



УДК 53.06
ББК 22.37

РАЗРАБОТКА ТЕХНОЛОГИИ СОЗДАНИЯ ДЕТЕКТОРА ГАЗОВ НА ОСНОВЕ ГРАФЕНА

Полунина Александра Анатольевна

Магистрант кафедры информационных систем и компьютерного моделирования,
Волгоградский государственный университет
polunina_a@mail.ru
просп. Университетский, 100, 400062 г. Волгоград, Российская Федерация

Ключевые слова: газовый сенсор, графен, адсорбция, лямбда-зонд, туннельный ток.

Актуальность исследования. Графен – относительно новый углеродный материал, набравший за последние годы большую популярность благодаря своим уникальным физико-химическим свойствам. Сложно назвать направление, в котором использование графеновых или функционализированных графеновых структур не привело бы к улучшению прочностных, электрических, теплофизических характеристик материалов.

На настоящий момент технологии синтеза графеновых структур различными методами, такими как химическое осаждение из газовой фазы на поверхностях различных металлов и термическое расщепление графита, широко апробированы в мировой и отечественной литературе. Таким образом, сегодня существуют технологии, позволяющие производить графен достаточно низкой себестоимости, однако, несмотря на широкие перспективы применения графена, большая часть практических разработок находится на стадии НИР, что связано как с относительно недавним открытием данного материала и описанием его свойств, так и с необходимостью организации междисциплинарных (физика, химия, материаловедение) исследований с использованием высокоточного оборудования. Реализация сенсора на графене позволит создать новое поколение газовых датчиков, которые могут найти широкое применение в области обеспечения об-

щественной безопасности, а также в производственных целях.

Постановка задачи и основные результаты. Одной из особенностей графеновых структур является зависимость электрофизических свойств от морфологии материала и параметров внешней атмосферы. Адсорбированные на поверхности графеновых структур молекулы различных газов, таких как O₂, CO, NO и др., могут изменять сопротивления материалов в x раз, благодаря чему на основе графена возможно создание высокочувствительных детекторов этих газов.

Целью исследования является разработка технологии создания детектора газов O₂, CO, NO, C_xH_x на основе CVD или GO графена.

Для решения задач проекта предполагается использовать следующие подходы и методы: квантово-механические расчеты, методы статистической физики, методы получения графена путем химического осаждения из газовой фазы, а также из оксида графена.

В существующих датчиках – два металлических электрода, заменим один из них на графен и будем исследовать туннельный ток такого контакта (см. рис. 1).

При изучении туннельных эффектов зададим гамильтониан нашей модели (см. рис. 2) в виде:

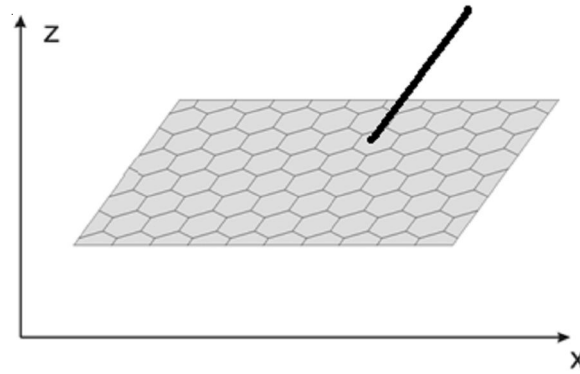


Рис. 1. Геометрия задачи

$$H = \sum_p E_p^A a_p^+ a_p + \sum_q E_q^B b_q^+ b_q + \sum_{pq} T_{pq} (a_p^+ b_q + b_q^+ a_p), \quad (1)$$

где a_p^+ ; a_p – операторы рождения, уничтожения электронов с импульсом p в графеновых нанолентах; E_p^A – электронный спектр графена; T_{pq} – матричный элемент оператора туннелирования между состояниями p и q ; b_q^+ ; b_q – операторы рождения, уничтожения электронов с импульсом q в веществе, приведенном в контакт с графеновой нанолентой; E_q^B – электронный спектр металла.

Отметим, что в (1) p и q являются мультииндексами. Мультииндекс же q определяется веществом приведенном в контакт и, например, для металлов он имеет вид $q = (p_x, p_y, p_z)$, тогда как для графена $q = (p_x, p_y)$.

То есть первоначально будем исследовать на пригодность в качестве чувствительного элемента в лямбда-датчике контакт графена с металлом. Далее планируется исследовать возможность использования контактов графена с другими материалами, в том числе – с нанотрубками.

Квантово-химические расчеты, проведенные в программе Gaussian, позволят получить параметры гамильтониана. С помощью гамильтониана мы получим плотность состояний графена с адсорбированными молекулами и затем вычислим туннельный ток.

$$J = 4pe|T|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dE n_A(E + eV) n_B(E) (n_f(E) - n_f(E + eV)), \quad (2)$$

$$n_A(E) = \sum_p d(E - E_p^A); n_B(E) = \sum_q d(E - E_q^B),$$

где $\delta(x)$ – дельта функция Дирака, $v_{A(B)}(E)$ – туннельная плотность состояний; $n_f(E)$ – функция распределения Ферми:

$$F_0 = \frac{1}{1 + \exp\{E/k_b T\}}, \quad (3)$$

где T – температура, k_b – постоянная Больцмана.

На настоящий момент проводятся теоретические исследования графена, в том числе искривленного графена, его физико-химических свойств и взаимодействия с примесями [1–5; 7].

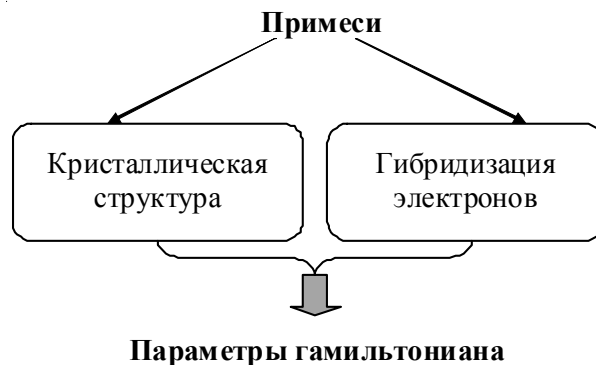


Рис. 2. Квантово-химические расчеты параметров гамильтониана

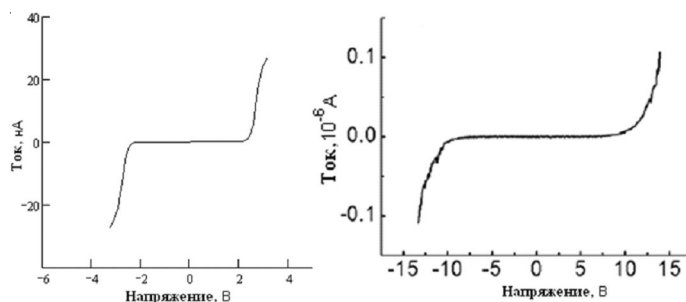


Рис. 3. ВАХ контакта графен – графен: слева – зависимость, полученная теоретически; справа – учеными из Национального университета Сингапура (экспериментально)

Примечание. Источник экспериментальных данных: [6].

На рисунке 3 видим вольтамперную характеристику контакта графен – графен. Наблюдается качественное совпадение вольтамперных характеристик для туннельного контакта.

Отсутствие количественного совпадения можно объяснить тем, что не представляется возможным точно определить расстояние, на которое подведен зонд в случае экспериментальных данных.

На рисунке 4 представлена ВАХ с примесями и без, в зависимости от наличия которых сопротивление меняется, что показывает пригодность рассматриваемой системы для создания лямбда-датчика на основе графена.

Потенциальные характеристики разрабатываемого датчика:

1) высокая чувствительность – датчик на основе графена способен уловить даже одну

молекулу, следовательно, является более чувствительным по сравнению с аналогами.

2) большой срок службы – легко чистить, через графеновый детектор пропускают ток силой около 10 мА – этого достаточно, чтобы нагреть структуру настолько, чтобы произошла десорбция частиц газа. Такой механизм очистки не влияет на степень эффективности детектирования газов: процесс сорбции-десорбции газов полностью обратим. Для аналогов срок службы – два года.

3) температурный диапазон (датчик будет работать при более низких температурах по сравнению с аналогами – до 300 °С) – у аналогов рабочий диапазон температуры датчика от 300 до 750 °С (при 850 °С может произойти разрушение датчика).

4) низкая стоимость (~1 200 руб.), относительно стоимости аналогов (от 1 700 до 8 500 руб.).

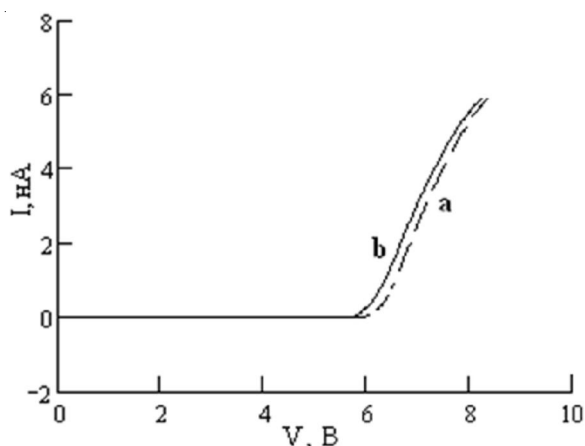


Рис. 4. ВАХ контакта графен – графен: с примесями (a) и без (b)

Детектор газов на основе графена имеет большие возможности внедрения на рынок. Положительными факторами является высокая стоимость имеющейся продукции и практическое отсутствие российских игроков на рынке. Потенциальными потребителями являются службы безопасности (аэро, ж/д, автовокзалы), автомобильные компании, обычные граждане (бытовые детекторы утечки природного газа в домах, оборудованных газовыми плитами или газовыми системами отопления), производство воздухоочистителей, кондиционеров и систем вентиляции помещений.

Анализ показал, что целесообразно направить усилия на завоевание сегмента рынка, связанного с автомобильной отраслью, а также провести аналогичные исследования для искривленного графена, который легче получить в настоящее время.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Конобеева, Н. Н. Моделирование процессов переноса в углеродных наноструктурах на основе явления перколяции / Н. Н. Конобеева, А. А. Полунина // Математическое моделирование фрактальных процессов, родственные проблемы анализа и информатики : материалы II Междунар. конф. мол. ученых. – Нальчик : Терскол, 2012. – С. 129–132.
2. Конобеева, Н. Н. Особенности спиновой диффузии на кривых поверхностях / Н. Н. Конобеева, А. А. Полунина // Приоритетные технологии: актуальные вопросы теории и практики : сб. науч. докл. I Всерос. конгр. – Волгоград, 2014. – С. 141–146.
3. Свидетельство о государственной регистрации на программу № 2013610055. Программа для расчета динамики предельно коротких оптических импульсов в слоистых структурах на основе графена и нитрида бора. – Выдано 09.01.2013.
4. Konobeeva, N. N. Zitterbewegung in curved graphene / N. N. Konobeeva, M. B. Belonenko // *Physica B: Condensed Matter*. – 2015. – Vol. 456. – P. 115–117.
5. Konobeeva, N. N. Renyi entropy for the doped graphene at low temperatures / N. N. Konobeeva, A. A. Polunina, M. B. Belonenko // *Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics*. – 2015. – Vol. 6 (2). – P. 1–6.
6. Tunneling characteristics of graphene / Y. J. Shin, G. Kalon, J. Son [et al.] // *Appl. Phys. Lett.* – 2010. – Vol. 97. – P. 102–252.
7. Zhukov, A. V. On the electronic spectrum in curved graphene nanoribbons / A. V. Zhukov, R. Bouffanais, N. N. Konobeeva, M. B. Belonenko // *JETPLett.* – 2013. – Vol. 97, iss. 7. – P. 465–468.

DEVELOPING CREATING TECHNIQUES GAS DETECTORS BASED ON GRAPHENE

Polunina Aleksandra Anatolyevna

Master Student, Department of Information Systems and Computer Modeling,
Volgograd State University
polunina_a@mail.ru
Prosp. Universitetsky, 100, 400062 Volgograd, Russian Federation

Key words: gas sensor, graphene, adsorption, lambda probe, tunneling current.