10,14

# Механические свойства многостенных углеродных хиральных нанотрубок и жгутов из них: *in silico* исследования в рамках метода функционала плотности в приближении сильной связи

© О.Е. Глухова[1,2], П.А. Колесниченко[1], М.М. Слепченков[1]

[1] Институт физики, Саратовский национальный исследовательский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского, Саратов, Россия
[2] Институт бионических технологий и инжиниринга, Первый МГМУ им. И.М. Сеченова Минздрава России, Москва, Россия

E-mail: glukhovaoe@info.sgu.ru

*Поступила в Редакцию 6 мая 2025 г.*
*В окончательной редакции 8 мая 2025 г.*
*Принята к публикации 8 мая 2025 г.*

Квантово-механическими методами выявлены закономерности электронных и механических свойств многостенных углеродных нанотрубок с внутренним каналом $\sim 4-5$ nm, в том числе при объединении в жгуты. Разработаны новые методики: I) генерации атомистических суперячеек атомных сеток многостенных трубок и жгутов из них; II) вычисления площади в поперечном сечении произвольного меандра из нанотрубок в составе жгута для расчета модуля Юнга. С помощью разработанных методик и метода DFTB (метод функционала плотности в приближении сильной связи) исследованы закономерности соотношения „напряжение–деформация“ при растяжении хиральных нанотрубок и жгутов из них в диапазоне $0.1-10\,\%$. Установлено, что константы упругости (модуль Юнга, коэффициент Пуассона) для жгутов из трех многостенных трубок превышают аналогичные для отдельных аналогичных трубок в несколько раз, что делает их перспективными в области разработки новых материалов для корпусирования электронных приборов в условиях экстремальных нагрузок.

**Ключевые слова:** углеродные многостенные хиральные нанотрубки, модуль Юнга, коэффициент Пуассона, жгуты из хиральных многостенных нанотрубок, метод функционала плотности в приближении сильной связи (DFTB).

DOI: 10.61011/FTT.2025.05.60756.105-25

## 1. Введение

Проблема повышения прочностных и эксплуатационных характеристик конструкционных материалов решается в настоящее время, в том числе, с применением углеродных нанотрубок (УНТ), которые синтезируются сегодня в промышленных масштабах с контролируемыми диаметром и длиной. Актуальность решения обозначенной проблемы определяется возросшими требованиями к аппаратуре, предназначенной для обеспечения и развития космической связи.

Наноматериалы на основе УНТ отличаются легкостью, супер-эластичностью, высокими прочностью и твердостью [1,2]. Такие качества предопределяют применение этих материалов для корпусирования электронных приборов, работающих в экстремальных условиях. Наноматериалы из УНТ включают в свой состав как одностенные УНТ (ОУНТ), так и многостенные (МУНТ). Выбор наиболее оптимального состава пленки из УНТ (хиральность, диаметр, количество стенок в составе МУНТ) определяется предварительным моделированием с расчетом механических характеристик МУНТ с различным количеством стенок.

Созданием атомистических моделей УНТ и жгутов из них, изучением их структурной и механической стабильности занимаются с начала 2010-х годов [2–5]. Для преодоления проблемы моделирования многоатомных УНТ, МУНТ и жгутов из них применяются различные подходы: построение крупнозернистых моделей [6–8]; построение полноамтоных моделей на основе ОУНТ малого диаметра с одинаковыми индексами хиральности [9]. В работе [9] авторы проводят исследования деформационного поведения жгута из ОУНТ (3,3) под действием растяжения с учетом различной величины угла скручивания ОУНТ внутри жгута. При этом рассматривается модель жгута, состоящая из девятнадцати параллельно ориентированных ОУНТ, которые закручиваются в „веревочку“ под углами 0, 10 и 20°, и на этих моделях далее выполняется исследование закономерностей механических свойств при растяжении структуры. В другой работе [10] проводится исследование динамического отклика жгутов ОУНТ с индексами хиральности (6,6) при механическом ударе с помощью молекулярной динамики и силового поля AIREBO-M в программном пакете LAMMPS. В настоящее время отсутствуют модели жгутов из МУНТ, в составе которых

присутствуют УНТ различной хиральности. Подобные исследования *in silico* требуют больших вычислительных ресурсов, экспериментальные исследования являются очень тонкими с позиции их реализации с минимальной погрешностью. Компьютерное исследование механических свойств жгутов было успешно реализовано для случая упаковки из нехиральных ОУНТ, при этом применялся эмпирический подход и молекулярно-динамическое моделирование. Экспериментальные исследования были реализованы для слоев из УНТ, которые равномерно растягивались вдоль оси трубок, а также для отдельных трубок, которые подвергались закручиванию [11]. Для индивидуальных УНТ были исследованы закономерности изменения модуля Юнга в зависимости от аспектного соотношения [12,13].

Цель данной работы — выявить с помощью квантово-механических подходов закономерности изменения механических свойств (в частности, модулей Юнга и Пуассона): 1) с увеличением количества хиральных УНТ в составе МУНТ с внутренним диаметром канала $\sim 4-5$ nm; 2) при объединении МУНТ различной слоистости с внутренним диаметром канала $\sim 4-5$ nm в жгуты.

## 2. Метод исследования

Все теоретические исследования проводились с применением метода SCC DFTB (метод функционала плотности в приближении сильной связи с самосогласованием заряда) [14], который обеспечивает высокую точность расчетов энергетических и электронных характеристик на фоне использования многоатомных суперячеек. Полная энергия структуры определяется выражением:

$$E_{\text{tot}} = E_{\text{band}} + E_{\text{scc}} + E_{\text{rep}}, \tag{1}$$

где $E_{\text{band}}$ — энергия занятых электронных состояний, $E_{\text{scc}}$ — энергия взаимодействия электронов, $E_{\text{rep}}$ описывает энергию отталкивания атомных ядер. Первое слагаемое энергия — $E_{\text{band}}$, вычисляется суммированием собственных значений $\varepsilon_v$ гамильтониана, соответствующих заполненным электронным состояниям. Второе слагаемое — энергия $E_{\text{scc}}$, учитывает изменение электронной плотности при взаимодействии атомов различных химических элементов. Эта энергия определяется перераспределением плотности электронного заряда, рассчитывающейся по методу Малликена, и кулоновским взаимодействием, включающим в себя обменно-корреляционное взаимодействие и параметры Хаббарда. Третье слагаемое — феноменологическая энергия $E_{\text{rep}}$, энергия отталкивания двух ядер атомов, не упитывающаяся при расчете энергий $E_{\text{band}}$ и $E_{\text{scc}}$. Величина энергии $E_{\text{rep}}$ представляется в виде суммы парных отталкивательных потенциалов между атомами $i$, $j$:

$$E_{\text{rep}} = \sum_{i<j} V_{\text{rep}_{i,j}}(r_{i,j}), \tag{2}$$

где потенциал $V_{\text{rep}_{i,j}}$ задается суммой полиномиальных функций:

$$V_{\text{rep}}(r) = \sum_{p=2}^{6} c_p (r_{\text{cut}} - r)^p. \tag{3}$$

Здесь $r_{\text{cut}}$ — радиус отсечки, то есть расстояние от данного атома до соседнего, на котором энергия межатомного взаимодействия еще является ненулевой (с превышением этого расстояния считается, что атомы не взаимодействуют), коэффициенты $c_p$ и степени $p$ задают форму сплайна, определяющего свойства потенциала межатомного взаимодействия. Потенциал $V_{\text{rep}_{i,j}}$ является короткодействующим и убывающим по мере увеличения расстояния между атомами. В данной работе применялся базисный набор Слэтера–Костера (sk-файлы) pbc-0-3 [15]. Дисперсионное взаимодействие между трубками в составе МУНТ учитывалось с применением потенциала Леннарда–Джонса.

Для получения энергетически выгодной атомной конфигурации суперячеек проводилась минимизация полной энергии по всем координатам всех атомов и по длинам векторов трансляции суперячейки при электронной температуре 300 K. Применялась 3D-периодическая ячейка, ее размеры определялись величиной вектора трансляции вдоль оси УНТ (жгута из УНТ), которая направлялась по оси $Y$ декартовой системы координат, в двух других направлениях размер ячейки составляла 100 nm. Для корректного обхода первой зоны Бриллюэна применялась сетка Монкхорста–Пака с разбиением $3 \times 1 \times 3$. Для минимизации полной энергии использовался метод сопряженных градиентов. Условием достижения минимума полной энергии выступала величина силы, действующей на атом, ее значение не должно было превышать $10^{-4}$ eV/atom.

Модуль Юнга рассчитывался по формуле, которая следует из закона Гука:

$$Y = \frac{2\Delta E_{\text{tot}}}{\Delta V} \frac{l}{\Delta l}, \tag{4}$$

где в числителе изменение полной энергии при растяжении/сжатии, в знаменателе — изменение объема, $\Delta l/l$ — деформация. Механическое напряжение рассчитывается, соответственно, по формуле:

$$\varepsilon = \frac{2\Delta E_{\text{tot}}}{\Delta V}. \tag{5}$$

Коэффициент Пуассона ОУНТ, МУНТ, и жгутов из них рассчитывается по изменению эффективного диаметра соответствующих цилиндрических и полиэдральных конструкций из трубок:

$$\mu = -\frac{\Delta d_{\text{eff}}}{d_{\text{eff}}} \frac{l}{\Delta l}, \tag{6}$$

где под эффективным диаметром понимается усредненная величина диаметра для МУНТ и величина диаметра контура жгута — диаметр окружности, в которую вписывается внешний контур жгута из нанотрубок.

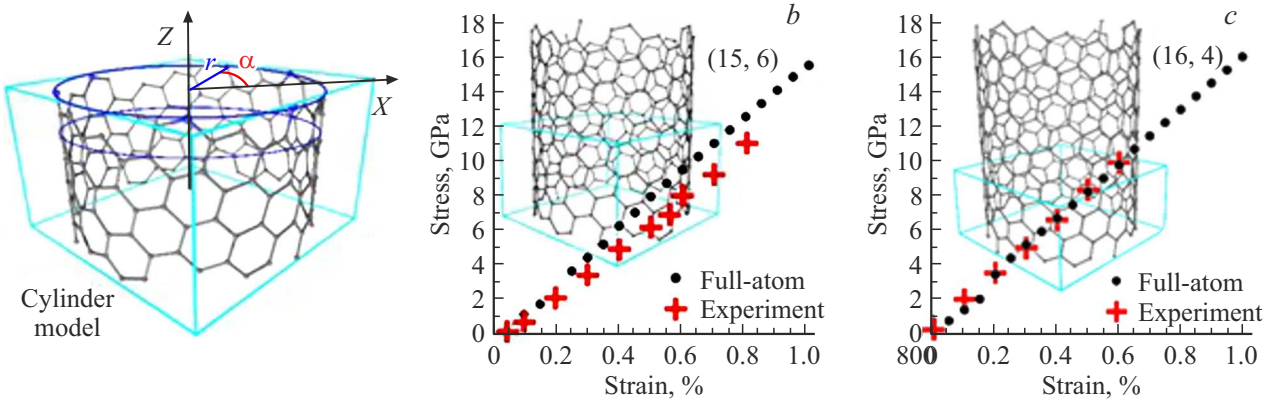



**Рис. 1.** Атомистические модели и деформационные свойства хиральных нанотрубок: *a* — модель УНТ в виде цилиндра с радиусом $r$ и углом расположения атома на цилиндре $\alpha$; *b* — соотношение напряжение–деформация для УНТ (15,6); *c* — соотношение напряжение–деформация для УНТ (16,4).

## 3. Результаты

### 3.1. Квантово-механические расчеты модулей упругости хиральных ОУНТ, сравнение с экспериментальными данными

Для нескольких хиральных УНТ, исследованных экспериментально, были проведены расчеты соотношений напряжение–деформация с целью верификации рассчитываемых модулей упругости. Трубка может быть представлена в виде цилиндра с определенным радиусом $r$ и углом $\alpha$, которые определяет положение каждого атома на цилиндрической поверхности. Такой подход позволяет генерировать атомную сетку УНТ любой хиральности. На рис. 1, *a* показан фрагмент УНТ в виде цилиндрической поверхности, атомы которой задаются радиусом $r$ и углом $\alpha$. Все атомы находятся на окружностях с центром на оси УНТ. На рис. 1, *b*–*c* представлены результаты квантово-механических исследований зависимостей напряжение–деформация для двух хиральных трубок (15,6) и (16,4) — черные точки. На тех же рисунках представлены результаты экспериментальных исследований, полученных в работе [16], они отмечены красными крестиками. В табл. 1 представлены результаты расчетов модуля Юнга и данные измерений, из которых следует, что квантово-механические расчеты модуля Юнга находятся пределах погрешности $\sim 7\,\%$ по сравнению с усредненными измеренными величинами.

**Таблица 1.** Сравнительные параметры нанотрубок

| ОУНТ | *in silico* | | Эксперимент [16] | | Погрешность |
|---|---|---|---|---|---|
| | $D$, nm | $Y$, TPa | $D$, nm | $Y$, TPa | $\lvert\Delta Y\rvert/Y$, % |
| (14,1) | 1.150 | 1.92 | 1.137 | $2.17 \pm 0.036$ | 11.5 |
| (16,4) | 1.449 | 1.61 | 1.435 | $1.63 \pm 0.034$ | 1.22 |
| (15,6) | 1.482 | 1.46 | 1.467 | $1.34 \pm 0.035$ | 8.95 |

### 3.2. МУНТ с внутренним диаметром канала $\sim 4-5$ nm

Трубки типа МУНТ характеризуются двумя параметрами: диаметром внутреннего канала и количеством слоев — стенок, образованных трубками. Например, в работе [17] показано, что характерным внутренним каналом МУНТ является трубка диаметром $\sim 4-6$ nm, а количество слоев может достигать трех и более. В данной работе была взята за основу модели МУНТ с внутренним каналом $\sim 4$ nm и тремя стенками. Как известно, синтезируемые УНТ имеют длину в несколько микрометров/миллиметров. Атомистические модели УНТ не могут характеризоваться такой же длиной из-за большой многоатомности таких структур, в связи с чем необходимо генерировать суперячейки, периодические граничные условия которых автоматически обеспечивают исследование бесконечно длинных 1D-наноструктур, свойства которых можно сравнивать с синтезируемыми УНТ микронной/миллиметровой длины. Проблемой генерирования атомных сеток таких суперячеек является сложность набора одностенных УНТ в составе МУНТ, которые отличаются хиральностью и, соответственно, типом проводимости. Межстенное расстояние в МУНТ при этом должно отвечать величине $\sim 3.4$ Å. Таким образом, при создании суперячеек МУНТ необходимо соблюсти выполнение следующих обязательных условий: 1) межстенное расстояние; 2) различная хиральность УНТ; 3) одинаковые величины векторов трансляции вдоль осей УНТ, что определяет в итоге вектор трансляции МУНТ.

Разработана оригинальная методика генерации атомных сеток МУНТ с заданным диаметром внутреннего канала. Математическая суть методики заключается в следующем:

1) Назначается выборка индексов хиральности $(m, n)$, например в диапазоне $(1-100)$, и задается в качестве главного определяющего параметра диаметр внутреннего канала $D$. Величина межстенного расстояния задается

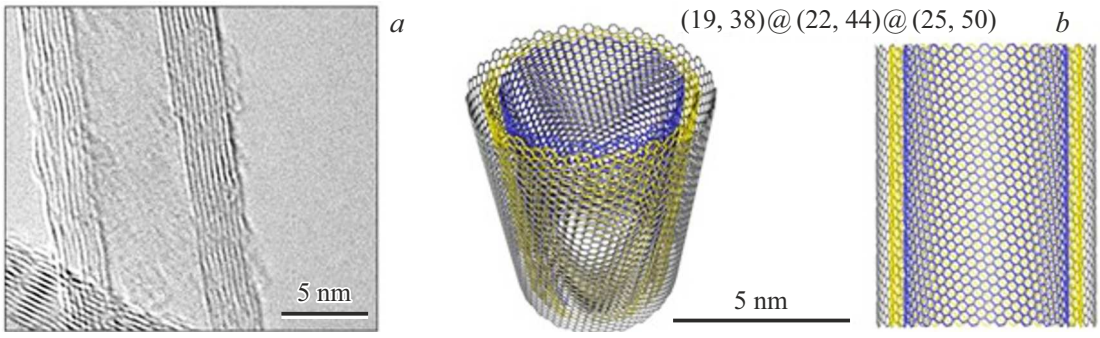



**Рис. 2.** Многостенные УНТ: TEM снимок МУНТ из десяти нанотрубных стенок [17]; атомистическая модель МУНТ из трех нанотрубных стенок с расстоянием между стенками $\sim 3.3-3.5$ Å (два ракурса — в 3D-изображении и перспективе, и в 2D-разрезе).

**Таблица 2.** Геометрические и энергетические характеристики УНТ

| CNT | Количество атомов | $T_C$, Å | $D$, Å | $E_{\text{tot}}$, eV/at | $E_{\text{vdW}}$, eV/at |
|---|---|---|---|---|---|
| (19,38) | 532 | 11.358 | 39.660 | −47.085 | – |
| (22,44) | 616 | 11.357 | 45.922 | −47.091 | – |
| (25,50) | 700 | 11.358 | 52.188 | −47.092 | – |
| (19,38)@(22,44) | 1148 | 11.352 | 39.407/46.192 | −47.127 | 0.222 |
| (22,44)@(25,50) | 1316 | 11.352 | 45.681/52.446 | −47.128 | 0.223 |
| (19,38)@(22,44)@(25,50) | 1848 | 11.349 | 39.240/45.835/52.647 | −47.141 | 0.207 |

в пределах $\sim 3.3-3.5$ Å, также указывается количество стенок в составе МУНТ;

2) Рассчитываются все возможные варианты сочетаний хиральных трубок $(m, n)$ в составе МУНТ с заданным количеством стенок и заданным межстенным расстоянием. Соответственно вычисляются диаметры трубок $D$ и векторы трансляций $T_C$:

$$D = \frac{0.246\sqrt{n^2 + nm + m^2}}{\pi}, \qquad (7),$$

$$T_C = \frac{\sqrt{3}C}{gcm(n, m)}, \quad C = 0.246\sqrt{n^2 + nm + m^2}, \qquad (8)$$

где $gcm$ — наибольший общий делитель (НОД);

3) Из полученного набора всех возможных моделей МУНТ проводится отбор структур, параметры которых наиболее удовлетворяют заданным. На этом этапе величина диаметра внутреннего канала $D$ может варьироваться в пределах нескольких процентов и может не соответствовать строго изначально заданному значению. Величина межстенного расстояния также может варьироваться в пределах $3.4 \pm 0.2$ Å. Однако, вектор трансляции $T_C$ для всех ОУНТ в составе МУНТ должен совпадать в очень узких пределах, не превышающих 1 %, так как именно этот параметр определяет периодические граничные условия для суперячейки модели МУНТ. Коррекция межстенного расстояния может быть эффективно осуществлена в ходе оптимизации структуры суперячейки вследствие учета дисперсионного взаимодействия между стенками ОУНТ в составе МУНТ. При этом коррекция величины $T_C$ допустима только незначительно во избежание неупругих растяжения/сжатия ОУНТ.

Многостенные УНТ характеризуются большим диаметром внутреннего канала $D \sim 4-7$ nm и количеством стенок в пределах десяти (на рис. 2, *a* показан снимок подобной нанотрубки). В данной работе построены модели трех/двустенных МУНТ с $D \sim 4-5$ nm. С помощью описанной методики выявлены оптимальные конструкции: (19,38)@(22,44), (22,44)@(25,50) и (19,38)@(22,44)@(25,50). На рис. 2 представлен снимок TEM трубки и атомистические модели трехслойной МУНТ (в двух ракурсах). Ограничение трехстенной моделью обусловлено значительными вычислительными ресурсами, необходимыми для квантовых исследований электронных свойств МУНТ. Суперячейка полученной атомистической модели МУНТ включает 1848 атомов с длиной вектора трансляции $\sim 11.273$ Å (до оптимизации). Была проведена оптимизация одностенных трубок в составе МУНТ, двустенных и трехстенной. Геометрические параметры трубок, полная энергия и энергия ван-дер-ваальсового взаимодействия стенок МУНТ (приведенные на атом) приведены в табл. 2. Для МУНТ приведены значения диаметров внутренней и внешней трубок. Энергетически выгодны двух/трехстенные труб-

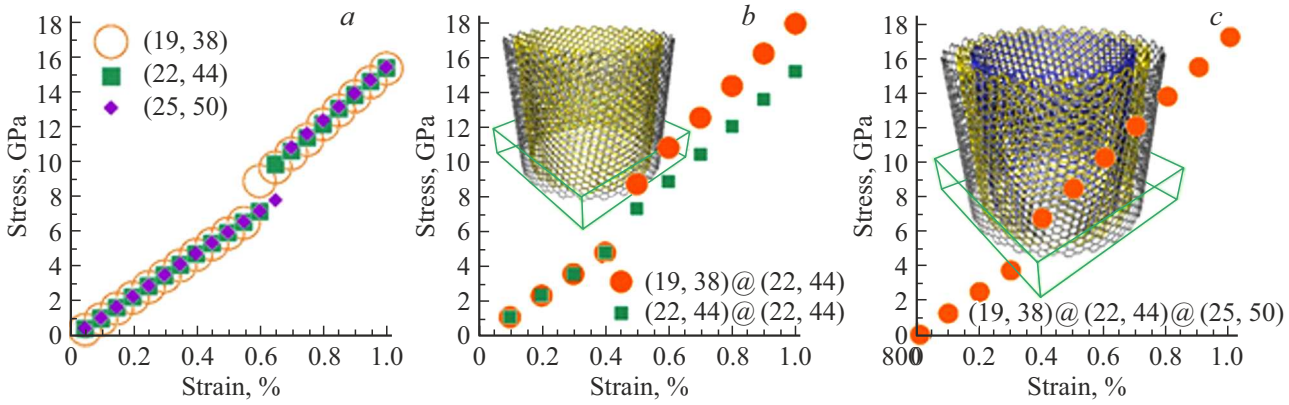



**Рис. 3.** Графики соотношения напряжение–деформация для: *a* — ОУНТ, *b* — двустенных УНТ, *c* — трехстенных УНТ (на вставках — модели трубок, в зеленом боксе показана суперячейка).

**Таблица 3.** Модули упругости ОУНТ и МУНТ

| CNT | $Y$, TPa | | $\mu$ (for 1 %) |
|---|---|---|---|
| (19,38) | 1.158 (0–0.55 %) | 1.531 (0.60–1 %) | 0.273 |
| (22,44) | 1.186 (0–0.60 %) | 1.538 (0.65–1 %) | 0.277 |
| (25,50) | 1.207 (0–0.65 %) | 1.550 (0.70–1 %) | 0.282 |
| (19,38)@(22,44) | 1.215 (0–0.45 %) | 1.788 (0.50–1 %) | 0.284 |
| (22,44)@(25,50) | 1.221 (0–0.45 %) | 1.498 (0.50–1 %) | 0.288 |
| (19,38)@(22,44)@(25,50) | 1.232 (0–0.35 %) | 1.714 (0.40–1 %) | 0.266 |

ки по сравнению с ОУНТ, но наиболее энергетически стабильна трехстенная трубка.

Исследование механических свойств трубок проводилось при постепенном растяжении на доли процента до достижения 1 % растяжения. На каждом этапе растяжения проводилась оптимизация нанструктуры и рассчитывались значения напряжения (5). Результаты приведены на рис. 3: *a*) для трех ОУНТ; *b*) двух двустенных трубок и *c*) трехстенной трубки. На вставках рис. 3, *b* и 3, *c* показаны атомистические модели МУНТ (стенки отмечены различными цветами для лучшей визуализации, суперячейка выделена зеленым боксом). Для ОУНТ шаг растяжения составлял 0.05 %, для МУНТ — 0.1 %. Обнаружен для всех трубок своеобразный „фазовый переход“, при котором соотношение напряжение–деформация скачкообразно меняется с изменением угла наклона. Такой переход для всех трубок наблюдается в пределах одного процента растяжения. Тщательный анализ экспериментальных данных подтверждает такой характер изменения соотношения напряжение–деформация [16]. В табл. 3 приведены значения $Y$ для двух диапазонов деформаций. Обнаружена интересная закономерность: „фазовый переход“ у ОУНТ происходит при растяжении 0.55–0.65 %, у двустенных этот порог меньше $\sim$ 0.45 %, у трехстенной трубки еще меньше $\sim$ 0.35 %. Возможно, с увеличением стенок МУНТ до десяти и более этот порог снизится до сотых долей процента или вообще исчезнет. В табл. 3 представлены значения модуля Юнга (4) в двух диапазонах растяжения и коэффициент Пуассона (6), рассчитанный для случая растяжения на 1 %. Наилучшими параметрами характеризуются трубки (19,38)@(22,44) и (19,38)@(22,44)@(25,50).

### 3.3. Жгуты из МУНТ

Построены атомистические модели тонких жгутов из двух/трехстенных МУНТ. Из-за многоатомности суперячеек были рассмотрены только жгуты из трех МУНТ, образующих треугольную вторичную структуру. Построены модели трех жгутов из одинаковых трубок — двухстенных (19,38)@(22,44) и (22,44)@(25,50), и трехстенной (19,38)@(22,44)@(25,50), для которых в результате оптимизации получены суперячейки жгутов с векторами трансляций длиной 11.351, 11.352 и 11.349 Å, соответственно. Количество атомов в суперячейках составляет 3444, 3948 и 5544 атомов, соответственно. Межтрубное расстояние в составе жгутов составляет 3.34–3.42 Å. На рис. 4 представлены фрагменты двух жгутов: *a*) из трубок (19,38)@(22,44) длиной в 11 суперячеек; *b*) из МУНТ (19,38)@(22,44)@(25,50) длиной в 7 суперячеек.

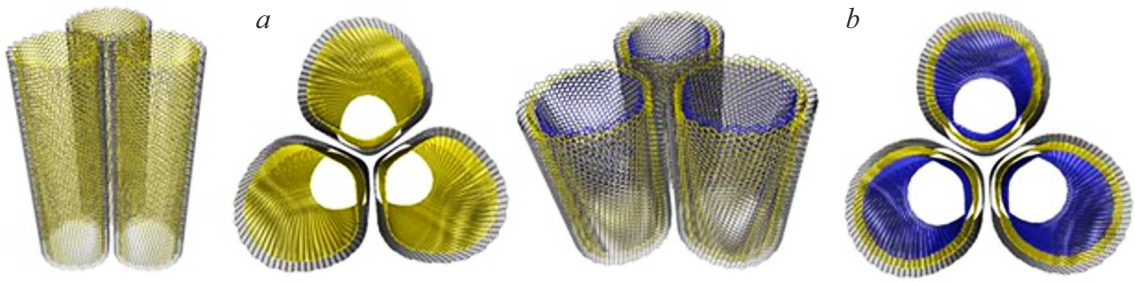



**Рис. 4.** Атомистические модели МУНТ: *a* — (19,38)@(22,44); *b* — (19,38)@(22,44)@(25,50).

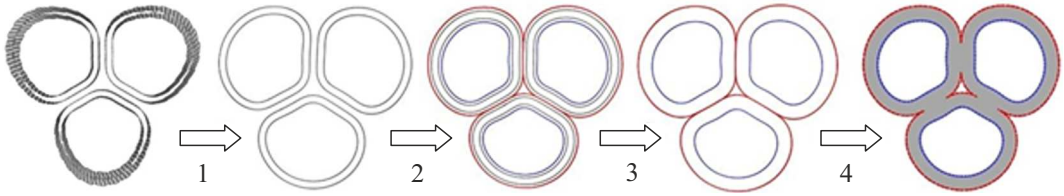



**Рис. 5.** Преобразование структуры жгута из МУНТ для вычисления площади поперечного сечения жгута (серым цветом отмечена полученная площадь жгута).

**Таблица 4.** Модули упругости ОУНТ и МУНТ

| Составе жгута (Bundle) | $D1$, Å | $D2$, Å | $D3$, Å | $S$, nm$^2$ | $Y$, TPa | $d_{\text{eff}}$, Å | $\mu$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| (19,38)@(22,44) | 39.407 | 46.064 | – | 27.23 | 2.49 | 101.24 | 6.40 |
| (22,44)@(25,50) | – | 45.681 | 52.446 | 38.30 | 2.28 | 105.70 | 6.38 |
| (19,38)@(22,44)@(25,50) | 39.240 | 45.835 | 52.647 | 43.60 | 2.52 | 116.90 | 6.50 |

Для вычисления модуля Юнга (4) разработан алгоритм вычисления площади поперечного сечения жгута, который заключается в выполнении нескольких действий (рис. 5): 1й шаг — переход от цилиндра к контуру трубок жгута в плоскости поперечного сечения относительно оси трубки; 2й шаг — построение для каждой трубки внешнего (красным цветом выделено) и внутреннего (синим цветом) контуров путем смещения по радиус-вектору на расстояние ван-дер-ваальсового радиуса атома во вне (для внешней трубки) и внутрь (для внутренней трубки); 3й шаг — удаляются все контуры исходных трубок; 4й шаг — удаляются части соприкасающихся внешних контуров, что в итоге приводит к окончательной форме среза жгута в плоскости, перпендикулярной его оси (на рис. 5 полученная площадь среза жгута выделена серым цветом).

Расчеты модуля Юнга и коэффициента Пуассона проводились только для случая 1растяжения, так как оптимизация атомистической структуры жгута из МУНТ требует значительных вычислительных ресурсов, что огранивает круг DFTB исследуемых вторичных структур из МУНТ. Полученные результаты представлены в табл. 4, где показаны диаметры трубок в составе жгута ($D1, D2, D3$), площадь фигуры жгута $S$ в поперечном сечении, модуль Юнга, эффективный диаметр жгута $d_{\text{eff}}$ и коэффициент Пуассона.

## 4. Заключение

Разработана оригинальная методика генерации атомных сеток МУНТ с заданным диаметром внутреннего канала. Методика позволяет определить любые комбинации МУНТ при заданном диаметре.

Построены модели МУНТ с внутренним каналом $\sim 4-5$ nm и исследованы их механические свойства и свойства жгутов из них, в составе трех МУНТ. Установлен новый эффект — фазовый переход МУНТ при растяжении на 0.35–0.65 %, сопровождающийся скачкообразным увеличением модуля Юнга на $\sim 30-45$ %. Величина деформации перехода определяется количеством стенок МУНТ, чем больше количество стенок, тем меньше величина деформации перехода: для ОУНТ — 0.55–0.65 %, двустенных — 0.45 %, трехстенной — 0.35 %. При этом наибольшая величина модуля Юнга обнаружена у двустенной и трехстенной трубки. Коэффициент Пуассона увеличивается по мере увеличения диаметра ОУНТ, такая же тенденция сохраняется и для двустенных УНТ.

Жгуты из двух/трехстренных УНТ превосходят по модулю Юнга все исследованные трубки, его величина превосходит на 41% величины модуля Юнга самой упругой двустенной трубки и превышает два терапаскаля. При этом коэффициент Пуассона в несколько раз превышает значения для отдельных МУНТ и составляет $\sim 6.3-0.05$.

Созданные методика генерации атомных сеток МУНТ и методика расчета модулей упругости жгутов из МУНТ позволят прогнозировать вторичные конструкции из нанотрубок с контролируемыми механическими свойствами.

### Финансирование работы

Работа выполнена в рамках гранта Российского научного фонда (проект № 25-29-00963).

### Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

## Список литературы

[1] А.В. Елецкий. УФН **177**, 233–274 (2007).
[2] Ю.А. Баимова, Р.Т. Мурзаев, С.В. Дмитриев. ФТТ **56**, *10*, 1946 (2014).
[3] C.H. Wong, V. Vijayaraghavan. Comput. Mater. Sci. **53**, *1*, 268–277 (2012).
[4] A.M. Beese, X.D. Wei, S. Sarkar, R. Ramachandramoorthy, M.R. Roenbeck, A. Moravsky, M. Ford, F. Yavari, D.T. Keane, R.O. Loutfy, S.T. Nguyen, H.D. Espinosa. ACS Nano **8**, *11*, 11454–11466 (2014).
[5] C.F. Cornwell, C.R. Welch. Molecular Simulation, **38**, *13*, 1032–1037 (2012).
[6] X. Liu, W. Lu, O.M. Ayala, L.-P. Wang, A.M. Karlsson, Q. Yang, T.-W. Chou. Nanoscale **5**, *5*, 2002–2008 (2013).
[7] G. Gul, R. Faller, N. Ileri-Ercan. Biophys. J. **122**, *10*, 1748–1761 (2023).
[8] B. Arash, H.S. Park, T. Rabczuk. Compos. B: Eng. **80**, 92–100 (2015).
[9] D. Zhao, X.Q. Wang, L.-H. Tam, C.L. Chow, D. Lau. Thin–Walled Struct. **196**, 111536 (2024).
[10] Y. Li, B. Zhang. Diam. Relat. Mater. **140, Part A,** 110476 (2023).
[11] H. Wei, H.Z.J. Ting, Y. Gong, C. Lü, O.E. Glukhova, H. Zhan. Nanomaterials (Basel), **12**, *5*, 760 (2022).
[12] J-G. Kim, D. Suh, H. Kang. Curr. Appl. Phys. **21**, 96–100 (2021).
[13] M.V. Il'ina, O.I. Il'in, A.A. Konshin, A.A. Fedotov, O.A. Ageev. IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng. **443**, 012010 (2018).
[14] G. Budiutama, R. Li, S. Manzhos, M. Ihara. J. Chem. Theory Comput. **19**, *15*, 5189–5198 (2023).
[15] Density Functional Tight Binding. Электронный ресурс. https://dftb.org (дата обращения: 2025-04-25).
[16] J. Sun, X. Zhang, Y. Wang, M. Li, X. Wei, H. Liu, W. Zhou. Nano Res. **17**, 7522–7532 (2024).
[17] A.Y. Gerasimenko, E. Kitsyuk, U.E. Kurilova, I.A. Suetina, L. Russu, M.V. Mezentseva, A. Markov, A.N. Narovlyansky, S. Kravchenko, S.V. Selishchev, O.E. Glukhova. Polymers **14**, *9*, 1866 (2022).

*Редактор А.Н. Смирнов*