

## عنوان مقاله:

شبیه سازی جذب گاز متان بر روی نانولوله کربنی آرایش یافته با اتم پالادیوم

## محل انتشار:

ماهنامه اکتشاف و تولید نفت و گاز، دوره 1398، شماره 173 (سال: 1398)

تعداد صفحات اصل مقاله: 6

## نویسندگان:

زهرا کرمی هرستانی - دانشگاه آزاد اسلامی واحد شیراز

صابر جمالی حاجیانی - شرکت بهره برداری نفت و گاز زاگرس جنوبی

## خلاصه مقاله:

حسگر گاز متان از تجهیزات مهم صنایع نفت و گاز و پتروشیمی است. در سال های اخیر ساخت حسگر گاز بر اساس نانولوله های کربنی مورد توجه قرار گرفته است. علی رغم اینکه نانولوله کربنی قابلیت آشکارسازی بعضی از گازها را دارد در آشکارسازی متان بسیار ضعیف است. با این وجود می توان با استفاده از روش هایی چون آرایش دادن سطح نانولوله با فلزات، خاصیت حسگری آنها را افزایش داد. بنابراین در این مقاله به شبیه سازی آرایش دهی نانولوله کربنی (۸۰۰) توسط اتم پالادیوم بر بهبود جذب مولکول متان با استفاده از نظریه تابعی چگالی پرداخته شده است. نتایج نشان داد که حضور اتم پالادیم نقش چشمگیری در افزایش انرژی جذب مولکول متان بر روی نانولوله کربنی دارد به طوری که از محدوده جذب ضعیف فیزیکی به محدوده جذب فیزیکی و شیمیایی می رساند. همچنین انتقال بار از نانولوله کربنی به سمت مولکول متان بوده که باعث افزایش رسانایی نانولوله کربنی در حضور متان می شود و از خاصیت تغییر هدایت الکتریکی و تغییر مقاومت می توان در حسگر متان استفاده کرد.

## کلمات کلیدی:

حسگر متان، نانولوله کربنی، پالادیوم، نظریه تابعی چگالی

## لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/1641908>

