

Molecular dynamics simulation of adsorption of toxic gas molecules CO, CO₂ and NH₃ by Ti₂C layer and nanotube

Maryam Malmir*

Department of Physics, Faculty of Basic Science, Lorestan University, Khorramabad, Lorestan, Iran

Received: 06.01.2023 Final revision: 25.02.2023 Accepted: 02.05.2023

Doi: [10.22055/jrmbms.2023.18299](https://doi.org/10.22055/jrmbms.2023.18299)

Abstract

In this study, the LAMMPS molecular dynamics calculation code is used for the first time to simulate the absorption of toxic gas molecules, CO, CO₂ and NH₃ by Ti₂C monolayer and nanotube, classified as Maxene materials. The results show that the Ti₂C nanotube exhibits higher sensitivity to the three toxic gases than its layer. This nanotube has the highest selectivity and sensitivity for absorbing of CO molecules. The results demonstrated that the dimension of the structure has an essential effect on the amount of sensitivity and selectivity of the structure as a gas sensor. The results of this study will be helpful for experimental and computational studies in the field of gas sensors at room temperature.

Keywords: Molecular dynamics, Gas sensors, CO gas, CO₂ gas, NH₃ gas, Ti₂C layer, Ti₂C nanotube

* Corresponding Author: malmir.m@lu.ac.ir

شبیه‌سازی دینامیک مولکولی جذب مولکول‌های گازهای سمی CO، CO₂و NH₃ توسط لایه و نانولوله Ti₂C

مریم مالمیر*

گروه آموزشی فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه لرستان، لرستان، خرم آباد، ایران

دریافت: ۱۴۰۱/۱۰/۱۶ ویرایش نهائی: ۱۴۰۱/۱۲/۰۶ پذیرش: ۱۴۰۲/۰۲/۱۸

Doi: [10.22055/jrmbms.2023.18299](https://doi.org/10.22055/jrmbms.2023.18299)

چکیده

در این مطالعه، با استفاده از کد محاسباتی دینامیک مولکولی LAMMPS به شبیه‌سازی جذب مولکول‌های گازهای سمی CO، CO₂ و NH₃ توسط لایه و نانولوله Ti₂C، که در دسته مواد مکسین‌ها قرار می‌گیرند، پرداخته شد. نتایج نشان داد که نانولوله Ti₂C حساسیت بالاتری به هر سه نوع گاز سمی، نسبت به لایه آن، از خود نشان می‌دهد، همچنین این نانولوله، بالاترین میزان انتخاب پذیری و حساسیت را به جذب مولکول‌های گاز CO نسبت به بقیه گازهای مورد مطالعه از خود نشان می‌دهد. بنابراین، ابعاد ساختار تأثیر اساسی بر میزان حساسیت و گزینش پذیری ساختار به‌عنوان حسگر گاز دارد. نتایج این مطالعه برای مطالعات تجربی و محاسباتی در زمینه حسگرهای گازی در دمای محیط مفید خواهد بود.

کلیدواژگان: شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، حسگرهای گازی، گاز CO، گاز CO₂، گاز NH₃، لایه Ti₂C، نانولوله Ti₂C

۱۳ و ۱۴ (Al, Si, P) و X (C یا N) می‌باشد. به‌دلیل

پیوند ضعیف اتم‌های لایه A، با اتم‌های M (مثلاً آلومینیوم‌ها با تیتانیوم‌ها)، حذف لایه A به وسیله محلول‌هایی حاوی یون‌های فلوراید به‌راحتی صورت می‌گیرد و طی آن مکسین‌ها با گروه‌های عاملی مختلف از جمله اکسیژن، هیدروکسیل، فلئور و کلر ایجاد می‌شوند که این خود منجر به آبدوستی سطح آنها می‌شود.

در سال ۲۰۱۱، گوگوتسی و همکاران یک نانوماریچ Ti₂C با قطری کمتر از ۲۰ نانومتر را به‌طور تجربی

مقدمه

از زمان کشف مکسین‌ها^۱ توسط گوگوتسی^۲ و همکاران در سال ۲۰۱۱ [۱]، این مواد دو بعدی جدید به‌دلیل ساختار گرافن مانندشان، رسانندگی فلزی، انعطاف‌پذیری مکانیکی، گاف نواری قابل تنظیم و آبدوستی قوی [۲]، توجه بسیاری را به‌خود جلب کرده‌اند. مکسین‌ها، کربدها و نیتریدهای فلزات واسطه با فرمول M_{n+1}AX_n (n= 1, 2, 3) هستند که با حذف لایه A از MAX فازها به‌دست می‌آیند. در این فرمول M یک فلز واسطه (Sc, Ti, V)، A یک عنصر گروه

* نویسنده مسئول: malmir.m@lu.ac.ir

¹ MXenes² Gogotsi

در این مطالعه به بررسی برهم‌کنش گازهای CO، CO₂ و NH₃ با لایه و نانولوله Ti₂C می‌پردازیم، و نتایج این دو را با هم مقایسه می‌کنیم.

روش محاسبات

در این مطالعه، از بسته نرم‌افزاری دینامیک مولکولی کلاسیکی LAMMPS [۱۰] برای شبیه‌سازی خواص و فرایندهای جذب مولکول‌های گاز CO، CO₂ و NH₃ روی تک‌لایه و نانولوله Ti₂C استفاده شد. شبیه‌سازی در هنگرد کانونیکال، NVT، با گام زمانی ۰٫۱ fs در دمای محیط، ۲۹۸ K، انجام شد. از ترموستات نوزهووفر^۴ برای ثابت نگه داشتن دما در طول شبیه‌سازی استفاده شد. همچنین انتگرال‌گیری از معادلات حرکت اتمی توسط الگوریتم ورت-سرعتی صورت گرفته است. شرایط مرزی دوره‌ای در همه ابعاد جعبه اعمال شد و زمان کل شبیه‌سازی ۳۰۰ ps و ۵۰۰ ps به ترتیب برای لایه و نانولوله در نظر گرفته شد. جعبه شبیه‌سازی شامل لایه یا نانولوله Ti₂C در مرکز است که توسط مولکول‌های گاز احاطه شده است. ثابت شبکه لایه ۳٫۰۱ Å بوده و ابعاد لایه ۱۷ Å × ۲۷ Å در نظر گرفته شد. ثابت شبکه نانولوله در راستای محور آن ۳٫۰۶ Å است. قطر خارجی، قطر داخلی و طول نانولوله به ترتیب ۲۲٫۴۲ Å، ۱۷٫۸۷ Å و ۲۹ Å می‌باشد. برای جلوگیری از برهم‌کنش سامانه‌ها با تصاویر آینه‌ای خود، یک خلاء حدود ۱۵ Å در راستای Z لایه و راستای X و Y نانولوله در نظر گرفته شد. جدول ۱، حجم جعبه‌های شبیه‌سازی و تعداد مولکول‌های هر گاز در جعبه را نشان می‌دهد. انرژی بستگی سامانه‌ها در برهم‌کنش با مولکول‌های گاز توسط رابطه^۱ محاسبه و در جدول ۱ ارائه شده‌اند.

استخراج کردند و این بدان معنا بود که این نوع مکسین می‌تواند به شکل لوله دربیاید [۱].
حسگر گازی وسیله‌ای است که گازها را شناسایی و مقدار آنها را اندازه‌گیری می‌کند. سنجش (حسگر) گازی برای محافظت از انسان در برابر گازهای بالقوه خطرناک مانند گازهای قابل احتراق و سمی ضروری است [۳،۴]. اولین بار Ti₃C₂T_x (T گروه‌های عاملی مثل اکسیژن، هیدروکسیل و فلئور است) توسط گروه لی^۱ و همکاران به عنوان جزئی از الکتروود در حسگر گازی مورد استفاده قرار گرفت، حسگر رفتار نیم‌رسانای نوع P را از خود نشان داد و مقاومت آن بعد از جذب گازهای آمونیاک، استون، متانول و اتانول افزایش یافت [۵]. بسیاری از محققان ترکیب Ti₃C₂T_x را با دیگر مواد به عنوان حسگر بررسی کردند [۶]، از جمله لی و همکاران ترکیب اکسید گرافن کاهش یافته (rGO) را با Ti₃C₂T_x به عنوان حسگر گازی در دمای اتاق به کار بردند، این ترکیب خواص قابل توجه مکانیکی و الکتریکی داشت و پاسخ خیلی بالایی به گاز NH₃ نشان داد [۷].

اولین مطالعه تئوری توسط یو^۲ و همکاران [۸] انجام شد که در آن برهم‌کنش مولکول‌های گاز H₂، CO₂، O₂، CO، NH₃، N₂ و NO₂ با نیم‌رسانای Ti₂CO₂ بررسی شد و نشان داده شد که از میان این گازها NH₃ با انتقال بار بالایی، ۰٫۱۷۴ e، و تشکیل پیوند Ti-N به صورت شیمیایی جذب سطح لایه Ti₂CO₂ می‌شود. ونگ^۳ و همکاران برهم‌کنش گازهای مختلف با لایه Hf₂CO₂ را بررسی کردند و نشان دادند که جذب NH₃ در لایه‌ای که قبلاً مولکول‌های H₂O، CO₂ و SO₂ را جذب کرده، به دلیل افزایش پیوندهای هیدروژنی، افزایش می‌یابد [۹].

⁴ Nose-Hoover

¹ Lee

² Yu

³ Wang

پارامترهای به‌کار رفته میدان نیرو نام دارد. از میدان نیروی MEAM^۱ برای توصیف برهم‌کنش‌های غیرپیوندی اتم‌های تیتانیوم و کربن و از تابع انرژی پتانسیل پیریکال (PEF)^۲، مجموع پتانسیل‌های دو جسمی لناردجونز و پتانسیل سه جسمی اکسیلرود-تلر^۳، رابطه^۶، برای توصیف برهم‌کنش بین اتم‌های کربن و تیتانیوم تک لایه و نانولوله Ti₂C استفاده شد [۱۳]. از پتانسیل لناردجونز ۶-۱۲ برای توصیف برهم‌کنش واندروالس لایه و نانولوله Ti₂C با مولکول‌های گاز استفاده شد [۱۴]، و مجموع پتانسیل‌های لنارد-جونز و کولنی برای توصیف برهم‌کنش‌های بین مولکول‌های هر گاز استفاده شده است [۱۵-۱۷].

$$E_{band} = \sum_i k_{b,i} (r_i - r_{0,i})^2 \quad ۲$$

$$E_{angle} = \sum_i k_{\theta,i} (\theta_i - \theta_{0,i})^2 \quad ۳$$

$$E_{nb} = \sum_i \sum_{j \neq i} \left[\frac{q_i q_j}{4\pi \epsilon_0 r_{ij}} + 4\epsilon_{ij} \left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right] \quad ۴$$

که k_{θ} و k_b به ترتیب ثابت‌های نیروی پیوند و زاویه $\theta_{0,i}$ و $r_{0,i}$ به ترتیب فاصله پیوند و زاویه پیوند در تعادل، σ_{ij} فاصله‌ای است که انرژی پتانسیل صفر می‌شود، ϵ_{ij} عمق منحنی پتانسیل، ϵ_0 گذردهی خلاء، r_{ij} فاصله میان بارهای جزئی، q_i و q_j هر جفت اتم است.

برای تعاملات جفت اتم‌ها قوانین ترکیب لورنتس-برتلوت^۴ استفاده شد، که با معادله‌های ۵ بیان می‌شوند [۱۸]:

$$\epsilon_{ij} = \sqrt{\epsilon_i \epsilon_j}, \quad \sigma_{ij} = \frac{\sigma_i + \sigma_j}{2} \quad ۵$$

$$E_b = E_{L/T@Gas} - E_{L/T} - E_{Gas} \quad ۱$$

که $E_{L/T@Gas}$ انرژی کل سامانه لایه یا نانولوله Ti₂C و مولکول‌های گاز، $E_{L/T}$ انرژی کل لایه یا نانولوله و E_{Gas} انرژی مولکول‌های گاز به تنهایی و بدون حضور لایه یا نانولوله است. مقادیر منفی انرژی‌های بستگی نشان می‌دهد که فرایند جذب مولکول‌های گاز از نظر انرژی مطلوب است و مولکول‌های گازهای سمی به لایه و نانولوله Ti₂C مقید هستند.

جدول ۱. تعداد مولکول‌های هر گاز (N) مورد مطالعه در جعبه شبیه‌سازی (شامل نانولوله) با حجم ۱۵۰×۱۰^۳ مکعب آنگستروم، box1 و جعبه شبیه‌سازی (شامل تک لایه) به حجم ۸۹×۱۰^۳ مکعب آنگستروم، box2 و انرژی بستگی (eV) لایه و نانولوله با گازهای مختلف (E_b-L/T) و مقایسه با مطالعات قبلی.

	CO	CO ₂	NH ₃
Box 1-N	۳۲۴	۲۰۶	۵۳۳
Box 2-N	۱۹۳	۱۲۳	۳۱۷
E _b -L	-۱۱۸٫۱۴	-۳۱٫۱۳	-۹۷٫۱۱
E _b -T	-۷۵٫۹۸	-۴۹۱٫۶۲	-۱۳۴٫۵۵
B12N12 nanoparticle REF [11]	-۰٫۱۵	-۰٫۰۳	-۱٫۵
Graphene REF [12]	-۰٫۱۱۵	-۰٫۱۲۵	-۰٫۲۴۴
N-Graphene REF [12]	-۰٫۱۴۵	-۰٫۱۴۶	-۰٫۳۰۴

برهم‌کنش‌های سامانه مولکولی به‌وسیله برهم‌کنش‌های درون مولکولی مانند کشش پیوند با رابطه^۲، خمش پیوند با رابطه^۳، و برهم‌کنش‌های بین مولکولی مثل برهم‌کنش‌های واندروالس و برهم‌کنش‌های کولنی میان دو ذره باردار یا رابطه^۴ توصیف شده‌اند. مجموعه

^۴ Lorentz-Berthelot

^۱ Modified embedded-atom method

^۲ Pirical potential energy function

^۳ Axilrod-Teller

شکل ۲ و ۳، برهم‌کنش گازهای CO، CO₂ و NH₃ را به ترتیب با تک لایه و نانولوله Ti₂C نشان می‌دهد، که الف، پ و ج آنها، سامانه‌ها را در آغاز شبیه‌سازی، به ترتیب در برهم‌کنش لایه (نانولوله) با گاز CO₂، CO و NH₃ را نشان می‌دهد، ب، ت و ج، این سامانه‌ها را در پایان شبیه‌سازی نشان می‌دهند. جذب مولکول‌های این گازها توسط لایه و نانولوله Ti₂C کاملاً در این تصاویر مشهود است. شکل ۱، نشان می‌دهد که بعد از حدود ۱۰۰ ps، سامانه‌ها به تعادل می‌رسند و مولکول‌های گازهای مورد مطالعه حول لایه و نانولوله توزیع می‌شوند و بعضی از آنها جذب سطح لایه یا جذب داخل، دیواره داخلی یا دیواره خارجی نانولوله می‌شوند. همان‌طور که در این شکل‌ها مشهود است، مقطع نانولوله Ti₂C تحت برهم‌کنش با هر سه نوع گاز مورد بررسی، از حالت دایره‌ای خارج می‌شود اما دچار شکستگی نشده و نانولوله همچنان پایدار است (مقادیر منفی در جدول شماره ۱ گویای این پایداری از نظر انرژی است). درصد وزنی جذب کلی مولکول‌های گاز توسط لایه و نانولوله Ti₂C با رابطه ۷ محاسبه شد:

$$N = \frac{N_g \times W_g}{(N_n \times W_n) + (N_c \times W_c)} \times 100 \quad 7$$

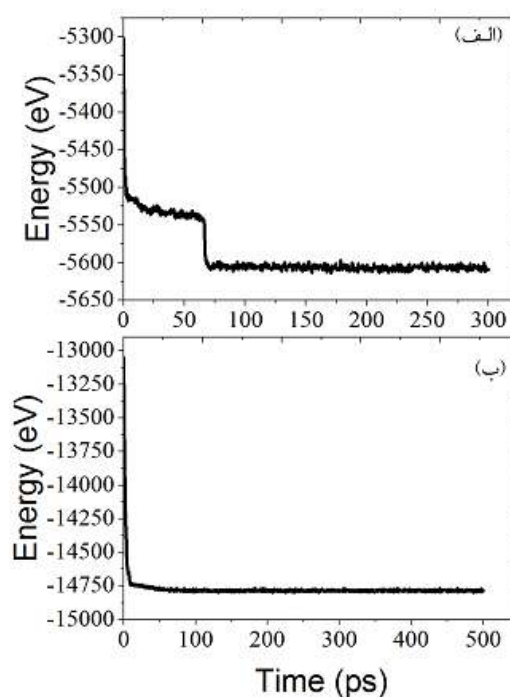
و نتایج در جدول ۲ ارائه شده است، که در آن Nها تعداد اتم‌های گازها یا تعداد اتم‌های تشکیل دهنده لایه (نانولوله)، شامل ۱۹۶ (۴۸۰) اتم تیتانیوم و ۹۸ (۲۴۰) اتم کربن است، و Wها وزن اتمی اتم‌های کربن یا تیتانیوم و یا وزن مولکولی هر گاز مورد مطالعه است. داده‌های جدول ۲ نشان می‌دهد که نانولوله Ti₂C نسبت به لایه Ti₂C، حساسیت بیشتری به هر سه نوع گاز از خود نشان می‌دهد و انتخاب پذیری و همچنین حساسیت آن به مولکول‌های گاز CO بیشتر از بقیه گازهای مورد مطالعه است.

$$W_{ijk} = \frac{z(1 + 3 \cos \theta_i \cos \theta_j \cos \theta_k)}{(r_{ij} r_{ik} r_{jk})^3} \quad 6$$

که r_{ij} ، r_{jk} و r_{ik} فاصله میان جفت اتم‌ها، Z پارامتر سختی سه-جسمی و θ_i ، θ_j و θ_k زوایای میان مثلث‌های شکل گرفته به وسیله r_{ij} و r_{ik} و r_{jk} هستند.

بحث و نتیجه‌گیری

شکل ۱، نوسانات انرژی کل برحسب زمان، به عنوان نمونه برای سامانه لایه و نانولوله Ti₂C در برهم‌کنش با مولکول‌های گاز CO را نشان می‌دهد، این تغییرات در یک دوره طولانی از زمان کمتر از ۰.۲٪ است و این خود نشان‌دهنده رسیدن سامانه به حالت تعادل است. کلیه خواص گزارش شده برای همه سامانه‌ها مربوط به زمان پس از تعادل است. سایر سامانه‌ها هم به همین ترتیب به تعادل رسیده‌اند.



شکل ۱. نوسانات انرژی کل برحسب زمان برای سامانه الف: لایه و ب: نانولوله Ti₂C در برهم‌کنش با مولکول‌های گاز CO.

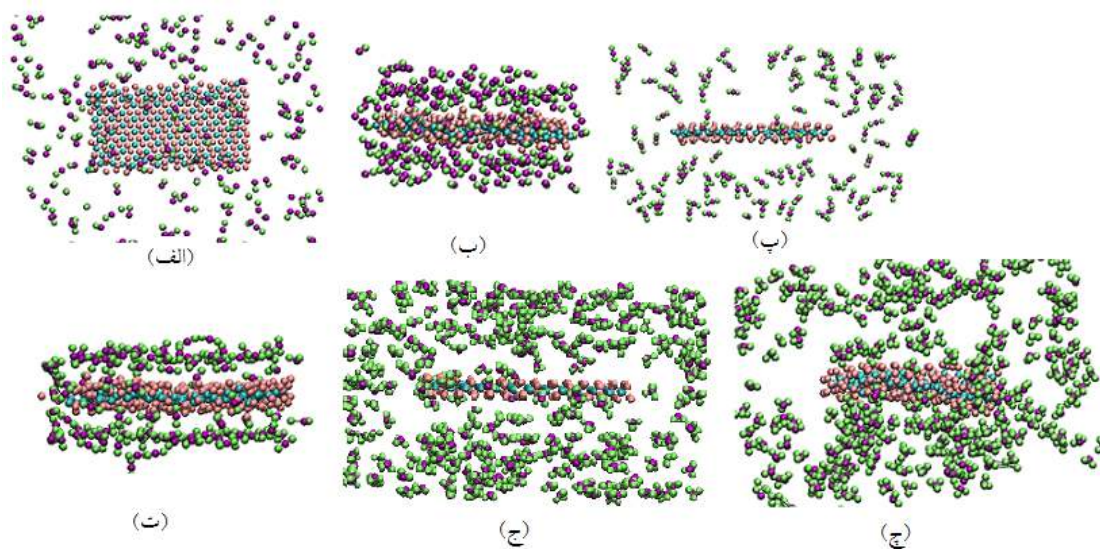
جدول ۲. درصد وزنی جذب کل، N (Wt%)، گازهای مورد بررسی برای لایه (L-Ti₂C) و نانولوله (T-Ti₂C) مورد مطالعه.

	CO	CO ₂	NH ₃
T-Ti ₂ C	۲۲٫۹۶	۲۰٫۲۴	۶٫۱۲
L-Ti ₂ C	۶٫۸۷	۰٫۳۷	۱٫۹۸

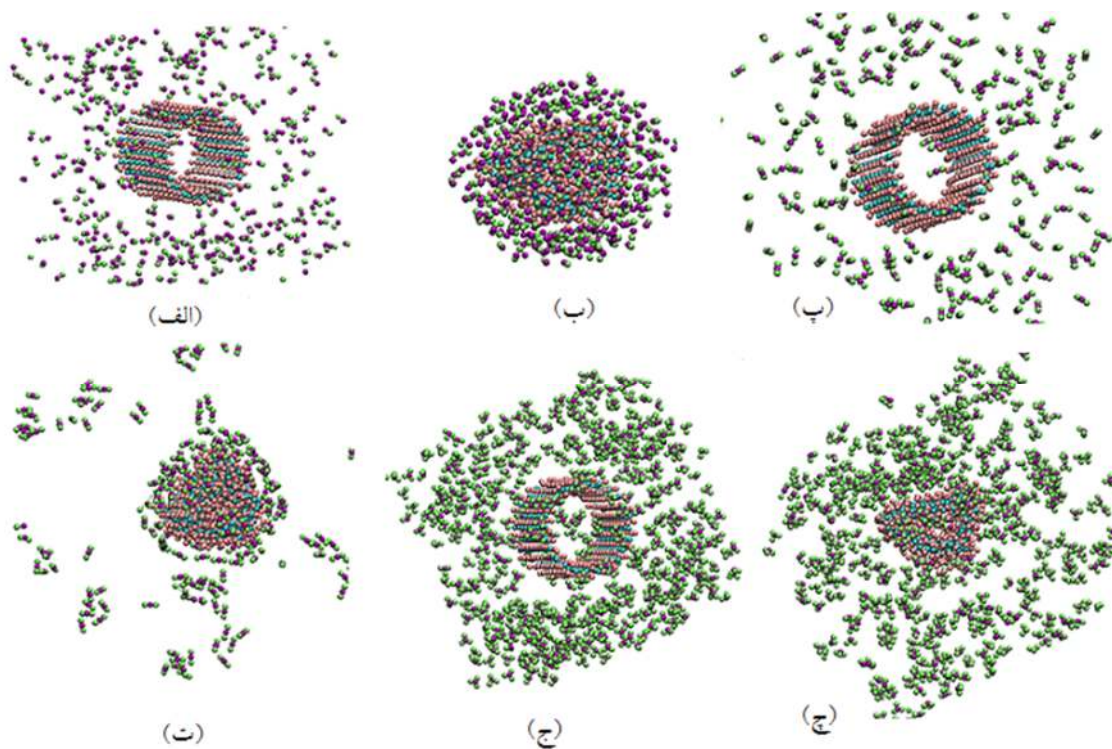
شکل ۴، نمودارهای جذب لحظه‌ای مولکول‌های گازها توسط لایه و نانولوله Ti₂C را نشان می‌دهد (تعداد مولکول‌های گاز جذب شده با گذشت زمان). در هر نمودار، جذب مولکول‌های گاز به صورت شیمیایی (CH)، جذب تا فاصله طول پیوند مولکول‌ها با ساختارها، یا به صورت فیزیکی (PHY)، از فاصله طول پیوند تا حدود چند آنگسترومی از ساختارها، و در نهایت جذب کلی (TOT)، مجموع جذب فیزیکی و شیمیایی، برحسب زمان، برای هر سه نوع گاز CO، CO₂ و NH₃ و برای هر دو ساختار لایه و نانولوله با هم مقایسه شده‌اند. در این نمودارها جذب مولکول‌های

گاز درست در همان زمان‌های اولیه شروع می‌شود و سپس به ماکزیمم مقدار جذب رسیده و از آن به بعد مقدار جذب تغییر چندانی نداشته و ثابت می‌ماند. لایه Ti₂C بیشترین مقدار جذب را برای مولکول‌های گاز CO₂ از خود نشان می‌دهد و همچنین جذب فیزیکی مولکول‌های گازهای CO و NH₃ در این لایه رقابت نزدیکی با هم دارند، در حالی که جذب به صورت فیزیکی مولکول‌های گازهای CO و CO₂ تقریباً در حد جذب به صورت شیمیایی بوده در حالی که جذب فیزیکی مولکول‌های NH₃ بیشتر از جذب به صورت شیمیایی آن در لایه است.

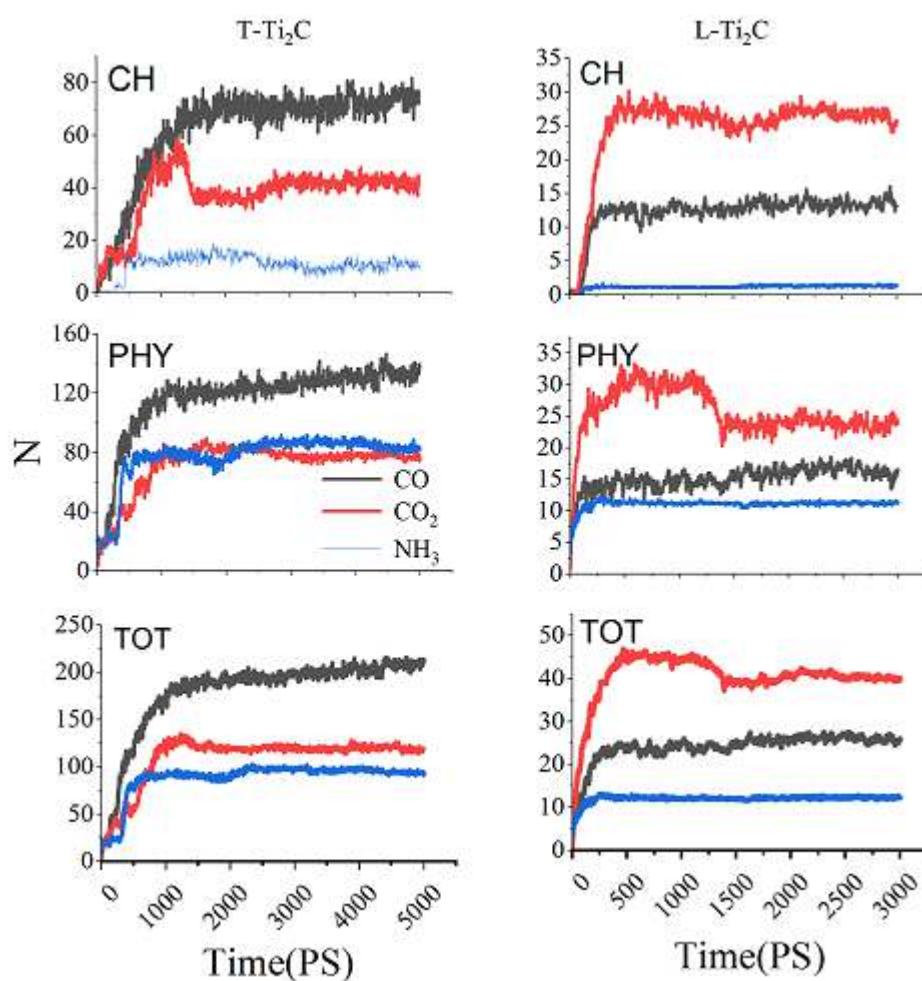
نانولوله Ti₂C بیشترین مقدار جذب را برای گاز CO از خود نشان می‌دهد و همچنین جذب فیزیکی گازهای CO₂ و NH₃ نزدیک به هم با زمان پیش می‌روند. جذب کلی (جذب به صورت شیمیایی و فیزیکی) هر سه نوع گاز در این نانولوله بیشتر از لایه است.



شکل ۲. جذب مولکول‌های گاز الف و ب، CO، پ و ت و CO₂ و ج و چ، NH₃ توسط لایه Ti₂C، به ترتیب در آغاز و پایان شبیه‌سازی.



شکل ۳. جذب مولکول‌های گاز الف و ب، CO، پ و ت و CO₂ و ج و چ، NH₃ توسط نانولوله Ti₂C، به ترتیب در آغاز و پایان شبیه‌سازی.



شکل ۴. جذب مولکول‌های گاز CO، CO₂ و NH₃ به صورت شیمیایی (CH)، فیزیکی (PHY) و جذب کلی (TOT) برحسب تابعی از زمان، توسط لایه و نانولوله Ti₂C.

جذب بالای این مولکول‌های گاز سمی را در ساختارهای لایه و نانولوله Ti₂C نشان می‌دهد. در نتیجه با تغییر بعد ساختار از دو بعد (لایه) به یک بعد (نانولوله)، می‌توان میزان جذب این گازها را بیشتر کرد، این خود تأثیر ابعادی نانو ساختارهای مورد مطالعه بر جذب این گازها در دمای محیط است.

مطالعات قبلی [۱۹] در مورد لایه و نانولوله Ti₂C نشان می‌دهد که نانولوله نسبت به لایه تعداد نوارهای بسیار بیشتری حوالی سطح فرمی دارد و لذا خاصیت فلزی در آن افزایش یافته است. بنابراین نانولوله الکترون‌های در دسترس بیشتری برای برقراری پیوند و جذب مولکول‌های گاز در اختیار خواهد داشت. در مقایسه این تحقیق با مطالعات قبلی [۱۱، ۱۲] می‌توان دریافت که انرژی بستگی ساختارهای مورد مطالعه در این کار نسبت به مولکول‌های گاز CO، CO₂ و NH₃ بسیار بیشتر از مطالعات قبلی است و این خود میزان تقید و

نتیجه‌گیری

در این مطالعه با استفاده از کد محاسباتی دینامیک مولکولی LAMMPS به شبیه‌سازی جذب مولکول‌های گازهای سمی CO، CO₂ و NH₃ توسط لایه و نانولوله Ti₂C، که در دسته مواد مکسین‌ها قرار می‌گیرند، پرداخته شد. مطالعه نانولوله‌های مکسین‌ها هنوز در مراحل اولیه خود است و بررسی خاصیت آنها در جذب گازهای مورد مطالعه می‌تواند سودمند باشد. نتایج نشان داد که لایه Ti₂C حساسیت و انتخاب‌پذیری بالاتری را نسبت به مولکول‌های گاز CO₂ از خود نشان می‌دهد. همچنین، قابل توجه است که، نانولوله Ti₂C حساسیت بالاتری به هر سه نوع گاز سمی، نسبت به لایه آن، از خود نشان می‌دهد، علاوه بر این، بالاترین میزان انتخاب‌پذیری و حساسیت را به جذب مولکول‌های گاز CO نسبت به بقیه گازهای مورد مطالعه از خود نشان می‌دهد. بر طبق این نتایج تأثیر ابعادی نانو ساختارهای مورد مطالعه بر جذب این گازها در دمای محیط مشهود است. نتایج این مطالعه برای مطالعات تجربی و محاسباتی در زمینه حسگرهای گازی مفید خواهد بود.

مرجع‌ها

- [4] E. Lee, D. Lee, J. Yoon, Y. Yin, Y.N. Lee, S. Uprety, Y.S. Yoon, D.-J. Kim, Enhanced gas-sensing performance of GO/TiO₂ composite by photocatalysis, *Sensors* **18** 10 (2018) 3334. <https://doi.org/10.3390/s18103334>
- [5] E. Lee, A. VahidMohammadi, B.C. Prorok, Y.S. Yoon, M. Beidaghi, D.J. Kim, Room temperature gas sensing of two-dimensional titanium carbide (MXene), *ACS applied materials & interfaces* **9** 42 (2017) 37184-37190. <https://doi.org/10.1021/acsami.7b11055>
- [6] W.Y. Chen, X. Jiang, S.N. Lai, D. Peroulis, L. Stanciu, Nanohybrids of a MXene and transition metal dichalcogenide for selective detection of volatile organic compounds, *Nature communications* **11** 1 (2020) 1-10. <https://doi.org/10.1038/s41467-020-15092-4>
- [7] S.H. Lee, W. Eom, H. Shin, R.B. Ambade, J.H. Bang, H.W. Kim, T.H. Han, Room-Temperature, Highly Durable Ti₃C₂T_x MXene/Graphene Hybrid Fibers for NH₃ Gas Sensing, (2020). <https://doi.org/10.1021/acsami.9b21765>
- [8] X.f. Yu, Y.C. Li, J.B. Cheng, Z.B. Liu, Q.Z. Li, W.Z. Li, X. Yang, B. Xiao, Monolayer Ti₂CO₂: a promising candidate for NH₃ sensor or capturer with high sensitivity and selectivity, *ACS applied materials & interfaces* **7** 24 (2015) 13707-13713. <https://doi.org/10.1021/acsami.5b03737>
- [9] Y. Wang, S. Ma, L. Wang, Z. Jiao, A novel highly selective and sensitive NH₃ gas sensor based on monolayer Hf₂CO₂, *Applied Surface Science* **492** (2019) 116-124. <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2019.06.212>
- [10] S. Plimpton, Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics, *Journal of computational physics* **117** 1 (1995) 1-19. <https://doi.org/10.1006/jcph.1995.1039>
- [1] M. Naguib, M. Kurtoglu, V. Presser, J. Lu, J. Niu, M. Heon, L. Hultman, Y. Gogotsi, M.W. Barsoum, Two-dimensional nanocrystals produced by exfoliation of Ti₃AlC₂, *Advanced materials* **23** 37 (2011) 4248-4253. <https://doi.org/10.1002/adma.201102306>
- [2] Y. Gogotsi, B. Anasori, The rise of MXenes, *ACS Publications* (2019) 8491-8494. <https://doi.org/10.1021/acsnano.9b06394>
- [3] J. Janata, Chemical sensors, *Analytical chemistry* **64** 12 (1992) 196-219. <https://doi.org/10.1021/ac00036a012>

<https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2016.04.050>

[18] B. Axilrod, E. Teller, Interaction of the van der Waals type between three atoms, *The Journal of Chemical Physics* **11** 6 (1943) 299-300.

<https://doi.org/10.1063/1.1723844>

[19] A.N. Enyashin, A.L. Ivanovskii, Atomic structure, comparative stability and electronic properties of hydroxylated Ti₂C and Ti₃C₂ nanotubes, *Computational and Theoretical Chemistry* **989** (2012) 27-32.

<https://doi.org/10.1016/j.comptc.2012.02.034>

[11] R. Rostamoghli, M. Vakili, A. Banaei, E. Pourbasheer, k. Jalalierad, Applying the B₁₂N₁₂ nanoparticle as the CO, CO₂, H₂O and NH₃ sensor, *Chemical Review and Letters* **1** 1 (2018) 31-6. [doi: 10.22034/crl.2018.85214](https://doi.org/10.22034/crl.2018.85214)

[12] HR. Jappor, SA. Khudair, Electronic properties of adsorption of CO, CO₂, NH₃, NO, NO₂ and SO₂ on nitrogen doped graphene for gas sensor applications, *Sensor Letters* **15** 5 (2017) 432-9. <https://doi.org/10.1166/sl.2017.3819>

[13] H. Oymak, Ş. Erkoç, Titanium coverage on a single-wall carbon nanotube: molecular dynamics simulations, *Chemical physics* **300** (1-3) (2004) 277-283. <https://doi.org/10.1016/j.chemphys.2004.02.013>

[14] S.L. Mayo, B.D. Olafson, W.A. Goddard, DREIDING: a generic force field for molecular simulations, *Journal of Physical chemistry* **94** 26 (1990) 8897-8909. <https://doi.org/10.1021/j100389a010>

[15] S. Pałucha, Z. Gburski, J. Biesiada, A molecular dynamics study of fullerene-carbon monoxide mixture, *Journal of molecular structure* **704** (1-3) (2004) 269-273. <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2004.02.044>

[16] H.M. Stowe, G.S. Hwang, Molecular insights into the enhanced rate of CO₂ absorption to produce bicarbonate in aqueous 2-amino-2-methyl-1-propanol, *Physical Chemistry Chemical Physics* **19** 47 (2017) 32116-32124. <https://doi.org/10.1039/C7CP05580C>

[17] E. Iskrenova, S. Patnaik, Solvent effects in the thermal decomposition reaction of ammonium carbamate: A computational molecular dynamics study of the relative solubilities of CO₂ and NH₃ in water, ethylene glycol, and their mixtures, *International Journal of Heat and Mass Transfer* **100** (2016) 224-230.