

Хеморезистивные газовые сенсоры на основе лазерно-индуцированного графена: моделирование и эксперимент

Павлов С.В.¹, Шилов М.С.¹, Чекушкин П.М.¹

sergey.v.pavlov@phystech.edu

¹ ОИВТ РАН, Москва, Россия

Разработка новых функциональных материалов для хеморезистивных газоанализаторов является одной из приоритетных задач современной сенсорики. Успех в этой области открывает пути к дальнейшей миниатюризации устройств, сокращению их энергетических затрат при одновременном улучшении таких ключевых характеристик, как чувствительность и селективность к газам. В данном контексте графен уверенно позиционируется в качестве одной из наиболее многообещающих основ для конструирования газочувствительных покрытий. Особого внимания заслуживает метод прямого лазерного формирования пористого графена (известный как лазерно-индуцированный графен, ЛИГ) [1]. Технология базируется на одноэтапном процессе лазерного пиролиза доступной полиимидной пленки. Её ключевые преимущества — высокая скорость, возможность масштабирования и отсутствие необходимости в трудоемких операциях переноса материала, поскольку требуемая графеновая структура создается непосредственно на гибкой диэлектрической подложке, что критически важно для встраивания в компактные сенсорные системы.

Данная работа посвящена изучению того, как варьирование режимов синтеза ЛИГ — а именно изменение мощности и скорости перемещения луча непрерывного ИК-лазера — сказывается на итоговых характеристиках получаемого углеродного материала. Основная задача — выявить и описать взаимосвязь между параметрами изготовления, особенностями химического состава, структурой поверхности (морфологией) пористого углерода и его итоговым хеморезистивным откликом. В дополнение к экспериментальной части проводится компьютерное моделирование локального пиролиза полиимида, реализованное с использованием метода молекулярной динамики в сочетании с реакционным силовым полем ReaxFF [2].

Чтобы глубже разобраться в природе изменения сенсорных свойств, был выполнен теоретический анализ факторов, влияющих на газовую чувствительность графена, с применением расчетов в рамках теории функционала плотности (DFT). В фокусе внимания — оценка влияния поверхностных функциональных групп [3], а также изучение того, как взаимодействие с металлическими подложками модифицирует адсорбционные характеристики и электронную структуру графеновой плоскости. Полученные данные необходимы для разработки научно обоснованных подходов к созданию высокочувствительных материалов для сенсоров нового поколения.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-73-00285, <https://rscf.ru/project/25-73-00285/>

Ссылки

- 1) Lin, J., Peng, Z., Liu, Y., Ruiz-Zepeda, F., Ye, R., Samuel, E.L., Yacaman, M.J., Yakobson, B.I. and Tour, J.M. *Nature communications* (2014), 5(1), 5714
- 2) Pavlov S.V. *Molecules* (2025), 30(22), 4344
- 3) Kozhevnikova E.O., Pavlov S.V., Kislenko V.A., Kislenko S.A. *Materials Chemistry and Physics* (2024), 322, 129488.