

پدیده‌های سطحی در مقیاس نانو

دکتر محسن عباسپور

دانشیار دانشگاه حکیم سبزواری

دکتر حامد اکبرزاده

دانشیار دانشگاه حکیم سبزواری

www.ketab.ir

انتشارات

آهنگ قلم

تابستان ۱۳۹۹

پدیده های سطحی در مقیاس نانو

دکتر محسن عباسپور
دانشیار دانشگاه حکیم سبزواری
دکتر حامد اکبرزاده
دانشیار دانشگاه حکیم سبزواری

کانون کرافت آهنگ قلم
ملیحه باقری باقری
رحیمی نژاد
اول / ۱۳۹۹
۵۰۰ / وزیری
۹۷۸-۶۰۰-۲۲۵۱-۵۷-۲
۳۰۰۰ تومان

طرح جلد
ویراستاری
امور چاپ
نوبت چاپ
شمارگان
شابک
قیمت



آهنگ قلم با همکاری دانشگاه حکیم سبزواری
مشهد/ کدپستی ۹۱۳۵۹۶۳۷۱۹
۰۵۱۳۷۶۲۶۳۰۹ - ۰۹۱۵۲۹۱۹۰۶
info@ahangghalam.ir
www.ahangghalam.ir

ناشر
نشانی ناشر
تلفن
پست الکترونیکی
سایت

به استناد قوانین جهانی و ملی مالکیت فکری
تمامی حقوق این اثر محفوظ است.

عباسپور، محسن، ۱۳۵۶ -	سرشناسه
پدیده‌های سطحی در مقیاس نانو/محسن عباسپور، حامد اکبرزاده؛ ویراستاری ملیحه باقری افسوسی.	عنوان و نام پدیدآور
مشهد: آهنگ قلم؛ سبزوار: دانشگاه حکیم سبزواری، ۱۳۹۹.	مشخصات نشر
۴۶ ص.؛ مصور، جدول.	مشخصات ظاهری
۹۷۸-۶-۲۳۵۱۵۷-۲	شابک
فیبا	وضعیت فهرست نویسی
کتابنامه.	یادداشت
نانو لوله‌های کربنی	موضوع
Carbon nanotubes	موضوع
نانوذرات	موضوع
Nanoparticles	موضوع
نانو لوله‌های کربنی -- خواص مکانیکی	موضوع
Carbon nanotubes -- Mechanical properties	موضوع
مواد نانوساختار -- خواص مکانیکی	موضوع
-- Mechanical properties Nanostructured materials	موضوع
اکبرزاده، حامد، ۱۳۶۲ -	شناسه افزوده
دانشگاه حکیم سبزواری	شناسه افزوده
۴۱۸ TA/ ۹	رده بندی کنگره
۶۲۰/۵	رده بندی دیویی
۶۱۸۳۹۵۰	شماره کتابشناسی ملی

فهرست مطالب

پیشگفتار	۷
----------------	---

فصل اول

مقدمه ای درباره نانوخوشه‌های فلزی و نانولوله‌های کربنی	۹
۱-۱ نانوخوشه‌های فلزی	۱۱
۱-۲ نانولوله کربنی	۱۳
مراجع	۱۵

فصل دوم

تابع توزیع شعاعی	۱۷
۱-۲ تئوری تابع توزیع شعاعی	۱۹
۲-۲ توابع توزیع شعاعی پیشنهاد شده برای سیستم‌های توده ای	۲۱
۱-۲-۲ تابع پیشنهادی مرسلی و همکارانش	۲۱
۲-۲-۲ تابع پیشنهادی عباسپور و همکارانش	۲۲
۳-۲ توابع توزیع شعاعی پیشنهاد شده برای سیستم‌های نانو	۲۲
۱-۳-۲ تابع پیشنهادی عباسپور و همکارانش	۲۲
مراجع	۲۵

فصل سوم

فرآیند گرمایش و سرمایش نانوخوشه‌های فلزی روی سطوح مختلف	۲۷
۱-۲ فرآیند گرمایش و سرمایش نانوخوشه‌های فلزی روی نانولوله کربنی	۲۹
۱-۳-۱ شبیه سازی گرمایش و سرمایش نانوخوشه‌های نقره روی نانولوله کربنی	۲۹
۱-۳-۲ شبیه سازی گرمایش و سرمایش نانوالیای طلا-نقره روی نانولوله کربنی	۳۳
۱-۳-۳ شبیه سازی تاثیر کابریته و نوع سطح نگهدارنده روی خواص نانوالیای طلا-پالادیوم	۴۱
۲-۳ فرآیند گرمایش و سرمایش نانوخوشه‌های فلزی درون نانولوله کربنی	۴۷
۲-۳-۱ شبیه سازی خواص گرمایی نانوخوشه‌های مس درون نانولوله کربنی	۴۷
۲-۳-۲ شبیه سازی تاثیر نوع بستر نگهدارنده روی خواص گرمایی نانوالیایهای محبوس شده	۶۰
مراجع	۶۶

فصل چهارم

فرآیند گرمایش و سرمایش نانوالیایهای سه فلزی	۶۷
مقدمه	۶۹
۱-۴ شبیه سازی خواص مختلف نانوسیستم سه ذره ای	۶۹
۱-۴-۱ خواص ترمودینامیکی	۶۹

۱۰۴-۲	خواص ساختاری	۷۲
۱۰۴-۳	خواص دینامیکی	۸۲
۱۰۴-۲	شبیه سازی خواص مختلف نانوسیستم سه تایی $(Ag_{0.5}Au_{0.5}Pt_2)_{N=1415,20}$	۸۳
۱۰۴-۲-۲	پارامتر نظم پیوندی (Q_6)	۸۸
۹۰	مراجع	

فصل پنجم

۹۱	فرآیند جذب گاز روی نانوخوشه‌های فلزی روی سطوح مختلف	
۵	۱- شبیه سازی جذب گاز CO توسط نانوخوشه‌های نقره روی نانولوله کربنی	۹۳
۵-۱-۱	خواص ترمودینامیکی جذب	۹۳
۵-۱-۲	خواص ساختاری	۹۷
۵-۱-۳	خواص دینامیکی	۹۷
۵-۲	۲- شبیه سازی جذب گاز CO توسط نانوالیازهای طلا-نقره روی نانولوله کربنی	۱۰۱
۵-۲-۱	اثر اندازه نانوالیاز	۱۰۱
۵-۲-۲	اثر کسر مولی نانوالیاز	۱۰۴
۵-۲-۳	اثر قطر نانولوله	۱۰۶
۵-۲-۴	اثر کاپرالیته نانولوله	۱۰۸
۵-۲-۵	اثر سطح نگهدارنده	۱۰۹
۵-۳	۳- شبیه سازی جذب پروین توسط نانوالیازهای $Au-Pd$ روی مجموعه نانولوله کربنی	۱۱۱
۵-۳-۱	اثر اندازه نانوالیاز	۱۱۱
۵-۳-۲	اثر قطر مجموعه نانولوله کربنی	۱۱۴
۵-۳-۳	اثر کاپرالیته مجموعه نانولوله کربنی	۱۱۸
۵-۳-۴	اثر کسر مولی	۱۲۱
۵-۳-۵	اثر نایر نوع سطح نگهدارنده	۱۲۵
۱۲۹	مراجع	

فصل ششم

۱۳۱	جداسازی گازها توسط فرآیند جذب در نانولوله	
۶-۱	مقدمه	۱۳۳
۶-۲	۲- شبیه سازی جداسازی مخلوط CO_2/CH_4 توسط مجموعه نانولوله‌های مختلف	۱۳۳
۶-۲-۱	روش انجام شبیه سازی	۱۳۳
۶-۲-۲	پارامترهای جداسازی	۱۳۴
۱۴۶	مراجع	

پیشگفتار

امروزه نانوخوشه‌های فلزی به دلیل خواص کاتالیزوری، الکتریکی و نوری ویژه‌ای که دارند، نقش مهمی در پیشرفت‌های تئوری و تجربی اخیر ایفا کرده‌اند. به ویژه، علاقه زیاد به نانوخوشه‌های فلزی به این دلیل است که این نانوذرات نسبت اتم‌های سطحی بیشتری نسبت به فلز توده‌ای دارند و خواص و ساختار آن‌ها به اندازه وابسته است. مشخص شده است که خواص کاتالیزوری نانوخوشه‌های فلزی در اثر قرار گرفتن روی سطوحی در مقیاس نانو مانند گرافن و نانولوله‌های کربنی بهبود قابل ملاحظه‌ای می‌یابد که امروزه این مورد یکی از زمینه‌های مورد علاقه دانشمندان علوم نانو قرار گرفته است. خود نانولوله‌های کربنی هم امروزه کاربردهای فراوانی از جمله در جداسازی گازها و خالص سازی آب آشامیدنی دارند.

کتاب حاضر تصنیفی بر اساس نتایج مطالعات، تحقیقات و مقالاتی است که در گروه شیمی فیزیک دانشگاه حکیم سبزواری در سال‌های اخیر انجام شده و در مجلات معتبر علمی به چاپ رسیده است. این تحقیقات بیشتر روی خواص ترمودینامیکی، ساختاری و دینامیکی نانوخوشه‌های فلزی قرار گرفته روی سطح نانولوله‌های کربنی (یا درون آنها) در دماهای مختلف می‌باشد. همچنین تحقیقاتی هم در مورد جذب گاز روی سطوح نانوخوشه‌های فلزی که روی نانولوله‌های کربنی قرار گرفته اند انجام شده است. از خود نانولوله‌های کربنی هم به عنوان سطوحی برای جداسازی گازهای مختلف مورد مطالعه قرار گرفته‌اند.

این کتاب می‌تواند مورد استفاده کلیه علاقه‌مندان به شیمی و فیزیک سطح مخصوصاً در مقیاس نانو قرار گیرد. به ویژه، موارد بررسی شده در این کتاب برای دانشجویان مقاطع تحصیلات تکمیلی شیمی، فیزیک و مهندسی مفید خواهد بود. در انتها از همه دانش‌پژوهان تقاضا می‌کنیم که نظرات ارزشمند خود را در مورد این کتاب به آدرس mohsenabbaspour@yahoo.com ایمیل نمایند.

با تشکر

دکتر محسن عباسپور - دانشیار دانشگاه حکیم سبزواری

دکتر حامد اکبرزاده - دانشیار دانشگاه حکیم سبزواری