

УДК 539  
КП  
№ держреєстрації 0117U003923  
Інв. №

Міністерство освіти і науки України  
Сумський державний університет (СумДУ)  
40007, м. Суми, вул. Р.-Корсакова, 2: тел. (0542) 33-41-08, факс (0542) 33-40-49

ЗАТВЕРДЖУЮ  
Проректор з наукової роботи  
доктор фіз.-мат. наук, проф.  
\_\_\_\_\_ А. М. Черноус

ЗВІТ  
ПРО НАУКОВО-ДОСЛІДНУ РОБОТУ  
**Фізичні властивості двовимірних наноматеріалів та металевих  
наночастинок**  
**ОБЧИСЛЕННЯ МЕХАНІЧНИХ ПАРАМЕТРІВ ДВОВИМІРНИХ  
КАРБІДІВ ТИТАНУ  $Ti_{n+1}C_n$**   
(проміжний)

Начальник НДЧ  
кандидат фіз.-мат. наук, с.н.с.

Д. І. Курбатов

Керівник НДР  
кандидат фіз.-мат. наук

В. М. Борисюк

2017

Рукопис закінчено 22 грудня 2017 р.

Результати цієї роботи розглянуто на засіданні наукової ради СумДУ, протокол від 29.11.2017 № 2

## СПИСОК АВТОРІВ

Керівник НДР, канд. фіз.-мат. наук	(22.12.2017)	В. М. Борисюк (вступ, розділ 1, висновки)
Відповідальний виконавець, аспірант	(22.12.2017)	Я. О. Кравченко (розд. 1)
Виконавці:		
Старший викладач, канд. фіз.-мат. наук	(22.12.2017)	А. А. Багдасарян (розділ 1).
Асистент, канд. тех. наук	(22.12.2017)	С. М. Маценко (вступ, розділ 1)
Науковий співробітник	(22.12.2017)	Д. С. Трощенко (вступ, розділ 1 )
Старший викладач, канд. фіз.-мат. наук	(22.12.2017)	А. В. Дворниченко (розділ 1)
Аспірант, молодший науковий співробітник	(22.12.2017)	О. В. Максакова (розділ 1)
Аспірант, молодший науковий співробітник	(22.12.2017)	К. В. Смирнова (розділ 1)
Аспірант, інженер	(22.12.2017)	І. О. Марченко (розділ 1)
Студент, лаборант	(22.12.2017)	Ю. О. Тарасенко (розділ 1)
Студент, лаборант	(22.12.2017)	К. В. Васюхно (розділ 1)

## РЕФЕРАТ

Звіт про НДР: 23 с., 7 рис., 38 джерел.

### ДВОВИМІРНІ НАОМАТЕРІАЛИ, ЖОРСТКІСТЬ ПРИ ЗГІНІ, ЗГІНАЮЧА ДЕФОРМАЦІЯ, МОЛЕКУЛЯРНА ДИНАМІКА.

Об'єкт дослідження – фізичні процеси, що відбуваються в двовимірних карбідах титану під час згинаючої деформації.

Мета роботи – розробка теоретичних та чисельних моделей для опису поведінки двовимірних матеріалів під дією зовнішнього згинаючого навантаження.

Метод дослідження – методи класичної молекулярної динаміки, з використанням моделі зануреного атома та трьох- частинних потенціалів, теорії пластин, методи обчислювальної математики тощо.

Для двовимірних карбідів титану, з загальною хімічною формулою  $Ti_{n+1}C_n$  побудовано комп'ютерну схему, для чисельного моделювання динамічної поведінки досліджуваних зразків. Розроблена комп'ютерна модель базується на методах класичної молекулярної динаміки, та дозволяє досліджувати основні фізичні та структурні властивості зазначених модельних зразків. В рамках розробленої моделі було реалізовано алгоритм дії зовнішньої згинаючої сили на досліджуваний зразок, що дозволило дослідити механічні властивості  $Ti_{n+1}C_n$  при згинаючій деформації. Проведено моделювання згинаючої деформації двовимірних карбідів титану  $Ti_{n+1}C_n$ , під час якого були розраховані атомістичні конфігурації та фізичні характеристики досліджуваних зразків.

## ЗМІСТ

ВСТУП.....	5
1 КОМ'ПЮТЕРНА МОДЕЛЬ МІЖАТОМНОЇ ВЗАЄМОДІЇ В ДВОВИМІРНИХ КАРБИДАХ ТИТАНУ .....	8
2 МОДЕЛЮВАННЯ ЗГИНАЮЧОЇ ДЕФОРМАЦІЇ .....	11
3 РОЗРАХУНОК МЕХАНІЧНИХ ПАРАМЕТРІВ .....	14
ВИСНОВКИ .....	19
ПЕРЕЛІК ДЖЕРЕЛ ПОСИЛАНЬ .....	20

## ВСТУП

Двовимірні карбіди титану  $Ti_{n+1}C_n$  належать до великого сімейства карбідів та нітридів перехідних металів - так званих *максенів* (англ. MXenes), що мають товщину від 3 до 7 атомних шарів [1]. Більшість теоретичних і експериментальних досліджень максенів спрямовані на надзвичайні електричні та електрохімічні властивості зазначених сполук [2-8]. Існує також зацікавленість використовувати максени в якості підсилювачів в полімерних композитах [9], тому колоїдна стійкість вказаних двовимірних матеріалів у органічних розчинниках є актуальним завданням досліджень [10]. Проте, існує мало відомостей про механічні властивості максенів, за винятком декількох обчислювальних спроб визначення модуля Юнга, напружено-деформованої поведінки та механізмів руйнування окремих зразків зазначених двовимірних наноматеріалів [11, 12].

З моменту відкриття двовимірних матеріалів було розроблено декілька передових експериментальних методик дослідження їх механічних властивостей [13-16]. Проте, реалізація таких методів для максенів представляє собою складне завдання, через невеликі (кілька мікрометрів) латеральні розміри наявних в даний час двовимірних зразків зазначених наноматеріалів [17]. До теперішнього часу не повідомлялось про експериментальні дослідження механічних властивостей нанорозмірних листів окремих максенів. Крім того, базальні площини всіх максенів, що синтезуються на теперішній час, мають функціональні групи, які містять кисень і фтор, що робить експериментальні дослідження пружних властивостей чистих нанорозмірних листів зазначених двовимірних наноматеріалів неможливими, принаймні, на сьогодні. А отже, вся поточна інформація про властивості чистих зразків максенів може бути отримана тільки з обчислювальних досліджень.

Жорсткість при згині (англ. Bending rigidity) є важливим параметром, що характеризує пружні властивості матеріалу при згинаючій деформації. Вказаний параметр характеризує механічну стійкість об'єкту до зовнішньої згинаючої сили. Вивчення поведінки двовимірних матеріалів під час згинаючої деформації представляє особливий інтерес через їх потенційне застосування в якості мембран та резонаторів в пристроях наноелектроніки [18-21], а також у різноманітних композитах. Нещодавно було показано, що  $Ti_{n+1}C_n$  максени більш стійкі до згину, ніж графен, оскільки шари  $Ti_3C_2$  залишаються в планарній формі в композитних полімерних розчинах [9].

В рамках загальної теорії пластин [22], жорсткість при згині  $D$  пов'язана із зовнішньою силою згину  $F$  і відхиленням в центрі пластини  $w$  через рівняння

$$\frac{F}{w} = \frac{D}{\beta L^2}, \quad (1)$$

де  $L$  довжина пластини, а  $\beta$  емпірична константа в діапазоні від 0.0056 до 0.00725 при зміні співвідношення довжини до ширини пластини від 1 до  $\infty$ . Таким чином, жорсткість при згинанні наноліста максену може бути розрахована з рівняння (1) шляхом наведення згинаючого навантаження у центральну зону зразка та вимірювання відповідного відхилення.

Нещодавно механічні властивості максенів були досліджені за допомогою методів молекулярної динаміки [11] та теорії функціоналу густини (англ. DFT) [12]. Зокрема, було показано, що модуль Юнга для максенів є меншим, ніж відповідний параметр графену, однак, більша товщина моношарів максенів порівняно з графеном дозволила авторам [12] припустити, що жорсткість при згині для максенів повинна бути значно вищою, ніж для графену. Ця гіпотеза ще ніколи не перевірялася. Запропонований звіт з НДР містить результати моделювання методами класичної молекулярної динаміки згинаючої деформації нанолістів трьох зразків двовимірних карбідів титану. Наведено результати

обчислень пружних параметрів двовимірного  $\text{Ti}_2\text{C}$  при згинанні а також наведено порівняння їх з аналогічними даними для інших двовимірних матеріалів.

## 1 КОМП'ЮТЕРНА МОДЕЛЬ МІЖАТОМНОЇ ВЗАЄМОДІЇ В ДВОВИМІРНИХ КАРБИДАХ ТИТАНУ

Для моделювання згинаючої деформації зразка  $Ti_2C$  під зовнішнім навантаженням була використана методика, розроблена для розрахунку жорсткості при згині нанострічок графену (англ. GNR -Graphene nanoribbon) [23, 24]. Так, відповідно до алгоритму [23], було розглянуто нанострічку  $Ti_2C$  з довжиною 12.0 нм, и шириною 1.1 нм розташовану в Декартові системі координат. Періодичні граничні умови були застосовані в напрямку  $y$ . Три шари атомів на обох краях нанострічки лишались нерухомими під час моделювання. Зовнішня згинаюча сила була застосована до атомів титану в центральній частині верхнього шару зразка  $Ti_2C$ . Схематичне зображення експериментальної конфігурації показано на рис.1 (усі зображення атомістичних конфігурацій в даній роботі були зроблені за допомогою програмного забезпечення Visual Molecular Dynamics [25]).

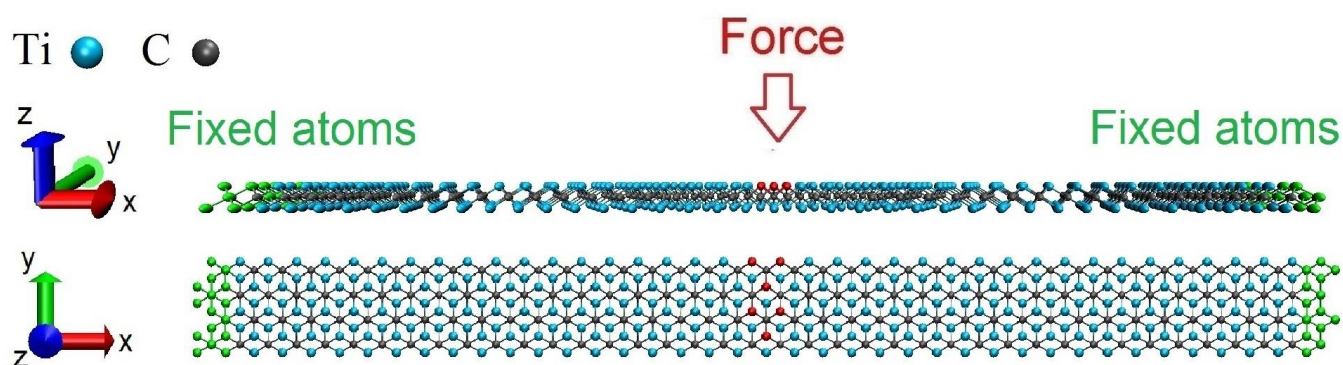


Рисунок 1 – Конфігурація досліджуваної системи. Фіксовані атоми на краях зразка  $Ti_2C$  показані зеленим кольором. Зовнішня сила застосовується до центральних атомів титану, які показані червоним кольором.



Зовнішня сила застосовувалась за допомогою алгоритму постійної сили (англ. Constant force algorithm) [26]. Під дією зовнішньої сили система досягала стаціонарного стану, після чого центральне відхилення вимірювалось як середнє вертикальне положення навантажених атомів протягом наступних  $5 \times 10^5$  кроків моделювання. Після розрахунку центрального відхилення зовнішня сила збільшувалася і процедура повторювалася. Таким чином, задаючи зовнішнє навантаження  $F$  і вимірюючи відповідне відхилення в центрі  $w$ , жорсткість при згині  $D$  можна розрахувати за допомогою рівняння (1).

Температура системи підтримувалась на рівні 1 К, як у роботі [23], з використанням термостату Берендсена [27]. Рівняння руху були інтегровані з кроком  $dt = 0.2$  фс.

Моделювання максенів методами класичної молекулярної динаміки є складним завданням через відсутність відповідного потенціалу міжатомної взаємодії. Ця ситуація може змінитися з нещодавньою параметризацією потенціалу ReaxFF [28, 29]. Проте ReaxFF та подібні реактивні (так звані REBO (англ. Reactive Empirical Bond-Order) потенціали (див. наприклад [30])) досить вимогливі до обчислювальної потужності, що обмежує розмір атомного ансамблю та / або час моделювання. Для правильного відтворення явищ, пов'язаних з дуже великою кількістю частинок на великих масштабах часу, параметризація традиційних, (не- REBO) класичних потенціалів, залишається дуже важливим завданням для масштабного моделювання механічних властивостей максенів та їх композитів. В запропонованому початковому дослідженні була використана проста техніка обчислення міжатомних сил в  $Ti_{n+1}C_n$  максенах, описана в [11].

Виходячи з припущення, що  $Ti_{n+1}C_n$  максени є металевими провідниками, і металевий тип зв'язку переважає в межах  $Ti$  шарів матеріалу [8], метод зануреного атома (англ. Embedded Atom Method (EAM)) [31] був вибраний для опису взаємодій між атомами титану в межах листів  $Ti_{n+1}C_n$ . Сили між атомами

титану та вуглецю були розраховані за допомогою емпіричної потенційної енергетичної функції (англ. Empirical potential energy function), параметризованої для сполук С-Ті [32]. В рамках цього підходу загальна потенційна енергія системи може бути представлена як обмежена сума парного та трьох-частинного доданків, де парний доданок має вид потенціалу Ленарда-Джонса (LJ). [33]

$$U_{ij} = \varepsilon_0 \left[ \left( \frac{r_0}{r_{ij}} \right)^{12} - 2 \left( \frac{r_0}{r_{ij}} \right)^6 \right], \quad (2)$$

де  $r_{ij}$ ,  $r_0$ , і  $\varepsilon_0$  відстань між атомами  $i$  та  $j$ , рівноважна відстань та мінімальна енергія при  $r_0$ , відповідно. Трьох- частинний доданок, має форму потенціалу Аксілрод-Тейллера (АТ) [34]

$$W_{ijk} = \frac{Z(1 + 3 \cos \theta_i \cos \theta_j \cos \theta_k)}{(r_{ij} r_{ik} r_{jk})^3}, \quad (3)$$

де  $r_{ij}$ ,  $r_{ik}$  і  $r_{jk}$  відстані між відповідними парами атомів,  $Z$  трьох частинний параметр інтенсивності,  $\theta_i$ ,  $\theta_j$  і  $\theta_k$  - кути трикутника утвореного  $r_{ij}$ ,  $r_{jk}$ , та  $r_{ik}$ . Слід зазначити, що цей підхід відтворює механічну поведінку двовимірних карбідів титану під деформацією розтягу [11], а отже є обґрунтованим вибором для вивчення пружних властивостей при згині зразків  $\text{Ti}_2\text{C}$ .

## 2 МОДЕЛЮВАННЯ ЗГИНАЮЧОЇ ДЕФОРМАЦІЇ

Моделювання було розпочато зі значення зовнішньої сили  $F = 0.03$  нН, та вимірювання відповідного центрального відхилення  $w$  після того, як системою досягався стаціонарний стан. Далі відбувалось збільшення сили з кроком  $\Delta F = 0.03$  нН після того як всі необхідні дані були записані. Залежність центрального прогину нанострічки  $Ti_2C$  від прикладеної згинаючої сили показано на рисунку 2а. Як показує рисунок, залежність починається з майже лінійної області, в якій ефективний коефіцієнт жорсткості зразка  $k_{eff} = \frac{F}{w}$  (показаний на внутрішній панелі на рисунку 2а) залишається майже постійним. У цьому режимі кожне значення сили, що змінюється з кроком  $\Delta F = 0.03$  нН призводить до відповідного приросту центрального відхилення  $\Delta w \approx 0.37$  Å. В момент коли прикладена сила досягає значення  $F \approx 0.6$  нН (що відповідає центральному прогину  $w \approx 7$  Å) ефективний коефіцієнт жорсткості зразка  $Ti_2C$  починає зростати від початкового значення  $k_{eff} \approx 0.82$  Н/м, в результаті чого також збільшується приріст центрального відхилення  $\Delta w$  нанострічки при  $\Delta F = 0.03$  нН (рисунок 2б, область I). Щоб підтримувати  $\Delta w$  в межах одного діапазону впродовж всього експерименту, приріст сили був збільшений до  $\Delta F = 0.06$  нН в момент коли прикладене навантаження та відповідний прогин досягли значень  $F = 1.44$  нН ата  $w \approx 12.27$  Å відповідно (рисунок 2б, регіон II) і до  $\Delta F = 0.12$  нН коли навантаження і відхилення дорівнювали  $F = 2.34$  нН та  $w \approx 16.41$  Å, відповідно (рисунок 2б, область III).

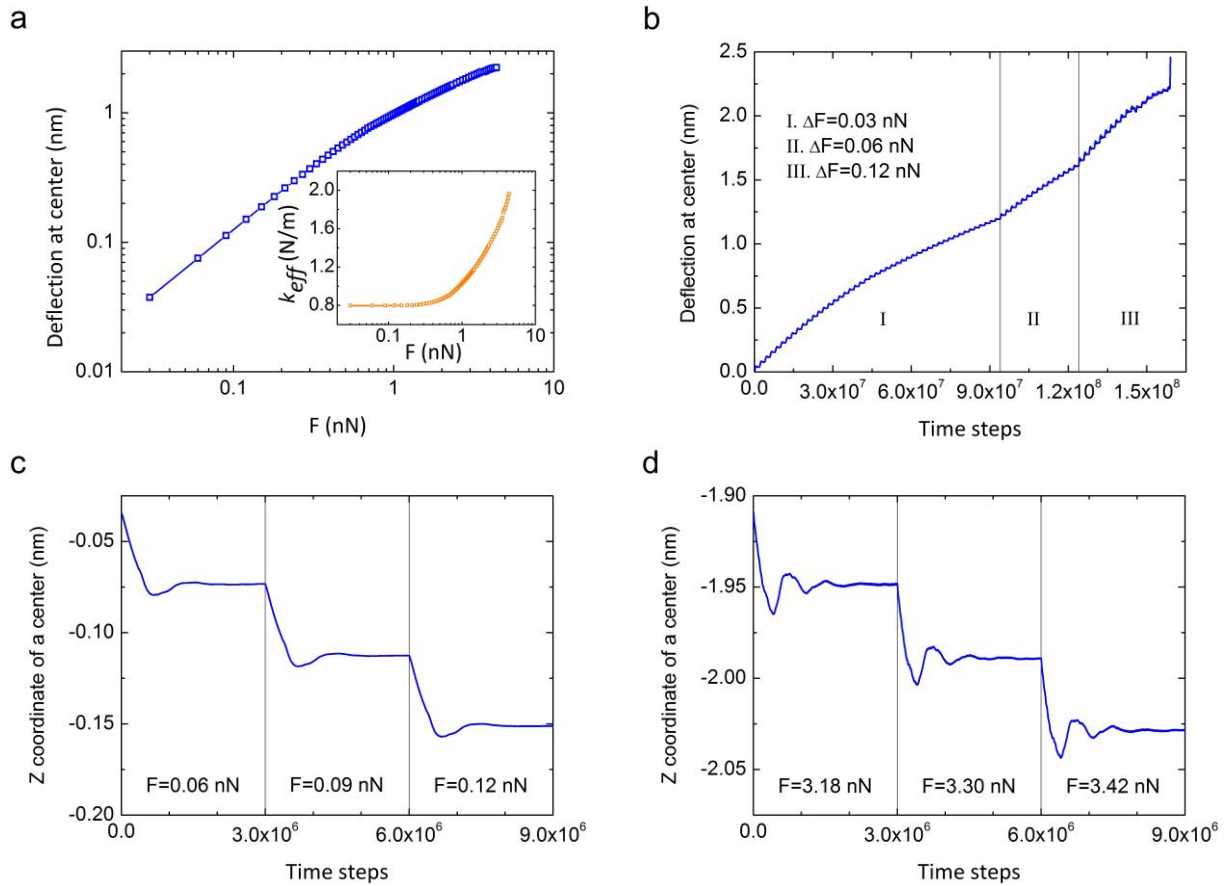


Рисунок 2 – Відхилення в центрі нанострічки  $\text{Ti}_2\text{C}$  як функція прикладеної сили згину. Внутрішня панель показує залежність ефективного коефіцієнту жорсткості (a). Часова залежність прогину з позначеними областями різного збільшення сили (b). Часові залежності координати Z нанострічки  $\text{Ti}_2\text{C}$  під час трьох кроків індентації при малих (c) і великих (d) відхиленнях, та у чотири рази більшому прирості сили в панелі (d).

Загальна часова залежність центрального відхилення при різних значеннях приросту сили  $\Delta F$  показана на рисунку 2 b .

Типові часові залежності вертикальної координати центральної зони зразка під час трьох кроків індентації з різними значеннями приросту згинаючої сили представлені на рисунках 2c та 2d. Як видно з рисунків, при малих відхиленнях

спостерігається лише незначна вертикальна віддача (рисунок 2с), тоді як в нелінійному режимі спостерігаються помітні згасаючі коливання (рисунок 2d).

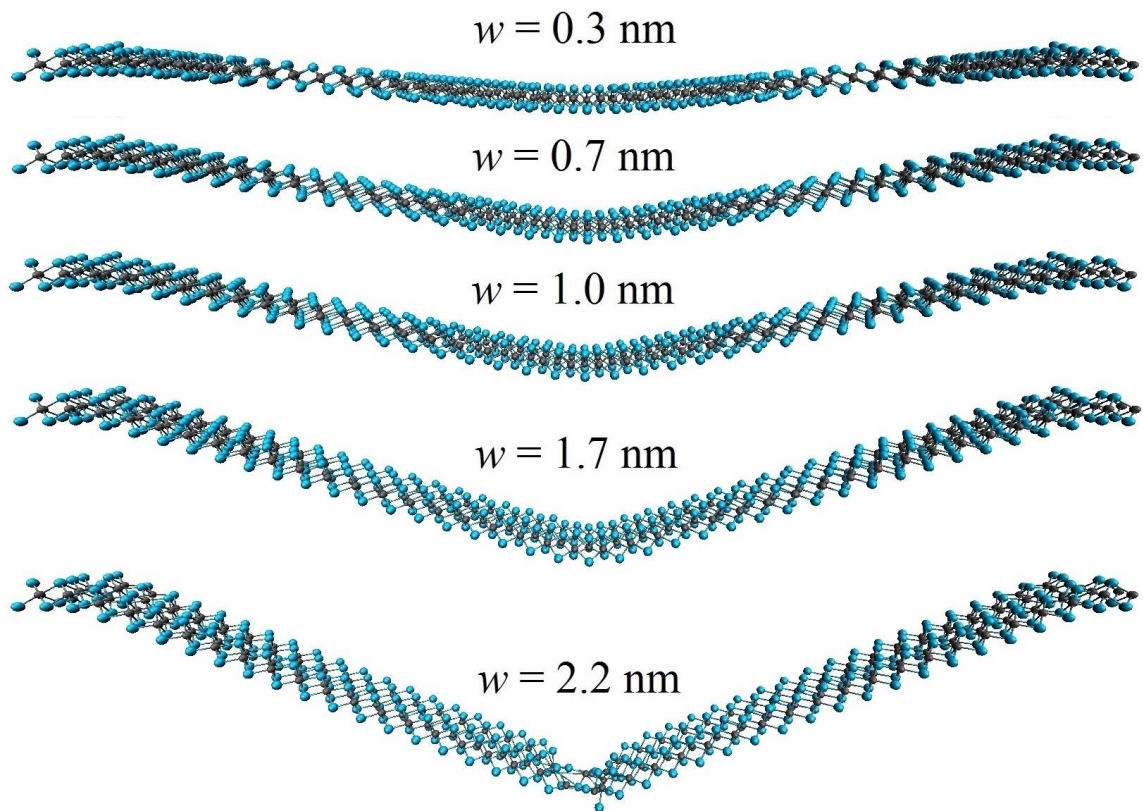


Рисунок 3 – Зміна атомної конфігурації нанострічки  $\text{Ti}_2\text{C}$  під зовнішньою згинаючою силою при різних значеннях центрального прогину  $w$ . Початок пошкодження зразка видно на останньому знімку ( $w = 2.2 \text{ nm}$ ).

Розрив зразка  $\text{Ti}_2\text{C}$  розпочався тоді, коли згинаюча сила досягла значення  $F \approx 4.50 \text{ nN}$ , з найбільшим зафіксованим відхиленням  $w \approx 22.31 \text{ \AA}$ . Знімки атомної конфігурації нанострічки  $\text{Ti}_2\text{C}$  при різних центральних прогинах представлені на рисунку 3.

### 3 РОЗРАХУНОК МЕХАНІЧНИХ ПАРАМЕТРІВ

На рисунку 4 показана розрахована жорсткість при згині як функція вимірюваного центрального відхилення (головна панель) і прикладеної сили (вставка). В межах лінійного режиму відхилення (до значень  $w = 4 \div 5 \text{ \AA}$ ), жорсткість при згині дещо збільшується від початкового значення  $D \approx 5.21 \text{ eV}$ , після чого нелінійно зростає при високих  $w$ . При подальшому збільшенні прикладеної сили жорсткість при згині зростає до максимального значення  $D \approx 12.79 \text{ eV}$  безпосередньо перед руйнуванням зразка.

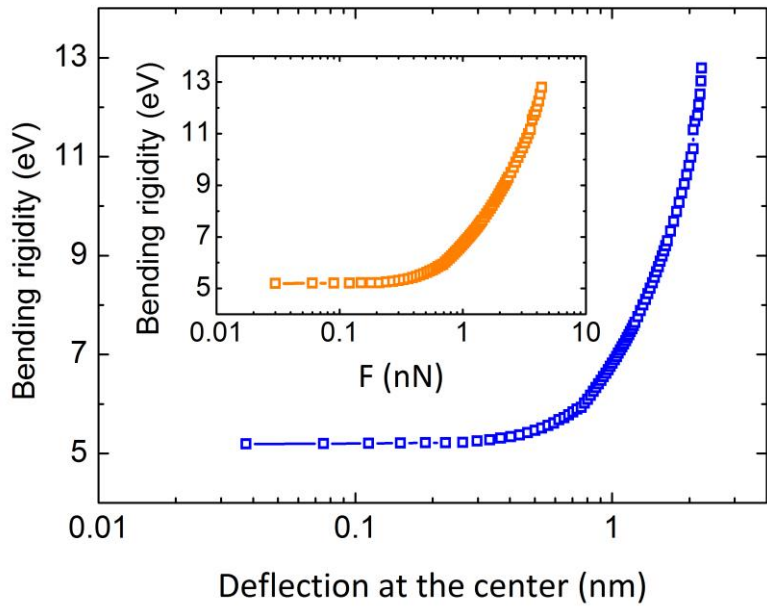


Рисунок 4 – Розрахована жорсткість при згині нанострічки  $Ti_2C$  як функція прогину в середині (основний графік) і прикладеної сила (вставка).

Слід зазначити, що жорсткість при згині, як очікується, має збільшуватись з товщиною зразка  $h$  пропорційно  $\propto h^3$ , тому вивчення поведінки при згинанні максенів  $Ti_{n+1}C_n$  з  $n > 1$  представляє особливий інтерес. А отже динамічні

моделювання нанострічок  $Ti_3C_2$  і  $Ti_4C_3$  під згинаючим навантаженням також були виконані.

Для вивчення згинальних властивостей нанострічок  $Ti_3C_2$  та  $Ti_4C_3$  було використано вищенаведену методологію обчислень з додатковими граничними умовами. Зокрема, граничні атоми вздовж довгого краю нанострічок були зафіксовані в  $xu$  площині під час згинання, оскільки було виявлено, що без цього обмеження зразок має тенденцію до нахилу в площині  $zy$  (див. рис.1) а також до прогресуючої деформації кручення, що робило дослідження неможливим. Крім того, для запобігання стискуванню зразка у точці, де було прикладене навантаження, згинаюча сила застосовувалась до всіх центральних атомів, на відміну від застосування лише до верхніх атомів  $Ti$  у випадку  $Ti_2C$ , описаному вище. Порівняльний аналіз показує, що додаткові обмеження не впливають на результати, отримані для нанострічки  $Ti_2C$ , з періодичними граничними умовами та нормальною силою застосованою тільки до найвищих атомів  $Ti$ , однак ці додаткові обмеження необхідні для збереження згинаючої поведінки зразків протягом усього моделювання.

Результати зазначених моделювань представлені на рисунках 5 і 6. На рисунку 5 показані загальні часові залежності нормальної координати центру для нанострічок  $Ti_3C_2$  та  $Ti_4C_3$  під час індентації з приростом сили  $\Delta F = 0.51$  нН і  $\Delta F = 0.72$  нН для  $Ti_3C_2$  і  $Ti_4C_3$ , відповідно. Як показує рисунок, пошкодження зразків починається з менших значень центрального відхилення ( $w \approx 1.7$  нм) у порівнянні з  $Ti_2C$ . Більше того, пластична деформація зразків разом із пошкодженням нанострічки  $Ti_3C_2$  у середній частині спостерігалася при відхиленні  $w \approx 1$  нм, що призвело до немонотонних залежностей відхилення від прикладеного навантаження (див. рисунок 6 та рисунок 7). На рисунку 6 показано відхилення нанострічок  $Ti_3C_2$  і  $Ti_4C_3$  як функції прикладеної сили згину (розрахункові значення жорсткості при згині  $D$  показані у вставці). Обидві

залежності є нерегулярними, з областями, де підвищення сили згину призводить до зменшення відхилення через пластичну деформацію та розрив зразків. На відміну від нанострічки  $Ti_2C$ , лінійний режим деформації згинання не спостерігався ні для  $Ti_3C_2$ , ні для  $Ti_4C_3$ . Вкладка на рисунку 6 показує, що при малих відхиленнях жорсткість згинання нанострічки  $Ti_3C_2$  нелінійно зростає від вихідного значення  $D \approx 49.55$  еВ, що відповідає невеликій прикладеній силі. При більших навантаженнях ( $F > 2.55$  нН) жорсткості при згині  $D(F)$  змінюється нерегулярно через пошкодження зразка у центральній частині. Залежність  $D(F)$  для зразка  $Ti_4C_3$  також починається з нелінійного зростання жорсткості при згині з  $D \approx 47.43$  еВ, після чого спостерігається зниження, пов'язане з пластичною деформацією після точки розриву на  $F \approx 9.0$  нН .

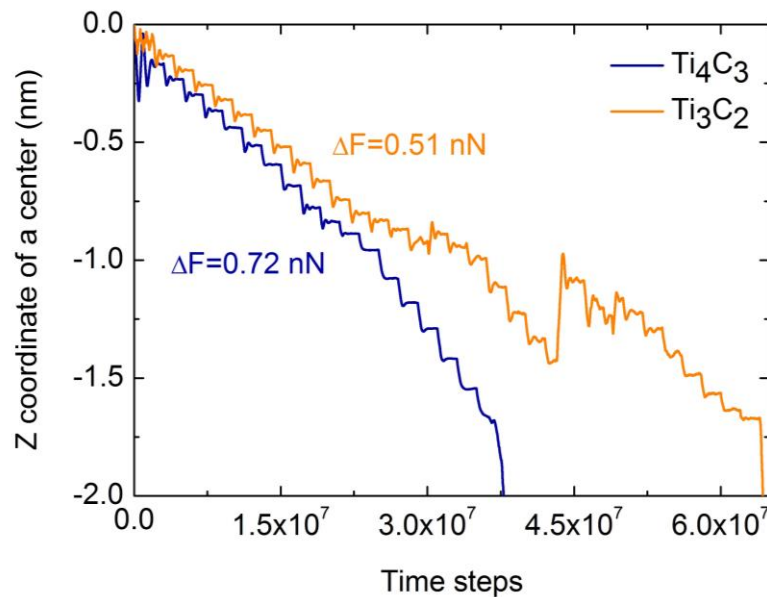


Рисунок 5 – Часові залежності координати  $Z$  середньої точки для нанострічок  $Ti_3C_2$  і  $Ti_4C_3$  при моделюванні згинаючого навантаження; відповідні прирости сили показаний на графіку.



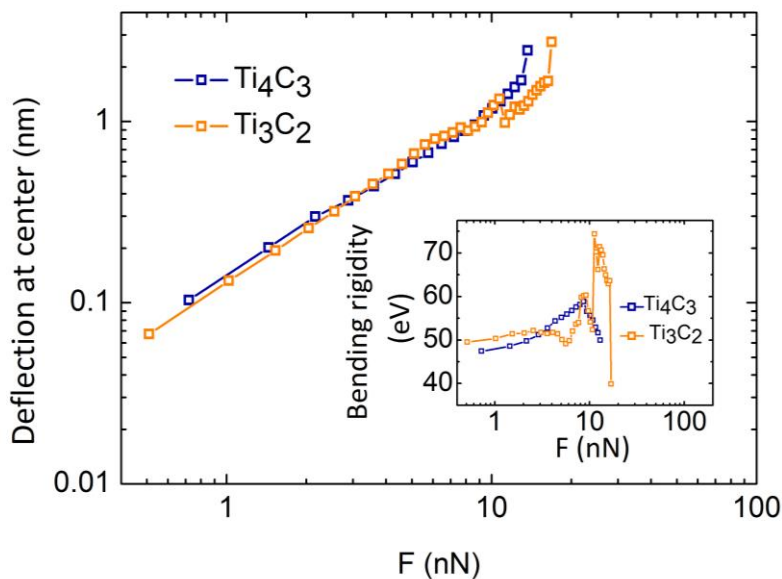


Рисунок 6 – Відхилення нанострічок  $\text{Ti}_3\text{C}_2$  і  $\text{Ti}_4\text{C}_3$  як функції прикладеної сили згину; вставка показує відповідні залежності жорсткості при згині (b).

Знімки атомних конфігурацій нанострічок  $\text{Ti}_3\text{C}_2$  і  $\text{Ti}_4\text{C}_3$  при різних прогинах показані на рисунку 7. Знімки показують, що зразок  $\text{Ti}_3\text{C}_2$  зазнає інтенсивної пластичної деформації, яка поширюється в  $[00\bar{1}]$  напрямку навколо точки завантаження що в подальшому призводить до розриву. На відміну від цього, зразок  $\text{Ti}_4\text{C}_3$  зберігає свою структуру під час деформації згинання безпосередньо до руйнування нанострічки, при якому в точці навантаження та прилеглих областях з'являються декілька тріщин, а потім відбувається розлам нанострічки на великі блоки (див. останній знімок на малюнку 7) Подібна динаміка руйнування також спостерігалася при моделюванні деформації розтягнення  $\text{Ti}_2\text{C}$ ,  $\text{Ti}_3\text{C}_2$  і  $\text{Ti}_4\text{C}_3$  [11].

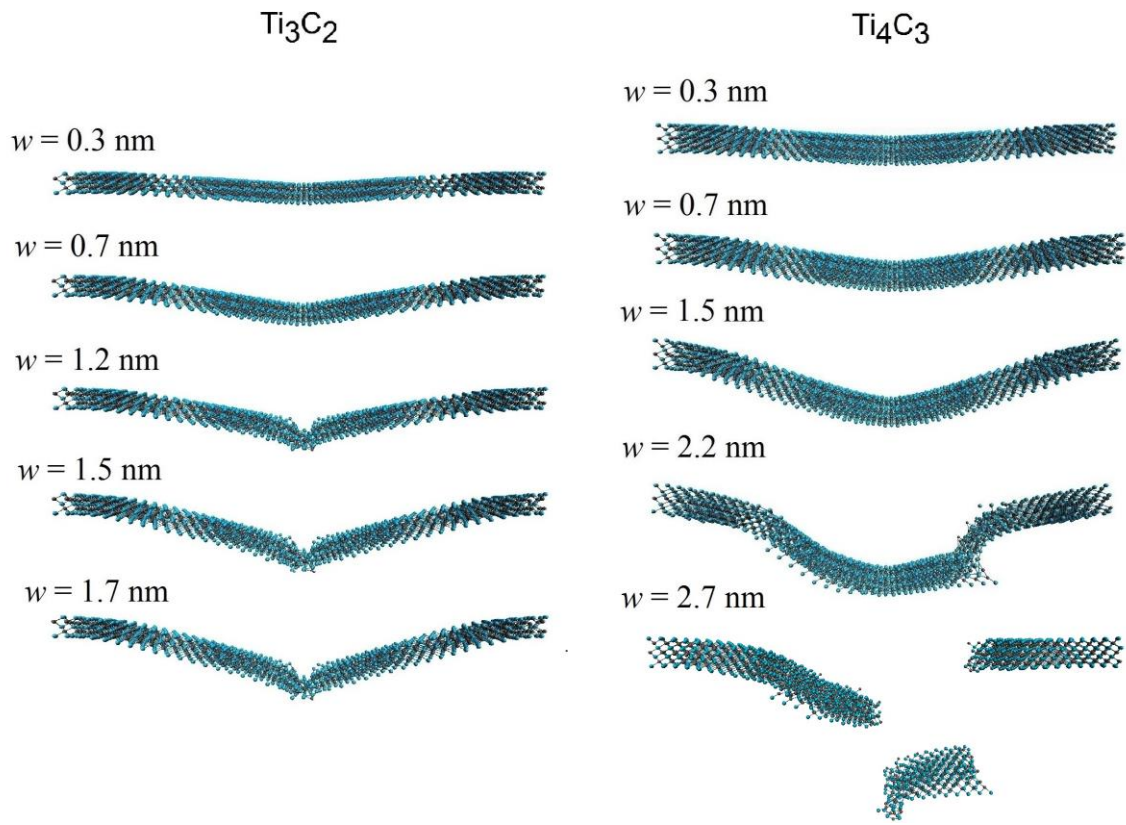


Рисунок 7 – Зміна атомної конфігурації нанострічок  $\text{Ti}_3\text{C}_2$  (ліва панель) та  $\text{Ti}_4\text{C}_3$  (права панель) під зовнішньою силою при різних центральних прогинах  $w$ .

При цьому слід зазначити, що в загальному випадку вимірне значення жорсткості згинання двовимірних матеріалів може залежати від багатьох факторів, таких як температура [35], розмір і форма зразка [36], техніка вимірювання та інше (див. посилання в роботі [23]), тому отримані величини можна розглядати лише як перші приблизні значення механічних параметрів згинання максенів. Тим не менше, отримані залежності є інформативними та якісно узгоджуються з аналогічними даними, наведеними для графена [23, 37] та двовимірного дисульфіду молібдену  $\text{MoS}_2$  [13].

## ВИСНОВКИ

Описано комп'ютерну процедуру обчислень та наведено отримані дані моделювання жорсткості при згині двовимірних карбідів титану (максенів). Згідно з наведеними в літературі даними, жорсткість при згині для графену, отримана з моделювання за допомогою аналогічних методів дорівнює  $D \approx 2.3$  еВ [23, 36]. Крім того, ефективний коефіцієнт жорсткості  $k_{eff}$  графенової нанострічки, приблизно такого ж розміру, як повідомляється, є нижчою, ніж  $k_{eff} \approx 0.36$  Н/м [23]. А отже, завдяки своїй більшій товщині,  $Ti_2C$  максен з  $D \approx 5.21$  еВ та  $k_{eff} \approx 0.82$  Н/м обчисленими в представленій роботі, більш стійкий до згинання, ніж атомарно тонкий графен. Таким чином проведено перевірку загальних міркувань щодо впливу товщини на гнучкість двовимірних матеріалів. У той же час жорсткість при згині  $Ti_2C$  нижче, ніж у другого двовимірного кристалу – дисульфіду молібдену  $MoS_2$ , для якого  $D \approx 9.61$  еВ [38]. Це може бути пов'язано з більшою товщиною та різним розміщенням атомів в  $MoS_2$  у порівнянні з  $Ti_2C$ . Нарешті, лінійний режим деформації згинання не спостерігався для більш товстих нанострічок максенів. Значення  $D \approx 49.55$  еВ та  $D \approx 47.43$  еВ, одержані при мінімальному прогині для  $Ti_3C_2$  і  $Ti_4C_3$ , слід розглядати лише як ефективні параметри, але вони значно перевищують аналогічні показники для графена,  $MoS_2$  та інших двовимірних матеріалів що узгоджується з експериментальними спостереженнями прямих одиничних шарів  $Ti_3C_2$  у полімерно-матричних композитах .

**ПЕРЕЛІК ДЖЕРЕЛ ПОСИЛАНЬ**

1. Two-Dimensional Nanocrystals Produced by Exfoliation of  $\text{Ti}_3\text{AlC}_2$  / M. Naguib, M. Kurtoglu, V. Presser [et al.] // *Advanced Materials*. – 2011. – 23. – P. 4248.
2.  $\text{Ti}_3\text{C}_2$  MXene as a High Capacity Electrode Material for Metal (Li, Na, K, Ca) Ion Batteries / D. Er, J. Li, M. Naguib, [et al.] // *ACS Applied Materials & Interfaces*. – 2014. – 6. – P. 11173.
3. Alkylammonium Cation Intercalation into  $\text{Ti}_3\text{C}_2$  (MXene): Effects on Properties and Ion-Exchange Capacity Estimation / M. Ghidui, S. Kota, J. Halim, [et al.] // *Chemistry of Materials*. – 2017. – 29. – P. 1099.
4. MXene: a new family of promising hydrogen storage medium / Q. Hu, D. Sun, Q. Wu, [et al.] // *J Phys Chem A*. – 2013. – 117. – P. 14253.
5. [5] Novel Electronic and Magnetic Properties of Two-Dimensional Transition Metal Carbides and Nitrides / M. Khazaei, M. Arai, T. Sasaki, [et al.] // *Advanced Functional Materials*. – 2013. – 23. – P. 2185.
6. Cation Intercalation and High Volumetric Capacitance of Two-Dimensional Titanium Carbide / M.R. Lukatskaya, O. Mashtalir, C.E. Ren, [et al.] // *Science*. – 2013. – 341. – P. 1502.
7. [7] M. Naguib, J. Come, B. Dyatkin, V. Presser, P.L. Taberna, P. Simon, M.W. Barsoum, Y. Gogotsi, MXene: a promising transition metal carbide anode for lithium-ion batteries / M. Naguib, J. Come, B. Dyatkin [et al.] // *Electrochemistry Communications*. – 2012. – 16. – P. 61.
8. Tang Q. Are MXenes Promising Anode Materials for Li Ion Batteries? Computational Studies on Electronic Properties and Li Storage Capability of  $\text{Ti}_3\text{C}_2$  and  $\text{Ti}_3\text{C}_2\text{X}_2$  (X = F, OH) Monolayer / Q. Tang, Z. Zhou, P.W. Shen // *Journal of the American Chemical Society*. – 2012. – 134. – P. 16909.

9. Flexible and conductive MXene films and nanocomposites with high capacitance / Z. Ling, C.E. Ren, M.-Q. Zhao [et al.] // Proceedings of the National Academy of Sciences.– 2014. – 111. – P. 16676.
10. Maleski K. Dispersions of Two-Dimensional Titanium Carbide MXene in Organic Solvents / K. Maleski, V.N. Mochalin, Y. Gogotsi // Chemistry of Materials.– 2017. – 29. – P. 1632.
11. Borysiuk V. N. Molecular dynamic study of the mechanical properties of two-dimensional titanium carbides  $Ti_{(n+1)}C_n$  (MXenes) / V. N. Borysiuk, V. N. Mochalin, Y. Gogotsi // Nanotechnology. – 2015. – 26. – P. 265705.
12. First principles study of two-dimensional early transition metal carbides / M. Kurtoglu, M. Naguib, Y. Gogotsi, M.W. Barsoum // MRS Communications. – 2012. – 2. – P. 133.
13. Elastic Properties of Freely Suspended  $MoS_2$  Nanosheets / A. Castellanos-Gomez, M. Poot, G.A. Steele [et al.] // Advanced Materials. – 2012. – 24. – P. 772.
14. Measurement of the elastic properties and intrinsic strength of monolayer graphene / C. Lee, X.D. Wei, J.W. Kysar, J. Hone // Science. – 2008. – 321. – P. 385.
15. Materials science. Dynamic mechanical behavior of multilayer graphene via supersonic projectile penetration / J.H. Lee, P.E. Loya, J. Lou, E.L. Thomas // Science. – 2014. – 346. – P. 1092.
16. Nanoscale bending of multilayered boron nitride and graphene ribbons: experiment and objective molecular dynamics calculations / I. Nikiforov, D.M. Tang, X. Wei [et al.] // Phys Rev Lett. – 2012. – 109. – P. 025504.
17. 25th Anniversary Article: MXenes: A New Family of Two-Dimensional Materials / M. Naguib, V.N. Mochalin, M.W. Barsoum, Y. Gogotsi // Advanced Materials. – 2014. – 26. – P. 992.
18. Electromechanical Resonators from Graphene Sheets / J.S. Bunch, A.M. van der Zande, S.S. Verbridge [et al.] // Science. – 2007. – 315. – P. 490.

19. Performance of monolayer graphene nanomechanical resonators with electrical readout / C. Chen, S. Rosenblatt, K.I. Bolotin [et al.] // *Nature Nano.* – 2009. – 4. – P. 861.
20. A tunable carbon nanotube electromechanical oscillator / V. Sazonova, Y. Yaish, H. Ustunel [et al.] // *Nature.* – 2004. – 431. – P. 284.
21. Large-Scale Arrays of Single-Layer Graphene Resonators / A.M.v.d. Zande, R.A. Barton, J.S. Alden [et al.] // *Nano Letters.* – 2010. – 10. – P. 4869.
22. Timoshenko S. Theory of plates and shells / S. Timoshenko, S. Woinowsky-Krieger, New York: McGraw-Hill. – 1959
23. Kang J.W., S. Lee S. Molecular dynamics study on the bending rigidity of graphene nanoribbons / J.W. Kang, S. Lee // *Computational Materials Science.* – 2013. – 74. – P. 107.
24. Molecular dynamics simulation study on mechanical responses of nanoindented monolayer-graphene-nanoribbon / S. Young Kim, S.-Y. Cho, J. Won Kang, O. Kuen Kwon // *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures.* – 2013. – 54. – P. 118.
25. Humphrey W. VMD: Visual molecular dynamics / W. Humphrey, A. Dalke, K. Schulten // *Journal of Molecular Graphics & Modelling.* – 1996. – 14. – P. 33.
26. [26] O.M. Braun, M. Peyrard, Friction in a solid lubricant film, *Physical Review E.* – 2001. – 63. – P. 046110.
27. Molecular-Dynamics with Coupling to an External Bath / H. J. C. Berendsen, J. P. M. Postma, W. F. Vangunsteren // *Journal of Chemical Physics.* – 1984. – 81. – P. 3684.
28. Effect of Metal Ion Intercalation on the Structure of MXene and Water Dynamics on its Internal Surfaces . N.C. Osti, M. Naguib, A. Ostadhossein[et al.] // *ACS Applied Materials & Interfaces.* – 2016. – 8. – P. 8859.

29. ReaxFF: A Reactive Force Field for Hydrocarbons / A.C.T. van Duin, S. Dasgupta, F. Lorant, W.A. Goddard // *The Journal of Physical Chemistry A*. – 2001. – 105. – P. 9396.
30. Properties of Ti/TiC Interfaces from Molecular Dynamics Simulations / T. Liang, M. Ashton, K. Choudhary [et al.] // *The Journal of Physical Chemistry C*. – 2016. – 120. – P. 12530.
31. Atomic scale structure of sputtered metal multilayers / X. W. Zhou, H. N. G. Wadley, R. A. Johnson [et al.] // *Acta Materialia*. – 2001. – 49. – P. 4005.
32. Oymak H., Erkoc F. Titanium coverage on a single-wall carbon nanotube: molecular dynamics simulations / H. Oymak, F. Erkoc. // *Chemical Physics*. – 2004. – 300. – P. 277.
33. Jones J. E. On the Determination of Molecular Fields. II. From the Equation of State of a Gas / J. E. Jones. // *Proc. R. Soc. Lond. A*. – 1924. – vol. 106. – P. 463.
34. Axilrod B. M., Teller E. Interaction of the van der Waals Type Between Three Atoms / B. M. Axilrod, E. Teller // *The Journal of Chemical Physics*. – 1943. – 11. – P. 299..
35. Liu P., Zhang Y.W. Temperature-dependent bending rigidity of graphene / P. Liu, Y.W. Zhang // *Applied Physics Letters*. – 2009. – 94. – P. 231912.
36. Wang Q. Simulations of the bending rigidity of graphene / Q. Wang // *Physics Letters A*. – 2010. – 374. – P. 1180.
37. Atalaya J. Continuum Elastic Modeling of Graphene Resonators / J. Atalaya, A. Isacsson, J.M. Kinaret // *Nano Letters*. – 2008. – 8. – P. 4196.,
38. Elastic bending modulus of single-layer molybdenum disulfide ( $\text{MoS}_2$ ): finite thickness effect / J.W. Jiang, Z. Qi, H.S. Park, T. Rabczuk // *Nanotechnology*. – 2013. – 24. – P. 435705.