ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ АТОМОВ БОРА С ДВУХСЛОЙНЫМИ УГЛЕРОДНЫМИ НАНОТРУБКАМИ

Ш.А. Муминовой, У.Б. Улжаев, И.Д. Ядгаров\*

Институт ионно-плазменных и лазерных технологий АН РУз. Ташкент, Узбекистан

\*e-mail: ishmuminyadgarov@gmail.com

Одним из простейших способов управления свойствами углеродных материалов является их функционализация, как пример - модификация sp2-нанотрубок аналогичными гетероатомами (B, N, Ca, Pd, Pt) [1]. В данной работе методом МД с использованием потенциала ReaxFF исследовано взаимодействие атомов бора с поверхностью двустенной нанотрубки (5.5) и (10.10) (температура нанотрубки - 300К, 900К). Для систем 300 К и 900 К концентрация атомов бора, адсорбированных на поверхности ДУНТ с хиральностями (5,5), (10,10), менялась в зависимости от скорости (энергии) атомов B. На рис.1б показана зависимость парциальных зарядов от энергии атомов бора. На рис.1б видно, что максимальные парциальные заряды атомов углерода (С) и бора (В) при температурах 300 К и 900 К изменяются в зависимости от энергии (16*е* и -16*е* (18 эВ) и 20,6*е* и 20,6*е* (32 эВ).



Рисунок 1. а) Показана адсорбция атомов бора поверхностью ДУНТ, атомы с положительным зарядом в системе - синий, с отрицательным - красный, незаряженные (0) атомы - белый. б) Динамика изменения парциальных зарядов адсорбированных атомов бора.

Увеличение концентрации бора приводит к увеличению положительных (p-типа) парциальных зарядов ДУНТ.

ЛИТЕРАТУРА

1. G. Speranza et all., “Carbon Nanomaterials: Synthesis, Functionalization and Sensing Applications”, *Nanomaterials*, 11, 4 (2021)