

کاربرد و شاخص‌های نانوکریستال‌ها

مصنف:

دکتر بیلا مهدویان

(عضو هیأت علمی دانشگاه آزاد اسلامی، واحد دورود)



۱۳۹۶

سرشناسه	: مهدویان، لیلا
عنوان و نام پدیدآور	: کاربرد و شاخص‌های نانوکریستال‌ها/ مصنف لیلا مهدویان.
مشخصات نشر	: بروجرد: دانشگاه آزاد اسلامی، واحد بروجرد، ۱۳۹۶.
مشخصات ظاهری	: ۳۲۲ ص.
شابک	: 978-964-10-4916-6: ۱۵۰۰۰۰ ریال
وضعیت فهرست نویسی	: فیپا
موضوع	: نانوبلورها
موضوع	: Nanocrystals
موضوع	: نانوبلورها-- کاربردهای صنعتی
موضوع	: Nanocrystals-- Industrial applications
شناسه افزوده	: دانشگاه آزاد اسلامی، واحد بروجرد
رده‌بندی کنگره	: ۱۳۹۶ م۹/ن۱۶/۹/۴۱۸/۴۱۸ TA
رده‌بندی دیوینی	: ۶۲۰/۵
شماره ثبت کتابخانه ملی	: ۴۸۹۹۵۵۳



دانشگاه آزاد اسلامی واحد بروجرد و دورود

کاربرد و شاخص‌های نانوکریستال‌ها

مصنف:

دکتر لیلا مهدویان

(عضو هیأت علمی دانشگاه آزاد اسلامی واحد بروجرد)

ناشر: دانشگاه آزاد اسلامی واحد بروجرد

مدیر مسؤول: دکتر علی آریاپور

ناظر چاپ: حسام یاریار

چاپ و صحافی: نویسنده

توبت چاپ: اول/ ۱۳۹۶

شمارگان: ۲۰۰۰

بها: ۱۵۰۰۰ تومان

شابک: ۹۷۸-۹۶۴-۱۰-۴۹۱۶-۶

حق چاپ برای ناشر محفوظ است

بروجرد - میدان نواب - خیابان یادگار امام - مجتمع دانشگاهی امام خمینی (ره)

تلفکس: ۰۶۶-۴۲۵۱۸۰۱۳

پیشگفتار

نانو بلور یک ذره کریستالی با حداقل یکی از ابعاد اندازه‌گیری کمتر از ۱۰۰۰ نانومتر (nm)، که در آن ۱ نانومتر به عنوان ۱ هزار میلیون متر (10^{-9} متر) تعریف شده است، می‌باشد. نانوبلورها یک طیف گسترده‌ای از مواد کاربردی ثابت شده و بالقوه هستند. آنها در تولید انواع فیلترهای در تصفیه آب، هوا، پالایش نفت خام به سوخت دیزل و ... استفاده می‌شوند. نانو بلورها همچنین می‌توانند بصورت لایه‌ای به بسترهای انعطاف‌پذیر برای تولید پنل‌های خورشیدی اعمال شوند. نانوبلورها تیتانیا به صورت معلق در مایع بر روی سطوح اعمال شده که می‌تواند بر روی دیوار یا سقف قرار گرفته و آن را به یک پنل خورشیدی تبدیل نماید. استفاده احتمالی آینده نانوبلورها عبارتند از: تولید هیدروژن، حذف آلاینده‌ها و سموم، تریپاری پزشکی، برجسب‌ها بیولوژیکی برای شناسایی ژن‌ها، تولید دارو، تجزیه و تحلیل پروتئین، نمایش صفحه تخت، نورپردازی، لیزر نوری و مادون قرمز و غیره.

بطور کلی ساختار کریستالی برگرفته از سلول‌های واحد تکراری هستند که دارای جایگاه درون‌دانه و مرزدانه برای استقرار اتم‌ها به شمار می‌رود. اتم‌های مستقر در درون دانه دارای نظم بیشتر می‌باشند، اما اتم‌های موجود در مرزدانه بی‌نظم‌تر. درصد بیشتری از اتم‌ها کریستال، را شامل می‌شود. بنابراین این اتم‌ها دارای جایگاه ناپایدار و نامتعادل هستند. در نانو کریستال‌ها به علت بی‌نظمی و فواصل اتمی متفاوت در مرزدانه‌ها، نفوذ ناخالصی‌ها از طریق این جایگاه صورت می‌گیرد. به این ترتیب تشکیل ترکیبات کریستال فلزی در دماهای بسیار کمتر به دلیل سرعت نفوذ عناصر در هم افزایش یافته

و امکان پذیر می شود. در مورد نانوکریستال های سرامیکی، نانو ساختار "نفوذ بین فازی" خیلی مهم است، چرا که در بهبود خواص شکل پذیری سرامیک ها، اثر چشم گیری دارد. تولید فلزات و آلیاژهای با اندازه دانه در حد ۵۰ تا ۱۰۰ نانومتر باعث دستیابی به مواد با استحکام فوق العاده زیاد خواهد شد، در واقع کوچک کردن دانه ها در مواد، ابزار قدرتمندی برای تولید میکروساختارهایی با خواص مکانیکی عالی شناخته شده اند که به دلیل بالا بودن سختی و مقاومت در برابر سایش، نوک مته های حفاری چاه نفت از نیکل نانو ساختار پوشش داده شده است. با کاهش اندازه دانه ها می توان تخلخل و حفرات را کاهش داد و بدین ترتیب مواد نسبت به ترک خوردگی بین دانه ای و ترک های خزشی، مقاومت های بالایی از خود نشان می دهند، از این ویژگی می توان در باتری های اسیدی و سایر تجهیزاتی که نسبت به ترک خوردگی حساس هستند، استفاده نمود. بنابراین مطالب فوق، نیاز به مراجع معتبر و جدید، زوم تألیف کتابی که بتواند اصول تشکیل بلورها در مقیاس نانو، بیان کاربرد آنها در صنعت ایجاد تجهیزات نوین، بازیافت مواد و کاهش آلاینده های محیط زیست را بیان کند. مؤلف را ر آن داشت که این مجموعه را بر اساس تحقیقات و پژوهش های خود در این زمینه برای صنعت گران، دانشجویان و محققین علوم مختلف از جمله: سنتز و شناسایی مواد شیمیایی، متالژی مواد، ساخت و تولید تجهیزات و غیره تهیه و در اختیار علاقه مندان قرار دهد.

کتاب حاضر شامل شش فصل می باشد. خواننده در فصل اول با اصول پایه ای کریستال و بلورشناسی در مقیاس نانو آشنا می شود. سعی شده است اصطلاحات، پارامترها، و جزئیات بلورها بطور مفصل شرح داده شود تا خواننده با جنبه های مختلف این شاخه از علم آشنا شود. ضمن پی بردن به جزئیات این رشته، آن را یکی از جذاب ترین رشته های علمی- پژوهشی قرن اخیر دریابد. در فصل دوم نرم افزار شبیه سازی GussView بررسی و در فصل سوم روش های محاسباتی بکار رفته برای بررسی ساختار و سایر خواص

کریستال‌ها را بیان می‌نماید. فصل چهارم کتاب به جزئیات ساختاری، ویژگی‌ها، روش تولید و آلیاژهای نانوکریستال‌های اکسید قلع می‌پردازد. فصول پنجم و ششم به ترتیب جزئیات نانوکریستال‌های اکسیدتیتانیم و نیتريدبور را بررسی و بیان می‌کند.

امید است این اثر به ارتقا هرچه بیشتر سطح علمی و صنعتی کشور کمک نماید و مورد علاقه دانشجویان، مهندسان و استادان ارجمند واقع گردد. از آنجا که هر اثر علمی عاری از خطا و اشتباه نمی‌باشد، از تمامی خوانندگان کتاب تقاضا می‌شود چنانچه اشکال و یا خطایی در متن و محتویات کتاب مشاهده گردید، از بیان و انتقال آن دریغ ننمایند تا به حمدالهی در چاپ‌های بعدی کتاب نواقص احتمالی آن برطرف گردد.

در پایان از تمامی ارادتی که به نحوی من را در تهیه و تنظیم این اثر یاری رسانیده‌اند، تشکر می‌نمایم. قدردانی صمیمانه‌ی ویژه خود را از خانواده عزیزم به دلیل محبت بی‌دریغ‌شان در طی آماده‌سازی این کتاب ابراز می‌دارم.

ضمناً از همکاری صمیمانه رؤسای مراکز دانشگاه آزاد اسلامی واحد دورود و بروجرد آقایان دکتر منصور ترکیان تبار و دکتر داروش جاوید و همچنین معاونت محترم پژوهش و فناوری واحد دورود و بروجرد آقایان دکتر حسن حیدری و دکتر محمدرضا معظمی گودرزی کمال تشکر و قدردانی را دارم.

لیلا مهدویان

فهرست مطالب

بخش اول: خواص فیزیکی و ساختاری نانوکریستال‌ها

- ۱-۱. بلور و شبکه فضایی ۱
- ۱-۲. عناصر سطوح تقارنی ۲
- ۱-۳. مشخصات آن سطوح مختلف یک بلور ۴
- ۱-۴. سیستم‌های بلوریناسی ۵
- ۱-۵. اندیس میلر ۱۰
- ۱-۶. قانون مناطق ۱۸
- ۱-۶-۱. قواعد منطقه‌ای ۲۰

بخش دوم: آموزش نرم‌افزار GaussView

بخش سوم: شیمی محاسباتی

- ۳-۱. پایه کامپیوتری ۳۳
- ۳-۲. روش‌های تجربی میدان نیرو ۳۵
- ۳-۳. روش‌های آغازین ۳۶
- ۳-۴. اوربیتال‌های پیوندی طبیعی ۳۸
- ۳-۵. ساختار برنامه NBO ۴۱
- ۳-۵-۱. مجموعه‌های پایه ۴۴
- ۳-۵-۲. مجموعه پایه نفوذی (پخشی) ۴۴

- ۳-۵-۳. مجموعه پایه قطبشی ۴۵
- ۳-۵-۴. سری پایه‌های ظرفیتی شکافته ۴۶
- ۳-۵-۴. مجموعه پایه همبستگی سازگار ۴۶
- ۳-۵-۵. توابع اسلیتری ۴۸
- ۳-۵-۶. توابع محاسباتی Minnesota ۴۹
- ۳-۶. روش محاسباتی QSAR ۵۱
- ۳-۶-۱. نرم‌افزار Dragon ۵۳
- ۳-۶-۲. کاربردهای QSAR ۵۵
- ۳-۶-۳. توابع و روش‌های QSAR ۵۵
- بخش چهارم ۵۷
- نانوکریستال‌های دی‌اکسید قلع ۵۷
- ۴-۱. منابع و کانی‌های قلع ۶۰
- ۴-۲. نانو دی‌اکسید قلع ۷۷
- ۴-۳. جذب و واکنش‌های مولکول‌های وی ۱۰۱
- ۴-۳-۱. جذب مولکول اکسیژن O_2 ۱۰۱
- ۴-۳-۲. جذب متانول (CH_3OH) ۱۰۵
- ۴-۴. نانوکریستال‌های $SnO_2(110)$ و $SnO_2(100)$ ۱۱۲
- ۴-۴-۱. سطوح استوکیومتری (1×1) و کاهش یافته‌ی سطح $SnO_2(110)$ ۱۱۳
- ۴-۴-۲. سطوح استوکیومتری (1×1) و کاهش یافته‌ی سطح $SnO_2(100)$ ۱۱۹
- ۴-۵. برهم‌کنش‌های شیمیایی مولکول جذبشده ۱۲۳
- ۴-۵-۱. تشکیل استالدئید ۱۲۴

- ۴-۵-۲. تشکیل اتیلاستات (استر) ۱۲۶
- ۴-۵-۳. تشکیل مخلوط منوکسید کربن و متان بر سطح دی‌کسیدقلع ۱۲۸
- ۴-۵-۴. برهم‌کنش‌های شیمیایی سطح SnO_2 در حضور اکسیژن هوا..... ۱۳۰
- ۴-۵-۵. تشکیل استالدئید در حضور اکسیژن..... ۱۳۳
- ۴-۵-۶. تأثیر دما ساختار بلوری نانوکریستال SnO_2 ۱۴۰
- ۴-۵-۷. تأثیرات غلظت (تعداد مولکول‌های اطراف سطح) ۱۴۱
- ۴-۵-۸. تأثیرات فاصله‌ای مولکول‌ها از سطح ۱۴۳
- ۴-۶. برهم‌کنش‌های شیمیایی سنسورهای گازی..... ۱۴۵
- ۴-۶-۱. بررسی هم‌کنش شیمیایی مخلوط اتانول و اکسیژن با $\text{SnO}_2(100)$ ۱۵۳

بخش پنجم: نانوکریستال‌های دی‌اکسیدتیتانیوم

- ۵-۱. خواص دی‌اکسیدتیتانیوم TiO_2 ۱۶۴
- ۵-۲. دی‌اکسیدتیتانیوم به عنوان نانوفتوکاتالیست ۱۶۵
- ۵-۲-۱. غیر سمی بودن ۱۶۶
- ۵-۲-۲. درجه سختی ۱۶۷
- ۵-۳. روش‌های سنتز نانوذرات دی‌اکسیدتیتانیوم ۱۶۷
- ۵-۳-۱. روش سل-ژل ۱۶۸
- ۵-۳-۲. روش هیدروترمال ۱۶۹
- ۵-۳-۳. روش مکانو شیمیایی ۱۷۱
- ۵-۳-۴. روش پلاسمای حرارتی با فرکانس رادیویی ۱۷۱
- ۵-۳-۵. روش چگالش از بخار شیمیایی (CVC) ۱۷۲

- ۱۷۳ ۵-۳-۶. روش میکرو اختلاط
- ۱۷۴ ۵-۴. خاصیت فتوکاتالیستی TiO_2
- ۱۷۸ ۵-۵. رفتار حرارتی TiO_2
- ۱۷۹ ۵-۶. نانو ذرات TiO_2
- ۱۸۳ ۵-۶-۱. پتانسیل زتای نانوذرات TiO_2
- ۱۸۵ ۵-۷. کاربردهای ویژه نانوذرات TiO_2
- ۱۸۵ ۵-۷-۱. اثر خودتمیزشوندگی
- ۱۸۸ ۵-۱-۲. امنیت ضد میکروبی TiO_2
- ۱۸۹ ۵-۷-۳. سلف نارویی، پزشکی، آرایشی و بهداشتی نانو ذرات TiO_2
- ۱۹۲ ۵-۷-۴. تصفیه آب، هماء خاک با استفاده از نانوذرات TiO_2
- ۱۹۸ ۵-۸. حذف آلاینده‌ها توسط TiO_2
- ۲۰۱ ۵-۸-۱. مبدل‌های کاتالیستی نانوذرات TiO_2
- ۲۰۷ ۵-۸-۲. حذف بوتادین و بنزوپیران توسط مبدل نانوکاتالیستی TiO_2
- بخش ششم: نانوکریستال‌های نیتريدبور
- ۲۳۳ ۶-۱. نیتريدبور هگزائگونال
- ۲۳۴ ۶-۲. نانوتیوب‌های نیتريدبور
- ۲۳۷ ۶-۲-۱. ساختارهای نانوتیوب‌های نیتريدبور
- ۲۴۵ ۶-۲-۲. خواص نانوتیوب نیتريدبور
- ۲۴۷ ۶-۲-۳. معایب نانوتیوب‌های نیتريدبور
- ۲۴۸ ۶-۲-۴. روش‌های سنتز نانوتیوب‌های نیتريدبور
- ۲۶۳ ۶-۲-۵. کاربردهای نانوتیوب‌های نیتريدبور

- ۶-۲-۶. طراحی نانوسنسور BNNT ۲۹۰
- ۶-۳. نانوقفس‌های نیتريدبور ۲۹۲
- ۶-۳-۱. کاربردهای نانوقفس نیتريدبور ۳۰۰
- منابع و مواخذ ۳۰۳

www.ketab.ir