

2. Lyubutin I. S. et al. Structural, magnetic, and electronic properties of iron selenide Fe₆-7Se₈ nanoparticles obtained by thermal decomposition in high-temperature organic solvents //The Journal of chemical physics. – 2014. – Т. 141. – №. 4. – С. 0447n selenide Fe₆-7Se₈ nanoparticles obtained by thermal decomposition in high-temperature organic solvents //The Journal of chemical physics. – 2014. – Т. 141. – №. 4. – С. 044704.0.

ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ПРОЦЕССА СОРБЦИИ ПРОДУКТОВ ВЫСТРЕЛА НА ВНЕШНЕЙ ПОВЕРХНОСТИ УГЛЕРОДНОЙ НАНОТРУБКИ

Назаренко А.К.¹, Кулиева Л.Э.¹, Борознина Е.В.², Галоян Д.М.³

¹) РХТУ им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия

²) ВолГУ, Волгоград, Россия

³) НИТУ МИСиС, Москва, Россия

E-mail: and.nazarenko2011@yandex.ru

THEORETICAL STUDIES OF THE PROCESS OF SORPTION OF THE SHOT PRODUCTS ON THE EXTERNAL SURFACE OF CARBON NANOTUBES

Nazarenko A.K.¹, Kulieva L.E.¹, Boroznina E.V.², Galoyan D.M.³

¹) D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russia

²) Volgograd State University, Volgograd, Russia

³) The National University of Science and Technology MISiS, Moscow, Russia

This paper presents the results of the study of the effect of structural modifications of carbon nanotubes on the surface adsorption of the main elements of the products of the shot of the traces of shot products. Carbon single-layer nanotubes of types (6,6), (3,6), (0,10) have been considered.

Для изучения процессов сорбции основных элементов следов продуктов выстрела (атомов алюминия, свинца и сурьмы) на поверхность углеродных нанотрубок было рассмотрено три структурных типа с различными граничными модификациями – «armchair» (6,6), «chiral» (3,6) и «zig-zag» (0,10). Расчеты проводились в рамках модели молекулярного кластера с использованием полуэмпирической схемы РМЗ. Моделирование процесса сорбции осуществлялось посредством пошагового приближения атомов металлов к внешней поверхности кластеров в трех положениях: 1) над атомом С гексагона УНТ; 2) над связью С-С гексагона УНТ; 3) над центром гексагона УНТ (рис.1).

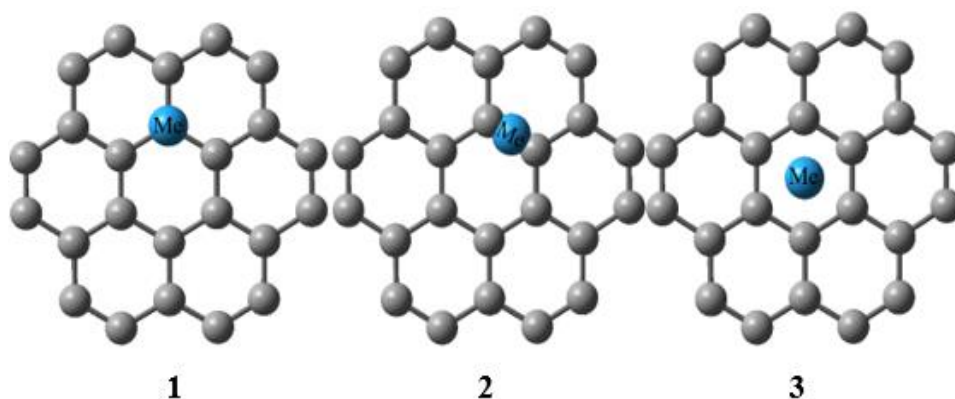


Рис. 1. Варианты положений атомов металлов относительно поверхности кластеров: 1) над атомом С гексагона УНТ; 2) над связью С-С гексагона УНТ; 3) над центром гексагона УНТ

Приближение атомов происходило вдоль нормали, относительно продольной оси кластеров к атомам С, либо к фиктивным атомам, находящимся в связи С-С и к центру гексагона УНТ и УНТ-[ОН] кластеров [1].

Характеристики процесса сорбции были определены с помощью построенных профилей поверхности потенциальной энергии. Установлено, что на всех графиках присутствуют два энергетических минимума, для каждого из которых были определены основные электронно-энергетические параметры. Первый минимум соответствовал явлению химической адсорбции, определяющая по сумме ковалентным радиусов между атомами; а второй – физической – по сумме радиусов Ван-дер-Ваальса между атомами – в нашем случае – между атомом металла и атомом углерода.

Химическая адсорбция наиболее предпочтительная для всех атомов металлов на поверхности кластеров размера (6, 6) и (3, 6), а физическая для кластеров размера (0, 10). Предпочтение сорбции заключается в различных электронных свойствах кластеров: (6, 6) и (3, 6) – металлические, (0, 10) – полупроводниковые.

1. Поликарпов Д.И. Исследование механизма адсорбции атомарного водорода на поверхность однослойных триагулярных и альфа-структурированных борных нанотрубок / Д.И. Поликарпов, И.В. Запороцкова // Вестник ВолГУ. – 2013. – № 1 (8). – 100 – 106 с.