

07,18,19

## Механические свойства и теплопроводность композитов на основе скомканного графена и наночастиц никеля: молекулярная динамика

© К.А. Крылова<sup>1,2</sup>, Л.Р. Сафина<sup>1,¶</sup>, Р.Т. Мурзаев<sup>1</sup>, С.А. Щербинин<sup>3,5</sup>, Ю.А. Баимова<sup>1,4</sup>, Р.Р. Мулюков<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Институт проблем сверхпластичности металлов РАН,  
Уфа, Россия

<sup>2</sup> Уфимский государственный нефтяной технический университет,  
Уфа, Россия

<sup>3</sup> Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,  
Санкт-Петербург, Россия

<sup>4</sup> Уфимский университет науки и технологий,  
Уфа, Россия

<sup>5</sup> Институт проблем машиноведения РАН,  
Санкт-Петербург, Россия

¶ E-mail: saflia@mail.ru

Поступила в Редакцию 5 июня 2023 г.

В окончательной редакции 20 июня 2023 г.

Принята к публикации 21 июня 2023 г.

Методом молекулярной динамики исследованы механические свойства и теплопроводность композита на основе скомканного графена и наночастиц никеля, полученного посредством высокотемпературного гидростатического сжатия. Поры графеновой матрицы композита заполнены наночастицами никеля разного размера (соответственно разное содержание Ni — 8, 16 и 24 at.%). Обнаружено, что увеличение количества никеля с одной стороны увеличивает теплопроводность композита, а с другой — уменьшает его прочность, поскольку прочность определяется наличием графеновой сетки, а теплопроводность — наличием проводящего металла. Полученные результаты по теплофизическим свойствам в сочетании с высокими механическими характеристиками композитов Ni/графен позволяют прогнозировать их применение для изготовления новой гибкой электроники, суперконденсаторов и литий-ионных аккумуляторов.

**Ключевые слова:** скомканный графен, композит Ni/графен, механические свойства, коэффициент теплопроводности, молекулярная динамика.

DOI: 10.21883/FTT.2023.09.56256.101

### 1. Введение

В настоящее время графен и различные материалы на основе полиморфов углерода приобретают все большее значение благодаря своим уникальным свойствам. В частности, появляются новые виды композитов на основе графена, нанотрубок, алмазных частиц и др. [1–4]. Одно из актуальных направлений исследований — это композиты на основе металлической матрицы, усиленной графеном, где в качестве матрицы используются Al, Ni, Mg, Zn, Cu и Ti или их сплавы. Благодаря таким свойствам графена, как гибкость, высокая прочность, легкость, его можно использовать практически во всех областях промышленности. Учитывая превосходные механические свойства графена, в последние годы он является важным армирующим элементом в производстве композитов [5–8]. Например, предел прочности на растяжение композита Al/графен, увеличился на 62% по сравнению с пределом прочности чистого алюминия [5]. Добавление графена в металлическую матрицу может в значительной мере влиять и на другие свойства итогового композита. В обзоре [8] проанализированы исследования композитов с металли-

ческой матрицей, в которых графен использовался в качестве армирующего материала.

Еще более новое направление исследования — это композиты на основе графеновой сетки и наночастиц металла [9–12]. При такой морфологии композита, графеновая сетка отвечает за прочность, а металлический наполнитель — за изменение других свойств, таких как проводимость. Создание такой новой морфологии становится возможным благодаря тому, что графен может „оборачивать“ наночастицы, формируя прочные капсулы с металлом внутри [10]. Сейчас уже отработаны различные методики получения композитов на основе наночастиц разных металлов [10–12]. Благодаря их уникальным свойствам они могут использоваться в качестве упрочняющих покрытий, для создания новых литий-ионных батарей и суперконденсаторов.

Графеновая сетка отличается следующими характеристиками: (1) высокая электропроводность по сравнению с графитовым углеродом; (2) большая площадь поверхности; (3) высокое отношение поверхности к объему, что обеспечивает больше активных центров для адсорбции; (4) высокая гибкость, что важно для создания гибкой электроники; (5) термическая и химическая

устойчивость. Более того, такой материал, полученный с помощью химического расслоения графита, может быть произведен в больших количествах при относительно невысокой стоимости, что немаловажно для его практического применения.

Одним из подходящих металлов для заполнения пор скомканного графена являются наночастицы Ni. Никель обладает высокой коррозионной стойкостью, повышенной пластичностью и ковкостью, является хорошим катализатором и т.п. Кроме того, преимуществом выбора данного металла является то, что между Ni и графеном преобладает довольно сильная связь на границе раздела [17]. За счет этого на практике Ni часто используется в качестве металлической подложки для выращивания графена и углеродных нанотрубок [18]. Изучение механических и физических свойств композита на основе скомканного графена и наночастиц Ni представляет большой интерес, так добавление Ni в скомканный графен может значительно улучшить как механические, так и физические свойства получаемого материала.

Экспериментальные работы над новыми морфологиями композитов поддерживаются большим количеством теоретических работ, в которых расчеты методом *ab initio* или молекулярной динамики (МД) используются для понимания механизмов, лежащих в основе улучшения свойств материала [4,13–16,19–21]. Например, в работе [14] показано, что дискретные листы графена, покрывающие частицы никеля, собираются в неповрежденную и непрерывную графеновую сеть при обработке спеканием. Чешуйки графена перемешиваются с матрицей Ni, образуя взаимосвязанную структуру. Результаты моделирования показывают, что добавление листов графена может эффективно блокировать распространение дислокаций [16], причем увеличение длины графенового слоя позволяет избежать зарождения дислокаций на конце графенового листа и повышает прочность структуры.

В связи с этим в настоящей работе методом молекулярной динамики исследованы механические свойства и теплопроводность композита на основе углеродной матрицы (скомканного графена) и наночастиц металла (Ni). Проанализировано влияние количества атомов металла на прочность композита и его теплопроводность. Показано, что можно управлять механическими и тепловыми свойствами композита меняя его морфологию.

## 2. Детали моделирования

Исходная структура представляет собой скомканный графен (пористый материал, состоящий из свернутых чешуек графена, связанных между собой силами Ван-дер-Ваальса), заполненный наночастицами Ni. В работе рассматриваются три композитные структуры с содержанием Ni: 8, 16 и 24 at.%. Далее для упрощения, композитная структура с содержанием Ni 8 at.% будет называться CG8, с содержанием Ni 16 at.% — CG16,

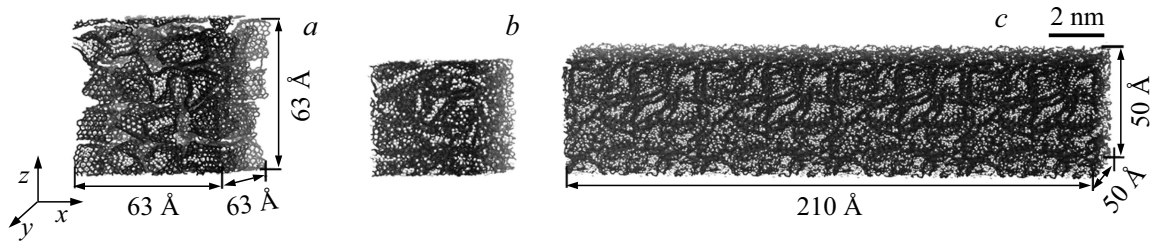
и с содержанием Ni 24 at.% — CG24, а структура скомканного графена без наночастиц никеля — CG. На рис. 1, *a* показана исходная структура предшественника композита Ni/графен: скомканные чешуйки графена (показаны черным цветом), заполненные наночастицами Ni (показаны серым цветом). Известно, что краевые атомы чешуек графена имеют *sp*-гибридизацию, которые могут легко образовывать новые связи с соседними чешуйками графена или же другими элементами, например, водородом, кислородом, азотом и различными функциональными группами. Для простоты в данной работе будет рассматриваться чистый скомканный графен без влияния атомов других элементов. Более подробная методика подготовки исходной структуры описана в работах [22,23].

Ранее в работах [22–24] показано, что композиты металл/графен могут быть успешно получены посредством гидростатического сжатия при повышенных температурах. В связи с этим, расчетная ячейка моделирования подвергается деформационно-контролируемому гидростатическому сжатию ( $\epsilon_x = \epsilon_y = \epsilon_z = \epsilon$ ) со скоростью  $0.01 \text{ ps}^{-1}$  до достижения максимальной плотности:  $\rho_{CG8} = 5.28$ ,  $\rho_{CG16} = 6.54$ ,  $\rho_{CG24} = 7.80 \text{ g/cm}^3$ . Сжатие проводится при 1000 K, что составляет  $T = 0.6–0.8T_{\text{пл}}$ , где  $T_{\text{пл}}$  — температура плавления наночастицы Ni выбранного размера. Отметим, что температура плавления наночастиц Ni составляет около 1360 K [25], а температура плавления графена — 5000 K [26]. Структура после гидростатического сжатия показана на рис. 1, *b*. Окончательный размер композита Ni/графен около  $43 \times 43 \times 43 \text{ \AA}$  при плотности  $5.15 \text{ g/cm}^3$ . Данная структура использована для расчета механических свойств композита.

В работе [27] подробно описаны различные способы оценки механических свойств композитов Ni/графен. Одним из способов является проведение статической деформации, которая идет поэтапно, где каждые  $n$  шагов растяжения сопровождаются  $m$  шагами релаксации структуры. Другим способом проведения одноосного растяжения является динамическая деформация, которая прикладывается непрерывно с постоянной скоростью. В данной работе для оценки механических свойств композита Ni/графен будет использован второй способ деформации — динамическое растяжение.

На рис. 1, *c* показана исходная структура, используемая для расчета теплопроводности композита. Сначала структура композита подвергалась релаксации для достижения термодинамического равновесия при температурах от 100 до 600 K с шагом 100 K. Для этого применялся сначала ансамбль NPT, а затем ансамбль NVE (каждый использовался в течении 1 ps).

Теплопроводность композита сравнивается с теплопроводностью чистого монокристаллического никеля размером  $205 \times 51 \times 51 \text{ \AA}$ . Оси  $x$ ,  $y$  и  $z$  совпадают с кристаллографическими направлениями [100], [010] и [001] соответственно. Релаксация образцов Ni проводится в тех же условиях, что и для композитной структуры.

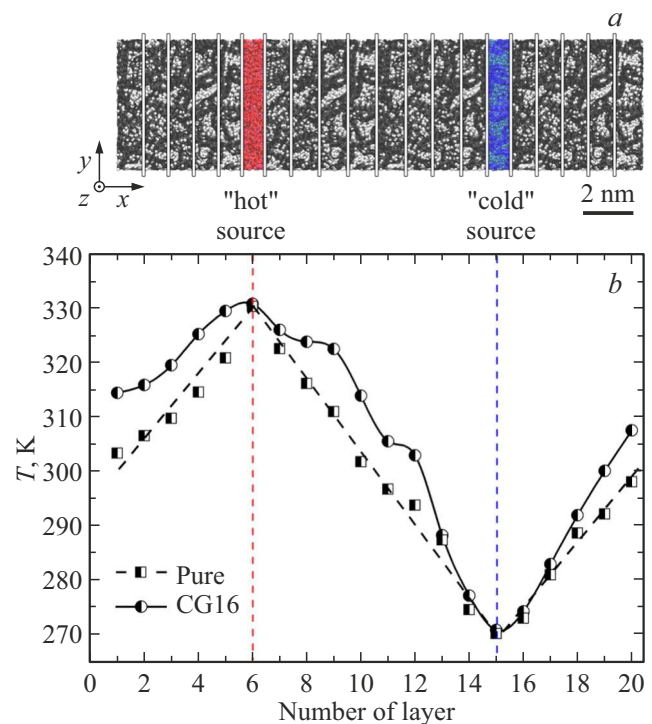


**Рис. 1.** (a) Начальная структура заготовки композита. (b) Структура композита после гидростатического сжатия при  $T = 1000$  К. (c) Увеличенная структура композита для расчета теплопроводности. Атомы Ni показаны серым цветом, а атомы углерода — черным.

После достижения термодинамического равновесия расчетная ячейка разбивается вдоль длинной стороны на 20 одинаковых областей шириной  $10\text{--}10.5$  Å, как показано на рис. 2, a. Здесь источник тепла — шестая (красная) область, а сток тепла — пятнадцатая (синяя) область. Между „горячим“ и „холодным“ источником задается температурный градиент по длине структуры, что приводит к возникновению теплового потока  $\Delta Q$ . Температуры „горячих“ и „холодных“ областей равны  $T + \Delta T$  и  $T - \Delta T$  соответственно. Величина  $\Delta T$  составляет 10% от температуры системы. Температура остальных областей в начале моделирования  $T$ , при чем расчет проводится при шести разных температурах  $T = \{100, 200, 300, 400, 500, 600\}$  К. Для каждого состояния проводится от трех до пяти измерений значений теплопроводности. Стандартное отклонение этих значений колеблется в пределах 5–7% при каждой температуре.

На рис. 2, b в качестве примера показано распределение температуры по ячейке моделирования для чистого никеля и композита CG16 после выдержки при 300 К. Отметим, что для остальных композитов температурные профили близки. Средняя температура „холодного“ и „горячего“ термостата составляет 270 и 330 К соответственно. В остальных областях также рассчитывается средняя температура. Отметим, что для чистого Ni температурный профиль имеет типичный линейный характер (черная пунктирная линия на рис. 2, b). Для металлов теплопередача более равномерна, чем для композитов Ni/графен с сильной ковалентной связью и сложной кристаллической структурой. Температурные профили композитов с наночастицами никеля (рис. 2, b) нелинейны.

Моделирование проводится с помощью программного пакета LAMMPS. Для описания межатомных взаимодействий в системе Ni/графен применяются три потенциала: AIREBO (описывает взаимодействие C–C) [28], Морзе (описывает взаимодействие C–Ni) [29,30] и EAM (метод погруженного атома, который используется для описания взаимодействия Ni–Ni) [31]. Работы [31–34] подтверждают эффективность использования потенциалов AIREBO, Морзе и EAM для решения задач, рассматриваемых в рамках данной работы. Для визуализации структуры используется программа VMD



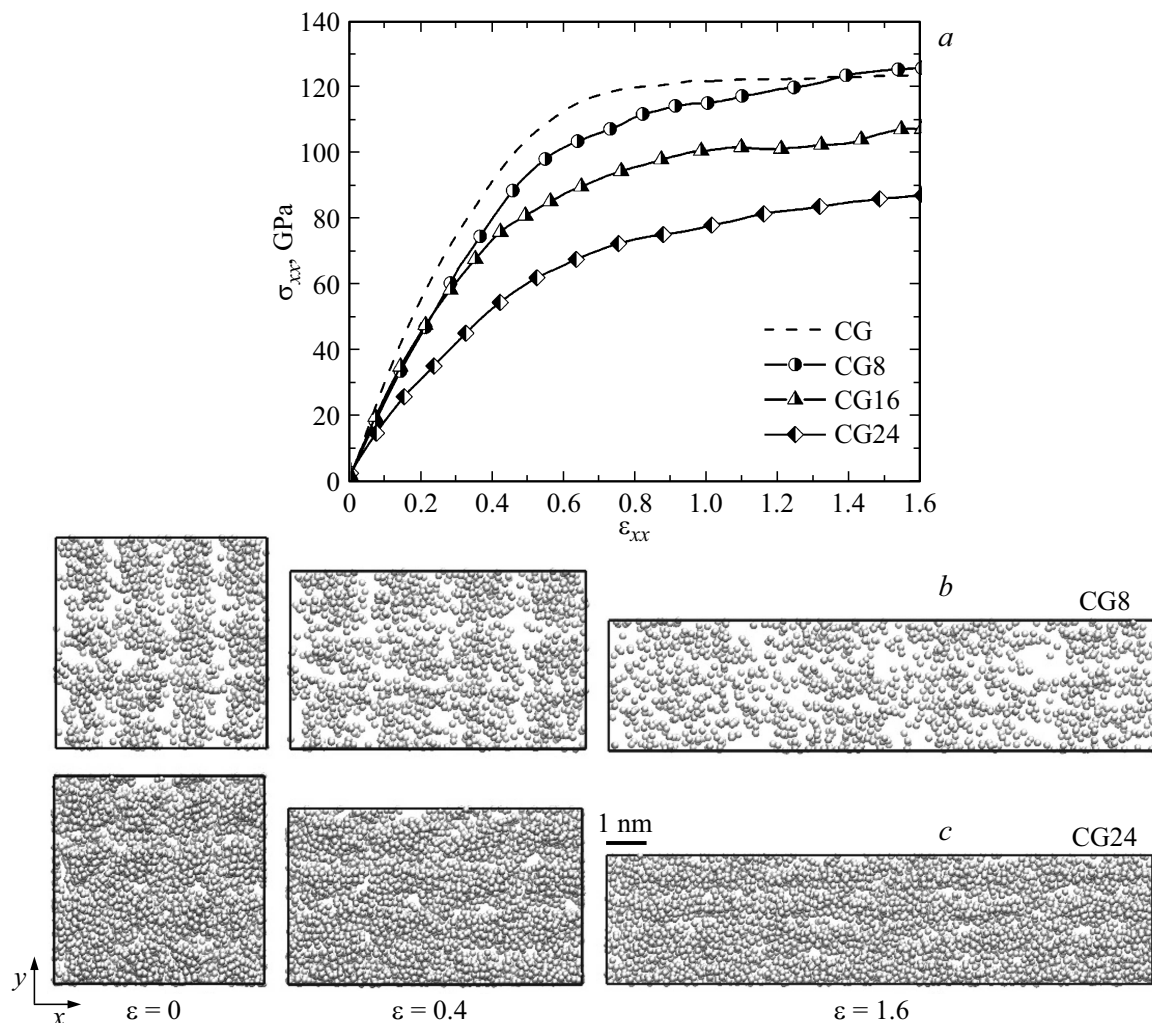
**Рис. 2.** (a) Композит Ni/графен, разделенный для расчета на 20 областей. Красная и синяя области соответствуют „горячему“ и „холодному“ источнику. Атомы углерода и никеля показаны черным и серым цветом соответственно. (b) Температурный профиль по слоям для чистого Ni и композита CG16 после выдержки при 300 К. Точки показаны расчетные значения, пунктирная кривая — линейная аппроксимация расчетных данных.

(Visual Molecular Dynamics), позволяющая отображать и анализировать структурные изменения на определенных этапах моделирования [35].

### 3. Результаты и обсуждение

#### 3.1. Механические свойства

На рис. 3, a представлены кривые напряжение-деформация в процессе одноосного растяжения. Показано, что механические свойства композита CG8 наиболее



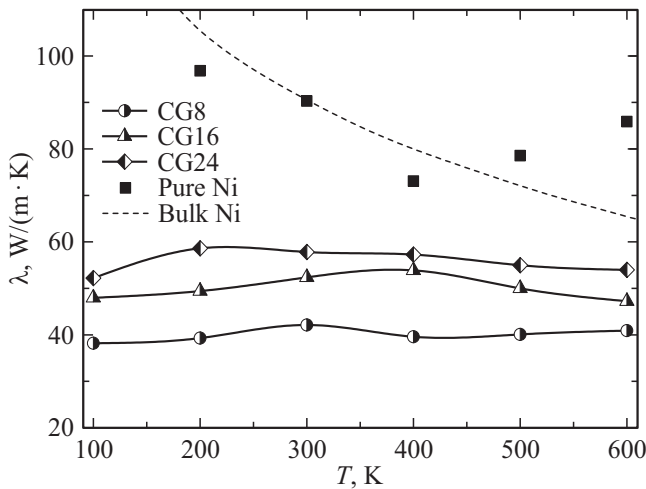
**Рис. 3.** (а) Кривые напряжение-деформация в процессе одноосного растяжения для композита Ni/графен с различным содержанием никеля (точки и сплошные линии) и для скомканного графена (CG, пунктирная линия). (b, c) Распределение наночастиц Ni в структуре CG8 и CG24 при разных степенях деформации в процессе одноосного растяжения. Атомы углерода не показаны.

высокие и близкие к прочности чистого скомканного графена, особенно при деформации  $\epsilon_{xx} > 1.2$ . Наименьшую прочность имеет композит CG24. Это свидетельствует о том, что за прочность композита отвечает графеновая сетка, а наличие металла ее ослабляет. Для всех трех композитов Ni/графен рассчитаны модули Юнга, которые составляют: 249, 245 и 230 GPa для CG8, CG16 и CG24 соответственно. Отметим, что модуль Юнга скомканного графена без атомов металла равен 330 GPa.

Максимальные растягивающие напряжения для CG8, CG16 и CG24 соответственно равны 125, 107 и 87 GPa. Такие высокие значения напряжения в композите Ni/графен можно объяснить формированием прочной графеновой сетки. Однако, на рис. 3, а видно, что предельной деформации, при которой происходит разрыв структур, не достигнуто. Большое влияние на механические свойства композита оказывает размер наночастиц. Чем меньше размер наночастиц Ni, тем легче появление

новых химических связей между соседними структурными элементами композита, а следовательно, выше его прочность.

На рис. 3, b и c показано распределение наночастиц Ni в процессе одноосного растяжения в композите с наименьшим (CG8) и наибольшим (CG24) содержанием Ni. Отметим, что атомы углерода не показаны. Видно, что в начальной структуре композита распределение атомов Ni более равномерно в структуре CG8, чем в CG24. Наночастицы Ni в структуре CG24 консолидированы и имеют достаточно большой размер. В композите CG8 атомы Ni распределены по углеродной сетке и уже не имеют форму наночастиц (см. рис. 3, b). В связи с этим, прочность такого композита достигает значений характерных для прочности скомканного графена при  $\epsilon_{xx} > 1.2$ . Появление новых химических связей в процессе гидростатического сжатия в структуре с большими наночастицами протекает довольно сложно, поскольку



**Рис. 4.** Теплопроводность чистого никеля и композита Ni/графен в зависимости от температуры. Штриховой линией показаны экспериментальные данные для объемного поликристаллического Ni [35], а квадратными символами показана величина  $\lambda$  чистого монокристаллического Ni, полученная в данной работе.

все атомы углерода уже задействованы во взаимодействии с наночастицами никеля, что и снижает прочность таких композитов.

### 3.2. Коэффициент теплопроводности

Зависимость коэффициента теплопроводности от температуры ( $\lambda$ ) для всех исследуемых композитов показано на рис. 4. Теплопроводность композита Ni/графен зависит от содержания Ni: чем выше содержание Ni, тем выше теплопроводность при всех температурах. Снижение величины  $\lambda$  с увеличением содержания графена также показано для композитов Cu/графен [36].

Однако, теплопроводность композитов Ni/графен слабо зависит от температуры, а существующие колебания коэффициента теплопроводности с ростом температуры связано с появлением новых контактных границ между Ni и графеном. Отметим, что полученное значение теплопроводности при 100–200 К может быть занижено из-за особенностей МД моделирования, которое учитывает только фононную (решеточную) теплопроводность и не учитывает электронную теплопроводность. Для металлов и сплавов влияние электронной теплопроводности незначительно при  $T < 100$  К. Однако для композитов Ni/графен электронная теплопроводность может давать существенный вклад в теплопроводность системы даже при  $T > 100$  К.

Для чистого монокристаллического Ni (черные квадраты на рис. 4) значения  $\lambda$  сопоставимы с экспериментальной кривой, характерной для объемного поликристаллического Ni [37] (черная штриховая кривая на рис. 4). Наблюдаемое снижение величины  $\lambda$  при  $T < 500$  К связано с размерами исследуемых образ-

цов. В [38] показано, что наночастицы никеля малого размера имеют меньшую теплопроводность, чем объемный никель. А с увеличением размера наночастиц теплопроводность увеличивалась и приближалась к значению  $\lambda_{\text{bulk}} = 91$  W/(mK) (теплопроводность объемного поликристаллического Ni при 300 К [37]). Увеличение толщины нанопленок Ni также приводит к увеличению  $\lambda$  при 300 К до значений, характерных для объемного Ni [39]. Теплопроводность при 500 и 600 К даже выше, чем у объемного Ni. Это можно объяснить плавлением или частичным плавлением наночастиц Ni в процессе моделирования. Поскольку размер частиц небольшой, поэтому их температура плавления может быть значительно ниже температуры плавления объемного Ni [40].

Контроль тепловых свойств различными внутренними и внешними факторами имеет большое значение [41]. В работе показано, что варьирование содержания Ni позволяет контролировать теплопроводность композитов: увеличение содержания Ni в композите приводит к увеличению теплопроводности системы (рис. 4). Однако величина  $\lambda$  для композитов CG16 и CG24 имеют близкие значения.

На теплопроводность композита Ni/графен может оказывать влияние несколько факторов. Например, небольшой размер чешуек графена в структуре композита ограничивает теплопередачу [42], как и добавление атомов Ni. Последнее превращает атомы углерода с  $sp^2$ -гибридизацией в атомы с  $sp^3$ -гибридизацией, что приводит к разрушению идеальной  $\pi$ -электронно-сопряженной структуры. Рассеяние фононов (основных переносчиков тепла) на дефектах и гребнях складок графена может также понижать теплопроводность, как и появление новых связей между соседними чешуйками графена, а, следовательно, снизить теплообмен.

## 4. Заключение

Методом молекулярной динамики исследовано деформационное поведение, прочность и теплопроводность композита Ni/графен. Показано, что механические и тепловые свойства композита сильно зависят от содержания Ni.

При одноосном растяжении предел прочности композитов Ni/графен тем ниже, чем больше атомов никеля в структуре. Наивысшей прочностью обладает композит CG8, у которого величина предела прочности достигает значений характерных для скомканного графена. Столь высокое значение прочности в этом композите связано с распределением атомов Ni по графеновой сетке, что приводит к формированию новых химических связей между графеновыми чешуйками. В других композитных структурах такого распределение атомов никеля не наблюдается, наночастицы сохраняют свою целостность, а, следовательно, формирование новых углеродных связей затруднено. Это приводит к снижению прочности

композитов CG16 и CG24 по сравнению со скомканным графеном и композитом CG8.

Теплопроводность композита Ni/графен значительно ниже, чем у чистого Ni ( $91 \text{ W}/(\text{mK})$  [37]), но значительно выше, чем у скомканного графена ( $2.183 \text{ W}/(\text{mK})$  [43]). Формирование сильно деформированной структуры смятого графена при его изготовлении приводит к образованию складок, снижающих теплопроводность структуры. Увеличение количества атомов Ni в композите приводит к увеличению теплопроводности за счет добавления элемента с более высокой теплопроводностью. Образование новых контактных границ между никелевой и углеродной фазами также оказывает сильное влияние на теплопроводность композита. При этом теплопроводность композита Ni/графен можно контролировать, изменяя содержание Ni. Отметим, что добавление никеля к скомканному графену приводит к увеличению теплового расширения, и, чем больше содержание Ni в композите, тем выше коэффициент теплового расширения [44]. Однако увеличение температуры практически не влияет на коэффициент теплопроводности композита, хотя для чистого никеля с ростом температуры наблюдается значительное уменьшение коэффициента теплопроводности.

На механические свойства композита оказывает большое влияние наличие графеновой сетки, и чем выше содержание никеля, тем ниже прочность композита. На коэффициент теплопроводности большее влияние оказывает наличие проводящего металла — чем больше атомов никеля, тем выше теплопроводность системы.

Полученное сочетание высоких механических свойств с контролируемыми термическими свойствами обуславливают потенциальное применение композитов Ni/графен в качестве альтернативных материалов в различных отраслях промышленности. Например, в настоящее время такие композиты можно использовать в качестве химических сенсоров, накопителей энергии или водорода, для аккумуляторов и суперконденсаторов [45,46].

## Благодарности

Авторы благодарят суперкомпьютерный центр „Политехнический“ за предоставленные вычислительные ресурсы.

## Финансирование работы

Работа К.А. Крыловой, Л.Р. Сафиной, Р.Т. Мурзаева, Ю.А. Баимовой поддержана грантом РФФИ (№ 20-72-10112). Работа Р.Р. Мулюкова выполнена в рамках Государственного задания ИПСМ РАН. Работа С.А. Щербинина выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (задание 0784-2020-0021).

## Конфликт интересов

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

## Список литературы

- [1] М.М. Слепченко, П.В. Барков, О.Е. Глухова. *ЖТФ* **93**, 4, 481 (2023).
- [2] М.К. Рабчинский, А.Д. Трофимук, А.В. Швидченко, М.В. Байдакова, С.И. Павлов, Д.А. Кириленко, Ю.В. Кульвелис, М.В. Гудков, К.А. Шиянова, В.С. Коваль, Г.С. Петерс, В.Т. Лебедев, В.П. Мельников, А.Т. Дидейкин, П.Н. Брунков. *ЖТФ* **92**, 12, 1853 (2022). [M.K. Rabchinskii, A.D. Trofimuk, A.V. Shvidchenko, M.V. Baidakova, S.I. Pavlov, D.A. Kirilenko, Yu.V. Kulvelis, M.V. Gudkov, K.A. Shiyanova, V.S. Koval, G.S. Peters, V.T. Lebedev, V.P. Melnikov, A.T. Dideikin, P.N. Brunkov. *Tech. Phys.* **67**, 12, 1611 (2022)].
- [3] А.Г. Шейнерман, С.А. Красницкий. *ПЖТФ* **47**, 17, 37 (2021). [A.G. Sheinerman, S.A. Krasnitskii. *Tech. Phys. Lett.* **47**, 12, 873 (2021)].
- [4] J.A. Vaimova, S.A. Shcherbinin. *Materials* **16**, 1, 202 (2023).
- [5] J. Wang, Z. Li, G. Fan, H. Pan, Z. Chen, D. Zhang. *Scripta Mater.* **66**, 594 (2012).
- [6] А.А. Леонов, Е.В. Абдульменова, М.А. Рудмин, Ц. Ли. *Письма о материалах* **11**, 4, 452 (2021). [A.A. Leonov, E.V. Abdulmenova, M.A. Rudmin, J. Li. *Lett. Mater.* **11**, 4, 452 (2021)].
- [7] О.Ю. Курапова, И.В. Смирнов, Е.Н. Соловьева, И.Ю. Арчаков, В.Г. Конаков. *Письма о материалах* **10**, 2, 164 (2020). [O.Y. Kurapova, I.V. Smirnov, E.N. Solovyeva, I.Y. Archakov, V.G. Konakov. *Lett. Mater.* **10**, 2, 164 (2020)].
- [8] Ö. Güler, N. Bağcı. *J. Mater. Res. Technol.* **9**, 3, 6808 (2020).
- [9] И.А. Завидовский, А.А. Хайдаров, О.А. Стрелецкий. *ФТТ* **12**, 2075 (2022). [I.A. Zavidovskiy, A.A. Khaidarov, O.A. Streletskiy. *Phys. Solid State* **64**, 8, 474 (2022)].
- [10] D. Wei, J. Liang, Y. Zhu, Z. Yuan, N. Li, Y. Qian. *Part. Part. Syst. Char.* **30**, 2, 143 (2013).
- [11] X. Li, J. Natsuki, T. Natsuki. *Physica E* **124**, 114249 (2020).
- [12] Z.-S. Wu, G. Zhou, L.-C. Yin, W. Ren, F. Li, H.-M. Cheng. *Nano Energy* **1**, 1, 107 (2012).
- [13] C. Qiu, Y. Su, J. Yang, B. Chen, Q. Ouyang, D. Zhang. *Compos. C* **4**, 100120 (2021).
- [14] Y. Yang, M. Liu, J. Du, W. Zhang, S. Zhou, W. Ren, Q. Zhou, L. Shi. *Carbon* **191**, 55 (2022).
- [15] D. Rapp, S. Hocker, H. Lipp, S. Schmauder. *Comput. Mater. Sci.* **226**, 112247 (2023).
- [16] Y. Huang, Z. Yang, Z. Lu. *Comp. Mater. Sci.* **186**, 109969 (2021).
- [17] M. Yang, Y. Liu, T. Fan, D. Zhang. *Prog. Mater. Sci.* **110**, 100652 (2020).
- [18] N.-W. Pu, G.-N. Shi, Y.-M. Liu, X. Sun, J.-K. Chang, C.-L. Sun, M.-D. Ger, C.-Y. Chen, P.-C. Wang, Y.-Y. Peng, C.-H. Wu, S. Lawes. *J. Power Sources* **282**, 248 (2015).
- [19] A.Y. Galashev, O.R. Rakhmanova. *Phys. Lett. A* **384**, 31, 126790 (2020).
- [20] A.E. Galashev, L.A. Elshina, R.V. Muradymov. *Russ. J. Phys. Chem. A* **90**, 2444 (2016).
- [21] А.Е. Галашев, О.Р. Рахманова, Л.А. Елшина. *Хим. физика* **37**, 6, 18 (2018). [A.E. Galashev, O.R. Rakhmanova, L.A. Elshina. *Russ. J. Phys. Chem. B* **12**, 3, 403 (2018)].

- [22] L.R. Safina, J.A. Baimova, K.A. Krylova, R.T. Murzaev, S.S. Shcherbinin, R.R. Mulyukov. *Phys. Status Solidi RRL* **15**, 1, 2100429 (2021).
- [23] L.R. Safina, K.A. Krylova, J.A. Baimova. *Mater. Today Phys.* **28**, 100851 (2022).
- [24] Y. Zhang, F.M. Heim, J.L. Bartlett, N. Song, D. Isheim, X. Li. *Sci. Adv.* **5**, 5, 1 (2019).
- [25] L.R. Safina, J.A. Baimova, R.R. Mulyukov. *Mech. Adv. Mater. Mod. Proc.* **5**, 2 (2019).
- [26] E. Ganz, A.B. Ganz, L.-M. Yang, M. Dornfelda. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **19**, 3756 (2017).
- [27] K.A. Krylova, L.R. Safina, S.A. Shcherbinin, J.A. Baimova. *Materials* **15**, 11, 4038 (2022).
- [28] S.J. Stuart, A.B. Tutein, J.A. Harrison. *J. Chem. Phys.* **112**, 14, 6472 (2000).
- [29] K.P. Katin, V.S. Prudkovskiy, M.M. Maslov. *Micro Nano Lett.* **13**, 2, 160 (2018).
- [30] A.Y. Galashev, K.P. Katin, M.M. Maslov. *Phys. Lett. A* **383**, 2–3, 252 (2019).
- [31] M.I. Mendelev, M.J. Kramer, S.G. Hao, K.M. Ho, C.Z. Wang. *Phil. Mag.* **92**, 35, 4454 (2012).
- [32] C. de Tomas, I. Suarez-Martinez, N.A. Marks. *Carbon* **109**, 681 (2016).
- [33] V.E. Zalizniak, O.A. Zolotov. *Mol. Simulat.* **43**, 17, 1 (2017).
- [34] L.R. Safina, E.A. Rozhnova, R.T. Murzaev, J.A. Baimova. *Appl. Sci.* **13**, 2, 916 (2023).
- [35] W. Humphrey, A. Dalke, K. Schulten. *J. Mol. Graphics* **14**, 1, 33 (1996).
- [36] T. Wejrzanowski, M. Grybczuk, M. Chmielewski, K. Pietrzak, K.J. Kurzydowski, A. Strojny-Nedza. *Mater. Design* **99**, 163 (2016).
- [37] C.Y. Ho, R.W. Powell, P.E. Liley. *Thermal Conductivity of Selected Materials*. U.S. Department of Commerce, National Bureau of Standards, Washington (1968). 180 p.
- [38] S.P. Yuan, P.X. Jiang. *Int. J. Thermophys* **27**, 581 (2006).
- [39] A.A. Le-Zakharov, A.M. Krivtsov, A.V. Porubov. *Continuum Mech. Therm.* **31**, 1873 (2019).
- [40] A.V. Verkhovtsev, S. Schramm, A.V. Solov'yov. *Eur. Phys. J. D* **68**, 246 (2014).
- [41] A.V. Savin, O.V. Gendelman. *Phys. Rev. E* **89**, 012134 (2014).
- [42] Z. Fan, A. Marconnet, S.T. Nguyen, C.Y. Lim, H.M. Duong. *Int. J. Heat Mass Tran.* **76**, 122 (2014).
- [43] Y. Zhong, M. Zhou, F. Huang, T. Lin, D. Wan. *Solar Energy Mater. Solar C* **113**, 195 (2013).
- [44] R.T. Murzaev, K.A. Krylova, J.A. Baimova. *Materials* **16**, 3747 (2023).
- [45] L. Cao, C. Wang, Y. Huang. *Chem. Eng. J.* **454**, 140094 (2023).
- [46] T. Zhang, X. Gao, J. Li, L. Xiao, H. Gao, F. Zhao, H. Ma. *Defence Technology* (2023). In press

Редактор К.В. Емцев