

ӘӨЖ 29.19.22

**АЦЕТОН ГАЗЫН АНЫҚТАУ ҮШІН JANUS ӨТПЕЛІ МЕТАЛДЫН
ДИХАЛКОГЕНИДТІ МОНОҚАБАТЫН КОМПЬЮТЕРЛІ ЕСЕПТЕУ**

Сейтжапар Н.Г¹, Хамитұлы А.²

Seitzhapar13@gmail.com

¹Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ Ядролық физика, жаңа материалдар және технологиялар халықаралық кафедрасы докторанты, Нұр-Сұлтан, Қазақстан.

²Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ Техникалық физика кафедрасы магистранты, Нұр-Сұлтан, Қазақстан.

Ғылыми жетекшісі- Ф.У.Абуова

Соңғы уақытта Janus 2D материалдары деп аталатын 2D материалдарының жаңа класы бірте-бірте айтарлықтай қызығушылық тудырды, себебі Janus 2D материалдарыныңдәстүрлі 2D материалдарынан ерекшеленетін тамаша қасиеттері бар. Janus 2D материалдары 2D материалдарының екі жағында екі түрлі қыры бар асимметриялық құрылымдары бар материалдар болып табылады. Чжоу және т.б. модельдеген графон деп аталатын бірінші

ұсынылған Janus 2D материалы графеннің тек бір жағын гидрлеу арқылы алынған графен негізіндегі материал болып табылады. Графен 0,46 эВ болатын шағын тиымсалынған аймаққа ие және ферромагниттік жартылай өткізгіш болып табылады. Сонымен қатар, Janus TMD материалдарының көптеген эксперименттік және теориялық зерттеулері бар. Эксперименттік зерттеулерде бір қабатты Janus TMD, MoSSe 2017 жылы зертханада Ли мен әріптестері, Лу және әріптестері өзгерткен химиялық бу тұндыру (CVD) арқылы сәтті жасалды, дегенмен Janus TMD табиғатта жоқ. 2D TMD Janus (MXY деп аталады) жоғары D_{3h} нүктелік топ симметриясына ие бір қабатты MX2 TMD құрылымымен салыстырғанда C_{3v} нүктелік топ симметриясын бұзу құрылымына ие. MOSSe, WSSE, WSETE және WSTE моноқабаттарын қоса алғанда, VI топтағы халькогенидті MXY моноқабаттары фонон дисперсиясының есептеулері және молекулалық динамикалық модельдеу арқылы тұрақты екендігі теориялық түрде көрсетілді. Гриннің көп денелі бұзылулар теориясын пайдалана отырып, Ли және басқалары Janus MoSSe моноқабаттарының оптоэлектрондық материалдарда қолдануға болатын күшті экситондық әсерлер көрсететінін анықтады.

Дүние жүзіндегі өнеркәсіптің дамуымен көміртегі тотығы (CO), азот оксидтері (NO_x), озон (O_3), қатты бөлшектер (PM2.5), асбест және ұшқыш органикалық қосылыстарды (VOC) қоса алғанда, улы газдар мен ауаны ластаушы заттардың шығарындылары, тез өсті. Дегенмен, соңғы жылдары ұшпа органикалық қосылыстардың (VOC) шығарындылары да айтарлықтай өсті. Ластаушы заттар негізінен химиялық процестердің (мысалы, бояулар) нәтижесінде шығарылады және адам денсаулығына қатерлі ісік, орталық жүйке жүйесінің бұзылуы және тері проблемалары сияқты елеулі теріс әсер етеді. Әдебиеттерде 2D материалдары, соның ішінде графен оксидтері, фосфор және TMD жақында улы газды анықтау саласындағы қолданбалар үшін кеңінен зерттелді. Сонымен қатар, қуатты тұтынуды арттыруы мүмкін жоғары жұмыс температурасын төмендету үшін газды анықтау саласындағы соңғы зерттеулер VOC және улы газдарды анықтау үшін бөлме температурасының сенсорларын жасауға бағытталған. Олардың ішінде, TMD бөлме температурасында VOC түсіру қабілетінің жақсы екенін көрсетті. Бұл жұмыс температурасын төмен температуралы VOC сенсоры үшін пайдалануға болады, себебі ол дәстүрлі VOC сенсорларына қарағанда төмен. TMD үшін функционалды емес MoS_2 толуол мен гександы анықтай алатыны хабарланды, ал Au безендірілген MoS_2 этанол мен ацетонға сезімтал. Бұл зерттеулер TMD-ларды функционалдықтандыру және модификациялау олардың сезімтал қасиеттерін газ молекулаларына тиімді баптай алатынын көрсетеді.

Жақында Janus MoSSe және WSSE моноқабаттары бірінші принципті есептеулер арқылы газ тәрізді NO_2 және NH_3 молекулаларын өлшеу арқылы зерттелді. Осы Janus TMD моноқабаттарының ақаулы құрылымдарын немесе деформациясын пайдалана отырып, Janus TMD моноқабаттарының NO_2 және NH_3 -ке жоғары сезімталдығы көрсетілді. Дегенмен, MoS_2 жақсы VOC сенсоры болып саналғанымен, Janus TMD моноқабаттарының VOC-қа қатысты сезімталдығы әлі анық емес. Осылайша, бұл жұмыста біз төрт түрлі VOC молекулаларының, соның ішінде ацетон, метанол, этанол және формилальдегидтің адсорбциясы мен сезімталдығын молибден негізіндегі TMD және Janus TMD-ні пайдалана отырып зерттедік. Адсорбциялық энергияны қоспағанда, біз VOC және TMD арасындағы өзара әрекеттесуді түсіндіру үшін тығыздықтан алынған электростатикалық және химиялық (DDEC) атомдық зарядтарды және электронды тығыздық айырмашылығын (EDD) қамтитын электронды талдауларды есептеп, талқылауды ұсынамыз. Сонымен қатар, VOC-терді ұстау мүмкіндігін анықтау үшін жолақ құрылымын есептедік және есептелген диапазондық мәндерді пайдалана отырып, Janus TMD-леріндегі VOC өткізгіштік өзгерісінің айырмашылығын таза TMD-лермен салыстырдық.

Бұл жұмыста біз тығыздықтың функционалдық теориясын қолдандық (DFT) ацетонның, метанолдың сезімталдығын зерттеуге арналған есептеулер, этанол және формил альдегид таза 2D өтпелі металдан дихалькогенидтер (TMD) және 2D Janus TMD моноқабаттары. Қосулы MoS_2 , $MoSe_2$ және $MoTe_2$ моноқабаттарынан біз анықтадық ацетонның адсорбциялық

энергиясы оның энергиясынан үлкен аналогтары метанол, этанол және формил альдегид. Жылы қосымша, MoS₂ моноқабатында ацетонның адсорбциясы үлкенірек диапазонның өзгеруіне әкелуі мүмкін, нәтижесінде үлкенірек болады өткізгіштігінің 35,23%-ға өсуімен өзгерді. Негізінде EDD есептеу, біз ацетонның екі жақты құрайтынын байқаймыз MoS₂ моноқабатымен электронды тасымалдау бағыты, онда бірі - MoS₂-ден ацетонның оттегіне электрон беру, екіншісі - ацетоннан электрон беру. C–H...S әрекеттесу арқылы MoS₂-ге C–H байланысы. Есептелген DDEC атомдық зарядтары да күштірек екенін көрсетеді ацетон мен MoS₂ арасындағы электрон алмасу әрекеттесуі моноқабат. Сонымен қатар, 2D-дегі төрт VOC-тің адсорбциялық энергиясы Janus TMD моноқабаттары таза қабаттағыларға ұқсас TMD. Дегенмен, біз ацетонды адсорбциялаудан кейін анықтадық Janus MoSSe және MoSTe моноқабаттарының S-қабатында, ол салыстырғанда өте үлкен жолақ аралық мәнінің өзгеруін көрсетеді ацетонның MoS₂-ге адсорбциясымен. Сезгеннен кейін ацетон молекуласы, Janus MoSSe диапазонының мәні өзгереді және MoSTe сәйкесінше -0,103 және 0,123 эВ. Бұл нәтижелер Janus MoSSe және MoSTe өткізгіштікке айналады және резистивті сенсорлар электр өткізгіштігінен және электрлік қарсылық Janus MoSSe бойынша 640,125 және 90,811% өсті және сәйкесінше MoSTe. Екінші жағынан, жолақ аралығы өзгерістер, сондай-ақ өткізгіштік өзгерісі шамалы дерлік Se-қабатында және Te-қабатында төрт VOC адсорбциясынан кейін MoSSe және MoSTe моноқабаттары. Сол сияқты, сезімталдық Janus MoSeTe өткізгіштігінің өзгеруіне негізделген бұл төрт VOC да өте нашар. Демек, біздің нәтижелеріміз Janus MoSSe және MoSTe күкірт қабаты екенін көрсетеді, атап айтқанда, MoS₂ моноқабатының Janus модификациясы материалдарға қатысты сезімталдықты тиімді түрде арттыра алады ацетон молекуласы. Бұл тұжырым жаңа 2D ұшпа органикалық қосылыс сенсорларын жобалауға нұсқау беруі мүмкін.

Қолданылған әдебиеттер тізімі

1. Novoselov, K. S.; Geim, A. K.; Morozov, S. V.; Jiang, D.; Zhang, Y.; Dubonos, S. V.; Grigorieva, I. V.; Firsov, A. A. Electric field effect in atomically thin carbon films. *Science* 2004, 306, 666–669.
2. Chen, Z.; Wang, J.; Pan, D.; Wang, Y.; Noetzel, R.; Li, H.; Xie, P.; Pei, W.; Umar, A.; Jiang, L.; Li, N.; Rooij, N. F.; Zhou, G. Mimicking a Dog's Nose: Scrolling Graphene Nanosheets. *ACS Nano* 2018, 12, 2521–2530.
3. Fiori, G.; Bonaccorso, F.; Iannaccone, G.; Palacios, T.; Neumaier, D.; Seabaugh, A.; Banerjee, S. K.; Colombo, L. Electronics based on two-dimensional materials. *Nat. Nanotechnol.* 2014, 9, 768–779.
4. Kim, Y. H.; Kim, S. J.; Kim, Y. J.; Shim, Y. S.; Kim, S. Y.; Hong, B. H.; Jang, H. W. Self-Activated Transparent All-Graphene Gas Sensor with Endurance to Humidity and Mechanical Bending. *ACS Nano* 2015, 9, 10453–10460.
5. Kim, Y. H.; Park, J. S.; Choi, Y.-R.; Park, S. Y.; Lee, S. Y.; Sohn, W.; Shim, Y.-S.; Lee, J.-H.; Park, C. R.; Choi, Y. S.; Hong, B. H.; Lee, J. H.; Lee, W. H.; Lee, D.; Jang, H. W. Chemically fluorinated graphene oxide for room temperature ammonia detection at ppb levels. *J. Mater. Chem. A* 2017, 5, 19116–19125.
6. Mas-Balleste, R.; Gomez-Navarro, C.; Gomez-Herrero, J.; Zamora, F. 2D materials: to graphene and beyond. *Nanoscale* 2011, 3, 20–30.