



УДК 538.975
ББК 22.3

НАНОТУБУЛЯРНЫЕ ФОРМЫ БОРА: ОСОБЕННОСТИ ЭЛЕКТРОННО-ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО СТРОЕНИЯ И ПРОВОДЯЩИХ СВОЙСТВ

Е.В. Борознина, И.В. Запороцкова, С.В. Борознин, Д.И. Поликарпов

В данной работе представлены результаты исследования влияния структурных модификаций борных нанотрубок на электронное строение и проводящие характеристики, а также результаты расчетов поверхностных, в том числе сорбционных свойств однослойных борных нанотрубок. Обсуждаются особенности механизмов внешней адсорбции различных атомов на поверхности борной нанотрубки малого диаметра и вызванные ими изменения проводящего состояния поверхностно-модифицированных тубуленов. Расчеты выполнены в рамках моделей ионно-встроенного ковалентно-циклического и молекулярного кластеров с помощью полуэмпирической схемы MNDO.

Ключевые слова: борные нанотрубки, полуэмпирические расчеты, адсорбция, протонная проводимость, молекулярный кластер.

чрезвычайно актуальными ввиду ожидаемых перспектив его применения.

Введение

В 2004 г. ученым удалось синтезировать чистые однослойные борные нанотрубки [4], которые могут быть рассмотрены как новый класс топологической структуры бора, обладающий уникальными физико-химическими и проводящими свойствами, открывающий широчайшие перспективы его использования в нано- и микроэлектронике. Ожидается, что борные нанотубулярные системы станут функциональными блоками и элементами (транзисторами, диодами и т. п.) для следующего поколения нанoeлектронных устройств.

Однако до настоящего времени не существует однозначного мнения о точной структуре нанотубулярного бора, практически ничего не известно о его электронно-энергетическом строении, физических и химических свойствах. Поэтому исследования новой конфигурации бора, а именно его нанотубулярной модификации, в настоящее время являются

Исследование влияния структурных модификаций борных нанотрубок на электронное строение и проводящие характеристики

Основным расчетным методом в работе является метод ИВ-КЦК в рамках схемы MNDO [2]. Ниже представлены матричные элементы оператора Хартри-Фока-Рутана для двухцентрового взаимодействия и одноцентрового взаимодействия:

$$F_{\mu\nu}^{AA} = \delta_{\mu\nu} U_{\text{ш}} + \sum_{\mu',\nu'}^{(A)} P_{\mu'\nu'} \cdot \left[\langle \mu\nu | \mu'\nu' \rangle - \frac{1}{2} \langle \mu\mu' | \nu\nu' \rangle \right] +$$

$$+ \sum_{B(\neq A)}^{(I)} \left[\sum_{\lambda,\sigma}^{(B)} P_{\lambda\sigma} \cdot \langle \mu\nu | \lambda\sigma \rangle - Z_B \cdot \langle \mu\nu | s_B s_B \rangle \right] +$$

$$+ \delta_{\mu\nu} \left[V_A^{(\infty)} - V_A^{(I)} \right];$$

$$F_{\mu\lambda}^{AB} = \beta_{\mu\lambda} - \frac{1}{2} \sum_{\nu}^{(A)} \sum_{\sigma}^{(B)} P_{\nu\sigma} \cdot \langle \mu\nu | \lambda\sigma \rangle$$

где μ, ν, μ', ν' – атомные орбитали s -, p - и d - типа, локализованные на атоме А;
 s, λ – атомные орбитали, локализованные на атоме В;
 U_{rr} – кинетическая и потенциальная энергия электрона в атоме;
 $\delta_{\tau\sigma}$ – символ Кронекера; P является матрицей плотностей (матрицы порядков связей);
 $V_{\mu\lambda}$ – двухцентровой одноэлектронный остоновый резонансный интеграл;
 $\langle \mu\mu' | \nu\nu' \rangle, \langle \mu\nu | \lambda\sigma \rangle$ – одноцентровые и двухцентровые интегралы отталкивания электронов, соответственно;
 s_B – атомные орбитали s -типа атома В;
 $V_A^{(i)}$ – маделунговский потенциал в точке А, создаваемый только теми атомами, которые находятся в области I;
 $V_A^{(o)}$ – маделунговский потенциал, создаваемый остальной областью нанотрубки.

Были исследованы электронно-энергетические характеристики чистых однослойных нанотрубок на основе гексагонального бора. Рассмотрены фрагменты однослойных борных нанотрубок типа (n, n) и $(n, 0)$ ($n = 4, 5, 6, 9, 11, 12$). В качестве геометрических моделей изучаемых тубуленов выбраны кластеры, содержащие n шестиатомных борных циклов по периметру трубки и два и более элементарных слоя вдоль ее оси. На рисунке 1 в качестве примера представлены расширенные элементарные ячейки (далее – РЭЯ) нанотрубок $(6, 6)$ и $(6, 0)$. На выбранные РЭЯ накладывались циклические граничные условия вдоль оси трубок. Длины связи между соседними атомами бора, полученные в результате оптимизации геометрии систем, получились равными 1,44 Å для всех рассмотренных типов нанотрубок.

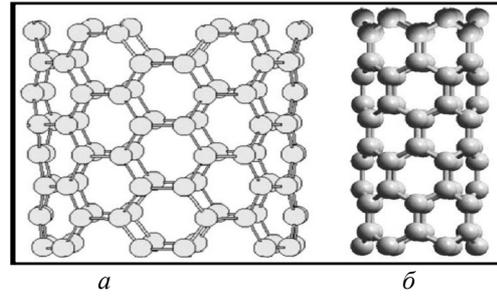


Рис. 1. РЭЯ борных нанотрубок:
 а – (6, 6)-тип; б – (6, 0)-тип

Результаты расчетов основных характеристик борных нанотрубок приведены в таблицах 1 и 2. Анализ ширины запрещенной зоны ΔE_g , позволил сделать вывод, что все они являются узкозонными полупроводниками, независимо от диаметра. Были вычислены энергии деформации $E_{\text{деф}}$ как разность энергий квазипланарной РЭЯ из атомов бора и РЭЯ соответствующей нанотрубки, полученной в результате скручивания гексагонального бора.

Анализ результатов показал, что энергия деформации уменьшается с увеличением диаметра для борных трубок типа (n, n) , в отличие от борных нанотрубок $(n, 0)$ типа (рис. 2). Это позволило сделать вывод, что образование нанотрубок типа $(n, 0)$ путем скручивания квазипланарного гексагонального бора энергетически невыгодно и, соответственно, менее вероятно. Анализ зарядового состояния борных тубуленов установил их устойчивую симметрию – заряды на атомах бора практически нулевые.

Можно рассчитать концентрацию носителей заряда в собственных полупроводниках, к которым относятся рассмотренные нами БНТ, опираясь на известный

Таблица 1

Основные электронно-энергетические характеристики борных нанотрубок (n, n)

n	Количество трансляций	Удельная энергия, эВ	Потенциал ионизации, эВ	$\Delta E_{g,z}$, эВ
4	4	68,01	6,43	0,07
5	4	67,91	6,07	0,04
6	4	68,14	6,32	0,90
9	3	68,97	7,55	0,02
11	2	69,34	7,73	0,35
12	2	69,33	7,84	0,22

Основные электронно-энергетические характеристики борных нанотрубок (*n*, 0)-типа

<i>n</i>	Количество трансляций	Удельная энергия, эВ	Потенциал ионизации, эВ	ΔE_g , эВ
4	4	67,85	6,50	0,27
5	4	67,80	7,18	0,00
6	4	67,88	6,24	0,20
8	3	67,92	6,69	0,01
12	2	69,03	7,41	0,02

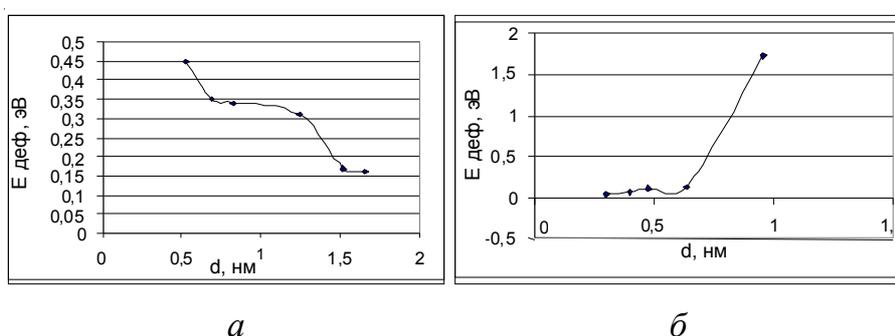


Рис. 2. Зависимость энергии деформации $E_{\text{деф}}$ от диаметра d тубулена: *a* – (*n*, *n*)-типа; *б* – (*n*, 0)-типа

формализм теории твердого тела [1] и используя формулу:

$$n = \frac{8\pi}{3} \left(\frac{2m_n^*}{h^2} \right)^{3/2} (E_F - E_C)^{3/2}$$

где m_n^* – эффективная масса электрона;
 $h = 6,63 \times 10^{-34}$ Дж·с – постоянная Планка;
 E_F – энергия уровня Ферми;
 E_C – энергия дна зоны проводимости.

Как известно, эффективная масса определяется кривизной зависимости $E(k)$. В нашем расчетном методе энергетический спектр строится для точки $k = 0$, когда эффективная масса электрона фактически совпадает с массой свободного электрона. В результате для борных нанотрубок (далее – БНТ) типа «arm-chair» нами получено значение концентрации основных носителей: $n \sim 10^{20}$ см⁻³. Получаем, что БНТ малого диаметра в смысле проводимости являют-

ся системами, близкими к металлам, для которых концентрация носителей $\sim 6 \times 10^{22}$ см⁻³.

Поверхностная модификация борных нанотрубок как способ создания элементов аноэлектроники с регулируемой проводимостью

Известно, что дефекты существенно изменяют проводящие свойства углеродных нанотрубок. Интересно проследить за изменением свойств борных тубуленов с дефектами.

Изучено электронное строение и энергетические характеристики борной трубки типа (6, 6), включающей дефекты замещения. Дефект находился в центре кластера (см. рис. 3). В качестве дефекта выбирался либо нейтральный атом углерода (C), либо положительно (C⁺) и отрицательно (C⁻) заряженные ионы углерода.

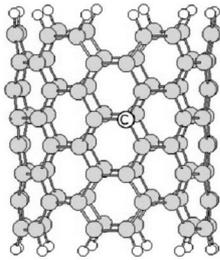


Рис. 3. Молекулярный кластер борной нанотрубки типа (6, 6), содержащей одиночный дефект замещения атома бора поверхностью атомом углерода

Анализ электронно-энергетической структуры показал, что дефект вносит дополнительные уровни в валентную зону, что приводит к ее расширению по сравнению с валентной зоной (далее – ВЗ) бездефектной борной нанотрубки. Величина запрещенной щели не изменяется, хотя меняется положение нижней вакантной и верхней заполненной орбиталей.

Итак, можно утверждать, что характер проводимости В-нанотрубки не изменяется при введении одиночного дефекта замещения.

Далее была исследована борная нанотрубка (6, 6), содержащая вакансию. Процесс образования вакансии моделировался пошаговым удалением (с шагом 0,1 Å) атома В от поверхности тубулена до момента его отрыва. В результате выполненных расчетов был построен профиль потенциальной энергии процесса образования вакансии, представленный на рисунке 4.

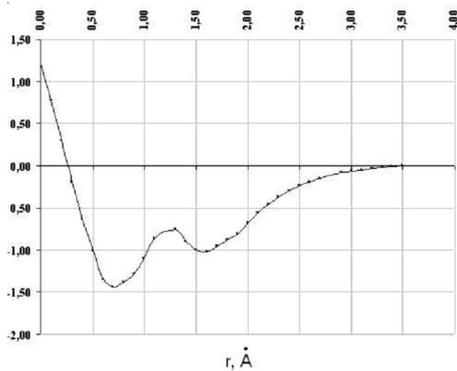


Рис. 4. Профиль потенциальной энергии процесса образования вакансии в борной нанотрубке типа (6, 6), нормированной к энергии отрыва атома (значение энергии системы $E_{tub-B} = 0$ на расстоянии $R_{tub-B} = N$)

Из графика видно, что при отрыве атом В преодолевает потенциальный барьер,

отождествляемый с энергией активации дефекта $E_{акт} = 0,68$ эВ. Найденное значение $E_{акт}$ позволило оценить относительную долю вакансий при температуре $T = 1000$ К по известной формуле:

$$n/N \sim \exp[-\text{Exp}\{-kT\}]$$

Она оказалась равной 0,53. Таким образом, при температуре 1000 К на 100 узлов борной нанотрубки может приходиться 53 вакансии, при этом система должна сохранить свою устойчивость [1].

Анализ одноэлектронных спектров борных нанотрубок с вакансией не обнаружил изменения ширины запрещенной зоны последних, что свидетельствует о низкой чувствительности проводящих свойств борных тубуленов к одиночным точечным дефектам.

Далее была исследована адсорбция атома водорода как способ создания носителя заряда на поверхности борного тубулена. Рассмотрены три варианта ориентации адсорбирующегося атома Н (адатома) относительно поверхности нанотрубки: I) над атомом бора, II) над центром связи В-В, III) над центром гексагона (рис. 5).

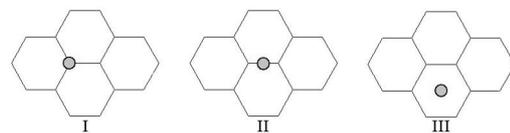


Рис. 5. Три варианта ориентации адатома (Н) относительно поверхности борного тубулена: I – над атомом бора; II – над центром связи В-В; III – над центром гексагона

Процесс адсорбции моделировался пошаговым приближением адсорбирующихся атомов к поверхности борного тубулена. Выполненные расчеты позволили построить профили поверхности потенциальной энергии процессов адсорбции (см. рис. 6).

Оказалось, что во всех рассмотренных положениях атом Н активно адсорбируется на поверхности борной нанотрубки. Анализ зарядового состояния системы установил, что при адсорбции атома водорода имеет место перенос электронной плотности с атома Н на поверхность борной нанотрубки, то есть фактически образуется протон H^+ .

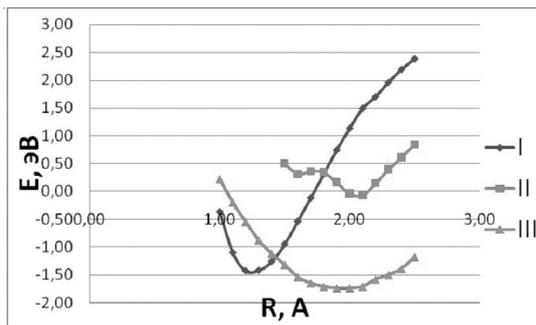


Рис. 6. Профили поверхности потенциальной энергии взаимодействия атома Н с поверхностью борной нанотрубки типа (6, 6) для трех вариантов расположения его относительно борного тубулена: I – над атомом бора; II – над центром связи В-В; III – над центром борного гексагона

Таким образом, было обнаружено, что присоединение атома водорода к поверхности борного тубулена приводит к созданию внешнего носителя положительного заряда – протона, что позволяет предположить возможность использования нанотрубок на основе бора в качестве элементов наноэлектроники с поверхностной протонной проводимостью.

Для исследования механизма протонной проводимости на поверхности борных нанотрубок были выбраны тубулены типа (6, 6) и (8, 8). Рассмотрены два варианта миграции одиночного протона Н⁺ вдоль поверхности нанотрубки (рис. 7):

- 1) так называемый «прыжковый» механизм, когда протон Н⁺ движется от одного атома бора поверхности до другого над двумя следующими друг за другом гексагонами (путь I);
- 2) «эстафетный» механизм, когда протон Н⁺ перемещается от одного атома бора до другого вдоль соединяющей их связи (путь II).

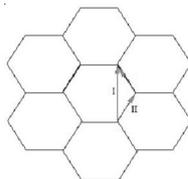


Рис. 7. Пути миграции протона по поверхности нанотруб типа «arm-chair» варианты I и II

Для обоих вариантов построены кривые энергий процессов миграции протона

(см. рис. 8). Установлено, что во всех случаях на кривых имеются максимумы, которые отождествляются с энергией активации ($E_{акт}$).

Используя полученные значения величин потенциальных барьеров, преодолеваемых протоном при миграции вдоль поверхности, можно оценить подвижность носителей поверхностного положительного заряда. Для этого была выполнена следующая расчетная процедура.

Для начала мы произвели оценку доли частиц, обладающих достаточной энергией для преодоления потенциального барьера классическим способом по формуле:

$$\alpha = \exp\left(-\frac{E_{акт}}{kT}\right)$$

Далее была оценена скорость поверхностной миграции протонов с использованием формулы:

$$v_s = \left(\frac{kT}{2\pi m}\right)^{1/2} n\alpha,$$

где n – концентрация протонов.

В нашем случае скорость поверхностной миграции протона, отнесенная к значению концентрации протонов n , может считаться дрейфовой и использоваться для оценки подвижности протона, являющегося внешним носителем положительного заряда по формуле

$$\mu = \frac{v_{др}}{E}$$

где E – напряженность электрического поля.

Значения подвижности протонов для рассматриваемых борных нанотрубок представлены в таблице 3.

Для сравнения подвижность электронов в кремнии по различным данным составляет (0,14...0,19) м²/(ВЧс), а в арсениде галлия – (0,93...1,1) м²/(ВЧс). Подвижность дырок в кремнии и арсениде галлия составляет (0,04...0,05) м²/(ВЧс) и 0,045 м²/(ВЧс), соответственно. Таким образом, подвижность протона на поверхности борных нанотрубок сравнима с подвижностью основных носителей типичных полупроводников.

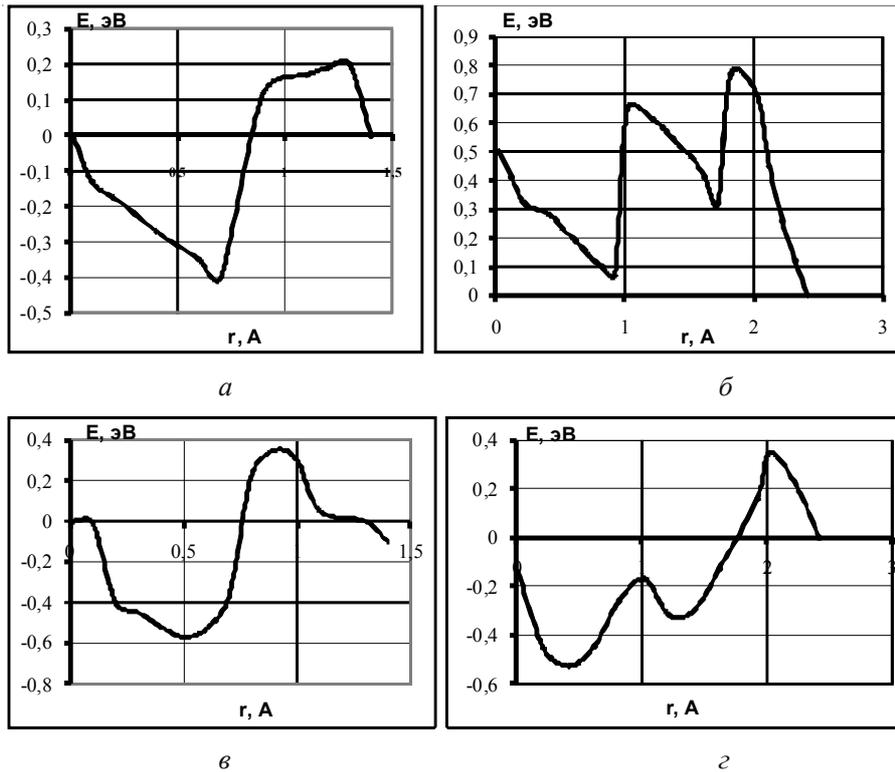


Рис. 8. Потенциальная энергия миграции протона по поверхности нанотрубки:
 а – (6, 6) – путь II; б – (6, 6) – путь I; в – (8, 8) – путь II; г – (8, 8) – путь I

Таблица 3

Основные характеристики процесса продольной миграции протона по поверхности борных нанотрубок типов (6, 6) и (8, 8) *

БНТ	(6, 6)		(8, 8)	
	I	II	I	II
α	$1,3 \times 10^{-4}$	$7,8 \times 10^{-2}$	$1,7 \times 10^{-2}$	$2,0 \times 10^{-2}$
$v_{s, c^{-1} m^{-2}}$	$1,5 \times 10^{-2}$	8,9	1,9	2,3
$\mu, m^2/V \times c$	$1,5 \times 10^{-3}$	0,89	0,19	0,23

* Доля частиц (протонов), преодолевающих потенциальный барьер классическим способом α ; скорость поверхностной миграции протона вдоль БНТ v_s ; подвижность протона μ .

Далее была исследована регулярная гидридензация и оксидирование борной нанотрубки. Выполнены расчеты двух вариантов присоединения атомов водорода и кислорода к поверхности нанотрубки, как показано на рисунке (см. рис. 9). Оказалось, что с энергетической точки зрения группе атомов водорода и кислорода наиболее выгодно расположиться над противоположащими вершинами гексагонов, а не в виде цепочки.

Анализ полученных одноэлектронных спектров гидридов и оксидов борной нанотрубки и чистой БНТ, представленных на рисунке 10, позволил сделать вывод, что наличие атомов водорода и кислорода на поверхности изменяет проводящие характеристики В-тубулена, а именно, гидридензированная и оксидированная борная нанотрубка обладает металлической проводимостью: энергетическая щель для гидридов обоих вариантов равна нулю.

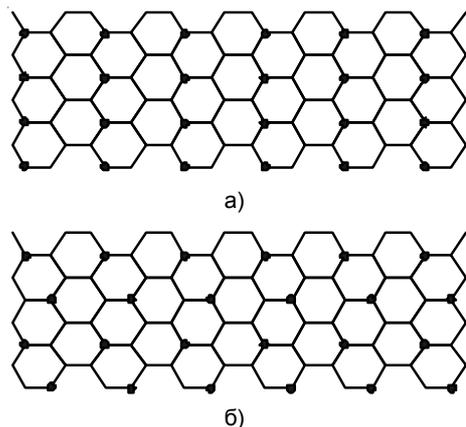


Рис. 9. Развернутые в плоскость РЭЯ борных тубуленов (6, 6) с указанием положений атомов водорода на поверхности: а) 1 вариант; б) 2 вариант

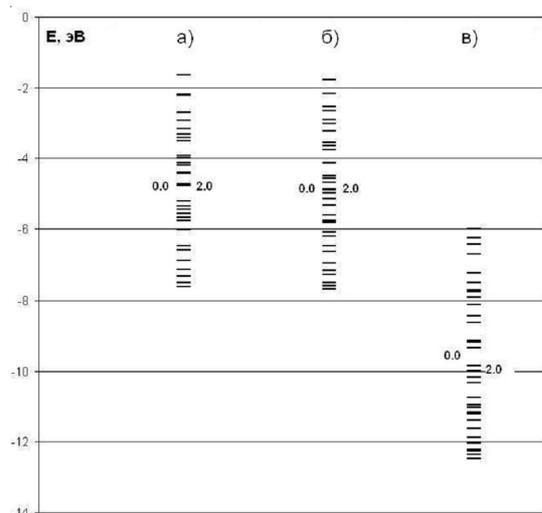


Рис. 10. Одноэлектронные энергетические спектры гидридов борных тубуленов (6, 6) для двух вариантов присоединения водорода: а) вариант 1 несмещенного расположения атомов водорода относительно поверхности; б) вариант 2 смещенных друг относительно друга колец атомов водорода; в) чистая борная нанотрубка. Показаны дважды заполненные и вакантные уровни

Итак, можно утверждать, что БНТ могут выступать в роли аккумуляторов водорода, наряду с углеродными нанотрубками, а гидриды и оксиды борных нанотрубок могут использоваться в качестве элементов нанoeлектроники с переходом «узкозонный полупро-

водник – металл» (элементы с барьером Шотки), если полупроводящую борную нанотрубку с одного конца насытить атомами водорода или кислорода, а другой конец оставить чистым.

Существенная модификация свойств тубуленов может быть достигнута при их покрытии разнообразными металлами и соединениями. Поэтому мы исследовали возможность присоединения атомов щелочных металлов (Li, Na, K) к внешней поверхности борной нанотрубки типа (6, 6) с целью выяснения возможности создания металлофазных композитов на основе борной нанотрубки. Положения адсорбирующихся атомов изображены на рисунке 11.

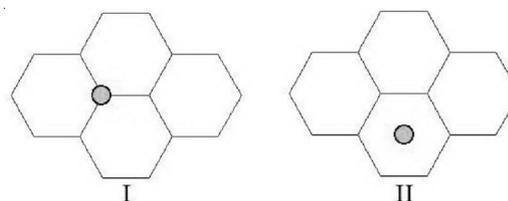


Рис. 11. Варианты ориентации адатомов относительно поверхности борного тубулена: I – над атомом бора, II – над центром гексагона

Анализ энергетических кривых показал, что в первом случае (адсорбция над поверхностным атомом В) все выбранные атомы металлов активно адсорбируются на поверхности В-тубулена (рис. 12).

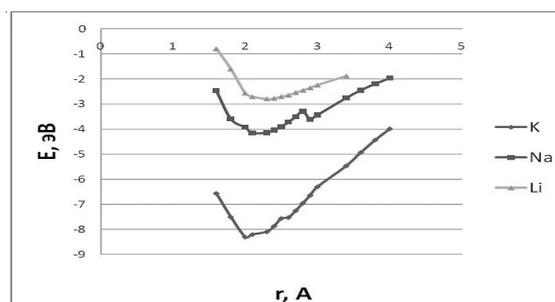


Рис. 12. Профили поверхности потенциальной энергии взаимодействия атомов Li, K, Na с поверхностью борной нанотрубки типа (6, 6); вариант I – над атомом бора

Во втором случае (см. рис. 13) адсорбция наблюдается лишь для атомов калия и натрия.

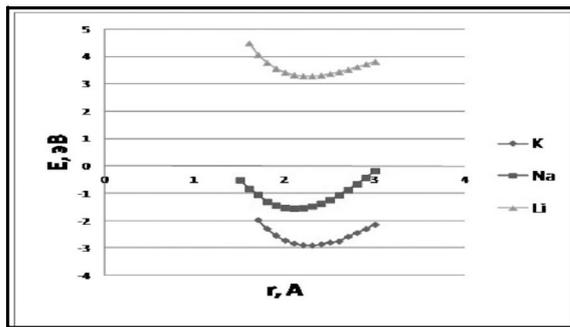


Рис. 13. Профили поверхности потенциальной энергии взаимодействия атомов Li, K, Na с поверхностью борной нанотрубки типа (6, 6); вариант II – над центром гексагона

Значения энергий адсорбции E_a атомов Li, K, Na и соответствующих расстояний адсорбции R_a представлены в таблице 4.

Таблица 4

Основные характеристики процессов адсорбции атомов лития Li, калия K и натрия Na на поверхности борной нанотрубки (6, 6) *

	Вариант ориентации адатомов (I)			Вариант ориентации адатомов (II)		
	$E_{ad}, \text{эВ}$	$R_{ad}, \text{Å}$	Q	$E_{ad}, \text{эВ}$	$R_{ad}, \text{Å}$	Q
Li	2,79	2,3	0,73	–	–	–
K	8,30	2,0	0,74	1,56	2,1	0,63
Na	4,17	2,2	0,60	2,30	2,9	0,37

* Здесь E_{ad} – энергия адсорбции, эВ, R_{ad} – расстояние адсорбции; E, Q – заряды на атомах щелочных металлов; вариант ориентации I – над атомом бора поверхности, вариант ориентации II – над центром борного гексагона.

Проанализировано зарядовое перераспределение в полученных наноккомпозитах. Установлен факт переноса электронной плотности с атомов металлов на борную трубку, что увеличивает число основных носителей заряда в тубулоне, а следовательно, усиливает металлические свойства борных трубок, которые мы ранее отнесли к узкощелевым полупроводникам.

Далее было исследовано регулярное расположение атомов щелочных металлов (далее – ЩМ) в позициях, показанных на рисунке 14.

Данные системы, выполненные атомами щелочных металлов, можно условно считать

металлической сверхрешеткой прямоугольного (рис. 14 (I)) и ромбического (рис. 14 (II)) вида. При выбранных положениях атомов металлов постоянные сверхрешеток оказываются сравнимыми с экспериментальными значениями постоянных кристаллических решеток ЩМ [3].

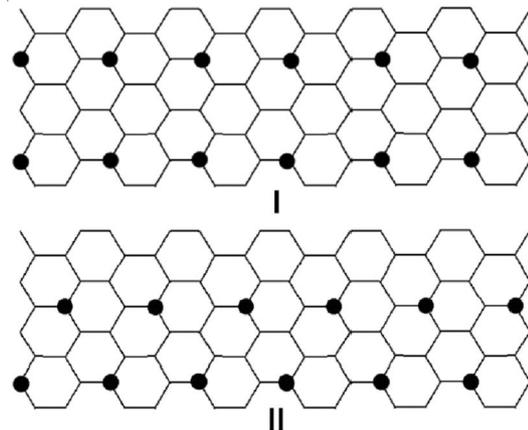


Рис. 14. Расширенная элементарная ячейка борной нанотрубки типа (6, 6) с указанными положениями атомов металлов (Li, K, Na), образующих над поверхностью трубки сверхрешетки I – прямоугольного типа, II – ромбического типа

В результате проведенного исследования мы получили значения ширины запрещенной зоны ΔE_g , представленные в таблице 5. Для варианта модифицирования I ширина запрещенной зоны борных нанотрубок, модифицированных атомами Li, по сравнению с чистым борным тубуленом в пределах заданной точности не изменяется. Для тубуленов, модифицированных атомами K и Na, происходит незначительное увеличение запрещенной зоны, но тем не менее, данные структуры по-прежнему можно классифицировать как узкозонные полупроводники. Для варианта модифицирования II ширина запрещенной зоны для БНТ, модифицированных атомами Li и Na, увеличивается незначительно, а в борном тубулоне с атомами K энергетическая щель не изменяется по сравнению с энергетической щелью чистой БНТ.

Анализ зарядового состояния для обоих вариантов расположения атомов металлов над поверхностью БНТ установил, что так же, как и в случае одиночной адсорбции, происходит перенос электронной плотности с атомов щелочных металлов на поверхностные атомы бора (см. табл. 5).

Таблица 5

Энергетические характеристики модифицированных борных тубуленов типа (6, 6) *

	Вариант модифицирования	Q	$E_{полн}$, эВ	ΔE_g , эВ	Δ , эВ
Чистая БНТ	–	–	–207,00	0,15	–
БНТ+12Li	I	0,96	–212,68	0,16	1,37
	II	0,95	–211,31	0,39	
БНТ+12K	I	0,96	–207,88	0,35	1,44
	II	0,94	–206,44	0,14	
БНТ+12Na	I	0,92	–212,88	0,28	1,49
	II	0,97	–211,39	0,20	

* I, II – варианты модифицирования; Q – заряды на атомах щелочных металлов; $E_{полн}$ – энергия системы, приходящейся на один гексагон, эВ; ΔE_g – ширина запрещенной зоны, эВ; $\Delta = E_{II} - E_I$ – разность полных энергий систем, эВ

Таким образом, расчеты показывают, что поверхностное модифицирование борных нанотрубок атомами металлов не меняет проводящий характер борных нанотрубок, но приводит к возникновению поверхностной проводимости за счет появления свободных носителей заряда на поверхности трубки, тем самым обеспечивая появление перехода «узкозонный полупроводник – металл» в полученных таким образом металлофазных композициях борных нанотрубок.

Заключение

1. Определены основные характеристики квазипланарного гексагонального бора и соответствующих нанотубулярных форм. Доказана возможность преимущественного образования (n, n) борных нанотрубок, причем БНТ малого диаметра (до 2 нм) являются узкозонными полупроводниками. Установлено, что БНТ малого диаметра являются эффективными в смысле проводимости системами, близкими к металлам по числу носителей – электронов.

2. Одиночные дефекты не влияют на характер проводимости борных нанотрубок. Это позволит при конструировании приборов нанoeлектроники широко использовать борные нанотрубки произвольно выбранного диаметра и «чистоты» поверхности без

потери искомым проводящих свойств последних.

3. Исследован механизм адсорбции атома водорода на внешней поверхности борных нанотрубок. Выяснено, что при адсорбции происходит перенос электронной плотности с атома H на поверхность тубулена, что фактически свидетельствует об образовании свободного носителя положительного заряда – протона H^+ .

4. Исследованы «эстафетный» и «прыжковый» механизмы миграции протона H^+ по внешней поверхности борной нанотрубки. Проведена оценка подвижности протонов и установлено, что она сравнима с подвижностью основных носителей типичных полупроводников. Доказано, что БНТ могут быть отнесены к классу протонпроводящих материалов, что обеспечит новые интересные перспективы их использования в электронной технике.

5. Исследованы механизмы адсорбции атомов газовой фазы на поверхности борных нанотрубок и определены наиболее предпочтительные места их присоединения. Тип проводимости получившихся фторида и хлорида борного тубулена не изменяется по сравнению с чисто борной нанотрубкой и сохраняет полупроводящий характер.

6. Изучен процесс регулярной адсорбции атомов водорода и кислорода на поверхности В-нанотрубок. Обнаружено изменение

проводимости получившихся композитов в сторону металлизации по сравнению с полупроводящим состоянием чистой БНТ.

7. Исследован механизм адсорбции атомов щелочных металлов на поверхности борной нанотрубки и установлено наиболее предпочтительное место их присоединения. Доказано, что модификация поверхности БНТ атомами металлов приводит к возникновению металлической сверхрешетки и появлению перехода «узкозонный полупроводник – металл» в полученных таким образом металлофазных композитах борных нанотрубок.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Китиль, Ч. Введение в физику твердого тела / Ч. Китиль. – М. : Наука. – 1978. – 79 с.
2. Литинский, А. О. Модель ионно-встроенного ковалентно-циклического кластера в MNDO-расчетах межмолекулярных взаимодействий в гетерогенных системах / А. О. Литинский, Н. Г. Лебедев, И. В. Запорожкова // Журнал физической химии. – 1995. – Т. 69. – № 1 – С. 189.
3. Пенкаля, Т. Очерки кристаллохимии / Т. Пенкаля. – Л. : Химия. – 1972. – 496 с.
4. Ciuparu, D. Synthesis of Pure Boron Single-Wall Nanotubes / D. Ciuparu [et al.] // J. Phys. Chem. B. – 2004. – V. 108. – P. 3967–3969.

**NANOTUBULARYARNEY OF THE PINE FOREST FORM:
FEATURES OF THE ELECTRONIC AND POWER STRUCTURE
AND CARRYING-OUT PROPERTIES**

E.V. Boroznina, I.V. Zaporotzkova, S.V. Boroznin, D.I. Polikarpov

In this work results of research of influence of structural modifications of boron nanotubes on an electronic structure and carrying-out characteristics, and also results of calculations superficial, including sorption properties single-layer boron nanotubes are presented. Features of mechanisms of external adsorption of various atoms on surfaces of a boron nanotube of small diameter and the changes of a carrying-out condition caused by them superficial modified nanotubes are discussed. Calculations are executed within models of ion-built-in covalent and cyclic and molecular clusters by means of the semi-empirical scheme of MNDO.

Key words: boron nanotubes, semi-empirical calculations, adsorption, proton conductivity, molecular cluster.