

DOI: 10.13718/j.cnki.xdzk.2025.12.016

路明, 张宇, 周渠. 检测空气开关柜局放特征气体 CO 的 Co-MoO<sub>3</sub> 传感器研究 [J]. 西南大学学报(自然科学版), 2025, 47(12): 182-191.

# 检测空气开关柜局放特征气体 CO 的 Co-MoO<sub>3</sub> 传感器研究

路明<sup>1</sup>, 张宇<sup>2</sup>, 周渠<sup>2</sup>

1. 国网辽宁省电力有限公司, 沈阳 110002; 2. 西南大学 工程技术学院, 重庆 400715

**摘要:** CO 是空气开关柜局部放电最重要的特征气体之一, 对其进行准确检测可有效评估空气开关柜的运行状态。针对 CO 气体的检测问题, 开展了 CO 气体传感特性及气敏机理研究。首先利用水热法制备了 Co-MoO<sub>3</sub> 传感材料, 并利用 X 射线衍射(X-ray Diffraction, XRD)、扫描电子显微镜(Scanning Electron Microscope, SEM)和 X 射线光电子能谱(X-ray Photoelectron Spectroscopy, XPS)对其进行表征。搭建了气敏测试平台, 测试了 Co-MoO<sub>3</sub> 传感器对 CO 气体的气敏响应性能。研究表明: Co-MoO<sub>3</sub> 在 5 μL/L 浓度的 CO 下展现出 11.5% 的响应值, 响应时间/恢复时间为 56 s/56 s, 且器件表现出良好的重复性和长期工作的稳定性。此外, 通过基于密度泛函理论的计算, 从吸附能、吸附距离、态密度及电荷转移等方面, 分析了 Co-MoO<sub>3</sub> 对 CO 分子的吸附行为及响应机理, 研究成果为开发用于检测空气开关柜局放特征气体 CO 的高性能 Co-MoO<sub>3</sub> 传感器奠定了基础。

**关键词:** 空气开关柜; 局放特征气体; CO 气体;

Co-MoO<sub>3</sub> 传感器; 气敏机理

中图分类号: TM407

文献标识码: A

开放科学(资源服务)标识码(OSID):

文章编号: 1673-9868(2025)12-0182-10



## Research on the Detection of the Characteristic Gas CO in Partial Discharge of Air Switchgear Cabinet by CO-MoO<sub>3</sub> Sensor

LU Ming<sup>1</sup>, ZHANG Yu<sup>2</sup>, ZHOU Qu<sup>2</sup>

1. State Grid Liaoning Electric Power Supply Co. Ltd., Shenyang 110002, China;

2. College of Engineering and Technology, Southwest University, Chongqing 400715, China

**Abstract:** CO is one of the most important characteristic gases for partial discharge in air switchgear cabinet, and accurate monitoring of CO can effectively evaluate the operating status of air switchgear. Aiming at the detection of CO, this paper has carried out research on the sensing characteristics of CO and the gas-sensing mechanism. Firstly, Co-MoO<sub>3</sub> sensing material was prepared by hydrothermal method, and characterized by X-ray Diffraction (XRD), Scanning Electron Microscope (SEM) and X-ray Photoelectron

收稿日期: 2025-04-25

基金项目: 国家自然科学基金项目(52077177)。

作者简介: 路明, 硕士, 高级工程师, 主要从事电气工程及其自动化研究。

Spectroscopy (XPS). The gas-sensing test platform was built, and the gas-sensing response characteristics of Co-MoO<sub>3</sub> sensors to CO were tested. The research shows that the response value of the Co-MoO<sub>3</sub> sensor to 5 μL/L CO gas was 11.5%, the response time and recovery time were 56 s and 56 s, respectively, and it has good repeatability and long-term stability. In addition, based on density functional theory, the adsorption performance and response mechanism of Co-MoO<sub>3</sub> to CO were analyzed from the perspectives of adsorption energy, adsorption distance, density of states and charge transfer. The research results of this paper lay a foundation for the development of high-performance Co-MoO<sub>3</sub> sensors for detecting the characteristic gas CO in air switchgear cabinet.

**Key words:** air switchgear cabinet; partial discharge characteristic gas; CO gas; Co-MoO<sub>3</sub> sensors; gas-sensing mechanism

空气开关柜作为一种重要的电气设备,广泛应用于电力变电站、配电站和各种电力设施中,承担着电力分配与保护的关键任务<sup>[1-2]</sup>。然而,长期运行的空气开关柜往往会受到局部放电的影响<sup>[3]</sup>,当产生局部放电时,空气会发生一系列复杂的化学反应,生成氮氧化物、臭氧以及 CO 气体。研究表明,CO 作为空气开关柜局部放电最重要的特征气体之一,通过检测 CO 气体,可以实现对潜在故障的早期识别,进而及时消除电力设备的安全隐患,确保设备的稳定运行并保障人员和财产安全。

目前,针对空气开关柜中局部放电所产生特征气体的检测,主要有 3 种常见技术,分别是气相色谱-质谱联用技术、光学检测技术以及半导体气体传感器技术。其中,气相色谱-质谱联用技术因其设备体积较大、成本较高,且难以实现现场快速在线检测,存在一定的应用局限性;而环境光照条件、灰尘等颗粒物可能会干扰光学检测的测量结果,且光学检测技术设备昂贵、笨重,并需定期校准,限制了其在便捷式测试中的应用。半导体传感器因具有成本低、体积小、恢复迅速及能耗低等特点,在空气开关柜局部放电特征气体的在线检测中展现出良好的应用潜力。三氧化钼(MoO<sub>3</sub>)是一种稳定的 N 型金属氧化物半导体材料,具有约 3.2 eV 的宽带隙<sup>[4]</sup>,这使得它在气体传感器中,尤其是检测有害气体和空气污染物时,能够提供更好的性能。研究表明,MoO<sub>3</sub> 的气敏特性与其晶体结构及表面状态密切相关,通过调控材料微观形貌或进行金属掺杂(如与碳纳米管、石墨烯等材料复合),能够有效提升其气体传感性能<sup>[5-8]</sup>。例如,Xu 等<sup>[9]</sup>研究了 Fe 掺杂 MoO<sub>3</sub> 纳米带在二甲苯检测中的应用,在 206 °C 下 Fe-MoO<sub>3</sub> 对 100 μL/L 二甲苯的响应值为 6.1,是 MoO<sub>3</sub> 的 2 倍,并且 Fe-MoO<sub>3</sub> 具有良好的选择性。

本文通过一步水热法制备 Co-MoO<sub>3</sub> 气敏材料,通过 XRD、SEM 和 XPS 等技术对材料进行表征,研制 Co-MoO<sub>3</sub> 传感器,对其在不同 CO 气体浓度下的响应特性、响应与恢复时间、重复性和稳定性进行测试,并通过基于密度泛函理论的仿真计算,从吸附能、态密度及电荷转移等方面,分析 Co-MoO<sub>3</sub> 对 CO 分子的吸附行为及响应机理。

## 1 实验

### 1.1 Co-MoO<sub>3</sub> 气敏材料的制备

本文通过一步水热法制备了 Co-MoO<sub>3</sub>,将 2.3 mmol 的二水钼酸钠、7.0 mmol 的硫脲以及 2.2 mmol 的柠檬酸,依次溶解于 50 mL 去离子水与 20 mL 无水乙醇组成的混合溶液中,通过 30 min 的磁力搅拌使其充分溶解,然后加入 0.35 mmol 硝酸钴六水合物,继续搅拌 30 min。将配制好的前驱体溶液移至 100 mL 聚四氟乙烯内衬的高压反应釜中,随后将其置于电热恒温鼓风干燥箱内,设定温度参数为 175 °C 并保持恒温条件,进行 22 h 的水热反应。反应完成后,待反应釜自然降温至室温,将内衬壁上形成的黑色沉淀物收集,并转移至离心管中保存。随后,用去离子水与无水乙醇对沉淀物反复洗涤,以去除杂质,在离心机中以 8 000 r/min 的转速进行高速离心,以收集沉淀物。最后,将洗净后的沉淀物在 70 °C 空气中干燥 12 h 以确保完全干燥,并在 500 °C 下煅烧 3 h,最终得到 5 mol% Co 掺杂的 MoO<sub>3</sub> 粉末。

### 1.2 Co-MoO<sub>3</sub> 气敏材料的表征方法

为确认 Co-MoO<sub>3</sub> 气敏材料的成功合成,本文采用了多种表征技术。XRD 分析在荷兰帕纳科公司生

产的 X'Pert<sup>3</sup> Powder 高性能衍射仪上完成, 测试条件设定为  $2\theta$  扫描范围  $10^\circ \sim 80^\circ$ , 步长  $0.02^\circ$ , 扫描速率  $5^\circ/\text{min}$ 。材料的微观形貌观察通过卡尔蔡司(英国)Sigma 500 型 SEM 进行。元素组成及其化学价态分析则使用岛津公司(英国)AXIS SUPRA+型 XPS 进行。

### 1.3 Co-MoO<sub>3</sub> 传感器制造及气敏性能测试平台搭建

如图 1 所示, 本文采用了陶瓷管型传感器进行性能测试, 该传感器结构主要由气敏材料层、陶瓷管基底、信号电极以及镍铬合金加热丝组成, 其研制流程为: 称一定量的 Co-MoO<sub>3</sub> 气敏材料粉末, 置于玛瑙研钵中持续研磨, 同时加入无水乙醇和去离子水, 直至形成均匀黏稠的浆状物; 用特细 0 号涂料笔将浆料均匀涂布于陶瓷管表面, 将 Ni-Cr 加热丝穿入涂覆好并已干燥的陶瓷管内, 并将加热丝和测量电极焊接到六角底座的加热端和测量端; 焊接完成后盖上管帽, 以避免移动过程损坏传感器电极, 同时还能防尘防爆; 将所制备的传感器置于北京艾利特科技有限公司 AS-20 型传感器老化平台上, 并采用低电流进行 24 h 老化处理, 以增强传感器的稳定性和重复性。

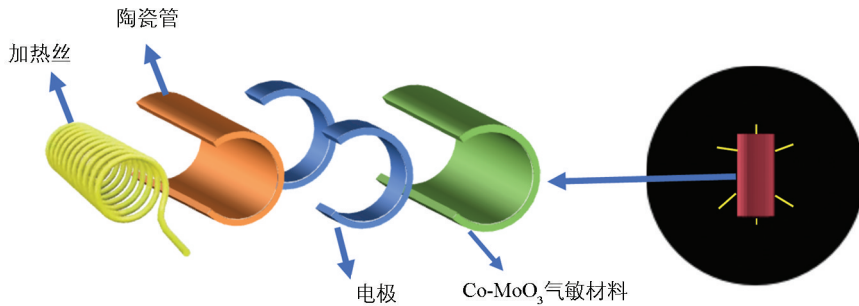


图 1 Co-MoO<sub>3</sub> 传感器结构图

本文搭建了用于测试空气开关柜局部放电特征气体 CO 传感器性能的测试平台, 如图 2 所示。该传感器测试平台由气瓶(目标气体 CO 和背景气体空气)、DGD-III 动态配气系统、测试气室、气体传感器、CGS-8 气敏分析系统及计算机组成。通过动态配气, 传感器由 CGS-8 气敏分析系统 100 mA 加热电流加热至  $170^\circ\text{C}$ , 并完成检测和数据分析, 实现对传感器的性能研究。

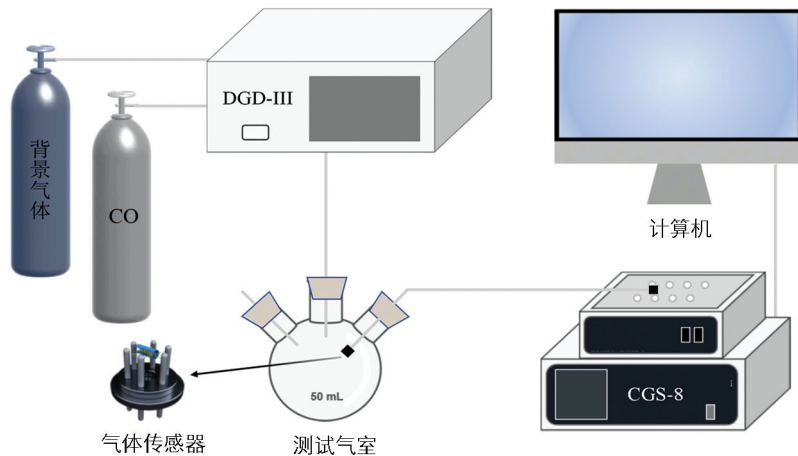


图 2 气体传感器性能测试平台

根据式(1)对 Co-MoO<sub>3</sub> 气敏传感器的响应值  $S$  进行定义:

$$S = \frac{|R_a - R_g|}{R_a} \times 100\% \quad (1)$$

式中:  $R_a$  为 Co-MoO<sub>3</sub> 传感器在空气中的电阻;  $R_g$  为 Co-MoO<sub>3</sub> 传感器在 CO 气体中的电阻。

### 1.4 第一性原理参数设定

本文利用密度泛函理论的第一性原理, 通过 Materials Studio 软件中的 Dmol<sup>3</sup> 模块, 完成了 Co-MoO<sub>3</sub> 晶体的建模、结构优化、吸附计算与分析<sup>[10-11]</sup>。同时, 采用了广义梯度近似中的 PBE 泛函来描述非均匀多

电子体系<sup>[12]</sup>。电子赝势计算中,使用双数值轨道基组和轨道极化函数(DNP),并结合 DFT 半核赝势(DSSP)进行计算<sup>[13]</sup>,使用 TS 方法对范德华力造成的误差进行修正。在自洽迭代过程中,收敛标准设定为能量  $1.0 \times 10^{-5}$  Ha,力的收敛标准为  $0.002$  Ha/Å,位移的收敛标准为  $0.005$  Å<sup>[14]</sup>。对于体系几何构型优化及电子态分析,采用  $4 \times 4 \times 1$  的 Monkhorst-Pack 网格以保证布里渊区积分的精确性<sup>[15]</sup>,并在 Z 轴方向增加了  $20$  Å 的真空层<sup>[16-17]</sup>。

通过式(2)计算不同掺杂构型的结合能  $E_b$ ,得到最稳定的 Co 掺杂  $\text{MoO}_3$  结构<sup>[18]</sup>:

$$E_b = E_{(\text{Mo}+\text{Co})} - E_{(\text{Mo})} - E_{(\text{Co})} \quad (2)$$

式中: $E_{(\text{Mo}+\text{Co})}$ 为 Co 掺杂结构优化后的能量; $E_{(\text{Mo})}$ 为未掺杂前的  $\text{MoO}_3$  能量; $E_{(\text{Co})}$ 为 Co 原子的能量。当  $E_b$  为负值时,说明反应放热,此时掺杂过程呈现出热力学自发特性,值越小说明该掺杂结构越稳定。

在开展 Co- $\text{MoO}_3$  材料对 CO 气体分子仿真吸附性能研究时,通过调整气体分子中各原子与 Co- $\text{MoO}_3$  表面的相对空间位置,依据式(3)对各吸附结构的吸附能  $E_{\text{ads}}$  进行系统计算与评估<sup>[19]</sup>:

$$E_{\text{ads}} = E_{\text{system}} - E_{\text{Co-MoO}_3} - E_{\text{CO}} \quad (3)$$

式中: $E_{\text{system}}$ 为 Co- $\text{MoO}_3$  和 CO 的整个吸附体系的能量; $E_{\text{Co-MoO}_3}$ 为 Co- $\text{MoO}_3$  材料的能量; $E_{\text{CO}}$ 为 CO 气体分子的能量。

Co- $\text{MoO}_3$  气敏材料与 CO 气体分子之间的电荷转移量  $Q_t$  可通过以下公式计算<sup>[20]</sup>:

$$Q_t = Q_{\text{after}} - Q_{\text{before}} \quad (4)$$

式中: $Q_{\text{before}}$ 和  $Q_{\text{after}}$ 分别为吸附 CO 气体分子前后的带电量。

## 2 结果与讨论

### 2.1 Co- $\text{MoO}_3$ 气敏材料的表征

图 3 展示了制备的 Co 掺杂  $\text{MoO}_3$  的 XRD 图谱,通过对比可以发现,样品中出现的主要衍射峰位置与正交晶体结构的  $\text{MoO}_3$  标准图谱(PDF # 35-0609)中的(020)、(110)、(040)、(021)、(111)、(060)、(061)、(002)、(112)、(152)面相吻合,说明成功制备了 Co- $\text{MoO}_3$ ,样品的衍射图谱整体线条光滑,特征衍射峰轮廓清晰,未观察到明显的杂质峰。XRD 谱图中,没有出现 Co 的晶相,可能是因为掺杂浓度较低。

在  $2 \mu\text{m}$  和  $1 \mu\text{m}$  2 种放大倍数下观察到的  $5 \text{ mol}\%$  Co 掺杂  $\text{MoO}_3$  的 SEM 图像如图 4 所示,可见 Co- $\text{MoO}_3$  由多个纳米球花堆叠而成,且每个纳米球花的表面由众多弯曲的纳米片堆积而成,这些纳米片堆叠形成的多孔结构为气体分子的转移与运动提供了通道,有利于气体响应过程的进行。

图 5 是 Co- $\text{MoO}_3$  的 XPS 表征图谱,其中材料全谱(图 5a)显示样品仅含有钴、氧、钼 3 种元素的特征信号,未检测到其他元素的存在,表明所制备的材料纯度很高。全谱图中氧元素和钼元素的特征峰信号强度显著,而钴元素的特征峰相对较弱,这一现象证实了钴元素以掺杂形式存在于  $\text{MoO}_3$  晶格结构中。钼元素的精细谱图经分峰拟合处理后观察到 Mo 3d 轨道呈现双峰特征(图 5b): Mo  $3d_{3/2}$  和 Mo  $3d_{5/2}$  的结合能分别位于  $235.3 \text{ eV}$  和  $232.1 \text{ eV}$ ,两者的能量差值为  $3.2 \text{ eV}$ ,该数值与  $\text{Mo}^{6+}$  的特征参数完全吻合,确证了材料中钼元素以  $+6$  价态稳定存在。图 5c 中 O 1s 的峰有轻微的不对称,对其进行分峰拟合,在  $529.9 \text{ eV}$  和  $531.4 \text{ eV}$  处的 2 个特征峰对应于晶格氧( $\text{O}_L$ )和空位氧( $\text{O}_V$ ),氧空位可以提供更多的氧化还原反应活性

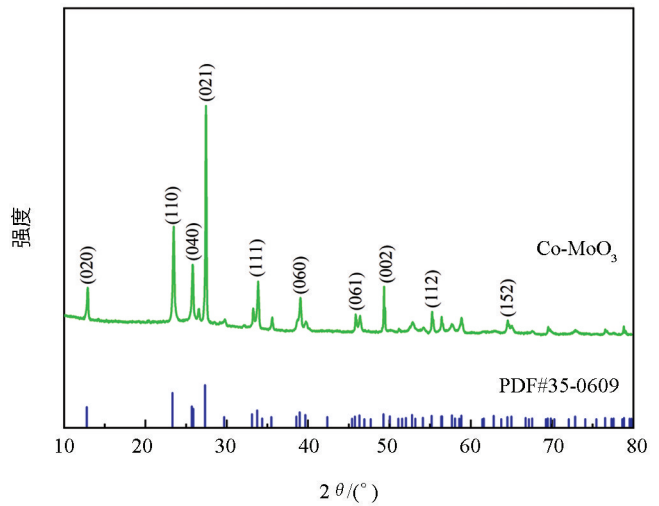
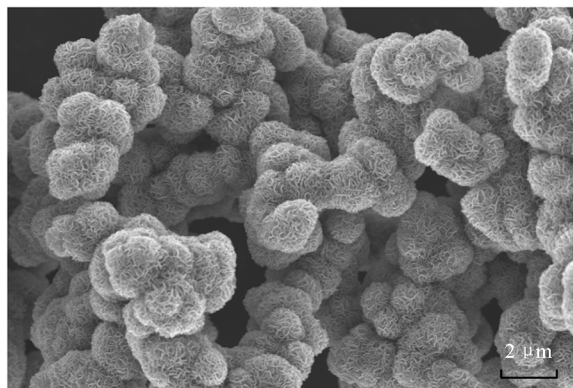
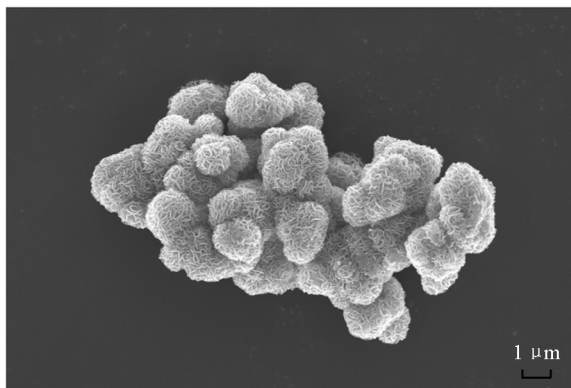


图 3 Co- $\text{MoO}_3$  材料的 XRD 谱图



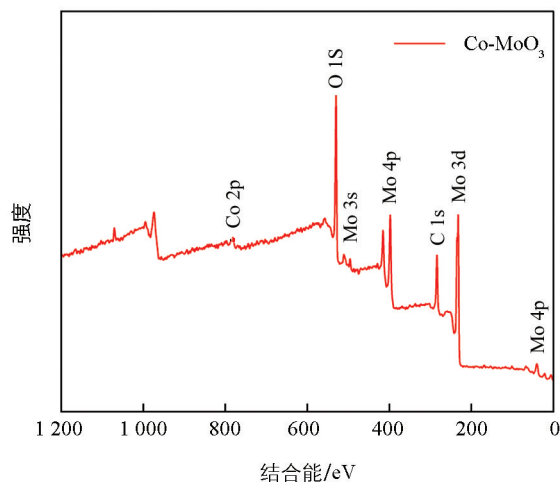
a. 2 μm尺寸



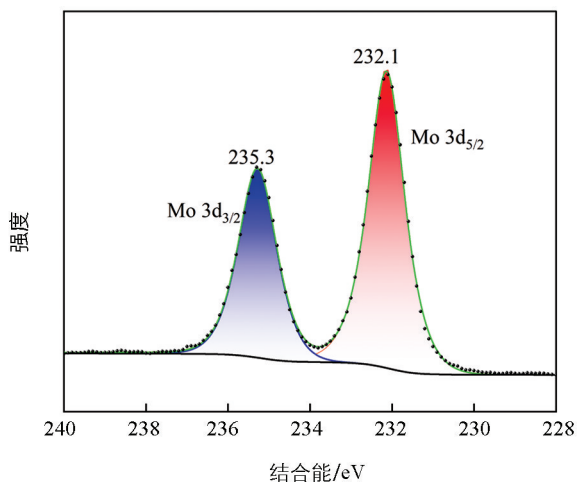
b. 1 μm尺寸

图 4 纳米球花 Co-MoO<sub>3</sub> 的 SEM 图像

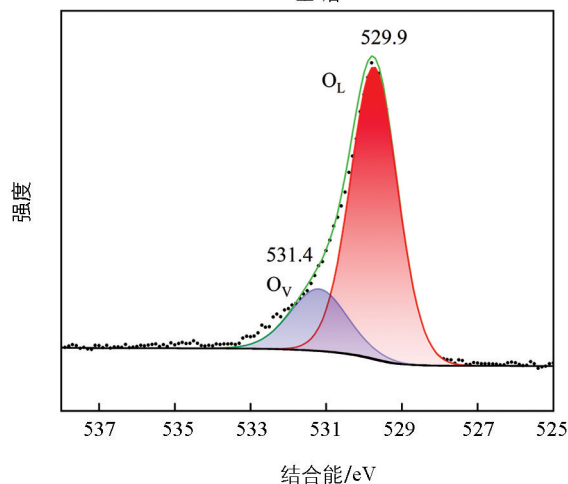
位点, 有利于提高气敏效果。图 5d 展示了钴元素 2p 轨道的拟合能谱, 2 个衍射峰分别位于 793.4 eV 和 777.9 eV 的结合能位置, 对应于 Co 2p<sub>1/2</sub> 和 Co 2p<sub>3/2</sub> 的自旋轨道, 这 2 个峰之间的结合能差值表明钴元素以 Co<sup>2+</sup> 存在。



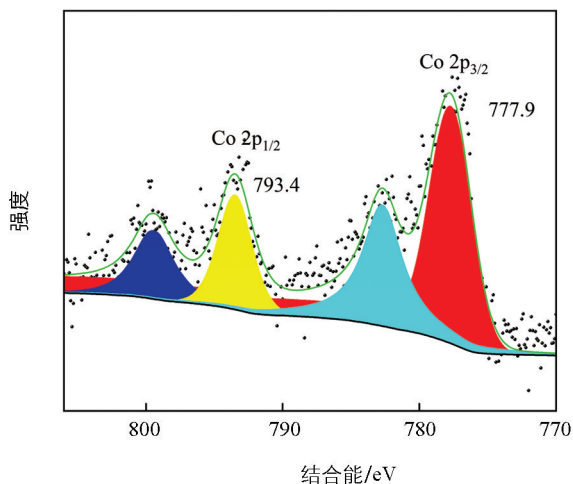
a. 全谱



b. Mo 3d



c. O 1s



d. Co 2p

图 5 Co-MoO<sub>3</sub> 的 XPS 图谱

## 2.2 Co-MoO<sub>3</sub> 传感器对 CO 气体的气敏性能测试

图 6 为 Co-MoO<sub>3</sub> 传感器对 CO 气体的动态响应恢复曲线, 本文对其在不同 CO 气体浓度(分别为

5  $\mu\text{L/L}$ 、10  $\mu\text{L/L}$ 、20  $\mu\text{L/L}$ 、50  $\mu\text{L/L}$ 、80  $\mu\text{L/L}$  和 100  $\mu\text{L/L}$  下进行了连续测试。从图 6 中可以看出, Co-MoO<sub>3</sub> 传感器对 CO 的响应分别为 11.5%、28.0%、35.2%、50.0%、58.9%、62.1%, 随着 CO 气体浓度的提高, Co-MoO<sub>3</sub> 传感器的响应值也相应增加, 同时其电阻值会基本恢复到初始状态。

图 7 展示了 Co-MoO<sub>3</sub> 传感器对 5  $\mu\text{L/L}$  CO 气体的响应恢复时间曲线, 经计算, 该传感器对 5  $\mu\text{L/L}$  CO 气体的响应时间为 56 s, 恢复时间同样为 56 s, 表明该传感器能够迅速响应并恢复对 CO 气体的检测, 其在空气开关柜局部放电特征气体 CO 的快速检测中具有较好的应用前景。

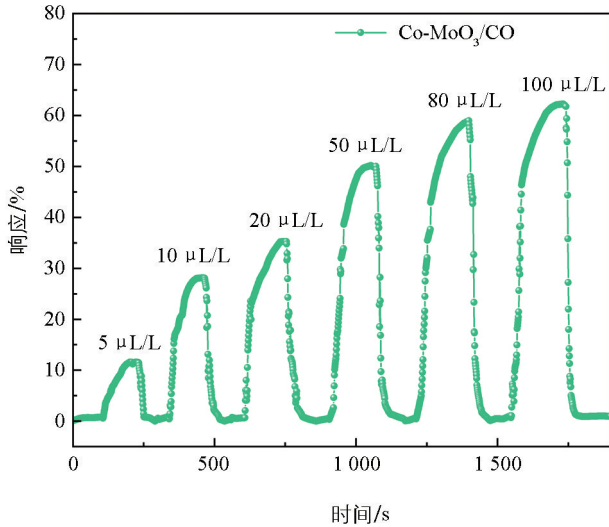


图 6 Co-MoO<sub>3</sub> 传感器对 CO 气体的动态响应恢复曲线

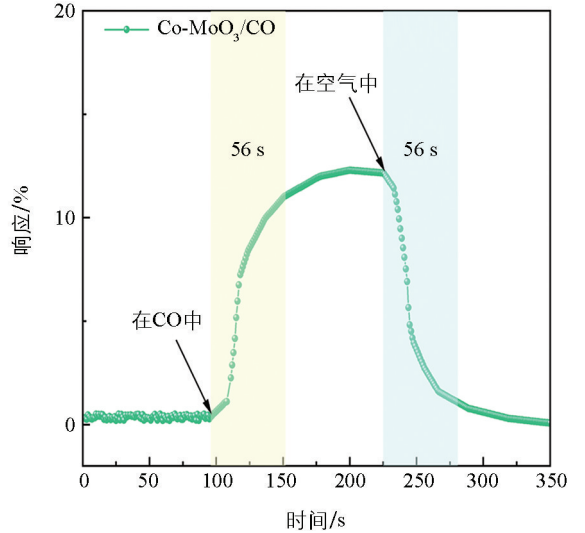


图 7 Co-MoO<sub>3</sub> 传感器对 5  $\mu\text{L/L}$  CO 气体的响应恢复时间

气体传感器的性能优劣与其响应重复性密切相关。本文对 Co-MoO<sub>3</sub> 传感器分别进行了 5  $\mu\text{L/L}$  和 10  $\mu\text{L/L}$  CO 气体 3 轮重复性测试实验, 实验数据如图 8 所示。通过分析实验结果可知, CO 气体的响应值变化范围较小, 且在不同测试轮次中, 响应与恢复时间基本保持一致。这一实验结果充分表明, Co-MoO<sub>3</sub> 传感器具备优异的重复性。

Co-MoO<sub>3</sub> 传感器的长期稳定性响应曲线如图 9 所示, 分别使用浓度为 5  $\mu\text{L/L}$ 、10  $\mu\text{L/L}$  和 20  $\mu\text{L/L}$  的 CO 气体进行响应实验。在连续测试 35 d 的过程中, Co-MoO<sub>3</sub> 传感器对 CO 气体的响应表现出良好的稳定性, 且未出现明显波动, 展现了优异的长期稳定性能。

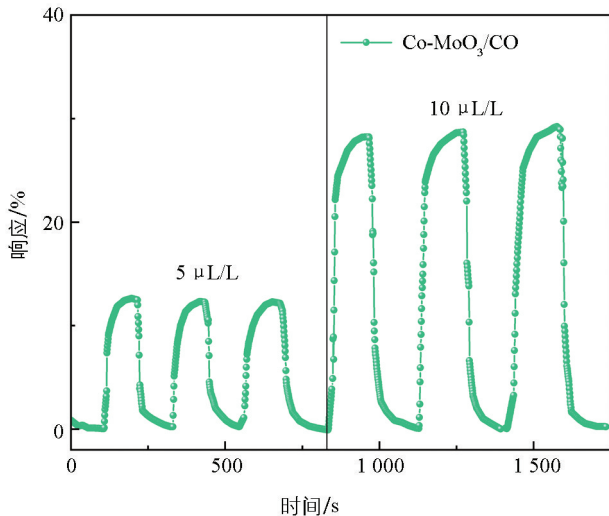


图 8 Co-MoO<sub>3</sub> 传感器对 5  $\mu\text{L/L}$ 、10  $\mu\text{L/L}$  CO 的重复性

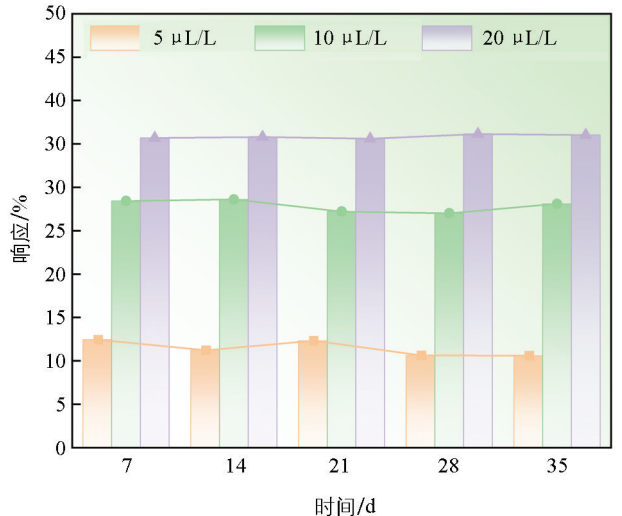


图 9 Co-MoO<sub>3</sub> 传感器对 5  $\mu\text{L/L}$ 、10  $\mu\text{L/L}$ 、20  $\mu\text{L/L}$  CO 的长期稳定性

最后, 将 Co-MoO<sub>3</sub> 传感器与表 1 中其他 CO 气体传感器进行了吸附性能比较, 结果证明 Co-MoO<sub>3</sub> 传感器对 CO 气体具有良好的吸附性能。

表 1 各传感器对 CO 气体的吸附性能

传感器材料	工作温度/°C	浓度/( $\mu\text{L} \cdot \text{L}^{-1}$ )	响应/%	响应时间/s	恢复时间/s	参考文献
RGO/CuCl	室温	400	92.0	332	>600	文献[21]
p-CuO/n-TiO <sub>2</sub>	250	100	250.0	187	453	文献[22]
PdO/SnO <sub>2</sub> /CuO	200	100	6.0	70	10	文献[23]
ZnO/LSCNO	200	160	16.2	—	—	文献[24]
Co-MoO <sub>3</sub>	170	5	11.5	56	56	本文

### 2.3 Co-MoO<sub>3</sub> 的气敏机理分析

模拟 CO 气体在 Co-MoO<sub>3</sub> 上的吸附过程之前需要得到最接近真实 Co-MoO<sub>3</sub> 材料的模型, 本文研究了 Co 原子在 MoO<sub>3</sub>(010)晶面上的替代掺杂位点, 其晶格参数为  $a = 3.9628 \text{ \AA}$ ,  $b = 13.8550 \text{ \AA}$ ,  $c = 3.6964 \text{ \AA}$ , 和以往的研究结果一致<sup>[25]</sup>。MoO<sub>3</sub>(010)晶面的表面能最低, 该晶面暴露的钼氧键长约为  $1.94 \text{ \AA}$ , 有利于气体的吸附。通过对不同掺杂结构进行弛豫优化后, 各掺杂体系的结合能通过式(2)计算并加以对比分析, 从而筛选出最稳定的掺杂结构。

Co 掺杂 MoO<sub>3</sub> 最优的掺杂结构如图 10 所示, Co 原子都为替代本征 MoO<sub>3</sub> 中 Mo 原子进行掺杂。Co-MoO<sub>3</sub> 掺杂后, 从正视图可以看出, Co 原子和邻近的 O 原子微微向下, 整体结构变化不大, Co 掺杂结构的结合能  $E_b$  为  $3.515 \text{ eV}$ , 说明 Co 原子掺入过程需要从外界获取能量。为实现 Co 原子的掺杂, 本文采用了水热法, 该方法能够提供高温高压的反应条件, 从而有效促进掺杂反应的进行。

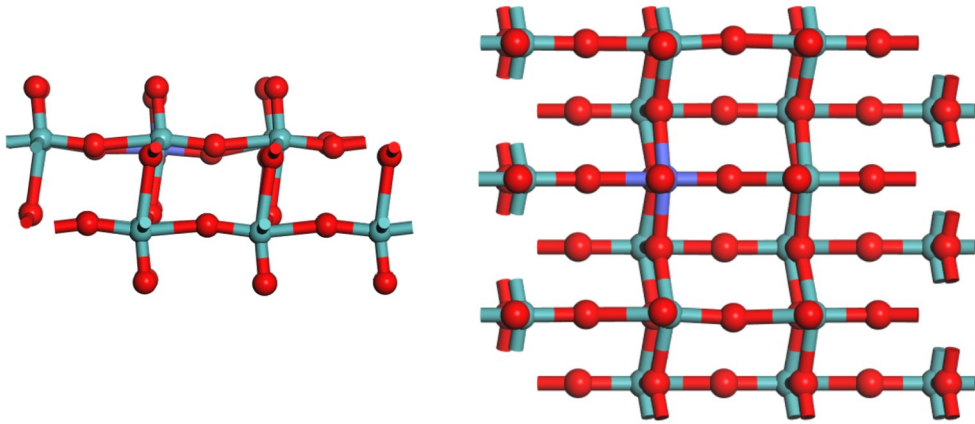


图 10 Co-MoO<sub>3</sub> 的模型结构图

通过让不同 CO 气体原子靠近 Co-MoO<sub>3</sub> 材料, 得到如图 11 所示的 Co-MoO<sub>3</sub> 对 CO 气体的最优吸附结构模型, 最优吸附模型的吸附参数如表 2 所示。表 2 直观地体现出 Co-MoO<sub>3</sub> 对 CO 气体的吸附性能, Co-MoO<sub>3</sub>/CO 体系的电荷转移量为  $0.032 \text{ e}$ , 吸附能达到了  $1.770 \text{ eV}$ , 表明 Co-MoO<sub>3</sub> 对 CO 气体是化学吸附。

表 2 CO 气体分子在 Co-MoO<sub>3</sub> 上的吸附参数

吸附体系	吸附能 $E_{\text{ads}}/\text{eV}$	电荷转移 $Q_i/\text{e}$	吸附距离 $d/\text{\AA}$
Co-MoO <sub>3</sub> /CO	1.770	0.032	2.765

通过分析气体吸附前后态密度的变化, 来描述吸附过程中电子性能的变化<sup>[26]</sup>。Co-MoO<sub>3</sub> 对 CO 气体吸附体系的态密度分布如图 12 所示, CO 气体在 Co-MoO<sub>3</sub> 表面的吸附态密度与吸附前的分布相比发生了显著变化。体系的态密度吸附后向低能量方向明显偏移, 并且在约  $-3 \text{ eV}$  的区域, 峰的形态出现了变化。

进一步分析态密度分布,有助于阐释气体分子与基底材料之间的杂化及成键现象。态密度中峰形状的变化主要与 C 的 2p 轨道有关。同时 CO 气体的 C-2p 和 Co-MoO<sub>3</sub> 的 O-2p、Co-3d 在 0 eV 到 -5 eV 范围之间存在大面积重叠,强烈杂化的出现表明这些原子之间存在强化学键,显著的气体吸附结合力得以形成。同时,电荷的相互作用导致了原体系电荷分布的变化。

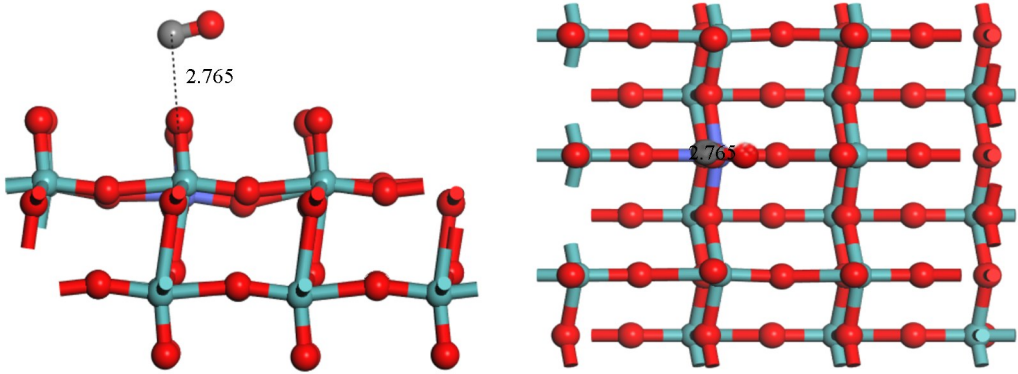
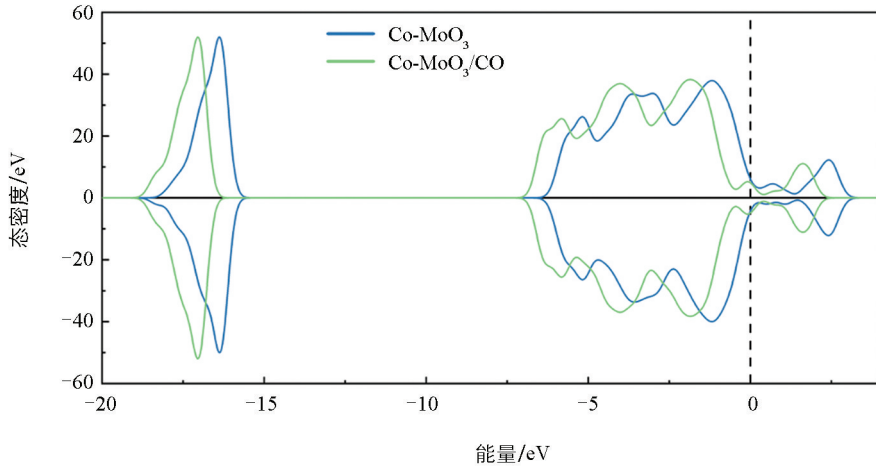
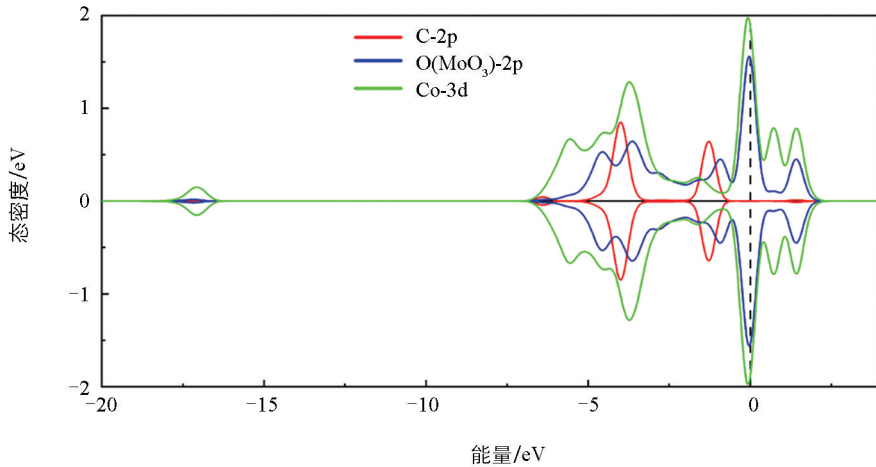


图 11 CO 分子在 Co-MoO<sub>3</sub> 上的吸附结构



a. 总态密度分布



b. 分态密度分布

图 12 Co-MoO<sub>3</sub> 对 CO 气体吸附体系的态密度分布图

本文通过计算各吸附体系的形变电荷密度 (Deformation Charge Density, DCD) 来深入探究吸附过程中电荷转移与聚集行为的内在机制。如图 13 所示, 蓝色区域表示电子密集区域, 而红色区域则指示电子耗尽的区域, 其颜色深浅的变化反映了电子的得失情况。CO 气体在 Co-MoO<sub>3</sub> 上的 DCD 分布表现出较强的紧密连接, 这表明 Co 掺杂的 MoO<sub>3</sub> 具有较强的与 CO 分子相互作用的能力, Co 的掺杂影响了 MoO<sub>3</sub> 对气体吸附的电荷转移与聚集, 使得表面的电子密度发生了改变, 从而影响了气体分子的吸附和电荷分布。

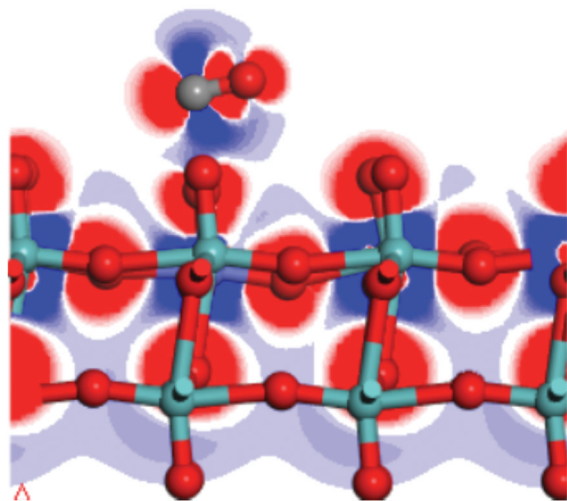


图 13 CO 分子在 Co-MoO<sub>3</sub> 上的 DCD 分布

### 3 结论

本文采用水热法制备了 Co-MoO<sub>3</sub> 气敏材料, 并通过 XRD、SEM 和 XPS 对其进行表征, 搭建了测试平台, 测试了 Co-MoO<sub>3</sub> 传感器对 CO 气体的气敏响应性能。测试结果表明, Co-MoO<sub>3</sub> 传感器对 5 μL/L CO 气体的响应值为 11.5%。通过重复性和长期稳定性实验, 进一步验证了 Co-MoO<sub>3</sub> 传感器的稳定性和可靠性。通过仿真方法计算了 Co-MoO<sub>3</sub> 对 CO 气体的吸附特性, 并结合吸附参数、态密度以及 DCD 等方面对吸附体系进行了详细分析。研究结果显示, Co-MoO<sub>3</sub> 对 CO 分子的吸附能达到 1.770 eV, 电荷转移 0.032 e, 呈现出典型的强化学吸附特征, 这与吸附体系中分态密度表现出的明显杂化效应相一致。因此, 本文的气敏性能测试与理论仿真工作验证了 Co-MoO<sub>3</sub> 传感器在检测空气开关柜局放特征气体 CO 方面的应用潜力。

### 参考文献:

- [1] 史林军, 王丹娜, 刘建戈, 等. 轻质型 10 kV 开关柜母线设计及其载流量分析 [J]. 电测与仪表, 2017, 54(22): 98-103.
- [2] 张昕冉. 开关柜绝缘缺陷气体特征检测研究 [D]. 沈阳: 沈阳工程学院, 2021.
- [3] 李汶雨. 基于机器嗅觉技术的开关柜局部放电特征气体检测 [D]. 南宁: 广西大学, 2024.
- [4] 卞帅娟. 热解金属有机骨架法制备 MoO<sub>3</sub> 基复合材料及其气敏性能研究 [D]. 南宁: 广西大学, 2022.
- [5] LIU H D, LIU J J, LIU Q, et al. Conductometric Gas Sensor Based on MoO<sub>3</sub> Nanoribbon Modified with rGO Nanosheets for Ethylenediamine Detection at Room Temperature [J]. Nanomaterials, 2023, 13(15): 2220.
- [6] HONG Y T, HAN D, DUAN Q, et al. GaN/MoO<sub>3</sub> n-n Heterojunction Based Anti-Humidity Gas Sensor for NO<sub>2</sub> Real-Time Monitoring [J]. Microchemical Journal, 2025, 209: 112651.
- [7] TAN X Y, WANG L, CHEN X, et al. Ultrasensitive Triethylamine Gas Sensors with ZnSe Nanospheres/Nest-Like Cr-Doped MoO<sub>3</sub> [J]. Journal of Hazardous Materials, 2024, 474: 134709.
- [8] 马雪莹, 李明. Ce 掺杂 Ni<sub>2</sub>P 纳米片的电子调控促进高效析氧 [J]. 西南大学学报(自然科学版), 2024, 46(1): 188-195.
- [9] XU R L, ZHANG N, SUN L, et al. One-Step Synthesis and the Enhanced Xylene-Sensing Properties of Fe-Doped MoO<sub>3</sub> Nanobelts [J]. RSC Advances, 2016, 6(108): 106364-106369.
- [10] CHEN J X, ZHOU Q, JIA L F, et al. The Gas-Sensing Mechanism of Pt<sub>3</sub> Cluster Doped SnS<sub>2</sub> Monolayer for SF<sub>6</sub> Decomposition: A DFT Study [J]. Applied Surface Science, 2022, 597: 153693.
- [11] 刘宇鹏, 侯文君, 周渠, 等. 基于密度泛函理论的油中特征气体在钼掺杂 SnP<sub>3</sub> 单层上吸附及传感性能研究 [J]. 中国电机工程学报, 2023, 43(5): 2040-2050.

- [12] LU D T, HUANG L, ZHANG J Q, et al. Rh- and Ru-Modified InSe Monolayers for Detection of  $\text{NH}_3$ ,  $\text{NO}_2$ , and  $\text{SO}_2$  in Agricultural Greenhouse: A DFT Study [J]. *ACS Applied Nano Materials*, 2023, 6(15): 14447-14458.
- [13] 涂杉, 冯伟权, 张泽, 等. Pt 掺杂  $\text{CeO}_2$  对磷酸铁锂电池热失控特征气体 CO 的吸附与传感机理研究 [J]. *重庆理工大学学报(自然科学)*, 2024, 38(2): 314-321.
- [14] 杨家隆, 吴宝良, 卢德滔, 等. 用于火电厂  $\text{NO}_x$  检测的 Pt- $\text{In}_2\text{O}_3$  传感器吸附及传感机理研究 [J]. *电子元件与材料*, 2024, 43(4): 387-394.
- [15] ZHANG D Z, WANG D Y, PAN W J, et al. Construction and DFT Study of Pd Decorated  $\text{WSe}_2$  Nanosheets for Highly Sensitive CO Detection at Room Temperature [J]. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 2022, 360: 131634.
- [16] ZHANG Y, FENG W Q, ZHANG J Q, et al. Enhancement of Adsorption Performance of Gases in Oil on a  $\text{Cr}_3$ -Modified  $\text{SnS}_2$  Monolayer Based on the First Principles [J]. *Langmuir*, 2023, 39(40): 14422-14432.
- [17] 王婧璇, 周渠, 桂银刚, 等. 掺杂硫化钼对油中特征气体  $\text{C}_2\text{H}_2$  的吸附性能 [J]. *高电压技术*, 2020, 46(6): 1962-1969.
- [18] WANG J X, ZHOU Q, ZENG W. Competitive Adsorption of  $\text{SF}_6$  Decompositions on Ni-Doped ZnO (100) Surface: Computational and Experimental Study [J]. *Applied Surface Science*, 2019, 479: 185-197.
- [19] LIAO N B, ZHOU H M, ZHENG B R, et al. Silicon Oxycarbide-Derived Carbon as Potential  $\text{NO}_2$  Gas Sensor: A First Principles' Study [J]. *IEEE Electron Device Letters*, 2018, 39(11): 1760-1763.
- [20] ZHANG X X, FANG R X, CHEN D C, et al. Using Pd-Doped  $\gamma$ -Graphyne to Detect Dissolved Gases in Transformer Oil: A Density Functional Theory Investigation [J]. *Nanomaterials*, 2019, 9(10): 1490.
- [21] LIU Q Q, ZHANG F Z, PEI M F, et al. RGO/CuCl-Based Flexible Gas Sensor for High-Concentration Carbon Monoxide Gas Detection at Room Temperature [J]. *Micromachines*, 2024, 15(6): 737.
- [22] NAKATE U T, PATIL P, NA S I, et al. Fabrication and Enhanced Carbon Monoxide Gas Sensing Performance of P-CuO/n-TiO<sub>2</sub> Heterojunction Device [J]. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, 2021, 612: 125962.
- [23] JAVANMARDI S, NASRESFAHANI S, SHEIKHI M H. Facile Synthesis of PdO/ $\text{SnO}_2$ /CuO Nanocomposite with Enhanced Carbon Monoxide Gas Sensing Performance at Low Operating Temperature [J]. *Materials Research Bulletin*, 2019, 118: 110496.
- [24] HSU K C, FANG T H, CHEN S H, et al. Gas Sensitivity and Sensing Mechanism Studies on ZnO/ $\text{La}_{0.8}\text{Sr}_{0.2}\text{Co}_{0.5}\text{Ni}_{0.5}\text{O}_3$  Heterojunction Structure [J]. *Ceramics International*, 2019, 45(7): 8744-8749.
- [25] LEI G, WANG Z, XIONG J, et al. The Enhanced Hydrogen-Sensing Performance of the Fe-Doped  $\text{MoO}_3$  Monolayer: A DFT Study [J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2020, 45(16): 10257-10267.
- [26] 高新, 李志慧, 刘宇鹏, 等. 改性石墨基传感器对  $\text{SF}_6$  分解组分  $\text{H}_2\text{S}$  的吸附机理及检测特性研究 [J]. *电工技术学报*, 2023, 38(13): 3606-3618.

