

عنوان مقاله:

بررسی بهبود عملکرد و افزایش بازده نانومیله های اکسید روی - چارچوب ایمیدازولات زئولیت-: 8 مطالعه سنتز، شبیه سازی دینامیک مولکولی

محل انتشار:

اولین همایش بین المللی علوم و فناوری نانو (سال: 1399)

تعداد صفحات اصل مقاله: 14

نویسنده:

علی لشنی زند - کارشناسی ارشد، مهندسی شیمی (گرایش نانوفناوری)، دانشکده فنی مهندسی، جهاد دانشگاهی اصفهان

خلاصه مقاله:

تشخیص گاز دی اکسیدکربن با استفاده از نانو میله های اکسید روی به دلیل حساسیت بالا، افزایش خطا در امیدانسه های اندازه گیری شده و بازده پایین، مستلزم جداسازی انتخابی و شناسایی مولکولهای مهمان در مقیاس مولکولی است. چارچوبهای آلی فلزی، نانومتخلخلهایی سنتز شده از خوشه های فلزی و لینکرهای آلی هستند که با استفاده از برهمکنشهای بین مولکولی قابلیت تفکیک مولکولهای مهمان را دارند و ترکیب این مواد با نانومیله های اکسید روی موجب افزایش بازده و حساسیت میشود. در این مطالعه پتانسیل ترکیب نانومتخلخلهای چارچوب ایمیدازولات زئولیت-8 با نانومیله های اکسید روی در افزایش حساسیت و انتخاب پذیری نسبت به مولکول های گاز دیاکسیدکربن معرفی شده و مطالعات آزمایشگاهی و شبیه سازی های دینامیک مولکولی براساس تئوری چگالی حالات و مدلسازی مولکولی مورد بررسی قرار گرفته است. قابلیت ترکیب این مواد با چارچوبهای آلی فلزی، نقاط ضعف نیمه هادیهای اکسید فلزی را در مقیاس نانومتری پوشش داده و در محیطهای حساس نانومتری بصورت تخصصی عمل میکند. در این مطالعه چارچوبهای آلی فلزی به عنوان یک مکمل برای افزایش کارایی نانو حسگرها معرفی می گردد

کلمات کلیدی:

تئوری چگالی حالات، چارچوب های آلی فلزی، شبیه سازی دینامیک مولکولی، نانومیله های اکسید روی، نانوحسگر

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/1140958>

