

عنوان مقاله:

مطالعه نظری جذب گاز نیتروژن دی اکسید بر روی پورفیرین کبالت جایگزین شده در فولرن C70: جاذب یا سنسور

محل انتشار:

دومین کنفرانس بین المللی پژوهش در علوم و تکنولوژی (سال: 1394)

تعداد صفحات اصل مقاله: 10

نویسندگان:

سیده فاطمه انیشه - دانشگاه پیام نور

ستار ارشدی

مهدی فروزانی

خلاصه مقاله:

استفاده از پورفیرین یا کمپلکس فلزی آن ها در سنسورهای شیمیایی و به خصوص در آنالیز چند سنسوری بسیار جالب است، از آنجائی که این ترکیبات نشان داده اند که می توانند مواد حسگر چندمنظوره باشند، بنابراین قادرند طیف گستردهای از گازها را از طریق تعداد زیادی از مکانیزمهای حسی متفاوت شناسایی کنند. پایداری و خواص فلز کبالت- پورفیرین جایگزین شده در فولرن C70 (Co- C70 PIC70F) و برهم کنش آن با مولکول گازی NO₂ به وسیله محاسبات نظریه تابعیت چگالی (DFT) مورد بررسی قرار گرفته است. برهم زدن نقص 4ND در فولرن با جایگزینی یون کبالت با انرژی 28.95 eV - منجر به اتصال قویایم با پورفیرین جایگزین شده در فولرن (C70 PIC70F) می شود و بنابراین کاهش خوشه ای شدن اتم فلزی را برای فلز گنجانده شده در فولرن، پیشنهاد می کند. ساختارهای تعادلی، پایداری و خواص الکترونیکی جذب گاز NO₂ بر روی پورفیرین کبالت دار و جایگزین شده در فولرن C70 نشان میدهد که این مولکول به حضور مولکول گازی NO₂ حساس نیست و نمی تواند به عنوان حسگر برای این مولکول گازی مورد استفاده قرار گیرد

کلمات کلیدی:

حسگر، فولرن NO₂، C70، جذب سطحی، پورفیرین کبالت

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/505079>

