

扶手椅型氮化硼纳米管吸附气体小分子的 密度泛函理论研究

阿卜杜萨拉木·萨迪克^{1,2}, 李庆扬¹, 魏 婕³, 祝恒江¹, 邹艳波^{1,2*}

(1. 新疆师范大学 物理与电子工程学院, 新疆 乌鲁木齐 830054; 2. 新疆发光矿物与光功能材料研究重点实验室, 新疆 乌鲁木齐 830054;
3. 新疆师范大学 实验室与设备管理中心, 新疆 乌鲁木齐 830017)

摘要: 氮化硼纳米管具有丰富的孔隙结构、优异的吸附小分子气体的能力。文章基于密度泛函理论, 对比研究了一类由四六八环构成的新型氮化硼纳米管以及六方氮化硼纳米管对CO、CO₂、NO、NO₂及N₂O的气敏性能。研究表明, 四六八环氮化硼纳米管有效吸附位点更为丰富, 并形成多种吸附稳定构型。研究指出, 四六八环氮化硼纳米管对特定气体分子, 如CO₂和NO, 展现出较高的选择性和灵敏的响应特性。

关键词: 密度泛函理论; 氮化硼纳米管; 吸附能

中图分类号: O469

文献标识码: A

文章编号: 1008-9659(2025)01-0033-09

随着经济的快速发展和生活水平的提升, 环境问题尤其是空气污染与全球变暖成为紧迫挑战。汽车尾气、化石燃料的使用及建材行业释放的CO、CO₂、NH₃、SO₂等气体, 严重威胁着生态环境和人类健康。精确监测这些关键污染物, 对于保护公众健康、维护生态平衡及推进可持续发展至关重要。

自1991年Iijima发现碳纳米管以来^[1], 一维纳米材料因其独特的机械、热学及电子性能而受到科研界的广泛关注。在此趋势下, 氮化硼纳米管(Boron-nitride Nanotubes, BNNTs)作为非碳基一维纳米材料的杰出代表, 因理论预测与实验合成的双重突破成为研究的焦点。BNNTs于1994年被理论预测存在^[2], 并在随后被成功合成, 其特性包括宽可调带隙、高力学强度、优异的化学稳定性和高温抗氧化性, 这些特性使其在纳米电子器件、特别是气体传感和存储装置中展现出一定的应用潜力^[3]。通过掺杂或引入缺陷策略调节BNNTs的电子结构, 进一步拓宽了其应用范围^[4-10]。BNNTs的结构特性, 如比表面积、管径和孔径分布, 直接影响其气体吸附性能, 使得通过设计特定结构的BNNTs, 可以实现对特定气体的高效吸附和选择性分离, 在气体净化、储存及气敏传感等方面展现出广泛应用前景^[11-22]。

文章聚焦于对CO、CO₂、NO、NO₂、N₂O等气体的气敏性能研究, 通过比较两种BNNTs的吸附性能, 探究四六八环氮化硼纳米管(Tetra-hexa-octagonal Boron nitride Nanotubes, THO-BNNTs)在吸附过程中涉及的物理化学机制, 揭示其相对六方氮化硼纳米管(Hexagonal Boron-nitride Nanotubes, H-BNNTs)吸附增强的物理原理。研究旨在建立结构与吸附性能间的定量模型, 明确THO-BNNTs在特定有害气体吸附上的优势, 利用其独特结构特点, 设计新型高效气体吸附模型, 实现有害气体的高选择性分离, 为环境保护和气体监测提供先进解决方案。

[收稿日期] 2024-04-18

[修回日期] 2024-07-05

[基金项目] 新疆维吾尔自治区自然科学基金项目(2022D01A223)。

[作者简介] 阿卜杜萨拉木·萨迪克(1996-), 男, 硕士研究生, 主要从事凝聚态物理(团簇物理)方面研究, E-mail: 15276614479@163.com.

* [通讯作者] 邹艳波(1981-), 女, 副教授, 主要从事材料的第一性原理计算方面研究, E-mail: zouyb@xjnu.edu.cn.

1 计算方法与模型设计

1.1 计算方法

本研究选用量子化学计算软件 Gaussian 16, 基于密度泛函理论(Density Functional Theory, DFT)框架, 对相关体系进行了深入的理论探究。具体而言, 选用B3LYP杂化泛函与3-21G基组的组合^[23-24]。这一选择旨在兼顾计算精度与效率, 以实现对研究对象性质的精确且高效模拟。计算采用周期性边界条件(Periodic Boundary Condition, PBC), 能量收敛标准为 10^{-6} a.u., 选取240个k点, 费米能级上下各取10个能级, 半高宽为2.5。

1.2 模型设计

本研究构建了H-BNNTs(6,6)和THO-BNNTs(0,6)两类扶手椅型BNNTs作为吸附材料。按照管的手性矢量标记方法, H-BNNTs(6,6)可视为是以手性矢量模长为 $|\vec{C}_{66}|$ 宽度(或周长)的H-BN纳米带卷曲而成。同样地, THO-BNNTs(0,6)是由单层THO-BN纳米带按照一定的螺旋方式(沿手性矢量 \vec{C}_{06})卷曲形成的纳米管。图1分别为H-BN纳米带和THO-BN纳米带形貌示意图以及手性矢量标记方式。图2为优化后能量最低的稳定结构H-BNNTs(6,6)和THO-BNNTs(0,6)。表1列出了对应结构的B-N平均键长, B原子(或N原子)的平均键角、管径、长度及平均结合能。计算结果表明两种结构是稳定的, THO-BNNTs(0,6)是平均结合能接近H-BNNTs(6,6)的扶手椅型BNNTs异构体。

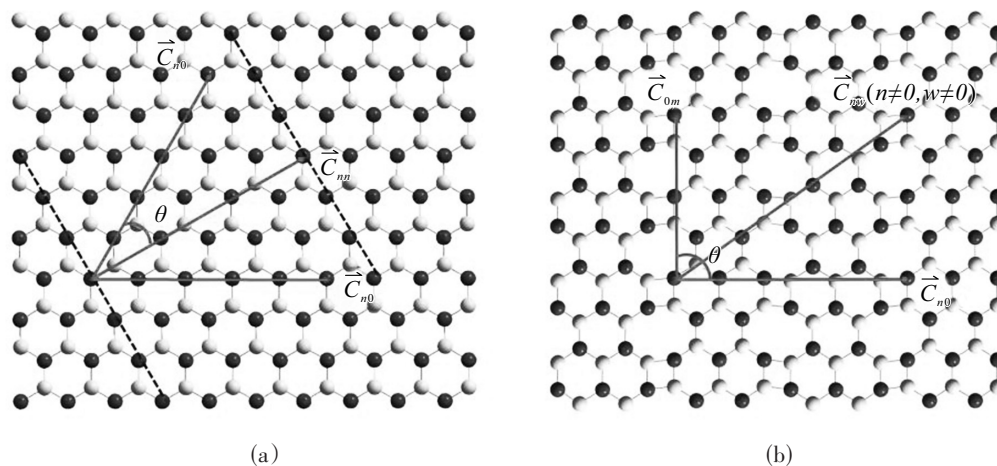


图1 单层H-BN纳米带及坐标表示(a)和单层THO-BN纳米带及坐标表示(b)

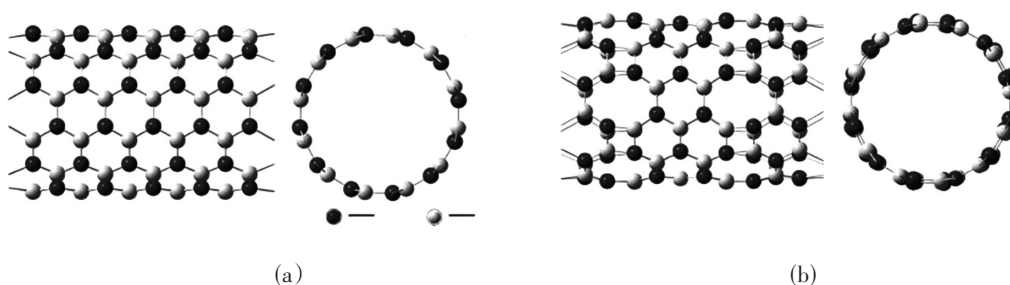


图2 H-BNNTs(6,6)(a)和THO-BNNTs(0,6)(b)

表1 H-BNNTs(6,6)和THO-BNNTs(0,6)的B-N平均键长、B原子(或N原子)的平均键角、管径、长度及平均结合能

类型	B-N/ \AA	-B-	-N-	管径/ \AA	长度/ \AA	E_b/eV
H-BNNTs(6,6)	1.466	119.118°	119.076°	8.365	12.673	8.081
THO-BNNTs(0,6)	1.469	119.852°	118.850°	8.577	12.788	7.890

2 计算结果与讨论

文章研究了五种不同气体分子CO、CO₂、NO、NO₂及N₂O(下文中不特指某种气体时用X表示)在管径和重复单元长度接近的两种纳米管表面的吸附现象,并对多种吸附位点和吸附构型进行了讨论。

2.1 THO-BNNTs(0,6)的吸附性质

吸附能是衡量吸附过程中系统能量变化的一个关键参数,其正值与负值分别对应内热现象和放热现象,从而揭示了吸附反应的自发性倾向以及吸附过程的相对难易程度。具体而言,BNNTs对吸附质X的吸附能计算公式如下

$$E_{ads} = E_{total} - E_{BNNTs} - E_{gas} \quad (1)$$

其中, E_{total} 表示BNNTs吸附气体后优化计算得到的总能量, E_{BNNTs} 和 E_{gas} 分别表示未吸附的BNNTs和气体小分子的能量。依据式(1),若得到的吸附能为负值,则意味着气体分子能稳定吸附于BNNTs, E_{ads} 越小表示吸附越强烈。

图3展示了五种气体小分子在THO-BNNTs(0,6)上吸附后可稳定存在构型。优化后CO在该纳米管表面的吸附有五种可稳定存在的构型(图3(a)~(e)),从吸附能分析(表1)可知,五种吸附构型性质相近;优化后CO₂在该纳米管表面吸附的稳定构型有4种(图3(f)~(i)),其中吸附性质最强的是图3(h)所展示的吸附构型;NO在纳米管表面有4种可稳定存在的构型(图3(j)~(m)),其中吸附性质最强的是图3(j)所展示的吸附构型;NO₂优化得到三种稳定的吸附构型(图3(n)~(p)),其中有两种吸附构型吸附性质较好;N₂O优化得到两种稳定的吸附构型(图3(h)~(i))。表2列出了稳定优化后的不同吸附构型下气体分子与表面原子间的距离以及吸附能。对比可以看到,THO-BNNTs(0,6)对NO₂吸附能力最强,对CO₂吸附次之,对CO吸附能力弱。

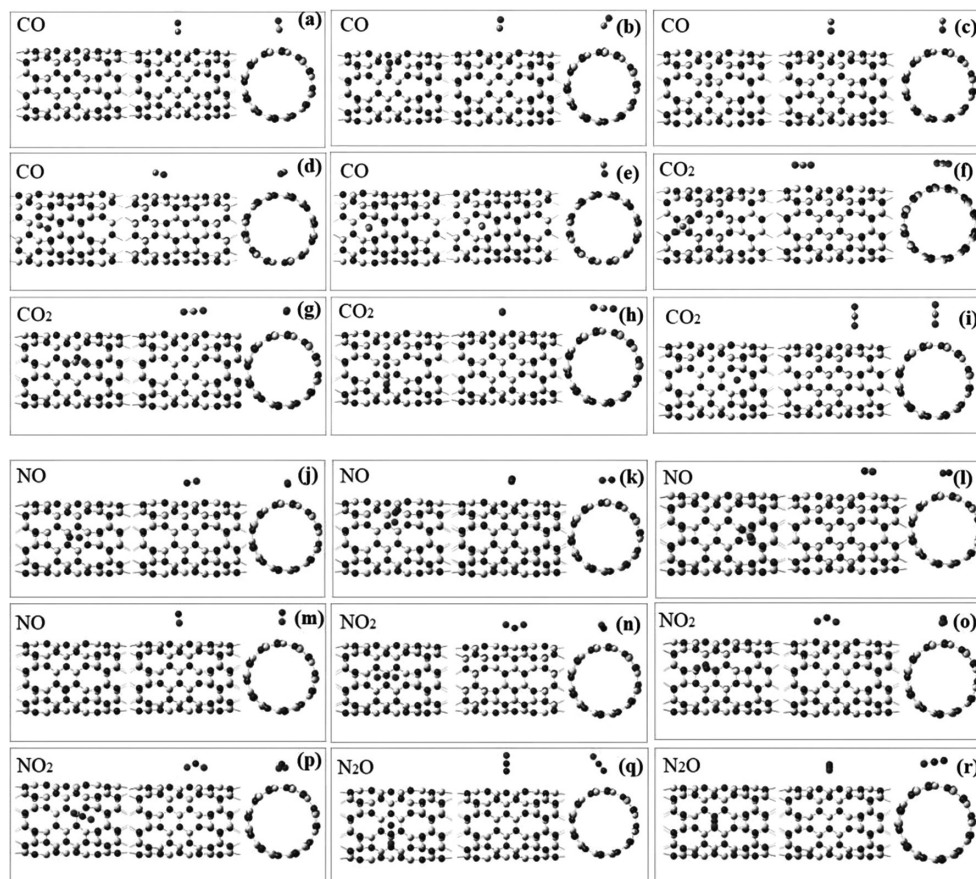


图3 THO-BNNTs(0,6)吸附多种气体优化后的稳定结构

表2 气体分子在THO-BNNTs(0,6)上经结构优化后形成的结构、气体分子与纳米管表面原子的平衡距离R以及吸附能E_{ad}

图	结构	$R(X\text{-THO-BNNTs}(0,6))/\text{\AA}$	E_{ad}/eV
图3(a)	CO/THO-BNNTs(0,6)	2.814	-0.14583
图3(b)	CO/THO-BNNTs(0,6)	2.763	-0.14550
图3(c)	CO/THO-BNNTs(0,6)	2.794	-0.15404
图3(d)	CO/THO-BNNTs(0,6)	2.688	-0.13742
图3(e)	CO/THO-BNNTs(0,6)	2.592	-0.14044
图3(f)	CO ₂ /THO-BNNTs(0,6)	2.882	-0.27964
图3(g)	CO ₂ /THO-BNNTs(0,6)	2.909	-0.26300
图3(h)	CO ₂ /THO-BNNTs(0,6)	2.761	-0.31350
图3(i)	CO ₂ /THO-BNNTs(0,6)	2.569	-0.16920
图3(j)	NO/THO-BNNTs(0,6)	2.454	-0.26349
图3(k)	NO/THO-BNNTs(0,6)	2.788	-0.19570
图3(l)	NO/THO-BNNTs(0,6)	2.910	-0.22632
图3(m)	NO/THO-BNNTs(0,6)	2.702	-0.11867
图3(n)	NO ₂ /THO-BNNTs(0,6)	2.418	-0.28822
图3(o)	NO ₂ /THO-BNNTs(0,6)	2.607	-0.37084
图3(p)	NO ₂ /THO-BNNTs(0,6)	2.498	-0.38409
图3(q)	N ₂ O/THO-BNNTs(0,6)	2.839	-0.13738
图3(r)	N ₂ O/THO-BNNTs(0,6)	2.699	-0.25743

最高占据分子轨道(Highest Occupied Molecular Orbital, HOMO)和最低未占据分子轨道(Lowest Unoccupied Molecular Orbital, LUMO)对于理解化学反应性、电荷转移过程以及预测诸如光学吸收或电子导电性等性质具有至关重要的作用。为进一步了解纳米管与气体小分子相互作用后的电荷转移过程,计算吸附前后HOMO和LUMO能量以及转移的电荷量Q,并通过总电子态密度(Total Density Of States, TDOS)解释其特性。通过电荷转移的分析进一步支持了上文中THO-BNNTs(0,6)对不同气体分子吸附能力的结论(表3)。图4展示了THO-BNNTs吸附气体小分子前后电子结构的变化,从图中可以看到有多个吸附构型在费米能级附近出现新的峰。特别是对于NO吸附,其在费米能级上下区域的态密度变化最为显著。

表3 气体分子在THO-BNNTs(0,6)吸附的稳定构型的HOMO、LUMO以及从THO-BNNTs(0,6)转移电荷量

图	气体/结构	HOMO/eV	HOMO/eV	Q/eV
图4(a)	CO/THO-BNNTs(0,6)	-6.61729	-1.13692	0.02398
图4(b)	CO/THO-BNNTs(0,6)	-6.63186	-0.86852	0.04126
图4(c)	CO/THO-BNNTs(0,6)	-6.61314	-1.11734	0.04272
图4(d)	CO/THO-BNNTs(0,6)	-6.63079	-0.99966	0.02744
图4(e)	CO/THO-BNNTs(0,6)	-6.61619	-0.98535	0.03910
图4(f)	CO ₂ /THO-BNNTs(0,6)	-6.62972	-0.81280	0.05148
图4(g)	CO ₂ /THO-BNNTs(0,6)	-6.60535	-0.79631	0.06205
图4(h)	CO ₂ /THO-BNNTs(0,6)	-6.64151	-0.82820	0.04584
图4(i)	CO ₂ /THO-BNNTs(0,6)	-6.59271	-0.78520	0.04739
图4(j)	NO/THO-BNNTs(0,6)	-6.18914	-3.15099	0.03176
图4(k)	NO/THO-BNNTs(0,6)	-6.26229	-3.26811	0.05044
图4(l)	NO/THO-BNNTs(0,6)	-6.37315	-3.36426	0.06398
图4(m)	NO/THO-BNNTs(0,6)	-6.15976	-3.17125	0.06396
图4(n)	NO ₂ /THO-BNNTs(0,6)	-6.63617	-3.08215	0.02841
图4(o)	NO ₂ /THO-BNNTs(0,6)	-6.57148	-3.41505	0.09043
图4(p)	NO ₂ /THO-BNNTs(0,6)	-6.59255	-3.29664	0.07886

续表

图	气体/结构	HOMO/eV	LUMO/eV	Q/eV
图 6(q)	N ₂ O/THO-BNNTs(0,6)	-6.62289	-1.08073	0.03943
图 6(0,6)	THO-BNNTs(0,6)	-6.64398	-0.82372	

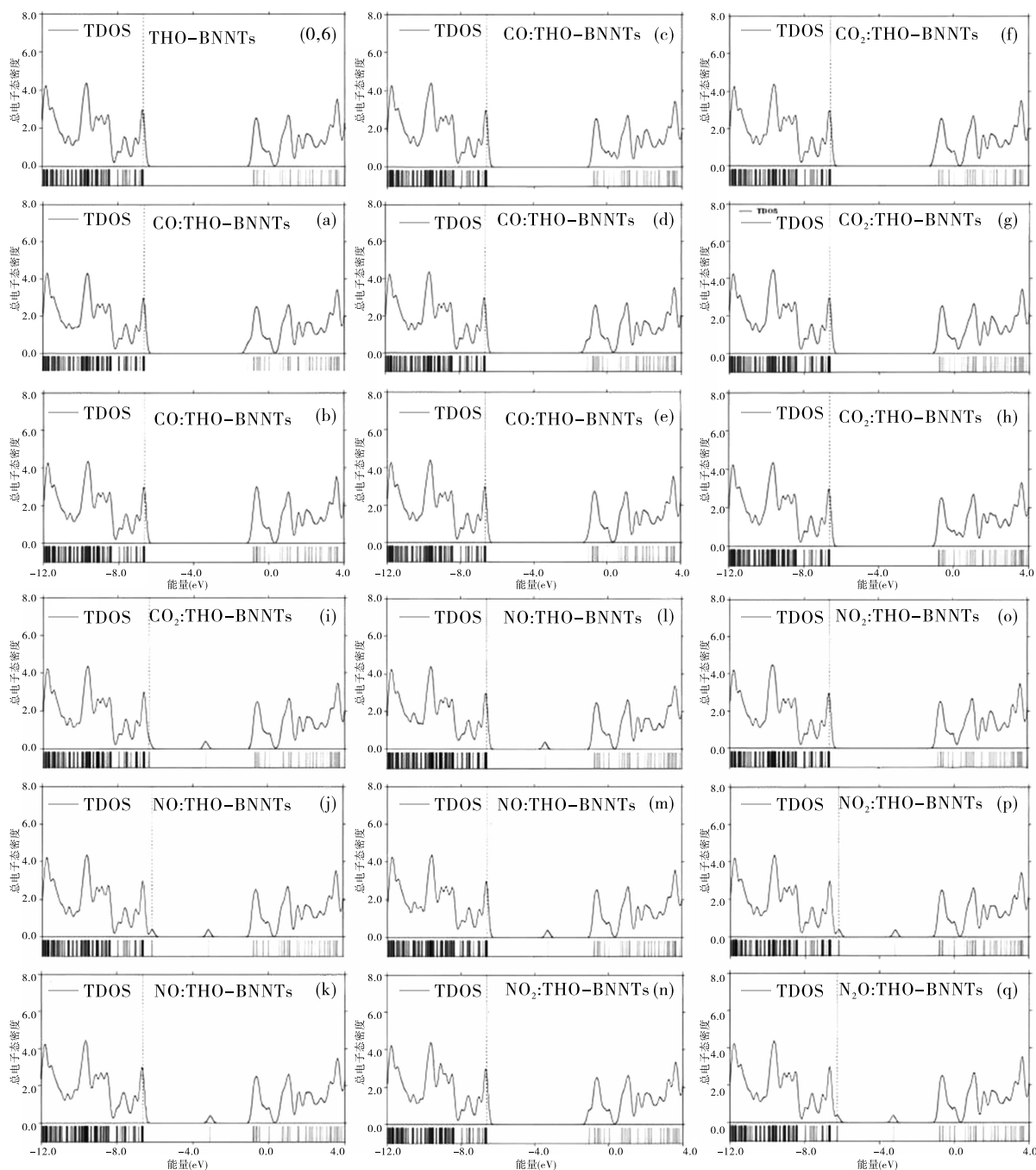


图4 THO-BNNTs(0,6)吸附不同气体分子后TDOS变化

图4(0,6)为THO-BNNTs吸附之前的TDOS;图4(a)~(e)为吸附CO后对应构型的TDOS;图4(f)~(i)为吸附CO₂对应构型的TODS;(j)~(m)为吸附NO后对应不同构型的TODS;图4(n)~(p)为吸附NO₂对应构型的TDOS;图4(q)为吸附N₂O在对应构型的TDOS.

2.2 THO-BNNTs(0,6)的吸附性质

图5展示了计算得到的五种气体分子在H-BNNTs(6,6)纳米管表面吸附的稳定构型,其中对CO、CO₂的吸附各有两种稳定存在的构型(图5(a)~(d));吸附NO时有一种可稳定存在的构型(图5(e));吸附NO₂、

N_2O 时各有两种稳定存在的构型(图5(f)~(i))。表4列出了稳定优化后的不同吸附构型下气体分子与表面原子间的距离以及吸附能。表5展示的是气体分子在H-BNNTs(6,6)上可稳定吸附的构型对应的HOMO、LUMO以及从H-BNNTs(6,6)转移电荷量。从吸附能对比可以看到H-BNNTs(6,6)对 NO_2 吸附能力最强,对 CO_2 吸附次之,对CO吸附能力弱,表5中电荷转移进一步支持了这个结论。

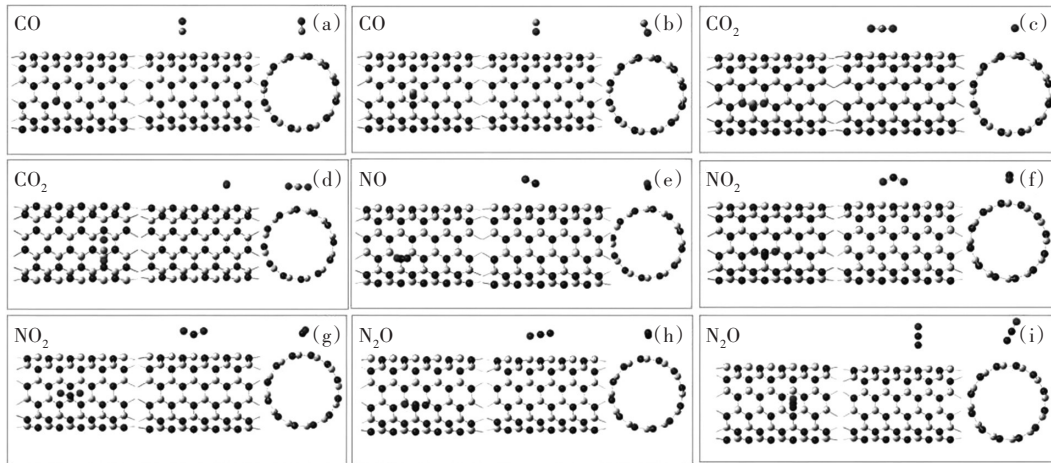


图5 H-BNNTs(6,6)吸附多种气体最终优化的结构

表4 气体分子在H-BNNTs(6,6)上可稳定存在的结构、气体分子与纳米管表面原子的平衡距离R以及吸附能 E_{ad}

图	结构	平衡距离 R/ \AA	E_{ad} /eV
图5(a)	CO/H-BNNTs(6,6)	2.798	-0.14036
图5(b)	CO/H-BNNTs(6,6)	2.769	-0.14120
图5(c)	CO_2 /H-BNNTs(6,6)	2.927	-0.26608
图5(d)	CO_2 /H-BNNTs(6,6)	2.771	-0.30254
图5(e)	NO/H-BNNTs(6,6)	2.544	-0.25090
图5(f)	NO_2 /H-BNNTs(6,6)	2.615	-0.36082
图5(g)	NO_2 /H-BNNTs(6,6)	2.551	-0.26396
图5(h)	N_2O /H-BNNTs(6,6)	2.785	-0.23018
图5(i)	N_2O /H-BNNTs(6,6)	2.835	-0.13022

表5 气体分子在H-BNNTs(6,6)吸附的稳定构型的HOMO、LUMO以及从H-BNNTs(6,6)转移电荷量

图	结构	HOMO/eV	LUMO /eV	Q/eV
图6(a)	CO/H-BNNTs(0,6)	-6.80784	-1.03421	0.02340
图6(b)	CO/H-BNNTs(0,6)	-6.81212	-1.03172	0.03872
图6(c)	CO_2 /H-BNNTs(0,6)	-6.80816	-0.16400	0.06049
图6(d)	CO_2 /H-BNNTs(0,6)	-6.84261	-0.20064	0.04235
图6(e)	NO/H-BNNTs(0,6)	-6.17389	-3.15271	0.03609
图6(f)	NO_2 /H-BNNTs(0,6)	-6.78051	-3.35594	0.08784
图6(g)	NO_2 /H-BNNTs(0,6)	-6.83032	-3.04618	0.01963
图6(h)	N_2O /H-BNNTs(0,6)	-6.79485	-1.19319	0.06807
图6(6,6)	H-BNNTs(6,6)	-6.83624	-0.189481	

图6展示了H-BNNTs(6,6)吸附气体小分子前后电子结构的变化:吸附NO后,禁带宽度缩小2.813 eV;

对于 NO_2 吸附,禁带宽度相应缩小2.485 eV和3.042 eV;当吸附 N_2O 、 CO 时,禁带宽度变化值为较小;吸附 CO_2 时,禁带宽度没有明显的变化。当 NO 、 NO_2 和 N_2O 吸附到H-BNNTs(6,6)和THO-BNNTs(0,6)的DOS图(图4(e)和图6(i))中看出,同时注意由于吸附导致的费米能级偏移。

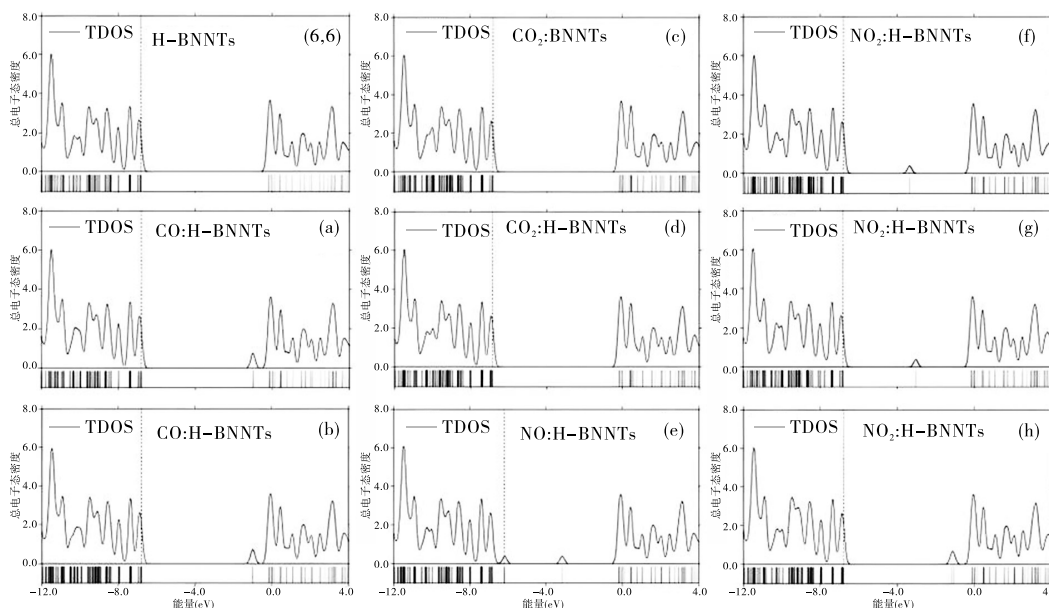


图6 H-BNNTs(6,6)气体分子吸附前后TDOS变化

2.3 两种扶手椅型纳米管吸附性质对比分析

为了更好地解释两种扶手椅型THO-BNNTs(0,6)和H-BNNTs(6,6)对不同气体分子的吸附行为,文章计算了纳米管吸附每一种气体分子时的吸附能平均值。图7展示了不同气体分子 CO 、 CO_2 、 NO 、 NO_2 和 N_2O 在两种扶手椅型H-BNNTs(6,6)和THO-BNNTs(0,6)上平均吸附能之差。相较于纯六元环结构的H-BNNTs(6,6),新结构THO-BNNTs(0,6)在吸附气体分子时展现出独特的吸附特性和选择性响应。这是由于THO-BNNTs(0,6)内部固有的四-六-八元环结构,能提供更加丰富的吸附位点,显示出更好的吸附性能。通过对比分析可以发现, CO 和 CO_2 也能吸附在这两种扶手椅型BNNTs上,但相较于 NO 、 NO_2 和 N_2O ,其对BNNTs的HOMO-LUMO能隙的影响相对较小。

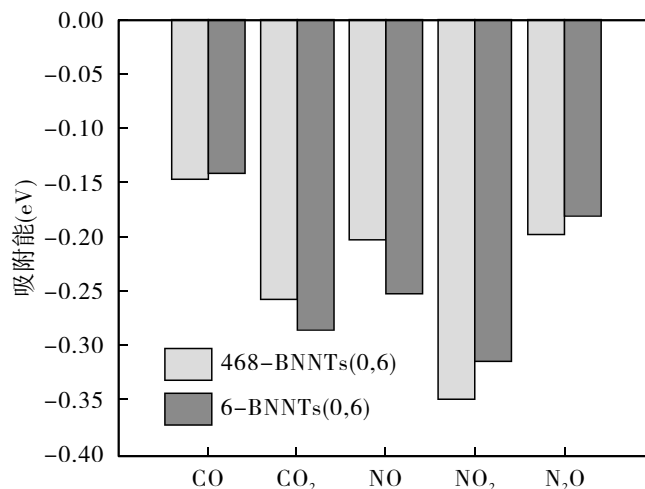


图7 H-BNNTs(6,6)和THO-BNNTs(0,6)对不同气体的吸附能(E_{ad})对比

图6(6,6)为吸附之前的H-BNNTs的TDOS;图6(a)~(b)为吸附 CO 后对应构型的TDOS;图6(c)~(d)为吸附 CO_2 后对应构型的TDOS;图6(e)为吸附 NO 后对应构型的TODS;图6(f)~(g)为吸附 NO_2 后对应构型的

TDOS;图6(h)为吸附 N_2O 后对应构型的TDOS。

综合分析,两种BNNTs对气体小分子吸附过程尤其是NO吸附后,总态密度在费米能级以上能量区域发生了显著调整,其中起主要作用的是B原子与N原子之间的N-B相互作用。而在 NO_2 和 N_2O 吸附于两种扶手椅型BNNTs时,还会伴随着吸附后BNNTs内部相邻N原子负电荷增加和相邻B原子正电荷减少的现象,这也体现在表3和表5中所示的 NO_2 和 N_2O 吸附构型中,电荷转移现象尤为突出。

3 结论

本研究基于一类四六八环结构THO-BNNTs(0,6),研究了其对CO、 CO_2 、NO、 NO_2 及 N_2O 五种气体小分子的吸附性质,并与经典的六环结构H-BNNTs(6,6)的吸附性质进行了对比分析。通过吸附结构优化、吸附能计算以及电荷转移的分析,进一步明确了两类纳米管对五种气体分子的吸附能力以及吸附前后电子性质分析,得到主要结论如下:

(1)从吸附能、电荷转移以及电子态密度分析可以看出,THO-BNNTs(0,6)与H-BNNTs(6,6)两种结构的纳米管对 NO_2 吸附能力最强,对 CO_2 吸附次之,对CO吸附能力弱。其中,THO-BNNTs(0,6)在吸附气体分子时展现出更优异的吸附特性和选择性。

(2)研究进一步展现出在气体吸附领域BNNTs的结构优势,理论预测的结果为实验研究提供有价值的参照,并进一步促进BNNTs在气体传感、催化等领域的实际应用和发展进程,从理论上为开发新型、高灵敏度和高选择性的气体传感器技术奠定了理论基础。

参考文献:

- [1] IJIMA S. Helical Microtubules of Graphitic Carbon[J]. Nature, 1991, 354(6348): 56-58.
- [2] RUBIO A, CORKILL J L, COHEN M L. Theory of Graphitic Boron Nitride Nanotubes [J]. Physical Review. B, Condensed Matter, 1994, 49(07): 5081-5084.
- [3] CHOPRA N G, LUYKEN R J, CHERREY K, et al. Boron Nitride Nanotubes [J]. Science, American Association for the Advancement of Science (AAAS), 1995, 269(5226): 966-967.
- [4] CHEN H, CHEN Y, LI C P, et al. Eu-doped Boron Nitride Nanotubes as a Nanometer-sized Visible-light Source [J]. Advanced Materials, 2007, (14): 19.
- [5] ARENAL R, STÉPHAN O, KOČIAK M, et al. Electron Energy Loss Spectroscopy Measurement of the Optical Gaps on Individual Boron Nitride Single-Walled and Multiwalled Nanotubes[J]. Phys Rev Lett. 2005, 95(12): 127601.
- [6] ZHOU Z, ZHAO J, CHEN Z, et al. Comparative Study of Hydrogen Adsorption on Carbon and BN Nanotubes [J]. Journal of Physical Chemistry B, 2006, 110(27): 13363-13369.
- [7] JHI S H, KWON Y K. Hydrogen Adsorption on Boron Nitride Nanotubes: A Path to Room-temperature Hydrogen Storage [J]. Physical Review B, 2004, 69(24): 1681-1685.
- [8] OKU T, KUNO M, NARITA I. Hydrogen Storage in Boron Nitride Nanomaterials Studied by TG/DTA and Cluster Calculation [J]. Journal of Physics & Chemistry of Solids, 2004, 65(02-03): 549-552.
- [9] WU X, YANG J, HOU J G, et al. Hydrogen Adsorption on Zigzag (8,0) Boron Nitride Nanotubes [J]. Journal of Chemical Physics, 2004, 121(17): 8481-8485.
- [10] BAIERLE R J, SCHMIDT T M, FAZZIO A. Adsorption of CO and NO Molecules on Carbon Doped Boron Nitride Nanotubes [J]. Solid State Communications, 2007, 142(01/02): 49-53.
- [11] LU N, WEI W, CHUAI X, et al. Investigation of Adsorbed Small-molecule on Boron Nitride Nanotube (Bnnt) Based on First Principles Calculations [C]//2018 International Conference on Simulation of Semiconductor Processes and Devices (SISPAD). IEEE Xplore, 2018: 284-287.
- [12] MANANGHAYA M, YU D, SANTOS G N. Hydrogen Adsorption on Boron Nitride Nanotubes Functionalized with Transition Metals [J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2016, 41(31): 13531-13539.
- [13] ZHANG L P, WU P, SULLIVAN M B. Hydrogen Adsorption on Rh, Ni, and Pd Functionalized Single-Walled Boron Nitride Nanotubes [J]. Journal of Physical Chemistry C, 2016, 115(10): 4289-4296.
- [14] OKU T, KUNO M. Synthesis, Argon/hydrogen Storage and Magnetic Properties of Boron Nitride Nanotubes and Nanocapsules [J].

- Diamond & Related Materials, 2003, 12(03-07): 840-845.
- [15] BAEI M T, KAVEH F, TORABI P, et al. Adsorption Properties of Oxygen on H-Capped (5,5) Boron Nitride Nanotube (BNNT)-A Density Functional Theory[J]. Journal of Chemistry, 2011, 8(02): 609-614.
- [16] DONG Q, LI X M, TIAN W Q, et al. Theoretical Studies on the Adsorption of Small Molecules on Pt-doped BN Nanotubes[J]. Journal of Molecular Structure Theochem, 2010, 948(01): 83-92.
- [17] BAEI M T, B A R S, C SOLTANI A R, MORADI A V, et al. Adsorption Properties of N₂O on (6,0), (7,0), and (8,0) Zigzag Single-Walled Boron Nitride Nanotubes: A Computational Study[J]. Computational and Theoretical Chemistry, 2011, 970(01-03): 30-35.
- [18] BEHESHTIAN J, BAEI M T, PEYGHAN A A. Theoretical Study of CO Adsorption on the Surface of BN, AlN, BP and AlP Nanotubes[J]. Surface Science, 2012, 606(11-12): 981-985.
- [19] XIE Y, HUO Y P, ZHANG J M. First-principles Study of CO and NO Adsorption on Transition Metals Doped (8,0) Boron Nitride Nanotube[J]. Applied Surface Science, 2012, 258(17): 6391-6397.
- [20] SHADMAN M A Z. Argon and Neon Storages in Single-Walled Boron Nitride Nanotubes: A Grand Canonical Monte-Carlo Study[J]. Fullerenes, Nanotubes, and Carbon Nanostructures, 2011, (19): 700-712.
- [21] GANJI M D, MIRNEJAD A, NAJAFI A. Theoretical Investigation of Methane Adsorption onto Boron Nitride and Carbon Nanotubes[J]. Technol Adv Mater, 2010, 11(04): 045001.
- [22] WANG R, ZHU R, ZHANG D. Adsorption of Formaldehyde Molecule on the Pristine and Silicodoped Boron Nitride Nanotubes[J]. Chemical Physics Letters, 2008, 467(01-03): 131-135.
- [23] BECKE, AXEL D. Density-functional Thermochemistry. III. The Role of Exact Exchange[J]. Journal of Chemical Physics, 1993, 98(07): 5648-5652.
- [24] LEE C, YANG W, PARR RG. Development of the Colle-Salvetti Correlation-energy Formula into a Functional of the Electron Density[J]. Physical Review B, 1988, 37(02): 785-789.

Density Functional Theory Study of Armchair Boron Nitride Nanotubes for Adsorption of Small Molecules Gases

ABUDUSALAMU·Sadike^{1,2}, LI Qing-yang¹, WEI Jie³, ZHU Heng-jiang¹, ZOU Yan-bo^{1,2*}

(1.School of Physics and Electronic Engineering, Xinjiang Normal University, Urumqi, Xinjiang, 830054, China; 2. Xinjiang Key Laboratory for Luminescence Minerals and Optical Functional Materials, Urumqi, Xinjiang, 830054, China; 3.Experimental Equipment Management Center, Xinjiang Normal University, Urumqi, Xinjiang, 830017, China)

Abstract: Boron-nitride nanotubes, characterized by their rich pore structures, exhibit exceptional capabilities in adsorbing small molecules. This study, grounded in density functional theory, delves into the comparative analysis of the gas-sensing attributes of a novel boron-nitride nanotubes configuration, comprising tetra-hexa-octagonal rings, alongside conventional hexagonal boron-nitride nanotubes. The investigation focuses on their responsiveness to a spectrum of gases, including CO, CO₂, NO, NO₂, and N₂O. Findings underscore the abundance of effective adsorption sites within these boron-nitride nanotubes, facilitating the formation of a plethora of stable adsorption configurations. Notably, the nanotubes display a pronounced selectivity and heightened sensitivity towards specific gas molecules, particularly CO₂ and NO. These results highlight the potential of boron-nitride nanotubes as promising candidates for advanced gas sensing applications, underscoring their versatility and efficacy in molecular detection.

Keywords: Density functional theory; Boron-nitride nanotubes; Adsorption energy