

И. И. Гумеров (асп.), Т. Р. Просочкина (д.х.н., проф.),
К. Г. Кичатов (к.х.н., доц.), О. Ю. Купова (к.х.н., доц.)

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ СВОЙСТВ ПОЛИСУЛЬФОНА И КОМПОЗИТОВ С ЦЕЛЛЮЛОЗОЙ НА ЕГО ОСНОВЕ

Уфимский государственный нефтяной технический университет,
кафедра нефтехимии и химической технологии
450064, Уфа, ул. Космонавтов, 1; e-mail: kichatov_k@mail.ru@mail.ru

I. I. Gumerov, T. R. Prosochkina, K. G. Kichatov, O. Yu. Kupova

FORECASTING THE PROPERTIES OF POLYSULFONE AND ITS CELLULOSE-BASED COMPOSITES

Ufa State Petroleum Technological University
1, Kosmonavtov Str., 450064, Ufa, Russia; e-mail: kichatov_k@mail.ru@mail.ru

С применением молекулярно-динамического метода моделирования проанализировано влияние надмолекулярной структуры композиционных материалов на основе полисульфона с наполнителем – целлюлозой на их некоторые характеристики. Подтверждено, что данный метод позволяет с достаточной точностью определить значение модуля Юнга с учетом содержания функционального наполнителя в матрице, а также формы и размера частиц целлюлозы и установлено, что оптимальной массовой концентрацией наполнителя в полимерно-композиционном материале PSU/MCC является 6.0%.

Ключевые слова: межмолекулярные взаимодействия; механические свойства; модуль Юнга; молекулярная динамика; полисульфон; целлюлоза; упругие свойства

В связи с растущей потребностью на внутреннем рынке в новых высокотехнологичных материалах, особый интерес представляют полимерные композиционные материалы (ПКМ) с наполнителями различной природы. ПКМ характеризуются уникальным сочетанием физико-химических, механических и эксплуатационных свойств, которые определяются не только видом, структурой и свойствами полимерной матрицы, но и зависят от природы, структурных характеристик, степени дисперсности наполнителя и свойств межфазной поверхности ¹.

Целлюлозное волокно (CF), являясь экологичным продуктом, находит широкое применение в разработке и производстве ПКМ. Оно может быть перспективной альтернативой синтетическим армирующим наполнителям, поскольку является доступным природным материалом с низ-

Molecular dynamics simulations were used to analyze how the supramolecular structure of polysulfone-cellulose composites affects some of their properties. This method was confirmed to be capable of determining Young's modulus with acceptable accuracy, taking into account the filler content in the matrix, as well as the shape and size of the filler's particles and it was established that the optimal mass concentration of the filler in the polymer-composite material PSU/MCC is 6.0%.

Key words: cellulose; elastic properties; intermolecular interactions; mechanical properties; molecular dynamics; polysulfone; Young's modulus

кой плотностью и требуемыми механическими характеристиками. Благодаря специфике морфологии и химического состава – наличию полярных гидроксильных групп на поверхности волокон ² – льняные CF проявляют высокую адгезию к поверхности полимерной матрицы, особенно при предварительной физико-химической обработке. Это позволяет создавать прочные и надежные биокomпозиты, которые являются достаточно жесткими, прочными, устойчивыми к воздействию окружающей среды. В то же время эти материалы являются биоразлагаемыми, и, поэтому, пригодными к последующей утилизации. Эти свойства CF-содержащих ПКМ способствуют применению их в качестве упаковочного материала, а также использованию в строительстве, автомобилестроении и других отраслях, где важным является сочетание технической эффективности и экологической безопасности. ПКМ, содержащие целлюлозу, иног-

Дата поступления 02.02.26

да относят к классу «зеленых» материалов, поскольку их применение способствует снижению экологической нагрузки на окружающую среду³.

Важной характеристикой ПКМ является модуль упругости Юнга E , который для немодифицированного CF находится в пределах 100.2 ГПа⁴⁻⁶, а предел прочности σ_B оценивается в 10.0 ГПа⁶. Величина σ_B намного превышает значение этой характеристики для стали, для которой $\sigma_B = 1$ ГПа.

Полисульфон (PSU) – высокоэффективный термопластик, широко используемый в областях, требующих стабильности при высоких температурах от минус 100 до плюс 150 °C и высокой химической стойкости. Он находит применение в электронике, медицине, автомобилестроении. Однако механические характеристики, в том числе модуль Юнга, не позволяют применять PSU в качестве конструкционного материала без армирования. Согласно справочным данным ресурса Substech⁷, модуль Юнга термопластичного полисульфона оценивается в 2.6 ГПа⁷, в среднем диапазон составляет $E = 1.8-9.0$ ГПа с усредненным значением около 5.7 ГПа. По данным компании Ensinger⁸, для материала PSU1000 величина модуля Юнга составляет $E = 2.6$ ГПа.

Добавление такого армирующего компонента, как целлюлозное нановолокно (CNF), часто значительно усиливает механическую прочность ПКМ. Так, в мембранах из PSU с добавлением массовой доли 0.3% CNF наблюдается увеличение значения модуля Юнга примерно на 34.0% и предела текучести $\sigma_{0.2}$ – на 32.0%⁹. Однако даже при достижении значений модуля Юнга $E = 2.0-6.0$ ГПа этого оказывается недостаточно, чтобы конкурировать с изделиями из стали. Тем не менее, важно еще учитывать отношение модуля Юнга к плотности материала – удельный модуль, который характеризует возможность получения изделий с сопоставимой со сталью жесткостью, но при этом более легких.

В статье¹⁰ описано использование целлюлозы, модифицированной лимонной кислотой (CAC), в качестве экологичного наполнителя для эпоксидных композитов. Авторами показано, что при введении модифицированной CAC (F-CAC) модуль Юнга композита удваивается – с примерно 1.1 ГПа для немодифицированного эпоксидного композита до 2.1 ГПа при включении F-CAC, что подтверждает возможность повышения механической жесткости полимерного материала.

Авторами исследования¹¹ изучено механическое и термическое поведение CF, пропитанных раствором PSU. Выявлено, что при пропитке CF раствором PSU с объемной долей 40.0% и сушке при температуре 110 °C, предел прочности на растяжение образцов достигает 4020 МПа. При со-

держании объемной доли PSU 20.0% значение предела прочности составляет около 3200 МПа, а при промежуточном содержании объемной доли 30.0% – примерно 3850 МПа¹¹.

Таким образом, включение целлюлозных волокон в полисульфовую матрицу позволяет повысить модуль Юнга ПКМ – от базовых значений порядка 2.6 ГПа¹¹ до больших величин, что особенно важно для улучшения эксплуатационных свойств изделия. Это открывает перспективы создания более прочных, надежных и устойчивых к нагрузкам биосовместимых материалов. Однако, несмотря на растущий интерес к исследованию влияния добавок целлюлозы на модуль упругости PSU-композитов, количество публикаций на данную тему ограничено, в том числе отсутствуют сведения о систематическом исследовании свойств материалов CNF/PSU или CF/PSU с применением методов молекулярно-динамического (molecular dynamics, MD) моделирования. В некоторых работах, посвященных моделированию ПКМ на основе PSU с добавкой CF или других компонентов, показана эффективность такого подхода для прогнозирования механических свойств и структурных особенностей материала. Так, авторами исследования¹² проведено моделирование мембран, содержащих PSU и наночастицы диоксида кремния SiO₂. Показано, что введение SiO₂ способствует улучшению совместимости компонентов, увеличению прочности и стабильности полимерной матрицы, что подтверждает возможность использования метода MD-моделирования для анализа свойств ПКМ на основе полисульфона. В работе¹³ проведено MD-моделирование механических свойств кристаллической целлюлозы I β , что позволяет прогнозировать ее поведение при включении в полимерные матрицы и оценивать влияние CF на механические характеристики ПКМ.

Таким образом, применение методов MD-моделирования может быть весьма успешным при решении задач прогнозирования свойств ПКМ и установления возможности их применения в мембранных и конструкционных материалах. В этой связи нами выполнено MD-моделирование системы CNF/PSU для установления связи структурных параметров материала с величиной модуля Юнга.

Материалы и методы

Исследование механических характеристик CNF/PSU проведено с использованием MD-метода расчета с применением методик, описанных в¹⁴⁻¹⁶. Для нахождения равновесной геометрии ПКМ использовался метод молекулярной динамики. Полученные структуры ПКМ использовались для расчета механических свойств.

Оптимизация геометрических параметров PSU и моделирование структуры ячейки для $T = 298$ К с использованием силового поля COMPASS III выполнено для полимера PSU и композита PSU/МСС с различной концентрацией заполнения.

Первым этапом для определения давления системы в изохорно-изотермических условиях выбран ансамбль NVT и применены следующие параметры MD-расчета: силовое поле COMPASS III, термостат Андерсен, $T = 298$ К, шаг по времени 1.0 фс¹⁷.

Вторым этапом выполнено моделирование в изобарно-изотермических условиях: ансамбль NPT, силовое поле COMPASS III, термостат Андерсен, $T = 298$ К, баростат Берендсен, шаг по времени 1.0 фс для определения плотности ПКМ и дальнейшего механического расчета. Давление подобрано таким образом, чтобы расчетная плотность материала соответствовала справочному значению для PSU = 1.24 г/см³.

Третьим этапом выполнен расчет механических свойств ПКМ в соответствии с методиками авторов^{14, 18-21} и анализ модуля Юнга в пространстве в зависимости от направления для оценки

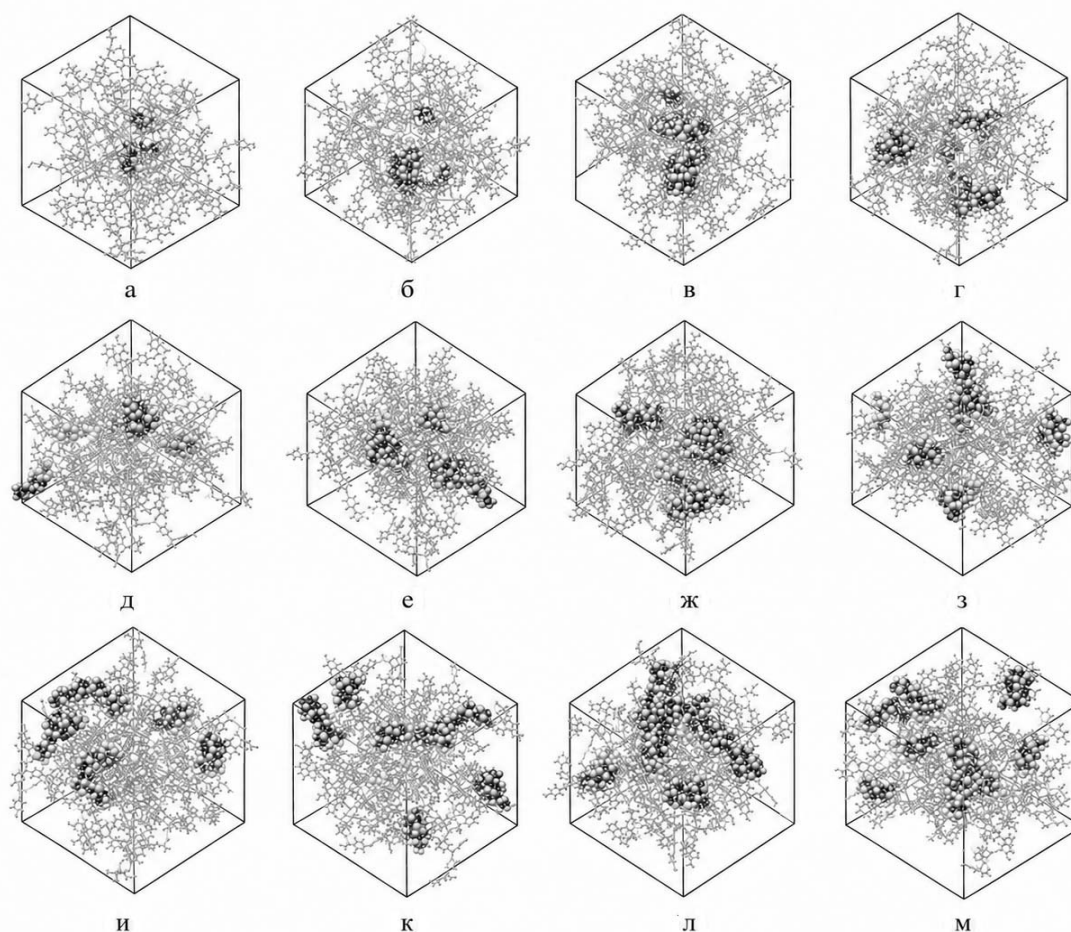
распределения компонентов ПКМ в элементарной ячейке по методике ELATE (Elastic tensor analysis)²².

Результаты и их обсуждение

При моделировании в качестве исходных значений использованы значения плотности: для немодифицированного PSU (1.24 г/см³)⁸ и МСС – 1.60 г/см³⁶.

В ходе работы выполнен расчет плотности смесей PSU/МСС, где варьировался состав: массовая доля PSU – от 0.7 до 1.0, доля целлюлозы – от 0.3 до 0.0 с шагом 0.01. В результате получены значения плотности для 30 ПКМ с содержанием МСС до 30.0%, что позволило оценить изменение плотности композита при введении наполнителя и использовать их для построения элементарных ячеек ПКМ¹².

Начальная конфигурация и конфигурации молекул PSU и МСС, с диапазоном содержания МСС от 0.0 до 11.0 % используемые в качестве расчетных моделей приведены на рис. 1.



Массовая доля МСС в ПКМ: а – 0.0%; б – 1.0%; в – 2.0%; г – 3.0%; д – 4.0%; е – 5.0%; ж – 6.0%; з – 7.0%; и – 8.0%; к – 9.0%; л – 10.0%; м – 11.0%

Рис. 1. Расчетные модели периодических ячеек PSU/МСС

Механические характеристики немодифицированного PSU и ПКМ PSU/МСС

Параметр		Значение					
		0%	1%	2%	3%	4%	5%
Объемный модуль упругости, ГПа	$K_{ср}$	5.43	4.33	4.5	4.74	4.33	4.58
Модуль Юнга E , ГПа	$E_{ср}$	2.72	2.72	3.12	3.35	3.27	3.58
Модуль сдвига G , ГПа	$G_{ср}$	0.97	0.97	1.13	1.2	1.19	1.31
Коэффициент Пуассона ν	$\nu_{ср}$	0.41	0.4	0.38	0.38	0.37	0.37
Параметр		Значение					
		6%	7%	8%	9%	10%	11%
Объемный модуль упругости, ГПа	$K_{ср}$	4.88	5.26	3.92	4.79	3.99	4.4
Модуль Юнга E , ГПа	$E_{ср}$	3.78	3.55	2.91	2.96	3.06	3
Модуль сдвига G , ГПа	$G_{ср}$	1.38	1.28	1.06	1.06	1.12	1.09
Коэффициент Пуассона ν	$\nu_{ср}$	0.37	0.39	0.38	0.4	0.37	0.39

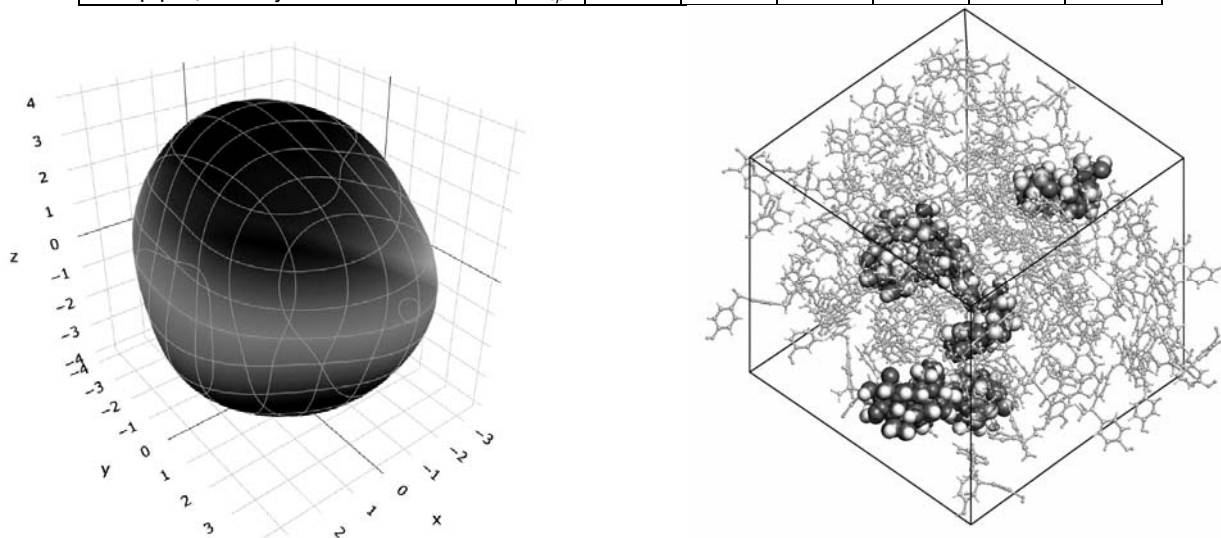


Рис. 2. Влияние величины модуля Юнга от направления при оптимальной массовой доле МСС в PSU 6.0%

Рассчитанные механические характеристики полученных элементарных ячеек немодифицированного PSU и ПКМ PSU/МСС, приведены в табл.

Полученное значение модуля Юнга немодифицированного полисульфона составляет 2.72 ГПа, что близко к справочному значению 2.6 ГПа, а величина модуля сдвига 0.97 ГПа находится в пределах справочных значений 0.8–1.1 ГПа^{7, 11}, что свидетельствует об адекватности сформированной модели PSU.

Рассчитанные в результате моделирования упругие константы использовались для анализа модуля Юнга в пространстве²². На рис. 2 представлена анизотропия модуля Юнга PSU и композитов с МСС по осям на основе упругих констант с помощью инструмента ELATE.

Зависимость модуля Юнга от концентрации носит экстремальный характер с максимумом при 6.0%. На начальном этапе (0.0–6.0 %) введение целлюлозы способствует армированию полимерной матрицы. Однако при содержании целлюлозы свыше 6.0% наблюдается ухудшение механических свойств. Это объясняется преобладанием межмо-

лекулярных взаимодействий между молекулами целлюлозы над их взаимодействием с полисульфоном, что инициирует процесс самоассоциации и образование агломератов.

Равномерное распределение частиц наполнителя обеспечивает стабильные механические характеристики материала независимо от направления приложения нагрузки. При 6.0% пространственная зависимость модуля Юнга имеет почти шарообразный вид (рис. 2), что подтверждает однородность структуры композиционного материала.

Анализ результатов, полученных на основе моделирования механических свойств системы PSU/МСС, показывает, что введение целлюлозного наполнителя в полисульфон приводит к значительному улучшению его механических характеристик, что особенно проявляется при массовой доле МСС = 6.0 %. Это количество наполнителя, в итоге, приводит к увеличению значения модуля Юнга с 2.72 до 3.78 ГПа (+39.0% по сравнению с немодифицированным полисульфоном).

В результате молекулярно-динамического моделирования установлено, что оптимальной

массовой концентрацией наполнителя в ПКМ PSU/МСС является 6.0%. Дальнейшее увеличение содержания целлюлозы не приводит к росту величины модуля Юнга, что не позволяет полу-

чать еще более жесткие изделия. Снижение модуля Юнга при дальнейшем увеличении концентрации МСС может быть связано с агрегацией частиц или ухудшением дисперсии в полимерной матрице.

Литература

1. Ивановский С.К., Мельниченко М.А. Использование дисперсных наполнителей для создания композиционных материалов на основе полимерной матрицы // Молодой ученый. – 2015. – №15(95). – С.91-93.
2. Pornwannachai W., Horrocks A.R., Kandola B.K. Surface Modification of Commingled Flax/PP and Flax/PLA Fibres by Silane or Atmospheric Argon Plasma Exposure to Improve Fibre-Matrix Adhesion in Composites // Fibers. Multidisciplinary Digital Publishing Institute. – 2022. – V.10, №1. – P.2.
3. Донецкий К.И., Хрульков А.В., Городилова Н.А., Мельников Д.А. Перспективы применения полимерных композиционных материалов на основе льняных волокон // Труды ВИАМ. – 2023. – №10. – С.82-95.
4. Наноцеллюлоза и проблемы ее использования. URL: <https://nizinev.com/nauka/tekhnicheskie-nauki/chto-takoe-nanocellyuloza-i-problemy-ee-ispolzovaniya> (дата обращения: 19.06.2025).
5. Ioelovich M.Y. Models of supramolecular structure and properties of cellulose // Polym. Sci. Ser. A. – 2016. – V.58, №6. – Pp.925-943.
6. Петров В.А., Гибадуллин М.Р., Аверьянова Н.В. Получение наноразмерной целлюлозы и области ее применения // Нанотехнологии. – 2014. – №4. – С.35-42.
7. Термопластичный полисульфон (PSF). URL: https://www.substech.com/dokuwiki/doku.php?id=thermoplastic_polysulfone_psf&utm_source=chatgpt (дата обращения: 19.06.2025).
8. PSU 1000 (Polysulfone). High Performance Injection Molding & Plastic Manufacturing. Ensinger Precision Components. URL: https://www.ensinger-pc.com/injection-molding-materials/our-plastic-stock-shapes/psu-1000-polysulfone/?utm_source (дата обращения: 19.06.2025).
9. Alasfar R., Kochkodan V., Ahzi S., Barth N., Koc M. Preparation and Characterization of Polysulfone Membranes Reinforced with Cellulose Nanofibers // Polymers. Multidisciplinary Digital Publishing Institute. – 2022. – V.14, №16. – P.3317.
10. Yano S., Hsu Yu-I., Uyama H. Improvement of mechanical and thermal properties of epoxy composites with citric acid modified and defibrated cellulose filler // Polymer Degradation and Stability. – 2025. – V.240. – P.111482.
11. Chukov D.I., Tcherdyntsev V.V., Stepashkin A.A., Zadorozhnyy M.Yu. Structure, Thermal, and Mechanical Behavior of the Polysulfone Solution Impregnated Unidirectional Carbon Fiber Yarns // Polymers. – 2023. – V.15, №23. – P.4601.
12. Synthia. Product brochure. GGA Asia. 2017. - URL: https://www.gga.asia/upload/pdf/483/synthia_20170927140719.pdf (дата обращения: 08.11.2025).
13. Ahn J., Chung W.-J., Pinnau I., Guiver M. D. Polysulfone/silica nanoparticle mixed-matrix

References

1. Ivanovskiy S.K., Melnichenko M.A. *Ispolzovanie dispersnykh napolniteley dlya sozdaniya kompozitsionnykh materialov na osnove polimernoy matritsy* [The use of dispersed fillers to create composite materials based on a polymer matrix]. *Molodoy uchenyi* [Young scientist], 2015, no.15 (95), pp.91-93.
2. Pornwannachai W., Horrocks A.R., Kandola B.K. [Surface Modification of Commingled Flax/PP and Flax/PLA Fibres by Silane or Atmospheric Argon Plasma Exposure to Improve Fibre-Matrix Adhesion in Composites]. *Fibers. Multidisciplinary Digital Publishing Institute*, 2022, vol.10, no.1, p.2.
3. Donetskiy K.I., Khrulkov A.V., Gorodilova N.A., Melnikov D.A. *Perspektivy primeneniya polimernykh kompozitsionnykh materialov na osnove lyanykh volokon* [Prospects for the use of polymer composite materials based on flax fibers]. *Trudy VIAM* [Proceedings of VIAM], 2023, no.10, pp.82-95.
4. <https://nizinev.com/nauka/tekhnicheskie-nauki/chto-takoe-nanocellyuloza-i-problemy-ee-ispolzovaniya>
5. Ioelovich M.Y. [Models of supramolecular structure and properties of cellulose]. *Polym. Sci. Ser. A.*, 2016, vol.58, no.6, pp.925-943.
6. Petrov V.A., Gibadullin M.R., Averyanova N.V. *Poluchenie nanorazmernoy tsellyulozy i oblasti eyo primeneniya* [Production of nanocellulose and areas of its application]. *Nanotekhnologii* [Nanotechnology], 2014, no.4, pp.35-42.
7. https://www.substech.com/dokuwiki/doku.php?id=thermoplastic_polysulfone_psf&utm_source=chatgpt
8. https://www.ensinger-pc.com/injection-molding-materials/our-plastic-stock-shapes/psu-1000-polysulfone/?utm_source
9. Alasfar R., Kochkodan V., Ahzi S., Barth N., Koc M. [Preparation and Characterization of Polysulfone Membranes Reinforced with Cellulose Nanofibers]. *Polymers. Multidisciplinary Digital Publishing Institute*, 2022, vol.14, no.16, p.3317.
10. Yano S., Hsu Yu-I., Uyama H. [Improvement of mechanical and thermal properties of epoxy composites with citric acid modified and defibrated cellulose filler]. *Polymer Degradation and Stability*, 2025, vol.240, p.111482.
11. Chukov D.I., Tcherdyntsev V.V., Stepashkin A.A., Zadorozhnyy M.Yu. [Structure, Thermal, and Mechanical Behavior of the Polysulfone Solution Impregnated Unidirectional Carbon Fiber Yarns]. *Polymers*, 2023, vol.15, no.23, p.4601.
12. https://www.gga.asia/upload/pdf/483/synthia_20170927140719.pdf
13. Ahn J., Chung W.-J., Pinnau I., Guiver M. D. [Polysulfone/silica nanoparticle mixed-matrix membranes for gas separation]. *Journal of Membrane Science*, 2008, vol.314, no.1, pp.123-133.
14. Gabitov A. K., Prosochkina T.R., Kichatov K.G. [Prediction of the Properties of Polyethylene

- membranes for gas separation // *Journal of Membrane Science*. – 2008. – V.314, №1. – Pp.123-133.
14. Gabitov A. K., Prosochkina T.R., Kichatov K.G. Prediction of the Properties of Polyethylene Terephthalate and its Carbon Nanotube Composites // *Chemistry and Technology of Fuels and Oils*. – 2024. – V.60, №1. – Pp.43-51.
 15. Clark S. J., Segall M., Pickard C. J., Hasnip P. J., Probert M., Refson K., Payne M. C. First principles methods using CASTEP // *Zeitschrift fur Kristallographie – Crystalline Materials*. – 2005. – V.220, №5-6. – Pp.567-570.
 16. Liu B., Lv F., Fan X., Li Y., Jiang B. Molecular Dynamics Study of the Influence of Nano SiO₂ on the Thermodynamic Properties of PMIA Composites // *Polymers. Multidisciplinary Digital Publishing Institute*. – 2022. – V.14, №15. – P.3134.
 17. Hasan N.H.J.A. Prediction of mechanical properties of EPON 862 (DGEBF) cross-linked with curing agent (TETA) and SiO₂ nanoparticle based on materials studio // *IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng. IOP Publishing*. – 2018. – V.454, №1. – P.012139.
 18. Муслов С.А., Гветадзе Р.Ш., Арутюнов С.Д. Коэффициент Пуассона кристаллов фторапатита // *Молекулярная медицина*. – 2023. – Т.21, №6. – С.33-40.
 19. Chen H., Liu S., Fan J., Pengfei L. Study on micromolecular mechanical properties of C-atom reinforced SBR polymer composites // *Sci Rep*. – 2024. – V.14, №1. – P.104.
 20. Mo Y., Zhang H., Xu J. Molecular dynamic simulation of the mechanical properties of PI/SiO₂ nanocomposite based on materials studio // *Journal of Chemical and Pharmaceutical Research*. – 2014. – V.6, №6. – Pp.1534-1539.
 21. Shenogina N. B., Tsige M., Patnaik S. S., Mukhopadhyay S. Molecular Modeling Approach to Prediction of Thermo-Mechanical Behavior of Thermoset Polymer Networks // *Macromolecules. American Chemical Society*. – 2012. – V.45, №12. – C.5307-5315.
 22. Gaillac R., Pullumbi P., Coudert F.-X. ELATE: an open-source online application for analysis and visualization of elastic tensors // *J. Phys.: Condens. Matter*. – 2016. – V.28, №27. – P.275201.
 - Terephthalate and its Carbon Nanotube Composites]. *Chemistry and Technology of Fuels and Oils*, 2024, vol.60, no.1, pp.43-51.
 15. Clark S. J., Segall M., Pickard C. J., Hasnip P. J., Probert M., Refson K., Payne M. C. [First principles methods using CASTEP]. *Zeitschrift fur Kristallographie – Crystalline Materials*, 2005, vol.220, no.5-6, pp.567-570.
 16. Liu B., Lv F., Fan X., Li Y., Jiang B. [Molecular Dynamics Study of the Influence of Nano SiO₂ on the Thermodynamic Properties of PMIA Composites]. *Polymers. Multidisciplinary Digital Publishing Institute*, 2022, vol.14, no.15, p.3134.
 17. Hasan N.H.J.A. [Prediction of mechanical properties of EPON 862 (DGEBF) cross-linked with curing agent (TETA) and SiO₂ nanoparticle based on materials studio]. *IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng. IOP Publishing*, 2018, vol.454, no.1, p.012139.
 18. Muslov S.A., Gvetadze R.Sh., Arutyunov S.D. *Koefitsient Puassona kristallov florapatita* [Poisson's ratio of fluorapatite crystals]. *Molekulyarnaya Meditsina* [Molecular medicine], 2023, vol.21, no.6, pp.33-40.
 19. Chen H., Liu S., Fan J., Pengfei L. [Study on micromolecular mechanical properties of C-atom reinforced SBR polymer composites]. *Sci. Rep.*, 2024, vol.14, no.1, p.104.
 20. Mo Y., Zhang H., Xu J. [Molecular dynamic simulation of the mechanical properties of PI/SiO₂ nanocomposite based on materials studio]. *Journal of Chemical and Pharmaceutical Research*, 2014, vol.6, no.6, pp.1534-1539.
 21. Shenogina N. B., Tsige M., Patnaik S. S., Mukhopadhyay S. [Molecular Modeling Approach to Prediction of Thermo-Mechanical Behavior of Thermoset Polymer Networks]. *Macromolecules. American Chemical Society*, 2012, vol.45, no.12, pp.5307-5315.
 22. Gaillac R., Pullumbi P., Coudert F.-X. [ELATE: an open-source online application for analysis and visualization of elastic tensors]. *J. Phys.: Condens. Matter*, 2016, vol.28, no.27, p.275201.