

УДК 539.2; 539.5

DOI 10.33113/mkmk.ras.2019.25.04.531\_542.06

## ДЕФОРМАЦИОННОЕ ПОВЕДЕНИЕ КОМПОЗИТА ГРАФЕН-НИКЕЛЬ, ПОЛУЧЕННОГО ПРИ ПОВЫШЕННЫХ ТЕМПЕРАТУРАХ\*

Сафина Л.Р.<sup>1</sup>, Баимова Ю.А.<sup>1,2</sup><sup>1</sup>*Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия*<sup>2</sup>*Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, г. Уфа, Россия*

### АННОТАЦИЯ

Композиты, получаемые путем комбинирования двух или более материалов, часто демонстрируют ряд уникальных свойств. В последние десятилетия большой интерес вызывают композиты на основе углеродных структур и наночастиц металлов. В данной работе методом молекулярной динамики изучено деформационное поведение композита графен-никель при температурах близких к 0 К и повышенных температурах. Моделирование проводилось с использованием простого парного межатомного потенциала Морзе. Для формирования композита на основе скомканного графена и наночастиц никеля, применялось гидростатическое сжатие при температурах от 0 до 2000 К. Чтобы оценить прочность полученного материала, к структуре прикладывалось гидростатическое растяжение. Показано, что гидростатическое сжатие при температуре близкой 0 К не приводит к образованию композита. Между соседними чешуйками графена не возникают химические связи, в следствии чего, полученный материал после растяжения возвращается в свое исходное состояние. Деформация структуры при 2000 К, способствует образованию ковалентных связей между соседними структурными элементами и происходит формирование единой композитной структуры.

**Ключевые слова:** наночастица никеля; скомканный графен; молекулярная динамика; композит

## DEFORMATION BEHAVIOR OF THE GRAPHEN-NICKEL COMPOSITE OBTAINED AT FINAL TEMPERATURES

Safina L.R.<sup>1</sup>, Baimova J.A.<sup>1,2</sup><sup>1</sup>*Bashkir State University, Ufa, Russia*<sup>2</sup>*Institute for Metals Superplasticity Problems of RAS, Ufa, Russia*

### ABSTRACT

Composites, obtained by combining two or more materials often exhibit a number of unique properties. For last decades, composites based on carbon structures and metal nanoparticles are of great interest. In this work, the deformation behavior of the graphene-nickel composite at temperatures close to 0 K and elevated temperatures was studied by the molecular dynamics simulation. Modeling was carried out using a simple pairwise interatomic Morse potential. To obtain a composite based on crumpled graphene and nickel nanoparticles,

\* Работа Л.Р.Сафиной поддержана грантом Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых – докторов наук (МД-1651.2018.2), работа Ю.А.Баимовой поддержана гос.заданием ИПСМ РАН.

hydrostatic compression is used at temperatures from 0 to 2000 K. In order to evaluate the strength of the obtained material, hydrostatic tension is applied to the structure. It is shown that hydrostatic compression at a temperature close to 0 K does not lead to the formation of a composite. Chemical bonds do not form between neighboring graphene flakes, and after stretching the resulting material returns to its original state. The deformation of the structure at 2000 K contributes to the formation of covalent bonds between adjacent structural elements and the formation of a single composite structure.

**Keywords:** nickel nanoparticle; crumpled graphene; molecular dynamics; graphene-nickel composite

## ВВЕДЕНИЕ

В последние десятилетия различные наноматериалы, в том числе композитные, рассматриваются как перспективные для большого спектра применений. Среди таких материалов, структуры на основе наноразмерных полиморфов углерода и наночастиц металлов представляют большой интерес. Было показано, что некоторые металлы, такие как Ni, Pt, Pd и Ti, легко и очень активно взаимодействуют с полиморфами углерода [1-3]. Следовательно, частицы таких металлов могут быть заключены внутрь углеродных нанотрубок или фуллеренов или обернуты чешуйками графена, а затем преобразованы в трехмерную композитную структуру, где после специальной обработки отделенные чешуйки будут соединены ковалентными связями [3,4]. Ранее наблюдалось, что графен при взаимодействии с металлическими наночастицами Ni изменяет свою структуру [5].

Композиты на основе углеродного материала и металла имеют малый вес, высокую жесткость и превосходные механические свойства, которые могут играть важную роль для практического применения [6-10]. Особый класс композитов представляют материалы, образованные на основе комбинации наночастиц

Ni с углеродной матрицей [11-14]. Такие композиты могут быть получены путем прикрепления различных типов наночастиц к поверхности чешуек графена как *in-situ* (например, выращивание наночастиц на поверхности графена), так и *exitu* (например, путем прикрепления предварительно изготовленных наночастиц к поверхности графена) [15].

Один из вариантов углеродных структур, подходящих для заполнения наночастицами металлов, является скомканный графен, который в последнее время активно исследуется с точки зрения его использования в энергетике и других применениях [16,17,18,19]. Такая структура представляет собой пористый материал, состоящий из смятых, скомканных листов графена разного размера, соединенных между собой силами Ван-дер-Ваальса. Выбор наночастиц Ni в качестве наполнителя для скомканного графена является довольно очевидным, поскольку структуры никель-графен рассматриваются в качестве перспективных материалов и их взаимодействие хорошо исследовано. Так, например, Ni был успешно использован для катализа роста полиморфов углерода [20,21], изготовления новой углеродной конфигурации, такой как нанорулоны [22,23], трансформации графена в фуллерен [24] и т.д. Добавление Ni в углеродную структуру может значительно улучшить свойства получаемого материала. Например, никелевые пленки на графене сохраняют свою стабильность даже при очень высоких температурах до 1800 K [25,26]; допирование атомами Ni

улучшает механические свойства углеродных нанотрубок [2]; показана возможность получения улучшенных суперконденсаторов за счет сочетания слоев Ni и углеродных структур [27]. Таким образом, изучение структуры на основе скомканного графена и наночастиц Ni и возможности получения композита с улучшенными механическими свойствами представляет большой интерес.

Целью настоящей работы является изучение методом молекулярной динамики деформационного поведения и структурных изменений композита графен-никель. Моделирование проводится с использованием широко известного потенциала Морзе. Для того, чтобы сформировать композит, прикладывается гидростатическое сжатие до максимально возможных плотностей при повышенных температурах.

### ОПИСАНИЕ МОДЕЛИ

Единичный элемент трехмерной структуры – свернутая чешуйка графена – получена из короткой углеродной нанотрубки удалением ряда атомов углерода в направлении ее оси (количество атомов углерода  $N_C=252$ ). После чего в полость чешуйки введена малая наночастица никеля размером  $5.5 \text{ \AA}$ , ( $N_{Ni}=21$ ). Общее количество атомов в системе  $N=17472$ . Трехмерная структура создана повторением четырех структурных единиц вдоль направлений  $x$ ,  $y$  и  $z$  соответственно (см. рис.1). Чешуйки, заполненные наночастицами, были ориентированы в пространстве случайным образом. Во всех случаях использовались периодические граничные условия вдоль направлений  $x$ ,  $y$  и  $z$ .

Моделирование проводилось с использованием пакета LAMMPS с адаптированным эмпирическим потенциалом межмолекулярного взаимодействия AIREBO [28]. Для описания взаимодействия атомов Ni-Ni и Ni-C использовался потенциал Морзе с параметрами, полученными методом *ab-initio*, демонстрирующий хорошее согласие с экспериментально полученными величинами [29,29]. Несмотря на то, что потенциал Морзе является простым парным потенциалом он хорошо воспроизводит многие свойства систем при различных условиях [31-34]. Параметры для потенциала Морзе Ni-C:  $D=0,433 \text{ эВ}$ ,  $r_e=2,316 \text{ \AA}$  и  $\beta=3,244 \text{ 1/\AA}$ , что указывает на связь типа Ван-дер-Ваальса между Ni и графеном. Для описания взаимодействия атомов Ni-Ni использовались параметры, предложенные в работе [35]:  $D_e=0.4205 \text{ eV}$ ,  $\beta=1.4199 \text{ 1/\AA}$  и  $R_e=2.78 \text{ \AA}$ . В [3] показано, что такие параметры могут быть успешно использованы для описания различных полиморфных форм углерода с нанокластерами Ni. Кроме того, результаты, полученные методом молекулярной динамики с помощью недавно разработанного потенциала реактивных силовых полей ReaxFF (Reactive Force Field) [36,37,38], показали, что результаты, получаемые разными потенциалами находятся в хорошем согласии, однако потенциал Морзе позволяет получить результат в несколько раз быстрее [39].

Для того, чтобы сформировать прочный композитный материал, к начальной (рис.1), довольно рыхлой структуре, прикладывается гидростатическое сжатие до максимально возможных плотностей при разных температурах от 0 до 2000 К. Температура поддерживается с помощью термостата Nose-Хувера. В процессе деформации структуры рассчитывается

гидростатическое давление  $p = (\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz})/3$ , а также другие необходимые характеристики материала.

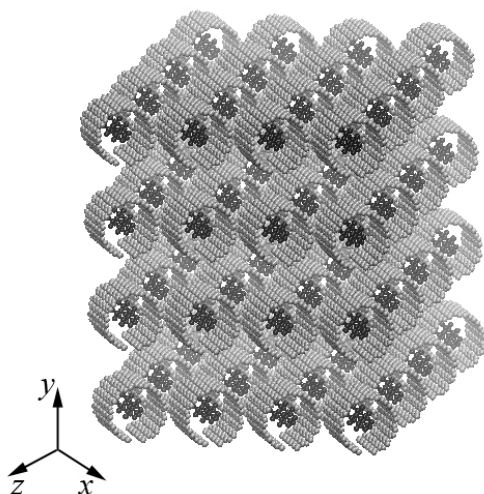


Рис.1. Начальный вид структуры графен-никель: чешуйки скомканного графена, заполненные наночастицами никеля. Светлым цветом показаны атомы углерода, темным – атомы никеля.

## РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Деформационное поведение полученного материала можно описать кривыми давление-деформация, показанными на рис.2а, однако иногда подобные пористые материалы удобнее описать зависимостью давление-плотность, показанными на рис.2б. Рассматриваемая структура может быть гидростатически сжата до высоких плотностей около  $5 \text{ г/см}^3$ .

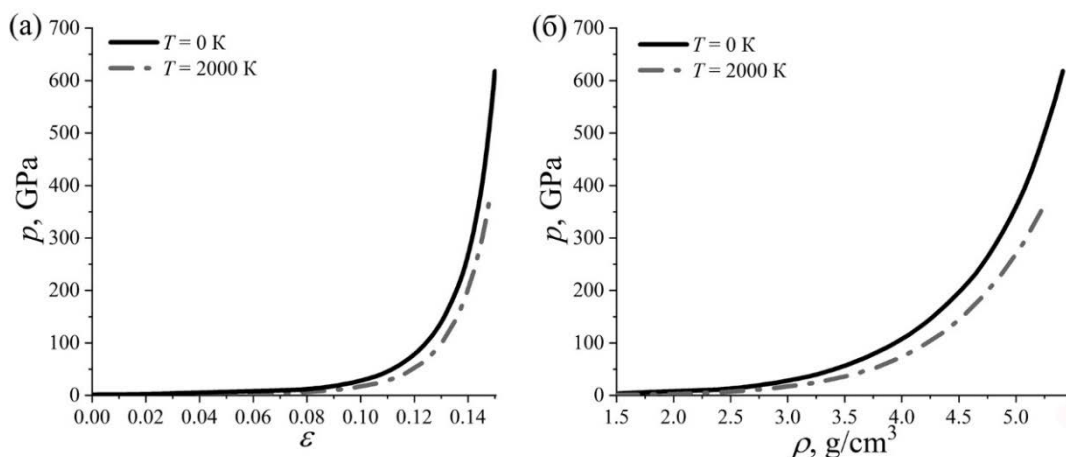


Рис.2. (а) Кривые давление-деформация и (б) давление-плотность при гидростатическом сжатии для двух исследованных температур.

На рис.2а представлены кривые давление-деформация при гидростатическом сжатии при температурах 0 и 2000 К. Следует отметить, что представлены лишь крайние случаи, показывающее максимальное отличие результатов, в то время как в процессе исследования сравнивались кривые при температурах 300 К, 500 К, 1000 К и 1500 К. В целом температура положительно

влияет на динамику формирования композитной структуры. Как видно из рис.2б, при высоких температурах наблюдается снижение критического давления при достижении той же конечной плотности.

Чтобы оценить прочность полученного композита, следующим этапом проведено испытание материала на гидростатическое растяжение. На рис.3а представлены кривые давление-деформация при растяжении для структуры гидростатически сжатой при 0 (сплошная линия) и 2000 К (пунктирная линия). Для структуры, сжатой при температуре 0 К, заметное увеличение  $p$  наблюдается до  $\varepsilon=0.2$ , после чего дальнейшее растяжение фактически не приводит к увеличению напряжений. В этом случае структурные элементы остались отдельными углеродными частицами, заполненными частицей металла, образования новых ковалентных связей не обнаружено. Такая кривая напряжение-деформация соответствует случаю растяжения материала, состоящего из отдельных элементов, а не цельного композитного материала.

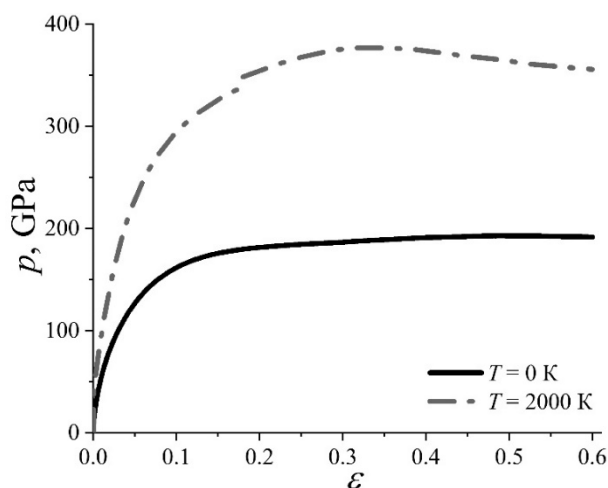


Рис.3. Кривые давление-деформация при растяжении после гидростатического сжатия при  $T = 0$  и  $T = 2000 \text{ К}$ .

Сжатие при 2000 К, наоборот, привело к активному формированию новых связей и трансформации в единый композитный материал. На кривой напряжение-деформация виден характерный рост напряжений с увеличением растягивающей деформации и их последующее снижение после  $\varepsilon=0.3$ , когда начался процесс появления пор. Как видно, при повышенных температурах достигнутые напряжения в два раза больше, чем при гидростатическом сжатии при 0 К. Полностью охарактеризовать происходящие процессы можно используя визуализацию атомной структуры.

На рис.4 представлены структуры при разных степенях растяжения при  $T = 0 \text{ К}$  (а) и  $T = 2000 \text{ К}$  (б). Из рис.4а хорошо видно, что структурные единицы при деформации  $\varepsilon=0.3$  начинают легко отделяться друг от друга в отличие сжатых при высокой температуре (рис.4б), где появление пор наблюдается гораздо позже. Даже по структурам при  $\varepsilon=0.1$  видно, что при 2000 К произошло значительное перемешивание элементов. При деформации  $\varepsilon=0.6$  (рис.4а) можно отчетливо наблюдать отсоединённые друг от друга чешуйки графена с наночастицей внутри, обернутой графеновой чешуйкой. Поры распределены практически равномерно, структурные элементы остались на своих местах и при больших деформациях структура разрушится на отдельные

элементы. Тем не менее, приложенное сжатие привело к появлению малого количества связей (цепочки атомов между отдельными чешуйками на рис.4а при  $\varepsilon=0.6$ ).

Структура, деформированная при 2000 К также начала разрушаться при  $\varepsilon=0.6$ , однако пор гораздо меньше, они распределены случайным образом в тех участках, где не удалось создать прочное ковалентное соединение. Анализ ближайших соседей показал, что большинство атомов углерода при таких условиях изменяют свою гибридизацию с  $sp^2$  на  $sp^3$ , следовательно, атомы углерода соседних чешуек соединились между собой. Можно сделать вывод, что деформация структуры при температуре при 2000 К приводит к образованию химических связей между отдельными единичными элементами структуры и за счет возникновения ковалентных связей повышаются прочностные свойства композита.

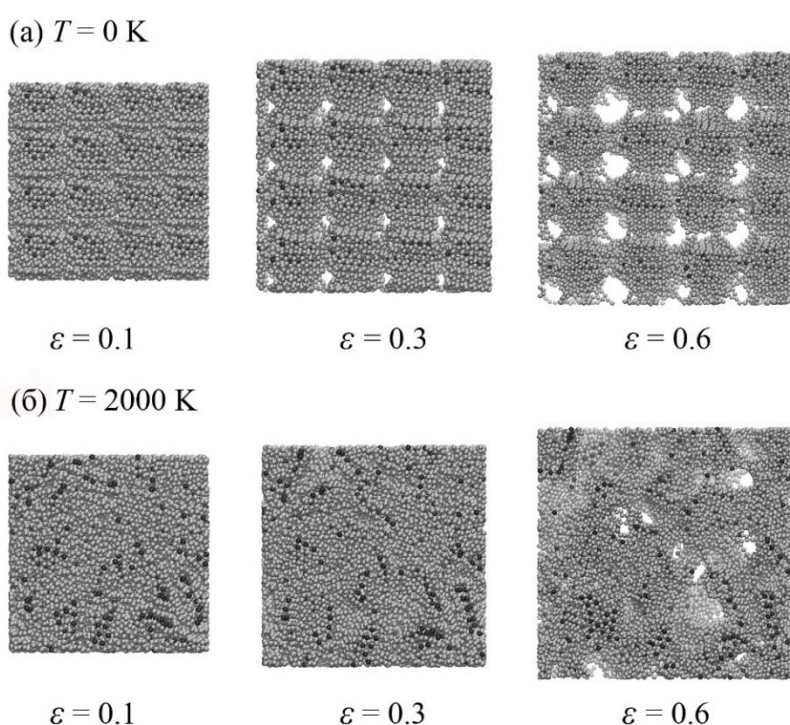


Рис.4. Структуры при растяжении для разной степени деформации и двух температур 0 и 2000 К.

Как было установлено в работе, простое сжатие структуры при нулевой или комнатной температуре даже до очень высоких плотностей не приводит к формированию композита: между чешуйками графена возникает очень мало ковалентных связей. Как известно, температура плавления графена достаточно высока [40,41,42]. Чтобы происходили структурные перестройки необходимы температуры около 2000 К. При этом следует учитывать, что температура плавления столь малых наночастиц никеля составляет около 1300 К [3] и при высоких температурах можно добиться их плавления и лучшего распределения внутри углеродной матрицы. Гидростатическое сжатие при температурах 1000 К и 1500 К также приводит к достаточно хорошим результатам, однако активность атомов углерода при этих температурах ниже, чем при температурах больше 1500 К.

## ВЫВОДЫ

Таким образом, методом молекулярной динамики изучено влияние гидростатического сжатия в интервале температур от 0 до 2000 К на образование композита графен-никель. Обнаружено, что даже высокое давление до 650 ГПа не может быть успешно использовано для получения монолитной композитной структуры в отсутствие высоких температур. Только нагрев до температур, близких к 2000 К, может привести к ковалентному связыванию графеновых хлопьев и образованию связей между отдельными структурными элементами.

Настоящая работа показала, что специальная высокотемпературная обработка является эффективным способом изготовления метал-углеродных нанокompозитов. Это исследование может быть продолжено путем дальнейшего изменения температурных режимов или использования различных внешних условий. Большое влияние также будет оказывать размер наночастиц металла.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Park N., Sung D., Lim S. et al. *Realistic adsorption geometries and binding affinities of metal nanoparticles onto the surface of carbon nanotubes* // Appl. Phys. Lett. – 2009. – Vol.94. – Pp.73105.
2. Inoue S., Matsumura Y. *Influence of metal coating on single-walled carbon nanotube: Molecular dynamics approach to determine tensile strength* // Chem. Phys. Lett. – 2009. – Vol.469. – Pp.125-129.
3. Safina L.R., Baimova J. A., Mulyukov R.R. *Nickel nanoparticles inside carbon nanostructures: atomistic simulation* // Mech. Adv. Mater. Mod. Process. – 2019. – Vol.5. – Pp.1-11.
4. Song H.-Y., Zha X.-W. *Mechanical properties of nickelcoated single-walled carbon nanotubes and their embedded gold matrix composites* // Phys. Lett. A. – 2010. – Vol.374. – Iss.8. – Pp.1068-1072.
5. Hu Q.-H., Wang X.-T., Chen H. et al. *Synthesis of Ni/graphene sheets by an electroless Ni-plating method* // New Carbon Mater. – 2012. – Vol.27. – Pp.35-41.
6. Neubauer E., Kitzmantel M., Hulman M., Angerer P. *Potential and challenges of metal-matrix-composites reinforced with carbon nanofibers and carbon nanotubes* // Compos. Sci. Technol. – 2010. – Vol.70. – Pp.2228-2236.
7. Shiozawa H., Briones-Leon A., Domanov O. et al. *Nickel clusters embedded in carbon nanotubes as high performance magnets* // Sci. Rep. – 2015. – Vol.5. – Pp.15033.
8. Hu Z., Tong G., Lin D. et al. *Laser sintered graphene nickel nanocomposites* // J. Mater. Process. Technol. – 2016. – Vol.231. – Pp.143-150
9. Jiang J., He X., Du J. et al. *In-situ fabrication of graphenenickel matrix composites* // Mater. Lett. – 2018. – Vol.220. – Pp.178-181.
10. Ji L., Chen F., Huang H. et al. *Preparation of nickel-graphene composites by jet electrodeposition and the influence of graphene oxide concentration on the morphologies and properties* // Surf. Coat. Tech. – 2018. – Vol.5. – Pp.212-219.
11. Neiva E.G., Souza V.H., Huang K. et al. *Graphene/nickel nanoparticles composites from graphenide solutions* // J. Colloid. Interf. Sci. – 2015. – Vol.453. – Pp.28-35.
12. Mahale N.K., Ladhe R.D., Attarde S.B.; Ingle S.T. *Synthesis and the Structural Transformation of fcc to hcp in Ni-Graphene Nanocomposite by Simple Chemical Route via Sonication* // J. Nanopart. – 2014. – Vol.2014. – Pp.1-7.

13. Fu Y., Cui W.J., Yan F., Zhao D.Y. *Synthesis of Graphene Load Nickel Nanoparticles Composites with Hydrothermal Process* J. Adv. Mater. Res. – 2013. – Vol.760-762. – Pp.793-796.
14. Mahboobi S., Meghdari A., Jalili N., Amiri F. *Molecular dynamics study of success evaluation for metallic nanoparticles manipulation on gold substrate.* // Micro Nano Lett. – 2010. – Vol.5. – Pp.286.
15. Yin P. T., Shah S., Chhowalla M., Lee K.-B. *Design, Synthesis, and Characterization of Graphene–Nanoparticle Hybrid Materials for Bioapplications* // Chem. Rev. – 2015. – Vol.115. – Pp.2483-2531.
16. Zhang L., Zhang F., Yang X., Long G., Wu Y. et al. *Porous 3D graphene-based bulk materials with exceptional high surface area and excellent conductivity for supercapacitors* // Sci. Rep. – 2013. – Vol.3. – Pp.1408.
17. Krylova K.A., Baimova J.A., Mulyukov R.R. *Effect of deformation on dehydrogenation mechanisms of crumpled graphene: molecular dynamics simulation* // Lett. Mater. – 2019. – No.1. – Pp.81-85.
18. Baimova J. A., Liu B., Dmitriev S.V., Zhou K. *Mechanical properties of crumpled graphene under hydrostatic and uniaxial compression* // J. Phys. D: Appl. Phys. – 2015. – Vol.48. – No.9. – Pp.095302.
19. Tang Z., Li X., Sun T., Shen S., Yang J. *Porous crumpled graphene with hierarchical pore structure and high surface utilization efficiency for supercapacitor* // Micropor. Mesopor. Mat. – 2018. – Vol.272. – Pp.40-43.
20. Moseler M., Cervantes-Sodi F., Hofmann S., Csanyi G., Ferrari A.C. *Dynamic Catalyst Restructuring during Carbon Nanotube Growth* // ACS Nano. – 2010. – Vol.4. – Pp.7587-7595.
21. Kwon H., Ha J.M., Yoo S.H. et al. *Synthesis of flake-like graphene from nickel-coated polyacrylonitrile polymer* // Nanoscale Res. Lett. – 2014. – Vol.9. – Pp.618.
22. Bejagam K. K., Singh S., Deshmukh S.A. *Nanoparticle activated and directed assembly of graphene into a nanoscroll* // Carbon. – 2018. – Vol.134. – Pp. 43-52.
23. Savin A.V., Korznikova E.A., Lobzenko I.P. et al. *Symmetric scrolled packings of multilayered carbon nanoribbons* // Phys. Solid State. – 2016. – Vol.58. – Pp.1278-1284.
24. Lebedeva I.V., Knizhnik A.A., Popov A.M. et al. *Ni-assisted transformation of graphene flakes to fullerenes* // J. Phys. Chem. C. – 2012. – Vol.116. – Pp.6572-6584.
25. Galashev A.E., Polukhin V.A. *Computer simulation of thin nickel films on single-layer graphene* // Phys. Solid State. – 2013. – Vol.55. – Pp.2368-2373.
26. Galashev A.E. *Computer simulation of the thermal stability of nickel films on two-layer graphene* // High Temp. – 2014. – Vol.52. – Pp.633-639.
27. Zhou H., Liu D., Luo F., et al. *Preparation of graphene nanowalls on nickel foam as supercapacitor electrodes* // Micro Nano Lett. – 2018. – Vol.13. – Pp.842-844.
28. Stuart S.J., Tutein A.B., Harrison J.A. *A reactive potential for hydrocarbons with intermolecular interactions* // J. Chem. Phys. – 2000. – Vol.112. – Pp.6472-6486.
29. Galashev A.Y., Katin K.P., Maslov M.M. *Morse parameters for the interaction of metals with graphene and silicene* // Phys. Lett. A. – 2019. – Vol.383. – Pp.252-258.
30. Katin K.P., Prudkovskiy V.S., Maslov M.M. *Molecular dynamics simulation of nickel-coated graphene bending* // Micro Nano Lett. – 2018. – Vol.13. – Pp.160-164.



31. Полетаев Г.М., Старостенков М.Д. *Определение температуры плавления и температурного коэффициента линейного расширения методом молекулярной динамики* // ФПСМ. – 2004. – Т.1. – №1. – С.81-85.
32. Starostenkov M.D., Poletayev G.M., Starostenkov D.M. *Structure of interphase boundaries in bimetallic thin films* // J. Mater. Sci. Technol. – 2001. – Vol.17. – No.1. – Pp.59-60.
33. Краснов В.Ю., Полетаев Г.М., Старостенков М.Д. *Исследование структуры аморфного никеля* // ФПСМ. – 2006. – Т.3. – №4 – С.37-45.
34. Poletayev G.M., Sannikov A.V., Berdychenko A.A., Starostenkov M.D. *Molecular dynamics study of plastic deformation mechanisms near the interphase boundary in two-dimensional bimetallic systems* // Materials Physics and Mechanics. – 2015. – Vol.22. – No.1. – Pp.15-19.
35. Girifalco L.A., Weizer V.G. *Application of the Morse potential function to cubic metals* // Phys. Rev. – 1959. – Vol.114 – Pp.687-690.
36. van Duin A.C.T., Dasgupta S., Lorant F., Goddard W.A. *ReaxFF: A Reactive Force Field for Hydrocarbons* // J. Phys. Chem. A. – 2001. – Vol.105. – Pp.9396-9409.
37. Srinivasan S.G., van Duin A.C.T., Ganesh P. *Development of a ReaxFF Potential for Carbon Condensed Phases and Its Application to the Thermal Fragmentation of a Large Fullerene* // J. Phys. Chem. A. – 2015. – Vol.119. – Pp.571-580.
38. Li K., Zhang H., Li G. et al. *ReaxFF Molecular Dynamics Simulation for the Graphitization of Amorphous Carbon: A Parametric Study* // J. Chem. Theory Comput. – 2018. – Vol.14. – Pp.2322-2331.
39. Сафина Л.Р., Баймова Ю.А. *Выбор потенциала межатомного взаимодействия для моделирования системы никель-углерод* // ФПСМ. – 2019. – Т.16. – №1. – С.30-36.
40. Ganz E., Ganz A.B., Yang L.-M., Dornfeld M. *The initial stages of melting of graphene between 4000 K and 6000 K* // Phys. Chem. Chem. Phys. – 2017. – Vol.19. – Pp.3756-3762.
41. Los J.H., Zakharchenko K.V., Katsnelson M.I., Fasolino A. *Melting temperature of graphene* // Phys. Rev. B. – 2015. – Vol.91. – Pp.045415.
42. Orekhov N.D., Stegailov V.V. *Molecular-dynamics based insights into the problem of graphite melting* // J. Phys. Conf. Ser. – 2015. – Vol.653. – Pp.012090.

## REFERENCES

1. Park N., Sung D., Lim S. et al. *Realistic adsorption geometries and binding affinities of metal nanoparticles onto the surface of carbon nanotubes*. Appl. Phys. Lett, 2009, Vol.94, Pp.73105.
2. Inoue S., Matsumura Y. *Influence of metal coating on single-walled carbon nanotube: Molecular dynamics approach to determine tensile strength*. Chem. Phys. Lett., 2009, Vol.469, Pp.125-129.
3. Safina L.R., Baimova J A., Mulyukov R.R. *Nickel nanoparticles inside carbon nanostructures: atomistic simulation*. Mech. Adv. Mater. Mod. Process, 2019, Vol.5, Pp.1-11.
4. Song H.-Y., Zha X.-W. *Mechanical properties of nickelcoated single-walled carbon nanotubes and their embedded gold matrix composites*. Phys. Lett. A., 2010, Vol.374, Pp.1068-1072.
5. Hu Q.-H., Wang X.-T., Chen H. et al. *Synthesis of Ni/graphene sheets by an electroless Ni-plating method*. New Carbon Mater., 2012, Vol.27, Pp.35-41.

6. Neubauer E., Kitzmantel M., Hulman M., Angerer P. *Potential and challenges of metal-matrix-composites reinforced with carbon nanofibers and carbon nanotubes*. Compos. Sci. Technol., 2010, Vol.70, Pp.2228-2236.
7. Shiozawa H., Briones-Leon A., Domanov O. et al. *Nickel clusters embedded in carbon nanotubes as high performance magnets*. Sci. Rep., 2015, Vol.5, Pp.15033.
8. Hu Z., Tong G., Lin D. et al. *Laser sintered graphene nickel nanocomposites*. J. Mater. Process. Technol., 2016, Vol.231, Pp.143-150.
9. Jiang J., He X., Du J. et al. *In-situ fabrication of graphene-nickel matrix composites* // Mater. Lett., 2018, Vol.220, Pp.178-181.
10. Ji L., Chen F., Huang H. et al. *Preparation of nickel-graphene composites by jet electrodeposition and the influence of graphene oxide concentration on the morphologies and properties*. Surf. Coat. Tech., 2018, Vol.5, Pp.212-219.
11. Neiva E.G., Souza V.H., Huang K. et al. *Graphene/nickel nanoparticles composites from graphenide solutions*. J. Colloid. Interf. Sci., 2015, Vol.453, Pp.28-35.
12. Mahale N.K., Ladhe R.D., Attarde S.B., Ingle S.T. *Synthesis and the Structural Transformation of fcc to hcp in Ni-Graphene Nanocomposite by Simple Chemical Route via Sonication*. J. Nanopart., 2014, Vol.2014, Pp.1-7.
13. Fu Y., Cui W.J., Yan F., Zhao D.Y. *Synthesis of Graphene Load Nickel Nanoparticles Composites with Hydrothermal Process*. J. Adv. Mater. Res., 2013, Vol.760-762, Pp.793-796.
14. Mahboobi S., Meghdari A., Jalili N., Amiri F. *Molecular dynamics study of success evaluation for metallic nanoparticles manipulation on gold substrate*. Micro Nano Lett., 2010, Vol.5, Pp.286.
15. Yin P. T., Shah S., Chhowalla M., Lee K.-B. *Design, Synthesis, and Characterization of Graphene-Nanoparticle Hybrid Materials for Bioapplications*. Chem. Rev., 2015, Vol.115, Pp.2483-2531.
16. Zhang L., Zhang F., Yang X., Long G., Wu Y. et al. *Porous 3D graphene-based bulk materials with exceptional high surface area and excellent conductivity for supercapacitors*. Sci. Rep., 2013, Vol.3, Pp.1408.
17. Krylova K.A., Baimova J.A., Mulyukov R.R. *Effect of deformation on dehydrogenation mechanisms of crumpled graphene: molecular dynamics simulation*. Lett. Mater., 2019, No.1, Pp.81-85.
18. Baimova J. A., Liu B., Dmitriev S.V., Zhou K. *Mechanical properties of crumpled graphene under hydrostatic and uniaxial compression*. J. Phys. D: Appl. Phys., 2015, Vol.48, No.9, Pp.095302.
19. Tang Z., Li X., Sun T., Shen S., Yang J. *Porous crumpled graphene with hierarchical pore structure and high surface utilization efficiency for supercapacitor* // Micropor. Mesopor. Mat., 2018, Vol.272, Pp.40-43.
20. Moseler M., Cervantes-Sodi F., Hofmann S., Csanyi G., Ferrari A. C. *Dynamic Catalyst Restructuring during Carbon Nanotube Growth*. ACS Nano, 2010, Vol.4, Pp.7587-7595.
21. Kwon H., Ha J.M., Yoo S.H. et al. *Synthesis of flake-like graphene from nickel-coated polyacrylonitrile polymer*. Nanoscale Res. Lett., 2014, Vol.9, Pp.618.
22. Bejagam K.K., Singh S., Deshmukh S.A. *Nanoparticle activated and directed assembly of graphene into a nanoscroll*. Carbon, 2018, Vol.134, Pp.43-52.
23. Savin A.V., Korznikova E.A., Lobzenko I.P. et al. *Symmetric scrolled packings of multilayered carbon nanoribbons*. Phys. Solid State., 2016, Vol.58, Pp.1278-1284.

24. Lebedeva I.V., Knizhnik A.A., Popov A.M. et al. *Niassisted transformation of graphene flakes to fullerenes*. J. Phys. Chem. C., 2012, Vol.116, Pp.6572-6584.
25. Galashev A.E., Polukhin V.A. *Computer simulation of thin nickel films on single-layer graphene*. Phys. Solid State, 2013, Vol.55, Pp.2368-2373.
26. Galashev A.E. *Computer simulation of the thermal stability of nickel films on two-layer graphene*. High Temp., 2014, Vol.52, Pp.633-639.
27. Zhou H., Liu D., Luo F. et al. *Preparation of graphene nanowalls on nickel foam as supercapacitor electrodes*. Micro Nano Lett., 2018, Vol.13, Pp. 842-844.
28. Stuart S.J., Tutein A.B., Harrison J.A. *A reac-tive potential for hydrocarbons with intermo-lecular interactions*. J. Chem. Phys., 2000, Vol.112, Pp.6472-6486.
29. Galashev A.Y., Katin K.P., Maslov M.M. *Morse parameters for the interaction of metals with graphene and silicone*. Phys. Lett. A, 2019, Vol.383, Pp.252-258.
30. Katin K.P., Prudkovskiy V.S., Maslov M.M. *Molecular dynamics simulation of nickel-coated graphene bending*. Micro Nano Lett., 2018, Vol.13, Pp.160-164.
31. Poletayev G.M., Starostenkov M.D. *Opredelenie temperatury plavleniya i temperaturnogo koehffitsienta linejnogo rasshireniya metodom molekulyarnoj dinamiki [Determination of the melting temperature and temperature coefficient of linear expansion by the molecular dynamics method]*. Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya, 2004, Vol.1, No.1, Pp.81-85.
32. Starostenkov M.D., Poletayev G.M., Starostenkov D.M. *Structure of interphase boundaries in bimetallic thin films*. J. Mater. Sci. Technol., 2001, Vol.17, No1, Pp.59-60.
33. Krasnov V.Yu., Poletayev G.M., Starostenkov M.D. *Issledovanie struktury amorfnogo nikelya [Investigation of the structure of amorphous nickel]*. Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya, 2006, Vol.3, No4, Pp.37-45.
34. Poletaev G.M., Sannikov A.V., Berdychenko A.A., Starostenkov M.D. *Molecular dynamics study of plastic deformation mechanisms near the interphase boundary in two-dimensional bimetallic systems*. Materials Physics and Mechanics, 2015, Vol.22, No.1, Pp.15-19.
35. Girifalco L.A., Weizer V.G. *Application of the Morse potential function to cubic metals*. Phys. Rev., 1959, Vol.114, Pp.687-690.
36. van Duin A.C.T., Dasgupta S., Lorant F., Goddard W.A. *ReaxFF: A Reactive Force Field for Hydrocarbons*. J. Phys. Chem. A., 2001, Vol.105, Pp.9396-9409.
37. Srinivasan S.G., van Duin A.C.T., Ganesh P. *Development of a ReaxFF Potential for Carbon Condensed Phases and Its Application to the Thermal Fragmentation of a Large Fullerene*. J. Phys. Chem. A., 2015, Vol.119, Pp.571-580.
38. Li K., Zhang H., Li G. et al. *ReaxFF Molecular Dynamics Simulation for the Graphitization of Amorphous Carbon: A Parametric Study*. J. Chem. Theory Comput., 2018, Vol.14, Pp.2322-2331.
39. Safina L.R., Baimova Yu.A. *Vybor potentsiala mezhatomnogo vzaimodejstviya dlya modelirovaniya sistemy nikel'-uglerod [The choice of interatomic interaction potential for modeling the nickel-carbon system]*. Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya, 2019, Vol.16, No.1, Pp.30-36.
40. Ganz E., Ganz A.B., Yang L.-M., Dornfeld M. *The initial stages of melting of graphene between 4000 K and 6000 K*. Phys. Chem. Chem. Phys., 2017, Vol.19, Pp.3756-3762.
41. Los J.H., Zakharchenko K.V., Katsnelson M.I., Fasolino A. *Melting temperature of graphene*. Phys. Rev. B, 2015, Vol.91, Pp.045415.

42. Orekhov N.D., Stegailov V.V. *Molecular-dynamics based insights into the problem of graphite melting*. J. Phys. Conf. Ser., 2015, Vol.653, Pp.012090.

*Поступила в редакцию 25 октября 2019 года.*

---

Сведения об авторах:

Сафина Лилия Ришатовна – студентка 4 курса, Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия; e-mail: [safia@mail.ru](mailto:safia@mail.ru)

Баимова Юлия Айдаровна – д.ф.-м.н., в.н.с., проф., Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, г. Уфа, Россия; e-mail: [julia.a.baimova@gmail.com](mailto:julia.a.baimova@gmail.com)