Влияние атомов замещения на электронные свойства углеродных нанотрубок

Борознин С.В. [1] , *Запороцкова И.В.* [1] , *Борознина Н.П.* [1] , *Григорьев А.Д.* [1] , *Запороцков П.А.* [1] , *Веревкина К.Ю.* [1]

boroznin@volsu.ru
[1] Волгоградский государственный университет, Волгоград, Россия

Несмотря на большой объем исследований по взаимодействию углеродных нанотрубок с различными материалами, бор (B) 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 B или N); 25%; и нанотрубки, в которых происходит замещение лишь одного атома C на атом B или N в гексагоне (рис. 1). На рисунке 1 приведены изображения исследуемых нанотрубок для иллюстрации взаимного расположения атомов B и C.

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”).

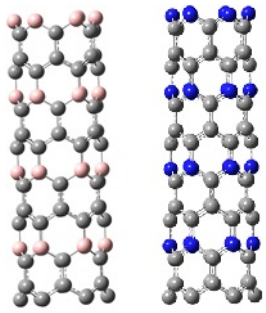

Рис. 1. Кластеры углеродных нанотрубок типа зигзаг с концентрацией замещающих атомов 15%: а) B; б) N

Ссылки

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