

**Heat resistance of a Pt crystal reinforced with CNT's****Устойчивость к нагреву кристалла платины, армированного  
углеродными нанотрубками***U. I. Yankovskaya<sup>1</sup>, P. V. Zakharov<sup>2</sup>**У. И. Янковская<sup>1</sup>, П. В. Захаров<sup>2</sup>*

<sup>1</sup> Altai State Medical University Ministry of health of the Russian Federation, Prosp. Lenina 40, Barnaul, 656038, Russia

<sup>2</sup> Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, Polytechnicheskaya str. 29, St. Petersburg, 195251, Russia

zalaevau@gmail.com

<sup>1</sup> Алтайский государственный медицинский университет Министерства здравоохранения Российской Федерации, Россия, 656038, Барнаул, пр. Ленина, 40

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

zalaevau@gmail.com

**ABSTRACT**

Metal matrix composites are advanced materials capable of exhibiting increased strength, wear and creep resistance, excellent damping and reduced thermal expansion, making them suitable for a wide range of applications in many industries including transportation, consumer transportation, cutting tools, consumer electronics, defense, space, aerospace, mechanical engineering and metalworking and many others. With the rapid development of nanotechnology, there has been a growing demand for the development of new metal matrix nanocomposites for a variety of fields such as structural engineering and functional device applications. One of the most effective approaches to the creation of composites is the reinforcement of a metal matrix with carbon-based materials - carbon nanotubes (CNTs) and fullerenes. In this work, the processes of heating and cooling of the metal - CNT composite are simulated by the molecular dynamics method. The LAMMPS software and a proven set of interatomic potentials were used for modeling. It has been found that the reinforcement of metallic CNT crystals leads to a change in its melting point. In this case, a decrease in the melting temperature was found, which is associated with an increase in the fraction of free volume, which in turn is determined by the small size of the computational cell. In the future, it is planned to increase the size of the considered computational cell and determine the effect of the cell size and geometry of the strengthening component on the complex of physical and mechanical properties of metal-matrix composites.

**KEYWORDS**

Metal matrix composites; carbon nanotubes; functional properties; modeling; molecular dynamics.

**АННОТАЦИЯ**

Композиты с металлической матрицей представляют собой передовые материалы, способные демонстрировать повышенную прочность, сопротивление износу и ползучести, отличное демпфирование и пониженное тепловое расширение, что делает их пригодными для широкого спектра применений во многих областях промышленности, включая транспортную, бытовую, области транспорта, режущего инструмента, бытовой электроники, обороны, космоса, авиакосмическую, машиностроения и металлообработки и многие другие. Благодаря быстрому развитию нанотехнологий, возник растущий спрос на разработку новых нанокомпозитов с металлической матрицей для различных областей, таких как структурная инженерия и приложения для функциональных устройств. Одним из наиболее эффективных подходов к созданию композитов является армирование металлической матрицы материалами на углеродной основе – углеродными нанотрубками (УНТ) и фуллеренами. Проводится моделирова-

ние процессов нагрева и охлаждения композита металл – УНТ методом молекулярной динамики. Для моделирования использовано программное обеспечение LAMMPS и апробированный набор межатомных потенциалов. Установлено, что армирование металлических кристаллов УНТ приводит к изменению его температуры плавления. В данном случае было обнаружено снижение температуры плавления, что связано с повышением доли свободного объема, что, в свою очередь, определяется небольшим размером расчетной ячейки. В дальнейшем планируется увеличение размера рассматриваемой расчетной ячейки и определение влияния размера ячейки и геометрии упрочняющей компоненты на комплекс физико-механических свойств металломатричных композитов.

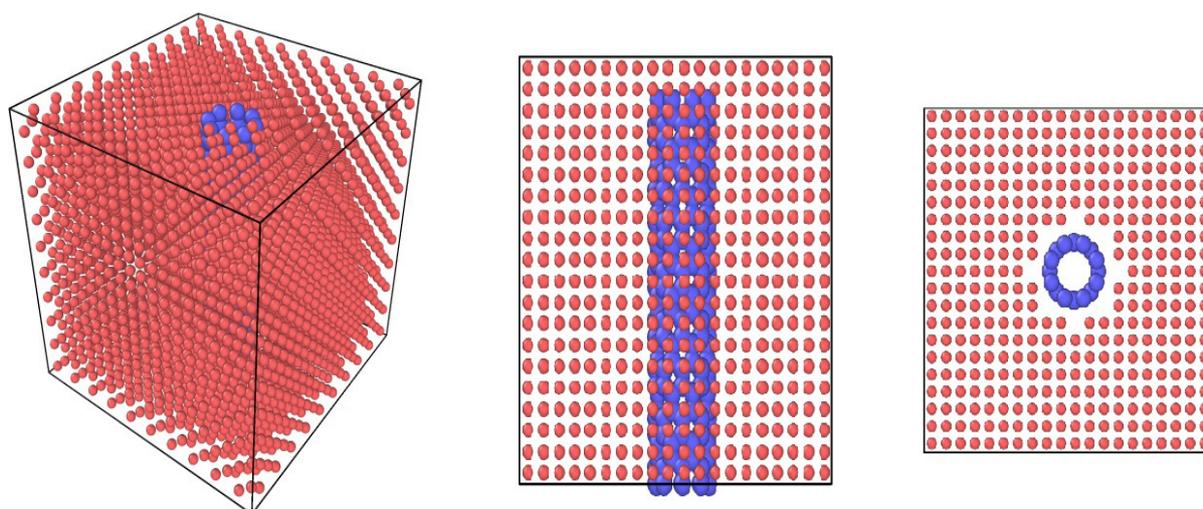
#### КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА

Металломатричные композиты; углеродные нанотрубки; функциональные свойства; моделирование; молекулярная динамика.

Нанокристаллические материалы, такие как графен, углеродные нанотрубки и их производные считаются высокоэффективными упрочняющими добавками в металлах [1]. Наиболее важным критерием для выбора упрочняющего материала является термодинамическая стабильность упрочняющих частиц по отношению к материалу изучаемого кристалла, т.е. отсутствие взаимной растворимости и возможности химического взаимодействия вплоть до температур плавления армируемого металла. Также при повышении температуры не должно наблюдаться процесса диффузионной коалесценции частиц [2]. В настоящее время активно изучается возможность использования наноструктур в качестве армируемых добавок при производстве композитов [3].

Для исследования механических и тепловых свойств нанокompозитов, армированных УНТ, на сегодняшний момент имеется ряд моделей [4]. В данной работе использовался метод молекулярной динамики. Был создан кристалл Pt посредством AtomsK [5]. Полученный кристалл был армирован однослойной углеродной нанотрубкой типа «zigzag» с хиральными индексами (8,0) (рис. 1).

При моделировании варьировался диаметр отверстия в кристалле Pt по отношению к диаметру УНТ. После проводилась релаксация системы в рамках NVE-ансамбля. Для дальнейших исследований выбиралась модель с наиболее устойчивой структурой. В данном случае радиус УНТ составил 3,31 Å, а отверстие в кристалле Pt – 6 Å.



**Рис. 1.** Модель кристалла Pt, армированного однослойной углеродной нанотрубкой типа «zigzag»

**Fig. 1.** Model of a Pt crystal reinforced with a “zigzag” single-walled CNT

Далее определяли температуру плавления чистого кристалла Pt и армированного УНТ. Методология эксперимента была следующая. В течение 0,3 нс модель находилась в состоянии равновесия при температуре 300 К. Далее система нагревалась в течение 3 нс от 300 до 3500 К, после чего 1 нс модель релаксировалась при температуре 3500 К. После этого следует охлаждение от 3500 до 300 К в течении 30,5 нс. Моделирование процессов нагревания и охлаждения чистой платины и системы Pt-C проводилось с помощью пакета LAMMPS. Для определения температуры плавления снималась зависимость потенциальной энергии от температуры, тем самым имелась возможность отслеживания фазовых трансформаций. Данная зависимость представлена на рис. 2.

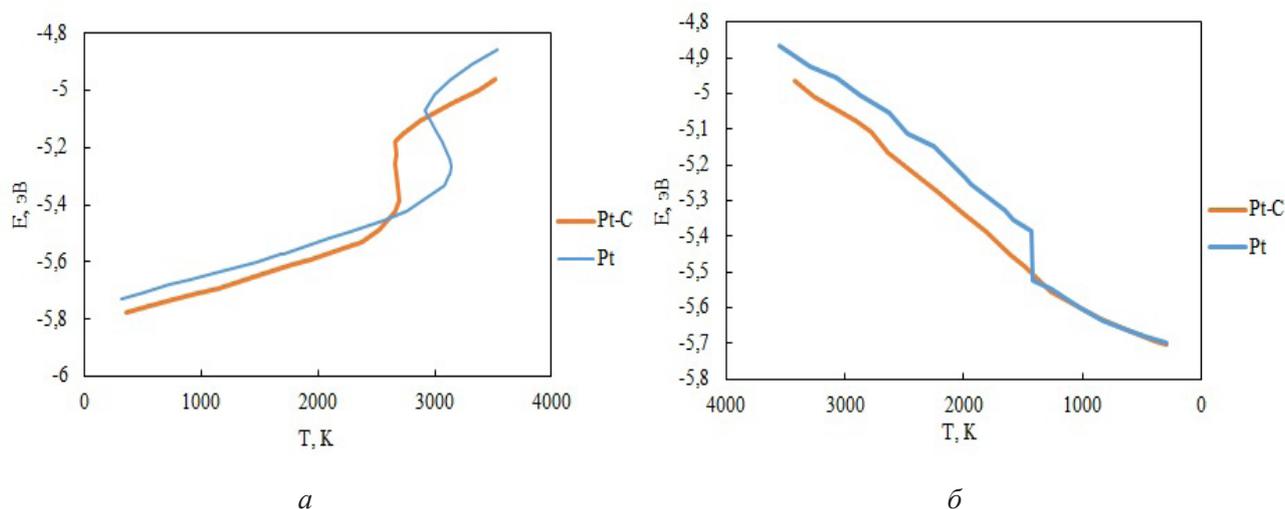
Из полученных данных можно определить температуру плавления платины посредством формулы:

$$T = T_{\text{нагр}} + T_{\text{охл}} - \sqrt{T_{\text{нагр}} \cdot T_{\text{охл}}},$$

где  $T$  – температура плавления;  $T_{\text{нагр}}$  – температура плавления при нагревании модели;  $T_{\text{охл}}$  – температура кристаллизации при охлаждении модели. Для платины расчет дает

значение равное 2392 К, что на 15% выше экспериментального значения. Это обусловлено идеальной кристаллической решеткой, отсутствием дефектов и свободных поверхностей. Далее рассмотрим кристалл с УНТ. Экспериментально было получено, что нанотрубки являются очень хорошими проводниками тепла [6–10]. По кривой нагрева расплав кристалла с УНТ происходит быстрее, при температуре порядка 2600 К, что свидетельствует о более низкой температуре плавления такого композита. Кривые охлаждения до 1400 К для обеих моделей идут параллельно. Охлаждение композита Pt-C происходит при меньшем значении потенциальной энергии, отсутствует фазовый переход. Однако, добиться наличия упорядоченной структуры не удалось. Это связано с наличием свободного объема, заключенного изначально в нанотрубке.

Армирование УНТ металла приводит к изменениям свойств материала, влияющим на температуру плавления. В данной работе было выявлено, что введение в модель углеродной нанотрубки приводит к уменьшению температуры плавления.



**Рис. 2.** Кривая зависимости потенциальная энергия-температура для кристалла Pt и Pt-C, армированного однослойной углеродной нанотрубкой типа «zigzag»:

*a* – нагрев; *б* – охлаждение

**Fig. 2.** Potential energy-temperature curve for Pt and Pt-C crystals, reinforced with a single-walled carbon nanotube of the “zigzag” type:

*a* – heating; *b* – cooling

**Благодарности**

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект № 21-12-00275.*

*The work was supported by the Russian Science Foundation (grant No. 21-12-00275).*

**Список литературы**

1. Mechanical Robustness of Metal Nanocomposites Rendered by Graphene Functionalization / L. Zhao et al. // *Nano Letters*. 2021. V. 21, No. 13. P. 5706–5713. DOI: 10.1021/acs.nanolett.1c01438.
2. Соколовская Е. Н., Гузей П. С. *Физикохимия композиционных материалов: учебник*. М.: Изд-во Московского ун-та, 1978. 255 с.
3. Tjong S. C. Novel nanoparticle-reinforced metal matrix composites with enhanced mechanical properties // *Advanced Engineering Materials*. 2007. V. 9, Iss. 8. P. 639–652. DOI: 10.1002/adem.200700106.
4. Ahmed K. S., Ibrahim I., Keng A. K. Advanced nanoindentation simulations for carbon nanotube reinforced nanocomposites // *Heliyon*. 2020. V. 6, Iss. 8. Article number E04575. DOI: 10.1016/j.heliyon.2020.e04575.
5. Hirel P. AtomsK: A tool for manipulating and converting atomic data files // *Comput. Phys. Comm.* 2015. V. 197. P. 212–219. DOI: 10.1016/j.cpc.2015.07.012.
6. Suk M. E. Effect of the Nanotube Radius and the Volume Fraction on the Mechanical Properties of Carbon Nanotube-Reinforced Aluminum Metal Matrix Composites // *Molecules*. 2021. V. 26, Iss. 13. Article number 3947. DOI: 10.3390/molecules26133947.
7. Shoukat R., Khan M. I. Carbon nanotubes: a review on properties, synthesis methods and applications in micro and nanotechnology // *Microsyst Technol.* 2021. V. 27, Iss. 12. P. 4183–4192. DOI: 10.1007/s00542-021-05211-6.
8. Comprehensive review on carbon nanotubes embedded in different metal and polymer matrix: fabrications and applications / Fahad Saleem Ahmed Khan et al. // *Critical Reviews in Solid State and Materials Sciences*. 2021. P. 28. DOI: 10.1080/10408436.2021.1935713.
9. Enhancing the thermoelectric performance of Cu–Ni alloys by introducing carbon nanotubes / M. Yuan et al. // *Materials Today Physics*. 2021. Vol. 16. Article number 100311. DOI: 10.1016/j.mtphys.2020.100311.
10. Thermal Conductivity and Viscosity: Review and Optimization of Effects of Nanoparticles / K. Apmann et al. // *Materials*. 2021. V. 14, Iss. 5. Article number 1291. DOI: 10.3390/ma14051291.