



www.volsu.ru



DOI: <https://doi.org/10.15688/NBIT.jvolsu.2024.2.1>

УДК 538.9:546.57

ББК 22.353.2-2

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ УГЛЕРОДНЫХ НАНОСТРУКТУР С АТОМОМ СЕРЕБРА¹

Данил Романович Ерофеев

Студент, кафедры судебной экспертизы и физического материаловедения,
Волгоградский государственный университет
Nim-231_568565@volsu.ru
просп. Университетский, 100, 400062 г. Волгоград, Российская Федерация

Наталья Павловна Борознина

Доктор физико-математических наук, профессор,
Волгоградский государственный университет
boroznina.natalya@volsu.ru
просп. Университетский, 100, 400062 г. Волгоград, Российская Федерация

Аннотация. В данной работе рассматривалось теоретическое исследование возможности применения углеродных нанотрубок в качестве элементов сенсорных устройств, проявляющих чувствительность в отношении молекулы серебра. В качестве нанотрубки выступала углеродная нанотрубка типа зиг-заг (6,0). Данная система позволит ускорить решения проблем прикладного использования наносистем: для высокоэффективных датчиков нового поколения на основе нанотрубок, обеспечивающих установление наличия ядовитых веществ и т. д. Результаты компьютерного моделирования указали на отличительные параметры взаимодействия, полученные методом DFT. Сделан вывод о том, что углеродные нанотрубки практически всегда образуют с Ag стабильные химические комплексы. Полученная наносистема проявляет сорбционную и сенсорную активность в отношении серебра.

Ключевые слова: углеродная нанотрубка, сенсорные свойства, сенсорные датчики, нанотехнологии, композитные наноматериалы, адсорбция, абсорбция, атом серебра, нанoeлектроника и микросистемная техника.

Введение

С момента своего первого открытия после массового производства фуллеренов углеродные нанотрубки (далее – УНТ) стали предметом интенсивных исследований в химии, физике и материаловедении. Как одностенные нанотрубки, так и многостенные нанотрубки бывают разных размеров и киральности, тем самым демонстрируя удивительно разнообразные физические свойства [1]. Ожидается, что УНТ будут потенциально полезны в электронных устройствах в качестве квантовой проволоки, газовой сенсорной промышленности, технологии нанопинцетов, микроскопии, атомно-силовой микроскопии высокого разрешения (АСМ) и автоэмиссионных дисплеев [2].

Нанотрубки подразделяются на одностенные нанотрубки (ОУНТ) и многостенные нанотрубки (МУНТ), и обе категории могут быть функционализированы и нефункционализированы, чтобы обеспечить возможность использования в различных областях науки и техники.

Что касается наночастиц серебра, то наночастицы серебра демонстрируют превосходную активность поверхностно-усиленного комбинационного рассеяния света, что вызвало большой интерес в биосенсорных приложениях. Наночастицы серебра также хорошо известны своими антибактериальными свойствами. Кроме того, во многих работах сообщалось, что НЧ Ag обладают ката-

литической активностью в отношении малых молекул [3].

Многие характерные свойства наноматериалов зависят от их размера, морфологии и покрытия поверхности. Разработка методов получения, позволяющих эффективно контролировать размер, морфологию и плотность наночастиц, имеет решающее значение для их применения.

Материалы и методы

В данной работе был смоделирован процесс добавления атома серебра к углеродной нанотрубке типа (6,0). Ее модель представлена на рисунке 1. Нанотрубка была кеппирована с двух концов атомами водорода.

Моделирование выполнено с использованием расчетного метода DFT, функционала V3LYP и базисного набора 6-31G.

Атом серебра располагался на поверхности в трех вариантах адсорбции: над атомом углерода, над центром связи C-C и над центром гексагона (см. рис. 2).

Результаты исследования

Приближение атома серебра к выбранному центру на поверхности УНТ моделировалось пошаговым приближением перпендикулярно оси нанотрубки с шагом 0,1 Å. По результатам расчетов были построены энергетические кривые взаимодействия атома серебра с поверхностью нанотрубки (см. рис. 3–5).

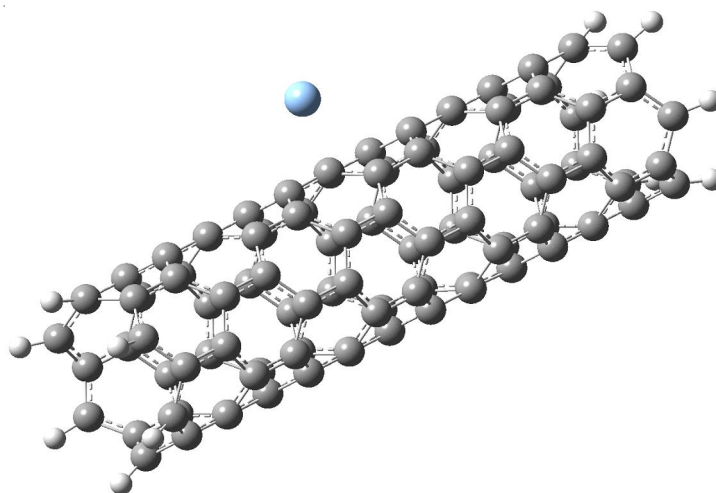


Рис. 1. Модель УНТ типа 6.0 с присоединенным атомом серебра, находящимся над центром атома углерода

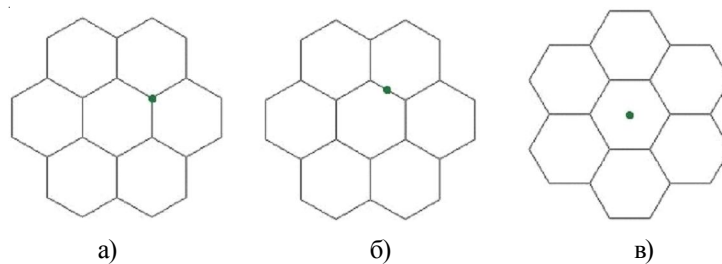


Рис. 2. Варианты расположения атома серебра относительно поверхности углеродной нанотрубки:
 а) над атомом углерода; б) над центром углеродной связи C-C; в) над центром гексагона

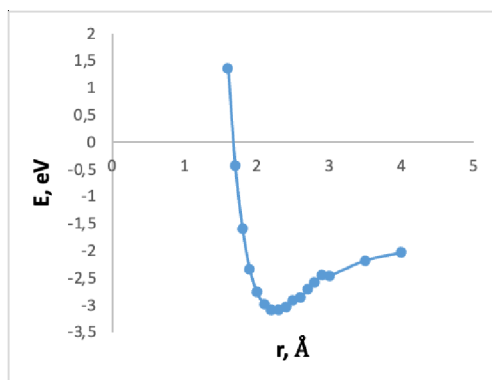


Рис. 3. Энергетические кривые взаимодействия атомарного серебра с углеродной нанотрубкой (6,0) при расположении его над атомом углерода

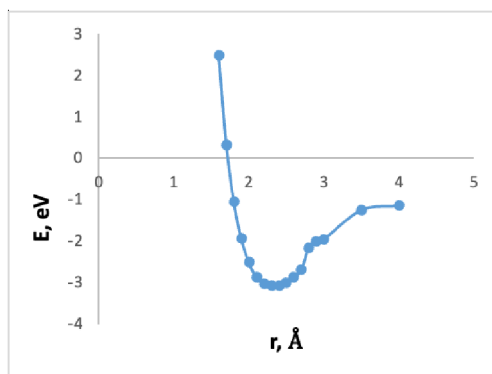


Рис. 4. Энергетические кривые взаимодействия атомарного серебра с углеродной нанотрубкой (6,0) при расположении его над центром углеродной связи

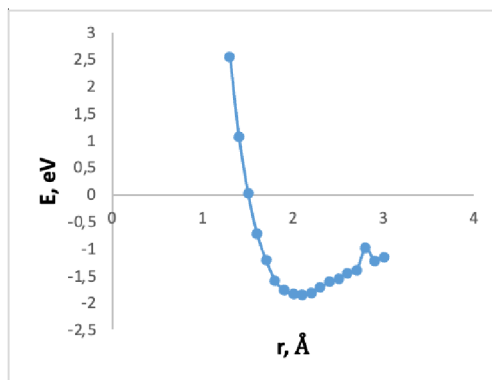


Рис. 5. Энергетические кривые взаимодействия атомарного серебра с углеродной нанотрубкой (6,0) при присоединении его к центру гексагона

Наличие характерного минимума на кривых позволяют утверждать, что атом серебра будет успешно адсорбироваться на поверхности углеродной нанотрубки. Наиболее энергетически выгодным является положение атома серебра над атомом углерода (табл. 1). Расстояние взаимодействия и соответствующая ему энергия характерны для физической адсорбции.

В качестве величины, определяющей электронные свойства углеродной нанотрубки, была выбрана ширина запрещенной зоны DE_g , значение которой рассчитывалось как разность между энергией нижней вакантной молекулярной орбитали E_{LUMO} и энергией верхней заполненной молекулярной орбитали E_{HOMO} :

$$DE_g = E_{LUMO} - E_{HOMO}$$

Как видно из таблицы 2, при присоединении исследуемого атома происходит изменение запрещенной зоны в зависимости от местонахождения атома относительно поверхности углеродной нанотрубки.

Выводы

Таким образом, мы установили, что модифицирование углеродных нанотрубок путем присоединения к их поверхности атомов се-

ребра позволяет управлять их электронными свойствами, в частности, шириной запрещенной зоны. Учитывая наличие зависимости между шириной запрещенной зоны и показателем преломления, становится возможным применение рассмотренных комплексов для оптических приложений. Подобные комплексы также перспективны для использования в качестве биосенсоров, позволяющих детектировать присутствие в среде микроколичеств различных веществ на основании указанных закономерностей, что в конечном счете делает их чрезвычайно полезными для экологических и медицинских исследований.

ПРИМЕЧАНИЕ

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

The research was carried out within the framework of the state task of the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (topic “FZUU-2023-0001”).

REFERENCES

1. Chen Y., Ciuparu D., Haller G.L., Lim S., Pfeifferle L.D. The Effect of the Cobalt Loading on the

Таблица 1

Основные характеристики процесса присоединения атома Ag к поверхности углеродной нанотрубки

Положение присоединения атома серебра	Расстояние взаимодействия, Å	Энергия взаимодействия, эВ
к атому С	2,3	-3,02
к центру гексагона	2,1	-1,85
к центру связи	2,3	-3,08

Таблица 2

Значения ширины запрещенной зоны при присоединении атома серебра к поверхности углеродной нанотрубки для трех вариантов расположения Ag относительно поверхности

Положение присоединения атома серебра	Значение ширины запрещенной зоны, эВ
чистая УНТ	0.69
к атому С	0.76
к центру связи	0.61
к центру гексагона	0.79

Growth of Single Wall Carbon Nanotubes by CO Disproportionation on Co-MCM-41 Catalysts. *Carbon*, 2006, vol. 44 (1), pp. 67-78. DOI: 10.1016/j.carbon.2005.07.035.

2. Mahajan S.V., Hasan S.A., Cho J., Shaffer M.S.P., Boccaccini A.R., Dickerson J.H. Carbon Nanotube-Nanocrystal Heterostructures Fabricated by

Electrophoretic Deposition. *Nanotechnology*, 2008, vol. 19, pp. 195301. DOI: 10.1088/0957-4484/19/19/195301

3. Mondroui M., Pirvu C., Ion R., Demetrescu I. Comparing Performance of Nanoarchitectures Fabricated by Ti6Al7Nb Anodizing in Two Kinds of Electrolytes. *Electrochimica Acta*, 2010, vol. 56 (10), pp. 193-202. DOI: 10.1016/j.electacta.2010.08.100

STUDY OF INTERACTION OF CARBON NANOSTRUCTURES WITH SILVER ATOM

Daniil R. Erofeev

Student, Department of Forensic Examination and Physical Materials Science,
Volgograd State University
Nim-231_568565@volsu.ru
Prosp. Universitetsky, 100, 400062 Volgograd, Russian Federation

Natalya P. Boroznina

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

Abstract. In this work, a theoretical study of the possibility of using carbon nanotubes as elements of sensor devices that exhibit sensitivity towards silver molecules was considered. A zig-zag (6.0) type carbon nanotube acted as a nanotube. This system will allow for the acceleration of solutions to problems of the applied use of nanosystems, such as high-performance sensors of the new generation on the basis of nanotubes, establishing the presence of poisonous substances, etc. Computer modelling showed distinctive interaction parameters obtained by the DFT method. It is concluded that carbon nanotubes almost always form stable chemical complexes with Ag. The obtained nanosystem exhibits sorption and sensory activity towards silver. Modification of carbon nanotubes by attaching silver atoms to their surface allows for control of their electronic properties, in particular the width of the forbidden zone. Taking into account the dependence between the forbidden zone width and the refractive index, it becomes possible to use these complexes for optical applications. Such complexes are also promising for use as biosensors, allowing them to detect the presence of microquantities of various substances in the environment on the basis of these regularities, which ultimately makes them extremely useful for environmental and medical research.

Key words: carbon nanotube, sensor properties, sensors, nanotechnology, composite nanomaterials, adsorption, absorption, silver atom, nanoelectronics and microsystems engineering.