

## Влияние атомов замещения на электронные свойства углеродных нанотрубок

*Борознин С.В.<sup>1</sup>, Запороцкова И.В.<sup>1</sup>, Борознина Н.П.<sup>1</sup>, Григорьев А.Д.<sup>1</sup>, Запороцков П.А.<sup>1</sup>,  
Веревкина К.Ю.<sup>1</sup>*

*boroznin@volsu.ru*

<sup>1</sup> Волгоградский государственный университет, Волгоград, Россия

Несмотря на большой объем исследований по взаимодействию углеродных нанотрубок с различными материалами, бор (В) и азот (N) остаются наиболее подходящими веществами для проведения реакций замещения. Для этого имеется ряд предпосылок, таких как окислительно-восстановительные свойства гетероатомов, обеспечивающие возможность простого протекания процесса встраивания их в решетку нанотрубок [1].

Для модельного эксперимента были изучены углеродные нанотрубки с различной концентрацией замещающих атомов бора или азота, а именно: с содержанием 50% (каждый второй атом углерода был заменен на атом В или N); 25%; и нанотрубки, в которых происходит замещение лишь одного атома С на атом В или N в гексагоне (рис. 1). На рисунке 1 приведены изображения исследуемых нанотрубок для иллюстрации взаимного расположения атомов В и С.

В результате проведенных исследований было установлено, что присутствует зависимость ширины запрещенной зоны от модифицирующих атомов, а также перенос заряда между углеродом и атомами замещения. По результатам анализа углеродных нанотрубок, содержащих различные концентрации примесных атомов бора, можно отметить, что нанотрубки типа, содержащие атомы замещения (n, 0) - узкощелевые полупроводники. При модификации атомами бора на них концентрируется положительный заряд, в то время как азот оттягивает на себя электронную плотность в углеродных нанотрубках.

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

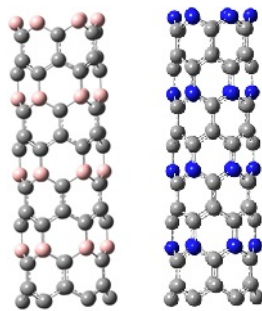


Рис. 1. Кластеры углеродных нанотрубок типа зигзаг с концентрацией замещающих атомов 15%: а) В; б) N

### ССЫЛКИ

1. S.V. Sawant, A.W. Patwardhan, J.B. Joshi, K. Dasgupta. Chemical Engineering Journal (2022) 427, 131616.