

مطالعه رسانندگی الکتریکی نانوحسگر ZnO-GS برای شناسایی CH_4 و CO_2 ، H_2S

در دمای اتاق

رحمانی، صادق؛ محمدی منش، ابراهیم

دانشکده علوم دانشگاه ملایر، کیلومتر ۵ جاده اراک، ملایر، همدان

چکیده

در این مقاله، شناسایی متان، دی اکسید کربن و سولفید هیدروژن با استفاده از نانوساختار حاصل از صفحات گرافن آلیپده شده به اکسید روی مطالعه شد. رسانندگی الکتریکی نانوساختار ZnO-GS در دمای اتاق قبل و بعد از جذب گازهای CH_4 ، CO_2 و H_2S بررسی شد. نتایج نشان می دهد که در دمای اتاق رسانندگی الکتریکی حسگر افزایش می یابد با جذب این گازها که می توان از آن برای شناسایی متان، دی اکسید کربن و سولفید هیدروژن استفاده کرد.

The electrical conductivity nanosensor ZnO-GS to identify H_2S , CO_2 and CH_4 at room temperature

Rahmani, Sadegh; Mohammadi-Manesh, Ebrahim

Department of Physics, Faculty of Science, Malayer University, Malayer,

Abstract

In this paper, the identification of methane (CH_4), carbon dioxide (CO_2) and hydrogen sulfide (H_2S) were studied using zinc oxide decorated on graphene sheets (ZnO-GS) nanostructure. The electrical conductance of ZnO-GS nanosensor at room temperature before and after the adsorption of CH_4 , CO_2 and H_2S was investigated. The results revealed that at room temperature, the sensor's electrical conductance increases following the adsorption of these gases, which can be used as an index for CH_4 , CO_2 and H_2S identification.

PACS No.71, 10

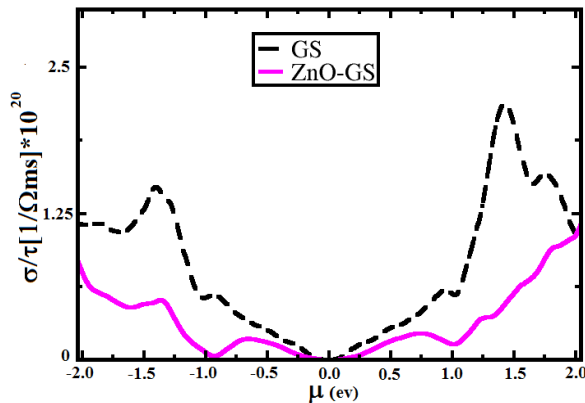
مقدمه

گازها از گاز طبیعی با استفاده از گرافن و آلیپده کردن آن به اکسید روی صورت گرفته است. از آنجایی برای شناسایی این گازها با استفاده از نانوساختار گرافن- اکسید روی مطالعاتی منتشر نشده است، در این مقاله به بررسی تغییرات رسانندگی الکتریکی نانوساختار گرافن- اکسید روی بعد از جذب این گازها می پردازیم.

شبیه سازی و محاسبات

در این مجموعه محاسبات، هندسه اتمی و ساختار الکترونی بر اساس نظریه تابعی چگالی (DFT) و با استفاده از بسط تابع موج تخت و با استفاده از بسته نرم افزاری کوانتوم اسپرسو انجام گرفت [۴]. برای بهینه سازی پیکربندیها، انرژی تبادل- همبستگی با استفاده از تقریب شیب تعمیم یافته GGA با تابعی PBE محاسبه

اکسید روی-گرافن ترکیب مناسبی برای کاربرد به عنوان ماده اصلی انواع مختلف حسگرها می باشد. در سالهای گذشته تلاش های بسیاری برای تولید نانو کامپوزیت گرافن- اکسید روی صورت گرفته است [۱]. این ترکیب با روش های مختلفی از جمله روش اولتراسونیک، الکتروشیمیایی و مواد ارگانیک از فاز بخار تولید شده است [۲]. تاکنون از این ترکیب برای ساخت حسگرهای زیستی از جمله گلوکز [۳]، سلول های خورشیدی، خواص فتوکاتالیستی و کاربرد در دیگر حسگرها استفاده شده است. گازهای دی اکسید کربن (CO_2)، سولفید هیدروژن (H_2S) و متان (CH_4) در صنایع کشور از اهمیت بسزایی برخوردار است و تاکنون تحقیقات بسیار کمی برای شناسایی و جداسازی این



شکل ۱: تغییر رسانندگی الکتریکی ZnO-GS (خطوط قرمز) و در دمای اتاق و مقایسه آن با گرافن خالص GS (نقطه چین مشکی)؛ صفر نمودار سطح فرمی است.

۲- بررسی رسانندگی نانوحسگر ZnO-GS بعد از جذب گاز H_2S در دمای اتاق

در این بخش فرآیند جذب H_2S بر نانوحسگرهای ZnO-GS مورد بررسی قرار گرفت. ساختارهای بهینه حاصل از این فرآیند جذب در شکل ۲ نشان داده شده است. همانگونه که در شکل مشاهده می شود گاز سولفید هیدروژن از طریق اتم هیدروژن در ساختار ZnO-GS با اکسیژن پیوند داده است که طول این پیوند برابر $1/0.3$ آنگستروم است. برای جذب H_2S بر ZnO-GS، انرژی جذب 0.73 - الکترون ولت محاسبه شد. این نتایج حکایت از جذب قوی سولفید هیدروژن بر این ساختار در مقایسه با گرافن خالص دارد. انرژی جذب گرافن خالص در محاسبات حدود 0.02 - الکترون ولت اندازه گیری شد که حکایت از جذب ضعیف سولفید هیدروژن بر گرافن خالص دارد. نتایج محاسبات حاضر نشان می دهد با افزودن اکسید روی بر گرافن، قدرت جذب سولفید هیدروژن بر ZnO-GS در مقایسه با گرافن خالص بیش از 37 برابر افزایش یافته است. برای این ساختار گاز سولفید هیدروژن پیوند شیمیایی تشکیل داده است.

با جذب سولفید هیدروژن بر نانوحسگر ZnO-GS باری معادل 0.07 الکترون از H_2S به ZnO-GS منتقل شده است. این می تواند نشانه خوبی برای تغییر در رسانندگی ساختار بعد از جذب سولفید هیدروژن نیز باشد. تغییرات رسانندگی حسگر ZnO-GS قبل و

شد. محاسبه تغییرات رسانندگی الکتریکی ساختارهای حاصل، با استفاده از کد محاسباتی BoltzTrap [۵] و بکارگیری فایل خروجی نتایج محاسبات غیر خودسازگار حاصل از محاسبات اولیه انجام شد. سیستم مورد مطالعه، ابرباخته گرافنی با 50 اتم کربن و فاصله بین صفحات گرافن 21 آنگستروم انتخاب شد. انرژی جنبشی قطع بسط امواج تخت تابع موج 45 ریدبرگ و چگالی بار 320 ریدبرگ تعیین شد. همچنین انتگرال گیری در منطقه اول بریلوئن با مش بندی به روش Monkhorst-Pack و با نقاط k به تعداد $6 \times 6 \times 1$ برای محاسبات ساختار بهینه و خود سازگار و نقاط $18 \times 18 \times 1$ برای محاسبات غیر خود سازگار مورد نیاز برای بدست آوردن نمودار رسانندگی الکتریکی در دمای اتاق استفاده شده است.

نتایج و بحث

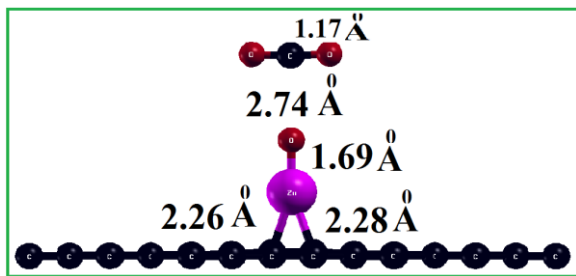
۱- بررسی رسانندگی نانوحسگر ZnO-GS در دمای اتاق

برای تشکیل ساختار ZnO-GS، ابتدا حالت های مختلف جذب مولکول ZnO بر گرافن خالص مورد بررسی قرار گرفت. انرژی جذب بهینه ترین حالت برای ZnO-GS برابر 0.65 - الکترون ولت محاسبه شد. این انرژی جذب حکایت از جذب شیمیایی ZnO بر گرافن دارد. طول پیوند کربن- روی برای ZnO-GS برابر $2/32$ آنگستروم محاسبه شد و نتایج حکایت از ایجاد ترکیب پایدار ZnO-GS در دمای اتاق دارد.

به منظور بررسی ساختار حاصل، رسانندگی الکتریکی GS، ZnO-GS در دمای اتاق محاسبه و تغییرات این رسانندگی بر حسب انرژی سطح فرمی در شکل ۱ رسم شده است. همانگونه که در شکل ۱ مشاهده می شود بعد از جذب ZnO بر گرافن رسانندگی الکتریکی کاهش یافت. کاهش رسانندگی حکایت از تغییر در توزیع چگالی بار در ساختار گرافن بعد از جذب اکسید روی دارد. نتایج محاسبات انتقال بار مقدار 0.06 الکترون از اکسیدروی به گرافن را نشان می دهد.

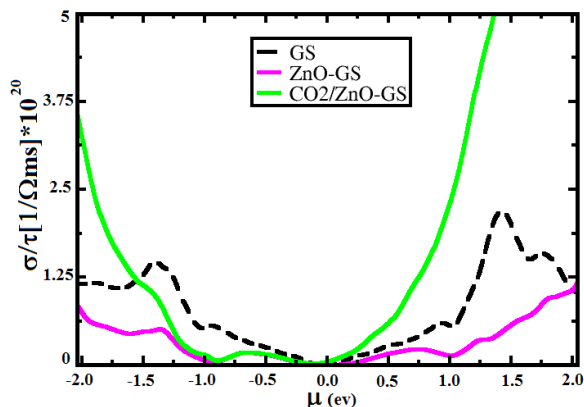
۳- بررسی رسانندگی نانوحسگر ZnO-GS بعد از جذب گاز CO₂ در دمای اتاق

در این قسمت رسانندگی الکتریکی حسگر ZnO-GS قبل و بعد از جذب CO₂ محاسبه و با یکدیگر مقایسه شده اند. ساختار بهینه در شکل ۴ نمایش داده شده است. در بهینه ترین حالت با جذب CO₂ بر حسگر گرافن- اکسید روی مقدار انرژی جذب ۰/۱۴- الکترون ولت را نشان می دهد که در مقایسه با جذب CO₂ بر گرافن خالص انرژی جذب حدود ۷ برابر شده است و خود نشان دهنده قابلیت بالای حسگر ZnO-GS برای جذب گاز CO₂ در مقایسه با گرافن خالص است. نتایج محاسبات فرآیند انتقال بار پس از جذب دی اکسید کربن بر ساختار نیز نشان می دهد که با جذب متان بر ZnO-GS باری معادل ۰/۱۹ الکترون از ZnO- GS به CO₂ منتقل می شود.



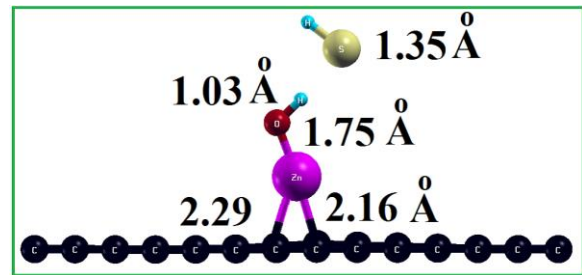
شکل ۴: جذب CO₂ بر نانوساختار ZnO-GS

تغییرات رسانندگی حسگر در دمای اتاق بعد از جذب دی اکسید کربن محاسبه و نمودار تغییرات آن در شکل ۵ نشان داده شده است.



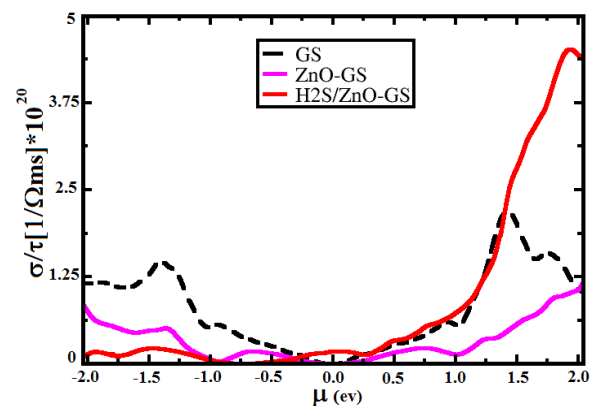
شکل ۵: تغییرات رسانندگی الکتریکی حسگر ZnO-GS پس از جذب CO₂ همان گونه که در شکل مشاهده می شود، با جذب دی اکسید کربن بر حسگر ZnO-GS، رسانندگی الکتریکی در دمای اتاق به شدت

بعد از جذب سولفید هیدروژن محاسبه و نمودار آن در شکل ۳ نشان داده شده است.



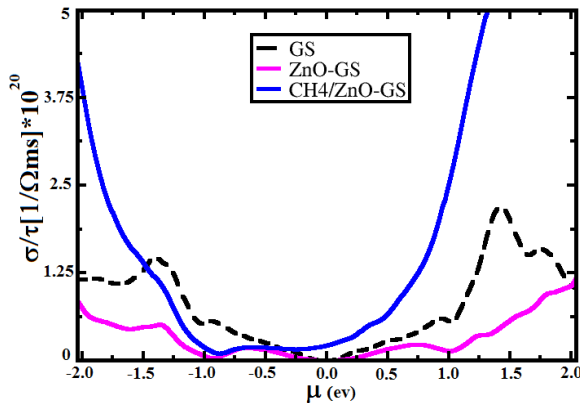
شکل ۲: جذب H₂S بر نانوساختار ZnO-GS

همانگونه که در شکل مشاهده می شود بالاتر از سطح فرمی تا انرژی ۰/۲۵ الکترون ولت تغییر خاصی در رسانندگی حسگر بعد از جذب سولفید هیدروژن مشاهده نمی شود اما با افزایش انرژی بیشتر از این مقدار رسانندگی حسگر بعد از جذب گاز افزایش قابل ملاحظه ای در مقایسه با قبل از جذب گاز دارد. با جذب گاز H₂S بر نانوساختار ZnO-GS رسانندگی افزایش یافت.



شکل ۳: تغییرات رسانندگی الکتریکی حسگر ZnO-GS پس از جذب H₂S

در یک ساختار واقعی با توجه به تعداد زیاد نانو بلورهای ZnO بر صفحه گرافن، انتظار می رود با ورود گاز H₂S بر روی نانو حسگر ZnO-GS الکترون های زیادی به صفحه گرافن منتقل شود. در این صورت به راحتی جریان حاصل از گاز جذب شده بر نانو کامپوزیت اندازه گیری خواهد شد. نتایج این محاسبات نشان می دهد که نانوساختار ZnO-GS در مجاورت گاز سولفید هیدروژن و در دمای اتاق خاصیت حسگری نسبتاً خوبی از خود نشان می دهد و می توان از آن در شناسایی گاز H₂S بهره برد.



شکل ۷: تغییرات رسانندگی الکتریکی حسگر ZnO-GS پس از جذب CH₄

نتیجه گیری

با جذب H₂S، CO₂ و CH₄ بر نانوساختار گرافن-اکسید روی، مشاهده شد که رسانندگی الکتریکی نسبت به سطح فرمی برای هر سه گاز افزایش می یابد که می توان از آن به عنوان یک شاخص مهم برای شناسایی گازهای مورد مطالعه بهره برد. با مقایسه تغییرات رسانندگی برای هر سه گاز با یکدیگر همچنین مشاهده شد، تغییرات رسانندگی حسگر بعد از جذب دی اکسید کربن و متان مشابه یکدیگر می-باشند و این تغییرات در مقایسه با رسانندگی الکتریکی حسگر بعد از جذب سولفید هیدروژن بیش از دو برابر افزایش یافته است. بنابراین می توان از این ساختار برای شناسایی و تفکیک گاز H₂S از دو گاز دیگر CO₂ و CH₄ بهره برد. با توجه به تغییرات رسانندگی مشابه نانوساختار در مقابل گازهای CO₂ و CH₄ نمی-توان از این حسگر برای جداسازی گازهای CO₂ و CH₄ با استفاده از شاخص تغییر رسانندگی استفاده کرد.

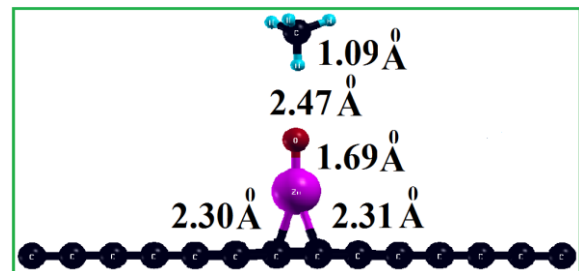
مرجع ها

- [1] H. X. Chang, Z. H. Sun, K. Y. F. Ho, X. M. Tao, F. Yan and W. M. Kwok; "A highly sensitive ultraviolet sensor based on a facile in situ solution-grown ZnO nanorod/graphene hetero structure"; *Nanoscale* **3**, No. 1 (2011) 258-264.
- [2] Y. J. Kim, J. H. Lee and G. C. Yi; "Vertically aligned ZnO nanostructures grown on graphene layers"; *Applied Physics Letters* **95**, No. 21 (2009) 213101-213103.
- [3] T. Kavitha, A. I. Gopalan, K. P. Lee and S. Y. Park; "Glucose sensing, photocatalytic and antibacterial properties of graphene-ZnO nanoparticle hybrids"; *Carbon* **50**, No. 8 (2012) 2994-3000.
- [4] P. Giannozzi, S. Baroni, N. Bonini, M. Calandra, R. Car, C. Cavazzoni and et al; "Quantum espresso"; *Condensed Matter* **21**, No. 39 (2009) 395502-395521.
- [5] G. K. H. Madsen and D. J. Singh; "BoltzTraP. A code for calculating bandstructure dependent quantities" *Computer Physics Communications* **175**, No. 1 (2006) 67-71.

افزایش می یابد. این تغییر رسانندگی الکتریکی در دمای اتاق بعد از جذب دی اکسید کربن در مقایسه با سولفید هیدروژن سریع تر می شود و همانگونه که مشاهده می شود بالاتر از سطح فرمی رسانندگی سیستم به شدت افزایش می یابد. به این ترتیب از نانو کامپوزیت ZnO-GS می توان به عنوان یک حسگر مبتنی بر کاربرد بالقوه برای نظارت بر آلودگی هوا در دمای اتاق با مصرف انرژی کم و هزینه پایین بهره برد.

۴- بررسی رسانندگی نانوحسگر ZnO-GS بعد از جذب گاز CH₄ در دمای اتاق

در این بخش به بررسی تغییرات رسانندگی الکتریکی حسگر ZnO-GS بعد از جذب CH₄ پرداخته شده است که پس از بررسی همه پیکربندی های جذب CH₄ بر حسگر گرافن-اکسید روی، بهینه ترین حالت انتخاب شد و ساختار آن در شکل ۶ نشان داده شده است. حسگر گاز متان را با انرژی ۰/۰۶- الکترون ولت جذب می کند که در مقایسه با گرافن خالص انرژی جذب ۳ برابر شده است. نتایج محاسبات فرآیند انتقال بار پس از جذب متان بر ساختار نیز نشان می دهد که با جذب متان بر ZnO-GS باری معادل ۰/۰۱۳ الکترون از ZnO-GS به CH₄ منتقل می شود.



شکل ۶: جذب CH₄ بر نانوساختار ZnO-GS

این نتایج همانگونه که در شکل ۷ نشان داده شده است، حکایت از این دارد که در اثر جذب متان بر گرافن-اکسید روی تغییر محسوسی در رسانندگی الکتریکی ساختار حسگر گرافن-اکسید روی پس از جذب CH₄ انجام می شود. نتایج این محاسبات نشان می دهد که نانو حسگر ZnO-GS در مجاورت گاز متان و در دمای اتاق خاصیت حسگری خوبی از خود نشان می دهد و می توان از آن در شناسایی گاز CH₄ بهره برد.