

УДК: 519.876, 538.913, 539.8

Молекулярно-динамическое исследование механических свойств кристалла платины, армированного углеродной нанотрубкой при одноосном растяжении

У. И. Янковская^{1,а}, М. Д. Старостенков², П. В. Захаров³

¹ Алтайский государственный медицинский университет,
Россия, 656038, г. Барнаул, пр. Ленина, 40

² Алтайский технологический университет им. Ползунова,
Россия, 656038, г. Барнаул, пр. Ленина, 46

³ Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Россия, 195251, г. Санкт-Петербург, ул. Политехническая, 29
E-mail: ^а zalaevau@gmail.com

Получено 11.04.2022, после доработки — 26.07.2022.

Принято к публикации 09.08.2022.

В этой статье рассматриваются механические свойства платины, армированной углеродной нанотрубкой (УНТ), в условиях одноосной растягивающей нагрузки посредством метода молекулярной динамики. Обзор текущих расчетов и экспериментальных исследований подчеркивает преимущества композитов, армированных углеродными нанотрубками с структурной точки зрения. Однако количественные и качественные исследования влияния углеродной нанотрубки на улучшения свойств композитов все еще редки. Выбор композита обусловлен перспективой применения платиновых сплавов во многих сферах, где они могут подвергаться механическим воздействиям, в том числе и в биосовместимых системах. Армирование платины (Pt) с помощью УНТ может обеспечить дополнительные возможности для вживления имплантатов и при этом достичь требуемых механических характеристик.

Структура композита состояла из кристалла Pt с гранецентрированной кубической решеткой с постоянной $3,92 \text{ \AA}$ и углеродной нанотрубки. Матрица кристалла платины имеет форму куба с размерами $43,1541 \text{ \AA} \times 43,1541 \text{ \AA} \times 43,1541 \text{ \AA}$. Размер отверстия в середине платиновой матрицы определяется радиусом углеродной нанотрубки типа «зигзаг» (8,0), который составляет $2,6 \text{ \AA}$. Углеродная нанотрубка помещается в отверстие радиусом $4,2 \text{ \AA}$. При таких параметрах взаимной конфигурации наблюдался минимум энергии взаимодействия. Рассматриваемая модель содержит 320 атомов углерода и 5181 атом платины. Объемная доля углерода в композите Pt-C составляет 5,8%. На первом этапе исследования производился анализ влияния скорости деформации на соотношение «напряжение–деформация» и изменение энергии в процессе одноосного растяжения композита Pt-C.

Анализ влияния скорости деформации показал, что предел текучести при растяжении увеличивается с увеличением скоростей деформации, а модуль упругости имеет, скорее, тенденцию к уменьшению при увеличении скорости деформации. Данная работа также демонстрирует, что по сравнению с чистой платиной модуль Юнга увеличился на 40% для Pt-C, а эластичность композита меньше на 42,3%. В целом подробно рассмотрены механизмы разрушения, включая пластическую деформацию в атомистическом масштабе.

Ключевые слова: метод молекулярной динамики, механические свойства, углеродная нанотрубка, армирование, композит

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 21-12-00275. Часть результатов работы были получены с использованием вычислительных ресурсов суперкомпьютерного центра Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого (www.scc.spbstu.ru).

UDC: 519.876, 538.913, 539.8

Molecular dynamics study of the mechanical properties of a platinum crystal reinforced with carbon nanotube under uniaxial tension

U. I. Yankovskaya^{1,a}, M. D. Starostenkov², P. V. Zakharov³

¹ASMU of the Ministry of Health of the Russian Federation,
40 Lenin pr., Barnaul, 656038, Russia

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

³Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University,
29 Polytechnicheskaya st., St. Petersburg, 195251, Russia

E-mail: ^a zalaevau@gmail.com

Received 11.04.2022, after completion – 26.07.2022.

Accepted for publication 09.08.2022.

This article discusses the mechanical properties of carbon nanotube (CNT)-reinforced platinum under uniaxial tensile loading using the molecular dynamics method. A review of current computational and experimental studies on the use of carbon nanotube-reinforced composites from a structural point of view. However, quantitative and qualitative studies of CNTs to improve the properties of composites are still rare. Composite selection is a promising application for platinum alloys in many cases where they may be subjected to mechanical stress, including in biocompatibility sources. Pt-reinforced with CNTs may have additional possibilities for implantation of the implant and at the same time obtain the required mechanical characteristics.

The structure of the composite is composed of a Pt crystal with a face-centered cubic lattice with a constant of 3.92 Å and a carbon nanotube. The Pt matrix has the shape of a cube with dimensions of 43.1541 Å × 43.1541 Å × 43.1541 Å. The hole size in the average platinum dimension is the radius of the carbon nanotube of the «zigzag» type (8,0), which is 2.6 Å. A carbon nanotube is placed in a hole with a radius of 4.2 Å. At such parameters, the maximum energy level was mutually observed. The model under consideration is contained in 320 atomic bombs and 5181 atomic platinum. The volume fraction of deaths in the Pt-C composite is 5.8%. At the first stage of the study, the strain rate was analyzed for stress-strain and energy change during uniaxial action on the Pt-C composite.

Analysis of the strain rate study showed that the consumption yield strength increases with high strain rate, and the elasticity has increased density with decreasing strain rate. This work also increased by 40% for Pt-C, the elasticity of the composite decreased by 42.3%. In general, fracture processes are considered in detail, including plastic deformation on an atomistic scale.

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

Citation: *Computer Research and Modeling*, 2022, vol. 14, no. 5, pp. 1069–1080 (Russian).

This work was supported by the Russian Science Foundation grant No. 21-12-00275. 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

Изучению поведения структурной механики в наномасштабе с помощью метода моделирования молекулярной динамики (МД) в последние годы уделяется значительное внимание в силу распространения высокопроизводительных вычислителей. Существует ряд исследований в этой области. Например, в работах [Zhou et al., 2017; Yang, Yang, Zhang, 2017; Shabib, Miller, 2009; Zhao et al., 2017; Tian et al., 2014; Chen, Shi, Lu, 2014; Heino, Häkkinen, Kaski, 1998] используется метод МД для исследования механизмов деформации нанокристаллической меди. Исследователи в [Li, Han, 2017; Yuan, 2012] изучали механизмы деформации в нанопроволоках ОЦК железа. В работе [Sainath, Choudhary, Jayakumar, 2015] проведено исследование деформации при растяжении нанопроволок ОЦК железа при температуре 10 К и скорости деформации $1 \cdot 10^8$ пс⁻¹; в [Setoodeh, Attariani, Khosrownejad, 2008] исследуются механические свойства никелевых нанопроволок при различных температурах, в [Koh et al., 2005] исследуется влияние различных скоростей деформации на поведение металлических нанопроволок при растяжении. Моделирование МД в [Koh et al., 2005; Chang et al., 2018] используется для изучения поведения при растяжении монокристаллического титана при различных скоростях деформации. Моджумдер [Mojumder, 2018] исследовал влияние сжимающей нагрузки на пластичность сплавов Al-Cu. Авторы [Chabba et al., 2018] изучали механические свойства алюминиевых нанопроволок и алюминия, покрытого оксидом алюминия, при различных скоростях деформации при растяжении и сжатии.

Хорошо известно, что углеродные нанотрубки (УНТ) обладают превосходными механическими свойствами [Lee et al., 2008; Zhao, Nardelli, Bernholc, 2002; Nasiri, Zaiser, 2016], хорошими термическими свойствами [Balandin, 2011; Pop, Varshney, Roy, 2012] и высокой электропроводностью [Castro Neto et al., 2009; Marinho et al., 2012]. Эти выдающиеся свойства делают углеродные нанотрубки подходящим кандидатом на роль армирующего элемента в композитах с металлической матрицей. В работе [Faria et al., 2020] представлен анализ влияния внедренных УНТ на механизмы деформации нанокompозитов железа и титана, результаты которого показали, что после линейного роста до максимума кривые «напряжение–деформация» резко уменьшаются, так как имеет место первый переход от упругой деформации к пластической и возникает проскальзывание. Работа [Xing et al., 2021] посвящена достижениям в области молекулярно-динамических исследований углеродных нанотрубок (УНТ) и композитов, армированных графеном (Cu, Al, Ni). Ряд исследований показывает, что добавление углеродных наноматериалов значительно улучшает механические свойства композитов с металлической матрицей [Cha, Kim, Arshad, 2005; Huang, Zheng, Zhao, 2017]. Токунага с коллегами сообщили, что твердость композита CNT-Al значительно увеличилась, а прочность на растяжение увеличилась до более чем 200 МПа при использовании кручения под высоким давлением (НПТ) [Tokunaga, Kaneko, Horita, 2008].

Сплавы на основе Pt применяются во многих сферах. В частности, соединения Pt-Al формируют интерметаллические соединения с хорошими механическими свойствами, превосходящими, например, аналогичные соединения Ni-Al. В то же время Pt является достаточно хорошим биосовместимым материалом. Так, в ряде работ показана возможность его применения для решения задач в данной области [Chiu et al., 2017; Huang, Cheng, Zheng, 2014; Singh et al., 2009; Song, Ryu, Hong, 2009]. Армирование Pt с помощью УНТ может обеспечить дополнительные возможности для вживления имплантатов и при этом обеспечить требуемые механические характеристики.

Несмотря на все преимущество использования моделирования методом МД, исследование и анализ механического поведения композитов с металлической матрицей все еще проводятся редко. Целью данной работы является изучение механического поведения композитов Pt-C при одноосной растягивающей нагрузке посредством серии МД-моделирования. В нашем моделировании детально рассмотрены механизмы разрушения, включая пластическую деформацию в атомистическом масштабе.

2. Модель и методика эксперимента

В качестве программного пакета для расчетов методом молекулярной динамики применялся LAMMPS [<http://lammps.sandia.gov/>], который обладает всем необходимым функционалом для моделирования и последующего анализа деформации модельных ячеек. В дополнении к указанному программному обеспечению использовался пакет AtomsK [Hirel, 2015] для создания структуры композита Pt-C и чистой платины. Это позволило оптимизировать построение моделей и проведение расчетов на высокопроизводительных кластерах суперЭВМ. Не менее важно частью проведения компьютерного эксперимента являются визуализация результатов расчетов и их графическое представление. Визуализация данных осуществлялась с помощью OVITO [Stukowski, 2010]. Пример имитационной модели композита Pt-C после первичной релаксации показан на рис. 1, визуализировано с помощью OVITO.

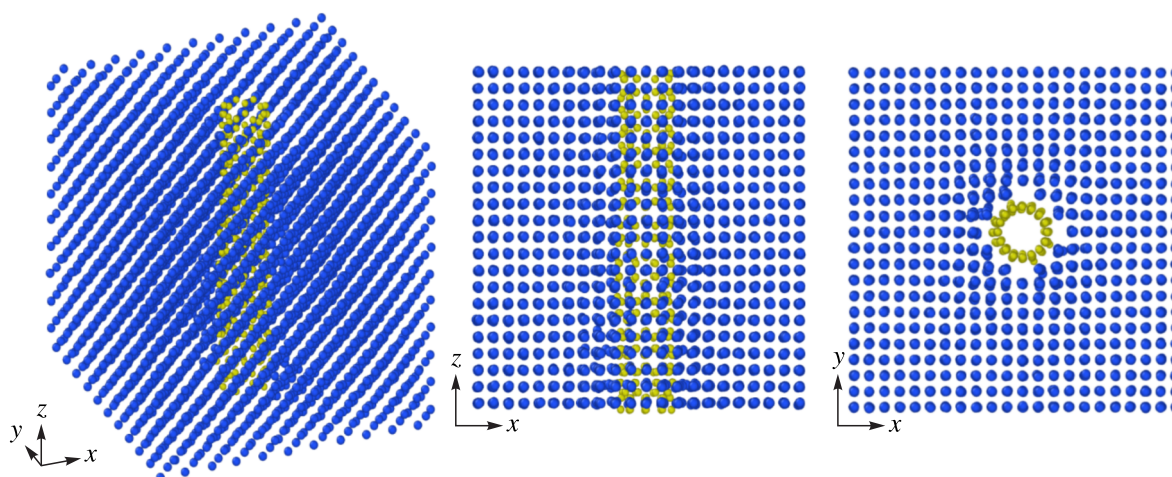


Рис. 1. Схема атомной модели для моделирования МД, представляющая внутреннюю часть образца композита Pt-C при первичной релаксации, до растягивающей нагрузки: синим цветом представлены атомы платины, желтым — углерод

Для представления наноразмерной структуры внутри композита Pt-C периодические граничные условия применялись в направлениях x , y и z для получения объемных свойств без эффектов краевой поверхности. Направления осей соответствуют кристаллографическим направлениям $\langle 100 \rangle$, $\langle 010 \rangle$, $\langle 001 \rangle$. Принимая все направленные периодические граничные условия, можно точно описать репрезентативный объем внутри композита при изучении механических свойств. Структура матрицы Pt состояла из гранецентрированной кубической (ГЦК) решетки с постоянной решетки $3,920 \text{ \AA}$. Матрица Pt имеет форму куба с размерами $43,1541 \text{ \AA} \times 43,1541 \text{ \AA} \times 43,1541 \text{ \AA}$. Размер отверстия в середине платиновой матрицы определяется радиусом УНТ типа «зигзаг» $(8,0)$, который составляет $2,6 \text{ \AA}$. УНТ помещается в отверстие радиусом $4,2 \text{ \AA}$. При таких параметрах взаимной конфигурации наблюдался минимум энергии взаимодействия. Представленная модель содержит 320 атомов углерода и 5181 атом платины. Объемная доля УНТ в композите Pt-C составляет $5,8 \%$, что соответствовало $0,38 \%$ массовой доли. Такая величина близка к значениям в экспериментальных работах, рассмотренных в обзоре выше.

Для описания взаимодействия Pt-Pt, C-C и Pt-C выбран MEAM-потенциал. Межатомный потенциал двойной системы Pt-C был разработан на основе формализма второго модифицированного метода вложенного атома ближайшего соседа (2NN MEAM) [Jeong, Lee, 2020].

Моделирование одноосного растяжения начинается с релаксации системы Pt-C в течение 1 ns с временным шагом 1 fs в ансамбле NPT с периодическими граничными условиями при

температуре $T = 300$ К и нулевом давлении для релаксации внутренних напряжений, результаты представлены на рис. 1.

К композиту во время моделирования на одноосное растяжение прикладывалась растягивающая нагрузка в направлении оси z ([001]) со скоростью деформации 10^{-9} пс $^{-1}$, что меньше, чем типичная скорость деформации, используемая в других аналогичных моделях [Sankaranarayanan, Bhethanabotla, Joseph, 2007; Setoodeh, Attariani, Khosrownejad, 2008]. Это было сделано для сбалансирования времени расчета, учитывая проблемы нежелательной деформации аморфного беспорядка с высокой скоростью, а также затраты на расчет с низкой скоростью. Далее анализ скорости деформации будет произведен более подробно.

При моделировании растяжения композита Pt-C использовался ансамбль NVT, который применяется при температуре 300 К. Шаг по времени был уменьшен до 0,5 фс, чтобы избежать ошибок в расчете траектории атомов УНТ во время разрушения. Величина относительной деформации задавалась посредством программных средств LAMMS, процедурой deform.

Механические напряжения рассчитываются на основе вириального напряжения следующим образом:

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

где Ω — общий объем; m_i — масса атома i ; \dot{u}_i — производная по времени от u_i , которая относится к вектору смещения атома i относительно исходного положения; \otimes — векторное произведение; r_{ij} — расстояние между векторами положения r_i и r_j атомов i и j соответственно; f_{ij} — межатомная сила, действующая на атом i атомом j [Lee et al., 2014]. Ω рассчитывается в уравновешенном состоянии, общий объем композита Pt-C рассчитывается путем суммирования объема платины с отверстием и объема УНТ. Предполагается, что УНТ представляет собой цилиндрическую оболочку. Моделирование растяжения выполнялось до тех пор, пока деформация ε не достигала значения 0,3. Расчеты производились для каждой модели три раза, после чего осуществлялось усреднение по полученным результатам.

3. Результаты и обсуждение

Для проведения наиболее оптимальных модельных экспериментов (как с физической точки зрения, так и скорости счета) на первом этапе производился анализ влияния скорости деформации на соотношение «напряжение–деформация» и изменение энергии в процессе одноосного растяжения композита Pt-C. На рис. 2 представлены кривые «напряжение–деформация» при различных скоростях деформации.

Как видно из рис. 2, изменение скоростей деформации в процессе растяжения мало влияет на упругую фазу зависимости «напряжение–деформация» и оказывает большее влияние на пластическую фазу. Предел текучести увеличивался с увеличением скорости деформации, что вполне соотносится с известными данными для различных соединений. После входа в зону текучести всех кривых, представленных на рис. 2, имеет зигзагообразную форму. Наблюдались при скорости 10^{-10} пс $^{-1}$ колебания значений напряжения в отрицательную область. Это говорит о быстром разрушении кристалла, что приводит к колебаниям всей структуры. При меньших скоростях данного эффекта не наблюдается.

На рис. 3 показано изменение энергии в процессе одноосного растяжения вдоль оси z при различных скоростях деформации.

Модули упругости для рассматриваемых случаев скоростей деформации были рассчитаны с помощью регрессионного анализа. В таблице 1 приведены результаты модуля Юнга и предела текучести композита Pt-C при различных скоростях растяжения.

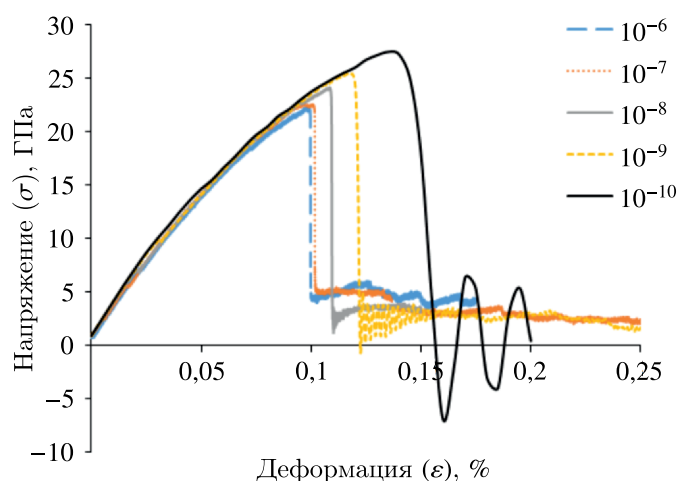


Рис. 2. Кривые «напряжение–деформация» при различных скоростях деформации при одноосном растяжении композита «платина-углерод» (Pt-C)

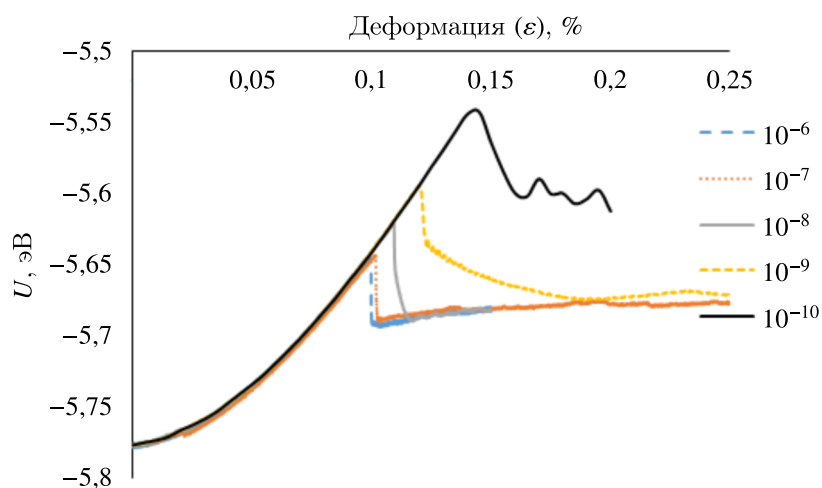


Рис. 3. Изменение потенциальной энергии U в процессе растягивающей нагрузки композита «платина-углерод» (Pt-C) при различных скоростях деформации

Таблица 1. Модуль Юнга и предел текучести Pt-C при различных скоростях растяжения

Скорость деформации (пс^{-1})	Модуль Юнга (E , ГПа)	Предел текучести (σ_T , ГПа)
10^{-6}	260,19	22,06
10^{-7}	273,55	22,37
10^{-8}	250,78	23,68
10^{-9}	270,50	25,40
10^{-10}	234,91	27,20

Погрешность рассчитанных значений модуля Юнга и предела текучести для композита Pt-C составляет 0,53 ГПа.

В соответствии с данными, приведенными в таблице, были построены гистограммы модуля упругости и предела текучести кристалла платины, армированного УНТ при различных скоростях деформации, как показано на рис. 4 и 5.

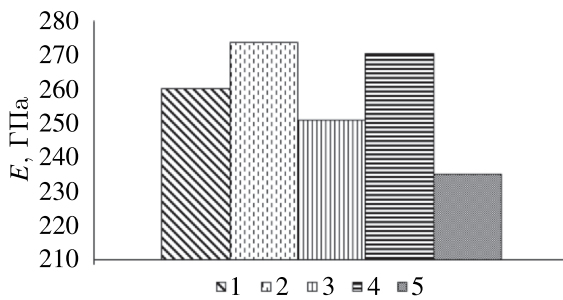


Рис. 4. Изменение модуля упругости в зависимости от скорости деформации при одноосном растяжении композита «платина-углерод» (Pt-C): 1 — 10^{-6} пс⁻¹; 2 — 10^{-7} пс⁻¹; 3 — 10^{-8} пс⁻¹; 4 — 10^{-9} пс⁻¹; 5 — 10^{-10} пс⁻¹

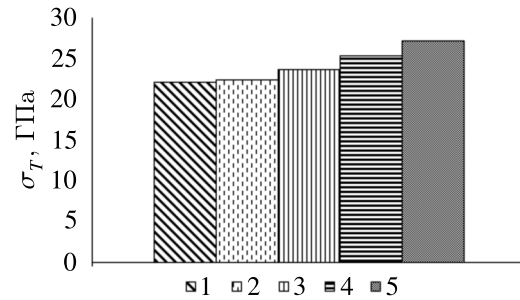


Рис. 5. Изменение предела текучести в зависимости от скорости деформации при одноосном растяжении композита «платина-углерод» (Pt-C): 1 — 10^{-6} пс⁻¹; 2 — 10^{-7} пс⁻¹; 3 — 10^{-8} пс⁻¹; 4 — 10^{-9} пс⁻¹; 5 — 10^{-10} пс⁻¹

Как видно из этих двух рисунков, предел текучести при растяжении увеличивается с увеличением скоростей деформации. Модуль упругости имеет, скорее, тенденцию к уменьшению при увеличении скорости деформации.

Исходя из полученных данных, для более подробного анализа была выбрана модель одноосного растяжения композита при скорости деформации 10^{-9} пс⁻¹. Это обеспечивает хорошую скорость счета и в то же время не требует каких-либо дополнительных ограничений для модели.

На рис. 6 представлены репрезентативные снимки моделирования МД, чтобы показать общие характеристики процесса разрушения во время моделирования растяжения. На рис. 6, *a* показано состояние при деформации 0,03, в этот момент происходит разрыв УНТ, и она перемещается от центра. По мере увеличения деформации в нижней части композита Pt-C, где произошел разрыв УНТ, увеличиваются атомные смещения, приводящие к нарастанию беспорядка (рис. 6, *c*). Затем при деформации порядка 0,11–0,12 (рис. 6, *d*) происходит разрушение композита.

На рис. 7 показана расчетная кривая «напряжение–деформация» при скорости деформации 10^{-9} пс⁻¹ для чистой платины и Pt-CNT. Рис. 8 представляет кривую изменения потенциальной энергии (сравнение чистой платины и композита Pt-CNT).

Для композита в области $0 \leq \varepsilon \leq 0,03$ связь между напряжением и деформацией практически линейна. В результате для чистой платины значение модуля Юнга равно 190,1 ГПа, для Pt-C — 270,5 ГПа. Видно, что модуль Юнга увеличился с включением УНТ в кристалл платины. Поэтому по сравнению с чистой платиной эластичность композита УНТ-Pt уменьшилась на 42,3 % за счет УНТ. Прочность композита увеличилась при объемной доле УНТ 5,8 % от общей. В области $0,03 \leq \varepsilon \leq 0,035$ кривая показывают снижение. Увеличенное изображение части кривой «напряжение–деформация» при деформации около 0,03 показано на рис. 9.

Уменьшение связано с разрывом УНТ (рис. 6, *b*). Это приводит к проскальзыванию атомов углерода по поверхности отверстия в середине кристалла. В результате отверстие немного расширено и имеет асимметричную форму. Одновременно УНТ, которая первоначально была расположена в середине отверстия, немного смещается к увеличенной поверхности, где происходит проскальзывание атомов. Поэтому композит сопровождается необратимое движение атомов, которое представляет собой предел текучести.

При анализе поведения структуры для разных скоростей растяжения было установлено, что больше дефектов решетки и дислокаций возникает при снижении скорости деформации. Другими словами, число атомов ГЦК-структуры, переходящих в другие структуры, при низких скоростях деформации было больше, чем при высоких скоростях деформации. Также установлено, что чем меньше скорость деформации, тем больше вероятность возникновения дислокаций.

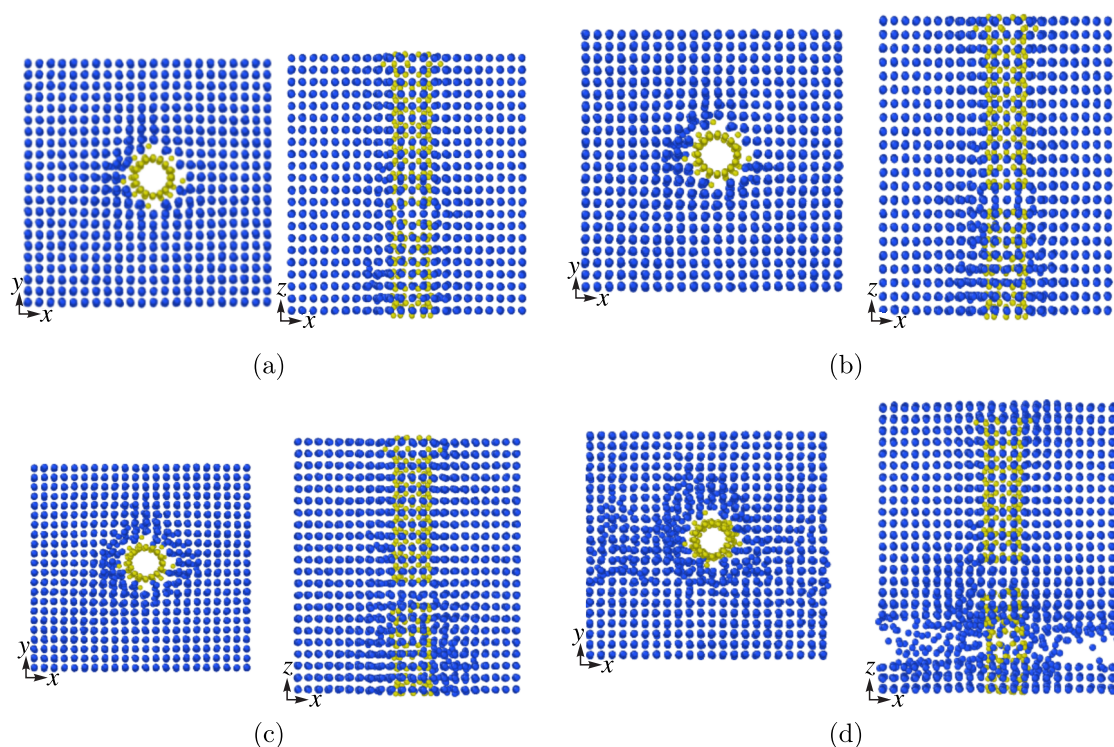


Рис. 6. Моментальные снимки фрагмента модели композита «платина-углерод» (Pt-C) в процессе одноосного растяжения при различных деформациях: а) 0,03; б) 0,05; в) 0,09; д) 0,12; синим цветом представлены атомы платины, желтым — углерод

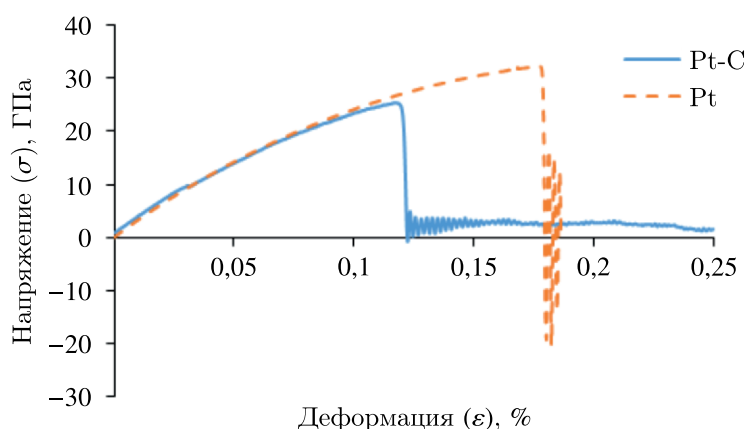


Рис. 7. Кривые «напряжение–деформация» композита «платина-углерод» (Pt-C) и кристалла чистой платины при скорости деформации 10^{-9} пс^{-1}

Это приводит к тому, что чем выше скорость деформации, тем выше предел текучести. После деформации 0,1 кривая «напряжение–деформация» уменьшается, вероятно, из-за массивного разупорядочения атомов платины. Генерация и рост пустот отслеживаются с помощью алгоритма извлечения дислокаций (DXA) [Stukowski, 2013]. Большинство изменений структуры решетки наблюдается вблизи локальных пустот.

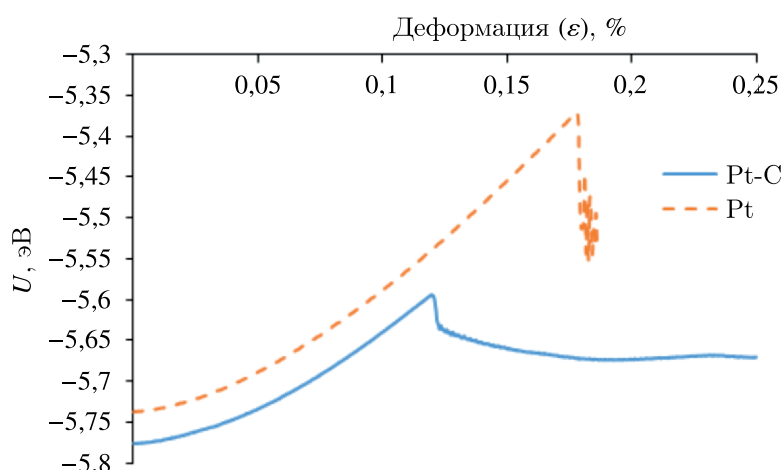


Рис. 8. Изменение потенциальной энергии для кристалла чистой платины и композита «платина-углерод» (Pt-C) при растягивающей нагрузке при скорости деформации 10^{-9} пс $^{-1}$

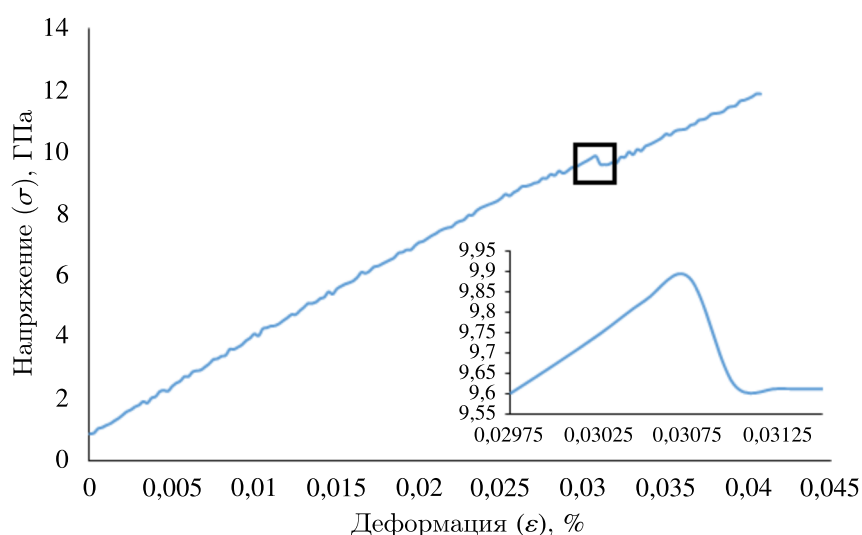


Рис. 9. Кривая «напряжение–деформация» (при скорости деформации 10^{-9} пс $^{-1}$) композита «платина-углерод» (Pt-CNT) в упругой области и увеличенная кривая вблизи предела текучести около 0,03 деформации

4. Заключение

В данной работе методом молекулярной динамики впервые исследован композит Pt-C в виде ГЦК металлической матрицы с внедренной УНТ. Получен ряд новых результатов, свидетельствующих об увеличении модуля Юнга на 40 % для композита Pt-C в сравнении с ГЦК платины. Эластичность композита уменьшилась на 42,3 %. Тем самым композит оказывает существенно большее сопротивление растяжению в отличие от чистого металла. Эти результаты сопоставимы с известными экспериментальными и модельными данными для других аналогичных композитов на основе Al, Ni, Ti. Тем самым работа расширяет спектр материалов, для которых проведены экспериментальные или теоретические исследования по внедрению УНТ.

Анализ влияния скорости деформации показал, что предел текучести при растяжении увеличивается с ростом скоростей деформации, а модуль упругости имеет, скорее, тенденцию к уменьшению при увеличении скорости деформации. Чрезмерная внешняя нагрузка может разрушить кристалл, но УНТ выдерживают дополнительную нагрузку, тем самым приостанавливая

разрушение всего композита за счет почти двукратного увеличения деформации разрушения. Показано, что даже небольшая массовая доля УНТ (около 0,38 %) оказывает всестороннее влияние на характеристики композитов с металлической матрицей.

Полученные результаты позволяют перейти к задачам, затрагивающим более тонкие аспекты моделирования таких структур. В частности, переход от МЕАМ-потенциала к гибридной функции нескольких потенциалов взаимодействий структур. Функции взаимодействия, полученные в дальнейшем, могут служить основой для такой модели. Систематическое исследование механических свойств композита Pt-C при различных деформирующих нагрузках является важной задачей с позиции материаловедения, упрощает экспериментаторам поиск наиболее оптимальных условий натурального эксперимента, а также полезно при оценке критических значений деформации в различных устройствах.

Список литературы (References)

- Balandin A. A.* Thermal properties of graphene and nanostructured carbon materials // *Nat. Mater.* — 2011. — Vol. 8. — P. 569.
- Castro Neto A. H., Guinea F., Peres N. M. R., Novoselov K. S., Geim A. K.* The electronic properties of graphene // *Rev. Mod. Phys.* — 2009. — Vol. 81. — P. 109.
- Cha S. I., Kim K. T., Arshad S. N. et al.* Extraordinary strengthening effect of carbon nanotubes in metal-matrix nanocomposites processed by molecular-level mixing // *Adv. Mater.* — 2005. — Vol. 17. — P. 1377.
- Chabba H., Lemaalem M., Derouiche A., Dafir D.* Modeling aluminum using molecular dynamics simulation // *J. Mater. Environ. Sci.* — 2018. — Vol. 9, No. 1. — P. 93–99.
- Chang L., Zhou C.-Y., Liu H.-X., Li J., He X.-H.* Orientation and strain rate dependent tensile behavior of single crystal titanium nanowires by molecular dynamics simulations // *J. Mater. Sci. Technol.* — 2018. — Vol. 34. — P. 864–877.
- Chen K., Shi S. Q., Lu J.* Tensile deformation properties of single crystal copper with nanotwins // *Comput. Mater. Sci.* — 2014. — Vol. 83. — P. 269–276.
- Chiu W.-T., Tahara Y., Chen C.-Y., Chang T.-F.M., Hashimoto T., Kurosu H., Sone M.* Fundamental property assessments of biocompatible silk-Pt composite prepared by supercritical carbon dioxide promoted electroless plating // *Industrial & Engineering Chemistry Research.* — 2017. — Vol. 56, No. 31. — P. 8864–8871.
- Faria B., Guarda C., Silvestre N., Lopes J. N. C.* CNT-reinforced iron and titanium nanocomposites: Strength and deformation mechanisms // *Composites Part B: Engineering.* — 2020. — Vol. 187. — P. 107836.
- Heino P., Häkkinen H., Kaski K.* Molecular-dynamics study of mechanical properties of copper // *Europhys. Lett.* — 1998. — Lett. 41. — P. 273–278.
- Hirel P.* Atomsk: A tool for manipulating and converting atomic data files // *Comput. Phys. Comm.* — 2015. — Vol. 197. — P. 212–219.
- Huang T., Cheng J., Zheng Y.F.* In vitro degradation and biocompatibility of Fe-Pd and Fe-Pt composites fabricated by spark plasma sintering // *Materials Science and Engineering: C.* — 2014. — Vol. 35. — P. 43–53.
- Huang Z., Zheng Z., Zhao S. et al.* Copper matrix composites reinforced by aligned carbon nanotubes: mechanical and tribological properties // *Mater Des.* — 2017. — Vol. 133. — P. 570–78.
- 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. — Vol. 185. — P. 109946.

- Koh S. J. A., Lee H. P., Lu C., Cheng Q. H.* Molecular dynamics simulation of a solid platinum nanowire under uniaxial tensile strain: Temperature and strain-rate effects // *Phys. Rev. B.* — 2005. — Vol. 72. — P. 085414.
- LAMMPS [Electronic resource]: <http://lammps.sandia.gov/> (accessed: 25.07.2022).
- Lee C., Wei X., Kysar J. W., Hone J.* Measurement of the elastic properties and intrinsic strength of monolayer graphene // *Science.* — 2008. — Vol. 321. — P. 385.
- 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. — Vol. 161, No. 9. — P. A1218–A1223.
- Li L., Han M.* Molecular dynamics simulations on tensile behaviors of single-crystal bcc Fe nanowire: Effects of strain rates and thermal environment // *Appl. Phys. A.* — 2017. — Vol. 123. — P. 450.
- Marinho B., Ghislandi M., Tkalya E., Koning C. E., de With G.* Electrical conductivity of compacts of graphene, multi-wall carbon nanotubes, carbon black, and graphite powder // *Powder Technol.* — 2012. — Vol. 221. — P. 351.
- Mojumder S.* Molecular dynamics study of plasticity in Al-Cu alloy nanopillar due to compressive loading // *Physica B.* — 2018. — Vol. 530. — P. 86–89.
- Nasiri S., Zaiser M.* Rupture of graphene sheets with randomly distributed defects // *AIMS Mater. Sci.* — 2016. — Vol. 3, No. 4. — P. 1340–1349.
- Pop E., Varshney V., Roy A. K.* Thermal properties of graphene: Fundamentals and applications // *MRS Bull.* — 2012. — Vol. 12. — P. 1273–1281.
- Sainath G., Choudhary B. K., Jayakumar T.* Molecular dynamics simulation studies on the size dependent tensile deformation and fracture behaviour of body centred cubic iron nanowires // *Comput. Mater. Sci.* — 2015. — Vol. 104. — P. 76–83.
- 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. — Vol. 76, No. 13.
- Setoodeh A. R., Attariani H., Khosrownejad M.* Nickel nanowires under uniaxial loads: A molecular dynamics simulation study // *Comput. Mater. Sci.* — 2008. — Vol. 44. — P. 378–384.
- Shabib I., Miller R. E.* Deformation characteristics and stress–strain response of nanotwinned copper via molecular dynamics simulation // *Acta Mater.* — 2009. — Vol. 57. — P. 4364–4373.
- Singh A. V., Patil R., Kasture M. B., Gade W. N., Prasad B. L. V.* Synthesis of Ag-Pt alloy nanoparticles in aqueous bovine serum albumin foam and their cytocompatibility against human gingival fibroblasts // *Colloids and Surfaces B: Biointerfaces.* — 2008. — Vol. 69, No. 2. — P. 239–245.
- Song W.-H., Ryu H. S., Hong S.-H.* Antibacterial properties of Ag (or Pt)-containing calcium phosphate coatings formed by micro-arc oxidation // *Journal of Biomedical Materials Research Part A.* — 2009. — Vol. 88A, No. 1. — P. 246–254.
- Stukowski A.* Computational analysis methods in atomistic modeling of crystals // *J. Min. Metal & Mat. Soc.* — 2013. — Vol. 66, No. 3. — P. 399–407.
- Stukowski A.* Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO — the Open Visualization Tool // *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering.* — 2010. — Vol. 18, No. 1.
- Tian X., Cui J., Zhang C., Ma Z., Wan R., Zhang Q.* Investigations on the deformation mechanisms of single-crystalline Cu nanowires under bending and torsion // *Comput. Mater. Sci.* — 2014. — Vol. 83. — P. 250–254.
- Tokunaga T., Kaneko K., Horita Z.* Production of aluminum-matrix carbon nanotube composite using high pressure torsion // *Mater. Sci. Eng. A.* — 2008. — Vol. 490, No. 1–2. — P. 300.

- 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.
- Yang Z., Yang Q., Zhang G.* Poisson's ratio and Young's modulus in single-crystal copper nanorods under uniaxial tensile loading by molecular dynamics // Phys. Lett. A. — 2017. — Vol. 381. — P. 280–283.
- Yuan F.* Atomistic simulation study of tensile deformation in bulk nanocrystalline bcc iron // Sci. China: Phys., Mech. Astron. — 2012. — Vol. 55. — P. 1657–1663.
- Zhao Q., Nardelli M. B., Bernholc J.* Ultimate strength of carbon nanotubes: A theoretical study // Phys. Rev. B. — 2002. — Vol. 65. — P. 144105.
- Zhao X., Lu C., Tieu A. K., Pei L., Zhang L., Su L., Zhan L.* Deformation mechanisms in nanotwinned copper by molecular dynamics simulation // Mater. Sci. Eng. A. — 2017. — Vol. 687. — P. 343–351.
- Zhou K., Liu B., Shao S., Yao Y.* Molecular dynamics simulations of tension–compression asymmetry in nanocrystalline copper // Phys. Lett. A. — 2017. — Vol. 381. — P. 1163–1168.