

УДК 620.3

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ АТОМОВ БЛАГОРОДНЫХ МЕТАЛЛОВ НА ПРОВОДЯЩИЕ СВОЙСТВА УГЛЕРОДНОЙ НАНОТРУБКИ

Д. Ф. СЕРГЕЕВ

Научный руководитель Н. П. БОРОЗНИНА, д-р физ.-мат. наук, доц.

Волгоградский государственный университет

Волгоград, Россия

Использование композитов с металлической матрицей, состоящих из различных комбинаций металлов, стало широко распространенным в различных видах промышленности [1]. Это объясняется наличием у данных материалов свойств, демонстрирующих их преимущество перед базовыми материалами [1, 2].

При этом современные тенденции по дальнейшей миниатюризации создают новый вызов перед промышленностью. Он заключен в улучшении нынешних свойств объектов с учетом их значительно меньших размеров [2].

Применение функционализированных нанотрубок призвано решить данную проблему за счет их различных улучшенных свойств [3–5].

Чтобы определить влияние атомов Pt и Au на проводящие свойства углеродной нанотрубки (УНТ) после функционализации, а также для достижения наибольшей точности при выявлении их месторасположения относительно поверхности УНТ, было создано три модели для каждого из анализируемых атомов (рис. 1).

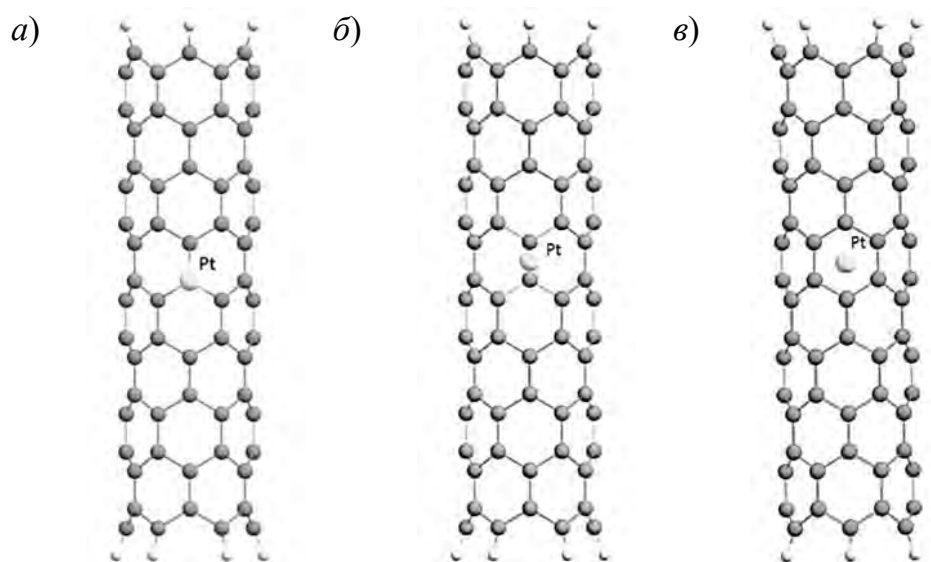


Рис. 1. Модель УНТ с присоединенным атомом платины: *а* – над атомом С; *б* – над центром связи С-С; *в* – над центром гексагона УНТ

Для получения исчерпывающего объема данных моделирование хода взаимодействия УНТ с атомами Pt и Au проходило с шагом в 0,01 нм к каждому из адсорбционных центров (см. рис. 1). Приближались данные атомы перпен-

дикулярно к продольной оси УНТ, при этом каждый шаг сопровождался расчетом потенциальной энергии полученной системы.

Проведенное исследование позволило установить наиболее вероятное, с энергетической точки зрения, месторасположение атомов Pt и Au на поверхности УНТ при ее функционализации. Им является расположение атомов благородных металлов над центром связи С-С поверхности УНТ (см. рис. 1, б). Оно было определено по наилучшей энергии взаимодействия из всех анализируемых систем.

Величина запрещенной зоны (ШЗЗ) представляет собой разность энергий верхней заполненной и нижней вакантной орбиталей. С помощью ШЗЗ определяются проводящие свойства материалов, включая различные наноструктуры. Для ее вычисления используется следующая формула:

$$\Delta E_g = E_{LUMO} - E_{HOMO}. \quad (1)$$

ШЗЗ у УНТ типа (6.0) без каких-либо модификаций составляет 0,69 эВ. При присоединении к «чистой» УНТ атомов Pt и Au наблюдается ее уменьшение, в случае Pt – до 0,62 эВ, в случае Au – до 0,59 эВ.

Заключение. Выполненные квантово-химические расчеты позволили установить следующее.

1. С точки зрения стабильности конфигурации наиболее оптимальным положением атомов платины и золота относительно поверхности УНТ является их нахождение над центром углеродной связи.

2. При присоединении данных атомов благородных металлов к центру углеродной связи УНТ происходит уменьшение ширины запрещенной зоны, что свидетельствует об улучшении проводящих свойств полученных систем.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Kumar, A.** Recent progress in production of metal matrix composites by stir casting process : An overview / A. Kumar, R. C. Singh, R. Chaudhary // *Materials Today : Proceedings*. – 2020. – Vol. 21. – P. 1453–1457.
2. **Aryasomayajula, L.** Carbon nanotube composites for electronic packaging applications / L. Aryasomayajula, K. J. Wolter // *Journal of Nanotechnology*. – 2013. – Vol. 2013, № 1. – P. 296517.
3. **Hamadani, M.** Modification of conductive properties of (10, 0) zigzag single-walled carbon nanotubes (SWCNT) by alkali metals absorption / M. Hamadani, Z. Tavangar, B. Noori // *Journal of Molecular Structure*. – 2014. – Vol. 1076. – P. 49–54.
4. Carbon nanotube/two-dimensional metal-organic framework composites with enhanced thermoelectric performances for thermoelectric generators / C. Y. Lin [et al.] // *Chemical Engineering Journal*. – 2025. – P. 166861.
5. Evaluating the performance of metal-doped anthracene nanotubes for gas sensing applications / M. A. S. Sakr [et al.] // *Materials Science and Engineering : B*. – 2025. – Vol. 317. – P. 118160.