

عنوان مقاله:

بررسی نظری خواص حسگری نانوساختار ZnO آلاینده شده با برخی فلزات واسطه در معرض گازاستون

محل انتشار:

سومین همایش ملی فناوری نانو از تئوری تا کاربرد (سال: 1393)

تعداد صفحات اصل مقاله: 9

نویسندگان:

محمدحسین درویش نژاد - گروه شیمی دانشگاه تربیت دبیر شهید رجایی

جواد بهشتیان - گروه شیمی دانشگاه تربیت دبیر شهید رجایی

اعظم انارکی فیروز - گروه شیمی دانشگاه تربیت دبیر شهید رجایی

خلاصه مقاله:

فن آوری حسگرهای گاز در طی چند دهه گذشته، پیشرفتهای قابل توجهی داشته و هم اکنون استفاده از حسگرهای گاز در منازل، محیط های صنعتی و ... به یک ضرورت تبدیل شده است. حسگرهای گازی، به صورت تجاری مورد استفاده بوده و محققان تلاش زیادی در جهت بهبود عملکرد و توسعه آنها انجام میدهند. حسگرهای زیادی به صورت تجربی ساخته شده اند، و تحقیقات تئوری بنیادی و مطالعات طیف سنجی زیادی نیز در این زمینه انجام شده است. در این پژوهش با استفاده از نظریه ی تابعیت چگالی DFT جذب گاز استون بر نانو ساختار رویاکسید و رویاکسید آلاینده شده با فلزات واسطه Mn-Fe-Co-Ni بررسی شده است. در این بررسی نظری از نرم افزار Dmol3 و تقریب گرادیان تعمیم یافته GGA استفاده شده- است. در این مقاله، نانو ساختارها از نظر انرژی کل، تراز فرمی و میزان حسگری نظری مورد بررسی قرار گرفته اند. نتایج نشان میدهند که عناصر Mn و Co آلاینده شده سبب افزایش خواص حسگری روی اکسید میشوند.

کلمات کلیدی:

روی اکسید، حسگر گازی، نظریه تابعیت چگالی، آلاینش

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/391201>

