**Новые подходы к квантовохимическому моделированию нанотрубок большого диаметра на основе WS2**

***Михайлов И. Е.1, Домнин А. В.1, Эварестов Р. А. 1***

*Студент, 4 курс бакалавриата*

*1Санкт-Петербургский государственный университет*

*Институт химии, Санкт-Петербург, Россия*

*E-mail:* [*ilia.mixailov@gmail.com*](mailto:ilia.mixailov@gmail.com)

Нанотрубки на основе дисульфида вольфрама являются актуальными объектами исследования как для экспериментаторов, так и теоретиков. Например, в работе [1] представлен метод селективного получения многостенных нанотрубок с одним значением хирального угла для всех одностенных компонент. Chen. Y и др. [2] представили результаты по измерению диаметров и предложили методику определения индексов хиральности трубки с использованием методов электронной дифракции и сканирующей электронной микроскопии.

Квантовохимические исследования демонстрируют, что электронные свойства, а именно – ширина запрещённой зоны, положения границ зон зависят от структурных параметров нанотрубки – диаметра, хирального угла, а также торсионных деформаций [3]. Однако в большинстве теоретических работ (в частности, посвященных квантовохимическому моделированию) диаметры изучаемых нанотрубок WS2 не превышают значений нескольких десятков ангстрем, тогда как экспериментально получаются нанотрубки с диаметрами более сотни ангстрем.

В данной работе рассматриваются методы квантовохимического моделирования нанотрубок WS2 большого диаметра: аппроксимация хиральной трубки ахиральной, а также использование малой торсионной деформации трубки. Торсионные деформации позволяют значительно уменьшить число атомов в элементарной ячейке (с сотни тысяч до тысячи атомов), что делает возможным проведение квантовохимического расчёта. Также представлены результаты расчётов нанотрубок, имеющих экспериментальные диаметры – 126.9 Å (рис. 1) и 138.4 Å). Получены значения энергий образования трубки и зонные структуры. Изучено влияние торсионного искажения на свойства нанотрубок.

A diagram of a molecule

Description automatically generated

Рис. 1. Элементарная ячейка нанотрубки WS2 с диаметром 126.9 Å. Оптимизация геометрии трубки методом DFT, функционал HSE06.

**Литература**

1. An Q. et al. Direct growth of single-chiral-angle tungsten disulfide nanotubes using gold nanoparticle catalysts // Nature Materials. – 2023. – С. 1-9.

2. Chen Y., Deniz H., Qin L. C. Accurate measurement of the chirality of WS 2 nanotubes // Nanoscale. – 2017. – Т. 9. – №. 21. – С. 7124-7134.

3. Domnin A. V., Mikhailov I. E., Evarestov R. A. DFT Study of WS2-Based Nanotubes Electronic Properties under Torsion Deformations // Nanomaterials. – 2023. – Т. 13. – №. 19. – С. 2699.