**Первопринципный подход к исследованию реакции водорода с предварительно адсорбированным поверхностью (011) оксида индия кислородом.**

***Полунин К.С., Курмангалеев К.С.***

*Аспирант, 2 год обучения*

*Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова РАН, Москва*

*E-mail: kpolunin62@gmail.com*

В последнее время большое внимание уделяется мониторингу содержания газов в атмосфере как огне- и/или взрывоопасных, так и токсичных, наносящих серьёзный ущерб здоровью человека и окружающей среде (например, водород, угарный газ, формальдегид, сероводород и др.). Одним из самых широкоиспользуемых способов их обнаружения в среде является применение полупроводниковых газовых сенсоров, демонстрирующих высокую селективность и чувствительность, а также быстрый отклик. Для создания детектирующих устройств с наибольшей эффективностью необходимо изучить механизмы происходящих явлений.

Исследование сенсорных свойств можно осуществлять как экспериментальными методами, так и с помощью расчётов из первых принципов. Моделирование в рамках теории функционала плотности позволяет определить устойчивые конфигурации системы, рассчитать их энергию и построить оптимальные пути переходов из одного состояния в другое. Дополнительно становится возможным получить распределение электронов в системе и увидеть изменения, которые оно претерпевает в ходе процесса.

Представленные результаты содержат данные о сенсорном эффекте, наблюдаемом при взаимодействии водорода с оксидом индия – одним из самых используемых полупроводниковых газовых детекторов. Процесс разделяется на две основные стадии: залечивание характерного дефекта – нейтральной кислородной вакансии – и непосредственное взаимодействие газа с поверхностью In2O3 (011) с преадсорбированным кислородом. Для первого обозначенного этапа определена наиболее устойчивая конечная конфигурация системы, и показано наличие избыточной электронной плотности на адатомах. Для реакции водорода с поверхностью детектора рассматриваются несколько возможных вариантов её протекания с образованием воды в диссоциированной и ассоциированной формах, с помощью квантово-химических методов рассчитана энергетика соответствующих процессов (значения энергетических барьеров реакции, а также изменения общей энергии системы) и определён наиболее предпочтительный реакционный путь[1].

**Литература**

1. K.S. Kurmangaleev, T.Yu. Mikhailova, K.S. Polunin, O.J. Ilegbusi, L.I. Trakhtenberg, DFT modeling of reaction of H2 with O2 pre-adsorbed on In2O3(011) surface // Chemical Physics Letters. - 2024. - V. 856, 141649 - doi:[10.1016/j.cplett.2024.141649](https://doi.org/10.1016/j.cplett.2024.141649).