

مطالعه حساسیت نانوله‌های کربنی آرایش شده با پالادیوم برای استفاده در حسگر گاز منواکسید کربن

یادداشت پژوهشی

محمد حسین جلال پور^۱، نگین معنوی‌زاده^{*۱}، مزگان صادقیان لمراسکی^۱

^۱دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی، دانشکده مهندسی برق، تهران، ایران.

تاریخ ثبت اولیه: ۱۳۹۴/۱۰/۲۳، تاریخ دریافت نسخه اصلاح شده: ۱۳۹۵/۴/۲۳، تاریخ پذیرش قطعی: ۱۳۹۵/۷/۱۱

چکیده در این مقاله، تأثیر اضافه شدن اتم پالادیوم به نانوله‌های کربنی به منظور استفاده از آن در حسگر گاز منواکسید کربن، بررسی شده است. با بررسی و مقایسه حالت‌های مختلف نحوه قرارگرفتن اتم پالادیوم بر روی سطح نانوله‌های کربنی و نیز نحوه تماس مولکول منواکسیدکربن بر روی آن با استفاده از نرم‌افزارهای شبیه‌سازی ابعاد اتمی (Siesta و QuantumWise)، مناسب‌ترین حالت جهت افزایش حساسیت نانوله‌ها بدست آمده است. با توجه به نتایج بدست آمده، پایدارترین نوع قرارگیری پالادیوم در حالت موازی با سطح و بهترین نوع تماس مولکول در حالتی است که گاز منواکسیدکربن از سمت اتم کربن خود به نانوله‌کربنی نزدیک شده باشد. با استفاده از سنجش انرژی کل سیستم، نشان داده شده که ساختار بدست آمده برای استفاده در حسگرهای گاز منواکسیدکربن مناسب می‌باشد.

کلمات کلیدی: حسگر گاز منواکسید کربن، نانوله کربنی آرایش شده با پالادیوم، شبیه سازی ابعاد اتمی.

An Investigation on Pd Decorated Carbon Nanotube Sensitivity for CO Gas Sensor Application

Mohammad hosein Jalalpur¹, Negin Manavizadeh^{*1}, Mojgan Sadeghian Lemraski¹

¹K. N. Toosi University of Technology, Faculty of Electrical Engineering, Tehran, Iran.

Abstract In this paper, the effect of Pd decorated Carbon nanotube system for Carbon monoxide gas sensor applications was studied. Various positions of Pd atom and CO molecule have been considered and investigated using ab initio atomic simulator software (Siesta and Quantumwise) to obtain the most appropriate structure for enhancing the sensitivity of Carbon nanotubes. According to the simulation results, the most stable configuration of Pd atom and CO molecule are obtained while Pd atoms stand parallel to the CNT with no carbon vacancy on and CO molecule approaches the Carbon nanotube with its Carbon atom. Results indicate that the obtained structure can be considered as an interesting candidate for gas sensing devices.

Keywords: Carbon-monoxide gas sensor, CNT-Pd Decorated, Ab initio simulation.

*عهده دار مکاتبات

نشانی: تهران، خیابان شریعتی، نرسیده به پل سید خندان، دانشکده مهندسی برق، دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی، تلفن: ۸۴۰۶۲۲۸۹

پیام نگار: manavizadeh@eetd.kntu.ac.ir

۱- مقدمه

موجود در محیط براساس تغییرات صورت گرفته در ویژگی‌های الکتریکی قطعه‌ای از جنس نیمه‌هادی، در مواجهه با مولکول‌های گاز منواکسید کربن، تعیین می‌گردد [۵].

معیارهای انتخاب یک حسگر شامل حساسیت، پاسخ حسگر، زمان پاسخ، زمان بازیابی، طول عمر قطعه، توان مصرفی، دمای کاری و هزینه ساخت است. در حال حاضر حسگرهای الکتروشیمیایی با توجه به معیارهای موجود، در وضع مطلوب‌تری نسبت به بقیه حسگرها قرار دارند ولی با پیشرفت‌های صورت گرفته، نسل‌هایی از حسگرهای نیمه‌هادی در حال ظهور هستند که دارای مشخصات بهتر و دقیق‌تری می‌باشند.

نانولوله‌های کربنی (CNTs) از جمله نیمه‌هادی‌هایی هستند که در سال‌های اخیر به دلیل خواص منحصر به فردشان، نظیر خواص مکانیکی، فیزیکی و الکتریکی و ویژگی‌های هندسی شامل قطر کوچک و نسبت ابعاد بالا، از اهمیت بالایی برخوردارند. تحقیقات نشان داده است که تغییر اندکی در ساختار نانولوله کربنی، به طور چشمگیری منجر به تغییر خواص مکانیکی، حرارتی و الکتریکی کامپوزیت آن می‌شود [۶-۱۲]. به دلیل هزینه‌های بالا و مشکلات تکنولوژیکی مرتبط با تجزیه و تحلیل تجربی در مقیاس نانو، معمولاً از روش‌های محاسباتی برای شبیه‌سازی رفتار نانوساختارهایی مانند نانولوله کربنی استفاده می‌شود.

در این مقاله، هدف بررسی حساسیت نانولوله‌های کربنی آلایش شده با اتم‌های پالادیم به منظور شناسایی گاز منواکسید کربن است.

۲- حسگر گاز منواکسید کربن مبتنی بر نانولوله‌های کربنی

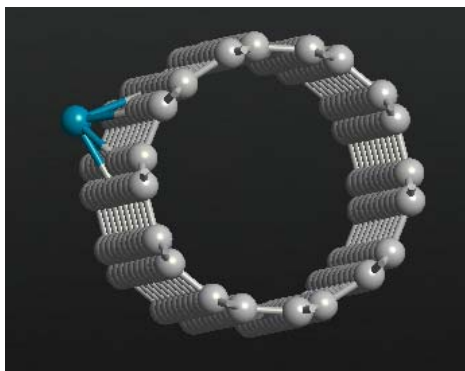
امروزه ادوات حسگری گاز منواکسید کربن مبتنی بر نانولوله‌ها نظر محققان را به خود جلب کرده‌اند. نانولوله‌های نیمه‌هادی پس از ساخت، ویژگی‌های جدیدی به خود می‌گیرند؛ این ویژگی‌ها می‌توانند نانولوله را کاملاً از ماده تشکیل دهنده آن متمایز کنند [۱۳]. تاکنون این نوع از حسگرها به کاربرد صنعتی نرسیده و تنها در سطح شبیه‌سازی و آزمایشگاهی، مورد مطالعه قرار گرفته‌اند. از آنجا که نانولوله‌های کربنی، قابلیت ساخت در آزمایشگاه را نسبت به

گاز منواکسید کربن، بی‌رنگ، بی‌بو و به شدت سمی بوده و شناسایی آن توسط حواس شش‌گانه انسان (بدون ابزار)، غیر ممکن است و در برخی موارد علائمی بسیار مشابه با بیماری‌های معمولی داشته و منجر به مرگ سریع می‌شود. این گاز، محصول بسیاری از فرآیندهای احتراق و سوختی می‌باشد لذا شناسایی به موقع این گاز سمی از اهمیت بالایی برخوردار است [۱].

آشکارسازهای گاز منواکسید کربن (CO)، شامل چهار خانواده نوری- شیمیایی، بایومیمتیک (تقلید بیولوژیکی)، الکتروشیمیایی و حسگرهای نیمه‌هادی هستند و تفاوت عمده این خانواده‌ها در قیمت، دقت و زمان پاسخ حسگرهای ساخته شده می‌باشد. حسگرهای نوری- شیمیایی یک صفحه از جنس ماده‌ای شیمیایی با رنگی خاص، تشکیل شده‌اند. رنگ این ماده شیمیایی در اثر برخورد با گاز منواکسید کربن تغییر کرده، در نتیجه این گاز شناسایی می‌شود. سپس این تغییر رنگ توسط سیستم الکترونیکی از طریق تاباندن نور و آشکارسازی طیف نور بازتاب شده، شناسایی و وجود گاز در محیط نشان داده می‌شود. از آنجایی که این حسگرها درصد غلظت گاز منواکسید کربن در هوا را نشان نمی‌دهند، کمترین میزان مصنوعیت را برای انسان ایجاد می‌کنند، اما دارای کمترین هزینه در میان خانواده‌های حسگر گاز هستند [۲]. در حسگرهای بایومیمتیک، ماده‌ای که عملکرد آن براساس کارکرد گلوبول‌های قرمز خون است، بعد از مواجهه با گاز منواکسید کربن دچار تغییر رنگ شده و مشابه مکانیزم اپتیکی- شیمیایی در این دسته از حسگرها، عملیات شناسایی رنگ صورت می‌پذیرد و وجود گاز منواکسید کربن شناسایی می‌شود [۳]. حسگرهای الکتروشیمیایی به دلیل قیمت مناسب و عملکرد مطلوبی که دارند، در حال حاضر رایج‌ترین نوع حسگر گاز منواکسید کربن می‌باشند. این حسگر دارای دو صفحه آند و کاتد و محلول الکترولیتی بین این دو صفحه است. تماس گاز منواکسید کربن با این محلول منجر به جذب گاز توسط سیستم شده و متناظر با مقدار مولکول‌های گاز جذب شده، جریان الکتریکی تولید خواهد شد [۴]. دسته چهارم از خانواده حسگرهای این گاز، حسگرهای نیمه‌هادی می‌باشند. در این حسگرها میزان گاز

¹ Carbon Nanotubes

محاسبات لحاظ شود. تعداد حلقه‌های خودسازگار^۲ در هر بار حل معادله کوهن‌شن، ۱۵۰ حلقه در نظر گرفته شده و همگرایی خوبی با موج‌های تخت با انرژی قطع ۷۵ Ryd حاصل شده است. برای انجام شبیه‌سازی، نمونه‌برداری فضای k-point (۱×۱×۵) برای ناحیه بریلوئن^۳ استفاده گردیده است.



شکل ۱. نانولوله کربنی به همراه اتم پالادیوم.

محاسبات دینامیک مولکولی^۴، به منظور پیدا کردن مختصات بهینه اتم‌ها با حد فاصل زمانی هر گام 1fs و آنالیز انرژی کل، جهت دستیابی به میزان تغییرات در سیستم، استفاده شده است. از معادله ۱ برای بدست آوردن انرژی جذب اتم پالادیوم روی ساختار نانولوله و از معادله ۲ برای یافتن میزان انرژی جذب مولکول منواکسیدکربن استفاده شده است.

$$E_{\text{ads}}(\text{Pd}) = E_{\text{T}}(\text{Pd/SWCNT}) - E_{\text{T}}(\text{SWCNT}) - E_{\text{T}}(\text{Pd}) \quad \text{معادله (۱)}$$

$$E_{\text{ads}}(\text{CO}) = E_{\text{T}}(\text{CO/Pd/SWCNT}) - E_{\text{T}}(\text{Pd/SWCNT}) - E_{\text{T}}(\text{CO}) \quad \text{معادله (۲)}$$

در این معادلات، $E_{\text{ads}}(\text{CO})$ میزان انرژی جذب مولکول گاز منواکسیدکربن توسط نانولوله کربنی آرایش شده با پالادیوم و $E_{\text{T}}(\text{CO/Pd/SWCNT})$ بیانگر میزان کل انرژی بدست آمده بعد از شبیه‌سازی است؛ هنگامی که در شبیه‌سازی، اتم پالادیوم، نانولوله کربنی و مولکول منواکسیدکربن، هر سه وجود دارند. $E_{\text{T}}(\text{Pd/SWCNT})$ ، انرژی کل حاصل از شبیه‌سازی ساختار شامل نانولوله کربنی

سایر نانولوله‌ها (کاربراندوم و سیلیکون [۱۴]) داشته و ساخت آنها از هزینه و مشکلات کمتری برخوردار است، در این مقاله به بررسی آن پرداخته می‌شود.

نانولوله‌های کربنی خالص، برای شناسایی بسیاری از گازهای سمی و مهم، عملکرد قابل قبولی دارند، اما در هیچ یک از آزمایش‌های انجام گرفته بر روی نانولوله‌های کربنی خالص که در معرض گاز منواکسیدکربن قرار گرفته‌اند، نتایج قابل قبولی ذکر نشده است [۱۵]. تحقیقات نشان می‌دهند که با انجام تغییراتی در ساختار این نانولوله‌ها، می‌توان از آنها در شناسایی گاز منواکسیدکربن استفاده کرد [۱۳-۱۵]. جذب مولکول منواکسیدکربن بر نانولوله آرایش شده با آلومینیوم، توسط وانگ و همکارانش مورد بررسی قرار گرفته است [۱۶]. وانگ و همکارانش نشان داده‌اند که نانولوله کربنی آرایش شده با آلومینیوم، حساسیت خوبی به گاز منواکسیدکربن نسبت به نانولوله کربنی خالص دارد. در این مقاله به بررسی حساسیت نانولوله‌های کربنی، پس از آرایش با اتم پالادیوم و در مواجهه با گاز منواکسیدکربن پرداخته شده است.

۳- شبیه سازی

به منظور بررسی تأثیر آرایش اتم پالادیوم بر حساسیت نانولوله‌های کربنی در حسگر گاز منواکسیدکربن، از نرم‌افزارهای Siesta و Quantumwise استفاده شده است. شکل ۱ ساختار مورد شبیه‌سازی را نشان می‌دهد. مقادیر ارائه شده حاصل از شبیه‌سازی در محیط Quantumwise بوده و از Siesta برای تاکید و تایید نتایج بهره گرفته شده است. همچنین در مقایسه با مراجع دیگر که از نرم‌افزار Gaussian03 استفاده شده، نتایج به دست آمده از این دو نرم‌افزار هم‌خوانی دارد [۱۵].

روش کلی شبیه‌سازی، براساس نظریه مکانیک کوانتومی و تئوری تابع چگالی احتمال (DFT^۱) است و از روش LDA برای تقریب Exchange correlation استفاده شده است. از تابع موج DZP به عنوان تابع پایه استفاده شده تا هم دقت افزایش یابد و هم پلاریزاسیون اوربیتال‌های خارجی در

² Self consistency

³ Brillouin zone

⁴ Molecular Dynamic

¹ Density Functional Theory

۴- نتایج و بحث

۳-۱- بررسی میزان جذب اتم پالادیوم بر روی نانولوله‌های

کربنی

به منظور بررسی امکان ایجاد ساختار مورد نظر، ابتدا باید نحوه قرارگیری اتم پالادیوم در مجاورت نانولوله‌های کربنی، نیروهای بین آنها (جاذبه و دافعه) و انرژی جذب را مورد مطالعه قرار داد. همچنین باید میزان این انرژی را برای حفظ ساختار در شرایط معمولی یا در دماهای بالا، بررسی نمود.

جهت انجام این بررسی‌ها، میزان انرژی کل سیستم، در سه حالت زیر مورد بررسی قرار گرفته است:

۱- سیستم متشکل از نانولوله کربنی

۲- سیستم متشکل از اتم پالادیوم

۳- سیستم متشکل از نانولوله کربنی و اتم پالادیوم

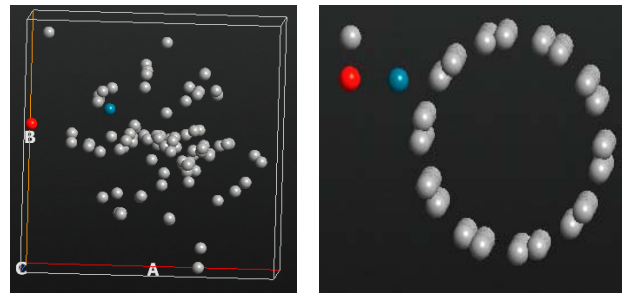
پیش از انجام شبیه‌سازی‌ها، شبیه‌سازی‌های اولیه‌ای می‌بایست انجام گیرد. به همین منظور، با استفاده از محاسبات دینامیک مولکولی، اتم‌ها به حالت سکون نسبی و آرمیدگی قرار خواهند گرفت. به این ترتیب می‌توان اطمینان حاصل کرد که مقادیر سنجیده شده در شبیه‌سازی‌های اصلی، معرف کمینه انرژی سیستم می‌باشند. به بیان دیگر اطمینان حاصل می‌شود که شبیه‌سازی در نزدیک‌ترین حالت به طبیعت صورت پذیرفته است.

نتیجه شبیه‌سازی سیستم متشکل از نانولوله کربنی در شکل (۴) آورده شده است.



شکل ۴. ساختار بهینه شده نانولوله کربنی.

و اتم پالادیوم بدون گاز و $E_T(\text{CO})$ انرژی بدست آمده از شبیه‌سازی مولکول گاز منواکسیدکربن به تنهایی می‌باشند.



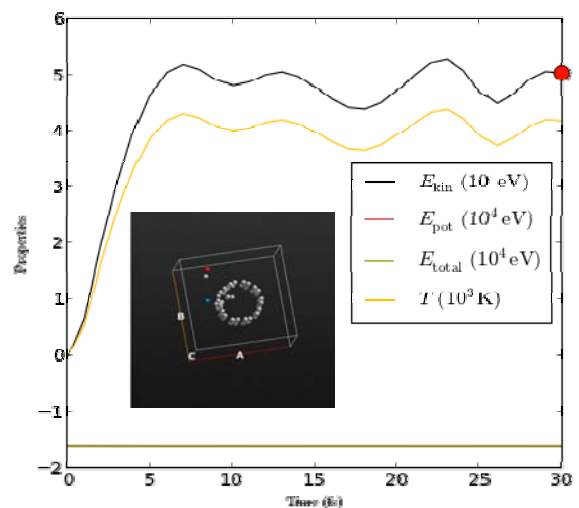
(ب)

(الف)

شکل ۲. ساختار شامل نانولوله کربنی و اتم پالادیوم در حضور گاز منواکسیدکربن با Mesh cut off کم‌تر از حد مطلوب (الف) مختصات ورودی شبیه‌سازی و (ب) نتیجه شبیه‌سازی.

انتخاب مکان قرارگیری مولکول منواکسیدکربن و

اتم پالادیوم اهمیت فراوانی دارد. مطابق شکل (۳) اگر اتم اکسیژن بسیار نزدیک به نانولوله قرار گیرد، نه تنها جذبی توسط ساختار صورت نمی‌گیرد، بلکه ساختار، مولکول گاز را پس زده و میزان این دفع به حدی است که ساختار، دیگر قادر به جذب دوباره مولکول منواکسیدکربن نخواهد بود.



شکل ۳. تغییرات انرژی کل سیستم تا رسیدن به حالت تعادل (قطعه مولکول را پس زده و نتایج شبیه‌سازی معتبر نیست).

در محاسبات انجام شده، اتم پالادیوم به موازات سطح قرار داده شده بود. به منظور دستیابی به بهترین نحوه قرارگیری اتم پالادیوم روی ساختار، در نانولوله کربنی یک اتم کربن حذف شده و یک جای خالی^۱ به وجود آمده و اتم پالادیوم در مجاورت این جای خالی قرار داده شده است. در این حالت نیز سه دسته محاسبات زیر صورت گرفته تا بتوان پس از مقایسه نتایج در حالت‌های مختلف، مناسب‌ترین ساختار را برای کاربرد حسگری انتخاب کرد.

۱- سیستم متشکل از نانولوله کربنی دارای جای خالی

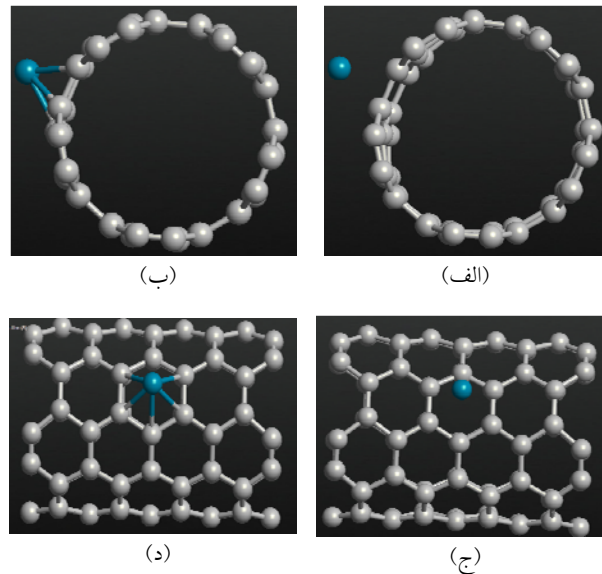
۲- سیستم متشکل از اتم پالادیوم

۳- سیستم متشکل از نانولوله کربنی دارای جای خالی و اتم پالادیوم

از آنجا که نتایج سیستم متشکل از اتم پالادیوم مشابه قسمت قبل می‌باشد، از ارائه مجدد آن خودداری شده است. به طور مشابه، محاسبات اولیه‌ای با استفاده از دینامیک مولکولی صورت گرفته تا بتوان اتم‌ها را پیش از سنجش، در کمترین انرژی و نزدیک‌ترین حالت به طبیعت قرار داد و سپس محاسبات مورد نیاز انجام شود. شکل (۶) ورودی و خروجی این شبیه‌سازی را نشان می‌دهد.

تصویر شکل (۶) نشان می‌دهد که اتم پالادیوم به علت بزرگتر بودن نسبت به اتم کربن و در نتیجه داشتن پیوندهایی با طول بلندتر با اتم‌های مجاور، اندکی به سمت بیرون از نانولوله هدایت می‌شود. همچنین اتم‌های کربن مجاور نیز دچار تغییر مختصات شده و اندکی به اطراف رانده می‌شوند.

مقادیر اندازه‌گیری شده انرژی برای نانولوله با اتم پالادیوم و بدون آن، در جدول (۲) آمده است.



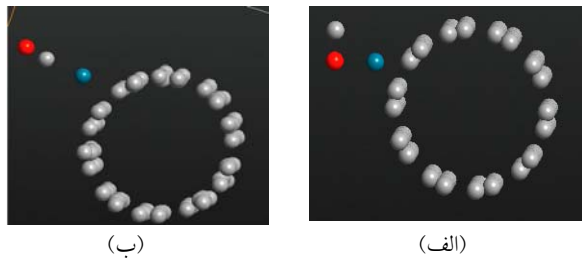
شکل ۵. شبیه‌سازی سیستم متشکل از نانولوله کربنی و اتم پالادیوم (الف) ساختار قرار گرفته تحت شرایط دینامیک مولکولی، (ب) خروجی شبیه‌سازی، (ج) ساختار تحت آزمایش از دید عمود بر نانولوله و (د) نتیجه شبیه‌سازی از دید عمود بر نانولوله.

از مقایسه تصویر (الف) با (ب) و تصویر (ج) با (د) در شکل (۵)، می‌توان دریافت اتم پالادیوم اندکی به سمت وسط شش ضلعی (از دید بالا) و اندکی دورتر از سطح نانولوله (از دید روبرو) حرکت کرده است. عدم وجود خطوط پیوند در تصاویر سمت راست (شکل ۵) به این دلیل است که فاصله میان دو اتم کمتر از طول پیوند، در نظر گرفته شده است. انرژی کل در این حالت، $15246/04193 \text{ eV}$ - محاسبه شده است. انرژی‌های حاصل از این شبیه‌سازی‌ها در جدول (۱) آمده است.

جدول ۱. انرژی‌های اندازه‌گیری شده برای ساختار موازی.

انرژی کل خوانده شده	ساختار مورد سنجش
$-15246/04193$	نانولوله به همراه پالادیوم
$-14145/42936$	ساختار نانولوله
$-1097/06292$	اتم پالادیوم
$-3/54965$	انرژی جذب پالادیوم توسط نانولوله کربنی

¹ vacancy



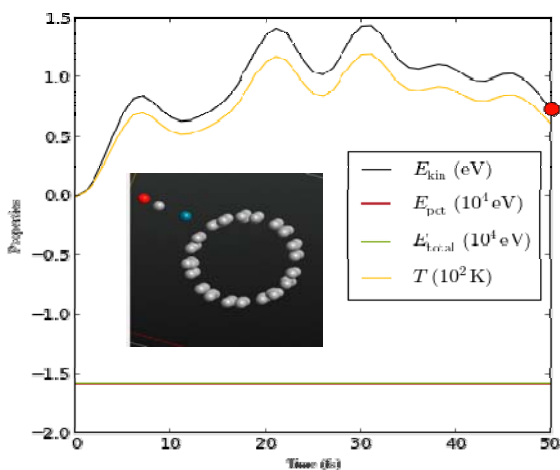
شکل ۷. شبیه‌سازی دینامیک مولکولی برای پیدا کردن بهترین مشخصات سیستم به منظور شناسایی مولکول گاز. (الف) ورودی و (ب) خروجی شبیه‌سازی.

تغییرات نشان‌دهنده حرکت مولکول از وضعیت افقی به وضعیت عمودی نانولوله می‌باشد. از این پیکربندی می‌توان نتیجه گرفت که اتم اکسیژن علاقه کمتر و اتم کربن درون مولکول گاز، علاقه بیشتری برای اتصال با نانولوله کربنی آرایش شده با پالادیوم دارند. این مطلب در شبیه‌سازی‌های بعدی به وضوح قابل مشاهده است.

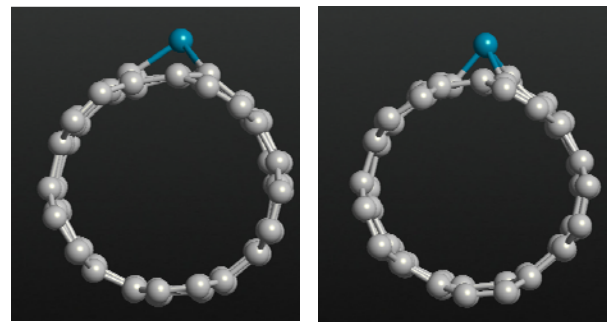
محاسبات اصلی شامل دو حالت متفاوت می‌باشد. در حالت اول مولکول گاز به نحوی قرار گرفته که اتم اکسیژن آن نزدیک‌تر به ساختار و اتم کربن آن دورتر، و در حالت دیگر اتم اکسیژن دورتر و اتم کربن نزدیک‌تر است. هر دو این حالت‌ها باز هم در دو حالت مختلف شبیه‌سازی شده است، یکی در حالتی که اتم پالادیوم در مکان جای خالی در ساختار نانولوله کربنی قرار دارد و دیگری هنگامی که جای خالی وجود ندارد.

انرژی کل سیستم هنگامی که اتم کربن به پالادیوم نزدیک‌تر است، $15837/58641$ eV بدست آمده است.

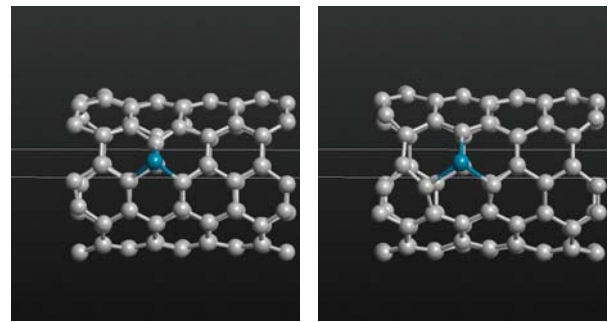
تصویر این شبیه‌سازی در شکل (۸) مشاهده می‌شود.



شکل ۸. شبیه‌سازی نانولوله کربنی در حضور مولکول گاز.



(الف) (ب)



(د) (ج)

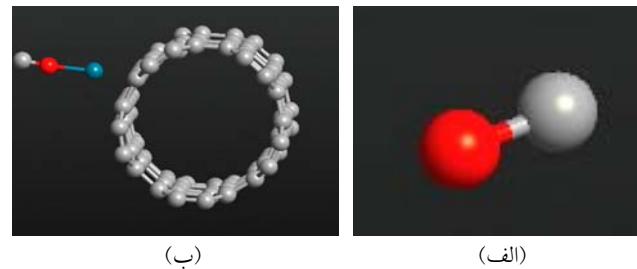
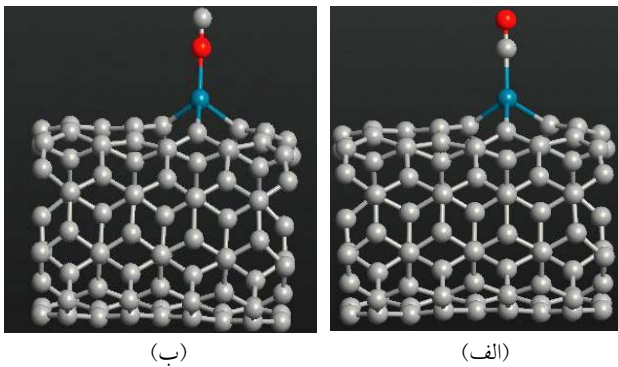
شکل ۶. شبیه‌سازی سیستم متشکل از نانولوله کربنی دارای جای خالی و اتم پالادیوم (الف) ورودی شبیه‌سازی از روبرو، (ب) نتیجه شبیه‌سازی از روبرو، (ج) ورودی شبیه‌سازی از دید بالا و (د) نتیجه شبیه‌سازی از دید بالا.

جدول ۲. اندازه‌گیری انرژی کل ساختار با جای خالی.

انرژی کل خوانده شده	ساختار مورد سنجش
-۱۵۰۷۹/۶۷۴۲۸	نانولوله به همراه پالادیوم
-۱۳۹۷۵/۲۲۵۳۳	نانولوله به تنهایی
-۱۰۹۷/۰۶۲۹۲	پالادیوم به تنهایی
-۷/۳۸۶۰۳	انرژی جذب پالادیوم روی نانولوله کربنی دارای جای خالی

۳-۲- بررسی میزان جذب مولکول منواکسیدکربن

در این مرحله نیز پیش از انجام محاسبات اصلی، شبیه‌سازی‌هایی با استفاده از دینامیک مولکولی صورت گرفته تا نحوه قرارگیری مولکول منواکسیدکربن نسبت به ساختار، مشخص گردد. شکل ۷-الف، به عنوان ورودی به سیستم اعمال شده و شکل ۷-ب به دست آمده است.



شکل ۹. شبیه‌سازی (الف) تک مولکول گاز منو اکسید کربن و (ب) نانولوله کربنی در حضور مولکول گاز.

شکل ۱۰. نانولوله کربنی به همراه مولکول گاز در حالت (الف) جای خالی و نزدیک‌تر بودن سر کربنی مولکول به نانولوله و (ب) جای خالی و نزدیک‌تر بودن سر اکسیژنی مولکول گاز به نانولوله.

انرژی کل اندازه‌گیری شده در مجاورت مولکول منواکسیدکربن، با وجود جای خالی در ساختار، هنگامی که مولکول یک‌بار از سر کربنی‌اش و بار دیگر از سر اکسیژنی‌اش به نانولوله نزدیک شده، به ترتیب $15668/21472$ eV و $15670/26049$ eV می‌باشد. جدول ۴ مقادیر انرژی جذب اندازه‌گیری شده را برای مجموعه آزمایش‌های صورت گرفته، نشان می‌دهد.

جدول ۴. مقادیر مربوط به انرژی جذب منواکسید کربن روی نانولوله کربنی.

انرژی به (eV)	اگر کربن به ساختار نزدیک‌تر باشد	اگر اکسیژن به ساختار نزدیک‌تر باشد
نانولوله کربنی + مولکول CO	$15670/26049$	$15668/21472$
نانولوله	$15079/67428$	
مولکول CO	$589/67262$	
انرژی جذب مولکول CO	$0/91359$	$1/13218$

۴- نتیجه‌گیری

نتایج شبیه‌سازی نشان می‌دهد که انرژی جذب اتم پالادیوم بر روی سطح نانولوله کربنی هم در حالت موازی با سطح و هم در حالت جای خالی به میزان مطلوبی بوده که امکان‌پذیر بودن ساخت چنین ساختاری را نشان می‌دهد، اما میزان انرژی جذب اتم پالادیوم در حالت جای خالی، بیشتر

انرژی کل برای مولکول منواکسیدکربن، $589/67079$ محاسبه شده است. تصویر این شبیه‌سازی در شکل ۹- الف، مشاهده می‌شود. انرژی کل هنگامی که اتم اکسیژن به پالادیوم نزدیک‌تر است (شکل ۹-ب)، $15836/01559$ eV بدست آمده است.

جدول ۳. مقادیر به دست آمده از اندازه‌گیری انرژی کل ساختار موازی.

انرژی به (eV)	اگر کربن به ساختار نزدیک‌تر باشد	اگر اکسیژن به ساختار نزدیک‌تر باشد
ساختار + مولکول	$15838/32648$	$15836/01561$
ساختار	$15246/04193$	
مولکول	$589/67262$	
انرژی جذب مولکول	$2/61193$	$0/30106$

خلاصه‌ای از مقادیر اندازه‌گیری شده برای سنجش میزان جذب مولکول گاز در حالت موازی در جدول ۳ آمده است.

حالت دیگر مربوط به شرایطی است که نانولوله کربنی جای خالی دارد و اتم پالادیوم در مجاورت جای خالی، قرار داده شده است. همان‌طور که برای ساختار با حالت موازی دو حالت در نظر گرفته شد، این بار نیز دو حالت در نظر گرفته می‌شود. شکل ۱۰ (الف و ب) این دو حالت را نشان می‌دهند.

10. Huang C.K., Prediction model of thermal conductivity for composite materials with nano particles, *In: Technical proceedings of the NSTI nanotechnology conference and trade show, NSTI*, 2007.
11. Rafiee Roham, Maleki Moghadam Reza., Simulation of impact and post-impac behavior of carbon nanotube reinforced polymer using multi-scale finite element modeling, *Comput Mater Sci*, 2012, 63, 261-8.
12. Kostopoulos V., Baltopoulos A., Karapappas P., Vavouliotis A., Paipetis A., Impact and after-impact properties of carbon fibre reinforced composites enhanced with multi-wall carbon nanotubes, *Compos Sci Technol*, 2010, 70, 553-63.
13. Wang, X., Qunqing, Li., Xie, Jing, Zhong, Jin. , Jinyong, Wang, Yan, Li, Kaili, Jiang. , Shoushan, Fan., Fabrication of Ultralong and Electrically Uniform Single-Walled Carbon Nanotubes on Clean Substrates, *Nano Letters* 9, 2009, 3137-3141.
14. Gullapalli, S.; Wong, M.S., Nanotechnology: A Guide to Nano-Objects, *Chemical Engineering Progress*, 2011, 107, 5, 28-32.
15. Yoosefian, Mehdi, Zahra Barzgari, and Javad Yoosefian., Ab initio study of Pd-decorated single-walled carbon nanotube with C-vacancy as CO sensor, *Structural Chemistry*, 2014, 25, 1, 9-19.
16. Wang R, Zhang D, Sun W, Han Z, Liu C., A novel aluminum-doped carbon nanotubes sensor for carbon monoxide., *J Mol Struct THEOCHEM*, 2007, 806:93-97.
- است که نشان‌دهنده ساخت راحت‌تر ساختار و پایداری بیشتر آن تحت شرایط محیطی می‌باشد. با در نظر گرفتن انرژی جذب مولکول گاز توسط ساختار در هنگام وجود یا عدم وجود جای خالی مشاهده می‌شود که مولکول در ساختار موازی با قدرت بیشتری جذب می‌شود و تغییرات انرژی کل سیستم، قبل و بعد از حضور مولکول بیشتر است. در نتیجه با توجه به این که انرژی جذب پالادیوم در ساختار موازی نیز در سطح مطلوبی می‌باشد، این ساختار برای ساخت حسگر مورد تایید می‌باشد. با توجه به مقدار مناسب انرژی جذب، می‌توان نتیجه گرفت که این ساختار در عمل قابلیت ساخت و کاربرد برای شناسایی گاز منواکسیدکربن را دارا است.

مراجع

1. Li, C., Lv, M., Zuo, J., Huang X., SnO₂ Highly Sensitive CO Gas Sensor Based on Quasi-Molecular-Imprinting Mechanism Design. *Sensors*. 2015, 15, 2, 3789-800.
2. Meskath S., Urban G., Heinze J., A new optochemical chlorine gas sensor based on the application of amphiphilic co-networks as matrices. *Sensors and Actuators B: Chemical*. 2011, 151, 2, 327-32.
3. Paczkowski S., Sauerwald T., Weiß A., Bauer M, Kohl D., Schütz S. , Biomimetic gas sensors for large-scale drying of wood particles. InSPIE Smart Structures and Materials+ Nondestructive Evaluation and Health Monitoring *International Society for Optics and Photonics*. , 2011, 797505-797505,
4. Goto T., Hyodo T., Kaneyasu K., Yanagi H., Shimizu Y., CO Sensing Properties of Electrochemical Gas Sensors Using an Anion-Conducting Polymer as an Electrolyte. *ECS Transactions*. 2013, 50, 12, 267-72.
5. Fine G.F., Cavanagh L.M., Afonja A, Binions R. Metal oxide semi-conductor gas sensors in environmental monitoring. *Sensors*. 2010, 10, 6, 5469-502.
6. Kim BC, Park SW, Lee DG., Fracture toughness of the nano-particle reinforced epoxy composite, *Compos Struct*, 2008, 86, 69-77.
7. Qinghua L., Jianhua Z., Effects of nano fillers on the conductivity, adhesion strength, and reliability of isotropic conductive adhesives (ICAs), *Key Eng Mater*, 2007, 353-358, 2879-82.
8. Salehi-Khojin A, Jana S, Wei-Hong Z. Thermal-mechanical properties of a graphitic-nanofibers reinforced epoxy, *J Nanosci Nanotechnol*, 2007, 7, 898-906.
9. Zhai L.L., Ling G.P., Wang Y.W., Effect of nano-Al₂O₃ on adhesion strength of epoxy adhesive and steel, *Int J Adhes Adhes*, 2008, 28, 23-8.