



Научная статья
УДК 538.9

Многостенные углеродные нанотрубки с индексами хиральности стенок ($m, 2m$): упругие и электропроводные свойства



О. Е. Глухова^{1,3}, А. Ю. Герасименко^{2,3}, М. М. Слепченков¹✉

¹Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н. Г. Чернышевского, Россия, 410012, г. Саратов, ул. Астраханская, д. 83

²Национальный исследовательский университет «Московский институт электронной техники», Россия, 124498, г. Москва, Зеленоград, площадь Шокина, д. 1

³Первый Московский государственный медицинский университет имени И. М. Сеченова, Россия, 119991, г. Москва, ул. Большая Пироговская, д. 2, стр. 4

Глухова Ольга Евгеньевна, доктор физико-математических наук, ¹заведующий кафедрой радиотехники и электродинамики; ³ведущий научный сотрудник лаборатории биомедицинских нанотехнологий, glukhovaoe@info.sgu.ru, <https://orcid.org/0000-0002-5670-2058>, AuthorID: 33028
Герасименко Александр Юрьевич, доктор технических наук, ²профессор Института биомедицинских систем; ³заведующий лабораторией биомедицинских нанотехнологий, gerasimenko@bms.zone, <https://orcid.org/0000-0001-6514-2411>, AuthorID: 605086
Слепченков Михаил Михайлович, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры радиотехники и электродинамики, slepchenkovm@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-4282-5620>, AuthorID: 712909

Аннотация. Многостенные углеродные нанотрубки, характеризующиеся большой удельной площадью поверхности, превосходной адсорбционной способностью, высокими показателями прочности на разрыв, тепло- и электропроводности, находят применение в наноэлектронике, энергетике, катализе, сенсорике, а также в различных биомедицинских приложениях. В данной работе рассматривается новая конфигурация многостенных углеродных нанотрубок с разным количеством стенок – с индексами хиральности ($m, 2m$) с шагом по числу m , равным 3, обеспечивающим ван-дер-ваальсовое межстенное расстояние ~ 3.4 Å и одинаковый шаг трансляции 11.35 Å по оси многостенной нанотрубки. Исходными данными для построения атомистических моделей послужили результаты проведенного натурного эксперимента по синтезу массивов многостенных углеродных нанотрубок методом плазменного химического осаждения паров из газовой фазы. Все теоретические исследования проводились с применением метода функционала плотности в приближении сильной связи с самосогласованием заряда. Показано, что при однородной упругой деформации растяжения подобных многостенных нанотрубок, стенки которых имеют одинаковый угол хиральности, наблюдается незначительное (в пределах нескольких сотых долей терапаскаля) увеличение модуля Юнга с изменением количества стенок от 1 до 8. При этом с ростом диаметра внутреннего канала от 2 до 6 нм происходит увеличение модуля Юнга от 1.7 до 2.2 ТПа. Установлен убывающий характер сопротивления нанотрубок с увеличением числа стенок и выходом его на насыщение вблизи значения 1 кОм при 8 стенках. Полученные результаты открывают широкие перспективы применения многостенных углеродных нанотрубок со стенками типа ($m, 2m$) (шаг изменения m равен 3) в устройствах гибкой и растяжимой электроники.

Ключевые слова: многостенные углеродные нанотрубки, хиральность, модуль Юнга, электрическое сопротивление

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 25-29-00963, <https://rscf.ru/project/25-29-00963/>).

Для цитирования: Глухова О. Е., Герасименко А. Ю., Слепченков М. М. Многостенные углеродные нанотрубки с индексами хиральности стенок ($m, 2m$): упругие и электропроводные свойства // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2026. Т. 26, вып. 1. С. 84–92. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2026-26-1-84-92>, EDN: SADIBL

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

Article

Multi-walled carbon nanotubes with wall chirality indices ($m, 2m$): Elastic and electrically conductive properties

О. Е. Glukhova^{1,3}, А. Yu. Gerasimenko^{2,3}, М. М. Slepchenkov¹✉

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

²National Research University "Moscow Institute of Electronic Technology", 1 Shokin Square, Zelenograd, Moscow 124498, Russia

³I. M. Sechenov First Moscow State Medical University, 2–4 Bolshaya Pirogovskaya St., Moscow 119991, Russia



Olga E. Glukhova, glukhovaoe@info.sgu.ru, <https://orcid.org/0000-0002-5670-2058>, AuthorID: 33028

Alexander Yu. Gerasimenko, gerasimenko@bms.zone, <https://orcid.org/0000-0001-6514-2411>, AuthorID: 605086

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

Abstract. Background and Objectives: Multi-walled carbon nanotubes (MWCNTs), characterized by a large specific surface area, excellent adsorption capacity, high tensile strength, thermal and electrical conductivity, find application in nanoelectronics, energy, catalysis, sensorics, and various biomedical applications. This paper considers a new MWCNT configuration with different number of walls with chirality indices ($m, 2m$) and an m -increment of 3, providing a van der Waals interwall spacing of ~ 3.4 Å and a uniform translation step of 11.35 Å along the MWCNT axis. **Materials and Methods:** The initial data for constructing the atomistic models were the results of a full-scale experiment on the synthesis of MWCNT arrays by plasma-enhanced chemical vapor deposition. All theoretical studies were performed using the density functional theory method in the tight-binding approximation with self-consistent charge. **Results:** It has been shown that, under uniform elastic tensile strain, such MWCNTs with walls having the same chirality angle exhibit a slight (within a few hundredths of a terapascal) increase in Young's modulus with a change in the number of walls from 1 to 8. Furthermore, with an increase in the inner channel diameter from 2 to 6 nm, Young's modulus increases from 1.7 to 2.2 TPa. A decreasing resistance pattern has been established for the MWCNTs with an increasing number of walls, reaching saturation near 1 kΩm at 8 walls. **Conclusion:** These results open up broad prospects for the application of MWCNTs with ($m, 2m$) walls (the m -increment is "3") in flexible and stretchable electronic devices.

Keywords: Young's modulus, electrical resistance, multi-walled carbon nanotubes, chirality

Acknowledgments: The 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., Gerasimenko A. Yu., Slepchenkov M. M. Multi-walled carbon nanotubes with wall chirality indices ($m, 2m$): Elastic and electrically conductive properties. *Izvestiya of Saratov University. Physics*, 2026, vol. 26, iss. 1, pp. 84–92 (in Russian). <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2026-26-1-84-92>, EDN: SADIBL

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

Введение

Углеродные нанотрубки (УНТ) занимают лидирующие позиции на рынке материалов с момента публикации С. Ииджимы в 1991 году [1]. Инженеры и ученые успешно работают и с одностенными УНТ (ОУНТ), и с многостенными углеродными нанотрубками (МУНТ), характеризующимися уникальными физико-химическими и механическими свойствами [2, 3]. В то же время МУНТ имеют ряд конкурентных преимуществ над ОУНТ, главным из которых является возможность их синтезировать в больших объемах, что обуславливает более высокий уровень коммерциализации МУНТ [4]. Отличительными признаками МУНТ являются большая удельная площадь поверхности, высокие значения прочности на разрыв (до 90 ГПа), модуля упругости (не менее 1 ТПа), тепло- и электропроводности, превосходная адсорбционная способность и улучшенные оптические свойства [5, 6]. Структурно МУНТ представляют собой коаксиально вложенные друг в друга ОУНТ, слабо связанные вместе силами Ван-дер-Ваальса, с внешним диаметром от 2 до 100 нм [6]. Имея вышеперечисленные структурные особенности и свойства, МУНТ находят широкий спектр областей применения, в том числе в нанoeлектронике, энергетике, катализе, сенсорике, различных биомедицинских приложениях [7–9]. Благодаря постоянному совершенствованию технологий синтеза в настоящее время можно получать структуры

МУНТ, содержащие различное количество стенок: от совсем небольшого (2–5) [10] до 100 и более [11]. И те, и другие разновидности МУНТ изучаются методами компьютерного моделирования для установления взаимосвязи «структура-свойства». Структуры МУНТ с числом стенок от 2 до 5 исследуются преимущественного методами атомистического моделирования [12, 13]. МУНТ с числом стенок от 10 и более изучаются методами конечно-элементного моделирования, базирующимися на приближениях сплошной среды [14].

В последние несколько лет технологам удалось добиться существенных успехов в области синтеза ОУНТ с контролируемым распределением хиральности. На основе данных многочисленных экспериментов по синтезу ОУНТ и результатов DFT-исследований была разработана теория винтовой дислокации, определяющей кинетику роста ОУНТ на твердых катализаторах [15]. Согласно разработанной теории, хиральные ОУНТ типа ($2n, n$), имеющие угол хиральности 19.1° , растут быстрее всего на твердой поверхности катализатора, а, значит, должны преобладать в конечном продукте синтеза УНТ. При этом следует отметить, что при описании теории и обосновании её результатов авторы рассматривают в основном полупроводниковые трубки. При построении геометрических моделей МУНТ, как правило, ограничиваются рассмотрением либо зигзагообразных, либо кресельных УНТ, причём в исследованиях и методами атомистического



моделирования [13, 16], и методами сплошной среды [14]. В тоже время большинство синтезируемых УНТ являются именно хиральными трубками с $n \neq m$ [17]. В данной работе рассматриваются МУНТ с хиральностью стенок типа $(m, 2m)$ с шагом изменения числа m , равным 3. Целью исследования является выявление закономерностей поведения упругих и электропроводных свойств таких МУНТ с изменением числа стенок.

1. Материалы и методы

1.1. Вычислительные подходы

Все теоретические исследования проводились с применением метода SCC DFTB [18], который обеспечивает высокую точность расчётов энергетических и электронных характеристик на фоне использования многоатомных суперъячеек. Дисперсионное взаимодействие между трубками в составе МУНТ учитывалось с помощью потенциала Леннард-Джонса [19]. Для получения энергетически выгодной атомной конфигурации суперъячеек проводилась минимизация полной энергии по всем координатам всех атомов и по длинам векторов трансляции суперъячейки при электронной температуре 300 К. Применялись периодические граничные условия во всех трёх пространственных направлениях. Размер моделируемой системы в направлении оси Z определялся величиной вектора трансляции суперъячейки вдоль оси УНТ, а в направлениях двух других осей он составлял 100 нм. Для минимизации полной энергии использовался метод сопряжённых градиентов. Условием достижения минимума полной энергии выступала величина силы, действующей на атом: её значение не должно было превышать 10^{-4} эВ/атом.

Модуль Юнга Y суперъячеек МУНТ рассчитывался по формуле, вытекающей из закона Гука [22]:

$$Y = \frac{2\Delta E_{tot}}{\Delta V} \frac{l}{\Delta l}, \quad (1)$$

где ΔE_{tot} – изменение полной энергии структуры при растяжении, ΔV – изменение объёма структуры при растяжении, l – длина суперъячейки, определяемая длиной вектора трансляции, Δl – удлинение вектора трансляции при растяжении.

Оценка электропроводных свойств проводилась в рамках формализма Ландауэра – Буттикера и метода неравновесных функций Грина [20]. На рис. 1 показана система из двух электродов

и проводящего канала (устройства), используемая для расчёта квантового транспорта электронов.

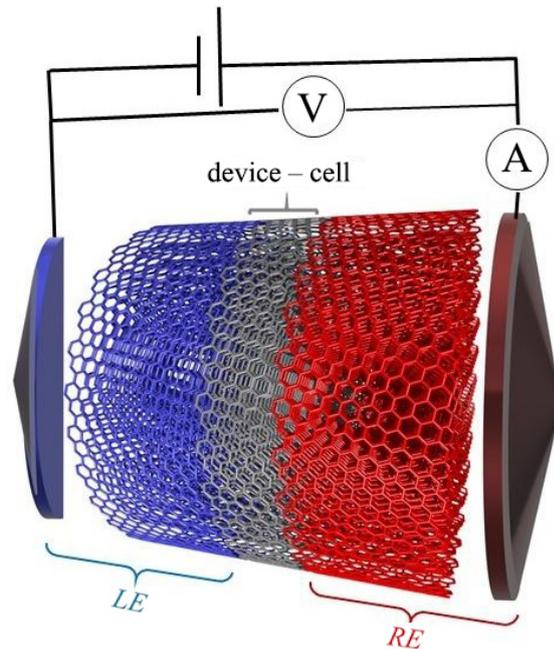


Рис. 1. Схема устройства и системы электродов (LE – левый электрод, RE – правый электрод) для расчёта электропроводности МУНТ с трубками $(m, 2m)$ (цвет онлайн)

Fig. 1. Diagram of the device and the electrode system (LE – left electrode, RE – right electrode) for calculating the electrical conductivity of MWCNTs with tubes $(m, 2m)$ (color online)

Расчёт электропроводности G проводился по формуле:

$$G = \frac{2e^2}{h} \int_{-\infty}^{\infty} T(E) F_T(E - E_F) dE, \quad (2)$$

где e^2/h – квант проводимости (e – заряд электрона, h – постоянная Планка), $T(E)$ – усреднённая функция пропускания электронов (E – энергия), F_T – функция теплового уширения энергетических уровней, E_F – уровень Ферми электродов. Электрическое сопротивление R – величина, обратная электропроводности G . Функция пропускания электронов $T(E)$ определяется выражением вида

$$T(E) = Tr(\Gamma_S(E) G_C^A(E) \Gamma_D(E) G_C^R(E)), \quad (3)$$

где $G_C^A(E)$ и $G_C^R(E)$ – опережающая и запаздывающая матрицы Грина, описывающие взаимодействие моделируемой системы с электродами, а $\Gamma_S(E)$ и $\Gamma_D(E)$ – матрицы уширения энергетических уровней электродов истока и стока. Расчёты проводились для температуры 300 К.



1.2. Синтез МУНТ

Массивы МУНТ были синтезированы методом плазменного химического осаждения паров из газовой фазы [21]. В качестве исходных подложек использовались сильно легированные монокристаллические кремниевые пластины с проводимостью электронного типа. Изначально на подложку наносилась каталитическая пара металлов, Ti (10 нм) и Ni (2 нм), обработанная в растворе Пиранья путем испарения электронным пучком. Далее были проведены стадии окислительного и восстановительного отжига для образования наночастиц катализатора на подложке. Синтез МУНТ проводился с использованием системы Oxford PlasmaLab System 100 (Oxford Instruments, Великобритания).

Для синтеза массивов нанотрубок проводились следующие процессы. Осуществлялось окисление при 280°C в течение 5 мин в среде газов O₂ и Ar с обработкой радиочастотным источником плазмы с мощностью 100 Вт. Восстановление при 700°C в течение 5 мин в среде газов NH₃ и Ar с обработкой радиочастотным источником плазмы с мощностью 100 Вт. Средний диаметр нанотрубок в массивах двух образцов определялся в основном размером сформированных наночастиц катализатора на подложке. Высота массивов МУНТ составляла ~8 мкм. Процесс вертикального роста нанотрубок объясняется эффектом конденсации от соседних УНТ (эффект сгущения), т. е. удержанием нанотрубок силами Ван-дер-Ваальса в массиве с высокой плотностью трубок во время их роста. Синтезированные образцы МУНТ с восьмью стенками (толщина стенок составляет 3.6–4.1 нм) имели диаметр внутреннего канала 2–6 нм и внешний диаметр 11–13 нм. На рис. 2 показаны изображения сканирующей электронной микроскопии

(СЭМ) (рис. 2, а, б) массивов МУНТ и просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) (рис. 2, в) отдельных МУНТ из массива с диаметром внутреннего канала ~5 нм.

2. Особенности атомного строения хиральных МУНТ

Для построения суперъячеек хиральных МУНТ с различным количеством стенок типа ($m, 2m$) использовался оригинальный подход [22], позволяющий генерировать атомные сетки МУНТ с любыми диаметром внутреннего канала и обеспечивающий межстенное расстояние ~3.4 Å. При построении моделей МУНТ учитывались топологические особенности индивидуальных нанотрубок с индексами хиральности ($m, 2m$), которые характеризуются одинаковым углом хиральности $\theta = 19.1^\circ$ и одинаковым вектором трансляции $T_c = 11.35 \pm \pm 0.005$ Å. Структура атомной сетки таких хиральных трубок отличается следующими особенностями:

- 1) m атомов лежат на одной окружности. На рис. 3, а показана суперъячейка ОУНТ (19, 38). В верхней части для удобства 19 атомов, расположенных на одной окружности, отмечены одинаковым цветом.
- 2) Окружности с идентичными атомами расположены нерегулярно вдоль оси. На рис. 3, б показано, что атомная сетка образована одинаковыми парами атомов (как и сетка графена), выделенными зелёным и голубым цветами в каждой паре. Расстояние между окружностями с идентичными атомами h_1 определяется с помощью угла хиральности θ и расстояния между этими атомами d_0 (малая диагональ гексагона) как

$$h_1 = \sqrt{3}d_0 \sin(\theta). \quad (4)$$

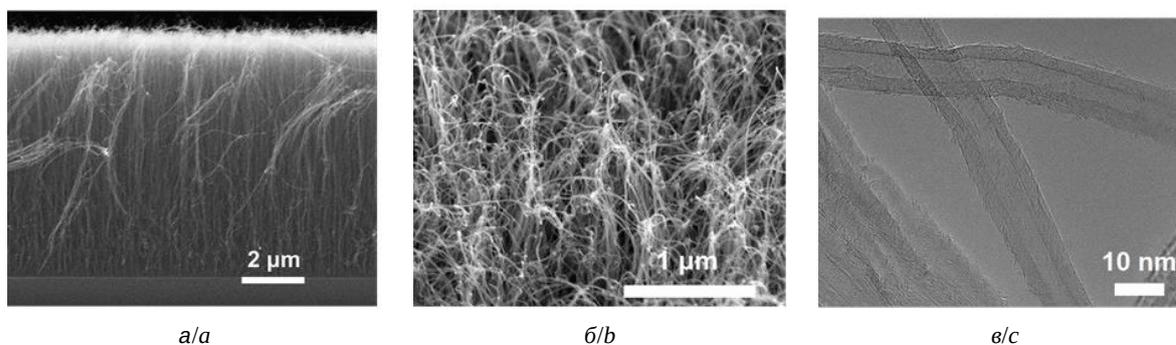


Рис. 2. Изображения СЭМ (а, б) и ПЭМ (в) массивов МУНТ на кремниевой подложке
Fig. 2. SEM (a, b) and TEM (c) images of MWCNT arrays on a silicon substrate

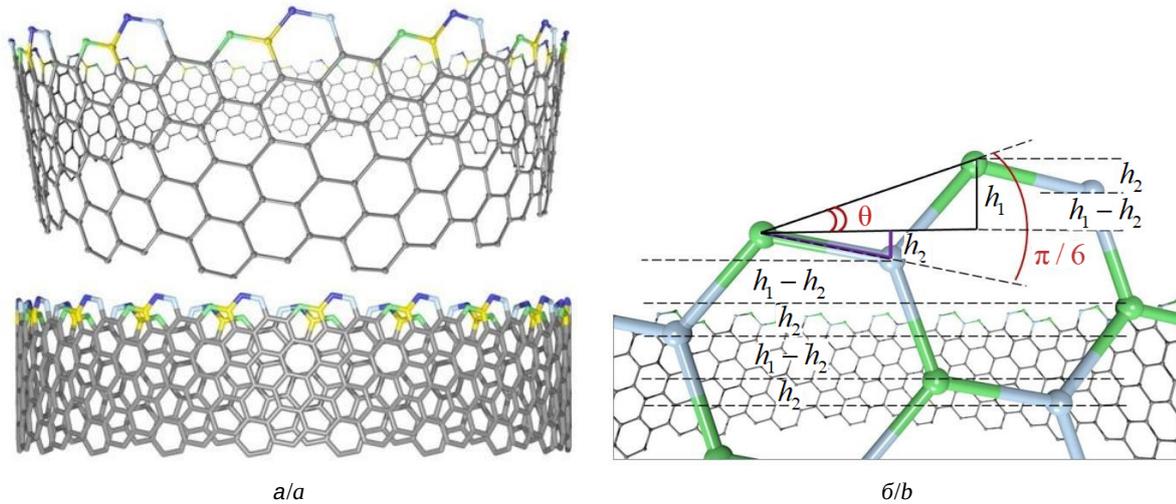


Рис. 3. Суперячейка ОУНТ (19, 38) (а) и её фрагмент с расстояниями h_1 между окружностями с идентичными атомами (выделены в каждой паре зелёным и голубым цветами) и h_2 между окружностями с неидентичными атомами (б) (цвет онлайн)

Fig. 3. Supercell of SWCNT (19, 38) (a) and its fragment with distances h_1 between circles with identical atoms (highlighted in each pair in green and blue) and h_2 between circles with non-identical atoms (b) (color online)

Промежуток h_2 между окружностями с неидентичными атомами определяется другим углом ($30^\circ - \theta$) и длиной С–С связи как

$$h_2 = d_0 \sin(30^\circ - \theta). \quad (5)$$

Таким образом, как показано на рис. 3, б, окружности с идентичными атомами чередуются вдоль оси трубки с шагом h_2 и шагом $h_1 - h_2$.

3) Количество окружностей N_{ring} с идентичными атомами определяется отношением длины вектора трансляции к величине h_1 , но поскольку таких атомов пара, то необходимо удвоение:

$$\begin{aligned} \frac{N_{ring}}{2} &= \frac{T_c}{h_1} = \frac{3\sqrt{7}d_0}{\sqrt{3d_0} \sin(\theta)} = \\ &= \frac{3\sqrt{7}d_0}{\sqrt{3d_0} \sqrt{3/28}} = 14. \end{aligned} \quad (6)$$

Для всех трубок $(m, 2m)$ количество окружностей одинаково $N_{ring} = 28$, соответственно количество атомов в супер-ячейке определяется как $N_{atom} = 28m$;

4) Шаг параметра m для трубок в составе МУНТ составляет 3.

Используя подход, подробно описанный в работе [22], и данные натурального эксперимента по синтезу массивов МУНТ, приведенные в п. 1.2, были построены атомистические модели МУНТ с различным количеством стенок и различными значениями диаметра внутреннего

канала. Всего были построены 32 кристаллических супер-ячейки МУНТ с количеством стенок от 1 до 8 и диаметром внутреннего канала 2, 4, 5 и 6 нм. Символически состав МУНТ можно записать как

$$\sum_{i=0}^n ((m + 3i), (2m + 6i)), \quad (7)$$

где m – индекс хиральности ОУНТ с диаметром, соответствующим внутреннему каналу МУНТ, а n – количество последующих стенок. Шаг индекса хиральности m для соседних стенок равен 3, поскольку разность между величинами диаметров при этом будет $\frac{\sqrt{21}d_{03}}{\pi}$, что соответствует ~ 6.3 Å – практически удвоенному значению ван-дер-ваальсовому расстоянию между стенками. На рис. 4 в качестве примера показана атомистическая модель МУНТ с восемью стенками и диаметром внутреннего канала ~ 5 нм. Для нее $m = 24$, поэтому МУНТ записывается следующим образом: $(24, 48)@(27, 54)@(30, 60)@(33, 66)@(36, 72)@(39, 78)@(42, 84)@(45, 90)$.

3. Упругие и электропроводные свойства хиральных МУНТ

Построенные атомистические модели МУНТ, составленных из хиральных трубок $(m, 2m)$, прошли проверку на прочность путём оценивания их способности оказывать сопротивление однородной деформации. С этой целью

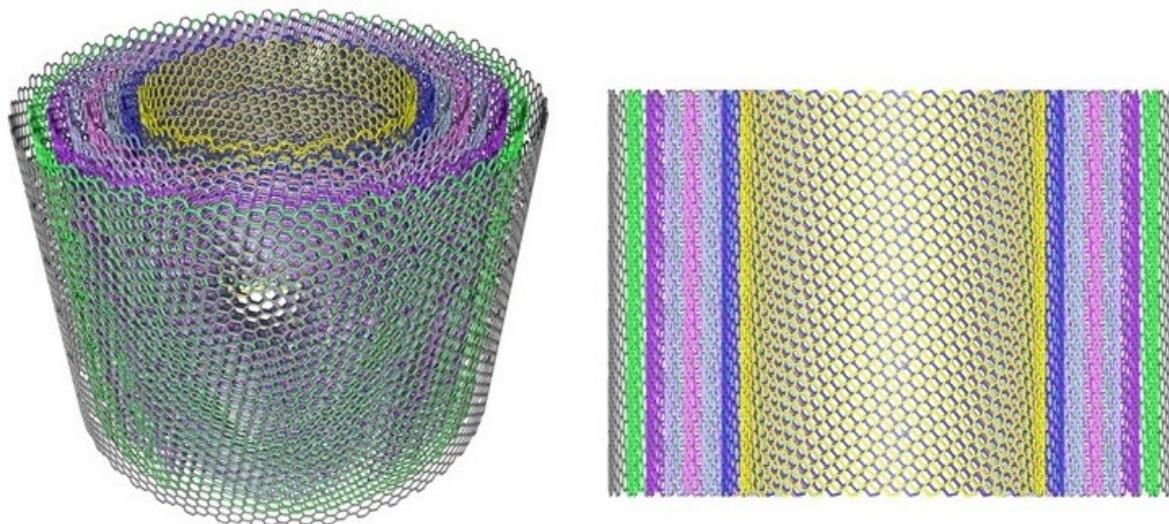


Рис. 4. Атомистическая модель МУНТ с 8 стенками с диаметром внутреннего канала ~ 5 нм, соответствующая данным изображения ПЭМ (см. рис. 1, в) (цвет онлайн)

Fig. 4. Atomistic model of MWCNT with 8 walls with an internal channel diameter of ~ 5 nm, corresponding to the TEM image data (see Fig. 1, c) (color online)

для всех построенных атомистических моделей МУНТ при растяжении на 1% был рассчитан модуль Юнга Y . Согласно полученным результатам расчёта, с увеличением количества стенок до восьми модуль Юнга меняется в небольших пределах: МУНТ с диаметрами внутреннего канала 2 ($m = 9$), 4 ($m = 19$), 5 ($m = 24$) и 6 нм ($m = 29$) характеризуются значениями 1.7 ± 0.02 , 1.8 ± 0.04 , 2.1 ± 0.03 и 2.2 ± 0.01 ТПа соответственно. Сравнение с результатами расчёта модуля Юнга МУНТ, построенных из ахиральных ОУНТ типа «zigzag» и «armchair» [14], показало, что МУНТ с типом хиральности трубок $(m, 2m)$ характеризуются лучшей способностью сопротивляться растяжению при упругой деформации. В частности, значения модуля Юнга, рассчитанного методами конечно-элементного моделирования, составляют 1.069–1.012 ТПа для МУНТ, состоящих из ОУНТ типа «zigzag», и 1.061–1.051 ТПа для МУНТ, состоящих из ОУНТ типа «armchair». Причём, с увеличением числа стенок в составе МУНТ от 5 до 20 значения модуля Юнга меняются в небольших пределах [14], что также было отмечено ранее в работе [23]. Из данных эксперимента известно, что усреднённое значение модуля Юнга индивидуальных МУНТ составляет 1.8 ТПа [24] и хорошо коррелирует с полученными нами расчётными значениями для МУНТ, состоящих из хиральных трубок $(m, 2m)$.

После оценки упругих свойств МУНТ со стенками типа $(m, 2m)$ были исследованы их электропроводные свойства. Подчеркнем, что расчёты квантового транспорта электронов для индивидуальных МУНТ, состоящих из хиральных трубок, ранее не проводились. Предпринимались попытки оценить влияние механических деформаций на электронный транспорт через МУНТ. В этом преуспел А. Pantano [25], предложивший комбинированный подход, сочетающий метод конечных элементов для создания континуальной модели УНТ и метод сильной связи для оценки электропроводности. Исследования выполнялись на примере пятистенных МУНТ, состоящих из трубок типа «armchair»: (70, 70), (65, 65), (60, 60), (55, 55) и (50, 50). Для недеформированной МУНТ величина электропроводности на уровне Ферми (смещён в 0 эВ) в квантах проводимости G_0 составила $2G_0$ (154.8 мкСм), а при осевом сжатии на 20 нм уменьшилась вдвое. Переходя к электрическому сопротивлению, имеем для недеформированной МУНТ значение 6.4 кОм, что соответствует сопротивлению идеальной металлической нанотрубки [26].

На рис. 5 показан график значений сопротивления, рассчитанных нами для МУНТ с разным числом стенок от 1 (соответствует ОУНТ $(m, 2m)$) до 8 для случая диаметра внутреннего канала ~ 2 нм ($m = 9$). Были выбраны структуры МУНТ с наименьшим значением внутреннего



диаметра среди рассмотренных ввиду высокой вычислительной сложности расчётов квантового транспорта. Из графика видно, что с увеличением числа стенок сопротивление уменьшается, причём, уже для двух- и трехстенных МУНТ наблюдается снижение сопротивления в 2 и 3 раза соответственно по сравнению с сопротивлением ОУНТ ($m, 2m$). Начиная с четырёх стенок и выше, сопротивление плавно выходит на насыщение, приближаясь к 1 кОм. Для объяснения такого поведения сопротивления МУНТ во вставке к графику на рис. 5 приводятся кривые функции пропускания электронов $T(E)$ для каждого рассмотренного количества стенок в составе МУНТ. Уровень Ферми смещён в 0 эВ. Хорошо видно, как по мере увеличения числа стенок сужается область «плато» вблизи уровня Ферми, поднимаясь при этом вверх по оси ординат, демонстрируя рост числа каналов проводимости, доступных для транспорта электронов. Приведённые на графике $T(E)$ пунктирные прямые наглядно показывают симметричное расположение границ области «плато» относительно положения уровня Ферми при разном количестве стенок и стремление числа каналов проводимости к своему возможному максимуму, достигаемому при 8 стенках.

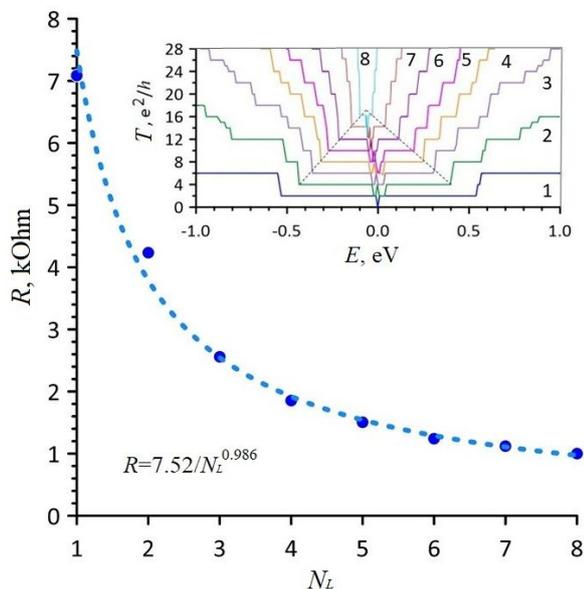


Рис. 5. Зависимость электрического сопротивления R от числа стенок N_L в МУНТ с трубками ($m, 2m$) с шагом изменения индекса m , равным 3 (цвет онлайн)

Fig. 5. Dependence of electrical resistance R on the number of walls N_L in MWCNTs with tubes ($m, 2m$) with a step of changing the index m equal to 3 (color online)

На основе анализа полученных результатов расчёта нами установлено, что сопротивление

МУНТ из трубок ($m, 2m$) с шагом изменения индекса $m = 3$, с увеличением числа стенок уменьшается по закону $R_0/N_L^{0.986}$, где R_0 – это сопротивление одной нанотрубки ($m, 2m$) (7.52 кОм). Установленное наименьшее значение сопротивления в 1 кОм, достигаемое для МУНТ с 8 стенками, превосходит на порядок значения сопротивлений МУНТ близкого диаметра, полученные в эксперименте [27, 28]. В работе [27] показано, что МУНТ с диаметром внутреннего канала 2.5–5 нм характеризуются сопротивлением 10–20 кОм, в то время как минимальное сопротивление МУНТ с диаметром 2–10 нм составляет 13 кОм [28].

С учетом упомянутых выше высоких показателей модуля Юнга можно прогнозировать широкие перспективы применения МУНТ со стенками типа ($m, 2m$) (шаг изменения m равен 3) в устройствах гибкой и растяжимой электроники. Важно отметить, что достижение столь низких значений электрического сопротивления и высоких значений модуля Юнга должно обеспечиваться бездефектностью стенок МУНТ. Известно, что при наличии структурных дефектов в атомной сетке нанотрубок, в частности дефектов типа «вакансия», модуль Юнга [29, 30] и электропроводность [26] МУНТ уменьшаются по сравнению с показателями для бездефектных нанотрубок.

Заключение

Представлена новая конфигурация хиральных нанотрубок ($m, 2m$) с шагом изменения индекса m , равным 3. Высокоточными квантовыми методами расчёта выявлены закономерности влияния количества стенок и диаметра внутреннего канала на модуль Юнга МУНТ, построенных из трубок ($m, 2m$). По мере увеличения количества стенок от 1 до 8 модуль Юнга изменяется в пределах нескольких сотых долей терапаскаля, а с ростом диаметра внутреннего канала с 2 до 6 нм он возрастает с 1.8 до 2.2 ТПа. На основе результатов расчёта электрического сопротивления установлено, что для МУНТ с хиральностью стенок ($m, 2m$) и шагом изменения числа $m = 3$, сопротивление уменьшается с ростом числа стенок по закону $R_0/N_L^{0.986}$, где R_0 – это сопротивление одной нанотрубки типа ($m, 2m$), N_L – количество стенок в составе МУНТ. Показано, что сопротивление МУНТ с ростом числа стенок стремится к значению ~1 кОм, достигаемому при 8 стенках. Для МУНТ с 8 стенками функция $T(E)$, определяющая число доступных каналов проводимости,



достигает своего максимума на уровне Ферми, что объясняет эффект насыщения сопротивления. Полученные результаты открывают широкие возможности для применения МУНТ со стенками типа (m , $2m$) в устройствах гибкой и растяжимой электроники.

Список литературы / References

- Iijima S. Helical Microtubules of Graphitic Carbon. *Nature*, 1991, vol. 354, pp. 56–58. <https://doi.org/10.1038/354056a0>
- Hughes K. J., Iyer K. A., Bird R. E., Ivanov J., Banerjee S., Georges G., Zhou Q. A. Review of carbon nanotube research and development: Materials and emerging applications. *ACS Appl. Nano Mater.*, 2024, vol. 7, iss. 16, pp. 18695–18713. <https://doi.org/10.1021/acsanm.4c02721>
- Kurita H., Estili M., Kwon H., Miyazaki T., Zhou W., Silvain J. F., Kawasaki A. Load-bearing contribution of multi-walled carbon nanotubes on tensile response of aluminum. *Compos. Part A Appl. Sci. Manuf.*, 2015, vol. 68, pp. 133–139. <https://doi.org/10.1016/j.compositesa.2014.09.014>
- Shoukat R., Khan M. I. Carbon nanotubes: A review on properties, synthesis methods and applications in micro and nanotechnology. *Microsyst Technol.*, 2021, vol. 27, pp. 4183–4192. <https://doi.org/10.1007/s00542-021-05211-6>
- Muradyan N. G., Gyulasaryan H., Arzumanyan A. A., Badalyan M. M., Kalantaryan M. A., Vardanyan Y. V., Laroze D., Manukyan A., Barseghyan M. G. The effect of multi-walled carbon nanotubes on the compressive strength of cement mortars. *Coatings*, 2022, vol. 12, iss. 12, art. 1933. <https://doi.org/10.3390/coatings12121933>
- Colbert D. D. T., Zhang J., McClure S. M., Nikolaev P., Chen Z., Hafner J. H., Owens D. W., Kotula P. G., Carter C. B., Weaver J. H., Rinzler A. G., Smalley R. E. Growth and sintering of fullerene nanotubes. *Science*, 1994, vol. 266, iss. 5188, pp. 1218–1222. <https://doi.org/10.1126/science.266.5188.1218>
- Syduzzaman M., Islam Saad M. S., Piam M. F., Talukdar T. A., Shobdo T. T., Pritha N. M. Carbon nanotubes: Structure, properties and applications in the aerospace industry. *Results Mater.*, 2025, vol. 25, art. 100654. <https://doi.org/10.1016/j.rinma.2024.100654>
- Tao Z., Zhao Y., Wang Y., Zhang G. Recent advances in carbon nanotube technology: Bridging the gap from fundamental science to wide applications. *C*, 2024, vol. 10, iss. 3, art. 9. <https://doi.org/10.3390/c10030069>
- Dubey R., Dutta D., Sarkar A., Chattopadhyay P. Functionalized carbon nanotubes: Synthesis, properties and applications in water purification, drug delivery and material and biomedical sciences. *Nanoscale Adv.*, 2021, vol. 3, iss. 20, pp. 5722–5744. <https://doi.org/10.1039/D1NA00293G>
- Huang J. Y., Chen S., Jo S. H., Wang Z., Han D. X., Chen G., Dresselhaus M. S., Ren Z. F. Atomic-scale imaging of wall-by-wall breakdown and concurrent transport measurements in multiwall carbon nanotubes. *Phys. Rev. Lett.*, 2005, vol. 94, art. 236802. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.94.236802>
- Masyutin A. G., Bagrov D. V., Vlasova I. I., Nikishin I. I., Klinov D. V., Sychevskaya K. A., Onishchenko G. E., Erokhina M. V. Wall thickness of industrial multi-walled carbon nanotubes is not a crucial factor for their Degradation by sodium hypochlorite. *Nanomaterials*, 2018, vol. 8, iss. 9, art. 715. <https://doi.org/10.3390/nano8090715>
- Qin C., Tian Z., Luo X., Xie Q., Nie T., Guo X. First-principles study of electronic structure of double-walled and single-walled carbon nanotubes. *Ceramics International*, 2021, vol. 47, iss. 2, pp. 2665–2671. <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2020.09.115>
- Yamamoto G., Chen Y., Kunitomo A., Shigemitsu N., Shindo T. Decreasing vacancy-defect sensitivity in multi-walled carbon nanotubes through interwall coupling. *Carbon Trends*, 2023, vol. 11, art. 100266. <https://doi.org/10.1016/j.cartre.2023.100266>
- Sakharova N. A., Pereira A. F. G., Antunes J. M., Fernandes J. V. Mechanical characterization of multiwalled carbon nanotubes: Numerical simulation study. *Materials*, 2020, vol. 13, iss. 19, art. 4283. <https://doi.org/10.3390/ma13194283>
- Qiu L., Ding F. Understanding single-walled carbon nanotube growth for chirality controllable synthesis. *Acc. Mater. Res.*, 2021, vol. 2, iss. 9, pp. 828–841. <https://doi.org/10.1021/accountsmr.1c00111>
- Marana N. L., Noel Y., Sambrano J. R., Ribaldone C., Casassa S. *Ab initio* modeling of multiwall: A general algorithm first applied to carbon nanotubes. *J. Phys. Chem. A*, 2021, vol. 125, iss. 18, pp. 4003–4012. <https://doi.org/10.1021/acs.jpca.1c01682>
- Li M., Liu X., Zhao X., Yang F., Wang X., Li Y. Metallic catalysts for structure-controlled growth of single-walled carbon nanotubes. *Top Curr Chem.*, 2017, vol. 375, art. 29. <https://doi.org/10.1007/s41061-017-0116-9>
- Elstner M., Seifert G. Density functional tight binding. *Phil. Trans. R. Soc. A*, 2014, vol. 372, iss. 2011, art. 20120483. <https://doi.org/10.1098/rsta.2012.0483>
- Hamada N., Sawada Si., Oshiyama A. New one-dimensional conductors: Graphitic microtubules. *Phys. Rev. Lett.*, 1992, vol. 68, pp. 1579–1581. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.68.1579>
- Datta S. *Quantum Transport: Atom to Transistor*. Cambridge, Cambridge University Press, 2012. xiv+404 p. <https://doi.org/10.1017/CBO9781139164313>
- Gerasimenko A. Yu., Kitsyuk E. P., Kuksin A. V., Ryazanov R. M., Savitskiy A. I., Savelyev M. S., Pavlov A. A. Influence of laser structuring and barium nitrate treatment on morphology and electrophysical characteristics of vertically aligned carbon nanotube arrays. *Diam. Relat. Mater.*, 2019, vol. 96, pp. 104–111. <https://doi.org/10.1016/j.diamond.2019.04.035>
- Glukhova O. E., Kolesnichenko P. A., Slepchenkov M. M. Mechanical properties of multi-walled carbon chiral nanotubes and their bundles: *In silico* studies within the density functional theory approach in



- the tight-binding approximation. *Physics of the Solid State*, 2025, vol. 67, iss. 5, pp. 897–903 (in Russian). <https://doi.org/10.61011/FTT.2025.05.60756.105-25>
23. Ghavamian A., Rahmandoust M., Öchsner A. A numerical evaluation of the influence of defects on the elastic modulus of single and multi-walled carbon nanotubes. *Comput. Mater. Sci.*, 2012, vol. 62, pp. 110–116. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2012.05.003>
24. Treacy M., Ebbesen T., Gibson J. Exceptionally high Young's modulus observed for individual carbon nanotubes. *Nature*, 1996, vol. 381, pp. 678–680. <https://doi.org/10.1038/381678a0>
25. Pantano A. Effects of mechanical deformation on electronic transport through multiwall carbon nanotubes. *Int. J. Solids Struct.*, 2017, vol. 122–123, pp. 33–41. <https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2017.05.041>
26. Xiang Y., Zhang L., Liu C. Electrical properties of carbon nanotubes: From individual to assemblies. *Nanomaterials*, 2025, vol. 15, iss. 15, art. 1165. <https://doi.org/10.3390/nano15151165>
27. Ahlskog M., Herranen O., Leppaniemi J., Mtsuko D. Conduction properties of semiconductive multiwalled carbon nanotubes. *Eur. Phys. J. B*, 2022, vol. 95, iss. 8, art. 130. <https://doi.org/10.1140/epjb/s10051-022-00392-z>
28. Mtsuko D., Koshio A., Yudasaka M., Iijima S., Ahlskog M. Measurements of the transport gap in semiconducting multiwalled carbon nanotubes with varying diameter and length. *Phys. Rev. B*, 2015, vol. 91, art. 195426. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.91.195426>
29. Kim H. I., Wang M., Lee S. K., Kang J., Nam J. D., Ci L., Suhr J. Tensile properties of millimeter-long multiwalled carbon nanotubes. *Sci Rep.*, 2017, vol. 7, art. 9512. <https://doi.org/10.1038/s41598-017-10279-0>
30. Pugno N. M. Young's modulus reduction of defective nanotubes. *Appl. Phys. Lett.*, 2007, vol. 90, iss. 4, art. 043106. <https://doi.org/10.1063/1.2425048>

Поступила в редакцию 04.11.2025; одобрена после рецензирования 10.12.2025; принята к публикации 19.12.2025; опубликована 31.03.2026

The article was submitted 04.11.2025; approved after reviewing 10.12.2025; accepted for publication 19.12.2025; published 31.03.2026