**Моделирование двумерных алмазных структур в многослойном графене**

***Томилин Л.Ф.1, 2, Ерохин С.В.2, Сорокин П.Б.2***

*Студент, 3 курс бакалавриата*

*1Российский университет дружбы народов* *117198, Москва, ул. Миклухо-Маклая, д. 6*

*2Лаборатория* *цифрового материаловедения
Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС»*

*119049, Россия, Москва, Ленинский пр. 4, стр. 1*

*E-mail: 13l13e13v@gmail.com*

Возможность формирования алмазных структур в графене представляет особый интерес, поскольку такие алмазные плёнки обладают огромным потенциалом в различных областях от электроники и оптики до биомедицины. Облучение многослойного графена тяжёлыми ионами демонстрирует возможность формирования алмазных структур с поверхностями, не подверженными графитизации, например, плёнок с поверхностью (100) [1].

В данной работе было проведено исследование механических свойств композитов с помощью одноосного растяжения структуры, а также используя моделирование процесса индентирования. Рассмотрена стабильность алмазных структур в многослойном графене в зависимости как от поперечного размера алмазного кластера, так и от толщины плёнки графена. Все вычисления были выполнены c использованием пакета молекулярной динамики LAMMPS [2].

*Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант № 21-12-00399). Лаборатория цифрового материаловедения была создана в рамках реализации программы стратегического академического лидерства «Приоритет-2030» и мероприятий направленных на развитие и реализацию прорывных научных исследований и разработок, в том числе получение по итогам прикладных научных исследований и (или) экспериментальных разработок результатов интеллектуальной деятельности Грант K6-2022-041.*

**Литература**

1. Z. Sun, D. Qiu, N. Gao, H. Li, Structural and electronic properties of two-dimensional atomically thick (100) diamond nanofilms by first-principlescalculations, J. Appl. Phys. 125 (2019) 215301, https://doi.org/10.1063/1.5094717.

2. LAMMPS molecular dynamics simulator (n.d.), http://lammps.sandia.gov.