

УДК 538.911

ТРЕХМЕРНАЯ СТРУКТУРА МНОГОСЛОЙНЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК

Е. А. Беленков

Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

belenkov@csu.ru

В статье исследованы особенности структуры многослойных углеродных нанотрубок. В результате установлено, что возможно существование пяти типов многослойных нанотрубок: $(n, 0)$, (n, n) , $(5n, n)$, $(5n, 2n)$ и $(10n, 3n)$, составленных из трубок одинаковой хиральности. Степени хиральности этих типов $k = 0, 0.4, 0.6, 0.8, 1$ (степень хиральности произвольной нанотрубки (n, m) находится как $k = m/n$). Межтрубочные расстояния для каждого из подтипов являются константами: 0.3528, 0.35927, 0.34842, 0.34174 и 0.33948 нм. Для многослойных нанотрубок, составленных из трубок произвольной хиральности, межтрубочные расстояния не являются константой и варьируются в широком диапазоне от 0.3354 до 0.345 нм. Расчёты межтрубочных взаимодействий, выполненных методом атом-атомного потенциала, показали, что разница в энергиях связи при различных взаимных сдвигах и разворотах вложенных нанотрубок незначительна (менее 1% полной энергии связи), что должно приводить к отсутствию порядка в их взаимном расположении.

Ключевые слова: многослойная углеродная нанотрубка, структура, молекулярная механика, метод атом-атомного потенциала, энергия связи.

Введение

В углеродных материалах, состоящих из атомов углерода в трёхкоординированных (sp^2 -гибридизированных) состояниях, образуются слоистые структуры [1; 2]. Характеристикой степени упорядочения таких структур принято считать межслоевое расстояние d_{002} . Особенностью ряда углеродных материалов: коксов, углеродных волокон, частиц сажи и др. — является отличие значения межслоевого расстояния от величины, характерной для графита [2–7]. В многослойных углеродных нанотрубках также фиксируют расстояние $d_{002} \sim 0.34\text{--}0.36$ нм, что больше значения, наблюдаемого в структуре идеального графита, — 0.3354 нм [8–13]. Причина этого отличия неясна, поэтому задачу данной работы составил модельный анализ трёхмерной структуры многослойных углеродных нанотрубок.

1. Образование многослойных углеродных нанотрубок

Нанотрубки можно синтезировать различными способами: при термическом распылении, окислении, электролитическом синтезе, лазерном распылении и другими методами [14]. До сих пор нет единого мнения относительно механизма образования нанотрубок [15], однако модельно формирование нанотрубок можно рассмотреть как процесс сворачивания графитовой плоскости в трубку (рис. 1, 2).

Нанотрубки в зависимости от ориентации ковалентных связей вдоль оси трубки характеризуются различной хиральностью, которая определяется двумя индексами (m, n) , задающими трансляции по осям x и y , угол между которыми составляет 60° (рис. 1). Индексы задают размер слоя и направление сворачивания. Так как одинаковое направление сворачивания может быть задано различными комбинациями индексов (например, $(2,1)$, $(4,2)$, $(6,3)$ и т. д.), то можно определить минимальное значение индексов, задающих направление (m_0, n_0) . Тогда любая нанотрубка такой хиральности может быть задана как (m_0j, n_0j) , где j — количество периодических трансляций, задающее размер сворачиваемого слоя ($j = 1, 2, \dots$).

Два основных подтипа нанотрубок, отличающихся ориентацией углерод-углеродных связей относительно оси нанотрубки, получаются сворачиванием графитовой плоскости вдоль направлений, задаваемых индексами (j, j) и $(j, 0)$. Эти структуры называют *armchair* и *zigzag* конфигурациями соответственно. Ориентация ковалентных связей атомной плоскости вдоль оси нанотрубки для этих структур аналогична ориентации связей вдоль оси углеродных волокон, получаемых из гидратцеллюлозы и полиакрилонитрила (ГТЦ- и ПАН-структуры) [16]. Степень хиральности нанотрубок удобно определять в виде числа

$$k = n/m, \quad (1)$$

область определения этого параметра от 0 до 1.

Допуская, что связи между атомами имеют постоянную длину $a = 0.1422$ нм и что нанотрубку можно получить путём сворачивания плоскости, к которой жёстко «пришиты» связи между атомами, т. е. они изгибаются вместе с ней по поверхности цилиндра, диаметр нанотрубок можно найти по формуле [14]

$$D = \sqrt{m^2 + n^2 + mn} \frac{\sqrt{3}a}{\pi}. \quad (2)$$

Межтрубочное расстояние между вложенными нанотрубками одинаковой хиральности найдём как

$$d_{002} = \frac{D_{\text{внеш}} - D_{\text{внутр}}}{2}.$$

Тогда, используя выражения (2) и (1), получим, что

$$d_{002} = \frac{\sqrt{3}a}{\pi} (j'' - j') \sqrt{m_0^2 + n_0^2 + m_0 n_0} \quad \text{или} \quad d_{002} = \frac{\sqrt{3}a}{\pi} (j'' - j') m_0 \sqrt{1 + k + k^2}, \quad (3)$$

где j' и j'' — количество периодических трансляций графитового слоя вдоль направления, задаваемого индексами (m_0, n_0) , для внутренней и внешней трубок соответственно. Вводя обозначение $f = j'' - j'$, где $f = 1, 2, \dots$, получаем, что межтрубочное расстояние для многослойных нанотрубок являются функцией степени хиральности и разницы в количестве элементарных трансляций внешнего и внутреннего слоя (рис. 2). Так как значения межслоевых расстояний d_{002} в углеродных материалах лежат в интервале от 0.3354 нм до 0.36 нм [2–7], величина f должна быть таковой, чтобы это условие выполнялось. Путём компьютерного перебора различных значений индексов, задающих хиральность нанотрубок в диапазоне от 1

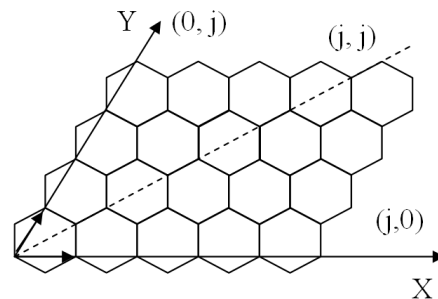


Рис. 1. Модельный механизм формирования углеродных нанотрубок различной хиральности — при сворачивании графенового слоя в направлении, задаваемом индексами (m, n)

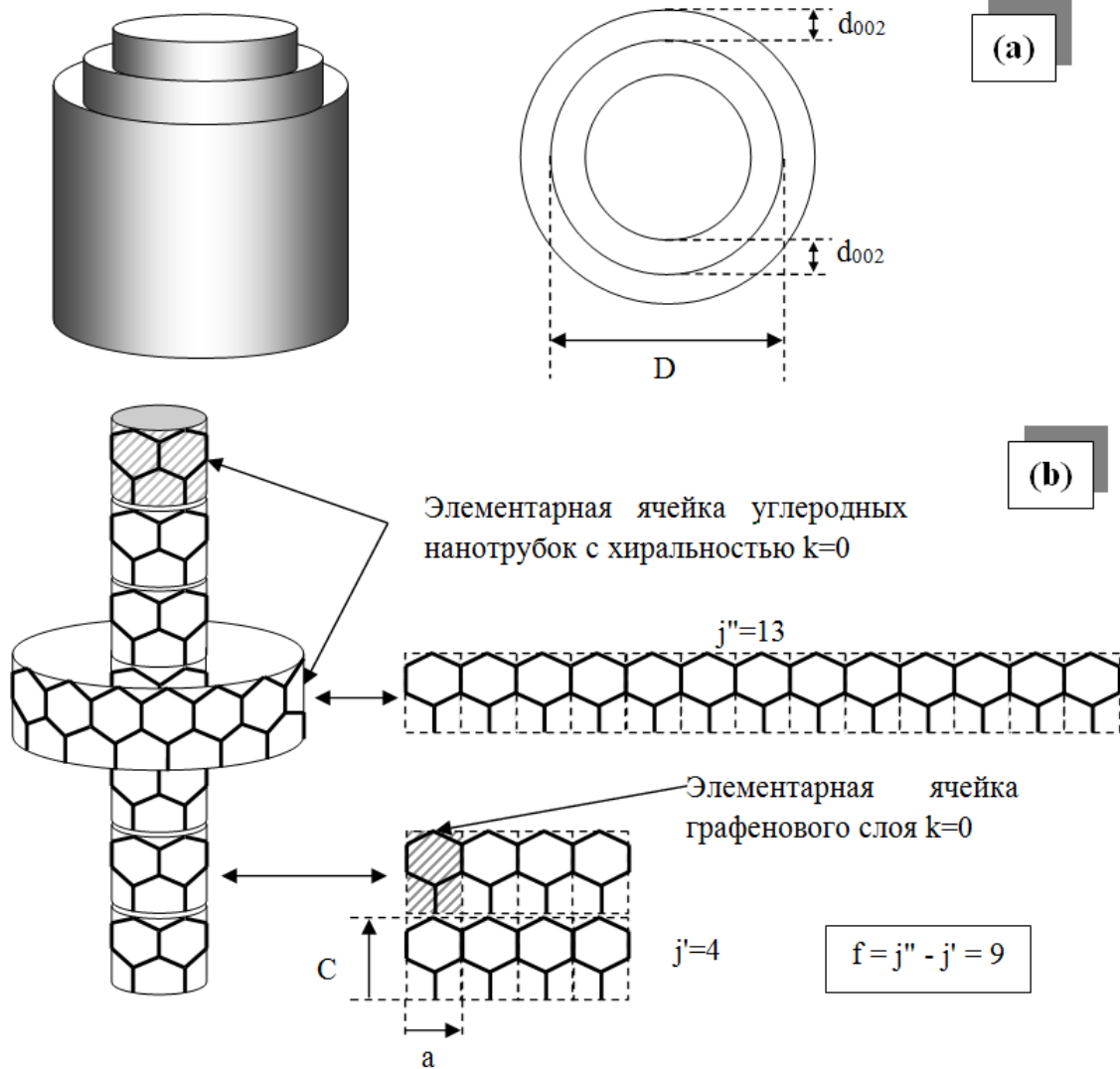


Рис. 2. Многослойные углеродные нанотрубки: (а) схематическое изображение трёхслойной нанотрубки и её сечения; (б) иллюстрация схемы модельных расчётов для двухслойной нанотрубки с хиральностью $k = 0$ (zigzag конфигурация)

до 10 000, установлено, что существует всего 16 значений k , для которых при $f = 1$ межтрубочное расстояние не превышает 0.36 нм (см. примеры в табл. 1).

Таблица 1

Индексы (m_0, n_0) , степень хиральности k , параметр f_0 для углеродных нанотрубок, из которых возможно формирование многослойных углеродных нанотрубок, в которых все отдельные нанотрубки имеют одинаковую хиральность и фиксированные значения межплоскостных расстояний d_{002}

Нанотрубка типа	m_0	n_0	$k = n_0/m_0$	d_{002} , нм ($f = 1$)	d_{002} , нм ($f = f_0$)	f_0
$(n, 0)$	1	0	0	0.03920	0.35280	9
(n, n)	2	1	1	0.06790	0.33948	5
$(5n, n)$	5	1	0.4	0.17964	0.35927	2
$(5n, 2n)$	5	2	0.8	0.17087	0.34174	2
$(10n, 3n)$	10	3	0.6	0.34842	0.34842	1

Если многослойная трубка составлена из трубок различной хиральности, то межтрубочное расстояние d_{002} не является константой (табл. 2). Однако и в этом случае оно больше значения, характерного для графита, и варьируется в достаточно широком интервале (от $d_{002}(\min)$ до $d_{002}(\max)$). Причём интервал, в котором изменяется значение межтрубочного расстояния, зависит от того, какая трубка

взята в качестве исходной (табл. 3).

Таблица 2

Возможная структура многослойной нанотрубки, состоящей из нанотрубок различной хиральности (для первой нанотрубки минимального диаметра $k = 0.5$)

Номер нанотрубки	m	n	$k = n/m$	D , нм	d_{002} , нм
1	4	2	1	0.35062	—
2	13	1	0.15384	1.02223	0.33580
3	21	6	0.57142	1.71231	0.34504
4	30	5	0.33334	2.38448	0.33608
5	36	15	0.83334	3.05765	0.33658
6	47	8	0.34042	3.73786	0.34010
7	55	12	0.43636	4.41351	0.33782
8	59	27	0.91526	5.08703	0.33676
9	71	19	0.53522	5.76236	0.33767
10	82	3	0.07318	6.43321	0.33542
11	84	34	0.80952	7.10473	0.33576
12	99	6	0.12122	7.77597	0.33562

Таблица 3

Диапазоны изменения межплоскостных расстояний d_{002} в различных многослойных углеродных нанотрубках, содержащих по 20 слоёв

Первая нанотрубка				$d_{002}(\min)$, нм	$d_{002}(\max)$, нм
m	n	$k = n/m$	D , нм		
5	0	0	0.35062	0.33541	0.33730
10	0	0	0.78401	0.33548	0.34032
15	0	0	1.17602	0.33553	0.34378
20	0	0	1.56803	0.33540	0.33852
4	2	1	0.35062	0.33542	0.34504
8	4	1	0.70124	0.33549	0.34402
10	5	1	0.87655	0.33540	0.34280
12	6	1	1.05186	0.33542	0.33801

Однако приближение изогнутых связей допустимо лишь в первом приближении, на самом деле связи остаются прямыми. В этом случае нанотрубки будут представлять собой в сечении, перпендикулярном их оси, многогранники, вписанные в окружности (рис. 3). Тогда, например, для нанотрубок хиральности 0 диаметры окружностей можно найти по формуле

$$D|_{k=0} = \frac{\sqrt{3}a}{2 \sin \frac{\pi}{2j}}.$$

Учитывая, что для нанотрубок хиральностью 0 разница в количестве элементарных трансляций слоёв, образующих внешнюю и внутреннюю нанотрубки, должна составлять $f = 9$, соответствующие межтрубочные расстояния будут

$$d_{002}|_{k=0} = 0.25\sqrt{3}a \left(\frac{1}{\sin \frac{\pi}{2(j'+9)}} - \frac{1}{\sin \frac{\pi}{2j'}} \right).$$

Их величина соответствует значениям, получаемым по формуле (3) лишь при больших $j' > 30$, в области малых значений j' межтрубочные расстояния меньше предсказываемого в приближении изогнутых связей. Диапазон изменения d_{002} — от 0.345

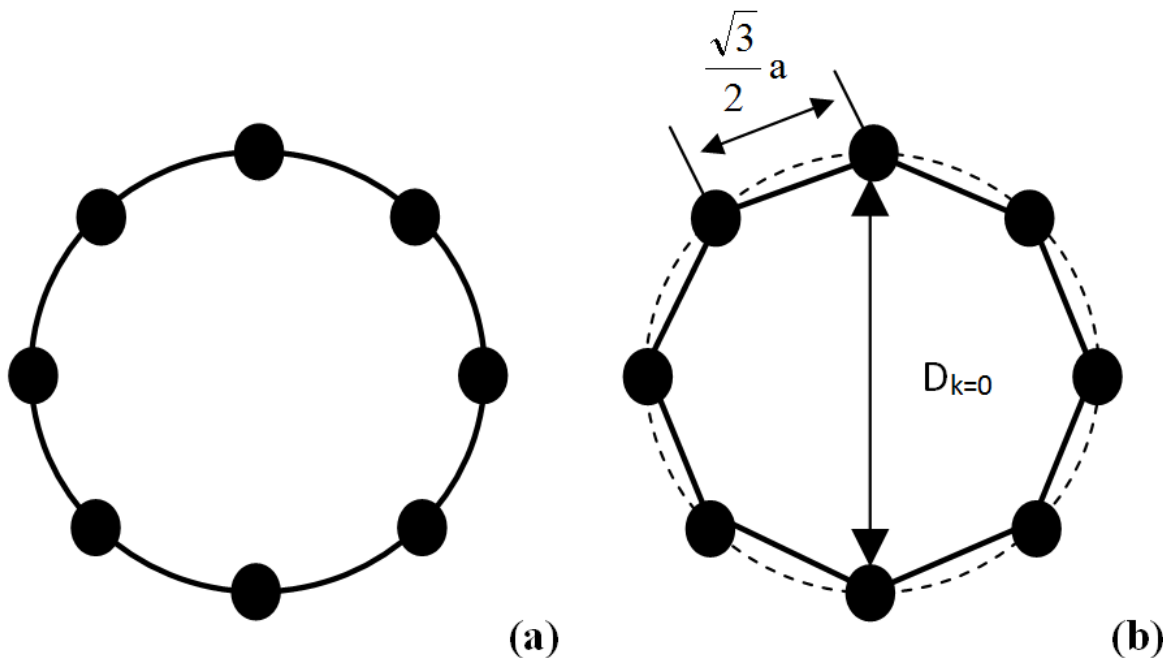


Рис. 3. Схематическое изображение сечения углеродной нанотрубки (4,0): (а) — в приближении изогнутых по окружности межатомных связей; (б) — в приближении прямых межатомных связей

до 0.3528 нм. Для других типов многослойных нанотрубок межтрубочные расстояния для малых значений j' также меньше предсказываемого по формуле (3) и стремятся к этому пределу при $j' > 30$.

2. Расчёт межтрубочных взаимодействий

Таким образом, межтрубочные расстояния определяются геометрией формирующихся трубок и имеют значения, отличные от межслоевых расстояний, характерных для графита. Однако взаимное пространственное расположение вложенных нанотрубок определяется ещё двумя параметрами, характеризующими относительный сдвиг и разворот трубок. Исследовать энергетически выгодные значения этих параметров можно методом атом-атомного потенциала [17], находя энергию Ван-дер-Ваальсовского взаимодействия двух вложенных трубок и допуская, что каждый из атомов вложенной трубки взаимодействует с каждым атомом внешней трубки с энергией

$$E = -Ar^{-6} + Be^{-\alpha r},$$

где r — расстояние между атомами. Коэффициенты уравнения A , B и α , определяемые по эмпирическим данным достаточно точно, задают силы межмолекулярного взаимодействия в системе углерод-углерод [17].

Моделирование было выполнено для вложенных нанотрубок одинаковой хиральности ($k = 0$ и $k = 1$). Предполагалось, что вложенные трубки имеют бесконечную длину. Так как полная энергия Ван-дер-Ваальсовского взаимодействия двух вложенных нанотрубок бесконечного размера так же бесконечна, то расчёт заключался в поиске удельной энергии Ван-дер-Ваальсовских связей, приходящейся на элементарную ячейку внешней нанотрубки (рис. 2 (b)). Действительно, полная энергия взаимодействия вложенных нанотрубок будет равна сумме удельных энергий взаимодействия элементарных ячеек одной из нанотрубок, поэтому минимум полной энергии будет в том случае, когда минимальна удельная энергия взаимодействия. Удельную энергию взаимодействия, приходящуюся на элементарную ячейку нанотрубки, необходимо находить как сумму энергий взаимодействия каждого

атома элементарной ячейки внешней нанотрубки со всеми атомами внутренней. В этом случае получается также необходимо провести суммирование бесконечного числа слагаемых. Однако быстрое убывание энергии взаимодействия с увеличением расстояния позволяет ограничиться расчётами энергии взаимодействия фрагментов трубок конечного размера (для $k = 0 - 7$ элементарных ячеек нанотрубки (рис. 2 (b)), для $k = 1 - 11$ элементарных ячеек нанотрубки). Действительно, увеличение длины внутренней нанотрубки более указанных выше значений приводит к изменению удельной энергии Ван-дер-Ваальсовского взаимодействия менее чем на 0.1%.

Так как межтрубное расстояние является величиной постоянной, зависящей только от диаметра трубок, то изменение удельной энергии взаимодействия прослеживалось в зависимости от их относительного сдвига вдоль оси трубок на расстояния от 0 до 1 периода трансляции C :

$$C|_{k=0.5} = \sqrt{3}a, \quad C|_{k=0} = 3a,$$

с шагом $C/10$, а также в зависимости от угла относительного разворота φ . Угол φ изменялся от 0 до 2θ ($\theta = 360^\circ/j''$ — угол, при котором относительный разворот двух вложенных нанотрубок снова становился эквивалентен нулевому повороту $\theta = 360^\circ/j''$) с шагом 2 градуса.

Расчёты были выполнены для j' от 2 до 100. Полученные данные представляли в виде энергетических картин, каждая точка на которых позволяет определить удельную энергию Ван-дер-Ваальсовского взаимодействия двух вложенных нанотрубок при соответствующих значениях взаимного сдвига и разворота. Две типичные энергетические картины из 198 полученных приведены на рис. 4 и 5.

В результате выполненных модельных расчётов установлено, что при относительных сдвигах и разворотах вложенных трубок энергия взаимодействия изменяется незначительно (<1%). Возможны практически безактивационные относительные смещения вложенных нанотрубок. Для нанотрубок с хиральностью $k = 1$ это сдвиги вдоль оси трубки (рис. 4), а для нанотрубок с $k = 0$ — повороты (рис. 5). Таким образом, относительное расположение вложенных нанотрубок произвольно — трёхмерная упорядоченность расположения углеродных атомов отсутствует. По-видимому, именно этим обусловлено подобие рентгенограмм многослойных нанотрубок рентгенограммам турбостратного углерода, для которого характерно наличие упорядоченного расположения углеродных атомов в слоях и отсутствие порядка во взаимном расположении слоёв. Однако в случае нанотрубок отличие межтрубного расстояния d_{002} от характерного для графита обусловлено геомет-

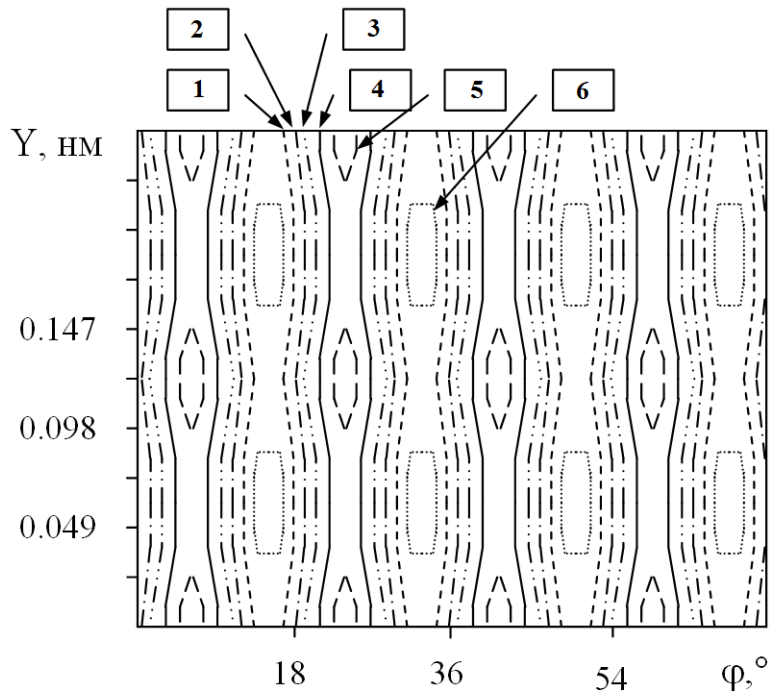


Рис. 4. Изменение энергии связи двух вложенных нанотрубок, с хиральностью $k = 0.5$, диаметрами 0.679 и 1.358 нм в зависимости от относительного сдвига и разворота. Энергия связи (Дж/моль): 1 — 66 261; 2 — 66 257; 3 — 66 253; 4 — 66 249; 5 — 66 245; 6 — 66 265

рией слоёв, скрученных в трубки, а не минимумом энергии межслоевого взаимодействия, как в случае мелкодисперсного углерода или углеродных волокон [3; 6; 16; 18; 19].

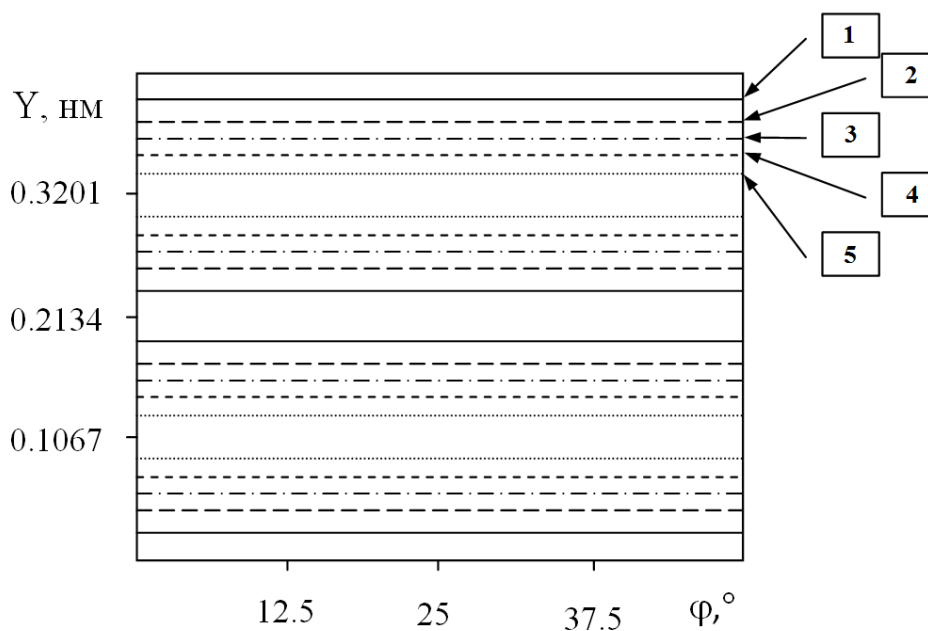


Рис. 5. Изменение энергии связи двух вложенных нанотрубок, с хиральностью $k = 0$, диаметрами 0.392 и 1.0976 нм в зависимости от относительного сдвига и разворота. Энергия связи (Дж/моль): 1 — $56\,127$; 2 — $56\,161$; 3 — $56\,195$; 4 — $56\,229$; 5 — $56\,263$

Выводы

Возможно, лишь пять типов многослойных нанотрубок, составленных из трубок одинаковой хиральности: $(n, 0)$, (n, n) , $(5n, n)$, $(5n, 2n)$ и $(10n, 3n)$. Хиральности трубок, соответствующих этим типам: 0 , 0.4 , 0.6 , 0.8 , 1 . Межтрубочное расстояние d_{002} в таких многослойных углеродных нанотрубках имеют значения 0.3528 , 0.35927 , 0.34842 , 0.34174 , 0.33948 нм соответственно. В результате геометрических ограничений межтрубочные расстояния в многослойных нанотрубках, составленных из трубок разной хиральности, варьируются в широком интервале (от 0.3354 до 0.345 нм) и превышают значение межслоевого расстояния, характерное для графита. При относительных сдвигах и разворотах вложенных нанотрубок изменение энергии связи незначительно, что обуславливает отсутствие трёхмерной упорядоченности во взаимном расположении вложенных нанотрубок и подобие структуры многослойных нанотрубок структуре турбостратного углерода.

Список литературы

1. Беленков, Е. А. Классификация структурных разновидностей углерода / Е. А. Беленков, В. А. Грешняков // Физика твёрдого тела. — 2013. — Т. 55, № 8. — С. 1640–1650.
2. Iwashita, N. Relations between structural parameters obtained by X-Ray powder diffraction of various carbon materials / N. Iwashita, M. Inagaki // Carbon. — 1993. — Vol. 31, № 7. — P. 1107–1113.
3. Беленков, Е. А. Формирование структуры графита в мелкокристаллическом углероде / Е. А. Беленков // Неорган. материалы. — 2001. — Т. 37, № 9. — С. 1094–1101.
4. Беленков, Е. А. Структура кристаллов идеального карбина / Е. А. Беленков, В. В. Мавринский // Кристаллография. — 2008. — Т. 53, № 1. — С. 83–87.

5. The effects of sulfur and other impurities on carbon-graphite transitions / V. A. Tyumentsev, E. A. Belenkov, G. P. Shveikin, S. A. Podkopaev // Carbon. — 1998. — Vol. 36, № 7–8. — P. 845–853.
6. **Беленков, Е. А.** Влияние размеров кристаллов на межатомные расстояния в дисперсном углероде / Е. А. Беленков, Е. А. Карнаухов // Физика твёрдого тела. — 1999. — Т. 41, № 4. — С. 744–747.
7. **Беленков, Е. А.** Структура и электронные свойства кристаллов, состоящих из графеновых слоёв L6, L4-8, L3-12 и L4-6-12 / Е. А. Беленков, А. Е. Коченгин // Физика твёрдого тела. — 2015. — Т. 57, № 10. — С. 2071–2078.
8. **Monthieux, M.** The graphitizability of fullerenes and related textures / M. Monthieux, J. G. Lavin // Carbon. — 1994. — Vol. 32, № 2. — P. 335–343.
9. High resolution electron microscopy studies in carbon soots / M. Miki-Yoshida [et al.] // Carbon. — 1994. — Vol. 32, № 2. — P. 231–246.
10. Interlayer interaction of two graphene sheets as a model of double-layer carbon nanotubes / K. Tanaka, H. Aoki, H. Ago, T. Yamabe, K. Okahara // Carbon. — 1997. — Vol. 35, № 1. — P. 121–125.
11. **Belenkov, E. A.** Scroll structure of carbon nanotubes obtained by the hydrothermal synthesis / E. A. Belenkov, F. K. Shabiev // Письма о материалах. — 2015. — Т. 5, № 4 (20). — С. 459–462.
12. Дефектные электронные состояния в углеродных нанотрубках и графите по данным NEXAFS-спектроскопии / М. М. Бржезинская, Е. М. Байтингер, Е. А. Беленков, Л. М. Свирская // Физика твёрдого тела. — 2013. — Т. 55, № 4. — С. 779–783.
13. **Беленков, Е. А.** Закономерности структурного упорядочения многослойных углеродных нанотрубок / Е. А. Беленков // Изв. Челяб. науч. центра УрО РАН. — 2001. — № 1. — С. 51–60.
14. **Елецкий, А. В.** Углеродные нанотрубки / А. В. Елецкий // Успехи физ. наук. — 1997. — Т. 167, № 9. — С. 945–972.
15. **Лозовик, Ю. Е.** Образование и рост углеродных наноструктур — фуллеренов, наночастиц, нанотрубок и конусов / Ю. Е. Лозовик, А. М. Попов // Успехи физ. наук. — 1997. — Т. 167, № 7. — С. 751–774.
16. **Беленков, Е. А.** Моделирование процесса формирования кристаллической структуры углеродного волокна / Е. А. Беленков // Кристаллография. — 1999. — Т. 44, № 5. — С. 808–813.
17. **Китайгородский, А. И.** Молекулярные кристаллы / А. И. Китайгородский. — М. : Наука, 1971. — 424 с.
18. **Беленкова, Э. И.** Моделирование структурной трансформации углеродных материалов, обусловленное изменением размеров нанокристаллов / Э. И. Беленкова // Новые технологии в материаловедении: материалы I науч.-практ. конф. с междунар. участием / отв. ред. У. Ш. Шаяхметов. — Уфа : Башк. гос. ун-т, 2015. — С. 180–181.
19. **Беленков, Е. А.** Моделирование процессов графитизации аморфного углерода / Е. А. Беленков, А. И. Шейнкман // Изв. вузов. Физика. — 1991. — № 10. — С. 67–69.

Поступила в редакцию 24.10.2016

После переработки 05.11.2016

Сведения об авторе

Беленков Евгений Анатольевич, доктор физико-математических наук, профессор, профессор кафедры физики конденсированного состояния, Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия; e-mail: belenkov@csu.ru.

3D STRUCTURE OF MULTILAYER CARBON NANOTUBES**E.A. Belenkov***Chelyabinsk State University, Chelyabinsk, Russia*
belenkov@csu.ru

The multiwall carbon nanotube structures have been investigated in the paper. As a result, it is established that there exists five types $(n, 0)$, (n, n) , $(5n, n)$, $(5n, 2n)$, $(10n, 3n)$ of multiwalled carbon nanotubes, composed of nanotubes with identical chirality. Degrees of these types chirality are $k = 0, 0.4, 0.6, 0.8, 1$ (for nanotube (n, m) k is equal to m/n). The interlayer distance d_{002} for each of the subtypes are constants 0.3528, 0.35927, 0.34842, 0.34174 and 0.33948 nm. For multilayer nanotubes composed of tubes with arbitrary chiralities intertubes distances are no constant and vary over a wide range from 0.3354 to 0.345 nm. Calculations of intertubes interactions, performed by the atom-atom potential method showed that the difference in the binding energies in various mutual shifts and turns of nested nanotubes is negligible (less than 1% of the total binding energy). It should lead to a lack of an order in their mutual arrangement.

Keywords: *multi-walled carbon nanotube, structure, molecular mechanics, atom-atom potential method, binding energy.*

References

1. **Belenkov E.A., Greshnyakov V.A.** Classification of structural modifications of carbon. *Physics of the Solid State*, 2013, vol. 55, no. 8, pp. 1754–1764.
2. **Iwashita N., Inagaki M.** Relations between structural parameters obtained by X-Ray powder diffraction of various carbon materials. *Carbon*, 1993, vol. 31, no. 7, pp. 1107–1113.
3. **Belenkov E.A.** Formation of graphite structure in carbon crystallites. *Inorganic Materials*, 2001, vol. 37, no. 9, pp. 928–934.
4. **Belenkov E.A., Mavrinsky V.V.** Crystal structure of a perfect carbine. *Crystallography Reports*, 2008, vol. 53, no. 1, pp. 83–87.
5. **Tyumentsev V.A., Belenkov E.A., Shveikin G.P., Podkopaev S.A.** The effects of sulfur and other impurities on carbon-graphite transitions. *Carbon*, 1998, vol. 36, no. 7–8, pp. 845–853.
6. **Belenkov E.A., Karnaukhov E.A.** Influence of crystal dimensions on interatomic distances in dispersed carbon. *Physics of the Solid State*, 1999, vol. 41, no. 4, pp. 672–675.
7. **Belenkov E.A., Kochengin E.A.** Structure and electronic properties of crystals consisting of graphene layers L6, L4–8, L3–12, and L4–6–12. *Physics of the Solid State*, 2015, vol. 57, no. 10, pp. 2126–2133.
8. **Monthieux M., Lavin J.G.** The graphitizability of fullerenes and related textures. *Carbon*, 1994, vol. 32, no. 2, pp. 335–343.
9. **Miki-Yoshida M. [et al.]** High resolution electron microscopy studies in carbon soots. *Carbon*, 1994, vol. 32, no. 2, pp. 231–246.
10. **Tanaka K., Aoki H., Ago H., Yamabe T., Okahara K.** Interlayer interaction of two graphene sheets as a model of double-layer carbon nanotubes. *Carbon*, 1997, vol. 35, no. 1, pp. 121–125.
11. **Belenkov E.A., Shabiev F.K.** Scroll structure of carbon nanotubes obtained by the hydrothermal synthesis. *Pis'ma o materialakh [Letters on Materials]*, 2015, vol. 5, no. 4 (20), pp. 459–462.

12. **Brzhezinskaya M.M., Baitinger E.M., Belenkov E.A., Svirskaya L.M.** Defect electron states in carbon nanotubes and graphite from the NEXAFS spectroscopy data. *Physics of the Solid State*, 2013, vol. 55, no. 4, pp. 850–854.
13. **Belenkov E.A.** Zakonomernosti strukturnogo uporyadocheniya mnogoslonykh uglerodnykh trubok [Patterns of structural ordering of multiwalled carbon nanotubes]. *Izvestiya Chelyabinskogo nauchnogo tsentra UrO RAN* [Proceedings of the Chelyabinsk Scientific Center of UB RAS], 2001, no. 1, pp. 51–60. (In Russ.).
14. **Eletskii A.V.** Carbon nanotubes. *Uspekhi — Physics*, 1997, vol. 40, pp. 899–924.
15. **Lozovik Yu.E., Popov A.M.** Formation and growth of carbon nanostructures: fullerenes, nanoparticles, nanotubes and cones. *Uspekhi — Physics*, 1997, vol. 40, pp. 717–737.
16. **Belenkov E.A.** Modeling of formation of a crystal structure in a carbon fiber. *Crystallography Reports*, 1999, vol. 44, no. 5, pp. 749–754.
17. **Kitaigorodsky A.I.** *Molecular crystals and Molecules*. New York, Academic Press, 1973. 553 p.
18. **Belenkova E.I.** Modelirovaniye strukturnoy transformatsii uglerodnykh materialov, obuslovennoye izmeneniyem razmerov nanokristallov [Simulation of carbon materials structural transformation due to a changing of nanocrystals sizes]. *Novye tekhnologii v materialovedenii* [New technologies in materials science]. Ufa, Bashkir State University Publ., 2015. Pp. 180–181. (In Russ.).
19. **Belenkov E.A., Sheinkman A.I.** Modeling the graphitization of amorphous carbon. *Soviet Physics Journal*, 1991, vol. 34, no. 10, pp. 903–905.

Accepted article received 24.10.2016

Corrections received 05.11.2016