Упрочнение поверхности никеля нанопокрытием на основе графена: атомистическое моделирование

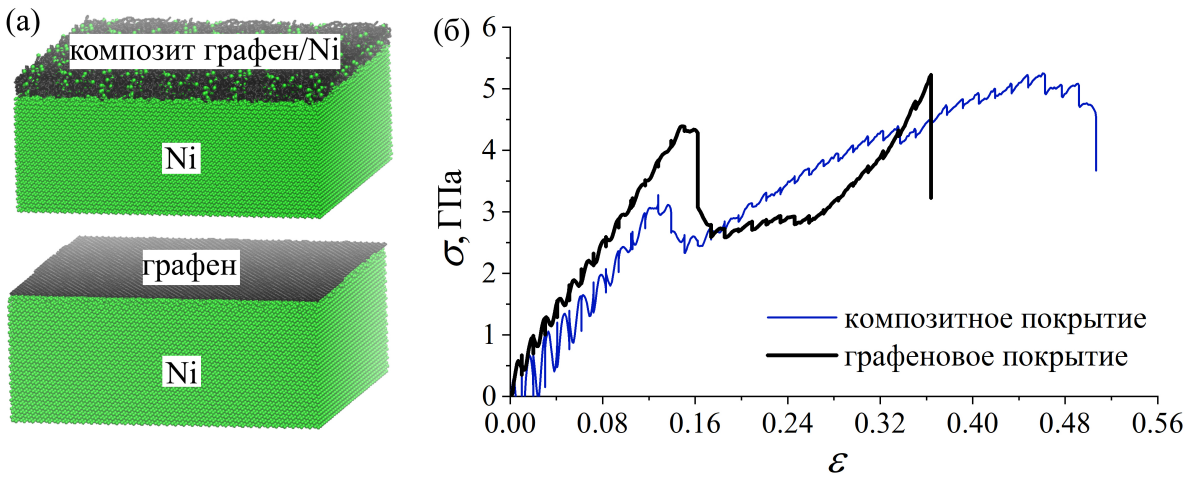
Сафина Л.Р. [1] , *Крылова К.А.* [1] , *Баимова Ю.А.* [1]

saflia@mail.ru
[1] ИПСМ РАН, г. Уфа, Россия

Благодаря своим уникальным свойствам, таким как повышенная коррозионная стойкость, прочность и твердость, графен считается одним из наиболее перспективных материалов для улучшения свойств металлов. Одним из важных задач является повышение механических свойств металла, а также защита его поверхности от различных внешних факторов. В данной работе методом атомистического моделирования исследуется влияние графенового нанопокрытия и композитного нанопокрытия графен-Ni на механические свойства монокристалла Ni.

Для исследования выбран монокристалл Ni, покрытый однослойным графеновым нанопокрытием и композитным нанопокрытием графен/Ni толщиной 1.0 нм. Способ получения композита графен/Ni и его механические свойства подробно описаны в работе [1]. Для описания взаимодействия атомов C-C, Ni-C, Ni-Ni используются потенциалы, представленные в работе [1]. Механические свойства структур оцениваются в процессе одноосного растяжения. Численные эксперименты выполняются в свободно распространяемом пакете молекулярно-динамического моделирования LAMMPS.

На рис. 1а,б показаны начальные структуры, а также кривые напряжение-деформация после одноосного растяжения монокристалла Ni с разными нанопокрытиями на основе графена. Из кривых видно, что предел прочности структур практически совпадает. Однако, монокристалл Ni, покрытый композитом графен-Ni демонстрирует большую пластичность (см. рис. 1). Это можно объяснить наличием довольно сильной связи между наночастицами Ni и графеном в композитном нанопокрытии. Так, наночастицы Ni, взаимодействуя чешуйками графена, препятствуют быстрому разрушению графеновой сетки.



(а) Начальные структуры и (б) кривые напряжение-деформация после одноосного растяжения монокристалла Ni с разными нанопокрытиями на основе графена.

Ссылки

1. L.R. Safina, K.A. Krylova, J.A. Baimova. Mater. Today Phys. (2022) 28, 100851.