

06

Функционализация коротких кластеров из углеродных нанотрубок (6,0) атомами меди и никеля: теоретическое исследование

© Н.П. Борознина,¹ Д.Ф. Сергеев,^{1,2} С.В. Борознин,¹ И.В. Запороцкова¹

¹Волгоградский государственный университет,
400062 Волгоград, Россия

²Всероссийский научно-исследовательский и конструкторско-технологический институт оборудования нефтеперерабатывающей и нефтехимической промышленности,
400078 Волгоград, Россия
e-mail: boroznina.natalya@volsu.ru

Поступило в Редакцию 1 ноября 2025 г.

В окончательной редакции 1 ноября 2025 г.

Принято к публикации 1 ноября 2025 г.

Представлены результаты теоретических исследований влияния функционализации поверхности чистых углеродных нанотрубок типа (6,0) атомами меди и никеля на их проводящие свойства. Для проведения анализа использован метод теории функционала плотности в рамках функционала B3LYP с применением базиса 6-31G. Выполненные расчеты позволили определить оптимальные положения атомов меди и никеля на поверхности углеродной нанотрубки. Ими оказались расположения атомов металлов над центром гексагона нанотрубки. Проведено компьютерное моделирование регулярной адсорбции атомов выбранных металлов на поверхности нанотрубки. Анализ электронно-энергетического состояния получившихся наносистем дал возможность определить значения ширины запрещенной энергетической зоны. При такого рода регулярной адсорбции наблюдается уменьшение ширины запрещенной зоны, что говорит об улучшении проводящих свойств полученных систем относительно „чистой“ углеродной нанотрубки.

Ключевые слова: нанотехнологии, наноматериалы, металлизация, поверхностная адсорбция.

DOI: 10.61011/JTF.2026.05.62747.303-25

Введение

В последнее время в различных областях промышленности заметно возросла популярность применения металлокомпозитов [1,2], что объясняется тем, что подобные материалы зачастую показывают улучшенные характеристики относительно своих составных компонентов по отдельности [1–3]. Обычно композитные материалы состоят из двух и более основополагающих компонентов, таких как матрица и арматура, обладающих различными свойствами [2,3]. Матрица представляет собой соединительный материал, а арматура — встраиваемый компонент для получения необходимых характеристик [3]. Стоит отметить, что распределение армирующего материала выступает важным этапом в получении требуемых от композита эксплуатационных свойств [4]. Развитие сильных сторон композитов с металлической матрицей привело к созданию алюминиевых металломатричных композитов. Такие композиты обладают хорошим соотношением механических характеристик с итоговой массой материала, электрическими и термическими характеристиками, а также разумной стоимостью [2,5–8].

Однако новые вызовы перед промышленностью диктуют дальнейшую необходимость в миниатюризации материалов и устройств совместно с улучшением их

свойств [9]. Учитывая вышеизложенное, стоит обратить особое внимание на углеродные нанотрубки (УНТ), поскольку они являются довольно ценным материалом для применения в различных областях, в том числе для разработок в области электроники, накопителей энергии, датчиков, композитов и покрытий [10–14]. Перспективность применения УНТ в различных сферах обуславливается наличием у них особо ценных для профильных задач свойств. К таким свойствам относятся высокие механические характеристики, высокая проводимость и адсорбционная способность, химическая стабильность [10,14–22].

При этом возможность изменения или улучшения свойств УНТ заслуживает отдельного внимания, поскольку манипуляции, касающиеся структурных модификаций или функционализации поверхности УНТ, позволяют добиться еще более выдающихся свойств [12,15,19–25]. Важно подчеркнуть, что полученные после усовершенствований УНТ демонстрируют рост применений в проводимых экспериментах, создании и использовании наноматериалов, а также основанных на них системах [26].

В качестве примера можно привести работы [20,27–29], в которых исследовались сенсорные свойства УНТ после их модификации или функционализации различными металлами. Результаты данных исследова-

ний зачастую демонстрируют улучшения наиважнейших характеристик для датчиков вредных веществ, а именно возросшую селективность и чувствительность.

В других работах [30–33] после аналогичных манипуляций удалось добиться повышения электрической проводимости, быстрого переноса электронов, высокой удельной емкости, электрической стабильности и механической прочности. Все вышеизложенное имеет огромное значение для современных электронных устройств как в бытовой, так и в промышленной областях.

В настоящей работе было проведено теоретическое исследование механизма взаимодействия УНТ типа (6,0) с атомами меди (Cu) и никеля (Ni), модифицирующими поверхность УНТ.

1. Методология

Теория функционала плотности (DFT) является признанным и достоверным методом как для проведения модельных экспериментов, так и для квантово-химических расчетов. Данный метод также характеризуется удобством использования при расчете систем на базе УНТ. Согласно DFT, свойства многоэлектронной системы, включая ее энергию, могут быть определены из электронной плотности при отсутствии информации о волновых функциях [34].

B3LYP — это гибридный метод приближения, трехпараметрический функционал (точный хартри-фоковский обменный оператор, функционал Бекке и функционал Слейтера), корреляционная часть представляет собой комбинацию функционалов LYP и VWN. Его уникальность заключается в том, что три обменные компоненты берутся с весовыми коэффициентами. Данный метод имеет полумпирические черты, в результате чего можно добиться высокой точности расчетов [34].

Базис 6-31G представляет собой более совершенную разновидность набора математических функций, поскольку является валентно-расщепленным базисом, в котором присутствующие валентные орбитали атомов описываются несколькими базисными функциями в молекуле [34].

2. Обсуждение результатов исследования

2.1. Взаимодействие УНТ типа (6,0) с атомами Cu и Ni — одиночная адсорбция

Для определения перспективы и механизма функционализации поверхности УНТ типа (6,0) атомами Cu и Ni было проведено исследование их взаимодействия. Для более точного выявления положения атомов Cu и Ni относительно поверхности УНТ, а также для идентификации их воздействия на проводящие свойства функционализированной УНТ было создано по три модели для каждого из анализируемых атомов, а именно

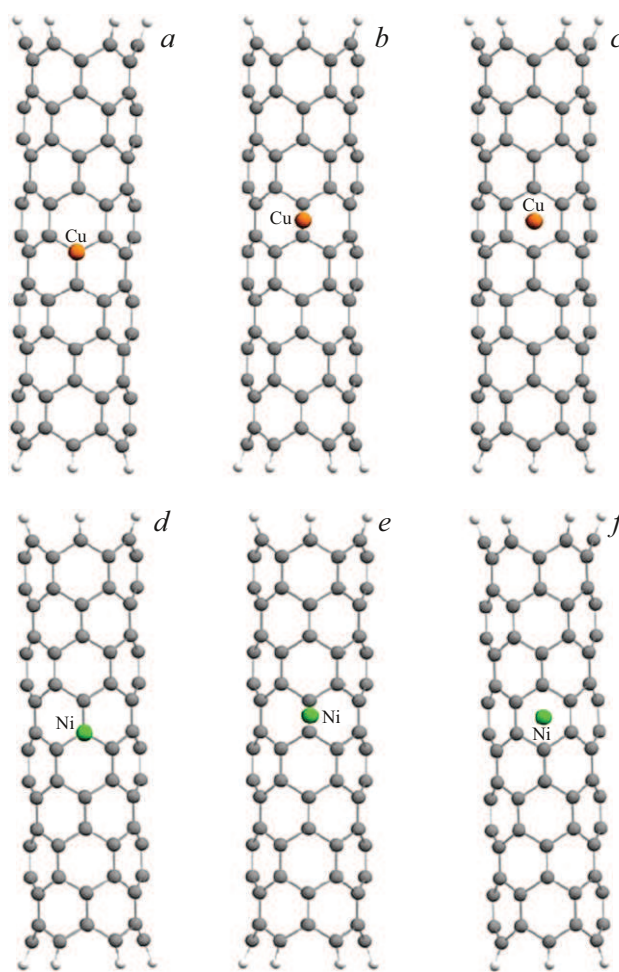


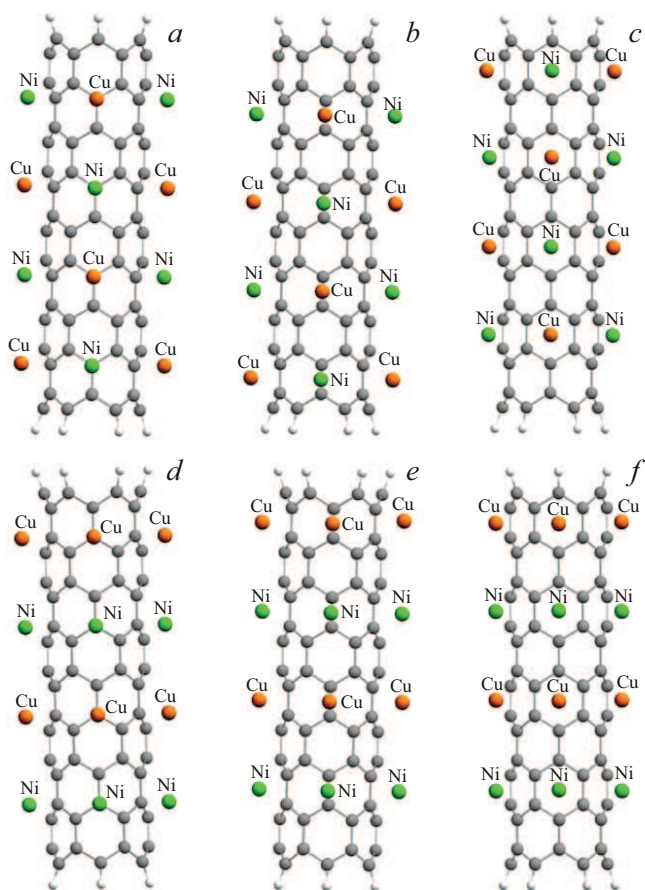
Рис. 1. УНТ с присоединенными атомами меди и никеля, одиночная адсорбция: *a, d* — над атомом углерода; *b, e* — над центром углеродной связи; *c, f* — над центром гексагона УНТ.

при их расположении над атомом углерода, центром связи атомов углерода и над центром гексагона (рис. 1). Длина УНТ составила порядка 17 Å или 8 гексагонов, нескомпенсированные валентности на границах кластера замкнуты атомами водорода во избежание краевых эффектов. На рис. 1 изображен полный кластер УНТ, чтобы наглядно продемонстрировать удаление сорбционного центра от границ УНТ, а далее (рис. 2) — для демонстрации регулярного расположения атомов металлов.

Для получения исчерпывающего объема данных моделирование хода взаимодействия УНТ типа (6,0) с атомами Cu и Ni проходило с шагом в 0.01 nm к каждому из адсорбционных центров (рис. 1, *a–f*). Приближались данные атомы перпендикулярно к продольной оси УНТ, при этом каждый шаг сопровождался расчетом предполагаемой энергии полученной системы. Полученные результаты расчетов были использованы для создания графиков, отражающих профили поверхности потенциальной энергии взаимодействия УНТ с исследуемыми

Таблица 1. Сравнительная таблица электронно-энергетических характеристик рассматриваемых систем при одиночной адсорбции

Тип структуры	Расстояние взаимодействия, nm	Энергия взаимодействия, eV	ШЗЗ, eV
УНТ типа (6,0) до функционализации			0.69
УНТ–Cu над атомом C	0.17	–2.50	0.26
УНТ–Cu над центром связи C–C	0.17	–3.07	0.20
УНТ–Cu над центром гексагона	0.12	–4.38	0.51
УНТ–Ni над атомом C	0.16	–3.59	0.53
УНТ–Ni над центром связи C–C	0.16	–4.61	0.64
УНТ–Ni над центром гексагона	0.12	–6.39	0.57

**Рис. 2.** УНТ с присоединенными атомами меди и никеля, регулярная адсорбция: *a, d* — Cu и Ni над атомом углерода; *b, e* — Cu и Ni над центром углеродной связи; *c, f* — Cu и Ni над центром гексагона УНТ.

атомами (рис. 3). Отталкиваясь от энергетических минимумов, из построенных графиков мы определили наилучшие расстояния взаимодействия Cu и Ni с поверхностью УНТ, а также принадлежавшие им значения энергии. После анализа электронно-энергетических состояний

полученных систем были рассчитаны их значения ширины запрещенной зоны (ШЗЗ). Результаты расчета представлены в табл. 1.

Проведенное исследование позволило установить наиболее вероятное с энергетической точки зрения месторасположение атомов Cu и Ni на поверхности УНТ типа (6,0) при ее функционализации. Им является расположение атомов данных металлов над центром гексагона поверхности УНТ (рис. 1, *c, f*), оно было определено по наилучшей энергии взаимодействия из всех анализируемых систем.

Произведенные теоретические расчеты дали возможность создать графики, отражающие плотности состояний анализируемых систем (рис. 4). Показатели ШЗЗ для всех вариаций месторасположения атомов металлов над поверхностью УНТ типа (6,0) представлены в табл. 1.

При помощи исследования электронно-энергетического строения созданных комплексов УНТ + Cu и Ni было выявлено, что молекулярные орбитали группируются в зону проводимости и в валентную зону с разделением запрещенной зоной. Плотности состояний представляют собой семейство графиков, на которых, помимо полной плотности состояний, обозначены плотности состояний альфа и бета электронов, отличающихся между собой направлением спина. Появление дополнительных плотностей состояний связано с примесными уровнями, которые появляются в структуре после присоединения атома металла. Значения потолка валентной зоны и дна зоны проводимости определялись по полной плотности состояний системы, также представленной на данных рисунках.

ШЗЗ представляет собой разность энергий верхней заполненной и нижней вакантной орбиталей. С помощью ШЗЗ определяются проводящие свойства материалов, включая различные наноструктуры. Для ее вычисления используется следующая формула:

$$\Delta E_g = E_{\text{LUMO}} - E_{\text{HOMO}}. \quad (1)$$

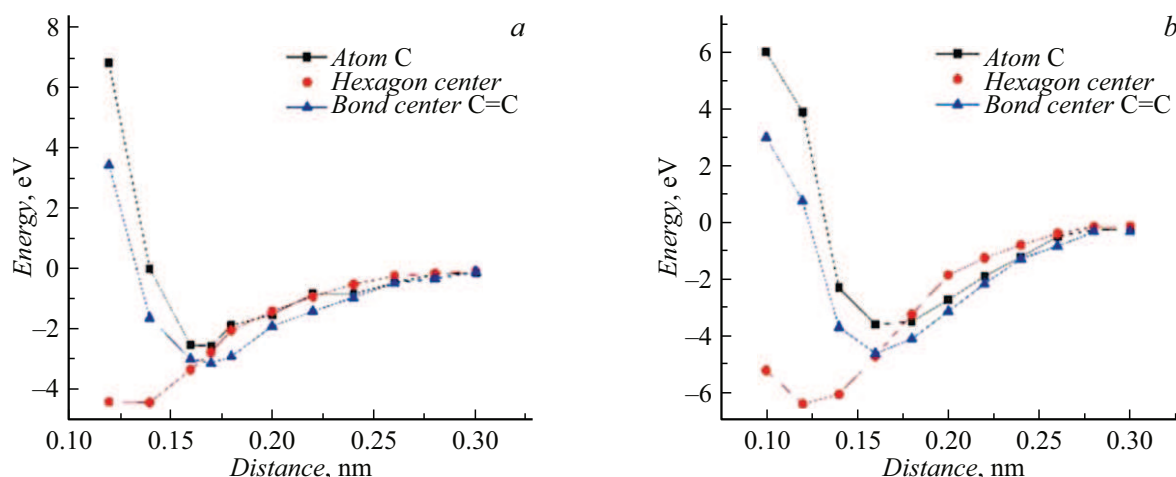


Рис. 3. Профили поверхности потенциальной энергии процесса присоединения атомов: *a* — Cu к поверхности УНТ для трех вариантов расположения атома; *b* — Ni к поверхности УНТ для трех вариантов расположения атома.

ШЗЗ у УНТ типа (6,0) до функционализации составляет 0.69 eV. При присоединении к данному типу УНТ атома Cu при любом его расположении происходит уменьшение показателей ШЗЗ (рис. 4, *b–d*) в случае расположения над центром гексагона — до 0.51 eV. При присоединении атома Ni с учетом всех его расположений наблюдается аналогичная ситуация (рис. 4, *e–g*) в случае расположения над центром гексагона — до 0.57 eV.

Исследование зарядового распределения в системах УНТ типа (6,0) + атомы Cu и Ni показало, что во всех анализируемых вариантах наблюдается перенос электронной плотности от атомов металлов на атомы углерода УНТ (табл. 2). Носитель заряда, в данном случае — электрон, переходит от атомов Cu и Ni на поверхность УНТ. За счет этого там образуется большая часть носителей зарядов и реализуется проводимость по ее поверхности.

Полученные данные свидетельствуют о том, что самыми стабильными из всех анализируемых систем являются системы с расположением атомов металлов над центром гексагона УНТ. Расстояния взаимодействия и энергии адсорбции данных комплексов соответствуют образованию связи, что, в свою очередь, указывает на их стабильность. При этом во всех анализируемых случаях наблюдается уменьшение ШЗЗ относительно УНТ (типа 6,0) до функционализации, а зарядовое распределение благоприятно влияет на сенсорные свойства полученной системы.

2.2. Взаимодействие УНТ типа (6,0) с атомами Cu и Ni — регулярная адсорбция

Убедившись в эффективности функционализации УНТ типа (6,0) атомами Cu и Ni при одиночной адсорбции, мы сделали следующий шаг, каковым стало проведение аналогичной операции, но уже по механизму регулярной

адсорбции. Расстояния взаимодействия атомов металлов с поверхностью УНТ для данных комплексов мы выбрали, отталкиваясь от лучших значений, полученных при проведении одиночной адсорбции. К поверхности УНТ было присоединено 12 атомов Cu и Ni с различными комбинациями (рис. 2). Атомы металлов располагались над сорбционными центрами таким образом, чтобы образовать металлическую сверхрешетку над поверхностью УНТ. Были выбраны различные варианты чередования атомов меди и никеля для изучения влияния расположения атомов в кристаллической сверхрешетке на электронно-энергетическую структуру металлического нанокompозита.

Рассматриваемые комбинации атомов Cu и Ni относительно поверхности УНТ типа (6,0) представляли собой:

1) атомы металлов над первым и третьим рядом гексагонов чередовались с образованием последовательности Ni–Cu–Ni, над вторым и четвертым рядом Cu–Ni–Cu — с их расположением над атомом углерода (рис. 2, *a*), над центром углеродной связи (рис. 2, *b*), над гексагоном (рис. 2, *b*);

2) атомы металлов над первым и третьим рядом гексагонов образовывали кольцо из атомов Cu, над вторым и четвертым рядом — кольцо из атомов Ni, с их расположением над атомом углерода (рис. 2, *d*), над центром углеродной связи (рис. 2, *e*), над гексагоном (рис. 2, *f*). Расстояния между построенными кольцами составляло 0.42 nm, поскольку анализируемые атомы имеют достаточно большие размеры.

Благодаря осуществленным теоретическим расчетам была получена возможность для построения графиков плотностей состояния анализируемых систем (рис. 5). Показатели ШЗЗ для всех комбинаций месторасположения атомов металлов над поверхностью УНТ (типа 6,0) представлены в табл. 3.

Исследование электронно-энергетического строения созданных комплексов УНТ + Cu + Ni показало, что мо-

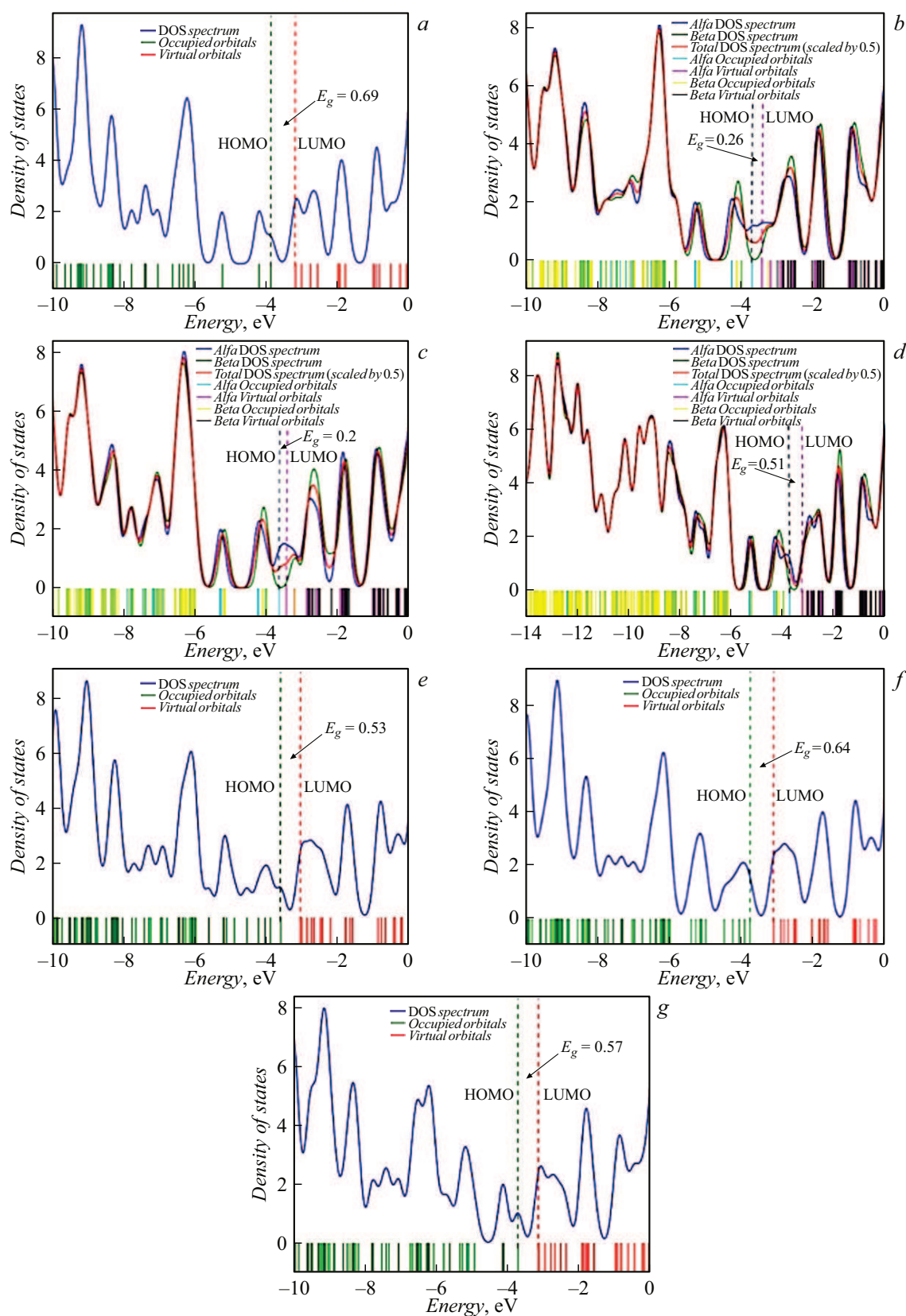


Рис. 4. Плотности состояний систем „УНТ + атомы Cu и Ni“ при одиночной адсорбции: *a* — УНТ типа (6,0) до функционализации; *b* — система УНТ + Cu с расположением атома над атомом углерода; *c* — система УНТ + Cu с расположением атома над центром углеродной связи; *d* — система УНТ + Cu с расположением атома над центром гексагона; *e* — система УНТ + Ni с расположением атома над атомом углерода; *f* — система УНТ + Ni с расположением атома над центром углеродной связи; *g* — система УНТ + Ni с расположением атома над центром гексагона.

Таблица 2. Зарядовое распределение при одиночной адсорбции

Вариант адсорбции атомов Cu и Ni	Значение заряда на атоме металла до присоединения	Значение заряда на атоме металла после присоединения	Усредненное значение заряда ближайших атомных соседей на поверхности УНТ до присоединения атомов	Усредненное значение заряда ближайших атомных соседей на поверхности УНТ после присоединения атомов
УНТ–Cu над атомом C	0	0.631	–0.010	–0.298
УНТ–Cu над центром связи C–C	0	0.909	0.009	–0.281
УНТ–Cu над центром гексагона	0	0.574	–0.011	–0.109
УНТ–Ni над атомом C	0	0.888	–0.010	–0.672
УНТ–Ni над центром связи C–C	0	0.810	0.009	–0.470
УНТ–Ni над центром гексагона	0	0.881	–0.011	–0.132

Таблица 3. Сравнительная таблица электронно-энергетических характеристик рассматриваемых систем при регулярной адсорбции

Тип структуры	Расстояние взаимодействия, nm		Энергия атомизации, eV	ШЗЗ, eV
Регулярная адсорбция над атомом C (рис. 2, a)	Cu	0.17	–7.55	0.21
	Ni	0.16		
Регулярная адсорбция над атомом C (рис. 2, d)	Cu	0.17	–7.54	0.24
	Ni	0.16		
Регулярная адсорбция над центром углеродной связи (рис. 2, b)	Cu	0.17	–7.62	0.45
	Ni	0.16		
Регулярная адсорбция над центром углеродной связи (рис. 2, e)	Cu	0.17	–7.62	0.36
	Ni	0.16		
Регулярная адсорбция над гексагоном (рис. 2, c)	Cu	0.17	–7.75	0.37
	Ni	0.16		
Регулярная адсорбция над гексагоном (рис. 2, f)	Cu	0.17	–7.73	0.31
	Ni	0.16		

лекулярные орбитали группируются аналогичным образом, как было описано ранее, т.е. присутствует валентная зона и зона проводимости с их разделением запрещенной зоной.

Исходя из ранее полученных данных, было установлено, что ШЗЗ у УНТ типа (6,0) до функционализации составляет 0.69 eV, при одиночной адсорбции над центром гексагона УНТ атомом Cu — 0.51 eV, атомом Ni — 0.57 eV. При регулярной адсорбции атомами Cu и Ni можно заметить уменьшение ШЗЗ по сравнению как с „чистой“ УНТ, так и с комплексами УНТ + Cu, УНТ + Ni при одиночной адсорбции. ШЗЗ наиболее стабильной из полученных систем при регулярной адсорбции равна 0.37 eV (табл. 3).

Стабильность комплексов на основе УНТ при регулярной адсорбции определялась при помощи следующей формулы:

$$E_{AT} = \frac{aE_c + bE_H + cE_{Ni} + dE_{Cu} - E_{CNT+Me}}{a + b + c + d}, \quad (2)$$

где E_{AT} — энергия атомизации на один атом УНТ, E_c — энергия атома углерода, E_H — энергия атома водорода, E_{Ni} — энергия атома никеля, E_{Cu} — энергия атома меди, a — количество атомов углерода в данной УНТ, b — количество псевдоатомов водорода, c — количество атомов никеля, d — количество атомов меди, E_{CNT+Me} — полная энергия всех атомов составляющих УНТ.

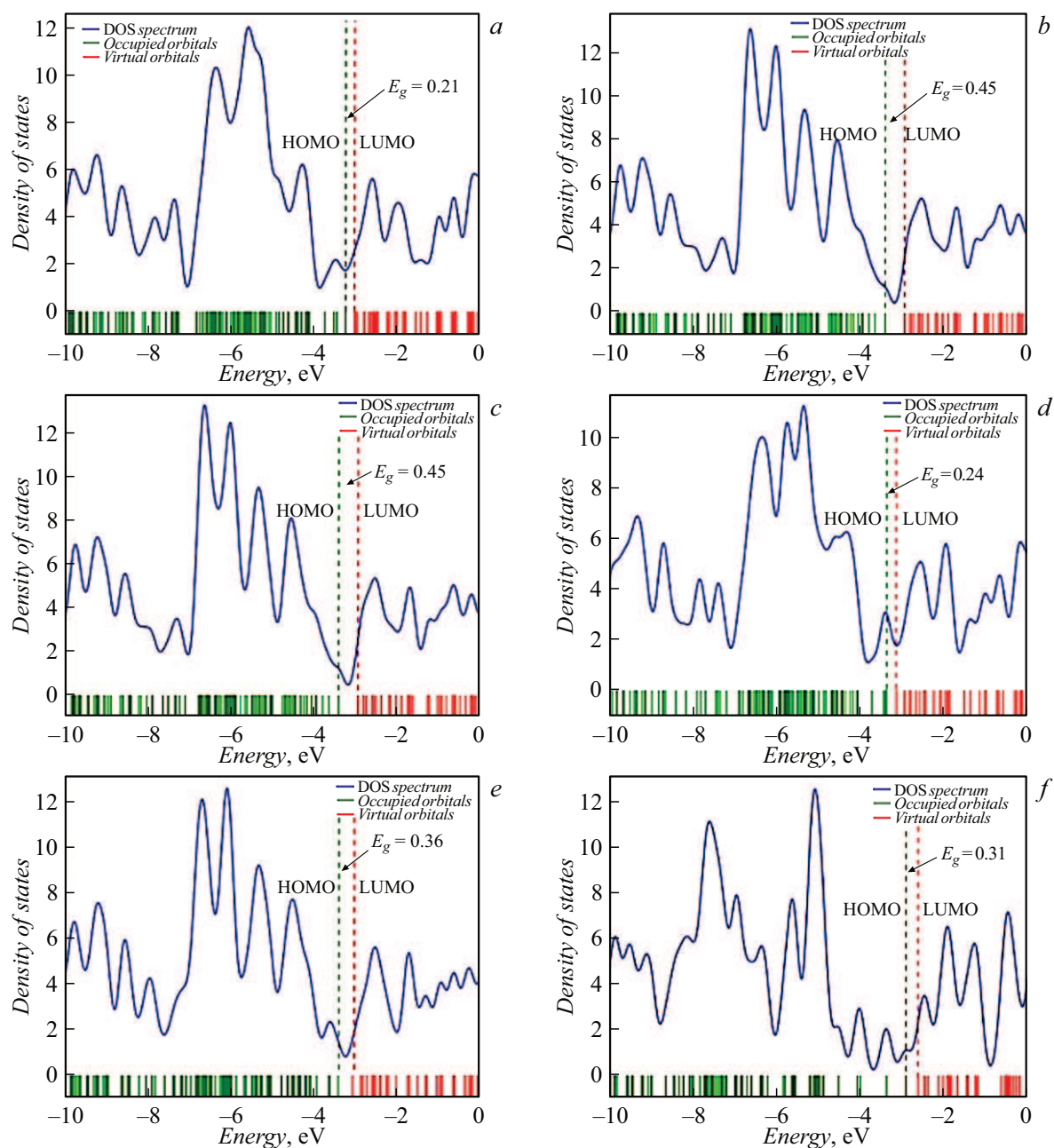


Рис. 5. Плотности состояний систем „УНТ + атомы Cu и Ni“ при регулярной адсорбции: *a* — система УНТ + Cu + Ni с расположением атомов над атомами углерода; *b* — система УНТ + Cu + Ni с расположением атомов над центрами углеродной связи; *c* — система УНТ + Cu + Ni с расположением атомов над центрами гексагонов; *d* — система УНТ + Cu + Ni с расположением атомов над атомами углерода; *e* — система УНТ + Cu + Ni с расположением атомов над центрами углеродной связи; *f* — система УНТ + Cu + Ni с расположением атомов над центрами гексагонов.

Выполненные исследования свидетельствуют о том, что наиболее стабильные комплексы при регулярной адсорбции, как и при одиночной адсорбции, образуются над центрами гексагонов УНТ, при этом наилучшим является вариант с 1 комбинацией атомов Cu и Ni (рис. 2, *c*). Результаты расчетов представлены в табл. 3.

Анализ зарядового распределения в системах УНТ типа (6,0) + Cu + Ni показал, что при регулярной адсорбции наблюдается аналогичный результат с одиночной

адсорбцией, т.е. во всех рассмотренных вариантах замечен перенос электронной плотности от атомов металлов на атомы углерода УНТ, благодаря чему там образуется большая часть носителей зарядов и реализуется проводимость по ее поверхности.

Полученные данные свидетельствуют о том, что самой стабильной из всех анализируемых систем является система с расположением атомов металлов над центром гексагона УНТ (комбинация 1, рис. 2, *c*). Расстояния

взаимодействия и энергия адсорбции данного комплекса соответствуют образованию связи, что указывает на стабильность полученной системы. Во всех анализируемых случаях наблюдается уменьшение ШЗЗ относительно УНТ типа (6,0) до функционализации, а также ее уменьшение у наиболее стабильной системы при регулярной адсорбции относительно системы с одиночной адсорбцией.

Заключение

Выполненное теоретическое исследование позволило определить воздействие функционализации атомами Cu и Ni на проводящие свойства УНТ типа (6,0) с учетом одиночной и регулярной адсорбции. Выполненные квантово-химические расчеты позволили установить следующее:

с точки зрения стабильности конфигурации наиболее оптимальным положением атомов Cu и Ni относительно поверхности УНТ типа (6,0) как при одиночной, так и при регулярной адсорбции (вариант комбинации 1), является их нахождение над центром гексагона УНТ;

при присоединении атомов металлов к поверхности УНТ типа (6,0) во всех анализируемых случаях происходит уменьшение ШЗЗ относительно УНТ до функционализации, при этом у наиболее стабильной системы с регулярной адсорбцией значения ШЗЗ меньше, чем у аналогичной системы с одиночной адсорбцией;

зарядовое распределение смоделированных систем УНТ типа (6,0) + атомы Cu и Ni во всех анализируемых случаях свидетельствует о том, что наблюдается перенос электронной плотности от атомов металлов на атомы углерода УНТ. Смещение электронного облака от атомов металлов к поверхности нанотрубки приведет к возможному увеличению носителей зарядов. Происходит улучшение проводящих свойств, обусловленное уменьшением ширины запрещенной зоны.

Таким образом, можно сделать вывод о возможности функционализации УНТ типа (6,0) атомами Cu и Ni, при этом отмечается факт улучшения проводящих свойств полученных систем, что наиболее заметно при регулярной адсорбции УНТ. Полученные данные могут лечь в основу создания сверхминиатюрных устройств для нужд нанoeлектроники.

Финансирование работы

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (тема „FZUU-2023-0001“).

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] A. Kumar, R.C. Singh, R. Chaudhary. *Mater. Today: Proceed.*, **21**, 1453 (2020). DOI: 10.1016/j.matpr.2019.10.079
- [2] A.K. Sharma, R. Bhandari, A. Aherwar, C. Pinca-Bretotean. *Mater. Today: Proceed.*, **27**, 1608 (2020). DOI: 10.1016/j.matpr.2020.03.316
- [3] A. Atmakuri, A. Palevicius, A. Vilkauskas, G. Yanusas. *Polymers*, **12** (9), 2088 (2020). DOI: 10.3390/polym12092088
- [4] D.S. Prasad, C. Shoba, N. Ramanaiah. *J. Mater. Res. Technol.*, **3** (1), 79 (2014). DOI: 10.1016/j.jmrt.2013.11.002
- [5] A. Kumar, V.P. Singh, R.C. Singh, R. Chaudhary, D. Kumar, A.-H.I. Mourad. *J. Mater. Sci.*, **59** (7), 2644 (2024). DOI: 10.1007/s10853-024-09398-7
- [6] S. Suresha, B.K. Sridhara. *Mater. Design*, **31** (9), 4470 (2010). DOI: 10.1016/j.matdes.2010.04.053
- [7] R. Chandel, N. Sharma, S.A. Bansal. *Emergent Mater.*, **4** (5), 1243 (2021).
- [8] S.A. Sajjadi, H.R. Ezatpour, M.T. Parizi. *Mater. Design*, **34**, 106 (2012). DOI: 10.1016/j.matdes.2011.07.037
- [9] L. Aryasomayajula, K.J. Wolter. *J. Nanotechnol.*, **2013** (1), 296517 (2013). DOI: 10.1155/2013/296517
- [10] N.T. Alvarez, P. Miller, M.R. Haase, R. Lobo, R. Malik, V. Shanov. *Carbon*, **144**, 55 (2019). DOI: 10.1016/j.carbon.2018.11.036
- [11] A. Hoque, C.P. Nawarathne, N.T. Alvarez. *Carbon*, **235**, 120086 (2025). DOI: 10.1016/j.carbon.2025.120086
- [12] M.M.H. Raza, M. Sadiq, M. Zulfequar, S. Husain, J. Ali. *J. Phys. Chem. Solids*, **178**, 111309 (2023).
- [13] M.A.S. Sakr, G.M. Abdelrazek, H. Abdelsalam, O.H. Abd-Elkader, V.A. Saroka, Q. Zhang. *Mater. Sci. Eng.: B*, **317**, 118160 (2025). DOI: 10.1016/j.mseb.2025.118160
- [14] A. Kumar, S. Rathor, S. Singh, R. Kant, H. Singh, M. Vost'ak, S. Houdkova. *Tribology Intern.*, 111249 (2025). DOI: 10.1016/j.triboint.2025.11124
- [15] S. Wangchuk, K. Promsuwan, J. Saichanapan, A. Soleh, K. Saisahas, K. Samoson, A. Numnuam, P. Kanatharana, P. Thavarungkul, W. Limbut. *Microchem. J.*, **207**, 112217 (2024). DOI: 10.1016/j.microc.2024.112217
- [16] Ya. Wang, J. Chen, W. Tang, D. Xia, Yu. Liang, X. Li. *Chemosphere*, **214**, 79 (2019). DOI: 10.1016/j.chemosphere.2018.09.074
- [17] H. Zhang, J. Dai, H. Zhou, R. Hong, W. Dong, H. Chu. *J. Analyt. Appl. Pyrolys.*, **192**, 107272 (2025). DOI: 10.1016/j.jaap.2025.107272
- [18] D. Chu, Ch. Gao, Z. Ji, Y. Li, Q. Jin, Y. He, W. Bai. *Mater. Today Chem.*, **45**, 102616 (2025). DOI: 10.1016/j.mtchem.2025.102616
- [19] J. Kang, M. Kang, S. Pyo, K. Park. *Composite Structures*, **372**, 119614 (2025). DOI: 10.1016/j.compstruct.2025.119614
- [20] Sh. Gulati, H.N. Lingam, B.S. Kumar, K. Goyal, A. Arora, R.S. Varma. *Chemosphere*, **299**, 134468 (2022). DOI: 10.1016/j.chemosphere.2022.134468
- [21] V.J. Chakravarthy, C. Thontadari, G.N. Basavaraj, R. Sowndharya, N. Aravindan, V. Sangeetha. *Microchem. J.*, **218**, 115413 (2025). DOI: 10.1016/j.microc.2025.115413
- [22] Ch.-Yu. Lin, J.-W. Chang, M.-H. Lin, K.-Ch. Wu, Sh.-H. Hong, J.-M. Lin, Ch.-W. Kung, Ch.-L. Liu. *Chem. Eng. J.*, **521**, 166861 (2025). DOI: 10.1016/j.cej.2025.166861

- [23] M. Hamadani, Z. Tavangar, B. Noori. J. Molecular Structure, **1076**, 49 (2014). DOI: 10.1016/j.molstruc.2014.07.017
- [24] N.P. Boroznina, S.V. Boroznin, I.V. Zaporotskova, P.A. Zaporotskov, D.F. Sergeev, G. Murugadoss, N. Venkatesh, Sh.G. Peera. Inventions, **10** (5), 86 (2025). DOI: 10.3390/inventions10050086
- [25] S. Ramanathan, W.J. Lau, P.S. Goh, M.F. Omar, M.C. Breadmore, A.F. Ismail, H.H. See. J. Environmental Chem. Eng., **12** (3), 112931 (2024). DOI: 10.1016/j.jece.2024.112931
- [26] J. Zhao, X. He, Yu. Wang, Sh. Wang, R.H. Baughman. Microchem. J., **214**, 114086 (2025). DOI: 10.1016/j.microc.2025.114086
- [27] S.-W. Choi, B.-M. Kim, S.-H. Oh, Yo.T. Byun. Sensors and Actuators B: Chem., **249**, 414 (2017). DOI: 10.1016/j.snb.2017.04.119
- [28] M. Penza, R. Rossi, M. Alvisi, M.A. Signore, G. Cassano, D. Dimaio, R. Pentassuglia, E. Piscopiello, E. Serra, M. Falconieri. Thin Solid Films, **517** (22), 6211 (2009). DOI: 10.1016/j.tsf.2009.04.009
- [29] H. Shi, J. Chen, S. Yu. Mater. Today Commun., **37**, 107200 (2023). DOI: 10.1016/j.mtcomm.2023.107200
- [30] X. Hao, W. Zhou, Z. Huang, Y. Li, D. Li, J. Xu. J. Colloid Interface Sci., **689**, 137200 (2025). DOI: 10.1016/j.jcis.2025.02.208
- [31] R. Li, P. Song, Zh. Ji, H. Zhou, Yi. Xue, L. Kong, X. Shen. Appl. Surf. Sci., **649**, 159188 (2024). DOI: 10.1016/j.apsusc.2023.159188
- [32] M.S. Munir, M.I. Alvi, M.A. Saeed, A. Khan, A. Shareef, M. Khan. Mater. Chem. Phys.: Sustainability and Energy, **2**, 100007 (2025). DOI: 10.1016/j.macse.2024.100007
- [33] Sh.J. Shetty, T.K. Nanditha, S. Amini, S.M. Rumana Farheen, M.A. Sangamesha, S. Krishnaveni, S.C. Gurumurthy. J. Alloys Compounds, **1041**, 183837 (2025). DOI: 10.1016/j.jallcom.2025.183837
- [34] Л.С. Элбакян. Квантово-химические расчеты с применением программного пакета GAUSSIAN и графического редактора GAUSSVIEW (Волгоградский гос. университет, Волгоград, 2022)