



Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Математика. Механика. Информатика. 2021. Т. 21, вып. 4. С. 489–502

Izvestiya of Saratov University. Mathematics. Mechanics. Informatics, 2021, vol. 21, iss. 4, pp. 489–502

<https://mmi.sgu.ru>

<https://doi.org/10.18500/1816-9791-2021-21-4-489-502>

Научная статья

УДК 517.98

Исследование механических свойств углеродных молекулярных структур в виде многослойного графена с вертикально ориентированными углеродными нанотрубками

А. С. Колесникова

Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н. Г. Чернышевского, Россия, 410012, г. Саратов, ул. Астраханская, д. 83

Колесникова Анна Сергеевна, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры математической теории упругости и биомеханики, i.a.kolesnikova.88@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-2033-1192>

Аннотация. В данной работе осуществлялось теоретическое исследование модуля Юнга углеродных молекулярных структур в виде многослойного графена с вертикально ориентированными углеродными нанотрубками (ВО-УНТ). Углеродные нанотрубки, входящие в состав молекулярных структур, были двух типов (zigzag и armchair). Исследования проводились молекулярно-механическим методом с энергетическим потенциалом AIREBO. Установлено, что модуль Юнга больше для молекулярных структур, в которых УНТ разного типа располагаются вдоль края zigzag графенового листа. Показано, что модуль Юнга молекулярной структуры с ВО-УНТ на графене, содержащей нанотрубки zigzag и armchair, больше, чем модуль Юнга молекулярной структуры с ВО-УНТ на графене, содержащей только zigzag УНТ. Данные результаты могут быть использованы при конструировании электромеханических устройств, включающих в качестве элементной базы молекулярную структуру с ВО-УНТ на графене.

Ключевые слова: вертикально ориентированные углеродные нанотрубки на графене, эффективный модуль Юнга, алгоритм расчета

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке Президентской стипендии 2019–2021 (проект № СП-310.2019.1).

Для цитирования: Колесникова А. С. Исследование механических свойств углеродных молекулярных структур в виде многослойного графена с вертикально ориентированными углеродными нанотрубками // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Математика. Механика. Информатика. 2021. Т. 21, вып. 4. С. 489–502. <https://doi.org/10.18500/1816-9791-2021-21-4-489-502>

Статья опубликована на условиях лицензии Creative Commons Attribution 4.0 International (CC-BY 4.0)



Article

Study of the mechanical properties of carbon molecular structures in the form of multilayer graphene with vertically oriented carbon nanotubes

A. S. Kolesnikova

Saratov State University, 83 Astrakhanskaya St., Saratov 410012, Russia

Anna S. Kolesnikova, i.a.Kolesnikova.88@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-2033-1192>

Abstract. In this work, we performed a theoretical study of the Young's modulus of carbon molecular structures in the form of multilayer graphene with vertically oriented carbon nanotubes (VO-CNTs). The carbon nanotubes that make up the molecular structures were of two types (zigzag and armchair). The studies were carried out by the molecular-mechanical method with the energy potential of AIREBO. It was found that the Young's modulus is higher for molecular structures of composites in which CNTs of different types are located along the zigzag edge of the graphene sheet. It is shown that the Young's modulus of the molecular structure with VO-CNTs on graphene containing zigzag and armchair nanotubes is higher than the Young's modulus of the molecular structure with VO-CNTs on graphene containing only zigzag CNTs. These results can be used in the design of electromechanical devices that include a molecular structure with VO-CNTs on graphene as an element base.

Keywords: vertically oriented carbon nanotubes on graphene, Young's modulus, calculation algorithm

Acknowledgements: This work was supported by the Presidential Scholarship 2019–2021 (project No. SP-310.2019.1).

For citation: Kolesnikova A. S. Study of the mechanical properties of carbon molecular structures in the form of multilayer graphene with vertically oriented carbon nanotubes. *Izvestiya of Saratov University. Mathematics. Mechanics. Informatics*, 2021, vol. 21, iss. 4, pp. 489–502 (in Russian). <https://doi.org/10.18500/1816-9791-2021-21-4-489-502>

This is an open access article distributed under the terms of Creative Commons Attribution 4.0 International License (CC-BY 4.0)

Введение

В настоящее время углеродные наноструктуры активно используются в различных областях науки и техники. При разработке наноустройств и их усовершенствовании создаются новые углеродные материалы или модификации существующих материалов с уникальными свойствами. К таким материалам могут относиться углеродные композиты в виде графена с вертикально ориентированными углеродными нанотрубками (ВО-УНТ). При этом углеродные нанотрубки с графеновым листом соединены ковалентными химическими связями. Интерес к исследованию данного композита обусловлен тем, что ВО-УНТ на графене имеют высокую площадь активной поверхности по сравнению с пленками только из УНТ [1], а также высокую проводимость и химическую совместимость [2–4]. Доказано, что композиты с ВО-УНТ на графене являются эффективными электродными материалами для суперконденсаторов [5] или автоэмиссионных устройств [6–8]. Композиты с ВО-УНТ на графене также могут использоваться в качестве элементной базы для устройств



генерации/накопления энергии, катализа и химических датчиков посредством легирования гетероатомами и/или размещения других органических или неорганических активных компонентов.

Для широкого внедрения углеродных композитов в различные производственные сферы необходимо исследовать их свойства. В настоящее время для изучения свойств композитов используются как экспериментальные методики, так и прогностическое моделирование. Несмотря на большие теоретические и экспериментальные исследования, вместе с важным технологическим потенциалом этих композитов существует заметный недостаток знаний об их механических свойствах. В настоящее время найдено только две работы по исследованию механических свойств композитов с ВО-УНТ на графене [9, 10]. В работе [9] проводилось теоретическое исследование напряжений в области перехода от графенового листа к нанотрубке. Для данного исследования авторы использовали нанотрубки zigzag (8,0) и armchair (4,4). В работе [10] осуществлялось теоретическое исследование модуля Юнга молекулярной структуры, образованной графеном с вертикально ориентированными zigzag углеродными нанотрубками. Модуль Юнга исследовался в зависимости от длины и диаметра углеродных нанотрубок, входящих в состав молекулярной структуры.

Данные композиты успешно синтезируются, что подтверждается результатами работ [11–15]. Однако в этих работах авторы данный вид композитов синтезируют на разных подложках и с разным количеством слоев УНТ и графена. В работе [12] синтезируется композит из многослойного графена с многослойными вертикально ориентированными УНТ на подложке оксида кремния. На кремниевой подложке также синтезируется композит, образованный монослоем графена с однослойными ВО-УНТ [5]. Многослойный графен с вертикально ориентированными УНТ также синтезируется в работе [15]. Однако количество слоев в нанотрубках синтезируемых композитов не показано. В работе [14] авторы осуществляют процесс синтеза композита на никелевой подложке. Однако подложка будет оказывать влияние на свойства композита, а следовательно, и на работу наноустройства, в котором этот композит будет использоваться.

В связи с этим, чтобы уменьшить влияние подложки, в рамках данной работы осуществляется теоретическое исследование механических свойств углеродных молекулярных структур в виде многослойного графена с вертикально ориентированными однослойными углеродными нанотрубками. Под молекулярной структурой подразумевается конечный фрагмент композита. Механические свойства (упругие свойства) в данной работе характеризуются модулем Юнга. Исследуемая углеродная молекулярная структура рассматривалась в виде двух геометрических форм: квадрата и наноленты. Исследования механических свойств проводились с использованием молекулярно-механического метода с энергетическим потенциалом AIREBO [16]. Выбор данного потенциала обусловлен тем, что качественная картина результатов исследований механических свойств углеродных наноструктур, получаемая с помощью молекулярно-механического метода на основе потенциала AIREBO, совпадает с качественной картиной, полученной с помощью квантово-химического метода сильной связи [17]. Следовательно, использование потенциала AIREBO позволяет верно прогнозировать качественное изменение энергетических и механических параметров углеродных наноструктур. При этом следует отметить, что для исследования механических свойств структур, подобных структуре многослойного



графена с вертикально ориентированными углеродными нанотрубками, авторы используют энергетический потенциал AIREBO [9, 18, 19].

В процессе растяжения молекулярных структур ВО-УНТ на графене вовлекаются атомы углерода, лежащие в плоскости графена [20]. При этом эти атомы «выходят» из плоскости, изгибая ее. Такой изгиб приводит к существенному изменению координаты при малых изменениях межатомных расстояний. В связи с этим при растяжении молекулярных структур ВО-УНТ на графене наблюдается отклик комбинированной системы на деформацию, поэтому в работе будет исследоваться эффективный модуль Юнга.

1. Объект исследования

Объектом исследования является углеродная молекулярная структура в виде многослойного графена с вертикально ориентированными однослойными углеродными нанотрубками. Для моделирования многослойного графенового листа использовался один графеновый лист с жестко закрепленными атомами, с которым на вандерваальсовом расстоянии располагалась молекулярная структура, образованная графеновым листом с вертикально ориентированными углеродными нанотрубками. При построении модели исследуемой молекулярной структуры открытая с обоих концов нанотрубка присоединялась ковалентными связями к верхнему слою графенового листа, в котором было вырезано отверстие, соответствующее диаметру присоединяемой трубки. При этом нанотрубки, входящие в состав молекулярной структуры, были двух типов (*zigzag* и *armchair*). Выбор в качестве объекта исследования молекулярной структуры с нанотрубками двух типов (*zigzag* и *armchair*) обусловлен тем, что в настоящее время отсутствуют экспериментальные работы по синтезу композитов или молекулярных структур с ВО-УНТ на графене, в которых авторы сообщали бы о том, что в композите или молекулярной структуре присутствуют одинаковые нанотрубки. В то же время известно, что при синтезе углеродных нанотрубок в эксперименте получают нанотрубки разных типов [18]. Следовательно, молекулярные структуры в виде графена с двумя типами вертикально ориентированных УНТ могут являться объектами исследований, которые реально синтезировать экспериментально.

В рамках данной работы молекулярная структура рассматривалась в виде двух геометрических форм — квадрата и наноленты:

- с *zigzag* УНТ с диаметром 0.5 нм и *armchair* УНТ с диаметром 0.5 нм;
- с *zigzag* УНТ с диаметром 1 нм и *armchair* УНТ с диаметром 0.8 нм.

Молекулярная структура квадратной формы

Молекулярная структура с ВО-УНТ на графене рассматривалась в виде квадратной формы двух типов. На рис. 1 и 2 представлены идеализированные структуры для наглядности изображения краев графеновых листов, входящих в состав исследуемой структуры. Конфигурациями первого типа являются структуры, в которых нанотрубки разных типов располагались вдоль *armchair* стороны графенового листа. Конфигурациями второго типа являются структуры, в которых нанотрубки разных типов располагались вдоль стороны *zigzag* графенового листа. Графеновый лист для двух типов молекулярных структур был приблизительно одинакового размера — 4×4 нм.

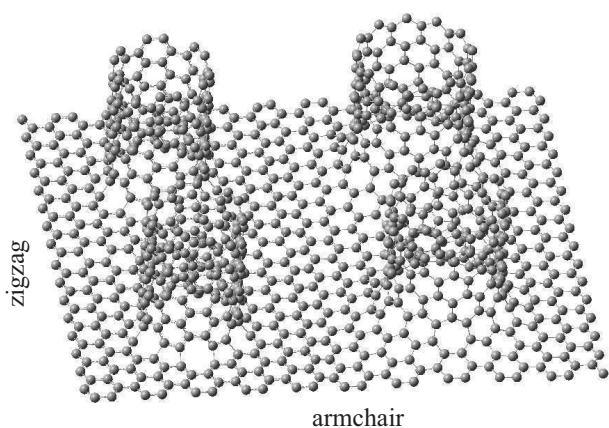


Рис. 1. Идеализированная модель первого типа молекулярной структуры квадратной формы с УНТ разных типов вдоль стороны zigzag графенового листа

Fig. 1. The idealized model of the first type of molecular structure of a square shape with CNTs of different types along the zigzag side of a graphene sheet

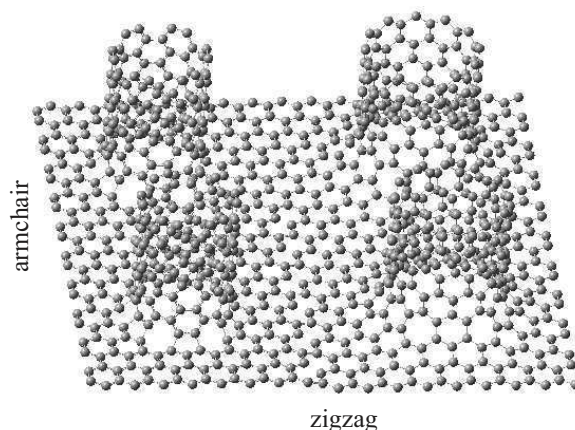


Рис. 2. Идеализированная модель второго типа молекулярной структуры квадратной формы с УНТ разных типов вдоль стороны armchair графенового листа

Fig. 2. The idealized model of the second type of molecular structure of a square shape with CNTs of different types along the armchair side of a graphene sheet

Геометрические параметры для двух типов идеализированных молекулярных структур с ВО-УНТ на графене с диаметром zigzag и armchair УНТ 0.5 нм представлены на рис. 3. Геометрические параметры для двух типов идеализированных молекулярных структур с ВО-УНТ на графене с диаметром УНТ armchair 0.8 нм и zigzag 1 нм представлены на рис. 4, 5.

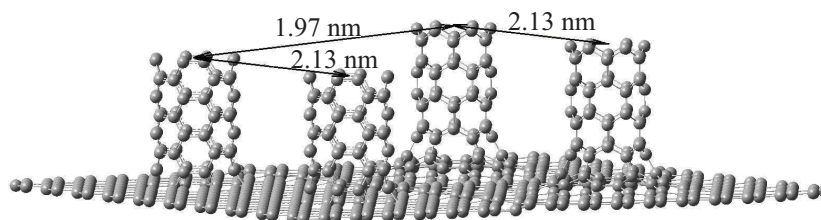


Рис. 3. Геометрические параметры молекулярной структуры для первого и второго типа с диаметром zigzag и armchair УНТ 0.5 нм

Fig. 3. Geometric parameters of the molecular structure for the first and second types with a zigzag diameter and armchair CNT of 0.5 nm

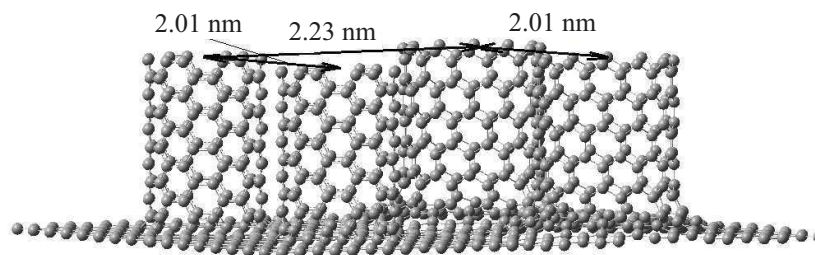


Рис. 4. Геометрические параметры молекулярной структуры первого типа с диаметром УНТ armchair 1 нм и zigzag 0.8 нм

Fig. 4. Geometric parameters for the molecular structure of the first type with an armchair CNT diameter of 1 nm and a zigzag of 0.8 nm

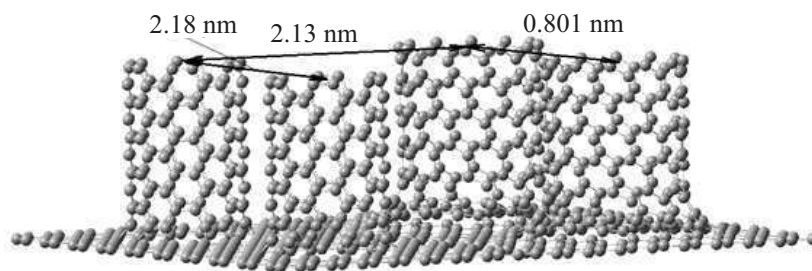


Рис. 5. Геометрические параметры молекулярной структуры второго типа с диаметром УНТ armchair 1 нм и zigzag 0.8 нм

Fig. 5. Geometric parameters of the molecular structure of the second type with an armchair CNT diameter of 1 nm and a zigzag of 0.8 nm

На рис. 3–5 представлены идеализированные структуры для наглядности изображения геометрии. На рис. 6 представлена форма молекулярной структуры после процесса нахождения равновесного состояния структуры.

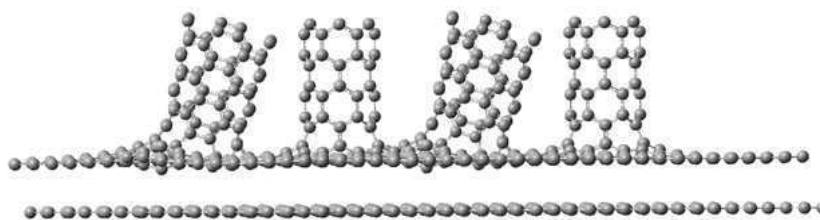


Рис. 6. Равновесная молекулярная структура с диаметром zigzag и armchair УНТ 0.5 нм

Fig. 6. Equilibrium molecular structure with a zigzag diameter and armchair CNT 0.5 nm

Молекулярные структуры в виде нанолент

При моделировании молекулярной структуры в виде нанолент используется часть квадратичной молекулярной структуры, в которой располагаются нанотрубки двух типов. В связи с этим геометрические размеры молекулярной структуры в виде нанолент (кроме ширины листа) совпадали с размерами квадратичной молекулярной структуры. Наноленты исследовались также двух типов:

первый тип — УНТ разных типов расположены вдоль края armchair графенового листа;

второй тип — УНТ разных типов расположены вдоль края zigzag графенового листа.

Известно, что ультратонкие нанотрубки диаметром 0.5 нм синтезируются внутри трубок большего диаметра, иначе они нестабильны [21]. Однако в рамках данной работы нанотрубки, входящие в состав исследуемой молекулярной структуры, имели длину 1.2 нм, что может быть причиной энергетической устойчивости данных УНТ в рамках исследуемой молекулярной структуры. Для выявления энергетической выгоды исследуемых в данной работе конфигураций проводилась оценка энергетической устойчивости исследуемых молекулярных структур по изменению полной энергии по формуле

$$E = (E_0 - (E_c + N_z E_z + N_{ar} E_{ar} + E_w)) / N_{atom},$$



где E_0 — полная энергия исследуемой молекулярной структуры, E_c — полная энергия графена с отверстиями, N_z — количество нанотрубок zigzag, E_z — полная энергия нанотрубки zigzag, входящей в состав молекулярной структуры, N_{ar} — количество нанотрубок armchair, E_{ar} — полная энергия нанотрубки armchair, входящей в состав молекулярной структуры, E_w — полная энергия жестко закрепленного графена, N_{atom} — количество атомов в исследуемой молекулярной структуре. В табл. 1 представлены значения энергетической устойчивости молекулярных структур, имеющих форму квадрата и наноленты. Поиск полных энергий осуществлялся с помощью энергетического потенциала AIREBO.

Из представленных в табл. 1 данных видно, что присоединение к графеновому листу любой из рассматриваемой в данной работе трубок приводит к формированию энергетически устойчивой молекулярной структуры. Увеличение нанотрубок в диаметре позволяет получать структуры с наиболее выгодной по энергии конфигурацией.

Таблица 1 / Table 1

Значения модуля Юнга квадратичной молекулярной структуры с ВО-УНТ на графене первого и второго типов при разных диаметрах УНТ
 Young's modulus of a quadratic molecular structure with VO-CNTs on graphene of the first and second types at different diameters of CNTs

Диаметр zigzag и armchair УНТ 0.5 нм в молекулярной структуре			
Энергетическая устойчивость наноленты, эВ/атом		Энергетическая устойчивость квадрата, эВ/атом	
УНТ разного типа вдоль zigzag края графена	УНТ разного типа вдоль armchair края графена	УНТ разного типа вдоль zigzag края графена	УНТ разного типа вдоль armchair края графена
-0.024	-0.043	-0.029	-0.029
Диаметр zigzag УНТ 1 нм и armchair УНТ 0.8 нм в молекулярной структуре			
Энергетическая устойчивость наноленты, эВ/атом		Энергетическая устойчивость квадрата, эВ/атом	
УНТ разного типа вдоль zigzag края графена	УНТ разного типа вдоль armchair края графена	УНТ разного типа вдоль zigzag края графена	УНТ разного типа вдоль armchair края графена
-0.061	-0.06	-0.062	-0.066

2. Подход для исследования модуля Юнга

Исследование механических свойств проводилось при растяжении на 3% вдоль нормали к графеновому полотну молекулярной структуры с ВО-УНТ на графене. Исследование модуля Юнга осуществляется с использованием следующего алгоритма.

1. Нахождение равновесного состояния молекулярной структуры путем минимизации значений полной энергии по координатам атомов. Энергия рассчитывалась с использованием энергетического потенциала AIREBO.

2. Деформация структуры. Исследуемая молекулярная структура растягивалась на 3% вдоль нормали к центру графенового полотна (рис. 7). Проводилась жесткая фиксация атомов, находящихся на торцах углеродных нанотрубок, чтобы избежать возвращения деформированной структуры в исходное состояние, а также жестко фиксировались атомы на графеновом листе, который моделировал подложку из многослойного графена.



3. Нахождение равновесного состояния деформированной структуры путем минимизации значений полной энергии по координатам атомов. Величина эффективного модуля Юнга определена следующими формулами:

$$F = \frac{2\Delta E}{\Delta l}, \quad Y = \frac{Fl}{S\Delta l},$$

где F — сила, Δl — удлинение растягиваемого торца, l — начальная длина растягиваемого торца, $\Delta E = E_2 - E_1$ — изменение численного значения полной энергии, Y — модуль Юнга, S — площадь поперечного сечения молекулярной структуры.

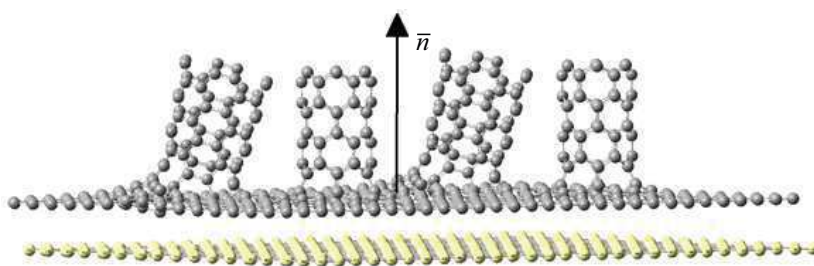


Рис. 7. Равновесная молекулярная структура с диаметром zigzag и armchair УНТ 0.5 нм

Fig. 7. Equilibrium molecular structure with a zigzag and armchair CNT diameter of 0.5 nm

При исследовании величины эффективного модуля Юнга вдоль нормали к центру поверхности графенового полотна площадь поперечного сечения молекулярной структуры определяется как площадь колец УНТ исследуемой молекулярной структуры.

Следует отметить, что с помощью подобного алгоритма проводились исследования механических свойств колонного графена с УНТ zigzag и armchair в зависимости от длины УНТ при растяжении композита вдоль УНТ [10, 22]. При этом численные значения этих исследований совпали с результатами работы [23], в которой проводилось исследование в зависимости от расстояния между УНТ.

3. Результаты исследования модуля Юнга

Для квадратичных молекулярных структур с ВО-УНТ на графене, представленных в данной работе, получены значения эффективного модуля Юнга при растяжении молекулярной структуры вдоль нормали к графеновому листу (вдоль оси УНТ). Полученные значения представлены в табл. 2. Из результатов видно, что эффективный модуль Юнга молекулярной структуры второго типа больше, чем эффективный модуль Юнга молекулярной структуры первого типа. Установлено, что для молекулярных структур с диаметром УНТ 0.5 нм значение эффективного модуля Юнга выше, чем для молекулярных структур с диаметром armchair УНТ 0.8 нм и диаметром zigzag УНТ 1 нм. Это объясняется тем, что при увеличении диаметра УНТ в молекулярной структуре увеличивается размер отверстия в области, в которой нанотрубка соединяется с графеновым листом. Этот результат также согласуется с результатами, представленными в работе [10].



Таблица 2 / Table 2

Значения эффективного модуля Юнга квадратичной молекулярной структуры с ВО-УНТ на графене первого и второго типов при разных диаметрах УНТ
 Values of the effective Young's modulus of a quadratic molecular structure with VO-CNTs on graphene of the first and second types at different diameters of CNTs

Молекулярная структура с диаметром УНТ 0.5 нм		Молекулярная структура с диаметром УНТ zigzag 1 нм и armchair 0.8 нм	
Эффективный модуль Юнга молекулярной структуры первого типа, ТПа	Эффективный модуль Юнга молекулярной структуры второго типа, ТПа	Эффективный модуль Юнга молекулярной структуры первого типа, ТПа	Эффективный модуль Юнга молекулярной структуры второго типа, ТПа
0.15	0.21	0.02	0.08

Проведено сравнение значений эффективных модулей Юнга для молекулярных структур квадратичной формы, содержащих УНТ zigzag и одновременно zigzag и armchair. В работе [24] показано, что эффективный модуль Юнга подобных молекулярных структур, содержащих четыре УНТ zigzag диаметром 0.5 нм и длиной УНТ 1.2 нм, составляет 55 ГПа с размером графенового полотна 3.3×3.4 нм [24]. Следовательно, эффективный модуль Юнга для молекулярных структур, содержащих два типа УНТ, составляет 158 ГПа и 210 ГПа и является больше, чем для молекулярной структуры только с УНТ zigzag. При увеличении размеров данной структуры до протяженных полученное значение не должно превышать эффективный модуль Юнга протяженных структур, содержащих только УНТ zigzag или armchair с подобными геометрическими параметрами рассматриваемой молекулярной структуры. В связи с этим следует отметить, что эффективный модуль Юнга протяженных структур с armchair нанотрубками такого же диаметра и длины составляет 250 ГПа [22]. При этом при увеличении размеров графенового полотна при длине УНТ 1.2 нм эффективный модуль Юнга достигает 80 ГПа. Увеличение графенового полотна осуществлялось путем увеличения количества УНТ в структуре так, чтобы расстояние между УНТ оставалось постоянным. Результаты свидетельствуют о том, что для протяженных структур с подобными УНТ эффективный модуль Юнга будет составлять 80 ГПа [24].

Из этого вытекает вывод, что, зная эффективный модуль Юнга молекулярной структуры, можно знать приблизительное значение эффективного модуля Юнга протяженной структуры, потому что при увеличении размеров конечной молекулярной структуры значение эффективного модуля Юнга перестанет изменяться.

Для молекулярных структур в виде нанолент получены значения эффективного модуля Юнга при растяжении молекулярной структуры вдоль нормали к графеновому листу (вдоль оси УНТ). Полученные значения представлены в табл. 3.

При сравнении значений эффективных модулей Юнга для молекулярной структуры с ВО-УНТ на графене в виде квадрата и наноленты видно, что квадратичные молекулярные структуры с ВО-УНТ на графене обладают большим значением эффективного модуля Юнга. При этом независимо от диаметра УНТ в молекулярных структурах, рассматриваемых в данной работе, и от геометрической формы этих структур молекулярные структуры второго типа обладают большим значением эффективного модуля Юнга.



Таблица 3 / Table 3

Значения эффективного модуля Юнга молекулярных структур с ВО-УНТ на графене в виде нанолент первого и второго типов при разных диаметрах УНТ

Values of the effective Young's modulus of the molecular structures with VO-CNTs on graphene in the form of nanoribbons of the first and second types at different CNT diameters

Параметры	Молекулярная структура с диаметром УНТ 0.5 нм		Молекулярная структура с диаметром УНТ zigzag 1 нм и armchair 0.8 нм	
	Молекулярная структура первого типа	Молекулярная структура второго типа	Молекулярная структура первого типа	Молекулярная структура второго типа
Эффективный модуль Юнга, ТПа	0.12	0.16	0.013	0.04
Ширина наноленты, нм	2.24	2.13	2.05	1.8
Длина наноленты, нм	4.18	3.98	4.3	4.1

Выводы

В данной работе проводилось исследование эффективного модуля Юнга молекулярных структур с ВО-УНТ на графене в виде квадрата и наноленты, включающие в качестве структурного элемента УНТ двух типов (zigzag и armchair). При этом рассматривалось два типа моделей:

- первый тип — УНТ разного типа располагались вдоль края armchair;
- второй тип — УНТ разного типа располагались вдоль края zigzag.

Первая и вторая модели молекулярных структур содержали нанотрубки приблизительно одного диаметра. Диаметр zigzag и armchair трубок в первой модели составлял 0.5 нм. Для второй модели молекулярной структуры диаметр armchair УНТ составлял 0.8 нм, а для zigzag УНТ — 1 нм. Растяжение молекулярных структур проводилось в направлении оси УНТ и нормали к графеновому полотну на 3%. Получены следующие результаты.

1. Установлено, что эффективный модуль Юнга больше для молекулярных структур, в которых УНТ разного типа располагаются вдоль края zigzag графенового листа. Следовательно, эффективный модуль Юнга молекулярных структур второго типа больше, чем эффективный модуль Юнга молекулярных структур первого типа, независимо от диаметра УНТ и типа молекулярной структуры.

2. Эффективный модуль Юнга молекулярной структуры с ВО-УНТ на графене уменьшается при увеличении диаметра УНТ с одинаковым размером графенового листа для разного типа молекулярной структуры.

3. Молекулярные структуры с ВО-УНТ на графене в виде квадрата обладают эффективным модулем Юнга больше, чем нанолент.

Данные молекулярные структуры могут использоваться в электромеханических устройствах, в которых необходимы повышенные упругие свойства материала. А также данные молекулярные структуры могут применяться в качестве наночистот и не разрушаться при прохождении веществ через них.



Список литературы

1. Dong P., Pint C. L., Hainey M., Mirri F., Zhan Y., Zhang J., Pasquali M., Hauge R. H., Verduzco R., Jiang M. Vertically aligned single-walled carbon nanotubes as low-cost and high electrocatalytic counter electrode for dye-sensitized solar cells // ACS Applied Materials & Interfaces. 2011. Vol. 3, № 8. P. 3157–3161. <https://doi.org/10.1021/am200659y>
2. Rolison D. R., Long J. W., Lytle J. C., Fischer A. E., Rhodes C. P., McEvoy T. M., Bourg M. E., Lubers A. M. Multifunctional 3D nanoarchitectures for energy storage and conversion // Chemical Society Reviews. 2009. Vol. 38, iss. 1. P. 226–252. <https://doi.org/10.1039/B801151F>
3. Chen Z., Ren W., Gao L., Liu B., Pei S., Cheng H.-M. Three-dimensional flexible and conductive interconnected graphene networks grown by chemical vapour deposition // Nature Materials. 2011. Vol. 10. P. 424–428. <https://doi.org/10.1038/nmat3001>
4. Jiang H., Lee P. S., Li C. 3D carbon based nanostructures for advanced supercapacitors // Energy & Environmental Science. 2013. Vol. 6, iss. 1. P. 41–53. <https://doi.org/10.1039/C2EE23284G>
5. Nagelli E. A., Huang L., Dai A. Q.-Z., Du F., Dai L. 3D vertically aligned CNT/graphene hybrids from layer-by-layer transfer for supercapacitors // Particle & Particle Systems Characterization. 2017. Vol. 34, iss. 9. Special Issue: Graphene Oxide Liquid Crystals 1700131. P. 1–5. <https://doi.org/10.1002/ppsc.201700131>
6. Wang D. W., Li F., Liu M., Lu G. Q., Cheng H.-M. 3D aperiodic hierarchical porous graphitic carbon material for high-rate electrochemical capacitive energy storage // Angewandte Chemie. 2007. Vol. 47, iss. 2. P. 373–376. <https://doi.org/10.1002/anie.200702721>
7. Lee D. H., Lee J. A., Lee W. J., Kim S. O. Flexible field emission of nitrogen-doped carbon nanotubes/reduced graphene hybrid films // Small. 2011. Vol. 7, iss. 1. P. 95–100. <https://doi.org/10.1002/sml.201001168>
8. Xu Y., Chen C.-Y., Zhao Z., Lin Z., Lee C., Xu X., Wang C., Huang Y., Shakir M. I., Duan X. Solution processable holey graphene oxide and its derived macrostructures for high-performance supercapacitors // Nano Letters. 2015. Vol. 15, iss. 7. P. 4605–4610. <https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.5b01212>
9. Moradia M., Mohandesi J. A. Mechanical behavior of carbon nanotube and graphene junction as a building block for 3D carbon nanostructures // AIP Advances. 2015. Vol. 5. P. 117143-1–117143-12. <https://doi.org/10.1063/1.4936560>
10. Колесникова А. С., Баранов И. А., Мазепа М. М. Модуль Юнга композита zigzag УНТ/графен при растяжении вдоль оси графена // Физика твердого тела. 2020. Т. 62, вып. 10. С. 1686–1689. <https://doi.org/10.21883/FTT.2020.10.49920.109>
11. Dong P., Zhu Y., Zhang J., Hao F., Wu J., Lei S., Lin H., Hauge R. H., Tour J. M., Lou J. Vertically aligned carbon nanotubes/graphene hybrid electrode as a TCO- and PT-free flexible cathode for application in solar cells // Journal of Materials Chemistry A. 2014. Vol. 2, iss. 48. P. 20902–20907. <https://doi.org/10.1039/C4TA05264A>
12. Das S., Seelaboyina R., Verma V., Lahiri I., Hwang J. Y., Banerjee R., Choi W. Synthesis and characterization of self-organized multilayered graphene-carbon nanotube hybrid films // Journal of Materials Chemistry. 2011. Vol. 21, iss. 20. P. 7289–7295. <https://doi.org/10.1039/C1JM10316D>
13. Lee D. H., Kim J. E., Han T. H., Hwang J. W., Jeon S., Choi S. Y., Hong S. H., Lee W. J., Ruoff R. S., Kim S. O. Versatile carbon hybrid films composed of vertical carbon nanotubes grown on mechanically compliant graphene films // Advanced Materials. 2010. Vol. 22, iss. 11. P. 1247–1252. <https://doi.org/10.1002/adma.200903063>
14. Kim N. D., Li Y., Wang G., Fan X., Jiang J., Li L., Ji Y., Ruan G., Hauge R. H., Tour J. M. Growth and transfer of seamless 3D graphene-nanotube hybrids // Nano Letters. 2016. Vol. 16, iss. 2. P. 1287–1292. <https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.5b04627>



15. Jousseume V., Cuzzocrea J., Bernier N., Renard V. T. Few graphene layers/carbon nanotube composites grown at complementary-metal-oxide-semiconductor compatible temperature // *Applied Physics Letters*. 2011. Vol. 98, iss. 12. P. 123103-1–123103-3. <https://doi.org/10.1063/1.3569142>
16. Stuart S. J., Tutein A. B., Harrison J. A. A reactive potential for hydrocarbons with intermolecular interactions // *The Journal of Chemical Physics*. 2000. Vol. 112, iss. 14. P. 6472–6486. <https://doi.org/10.1063/1.481208>
17. Глухова О. Е., Колесникова А. С. Эмпирическое моделирование продольного растяжения и сжатия графеновых наночастиц и нанолент // *Физика твердого тела*. 2011. Т. 53, № 9. С. 1855–1860.
18. Xu Z., Qiu L., Ding F. The kinetics of chirality assignment in catalytic single-walled carbon nanotube growth and the routes towards selective growth // *Chemical Science*. 2018. Vol. 9. P. 3056–3061. <https://doi.org/10.1039/C7SC04714B>
19. Fang T. H., Chang W. J., Fan Y. C., Sun W. L. Molecular dynamics study of the tensile behavior of pillared graphene nanostructures // *Japanese Journal of Applied Physics*. 2016. Vol. 55, № 4. P. 040301. <https://doi.org/10.7567/jjap.55.040301>
20. Wang Y., Zhu Y., Wang F., Liu X., Wu H. Super-elasticity and deformation mechanism of three-dimensional pillared graphene network structures // *Carbon*. 2017. Vol. 118. P. 588–596. <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2017.03.092>
21. Qin L. C., Zhao X., Hirahara K., Miyamoto Y., Ando Y., Iijima S. The smallest carbon nanotube // *Nature*. 2000. Vol. 408. P. 50. <https://doi.org/10.1038/35040699>
22. Колесникова А. С., Мазепа М. М. Модуль Юнга и коэффициент Пуассона двумерно протяженного колонного графена // *Физика твердого тела*. 2018. Т. 60, № 9. С. 1781–1784. <https://dx.doi.org/10.21883/FTT.2018.09.46397.041>
23. Song L., Guo Z., Chai G. B., Wang Z., Li Y., Luan Y. A finite element method to investigate the elastic properties of pillared graphene sheet under different conditions // *Carbon*. 2018. Vol. 140. P. 210–217. <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2018.08.058>
24. Kolesnikova A. S., Mazepa M. M., Kirillova I. V., Kossovich L. Yu. Water purification using the pillared graphene owning the most mechanical strength // *Proceedings SPIE 10893, Reporters, Markers, Dyes, Nanoparticles, and Molecular Probes for Biomedical Applications XI*. 2019. Vol. 108930T. P. 108930T-1. <https://doi.org/10.1117/12.2508795>

References

1. Dong P., Pint C. L., Hainey M., Mirri F., Zhan Y., Zhang J., Pasquali M., Hauge R. H., Verduzco R., Jiang M. Vertically aligned single-walled carbon nanotubes as low-cost and high electrocatalytic counter electrode for dye-sensitized solar cells. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 2011, vol. 3, no. 8, pp. 3157–3161. <https://doi.org/10.1021/am200659y>
2. Rolison D. R., Long J. W., Lytle J. C., Fischer A. E., Rhodes C. P., McEvoy T. M., Bourg M. E., Lubers A. M. Multifunctional 3D nanoarchitectures for energy storage and conversion. *Chemical Society Reviews*, 2009, vol. 38, iss. 1, pp. 226–252. <https://doi.org/10.1039/B801151F>
3. Chen Z., Ren W., Gao L., Liu B., Pei S., Cheng H.-M. Three-dimensional flexible and conductive interconnected graphene networks grown by chemical vapour deposition. *Nature Materials*, 2011, vol. 10, pp. 424–428. <https://doi.org/10.1038/nmat3001>
4. Jiang H., Lee P. S., Li C. 3D carbon based nanostructures for advanced supercapacitors. *Energy & Environmental Science*, 2013, vol. 6, iss. 1, pp. 41–53. <https://doi.org/10.1039/C2EE23284G>
5. Nagelli E. A., Huang L., Dai A. Q.-Z., Du F., Dai L. 3D vertically aligned CNT/graphene hybrids from layer-by-layer transfer for supercapacitors. *Particle & Particle Systems Characterization*, 2017, vol. 34, iss. 9. Special Issue: Graphene Oxide Liquid Crystals 1700131, pp. 1–5. <https://doi.org/10.1002/ppsc.201700131>



6. Wang D. W., Li F., Liu M., Lu G. Q., Cheng H.-M. 3D aperiodic hierarchical porous graphitic carbon material for high-rate electrochemical capacitive energy storage. *Angewandte Chemie*, 2007. Vol. 47, iss. 2, pp. 373–376. <https://doi.org/10.1002/anie.200702721>
7. Lee D. H., Lee J. A., Lee W. J., Kim S. O. Flexible field emission of nitrogen-doped carbon nanotubes/reduced graphene hybrid films. *Small*, 2011, vol. 7, iss. 1, pp. 95–100. <https://doi.org/10.1002/sml.201001168>
8. Xu Y., Chen C.-Y., Zhao Z., Lin Z., Lee C., Xu X., Wang C., Huang Y., Shakir M. I., Duan X. Solution processable holey graphene oxide and its derived macrostructures for high-performance supercapacitors. *Nano Letters*, 2015, vol. 15, iss. 7, pp. 4605–4610. <https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.5b01212>
9. Moradia M., Mohandesi J. A. Mechanical behavior of carbon nanotube and graphene junction as a building block for 3D carbon nanostructures. *AIP Advances*, 2015, vol. 5, pp. 117143-1–117143-12. <https://doi.org/10.1063/1.4936560>
10. Kolesnikova A. S., Baranov I. A., Mazepa M. M. The Young's modulus of a zigzag CN-T/graphene composite by tension along the graphene direction. *Physics of the Solid State*, 2020, vol. 62, iss. 10, pp. 1889–1891. <https://doi.org/10.1134/S1063783420100169>
11. Dong P., Zhu Y., Zhang J., Hao F., Wu J., Lei S., Lin H., Hauge R. H., Tour J. M., Lou J. Vertically aligned carbon nanotubes/graphene hybrid electrode as a TCO- and PT-free flexible cathode for application in solar cells. *Journal of Materials Chemistry A*, 2014, vol. 2, iss. 48, pp. 20902–20907. <https://doi.org/10.1039/C4TA05264A>
12. Das S., Seelaboyina R., Verma V., Lahiri I., Hwang J. Y., Banerjee R., Choi W. Synthesis and characterization of self-organized multilayered graphene-carbon nanotube hybrid films. *Journal of Materials Chemistry*, 2011, vol. 21, iss. 20, pp. 7289–7295. <https://doi.org/10.1039/C1JM10316D>
13. Lee D. H., Kim J. E., Han T. H., Hwang J. W., Jeon S., Choi S. Y., Hong S. H., Lee W. J., Ruoff R. S., Kim S. O. Versatile carbon hybrid films composed of vertical carbon nanotubes grown on mechanically compliant graphene films. *Advanced Materials*, 2010, vol. 22, iss. 11, pp. 1247–1252. <https://doi.org/10.1002/adma.200903063>
14. Kim N. D., Li Y., Wang G., Fan X., Jiang J., Li L., Ji Y., Ruan G., Hauge R. H., Tour J. M. Growth and transfer of seamless 3D graphene-nanotube hybrids. *Nano Letters*, 2016, vol. 16, iss. 2, pp. 1287–1292. <https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.5b04627>
15. Jousseume V., Cuzzocrea J., Bernier N., Renard V. T. Few graphene layers/carbon nanotube composites grown at complementary-metal-oxide-semiconductor compatible temperature. *Applied Physics Letters*, 2011, vol. 98, iss. 12, pp. 123103-1–123103-3. <https://doi.org/10.1063/1.3569142>
16. Stuart S. J., Tutein A. B., Harrison J. A. A reactive potential for hydrocarbons with intermolecular interactions. *The Journal of Chemical Physics*, 2000, vol. 112, iss. 14, pp. 6472–6486. <https://doi.org/10.1063/1.481208>
17. Glukhova O. E., Kolesnikova A. S. Empirical modeling of longitudinal tension and compression of graphene nanoparticles and nanoribbons. *Physics of the Solid State*, 2011, vol. 53, iss. 9, pp. 1957–1962. <http://doi.org/10.1134/S1063783411090137>
18. Xu Z., Qiu L., Ding F. The kinetics of chirality assignment in catalytic single-walled carbon nanotube growth and the routes towards selective growth. *Chemical Science*, 2018, vol. 9, pp. 3056–3061. <https://doi.org/10.1039/C7SC04714B>
19. Fang T. H., Chang W. J., Fan Y. C., Sun W. L. Molecular dynamics study of the tensile behavior of pillared graphene nanostructures. *Japanese Journal of Applied Physics*, 2016, vol. 55, no. 4, pp. 040301. <https://doi.org/10.7567/jjap.55.040301>
20. Wang Y., Zhu Y., Wang F., Liu X., Wu H. Super-elasticity and deformation mechanism of three-dimensional pillared graphene network structures. *Carbon*, 2017, vol. 118, pp. 588–596. <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2017.03.092>



21. Qin L. C., Zhao X., Hirahara K., Miyamoto Y., Ando Y., Iijima S. The smallest carbon nanotube. *Nature*, 2000, vol. 408, pp. 50. <https://doi.org/10.1038/35040699>
22. Kolesnikova A. S., Mazepa M. M. The young modulus and the Poisson coefficient of two-dimensionally extended columnar graphene. *Physics of the Solid State*, 2018, vol. 60, iss. 9, pp. 1827–1830. <https://doi.org/10.1134/S1063783418090160>
23. Song L., Guo Z., Chai G. B., Wang Z., Li Y., Luan Y. A finite element method to investigate the elastic properties of pillared graphene sheet under different conditions. *Carbon*, 2018, vol. 140, pp. 210–217. <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2018.08.058>
24. Kolesnikova A. S., Mazepa M. M., Kirillova I. V., Kossovich L. Yu. Water purification using the pillared graphene owning the most mechanical strength. *Proceedings SPIE 10893, Reporters, Markers, Dyes, Nanoparticles, and Molecular Probes for Biomedical Applications XI*, 2019, vol. 108930T, pp. 108930T-1. <https://doi.org/10.1117/12.2508795>

Поступила в редакцию / Received 30.04.2021

Принята к публикации / Accepted 21.06.2021

Опубликована / Published 30.11.2021