Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Математика. Механика. Информатика. 2026. Т. 26, вып. 3. С. 407–417
Izvestiya of Saratov University. Mathematics. Mechanics. Informatics, 2026, vol. 26, iss. 3, pp. 407–417
https://mmi.sgu.ru DOI: https://doi.org/10.18500/1816-9791-2026-26-3-407-417
EDN: https://elibrary.ru/PWVEUF

Научная статья
УДК 530.145.81

Методика генерирования атомистических супер-ячеек слоистых сеток из многостенных хиральных углеродных нанотрубок и жгутов из них

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

[1]Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н. Г. Чернышевского, Россия, 410012, г. Саратов, ул. Астраханская, д. 83
[2]Первый Московский государственный медицинский университет имени И. М. Сеченова Минздрава России (Сеченовский университет), Россия, 119991, г. Москва, ул. Трубецкая, д. 8, стр. 2

Глухова Ольга Евгеньевна, доктор физико-математических наук, [1]заведующий кафедрой радиотехники и электродинамики; [2]ведущий научный сотрудник лаборатории биомедицинских нанотехнологий, glukhovaoe@info.sgu.ru, https://orcid.org/0000-0002-5670-2058, SPIN: 6656-9658, AuthorID: 33028
Колесниченко Павел Андреевич, ассистент кафедры радиотехники и электродинамики, kolesnichenkopa@list.ru, https://orcid.org/0009-0009-9158-0795, SPIN: 4148-0803, AuthorID: 1284338
Слепченков Михаил Михайлович, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры радиотехники и электродинамики, slepchenkovm@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-4282-5620, SPIN: 9066-0896, AuthorID: 712909

Аннотация. Для исследования механических свойств квази 2D-слоистых сеток из хиральных многостенных углеродных нанотрубок и жгутов из них разработана методика построения атомистических моделей супер-ячеек на основе хиральных нанотрубок типа $(m, 2m)$. Сетки представляют собой X-образное ван-дер-ваальсовое соединение нанотрубок с различным шагом периодичности в двух взаимно перпендикулярных направлениях. Методика как алгоритм последовательных математических манипуляций универсальна и может быть использована для любой конфигурации многостенных углеродных нанотрубок и жгутов из них с любым количеством нанотрубок, входящих в эти нанотрубки. Разработанная методика также позволяет производить контроль за шагом сетки — размером окна, образованного трубками. Апробация методики проведена на примере одиночных двустенных углеродных нанотрубок и жгутов, содержащих как две, так и три нанотрубки.

Ключевые слова: углеродные многостенные хиральные нанотрубки, жгуты из хиральных многостенных нанотрубок, метод функционала плотности в приближении сильной связи (DFTB), моделирование углеродных наноструктур

Благодарности: Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 25-29-00963, https://rscf.ru/project/25-29-00963/).

Для цитирования: *Глухова О. Е., Колесниченко П. А., Слепченков М. М.* Методика генерирования атомистических супер-ячеек слоистых сеток из многостенных хиральных углеродных нанотрубок и жгутов из них // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Математика. Механика. Информатика. 2026. Т. 26, вып. 3. С. 407–417. DOI: https://doi.org/10.18500/1816-9791-2026-26-3-407-417, EDN: PWVEUF

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

© Глухова О. Е., Колесниченко П. А., Слепченков М. М., 2026

Article

Method for generating atomistic supercells of layered networks from multi-walled chiral carbon nanotubes and their bundles

O. E. Glukhova[1,2], **P. A. Kolesnichenko**[1✉], **M. M. Slepchenkov**[1]

[1]Saratov State University, 83 Astrakhanskaya St., Saratov 410012, Russia

[2]I. M. Sechenov First Moscow State Medical University of the Ministry of Healthcare of the Russian Federation (Sechenovskiy University), 8–2 Trubetskaya St., Moscow 119991, Russia

Olga E. Glukhova, glukhovaoe@sgu.ru, https://orcid.org/0000-0002-5670-2058, SPIN: 6656-9658, AuthorID: 33028

Pavel A. Kolesnichenko, kolesnichenkopa@list.ru, https://orcid.org/0009-0009-9158-0795, SPIN: 4148-0803, AuthorID: 1284338

Mikhail M. Slepchenkov, slepchenkovm@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-4282-5620, SPIN: 9066-0896, AuthorID: 712909

Abstract. To investigate the mechanical properties of quasi-2D layered networks composed of chiral multi-walled carbon nanotubes and their bundles, a methodology has been developed for constructing atomistic supercell models based on chiral nanotubes of the $(m, 2m)$ type. These networks feature X-shaped van der Waals junctions between nanotubes, with varying periodicity steps along two mutually perpendicular directions. The methodology, formulated as a sequential algorithm of mathematical operations, is universal and can be applied to any configuration of multi-walled carbon nanotubes and their bundles, regardless of the number of constituent nanotubes. The developed approach also enables precise control over the network periodicity — i.e., the size of the window formed by the interconnected tubes. Validation of the methodology was performed using examples of individual double-walled carbon nanotubes and bundles containing both two and three nanotubes.

Keywords: chiral multi-walled carbon nanotubes, bundles of chiral multi-walled carbon nanotubes, density-functional tight-binding method (DFTB), modeling of carbon nanostructures

Acknowledgements: This work was supported by the Russian Science Foundation (project No. 25-29-00963, https://rscf.ru/project/25-29-00963/).

For citation: Glukhova O. E., Kolesnichenko P. A., Slepchenkov M. M. Method for generating atomistic supercells of layered networks from multi-walled chiral carbon nanotubes and their bundles. *Izvestiya of Saratov University. Mathematics. Mechanics. Informatics*, 2026, vol. 26, iss. 3, pp. 407–417 (in Russian). DOI: https://doi.org/10.18500/1816-9791-2026-26-3-407-417, EDN: PWVEUF

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

Введение

Повышение долговечности работы электронных устройств, прежде всего в космических условиях, предопределено в том числе повышенными прочностными и эксплуатационными характеристиками материалов, используемых для корпусирования этих устройств. Одними из перспективных материалов в этом направлении являются наноматериалы на основе углеродных нанотрубок (УНТ) благодаря своим исключительным свойствам, в том числе легкости, высокой эластичности, прочности и твердости [1, 2].

В полимерных матрицах УНТ используются в качестве армирующего наполнителя для повышения их механической прочности, термической стабильности и электропроводности, что позволяет разрабатывать легкие, но высокоэффективные композитные материалы [3]. Такие композиты из УНТ и полимеров нашли применение в качестве конструкционных материалов, для электромагнитного экранирования и сенсорных технологий в аэрокосмической отрасли [4, 5].

Аналогичным образом интеграция УНТ в металлические матрицы открыла новые возможности для создания передовых аэрокосмических материалов. Эти композиты демонстрируют улучшенную механическую прочность, износостойкость и теплопроводность, что делает их идеальными кандидатами для таких применений, как компоненты двигателей и системы терморегулирования [6–8]. В частности, в работе [7] сообщалось о создании пленок из УНТ, модифицированных частицами серебра, которые затем были интегрированы в ламинаты из полимера, армированного углеродным волокном.

По результатам испытаний созданных композитных наноматериалов на основе УНТ на молниеустойчивость было установлено, что пленки из УНТ продемонстрировали лучшие показатели по прочностным характеристикам после имитации удара молнии, чем традиционно используемые ламинаты из медной сетки. Кроме того, интеграция пленок из УНТ в ламинаты привела к их минимальному расслоению даже после высоких электрических и термических напряжений.

В работе [8] в качестве защитного покрытия авиационных конструкций были предложены пленки из УНТ, уложенных в слой толщиной 30 мкм со сверхвыровненной структурой, обладающие высокой плотностью, электропроводностью и теплопроводностью. Эта структура из УНТ была внедрена в качестве внешнего слоя в композитный ламинат, состоящий из диэлектрического сердечника (волокна диоксида циркония) и углеволокнистого полимера. После проведенных испытаний с имитацией удара молнии за счет применения тока величиной до 100 кА структура защитного покрытия не показала внутренних повреждений, что демонстрирует эффективность пленки из УНТ, способной к высокому рассеиванию энергии и структурной защите.

С позиции достижения более высоких прочностных свойств предпочтительны не одностенные УНТ (ОУНТ), а многостенные УНТ (МУНТ) [9–13] и жгуты из них [14–17]. В качестве наноматериалов из МУНТ рассматриваются слоистые сетки из МУНТ/жгутов из МУНТ, расположенных слоями друг над другом под различными углами [18]. Различная ориентация МУНТ/жгутов в соседних слоях, взаимодействующих посредством сил Ван-дер-Ваальса, характеризует топологию слоистой сетки. Топологическое разнообразие слоистых сеток отличается шагом и углом расположения МУНТ/жгутов из МУНТ. Исследование механических свойств подобных наноматериалов осложнено отсутствием атомных супер-ячеек конструкций МУНТ/жгутов, трансляция которых в двух направлениях воспроизводила бы бесконечно протяженную квази 2D-структуру.

Ранее авторами в работе [19] было показано на примере двустенных нанотрубок $(19,38)@(22,44)$, $(22,44)@(25,50)$ и трехстенной нанотрубки $(19,38)@(22,44)@(25,50)$, что при объединении их в жгуты модуль Юнга увеличивается в 1.4–1.5 раза. Также надо заметить, что в отношении коэффициента Пуассона картина была другой: без объединения в жгуты нанотрубки характеризуются меньшим значением коэффициента Пуассона ~ 0.3 в сравнении с величиной ~ 6.4–6.5 для жгутов.

Целью данной работы является разработка: 1) методики генерирования атомных супер-ячеек слоистых сеток из МУНТ и жгутов из них для последующего исследования механических свойств; 2) программного кода алгоритма методики.

1. Методика генерирования супер-ячеек

В качестве примера реализации механизма построения атомистических моделей супер-ячеек выбраны две нанотрубки: двустенная МУНТ $(9,18)@(12,24)$, а также двустенная МУНТ $(19,38)@(22,44)$ с большим внутренним диаметром, на основе которых строятся жгуты, включающие две и три нанотрубки, с целью демонстрации работы алгоритма построения как для четного, так и для нечетного числа нанотрубок. Супер-ячейка одиночной МУНТ $(9,18)@(12,24)$ включает 588 атомов; жгут из двух МУНТ — 1176 атомов; жгут из трех МУНТ — 1764 атома. Супер-ячейка жгута из трех МУНТ $(19,38)@(22,44)$ состоит из 130 872 атомов.

1.1. Квантово-механический подход выявления равновесных конфигураций супер-ячеек

Для выявления атомистической структуры периодических супер-ячеек МУНТ и жгутов из МУНТ, отвечающих равновесному состоянию (минимум полной энергии), предварительно была проведена оптимизация атомистической структуры в рамках квантово-механического метода SCC DFTB (метод функционала плотности в приближении сильной связи с самосогласованием заряда) [20], который обеспечивает высокую точность выявления оптимальной метрической конфигурации и энергетических характеристик. Полная энергия супер-ячейки определяется выражением

$$E_{\text{total}} = E_{\text{band}} + E_{\text{Coulomb}} + E_{\text{rep}}, \tag{1}$$

где E_{band} — энергия занятых электронных состояний, E_{Coulomb} — энергия взаимодействия электронов структуры, E_{rep} определяет энергию отталкивания атомных ядер. Энергия E_{band} вычисляется суммированием тех собственных значений гамильтониана, которые отвечают заполненным электронным состояниям. Энергия E_{Coulomb} соответствует той энергии, которая вызвана изменением электронной плотности при взаимодействии атомов различных химических элементов. Эта энергия определяется: 1) изменением и перераспределением плотности электронного заряда, которая рассчитывается с применением метода Маллликена; 2) кулоновским взаимодействием с учетом обменно-корреляционного взаимодействия; 3) параметрами Хаббарда. Феноменологическая энергия E_{rep} определяется суммой парных отталкивательных потенциалов (величин потенциальной энергии) между атомами i и j:

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

где потенциал $V_{\text{rep}}(r)$ задается суммой полиномиальных функций

$$V_{\text{rep}}(r) = \sum_{p} c_p (r_c - r)^p. \tag{3}$$

Здесь r_c — радиус отсечки (расстояние от данного атома до соседнего), т. е. расстояние, на котором энергия межатомного взаимодействия отлична от нуля (при превышении этого расстояния принято считать в рамках данного метода, что атомы не взаимодействуют). Коэффициент c_p и показатель степени p задают форму сплайна, который определяет свойства потенциала межатомного взаимодействия. Потенциал V_{rep} является короткодействующим и убывает при увеличении расстояния между атомами. В данной работе применялся базисный набор Слэтера – Костера (sk-файлы) pbc-0-3 [21]. Дисперсионное взаимодействие между трубками в составе МУНТ и трубок в составе жгутов учитывалось с применением потенциала Леннард-Джонса. Для решения минимаксной задачи применялся метод L-BFGS [22]. Минимальная полная энергия была достигнута, когда сила, действующая на атом, не превышала 10^{-4} эВ/атом. В результате оптимизации установлена длина вектора трансляции трубок, она одинакова для всех типов трубок $(m, 2m)$ и равна $\sim 11,35$ Å. В работе [19] подробно рассмотрены закономерности формирования МУНТ на основе хиральных трубок $(m, 2m)$.

1.2. Пошаговый алгоритм реализации методики и разработки программного кода

Шаг 1: задание входных параметров.

Входные параметры программа подгружает из ряда файлов, которые включают: 1) файл с координатами атомов исходной супер-ячейки в формате «.xyz»; 2) файл, в котором содержатся данные о длине вектора трансляции данной супер-ячейки в формате «.gen». Кроме

того, входными параметрами также служат числа, определяющие количество трансляций нижнего и верхнего слоя сетки из МУНТ (жгутов из МУНТ), т.е. длину структур вдоль осей Y и X, благодаря чему осуществляется контроль за шагом сетки (рис. 1).

Шаг 2: анализ входных файлов.

Координаты атомов, выгружаемые из файлов «.xyz», формируются в единый массив данных, у каждого атома есть свой индекс и относящиеся к этому индексу координаты по X, Y и Z. Из файла формата «.gen» считывается вектор трансляции вдоль оси Y (изначально все структуры предварительно на этапе оптимизации были расположены вдоль оси Y). Полученные данные формируются в едином классе `CarbonNanotube Transformer`, методы которого будут использованы на следующем шаге формирования сеток.

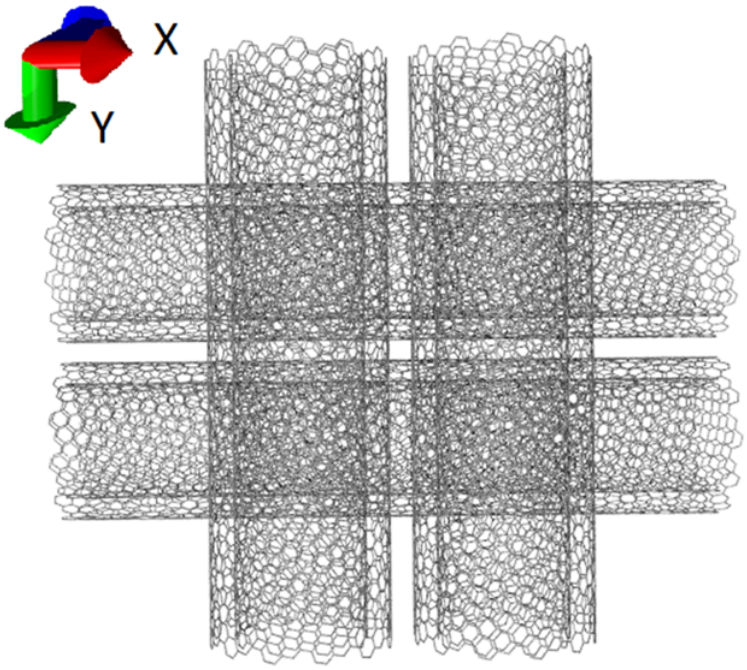


Рис. 1. Атомистическая модель супер-ячейки пленки из двустенных нанотрубок $(9, 18)@(12, 24)$

Fig. 1. Atomistic model of a supercell of a film of double-walled nanotubes $(9, 18)@(12, 24)$

Шаг 3: построение атомистических сеток супер-ячеек.

Ключевыми моментами на данном этапе являются: расчет центра масс структур, вычисление длины вектора трансляции структуры, вычисление измененных координат атомов с учетом заданной величины угла поворота структуры, расчет разницы координат вдоль оси Z для определения «высоты» структуры. На основании полученных данных — координат атомов и длин векторов трансляции (шаг 2) — проверяется положение начальной структуры и находятся координаты X_c, Y_c ее центра масс (в плоскости XOY) по известным формулам

$$X_c = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} x_i, \quad Y_c = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} y_i, \tag{4}$$

где N — число атомов в структуре, x_i, y_i — координаты x и y i-го атома. Далее, если координаты центра масс отличаются от начала координат, происходит сдвиг структуры к центру системы координат. После центрирования структуры происходит трансляция атомной структуры супер-ячейки нанотрубки (жгута) вдоль оси Y путем итерационного копирования структуры на расстояние длины вектора трансляции, причем число копирований, а следовательно, и длина структуры определяются входными данными из шага 1. Также записывается длина нового вектора трансляции, вычисляемого по следующей формуле:

$$T_y = T \cdot n_y, \tag{5}$$

где T_y — длина вектора трансляции итоговой структуры по оси Y, T — вектор трансляции из файла «.gen», n_y — заданное на шаге 2 число трансляций нижнего слоя по оси Y. Таким образом, на этом этапе реализации третьего шага подготовлены все данные для формирования нижнего слоя.

Далее осуществляется трансляция супер-ячейки по оси Z так, чтобы расстояние между нанотрубками (жгутами) было равно расстоянию ван-дер-ваальсового взаимодействия $\sim 3,4$ Å. Для выявления длины вектора трансляции по оси Z в рамках разрабатываемой методики реализуется следующее:

- определяется характеристическая длина h вдоль оси Z (рис. 2, *а*), которая затем увеличивается на величину ван-дер-ваальсового взаимодействия $\sim 3,4$ Å(в случае одинарной МУНТ величина h совпадает с диаметром внешней нанотрубки). Определение величины h в программе реализовано при помощи расчета разности между наибольшей и наименьшей Z-координатами атомов, составляющих супер-ячейку, как показано на рис. 2, *а*. В результате удается получить расстояние между нижним и верхним слоями сетки с точностью до второго знака после запятой и атомистическую модель верхнего слоя сетки;
- осуществляется поворот верхнего слоя сетки относительно нижнего на 90° в плоскости XOY, для того чтобы жгуты (нанотрубки) были перпендикулярны по направлению друг к другу. Для каждого атома с координатами (x, y, z) вычисляются новые координаты (x', y', z') после поворота против часовой стрелки на угол θ (в данном случае $\theta = \pi/2$, или 90 радиан) по формулам

$$x' = x\cos\theta - y\sin\theta, \quad y' = x\sin\theta + y\cos\theta, \quad z' = z. \tag{6}$$

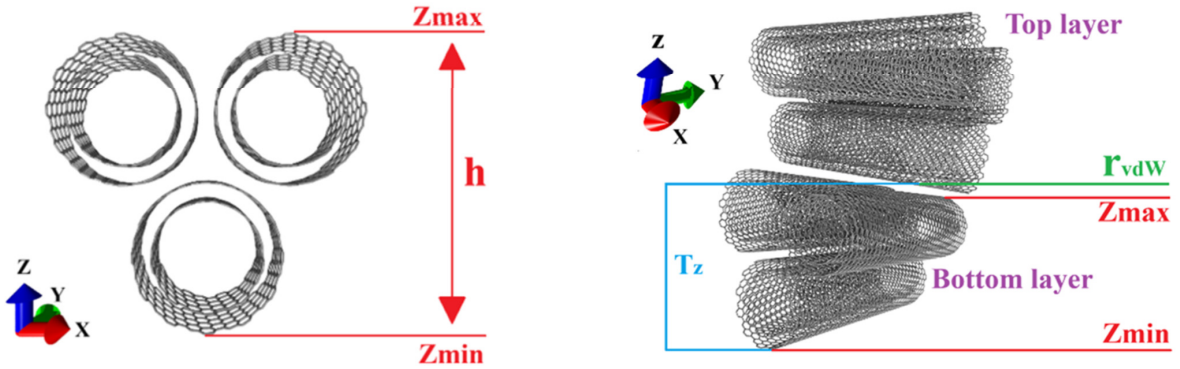
Поскольку поворот осуществляется на угол $\pi/2$, то формулы (6) приобретают вид:

$$x' = -y, \quad y' = x, \quad z' = z; \tag{7}$$

- верхний слой сетки также транслируется заданное число раз аналогично нижнему слою, но по оси X согласно выражению (5):

$$T_x = T \cdot n_x. \tag{8}$$

Далее верхний слой сетки также выравнивается относительно своего центра масс, а его итоговый вектор трансляции фиксируется. Таким образом, получается, что центры масс верхнего и нижнего слоев сетки характеризуются одинаковыми координатами в плоскости XOY (рис. 2, *б*).



а / *a* *б* / *b*

Рис. 2. Построение супер-ячеек сеток из жгутов МУНТ: *а* — определение характеристической длины h; *б* — схема супер-ячейки с учетом r_{vdW} — радиуса ван-дер-ваальсового взаимодействия и T_z — вектора трансляции нижнего слоя сетки вдоль оси Z (цвет онлайн)

Fig. 2. Construction of supercells of networks from MWCNT bundles: *a* — determination of the characteristic length h; *b* — diagram of the supercell taking into account r_{vdW} — the radius of the van der Waals interaction and T_z — the translation vector of the lower layer of the network along the Z axis (color online)

Шаг 4: формирование выходных файлов с указанием полученных векторов трансляции сгенерированных сеток.

На данном этапе происходит формирование выходного файла: 1) с итоговыми длинами векторов трансляции полученной сетки; 2) массива полученных координат атомов в файл формата «.xyz» в соответствии со стандартным форматированием такого типа файлов, учитывая заглавие файла, количество атомов в структуре, тип атома углерода «C», а также название выходного файла, которое задается на шаге 1.

2. Построенные атомистические модели супер-ячеек сеток из МУНТ (жгутов МУНТ)

2.1. Сетки из МУНТ $(9,18)@(12,24)$

Благодаря заданию начальных значений количества трансляций верхнего и нижнего слоев сетки возможно контролировать шаг сетки в обоих направлениях X, Y. На рис. 3 показаны фрагменты сеток из одиночных МУНТ с различным размером и формой «окна».

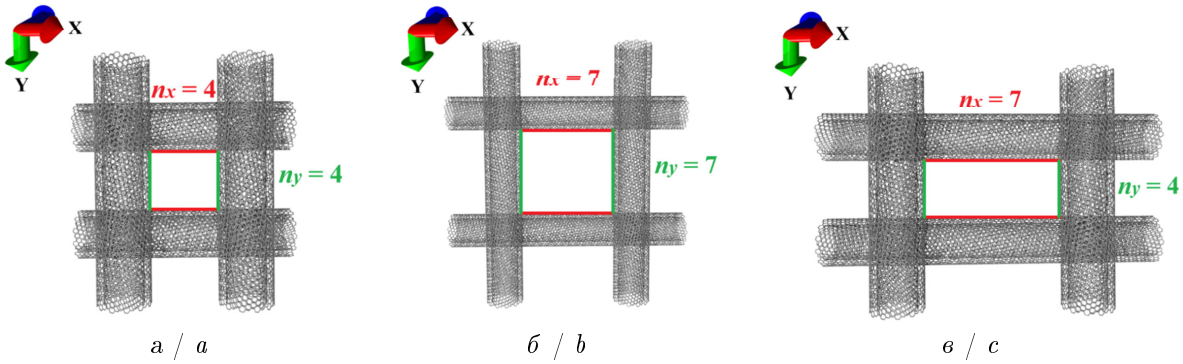


Рис. 3. Пример построения сеток из МУНТ $(9,18)@(12,24)$ с разным шагом: a — $n_x = n_y = 4$; $б$ — $n_x = n_y = 7$; $в$ — $n_x = 7$, $n_y = 4$; n_x, n_y — число трансляций вдоль осей X, Y соответственно (цвет онлайн)

Fig. 3. An example of constructing grids from MWCNTs $(9,18)@(12,24)$ with different pitches: a — $n_x = n_y = 4$; b — $n_x = n_y = 7$; c — $n_x = 7$, $n_y = 4$; n_x, n_y — the number of translations along the X, Y axes, respectively (color online)

На рис. 3, *а* показана сетка с квадратным окном и числом трансляций $n_x = n_y = 4$ вдоль каждой из осей X, Y. Вектор трансляции вдоль осей X, Y при этом равен 56.750 Å. На рис. 3, *б* показана сетка также с квадратным окном, но с числом трансляций, равным 7. Вектор трансляции при этом стал равным 90.798 Å. На рис. 3, *в* показан фрагмент сетки с прямоугольным окном. В данном случае векторы трансляции вдоль осей X и Y различаются и равны 56.750 Åи 90.7981 Å соответственно. Благодаря контролю размера и формы окна становится возможно создание из жгутов МУНТ сеток различных модификаций, что делает методику более универсальной и широкой в использовании.

На рис. 4 показаны модели фрагментов сеток из жгутов двух МУНТ.

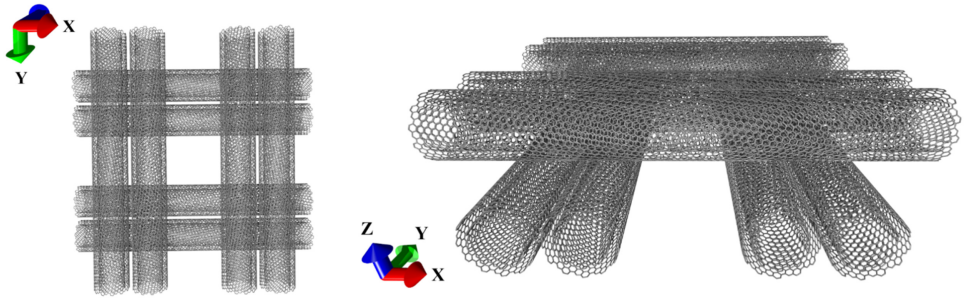


Рис. 4. Фрагмент сетки жгутов из двух МУНТ $(9,18)@(12,24)$, представленный в разных проекциях

Fig. 4. Fragment of a network of bundles of two MWCNTs $(9,18)@(12,24)$ presented in different projections

2.2. Сетки из жгутов МУНТ $(19, 38)@(22, 44)$

Аналогичным образом были построены атомистические модели супер-ячеек сеток жгутов из трех МУНТ $(19, 38)@(22, 44)$, внутренний диаметр которых равен 4 нм. Длина вектора трансляции равна 215.6842 Å по оси X и по оси Y. Пример полученной супер-ячейки представлен на рис. 5 с разных проекций.

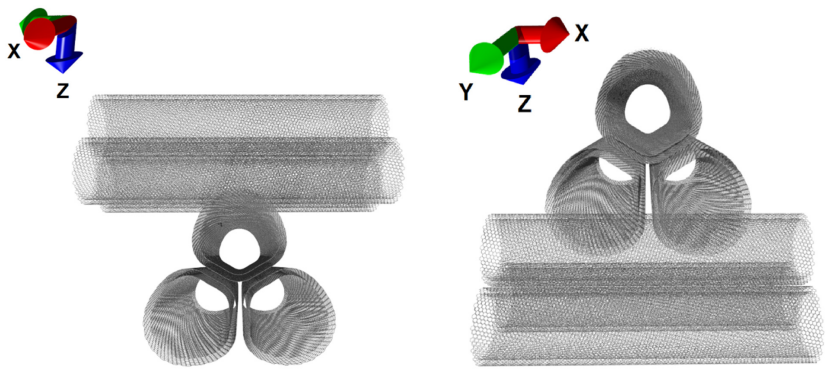


Рис. 5. Атомистическая модель супер-ячейки жгута из трех МУНТ $(19, 38)@(22, 44)$, представленная в разных проекциях
Fig. 5. Atomistic model of a supercell of a bundle of three MWCNTs $(19, 38)@(22, 44)$ presented in different projections

На рис. 5 жгуты расположены перпендикулярно друг другу, образуя сетку. Так же, как и в предыдущем рассмотренном случае, здесь жгуты расположены друг относительно друга на расстоянии порядка 3.4 Å, что соответствует ван-дер-ваальсову взаимодействию в точке наибольшего сближения жгутов. Указанная особенность позволяет удерживать жгуты в единой сетке.

Заключение

Подводя итог описанию механизма построения сеток из одиночных МУНТ и их жгутов, можно сказать, что представленная методика является универсальной, применимой к любым начальным структурам, будь то отдельные МУНТ или жгуты на их основе из различного числа нанотрубок. Дополнительно существует возможность изменения шага сеток, в том числе и асимметричного шага. Более того, механизм реализует размещение жгутов друг относительно друга на расстоянии ван-дер-ваальсова взаимодействия. В дальнейшем сгенерированные атомистические модели послужат основой для проведения масштабных вычислительных экспериментов по изучению деформационного поведения сеток при различных типах нагрузок (растяжение, сжатие, сдвиг). Это позволит установить количественные зависимости между топологией сетки, хиральностью исходных нанотрубок и эффективными механическими характеристиками материала, что критически важно для верификации гипотезы о повышении эксплуатационных свойств композитов в экстремальных условиях эксплуатации. Кроме того, универсальность алгоритма создает предпосылки для формирования базы данных стандартных супер-ячеек, которые могут быть использованы в качестве входных структур для методов молекулярной динамики и мультимасштабного моделирования. Такой подход обеспечит переход от атомистического описания к прогнозированию надежности корпусов электронных устройств, что напрямую соответствует задачам повышения долговечности техники в космических условиях.

Список литературы

1. *Елецкий А. В.* Механические свойства углеродных наноструктур и материалов на их основе // Успехи физических наук. 2007. Т. 177. С. 233–274. DOI: https://doi.org/10.3367/UFNr.0177.200703a.0233

2. *Баимова Ю. А., Мурзаев Р. Т., Дмитриев С. В.* Механические свойства объемных углеродных наноматериалов // Физика твердого тела. 2014. Т. 56, № 10. С. 1946–1952. EDN: SNWAAV
3. *Georgantzinos S. K., Giannopoulos G. I., Stamoulis K., Markolefas S.* Composites in aerospace and mechanical engineering // Materials. 2023. Vol. 16. Art. 7230. DOI: https://doi.org/10.3390/ma16227230
4. *Harussani M., Sapuan S., Nadeem G., Rafin T., Kirubaanand W.* Recent applications of carbon-based composites in defence industry: A review // Defence Technology. 2022. Vol. 18, iss. 8. P. 1281–1300. DOI: https://doi.org/10.1016/j.dt.2022.03.006
5. *Zecchi S., Cristoforo G., Piatti E., Torsello D., Ghigo G., Tagliaferro A., Rosso C., Bartoli M.* A concise review of recent advancements in carbon nanotubes for aerospace applications // Micromachines. 2025. Vol. 16, iss. 1. Art. 53. DOI: https://doi.org/10.3390/mi16010053
6. *Ramachandran K., Boopalan V., Bear J. C., Subramani R.* Multi-walled carbon nanotubes (MWCNTs)-reinforced ceramic nanocomposites for aerospace applications: A review // Journal of Materials Science. 2022. Vol. 57, iss. 2. P. 3923–3953. DOI: https://doi.org/10.1007/s10853-021-06760-X
7. *Xia Q., Mei H., Zhang Z., Liu Y., Liu Y., Leng J.* Fabrication of the silver modified carbon nanotube film/carbon fiber reinforced polymer composite for the lightning strike protection application // Composites Part B: Engineering. 2020. Vol. 180. Art. 107563. DOI: https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2019.107563
8. *Zhu M., Zhang P., Gao F., Bai Y., Zhang H., Zu M., Liu L., Zhang Z.* Advanced lightweight lightning strike protection composites based on super-aligned carbon nanotube films and thermal-resistant zirconia fibers // Nanoscale Advances. 2024. Vol. 6, iss. 19. P. 4858–4864. DOI: https://doi.org/10.1039/D4NA00392F
9. *Mallampati S. C., Komal U. K., Rakesh P., Barman P.* Investigation of the mechanical response of MWCNTs infused carbon/glass fiber-based hybrid composites using digital image correlation // Construction and Building Materials. 2025. Vol. 492. Art. 143068. DOI: https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2025.143068
10. *Xia X., Xiao J., Yang W., Weng G. J.* Modeling of CNT alignment state on the strain sensing characteristics of MWCNT-based nanocomposites // Applied Mathematical Modelling. 2025. Vol. 141. Art. 115946. DOI: https://doi.org/10.1016/j.apm.2025.115946
11. *Safaei B., Naseradinmousavi P., Rahmani A.* Development of an accurate molecular mechanics model for buckling behavior of multi-walled carbon nanotubes under axial compression // Journal of Molecular Graphics and Modelling. 2016. Vol. 65. P. 43–60. DOI: https://doi.org/10.1016/j.jmgm.2016.02.001
12. *Sonawane S. S., Thakur P. P., Paul R.* Study on visco-elastic properties enhancement of MWCNT based polypropylene nanocomposites // Materials Today: Proceedings. 2020. Vol. 29, pt. 3. P. 929–933. DOI: https://doi.org/10.1016/j.matpr.2020.05.417
13. *Wang G., Liu L., Zhang Z.* Interface mechanics in carbon nanomaterials-based nanocomposites // Composites Part A: Applied Science and Manufacturing. 2021. Vol. 141. Art. 106212. DOI: https://doi.org/10.1016/j.compositesa.2020.106212
14. *Goh B., Choi J.* The maintained interstitials in twisted carbon nanotube bundles under bending deformation // Cell Reports Physical Science. 2025. Vol. 6, iss. 2. Art. 102443. DOI: https://doi.org/10.1016/j.xcrp.2025.102443
15. *Serafimoski S., Šobak M., Vesel A., Slemenik Perše L., Oseli A.* Structure-property relationship of established MWCNT network enhancing thermo-mechanical stability and electrical conductivity in TPU nanocomposites // Materials & Design. 2025. Vol. 260. Art. 115126. DOI: https://doi.org/10.1016/j.matdes.2025.115126
16. *Goh B., Choi J.* Radial gradient characteristics formed by the interstitial space of MWCNT yarn owing to twisting // Carbon. 2024. Vol. 230. Art. 119642. DOI: https://doi.org/10.1016/j.carbon.2024.119642
17. *O'Brien N. P., McCarthy M. A., Curtin W. A.* Improved inter-tube coupling in CNT bundles through carbon ion irradiation // Carbon. 2013. Vol. 51. P. 173–184. DOI: https://doi.org/10.1016/j.carbon.2012.08.026
18. *Kassa M. K., Arumugam A. B.* Bending response analysis of a laminated, tapered, curved, composite panel made from an agglomerated and wavy MWCNT-glass fiber-polymer hybrid // Transactions of the Canadian Society for Mechanical Engineering. 2021. Vol. 46, iss. 1. P. 103–131. DOI: https://doi.org/10.1139/tcsme-2021-0084
19. *Глухова О. Е., Колесниченко П. А., Слепченков М. М.* Механические свойства многостенных

углеродных хиральных нанотрубок и жгутов из них: In silico исследования в рамках метода функционала плотности в приближении сильной связи // Физика твердого тела. 2025. Т. 67, вып. 5. С. 897–903. DOI: https://doi.org/10.61011/FTT.2025.05.60756.105-25, EDN: OAUTZO

20. *Hourahine B., Berdakin M., Bich J. A. et al.* Recent developments in DFTB+, a software package for efficient atomistic quantum mechanical simulations // The Journal of Physical Chemistry A. 2025. Vol. 129, iss. 24. P. 5373–5390. DOI: https://doi.org/10.1021/acs.jpca.5c01146
21. *Rauls E., Gutierrez R., Elsner J., Frauenheim Th.* Stoichiometric and non-stoichiometric (101¯0) and (112¯0) surfaces in 2H–SiC: A theoretical study // Solid State Communications. 1999. Vol. 111, iss. 8. P. 459–465. DOI: https://doi.org/10.1016/S0038-1098(99)00137-4, EDN: ADMSDX
22. *Nocedal J., Wright S. J.* Numerical Optimization. 2nd ed. New York : Springer, 2006. 664 p.

References

1. Eletskii A. V. Mechanical properties of carbon nanostructures and materials based on them. *Uspekhi Fizicheskikh Nauk* [Physics-Uspekhi], 2007, vol. 177, pp. 233–274 (in Russian). DOI: https://doi.org/10.3367/UFNr.0177.200703a.0233
2. Baimova Yu. A., Murzaev R. T., Dmitriev S. V. Mechanical properties of bulk carbon nanomaterials. *Physics of the Solid State*, 2014, vol. 56, iss. 10, pp. 2010–2016. DOI: https://doi.org/10.1134/S1063783414100035, EDN: UFVVEN
3. Georgantzinos S. K., Giannopoulos G. I., Stamoulis K., Markolefas S. Composites in aerospace and mechanical engineering. *Materials*, 2023, vol. 16, art. 7230. DOI: https://doi.org/10.3390/ma16227230
4. Harussani M., Sapuan S., Nadeem G., Rafin T., Kirubaanand W. Recent applications of carbon-based composites in defence industry: A review. *Defence Technology*, 2022, vol. 18, iss. 8, pp. 1281–1300. DOI: https://doi.org/10.1016/j.dt.2022.03.006
5. Zecchi S., Cristoforo G., Piatti E., Torsello D., Ghigo G., Tagliaferro A., Rosso C., Bartoli M. A concise review of recent advancements in carbon nanotubes for aerospace applications. *Micromachines*, 2025, vol. 16, iss. 1, art. 53. DOI: https://doi.org/10.3390/mi16010053
6. Ramachandran K., Boopalan V., Bear J. C., Subramani R. Multi-walled carbon nanotubes (MWCNTs)-reinforced ceramic nanocomposites for aerospace applications: A review. *Journal of Materials Science*, 2022, vol. 57, iss. 2, pp. 3923–3953. DOI: https://doi.org/10.1007/s10853-021-06760-X
7. Xia Q., Mei H., Zhang Z., Liu Y., Liu Y., Leng J. Fabrication of the silver modified carbon nanotube film/carbon fiber reinforced polymer composite for the lightning strike protection application. *Composites Part B: Engineering*, 2020, vol. 180, art. 107563. DOI: https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2019.107563
8. Zhu M., Zhang P., Gao F., Bai Y., Zhang H., Zu M., Liu L., Zhang Z. Advanced lightweight lightning strike protection composites based on super-aligned carbon nanotube films and thermal-resistant zirconia fibers. *Nanoscale Advances*, 2024, vol. 6, iss. 19, pp. 4858–4864. DOI: https://doi.org/10.1039/D4NA00392F
9. Mallampati S. C., Komal U. K., Rakesh P., Barman P. Investigation of the mechanical response of MWCNTs infused carbon/glass fiber-based hybrid composites using digital image correlation. *Construction and Building Materials*, 2025, vol. 492, art. 143068. DOI: https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2025.143068
10. Xia X., Xiao J., Yang W., Weng G. J. Modeling of CNT alignment state on the strain sensing characteristics of MWCNT-based nanocomposites. *Applied Mathematical Modelling*, 2025, vol. 141, art. 115946. DOI: https://doi.org/10.1016/j.apm.2025.115946
11. Safaei B., Naseradinmousavi P., Rahmani A. Development of an accurate molecular mechanics model for buckling behavior of multi-walled carbon nanotubes under axial compression. *Journal of Molecular Graphics and Modelling*, 2016, vol. 65, pp. 43–60. DOI: https://doi.org/10.1016/j.jmgm.2016.02.001
12. Sonawane S. S., Thakur P. P., Paul R. Study on visco-elastic properties enhancement of MWCNT based polypropylene nanocomposites. *Materials Today: Proceedings*, 2020, vol. 29, pt. 3, pp. 929–933. DOI: https://doi.org/10.1016/j.matpr.2020.05.417
13. Wang G., Liu L., Zhang Z. Interface mechanics in carbon nanomaterials-based nanocomposites. *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing*, 2021, vol. 141, art. 106212. DOI: https://doi.org/10.1016/j.compositesa.2020.106212
14. Goh B., Choi J. The maintained interstitials in twisted carbon nanotube bundles under bending

deformation. *Cell Reports Physical Science*, 2025, vol. 6, iss. 2, art. 102443. DOI: https://doi.org/10.1016/j.xcrp.2025.102443

15. Serafimoski S., Šobak M., Vesel A., Slemenik Perše L., Oseli A. Structure-property relationship of established MWCNT network enhancing thermo-mechanical stability and electrical conductivity in TPU nanocomposites. *Materials & Design*, 2025, vol. 260, art. 115126. DOI: https://doi.org/10.1016/j.matdes.2025.115126
16. Goh B., Choi J. Radial gradient characteristics formed by the interstitial space of MWCNT yarn owing to twisting. *Carbon*, 2024, vol. 230, art. 119642. DOI: https://doi.org/10.1016/j.carbon.2024.119642
17. O'Brien N. P., McCarthy M. A., Curtin W. A. Improved inter-tube coupling in CNT bundles through carbon ion irradiation. *Carbon*, 2013, vol. 51, pp. 173–184. DOI: https://doi.org/10.1016/j.carbon.2012.08.026
18. Kassa M. K., Arumugam A. B. Bending response analysis of a laminated, tapered, curved, composite panel made from an agglomerated and wavy MWCNT-glass fiber-polymer hybrid. *Transactions of the Canadian Society for Mechanical Engineering*, 2021, vol. 46, iss. 1, pp. 103–131. DOI: https://doi.org/10.1139/tcsme-2021-0084
19. Glukhova O. E., Kolesnichenko P. A., Slepchenkov M. M. Mechanical properties of multi-walled carbon chiral nanotubes and bundles thereof: In silico studies within the density functional method in the tight-binding approximation. *Physics of the Solid State*, 2025, vol. 67, iss. 5, pp. 897–903 (in Russian). DOI: https://doi.org/10.61011/FTT.2025.05.60756.105-25, EDN: OAUTZO
20. Hourahine B., Berdakin M., Bich J. A. et al. Recent developments in DFTB+, a software package for efficient atomistic quantum mechanical simulations. *The Journal of Physical Chemistry A*, 2025, vol. 129, iss. 24, pp. 5373–5390. DOI: https://doi.org/10.1021/acs.jpca.5c01146
21. Rauls E., Gutierrez R., Elsner J., Frauenheim Th. Stoichiometric and non-stoichiometric (101^{-}0) and (112^{-}0) surfaces in 2H–SiC: A theoretical study. *Solid State Communications*, 1999, vol. 111, iss. 8, pp. 459–465. DOI: https://doi.org/10.1016/S0038-1098(99)00137-4, EDN: ADMSDX
22. Nocedal J., Wright S. J. *Numerical Optimization*. 2nd ed. New York, Springer, 2006. 664 p.

Поступила в редакцию / Received 16.03.2026
Принята к публикации / Accepted 04.06.2026
Опубликована / Published 31.08.2026