

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ
Н.Г.ЧЕРНЫШЕВСКОГО»

Кафедра радиотехники и электродинамики
наименование кафедры

**Исследование углеродных нанотрубок в качестве сенсоров спиртов и
кетонов**

АВТОРЕФЕРАТ БАКАЛАВРСКОЙ РАБОТЫ

Студента	4	курса	4033	группы
направления 03.03.03 «Радиофизика»				
код и наименование направления				
института физики				
наименование факультета				
Чернышова Александра Дмитриевича				
фамилия, имя, отчество				

Научный руководитель

Старший преподаватель

должность, уч. ст., уч. зв.

Петр 02.06.2026

личная подпись, дата

А.А. Петрунин

инициалы, фамилия

Зав. кафедрой

д.ф.-м.н., профессор

уч. ст., уч. зв.

О.Е. Глухова 02.06.26

личная подпись, дата

О.Е. Глухова

инициалы, фамилия

Саратов 2026 г.

Введение. Углеродные нанотрубки обладают уникальными физико-химическими свойствами, такими как высокая чувствительность, селективность, большая поверхность и быстрый отклик. Благодаря этим характеристикам, УНТ приобрели широкий потенциал в области сенсорики. Исследование их возможностей в качестве элементов сенсорных устройств для выявления кетонов и спиртов является важным направлением, способным привести к созданию новых, более эффективных и миниатюрных сенсоров.

Актуальность данного исследования обусловлена необходимостью разработки перспективных методов быстрого анализа, которые бы смогли заменить или дополнить существующие технологии. В этом контексте углеродные нанотрубки представляют собой инновационный материал, способный кардинально повысить качество и эффективность сенсорных систем.

Современная радиофизика всё чаще выходит за рамки классического описания макроскопических систем, вторгаясь в область нанометровых структур, где электродинамические свойства среды определяются квантовыми размерами и топологией материала. Углеродные нанотрубки (УНТ) представляют собой яркий пример одномерного проводника, чья комплексная проводимость на постоянном и переменном токе критически зависит от адсорбции полярных молекул. С точки зрения радиофизики, взаимодействие паров кетонов и спиртов с поверхностью УНТ вызывает перераспределение зарядовой плотности, что может быть зарегистрировано как изменение сопротивления наноструктуры.

Кетоны и спирты являются важнейшими маркерами в экологическом мониторинге (выбросы промышленных предприятий), медицинской диагностике (ацетон при диабете, этанол в выдыхаемом воздухе) и безопасности труда (ПДК в воздухе рабочей зоны).

Целью данной работы является исследование одностенных углеродных нанотрубок (ОУНТ) в качестве сенсоров кетонов и спиртов при помощи компьютерного моделирования.

Для достижения поставленной цели решаются следующие задачи:

1. Построить атомистические модели углеродных нанотрубок с индексами хиральности (8,0) – (16,0)
2. Провести моделирование процесса адсорбции аналитов на поверхность ОУНТ.
3. Рассчитать проводимости, рассчитать плотность электронных состояний, построить зонные структуры.
4. Рассчитать хеморезистивный отклик.

Основное содержание работы. Все расчеты, проводимые в рамках данного исследования, выполнялись с помощью квантового метода функционала плотности в приближении сильной связи с самосогласованным вычислением заряда (SCC DFTB) в программном пакете открытого доступа DFTB+ [2]. Метод SCC DFTB (SCC - самосогласование по заряду) является оптимальным решением при работе с многоатомными суперъядерками, поскольку, с одной стороны, обладает удовлетворительной точностью расчетов, подтвержденной хорошей корреляцией получаемых результатов с результатами DFT-расчетов, в том числе для углеродных соединений, а с другой стороны, характеризуется меньшими вычислительными затратами и более высокой скоростью расчетов.

DFTB+ — это гибкий программный пакет с открытым исходным кодом, разработанный его сообществом и предназначенный для быстрых и эффективных атомистических квантово-механических симуляций. Он использует различные методы, аппроксимирующие теорию функционала плотности (DFT), такие как метод сильной связи на основе функционала плотности (DFTB) и расширенный метод сильной связи (xTB), позволяющие моделировать большие системы в течение длительных временных масштабов с разумной точностью, при этом значительно превосходя традиционные

методы. В последние годы в программный пакет DFTB+ были разработаны и реализованы несколько новых расширений метода DFTB с целью повышения точности и общности доступных результатов моделирования.

В работе рассматриваются структуры ОУНТ с индексами хиральности от (8,0) до (16,0) с адсорбированными на их поверхности различными аналитами.

На рисунке 1 показана атомистическая модель ОУНТ (16,0) оптимизированная с помощью метода DFTB.

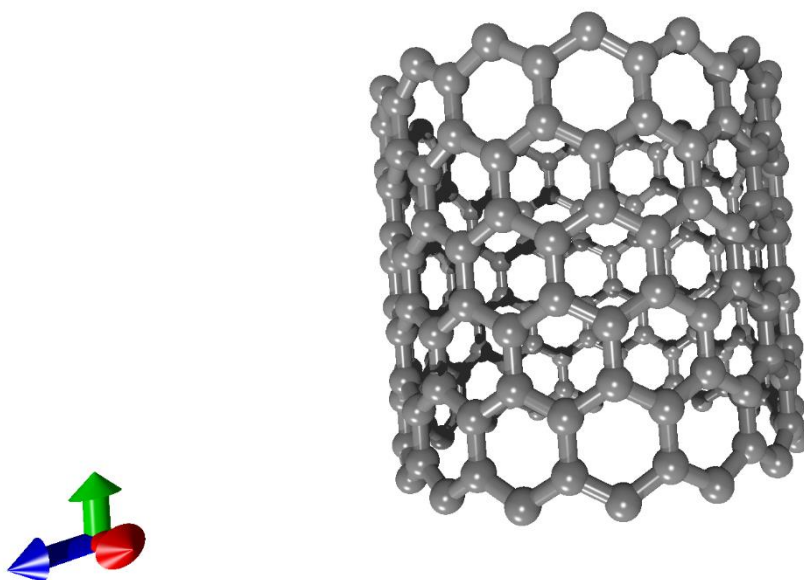


Рисунок 1. Оптимизированная с помощью метода DFTB ОУНТ (16,0).

На таблице 1 показаны аналиты участвующие в процессе адсорбции.

№	Наименование аналита
1	2-octanone
2	acetone
3	butanol
4	cyclohexanone
5	cyclopentanone
6	ethanol
7	isopropanol

8	methanole
---	-----------

Таблица 1. Аналиты участвующие в процессе адсорбции.

На рисунке 2 показаны атомистическая модель ОУНТ (16,0) + Аналит оптимизированные с помощью метода DFTB.

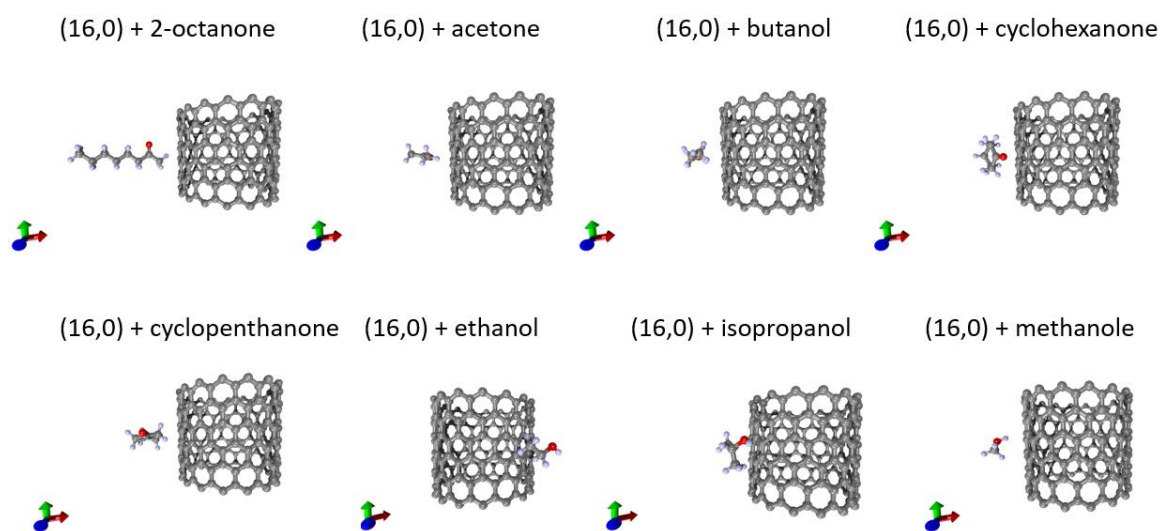


Рисунок 2. Оптимизированная с помощью метода DFTB структуры (16,0) + Аналит.

Для полученных структур были проведены расчеты энергии связи и построены столбчатые диаграммы уровней Ферми.

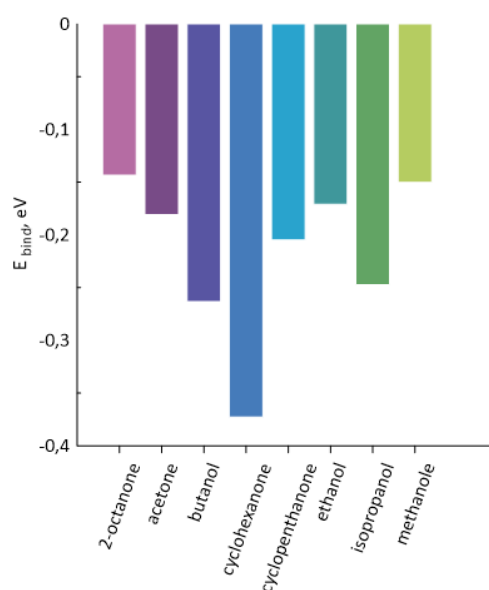


Рисунок 3. Энергии связи для структур (16,0) + Аналит

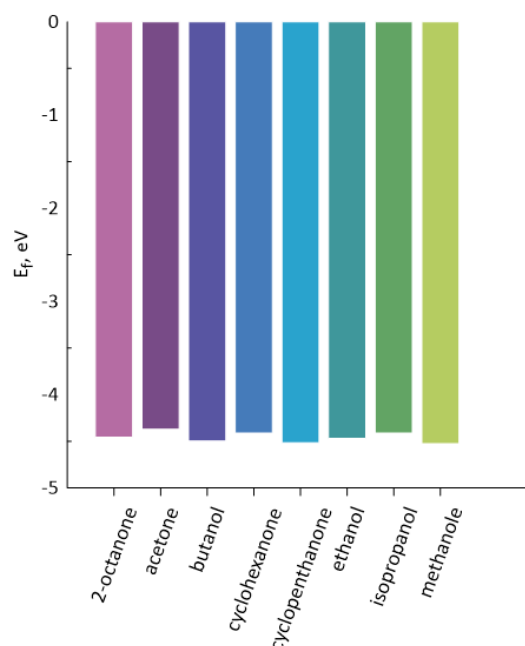


Рисунок 4. Уровни Ферми для структур (16,0) + Аналит

Для полученных структур были рассчитаны электропроводности, а затем были рассчитаны хеморезистивные отклики для каждой из исследуемых структур.

В таблице 2 приведены значения сопротивлений для ОУНТ с индексами хиральности (8,0) - (16,0).

n,m	D, Å	R, MOhm
8,0	6,26	431271,596
9,0	7,05	0,029
10,0	7,83	12659,499
11,0	8,61	33178,011
12,0	9,39	0,008
13,0	10,18	954,727
14,0	10,96	1384,439
15,0	11,74	0,007
16,0	12,53	107,522

Таблица 2. Сопротивление ОУНТ с индексами хиральности (8,0) - (16,0).

Далее в работе были построены зонные структуры каждой из исследуемых структур в интервале энергии ($E_F - 3\text{eV}$; $E_F + 3\text{eV}$). На рисунке 5 показаны зонные структуры структур (16,0) + Аналит.

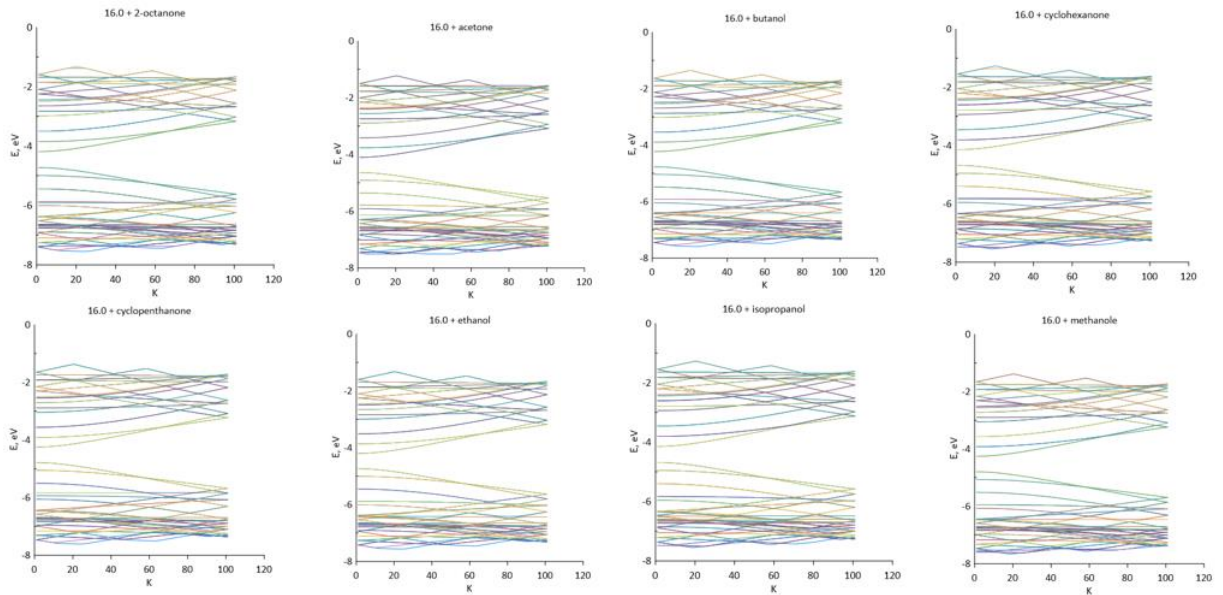


Рисунок 5. Зонные структуры для (16,0) + Аналит.

После построения зонных структур были построены распределения плотности электронных состояний DOS (density of states) для каждой из ранее полученных структур в интервале энергии ($E_F - 3\text{eV}$; $E_F + 3\text{eV}$). На рисунке 6 представлены распределения плотности электронных состояний для структур (16,0) + Аналит.

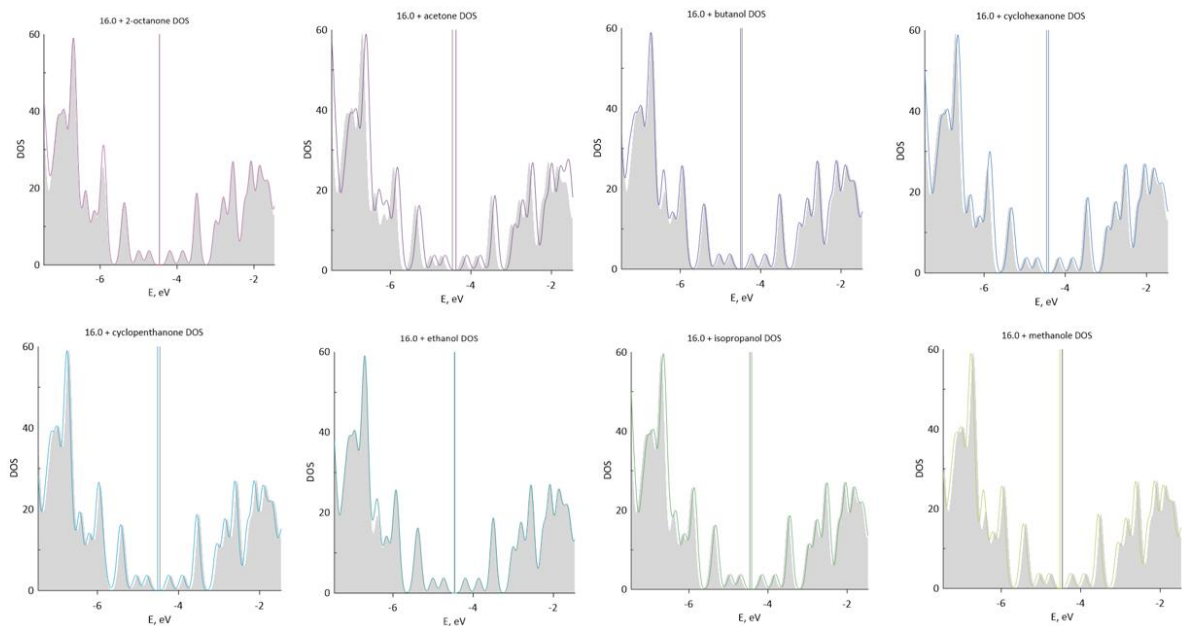


Рисунок 6. Распределения DOS структур (16,0) + Аналит.

Заключение. Таким образом, в данной работе были исследованы углеродные нанотрубки в качестве сенсоров кетонов и спиртов при помощи компьютерного моделирования в рамках метода DFTB. Углеродные нанотрубки оказались очень эффективными в области сенсорики из-за высокой чувствительности.

В ходе выполнения дипломной работы были получены следующие результаты:

1. Построены атомистические модели углеродных нанотрубок с индексами хиральности (8,0) – (16,0).
2. Проведено моделирование процесса адсорбции аналитов на поверхность ОУНТ.
3. Рассчитаны проводимости, плотности электронных состояний, построены зонные структуры.
4. Рассчитаны хеморезистивные отклики.

Список использованной литературы

1. Glukhova, O.E.; Shmygin, D.S. The electrical conductivity of CNT/graphene composites: A new method for accelerating transmission function calculations. Beilstein. J. Nanotechnol. 2018, 9, 1254–1262.
2. Hourahine B., Aradi B., Blum V., Bonafé F., Buccheri A., Camacho C., Cevallos C., Deshaye M. Y., Dumitrică T., Dominguez A., Ehlert S., Elstner M., van der Heide T., Hermann J., Irle S., Kranz J. J., Köhler C., Kowalczyk T., Kubař T., Lee I. S., Lutsker V., Maurer R. J., Min S. K., Mitchell I., Negre C., Niehaus T. A., Niklasson A. M. N., Page A. J., Pecchia A., Penazzi G., Persson M. P., Řezáč J., Sánchez C. G., Sternberg M., Stöhr M., Stuckenberg F., Tkatchenko A., Yu V. W.-z., Frauenheim T. DFTB+, a software package for efficient approximate density functional theory based atomistic simulations. J. Chem. Phys., 2020, vol. 152, article no. 124101.

3. E. Caldeweyher, S. Ehlert, A. Hansen, H. Neugebauer, S. Spicher, C. Bannwarth, and S. Grimme, *J. Chem. Phys.* 150, 154122 (2019).
4. Recent Developments in DFTB+, a Software Package for Efficient Atomistic Quantum Mechanical Simulations B. Hourahine, M. Berdakin, J. A. Bich, F. P. Bonafé, C. Camacho, Q. Cui, M. Y. Deshayé, G. Díaz Mirón, S. Ehlert, M. Elstner, T. Frauenheim, N. Goldman, R. A. González León, T. van der Heide, S. Irle, T. Kowalczyk, T. Kubař, I. S. Lee, C. R. Lien-Medrano, A. Maryewski, T. Melson, S. K. Min, T. Niehaus, A. M. N. Niklasson, A. Pecchia, K. Reuter, C. G. Sánchez, C. Scheurer, M. A. Sentef, P. V. Stishenko, V. Q. Vuong, and B. Aradi *The Journal of Physical Chemistry A* **2025** 129 (24), 5373-5390
5. Барков П. В., Слепченков М. М., Глухова О. Е. Влияние функциональных групп на электронно-энергетические характеристики тонких пленок дырчатого графена: результаты DFTB-моделирования // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2024. Т. 24, вып. 2. С. 114–125.
6. Frank Eckert, Peter Pulay, and Hans-Joachim Werner. Ab initio geometry optimization for large molecules. *Journal of Computational Chemistry*, 18(12):1473–1483, sep 1997.
7. C. G. Broyden. The Convergence of a Class of Double-rank Minimization Algorithms 1. General Considerations. *IMA Journal of Applied Mathematics*, 6(1):76–90, 1970.
8. H. J. Monkhorst and J. D. Pack. Special points for Brillouin-zone integrations. *Phys. Rev. B*, 13:5188, 1976.
9. Datta, S. *Quantum Transport: Atom to Transistor*; Cambridge University Press: New York, NY, U.S.A., 2005.
10. Elstner, M.; Seifert, G. *Philos. Trans. R. Soc., A* 2014, 372, 20120483.

11. Elstner, M.; Porezag, D.; Jungnickel, G.; Elsner, J.; Haugk, M.; Frauenheim, T.; Suhai, S.; Seifert, G. *Phys. Rev. B* 1998, 58, 7260–7268.
12. Pecchia, A.; Penazzi, G.; Salvucci, L.; DiCarlo, A. *New J. Phys.* 2008, 10, 065022.
13. M. Gaus, Q. Cui, and M. Elstner. DFTB3: Extension of the Self-Consistent-Charge Density Functional Tight-Binding Method (SCC-DFTB). *J. Chem. Theory Comput.*, 7:931–948, 2011.
14. Eike Caldeweyher, Christoph Bannwarth, and Stefan Grimme. Extension of the D3 dispersion coefficient model. *J. Chem. Phys.*, 147(3):034112, 2017
15. Eike Caldeweyher, Sebastian Ehlert, Andreas Hansen, Hagen Neugebauer, Sebastian Spicher, Christoph Bannwarth, and Stefan Grimme. A generally applicable atomic-charge dependent London dispersion correction. *J. Chem. Phys.*, 150(15):154122, 2019.
16. S. Grimme, S. Ehrlich, and L. Goerigk. Effect of the damping function in dispersion corrected density functional theory. *J. Chem. Phys.*, 32:1456–1465, 2011.
17. E. Caldeweyher, S. Ehlert, A. Hansen, H. Neugebauer, S. Spicher, C. Bannwarth, and S. Grimme, *J. Chem. Phys.* 150, 154122 (2019)
18. M. Bursch, E. Caldeweyher, A. Hansen, H. Neugebauer, S. Ehlert, and S. Grimme, *Acc. Chem. Res.* 52, 258 (2019).
19. E. Caldeweyher, J.-M. Mewes, S. Ehlert, and S. Grimme, *Phys. Chem. Chem. Phys.*
20. J. G. Brandenburg, C. Bannwarth, A. Hansen, and S. Grimme, *J. Chem. Phys.* 148, 064104 (2018).