

عنوان مقاله:

مطالعه نانولوله کربنی تک دیواره آرایش یافته با اتم نیکل به عنوان حسگر گاز متان

محل انتشار:

دومین همایش بین المللی علوم و فناوری نانو دانشگاه تهران (سال: 1400)

تعداد صفحات اصل مقاله: 9

نویسندگان:

زهرا کرمی هرستانی - گروه مهندسی برق، واحد شیراز، دانشگاه آزاد اسلامی، شیراز، ایران

اسماعیل دبیری - گروه مهندسی برق، واحد شیراز، دانشگاه آزاد اسلامی، شیراز، ایران

خلاصه مقاله:

هدف اصلی مطالعه حاضر، بررسی خواص الکترونیکی ساختار نانولوله کربنی (o و 8) آرایش یافته با اتم نیکل در حضور مولکول متان است. کلیه محاسبات بر اساس نظریه تابعی چگالی و با لحاظ نمودن نیروی واندروالسی DFT-D2 انجام شده است. محاسبات انجام شده شامل موقعیت بهینه جذب، انرژی جذب، ساختار نواری، تابع کار و انتقال بار می باشد. نتایج به دست آمده نشان می دهد که آرایش دادن سطح نانولوله توسط اتم نیکل موجب افزایش انرژی جذب نیکل بر روی آن می شود. جذب متان موجب باز شدن گاف انرژی ساختار شده به طوری که مقدار آن پس از جذب متان از مقدار 3/8 eV به 5.5 eV افزایش می یابد 31/5% بر اساس محاسبات توزیع چگالی بار، بار الکتریکی از نانولوله کربنی آرایش یافته با نیکل به مولکول متان انتقال می یابد که با نتایج مربوط به رسم سطوح انرژی به خوبی تطبیق دارد. بررسی تابع کار، حاکی از افزایش تابع کار ساختار پس از جذب متان است. با توجه به نتایج به دست آمده ساختار نانولوله کربنی آرایش یافته با نیکل، می تواند به عنوان یک گزینه مناسب به عنوان حسگر گاز متان مورد استفاده قرار گیرد

کلمات کلیدی:

نظریه تابعی چگالی، نیکل، نانولوله کربنی، متان

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/1274760>

