

СЕНСОРНЫЕ СВОЙСТВА БОРОУГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК ТИПА ВС

Волкова Д. В.¹, Назаренко А. К.¹, Галоян Д. М.²

¹) Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева

²) Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»

E-mail: madam.volkova-vip-das@yandex.ru

SENSORY PROPERTIES OF BC-TYPE BOROCARBON NANOTUBES

Volkova D. V.¹, Nazarenko A. K.¹, Galoyan D. M.²

¹) D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia

²) National University of Science and Technology "MISIS"

This paper presents the results of a study of the effect of structural modifications of borocarbon nanotubes on the surface adsorption of the functional group -COOH. Borocarbon single-layer nanotubes of types «armchair» (6,6), «chiral» (3,6) and «zig-zag» (0,10) have been considered.

В настоящее время особый интерес научного сообщества является исследование бороуглеродных нанотрубок типа BC_n , которые получают сверткой изоструктурных аналогов графита. По сравнению с углеродными нанотрубками (УНТ), бороуглеродные (БУНТ) имеют меньшую энергию деформации, что делает их получение энергетически выгодным. Также одним из преимуществ БУНТ является интересные электронно-энергетические характеристики, которые зависят от взаимного расположения атомов бора и углерода в них [1].

Основная задача исследования является теоретическое моделирование наиболее вероятного расположения атомов В и С в бороуглеродных наноструктурах, а также исследование адсорбционных свойств бездефектных нанотрубок. Ожидается, что бороуглеродные нанотубулярные системы станут образующим материалом для новых сенсорных структур в различных областях защиты окружающей среды.

Для исследования сорбционных способностей функциональной группы -COOH было рассмотрено три вида однослойных открытых бороуглеродных нанотрубок типа ВС – «armchair» (6,6), «chiral» (3,6) и «zig-zag» (0,10) (рис. 1). Моделирование процесса сорбции осуществлялось посредством пошагового приближения функциональной группы -COOH к различным вариантам ориентации. Расчеты выполнялись в рамках расчетной схемы MNDO [2]. В результате были построены профили поверхностей потенциальных энергий взаимодействия БУНТ и функциональной группы -COOH.

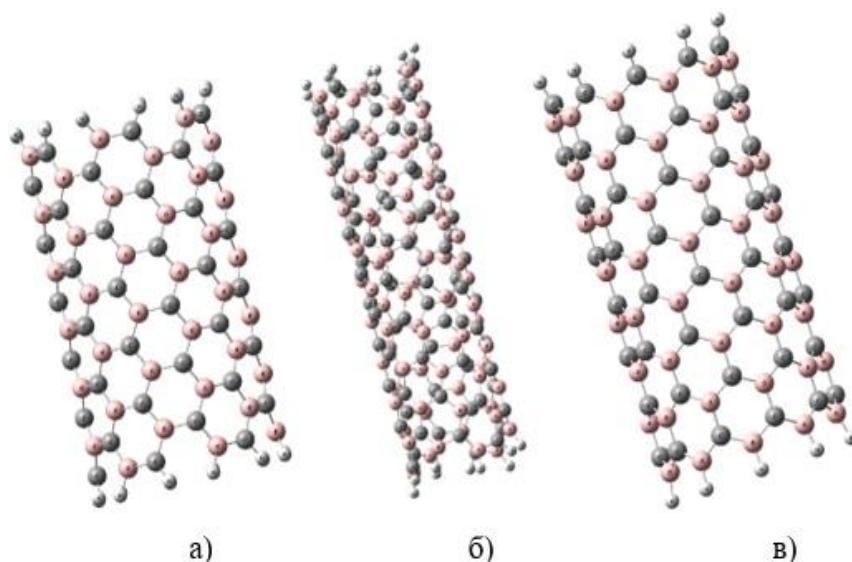


Рис. 1 – БУНТ размера: а) (6, 6), б) (3, 6), в) (0, 10)

Установлено, что во всех рассмотренных вариантах взаимодействия реализуются как химическая, так и физическая адсорбция. Хемосорбция функциональной группы $-\text{COOH}$ наиболее предпочтительная на поверхности кластеров размера (6, 6) и (3, 6), а физическая для кластеров размера (0, 10). Это объясняется тем, что кластеры имеют различные электронные свойства. К металлическому типу проводимости относятся БУНТ размера (6, 6) и (3, 6), а БУНТ размера (0, 10) к полупроводниковому типу.

1. Boroznin, S.V. BC₃ nanotubes: electronic and structural properties / I.V. Zaporotskova, S.V. Boroznin, E.V. Perevalova // Fundamental and Applied NanoElectroMagnetics (FANEM'12). Conference proceedings. – 2012. – P. 43.
2. Лебедев Н.Г. Полуэмпирические методы расчета электронного строения и энергетических характеристик многоэлектронных систем / Н.Г. Лебедев – Волгоград: Изд-во ВолГУ, 2000. – 24 С.