УДК: 669

ТРАНСПОРТНЫЕ СВОЙСТВА НАНОСТРУКТУРНЫХ АЛЮМОМАТРИЧНЫХ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ, МОДИФИЦИРОВАННЫХ УГЛЕРОДНЫМИ НАНОСТРУКТУРАМИ

И.А. Евдокимов, Д.А. Овсянников, Р.Р. Хайруллин, С.А. Перфилов, А.А. Поздняков, Д.В. Сухоруков, Р.Л. Ломакин, И.В. Пахомов

Иван Андреевич Евдокимов *, Ринат Радионович Хайруллин, Данила Алексеевич Овсянников, Сергей Алексеевич Перфилов, Андрей Анатольевич Поздняков, Роман Леонидович Ломакин, Илья Владимирович Пахомов

Технологический институт сверхтвердых и новых углеродных материалов, ул. Центральная, 7А, Троицк, Москва, Российская Федерация, 108840 E-mail: ivan_911@mail.ru*

Данила Алексеевич Овсянников

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), Институтский пер., 9, Долгопрудный, Московская обл., Российская Федерация, 141701 E-mail: dao@tisnum.ru

Денис Владимирович Сухоруков

Владимирский государственный университет им. А.Г. и Н.Г. Столетовых, ул. Горького, 87, Владимир, Российская Федерация, 600000

E-mail: info@inlittech.ru

Проведен анализ влияния типа и концентрации углеродных наноматериалов на тепло- и электропроводность наноструктурных композитов на основе алюминия, с учетом современных представлений о механизмах и особенностях транспортных свойств поликристаллических материалов. Эксперимент проводился на нанострутурированных объемных образцах, полученных путем спекания и экструзии порошкового материала после механоактивационной обработки в планетарной мельнице Al с различными углеродными добавками, средний размер зерен полученного порошкового материала составил 30-100 нм в зависимости от концентрации и типа модифицирующей добавки. Проведены испытания транспортных свойств (электропроводность, температуро- и теплопроводность) образцов алюмоматричного композита модифицированных углеродными наноструктурами при температурах от 300 до 800 К (измерение теплопроводности проводились методом лазерной вспышки, электропроводность измерялась 4-х точечным контактным методом). Установлено, что теплопроводность алюмоматричных композиционных материалов, модифицированных углеродными наноструктурами, оказалась в среднем в 2 раза ниже исходного алюминия. При этом кроме размера кристаллитов алюминия в композите, влияние на величину теплопроводности оказывают структурные, физико-механические и химические особенности применяемых углеродных наноматериалов. Таким образом установлено, что экструдированные образцы композитов обладают анизотропией транспортных свойств порядка 5-8% в поперечном и продольных сечениях относительно оси экструзии. После отжига теплопроводность уменьшается на 5-10%, что, скорее всего, связано с распадом твердого раствора и выделения интерметаллидов алюминий-магний на границах зерен, что подтверждается данными рентгенофазового анализа. Установлено влияние электронфононного рассеяния на особенности в поведении электропроводности в алюмоматричных композиционных материалах, модифицированных углеродными наноструктурами.

Ключевые слова: алюминий, композит, наноструктура, фуллерен, углерод, теплопроводность, электропроводность

TRANSPORT PROPERTIES OF NANOSTRUCTURED ALUMINUM-MATRIX COMPOSITE MATERIALS MODIFIED WITH CARBON NANOSTRUCTURES

I.A. Evdokimov, D.A. Ovsyannikov, R.R. Khairullin, S.A. Perfilov, A.A. Pozdnyakov, D.V. Sukhorukov, R.L. Lomakin, I.V. Pakhomov

Ivan A. Evdokomov *, Rinat R. Khairullin, Danila A. Ovsyannikov, Sergey A. Perfilov, Andrey A. Pozdnyakov, Roman L. Lomakin, Ilya V. Pakhomov

Technological Institute for Superhard and Novel Carbon Materials, Tsentralnaya st., 7A, Troitsk, Moscow, 108840, Russia

E-mail: ivan_911@mail.ru*

Danila A. Ovsyannikov

Moscow Institute of Physics and Technology (National Research University), Institutskiy per., 9, Dolgoprudny, Moscow Region, 141700, Russia

Denis V. Sukhorukov

Vladimir State University named after A.G. and N.G. Stoletovs, Gorky st., 87, Vladimir, 600000, Russia E-mail: info@inlittech.ru

The analysis of the influence of the type and density of carbon nanomaterials on the heat and electrical conductivity of nanostructured composites based on aluminum is carried out, taking into account modern ideas about the mechanisms and features of the transport properties of polycrystalline materials. The experiment was carried out on nanostructured bulk materials obtained by sintering and extrusion of powder material after mechanical activation treatment in a planetary mill with other different carbon additives, the average grain size of the obtained powder material is 30-100 nm, depending on the type of modifying additive. The transport properties (electrical conductivity, temperature and thermal conductivity) were tested for samples of an aluminum-matrix composite of modified carbon nanostructures at temperatures from 300 to 800 K (thermal conductivity was measured by the laser flash method, electrical conductivity was measured by a 4-point contact method). It was found that the thermal conductivity of aluminum-matrix materials modified with carbon nanostructures turned out to be on average 2 of the initial aluminum. Moreover, in addition to the size of aluminum crystallites in the composite, structural, physicomechanical, and chemical features of the used carbon nanomaterials have an effect on the introduction of thermal conductivity. Thus, it was found that extruded samples of composites have anisotropy of transport properties of the order of 5-8% in the transverse and longitudinal sections of the extrusion axis. After annealing, the thermal conductivity decreases by 5-10%, which is more likely due to the decomposition of the solid solution and the release of aluminum-magnesium intermetallic compounds at the grain boundaries, which is confirmed by the data of X-ray phase analysis. The effect of electron-phonon scattering on the features in the behavior of electrical conductivity in aluminum-matrix composite materials modified with carbon nanostructures is established.

Key words: aluminum, composite, nanostructure, fullerene, carbon, thermal conductivity, electrical conductivity

Для цитирования:

Евдокимов И.А., Овсянников Д.А., Хайруллин Р.Р., Перфилов С.А., Поздняков А.А., Сухоруков Д.В., Ломакин Р.Л., Пахомов И.В. Транспортные свойства наноструктурных алюмоматричных композиционных материалов, модифицированных углеродными наноструктурами. *Изв. вузов. Химия и хим. технология.* 2020. Т. 63. Вып. 12. С. 44–49

For citation:

Evdokimov I.A., Ovsyannikov D.A., Khairullin R.R., Perfilov S.A., Pozdnyakov A.A., Sukhorukov D.V., Lomakin R.L., Pakhomov I.V. Transport properties of nanostructured aluminum-matrix composite materials modified with carbon nanostructures. *Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved. Khim. Khim. Tekhnol.* [Russ. J. Chem. & Chem. Tech.]. 2020. V. 63. N 12. P. 44–49

введение

Теплопроводность и электрическая проводимость являются важными транспортными характеристиками материалов, поскольку они описывают процесс переноса теплоты и изменение температуры в них [1], независимо от области применения материала. Тепловые свойства вещества (теплоемкость и теплопроводность) исследованы в классических работах Эйнштейна, Борна и Дебая [2, 3], основанных на рассмотрении колебаний решетки кристалла и введении характеристической частоты (модель Эйнштейна) или спектра частот (модели Борна и Дебая) атомных осцилляторов. Общепризнанной является модель Дебая, дополненная представлениями о квантах колебаний (фононах) – гипотетических квазичастицах, переносящих энергию и импульс. Считается, что теплопроводность диэлектриков обусловлена переносом в кристалле фононов, а теплопроводность металлов - переносом электронов проводимости [2, 3]. В случае полупроводников возможны оба механизма теплопроводности [3].

В настоящее время сложилась довольно ясная трактовка процессов фононного транспорта, которые приводят к уменьшению теплопроводности материала [4, 5]. Основным механизмом уменьшения теплопроводности в наноструктурированных материалах является уменьшение средней длины пробега фононов и рассеяние их на границах. При переходе к наноразмерному состоянию работают те же механизмы переноса энергии, что и в макроматериалах, т.е. температуропроводность алюмоматричных композиционных материалов, упрочненных углеродными нанострктурами, будет складываться из электронной и фононной составляющих. Так, температуропроводность наноструктурного серебра с размером зерен 20-47 нм оказывается в 3,5-4 раза ниже таковой для крупнозернистого серебра [6]. Для оксида циркония переход в нанокристаллическое состояние также сопровождается значительным снижением теплопроводности, что связано с увеличивающимся рассеянием фононов на поверхностях раздела [7]. Аналогичная ситуация имеет место для тонких поликристаллических алмазных пленок, теплопроводность которых значительно ниже теплопроводности алмазных монокристаллов.

Алюмоматричные композиционные материалы (НКМ), модифицированные углеродными наноструктурами (УНС), не являются исключением, и их теплопроводность в среднем в 2 раза ниже теплопроводности крупнокристаллических образцов алюминия. Исследование электронных транспортных свойств наноструктурированных композитов также является актуальной современной задачей. Полученные результаты можно использовать для проектирования проводящих конструкционных материалов с заданными соотношениями (прочность, плотность, электропроводность и теплопроводность). В качестве примера часто используются композитные материалы с добавками углеродные материалов, например, композита A1 с многостенными углеродными нанотрубками [7-9], A1-графита [10], или A1 с фуллереном C₆₀ [11, 12].

В объемных материалах справедливо соотношение K/σ (где K – теплопроводность, σ – электропроводность) при постоянной температуре является константой [13], и несмотря на то, что это соотношение в значительной мере (пренебрегая фононным влиянием электронными поправками, а также неупругим рассеянием) соблюдается с высокой точностью. Обычно нарушения данного закона характерно для влияния квантового ограничения [14-15].

Кроме того, вследствие влияния эффекта квантовой локализации из-за уменьшения размера зерна и уменьшения длины свободного пробега механизмы электронного и электрон-фононного рассеяния не могут быть описаны классическими теориями свободного электронного газа, предложенными моделью Зоммерфельда [16, 17].

Ранее в работе [18], была предложена модель, описывающая изменения проводимости в наноструктурированном Al, модифицированном фуллереном C_{60} . В данной работе была предложена модель зависимости проводимости от среднего размера зерна и концентрации внесенных добавок. Модель была основана на комплексной оценке рассеяния на дефектах кристаллической структуры и включениях фуллерена, а также модели, предложенной Мадаясом-Шацкецом для поликристаллических металлических тонких пленок [19-20].

В рамках настоящей работы проведен анализ влияния типа и концентрации УНС на теплои электропроводность НКМ на основе алюминия, с учетом описанных выше современных представлений о механизмах и особенностях транспортных свойств поликристаллических материалов.

МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

В качестве исходных материалов для получения НКМ применяли алюминиевые сплавы АДО и АМг6 (ГОСТ 4784–97). В качестве модифицирующей фазы в состав НКМ дополнительно вводили 0,3 вес. % фуллерена С₆₀ (99,5 %). Также были проведены сравнительные эксперименты при внедрении различных углеродных наноструктур (до 8 об. %).

Совместное механолегирование исходных материалов проводили в планетарной шаровой мельнице АГО-2У в течение 60 мин при частоте вращения водила 1800 об/мин. Соотношение массы размольных тел к массе обрабатываемого материала составляло 20:1.

Для предотвращения окисления и протекания других нежелательных реакций все манипуляции с исходными материалами и полученными порошками проводили в заполненном аргоном изолирующем перчаточном боксе, поддерживающем чистоту атмосферы по кислороду и парам воды не хуже 0,1 ppm.

Полученные после механолегирования порошки компактировали в цилиндрические брикеты под давлением 0,5-0,6 ГПа и подвергали прямой горячей экструзии при температуре 270-290 °С со степенью обжатия 6,2 при давлении истечения 1,0...1,5 ГПа. Экструдированные образцы механически обрабатывали для дальнейших исследований.

Измерения теплопроводности проводились на установке LFA 457 Netsch laser flash system, измерения теплоемкости проводились на установке DSC 8000 Perkin Elmer scanning differential microcalorimeter. Измерения электропроводности в зависимости от температуры проводились на устройстве LSR-3 Linsies.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Теплопроводность алюмоматричных композиционных материалов, модифицированных УНС, оказалась в среднем в 2 раза ниже исходного алюминия, и составляет 225Вт·м/К (рис. 1, 2).

Кроме размера кристаллитов алюминия в НКМ, влияние на величину теплопроводности должны оказывать структурные, физико-механические и химические особенности применяемых УНС.

Как видно из рис. 1, теплопроводность НКМ, модифицированных УНС, в среднем в 1,5-2 раза ниже (90-150 Вт·м/К, в зависимости от концентрации модифицирующих добавок), чем у исходного матричного сплава АДО (225 Вт·м/К). Это снижение можно объяснить рассеянием электронов и фононов на межкристаллитных границах композиционных материалов, количество которых на несколько порядков больше, чем в исходном материале. В общем случае теплопроводность может быть выражена формулой $k = k_0(T)(R_b(T)+R_d(T))$, где R_b и R_d коэффициенты пропускания на границах и точечных дефектах соответственно. Кроме того, в теплопроводности при температурах порядка T_{Θ} - температуры Дебая (для алюминия это $\sim 429~K)$ и выше участвуют в основном процессы электрон-фононного рассеяния.



Рис. 1. Теплопроводность алюмоматрчных композиционных материалов, модифицированных углеродными наноструктурами: а) АД0+8% С₆₀, б) АД0+8% УНТ, в) АД0+8% УДА, г) АД0+8% онионоподобных структур, д) АД0+8% графита, е) Амг6+0,3% С₆₀

Fig. 1. Thermal conductivity of aluminum composite materials modified with carbon nanostructures: a) AD0 + 8% C₆₀, δ) AD0+ 8% UNT, B) AD0 + 8% UDA, Γ) AD0 + 8% oni-like carbon, д) AD0 + 8% graphite, e) Amg6 + 0.3% C₆₀



Рис. 2. Теплопроводность алюмоматрчных композиционных материалов с различным содержанием фуллерена: a) Al 99,99%, б) АД0, АД +2% С₆₀, в) АД +2% С₆₀



Как видно из рис. 1, теплопроводность НКМ напрямую зависит от размера зерна. Здесь образцы, содержащие 8 об. % углеродных наноструктур имели средний размер зерна 40-50 нм. Образец, содержащий 8% онионоподобных структур имел средний размер зерна порядка 70 -80 нм, образец с 0,3 вес. % C_{60} имеет средний размер зерна 100 нм.

И.А. Евдокимов и др.

На рис. 3 приведены данные для теплопроводности в поперечном и продольных сечениях относительно оси экструзии композиционных материалов с 3 вес.% С₆₀. Видно, что теплопроводность отличается в пределах 5-8%. После отжига это различие становится более выражено. Также стоит отметить, что теплопроводность после отжига уменьшается на 5-10%, что, скорее всего, связано с распадом твердого раствора и выделением интерметаллидов алюминий-магний на границах зерен. Это также подтверждается данными рентгенофазового анализа.

С увеличением концентрации примесей электропроводность НКМ падает, что связано с увеличением количества дефектов и коэффициента фонон-электронного рассеяния согласно модели, предложенной в работе [10].



Рис. 3. Теплопроводность алюмоматричных композиционных материалов, содержащих 0,3 вес. % С₆₀. Теплопроводность измерена в направлениях вдоль оси экструзии (L) и поперек (T) соответственно, также приведены данные для теплопроводности после отжига при 500 °C: а) Амг6 + С₆₀ L, б) Амг6 + +С₆₀ L (отжиг), г) Амг6 + С₆₀ T, д) Амг6 + С₆₀ T (отжиг)

Fig. 3. Thermal conductivity of aluminum-matrix composite materials containing 0.3 wt. % C_{60} . The thermal conductivity is measured in the directions along the extrusion axis (L) and across (T), respectively and data for the thermal conductivity after annealing at 500 °C are also given: a) Amg6 + C_{60} L, 6) Amg6 + C_{60} L (annealing), B) Amg6 + C_{60} T, Γ) Amg6 + C_{60} T (annealing)

Стоит отметить, что отношение $K/\sigma = TL$ теплопроводности к электропроводности (где L – коэффициент Лоренца) для НКМ не выполняется. По-видимому, механизм электрон-фононного рассеяния наноструктурированных металлов в условиях ограниченной длинны свободного пробега фононов и электронов путем уменьшения зерна, не может быть описан в классической модели свободных электронов.

выводы

Несмотря на теоретическое и экспериментальное обоснования, общая картина изменения теплопроводности алюмоматричных композиционных материалов, модифицированных УНС, оказывается неполной. Это говорит о том, что механизм влияния УНС на транспортные свойства НКМ крайне сложен и включает в себя множество факторов, изучение которых требует дальнейших исследований.



Рис. 4. Сравнение электропроводности алюмоматрчных композиционных материалов, с различным содержанием фуллерена: a) Al 99,99%, б) AД0, AД +2% C₆₀, в) AД +2% C₆₀ Fig. 4. Comparison of electrical conductivity of aluminum matrix composite materials with different fullerene content: a) Al 99.99%, б) AD0, AD +2% C₆₀, в) AD +2% C₆₀

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, в рамках соглашения о предоставлении субсидии от 14.06.2019 г. № 075-15-2019-1307 (№14.574.21.0162). Идентификатор соглашения: RFMEFI57417X0162.

This work was carried out with the financial support of the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation, within the framework of the subsidy agreement dated June 14, 2019 No. 075-15-2019-1307 (No. 14.574.21.0162). Agreement ID: RFMEFI57417X0162.

ЛИТЕРАТУРА REFERENCES

- CRC Handbook of Chemistry and Physics. Ed. by J. Rumble. CRS Press. 2020. 1572 p.
- Киттель Ч. Введение в физику твёрдого тела. М.: ООО «МедиаСтар». 2006. 792 с.
 Kittel Ch. Introduction to solid state physics. М.: ООО
- «MediaStar». 2006. 792 p. (in Russian).
- Thermoelectric Handbook Macro to Nano. Ed. by D.M. Rowe. CRS Press. 2006. P. 29-1 - 29-11. 25.

- Minnich A.J., Dresselhaus M.S., Ren Z.F., Chen G. Bulk nanostructured thermoelectric materials: current research and future prospects. *Energy Environ. Sci.* 2009. V. 2. P. 466-479. DOI: 10.1039/B822664B.
- Kim D., Moon J. Highly conductive ink jet printed films of nanosilver particles for printable electronics. *Electrochem. Solid State Lett.* 2005. V. 8. N 11. P. 30-33. DOI: 10.1149/1.2073670.
- Liang L.H., Baowen L. Size-dependent thermal conductivity of nanoscale semiconducting systems. *Phys. Rev. B.* 2006. V. 73. N 15. P. 153303-153307. DOI: 10.1103/PhysRevB.73.153303.
- Esawi A.M.K., Morsi K., Sayed A., Gawad A.A., Borah P. Fabrication and properties of dispersed carbon nanotube– aluminum composites. *Mater. Sci. Eng. A, Struct. Mater.: Prop. Microstruct. Process.* 2009. V. 508. N 1-2. P. 167-173. DOI: 10.1016/j.msea.2009.01.002.
- Gupta R., Tripathy A., Chaubey A.K. Development of CNT Reinforced Al Matrix FGM for Advanced Applications in Lightweight and High Strength Components. *ARIAM* 2019. 2020. V. 5. P. 350-356. DOI: 10.1007/978-3-030-30271-9_32.
- Choi H.J., Kwon G.B., Lee G.Y., Bae D.H. Reinforcement with carbon nanotubes in aluminum matrix composites. *Scr. Mater.* 2008. V. 59. N 3. P. 360. DOI: 10.1016/j.scriptamat. 2008.04.006.
- Estrada-Guel I., Carreno-Gallardo C., Cardoso-Cortes J.L., Rocha-Rangel E., Herrera-Ramirez J.M., Martinez-Sanchez R. Effect of metallic addition on mechanical properties in an aluminum–graphite composite synthesized by means of mechanical milling. J. Alloys Compd. 2010. V. 495. N 2. P. 403-407. DOI: 10.1016/j.jallcom.2009.10.256.
- Tokunaga T., Kaneko K., Sato K., Horita Z. Microstructure and mechanical properties of aluminum–fullerene composite fabricated by high pressure torsion. *Scr. Mater.* 2008. V. 58. P. 735-738. DOI: 10.1016/j.scriptamat.2007.12.010.
- Choi K., Shin S., Bae D., Choi H. Mechanical Properties of Aluminium-Based Nanocomposite Reinforced with Fullerenes. *Light Metals*. 2014. P. 1437-1440. DOI: 10.1007/978-3-319-48144-9_240.
- Bürkle M., Asai Y. How to Probe the Limits of the Wiedemann–Franz Law at Nanoscale. *Nano Lett.* 2018. V. 18. N 11. P. 7358–7361. DOI: 10.1021/acs.nanolett.8b03651.
- 14. Ronning F., Hill R.W., Sutherland M., Hawthorn D.G., Tanatar M.A., Paglione J., Taillefer L., Graf M.J., Perry R.S., Maeno Y., Mackenzie A.P. Thermal Conductivity in the Vicinity of the Quantum Critical End Point in Sr₃Ru₂O₇. *Phys. Rev. Lett.* 2006. V. 97. P. 067005. DOI: 10.1103/PhysRevLett.97.067005.
- Khodel V.A., Clark J.W., Shaginyan V.R., Zverev M.V. Fate of the Wiedemann-Franz Law near Quantum Critical Points of Electron Systems in Solids. *JETP Lett.* 2015. V. 102. P. 826-833. DOI: 10.7868/S0370274X15240091.
- Sullivan D.M. Quantum Mechanics for Electrical Engineers. Wiley IEEE Press. 2012. 448 p.

- Горелик С.С., Дашевский М.Я. Материаловедение полупроводников и диэлектриков. М.: МИСиС. 2003. 480 с. Gorelik S.S., Dashevsky M.Ya. Materials science of semiconductors and dielectrics. М.: MISiS. 2003.480 p.
- Zameshin A., Popov M., Medvedev V. Electrical conductivity of nanostructured and C60-modified aluminum. *Appl. Phys. A.* 2012. V. 107. P. 863–869. DOI: 10.1007/s00339-012-6805-x.
- Mayadas A.F., Shatzkes M., Janak J.F. Electrical resistivity model for polycrystalline films: the case of specular reflection at external surfaces. *Appl. Phys. Lett.* 1969. V. 14. N 11. P. 345-347. DOI: 10.1063/1.1652680.
- Mayadas A.F. Electrical-resistivity model for polycrystalline films: the case of arbitrary reflection at external surfaces. *Phys. Rev. B.* 1970. V. 1. N 4. P. 1382-1389. DOI: 10.1103/PhysRevB.1.1382.
- Popov M., Medvedev V., Blank V., Denisov V., Kirichenko A., Tat'yanin E., Aksenenkov V., Perfilov S., Lomakin R., D'yakov E., Zaitsev V. Fulleride of aluminum nanoclusters. J. Appl. Phys. 2010. V. 108. N 9. P. 094317-094317-6. DOI: 10.1063/1.3505757.
- 22. Евдокимов И.А., Пивоваров Г.И., Бланк В.Д., Аксененков В.В., Кириченко А.Н., Ваганов В.Е. Металлоуглеродный композиционный материал на основе алюминия. Изв. вузов. Химия и хим. технология. 2011. Т. 54. Вып. 7. С. 58-62.

Evdokimov I.A., Pivovarov G.I., Blank V.D., Aksenenkov V.V., Kirichenko A.N., Vaganov V.E. Metal-carbon composite material on based of aluminum. *Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved. Khim. Khim. Tekhnol.* [Russ. J. Chem. & Chem. Tech.]. 2011. V. 54. N 7. P. 58-62.

- Evdokimov I.A., Perfilov S.A., Pozdnyakov A.A., Blank V.D., Bagramov R.Kh., Perezhogin, I.A., Kulnitsky B.A., Kirichenko A.N., Aksenenkov V.V. Nanostructured Composite Materials Based on Al–Mg Alloy Modified with Fullerene C60. *Inorg. Mater.: Appl. Res.* 2018. V. 9(3). P. 472-477. DOI: 10.1134/S2075113318030139.
- Murashkin M.Yu., Kil'mametov A.R., Valiev R.Z. Structure and mechanical properties of an aluminum alloy 1570 subjected to severe plastic deformation by high-pressure torsion. Phys. Metals. Metall. 2008. V. 106(1). P. 90–96.6. DOI: 10.1134/S0031918X08070120.
- Vanin M., Mortensen J.J., Kelkkanen A.K., Garcia-Lastra J.M., Thygesen K.S., Jacobsen K.W. Graphene on metals: A van der Waals density functional study. *Phys. Rev. B.* 2010. V. 81. P. 081408. DOI: 10.1103/PhysRevB.81. 081408.
- McCarthy B. A Microscopic and Spectroscopic Study of Interactions between Carbon Nanotubes and a Conjugated Polymer. J. Phys. Chem. B. 2002. V. 106. N 9. P. 2210– 2216. DOI: 10.1021/jp013745f.
- Barbary El., Telling A., Ewels R. Heggie C., Briddon M. Structure and energetics of the vacancy in graphite. *Phys. Rev. B.* 2003. V. 68. N 14. P. 144107/1-144107/7. DOI: 10.1103/PhysRevB.68.144107.
- 28. Gillan M.J. Calculation of the vacancy formation energy in aluminium. J. Phys. Condens. Matter. 1989. V. 1. N 4. P. 689.

Поступила в редакцию 07.10.2020 Принята к опубликованию 21.10.2020

Received 07.10.2020 Accepted 21.10.2020