные материалы. Исследования показали, что добавление УНТ значительно улучшает механические и функциональные свойства композитов, такие как усиление, улучшение электрических и тепловых свойств.

Моделирование в различных отраслях. Моделирование композитов, армированных УНТ, применяется в различных областях, включая авиацию, автомобилестроение, электронику, энергетику и строительство. Это свидетельствует о широких перспективах применения УНТ и их композитов в различных отраслях промышленности.

Вызовы и перспективы. Несмотря на перспективы применения УНТ и их композитов, существуют вызовы, такие как разработка точных моделей взаимодействия между УНТ и матрицей, увеличение производства УНТ и снижение их стоимости, а также разработка методов выравнивания и равномерного распределения УНТ в матрице. Решение этих вызовов позволит расширить область применения УНТ и их композитов.

Таким образом, моделирование композитов, армированных углеродными нанотрубками, представляет собой активно развивающуюся область исследований с широким спектром применения и перспективами для улучшения свойств инженерных материалов.

В данном обзоре рассмотрены механические характеристики композитов с металлической матрицей, армированных УНТ. По сути, УНТ обладают превосходными химическими и физическими свойствами, которые делают их идеальными и перспективными армирующими элементами в металломатричных композитах. На основании существующих исследований было признано, что на механические свойства композит-УНТ влияют взаимодействия между наноструктурами и металлическими матрицами. Исследователи придумали различные методы распределения и ориентации УНТ. На механические свойства композитов влияют несколько аспектов, таких как объемная доля УНТ, диаметр, пространственное распределение и ориентация. Важной задачей является поиск оптимального баланса между этими параметрами.

Список литературы (References)

- Бадамишина Э. Р., Эстрин Я. И., Кулагина Г. С., Лурье С. А., Соляев Ю. О. Моделирование аномальных механических свойств полиуретана, модифицированного углеродными однослойными нанотрубками // Механика композиционных материалов и конструкций. — 2010. — Т. 16, № 4. — С. 551–562.
- Badamshina E. R., Estrin Ya. I., Kulagina G. S., Lurie S. A., Solyaev Yu. O. Modelirovanie anomal'nykh mekhanicheskikh svoystv poliuretana, modifitsirovannogo uglevodnymi odnosloynymi nanotrubkami [Modeling of anomalous mechanical properties of polyurethane modified with single-walled carbon nanotubes] // Mekhanika kompozitsionnykh materialov i konstruksii. — 2010. — Vol. 16, No. 4. — P. 551–562 (in Russian).*
- Брюханов И. А., Городцов В. А., Лисовенко Д. С. Атомистическое моделирование механических свойств хиральных металлических нанотрубок // Физическая мезомеханика. — 2019. — Т. 22, № 6. — С. 48–57.
- Bryukhanov I. A., Gorodtsov V. A., Lisovenko D. S. Atomisticheskoe modelirovanie mekhanicheskikh svoystv khiral'nykh metallicheskh nanotrubok [Atomistic modeling of the mechanical properties of chiral metal nanotubes] // Fizicheskaya mezomekhanika. — 2019. — Vol. 22, No. 6. — P. 48–57 (in Russian).*
- Галанин М. П., Савенков Е. Б., Темис Ю. М., Щеглов И. А., Яковлев Д. А. Применение метода конечных суперэлементов для расчета характеристик дисперсно-армированных композиционных материалов // Вестник Московского государственного технического университета им. Н. Э. Баумана. Сер. Естественные науки. — 2007. — Т. 26, № 3. — С. 54–68.
- Galanin M. P., Savenkov E. B., Temis Yu. M., Shcheglov I. A., Yakovlev D. A. Primenenie metoda konechnykh superelementov dlya rascheta kharakteristik dispersno-armirovannykh kompozitsionnykh materialov [Application of the finite superelement method for calculating the characteristics of dispersed reinforced composite materials] // Herald of the Bauman Moscow State Technical University. Ser. Natural Sciences. — 2007. — Vol. 26, No. 3. — P. 54–68 (in Russian).*
- Зенкин М. И., Атапин А. А., Макаров Н. А. Композиционная керамика на основе корунда, армированная углеродными нанотрубками // Успехи в химии и химической технологии. — 2019. — Т. 33, № 4 (214). — С. 78–80.
- Zenkin M. I., Atapin A. A., Makarov N. A. Kompozitsionnaya keramika na osnove korunda, armirovannaya uglevodnymi nanotrubkami [Corundum-based composite ceramics reinforced with carbon nanotubes] // Uspekhi v khimii i khimicheskoi tekhnologii. — 2019. — Vol. 33, No. 4 (214). — P. 78–80 (in Russian).*
- Коришунув В. А., Мудрик Р. С., Пономарев Д. А., Родионов А. А. Особенности применения метода конечных элементов для расчета судовых валопроводов из полимерных композиционных материалов // Труды Крыловского государственного научного центра. — 2020. — Спецвыпуск 2. — С. 113–118.
- Korshunov V. A., Mudrik R. S., Ponomarev D. A., Rodionov A. A. Osobennosti primeneniya metoda konechnykh elementov dlya rascheta sudovykh valoprovodov iz polimernykh kompozitsionnykh materialov [Features of the application of the finite element method for calculating ship shafting lines made of polymer composite materials] // Trudy Krylovskogo gosudarstvennogo nauchnogo tsentra. — 2020. — Special Issue 2. — P. 113–118 (in Russian).*
- Леонов А. А., Двилис Э. С., Хасанов О. Л., Пайгин В. Д., Калашников М. П., Петюкевич М. С., Панина А. А. Керамический композит на основе диоксида циркония, армированный одностенными углеродными нанотрубками // Российские нанотехнологии. — 2019. — № 14. — С. 32–38.

- Leonov A., Dvilis E., Khasanov O., Paygin V., Kalashnikov M., Petyukevich M., Panina A.* Keramicheskii kompozit na osnove dioksida tsirkoniya, armirovannyi odnostennymi uglerodnymi nanotrubkami [Ceramic composite based on zirconium dioxide, reinforced with single-walled carbon nanotubes] // Rossiiskie nanotekhnologii. — 2019. — No. 14. — P. 32–38 (in Russian).
- Лурье С. А., Соляев Ю. О.* Метод идентификации параметров градиентных моделей неоднородных структур с использованием дискретно-атомистического моделирования // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. — 2014. — № 3. — С. 89–112.
- Lurie S. A., Solyaev Yu. O.* Metod identifikatsii parametrov gradientnykh modelei neodnorodnykh struktur s ispol'zovaniem diskretno-atomisticheskogo modelirovaniya [Method for identifying parameters of gradient models of inhomogeneous structures using discrete atomistic modeling] // PNRPU Mechanics Bulletin. — 2014. — No. 3. — P. 89–112 (in Russian).
- Риб С. В., Волошин В. А., Фрянов В. Н., Максимов А. А., Борзых Д. М., Никитина А. М.* Численное моделирование методом конечных элементов напряженно-деформированного состояния углеродного массива при переходе очистным забоем передовой выработки // Горный информационно-аналитический бюллетень (научно-технический журнал). — 2015. — № 3. — С. 414–422.
- Rib S. V., Voloshin V. A., Fryanov V. N., Maksimov A. A., Borzykh D. M., Nikitina A. M.* Chislennoe modelirovanie metodom konechnykh elementov napryazhenno-deformirovannogo sostoyaniya uglerodnogo massiva pri perekhode ochistnym zaboom peredovoi vyrabotki [Numerical modeling by the finite element method of the stress-strain state of a coal rock mass during the transition to the working face advanced production] // Gornyi informatsionno-analiticheskii byulleten' (nauchno-tekhnicheskii zhurnal). — 2015. — No. 3. — P. 414–422 (in Russian).
- Тюрин Ю. И., Чистякова Н. В.* Имитационное моделирование диффузии атомов в кристаллической решетке методом Монте-Карло // Известия Томского политехнического университета. Инжиниринг георесурсов. — 2009. — Т. 314, № 2. — С. 135–137.
- Tyurin Yu. I., Chistyakova N. V.* Imitatsionnoe modelirovanie diffuzii atomov v kristallicheskoj reshetke metodom Monte-Karlo [Simulation modeling of the diffusion of atoms in a crystal lattice using the Monte Carlo method] // Bulletin of the Tomsk Polytechnic University. Geo Assets Engineering. — 2009. — Vol. 314, No. 2. — P. 135–137 (in Russian).
- Федосова Н. А., Кольцова Э. М., Попова Н. А., Жариков Е. В., Лукин Е. С.* Керамоматричные композиты, армированные углеродными нанотрубками: искровое плазменное спекание, моделирование, оптимизация // Новые огнеупоры. — 2015. — № 12. — С. 13–17.
- Fedosova N. A., Koltsova E. M., Popova N. A., Zharikov E. V., Lukin E. S.* Keramomatrichniye kompozity, armirovannyye uglerodnymi nanotrubkami: iskrovoe plazmennoe spekanie, modelirovanie, optimizatsiya [Ceramic matrix composites reinforced with carbon nanotubes: spark plasma sintering, modeling, optimization] // Novye огнеупоры. — 2015. — No. 12. — P. 13–17 (in Russian).
- Шейнерман А. Г.* Механические свойства металломатричных композитов с графеном и углеродными нанотрубками // Физика металлов и металловедение. — 2022. — Т. 123, № 1. — С. 63–92.
- Sheinerman A. G.* Mekhanicheskie svoistva metallomatrichnykh kompozitov s grafenom i uglerodnymi nanotrubkami [Mechanical properties of metal matrix composites with graphene and carbon nanotubes] // Physics of Metals and Metallography. — 2022. — Vol. 123, No. 1. — P. 63–92 (in Russian).
- Янковская У. И., Шарاپова Ю. Р., Захаров П. В.* Влияние углеродных нанотрубок на механические свойства поликристалла Ni₃Al // Materials. Technologies. Design. — 2022. — Т. 4, № 4 (10). — P. 76–81.
- Yankovskaya U. I., Sharapova Yu. R., Zakharov P. V.* Vliyanie uglerodnykh nanotrubok na mekhanicheskie svoistva polikristalla Ni₃Al [The influence of carbon nanotubes on the mechanical properties of Ni₃Al polycrystal] // Materials. Technologies. Design. — 2022. — Vol. 4, No. 4 (10). — P. 76–81 (in Russian).
- Aider B. J., Wainwright T. E.* Phase transition for a hard sphere system // J. Chem. Phys. — 1957. — Vol. 27, No. 5. — P. 1208–1209.
- Ameri S., Sadeghian W., Kazeminezhad I.* Effect of CNT addition approach on the microstructure and properties of NiAl-CNT nanocomposites produced by mechanical alloying and spark plasma sintering // Intermetallics. — 2016. — Vol. 76. — P. 41–48.
- Arash B., Wang Q., Varadan V.* Mechanical properties of carbon nanotube/polymer composites // Sci. Rep. — 2014. — No. 4. — P. 6479.
- Bakshi S. R., Lahiri D., Agarwal A.* Carbon nanotube reinforced metal matrix composites — a review // International Materials Reviews. — 2010. — Vol. 55, No. 1. — P. 41–64.
- Balandin A. A.* Thermal properties of graphene and nanostructured carbon materials // Nature materials. — 2011. — Vol. 10, No. 8. — P. 569.

- Bejagam K. K., Singh S., Deshmukh S. A.* Nanoparticle activated and directed assembly of graphene into a nanoscroll // *Carbon*. — 2018. — Vol. 134. — P. 43–52.
- Biswas A., Roy S. K., Gurumurthy K. R., Prabhu N., Banerjee S.* A study of self-propagating high-temperature synthesis of NiAl in thermal explosion mode // *Acta Materialia*. — 2002. — Vol. 50, No. 4. — P. 757–773.
- Bor A., Ichinkhorloo B., Uyanga B., Lee J., Choi H.* Cu/CNT nanocomposite fabrication with different raw material properties using a planetary ball milling process // *Powder Technology*. — 2018. — Vol. 323. — P. 563–573.
- Bulmer J. S., Kaniyoor A., Elliott J. A.* A meta-analysis of conductive and strong carbon nanotube materials // *Adv. Mater.* — 2021. — No. 33. — P. 2008432.
- Cha S. I., Kim K. T., Arshad S. N., Mo C. B., Hong S. H.* Extraordinary strengthening effect of carbon nanotubes in metal-matrix nanocomposites processed by molecular-level mixing // *Adv. Mater.* — 2005. — Vol. 17. — P. 1377.
- Chen B., Kondoh K., Imai H., Umeda J., Takahashi M.* Simultaneously enhancing strength and ductility of carbon nanotube/aluminum composites by improving bonding conditions // *Scr. Mater.* — 2016. — Vol. 113. — P. 158–162.
- Chen B., Li S., Imai H., Jia L., Umeda J., Takahashi M., Kondoh K.* Load transfer strengthening in carbon nanotubes reinforced metal matrix composites via in-situ tensile tests // *Composites Science and Technology*. — 2015. — Vol. 113. — P. 1–8.
- Chen J. L., Hsieh J. Y., Chang J.-G., Lin H.-Ch., Chiang H.-J., Huang H.-K., Hwang Ch.-Ch.* Molecular dynamical investigation on dislocation near twist-grain boundary of Ni under compression // *J. Appl. Phys.* — 2011. — Vol. 110, No. 9. — P. 094315.
- Chen K., Wang L., Yin Y., Wang Q.* Molecular dynamics simulation of polycrystalline metal under high velocity nanoscale sliding // *Chemical Engineering Transactions*. — 2017. — Vol. 61. — P. 859–864.
- Choi B. K., Yoon G. H., Lee S.* Molecular dynamics studies of CNT-reinforced aluminum composites under uniaxial tensile loading // *Composites Part B: Engineering*. — 2016. — Vol. 91. — P. 119–125.
- Cuppoletti J.* Nanocomposites with unique properties and applications in medicine and industry. — Croatia: inTech, 2011.
- Dai L., Sun J.* Mechanical properties of carbon nanotubes-polymer composites // *Carbon Nanotubes — Current Progress of their Polymer Composites*. — InTech, 2016. — P. 20.
- Dandekar Ch. R., Shin Y. C.* Molecular dynamics based cohesive zone law for describing Al–SiC interface mechanics // *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing*. — 2011. — Vol. 42, No. 4. — P. 355–363.
- Daw M. S., Baskes M. I.* Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals // *Phys. Rev. B*. — 1984. — Vol. 29. — P. 6443.
- Drissi-Habti M., El Assami Y., Raman V.* Multiscale toughening of composites with carbon nanotubes — continuous multiscale reinforcement new concept // *J. Compos. Sci.* — 2021. — No. 5. — P. 135.
- El Assami Y., Drissi Habti M., Raman V.* Stiffening offshore composite wind-blades bonding joints by carbon nanotubes reinforced resin — a new concept // *Journal of Structural Integrity and Maintenance*. — 2020. — Vol. 5, No. 2. — P. 87–103.
- Fu K., Zhang X., Shi C., Liu E., He F., Li J., Zhao N., He Ch.* An approach for fabricating Ni@graphene reinforced nickel matrix composites with enhanced mechanical properties // *Materials Science and Engineering: A*. — 2018. — Vol. 715. — P. 108–116.
- Gaikwad S. P., Kowalik M., Jensen B. D., van Duin A., Odegard G. M.* Molecular dynamics modeling of interfacial interactions between flattened carbon nanotubes and amorphous carbon: implications for ultra-lightweight composites // *ACS Appl. Nano Mater.* — 2022. — Vol. 5, No. 4. — P. 5915–5924.

- George R., Kashyap K. T., Rahul R., Yamdogni S. Strengthening in carbon nanotube/aluminum (CNT/Al) composites // *Scr. Mater.* — 2005. — Vol. 53, No. 10. — P. 1159–1163.
- Hayat M. D., Singh H., He Zh., Cao P. Titanium metal matrix composites: An overview // *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing.* — 2019. — Vol. 121. — P. 418–438.
- He C. N., Zhao N. Q., Shi C. S., Song S. Z. Mechanical properties and microstructures of carbon nanotube-reinforced Al matrix composite fabricated by in situ chemical vapor deposition // *J. of Alloys Compd.* — 2009. — Vol. 487. — P. 258–262.
- Heo S. J., Kim K. H., Han B., Han G. C., Lee S. G. Defect structure evolution of polyacrylonitrile and single wall carbon nanotube nanocomposites: a molecular dynamics simulation approach // *Sci. Rep.* — 2020. — No. 10. — P. 11816.
- Hu Z., Tong G., Lin D., Chen C., Guo H., Xu J., Zhou L. Graphene-reinforced metal matrix nanocomposites — a review // *Materials Science and Technology.* — 2016. — Vol. 32, No. 9. — P. 930–953.
- Huang W., Pan K., Zhang J., Gong Y. Strain rate and temperature effects on tensile properties of polycrystalline Cu_6Sn_5 by molecular dynamic simulation // *Crystals.* — 2021. — Vol. 11, No. 11. — P. 1415.
- Huang Z., Zheng Z., Zhao S., Dong S., Luo P., Chen L. Copper matrix composites reinforced by aligned carbon nanotubes: mechanical and tribological properties // *Watching.* — 2017. — Vol. 133. — P. 570–578.
- Jiang J., He X., Du J., Pang X., Yang H., Wei Zh. In-situ fabrication of graphene-nickel matrix composites // *Feeds lightly.* — 2018. — Vol. 220. — P. 178–181.
- Jong G. P., Jeong-Gyun K., Kang P. S., Jun Y. H., Eun S. K., Ju L., Dongseok S., Young H. L. Anisotropic mechanical properties and strengthening mechanism in superaligned carbon nanotubes-reinforced aluminum // *Carbon.* — 2019. — Vol. 153. — P. 513–524.
- Jozwik P., Polkowski W., Bojar Z. Applications of Ni_3Al based intermetallic alloys — current stage and potential perceptivities // *Materials.* — 2015. — Vol. 8, No. 5. — P. 2537–2568.
- Kim Y., Lee J., Yeom M. S., Shin J. W., Kim H., Cui Y., Kysar J. W., Hone J., Jung Y., Jeon S., Han S. M. Strengthening effect of single-atomic-layer graphene in metal-graphene nanolayered composites // *Nature Communications.* — 2013. — Vol. 4. — P. 2114.
- Kwan V., Ballaney P., Titiksha T., Consta S. Limitations of atomistic modeling to reveal ejection of proteins from charged nanodroplets // 2023. — <https://doi.org/10.48550/arXiv.2303.00974>
- Kwon H., Estili M., Takagi K., Miyazaki T., Kawasaki A. Combination of hot extrusion and spark plasma sintering for producing carbon nanotube reinforced aluminum matrix composites // *Carbon.* — 2009. — Vol. 47, No. 3. — P. 570–577.
- Li C., Chou T.-W. Elastic moduli of multi-walled carbon nanotubes and the effect of van der Waals forces // *Composites Science and Technology.* — 2003. — No. 63. — P. 1517–1524.
- Liu Q., Lomov S. V., Gorbatikh L. Enhancing strength and toughness of hierarchical composites through optimization of position and orientation of nanotubes: a computational study // *Journal of Composites Science.* — 2020. — Vol. 4, No. 2. — P. 34.
- Malagù M., Lyulin A., Benvenuti E., Simone A. A molecular-dynamics study of size and chirality effects on glass-transition temperature and ordering in carbon nanotube-polymer composites // *Macromolecular Theory and Simulations.* — 2016. — Vol. 25, No. 6. — P. 571–581.
- Nasiri S., Greff C., Wang K., Yang M., Li Q., Moretti P., Zaiser M. Multilayer structures of graphene and pt nanoparticles: A multiscale computational study // *Advanced Engineering Materials.* — 2020. — P. 2000207.
- Nasiri S., Zaiser M. Rupture of graphene sheets with randomly distributed defects // *AIMS materials science.* — 2016. — Vol. 3, No. 4. — P. 1340–1349.

- Nielson K. D., van Duin A. C. T., Oxgaard J., Deng W.-Q., Goddard W. A.* Development of the ReaxFF reactive force field for describing transition metal catalyzed reactions, with application to the initial stages of the catalytic formation of carbon nanotubes // *J. Phys. Chem. A.* — 2005. — Vol. 109, No. 3. — P. 493–499.
- Norizan M. N., Abdullah N., Demon S. Z. N., Halim N. A., Azmi A. F. M., Knight V. F., Mohamad I. S.* The frontiers of functionalized graphene – Based nanocomposites as chemical sensors // *Nanotechnol. Rev.* — 2021. — No. 10. — P. 330–369.
- Pal S., Badu P. N., Gargeya B. S. K., Becquart C. S.* Molecular dynamics simulation based investigation of possible enhancement in strength and ductility of nanocrystalline aluminum by CNT reinforcement // *Mater. Chem. Phys.* — 2020. — Vol. 243. — P. 122593.
- Pan Y., Adams B. L., Olson T., Panayotou N.* Grain-boundary structure effects on intergranular stress corrosion cracking of Alloy X-750 // *Acta Mater.* — 1996. — Vol. 44. — P. 4685–4695.
- Park D. M., Kim J. H., Lee S. J., Yoon G. H.* Analysis of geometrical characteristics of CNT-Al composite using molecular dynamics and the modified rule of mixture (MROM) // *Journal of Mechanical Science and Technology.* — 2018. — Vol. 32, No. 12. — P. 5845–5853.
- Park J. G., Keum D. H., Lee Y. H.* Strengthening mechanisms in carbon nanotube-reinforced aluminum composites // *Carbon.* — 2015. — Vol. 95. — P. 690–698.
- Patel P. R., Sharma S., Tiwari S. K.* A molecular dynamics investigation for predicting the effect of various parameters on the mechanical properties of carbon nanotube-reinforced aluminum nanocomposites // *J. Mol. Model.* — 2020. — Vol. 26. — P. 238.
- Pedrielli A., Dapor M., Gkagkas K., Taioli S., Pugno N. M.* Mechanical properties of twisted carbon nanotube bundles with carbon linkers from molecular dynamics simulations // *International Journal of Molecular Sciences.* — 2023. — Vol. 24, No. 3. — P. 2473.
- Pestana L. A. R., Liao Y., Li Z., Xia W.* Atomistic molecular modeling methods // *Fundamentals of Multiscale Modeling of Structural Materials, Elsevier.* — 2023. — Chapter Two. — P. 37–73.
- Plimpton S. J., Thompson A. P.* Computational aspects of many-body potentials // *MRS Bulletin.* — 2012. — Vol. 37, No. 5. — P. 513–521.
- Praneeth H. R., Patil S., Budavi P., Srinivas G. S., Usman M., Sarjil P.* Study of effect of carbon nanotube on tensile, impact and flexural properties of carbon fibre/epoxy reinforcement polymer // *IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng.* — 2022. — P. 1248.
- Randjbaran E., Abang H. A. M., Dayang L., Hameed S., Mohamed T., Mazlan N., Zahari R.* Tensile strength of epoxy composites reinforced with carbon nanotubes // *Academic Journal of Manufacturing Engineering.* — 2021. — No. 19. — P. 106–112.
- Ruoff R. S., Lorents D. C.* Mechanical and Thermal Properties of Carbon Nanotubes // *Carbon.* — 1995. — Vol. 33, No. 7. — P. 925–930.
- Ryu K.-H., Kim J.-G., Lee D., Kim S. G., Ku B.-C., Hwang J. Y., Jeong K.-U., Kim N. D., Kim D.-Y.* Boost up the mechanical and electrical property of CNT fibers by governing lyotropic liquid crystalline mesophases with aramid polymers for robust lightweight wiring applications // *Adv. Fiber Mater.* — 2023. — No. 5. — P. 514–526.
- Salvetat J.-P., Bonard J.-M., Thomson N. H., Kulik A. J., Forró L., Benoit W., Zuppiroli L.* Mechanical properties of carbon nanotubes // *Appl. Phys. A.* — 1999. — Vol. 69, No. 3. — P. 255–260.
- Sansoz F., Molinari J. F.* Mechanical behavior of Sigma tilt grain boundaries in nanoscale Cu and Al: a quasicontinuum study // *Acta Mater.* — 2005. — Vol. 53. — P. 1931–1944.
- Sdobnyakov N. Yu., Samsonov V. M., Kolosov A. Yu., Vasilyev S. A., Myasnichenko V. S., Sokolov D. N., Savina K. G., Veselov A. D.* To the problem of stability/instability of bimetallic structures Co (core) / Au (shell) and Au (core) / Co (shell): atomistic simulation // *Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials: Interuniversity collection of proceedings.* — Tver: TSU, 2019. — I. 11. — P. 520–534.

- Shin U.S., Yoon I.K., Lee G.S., Jang W.C., Knowles J.C., Kim H.W.* Carbon nanotubes in nanocomposites and hybrids with hydroxyapatite for bone replacements // *J. Tissue Eng.* — 2011. — P. 674287.
- Sidorenkov A., Kolesnikov S., Saletsky A.* Molecular dynamics simulation of graphene on Cu (111) with different Lennard–Jones parameters // *Eur. Phys. J. B.* — 2016. — Vol. 89. — P. 220.
- Soni S.K., Thomas B., Kar V.R.* A comprehensive review on CNTs and CNT-reinforced composites: syntheses, characteristics and applications // *Materials Today Communications.* — 2020. — No. 25. — P. 101546.
- Stuart S.J., Tutein A.B., Harrison J.A.* A reactive potential for hydrocarbons with intermolecular interactions // *J. Chem. Phys.* — 2000. — Vol. 112. — P. 6472–6486.
- Trautt Z.T., Adland A., Karma A., Mishin Y.* Coupled motion of asymmetrical tilt grain boundaries: molecular dynamics and phase field crystal simulations // *Acta Mater.* — 2012. — Vol. 60, No. 19. — P. 6528–6546.
- Tsai P.-Ch., Jeng Y.-R.* Coalescence and epitaxial self-assembly of Cu nanoparticles on graphene surface: A molecular dynamic study // *Computational Materials Science.* — 2019. — Vol. 156. — P. 104–110.
- Vardanyan V.H., Urbassek H.M.* Strength of graphene-coated Ni Bi-crystals: A molecular dynamics nano-indentation study // *Materials.* — 2020. — Vol. 13, No. 7. — P. 1683.
- Vidu R., Rahman M., Mahmoudi M., Enachescu M., Poteca T.D., Opris I.* Nanostructures: A platform for brain repair and augmentation // *Front. Syst. Neurosci.* — 2014. — Vol. 8.
- Wang J., Cao C., Chen X., Ren S., Chen Y., Yu D., Chen X.* Orientation and dispersion evolution of carbon nanotubes in ultra high molecular weight polyethylene composites under extensional-shear coupled flow: a dissipative particle dynamics study // *Polymers.* — 2019. — Vol. 11, No. 1. — P. 154.
- Wang W., Zhu Y., Liao S., Li J.* Carbon nanotubes reinforced composites for biomedical applications // *Biomed. Res. Int.* — 2014. — P. 518609.
- Xiang J., Xie L., Meguid S.A., Pang S., Yi J., Zhang Y., Liang R.* An atomic-level understanding of the strengthening mechanism of aluminum matrix composites reinforced by aligned carbon nanotubes // *Computational Materials Science.* — 2017. — Vol. 128. — P. 359–372.
- Xing C., Sheng J., Wang L., Fei W.* Research progress in molecular dynamics simulation of CNT and graphene reinforced metal matrix composites // *Oxford Open Materials Science.* — 2021. — Vol. 1, No. 1. — P. itab008.
- Xiong D.-B., Cao M., Guo O., Tan Z., Fan G., Li Z., Zhang D.* Graphene-and-copper artificial nacre fabricated by a preform impregnation process: bioinspired strategy for strengthening-toughening of metal matrix composite // *ACS Nano.* — 2015. — Vol. 9. — P. 6934–6943.
- Yan Y., Lei Y., Liu S.* Tensile responses of carbon nanotubes-reinforced copper nano-composites: molecular dynamics simulation // *Comput. Mater. Sci.* — 2018. — Vol. 151. — P. 273–277.
- Yankovaskaya U.I., Korznikova E.A., Korpuseva S.D., Zakharov P.V.* Mechanical properties of the Pt-CNT composite under uniaxial deformation: tension and compression // *Materials.* — 2023. — Vol. 16, No. 11. — P. 4140.
- Yu Q., Li S., Minor A.M., Sun J., Ma E.* High-strength titanium alloy nanopillars with stacking faults and enhanced plastic flow // *Apply Phys. Lett.* — 2012. — Vol. 100, No. 6. — P. 063109.
- Zhang Ch., Lu Ch., Pei L., Li J., Wang R.* Molecular dynamics simulation of the negative Poisson's ratio in graphene/Cu nanolayered composites: implications for scaffold design and telecommunication cables // *ACS Appl. Nano Mater.* — 2020. — Vol. 3, No. 1. — P. 496–505.
- Zhang Ch., van Duin A. C. T., Seo J. W., Seveno D.* Weakening effect of nickel catalyst particles on the mechanical strength of the carbon nanotube/carbon fiber junction // *Carbon.* — 2017. — Vol. 115. — P. 589–599.

- Zhang D., Zhan Z.* Strengthening effect of graphene derivatives in copper matrix composites // *J. Alloys Compd.* — 2016. — Vol. 654. — P. 226–233.
- Zhigao L., Yongyi G., Shiping Z., Huihong F., Zhongyi Z.* Molecular dynamics study on temperature and strain rate dependences of mechanical properties of single crystal Al under uniaxial loading // *AIP Advances.* — 2020. — Vol. 10, No. 7. — P. 075321.
- Zhou M., Qu X., Ren L., Fan L., Zhang Y., Guo Y., Quan G., Tang Q., Liu B., Sun H.* The effects of carbon nanotubes on the mechanical and wear properties of AZ31 alloy // *Materials.* — 2017. — Vol. 10, No. 12. — P. 1385.