

I sensori di gas basati sugli ossidi metallici semiconduttori (MOX) si sono rivelati negli ultimi anni una tecnologia estremamente vantaggiosa. Nonostante i progressi fatti in questo campo, questi dispositivi presentano ancora alcuni punti deboli che spingono la ricerca ad effettuare ulteriori indagini per perfezionare il loro funzionamento.

I ricercatori hanno cercato di risolvere questi svantaggi in diversi modi, focalizzandosi sullo sviluppo di MOX innovativi, tra cui il drogaggio tramite l'utilizzo di additivi o l'introduzione nel materiale di vacanze di ossigeno a concentrazione controllata. Questa alternativa sta attirando l'attenzione di molti gruppi di ricerca, anche se, ad oggi, la letteratura scientifica presenta una mancanza di studi su come la disposizione e concentrazione di vacanze di ossigeno influenzano le performance di sensing e solo alcuni lavori preliminari hanno portato a risultati interessanti. Per cercare di ovviare ai limiti dei sensori MOX, una seconda via è stata lo sviluppo di materiali 2D basati su solfuri metallici, grafene o similari. Il fosforene è uno dei migliori candidati per tale applicazione tecnologica, poiché mostra un'attività elettrica anche a temperatura ambiente, anche se studi preliminari hanno evidenziato un alto tasso di degradazione nel tempo del materiale durante il suo utilizzo.

L'obiettivo di questo lavoro è quello di diminuire la temperatura di funzionamento di sensori di gas basati su SnO₂ sfruttando il controllo delle vacanze di ossigeno. A tale scopo, è stato fatto inizialmente uno studio della letteratura e un'analisi analitica nell'ambito della DFT per indagare come le vacanze di ossigeno influenzano le proprietà fisico-chimiche del materiale. È stato studiato l'effetto di due diverse concentrazioni di vacanze di ossigeno sulle proprietà chimico-fisiche dello SnO₂ bulk. Successivamente è stata studiata la formazione delle vacanze in superficie per investigare l'adsorbimento di molecole di ossigeno dall'atmosfera circostante sulla superficie dello SnO₂ è stato sintetizzato tramite sintesi sol-gel e la riduzione è stata ottenuta tramite trattamento termico in presenza di H₂ a diverse temperature. I risultati hanno mostrato un'alta risposta dei sensori basati su SnO_{2-x} in presenza di basse concentrazioni di NO₂ spostando a 130 °C la temperatura ottimale di funzionamento del dispositivo. Questa diminuzione della temperatura operativa implica una diminuzione del consumo energetico del dispositivo.

Come menzionato precedentemente, il fosforene è uno dei materiali 2D più promettenti per lo sviluppo di sensori di gas chemoresistivi, ma presenta ancora alcuni svantaggi. Molti studi sono stati sviluppati sulla decorazione del fosforene con atomi metallici al fine di migliorare le sue prestazioni per diverse applicazioni tecnologiche, ma non sono stati ancora condotti studi specifici su questa particolare forma di fosforene decorato per applicazioni di sensoristica gassosa. Nello studio qui proposto, sono stati eseguiti calcoli DFT per spiegare come il nichel influenzi le proprietà elettroniche del fosforene, poiché la decorazione con nichel ha mostrato una migliore stabilità del sensore e un'alta sensibilità all'NO₂.

Tramite simulazione DFT è stato possibile investigare l'adsorbimento delle molecole di ossigeno sul Fosforene tal quale e decorato con nichel. I risultati hanno evidenziato che le molecole di ossigeno si dissociano sullo strato di fosforene tal quale e reagiscono con gli atomi di fosforo, ossidandolo, mentre in presenza dei cluster di nichel è quest'ultimo a svolgere il ruolo di catalizzatore, interagendo con le molecole di ossigeno. Infine, il meccanismo di interazione tra NO_2 e la superficie del fosforene tal quale e funzionalizzato è stato caratterizzato teoricamente studiando il trasferimento di carica che avviene sulla superficie del materiale in esame.