

## Квантовохимический анализ взаимодействия атомарного водорода с борными нанотрубками различных структурных модификаций

И.В. Запороцкова, Д.И. Поликарпов, Н.П. Поликарпова, С.В. Борознин

Волгоградский государственный университет  
400062, Российская Федерация, г. Волгоград  
Университетский пр., 100

Представлены результаты теоретического исследования влияния структурных модификаций борных нанотрубок на их электронное строение и проводящие характеристики, а также результаты изучения сорбционной активности однослойных борных нанотрубок в отношении атомарного водорода. Обсуждаются особенности механизмов внешней адсорбции атома водорода на поверхности борных нанотрубок малого диаметра различной поверхностной конфигурации и вызванные этим процессом изменения проводящего и зарядового состояния гидrogenизированных нанотрубулярных систем. Расчеты выполнены с помощью моделей ионно-встроенного ковалентно-циклического и молекулярного кластеров в рамках полуэмпирической схемы MNDO.

*Ключевые слова:* борные нанотрубки, структурные модификации, проводящее состояние, электронно-энергетическое строение, адсорбция атомарного водорода.

### Введение

В последние годы появляется большое количество исследований различных топологических конфигураций борных наноструктур, таких как боран [1], борные кластеры [2], борные нанопровода и т. д. [3–7]. Борные нанотрубки являются недавним открытием; они были впервые синтезированы в 2004 г. [8] и могут быть классифицированы как новый класс топологической структуры бора. Исследования борных нанотрубок (БНТ) главным образом посвящены изучению их возможных структурных конфигураций и типов проводимости [9–21]. Например, в [12] авторы утверждают, что все БНТ, независимо от диаметра или хиральности, обладают металлической проводимостью. Однако авторы [11] полагают, что трубы маленького диаметра, полученные путем скручивания монослоя бора, вероятно, будут полупроводниками. Подобное заключение мы находим и в работе [16]. В работах [19; 20; 22] авторы изучили особенности электронно-энергетического строения борных нанотрубок типов «arm-chair» ( $n, n$ ) и «zig-zag» ( $n, 0$ ), полученных скручиванием квазипланарного гексагонального бора. Их результаты показывают, что однослойные борные нанотрубки ( $n, n$ )- и ( $n, 0$ )-типов представляют собой узкозонные полупроводники, что находится в хорошем согласии с резуль-

татами, представленными в работе [11]. Авторы работ [19; 20] также утверждают, что процессы формирования зигзагообразных гексагональных борных нанотрубок энергетически невыгодны, и эти данные не противоречат заключению, полученному в [14] для БНТ изомера (9, 0). Таким образом, до настоящего времени не существует однозначного мнения о характере проводимости борных нанотрубок различных структурных модификаций, что обуславливает необходимость продолжения исследований в этом направлении.

Другая интересная область исследований борных нанотрубок – это исследования их физических и химических свойств, включая свойства сорбции, которые до сих пор не получили значимого обсуждения в научной литературе. Тем не менее эти проблемы имеют чрезвычайное значение, так как могут обеспечить понимание перспектив возможного применения борных нанотрубок в различных областях науки и техники. Адсорбированные атомы на поверхности БНТ могут изменить тип проводимости нанотрубок, что будет иметь большое значение для применения БНТ в нанoeлектронике. Можно ожидать, что борные нанотрубулярные системы станут функциональными блоками и элементами (транзисторами, диодами и т. п.) для следующего поколения нанoeлектронных устройств.