

基于第一性原理的 Mo_3N_2 晶体对 SF_6 分解组分吸附特性研究

张瑞恩^{1,2*} 李欣然^{1,2} 陈林聪^{1,2} 李天楚^{1,2} 范晓舟³

(1. 海南电网有限责任公司电力科学研究院 海口 570311; 2. 海南省电网理化分析重点实验室 海口 570311;
3. 华北电力大学 保定 071000)

Adsorption Characteristics of Mo_3N_2 Crystals for SF_6 Decomposition Components Based on First Principles

ZHANG Ruien^{1,2*}, LI Xinran^{1,2}, CHEN Lincong^{1,2}, LI Tianchu^{1,2}, FAN Xiaozhou³

(1. Electric Power Research Institute of Hainan Power Grid Co., Ltd., Haikou 570311, China; 2. Key Laboratory of Physical and Chemical Analysis for Electric Power of Hainan Province, Haikou 570311, China;
3. North China Electric Power University, Baoding 071000, China)

Abstract The detection of SF_6 decomposition components is one of the effective means to evaluate the operation status of power equipment and ensure the safe and reliable operation of the equipment. In this paper, the first-principles simulation software Materials Studio is used to simulate the adsorption behavior of two characteristic decomposition components of SF_6 on the surface of Mo_3N_2 . Its feasibility in the sensor field was evaluated from the aspects of adsorption energy, adsorption distance, transferred charge, band gap, and DOS diagram. The results show that the adsorption energy of Mo_3N_2 for H_2S and SO_2F_2 is greater than 0.800 eV, the SO_2F_2 gas molecules undergo deformation and cracking after adsorption, and the atomic arrangement of the Mo_3N_2 substrate is slightly dislocated, all of which are chemical adsorption. The band gap decreases to 0 after Mo_3N_2 adsorbs two gases and becomes metallic. All the simulation studies in this paper provide a theoretical basis for the selection of materials for the detection and removal of SF_6 decomposition component gases.

Keywords SF_6 decomposition component detection, First principles, Gas sensor, Mo_3N_2

摘要 对 SF_6 分解组分进行检测是对电力设备运行状态进行评估,以确保设备能安全稳定工作的有效措施之一。本文基于第一性原理仿真软件 Materials Studio 对 SF_6 的两种特征分解组分气体在 Mo_3N_2 表面上的吸附过程进行理论计算。从吸附能、吸附距离、转移电荷、带隙、能态密度图等方面对其在传感器领域的可行性做了评估。结果表明, Mo_3N_2 上对 H_2S , SO_2F_2 的吸附能均大于 0.800 eV, 且 SO_2F_2 气体分子在吸附后发生形变裂解, Mo_3N_2 基底的原子排布些许错位, 均为化学吸附。 Mo_3N_2 吸附两种气体后带隙降为 0, 转变为金属性。本文的所有理论计算研究对检测与清除 SF_6 分解组分气体的材料选型提供理论依据。

关键词 SF_6 分解组分检测 第一性原理 气敏传感器 Mo_3N_2

中图分类号: TM85 文献标识码: A doi: 10.13922/j.cnki.cjvst.202207017

纳米传感器因其体积小, 检测精度高, 成本低的优点, 成为未来绝缘电气设备内置传感, 在线监测的发展方向。作为纳米传感器的关键部分, 纳米材料发展至今, 有较多性能优异的典型代表。例如

过渡金属硫化物、半导体性质的金属氧化物, 过渡金属氮化物、碳化物等^[1] 纳米材料, 因其材料特质在纳米传感器领域受到广泛关注。与这些广为人知的二维结构的纳米材料不同, 作为一种过渡金属

氮化物纳米材料, 因为基于 Mo_3N_2 的薄膜所具有的优越的物理、化学和机械性能已被研究用于各种应用之中^[2]。因 Mo_3N_2 具有优异的催化性能, 气体分子较易吸附在其表面并改变其导电性能, 且 Mo_3N_2 材料对外几乎呈现金属性, 即能耗较低的特质, 为其作为器件设计及生产提供可能。

SF_6 , 一种无毒不燃的稳定气体, 因具有优异电负性, 已成熟应用于各气体绝缘设备之中^[3], 但这些电力设备在运行过程中出现的局部放电或者局部过热会导致绝缘介质被击穿, 发生分解, 产生系列可恢复的低氟化物, 但由于设备长期运行后, 密封性降低而增加的微水、微氧等成分与这些低氟化物发生反应, 最终产物为几种成分较为稳定的化合物^[4-5]。这些气体的存在将进一步促进 SF_6 的分解, 最终降低电力设备中绝缘介质含量, 影响设备工作性能。在 GIS 中, H_2S , 主要分解产物之一, 含量较多, 而 SO_2F_2 作为一种典型剧毒分解产物, 不仅对设备运维人员的构成安全隐患, 还会腐蚀电力设备内壁^[6-7]。及经长期的设备运行监测及相应实验研究发现, 通过对这些气体组分的检测, 可以实现对 SF_6 绝缘状态及电力设备运行状态的评估^[8-9]。因此, 采取一些检测手段对这些分解产物的含量进行检测是有必要的^[10]。在以下几个部分中, 本文将对上述两种分子在 Mo_3N_2 上的吸附性能进行理论计算, 从吸附前后对吸附能、电荷转移、能带结构、态密度(分波态密度)这几个方面进行对比, 分析 Mo_3N_2 的传感机理。对 Mo_3N_2 作为气敏材料的可行性研究提供数据支持。

1 研究方法

本文使用 Materials Studio(MS)商业软件中的 Dmol³ 软件包完成全部的理论计算。在本文的仿真计算中, 对交换关联泛函的处理选用了广义梯度近似(GGA)以解决电子密度不均的现象造成的带隙计算不准问题。同时, Perdew-Burke-Ernzerhof(PBE)函数被选用为处理交换关联能^[11]。使用 Tkatchenko 和 Scheffler 开发的色散校正的密度泛函理论(DFT-D)方法以及 TS 方法用于理解弱相互作用和范德华力^[12]。双数值极化基组(DNP)作为原子轨道基组^[13]。对于本文中 $4 \times 4 \times 1$ 超胞进行几何优化及电子计算过程中, 静态电子结构计算中布里渊区 MonkhorstPack 网格 k 点设置为 $2 \times 2 \times 1$ 。几何优化计算中, 能量容差精度设为 1.0×10^{-5} Ha, 最大力和最大位移分别为

0.002 Ha/Å 和 0.005 Å^[14]。为消除吸附模型层间相互作用的影响, 真空层设置成 15 Å, 在所有仿真计算中选用 5.0 Å 的全局轨道截止半径和 0.005 Ha 的拖尾值用以提高收敛速度, 并确保总能量的准确性。

Mo_3N_2 对单个气体分子的吸附能定义为:

$$E_{\text{ads}} = E_{(\text{Mo}_3\text{N}_2 + \text{gas})} - E_{\text{Mo}_3\text{N}_2} - E_{\text{gas}} \quad (1)$$

其中 $E_{(\text{Mo}_3\text{N}_2 + \text{gas})}$ 表示气体分子吸附在 Mo_3N_2 晶体上的总能量, $E_{\text{Mo}_3\text{N}_2}$ 表示未吸附气体分子时原本晶体结构的能量, E_{gas} 表示单个气体分子的能量。如果 E_{ads} 为负值, 则说明该吸附过程是自发进行的^[15]。

表一给出了 Mo_3N_2 的最稳定吸附位上的吸附能、吸附距离及电荷转移情况, 电荷转移用 Q 表示, Q 大于 0 表明电荷从吸附基底转移到气体分子上, 如果小于 0 则情况相反^[16]。

2 结果与分析

2.1 最稳定吸附构型

$\text{Mo}_3\text{N}_2(200)$ 为两层吸附原子排列而成, 如图 1(a) 所示, 其中(a1)为 Mo_3N_2 俯视图, (a2)为侧视图。从图中可知 N 原子被 Mo 原子环绕其中, 呈四方型排布。根据这种特殊原子分布情况, 本文参照石墨烯的吸附位点, 设置了 N 原子顶部, Mo 原子顶部, 及 Mo-Mo 桥位这三种吸附位点, 并充分考虑 H_2S , SO_2F_2 分子的对称性, 设置了多种角度及朝向的吸附构型。两种气体的最稳定吸附构型的吸附能、吸附距离、转移电荷及能带带隙情况如表 1 所示。其中吸附距离是指气体分子距离吸附基底最近的距离。

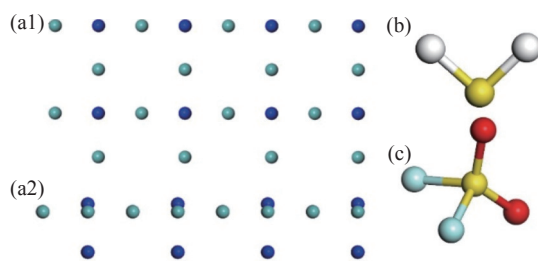


图1 $\text{Mo}_3\text{N}_2(200)$ (a) 及 H_2S (b), SO_2F_2 (c) 模型

Fig. 1 The structure of $\text{Mo}_3\text{N}_2(200)$ (a), H_2S (b) and SO_2F_2 (c)

图 2 展示了 Mo_3N_2 对两种气体分子的最佳吸附构型, 图 2(a)、(b) 分别为 SO_2F_2 及 H_2S 的最佳吸附构型, 从图中可以看到, SO_2F_2 气体分子由原始的一个 O 原子朝上, 两个 F 原子及另一个 O 原子呈三

表 1 最稳定吸附体系的吸附能, 吸附距离, 转移电荷及带隙

Tab. 1 Adsorption energy, adsorption distance, transfer charge and band gap of the most stable adsorption system

吸附分子	吸附能/eV	吸附距离/Å	转移电荷/e	带隙/eV
H ₂ S	-1.958	2.621	-0.148	0
SO ₂ F ₂	-6.244	1.715	0.7927	0

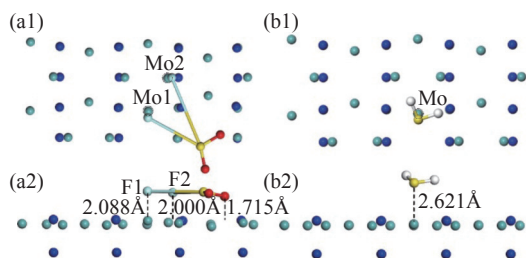


图2 H₂S (a) 及 SO₂F₂ (b) 最佳吸附模型

Fig. 2 Optimal adsorption structure of H₂S (a) and SO₂F₂ (b) molecule

角朝下的吸附形态变成 5 个原子呈平面形态吸附在 Mo₃N₂ 表面。其中 Mo₃N₂ 表面的 Mo 原子发生偏移, 有别于原始形态, 且 F1-S 键长为 4.120 Å, F1-S 键长为 5.123 Å, 明显长于原始的 1.614 Å, 可判定 S-F 键断裂, 且两个 F 原子均向 Mo 原子移动, 考虑

该体系吸附能为 -6.244 eV, 可综合判定该吸附为强烈的化学吸附。H₂S 吸附体系与 SO₂F₂ 体系明显不同, 虽然 Mo₃N₂ 表面的 Mo 原子也发生偏移, 但 H₂S 分子无明显形变, 吸附距离为 2.621 Å, H₂S 由原始的 H 原子朝下呈一字型的吸附形态变为整体稍平行于 Mo₃N₂ 表面, 吸附能为 -1.958 eV, 有 0.148 e 电荷从 Mo₃N₂ 表面转移到 H₂S 气体分子, 有别于 SO₂F₂ 吸附体系。

2.2 电子性质

为了更细致的了解这两种气体分子在 Mo₃N₂ 表面上的吸附行为, 进一步绘制了能带图与自旋电子态密度图 (Density of States, DOS), 从它们的变化来对比分析吸附气体的变化机理与原因。从图 3 可以看出 Mo₃N₂ 表面与两种气体分子吸附完成后的能带结构图变化。图 3(a) 为 Mo₃N₂ 的带隙结构, 带隙为 0.028 eV, 即带隙及其微小, 呈半导体性质。吸附两种气体后, 带隙均变为 0, 呈金属性^[17]。从图 4 中可以看到两种气体分子在 Mo₃N₂ 表面吸附前后的自旋态密度图, 均呈严格对称分布, 即均为无磁性体系, 在本节的后续部分不再赘述。图 4(a) 中可以明显看出, 在费米能级 ±1.000 eV 范围内吸附

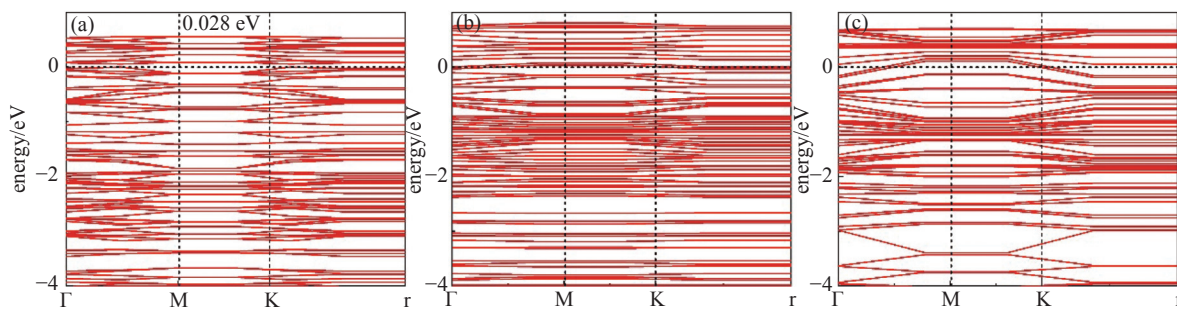


图3 Mo₃N₂ (a), H₂S (b) 及 SO₂F₂ (c) 能带结构图

Fig. 3 Band structure of Mo₃N₂ (a), H₂S (b) and SO₂F₂ (c)

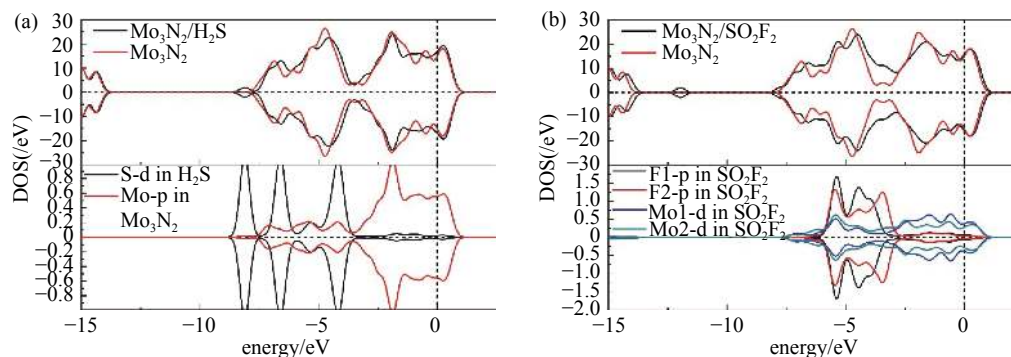


图4 H₂S(a) 及 SO₂F₂(b) 吸附体系的 DOS

Fig. 4 DOS of H₂S(a) and SO₂F₂(b) adsorption systems

前后的态密度几近完全重合, 在 -1.000 eV 之后吸附体系较 Mo_3N_2 体系态密度变化更为平缓, 幅值有略微增长, 峰值均出现在 -2.500 、 -4.850 eV 左右, 无明显偏移, 吸附后体系较吸附前 DOS 有所降低。可以看出这个 -2.500 eV 处, 未被占据的 DOS 峰主要是由离气体分子最近的 Mo 原子的 P 轨道贡献所得, 而 -4.850 eV 处的未被占据的 DOS 峰则由 S 原子的 d 轨道与吸附基底中离 H_2S 分子最近的 Mo 原子的 P 轨道贡献所得(后续所讨论的 Mo 原子均为离气体分子最近的吸附基底中的原子)。在费米能级附近可以看出这两个原子轨道无轨道重叠, 即相互作用微弱。

从图 4(b) 中可以看出 SO_2F_2 在 Mo_3N_2 表面上吸附前后的能态密度在导带处基本重合, 而在价带处出现不同程度的偏移。吸附气体后, 导带 0.500 eV 、价带 1.000 eV 出现的未被占据的峰主要是由 Mo1 原子和 Mo2 原子的 p 轨道杂化贡献所得。在价带 3.500 eV 处, 两个 F 原子的 p 轨道分别与其最近的 Mo 原子的 d 轨道交叠, 相互作用明显。在费米能级出, 两种原子交叠程度明显高于 SO_2 , 且分子间原子重叠, 轨道杂化明显, 结合 SO_2F_2 分子裂解, 两个 F 原子远离分子主体的吸附行为, 印证其吸附性质为吸附能较大的化学吸附^[18]。

图 5 展示了两种气体分子在 Mo_3N_2 表面上完成吸附后最稳定模型的差分电荷密度, 非常形象的展现了分子与晶体间的电荷转移情况。通过 CDD 计算公式 $\Delta\rho = \rho(\text{Mo}_3\text{N}_2 + \text{gas}) - \rho\text{Mo}_3\text{N}_2 - \rho\text{gas}$ 可以计算出每种气体分子最稳定吸附模型的 CDD, 其中 $\Delta\rho = \rho(\text{Mo}_3\text{N}_2 + \text{gas})$ 为整个吸附模型的电荷密度, $\rho\text{Mo}_3\text{N}_2$ 则为 Mo_3N_2 的电荷密度, ρgas 为一个气体分子的电荷密度, 需要注意的是, 以上几个电荷密度必须为同一模型内的计算数据^[19]。

H_2S 吸附在 Mo_3N_2 表面上 CDD 如图 5(a) 所示, 可以清楚看出 Mo 原子附近聚集了主要的电荷积累, 些许电荷积累同样存在与吸附基底与气体分子之间, 电荷减少出现在吸附基底的 Mo 原子周围, 可知 Mo 与 S 原子之间存在较强的电荷局域化行为。以 Hirshfeld 法得知, H_2S 在吸附后转移了 0.148 e 电子到 Mo_3N_2 表面, 表明 H_2S 分子在反应中的失电子性能。 SO_2F_2 吸附在 Mo_3N_2 表面上 CDD 如图 5(b) 所示, 可以清楚看出电荷主要积累在 SO_2F_2 周围, 电荷减少则出现在吸附基底与 SO_2F_2 分子周围, 可知

SO_2F_2 与吸附基底之间存在较强的电荷局域化行为。 SO_2F_2 在吸附后转移了从 Mo_3N_2 表面转移了 0.7927 e 电子, 表明 SO_2F_2 分子在反应中的得电子性能。上述电荷转移描述再次验证了对于两种 SF_6 分解组分气体而言, Mo_3N_2 晶体表面对 SO_2F_2 气体的吸附能力优于 H_2S 。

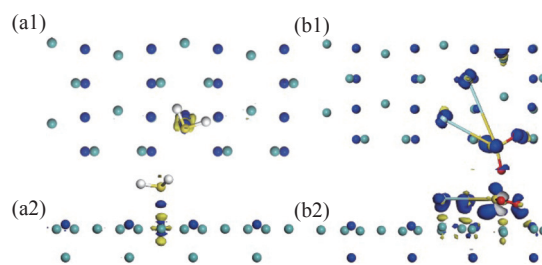


图5 H_2S (a) 及 SO_2F_2 (b) 吸附体系的 CDD。海军蓝色和黄色代表电荷的积累与消耗, 等值面均取 $0.100 \text{ e}/\text{\AA}^3$

Fig. 5 CDD of H_2S (a) and SO_2F_2 (b) adsorption systems, the navy blue and yellow areas correspond to the accumulation and consumption of electric charge, respectively. The isosurface is all taken as $0.100 \text{ e}/\text{\AA}^3$

2.3 功函数分析

功函数(Work Function, WF)表达了一个电子从费米能级跨跃到真空层中所需的最少能量。换种说法而言, 功函数可以被看做在气体在吸附过程中触及吸附基底, 发生电荷转移的壁垒。本节为 Mo_3N_2 在场效应传感器领域的扩展应用提供理论数据支撑^[20]。

图 6 展示了 Mo_3N_2 以及 H_2S 和 SO_2F_2 吸附体系的功函数大小。从图中可以看出, Mo_3N_2 体系的功函数为 3.755 eV , 在吸附了单个 H_2S 分子以后, Mo_3N_2 的功函数降低为 3.483 eV , 而吸附 SO_2F_2 后, 整个体系功函数增加至 4.190 eV 。这表明吸附单

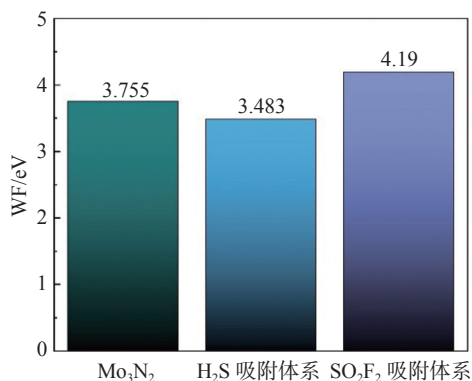


图6 H_2S 、 SO_2F_2 吸附体系的功函数。

Fig. 6 WF of H_2S , SO_2F_2 adsorption systems

个 SO_2F_2 分子后, 电子从吸附基底转移的过程变得不易, 吸附 H_2S 后与电子转移难易程度则与之相反。这两个相反的功函数数值变化进一步证实了在 Mo_3N_2 场效应管传感器领域, 可以通过调节栅极电压的形式来控制传感器电阻变化规律^[21], 以达到对气体的检测目的。

3 结论

本文通过对 SF_6 的两种主要分解组分的基于第一性原理的 MS 仿真计算, 得出了两种气体分子在 Mo_3N_2 表面上的最稳定吸附模型, 及其相应的吸附能, 吸附距离、转移电荷等数值。从结果可以得出以下结论:

(1) 两种气体的吸附改变 Mo_3N_2 的带隙, 使其从半导体状态转变为金属性;

(2) Mo_3N_2 对 H_2S , SO_2F_2 的吸附能分别为 -1.958 eV 、 -6.244 eV , 结合 Hirshfeld 法进一步分析电荷转移情况确定对单个 H_2S , SO_2F_2 的吸附行为均为化学吸附;

(3) 通过对能带结构及能态密度分析得出 Mo_3N_2 有潜力作为电阻型气敏传感器对两种气体进行气敏检测, 而 WF 分析表明其在场效应传感器对气体进行选择检测方面的可行性;

(4) SO_2F_2 在吸附在 Mo_3N_2 表面的过程中因强相互作用导致 S-F 键断裂, 表明 Mo_3N_2 具有作为 SO_2F_2 清除剂的潜力。

本文所有研究结果为开发 Mo_3N_2 基气敏传感器在电力设备故障检测领域的应用上提供理论支持。

参 考 文 献

- [1] Cui H. Gas sensing properties of co-doped carbon nanotubes for detection of SF_6 decomposed species[D]. Chongqing University, 2019 (崔豪. 复合掺杂碳纳米管检测六氟化硫分解组分的气敏传感研究[D]. 重庆: 重庆大学, 2019.(in chinese))
- [2] Wang Y. B, Zhang D Y, Han J H, et al., Porous $\text{Mo}_3\text{C}-\text{Mo}_3\text{N}_2$ heterostructure/rGO with synergistic functions as polysulfides regulator for high-performance lithium sulfur batteries[J]. Chemical Engineering Journal, 2022; 433
- [3] Chen DC, Tang J, Zhang XX, et al. detection of SF_6 decomposition products using MoS_2 nanoflakes: gas sensing properties combined with mechanism study[J]. Proceedings of the CSEE, 2022, 42(22): 8390–8404 (陈达畅, 唐炬, 张晓星, 等. 检测 SF_6 分解特征组分的 MoS_2 纳米片气敏特性与机理研究[J]. 中国电机工程学报, 2022, 42(22): 8390–8404(in chinese))
- [4] Zhang XX, Wu FQ, Tie J, et al. TiO_2 nanotube array sensor for detecting SF_6 decomposition component SO_2F_2 [J]. High Voltage Engineering, 2014, 40(11): 3396–3402 (张晓星, 吴法清, 铁静, 等. 二氧化钛纳米管气体传感器检测 SF_6 的气体分解组分 SO_2F_2 的气敏特性[J]. 高电压技术, 2014, 40(11): 3396–3402(in chinese))
- [5] Zhang XX, Meng FS, Ren JB. et al. Simulation on the b-doped single-walled carbon nanotubes detecting the partial discharge of SF_6 [J]. High Voltage Engineering, 2011, 37(07): 1689–1694 (张晓星, 孟凡生, 任江波, 等. 硼掺杂单壁碳纳米管检测 SF_6 气体局部放电仿真[J]. 高电压技术, 2011, 37(07): 1689–1694(in chinese))
- [6] Wei Z, Zhou Q, Zeng W. Hierarchical WO_3-NiO microflower for high sensitivity detection of SF_6 decomposition by product H_2S [J]. Nanotechnology, 2020, 31(21): 215701
- [7] Zhang XX, Fang JN, Cui H, et al. Review: adsorption principle and application of carbon nanotubes to SF_6 decomposition components[J]. Proceedings of the CSEE, 2018, 38(16): 4926–4941+4997 (张晓星, 方佳妮, 崔豪, 等. 碳纳米管传感器吸附机理及对 SF_6 分解组分检测应用综述[J]. 中国电机工程学报, 2018, 38(16): 4926–4941+4997(in chinese))
- [8] Tang J, Yang D, Zeng FP, et al. Research status of SF_6 insulation equipment fault diagnosis method and technology based on decomposed components analysis[J]. Transactions Of China Electrotechnical Society, 2016, 31(20): 41–54 (唐炬, 杨东, 曾福平, 等. 基于分解组分分析的 SF_6 设备绝缘故障诊断方法与技术的研究现状[J]. 电工技术学报, 2016, 31(20): 41–54(in chinese))
- [9] Wang H, Li XJ, Li Z. et al. Research progress of SO_2 and H_2S gas sensors for insulation fault detection of SF_6 electrical equipment[J]. High Voltage Apparatus, 2019, 55(08): 1–9 (王辉, 李晓军, 李舟. SF_6 电气设备绝缘故障诊断用 SO_2 、 H_2S 气体传感器研究进展[J]. 高压电器, 2019, 55(08): 1–9(in chinese))
- [10] Dou XJ, Ye RX, Fu JH. et al. Research Status of SF_6 gas decomposition products detection methods and their application[J]. Power System and Clean Energy, 2019, 35(07): 24–31 (窦小晶, 叶日新, 付纪华, 等. SF_6 气体分解产物检测技术及其应用的研究现状[J]. 电网与清洁能源, 2019, 35(07): 24–31(in chinese))
- [11] Cui Hao, Jia Pengfei, Peng Xiaoyan, et al. Adsorption and

- sensing of CO and C_2H_2 by S-defected SnS_2 monolayer for DGA in transformer oil: A DFT study[J]. *Materials Chemistry and Physics*[J], 2020, 249: 123006
- [12] Wang Jincong, Zhang Xiaoxing, Liu Li, et al. Dissolved gas analysis in transformer oil using Ni-doped gan monolayer: a DFT study[J]. *Superlattices and Microstructures*, 2021: 159
- [13] Jia Pengfei, Qiao Siqi, Wang Yu, et al. Pd-decorated GaN monolayer as a promising scavenger for SO_2 and SOF_2 in SF_6 insulation equipment: a first-principles study. *computational and theoretical chemistry*[J]. 2021, 1201: 6
- [14] Huang Jialiang, Huang Jialiang, Wang Zhenyu, et al. Chemisorption of NO_2 to MoS_2 nanostructures and its effects for MoS_2 sensors[J]. *Chem Nano Matt*, 2019, 5(9): 1123–1130
- [15] Liu Yupeng, Zhou Qu, Mi Hongwan, et al. Gas-sensing mechanism of Cr doped SnP_3 monolayer to SF_6 partial discharge decomposition components[J]. *Applied Surface Science*, 2021, 546: 149084
- [16] Jincong Wang, Xiaoxing Zhang, Li Liu, et al. Adsorption of SF_6 decomposition products by the s vacancy structure and edge structure of SnS_2 : a density functional theory study[J]. *ACS Omega*, 2021, 6(42): 28131–28139
- [17] Zhang X X, Wang J C, Chen D C. et al. Calculation of adsorption performance ti dopped with MoS_2 to CF_4 , C_2F_6 and COF_2 Based on the first-principle[J]. *High Voltage Apparatus*, 2021, 57(03): 89–96 (张晓星, 王锦聪, 陈达畅, 等. 基于第一性原理计算Ti掺杂 MoS_2 对 CF_4 、 C_2F_6 和 COF_2 的吸附性能[J]. 高压电器, 2021, 57(03): 89–96(in chinese))
- [18] Xiaoxing Zhang, Li Liu, Jincong Wang, et al. Detection of SF_6 decomposition components by pristine and Cr doped GaN based on the first-principles theory[J]. *Computational and Theoretical Chemistry*, 2021, 1205: 113431
- [19] Xiaoxing Zhang, Jincong Wang, Dachang Chen, et al. The adsorption performance of harmful gas on Cu doped WS_2 : A first-principle study[J]. *Materials Today Communications*, 2021, 28(9): 102488
- [20] Pi SM, Zhang XX, Fang JN. et al. Different PtNPs doped graphene sensor for detecting gas sensitive property of SF_6 decomposition components[J]. *High Voltage Apparatus*, 2022, 58(02): 67–72+81 (皮守苗, 张晓星, 方佳妮, 等. 不同PtNPs掺杂量石墨烯传感器检测 SF_6 分解组分的气敏特性[J]. 高压电器, 2022, 58(02): 67–72+81(in chinese))
- [21] Zheng SY, Cao ZG, Cao Y. et al. Study on adsorption characteristics of dissolved gas in transformer oil by copper doped zinc oxide[J]. *High Voltage Apparatus*, 2022 (郑世英, 曹志刚, 曹阳, 等. 基于第一性原理的铜掺杂氧化锌对变压器油中溶解气体的吸附特性研究[J/OL]. 真空科学与技术学报, 2022.(in chinese))