

УДК 538.9

Оригинальная статья

Исследование влияния борных примесей замещения в углеродных нанотрубках на процесс взаимодействия полиметилметакрилата с бороуглеродными нанотрубками

Л.С. Элбакян, И.В. Запороцкова

ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный университет»

400062, Россия, Волгоград, Университетский проспект, 100

lusniak-e@yandex.ru

DOI: 10.26456/pcascnn/2025.17.906

Аннотация: Проведен анализ влияния борных примесей на адсорбционную активность модифицированных бором углеродных нанотрубок в отношении метилметакрилата. Исследование по адсорбции метилметакрилата может внести вклад в понимание механизмов сорбции и помочь в разработке новых функциональных материалов. Для полноты картины в рамках исследования изучено влияние концентрации бора (от ~16% до 50%) на конечные свойства композита. Для прогнозирования возможности создания стабильного комплекса «полимер-углеродная нанотрубка» выполнено теоретическое исследование с применением квантово-химического метода функционала плотности. Результаты сравнивались с ранее полученными результатами исследования чистых углеродных нанотрубок со структурной единицей метилметакрилата. Установлено, что молекулы полиметилметакрилата адсорбируются на поверхности бороуглеродной нанотрубки с значительно большей энергией (~45-50%), чем на чистой углеродной нанотрубке. Результаты расчётов электронной структуры и электростатических потенциалов показали, что в ходе взаимодействия между бороуглеродной нанотрубкой и мономером метилметакрилата происходит значительное перераспределение электронной плотности. Это выражается в увеличении положительного заряда на атоме бора и росте отрицательного заряда на карбонильном кислороде мономера, что свидетельствует о возникновении сильного донорно-акцепторного и кулоновского притяжения между ними. В результате было смоделировано строение комплекса бороуглеродной нанотрубки с метилметакрилатом. Его устойчивость обеспечивается физической адсорбцией, сопровождающейся значительным кулоновским вкладом. Таким образом, бороуглеродные нанотрубки, будучи полупроводниками *p*-типа, могут обеспечить лучший контроль над электропроводностью композита и создать новые пути для применения в гибкой электронике и сенсорах. Также можно ожидать существенного увеличения прочности на разрыв, модуля упругости и ударной вязкости композита при одинаковой степени наполнения благодаря эффективной передаче нагрузки с полимерной матрицы на армирующие бороуглеродные нанотрубки.

Ключевые слова: полиметилметакрилат, бороуглеродные нанотрубки, полимерные нанокомпозиты, метод функционала плотности, адсорбционное взаимодействие, электростатический потенциал.

Элбакян Лусине Самвеловна – к.ф.-м.н., доцент кафедры судебной экспертизы и физического материаловедения Института приоритетных технологий ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный университет»

Запороцкова Ирина Владимировна – д.ф.-м.н., профессор, директор Института приоритетных технологий ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный университет»

Original paper

Investigation of the effect of boron substitution impurities in carbon nanotubes on the interaction of polymethyl methacrylate with borocarbon nanotubes

L.S. Elbakyan, I.V. Zaporotskova

Volgograd State University, Volgograd, Russia

DOI: 10.26456/pcascnn/2025.17.906

Abstract: An analysis of the influence of boron impurities on the adsorption activity of boron-

modified carbon nanotubes with respect to methyl methacrylate have been done. Research on the adsorption of methyl methacrylate can contribute to understanding mechanisms of sorption and help in the development of new functional materials. To complete the picture, the effect of boron concentration (from ~16% to 50%) on the final properties of the composite has been studied in the framework of the study. To predict the possibility of creating a stable «polymer-nanotube» complex, a theoretical study was performed using the quantum chemical density functional theory. The results were compared with the previously obtained results of a study of pure carbon nanotubes with a structural unit of methyl methacrylate. It has been found that polymethyl methacrylate molecules were adsorbed on the surface of nanotubes with significantly higher energy (~45-50%) than on pure nanotubes. The results of calculations of the electronic structure and electrostatic potentials have shown that a significant redistribution of the electron density occurs during the interaction between borocarbon nanotube and the methyl methacrylate monomer. This is expressed in an increase in the positive charge on the boron atom and an increase in the negative charge on the carbonyl oxygen of the monomer, which indicates the emergence of a strong donor-acceptor and Coulomb attraction between them. As a result, the structure of a borocarbon nanotube complex with methyl methacrylate was modeled. Its stability is ensured by physical adsorption, accompanied by a significant Coulomb contribution. Thus, borocarbon nanotubes, being *p*-type semiconductors, can provide better control over the electrical conductivity of the composite and create new ways for use in flexible electronics and sensors. It is also possible to expect a significant increase in the tensile strength, modulus of elasticity and impact strength of the composite with the same degree of filling due to the effective load transfer from the polymer matrix to the reinforcing bunts.

Keywords: polymethyl methacrylate, borocarbon nanotubes, polymer nanocomposites, density functional theory, adsorption interaction, electrostatic potential.

Lusine S. Elbakyan – Ph. D., Docent, Forensic Examination and Physical Materials Science, Volgograd State University, ORCID: 0009-0006-1014-240X

Irina V. Zaporotskova – Dr. Sc., Professor, Director, Institute of Priority Technologies, Volgograd State University, ORCID: 0000-0002-9486-2482

Поступила в редакцию/received: 11.07.2024; после рецензирования/revised: 20.09.2024; принята/accepted 22.09.2024.

1. Введение

Бороуглеродные нанотрубки (БУНТ) – это гибридные наноструктуры, сочетающие атомы бора (*B*) и углерода (*C*) в цилиндрической форме. Они обладают уникальными свойствами, отличающими их от чистых углеродных нанотрубок (УНТ). БУНТ являются перспективным объектом исследований, особенно в областях, где требуется сочетание механической прочности, электронной настраиваемости и химической функциональности. Эти характеристики можно варьировать в зависимости от содержания бора.

Совместимость БУНТ с полимерами и металлами в композитных материалах – ключевой фактор их практического применения. Благодаря наличию атомов бора в структуре, БУНТ обладают улучшенной химической активностью и адгезией по сравнению с обычными УНТ, что делает их перспективными для создания высокопрочных и функциональных композитов. Так, наличие атомов бора повышает химическое взаимодействие с функциональными группами полимеров (например, с $-OH$, $-COOH$), что значительно усиливает адгезионные свойства нанотрубок. Полярные связи *B–C* способствуют более

равномерному распределению в полярных полимерах. Также композиты с БУНТ могут приобретать проводящие свойства, что полезно для антистатических покрытий и гибкой электроники.

Таким образом, выбор подходящего наполнителя имеет решающее значение для планирования проводящего композита для конкретного применения. Добавление проводящих наночастиц в полимерную матрицу может настраивать ее физические или электрические свойства, что широко используется в таких областях, как электромагнитное экранирование, электростатическое рассеивание и системы конденсаторов для хранения заряда.

В качестве объекта исследования выбран полимерный материал на основе полиметилметакрилата (ПММА). Для прогнозирования возможности создания композитных материалов с высокими механическими, проводящими свойствами при малом содержании наполнителя важно понимать механизм взаимодействия мономера метилметакрилата (ММА) с УНТ, содержащими примесные атомы бора. Для этого проведены квантово-химические расчеты с использованием теории функционала плотности (DFT – density functional theory) для понимания сорбционной активности БУНТ в отношении ПММА для создания композитного полимерного материала.

2. Постановка задачи с оценкой верификации результатов

Среди полимеров ПММА является один из наиболее распространенных термопластичных полимеров [1-4]. На сегодняшний день глобальный рынок ПММА оценивается в \$5 млрд с ежегодным ростом ~4-5%, является востребованным материалом в оптике, строительстве, медицине и др. Однако несмотря на преимущества его применение ограничено механическими, термическими и химическими свойствами. Развитие модифицированных составов (ударопрочных, термостойких, самовосстанавливающихся) расширяет потенциал этого полимера.

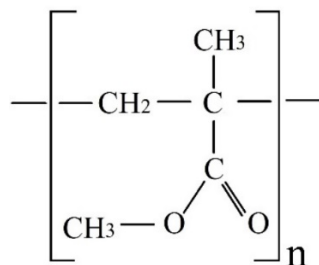


Рис. 1. Структурная формула ПММА.

Допирование ПММА наночастицами позволяет существенно улучшить его механические, проводящие, термические и функциональные свойства, расширяя области применения [5-9]. Однако ключевыми

задачами остаются обеспечение стабильности дисперсии наночастиц. Наши исследования направлены на разработку экономичных и масштабируемых методов получения нанокompозитного ПММА. В качестве нанодобавки предложено использование БУНТ [10, 11]. Проведены детальные теоретические исследования, а именно взаимодействие мономера рассматриваемого полимерного материала с БУНТ, замещенными атомами бора разной концентрации. Рассматривались следующие типы структур (см. рис. 2):

- BC нанотрубки – с 50%-ной концентрацией бора, где каждый второй атом углерода в решетке замещен атомом бора (стехиометрия 1:1).
- BC_3 нанотрубки – с 25%-ной концентрацией бора, что соответствует замещению одного атома бора на три атома углерода.
- BC_5 нанотрубки – с $\approx 16,7\%$ -ной концентрацией бора, при которой замещение происходит в одном из шести атомов углерода в гексагональном фрагменте структуры.

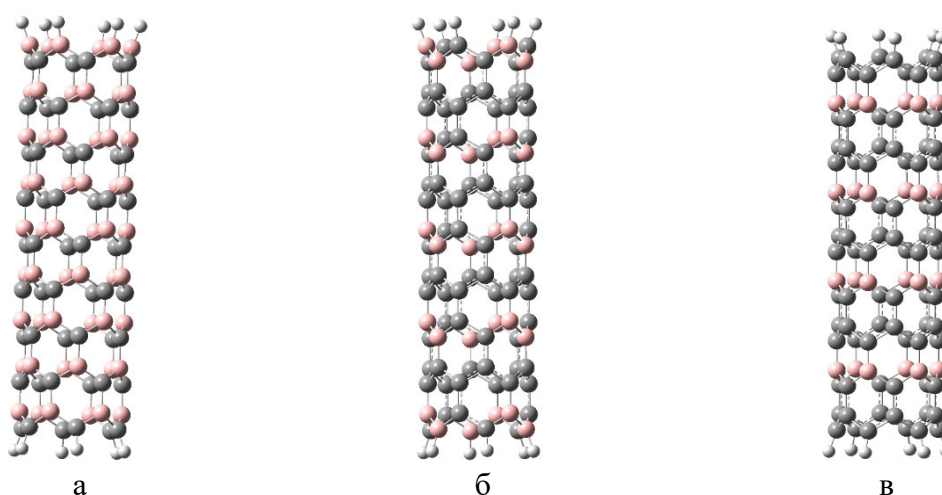


Рис. 2. Кластеры бороуглеродных нанотрубок с различной концентрацией атомов бора: а – BC типа (6,0), б – BC_3 типа (6,0), в – BC_5 типа (6,0).

Данные конфигурации позволяют систематически изучить влияние концентрации бора на электронные, механические и химические свойства нанотрубок, а также комплексов, состоящих из выбранных нанотрубок и полимерных материалов.

Были выполнены квантово-химические расчеты с использованием теории функционала плотности [12–15]. Был использован гибридный функционал B3LYP, известный своей высокой точностью при моделировании молекулярных систем [16, 17]. Для проведения расчетов применялся валентно-расщепленный базисный набор 3-21G. Выбор данного сочетания функционала и базисного набора обусловлен их оптимальным соответствием характеристикам исследуемых систем.

3. Результаты и обсуждение

3.1. Анализ карт электростатического потенциала

Для прогнозирования возможности создания комплекса, состоящего из ПММА и БУНТ, важно правильно определить наиболее реакционноспособный центр выбранного полимера, который смог бы обеспечить прочное связывание с поверхностью нанотрубок. Как известно, электростатический потенциал играет ключевую роль в исследовании межмолекулярных взаимодействий, предсказании реакционных центров, оценке молекулярных свойств и т. д.

Анализ карт электростатического поля мономера ММА позволил выбрать наиболее вероятный адсорбционный центр для метилметакрилата. На рис. 3 представлена визуализация электростатического поля мономера ММА в виде цветовой кодировки: красным цветом показан отрицательный потенциал (высокая электронная плотность), синим – положительный. Анализ электростатического поля мономера показал высокую электронную плотность на атоме кислорода, подтверждая, что данная молекула является реакционным центром.

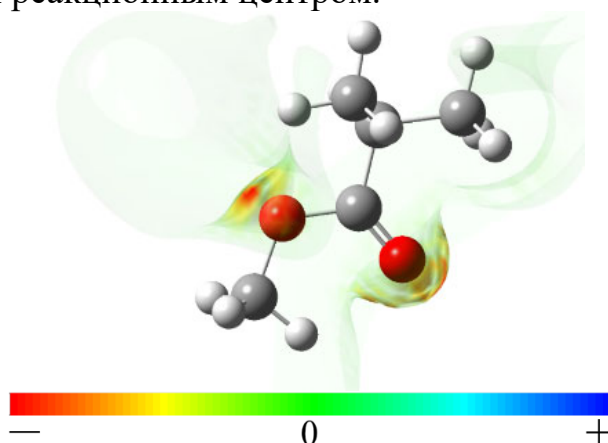


Рис. 3. Карта электростатического потенциала в мономере ММА.

Далее изучены адсорбционные взаимодействия системы «ММА+БУНТ», а также влияние концентрации примесей бора на этот процесс. Моделирование проводилось пошаговым приближением звена мономера метилметакрилата (ММА) к центру поверхности исследуемой нанотрубки (6, 0), содержащей различные количества примесных атомов бора, с шагом 0,2 Å. Для компенсации оборванных валентностей на границах кластеров были использованы псевдоатомы водорода. Наиболее реакционно активным атомом ММА является атом кислорода. Поэтому мономер был ориентирован именно этим атомом к атому бора поверхности нанотрубок для всех вариантов бороуглеродных труб видов BC , BC_3 и BC_5 .

В качестве активного центра на поверхности нанотрубки выбран положительно заряженный атом бора, находящийся примерно в центре кластера. Модели взаимодействующих БУНТ и ММА представлены на

рис. 4. На каждом этапе рассчитывались энергетические параметры для построения профилей поверхности потенциальной энергии (см. рис. 5).

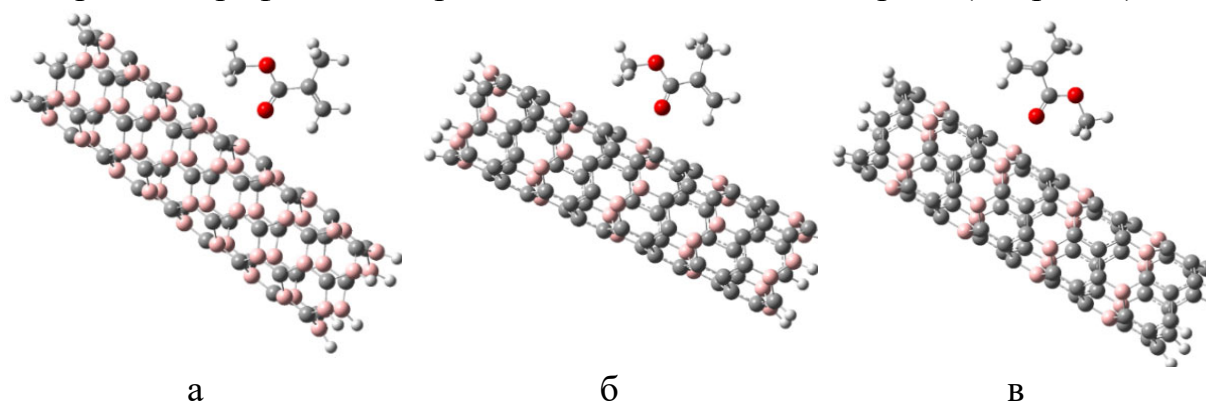


Рис. 4. Модели взаимодействующих метилметакрилата и бороуглеродных нанотрубок: а – $BC + MMA$, б – $BC_3 + MMA$, в – $BC_5 + MMA$.

Исследование взаимодействия мономерных звеньев с БУНТ с различными концентрациями атомов бора показало, что механизм присоединения в каждом случае имеет схожие черты. Мономер MMA при взаимодействии с нанотрубкой образует устойчивый комплекс для всех рассматриваемых случаев. Ранее нами был исследован процесс адсорбционного взаимодействия MMA с УНТ типа (6,0), не содержащие примеси бора [18, 19]. Установлено, что минимальная энергия системы наблюдается на расстоянии 2,9 Å, а величина энергии адсорбции составляет $E_{ad} = 0,28$ эВ. Основные параметры взаимодействия приведены в Таблице 1. Полученные результаты подтверждают, что борное легирование улучшает сорбционные свойства нанотрубок, создавая зоны повышенной активности для адсорбции. Вид профилей энергии (см. рис. 3) демонстрирует устойчивость комплексов, что открывает возможности для применения таких материалов.

Для объяснения механизма взаимодействия MMA с нанотрубками, содержащими примесные атомы бора, нами проведен анализ карт электростатических потенциалов и зарядовых распределений в рассмотренных системах. Анализ зарядового распределения изолированных нанотрубок и мономера MMA, а также карт электростатических потенциалов и зарядовых распределений в рассмотренных системах обнаружил перераспределения электронной плотности, при котором при взаимодействии БУНТ с мономером MMA на атоме бора нанотрубки, к которому приближался мономер, заряд стал более положительным, а на атоме кислорода MMA – отрицательный (см. Таблицу 2). На рис. 6 представлена визуализация карт электростатических потенциалов и зарядовых распределений в рассмотренных системах. Полученные результаты подтверждают факт возникновения дополнительного кулоновского взаимодействия в системе.

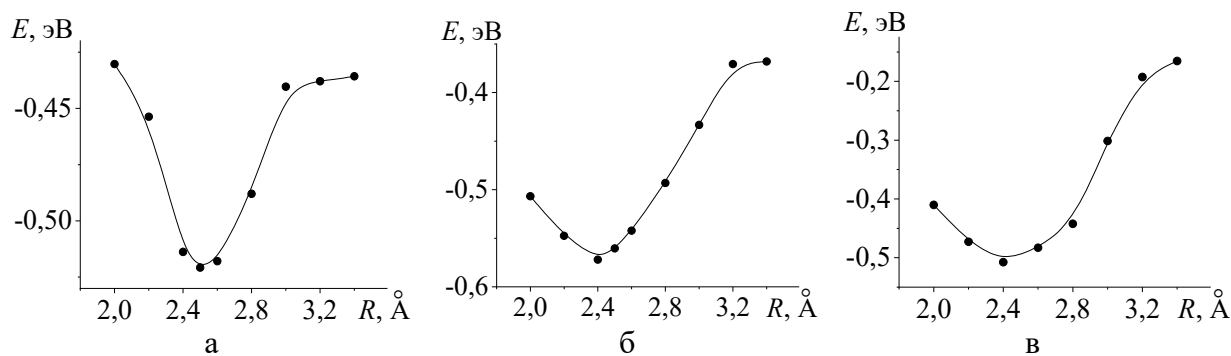


Рис. 5. Профили потенциальной энергии процесса присоединения мономера MMA к поверхности БУНТ при различной концентрации примеси атомов бора: а – BC нанотрубка, б) BC_3 нанотрубка, в) BC_5 нанотрубка.

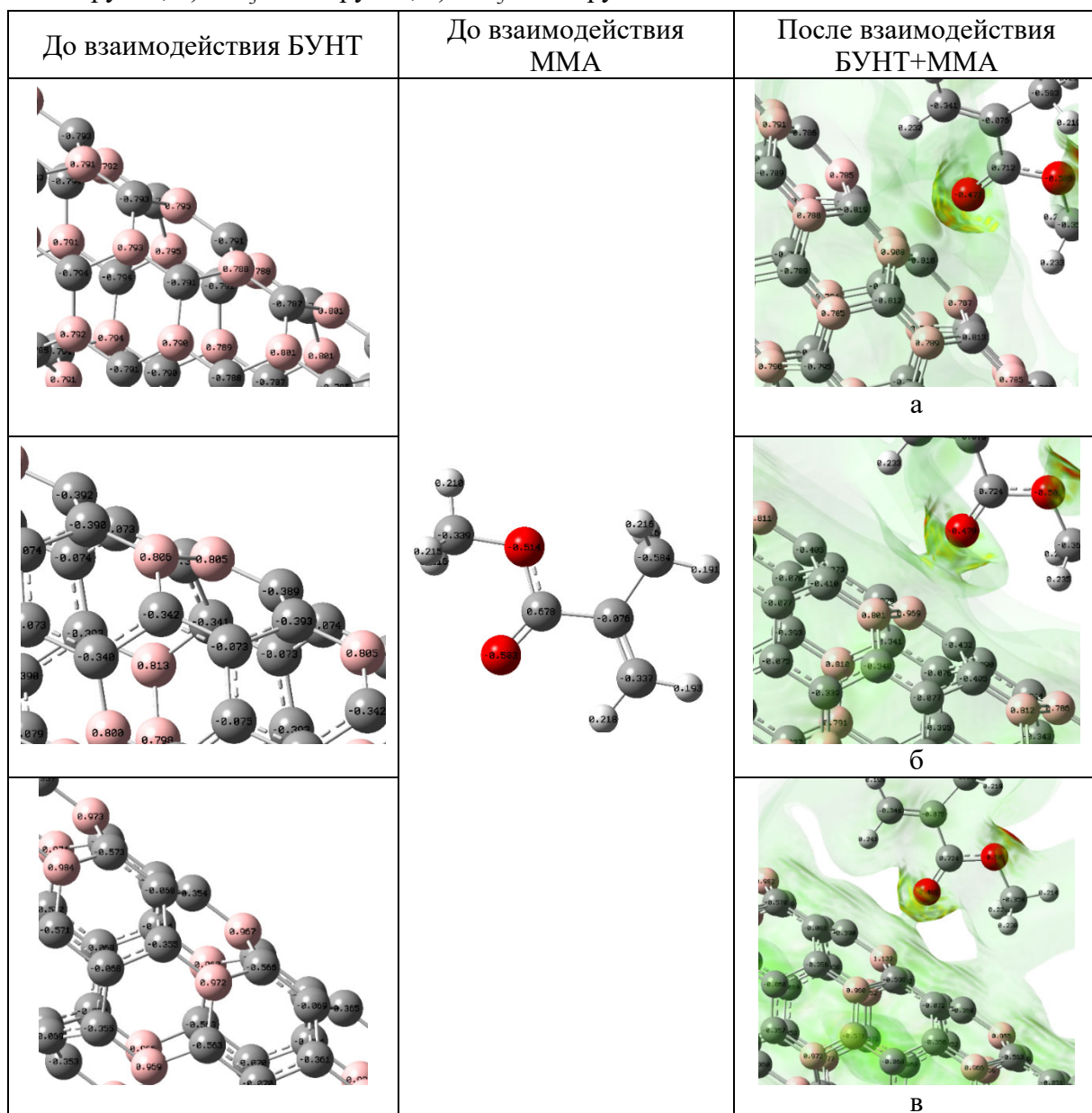


Рис. 6. Визуализация карт электростатических потенциалов и зарядовых распределений до и после взаимодействия в системах: а – $BC + MMA$, б – $BC_3 + MMA$, в – $BC_5 + MMA$.

Таблица 1. Основные параметры взаимодействия ММА с УНТ, содержащими различное количество примесных атомов бора.

Тип нанотрубок		Расстояние адсорбции, Å	Энергия адсорбции, эВ	Тип адсорбции
Чистые УНТ		2,9	-0,280	Физическая
Легированные УНТ	BC	2,5	-0,521	Физическая
	BC ₃	2,4	-0,572	Физическая
	BC ₅	2,4	-0,507	Физическая

Таблица 2. Зарядовое перераспределение адсорбционных центров при взаимодействии нанотрубок, содержащих примеси атома бора и ММА.

Тип нанотрубок	Заряд атома бора нанотрубки		Заряд атома кислорода мономера ММА	
	до взаимодействия	после взаимодействия	до взаимодействия	после взаимодействия
BC	0,795	0,818	-0,503	-0.477
BC ₃	0,805	0,963	-0,503	-0.479
BC ₅	0,973	1,132	-0,503	-0.465

Итак, установленный факт реализации взаимодействия мономера полимера $[C_5H_8O_2]_n$ с поверхностью БУНТ позволяет получить модельную структуру рассматриваемого комплекса и объясняет механизм взаимодействия ММА с УНТ, содержащими примесные атомы бора, обусловленное физическим адсорбционным взаимодействием компонентов, сопровождающееся кулоновским взаимодействием.

6. Заключение

Результаты проведенного исследования подтвердили высокую способность БУНТ типов BC, BC₃, BC₅ к взаимодействию с метилметакрилатом. Показано, что адсорбция сопровождается формированием стабильных комплексов, что подчеркивает положительную роль замещающих атомов бора в исследуемых процессах. Понимание механизма взаимодействия ММА с УНТ, содержащими примесные атомы бора, расширяет возможности создания новых функциональных материалов с регулируемыми сорбционными и электронными свойствами. Таким образом, введение борных примесей повышает сорбционную активность УНТ в отношении ПММА, сохраняя при этом все преимущества использования нанотрубок для создания композитного полимерного материала.

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (тема «FZUU-2023-0001»).

Библиографический список:

1. **Elbakyan, L.S.** Composite nanomaterials based on polymethylmethacrylate doped with carbon nanotubes and nanoparticles: a review / L.S. Elbakyan, I.V. Zaporotskova // *Polymers*. – 2024. – V. 16. – I. 9. – Art. № 1242. – 13 p. DOI: 10.3390/polym16091242.
2. **Frazer, R.Q.** PMMA: An essential material in medicine and dentistry / R.Q. Frazer, R.T. Byron, P.B. Osborne, K.P. West // *Journal of Long-Term Effects of Medical Implants*. – 2005. – V. 15. – I. 6. – P. 629-639. DOI: 10.1615/jlongtermeffmedimplants.v15.i6.60.
3. **Bettencourt, A.** Safety assessment of poly(methylmethacrylate) nanomaterials for drug delivery: genotoxicity in mammalian cells / A. Bettencourt, D. Graça, A. Matos et al. // *Toxicology Letters*. – 2015. – V. 238. – I. 2 (supplement). – P. S208. DOI: 10.1016/j.toxlet.2015.08.619.
4. **Kaur, H.** Applications of poly(methyl methacrylate) polymer in dentistry: a review / H. Kaur, A.Thakur // *Materials Today: Proceedings*. – 2021. – V. 50. – Part 5. – P. 1619-1625. DOI: 10.1016/j.matpr.2021.09.125.
5. **Said, M.N.A.** Polymerization and applications of poly(methyl methacrylate)-graphene oxide nanocomposites: a review / M.N.A. Said, N.A. Hasbullah, M.R.H. Rosdi et al. // *ACS Omega*. – 2022. – V. 7. – I. 51. – P. 47490-47503. DOI: 10.1021/acsomega.2c04483.
6. **Dimitrova, M.** Comparison between conventional PMMA and 3D printed resins for denture bases: a narrative review / M. Dimitrova, M. Corsalini, R. Kazakova et al. // *Journal of Composites Science*. – 2022. – V. 6. – I. 3. – Art. № 87. – 13 p. DOI: 10.3390/jcs6030087.
7. **Wang, H.** Nanocomposite of graphene oxide encapsulated in polymethylmethacrylate (PMMA): pre-modification, synthesis, and latex stability / H. Wang, L. Wang, S. Meng et al. // *Journal of Composites Science*. – 2020. – V. 4. – I. 3. – Art. № 118. – 17 p. DOI: 10.3390/jcs4030118.
8. **Ali, A.** Carbon nanotube characteristics and enhancement effects on the mechanical features of polymer-based materials and structures – A review / A. Ali, S.S.R. Koloor, A.H. Alshehri, A. Arockiarajan // *Journal of Materials Research and Technology*. – 2023. – V. 24. – P. 6495-6521. DOI: 10.1016/j.jmrt.2023.04.072.
9. **Zaporotskova, I.** Study of modification of carbon univariate nanostructures with boron atoms impurities / I. Zaporotskova, S. Boroznin, N. Boroznina // *Journal of Physics: Conference*. – 2021. – V. 1967. – Art. № 012045. – 6 p. DOI: 10.1088/1742-6596/1967/1/012045.
10. **Boroznina, N.** Sensors based on amino group surface-modified CNTs / N. Boroznina, I. Zaporotskova, S. Boroznin, E. Dryuchkov // *Chemosensors*. – 2019. – V.7. – I. 1. – Art. № 11. – 8 p. DOI: 10.3390/chemosensors7010011.
11. **Fuchs, M.** Ab initio pseudopotentials for electronic structure calculations of poly-atomic systems using density-functional theory / M. Fuchs, M. Scheffler // *Computer Physics Communications*. – 1999. – V. 119. – I. 1. – P. 67-98. DOI:10.1016/S0010-4655(98)00201-X.
12. **Beckstedte, M.** Density functional theory calculations for poly-atomic systems: electronic structure, static and elastic properties and ab initio molecular dynamics / M. Beckstedte, A. Kley, J. Neugebauer et al. // *Computer Physics Communications*. – 1997. – V. 107. – I. 1-3. – P. 187-222. DOI: 10.1016/S0010-4655(97)00117-3.
13. **Perdew, J.P.** Self-interaction correction to density functional approximation for many-electron systems / J.P. Perdew, A. Zunger // *Physical Review B*. – 1981. – V. 23. – I. 1. – P. 5048-5079. DOI: 10.1103/PhysRevB.23.5048.
14. **Tomasi, J.** Models and modeling in theoretical chemistry / J. Tomasi // *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM*. – 1988. – V. 179. – I. 1. – P.273-292. DOI: 10.1016/0166-1280(88)80128-3.
15. **Ichkitidze, L.P.** Flexible electrically conductive films based on biocompatible composite material / L.P. Ichkitidze, K.D. Popovich, V.V. Suchkova et al. // *Journal of Technical Physics*. – 2025. – V. 70. – I. 3. – P. 601-610. DOI: 10.61011/TP.2025.03.60867.285-24.
16. **Jorio, A.** Carbon nanotubes. Advanced topics in the synthesis, structure, properties and applications / A. Jorio, G. Dresselhaus, M. S. Dresselhaus // In: *Topics in Applied Physics*. Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 2008. – V. 111. – XXIV+720 p. DOI: 10.1007/978-3-540-72865-8.
17. **Curtiss, L.A.** Gaussian-3 (G3) theory for molecules containing first and second-row atoms / L.A. Curtiss, K. Raghavachari, P.C. Redfern et al. // *The Journal of Chemical Physics*. – 1998. – V. 109. – I. 18. – P. 7764-7776 DOI: 10.1063/1.477422.
18. **Zaporotskova, I.V.** Obtaining new dental materials reinforced with carbon nanotubes / I.V. Zaporotskova, L.S. Elbakyan // *Journal of Nano- and Electronic Physics*. – 2014. – V. 6. – № 3. – P. 03008-1-03008-3.
19. **Zaporotskova, I.V.** The mechanism of interaction of esters of methacrylic acid with carbon nanotubes to create a new polymer composite material / I.V. Zaporotskova, L.S. Elbakyan // *Journal of Nano- and Electronic Physics*. – 2016. – V. 8. – № 3. – P. 03047-1-03047-3. DOI: 10.21272/jnep.8(3).03047.

References:

1. Elbakyan L.S., Zaporotskova I.V. Composite nanomaterials based on polymethylmethacrylate doped with carbon nanotubes and nanoparticles: a review, *Polymers*, 2024, vol. 16, issue 9, art no. 1242, 13 p. DOI: 10.3390/polym16091242.
2. Frazer R.Q., Byron R.T., Osborne P.B., West K.P. PMMA: An essential material in medicine and dentistry, *Journal of Long-Term Effects of Medical Implants*, 2005, vol. 15, issue 6, pp. 629-639. DOI: 10.1615/jlongtermeffmedimplants.v15.i6.60.
3. Bettencourt A., Graça D., Matos A. et al. Safety assessment of poly(methylmethacrylate) nanomaterials for drug delivery: genotoxicity in mammalian cells, *Toxicology Letters*, 2015, vol. 238, issue 2 (supplement), p. S208. DOI: 10.1016/j.toxlet.2015.08.619.
4. Kaur H., Thakur A. Applications of poly(methyl methacrylate) polymer in dentistry: a review, *Materials Today: Proceedings*, 2021, vol. 50, part 5, pp. 1619-1625. DOI: 10.1016/j.matpr.2021.09.125.
5. Said M.N.A., Hasbullah N.A., Rosdi M.R.H. et al. Polymerization and applications of poly(methyl methacrylate)-graphene oxide nanocomposites: a review, *ACS Omega*, 2022, vol. 7, issue 51, pp. 47490-47503. DOI: 10.1021/acsomega.2c04483.
6. Dimitrova M., Corsalini M., Kazakova R. et al. Comparison between conventional PMMA and 3D printed resins for denture bases: a narrative review, *Journal of Composites Science*, 2022, vol. 6, issue 3, art. no. 87, 13 p. DOI: 10.3390/jcs6030087.
7. Wang H., Wang L., Meng S. et al. Nanocomposite of graphene oxide encapsulated in polymethylmethacrylate (PMMA): pre-modification, synthesis, and latex stability, *Journal of Composites Science*, 2020, vol. 4, issue 3, art. no. 1181, 7 p. DOI: 10.3390/jcs4030118.
8. Ali A., Koor S.S.R., Alshehri A.H., Arockiarajan A. Carbon nanotube characteristics and enhancement effects on the mechanical features of polymer-based materials and structures – a review, *Journal of Materials Research and Technology*, 2023, vol. 24, pp. 6495-6521. DOI: 10.1016/j.jmrt.2023.04.072.
9. Zaporotskova I., Boroznin S., Boroznina N. Study of modification of carbon univariate nanostructures with boron atoms impurities, *Journal of Physics: Conference*, 2021, vol. 1967, art. no. 012045, 6 p. DOI: 10.1088/1742-6596/1967/1/012045.
10. Boroznina N., Zaporotskova I., Boroznin S., Dryuchkov E. Sensors based on amino group surface-modified CNTs, *Chemosensors*, 2019, vol. 7, issue 1, art. no. 11, 13 p. DOI: 10.3390/chemosensors7010011.
11. Fuchs M., Scheffler M. Ab initio pseudopotentials for electronic structure calculations of poly-atomic systems using density-functional theory, *Computer Physics Communications*, 1999, vol. 119, issue 1, pp. 67-98. DOI: 10.1016/S0010-4655(98)00201-X.
12. Beckstedte M., Kley A., Neugebauer J. et al. Density functional theory calculations for poly-atomic systems: electronic structure, static and elastic properties and ab initio molecular dynamics, *Computer Physics Communications*, 1997, vol. 107, issue 1-3, pp. 187-205 DOI: 10.1016/S0010-4655(97)00117-3.
13. Perdew J.P., Zunger A. Self-interaction correction to density functional approximation for many-electron systems // *Physical Review B*, 1981, vol. 23, issue 1, pp. 5048-5079 DOI: 10.1103/PhysRevB.23.5048.
14. Tomasi J. Models and modeling in theoretical chemistry, *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM*, 1988, vol. 179, issue 1, pp. 273-292. DOI: 10.1016/0166-1280(88)80128-3.
15. Ichkitidze L.P., Popovich K.D., Suchkova V.V. et al. Flexible electrically conductive films based on biocompatible composite material, *Journal of Technical Physics*, 2025, vol. 70, issue 3, pp. 601-610. DOI: 10.61011/TP.2025.03.60867.285-24.
16. Jorio A., Dresselhaus G., Dresselhaus M.S. Carbon nanotubes. Advanced topics in the synthesis, structure, properties and applications, *Topics in Applied Physics*. Berlin, Heidelberg, Springer-Verlag, 2008, vol. 111, XXIV+720 p. DOI: 10.1007/978-3-540-72865-8.
17. Curtiss L.A., Raghavachari K., Redfern P.C. et al Gaussian-3 (G3) theory for molecules containing first and second-row atoms, *The Journal of Chemical Physics*, 1998, vol. 109, issue 18, pp. 7764-7776 DOI: 10.1063/1.477422.
18. Zaporotskova I.V., Elbakyan L.S. Obtaining new dental materials reinforced with carbon nanotubes, *Journal of Nano- and Electronic Physics*, 2014, vol. 6, no. 3, pp. 03008-1-03008-3.
19. Zaporotskova I.V., Elbakyan L.S. The mechanism of interaction of esters of methacrylic acid with carbon nanotubes to create a new polymer composite material, *Journal of Nano- and Electronic Physics*, 2016, vol. 8, no. 3, pp. 03047-1-03047-3. DOI: 10.21272/jnep.8(3).03047.