

УДК 620.3

ВЛИЯНИЕ АДСОРБЦИИ УГЛЕКИСЛОГО ГАЗА НА БАЛЛИСТИЧЕСКИЙ ТОК В УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБКАХ, МОДИФИЦИРОВАННЫХ ОКСИДОМ ЖЕЛЕЗА

Эль Занин А.Р. (ВолГУ)

Научный руководитель – доктор физико-математических наук, доцент, заведующий кафедрой судебной экспертизы и физического материаловедения Борознин С.В. (ВолГУ)

Введение. Ведение непрерывного экологического, промышленного мониторинга, оперативное реагирование на повышение концентрации тех или иных веществ в окружающей среде, производственных помещениях, жилых объектах, являются важными задачами, направленными на повышение качества жизни, обеспечения безопасности жизни и здоровья людей. В связи с этим актуальным направлением исследований является поиск новых материалов для высокочувствительных газовых сенсоров, способных обнаруживать чрезвычайно малые количества определенных веществ. Из-за своих уникальных физико-химических свойств углеродные наноматериалы в целом и углеродные нанотрубки (УНТ) в частности рассматриваются сегодня как одни из наиболее перспективных материалов для детектирования различных веществ [1]. Возможность модифицирования поверхности УНТ с помощью атомов, молекул, функциональных групп и пр. позволяет создавать новые уникальные материалы, характеризующиеся высокой селективностью в отношении определенных химических компонентов. В настоящей работе предлагается рассмотреть влияние адсорбции углекислого газа на баллистический ток в УНТ, модифицированных оксидом железа.

Основная часть. Были рассмотрены УНТ двух типов геометрии: “зигзаг” (6,0) и “кресло” (6,6), – поверхностно модифицированные оксидом железа Fe_3O_4 . Квантово-химическое моделирование в рамках теории функционала плотности на уровне теории B3LYP/6-31G позволило определить наиболее оптимальные конфигурации адсорбционных комплексов описанных выше структур с углекислым газом. Далее были рассчитаны одноэлектронные спектры и плотности состояний композитов УНТ/ Fe_3O_4 до и после адсорбции углекислого газа. С помощью полученных данных был произведен расчет величины баллистического тока в системах “серебро-УНТ/ Fe_3O_4 -серебро” для УНТ различной геометрии до и после адсорбции углекислого газа и построены соответствующие вольт-амперные характеристики (ВАХ). Расчет производился в рамках модели Ландауэра [2] для диапазона значений напряжения до 0,1 В. Значение уровня Ферми для серебра было взято из справочной литературы [3].

Было обнаружено, что ВАХ имеют нелинейный характер в рассматриваемом диапазоне значений напряжения. Величина тока после адсорбции возрастает для УНТ/ Fe_3O_4 как для геометрии типа “зигзаг”, так и для геометрии типа “кресло”. Это объясняется перестройкой энергетических уровней вследствие адсорбции, а именно увеличением числа уровней энергии, а, соответственно, плотности состояний в диапазоне энергий 5,5-5,6 эВ. УНТ/ Fe_3O_4 с типом геометрии “кресло” характеризуется большими значениями тока по сравнению с УНТ/ Fe_3O_4 с типом геометрии “зигзаг”. Так, значение тока для УНТ(6,6)/ Fe_3O_4 до адсорбции углекислого газа при напряжении 0,1 В составляет 0,745 мА, для УНТ(6,0)/ Fe_3O_4 – 0,379 мА.

Выводы. Проведенное исследование позволило установить, что адсорбция углекислого газа на поверхности композитов УНТ/ Fe_3O_4 с различными типами геометрии приводит к увеличению величины баллистического тока. Таким образом, система “серебро-УНТ/ Fe_3O_4 -серебро” может выступать в качестве простейшего устройства для детектирования углекислого газа. Полученные результаты могут быть полезны для проектирования новых сенсорных устройств и других приложений в сфере нанoeлектроники.

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ (тема “FZUU-2023-0001”).

Список использованных источников:

1. Panigrahi P. K., Chandu B., Puvvada N. Recent advances in nanostructured materials for application as gas sensors //ACS omega. – 2024. – V. 9. – №. 3. – P. 3092-3122.
2. Davoudiniya M., Yang B., Sanyal B. Influence of ab initio derived site-dependent hopping parameters on electronic transport in graphene nanoribbons //Physical Chemistry Chemical Physics. – 2024. – V. 26. – №. 3. – P. 1936-1949.
3. Степанов, Н. П. Физические характеристики полупроводников, использующихся в твердотельной электронике : учебное пособие / Н. П. Степанов. — Чита : ЗабГУ, 2021. — 126 с.