

**EFFECT OF CARBON NANOTUBES  
ON THE MECHANICAL PROPERTIES OF Ni<sub>3</sub>Al POLYCRYSTAL**

*Ustina Ildusovna Yankovskaya*<sup>1a</sup>, *Yulia Ravilievna Sharapova*<sup>2</sup>, *Pavel Vasilyevich Zakharov*<sup>3</sup>

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

<sup>2</sup> Ufa University of Science and Technology, Zaki Validi str. 32, Ufa, 450076, Russia

<sup>3</sup> Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, Polytechnicheskaya str. 29, St. Petersburg, 195251, Russia

<sup>a</sup> zalaevau@gmail.com

**ABSTRACT**

In recent years, due to the rapid development of nanotechnology, there has been an increasing demand for the development of new polycrystalline metal matrix systems for various applications in both high temperature and high pressure environments such as aircraft engines and gas turbines. In this paper, using molecular dynamics modeling with an embedded atom potential (EAM), we consider the effectiveness of strengthening the Ni<sub>3</sub>Al alloy when reinforced with carbon-based materials – carbon nanotubes (CNTs) and fullerenes: single-walled carbon nanotubes of the “zigzag” type under uniaxial tension. It was found that the introduction of a small fraction of CNTs (about 3%) into the Ni<sub>3</sub>Al polycrystal leads to a significant increase in the rigidity of the Ni<sub>3</sub>Al-CNT composites compared to pure Ni<sub>3</sub>Al. It is shown that the reinforcement of CNTs under tension works continuously, i.e. the action extends both in the elastic and in the plastic stage.

**KEYWORDS**

Carbon nanotubes; reinforcement; modeling; mechanical properties; molecular dynamics method.

**ВЛИЯНИЕ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК  
НА МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПОЛИКРИСТАЛЛА Ni<sub>3</sub>Al**

*Устина Ильдусовна Янковская*<sup>1a</sup>, *Юлия Равильевна Шарипова*<sup>2</sup>, *Павел Васильевич Захаров*<sup>3</sup>

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

<sup>2</sup> Уфимский университет науки и технологий, Россия, 450076, Уфа, ул. Заки Валиди, 32

<sup>3</sup> Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Россия, 195251, Санкт-Петербург, ул. Политехническая, 29

<sup>a</sup> zalaevau@gmail.com

**АННОТАЦИЯ**

В последние годы, благодаря быстрому развитию нанотехнологий, возник растущий спрос на разработку новых поликристаллических систем с металлической матрицей для различных областей: в средах как с высокой температурой, так и с высоким давлением, например, та-

ких как авиационные двигатели и газовые турбины. Данная статья предлагает теоретический вариант для прогнозирования механических свойств композитов с металлической матрицей, армированных углеродной нанотрубкой (УНТ), на основе микромасштабных моделей. В данной работе с использованием моделирования методом молекулярной динамики с потенциалом встроенного атома (ЕАМ) рассмотрена реакция на одноосное растяжение сплава  $Ni_3Al$ , армированного однослойной УНТ типа «зигзаг». Было выявлено, что введение небольшой доли УНТ (около 3%) в поликристалл  $Ni_3Al$  приводит к улучшению механических свойств композитов  $Ni_3Al$ -УНТ по сравнению с «чистым»  $Ni_3Al$ . Выявлено, что упругие свойства улучшаются более чем на 6% (Модуль Юнга = 237,31 ГПа) по сравнению со сплавом  $Ni_3Al$ . Показано, что армирование УНТ при растяжении работает непрерывно, т.е. действие распространяется и в упругой, и в пластической стадии. Максимальное напряжение композита уменьшилось примерно на 6%.

## КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА

Углеродные нанотрубки; армирование; моделирование; механические свойства; метод молекулярной динамики.

### Введение

Одним из подходов к поиску новых технологических материалов является создание композитов на основе металлической матрицы и низкоразмерных углеродных структур. Эти материалы обладают уникальным сочетанием свойств, которых сложно добиться от классических композиционных материалов. В частности, речь идет о механической прочности, пластичности и хрупкости. Среди всех армирующих элементов на основе углерода выделяются углеродные нанотрубки (УНТ). С момента открытия УНТ был изучен их вклад в качестве эффективного армирующего элемента для композита из-за их уникальных механических свойств, содержащих низкую плотность, гораздо более высокий модуль Юнга, высокое растягивающее напряжение и деформацию разрушения [1, 2].

Особый интерес в качестве матрицы для таких композитов вызывают суперсплавы. Среди них выделим суперсплавы на основе никеля и алюминия, они нашли широкое применение из-за их превосходной жаропрочности и стойкости к окислению [3, 4]. Эти интерметаллические материалы обладают многими превосходными свойствами, в том числе низкой плотностью, высокой температурой плавления, хорошей стойко-

стью к окислению и коррозии [5, 6]. В данной работе рассматривается композит на основе металлической матрицы сплава  $Ni_3Al$ . Он является довольно хрупким материалом, что ограничивает его более широкое применение. Поэтому армирование его УНТ видится крайне перспективным.

Сложность создания таких композитов накладывает серьезные ограничения на экспериментальное их исследование. Поэтому в последнее время все больше внимания уделяется моделированию композитов на основе металлической матрицы [7–9]. Такой подход позволяет с достаточной степенью точности предсказать свойства композита и в то же время проверить большое количество вариантов компоновки. Кроме того, моделирование позволяет проверить полученный материал при различных экстремальных условиях, что зачастую, невозможно сделать в натурном эксперименте с достаточной степенью контроля всех параметров [10–12].

Так в ряде работ при исследовании, например, композита Pt-УНТ [13–15] изучен широкий спектр характеристик такого композита. Показано, что предел текучести при растяжении увеличивается с ростом скоростей деформации, а модуль упругости имеет, скорее, тенденцию к уменьшению в этом же процессе. При этом имеет важность массовая

доля УНТ в композите. В ряде работ [16–18] имеются экспериментальные данные, говорящие о том, что имеется оптимальное значение объемной и массовой долей УНТ для различных характеристик композита. Тем самым проверяя в моделировании множество различных вариантов, можно предоставить экспериментаторам исходные данные для поиска оптимального сочетания компонент композита для улучшения того или иного свойства материала.

Как уже отмечалось в этой работе, рассматривается композит  $Ni_3Al$ -УНТ. В отличие от чистых металлов с УНТ, интерметаллиды более сложны в получении, но в то же время обладают более перспективными

свойствами. Мы рассматриваем композит с однослойной нанотрубкой в квадратном блоке, который моделирует свободные границы. Основное внимание уделено процессу одноосного растяжения и, соответственно, характеристикам материала при этом. Сравнение производится с кристаллитом без дефектов и при тех же термодинамических параметрах.

### 1. Модель и методы эксперимента

Модель элементарной ячейки композита УНТ- $Ni_3Al$ , принятая в данной работе, показана на рис. 1.  $Ni_3Al$  представляет собой интерметаллический сплав с гранецентрированной кубической структурой  $L1_2$ .

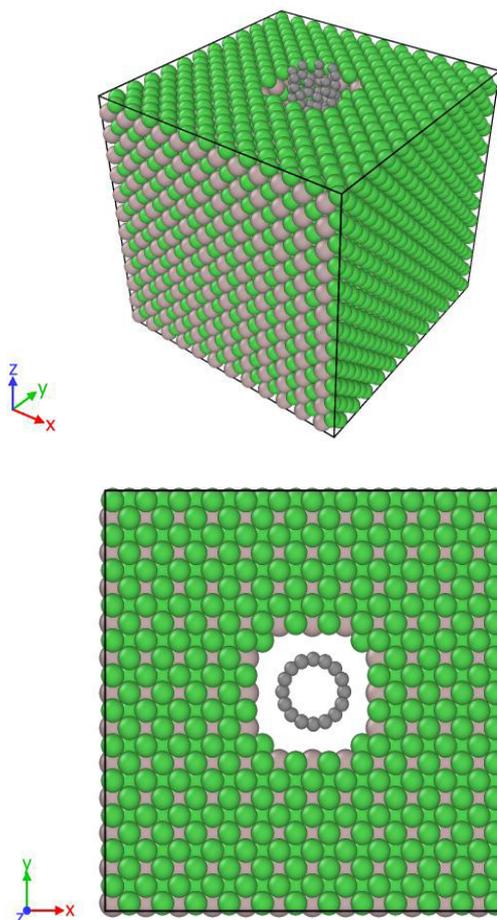


Рис. 1. Модель кристалла  $Ni_3Al$ , армированного однослойной углеродной нанотрубкой типа «zigzag» (0,8)

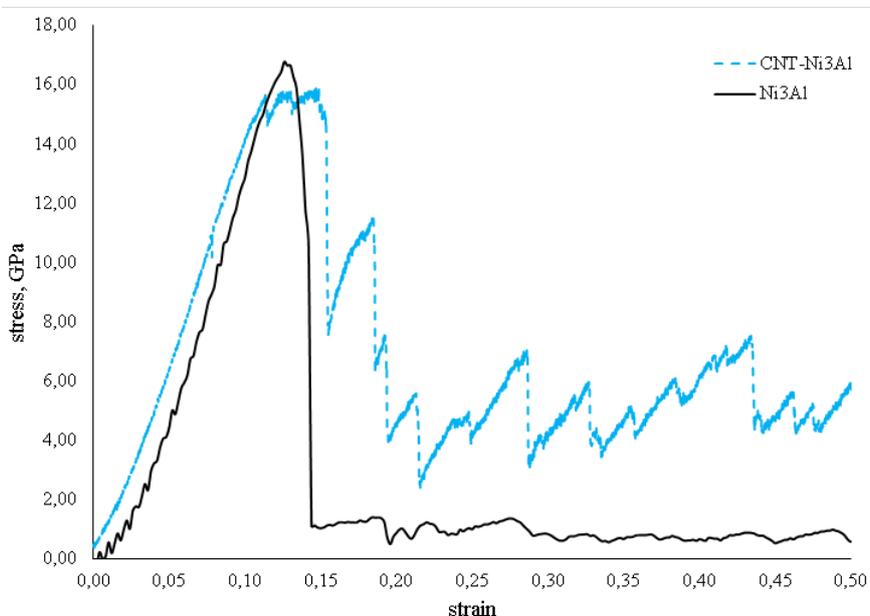
Fig. 1. Model of a  $Ni_3Al$  crystal reinforced with a “zigzag” (0.8) single-walled CNT

Матрица  $\text{Ni}_3\text{Al}$  имеет форму квадратной призмы с постоянной кристаллической решетки  $a = 3,57 \text{ \AA}$ . Размеры элементарной ячейки составляют  $10a \times 10a \times 10a$  по осям  $x$ ,  $y$ ,  $z$  соответственно. Оси  $x$ ,  $y$ ,  $z$  изначально выровнены с ориентациями решетки  $\text{Ni}_3\text{Al}$   $[100]$ ,  $[010]$  и  $[001]$  соответственно. УНТ «вставлено» в цилиндрическое отверстие по высоте матрицы  $\text{Ni}_3\text{Al}$ . Радиус отверстия подобран таким образом, чтобы расстояние между атомами  $\text{Ni}_3\text{Al}$  и атомами УНТ составлял  $3 \text{ \AA}$ , что гарантирует точное межатомное взаимодействие. В качестве эталона рассчитана элементарная ячейка из чистого  $\text{Ni}_3\text{Al}$  той же геометрии. Создание моделей со свободными границами проводилось посредством AtomsK [19]. Перед выполнением моделирования на одноосное растяжение элементарная ячейка, в первую очередь, минимизируется до низкоэнергетического состояния. После этого проводится релаксация структуры при постоянной температуре  $T = 300 \text{ K}$  и постоянном давлении  $p = 0 \text{ бар}$  (ансамбль NPT) с шагом по времени  $0,5 \text{ фс}$  в течение  $1000 \text{ пс}$  для устранения внутренних остаточных напряжений и стабилизации структуры. Ансамбли NVE во время моде-

лирования на одноосное растяжение применяется при температуре  $T = 300 \text{ K}$ . Периодические граничные условия применяются во всех трех измерениях, чтобы свести к минимуму размерные эффекты, вызванные ограниченным размером имитационной модели. Моделирование методом молекулярной динамики выполняется с использованием кода крупномасштабного атомно-молекулярного массивно-параллельного симулятора (LAMMPS) [20].

## 2. Результаты и обсуждения

Для анализа роли УНТ в прочностных характеристиках производился расчет напряжений на каждом шаге моделирования. Расчетные кривые напряжение-деформация для кристалла  $\text{Ni}_3\text{Al}$  и композита УНТ- $\text{Ni}_3\text{Al}$  при растягивающей нагрузке при  $T = 300 \text{ K}$  показаны на рис. 2. Такие зависимости позволяют отследить напряжения, возникающие в образце на каждом этапе деформации. Кроме того, по характеру зависимостей можно судить об изменении фаз, формировании дефектных структур и прочих особенностях конкретного образца.



**Рис. 2.** Кривые зависимости напряжения от деформации для кристалла  $\text{Ni}_3\text{Al}$  и УНТ- $\text{Ni}_3\text{Al}$  при одноосном растяжении (свободные границы) при скорости деформации  $1 \times 10^9 \text{ ps}^{-1}$

**Fig. 2.** Stress-strain curves for a  $\text{Ni}_3\text{Al}$  and CNT- $\text{Ni}_3\text{Al}$  crystal under uniaxial tension (free boundaries) at a strain rate of  $1 \times 10^9 \text{ ps}^{-1}$

В режиме малых деформаций ( $0 \leq \varepsilon \leq 0,1$ ), которые обозначают стадию упругой деформации, отношения между напряжениями и деформациями почти линейны для обоих кривых. Модули упругости были получены посредством регрессионного анализа. По сравнению со значением чистого  $\text{Ni}_3\text{Al}$ , которое было получено равным 222 ГПа, эластичные свойства композита УНТ- $\text{Ni}_3\text{Al}$  показывают прирост на 6,9% (237,31 ГПа).

Отметим, что наличие пиков на кривых деформации композита обусловлено проскальзыванием УНТ вдоль интерметаллида, тем самым происходит плавное нарастание напряжения с последующим резким спадом. Это позволяет повысить прочность таких материалов за пределом текучести.

### Выводы

Таким образом, посредством моделирования методом молекулярной динамики было получено, что армирование углеродными нанотрубками поликристаллического композита с металлической матрицей приводит к увеличению упругих свойств при одноосной растягивающей нагрузке. Тем самым показано, что такие композиты могут увеличить эксплуатационные характеристики различных изделий на основе интерметаллида  $\text{Ni}_3\text{Al}$ .

### Благодарности / Acknowledgments

*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

- 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. V. 69, No. 3. P. 255–260. DOI: 10.1007/s003390050999.
- Ruoff R. S., Lorents D. C. Mechanical and Thermal Properties of Carbon Nanotubes // *Carbon*. 1995. V. 33, No. 7. P. 925–930. DOI: 10.1016/0008-6223(95)00021-5.
- Geddes B., Leon H., Huang X. Superalloys: Alloying and Performance. USA: ASM International, 2010. 184 p.
- Reed R. C. The Superalloys: Fundamentals and Applications. UK: Cambridge university press, 2008. 372 p.
- Li Y., Zhao J., Zeng G., Guan C., He X. Ni/Ni<sub>3</sub>Al microlaminate composite produced by EB-PVD and the mechanical properties // *Materials Letters*. 2004. V. 58, Iss. 10. P. 1629–1633. DOI: 10.1016/j.matlet.2003.09.052.
- Pollock T., Tin S. Nickel-Based Superalloys for Advanced Turbine Engines: Chemistry, Microstructure and Properties // *J. Propul. Power*. 2006. V. 22, No. 2. P. 361–374. DOI: 10.2514/1.18239.
- Zhao L., Lee T., Ryu S., Oshima Y., Guo Q., Zhang D. Mechanical Robustness of Metal Nanocomposites Rendered by Graphene Functionalization // *Nano Letters*. 2021. V. 21, Iss. 13. P. 5706–5713. DOI: 10.1021/acs.nanolett.1c01438.
- Соколовская Е. Н., Гузей П. С. Физикохимия композиционных материалов: учебник. М.: Изд-во Московского ун-та, 1978. 255 с.
- 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.
- Dong S., Zhu C., Chen Y. and Zhao J. Buckling behaviors of metal nanowires encapsulating carbon nanotubes by considering surface/interface effects from a refined beam model // *Carbon*. 2019. V. 141. P. 348–362. DOI: 10.1016/j.carbon.2018.09.059.
- Shang J., Yang F., Li C., Wei N., Tan X. Size effect on the plastic deformation of pre-void Ni/Ni<sub>3</sub>Al interface under uniaxial tension: A molecular dynamic simulation // *Comp. Mater. Sci*. 2018. V. 148. P. 200–206. DOI: 10.1016/j.commatsci.2018.02.046.
- Cong Z., Lee S. Study of mechanical behavior of BNNT-reinforced aluminum composites using molecular dynamics simulations // *Compos. Struct*. 2018. V. 194. P. 80–86. DOI: 10.1016/j.compstruct.2018.03.103.
- Янковская У. И., Старостенков М. Д., Захаров П. В. Молекулярно-динамическое исследование механических свойств кристалла платины, армированного углеродной нанотрубкой при одноосном растяжении // *Компьютерные исследования и моделирование*. 2022. Т. 14, № 5. С. 1069–1080. DOI: 10.20537/2076-7633-2022-14-5-1069-1080.
- Yankovskaya U. I., Zakharov P. V., Starostenkov M. D., Markidonov A. V., Korznikova E.A. Behavior of platinum reinforced with carbon nanotubes under compressive load // *Fundamental problems of modern materials science*. 2022. V. 19, No. 3. P. 295–303. DOI: 10.25712/ASTU.1811-1416.2021.04.003.

15. Yankovskaya U. I., Zakharov P. V. Construction of a Molecular Dynamics Model of a Pt Crystal Reinforced with CNTs // *Mathematical and computer modeling*. 2021. P. 109–111.

16. Янковская У. И., Захаров П. В., Старостенков М. Д., Маркидонов А. В., Корзникова Е. А. Поведение платины, армированной углеродной нанотрубкой, при сжимающей нагрузке // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2022. Т. 19, № 3. С. 295–303. DOI: 10.25712/ASTU.1811-1416.2021.04.003.

17. Янковская У. И., Захаров П. В. Устойчивость к нагреву кристалла платины, армированного

углеродными нанотрубками // *Materials. Technologies. Design*. 2021. Т. 3, № 4. С. 64–67. DOI: 10.54708/26587572\_2021\_34664.

18. Yankovskaya U. I., Starostenkov M. D., Zakharov P. V. Studying the effect of CNT as a reinforcing element on the properties of composites with a metal matrix // *Materials in external fields (ISMEF 2022)*, Novokuznetsk, 2022. P. 73–75.

19. 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.

20. LAMMPS Molecular Dynamics Simulator. URL: <http://www.cdc.gov/kawasaki/>