

**КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ
ПОВЕРХНОСТНЫХ ЭФФЕКТОВ ГИБРИДНЫХ СИСТЕМ
Te@УНТ ДЛЯ СЕНСОРНЫХ ПРИЛОЖЕНИЙ**

Петрова С.С.⁽¹⁾, Эварестов Р.А.⁽²⁾, Квашинин Д.Г.⁽¹⁾

⁽¹⁾ Институт биохимической физики РАН

119334, г. Москва, ул. Косыгина, д. 4

⁽²⁾ Санкт-Петербургский государственный университет

199034, г. Санкт-Петербург, Университетская наб., д. 7–9

Углеродные нанотрубки (УНТ) продолжают быть актуальным и востребованным материалом, благодаря своим уникальным физико-химическим свойствам и возможностью управлять ими, изменяя атомную структуру или внедряя другие материалы в полое пространство нанотрубок, что позволяет использовать УНТ для широкого спектра приложений: создание гибких электронных устройств, адресной доставки лекарств, создания композитных материалов, а также в качестве основы для создания высокочувствительных газовых сенсоров.

Недавние исследования в области заполненных УНТ показали интерес к классу кристаллов, имеющих стержневую геометрию, таких как сера и селен, кристаллы которых при помещении в УНТ могут иметь спиральную структуру. В данной работе рассматривается схожий по своему стержневому строению Te, для которого исследования в области сенсорики только начали проводиться [1]. В работе представлены первые шаги в исследовании особенностей физико-химических на границе раздела между УНТ и стержневой структурой Te. В ходе работы были проведены моделирование и оценка стабильности структур, состоящих из одностенных углеродных нанотрубок разных диаметров (8 - 11 Å) и хиральностей с размещенными внутри стержнями теллура. Предлагается, что наличие стержневой структуры приведёт к изменению химической активности поверхности УНТ, что увеличит чувствительность к опасным летучим соединениям. Расчеты проводились с использованием метода DFT в программном комплексе SIESTA. На основе анализа зонных структур была проведена оценка влияния стержней Te на электронную структуру УНТ. Результаты показали изменение плотности электронного состояния, при включении стержней Te внутрь одностенных УНТ. В полупроводниковых УНТ при включении стержней теллура наблюдалось уменьшение ширины запрещённой зоны. Полученные результаты демонстрируют потенциал гибридных структур Te@УНТ в качестве чувствительных элементов сенсорных устройств, где изменение электронной структуры под воздействием внедряемого компонента может повлиять на поверхностную активность материала и улучшить адсорбцию газов.

1. Porsev V., Vandura A.V., Evarestov R.A. Line group approach for quantum chemical study of intrinsic helical twist of ultrathin tellurium nanorods // CrystEng Com. 2024. Vol. 26. P. 3410.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФ (грант № 25-73-10250, <https://rscf.ru/project/25-73-10250/>)