

مطالعه نظری جذب متان بر روی نانولوله کربنی تک دیواره (۸۰) آرایش یافته با دیمر نقره-پالادیوم

زهرا کرمی هرستانی*، صابر جمالی حاجیانی

گروه مهندسی برق، واحد شیراز، دانشگاه آزاد اسلامی، شیراز، ایران

چکیده: در مقاله حاضر نانولوله کربنی (۸۰) آرایش یافته با دیمر نقره-پالادیوم و خواص حسگری آن در مجاورت مولکول متان، با استفاده از نظریه تابعی چگالی مورد بررسی قرار گرفته است. جذب مولکول متان بر روی ساختار از نوع فیزیکی و گرماده با انرژی جذب 340 meV است. مقدار انرژی جذب حاکی از افزایش قابل توجه جذب مولکول متان بر روی نانولوله آرایش یافته در مقایسه با نانولوله خالص (80 meV) می باشد. ساختار پیشنهادی در حالت بدون گاز یک نیمه هادی مغناطیسی دوقطبی با گاف وارونگی اسپین بسیار کوچک برابر با 150 meV است، از سوی دیگر انرژی جذب متان بر روی ساختار مقدار قابل توجه در حدود دو برابر گاف انرژی می باشد. همین امر امکان تزریق حامل به نانولوله در اثر گرمای واکنش و به دنبال آن تغییر هدایت را فراهم می آورد. بنابراین ساختار پیشنهادی، پتانسیل به کارگیری به عنوان حسگر بر مبنای تغییر دمای واکنش و تغییر رسانایی را دارا می باشد.

واژگان کلیدی: نانولوله کربنی، دیمر نقره-پالادیوم، متان، نظریه تابعی چگالی.

Zahra.Karamiherastani@iau.ac.ir

در حال حاضر حسگرهای تجاری متان مبتنی بر اکسیدهای فلزی نیمه هادی ساخته می شوند. این حسگرها با حساسیت بالایی قادر به شناسایی متان هستند ولی غالباً دمای کار بالایی دارند و متعاقباً انرژی زیادی مصرف می کنند. از سوی دیگر با توجه به اینکه متان گازی اشتعال پذیر است، دمای کار بالای حسگر می تواند عامل انفجار باشد و از درجه ایمنی حسگر بکاهد [۲].

بنابراین لزوم طراحی حسگرهای جدید که در دماهای پایین تری کار کنند هم از لحاظ کاهش مصرف انرژی و هم از جهت افزایش ایمنی امری ضروری است. یکی از روش های حل این مشکل به کارگیری نانو ساختارها می باشد. اخیراً ساختارهای نانو بر پایه کربن به یکی از موضوعات داغ در تمامی حوزه ها و همچنین حوزه حسگرهای گاز تبدیل شده است [۷-۳].

۱- مقدمه

با توجه به ذخایر بزرگ متان در سراسر جهان و اثرات زیست محیطی کم آن، این گاز به طور گسترده ای به عنوان یک منبع انرژی قابل اعتماد و در دسترس مورد استفاده قرار می گیرد. کاربردهای خانگی و صنعتی این گاز در طول سال های اخیر افزایش چشمگیری داشته است. متان گازی بی رنگ، بدون بو و غیر سمی اما بسیار قابل اشتعال است. این گاز می تواند در هوا مخلوط انفجاری تشکیل دهد. غلظت حد انفجار پایین آن (LEL) $4/9\%$ و حد انفجار بالا (UEL) $15/4\%$ گزارش شده است [۱]. بنابراین، نیاز به حسگرهای قابل اعتماد و بسیار حساس برای تشخیص متان در غلظت های پایین برای جلوگیری از انفجارهای تصادفی ناشی از نشت، امری ضروری است.

منزوی انجام گیرد، طول سلول واحد در دو راستای عرضی (عمود بر محور نانولوله) به اندازه کافی بزرگ (۲۰ آنگستروم) در نظر گرفته شد. انرژی قطع برای کلیه محاسبات ۵۵ Ry در نظر گرفته شد. تعداد نقاط K برای انتگرال گیری منطقه اول بریلئون به روش Monkhorst-Pack، ۸×۸×۱ در نظر گرفته شده است [۱۸]. واهلش ساختاری هندسی در هر سه بعد تا وقتی که نیروی وارد بر هر اتم ۰/۰۰۱ Ry/Bohr شود ادامه یافت.

انرژی جذب (E_{ads}) از رابطه (۱) بدست می آید:

$$E_{ads} = E_{tot}(F-Adsorbent) - E_{tot}(Adsorbent) - E_{tot}(F) \quad (1)$$

که در آن $E_{tot}(Adsorbent)$ انرژی کل ماده جاذب (که ممکن است نانولوله کربنی خالص یا آرایش یافته با دیمر باشد) و $E_{tot}(F)$ انرژی کل گونه جذب شونده در حالت منزوی است. همچنین $E_{tot}(F-Adsorbent)$ انرژی کل ماده جاذب پس از جذب گونه خارجی می باشد. به طور کلی، $E_{ads} < 0$ نشان دهنده فرآیند جذب به طور خود به خودی و گرماده می باشد.

۳- نتایج و بحث

نتایج ارایه شده در مقاله حاضر به دو بخش کلی تقسیم شده است. در بخش اول، نانولوله کربنی آرایش یافته با دیمر نقره-پالادیوم مورد مطالعه قرار گرفته و نتایج به دست آمده با نتایج مربوط به نانولوله کربنی خالص مورد مقایسه قرار گرفته است. بخش دوم به جذب متان بر روی نانولوله کربنی آرایش یافته با دیمر پرداخته است و مکانیزم حسگری این ساختار را توضیح داده است.

۳-۱- نانولوله کربنی آرایش یافته با دیمر نقره - پالادیوم

موقعیت بهینه جذب دیمر بر روی نانولوله کربنی در شکل ۱ نشان داده شده است.

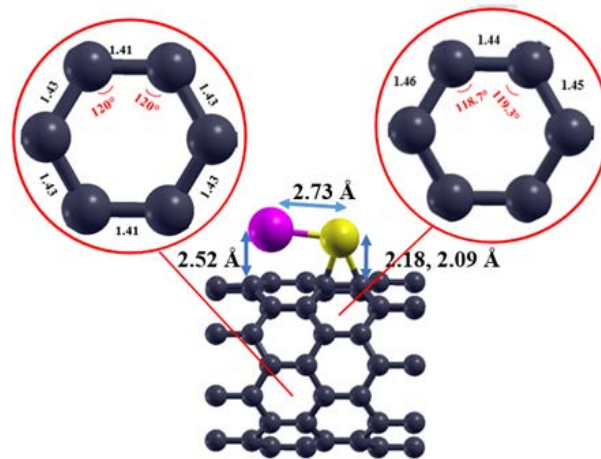
مقدار انرژی جذب برابر با ۱/۷۴ eV - می باشد که حاکی از جذب قوی شیمیایی و گرماده دیمر بر روی سطح نانولوله کربنی است. الکترون π عمود بر سطح نانولوله پس از جذب دیمر بر روی سطح، در تشکیل پیوند کوالانسی با پالادیوم شرکت میکند بنابراین در محل جذب، ساختار از هیبریداسیون sp^2 فاصله می گیرد و به سمت

نانولوله های کربنی (CNT) به دلیل خواص منحصر به فرد الکتریکی، نسبت سطح به حجم بالا، پایداری حرارتی و استحکام مکانیکی قابل توجه به عنوان ماده حساس به گاز مورد توجه قرار گرفته اند [۸، ۹]. وجود الکترون های π روی سطح نانولوله احتمال جذب گاز بر روی CNT را افزایش می دهد و منجر به درجاتی از انتقال بار بین گاز و CNT می شود. این انتقال بار باعث تغییر رسانایی و مقاومت در CNT می شود که به عنوان پارامتر حسگری قابل تجزیه و تحلیل می باشد. در عین حال نانولوله های کربنی در جذب گازهای نجیب و برخی از مولکول های غیرقطبی مانند متان ضعیف عمل می کنند. همچنین دارای محدودیت هایی از جمله زمان بازیابی طولانی هستند [۱۰]. برای اصلاح این ضعف ها روش های اصلاحی متعددی پیشنهاد شده است. از جمله این روش ها تزئین سطح نانولوله توسط فلزات واسطه می باشد [۱۰، ۱۱]. مطالعات گذشته نشان می دهد تزئین سطح نانولوله کربنی با فلزاتی مانند Pd، Ag و Pt باعث بهبود قابل توجه جذب متان بر روی نانولوله کربنی می شود [۴، ۱۲، ۱۳]. در این مقاله از دیمر نقره-پالادیوم برای تزئین سطح نانولوله کربنی (۸۰) استفاده شده است. سپس تاثیر حضور این دیمر در بهبود جذب متان بر روی سطح نانولوله مورد مطالعه قرار گرفته است. محاسبات بر اساس نظریه تابعی چگالی [۱۴] و با استفاده از نرم افزار Quantum Espresso [۱۵] انجام شده است.

۲- روش تحقیق

محاسبات مقاله حاضر با استفاده از بسته نرم افزاری کوانتوم اسپرسو (بر اساس نظریه تابعی چگالی) انجام شده است. در انجام محاسبات از شبه پتانسیل فوق نرم همراه با تابعی تبدلی - همبستگی با تقریب گرادیان تعمیم یافته (GGA) استفاده شده است [۱۶]. به منظور دقت محاسبات مربوط به انرژی جذب، نیروهای واندروالسی با استفاده از روش DFT-D2 در نظر گرفته شده است [۱۷]. نانولوله کربنی مورد مطالعه در این مقاله از نوع تک دیواره با کایرالیته (۸۰) می باشد. ابرباخته به کار رفته شامل دو یاخته بسیط (۳۲ اتم کربن) به طول ۸/۵ آنگستروم دارای ۶۴ اتم می باشد. انتخاب دو برابر یاخته بسیط بدین جهت انجام شده است تا بتوان از برهم کنش گونه های خارجی جذب شده بر روی سطح نانولوله چشم پوشی نمود. برای اطمینان از اینکه کلیه محاسبات بر روی تک نانولوله

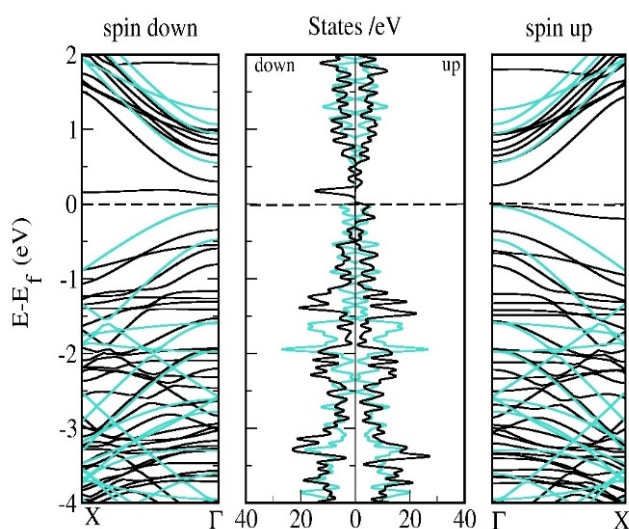
کمینه نوار ظرفیت قرار داد و به این ترتیب جریان کاملاً قطبیده‌ی با اسپین بالا تولید نمود. به طور مشابه با تغییر میزان انرژی فرمی از طریق اعمال ولتاژ گیت منفی و قرار دادن آن در محدوده بیشینه و کمینه نوار هدایت می‌توان جریان کاملاً قطبیده‌ی با اسپین پایین ایجاد نمود. بنابراین تنها با اعمال ولتاژ گیت (میدان الکتریکی) منفی و مثبت می‌توان قطبش اسپینی جریان را تغییر داد. با توجه به نتایج به دست آمده ساختار پیشنهادی می‌تواند به عنوان یک گزینه در ساخت ادوات اسپینترونیک مانند شیرهای اسپینی یا ترانزیستورهای اثر میدانی اسپینی مورد استفاده قرار گیرد.



شکل ۱: موقعیت بهینه جذب دایمر نقره-پالادیوم بر روی نانولوله کربنی. رنگ زرد و بنفش به ترتیب نشان دهنده پالادیوم و نقره می‌باشد.

هیبریداسیون sp^3 متمایل می‌شود. همین امر موجب افزایش طول پیوندهای کربن-کربن و کاهش زوایا در محل جذب مطابق شکل شده است.

ساختار نواری و چگالی حالات نانولوله کربنی (۰ و ۸) قبل و بعد از جذب دایمر در شکل ۲ نشان داده شده است. نانولوله (۰ و ۸) نیمه‌هادی نوع p با گاف مستقیم با مقدار 0.58 eV در نقطه گاما است. همچنین ساختار فاقد مغناطش می‌باشد. همانطور که در شکل ۲ نشان داده شده است جذب دایمر بر روی نانولوله موجب از بین رفتن تبه‌گنی نوارهای انرژی شده است. با توجه به جذب قوی دایمر بر روی ساختار و از بین رفتن تقارن ساختار این امر مورد انتظار است. محاسبات انتقال بار، حاکی از انتقال بار ضعیف به میزان 0.14 e از نانولوله کربنی به دایمر است که با توجه به تشکیل پیوند کووالانسی بین نانولوله و دایمر و طبیعت اشتراکی این نوع پیوند و همچنین وجود پیوند موثر نقره و پالادیوم مورد انتظار است. نکته حایز اهمیت تغییر نانولوله کربنی خالص از نیمه هادی نوع p غیر مغناطیسی به نیمه هادی مغناطیسی دو قطبی پس از جذب دایمر است. ساختار در کانال اسپینی بالا به صورت نیمه هادی نوع p با گاف انرژی مستقیم 0.27 eV در کانال اسپینی پایین به صورت نیمه‌هادی نوع n با گاف انرژی مستقیم 0.47 eV عمل میکند. گاف انرژی واقعی (گاف وارونگی اسپین) ساختار، مستقیم و برابر با 0.15 eV است. همچنین فاصله انرژی فرمی تا لبه نوار ظرفیت و هدایت 0.02 eV و 0.12 eV می‌باشد. بنابراین با تغییر میزان انرژی فرمی از طریق اعمال ولتاژ مثبت (به صورت ولتاژ گیت) می‌توان انرژی فرمی را به طور کامل در محدوده بیشینه و



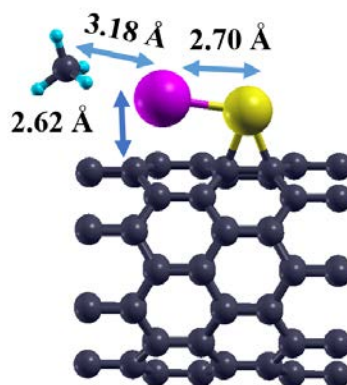
شکل ۲: ساختار نواری و چگالی حالات های انرژی نانولوله کربنی آرایش یافته با دایمر نقره-پالادیوم (رنگ مشکی) و نانولوله خالص (رنگ آبی)

۳-۲- نمودار نانولوله کربنی آرایش یافته با دایمر نقره -

پالادیوم در مجاورت گاز متان

ساختار و اهیده نانولوله کربنی (۰ و ۸) آرایش یافته با دایمر نقره-پالادیوم بعد از جذب متان در شکل ۳ نشان داده شده است. همانطور که در شکل ۳ مشاهده می‌شود مولکول متان از سر نقره بر روی دایمر جذب شده است. این امر به دلیل پیوند قوی پالادیوم با سطح نانولوله می‌باشد. این در حالی است که نقره پیوند ضعیف تری با سطح نانولوله برقرار نموده است. همین امر احتمال جذب متان از سر نقره نسبت به پالادیوم را افزایش می‌دهد. طول پیوند Ag-Pd و فاصله Ag تا سطح نانولوله پس از جذب متان تغییر یافته است که نشان دهنده متاثر شدن ساختار در اثر جذب متان است. فاصله مولکول متان تا دایمر در حدود 3 \AA آنگستروم می‌باشد

که نشان دهنده پیوند نسبتاً ضعیف متان با نانولوله آرایش یافته با دایمر می باشد.



شکل ۳: ساختار هندسی نانولوله کربنی آرایش یافته با دایمر نقره-پالادیوم بعد از جذب مولکول متان. رنگ زرد و بنفش به ترتیب نشان دهنده پالادیوم و نقره می باشد.

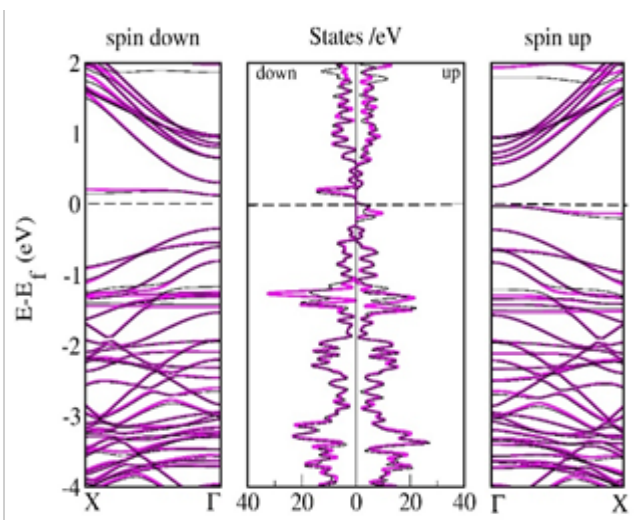
محاسبه انرژی جذب بر اساس معادله ۱ نیز موید این مطلب می باشد. انرژی جذب متان در این ساختار برابر 340 meV می باشد که نشان دهنده پیوند فیزیکی و از نوع گرماده می باشد. انرژی جذب به دست آمده با مقادیر گزارش شده در مرجع [۱۹، ۲۰] مبنی در جذب فیزیکی مولکول متان (به دلیل طبیعت پایدار آن) بر روی نانولوله کربنی آرایش یافته با اتم های نقره و پالادیوم (به صورت تک اتمی) تطبیق دارد. به هر حال مقایسه انرژی جذب در این ساختار با انرژی جذب متان بر روی نانولوله کربنی خالص (-80 meV) حاکی از بهبود فرایند جذب در حضور دایمر است. انرژی جذب متان بر روی ساختار پیشنهادی اگرچه در محدوده جذب فیزیکی قرار دارد ولی مقدار قابل قبولی جهت استفاده این ساختار به منظور آشکارسازی گاز به روش های مبتنی بر تغییر دما دارد. ضمن اینکه انرژی جذب متان بر روی ساختار به گونه ای است که بازگشت پذیری حسگر پس از خروج از محیط گاز متان را تضمین می کند. زمان بازیابی حسگر با استفاده از رابطه ۲ قابل محاسبه است. در این رابطه A طبق [۲۱، ۲۲] برابر با 10^{12} s^{-1} ، K ثابت بولتزمن، T دما برحسب کلوین و E_a سد پتانسیل است که معمولاً با انرژی جذب جایگزین می شود. طبق این رابطه انرژی جذب متان در محدوده مناسب قرار دارد.

$$\tau = A^{-1} \exp\left(-\frac{E_a}{KT}\right) \quad (2)$$

محاسبات انتقال بار بین متان و ساختار Dimer/CNT، انتقال

بار 0.5 از متان به نانولوله را نشان می دهد که با توجه به جذب فیزیکی، قابل پیش بینی می باشد.

ساختار نواری و چگالی حالات نانولوله آرایش یافته با دایمر بعد جذب مولکول متان در شکل ۴ نشان داده شده است.



شکل ۴: ساختار نواری و چگالی حالات نانولوله کربنی آرایش یافته با دایمر (رنگ مشکی)، در حضور مولکول متان (رنگ بنفش)

همانطور که مشاهده می شود جذب متان تاثیر قابل ملاحظه ای بر روی ساختار نواری و چگالی حالات نداشته است، لیکن با توجه به کوچکی گاف انرژی و با توجه به اینکه انرژی جذب مقدار قابل توجهی دارد گرمای حاصل از واکنش می تواند منجر به تزریق حامل به نانولوله شده و بدین ترتیب هدایت آن در حضور گاز را تغییر دهد (شکل ۵-الف). این درحالی است که جذب مولکول متان بر روی نانولوله آرایش یافته با پالادیوم اتمی [۲۰] به دلیل گاف انرژی نسبتاً بزرگ آن (در مقایسه با نانولوله آرایش یافته با دایمر نقره-پالادیوم) نمی تواند موجب تزریق قابل ملاحظه حامل ها و تغییر در هدایت حسگر گردد. انرژی جذب متان در حضور دایمر افزایش قابل ملاحظه ای یافته است. بنابراین می توان از این ساختار به عنوان ماده جاذب در حسگرهای گاز پیزوالکتریک استفاده نمود (شکل ۵-ب). این حسگرها از یک قطعه پیزوالکتریک ساخته شده اند که سطح آن ها با ماده جاذب مناسب جهت جذب گاز هدف پوشانده شده است. در محیط عاری از گاز هدف این حسگرها فرکانس ارتعاش خاصی دارند. در حضور گاز هدف در اثر جذب گاز بر روی سطح آن ها تغییر جرم رخ داده و متعاقباً تغییر در فرکانس ارتعاش ایجاد می شود. با رصد نمودن تغییر در فرکانس ارتعاش

• جذب دایمر موجب تغییر نانولوله کربنی از نیمه هادی به نیمه هادی مغناطیسی دو قطبی می‌گردد.

• گاف انرژی، گاف اسپین بالا و اسپین پایین ساختار نانولوله آرایش یافته با دایمر به ترتیب برابر با 0.15 eV ، 0.27 و 0.47 می‌باشد.

• با تغییر موقیت تراز فرمی حداقل به اندازه 0.12 eV و حداکثر 0.19 به سمت بالا به وسیله اعمال ولتاژ مناسب گیت می‌توان جریان خالص اسپین پایین داشت.

• با تغییر موقیت تراز فرمی حداقل به اندازه 0.02 eV و حداکثر 0.20 به سمت پایین به وسیله اعمال ولتاژ مناسب گیت می‌توان جریان خالص اسپین بالا داشت.

• ساختار نواری، چگالی حالتها، تابع کار و مغناطش سیستم پس از جذب متان تغییر محسوسی ندارد.

• جذب متان از نوع فیزیکی و دارای طبیعت گرماده می‌باشد.

• میزان انرژی جذب متان بر روی نانولوله آرایش یافته با دایمر نقره-پالادیوم در مقایسه نانوله خالص افزایش چشمگیری دارد.

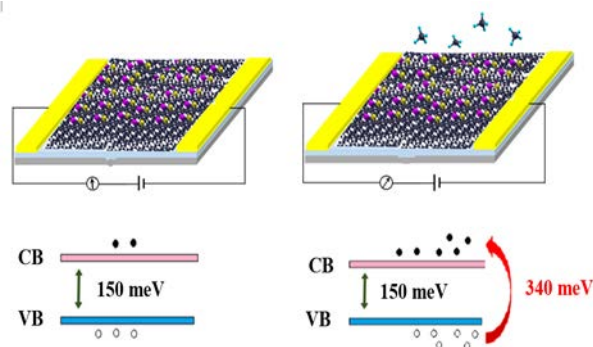
• با توجه به اینکه مقدار انرژی جذب متان بر روی نانولوله در حضور دایمر نقره پالادیوم تقریباً دوبرابر گاف انرژی ساختار می‌باشد، امکان تزریق حامل در اثر گرمای واکنش وجود دارد. بنابراین هدایت ماده حسگر در مجاورت گاز متان به شدت متاثر خواهد شد. لذا از این ساختار می‌توان به عنوان ماده حسگر مبتنی بر تغییر هدایت یا گرمای واکنش بهره برد.

• نظر به مقدار انرژی جذب متان، می‌توان از این ساختار به عنوان ماده جاذب در حسگرهای گاز پیزوالکتریک بهره برد.

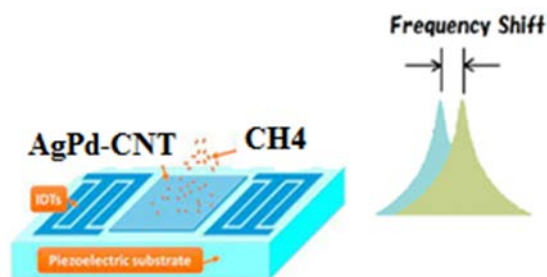
مراجع

1. G. De Smedt, F. De Corte, R. Notele, J. Berghmans, J. Hazard. Mater., 70, 105 (1999).

می‌توان به حضور گاز پی برد.



(الف)



(ب)

شکل ۵: کاربردهای نانولوله کربنی آرایش یافته با دایمر نقره-پالادیوم به عنوان حسگر گاز متان (الف) حسگر بر مبنای تغییر در گرمای واکنش و هدایت (ب) به عنوان ماده جاذب در حسگرهای گاز پیزوالکتریک

۴- نتیجه گیری

در مقاله حاضر به بررسی خواص ساختاری، الکتریکی و مغناطیسی نانولوله کربنی تک دیواره (10^0) آرایش یافته با دایمر نقره-پالادیوم و خواص حسگری آن در مجاورت مولکول متان پرداخته شده است. اهم نتایج به دست آمده به شرح زیر است:

• جذب دایمر نقره-پالادیوم بر روی نانولوله کربنی از نوع شیمیایی و گرماده می‌باشد.

• انتقال بار از نانولوله کربنی به دایمر و با میزان 0.14 e صورت می‌گیرد.

• جذب دایمر بر روی ساختار موجب از بین رفتن تقارن ساختار و به دنبال آن از بین رفتن تبهگنی نوارهای انرژی در ساختار نواری می‌گردد.

• نانولوله کربنی آرایش یافته با دایمر نقره-پالادیوم بر خلاف نانولوله کربنی خالص خاصیت مغناطیسی دارد.

15. P. Giannozzi, S. Baroni, N. Bonini, M. Calandra, R. Car, C. Cavazzoni, D. Ceresoli, G.L. Chiarotti, M. Cococcioni, I. Dabo, J. Condens. Matter Phys., 21, 395502,(2009).
16. M. Ernzerhof, J.P. Perdew, Chem. Phys., 109, 3313(1998).
17. S. Grimme, J. Antony, S. Ehrlich, H. Krieg, Chem. Phys., 132, 154104(2010).
18. R. Evarestov, V. Smirnov, Phys. Rev. B Condens. Matter, 70, 233101(2004).
19. C. Yan, Q. Zeng, J. Zhu, Carbon Lett., 29, 625(2019).
20. Z.K. Horastani, F.K. Horestani, S.J. Hajiani, R. Safaiee, S.J. Hashemifar, IEEE Access, 9, 122951(2021).
21. Y.H. Zhang, Y.B. Chen, K.G. Zhou, C.H. Liu, J. Zeng, H.L. Zhang, Y. Peng, Nanotechnology, 20(18), 185504(2009).
22. S. Peng, K. Cho, P. Qi, H. Dai, Chem. Phys. Lett., 387(4-6), 271(2004).
2. M.J. Bezdek, S.-X.L. Luo, K.H. Ku, T.M. Swager, PNAS, 118, e2022515118(2021).
3. G. Chimowa, Z.P. Tshabalala, A.A. Akande, G. Bepete, B. Mwakikunga, S.S. Ray, E.M. Benecha, Sens. Actuators B Chem., 247, 11(2017).
4. H. Cui, X. Zhang, J. Zhang, M. Ali Mehmood, ACS omega, 3, 16892(2018).
5. T. Hong, J.T. Culp, K.-J. Kim, J. Devkota, C. Sun, P.R. Ohodnicki, TrAC, Trends Anal. Chem., 125, 115820(2020).
6. N. Janudin, N. Abdullah, F.M. Yasin, M.H. Yaacob, M.Z. Ahmad, L.C. Abdullah, R.N.I.R. Othman, N.A.A. Syah, S. Sobri, N.A.M. Kasim, JDSET, 1, 2(2018).
7. M.-Z. Jiao, X.-Y. Chen, K.-X. Hu, D.-Y. Qian, X.-H. Zhao, E.-J. Ding, Rare Metals, 40, 1515(2021).
8. G. Verma, A. Gupta, J. Mater. NanoSci., 9, 3(2022).
9. Y. Wang, J.T. Yeow, J. Sens., (2009). <https://doi.org/10.1155/2009/493904>
10. J. Li, X. Huang, W. Shi, M. Jiang, L. Tian, M. Su, J. Wu, Q. Liu, C. Yu, H. Gu, Sens. Actuators B Chem., 330, 129311(2021).
11. I. Sharafeldin, S. Garcia-Rios, N. Ahmed, M. Alvarado, X. Vilanova, N.K. Allam, J. Environ. Chem. Eng., 9, 104534(2021).
12. J.K. Kim, M. Han, Y. Kim, H.K. An, S. Lee, S.H. Kong, D. Jung, J. Nanosci. Nanotechnol., 21, 3707(2021).
13. S.-J. Young, Y.-H. Liu, Z.-D. Lin, K. Ahmed, M.N.I. Shiblee, S. Romanuik, P.K. Sekhar, T. Thundat, L. Nagahara, S. Arya, J. Electrochem. Soc., 167, 167519(2020).
14. M. Orio, D.A. Pantazis, F. Neese, Photosynth. Res., 102, 443(2009).

Theoretical study of methane adsorption on the (8,0) single wall carbon nanotube decorated with Ag-Pd dimer

Zahra Karami Horastani*, Saber Jamali Hajiani

Department of Electrical Engineering, Shiraz Branch, Islamic Azad University, Shiraz, Iran

Abstract: In the present paper, methane adsorption on the (8,0) single wall carbon nanotube decorated with Ag-Pd dimer is investigated using density functional theory. The results show that methane adsorption on the nanotube is an exothermic and physical process accompanied with the adsorption energy of -340 meV. The amount of adsorption energy indicates a significant increase in the adsorption energy of methane molecule on the decorated nanotube compared to pure one (-80 meV). The proposed structure before methane adsorption is a bipolar magnetic semiconductor with a small gap (-150 meV). On the other hand, methane adsorption energy is about twice the energy gap. This allows the carrier to be injected into the nanotube due to the heat of the reaction, followed by a change in conductivity. Therefore, the proposed structure has the potential to be used as a sensor based on reaction temperature and conductivity change.

Keywords: Single wall carbon nanotube, Methane, Ag-Pd dimer, Density functional theory.