www.volsu.ru

CC BY

DOI: https://doi.org/10.15688/NBIT.jvolsu.2025.4.6

УДК 620.3
ББК 30.37

О ФУНКЦИОНАЛИЗАЦИИ ПОВЕРХНОСТИ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК РАЗЛИЧНОЙ ГЕОМЕТРИИ ОКСИДОМ МАРГАНЦА [1]

Антон Раджабович Эль Занин

Магистрант, инженер лаборатории спектральных методов анализа,
Кафедра судебной экспертизы и физического материаловедения,
Волгоградский государственный университет
aelzanin@volsu.ru
просп. Университетский, 100, 400062 г. Волгоград, Российская Федерация

Сергей Владимирович Борознин

Доктор физико-математических наук, доцент,
Заведующий кафедрой судебной экспертизы
и физического материаловедения,
Волгоградский государственный университет
boroznin@volsu.ru
просп. Университетский, 100, 400062 г. Волгоград, Российская Федерация

Дмитрий Сергеевич Чуйкин

Генеральный директор ООО «Трубэксперт»,
info@trubexp.ru
ул. Генерала Шумилова, 29, 400057 г. Волгоград, Российская Федерация

Аннотация. В настоящей работе было проведено квантово-химическое моделирование функционализации поверхности углеродных нанотрубок типов «кресло» и «зигзаг» оксидом марганца MnO_2. Расчеты проводились методами теории функционала плотности на уровне теории B3LYP/SDD. Было установлено, что наиболее энергетически выгодным положением адсорбции в обоих случаях является положение над атомом углерода. Влияние процесса функционализации на значение ширины запрещенной зоны зависит от типа геометрии нанотрубки. Парциальные атомные заряды уменьшаются как на атоме металла оксида, так и на атоме углерода нанотрубки. Полученные в работе результаты могут быть полезны для создания высокочувствительных и селективных газовых сенсоров.

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

© Эль Занин А.Р., Борознин С.В., Чуйкин Д.С., 2025

Введение

Вопросы формирования гибридных композитных материалов, содержащих компоненты различной химической природы, являются крайне актуальными на текущем этапе развития материаловедческой науки. Связано это в том числе с тем обстоятельством, что получаемые в конечном итоге композиты проявляют свойства, не наблюдаемые у исходных компонентов по отдельности, то есть демонстрируют синергетические эффекты. Чрезвычайно любопытными в этом отношении являются материалы на основе углеродных наноструктур, в частности, углеродных нанотрубок (далее – УНТ) [4; 6; 12]. Уникальные механические свойства [11], большая удельная поверхность, термическая стабильность [1], достаточно высокая адсорбционная активность и возможность проявления различных типов проводимости в зависимости от геометрии, – сочетание данных свойств в одном материале, а именно в УНТ, делает их чрезвычайно перспективными для приложений в самых различных областях. Для создания наиболее эффективных решений прикладных задач УНТ подвергают функционализации, что позволяет усиливать тот спектр свойств, который необходим для обеспечения функционирования конкретного устройства. Функционализация поверхности, то есть присоединение к поверхности УНТ различных структурных элементов (атомов, молекул, функциональных групп, наночастиц), является широко распространенной, хорошо воспроизводимой и масштабируемой практикой.

В качестве перспективных функционализирующих агентов для УНТ могут выступать оксиды металлов [3; 14], в частности оксид марганца MnO_2. Следует отметить, что композиты на основе углеродных наноматериалов (и УНТ здесь не исключение) и MnO_2 могут найти широкое применение в качестве материалов для создания электродов суперконденсаторов [15]. В работе [13] путем восстановления перманганата калия $KMnO_4$ многостенными УНТ в кислой среде были получены композиты УНТ/MnO_2 с различным содержанием MnO_2. Чем более концентрированный раствор $KMnO_4$ использовался, тем выше было содержание MnO_2 в конечном продукте; при этом в работе использовались растворы $KMnO_4$ с молярной концентрацией 12 мМ, 25 мМ и 50 мМ, и в зависимости от этого параметра различные образцы композита были обозначены как CNT-MnO_2-12, CNT-MnO_2-25, CNT-MnO_2-50. Методами циклической вольтамперометрии, гальваностатических зарядно-разрядных измерений, измерений циклической стабильности было установлено, что композит CNT-MnO_2-25 обладает наибольшей из всех рассмотренных композитов удельной емкостью (674 Ф/г) и отличной циклической стабильностью, определенной в ходе 5 000 циклов заряда-разряда; на этом основании авторы заявляют о возможности применения данного материала для изготовления электродов для суперконденсаторов. В работе [7] методом восстановительного осаждения MnO_2 на послойно расположенные многостенные УНТ были получены ультратонкие пленочные электроды. С помощью сканирующей электронной микроскопии и просвечивающей электронной микроскопии было продемонстрировано, что эти тонкие пленки состоят из равномерного нанопокрытия MnO_2 на сетчатой структуре из многостенных УНТ, что является перспективной архитектурой для применения в суперконденсаторах. Изготовленные электроды демонстрируют удельную емкость в 246 Ф/см^3, при достаточно высокой циклической стабильности. Преимуществами предлагаемого метода изготовления данных электродов являются мягкие условия синтеза и возможность точного контроля толщины электрода. Возможно также применение композитов УНТ/MnO_2 в качестве основы для катализаторов [9], сенсоров, детектирующих микроколичества различных веществ [8; 16]. Все вышесказанное обуславливает актуальность исследования процессов формирования гибридных композитных наноструктур на основе УНТ и MnO_2.

Целью настоящей работы являлось исследования процесса функционализации УНТ различной геометрии оксидом марганца MnO_2 и влияния подобной процедуры на электронно-энергетические свойства наноматериала.

Материалы и методы

Квантово-химическое моделирование проводилось методами теории функционала плотности с использованием гибридного фун-

кционала B3LYP и базисного набора SDD. Для случая УНТ(6,0) дополнительно применялась процедура SCF = SLEAZY. Предварительно была проведена оптимизация геометрии оксида MnO_2: длина связи Mn-O составляет 1,605 Е, – и построены молекулярные кластеры УНТ типов «кресло» (6,6) и «зигзаг» (6,0). Длина кластера выбиралась таким образом, чтобы при нахождении адсорбционного центра приблизительно посередине УНТ можно было исключить влияние граничных эффектов. Для компенсации оборванных химических связей на границах УНТ ее концы насыщались псевдоатомами водорода. Приближение оксида марганца MnO_2 к поверхности УНТ производилось в три положения адсорбции (рис. 1): 1) над атомом углерода; 2) над центром связи углерод-углерод; 3) над центром гексагона. На каждом шаге приближения производился расчет полной энергии системы. На основе этих сведений впоследствии строились профили поверхности потенциальной энергии (ППЭ), позволяющие определить наиболее энергетически выгодное положение адсорбции.

Оценка зарядового распределения производилась на основе расчета атомных парциальных зарядов по схеме Малликена [5]. Ширина запрещенной зоны ΔE_g определялась как разность между энергией нижней вакантной молекулярной орбитали E_{LUMO} и энергией верхней заполненной молекулярной орбитали E_{HOMO}:

$$\Delta E_g = E_{LUMO} - E_{HOMO}$$

Поскольку системы УНТ/MnO_2 характеризуются нечетным числом электронов, в процессе квантово-химического моделирования использовался неограниченный метод Хартри-Фока (UHF), и расчет ширины запрещенной зоны производился отдельно для электронных состояний «спин-вверх» и «спин-вниз». Функции полной плотности состояний (DOS) и парциальной плотности состояний (PDOS) формировались с помощью программы GaussSum [10].

Результаты и обсуждение

Рассмотрим процесс функционализации УНТ(6,6) оксидом марганца MnO_2 (рис. 2). Наиболее глубокий минимум потенциальной энергии на ППЭ наблюдается в случае адсорбции оксида марганца в положение над атомом углерода, соответственно, это положение является наиболее энергетически выгодным. Расстояние адсорбции в этом случае составляет 2,7 Å, а энергия адсорбции

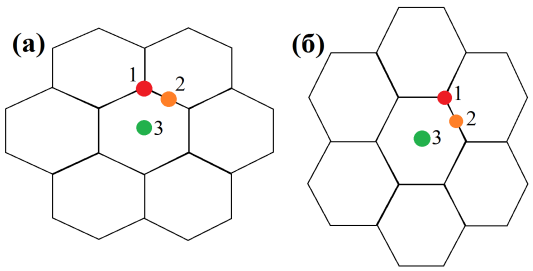


Рис. 1. Положения адсорбции MnO_2 на поверхности: *а* – УНТ(6,6); *б* – УНТ(6,0)

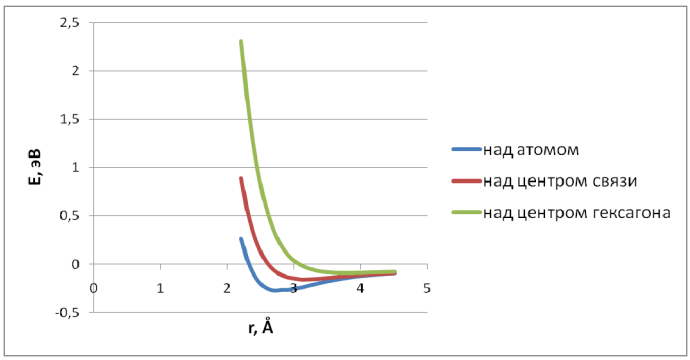


Рис. 2. ППЭ взаимодействия УНТ(6,6) и MnO_2

равняется 0,273 эВ. При адсорбции в положение над центром связи расстояние адсорбции составляет 3,1 Å, а энергия адсорбции – 0,158 эВ. Наименее энергетически выгодным положением адсорбции является положение над центром гексагона: энергия адсорбции в этом случае составляет 0,093 эВ, а расстояние адсорбции – 3,8 Å.

Теперь перейдем к рассмотрению случая функционализации УНТ(6,0) оксидом марганца MnO_2 (рис. 3). Как и в представленном выше случае УНТ(6,6), наиболее энергетически выгодным положением адсорбции является положение над атомом углерода, а наименее выгодным – положение над центром гексагона. В случае адсорбции в положение над атомом углерода расстояние адсорбции составляет 2,8 Å, а энергия адсорбции – 0,693 эВ. При адсорбции в положение над центром гексагона расстояние адсорбции составляет 2,9 Å, а энергия адсорбции равняется 0,514 эВ. Адсорбция в положение над центром связи характеризуется расстоянием 2,8 Å и энергией 0,602 эВ.

Примечательным является то обстоятельство, что с точки зрения предпочтительности того или иного положения адсорбции ситуация сходна для УНТ обоих типов геометрии. Однако значение энергии адсорбции в случае УНТ(6,0) в 2,5–5,5 раз превышает значение данного показателя в случае УНТ(6,6) при проведении сравнения по одному и тому же положению. Следовательно, между УНТ(6,0) и оксидом марганца формируется более прочная связь относительно структуры на основе УНТ(6,6). Более того, в случае УНТ(6,0) наблюдается меньший разброс значений расстояния адсорбции в зависимости от положения адсорбции (2,8–2,9 Å) по сравнению со случаем УНТ(6,6) (2,7–3,8 Å).

Для полученных в конечном итоге наиболее энергетически предпочтительных конфигураций (рис. 4) производился расчет ширины запрещенной зоны, анализ DOS и PDOS, оценка зарядового распределения.

В результате функционализации поверхности УНТ(6,0) наблюдается увеличение ширины запрещенной зоны: значение данного показателя для чистой УНТ(6,0) составляет 0,390 эВ, а для модифицированной – 0,461 эВ или 0,635 эВ, для состояний «спин-вверх» и «спин-вниз», соответственно. В случае УНТ(6,6)

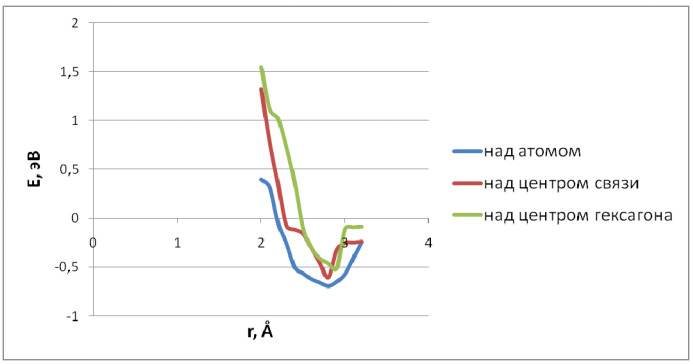


Рис. 3. ППТЭ взаимодействия УНТ(6,0) и MnO_2

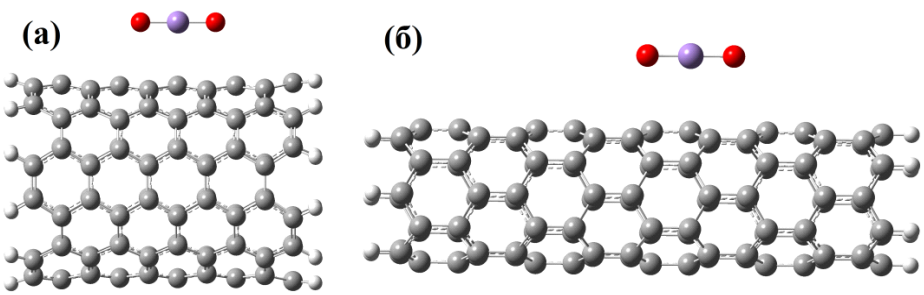


Рис. 4. Нанокомпозиты, в которых оксид марганца адсорбирован в положение над атомом углерода: *а* – УНТ(6,6)/MnO_2; *б* – УНТ(6,0)/MnO_2

наблюдается обратная зависимость: ширина запрещенной зоны для чистой УНТ(6,6) составляет 1,859 эВ, в то время как для функционализованной – 1,026 эВ или 1,651 эВ, для - состояний «спин-вверх» и «спин-вниз», соответственно.

Анализ DOS и PDOS (рис. 5) позволил установить, что уровни энергии, соответствующие дну зоны проводимости, являются примесными как для случая УНТ(6,6)/MnO_2, так и для случая УНТ(6,0)/MnO_2. В то же время также в обоих рассматриваемых случаях уровни энергии, соответствующие потолку валентной зоны, являются собственными, о чем свидетельствует отсутствие пиков на PDOS для MnO_2 вблизи границы валентной зоны.

Значение заряда на атоме металла (марганца) уменьшается. В изолированном оксиде данная величина равнялась 0,609, в то время как в композитах УНТ/MnO_2 – 0,485 и 0,499, для УНТ(6,0) и УНТ(6,6) соответственно. Причем ближайший к атому металла атом углерода УНТ приобретал отрицательный заряд: –0,148 и –0,170 для УНТ(6,0) и УНТ(6,6) соответственно. Данная закономерность является достаточно нетипичной для случаев функционализации поверхности УНТ металлосодержащими соединениями, тем не менее сходная ситуация была обнаружена ранее при функционализации поверхности УНТ оксидом олова SnO_2 [2].

Заключение

Таким образом, в настоящей работе было проведено квантово-химическое моделирование процесса функционализации поверхности УНТ(6,6) и УНТ(6,0) оксидом марганца MnO_2, определены наиболее энергетические выгодные конфигурации рассматриваемых композитов, оценены такие параметры как ширина запрещенной зоны и парциальные атомные заряды, проанализированы DOS и PDOS. На основе полученных результатов могут быть сделаны следующие выводы:

– наиболее энергетически выгодным положением адсорбции для УНТ обоих типов геометрии является положение над атомом углерода, однако связь между УНТ(6,0) и MnO_2 является более прочной нежели между УНТ(6,6) и MnO_2;

– ширина запрещенной зоны увеличивается в случае УНТ(6,0) и уменьшается в слу-

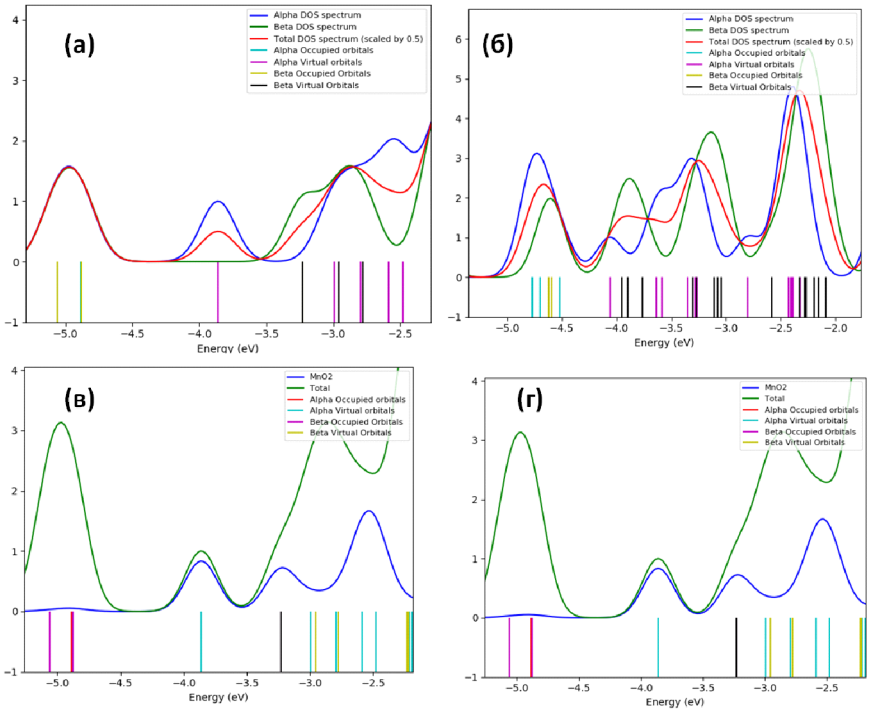


Рис. 5. DOS для нанокомпозитов: *а* – УНТ(6,6)/MnO_2; *б* – УНТ(6,0)/MnO_2
PDOS для нанокомпозитов: *в* – УНТ(6,6)/MnO_2; *г* – УНТ(6,0)/MnO_2

чае УНТ(6,6) независимо от спиновых состояний, используемых в расчетах. Функционализация с использованием оксида марганца приводит к формированию примесных уровней на границе зоны проводимости, в то время как на границе валентной зоны уровни энергии являются собственными;

– парциальные атомные заряды, как на атоме металла оксида, так и на атоме углерода, уменьшаются, что свидетельствует о смещении электронной плотности на данные атомы.

Полученные результаты могут быть полезны для создания новых устройств наноэлектроники, в том числе высокочувствительных и селективных газовых сенсоров.

ПРИМЕЧАНИЕ

[1] Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ (тема «FZUU-2023-0001»).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Бадамшина, Э. Р. Модифицирование углеродных нанотрубок и синтез полимерных композитов с их участием / Э. Р. Бадамшина, М. П. Гафурова, Я. И. Эстрин // Успехи химии. – 2010. – Т. 79, № 11. – С. 945–979.

2. Эль Занин, А. Р. Исследование процесса поверхностного модифицирования углеродных нанотрубок оксидом олова / А. Р. Эль Занин, С. В. Борознин // Нанотехнологии и наноматериалы: Современное состояние и перспективы развития : сб. тез. V Междунар. науч.-техн. конф. (Волгоград, 24–25 апр. 2025 г.). – Волгоград : Волгоград. гос. ун-т, 2025. – С. 6–7.

3. Эль Занин, А. Р. Квантово-химическое моделирование поверхностного модифицирования углеродной нанотрубки типа «кресло» оксидом кобальта / А. Р. Эль Занин, С. В. Борознин // Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники. – 2024. – Т. 27, № 4. – С. 317–323.

4. Carbon Nanotube Based Magnetic Composites for Decontamination of Organic Chemical Pollutants in Water: A Review / N. Agasti [et al.] // Applied Surface Science Advances. – 2022. – Vol. 10. – P. 100270.

5. Davidson, E. R. A Viewpoint on Population Analyses / E. R. Davidson, A. E. Clark // International Journal of Quantum Chemistry. – 2022. – Vol. 122, № 8. – P. e26860.

6. Developments in Conducting Polymer-, Metal Oxide-, and Carbon Nanotube-Based Composite Electrode Materials for Supercapacitors: A Review / A. Tundwal [et al.] // RSC Advances. – 2024. – Vol. 14, № 14. – P. 9406–9439.

7. Lee, S.W. Carbon Nanotube/Manganese Oxide Ultrathin Film Electrodes for Electrochemical Capacitors / S. W. Lee, J. Kim, S. Chen, P. T. Hammond, Y. Shao-Horn // ACS nano. – 2010. – Vol 4, № 7. – P. 3889–3896.

8. Meng, A. A Free-Standing Flexible Sensor MnO_2–Co/rGO-CNT for Effective Electrochemical Hydrogen Peroxide Sensing and Real-Time Cancer Biomarker Assaying / A. Meng [et al.] // Ceramics International. – 2023. – Vol. 49, № 2. – P. 2440–2450.

9. Nanostructured Manganese Oxide Supported on Carbon Nanotubes for Electrocatalytic Water Splitting / K. Mette [et al.] // ChemCatChem. – 2012. – Vol. 4, № 6. – P. 851–862.

10. O'boyle, N. M. Cclib: A Library for Packageindependent Computational Chemistry Algorithms / N. M. O'boyle, A. L. Tenderholt, K. M. Langner // Journal of Computational Chemistry. – 2008. – Vol. 29, № 5. – P. 839–845.

11. Rashko, M. N. Mechanical Properties of Carbon Nanotubes (CNTs): A Review / M. N. Rashko, S. M. Hamad, A. A. Barzinjy, A. H. Hamad // Eurasian Journal of Science and Engineering. – 2022. – Vol. 8, № 2. – P. 54–68.

12. Recent Advances in Carbon Nanotubes-Based Microwave Absorbing Composites / X. Chen [et al.] // Ceramics International. – 2021. – Vol. 47, № 17. – P. 23749–23761.

13. Singu, B. S. Carbon Nanotube-Manganese Oxide Nanorods Hybrid Composites for High-Performance Supercapacitor Materials / B. S. Singu, E. S. Goda, K. R. Yoon // Journal of Industrial and Engineering Chemistry. – 2021. – Vol. 97. – P. 239–249.

14. Surface and Edge Functionalization of Carbon Nanotubes with Iron Oxide for Enhanced Gas Sensing: A Theoretical Investigation / A. R. El Zanin [et al.] // Sensors and Actuators A: Physical. – 2025. – Vol. 389. – P. 116565.

15. Wayu, M. Manganese Oxide Carbon-Based Nanocomposite in Energy Storage Applications / M. Wayu // Solids. – 2021. – Vol. 2, №. 2. – P. 232–248.

16. 3D Porous CNT/MnO_2 Composite Electrode for High-Performance Enzymeless Glucose Detection and Supercapacitor Application / C. Guo [et al.] // Sensors and Actuators B: Chemical. – 2015. – Vol. 206. – P. 407–414.

REFERENCES

1. Badamshina E.R., Gafurova M.P., Estrin Ya.I. Modifitsirovaniye uglerodnykh nanotrubok i sintez

polimernykh kompozitov s ikh uchastiyem [Modification of Carbon Nanotubes and Synthesis of Polymeric Composites Involving the Nanotubes]. *Uspekhi khimii* [Russ. Chem. Rev.], 2010, vol. 79, no. 11, pp. 945-979.

2. El Zanin A.R., Boroznin S.V. Issledovanie processa poverhnostnogo modificirovaniya uglerodnyh nanotrubok oksidom olova [Investigation of the Process of the Surface Modification of Carbon Nanotubes with Tin Oxide]. *Nanotehnologii i nanomaterialy: Sovremennoye sostoyaniye i perspektivy razvitiya: sb. tez. V Mezhdunar. nauch.-tekhn. konf. (Volgograd, 24–25 apr. 2025 g.)* [Nanotechnologies and Nanomaterials: Current State and Development Prospects. Abstracts of the 5th International Scientific and Technical Conference, Volgograd, April 24–25, 2025]. Volgograd, Volgograd. gos. un-t, 2025, pp. 6-7.

3. El Zanin A.R., Boroznin S.V. *Kvantovo-himicheskoye modelirovaniye poverhnostnogo modificirovaniya uglerodnoj nanotrubki tipa «kreslo» oksidom kobalta* [Quantum Chemical Modeling of the Surface Modification of an "Armchair" Carbon Nanotube with Cobalt Oxide]. *Izvestiya Vysshih Uchebnyh Zavedeniy. Materialy Elektronnoy Tehniki* [Materials of Electronics Engineering], 2024, vol. 27, no. 4, pp. 317-323.

4. Agasti N., Gautam V., Pandey N., Genwa M., Meena P.L., Tandon S., Samantaray R. Carbon Nanotube Based Magnetic Composites for Decontamination of Organic Chemical Pollutants in Water: A Review. *Applied Surface Science Advances*, 2022, vol. 10, p. 100270.

5. Davidson E.R., Clark A.E. A Viewpoint on Population Analyses. *International Journal of Quantum Chemistry*, 2022, vol. 122, no. 8, p. e26860.

6. Tundwal A., Kumar H., Binoj B.J., Sharma R., Kumar G., Kumari R., Dhayal A., Yadav A., Singh D., Kumar P. Developments in Conducting Polymer-, Metal Oxide-, and Carbon Nanotube-Based Composite Electrode Materials for Supercapacitors: A Review. *RSC Advances*, 2024, vol. 14, no. 14, pp. 9406-9439.

7. Lee W., Kim J., Chen S., Hammond P.T., Shao-Horn Y. Carbon Nanotube/Manganese Oxide Ultrathin Film Electrodes for Electrochemical. *ACS Nano*, 2010, vol. 4, no. 7, pp. 3889-3896.

8. Meng A., Hong X., Zhang Y., Liu W., Zhang Z., Sheng L., Li Z. A Free-Standing Flexible Sensor MnO_2–Co/rGO-CNT for Effective Electrochemical Hydrogen Peroxide Sensing and Real-Time Cancer Biomarker Assaying. *Ceramics International*, 2023, vol. 49, no. 2, pp. 2440-2450.

9. Mette K., Bergmann A., Tessonnier J.P., Ндvecker M., Yao L., Ressler T., Schlцgl R., Strasser P., Behrens M. Nanostructured Manganese Oxide Supported on Carbon Nanotubes for Electrocatalytic Water Splitting. *ChemCatChem*, 2012, vol. 4, no. 6, pp. 851-862.

10. O'boyle N.M., Tenderholt A.L., Langner K.M. Cclib: A Library for PackageIndependent Computational Chemistry Algorithms. *Journal of Computational Chemistry*, 2008, vol. 29, no. 5, pp. 839-845.

11. Rashko M.N., Hamad S.M., Barzinjy A.A., Hamad A.H. Mechanical Properties of Carbon Nanotubes (CNTs): A Review. *Eurasian Journal of Science and Engineering*, 2022, vol. 8, no. 2, pp. 54-68.

12. Chen X., Liu H., Hu D., Liu H., Ma W. Recent Advances in Carbon Nanotubes-Based Microwave Absorbing Composites. *Ceramics International*, 2021, vol. 47, no. 17, pp. 23749-23761.

13. Singu B.S., Goda E.S., Yoon K.R. Carbon Nanotube-Manganese Oxide Nanorods Hybrid Composites for High-Performance Supercapacitor Materials. *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*, 2021, vol. 97, pp. 239-249.

14. El Zanin A.R., Boroznin S.V., Zaporotskova I.V., Boroznina N.P., Venkatesh N., Murugadoss G. Surface and Edge Functionalization of Carbon Nanotubes with Iron Oxide for Enhanced Gas Sensing: A Theoretical Investigation. *Sensors and Actuators A: Physical*, 2025, vol. 389, pp. 116565.

15. Wayu M. Manganese Oxide Carbon-Based Nanocomposite in Energy Storage Applications. *Solids*, 2021, vol. 2, no. 2, pp. 232-248.

16. Guo C., Li H., Zhang X., Huo H., Xu C. 3D Porous CNT/MnO_2 Composite Electrode for High-Performance Enzymeless Glucose Detection and Supercapacitor Application. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 2015, vol. 206, pp. 407-414.

ABOUT THE SURFACE FUNCTIONALIZATION OF THE CARBON NANOTUBES WITH DIFFERENT GEOMETRY WITH MANGANESE OXIDE

Anton R. El Zanin

Master's Student, Engineer, Spectral Analysis Methods Laboratory,
Department of the Forensic Examination and Physical Materials Science,
Volgograd State University
aelzanin@volsu.ru
Prosp. Universitetsky, 100, 400062 Volgograd, Russian Federation

Sergey V. Boroznin

Doctor of Sciences (Physics and Mathematics), Associate Professor,
Head of the Department of the Forensic Examination
and Physical Materials Science,
Volgograd State University
boroznin@volsu.ru
Prosp. Universitetsky, 100, 400062 Volgograd, Russian Federation

Dmitriy S. Chuikin

General Director of Trubexpert LLC,
info@trubexp.ru
Generala Shumilova St, 29, 400057 Volgograd, Russian Federation

Abstract. This study presents a quantum-chemical investigation into the functionalization of carbon nanotubes (CNTs) with manganese oxide (MnO), focusing on the influence of nanotube geometry. Using density functional theory (DFT) calculations at the B3LYP/SDD level, the adsorption of MnO onto both "armchair" (6,6) and "zigzag" (6,0) CNT structures was modelled. The analysis determined the most energetically favorable adsorption sites, evaluated changes in electronic properties, and assessed charge distribution via Mulliken population analysis. The results indicate that for both CNT chiralities, adsorption directly above a carbon atom is the most stable configuration. However, the interaction strength and resulting electronic effects are geometry-dependent. The functionalization significantly alters the CNTs' band gap, decreasing it for the armchair structure while increasing it for the zigzag type. Furthermore, a reduction in partial atomic charges was observed on both the manganese atom and the adjacent carbon atom of the CNT. These findings, detailing the modulated electronic structure, provide a theoretical foundation for the rational design of advanced composite nanomaterials. Specifically, the controlled changes in electronic properties suggest high potential for developing enhanced and selective gas-sensing applications based on CNT-MnO hybrids.

Key words: carbon nanotubes, manganese oxide, density functional theory, band gap, charge distribution.