



مدل سازی و صحت سنجی پاسخ یک حسگر گاز تحت مدولاسیون دمایی به گاز اتانول

سید محسن حسینی گلگو^{1*}، سجاد ثابت²

1- استادیار، مهندسی الکترونیک، دانشگاه گیلان، رشت

2- دانش‌آموخته کارشناسی ارشد، مهندسی الکترونیک، دانشگاه گیلان، رشت

* صندوق پستی 4199613776، پست الکترونیکی smhosseini@guilan.ac.ir

اطلاعات مقاله

مقاله پژوهشی کامل

دریافت: 07 دی 1396

پذیرش: 09 بهمن 1396

ارائه در سایت: 04 اسفند 1396

کلید واژگان:

حسگر گاز اکسید فلزی

سیمولینک متلب

مدولاسیون دمایی

پاسخ گذرا

چکیده

در این مقاله ابتدا یک حسگر گاز اکسید فلزی از نوع تجاری تحت مدولاسیون دمایی قرار داده شده و همزمان ثبت پاسخ‌های گذرای آن به تراکم‌های مختلف گاز اتانول ارائه می‌شود. با اعمال مدولاسیون دمایی، دمای سطح حسگر نیز توسط یک ترموکوپل نوع-S ظرفیت ثبت شد. سپس عملکرد این نوع حسگرها بر اساس مدل جذب اکسیژن هوا و جذب گاز اتانول بر سطح لایه حساس با استفاده از معادله جذب هم‌دمای فروندلیش بیان می‌شود. در ادامه، این مدل با استفاده از نرم افزار متلب در محیط سیمولینک شبیه‌سازی می‌شود. با استفاده از این مدل می‌توان پاسخ پویای حسگر را به اتانول مشاهده کرد. در این مدل، تراکم یک گاز بصورت ولتاژ در نظر گرفته می‌شود. این پارامتر به همراه پروفایل دمایی سطح یک حسگر تحت مدولاسیون دمایی و هدایت حسگر تحت تاثیر اکسیژن هوا، به عنوان ورودی‌های مدل و پاسخ‌های گذرای حسگر به عنوان خروجی مدل در نظر گرفته می‌شوند. پارامترهای این مدل بر اساس معیار نزدیکی پاسخ‌های شبیه‌سازی شده و پاسخ‌های ثبت شده در هر تراکم از گاز اتانول محاسبه می‌شوند. نتایج شبیه‌سازی بر اساس میانگین پارامترهای شبیه‌سازی شده نیز نشان‌دهنده‌ی نزدیکی پاسخ‌های شبیه‌سازی شده و پاسخ‌های ثبت‌شده‌ی واقعی بود.

Modeling and validation of the transient response of a temperature modulated gas sensor to ethanol

Seyed Mohsen Hosseini Golgoo*, Sajjad Sabet

Engineering Faculty, University of Guilan, Rasht, Iran

* P.O.B. 4199613776 Rasht, Iran, smhosseini@guilan.ac.ir

ARTICLE INFORMATION

Original Research Paper
Received 28 December 2017
Accepted 29 January 2018
Available Online 23 February 2018

Keywords:

Metal oxide gas sensor
MATLAB Simulink
Temperature modulation
Transient response

ABSTRACT

In this paper, a commercial metal-oxide gas sensor was first placed under temperature modulation regime and simultaneously their transient response to various concentrations of ethanol vapors was recorded. By applying the temperature modulation, the sensor surface temperature was also recorded by a S-type thermocouple. Then, the performance of these sensors was expressed based on the both air oxygen absorption model and ethanol absorption on the surface of the sensitive layer using the Freundlich isotherm equation. Further, this model is simulated using the MATLAB software in the simulink environment. Using this model, one can see the sensor's dynamic response to ethanol. In this model, the concentration of a gas is considered as a voltage. This parameter, along with the temperature profile of the sensor surface under temperature modulation and sensor conductance under the influence of air oxygen, are considered as inputs of the model and transient response of the sensor as output of the model. The parameters of this model are calculated based on the approximate criterion of simulated responses and the responses recorded for each concentration of ethanol gas. The simulation results based on the validation data also showed that the simulated responses were close to the actual recorded responses.

1- مقدمه

گاز نیمه‌رسانا به طراحی و تفسیر داده‌های آزمایشی کمک فراوانی کرده است [8,7]. یکی از روش‌های مهم انتخابگر نمودن این نوع حسگرها، مدولاسیون دمایی کار آن‌ها با اعمال یک شکل موج متغیر با زمان به گرمکن حسگر است [9]. در این حالت پاسخ پویا¹ در یک حسگر گاز اکسید فلزی شامل اطلاعاتی است که شناسایی گاز را ممکن ساخته است [10,8]. یک حسگر گاز نیمه‌رسانا در حضور گاز با توجه به جذب گاز روی سطح حساس آن پاسخی را از خود نشان می‌دهد که این پاسخ تحت شرایطی می‌تواند شامل

حسگر تبدیلی است که کمیت‌های فیزیکی یا شیمیایی را به یک کمیت الکتریکی مطلوب تعیین نماید. از میان کمیت‌های الکتریکی می‌توان به تغییرات مقاومت الکتریکی [5-1] و تغییرات خازنی [6] اشاره نمود. بسیاری از لایه‌های اکسید فلزی همچون SnO_2 ، TiO_2 و ZnO به گازها حساس هستند و به همین دلیل به عنوان حسگرهای حالت جامد مورد استفاده قرار می‌گیرند [5-1]. حسگرهای اکسید فلزی با وجود دارا بودن حساسیت بالا به گازهای هدف قابلیت انتخابگری ندارند. توسعه مدل‌های این نوع حسگرهای

¹ Dynamic response

Please cite this article using:

S. M. Hosseini Golgoo, S. Sabet, Modeling and validation of the transient response of a temperature modulated gas sensor to ethanol, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 18, No. 03, pp. 164-170, 2018 (in Persian)

برای ارجاع به این مقاله از عبارت ذیل استفاده نمایید:

2- کار آزمایشگاهی و ثبت پاسخ حسگر

برای ثبت پاسخ حسگر، یک سامانه‌ی مکانیکی طراحی و استفاده شد. شکل 1-a تصویر واقعی سامانه ثبت پاسخ حسگر را نشان می‌دهد. طرح‌واره‌ای از این سامانه نیز در شکل 1-b نشان داده شده است. این سامانه شامل یک محفظه‌ی 8 لیتری جهت تزریق گاز هدف است. همچنین به منظور تولید شکل موج ولتاژ گرمکن، انتقال سیگنال حسگر به رایانه و دیگر فرامین مورد نیاز از یک کارت ورودی/خروجی چندکاره قابل کنترل با لب‌ویو¹⁰ (کارت ادونتک، مدل PCI-1711-L)¹¹ استفاده شد. برای ثبت هر پاسخ، ابتدا حجم معینی از مایع مورد آزمایش توسط نمونه‌بردار¹² و از طریق دریچه‌ی تزریق به داخل محفظه‌ی گاز تزریق شد. در طول آزمایش، ورود/خروج حسگر به/از محفظه‌ی آلوده به گاز مورد مطالعه، با استفاده از یک جک بادی¹³ که از کارت کنترلی فرمان می‌گرفت به صورت خودکار انجام می‌شد. یک مدار واسط نیز وظیفه‌ی ارتباط بین کارت ورودی/خروجی و اجزای دیگر سامانه را بر عهده داشت. پس از تعادل بخار مایع تزریق شده با هوای داخل محفظه، فرمان کارت کنترلی از طریق مدار واسط به پیستون‌های بادی صادر شده و با عمل کردن پیستون‌ها، حسگر در معرض محیط آلوده به گاز هدف قرار می‌گرفت. همزمان، برنامه‌ی تحریک گرمکن‌ها نیز مطابق شکل 2 اجرا می‌شد. در این حالت، تغییر مقاومت حسگر از طریق مدار واسط به ولتاژ تبدیل شده و از طریق مبدل آنالوگ به دیجیتال با نرخ نمونه‌برداری 100 نمونه بر ثانیه به رایانه منتقل می‌شد. در هر تزریق، شکل موج ورودی، به گرمکن حسگر

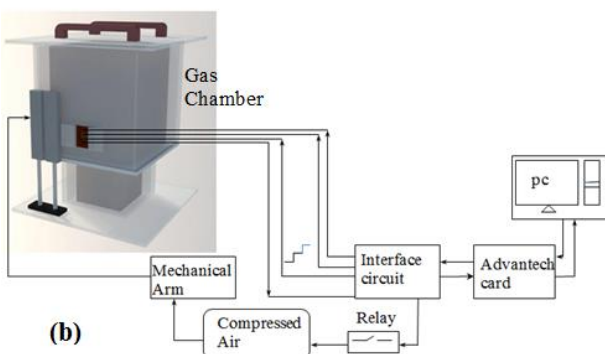
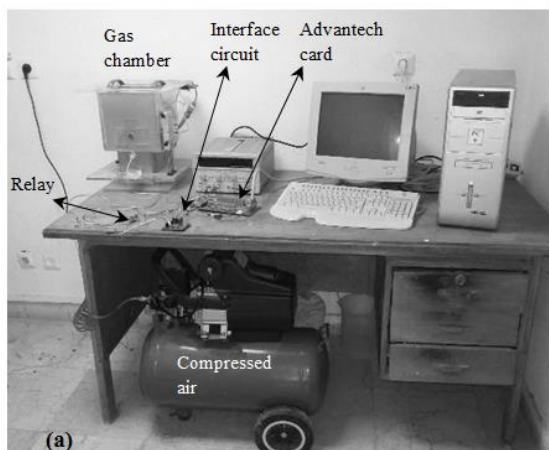


Fig.1 (a) Experimental setup. (b) Schematic experimental setup

شکل 1 الف) تصویر واقعی و ب) طرح‌واره سامانه آزمایش‌های تجربی

ویژگی‌های شناسایی گاز است. این پاسخ به پاسخ زمانی حسگر معروف است. پاسخ زمانی حسگر بر اساس تغییر مقاومت لایه اکسید فلزی ایجاد می‌شود. مدولاسیون دمایی یکی از روش‌های جنبش‌شناسی¹ جذب و واکنش در سطح حسگر برای تشخیص گونه‌های اکسیدی/احیایی² در حضور اکسیژن هوا محسوب می‌شود. در این روش از یک شکل موج ولتاژ برای تحریک گرمکن³ حسگر استفاده می‌شود تا سطح حسگر دماهای مختلف را تجربه کند. در [11] با اعمال یک شکل موج پلکانی به گرمکن حسگر به عنوان مدولاسیون دمایی⁴، گازهای متانول، اتانول، پروپانول و 1-بوتانول از یکدیگر تشخیص داده شدند. همچنین در [12] برای یک حسگر اکسیدفلزی از تلفیق شکل موج‌های پالس و پلکانی به منظور تشخیص 12 گاز متانول، اتانول، 1-پروپانول، 2-پروپانول، 1-بوتانول، 2-بوتانول، ترت-بوتانول، ایزو-بوتانول، هیدروژن، 2-بوتانول، 2-پنتانول و استون استفاده شد. همچنین در [13] به منظور پیاده سازی یک آشکارساز هوشمند برای تمایز بین CH_4 و CO از یک سیگنال مثلثی برای مدولاسیون دمایی حسگر استفاده شد. در [14] برای تمایز بین دو گاز CO و NO_2 از یک شکل موج سینوسی برای مدولاسیون دمایی استفاده شد. سپس در مرجع [15] نانو سیم اکسید فلزی تک‌بلور (ZnO و SnO_2) به عنوان حسگر مونوکسیدکربن استفاده شد. به طور خاص یک مدل هدایتی برای رفتار پویای حسگر که قادر به پیش‌بینی پاسخ حسگر در طی پاسخ گذرا بود، توسعه داده و تست شد. همچنین در [16] اثر آلیش و خواص لایه‌های TiO_2 نانو لوله‌ای بر رفتار حسگر بررسی شده است و همچنین این مکانیزم برای گاز NO_2 با استفاده از مدل سازی با یک مدار معادل شامل مقاومت و خازن مورد بررسی قرار گرفته است پارامترهای این مدار معادل با نرم افزار متلب با استفاده از تکنیک برازش بدست آمد. همچنین در مراجع [17-19] یک مدل پی-اس-پایس⁵ برای حسگرهای گاز مقاومتی بیان شد. با استفاده از این مدل یک مدولاسیون دمایی به گرمکن حسگر اعمال شد و پاسخ حسگر به گازهای احیایی ثبت شد. در این مدل مصالحه خوبی بین پاسخ تجربی و پاسخ شبیه‌سازی مشاهده شد. در مرجع [20] هدایت اکسید قلع لایه ضخیم با افزایش تراکم گاز مورد تحلیل قرار گرفت. پاسخ گذرای سه حسگر اکسید قلع لایه ضخیم در حضور بخارات تولوئن، اواکسیلن و اتانول ثبت شد. سپس رفتار این حسگرها با استفاده از یک مدل واکنش نفوذی⁶ مدل‌سازی شد. در آخر مرجع [21] یک مدل مدار معادل الکتریکی که شامل مقاومت، خازن، منبع ولتاژ و یک سوئیچ است را ارائه می‌دهد که فرایند جذب و واجذب که بر روی حسگرهای شیمیایی تحت فرضیه لانگمویر⁷ رخ می‌دهد را توصیف می‌کند. باز یا بسته بودن سوئیچ بستگی به حالت فرایند جذب و واجذب دارد.

در این مقاله با اعمال یک شکل موج پلکانی، شامل 5 پله با مدت دوام 10 ثانیه و ارتفاع 1 ولت برای هر پله، به گرمکن حسگر، پاسخ حسگر تجاری اف-آی-اس (مدل SP3-AQ2)⁸ در حضور بخارات اتانول ثبت شد. این حسگر دارای حساسیت و سرعت پاسخ بالایی به گازهای احیایی است. سپس مدلی برای این حسگر تجاری بر اساس معادله جذب فروندلیش و جذب اکسیژن ارائه و در سیمولینک متلب⁹ پیاده‌سازی شد. نهایتاً، با استفاده از این مدل پاسخ حسگر پیش‌بینی و با نتایج آزمایشگاهی مقایسه شد.

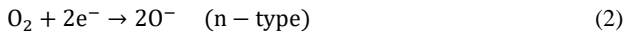
¹ Kinetic
² Oxidizing/Reducing
³ Heater
⁴ Temperature Modulation
⁵ PSpice
⁶ Diffusion-Reaction Model
⁷ Langmuir
⁸ FIS (SP3-AQ2)
⁹ MATLAB Simulink

¹⁰ Labview
¹¹ Advantech (PCI-1711-L)
¹² Sampler
¹³ Pneumatic

هدف اتانول، صورت گرفت. نتایج، براساس پروفایل شکل موج پلکانی استفاده شده، در شکل 3 نمایش داده شده‌اند. در این شکل، پاسخ گذرای حسگر تحت مدولاسیون دمایی به هوای تمیز نیز با نقطه چین نشان داده شده است.

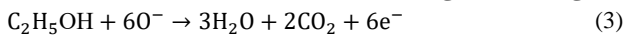
3- مدل سازی پاسخ حسگر

قبل از تشریح جزئیات مدل، توصیف مختصری در مورد رفتار معمول حسگر گاز اکسید فلزی در حضور گاز ارائه می‌شود. در هوا، اکسیژن بر روی سطح جذب شده به شکل O^- تجزیه می‌شود [25]. این تعامل اکسیژن با سطح سبب کاهش الکترون از نیمه‌رسانا می‌شود. واکنش‌های اکسیدی در سطح را می‌توان بصورت معادله‌ی (2) در نظر گرفت:



این کسرشدگی الکترون سبب افزایش مقاومت نیمه‌رسانا می‌شود. لازم به ذکر است که از واکنش‌های الکتروشیمیایی همانند معادله شیمیایی (2) در پیل‌های سوختی اکسید جامد با سوخت هیدروژن برای تولید انرژی الکتریکی نیز استفاده می‌شود [27].

سپس در حضور گاز احیایی⁵، همچون C_2H_5OH ، اتانول با اکسیژن جذب شده، O^- ، واکنش داده تشکیل آب و دی‌اکسیدکربن می‌دهد. این واکنش‌ها سبب می‌شوند الکترون دوباره به نیمه‌رسانا تزریق شود. واکنش احیایی مورد نظر را می‌توان به صورت معادله‌ی (3) در نظر گرفت [2]:



این بازیابی الکترون سبب کاهش مقاومت نیمه‌رسانا می‌شود. در این صورت هدایت الکتریکی حسگر تحت تاثیر گاز محیطی قرار خواهد گرفت [26]. نشان داده شده است که هدایت الکتریکی حسگرهای اکسید فلزی، G_s ، در حضور تراکم مشخص از گاز احیایی، C_{gas} ، با دقت خوبی از جذب هم‌دمای فروندلیش⁶ و جذب اکسیژن در سطح مطابق رابطه (4) پیروی می‌کنند [17].

$$G_s = K_q \times C_{gas}^r \times p(O_2)^{\frac{1}{m}} \quad (4)$$

که در آن، $p(O_2)$ فشار اکسیژن محیطی و m ثابتی است که به نوع نقص غالب⁷ بین بدهنی نیمه‌رسانا، در حالت تعادل اکسیژن با حسگر بستگی دارد.

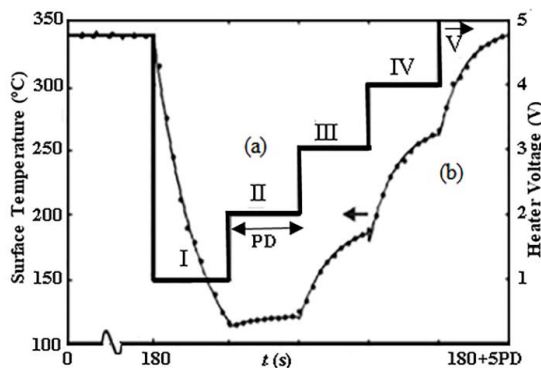


Fig. 2 (a) Heater staircase voltage, (b) Thermal variation of the sensor surface

شکل 2 (الف) ولتاژ پلکانی گرمکن، (ب) تغییر دمای سطح حساس حسگر

جدول 1 پارامترهای رابطه (1)

پله-IV	پله-III	پله-II	پله-I	پارامترها
343	193	122	63	T_{SS} (°C)
82.1	73.7	8.4	-282	T_0 (°C)
3.5	4.4	4.8	6.6	τ (s)

⁵ Reducing Gas

⁶ Freundlich Adsorption Isotherm

⁷ Dominant Defect

اعمال شده پاسخ‌ها ثبت می‌شود. پس از ثبت پاسخ‌ها در مدت معین، مجدداً از طریق فرمان کارت کنترلی، حسگر از محفظه جدا شده درجه‌ی ورودی بسته می‌شود. در این حالت محفظه برای تزریق تراکم بعدی آماده شده و عملیات ثبت پاسخ‌ها تکرار می‌شود.

به منظور ثبت پاسخ‌های تجربی از یک حسگر گاز مقاومتی تجاری در حضور تراکم‌های مختلف گاز اتانول استفاده شد. حسگر مورد استفاده جهت ثبت پاسخ و مدل‌سازی، یک آشکارساز گاز عمومی از خانواده‌ی اف-آی-اس است [22]. حسگرهای اف-آی-اس جزء حسگرهایی هستند که نسبت به حسگرهای مشابه، دارای حساسیت بالاتر و قابلیت تکرار پاسخ مناسب‌تر هستند. لازم به ذکر است که در مورد حسگرهای شیمیایی، به دلیل باز بودن این حسگرها و تاثیرپذیر بودن آن‌ها از شرایط محیطی، اعلان دقت پاسخ و طول عمر به شرایط استفاده و نگهداری بستگی داشته و توسط کارخانه‌های سازنده ارائه نمی‌شود. این حسگر شامل لایه‌ی ضخیمی از اکسید قلع (نیمه‌رسانای نوع-n) با مساحت مفید تقریبی 2.3 میلی متر مربع بر روی یک زیرلایه‌ی آلومینایی¹ و ریزگرمکنی برای ایجاد دماهای کاری بالا است. از یک شکل موج پلکانی که ترکیبی از روش‌های «دوره‌ی دمایی» و «گذارهای دمایی» است برای تحریک گرمکن حسگر و برقراری شرایط مدولاسیون دمایی حسگر گاز استفاده شد [23]. شکل 2-a ساختار شکل موج پلکانی نوعی مورد استفاده را نشان می‌دهد.

پارامتر PD در این شکل، دوام هر پله² است که در اینجا برای آن مقدار 10 ثانیه در نظر گرفته شد. در ابتدا حسگر به مدت 180 ثانیه در هوای آزاد در ولتاژ 5 ولت تحریک می‌شود. علت این کار پاک شدن سطح حسگر از آلودگی‌ها محتمل در اثر آزمایشات قبلی است. تعداد پله‌ها 5 پله از ولتاژ 1 تا 5 ولت در نظر گرفته شد (پله‌های V-I). پله I همواره تغییر از 5 ولت به 1 ولت است. دمای سطح حسگر با تغییر ولتاژ اعمالی به ریزگرمکن تغییر می‌کند. این دما از طریق یک ترموکوپل نوع S- بسیار نازک (با قطر 0.04 میلی‌متر) در تماس فیزیکی با سطح حسگر تعیین شد. این ترموکوپل از نوع استاندارد بوده دارای دقت $\pm 1.5^\circ C$ است. جهت جبران دمای نقطه سرد ترموکوپل از حسگر خطی ساخت شرکت نشنال سمیکانداکتر³ (مدل LM35) استفاده شد [24]. با احتساب دقت حسگر دمای مورد استفاده و همچنین دقت ولت‌سنج متصل به ترموکوپل، دقت کل سامانه اندازه‌گیری دما $\pm 2.5^\circ C$ خواهد شد. شکل 1(ب)، دماهای متناظری که در سطح حسگر ایجاد می‌شود را نشان می‌دهد. ملاحظه می‌شود که شکل موج اعمالی سبب تغییرات دمایی از حدود $110^\circ C$ تا $350^\circ C$ در سطح حساس حسگر می‌شود. در شکل 1، نقاط توپر، نقاط حاصل از آزمایش و منحنی‌ها، نتایج حاصل از برازش این نقاط در هر پله‌ی دمایی با منحنی‌های نمایی به صورت رابطه‌ی (1) است:

$$T = T_{SS} - T_0 \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \quad (1)$$

مقادیر این پارامترها برای برازش پنج پله‌ی ولتاژ از شکل موج گرمکن، به ترتیب در جدول 1 خلاصه شده‌اند.

ثبت پاسخ‌ها در 11 تراکم از 250 تا 2000 ppm^4 وزنی اتانول در محفظه‌ی 8 لیتری صورت گرفت. پس از اتمام هر آزمایش هوای داخل محفظه به سمت سامانه‌ی تخلیه هدایت می‌شود. این آزمایش‌ها برای یک گاز

¹ Substrate

² Plateau Duration (PD)

³ National Semiconductor

⁴ Part Per Million (ppm)

شناسایی شوند [29,28]. شکل 4، بلوک دیاگرام مدل حسگر ارائه شده را برای یک حسگر اکسید فلزی نشان می‌دهد. این مدل، پاسخ حسگر به یک گاز را شبیه‌سازی می‌کند [17]. سه ورودی مدل به شرح زیر است.

- غلظت گاز، $C_{gas}(t)$: این ورودی بیانگر تراکم گاز ورودی است. ولتاژ پله به عنوان تراکم گاز استفاده شده است. تراکم گاز معادل ولتاژ در نظر گرفته شده است.
- ولتاژ گرمکن $V_h(t)$: یک ولتاژ 5 ولت ثابت به مدت 180 ثانیه به همراه یک ولتاژ پلکانی با پنج پله با دامنه 1 تا 5 ولت با ارتفاع 1 ولت و دوام 10 ثانیه برای هر پله است.
- فشار اکسیژن $p(O_2)$: بر طبق معادله‌ی (2) رفتار حسگر در هوای تمیز، در واقع نتیجه تعامل اکسیژن با سطح حساس حسگر است. در واقع، معادله‌ی (2) دارای ثابت واکنشی است که قویا به فشار اکسیژن وابسته است. بنابراین می‌توان از روی پاسخ گذرای حسگر تحت مدولاسیون دمایی به هوای تمیز که در شکل 3 با نقطه چین نشان داده شده است، به نحوی که در بخش بعد تشریح می‌شود، رفتار حسگر در مقابل فشار اکسیژن را حاصل نمود.

- خروجی مدل به شرح زیر است:
- هدایت الکتریکی $G_s(t)$: خروجی حسگر در حضور گاز اتانول است. خصوصیات اصلی بلوک‌های داخلی مدل نشان داده شده در شکل 4 به شرح زیر است.

- ✓ مدل تحویل نمونه⁴: این مدل در واقع نحوه‌ی ایجاد تراکم گاز در سطح حسگر را نشان می‌دهد. به وضوح در عالم واقع هیچگاه تراکم گاز بصورت ناگهانی (پالسی) در سطح حسگر ایجاد نشده و پایدار نمی‌شود. لذا این مدل شامل یک فیلتر درجه دو است تا خروجی این بلوک یک تابع نمایی از گاز شده و به شرایط واقعی نزدیک باشد.
- ✓ مدل گرمکن⁵: به دلیل پیروی پارامترهای معادله‌ی (4) از دما، جهت عملکرد حسگر در دماهای مختلف نیاز به تعریف یک مدل برای گرمکن حسگر است. این مدل با استفاده از رابطه‌ی (1) مدل می‌شود.
- ✓ مدل جذب اکسیژن⁶: بر طبق توضیحاتی که پیشتر ارائه شد، از پاسخ ثبت شده‌ی حسگر در هوای تمیز برای این منظور استفاده می‌شود.
- ✓ مدل پاسخ پویا: این بلوک مطابق رابطه‌ی (7) با سه ورودی تراکم گاز، دمای خروجی از مدل گرمکن و جذب اکسیژن برای هدایت حسگر مدل می‌شود.

- ✓ مدل پاسخ پویای اصلاح شده: خروجی این بلوک حاصل ضرب خروجی مدل پاسخ پویا با خروجی مدل گرمکن است تا مطابق رابطه‌ی (9) عملکرد حسگر را در دماهای مختلف مدل کند.

4- شبیه‌سازی و نتایج

در این بخش مدل طراحی شده در محیط سیمولینک متلب ارائه شده است. همانطور که در بالا بیان شد تمامی بلوک‌ها با توجه به معادله‌های مربوط به خود در محیط متلب پیاده سازی شد. هر معادله در یک بلوک تابع⁷ نوشته شد. مدل جذب اکسیژن با استفاده از پاسخ واقعی حسگر به هوای پاک، مدل شد. با توجه به اینکه پاسخ حسگر در واقع هدایت الکتریکی حسگر است و با

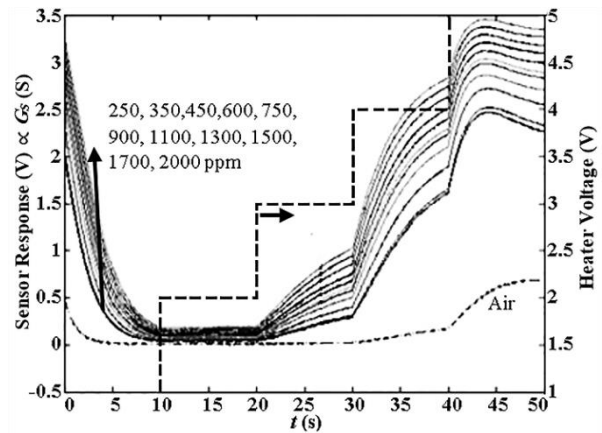


Fig. 3 Recorded transient response of a temperature modulated sensor to different concentrations of ethanol

شکل 3 پاسخ گذرای ثبت شده حسگر تحت مدولاسیون دمایی به تراکم‌های مختلف اتانول

علامت $1/m$ نیز به نوع هدایت نیمه‌رسانا بستگی دارد. برای نیمه‌رسانای نوع- p علامت $1/m$ مثبت و برای نیمه‌رسانای نوع- n علامت آن منفی است. پارامترهای K_q و r در رابطه (4) از دما پیروی می‌کنند. بنابراین، پاسخ حسگر به شدت به عملکرد دمایی حسگر بستگی دارد. با در نظر گرفتن اثر دما می‌توان پارامترهای فوق را بصورت روابط (5) و (6) بازنویسی کرد.

$$K_q = K_T \times \exp\left(-\frac{E_A}{kT}\right) \quad (5)$$

$$r = n kT \quad (6)$$

که در آن E_A ، K_T و n بر ترتیب ضریب پیش‌نمایی، انرژی فعال‌سازی¹ و پیش ضریب قانون توان برای اکسید k نیز ثابت بولتزمن است. با جایگذاری روابط (5) و (6) در رابطه (4)، رابطه (7) حاصل می‌شود.

$$G_s = K_T \times \exp\left(-\frac{E_A}{kT}\right) \times C^{n kT} \times p(O_2)^{\frac{1}{m}} \quad (7)$$

بر طبق معادله‌ی (5)، ضریب K_q از یک رابطه‌ی آرنیوسی پیروی می‌نماید. معمولاً در این معادلات، ضریب پیش‌نمایی K_T نیز خود تابعی توانی از دما محسوب می‌شود. در اینجا به منظور سادگی، رابطه‌ی K_T بصورت معادله‌ی (8) در نظر گرفته می‌شود:

$$K_T = K_{T0} \times T^\gamma \quad (8)$$

که در آن γ عددی ثابت در نظر گرفته می‌شود. با احتساب رابطه‌ی (8)، می‌توان پاسخ پویای حسگر را بصورت دقیق‌تر بصورت معادله‌ی (9) بازنویسی نمود:

$$G_s = K_{T0} \times T^\gamma \times \exp\left(-\frac{E_A}{kT}\right) \times C^{n kT} \times p(O_2)^{\frac{1}{m}} \quad (9)$$

در بسیاری از مراجع فرض می‌کنند که در رابطه‌ی آرنیوسی (5)، عبارت نمایی تعیین‌کننده‌ی تغییرات دمایی کل است و لذا از تغییرات دمایی ضریب پیش‌نمایی، رابطه‌ی (8)، صرف‌نظر می‌شود. در هنگام مدل‌سازی، بمنظور تمایز بین معادلات (7) و (9)، مدل خروجی حاصل از معادله‌ی (7) پاسخ پویای حسگر² و مدل خروجی حاصل از معادله‌ی (9) پاسخ پویای اصلاح شده‌ی حسگر³ نامیده می‌شود. همان‌گونه که مشاهده می‌شود، پاسخ پویای اصلاح شده‌ی حسگر بطور قابل توجهی متأثر از عملکرد دمایی آن است. اعمال دما بصورت دوره‌ای یا تناوبی در یک حسگر این امکان را فراهم می‌سازد تا طیف وسیعی از گازهای واکنش‌دهنده در الگوهای دمایی مختلف،

⁴ Sample Delivery Model

⁵ Heater Model

⁶ Oxygen Adsorption Model

⁷ Mat-Function

¹ Activation Energy

² Sensor's Dynamic Response

³ Corrected Sensor's Dynamic Response

مربعات خطا²، SSE، بین خروجی‌های واقعی و شبیه‌سازی شده در هر تراکم به عنوان تابع هزینه³ در نظر گرفته شد. بدین طریق پارامترهای این بلوک در هر تراکم محاسبه شد که مقادیر آن در جدول 2 آورده شده است. پاسخ‌های شبیه‌سازی توسط بلوک مدل ارائه شده، در شکل 6 قابل مشاهده است. همانگونه که ملاحظه می‌شود خروجی‌های حاصل از شبیه‌سازی تطابق مناسبی با نتایج آزمایش دارد. مقادیر نهایی SSE در هر تراکم نیز در ستون آخر جدول 2 آورده شده است. از روی مقادیر SSE ملاحظه می‌شود که پاسخ‌های محاسبه شده از روی مدل نزدیکی مناسبی با خروجی‌های ثبت شده دارند. همانگونه که از این ستون مشاهده می‌شود، مقادیر SSE بین 10 تا 50 حاصل شد که مقادیر اندکی محسوب می‌شوند. تغییرات SSE برحسب تراکم‌های مورد آزمایش در شکل 7 با دایره توخالی و خطوط پیوسته نمایش داده شدند. مقدار میانگین پارامترهای محاسبه شده نیز در جدول 2 در سطر آخر همین جدول محاسبه شده است. در این جدول برای m مقادیر منفی از -1.4 تا -3 حاصل شده است که با توجه به نوع n بودن حسگر مورد استفاده اولاً علامت آن صحیح است ثانیاً مقدار آن با آنچه در مقالات دیگر آمده مطابقت دارد [31]. مقدار انرژی فعال‌سازی، E_A و مقدار n نیز در مرجع [18]، گزارش شده است که با مقادیر گزارش شده در جدول 2 مطابقت دارد.

جدول 2 پارامترهای معادله (9)

Table 2 Parameters of eq. (9)

SSE	g	m	n (mol/kj)	E _A (kj/mol)	K _{T0}	پارامتر تراکم (×10 ⁻⁶)
25	5.69	-1.4	0.65	70	300	250
12.3	5.58	-1.4	0.66	70	300	350
16.62	5.54	-1.54	0.67	70	300	450
22.55	5.53	-1.67	0.69	70	300	600
25.49	5.44	-1.86	0.7	70	301	750
27.23	5.31	-2	0.7	69.51	315	900
30.28	5.16	-2.15	0.7	68.20	320	1100
33.62	5.04	-2.32	0.7	67.32	320	1300
39.78	4.94	-2.5	0.7	66.08	312	1500
43.78	4.84	-2.65	0.7	65	313	1700
46.53	4.74	-3	0.7	65	320	2000
29.38	5.26	-2.04	0.69	68.28	309	میانگین

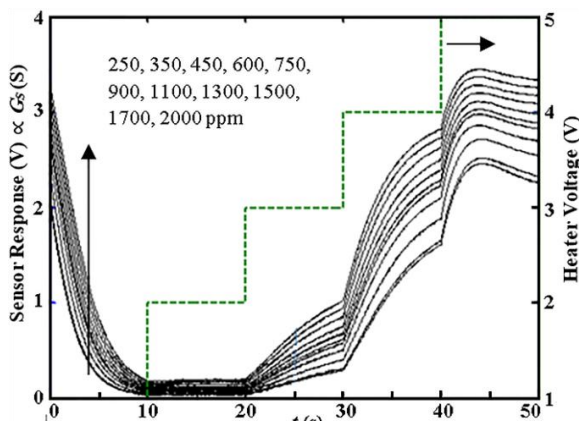


Fig. 6 Simulated transient response of a temperature modulated gas sensor to different concentrations of ethanol from output of Fig. 5

شکل 6 پاسخ گذرای شبیه‌سازی شده حسگر تحت مدولاسیون دمایی به تراکم‌های مختلف اتانول حاصل از خروجی شکل 5

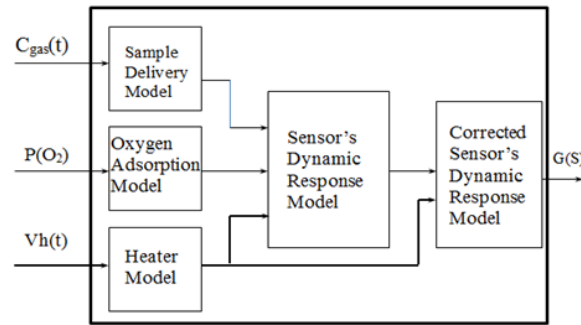


Fig. 4 block diagram of tin oxide gas sensor model

شکل 4 دیاگرام بلوکی مدل حسگر گاز اکسید قلع

جذب اکسیژن، هدایت حسگر کاهش می‌یابد. لذا هدایت الکتریکی حسگر با جذب اکسیژن نسبت معکوس دارد. لذا در اینجا معکوس پاسخ حسگر به هوای پاک به عنوان جذب اکسیژن در نظر گرفته شد. باید توجه داشت که رابطه‌ی هدایت حسگر با فشار اکسیژن یک رابطه‌ی معکوس ساده نیست [30] اما این رابطه در اینجا بمنظور راحتی، یک رابطه معکوس ساده در نظر گرفته می‌شود. ابتدا پاسخ حسگر به هوای پاک با استفاده از یک معادله نمایی دو جمله‌ای در تمام پله‌ها برازش شد. سپس حاصل برازش در یک بلوک تابع به عنوان جذب اکسیژن در سطح حسگر در نظر گرفته شد. مدل گرمکن با استفاده از رابطه‌ی (1) مدل شد. این رابطه نیز در یک بلوک تابع نوشته شد. ورودی این بلوک یک ولتاژ پلکانی است تا دمای سطح حسگر را همچون شکل 2 تولید نماید. ورودی مدل پاسخ پویا بیانگر مقدار تراکم گاز است (1 ولت معادل 1 ppm). مدل پاسخ پویا/ نیز با استفاده معادله‌ی (7) با سه ورودی در یک بلوک تابع نوشته شد. بمنظور طراحی بلوک مدل پاسخ پویای اصلاح شده، از مدل ارائه شده در بخش 3 و نتیجه نهایی آن، یعنی معادله (9) استفاده شد. این بلوک، مطابق رابطه‌ی (9) حاصل ضرب خروجی بلوک پاسخ پویا با خروجی بلوک گرمکن است. شکل 5 مدل پیاده شده در متلب را نشان می‌دهد.

پس از قرار دادن پارامترهای بلوک‌های شکل 5، خروجی حسگر در هر تراکم قابل شبیه‌سازی و ترسیم است. با تعریف شکل موج پلکانی با دوام 10 ثانیه برای مدل گرمکن حسگر و همچنین تعریف تراکم‌های مختلف گاز برای ورودی سیستم تحویل نمونه از 250 ppm تا 2000 ppm (مثلا 250 ppm معادل 250 ولت) پاسخ مدل شبیه‌سازی شد. پارامترهای معادله (9) در این بلوک‌ها به کمک جعبه ابزار بهینه‌سازی¹ و با معیار نزدیکی پاسخ‌های مدل و پاسخ‌های واقعی صورت گرفت. به منظور کمی‌سازی این نزدیکی، مجموع

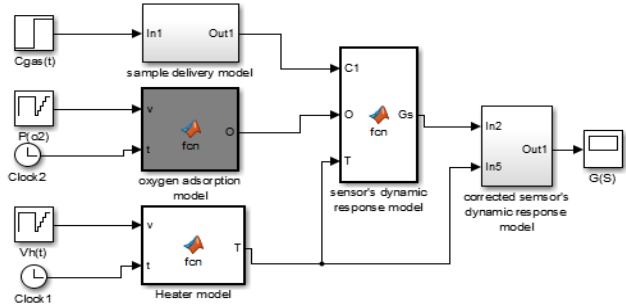


Fig. 5 Tin oxide gas sensor model in MATLAB Simulink

شکل 5 مدل حسگر گاز اکسید قلع در سیمولینک متلب

² Sum Square Error

³ Cost Function

¹ Optimization Toolbox

5- نتیجه گیری

در این تحقیق ابتدا پاسخ حسگر به بخارات اتانول ثبت شد. سپس یک مدلی از هدایت حسگرهای اکسید فلزی بر مبنای مدل هم دمایی فروندلیش و جذب اکسیژن ارائه و در متلب پیاده‌سازی شد. این مدل دارای یک ورودی برای گاز و یک ورودی برای ولتاژ گرم کن و یک ورودی برای جذب اکسیژن بود. در اینجا تراکم گاز هدف معادل با ولتاژ در نظر گرفته شد. همانند سامانه واقعی شکل موج پلکانی برای مدل ارائه شده تعریف شد. برای جذب اکسیژن در سطح حسگر، از پاسخ ثبت شده حسگر در هوای تمیز برای این منظور استفاده شد. پاسخ مدل رفتار حسگر را همانند پاسخ واقعی حسگر شبیه‌سازی می‌کند. آزمایش‌های صحنه‌سنجی، صحت مدل ارائه شده را نشان می‌دهند.

6- فهرست علائم

C	تراکم گاز
E_A	انرژی فعال‌سازی (kJ/mol)
G_s	هدایت حسگر (S)
k	ثابت بولتزمن (kJ/K)
K_q	ضریب حساسیت
K_T	ضریب پیش‌نمایی هدایت الکتریکی وابسته به دما
K_{T0}	ضریب پیش‌نمایی هدایت الکتریکی مستقل از دما
m	پارامتر وابسته به نقص بلوری بدنه حسگر
n	پیش‌ضریب قانون توان برای اکسید $(\text{kJ/mol})^{-1}$
$p(\text{O}_2)$	فشار اکسیژن
r	قانون توان برای اکسید
T	دما (K)
T_0	ضریب پیش‌نمای دمای حسگر
T_{SS}	دمای ثابت سطح حسگر
γ	رابطه‌ی توانی دما برای ضریب پیش‌نمایی هدایت الکتریکی
τ	ثابت زمانی (s)

7- مراجع

- [1] F. Hossein-Babaei, M. Keshmiri, M. Kakavand, T. Troczynski, A resistive gas sensor based on undoped p-type anatase, *Sensors and Actuators B*, Vol. 110, No. 1, pp. 28-35, 2005.
- [2] S. M. Hosseini-golgo, F. Hossein. Babaei, R. Afzalzadeh, Detection of flammable gases by a tin oxide sensor made by evaporation of the electronic beam, *Sharif Scientific Journal*, Vol. 21, pp. 29-38, 2007 (in persian فارسی)
- [3] F. Hossein-Babaei, M. Akbari-Saatlu, Growth of ZnO nanorods on the surface and edges of a multilayer graphene sheet, *Scripta Materialia*, Vol. 139, No. 1, pp. 77-82, 2017.
- [4] F. Hossein-Babaei, N. Alaei. Sheini, M. Jahangiri, The ohmic contact between zinc oxide and highly oriented pyrolytic graphite, *Materials Letters*, Vol. 192, No. 1, pp. 52-55, 2017.
- [5] F. Hossein-Babaei, N. Alaei. Sheini, Electronic conduction in Ti/Poly-TiO₂/Ti structures, *Scientific Reports*, Vol. 6, No. 29624, pp. 1-11, 2016.
- [6] H. Amirabadi, M. Shakeri, E. Hourichi, measurement of rough surface by capacitive sensor, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 8, No. 1, pp. 87-97, 2008 (in persian فارسی).
- [7] X. Yin, L. Zhang, F. Tian, D. Zhang, Temperature modulated gas sensing E-nose system for low-cost and fast detection, *IEEE Sensors Journal*, Vol. 16, No. 2, pp. 464-474, 2015.
- [8] M. Yoo, H. Ki Kim, S. Lim, Electromagnetic-based ethanol chemical sensor using metamaterial absorber, *Sensors and Actuators B*, Vol. 222, No. 1, pp. 173-180, 2016.
- [9] S. M. Hosseini-Golgo, H. Bozorgi, A. Saberkeri, Comparing success levels of different neural network structures in extracting discriminative information from the response patterns of a temperature modulation resistive gas sensors, *Measurement Science and Technology*, Vol. 26, No. 6, pp. 1-10, 2015.
- [10] Q. Deng, sh. Gao, T. Lei, Y. Ling, Sh. Zhang, Ch. Xie, Temperature and light modulation to enhance the selectivity of Pt-modified zinc oxide gas

برای صحنه‌سنجی، آزمایش‌های فوق برای دو تراکم مختلف 500ppm و 1700ppm در شرایط دیگری برای بخارات اتانول ثبت شد. در انتخاب تراکم‌های اتانول جهت صحنه‌سنجی، یک تراکم مشابه یکی از یازده تراکم استفاده شده در فرایند آموزش، یعنی 1700ppm، و دیگری در همان محدوده‌ی آموزشی ولی با مقداری متفاوت، یعنی 500ppm، انتخاب شد. پاسخ‌های ثبت شده در این دو تراکم در شکل 8 با نشانگرهای توخالی نمایش داده شده است. همانطور که دیده می‌شود پاسخ کاملاً مشابه با پاسخ‌های ثبت شده در بخش 2 است. سپس با استفاده از مدل ارائه شده پاسخ‌های صحنه‌سنجی شبیه‌سازی شد. نتایج شبیه‌سازی در همان شکل 8 و با منحنی‌های پیوسته نمایش داده شده است. با توجه به نتایج شبیه‌سازی دیده می‌شود که رفتار مدل در کلیه پله‌ها مشابه رفتار واقعی حسگر است. مقادیر SSE بین خروجی حاصل از مدل و خروجی‌های واقعی برای این دو تراکم ارزیابی نیز در شکل 7 و با مربع‌های توپر نشان داده شده‌اند.

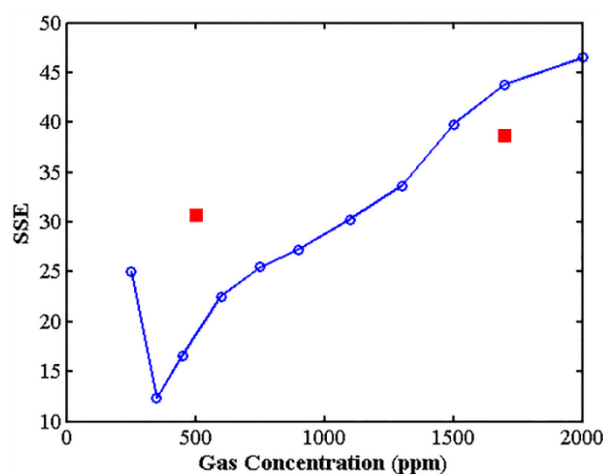


Fig. 7. Unfilled circles: SSE values between recorded and simulated responses of gas sensor in 11 training concentrations; Filled squares: the same values for 2 validation data

شکل 7 دایره توخالی: مقادیر مجموع مربعات خطا بین پاسخ‌های واقعی و شبیه‌سازی شده حسگر در یازده تراکم آموزشی؛ مربع‌های توپر: همان مقادیر برای دو داده‌ی صحنه‌سنجی

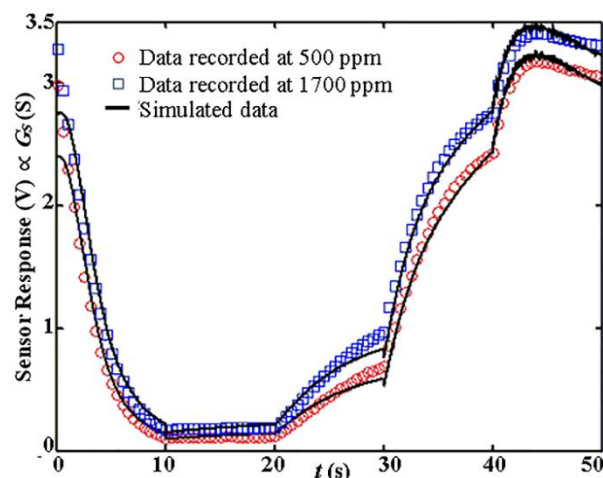


Fig. 8 Sensor's recorded responses (unfilled markers) and simulated responses (solid lines) for validation

شکل 8 پاسخ‌های ثبت شده (نشانگرهای توخالی) و شبیه‌سازی شده (منحنی‌های پیوسته) حسگر جهت صحنه‌سنجی

- 1138, 1997.
- [21] A. D'Amico, C. Di Natale, C. Falconi, G. Pennazza, M. Santonico, I. Lundstorm, Equivalent electric circuits for chemical sensors in the langmuir regime, *Sensors and Actuators B*, Vol. 238, No.1, pp. 214-220, 2017.
- [22] *FIS gas sensor SP3-AQ2-01 for air quality controls (VOCs)*, Accessed on 7 October 2017; http://www.fisinc.co.jp/en/common/pdf/SP3SAQ201E_P.pdf.
- [23] F. Hossein-Babaei, S. M. Hosseini-Golgo, Analyzing the responses of a thermally modulated gas sensor using a linear system identification technique for gas diagnosis, *IEEE Sensors Journal*, Vol. 8, No. 11, pp. 1837-1847, 2008.
- [24] *LM35 precision centigrade temperature sensors (Rev. H)*, Accessed on 25 November 2017; <http://www.ti.com/product/LM35/datasheet/abstract#SNIS1592470>.
- [25] M. Batzill, Surface science studies of gas sensing materials: SnO₂, *Sensors*, Vol. 6, No. 10, pp. 1345-1366, 2006.
- [26] P. K. Clifford, D. T. Tuma, Characteristics of semiconductor gas sensors I. Steady-state gas response, *Sensors and Actuators*, Vol. 3, No. 1, pp. 233-254, 1982-83.
- [27] Fadaei, M. Ghassemi, R. Mohammadi, Fuel concentration impedance simulation of a planar solid oxide fuel cell, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 13, No. 15, pp. 38-49, 2013. (in persian فارسی)
- [28] J. Samitier, J. M. Lopez-Villegas, S. Marco, L. Camara, A. Pardo, O. Ruiz, J. R. Morante, A new method to analyse signal transients in chemical sensors, *Sensors and Actuators B*, Vol. 8, No. 1-3, pp. 308-312, 1994.
- [29] S. Wlodek, K. Colbow, F. Consadori, Signal-shape analysis of a thermally cycled tin oxide gas sensor, *Sensors and Actuators B*, Vol. 3, No. 1, pp. 63-68, 1991.
- [30] S. R. Morrison, *Chemical sensors*, S. M. Sze (Ed.), *Semiconductor sensors*, pp. 392, New York: John Wiley & Sons, 1994.
- [31] J. F. Mcaleer, P. T. Moseley, J. O. W. Norris, D. E. Williams, Tin dioxide gas sensors Part I.-Aspects of the surface chemistry revealed by electrical conductance variations, *Journal of the Chemical Society*, Vol. 83, No. 4, pp. 1323-1346, 1987.
- sensors, *Sensors and Actuators B*, Vol. 247, No. 1, pp. 903-915, 2017.
- [11] S. M. Hosseini-Golgo, F. Hossein-Babaei, Assessing the diagnostic information in the response patterns of a temperature-modulated tin oxide gas sensor, *Measurement Science and Technology*, Vol. 22, No. 3, pp. 1-11, 2011.
- [12] F. Hossein-Babaei, A. Amini, A breakthrough in gas diagnosis with a temperature- modulated generic metal oxide gas sensor, *Sensors and Actuators B*, Vol. 166-167, No. 1, pp. 419-425, 2012.
- [13] A.Ortega, S. Marco, A. Perera, T. Sundic, A.Pardo , J. Samitier, An intelligent detector based on temperature modulation of a gas sensor with a digital signal processor, *Sensors and Actuators B*, Vol. 78, No. 1-3, pp. 32-39, 2001.
- [14] S. Al-Khalifa, S. Maldonado-Bascon, J. W. Gardner, Identification of CO and NO₂ using a thermally resistive microsensor and support vector machine, *IEE Proceedings-Science, Measurement and Technology*, Vol. 150, No. 1, pp. 11-14, 2003.
- [15] A. Fort, M. Muganaini, S. Rocchi, V. Vignoli, E. Comini, G. Faglia, A. Ponzoni, Metal-oxide nanowire sensors for CO detection: characterization and modeling, *Sensors and Actuators B*, Vol. 148, No. 1, pp. 283-291, 2010.
- [16] Y. Gonullu, K. Kelm, S. Mathur, B. Saruhan, Equivalent circuit models for determination of the relation between the sensing behavior and properties of undoped/Cr doped TiO₂ NTs, *Chemosensors*, Vol. 2, No. 1, pp. 69-84, 2014.
- [17] E. Llobet, X. Vilanova, J. Brezmes, D. Lopez, X. Correig, Electrical equivalent models of semiconductor gas sensors using PSpice, *Sensors and Actuators B*, Vol. 77, No. 1-2, pp. 275-280, 2001 .
- [18] E. Llobet, J. Rubio, X. Vilanova, J. Brezmes, X. Correig, J. W. Gardner, E. L. Hines, Electronic nose simulation tool centred on PSpice, *Sensors and Actuators B*, Vol. 76, No. 1-3, pp. 419-429, 2001.
- [19] J. W. Gardner, E. L. Hines, PSPICE model for resistive gas odour sensors, *IEE Proceeding, Circuit Devices System*, Vol. 146, No. 3, pp. 101-104, 1999.
- [20] E. Llobet, X. Vilanova, J. Brezmes, R. Alcubilla, J. Calderer, J. E. Sueiras, X. Correig, Conductance-transient analysis of thick-film tin oxide gas sensors under successive gas-injection steps, *IOP Science*, Vol. 8, No. 10, pp. 1133-