



DOI: <https://doi.org/10.15688/jvolsu10.2017.4.6>

УДК 537.311.33(075.8)

ББК 22.379я73

ВНЕДРЕНИЕ АТОМОВ ГАЗОВОЙ СРЕДЫ В БОРНЫЕ НАНОТРУБКИ ТИПА ВС

Олеся Александровна Какорина

Кандидат физико-математических наук,
доцент кафедры судебной экспертизы и физического материаловедения,
Волгоградский государственный университет
sefm@volsu.ru, olessya.08@mail.ru
просп. Университетский, 100, 400062 г. Волгоград, Российская Федерация

Сергей Владимирович Борознин

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

Татьяна Федоровна Панченко

Учитель химии и биологии, МКОУ «Бузиновская СШ»
buzschool@yandex.ru
ул. Школьная, 1, 404544 хут. Бузиновка, Калачевский р-н, Волгоградская обл., Российская Федерация

Оксана Олеговна Стрекозова

Магистрант,
Волгоградский государственный университет
5492422@mail.ru
просп. Университетский, 100, 400062 г. Волгоград, Российская Федерация

Александр Александрович Захарченко

Кандидат физико-математических наук,
доцент кафедры полупроводников и микроэлектроники,
Воронежский государственный университет
cntbox@yandex.ru
Университетская площадь, 1, 394018 г. Воронеж, Российская Федерация

Аннотация. В данной работе рассматриваются два способа заполнения борных нанотрубок атомами газовой среды: метод просачивания и капиллярный метод.

Выполненные исследования доказали возможность и достаточную эффективность процесса заполнения борных нанотрубок атомами газовой среды, что открывает интересные перспективы использования интеркалированных тубуленов и создания новых устройств на их основе.

Ключевые слова: бороуглеродные нанотрубки, капиллярный метод, квантово-химические расчеты, профиль поверхности потенциальной энергии, газофазные наноконпозиты, хлорирование, оксидирование.

В настоящее время внимание исследователей привлекают борные наноструктуры благодаря своим уникальным физико-химическим свойствам. Сам бор применяется в виде добавки при получении коррозионно-устойчивых и жаропрочных сплавов. Его соединения – нитрид BN и другие – используются как полупроводниковые материалы и диэлектрики. Борные атомы могут соединяться между собой в цепочки, сетки, каркасы и другие формы. Поэтому последние десятилетия очень много исследователей обратили свое внимание на различные геометрические и топологические конфигурации бора (борные кластеры, борные нановолокна, бораны) [1–6].

В данной работе рассматриваются два способа заполнения борных нанотрубок атомами газовой среды: метод просачивания и капиллярный метод. Для изучения процесса заполнения была выбрана борная нанотрубка типа (6, 6). В качестве основной расчетной схемы использовалась модель молекулярного кластера в рамках квантово-химической схемы MNDO. Для изучения процесса адсорбции была выбрана структура элементарной ячейки БУНТ, которая состояла из 95 атомов бора и содержала пять слоев гексагонов в направлении продольной оси трубки и шесть гексагонов по ее окружности. На концах трубки нескомпенсированные связи были замкнуты псевдоатомами, в качестве которых выступил атом водорода. Связь В-С в нанотубулоне была выбрана на 1.44 Å.

**Механизм внедрения атомов
О, Н, Сl, F в полость БУНТ
методом просачивания**

Внедрение молекулы атомов моделировалось пошаговым приближением их к

нанотрубке вдоль перпендикуляра, проведенного к центральной оси тубулена через центр бокового углеродного гексагона с шагом 0.1 Å.

Геометрия системы «БУНТ – внедряющийся атом» оптимизировалась на каждом шаге. Выполненные расчеты позволили построить энергетические кривые данного процесса для каждого атома (см. рис. 1).

Анализ результатов показал, что для проникновения внутрь трубки через боковую поверхность атомам необходимо преодолеть потенциальный барьер, отождествляемый с энергией активации $E_{акт}$. Его величина может быть рассчитана по формуле:

$$E_{акт} = E_{БУНТ+X} - (E_{БУНТ} + E_x)$$

где $E_{БУНТ+X}$ – полная энергия системы взаимодействующих объектов (трубка + внедряющийся атом (Н, О, F, Сl)); $E_{БУНТ}$ – полная энергия бороуглеродной нанотрубки типа (6, 6); E_x – энергия атомов О, Н, F, Сl.

Высота энергетических барьеров для каждого атома представлена в таблице. Следует отметить, что пик барьера находится внутри трубки. Анализируя величины барьеров, можно сделать вывод, что заполнение БУНТ методом просачивания возможно только для атома водорода (наименьшая величина барьера – $E_6 = 3,75$ эВ).

**Основные энергетические
характеристики процессов внедрения
атомов путем просачивания**

Атомы	Высота барьера, эВ
О	16,65
Н	3,75
Сl	23,45
F	14,41

Исследование проникновения атомов газофазной среды в БУНТ (6, 6) капиллярным методом

Как известно, возможным способом внутреннего насыщения бороуглеродных нанотруб атомами является способ капиллярного проникновения элементов в полость тубулена через его торец. Поэтому нами было рассмотрено заполнение бороуглеродного тубулена (6, 6) атомами О, Н, F, Cl именно этим способом.

Исследовался вариант внедрения атомов через открытую границу тубулена. При

этом ненасыщенные связи на границе полубесконечной трубки замыкались атомами водорода (так называемая «краевая функционализация»).

Были выполнены расчеты процесса внедрения для каждого предложенного атома.

Заполнение трубки моделировалось путем пошагового приближения атомов О, Н, F, Cl к тубулену вдоль его главной продольной оси (с шагом 0.1 Å) и проникновением внутрь через торец тубулена. Выполненные расчеты позволили построить энергетические кривые процесса внедрения атомов О, Н, F, Cl внутрь тубулена через его открытую границу (см., напр., рис. 2).

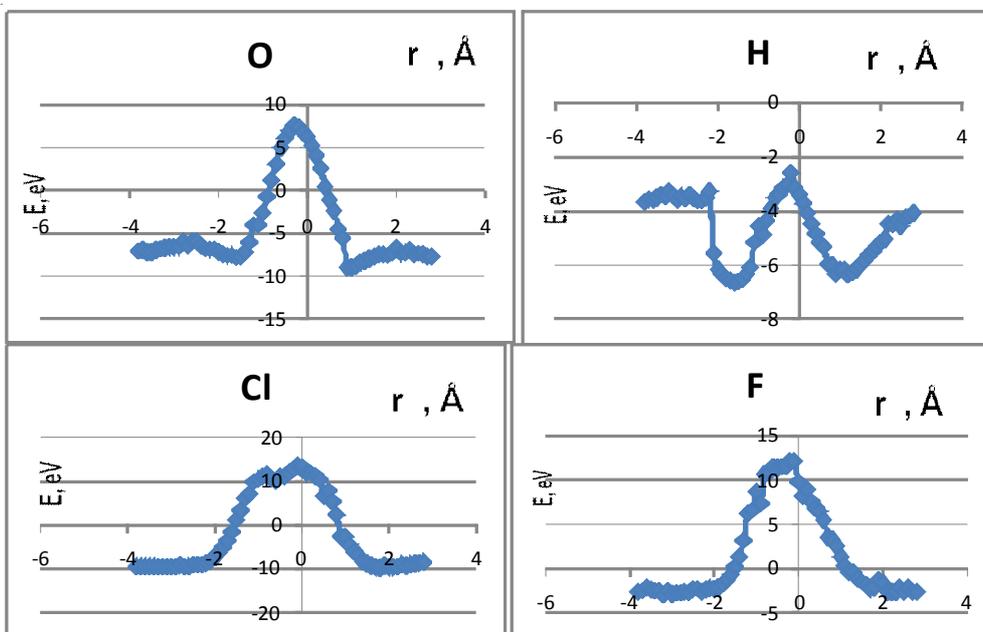


Рис. 1. Профили поверхности потенциальных энергий процессов внедрения О, F, Cl, Н в бороуглеродную нанотрубку (6, 6)

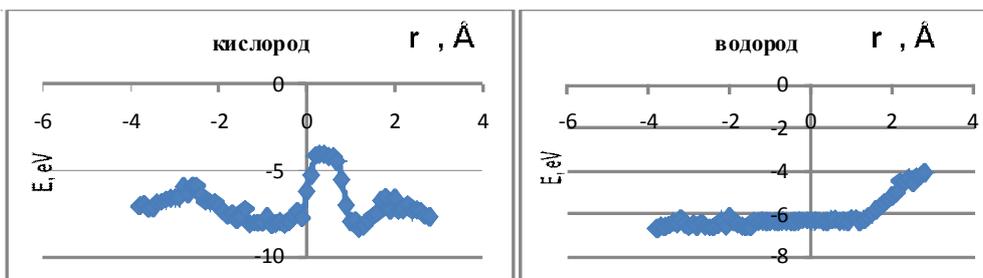


Рис. 2. Энергетические кривые зависимости энергии от расстояния для случая проникновения атомов через торец трубки

Анализ энергетической кривой для атома водорода обнаружил отсутствие энергетического барьера на пути атома H. При этом минимум на кривой, свидетельствующий об эффективности проникновения атома водорода в полость, находится внутри трубки. Значение минимума энергии на кривой, нормированной на бесконечность, отождествляется с энергией устойчивого положения атома водорода в полости ($E_{св}$).

Для случая внедрения атомов кислорода, фтора и хлора в полость трубки минимум энергии находится за пределами границы тубулена. Дальнейшее проникновение атомов в трубку требует дополнительных внешних условий, которые позволят преодолеть энергетический барьер. Как видно из рисунка 2, атомы, преодолев энергетический барьер, попадают в стабильное состояние уже внутри трубки. Этот факт иллюстрирует возможность заполнения БУНТ атомами газовой среды.

Заключение

Выполненные исследования доказали возможность и достаточную эффективность процесса заполнения борных нанотрубок атомами газовой среды, что открывает интересные перспективы использования интеркалированных тубуленов и создания новых устройств на их основе.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Борознин, С. В. Исследование процессов адсорбции кислорода на поверхности борсодержащих нанотрубок / С. В. Борознин, И. В. Запороцкова, Е. В. Перевалова // Нанотехнологии и наноматериалы: современное состояние и перспективы развития в условиях Волгоградской области : материалы 3-й Всерос. науч.-техн. конф. – Волгоград, 2010. – С. 132–143.

2. Запороцкова, И. В. Абсорбция молекулы кислорода на поверхность различных видов нанотрубок / И. В. Запороцкова, С. В. Борознин, Е. В. Перевалова // Двенадцатая Всероссийская молодежная конференция по физике полупроводников и полупроводниковой опто- и наноэлектронике. – СПб. : Изд-во Политехн. ун-та, 2010. – С. 80.

3. Запороцкова, И. В. Об адсорбции молекулярного кислорода на внешней поверхности борной и борнитридной нанотрубок / И. В. Запороцкова, Е. В. Перевалова, С. В. Борознин // Вестник Волгоградского государственного университета. Серия 10, Инновационная деятельность. – 2011. – Вып. 5. – С. 18–24.

4. Процессы оксидирования борсодержащих нанотрубок / С. В. Борознин [и др.] // Технология металлов. – 2011. – № 6. – С. 17–21.

5. Zaporotskova, I. V. Investigation of oxidation in boron-containing nanotubes / I. V. Zaporotskova, S. V. Boroznin, E. V. Perevalova // Nanoscience and Nanotechnology Letters. – 2012. – Vol. 4. – P. 1–4.

6. Zaporotskova, I. V. Research of oxidation processes of boron-carbon nanotubes / I. V. Zaporotskova, S. V. Boroznin, E. V. Perevalova // Nanoscience & nanotechnology. – 2011. Book of abstract. – 2011. – P. 67–68.

REFERENCES

1. Boroznin S.V., Zaporotskova I.V., Perevalova E.V. Issledovanie protsessov adsorbtsii kisloroda na poverkhnosti borsoderzhashchikh nanotrub [The Study of Processes of Oxygen Adsorption on the Surface of Boron-Containing Nanotubes]. *Nanotekhnologii i nanomaterialy: sovremennoe sostoyanie i perspektivy razvitiya v usloviyakh Volgogradskoy oblasti : materialy 3-y Vseros. nauch.-tekhn. konf.* [Nanotechnologies and Nanomaterials: the Current State and Development Prospects in the Volgograd Region: Materials of the 3rd All-Russian Scientific-Technical Conference]. Volgograd, 2010, pp. 132-143.

2. Zaporotskova I.V., Boroznin S.V., Perevalova E.V. Absorbtsiya molekuly kisloroda na poverkhnost razlichnykh vidov nanotrub [The Absorption of Oxygen Molecules on the Surface of Various Types of Nanotubes]. *Dvenadtsataya Vserossiyskaya molodezhnaya konferentsiya po fizike poluprovodnikov i poluprovodnikovoy opto- i nanoelektronike* [The Twelfth All-Russian Youth Conference on Semiconductor Physics and Semiconductor Opto- and Nanoelectronics]. Saint Petersburg, Izd-vo Politekhn. un-ta, 2010, p. 80.

3. Zaporotskova I.V., Boroznin S.V., Perevalova E.V. Ob adsorbtsii molekulyarnogo kisloroda na vneshney poverkhnosti bornoy i boronitridnoy nanotrub [About the Adsorption of Molecular Oxygen on the External Surface of Boron Nanotubes and Boronitride Nanotubes]. *Vestnik Volgogradskogo gosudarstvennogo universiteta. Seriya 10, Innovatsionnaya deyatel'nost* [Science Journal of Volgograd State University. Technology and Innovations], 2011, no. 5, pp. 18-24.

4. Boroznin S.V., et al. Protsessy oksidirovaniya borsoderzhashchikh nanotrub [The Processes of Boron Nanotubes Oxidation]. *Tekhnologiya metallov*, 2011, no. 6, pp. 17-21.

5. Zaporotskova I.V., Boroznin S.V., Perevalova E.V. Investigation of oxidation in boron-containing

nanotubes. *Nanoscience and Nanotechnology Letters*, 2012, vol. 4, pp. 1-4.

6. Boroznin S.V., Zaporotskova I.V., Perevalova E.V. Research of oxidation processes of boron-carbon nanotubes. *Nanoscience & Nanotechnology 2011. Book of abstracts*, 2011, pp. 67-68.

DOPING OF GAS ATOMS INTO BORON-CARBON NANOTUBES

Olesya Aleksandrovna Kakorina

Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor,
Department of Forensic Science and Physical Materials Science,
Volgograd State University
sefm@volsu.ru, olessya.08@mail.ru
Prosp. Universitetsky, 100, 400062 Volgograd, Russian Federation

Sergey Vladimirovich Boroznin

Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor,
Department of Forensic Science and Physical Materials Science,
Volgograd State University
sefm@volsu.ru, boroznin@volsu.ru
Prosp. Universitetsky, 100, 400062 Volgograd, Russian Federation

Tatyana Fedorovna Panchenko

Teacher of Chemistry and Biology,
Buzinovskaya Secondary School
buzschool@yandex.ru
Shkolnaya St., 1, 404544 Buzynovka Hamlet, Kalachevsky District, Volgograd Region, Russian Federation

Oksana Olegovna Strekozova

Master Student,
Volgograd State University
5492422@mail.ru
Prosp. Universitetsky, 100, 400062 Volgograd, Russian Federation

Aleksandr Aleksandrovich Zakharchenko

Candidate of Physical and Mathematical Sciences,
Associate Professor, Department of Semiconductors and Microelectronics,
Voronezh State University
cntbox@yandex.ru
Universitetskaya Sq., 1, 394018 Voronezh, Russian Federation

Abstract. Today the researchers focus on the boron nanostructures due to their unique physical and chemical properties. The boron is applied as the additive in obtaining corrosion-resistant and heat-resistant alloys. Its connections – nitride BN and others – are used as semiconductor

materials and dielectrics. Boron atoms can be connected in chains, meshes, frameworks and other forms. Therefore, over the last decade a lot of researchers have turned their attention to various geometric and topological configuration of boron (boron clusters and boron nanofibers, boranes).

In this paper we consider two methods of filling nanotubes with boron atoms of the gaseous medium: the method of percolation and capillary method. To study the seeding process, boron nanotube of special type was selected. We use the model of molecular cluster in the framework of quantum-chemical MNDO scheme as the main design scheme. We study the adsorption process in the structure of the unit cell, which consists of 95 boron atoms and five layers of hexagons in the direction of the longitudinal axis of the tube and six hexagons on its circumference. At the end of the tube uncompensated connection was closed by pseudoatoms, which made the hydrogen atom.

The research performed have proved the possibility and efficiency of process of filling nanotubes of boron with atoms of the gaseous medium, which opens up interesting prospects for the use of intercalated tubes and the creation of new devices based on them.

Key words: boron carbon nanotubes, capillary method, quantum chemical calculations, surface profile of potential energy, gas-phase nanocomposites, chlorination, oxidation.