УДК 620.3

квантово-химическое моделирование поверхностного модифицирования углеродной нанотрубки типа “Кресло” оксидом кобальта

*Эль Занин Антон Раджабович, студент1,*[*aelzanin@volsu.ru*](mailto:aelzanin@volsu.ru)

*Борознин Сергей Владимирович, д.ф.-м.н., доцент, зав. каф. судебной экспертизы и физического материаловедения1,*

[*boroznin@volsu.ru*](mailto:boroznin@volsu.ru)

*1Волгоградский государственный университет, г. Волгоград*

Аннотация: В работе было проведено квантово-химическое моделирование процесса присоединения оксида кобальта Co3O4 к поверхности углеродной нанотрубки (УНТ) типа “кресло” в трех различных положениях адсорбции. Исследуется влияние подобного модифицирования на электронно-энергетические свойства рассматриваемой наноструктуры.

Ключевые слова: углеродные нанотрубки, оксид кобальта, адсорбция, теория функционала плотности, ширина запрещенной зоны, зарядовое распределение.

Введение

УНТ и их производные в настоящее время рассматриваются как крайне перспективная группа материалов для применения в наноэлектронике и оптоэлектронике, в частности, для конструирования полевых транзисторов, FED-дисплеев [1], газовых сенсоров [2] и биосенсоров [3]. Высокая адсорбционная активность УНТ обуславливает широкие возможности по их модифицированию: возможно присоединение атомов, молекул, функциональных групп к поверхности, границам УНТ или их внедрение в полость структуры. Использование для модифицирования оксидов металлов позволяет управлять электрическими, оптическими и магнитными свойствами материала, а, соответственно, получать материалы с заданными характеристиками. **Целью** настоящей работы является исследование влияния на электронно-энергетические свойства УНТ поверхностного модифицирования оксидом кобальта Co3O4.

Проведение модельного эксперимента

Модельный эксперимент проводился методами теории функционала плотности на уровне теории B3LYP/3-21G. УНТ характеризовалась индексами хиральности (6,6). Для компенсации оборванных химических связей границы УНТ были замкнуты псевдоатомами водорода. Приближение оксида кобальта Co3O4 проводилось атомом кобальта вдоль нормали к поверхности УНТ. Были выбраны три положения адсорбции: над атомом углерода, над центром связи углерод-углерод и над центром гексагона. В каждой точке фиксировались значения расстояния и энергии для дальнейшего построения профилей поверхности потенциальной энергии (ПППЭ) взаимодействия. Заряды на атомах рассчитывались по схеме Малликена. Ширина запрещенной зоны ΔEg определялась как разность между энергией нижней вакантной молекулярной орбитали ELUMO и энергией верхней заполненной молекулярной орбитали EHOMO:

.

На основе проведенного квантово-химического моделирования были построены ПППЭ для каждого положения адсорбции (рис. 1). Анализ профилей показал, что взаимодействие между оксидом металла и УНТ становится возможным во всех рассматриваемых вариантах. Однако наиболее глубокий минимум при адсорбции над центром связи говорит о наибольшей энергетической выгодности этого положения по сравнению с остальными.

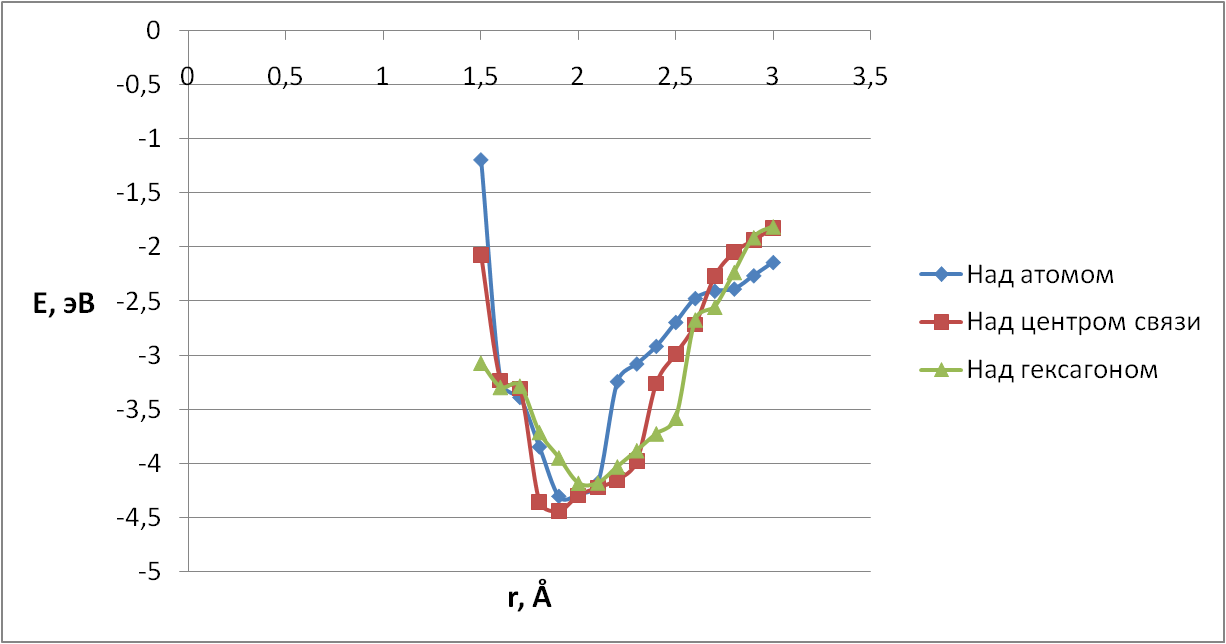


Рис. 1. ПППЭ взаимодействия УНТ и Co3O4 в различных положениях адсорбции.

Поверхностное модифицирование УНТ оксидом кобальта во всех рассмотренных случаях приводит к уменьшению ширины запрещенной зоны. Причем наиболее сильно это выражено для положения над центром гексагона – ширина запрещенной зоны здесь снижается на 26% при использовании при расчете энергий альфа-орбиталей и 36% при использовании энергий бета-орбиталей. Анализ зарядового распределения позволил установить уменьшение заряда на атомах углерода поверхности УНТ и увеличении заряда на атоме кобальта, которым производилось присоединение. Соответственно, электронная плотность смещается с оксида на УНТ.

Выводы

В работе было проведено квантово-химическое моделирование присоединения оксида кобальта Co3O4 к поверхности УНТ типа “кресло” с индексами хиральности (6,6). Установлено, что таким способом возможно управлять шириной запрещенной зоны, что может быть полезно для создания новых материалов для наноэлектроники и оптоэлектроники.

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

Список использованных источников

1. Maheswaran R., Shanmugavel B. P. A critical review of the role of carbon nanotubes in the progress of next-generation electronic applications // Journal of Electronic Materials, 2022, Vol. 51, no. 6., pp. 2786-2800. DOI: 10.1007/s11664-022-09516-8

2. Luo K. et al. Advances in carbon nanotube-based gas sensors: Exploring the path to the future // Coordination Chemistry Reviews, 2024, Vol. 518, p. 216049. DOI: 10.1016/j.ccr.2024.216049

3. Ferrier D. C., Honeychurch K. C. Carbon nanotube (CNT)-based biosensors //Biosensors, 2021, Vol. 11, no. 12, p. 486. DOI: 10.3390/bios11120486

Quantum chemical modeling of the surface modification of an “armchair” carbon nanotube with cobalt oxide

A.R. El Zanin, S.V. Boroznin

Abstract: In this work quantum chemical modeling of the process of attachment of cobalt oxide Co3O4 to the surface of a carbon nanotube (CNT) of the “armchair” type in three different adsorption positions was carried out. The effect of such modification on the electronic properties of the nanostructure under consideration is investigated.

Key words: carbon nanotubes, cobalt oxide, adsorption, density functional theory, energy gap, charge distribution.