

ГРАФЕН – НАНОТРУБНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ

А.А. Аргюх, Л.А. Чернозатонский

Учреждение Российской академии наук Институт биохимической физики им.

Н.М. Эмануэля РАН

В [1] показано, что соединение полимера с фуллереном является перспективным материалом для применения в качестве фотоэлемента или фотодиода, так как обеспечивает высокое разделение зарядов и эффективный транспорт электронов. Фуллерен в соединении с полупроводником может быть использован как фотодиод или фотоэлемент. В 2007 году впервые был синтезирован материал, состоящий из фуллеренов ковалентно прикрепленных к внешней стенке УНТ [2].

В данной работе исследованы различные конфигурации ковалентных и молекулярных соединений, определены оптимальные, рассчитаны барьеры реакций присоединения C₆₀ к нанотрубкам. Все исследуемые конфигурации являются энергетически устойчивыми. Показано, что наиболее энергетически выгодным является 2+4 циклоприсоединение, наименее - 6+6 циклоприсоединение. Барьер присоединения для первого случая равен 2.63 эВ, для второго – 3.12 эВ, барьеры диссоциации – 0.97эВ и 1.1 эВ, соответственно.

Исследуемые структуры являются многообещающими для применения в солнечных батареях, так как углеродные нанотрубки хорошо проводят и разделяют заряд.

1. C. Li, Y. Chen, Y. Wang, Z. Iqbal et.al, J.Mater. Chem, 17, 2406-2411 (2007).
2. A. G. Nasibulin et.al., Nature Nanotechnology 2, 156 - 161 (2007).