

Углеродные нанотрубки, модифицированные атомами меди: механизмы взаимодействия и особенности строения

Запороцков П.А.¹, Запороцкова И.В.¹, Чешева М.Ф.¹, Тимникова В.А.¹

paulzaporoskov@gmail.com

¹ Волгоградский государственный университет, Волгоград, Россия

Модифицирование УНТ металлическими частицами или их оксидами может приводить к созданию композитных структур, которые могут демонстрировать изменение намагниченности, плавные S-образные петли гистерезиса и полуметаллическое поведение [1]. Благодаря этим свойствам, становится возможным контроль транспорта лекарств с помощью декорированных УНТ путем приложения магнитного поля, что приведет к возможности применения их в качестве медицинских диагностических материалов. Кроме того, модифицированные атомами металлов нанотрубки могут выступать в качестве материалов сенсорных устройств, позволяющих эффективно определять присутствие газофазных атомов и молекул [2]. Поэтому исследования возможности модифицирования поверхности УНТ металлическими атомами является актуальным.

В данной работе выполнены теоретические исследования механизма взаимодействия однослойных углеродных нанотрубок (6, 6) и (6, 0) с атомами меди. Рассмотрены три возможных положения атома относительно поверхности УНТ: над атомом углерода, над центром углеродного гексагона и над центром связи C-C. Присоединение моделировалось последовательным приближением с шагом 0,1 Å атома меди к выбранной позиции. Расчеты были выполнены в рамках квантово-химического метода DFT, потенциала B3LYP с базисным набором 6-31G. В результате выполненных расчетов были построены энергетические кривые процесса взаимодействия меди с УНТ, определены основные параметры взаимодействия (расстояния и энергии), проанализировано зарядовое перераспределение в системах и выявлены особенности электронно-энергетического строения. Анализ полученных результатов позволил определить ширину запрещенной зоны модифицированных УНТ и отнести полученные системы к узкозонным полупроводникам. Кроме того, обнаружен перенос электронной плотности от атома Cu на ближайшие атомы углерода нанотрубки. Установлено, что взаимодействие может осуществляться для всех вариантов ориентации атома меди относительно поверхности УНТ, но энергетически более выгодным является положение Cu над центром углеродного гексагона.

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ (тема "FZUU-2023-0001").

Ссылки

1. Wu C., Shi K.L., Zhang Y. //Journal of Magnetism and Magnetic Materials. - 2018. - Vol. 465. - P. 114-121.
2. Maklin J. Nitric oxide gas sensors with functionalized carbon nanotubes // Physica Status Solidi B. - 2007. - Vol. 244. № 11. - P. 4298.