

06

## Влияние атомов замещения на электронные свойства углеродных нанотрубок

© С.В. Борознин, И.В. Запороцкова, Н.П. Борознина, А.Д. Григорьев, П.А. Запороцков, К.Ю. Веревкина

Волгоградский государственный университет,  
400062 Волгоград, Россия  
e-mail: boroznin@volsu.ru

Поступило в Редакцию 2 октября 2024 г.

В окончательной редакции 2 октября 2024 г.

Принято к публикации 2 октября 2024 г.

Проведен компьютерный эксперимент по исследованию зависимости электронных свойств углеродных нанотрубок от концентрации замещающих атомов бора и азота. Выбраны нанотрубки со следующими концентрациями замещающих атомов бора или азота: с содержанием 50% (каждый второй атом углерода был заменен на атом В или N); 25%; нанотрубки, в которых происходит замещение лишь одного атома С на атом В или N в шестиугольнике. Установлено присутствие зависимости ширины запрещенной зоны от модифицирующих атомов, а также наличие переноса заряда между углеродом и атомами замещения. Результаты анализа углеродных нанотрубок, содержащих различные концентрации примесных атомов бора, показали, что нанотрубки типа  $(n, 0)$ , содержащие атомы замещения, — узкощелевые полупроводники. При модификации атомами бора на них концентрируется положительный заряд, в то время как азот оттягивает на себя электронную плотность в углеродных нанотрубках.

**Ключевые слова:** углеродная нанотрубка, реакция замещения, гетероструктура, узкощелевой полупроводник, перенос заряда.

DOI: 10.61011/JTF.2025.02.59716.279-24

### Введение

Наноструктуры на основе углерода уже несколько десятилетий являются одними из самых востребованных материалов нанотехнологий. Благодаря своим уникальным свойствам они нашли применение в различных областях промышленности, науки и техники. Однако одним из ключевых вопросов остается получение стабильных наноструктур с заданными свойствами. Одним из наиболее простых способов контроля свойств является функционализация углеродных нанотрубок (УНТ). Под этим действием подразумевается модифицирование  $sp^2$  гибридных нанотрубок с помощью реакций замещения схожими гетероатомами или функциональными группами [1–3]. Данный метод позволяет управлять химическими свойствами нанотрубок, а также эффективно изменять их способности и характеристики, расширяя возможность их применения [1–3]. В качестве допирующих веществ в литературе рассматривались Li, B, N, S, P, K и другие элементы. Крюкель (Kroczel et al.) в работе [4] детально изучает возможность допирования УНТ калием и электронно-энергетическую структуру полученного наноматериала. В ряде работ описывается возможность допирования нанотрубок серой и фосфором [5–7]. Тавакол (Tavakol et al.) в своем исследовании [8] сообщает о возможности применения сульфидированных УНТ с целью препятствования процессам окисления. Свои исследования ученые подтверждают также данными рассматривались Li, B, N, S, P, K и другие элементы. Крюкель (Kroczel компьютер-

ного эксперимента, проведенного с применением теории функционала плотности, Монте-Карло и т.д. [9]. Саадат (Saadat et al.) в работе [9] исследовал взаимодействие чистых углеродных и сульфидированных нанотрубок с метанолом, метантиолом, водой и дигидросульфидом.

Несмотря на большой объем исследований по взаимодействию УНТ с различными материалами, бор (В) и азот (N) остаются наиболее подходящими веществами для проведения реакций замещения, для чего имеется ряд предпосылок, таких как окислительно-восстановительные свойства гетероатомов, обеспечивающие возможность простого протекания процесса встраивания их в решетку нанотрубок [10]. При выборе допирующего вещества также стоит обращать внимание на безопасность получаемого материала и его стабильность с сохранением основных пространственных характеристик нанобъекта.

Замещение гетероатомами части атомов нанотрубки, даже при малых концентрациях замещающих атомов, может обеспечить сдвиг энергии Ферми при протекании донорно-акцепторных реакций. Аналогичные методы положены в основу контролируемого получения наноматериалов  $p$ - или  $n$ -типов, поскольку электронные свойства нанотрубок показывают сильную зависимость от атомов замещения [10–12]. Этим обусловлена актуальность представленных в статье исследований.

Целью настоящей работы является рассмотрение электронно-энергетического строения гетероструктур, основанных на УНТ, содержащих атомы замещения, анализ физико-химических свойств полученных нанома-

териалов и прогнозирование на основании теоретических экспериментов возможных областей их применения. Для достижения цели исследования с применением теории функционала плотности были изучены варианты замещения части углеродных атомов нанотрубки азотом и бором в концентрациях 15, 25, 50%. В результате модельного эксперимента были получены данные об электронно-энергетическом строении УНТ с замещающими атомами и сделан вывод об их влиянии на электронные свойства нанобъектов.

## 1. Теория функционала плотности

Метод DFT (Density Functional Theory) с функционалом B3LYP основан на комбинации трех компонентов: функционала Ли–Янга–Парра для обменной энергии, функционала Беккера–Ли–Янга–Парра для корреляционной энергии и функционала Жилия–Йохансена для обменно-корреляционной энергии. Такая комбинация обеспечивает баланс между точностью и вычислительной эффективностью. B3LYP обладает хорошей точностью для расчета энергий связей и геометрических параметров [13].

В методе DFT центральной физической величиной является электронная плотность  $\rho$ , которая зависит от координат всех электронов, составляющих систему. Электронная плотность, создаваемая всеми электронами молекулы, определяется по формуле

$$\rho(r) = \sum_{i=1}^N |\phi_i(r)|^2, \quad (1)$$

где  $\phi_i$  — волновые функции электрона.

В теории функционала плотности Кона–Шэма полная энергия системы выражается как функционал плотности заряда:

$$\begin{aligned} E[n] &= \langle \Psi[n] | (\hat{T} + \hat{U} + \hat{V}_{ext}) | \Psi[n] \rangle = T + U + V_{ext} \\ &= T_S + V_H + V_{ext} + (T - T_S + U - V_H), \end{aligned} \quad (2)$$

где  $T_S$  — кинетическая энергия Кона–Шэма, которая выражается через орбитали Кона–Шэма,  $V_{ext}$  — внешний потенциал, действующий на взаимодействующую систему (как минимум, для молекулярной системы взаимодействие электрон–ядро),  $U$  — энергия кулоновского взаимодействия,  $V_H$  — энергия Хартри.

Методы DFT отличаются друг от друга формой функционала EXC( $\rho$ ), а также наличием различных подгоночных параметров.

Корреляционный обменный функционал B3LYP:

$$\begin{aligned} E_{XC}^{B3LYP} &= (1 - a)E_X^{LSDA} + aE_X^{HF} \\ &+ b\Delta E_X^{B88} + (1 - c)E_C^{VWN} + c\Delta E_C^{LYP}. \end{aligned} \quad (3)$$

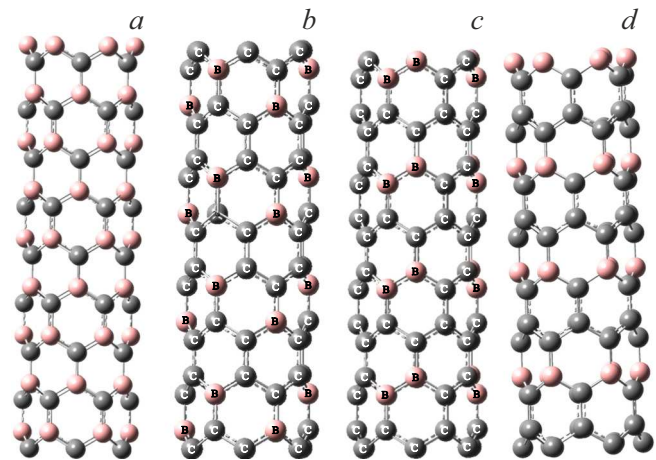
Здесь  $E_X^{LSDA}$  — энергия обмена с использованием приближения локальной спиновой плотности;  $E_X^{HF}$  —

хартри-фоковская энергия обмена;  $\Delta E_X^{B88}$  — трехпараметрический функционал Бекке метода градиентной коррекции;  $E_C^{VWN}$  — приближение локальной спиновой плотности VWN к корреляционному функционалу;  $\Delta E_C^{LYP}$  — один из наиболее популярных корреляционных функционалов, предложенный Ли, Янгом и Парром;  $a$ ,  $b$  и  $c$  — константы, подобранные по экспериментальным данным для сравнительно простых химических соединений:  $a = 0.2$ ,  $b = 0.72$  и  $c = 0.81$ .

## 2. УНТ содержащие замещающие атомы бора

Для компьютерного эксперимента были изучены бороуглеродные нанотрубки с различной концентрацией примесных атомов бора, а именно нанотрубки вида BC, т.е. с содержанием бора 50% (каждый второй атом углерода был заменен на атом В), бороуглеродные нанотрубки вида BC<sub>3</sub> с содержанием бора 25% и BC<sub>5</sub>-нанотрубки, в которых происходит замещение лишь одного атома С на атом В в шестиугольнике [14,15]. На рис. 1 приведены изображения исследуемых нанотрубок для иллюстрации взаимного расположения атомов В и С.

При проведении исследования были выбраны нанотрубки типа „зигзаг“ ( $n, 0$ ), в которых  $n = 4, 6, 8, 10, 12$ . Длина кластера нанотрубки составляла не менее 8 слоев шестиугольников вдоль ее главной продольной оси, а по периметру нанотрубки их число в соответствии с принципом построения скрученных нанобъектов составляло  $n$ . Теория функционала плотности была выбрана в качестве основного расчетного метода. Погрешность данного метода при выбранном базисном наборе (6-31G с функционалом B3LYP), проверенная на 300 соединениях путем срав-



**Рис. 1.** Кластеры бороуглеродных нанотрубок с различной концентрацией атомов бора:  $a$  — BC-нанотрубка (6,0);  $b, c$  — взаимное положение атомов бора и углерода в BC<sub>3</sub>-нанотрубках видов A и B;  $d$  — вариант атомного упорядочения В и С атомов в кластере BC<sub>5</sub>-нанотрубки.

**Таблица 1.** Изменение ширины запрещенной зоны УНТ в зависимости от диаметра и содержания замещающих атомов бора

Диаметр нанотрубки, Å	$\Delta E_g, \text{eV (C)}$	$\Delta E_g, \text{eV (BC}_5\text{)}$	$\Delta E_g, \text{eV (BC}_3\text{)}$		$\Delta E_g, \text{eV (BC)}$
			Вид А	Вид В	
3.03	0.81	0.13	0.81	0.54	0.02
4.77	0.81	0.69	0.54	0.54	0.09
6.35	0.27	0.26	0.26	0.54	0.02
7.72	0.27	0.19	0.19	0.54	0.02
9.57	0.27	0.69	0.07	0.54	0.02

нения с экспериментальными данными, дает отклонение до 1 kcal/mol [16,17]. Расчеты проводились с использованием программного пакета Gaussian. В результате теоретических исследований был определен основной параметр, влияющий на электронные свойства нанотрубок, а именно ширина запрещенной зоны  $\Delta E_g$ . Ее величины в зависимости от диаметра трубок приведены в табл. 1.

Проведенный компьютерный эксперимент позволил также получить данные, с помощью которых были построены одноэлектронные спектры нанотрубок (рис. 2). Анализ спектров установил, что уровни атомных орбиталей группируются в зоны, которые в соответствии с принятым обозначением делят на валентную зону и зону проводимости. Приведенные в табл. 1 значения величины энергетической щели, которая вычислялась как разность между энергиями верхней занятой молекулярной орбитали (ВЗМО) и нижней вакантной молекулярной орбитали (НВМО), позволяют отнести УНТ с содержанием примесных атомов бора 50% к узкощелевым полупроводникам независимо от значений диаметра нанотрубки. Исследования строения атомных орбиталей показали, что  $s$ - и  $p$ -орбитали С атома, а также  $s$ -орбитали атома В составляют валентную зону нанотрубки. А  $2p$ -орбитали атомов В и С формируют зону проводимости. Введение примесных атомов в структуру нанотрубки приводит к неоднородному зарядовому распределению: происходит перераспределение электронной плотности и на атомах бора появляются положительные заряды  $Q_B = 0.8$ , а на атомах углерода — отрицательные заряды  $Q_C = -0.7$ .

Далее нами было изучено изменение проводящих свойств бороуглеродных нанотрубок при уменьшении содержания примесных атомов бора. Следующим объектом нашего исследования стали бороуглеродные нанотрубки  $\text{BC}_3$  с содержанием бора 25%. Из-за уменьшения концентрации атомов В стало возможным предположить различные варианты их расположения на поверхности нанотрубки. Такие нанотрубки могут быть названы бороуглеродными  $\text{BC}_3$ -трубками видов А и (рис. 1, *b, c*) [14,15].

Для нанотрубок с упорядоченностью атомов углерода и бора, соответствующей структуре вида А, результаты

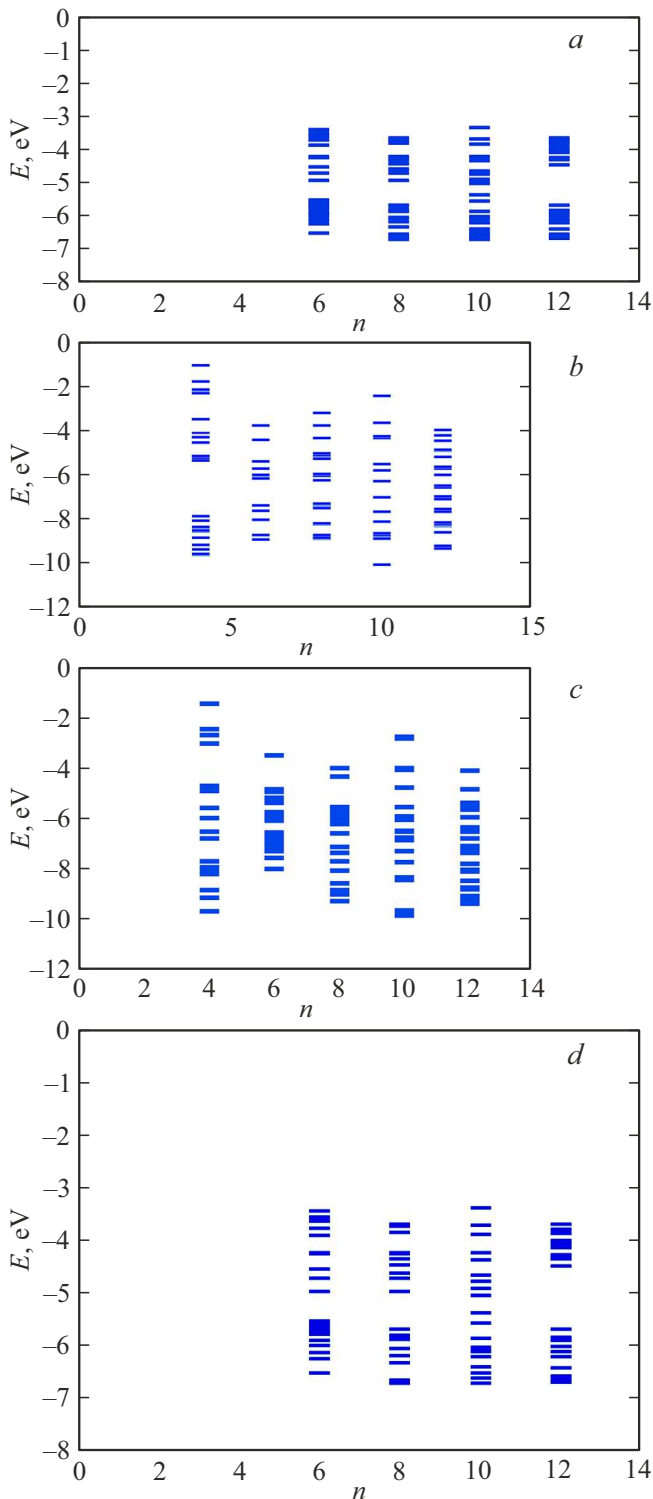
вычислений значений ширины запрещенной зоны  $\Delta E_g$  позволили выявить две важные особенности электронной структуры. Во-первых, по типу проводимости они являются полупроводниками, а во-вторых, для них, как и для чисто УНТ, существует зависимость между диаметром и шириной энергетической щели, а именно при увеличении диаметра происходит уменьшение  $\Delta E_g$ . Анализ электронно-энергетической структуры нанотрубок вида В показал, что они относятся к узкощелевым полупроводникам. При этом валентная зона складывается из  $s$ - и  $p$ -орбиталей атома С и  $s$ -орбиталей атома В. Зона проводимости формируется за счет вкладов  $2p$ -орбиталей обоих видов атомов. Численные значения ширины запрещенной зоны представлены в табл. 1. Как и в случае равновесной концентрации атомов В и С, введение примесных атомов в структуру нанотрубки приводит к неоднородному зарядовому распределению. Следствием этого является появление на атомах бора положительного заряда  $Q_B = 0.13$  и отрицательного заряда на атомах углерода  $Q_C = -0.07$ .

Одноэлектронные спектры исследуемых видов УНТ с примесными атомами бора представлены на рис. 2, *b, c*.

Завершающим этапом исследования влияния примесных атомов бора на электронную структуру УНТ стало изучение случая, когда концентрация атомов В минимальна. Это тот случай, когда происходит замещение лишь одного атома С в шестиугольнике на атом бора. Такая нанотрубка может быть обозначена как  $\text{BC}_5$  нанотрубка. Вариант атомного упорядочения в  $\text{BC}_5$ -нанотрубке представлен на рис. 1, *d* для нанотрубки (6,0).

Анализ рассчитанных значений ширины запрещенной зоны позволил сделать вывод, что  $\text{BC}_5$ -нанотрубки по типу проводимости будут относиться к узкощелевым полупроводникам. Обнаружено, что при увеличении диаметра нанотрубок изменение значений ширины запрещенной зоны носит периодический характер. На рис. 2, *d* представлены одноэлектронные энергетические спектры (6,0) нанотрубок вида  $\text{BC}_5$ .

Для большего удобства оценивания численных изменений энергетической щели с увеличением диаметра для УНТ, допированных различным количеством атомов бора, была составлена табл. 1.



**Рис. 2.** Одноэлектронные энергетические спектры бороуглеродной нанотрубки. По оси X отложен индекс хиральности  $n$  в соответствии с общепринятым обозначением для „зигзаг“ нанотрубок  $(n, 0)$ ; по оси Y — энергия [eV]: *a* — для структуры BC; *b, c* — для структуры BC<sub>3</sub> A-типа и B-типа; *d* — для структуры BC<sub>5</sub>.

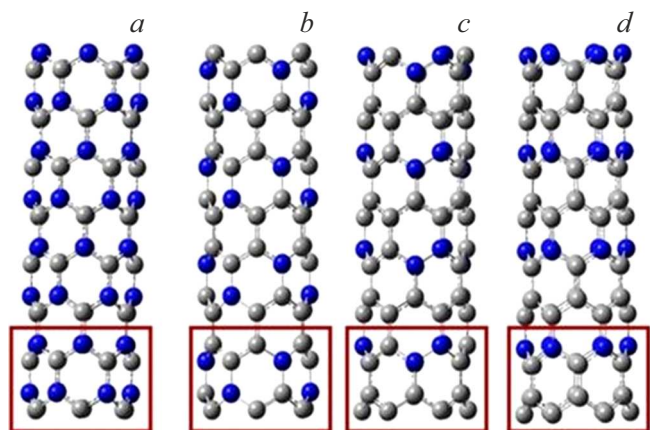
### 3. УНТ содержащие замещающие атомы азота

Особенностью рассматриваемых в рамках компьютерного эксперимента гетероструктур является периодичность распределения замещающих атомов по всей поверхности нанотрубки. Для реализации данной периодичности были выбраны концентрации 50, 25, 15% атомов азота [13–15]. Взаимное расположение атомов азота и углерода в нанотрубке типа „зигзаг“ представлено на рис. 3.

Как было указано выше, на рис. 3 приведена используемая для компьютерных экспериментов модель кластеров УНТ с замещенными атомами азота в них. Используемая модель состоит из четырех элементарных ячеек. С помощью проведенных квантово-химических расчетов были получены данные об электронной структуре нанотрубок, а также их физико-химических свойствах. В табл. 2 представлены значения ширины запрещенной зоны для различных диаметров УНТ с замещенными атомами азота.

Данные об электронной структуре и энергетическом строении были получены после построения по результатам квантово-химических расчетов плотностей электронных состояний (рис. 4).

Перейдем к более подробному рассмотрению отдельных видов УНТ, содержащих азот. На первом этапе исследования было проведено максимальное замещение атомов углерода азотом, а именно 50%, что соответствует наноструктуре типа CN. Для анализа ширины запрещенной зоны определялись значения верхней занятой и нижней вакантной молекулярных орбиталей (ВЗМО и НВМО соответственно). Разность между ними и составляет ширину запрещенной зоны. Было установлено, как показано в табл. 2, что данный вид азото-углеродных нанотрубок относится к узкощелевым полупроводникам со значениями  $\Delta E_g$  от 0.4 до 0.8 eV. В формировании валентной зоны основное участие оказывают  $s$ - и  $p$ -орбитали атомов углерода, а также  $s$ -орбиталь

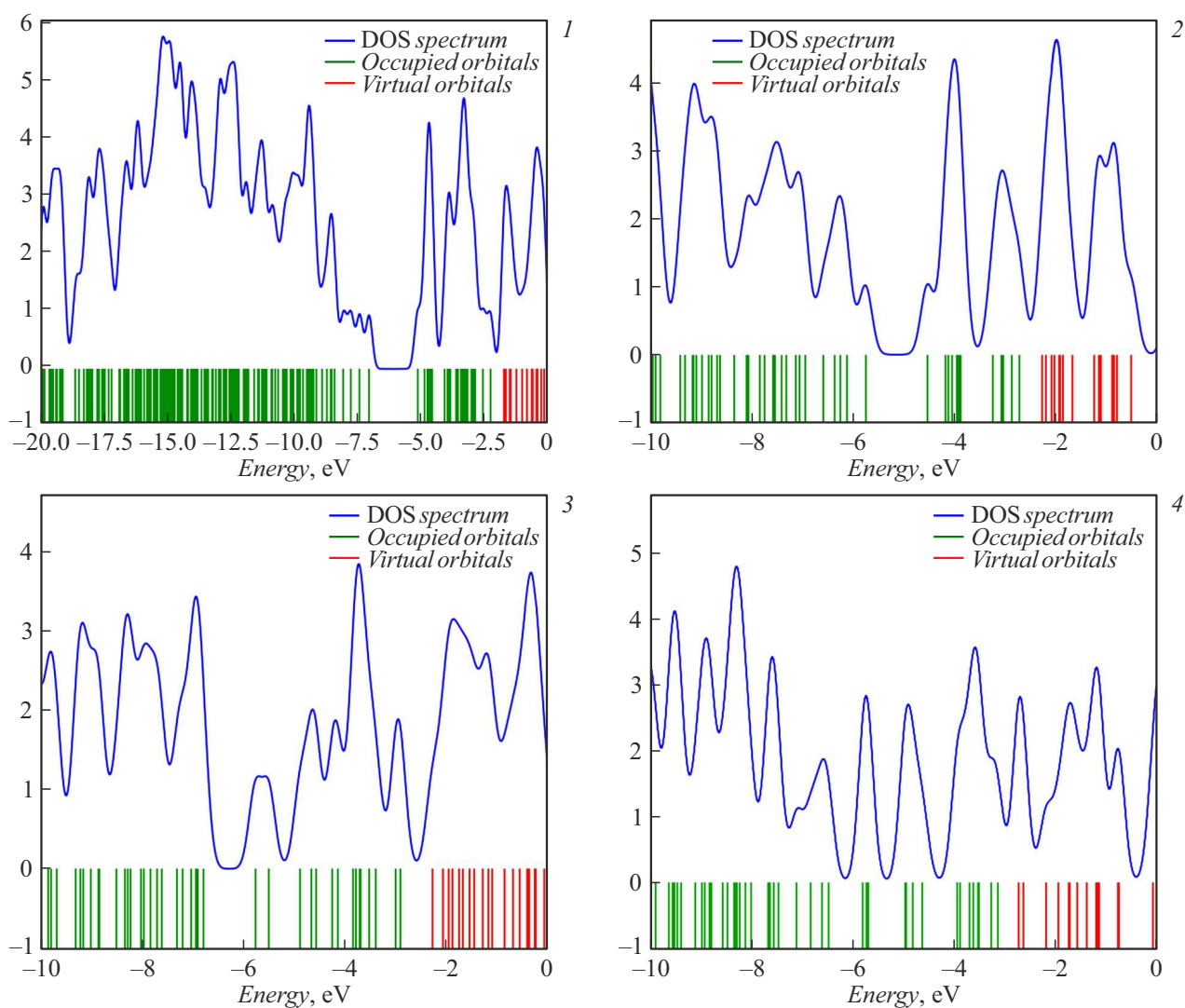


**Рис. 3.** Кластеры УНТ с различной концентрацией атомов азота: *a* — 50%; *b* — 25% вид А; *b* — 25% вид В; *d* — 15%.

**Таблица 2.** Значения ширины запрещенной зоны для УНТ с различным содержанием атомов азота

$(n, 0)$	$\Delta E_g, \text{eV}$				
	C	NC <sub>5</sub>	NC <sub>3</sub> вид A	NC <sub>3</sub> вид B	NC
(4,0)	0.81	0.86	0.73	0.43	0.81
(6,0)	0.81	0,59	0.51	0,43	0.51
(8,0)	0.27	0.43	0.62	0,40	0.51
(10,0)	0.27	0,46	0.56	0,46	0.48
(12,0)	0.27	0,43	0.56	0,46	0.46

Примечание. Для сравнения приведены значения для чистой нанотрубки из углерода.



**Рис. 4.** Примеры плотностей состояний УНТ, модифицированных замещающими атомами азота: 1 — для структуры NC; 2 — для структуры NC<sub>5</sub>; 3 — для структуры NC<sub>3</sub> вид A; 4 — для структуры NC<sub>3</sub> вид B.

атомов азота. При формировании зоны проводимости энергетические уровни образуются р-орбиталями атомов углерода и азота. Еще одним подтверждением формирования гетероструктуры является возникновение перераспределения электронной плотности между структурными элементами. Для подтверждения данного

факта был проведен анализ зарядового распределения. По его результатам было установлено, что электронная плотность сконцентрирована возле атомов азота (заряд  $Q_N = -0.7$ ), следствием чего является положительный заряд на атомах углерода ( $Q_C = 0.3$ ), т.е. УНТ, модифицированные замещенными атомами азота, в силу

появления зарядового перераспределения могут быть отнесены к гетероструктурам с контролируемой шириной запрещенной зоны и периодической структурой.

Следующим этапом компьютерных экспериментов стало изучение УНТ с меньшим содержанием замещающих атомов азота. Для обеспечения периодичности, как отмечалось выше, это были наноструктуры с процентным содержанием азота 25% или  $\text{NC}_3$ -нанотрубки. Данная концентрация позволяет перейти к двум вариантам взаимной пространственной ориентации атомов С и N, которые были обозначены как виды А и В, по аналогии с УНТ, содержащими замещенные атомы бора [10, 13].

Ширина запрещенной зоны в них также позволяет отнести их к полупроводникам, поскольку имеет значения 0.5 V. Анализ энергетической структуры показал, что при формировании уровней энергии валентной зоны задействованы *s*- и *p*-орбитали атомов N и C, уровни зоны проводимости также сформированы из *s*- и *p*-орбиталей атомов N и C. Изучение зарядового перераспределения показало, что для данного случая, как и для равновесной концентрации, наблюдается смещение электронной плотности к атомам азота ( $Q_N = -0.77$ ), а у углерода образуется положительный заряд ( $Q_C = 0.23$ ).

Финишным стало исследование минимальной концентрации атомов азота в УНТ. При данной концентрации только один атом углерода в шестиугольнике замещается на азот. Данному виду реакции замещения соответствует структура нанотрубок типа  $\text{NC}_5$ . На рис. 3, с приведен кластер данной нанотрубки и показано атомное упорядочение в ней.

Полученные в ходе квантово-химических расчетов значения ширины запрещенной зоны показали, что нанотрубка типа  $\text{NC}_5$  будет соответствовать полупроводниковая проводимость, причем величина энергетической щели в них позволяет предсказать появление в данных наноструктурах полуметаллических свойств.

На основании проведенных компьютерных экспериментов можно установить приведенные ниже основные выводы. Тип „зигзаг“ УНТ с замещенными атомами бора относится к узкощелевым полупроводникам. Для нанотрубок, в которых содержание замещающих атомов бора ниже 25%, происходит рост ширины запрещенной зоны. Объяснением этому может служить гетероструктура и возникающая в ней неоднородность зарядового распределения, обусловленные появлением замещающих атомов бора. Они являются центрами положительных зарядов в нанотручке, а электронная плотность смещается в сторону атомов углерода. При увеличении концентрации замещающих атомов бора до 50% наблюдается уменьшение запрещенной зоны до практически нулевых значений, т.е. за счет введения замещающих атомов бора становится возможным осуществлять управление шириной запрещенной зоны и электронными свойствами УНТ, доказанная с помощью модельных экспериментов и сопоставления их результатов с данными реальных наблюдений.

Результаты квантово-химических расчетов, а именно варианты расположения и концентраций атомов бора в УНТ были подтверждены согласованием с данными экспериментов. Наиболее стабильным типом боросодержащих нанотрубок является зигзаг. Это было подтверждено квантово-химическими расчетами с использованием теории функционала плотности. Также было установлено, что минимальная концентрация примесных атомов бора, приводящая к равномерному распределению бора по поверхности нанотрубки и формирующая с углеродом полноценную гетероструктуру, соответствует 15%, т.е. структуре  $\text{BC}_5$ . Также было установлено, что все УНТ, содержащие примесные атомы бора, являются узкощелевыми полупроводниками, в которых существует обратная зависимость ширины запрещенной зоны от диаметра нанотрубки.

Теоретически доказана возможность использования в качестве элементов наноэлектронных устройств УНТ, содержащих различные концентрации замещающих атомов азота (15, 25, 50%). Изменение ширины запрещенной зоны наблюдается в углеродных нанотрубках одного диаметра при проведении реакции замещения с различными концентрациями атомов азота. Значения ширины запрещенной зоны позволяют отнести все исследуемые нанотрубки к узкощелевым полупроводникам. Также можно сделать вывод о формировании гетероструктуры на основе УНТ с замещенными атомами азота, поскольку во всех случаях наблюдается перенос электронной плотности к атомам азота и локализация положительного заряда вблизи углерода. Изучение периодических структур и, в частности, двух типов упорядочения атомов N в нанотрубках, содержащих 25% азота, позволило обратить внимание на существенный вклад периодичности взаимного расположения атомов азота и углерода в нанотрубках в формирование гетероструктур за счет возникновения перераспределения зарядов. При этом группировка и взаимное расположение атомов азота существенны для управления свойствами нанотрубок. При изучении нанотрубок вида В, где атомы N собраны в пары, наблюдается аномальное поведение зависимости ширины запрещенной зоны от диаметра. Она заключается в прямой зависимости ширины запрещенной зоны от диаметра, хотя обычно имеет место обратный характер зависимости. Полученные результаты крайне важны при проектировании и конструировании элементов и узлов наноэлектроники и микросистемной техники. Это связано с тем, что полученные в ходе теоретического исследования данные подтверждают возможность управлять показателем преломления среды, ее проводимостью за счет реализации реакции замещения углерода азотом в различных концентрациях.

## Выводы

На основании проведенных компьютерных экспериментов по исследованию зависимости электронных

свойств УНТ от атомов замещения было установлено следующее. Атомы замещения оказывают влияние на электронные свойства путем изменения ширины запрещенной зоны за счет появления примесных уровней энергии. Перераспределение электронной плотности позволяет отнести изучаемые наноматериалы к гетероструктурам, причем при замещении атомами бора электронная плотность смещается к атомам углерода, а при замещении азотом, наоборот, переходит к атомам замещения.

### Финансирование работы

Исследование проводилось в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (тема „FZUU-2023-0001“).

### Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

### Список литературы

- [1] S. Agnoli, M. Favaro. *J. Mater. Chem. A*, **4**, 5002 (2016). DOI: 10.1039/C5TA10599D
- [2] L.K. Putri, W.J. Ong, W.S. Chang, S.P. Chai. *Appl. Surf. Sci.* **358**, 2 (2015). DOI: 10.1016/j.apsusc.2015.08.177
- [3] W. Zhang, L. Wu, Z. Li, Y. Liu. *Rsc Adv.*, **5**, 49521 (2015). DOI: 10.1039/C5RA05051K
- [4] C. Krockel, M.R. Preciado-Rivas, V.A. Torres-Sanchez, D.J. Mowbray, S. Reich, F. Hauke, J.C. Chacon-Torres, A. Hirsch. *J. Am. Chem. Soc.*, **142** (5), 2327 (2020). DOI: 10.1021/jacs.9b11370
- [5] F. Hassani, H. Tavakol. *Fullerenes, Nanotub. Carbon Nanostruct.* **26** (8), 479 (2018). DOI: 10.1080/1536383X.2018.1448793
- [6] F. Mohammadi, H. Tavakol. *Fullerenes, Nanotub. Carbon Nanostruct.*, **26** (4), 218 (2018). DOI: 10.1080/1536383X.2018.1428567
- [7] H. Tavakol, F. Mohammadi. *Fullerenes, Nanotub. Carbon Nanostruct.*, **26** (11), 715 (2018). DOI: 10.1080/1536383X.2018.1484731
- [8] H. Tavakol, F. Keshavarzipour. *RSC Adv.*, **6** (67), 63084 (2016). DOI: 10.1039/C6RA11447D
- [9] K. Saadat, H. Tavakol. *Struct. Chem.*, **27** (3), 739 (2016). DOI: 10.1007/s11224-015-0616-6
- [10] S.V. Sawant, A.W. Patwardhan, J.B. Joshi, K. Dasgupta. *Chem. Eng. J.*, **427**, 131616 (2022). DOI: 10.1016/j.cej.2021.131616
- [11] П.Н. Дьячков П.Н. *Углеродные нанотрубки. Строение, свойства, применения* (Бином. Лаборатория знаний, М., 2006)
- [12] K. Fujisawa, T. Hayashi, M. Endo, M. Terrones, J.H. Kim, Y.A. Kim. *Nanoscale.*, **10** (26) 12723 (2018).
- [13] С.В. Борознин. *Углеродные наноструктуры с примесными атомами бора: исследования строения и свойств* (Канд. дис. Волгоград: Изд-во ВолГУ, 2023)
- [14] I. Zaporotskova, S. Boroznin, N. Boroznina. *J. Phys.: Conf. Ser.*, **1967** (1), 012045 (2021).
- [15] N. Boroznina, I. Zaporotskova, S. Boroznin, E. Dryuchkov. *Chemosensors.*, **7** (1), 11 (2019).
- [16] W. Koch, M. Holthausen. *A Chemist's Guide to Density Functional Theory* (Weinheim: Wiley-VCH, Germany, 2002)
- [17] В. Кон, Дж.А. Попл. *Успехи физических наук*, **172** (3) 335 (2002).