

YARIMKEÇİRİCİ NANOHISSƏCİYİN SƏTHİNDƏ QAZ MOLEKULLARININ ADSORBSİYASI

R.R. HÜSEYNOV, R.Ə. ƏLİZADƏ, V.S. TAĞIYEV, N.B. MUSTAFAYEV

Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyasının Fizika İnstitutu,

Azərbaycan, AZ 1143, Bakı şəhəri, H. Cavid pr. 131

e-mail: alizade_r2@mail.ru

Diffuziya tənliyinin həllindən yarımkeçirici nanohissəciyin səthində adsorbsiya olunmuş qazın konsentrasiyası hesablanıb. Nanohissəciyin səthində qaz molekullarının sayının nanohissəciyin və qaz molekulunun ölçülərindən asılılıqları qurulub. Nanohissəciyin səthində yığılan qaz kütləsinin zamandan asılılığı hesablanıb. Yarımkeçirici ZnO və Co₃O₄ nanohissəciklərinin səthində adsorbsiya layının qalınlığı ilə əmələgəlmə sürəti müqayisə edilir. Səthində qaz kütləsinin yığılma sürəti daha yüksək olduğundan, ZnO nanohissəciyi ətrafdakı qazları daha tez adsorbsiya edir və buna görə də qaz detektoru düzəldilməsi üçün daha perspektivli görünür.

Açar sözlər: yarımkeçirici nanohissəciklər, qaz adsorbsiyası, adsorbsiya layının qalınlığı, qaz kütləsinin səthdə akkumulyasiyası.

UOT:537.222.22; 543.51; 54-183.544.723

1. GİRİŞ

Yarımkeçirici nanohissəciklərdən hal-hazırda qaz detektorları yaratmaq üçün geniş istifadə edilir [1,2]. Ətraf mühit qazlarının bu sistemlər vasitəsilə detektətmə metodu qaz adsorbsiyası zamanı sistemin elektrik keçiriciliyinin özünəməxsus bir şəkildə dəyişməsinə əsaslanır, bu da adsorbsiya olunan qaz molekullarının sayından, nanohissəciklərin ölçüsü ilə konsentrasiyasından, yarımkeçirici materialın növündən və digər amillərdən asılıdır. Yarımkeçirici nanohissəciklər əsasında hazırlanan qaz detektorları çox həssasdır və onların istehsalı iqtisadi cəhətdən sərfəlidir.

Bu məqalədə nanohissəciklərin səthində qaz molekullarının adsorbsiya prosesi diffuziya tənliyindən istifadə etməklə tədqiq edilmişdir. Adsorbsiya olunmuş qaz təbəqəsinin qalınlığı və yaranma sürəti üçün zamandan, ətraf mühitdəki qazın konsentrasiyasından, qazın molekulyar kütləsindən, nanohissəciklərin konsentrasiyası ilə ölçülərindən asılılıqlar hesablanmışdır. Məsələn ədədi həll edildiyindən, məqalədə yalnız əsas tənliklərin ifadələri verilmişdir.

2. MƏSƏLƏNİN ƏSAS TƏNLİKLƏRİ

Yarımkeçirici nanohissəciyin səthində qazın adsorbsiyası prosesinə səthdə qaz konsentrasiyasının dəyişməsi kimi baxmaq olar. Hesab edək ki, səthə adsorbsiya olunan qazın konsentrasiyası dəyişdikdə ətraf mühitdə qaz konsentrasiyası dəyişmir, nanohissəcikdən qaz molekullarının desorbsiyası və qaz molekulları ilə nanohissəcik arasında kimyəvi reaksiya mövcud deyil. Adsorbsiya olunan qaz konsentrasiyasının zamandan asılı olaraq dəyişməsinə

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D\nabla^2 n - Kn \quad (1)$$

diffuziya tənliyi vasitəsilə təsvir edək. Burada n – adsorbsiya olunan qazın konsentrasiyası, D və K isə müvafiq olaraq qazın diffuziya və kimyəvi reaksiya

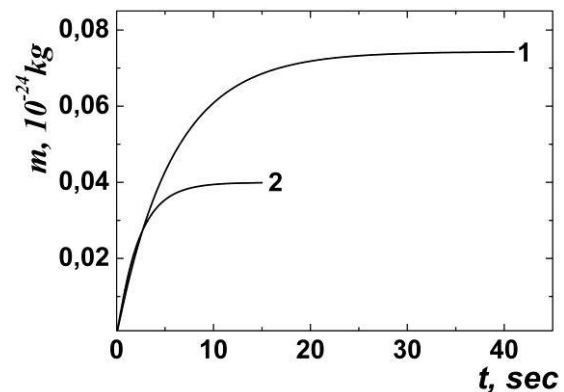
sabitləridir. Onların qiymətləri [3]-də verilib. Hesab etsək ki, sistem simmetrikdir, adsorbsiya bütün istiqamətlərdə eynidir, onda (1) tənliyini sferik koordinat sistemində həll edə bilərik.

Adsorbsiya nəticəsində nanohissəcikdə yığılan qazın miqdarı aşağıdakı münasibətdən təyin oluna bilər:

$$\frac{1}{V} \frac{dm}{dt} = Kn \quad (2)$$

Burada $m = \rho V$ – yığılan qazın kütləsi, ρ – qazın sıxlığı, $V \approx 4\pi R_0^2 d$ – nanohissəciyin səthində yığılan qaz layının həcmi, R_0 – nanohissəciyin radiusu, d isə qaz layının qalınlığıdır.

Şəkil 1-də ölçüsü 20 nm olan ZnO və Co₃O₄ yarımkeçirici nanohissəciyin səthində yığılan qaz kütləsinin zamandan asılılığı göstərilib. Bu asılılıq (1) və (2) tənliklərinin ədədi həlli nəticəsində qurulmuşdur. Şəkil 1-dən görüldüyü kimi, müəyyən bir müddətdən sonra qaz kütləsinin akkumulyasiyası dayanır və o öz maksimum qiymətinə çatır.

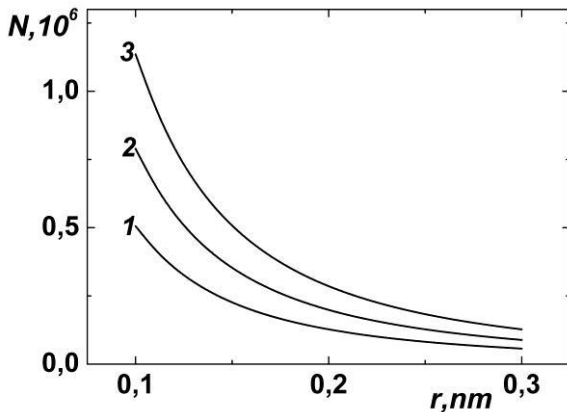


Şəkil 1. Ölçüsü 20 nm olan ZnO (əyri 1) və Co₃O₄ (əyri 2) yarımkeçirici nanohissəciklərin səthində yığılan qaz kütləsinin zamandan asılılığı.

Adsorbsiya nəticəsində nanohissəciyin səthində yığılan qaz layının kütləsi həm də $m = m_0 N$ kimi təyin

edilə bilər (burada m_0 – qaz molekulunun kütləsi, N isə nanohissəciyin səthində olan qaz molekullarının sayıdır). Şəkil 2-də radiusu 40 nm (əyri 1), 50 nm (əyri 2) və 60 nm (əyri 3) olan nanohissəciyin səthində qaz molekullarının sayının qaz molekulunun radiusundan hesablanmış asılılığı göstərilib. Qaz molekullarının ölçüləri [4]-də verilib.

Baxdığımız halda qaz molekulları nanohissəciyin bütün səthini doldurur. Lakin, əslində, nanohissəciyin səthi qaz molekulları ilə qismən dolur. Səthin doldurma əmsalı (θ) qaz molekulları arasında və qaz molekulu ilə nanohissəcik arasında qarşılıqlı təsir enerjisindən asılıdır. Qaz molekulları arasında qarşılıqlı təsir enerjisi mühitin temperaturu, təzyiği və qaz molekullarının xassələrindən asılıdır. Qaz molekulu ilə nanohissəcik arasında qarşılıqlı təsir enerjisi, nanohissəciyin ölçüsündən, elektrik dipol momentindən, qaz molekulu ilə nanohissəcik arasındakı qarşılıqlı təsir potensialının növündən və s. asılıdır.



Şəkil 2. Radiusu 40 nm (əyri 1), 50 nm (əyri 2) və 60nm (əyri 3) olan nanohissəciyin səthində qaz molekullarının N sayının qaz molekulunun r radiusundan asılılığı.

3. NƏTİCƏLƏRİN MÜZAKİRƏSİ

Nanohissəciyin səthində adsorbsiya olunmuş qaz molekullarının sayı onların səthdə qablaşma növündən asılıdır. Nəzəri düsturlar adsorbsiya olunmuş qaz molekullarının sayını və yığılmış qaz kütləsini təyin etməyə imkan verir. Nanohissəciyin səthində yığılan qaz kütlənin hesablanmış və təcrübədən əldə edilmiş qiymətlərinin müqayisəsindən səthdə qaz molekullarının qablaşma növünü təyin etmək mümkündür.

Adsorbsiya layının yaranma mexanizmi ətraf mühitdəki qaz molekullarının nanohissəciyə diffuziya-

sıdır. Qaz adsorbsiyası, yarımkeçirici nanohissəciyin səthində qaz konsentrasiyası nanohissəciklə mühit arasındakı tarazlıq qiymətinə çatana qədər baş verir. Adsorbsiya layı bir neçə mərhələdə əmələ gəlir. Adsorbsiyanın birinci mərhələsində qaz molekulları nanohissəciyin səthini qismən doldurur və birinci təbəqə əmələ gəlir. İkinci mərhələdə qaz molekullarının birinci təbəqədəki molekulunun üstünə çökməsi nəticəsində ikinci təbəqə əmələ gəlir. Üçüncü mərhələdə birinci təbəqənin dolması davam edir və birinci təbəqə maksimum qədər dolur (doldurma əmsalı $\theta_1=1$). Dördüncü mərhələdə qaz molekulları birinci təbəqədə molekulların yaratdığı boşluqlarda yerləşir.

Adsorbsiya layı, əsasən, sıx qablaşma quruluşuna malikdir. Təbəqə sayının müəyyən bir qiymətindən başlayaraq adsorbsiya layında qaz molekullarının qablaşması nizamsız olur. Sadə hesablamalara görə birinci, ikinci, üçüncü və sonrakı təbəqələr üçün doldurma əmsalının qiymətləri fərqlənə bilər: $\theta_1 > \theta_2 > \theta_3 > \dots > \theta_n$. Bu, təbəqə sayının müəyyən bir qiymətindən sonra nizamsız bir quruluşun meydana gəlməsini izah edir.

Adsorbsiya təbəqələrinin sayı nanohissəciyin ölçüsü ilə artır. Adsorbsiya təbəqələrinin sayı artdıqca qaz detektorunun işləmə effektivliyi azalır. Bundan əlavə, adsorbsiya layının qalınlığı yarımkeçirici nanohissəciyin növündən asılıdır. Məsələn, sink oksid (ZnO) n -tip, kobalt oksid (Co_3O_4) isə p -tip yarımkeçiricidir. ZnO ilə müqayisədə, Co_3O_4 nanohissəciyin səthində adsorbsiya olunmuş qaz layının qalınlığı daha az olur. Bu baxımdan, Co_3O_4 nanohissəcikləri əsasında qaz detektorlarının düzəldilməsi daha məqsədəuyğun görünür. Lakin Co_3O_4 ilə müqayisədə, ZnO nanohissəciyin səthində qaz kütləsinin yığılma sürəti daha yüksəkdir. Bu o deməkdir ki, ZnO nanohissəcikləri ətrafdakı qazları daha tez adsorbsiya, yəni detektə edə bilərlər. Onlar CO, H_2 , NH_3 , $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ və H_2S kimi toksik və tezalısan qazların aşkarlanması üçün çox perspektivli görünür. Ona görə də, effektiv və hassas qaz detektorları düzəltməkdən ötrü, adsorbsiya layının optimal qalınlığını və yarımkeçirici nanohissəciklərin səthində adsorbsiya layının əmələgəlmə sürətinin maksimum qiymətini təyin etmək lazımdır.

Nanohissəciklərin səthində adsorbsiya olunmuş qaz layının qalınlığı ilə əmələgəlmə sürəti, onların ətraf mühitdəki qazın konsentrasiyası və temperaturundan, habelə adsorbentin ölçüsündən asılılığı yarımkeçirici nanohissəciklər əsasında qaz detektorlarının yaradılması baxımından böyük maraq kəsb edir.

[1] *M.H.Румянцева, В.В.Коваленко, А.М.Гаськов, Т.Панье.* Рос. хим. ж. (Ж. Рос. хим. об-ва им. Д.И. Менделеева), 2007, т. LI, №. 6, с.61-70.
 [2] *L.I. Trakhtenberg, G.N. Gerasimov, V.F.Gromov, T.V.Belysheva, O.J. Ilegbusi.*

Journal of Materials Science Research, 2012, v.1, N. 2, pp.56-68.

[3] *Курс физической химии. т. 2. Под ред. Я.И.Герасимова, М.: Химия, 1973, 624 с.*
 [4] *В.М. Рамм. Адсорбция газов. М.: Химия, 1976, 656 с.*

R.R. Guseinov, R.A. Alizade, V.S. Tagiyev, N.B. Mustafayev

**ADSORPTION OF GAS MOLECULES ON THE SURFACE OF SEMICONDUCTOR
NANOPARTICLE**

From the solution of diffusion equation, the concentration of the gas adsorbed on the semiconductor nanoparticle surface has been calculated. Dependences of the number of adsorbed gas molecules on sizes of the nanoparticle and gas molecule are given. The time dependence of the gas mass accumulated on the nanoparticle surface has been calculated. The thickness and the rate of formation of adsorption layer on the surface of ZnO and Co₃O₄ semiconductor nanoparticles are compared. Since the rate of accumulation of the gas mass on the ZnO nanoparticle surface is higher, it adsorbs ambient gases faster, and therefore is more promising as a gas-sensing material.

Р.Р. Гусейнов, Р.А. Ализаде, В.С. Тагиев, Н.Б. Мустафаев

**АДСОРБЦИЯ МОЛЕКУЛ ГАЗА НА ПОВЕРХНОСТЬ ПОЛУПРОВОДНИКОВОЙ
НАНОЧАСТИЦЫ**

На основе решения уравнения диффузии была рассчитана концентрация газа, адсорбированного на поверхность полупроводниковой наночастицы. Построена зависимость количества молекул газа на поверхности наночастицы от размеров наночастицы и молекулы газа. Рассчитана временная зависимость массы газа, аккумулированной на поверхности наночастицы. Сравниваются толщины и скорость образования адсорбционного слоя на поверхности полупроводниковых наночастиц ZnO и Co₃O₄. Поскольку скорость накопления массы газа на поверхности наночастицы ZnO выше, она быстрее адсорбирует окружающие газы, и поэтому является более перспективным материалом для создания газовых детекторов.

Qəbul olunma tarixi: 07.07.2021