

## ОПРЕДЕЛЕНИЕ УГЛЕКИСЛОГО ГАЗА В ОКРУЖАЮЩЕМ ВОЗДУХЕ

А.Н. Панченко, студент  
Волгоградский государственный университет  
(Россия, г. Волгоград)

DOI: 10.24412/2500-1000-2023-3-2-124-127

**Аннотация.** проведено исследование сенсорных свойств пиролизованного полиакрилонитрила в отношении углекислого газа. Описаны датчики для определения углекислого газа и их принципы работы. Датчики для определения углекислого газа – это устройства, обнаруживающие и измеряющие концентрацию  $CO_2$  в атмосфере или в определенной среде. Эти датчики используются в самых разных областях, таких как мониторинг качества воздуха внутри зданий, контроль выбросов  $CO_2$  в промышленных процессах и измерение уровня  $CO_2$  в атмосфере для исследований климата.

**Ключевые слова:** углекислый газ, сенсор, детектор, концентрация, датчик.

Углекислый газ является парниковым газом, который значительно влияет на изменение климата. Выбросы углекислого газа увеличиваются, в первую очередь из-за деятельности человека, такой как сжигание ископаемого топлива, вырубка лесов и промышленные процессы. Для решения проблемы повышения уровня углекислого газа необходимо контролировать концентрацию углекислого газа в атмосфере.

Датчики для определения углекислого газа используют несколько принципов работы, включая инфракрасное поглощение, электрохимическое и твердотельное зондирование. Датчики инфракрасного поглощения используют принцип, согласно которому молекулы углекислого газа поглощают определенные длины волн инфракрасного света. Измеряя количество инфракрасного света, поглощаемого углекислым газом, можно определить концентрацию углекислого газа в воздухе. Электрохимические датчики работают, измеряя электрический ток, генерируемый при

окислении углекислого газа на электроде. Твердотельные датчики используют принцип адсорбции газа для измерения концентрации углекислого газа [1].

Так в качестве сенсора на присутствие углекислого газа в газовой атмосфере может применяться углеродный нанокристаллический материал на основе пиролизованного полиакрилонитрила (ППАН). В присутствии углекислого газа сопротивление ППАН увеличивается, что позволяет определять данный газ [2-3].

Рассмотрим взаимодействие молекулы углекислого газа с молекулярным кластером ППАН. В первом случае исследуем процесс адсорбции молекулы на поверхности полимера. Расчеты проводились полумпирическим методом РМ6. Молекула газа подводится к слою полимера, интервал движения составляет  $0,1 \text{ \AA}$ . На каждом этапе фиксировалась полная энергия системы, которая позволила построить графическую зависимость (рис. 1.)

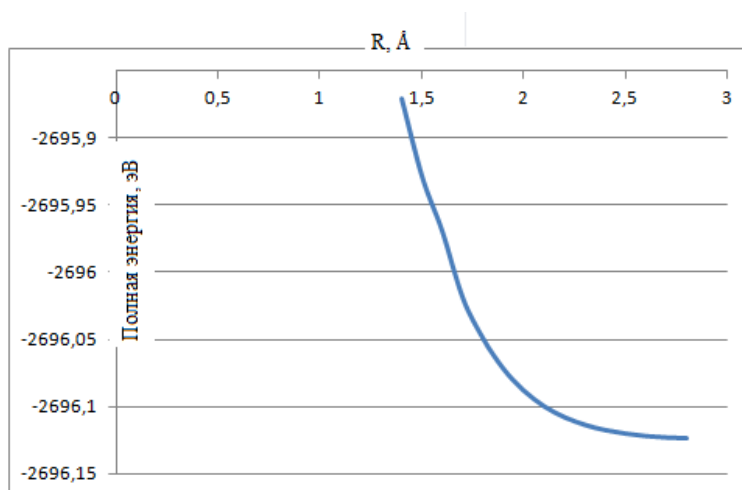


Рис. 1. Зависимость энергии от расстояния между молекулой  $\text{CO}_2$  и ППАН

Отсутствие минимума на данной зависимости свидетельствует об отсутствии

адсорбционного взаимодействия между углекислым газом и полимером (рис. 2).

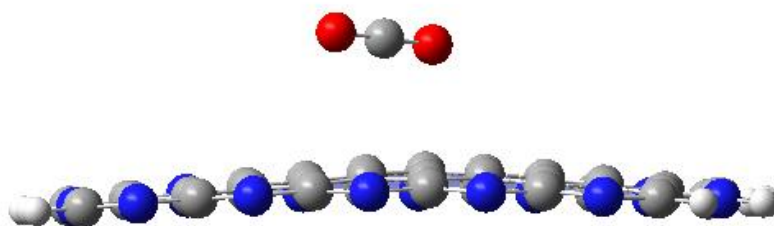


Рис. 2. Взаимодействие молекулы  $\text{CO}_2$  с ППАН

Следует отметить, что ППАН имеет слоистую структуру, монослои которого подобны графиту. Рассмотрим как взаимодействует молекула газа с двухслойной структурой. Данное взаимодействие моделировалось внедрением молекулы через

боковую поверхность в межслоевое пространство полимера. Оптимизация геометрических параметров позволила обнаружить адсорбционный комплекс «ППАН+ $\text{CO}_2$ » (рис. 3).

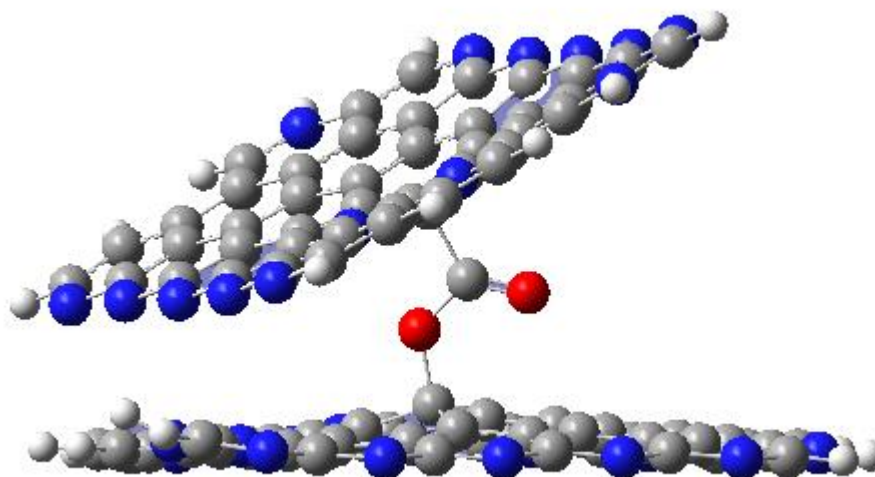


Рис. 3. Образование химической связи между молекулой углекислого газа и полимера

Сравнение физико-химических свойств образовавшегося комплекса с характеристиками «чистого» полимера позволило

установить ряд отличий. Например, адсорбция газа приводит к изменению ширины запрещенной зоны (рис. 4).

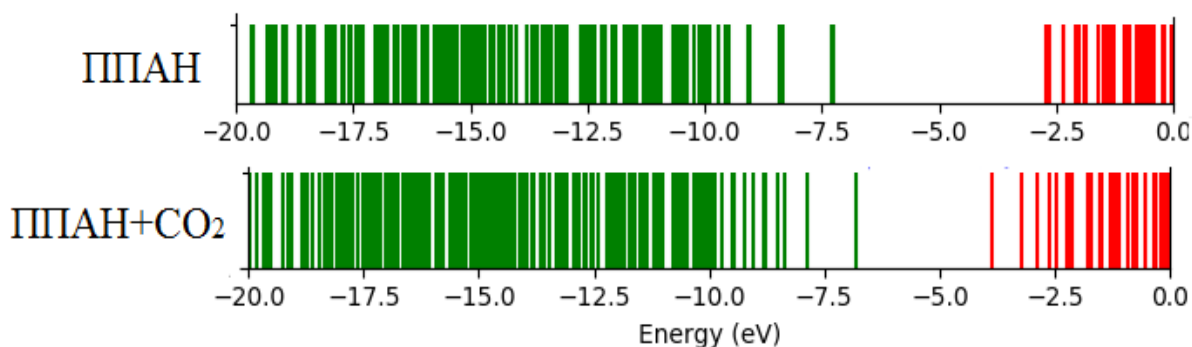


Рис. 4. Значение запрещенной зоны

Это отличие и может позволить ППАН выступить в качестве сенсорного устройства. Полимер будет менять свои проводящие свойства при обнаружении газа в атмосфере.

Датчики для определения углекислого газа имеют несколько применений, включая мониторинг качества воздуха в помещениях, управление производственными процессами и исследования климата. При мониторинге качества воздуха в помещении датчики используются для обеспечения того, чтобы концентрация углекислого газа в помещениях находилась в допустимых пределах. Высокий уровень углекислого газа в помещениях может вызывать усталость, головные боли и другие проблемы со здоровьем. В управлении промышленными процессами датчики используются для контроля концентрации углекислого газа в выхлопных газах процессов горения. В исследованиях климата датчики используются для измерения концентрации углекислого газа в атмосфере, что-

бы лучше понять динамику изменения климата.

**Заключение:** Датчики для определения углекислого газа необходимы для контроля концентрации этого парникового газа в атмосфере. Различные типы датчиков используют разные принципы работы, и каждый из них имеет свои преимущества и недостатки. Инфракрасные абсорбционные датчики широко используются благодаря их точности и надежности, тогда как электрохимические и твердотельные датчики более экономичны [4]. Датчики для определения углекислого газа имеют несколько применений, включая мониторинг качества воздуха в помещениях, управление производственными процессами и исследования климата. Поскольку мир продолжает бороться с проблемой повышения уровня углекислого газа, датчики для определения углекислого газа будут играть жизненно важную роль в смягчении последствий изменения климата.

#### Библиографический список

1. Максумова, И. М. Газочувствительные сенсоры для определения углекислого газа в атмосфере на основе наноматериалов / И. М. Максумова // *Фундаментальные и прикладные научные исследования: актуальные вопросы, достижения и инновации: сборник статей LI Международной научно-практической конференции. В 2 частях, Пенза, 15 декабря 2021 года. Том Часть 1.* – Пенза: Наука и Просвещение (ИП Гуляев Г.Ю.), 2021. – С. 31-34.
2. About the Creation of Sensor of New Firefighting, Devices Based on Nanostructures for Determination of Carbon Monoxide and Carbon Dioxide Components / S. V. Boroznin, O. A. Kakorina, I. A. Kakorin, E. S. Dryuchkov // "Smart technologies" for society, state and

economy, Volgograd, 02-03 июля 2020 года. – Volgograd: Springer, 2021. – P. 277-287. – DOI 10.1007/978-3-030-59126-7\_31.

3. Давлетова, О. А. Структура и электронные характеристики пиролизованного полиакрилонитрила: специальность 05.27.01 "Твердотельная электроника, радиоэлектронные компоненты, микро- и нанoeлектроника, приборы на квантовых эффектах": диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математич. наук / Давлетова Олеся Александровна. – Волгоград, 2010. – 140 с.

4. Газовый сенсор на многостенных углеродных нанотрубках, работающий на регистрации четырех электрофизических параметров / С. А. Жукова, Д. Ю. Обижаев, О. В. Демичева [и др.] // Нано- и микросистемная техника. – 2007. – № 4. – С. 60-64.

## DETERMINATION OF CARBON DIOXIDE IN AMBIENT AIR

**A.N. Panchenko**, *Student*  
**Volgograd State University**  
**(Russia, Volgograd)**

**Abstract.** *Study of the sensory properties of pyrolyzed polyacrylonitrile in relation to carbon dioxide was carried out. This article describes sensors for determining carbon dioxide and their principles of operation. Carbon dioxide sensors are devices that detect and measure the concentration of CO<sub>2</sub> in the atmosphere or in a specific environment. These sensors are used in a wide variety of fields, such as monitoring air quality inside buildings, controlling CO<sub>2</sub> emissions in industrial processes, and measuring atmospheric CO<sub>2</sub> levels for climate research.*

**Keywords:** *carbon dioxide, sensor, detector, concentration, sensor.*