

УДК 539.213.2

А. Е. Почтенный, канд. физ.-мат. наук, доц.;

Л. Д. Русак, магистрант (БГТУ, г. Минск)

### **ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ АДсорбЦИОННО-РЕЗИСТИВНОГО ОТКЛИКА НА АММИАК ПЛЕНОК ФТОРЗАМЕЩЕННОГО ФТАЛОЦИАНИНА МЕДИ**

Целью работы является установление связи между концентрацией адсорбированных молекул и электропроводностью пленки, выполняющей функцию адсорбента. Моделирование проводилось для конкретного случая – адсорбции аммиака пленкой фторзамещенного фталоцианина меди.

Предварительные экспериментальные исследования проводимости исходного материала показали, что в пленках фторзамещенного фталоцианина меди реализуется прыжковый механизм проводимости, причем в интервале температур от комнатной и примерно до 150°C проводимость этих пленок осуществляется по собственным состояниям, а примесные уровни, обусловленные адсорбированным из атмосферы кислородом, лежат по шкале энергий ниже, чем собственные.

Соответственно, экспериментальные исследования адсорбционно-резистивного отклика на аммиак пленок фторзамещенного фталоцианина меди показали, что адсорбция аммиака увеличивает электрическое сопротивление этих пленок, при этом увеличение концентрации аммиака увеличивает адсорбционно-резистивный отклик, а увеличение температуры пленок уменьшает адсорбционно-резистивный отклик на аммиак. Моделирование процесса осуществлялось на основе теории примесной прыжковой проводимости с учетом трех систем электронных энергетических уровней: собственных состояний фторзамещенного фталоцианина меди, состояний адсорбированного кислорода и состояний адсорбированного аммиака. Обнаруженные закономерности реализуются, если адсорбированные молекулы аммиака связываются с молекулами адсорбированного из воздуха кислорода, высвобождая при этом связи адсорбированного кислорода с молекулами фталоцианина и переходя на энергетические уровни, расположенные ниже, чем уровни как фталоцианина, так и кислорода. Молекулы фталоцианина при этом возвращаются на уровни собственных состояний фталоцианина, увеличивая тем самым концентрацию собственных центров локализации.

Таким образом, теория примесной прыжковой проводимости позволяет описать адсорбционно-резистивный эффект при адсорбции аммиака пленками фторзамещенного фталоцианина меди.