

Квантово–химическое моделирование поверхностного модифицирования углеродной нанотрубки типа «кресло» оксидом кобальта

© 2024 г. А. Р. Эль Занин✉, С. В. Борознин

*Волгоградский государственный университет,
Университетский просп., д. 100, Волгоград, 400062, Российская Федерация*

✉ Автор для переписки: aelzanin@volsu.ru

Аннотация. Проведено исследование процесса адсорбции оксида кобальта Co_3O_4 на поверхности углеродной нанотрубки (УНТ) типа «кресло» в трех положениях адсорбции путем квантово–химического моделирования в рамках теории функционала плотности на уровне теории B3LYP/3–21G. Были рассчитаны значения ширины запрещенной зоны исходной УНТ (6,6) и композитов УНТ (6,6)/ Co_3O_4 с различными положениями адсорбции и определены механизмы ее изменения, а также проведен анализ зарядового распределения в полученных структурах. Проведенное исследование позволило установить возможность поверхностного модифицирования углеродной нанотрубки (6,6) оксидом кобальта в любом из рассмотренных положений адсорбции, поскольку во всех приведенных случаях наблюдался процесс химической адсорбции. Подобное модифицирование приводит к уменьшению ширины запрещенной зоны, что связано с повышением потолка валентной зоны и понижением дна зоны проводимости. В наибольшей степени ширина запрещенной зоны уменьшается при адсорбции оксида кобальта в положение, при котором атом кобальта оксида расположен над центром гексагона углеродной нанотрубки. Электронная плотность смещается с оксида кобальта на поверхность нанотрубки, при этом атом кобальта оксида приобретает положительный заряд, а близлежащие к нему атомы углерода — отрицательный. Полученные результаты могут быть применены для разработки новых устройств наноэлектроники, газовых сенсоров и биосенсоров.

Ключевые слова: углеродные нанотрубки, оксид кобальта, адсорбция, поверхностное модифицирование, теория функционала плотности, ширина запрещенной зоны, зарядовое распределение

Благодарности: Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ (тема «FZUU–2023–0001»).

Для цитирования: Эль Занин А.Р., Борознин С.В. Квантово–химическое моделирование поверхностного модифицирования углеродной нанотрубки типа «кресло» оксидом кобальта. *Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники.* 2024; 27(4): 317—323. <https://doi.org/10.17073/1609-3577j.met202411.637>

Статья подготовлена по материалам доклада, представленного на VI–й международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов», Москва, 21–23 октября 2024 г.

© 2024 National University of Science and Technology “MISIS”.

This is an open access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution License (CC-BY 4.0), which permits unrestricted use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original author and source are credited.

Quantum chemical modeling of the surface modification of an “armchair” carbon nanotube with cobalt oxide

A. R. El Zanin✉, S. V. Boroznin

*Volgograd State University,
100 Universitetsky Ave., Volgograd 400062, Russian Federation*

✉ Corresponding author: aelzanin@volsu.ru

Abstract: In this work the adsorption of the cobalt oxide on the surface of the “armchair” carbon nanotube (CNT) in three positions of the adsorption was investigated by quantum chemical modeling with methods of the density functional theory on the B3LYP/3–21G level. The values of the band gap of the pure CNT(6,6) and CNT(6,6)/Co₃O₄ composites with different adsorption positions were calculated and the mechanisms of its change were determined, the charge distribution in the obtained structures was analyzed. The conducted study permitted the establishment of the possibility of surface modification of CNT(6,6) with cobalt oxide in any of the considered adsorption positions, as evidenced by the observation of a process of chemical adsorption in all the given cases. Such modification leads to a decrease in the band gap, which is associated with an increase in the top of the valence band and a decrease in the bottom of the conduction band. The maximum decrease of the band gap is observed for the adsorption of cobalt oxide to a position where the cobalt atom of the cobalt oxide is located above the center of the CNT hexagon. The electron density shifts from the cobalt oxide to the surface of the CNT, while the cobalt atom of the cobalt oxide charges positively, and the carbon atoms nearby it charge negatively. The obtained results can be useful for the development of new nanoelectronics devices, gas sensors and biosensors.

Keywords: carbon nanotubes, cobalt oxide, adsorption, surface modification, density functional theory, band gap, charge distribution

Acknowledgments: The work was carried out within the framework of the state assignment of the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (“FZUU–2023–0001”).

For citation: El Zanin A.R., Boroznin S.V. Quantum chemical modeling of the surface modification of an “armchair” carbon nanotube with cobalt oxide. *Izvestiya vuzov. Materialy elektronnoi tekhniki = Materials of Electronics Engineering*. 2024; 27(4): 317–323. <https://doi.org/10.17073/1609-3577j.met202411.637>

Введение

Углеродные нанотрубки (УНТ) представляют собой полые цилиндрические наноструктуры, образующиеся в результате свертки листа графена; геометрия таких структур характеризуется индексами хиральности (n, m), определяющими диаметр и хиральный угол. Ахиральные нанотрубки подразделяют на два типа: «зигзаг» и «кресло». Первому случаю соответствуют индексы ($n, 0$) и хиральный угол 0° , второму — (n, n) и хиральный угол 30° . Установлено, что геометрия УНТ является основополагающим фактором, определяющим их проводящие и оптоэлектронные свойства [1, 2]. Подобное обстоятельство открывает широкие возможности по конструированию разнообразных устройств электроники и оптоэлектроники [3, 4]. Однако следует отметить, что практическое полу-

чение и выделение УНТ с заданной хиральностью является достаточно серьезной проблемой, которая в настоящее время ограничивает возможности их промышленного производства.

Управлять свойствами УНТ возможно не только посредством подбора и контроля геометрии, но и путем поверхностного модифицирования: возможно присоединение к поверхности УНТ различных атомов, молекул, функциональных групп, что приводит к изменению свойств материала. Такой подход является более экономически обоснованным по сравнению с получением УНТ с заданной хиральностью, поскольку часто поверхностно модифицированные УНТ могут быть получены химическими методами в достаточно мягких условиях [5, 6].

Модифицирование оксидами металлов позволяет получать композиты с уникальными характеристиками, которые могут найти свое применение

в широком спектре практических приложений, начиная от фотогальванических элементов и фотокатализаторов и заканчивая аккумуляторами и сенсорами [7—11]. Углеродные нанотрубки, модифицированные оксидом кобальта, в этом отношении не являются исключением. В работе [12] исследовалась сенсорная активность композита «одностенные УНТ—оксид кобальта» в отношении метанола. Композит получали электродуговым методом с использованием графитовых электродов с внедренной кобальтовой проволокой. Наилучшие сенсорные свойства в отношении метанола показал образец, полученный при проведении дугового разряда в течение 15 мин и последующем выдерживании образца при температуре 500 °C в течение 2 ч. Авторы отмечают низкий порог обнаружения метанола (21—35 ppm при 300 °C) и хорошую селективность сенсорного устройства, сконструированного на основе рассматриваемого наноматериала. В работе [13] авторы предлагают модифицировать углеродное волокно с помощью УНТ/Co₃O₄ для использования полученного композита в качестве анода в аккумуляторных батареях, в т. ч. для улучшения их емкостных свойств. Возможно применение тройного композита WSe₂@УНТ/Co₃O₄ в качестве высокоэффективного радиопоглощающего материала [14].

Все вышесказанное обуславливает актуальность исследования механизмов поверхностного модифицирования УНТ оксидом кобальта. Цель работы — исследование процесса адсорбции оксида кобальта Co₃O₄ на поверхности УНТ типа «кресло» и электронных свойств получаемых композитов УНТ(6,6)/Co₃O₄.

Материалы и методы

Квантово-химическое моделирование проводилось в рамках теории функционала плотности на уровне теории B3LYP/3–21G с использованием процедуры SCF = XQC. Теория функционала плотности является одним из наиболее широко распространенных и достоверных методов, используемых для исследования физико-химических свойств материалов [15]. В его основе лежит уравнение Кона—Шэма. Определим вид функционала для средней энергии $E[n]$:

$$\begin{aligned} E[n] &= \left\langle \Psi[n] \left| \left(\hat{T} + \hat{U} + \hat{V}_{\text{ext}} \right) \right| \Psi[n] \right\rangle = T + U + V_{\text{ext}} = \\ &= T_S + V_H + V_{\text{ext}} + (T - T_S + U - V_H), \end{aligned}$$

где T — кинетическая энергия взаимодействующих частиц; U — точная энергия кулоновского взаимодействия; V_{ext} — средняя энергия частиц во внешнем поле; T_S — кинетическая энергия свободных частиц; V_H — энергия Хартри.

Последний член в данном выражении отвечает за вклад обменно-корреляционной энергии

$$V_{XC} = (T - T_S + U - V_H).$$

В это выражение входят четыре члена, попарная разность которых в сумме дает указанное значение энергии. Первая разность — между кинетическими энергиями взаимодействующих и свободных частиц, а вторая — между энергиями кулоновского взаимодействия и Хартри.

Для большей определенности можно переписать функционал Кона—Шэма с указанием функциональной зависимости членов перед переходом к конкретным вычислениям

$$E_{KS}[n] = T_S[n] + V_H[n] + V_{\text{ext}}[n] + V_{XC}[n].$$

Для проведения варьирования зададим соответствующие соотношения

$$\begin{aligned} \frac{\delta E_{KS}}{\delta \Psi_{i\sigma}(r)} &= \\ = \frac{\delta T_S}{\delta \Psi_{i\sigma}(r)} + \left[\frac{\delta V_H}{\delta n(r)} + \frac{\delta V_{\text{ext}}}{\delta n(r)} + \frac{\delta V_{XC}}{\delta n(r)} \right] \frac{\delta n(r)}{\delta \Psi_{i\sigma}(r)} &= 0; \\ \frac{\delta T_S}{\delta \Psi_{i\sigma}(r)} &= -\frac{1}{2} \nabla^2 \Psi_{i\sigma}(r). \end{aligned}$$

Введение множителя Лагранжа (обозначаемого ниже $\epsilon_{i\sigma}$) задает условие нормировки. Учитывая все проведенные выше операции, можно записать уравнение Кона—Шэма:

$$-\frac{1}{2} \nabla^2 \Psi_{i\sigma}(r) + v_{KS}(r) \Psi_{i\sigma}(r) = \epsilon_{i\sigma} \Psi_{i\sigma}(r).$$

Это уравнение совпадает по виду с одночастичным уравнением Шредингера, описывающим поведение частицы в самосогласованном потенциале, задаваемом выражением

$$v_{KS}(r) = v_{\text{ext}}(r) + v_H(r) + v_{XC}(r),$$

$$v_H(r) = \int dr' \frac{n(r')}{|r - r'|};$$

$$v_{XC}(r) = \frac{\delta V_{XC}}{\delta n(r)};$$

$$n(r) = \sum_{i\sigma} |\Psi_{i\sigma}(r)|^2,$$

где $v_{KS}(r)$ — потенциал Кона—Шэма; $v_{\text{ext}}(r)$ — внешний потенциал, действующий на систему; $v_H(r)$ — эффективный одночастичный потенциал; $v_{XC}(r)$ — обменно-корреляционный потенциал.

Для исследования была выбрана УНТ с индексами хиральности (6,6). Геометрическая струк-

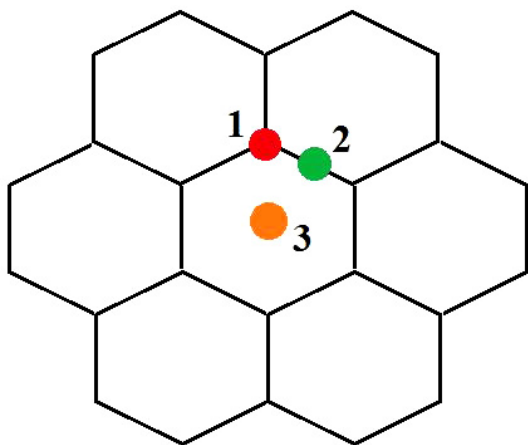


Рис. 1. Рассматриваемые варианты расположения одного из атомов кобальта Co_3O_4 над поверхностью УНТ(6,6)
Fig. 1. The considered variants of the arrangement of one of the cobalt atoms Co_3O_4 over the surface of CNT(6,6)

тура УНТ представлялась в виде молекулярного кластера. Длина кластера выбиралась такой, чтобы при нахождении адсорбционного центра приблизительно посередине УНТ можно было исключить влияние граничных эффектов. Для компенсации оборванных связей на границах УНТ ее концы замыкались псевдоатомами водорода. Приближение Co_3O_4 проводилось вдоль нормали к поверхности УНТ в трех положениях (рис. 1): один из атомов кобальта оксида располагался: 1) над атомом углерода; 2) над центром связи углерод—углерод; 3) над центром гексагона.

Расчет атомных зарядов производился по схеме Малликена [16]. Ширина запрещенной зоны ΔE_g определялась как разность между энергией нижней вакантной молекулярной орбитали E_{LUMO} и энергией верхней заполненной молекулярной орбитали E_{HOMO} :

$$\Delta E_g = E_{\text{LUMO}} - E_{\text{HOMO}}.$$

Причем, поскольку имело место вырождение состояний по спину, расчет производился отдельно с использованием значений энергии орбиталей, соответствующих состояниям «спин вверх» (α -орбитали) и состояниям «спин вниз» (β -орбитали).

Результаты и их обсуждение

На основе проведенного квантово-химического моделирования были построены профили поверхности потенциальной энергии взаимодействия для каждого положения адсорбции (рис. 2). Наличие для каждого случая минимума свидетельствует об осуществлении взаимодействия. Расстояние адсорбции r_a составляет 0,19 нм для положений адсорбции над атомом углерода и центром связи углерод—углерод, и 0,20 нм для положения адсорб-

ции над центром гексагона. Энергия адсорбции E_a максимальна (глубина минимума на профиле поверхности потенциальной энергии, соответственно, наибольшая) при адсорбции над центром связи углерод—углерод и составляет 4,44 эВ, соответственно, это положение из всех рассмотренных является наиболее энергетически выгодным. Для положения адсорбции над атомом углерода данный показатель составляет 4,31 эВ, над центром гексагона — 4,18 эВ. Энергии и расстояния адсорбции указывают на взаимодействие по механизму химической адсорбции.

Геометрия конечных структур представлена на рис. 3.

Рассмотрим далее электронные свойства композита УНТ(6,6)/ Co_3O_4 . Было установлено, что ширина запрещенной зоны уменьшается по сравнению с исходной УНТ при присоединении оксида кобальта в любое из положений адсорбции (табл. 1). Это связано с двумя наблюдаемыми процессами: повышением потолка валентной зоны (E_{HOMO}) и понижением дна зоны проводимости (E_{LUMO}). В большинстве рассмотренных случаев наибольший вклад в уменьшение ширины запрещенной зоны вносится повышением потолка валентной зоны. Только при адсорбции в положение над центром связи углерод—углерод при рассмотрении β -орбиталей можно говорить о большем по значению вкладе понижения дна зоны проводимости по сравнению с повышением потолка валентной зоны: E_{LUMO} уменьшается на 0,107 эВ, в то время как E_{HOMO} увеличивается на 0,041 эВ. Также отметим, что положение потолка валентной зоны в композитах УНТ(6,6)/ Co_3O_4 варьируется в достаточно широком диапазоне значений как в зависимости от положения адсорбции, так и от рассматриваемых спиновых состояний при одном

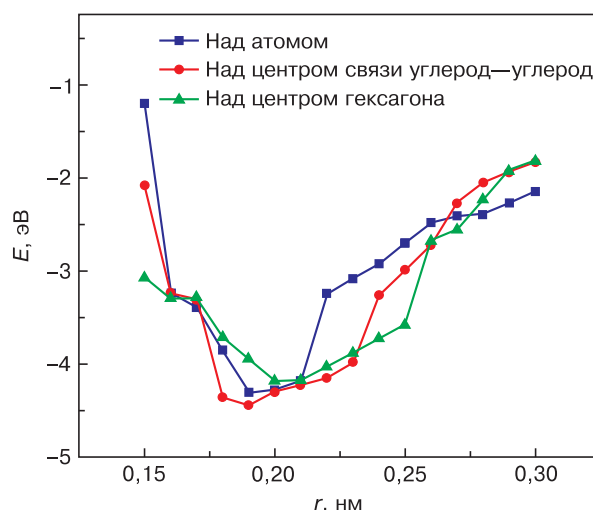


Рис. 2. Профили поверхности потенциальной энергии взаимодействия УНТ(6,6) и Co_3O_4 при разных положениях адсорбции

Fig. 2. Potential energy surfaces of interaction of CNT(6,6) and Co_3O_4 at different adsorption positions

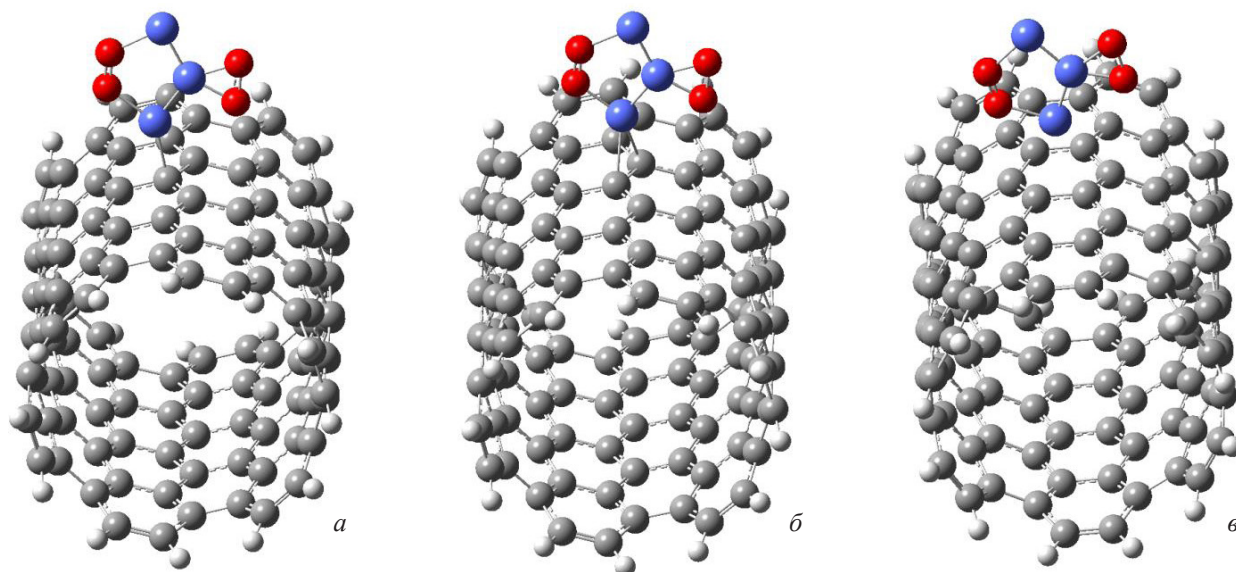


Рис. 3. Полученные композиты УНТ/ Co_3O_4 с положениями адсорбции над атомом углерода (а), над центром связи углерод—углерод (б), над центром гексагона (в)

Fig. 3. Obtained CNT/ Co_3O_4 composites with adsorption positions above the carbon atom (a), above the carbon–carbon bond center (б), above the hexagon center (в)

Таблица 1 / Table 1

Электронные свойства композитов Electronic properties of composites

Структура	E_{LUMO} , эВ	E_{HOMO} , эВ	ΔE_g , эВ
УНТ(6,6)	–2,818	–4,710	1,892
УНТ(6,6)/ Co_3O_4 (над атомом углерода)	–2,943 (α)	–4,438 (α)	1,495 (α)
	–2,946 (β)	–4,450 (β)	1,504 (β)
УНТ(6,6)/ Co_3O_4 (над центром связи углерод—углерод)	–2,975 (α)	–4,512 (α)	1,537 (α)
	–2,925 (β)	–4,669 (β)	1,744 (β)
УНТ(6,6)/ Co_3O_4 (над центром гексагона)	–2,958 (α)	–4,350 (α)	1,392 (α)
	–2,956 (β)	–4,163 (β)	1,207 (β)

Обозначения: E_{LUMO} — энергия нижней вакантной молекулярной орбитали; E_{HOMO} — энергия верхней заполненной молекулярной орбитали; ΔE_g — ширина запрещенной зоны чистой УНТ(6,6) и композитов УНТ(6,6)/ Co_3O_4 с различными положениями адсорбции. В скобках указан тип орбиталей (α или β), используемых при расчете.

положении адсорбции. Подобного обстоятельства не наблюдается для положения дна зоны проводимости, которое сравнительно слабо меняется при различных положениях адсорбции и спиновых состояниях.

Анализ зарядового распределения показывает, что электронная плотность смещается с оксида кобальта на атомы углерода УНТ. В изолированном состоянии Co_3O_4 заряд на атоме кобальта, которым впоследствии производилось приближение к поверхности УНТ, составляет 0,94; в изолированном состоянии УНТ заряды на атомах углерода можно считать близкими к нулю. При положении адсорбции над атомом углерода заряд на атоме кобальта становится равным 2,01; на атоме углерода наблю-

дается отрицательный заряд равный –0,67. При положении адсорбции над центром связи углерод—углерод заряд на атоме кобальта составляет 2,12, в то время как близлежащие атомы углерода приобретают заряды –0,41 и –0,34. При положении адсорбции над центром гексагона атом кобальта приобретает заряд 2,14. Рассмотрим заряды, которые приобретают атомы углерода, образующие гексагон. Одна пара атомов углерода по диагонали приобретает заряды –0,18 и –0,15, другая — заряды –0,18 и –0,16 и третья — заряды 0,05 и 0,01. Можно предположить, что наличие на двух атомах углерода достаточно малых положительных зарядов связано с пространственным расположением атомов кислорода.

Заключение

В ходе работы было проведено квантово-химическое моделирование процесса поверхностного модифицирования УНТ(6,6) оксидом кобальта Co_3O_4 . Были установлены параметры адсорбции (энергия и расстояние адсорбции) для положений адсорбции, при которых атом кобальта оксида располагался над атомом углерода, центром связи углерод–углерод или над центром гексагона УНТ. Также проанализированы закономерности изменения ширины запрещенной зоны и смещения электронной плотности.

Было установлено, что наиболее энергетически выгодным положением адсорбции является положение над центром связи углерод–углерод, наименее выгодным — над центром гексагона. Во всех случаях имела место химическая адсорбция.

Присоединение Co_3O_4 к поверхности УНТ приводило к уменьшению ширины запрещенной зоны на величину от 7,8 до 36,2 % по сравнению с исходной структурой в зависимости от положения адсорбции, что связано как с повышением потолка валентной зоны, так и с понижением дна зоны проводимости, причем первый процесс в большинстве случаев вносил более значительный вклад. Также было установлено, что в результате адсорбции происходит перераспределение электронной плотности и на поверхности УНТ возникают дополнительные заряды. Атом кобальта оксида приобретает положительный заряд, а близлежащие к нему атомы углерода на поверхности УНТ — отрицательные.

Полученные результаты могут быть применены при разработке устройств нанoeлектроники, а также газовых сенсоров и биосенсоров.

Библиографический список / References

1. Liu B., Wu F., Gui H., Zheng M., Zhou C. Chirality-controlled synthesis and applications of single-wall carbon nanotubes. *ACS Nano*. 2017; 11(1): 31—53. <https://doi.org/10.1021/acsnano.6b06900>
2. Su W., Li X., Li L., Yang D., Wang F., Wei X., Zhou W., Kataura H., Xie S., Liu H. Chirality-dependent electrical transport properties of carbon nanotubes obtained by experimental measurement. *Nature Communications*. 2023; 14(1): 1672. <https://doi.org/10.1038/s41467-023-37443-7>
3. Tang D.-M., Cretu O., Ishihara S., Zheng Y., Otsuka K., Xiang R., Maruyama S., Cheng H.M., Liu C., Golberg D. Chirality engineering for carbon nanotube electronics. *Nature Reviews Electrical Engineering*. 2024; 1(3): 149—162. <https://doi.org/10.1038/s44287-023-00011-8>
4. Riaz A., Alam A., Selvasundaram P.B., Dehm S., Hennrich F., Kappes M.M., Krupke R. Near-infrared photoresponse of waveguide-integrated carbon nanotube-silicon junctions. *Advanced Electronic Materials*. 2019; 5(1): 1800265. <https://doi.org/10.1002/aelm.201800265>
5. Dubey R., Dutta D., Sarkar A., Chattopadhyay P. Functionalized carbon nanotubes: Synthesis, properties and applications in water purification, drug delivery, and material and biomedical sciences. *Nanoscale Advances*. 2021; 3(20): 5722—5744. <https://doi.org/10.1039/D1NA00293G>
6. Lakhdar S.S., Ouslimani N., Bousba D., Huynen I., Danlée Y., Aksas H. Carbon nanotubes (CNTs) from synthesis to functionalized (CNTs) using conventional and new chemical approaches. *Journal of Nanomaterials*. 2021; 2021(1): 4972770. <https://doi.org/10.1155/2021/4972770>
7. Devi S., Suman, Chahal S., Singh S., Ankita, Kumar P., Kumar S., Kumar A., Kumar V. Magnetic $\text{Fe}_3\text{O}_3/\text{CNT}$ nanocomposites: characterization and photocatalytic application towards the degradation of Rose Bengal dye. *Ceramics International*. 2023; 49(12): 20071—20079. <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2023.03.130>
8. Akhter P., Ali F., Ali A., Hussain M. TiO_2 decorated CNTs nanocomposite for efficient photocatalytic degradation of methylene blue. *Diamond and Related Materials*. 2024; 141: 110702. <https://doi.org/10.1016/j.diamond.2023.110702>
9. Tan C., Luo X., He H., He S., Ren R., Xiao Y., Fu Y., Huang S., Cai Y., Yang Y. Facile fabrication of carbon nanotubes/zinc oxide decorated poly (vinyl alcohol) electrospun nanofiber membrane and its photocatalytic performance. *Journal of Applied Polymer Science*. 2024; 141(43): e56132. <https://doi.org/10.1002/app.56132>
10. Eswaramoorthy N., Rajendran S., Kumar B. A., Nallusamy S., Rengasamy M., Selvaraj Y., Sangaraju S., Krishnan T., Kumaresan G., Rajaram K. Influence of ZnO/MWCNTs based hybrid electrodes for boosting the performance of photovoltaic and supercapacitor devices. *Materials Chemistry and Physics*. 2024; 316(12): 129049. <https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2024.129049>
11. Mallakpour S., Khadem E. Carbon nanotube-metal oxide nanocomposites: Fabrication, properties and applications. *Chemical Engineering Journal*. 2016; 302: 344—367. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2016.05.038>
12. Chinh N.D., Hung N.M., Majumder S., Kim C., Kim D. Hole-supply-rate-controlled methanol-gas-sensing reaction over p-type Co_3O_4 /single-walled carbon nanotube hybrid structures. *Sensors and Actuators B: Chemical*. 2021; 326: 128956. <https://doi.org/10.1016/j.snb.2020.128956>
13. Hu Z., Fu Y., Hong Z., Huang Y., Guo W., Yang R., Xu J., Zhou L., Yin S. Composite structural batteries with $\text{Co}_3\text{O}_4/\text{CNT}$ modified carbon fibers as anode: Computational insights on the interfacial behavior. *Composites Science and Technology*. 2021; 201: 108495. <https://doi.org/10.1016/j.compscitech.2020.108495>
14. Han Y., Wang Q., Zheng Q., Cao M., Yuan J., Li L. Ternary $\text{WSe}_2@ \text{CNTs}/\text{Co}_3\text{O}_4$ nanocomposites for highly efficient multi-band microwave absorption. *Materials Letters*. 2022; 325: 132837. <https://doi.org/10.1016/j.matlet.2022.132837>
15. Neugebauer J., Hickel T. Density functional theory in materials science. *Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science*. 2013; 3(5): 438—448. <https://doi.org/10.1002/wcms.1125>
16. Davidson E.R., Clark A.E. A viewpoint on population analyses. *International Journal of Quantum Chemistry*. 2022; 122(8): e26860. <https://doi.org/10.1002/qua.26860>

Информация об авторах / Information about the authors

Эль Занин Антон Раджабович — студент, лаборант кафедры судебной экспертизы и физического материаловедения, Волгоградский государственный университет, Университетский просп., д. 100, Волгоград, 400062, Российская Федерация; e-mail: aelzanin@volsu.ru

Anton R. El Zanin — Student, Laboratory Assistant of the Department of Forensic Science and Physical Materials Science, Volgograd State University, 100 Universitetsky Ave., Volgograd 400062, Russian Federation; e-mail: aelzanin@volsu.ru

Борознин Сергей Владимирович — доктор физ.-мат. наук, доцент, зав. кафедрой судебной экспертизы и физического материаловедения, Волгоградский государственный университет, Университетский просп., д. 100, Волгоград, 400062, Российская Федерация; ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-0110-2271>; e-mail: boroznin@volsu.ru

Sergey V. Boroznin — Dr. Sci. (Phys.-Math.), Associate Professor, Head of the Department of Forensic Science and Physical Materials Science, Volgograd State University, 100 Universitetsky Ave., Volgograd 400062, Russian Federation; ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-0110-2271>; e-mail: boroznin@volsu.ru

Поступила в редакцию 25.11.2024; поступила после доработки 12.12.2024; принята к публикации 18.12.2024
Received 25 November 2024; Revised 12 December 2024; Accepted 18 December 2024
