

Функционализация углеродных нанотрубок типа (6,6) атомами серебра и золота: теоретическое исследование

Сергеев Д.Ф.^{1,2}, Борознина Н.П.¹, Запороцкова И.В.¹

khtnmma-231_327882@volsu.ru

¹ ФГАОУ ВО «Волгоградский государственный университет», Волгоград, Россия

² АО «ВНИКТИнефтехимоборудование», Волгоград, Россия

Необходимость разработки новых, специальных и улучшенных материалов диктуется все более возрастающими потребностями промышленности, вызванными быстрым темпом развития технологий [1]. Выбор в пользу композитов обуславливается обеспечением всех необходимых от материала свойств, в зависимости от специфики применения, что недоступно для их изначальных компонентов [1, 2]. Учитывая все вышеизложенное, можно акцентировать внимание на углеродных нанотрубках различных конфигураций, которые возможно усовершенствовать многообразными способами [3, 4].

В качестве компонентов, изменяющих проводящие свойства углеродных нанотрубок типа (6,6) (УНТ), были выбраны атомы серебра (Ag) и золота (Au), расположенные над тремя адсорбционными центрами поверхности УНТ. Был определен наиболее вероятный адсорбционный центр на поверхности УНТ (6,6). В случае атома серебра им выступает центр углеродной связи нанотрубки, а в случае атома золота – атом углерода.

Для “чистой” УНТ типа (6,6) значение величины запрещенной зоны (ШЗЗ) соответствует 0,92 эВ. Одиночная адсорбция атома Ag поверхностью УНТ не приводит к каким-либо изменениям, при этом взаимодействие с одиночным атомом Au вызывает уменьшение значений ШЗЗ у УНТ (6,6) до 0,43 эВ, что говорит об улучшении проводящих свойств.

С учетом данных, полученных после проведения одиночной адсорбции, было исследовано влияние, так называемой, «регулярной» адсорбции, на проводящие свойства УНТ (6,6). Расстояние взаимодействия атомов металлов с поверхностью УНТ, соответствовало самому стабильному из всех рассчитанных при проведении одиночной адсорбции, а именно: для атома Ag – 0,37 нм, для атома Au – 0,32 нм. В совокупности было присоединено не менее 30 атомов Ag и Au.

Анализ изменений ШЗЗ смоделированных систем свидетельствует о том, что регулярная адсорбция атомами Ag приводит к уменьшению ШЗЗ до 0,26 эВ, а атомами Au до 0,19 эВ.

Ссылки

1. Soni S. K., Thomas B., Swain A., Roy T., Composite Structures (2022), 299, 116075
2. Raj P., Biju P. L., Deepanraj B., Menachery N., Materials Today: Proceedings (2023), 72, 2139
3. Choi M., Park K. T., Woo D. U., Jang J., Lee K., Jung Y., Kim T., Composites Part B: Engineering (2026), 113482
4. Jo S., Mikhanchan A., Hong S., Kim S., Kim S. G., Kim S. M., Hwang J. Y., Composites Part B: Engineering (2025), 300, 112471