

## ИССЛЕДОВАНИЕ УГЛЕРОДНЫХ НАНОСТРУКТУР C<sub>60</sub>-УНТ

Демин В.А., Чернозатонский Л.А.

Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН,  
Россия, 119334, г. Москва, ул. Косыгина, д. 4,  
Тел: +7(499)135-7894, факс: +7(499)137-4101,  
E-mail: [demin\\_v\\_a@mail.ru](mailto:demin_v_a@mail.ru)

Аллотропные модификации углерода, такие как фуллерен, графен и нанотрубки, обладают различными уникальными свойствами и являются перспективными материалами для широкого прикладного применения.

В 2007 г. в статье [1] впервые было предложено использовать комплекс фуллерен-одностенные УНТ как эффективный компонент органических фотогальванических элементов. В работе исследованы пленки поли(3-гексилтиофен):C<sub>60</sub>, а также пленки поли(3-гексилтиофен):C<sub>60</sub>-УНТ. Показано, что пленки с добавлением УНТ обладают лучшей электропроводностью, так как электронный транспорт через слой C<sub>60</sub> сильно ограничен, в отличие от слоя с УНТ, в котором, несмотря на отсутствие химической связи, электрон, захваченный фуллереном будет перенесен на нанотрубку.

В данной работе рассматриваются электронные свойства одностенных УНТ, покрытых оболочкой из фуллеренов.

Оптимизация геометрии структур проводилась методом молекулярной механики с использованием потенциалов Бреннера и Леннарда-Джонса в рамках программного пакета GULP [2].

Для получения плотности электронных состояний (DOS) исследуемых структур был использован программный пакет DFTB+[3], реализующий метод DFTB (density-functional tight-binding method). Показана применимость метода DFTB для расчета углеродных структур, связанных ковалентными и ван-дер-ваальсовыми связями.

Были построены две структуры с различным расположением фуллеренов вокруг зигзагообразной нанотрубки (7,0). Оболочка первой состоит из 5 фуллеренов таким образом, что кривая, проведенная через центры C<sub>60</sub> образует угол 90° с осью нанотрубки; оболочка второй – 5 фуллеренов под углом 60°.

Для обеих структур были построены плотности электронных состояний. Трубка (7,0) – полупроводник. Показано, что наличие оболочки из фуллеренов вокруг полупроводниковой нанотрубки изменяет проводимость на металлическую.

### Литература.

1. C.Li, Y. Chen, Y. Wang, Z. Iqbal, M. Chhowalla, S. Mitra, J. Mater.Chem, 2406-2411, 17, 2007.
2. J.D. Gale and A.L. Rohl, Mol. Simul., **29**, 291 (2003).
3. B. Aradi, B. Hourahine, Th. Frauenheim, J. Phys. Chem. A 2007, 111, 5678-5684