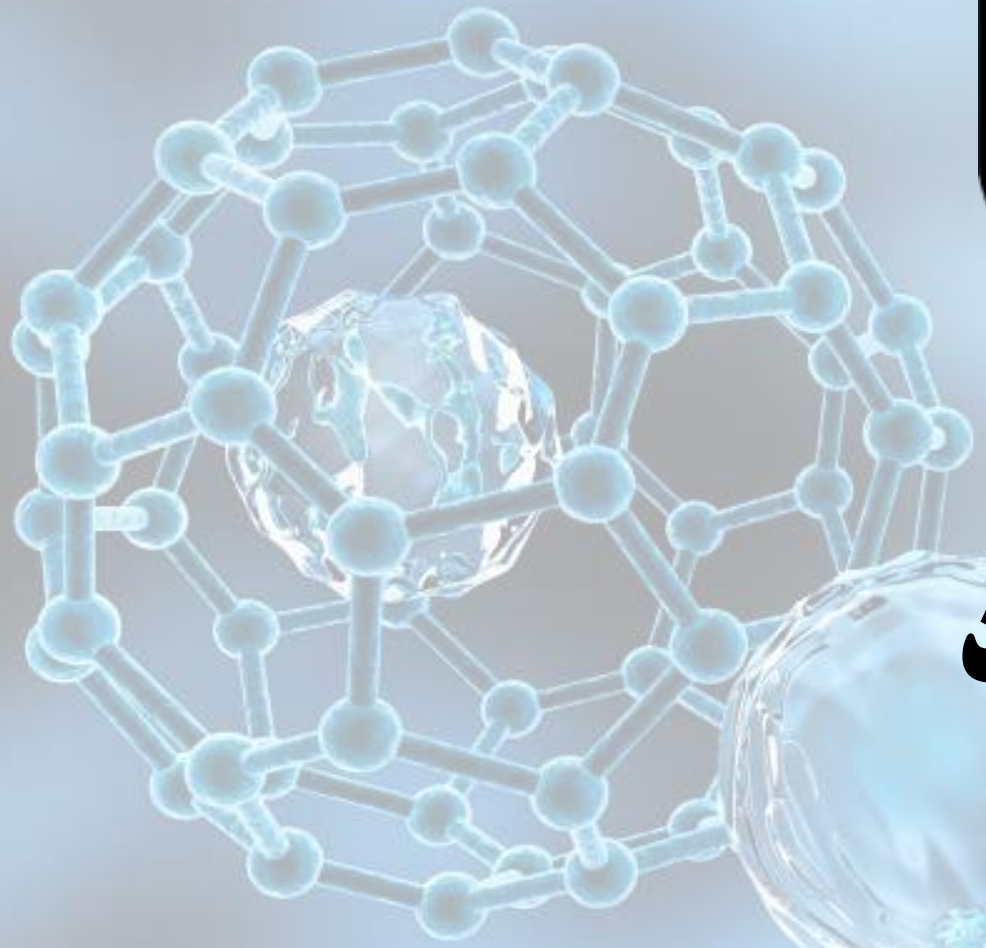


دانشگاه سمنان

نانو مواد

حسن کوهستانی

بارم نمره:

- تمرین کلاسی: ۲۵٪
- میانترم: ۲×۲۵٪
- امتحان پایانترم: ۲۵٪

دقت کنید

مقدمه

نانو nano:

- کلمه یونانی dwarf به معنی شخص کوتوله
- پیشوند: یک میلیاردم

- موادی که اندازه آنها حداقل در یک بعد 1-100nm باشد: مواد نانو
- در مقیاس نانو، ویژگی جدید ایجاد می شود وخواص مواد در ابعاد معمولی تغییر می کند.

- مواد نانو و یا ساختارهای نانویی طبیعی: پروتئین، ویروس، سلول و ...

The Scale of Things – Nanometers and More

Things Natural

Dust mite
200 μm

Ant
~ 5 mm

Human hair
~ 60-120 μm wide

Fly ash
~ 10-20 μm

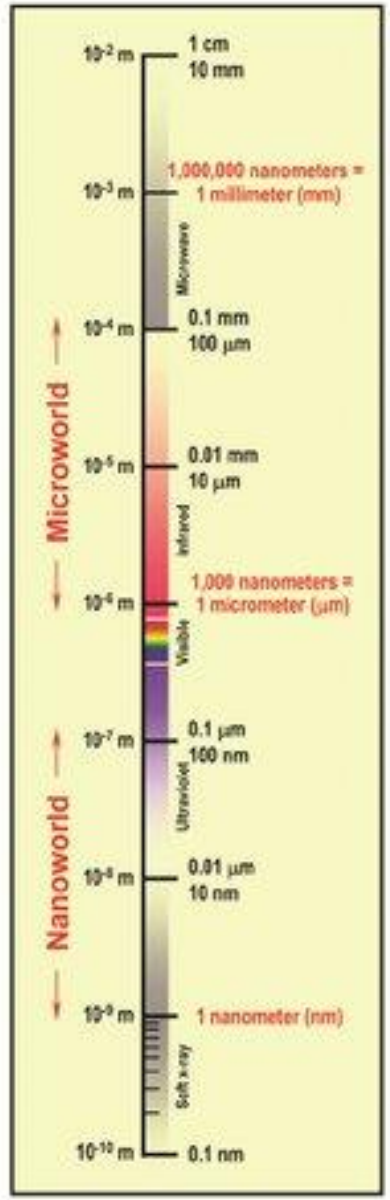
Red blood cells
(~7-8 μm)

~10 nm diameter

ATP synthase

DNA
~2-1/2 nm diameter

Atoms of silicon
spacing 0.078 nm



Things Manmade

Head of a pin
1-2 mm

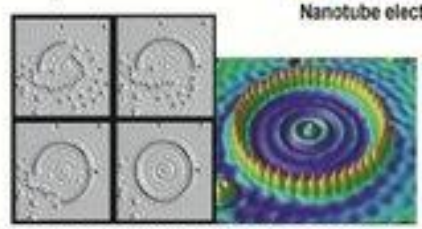
MicroElectroMechanical
(MEMS) devices
10 -100 μm wide

Pollen grain
Red blood cells

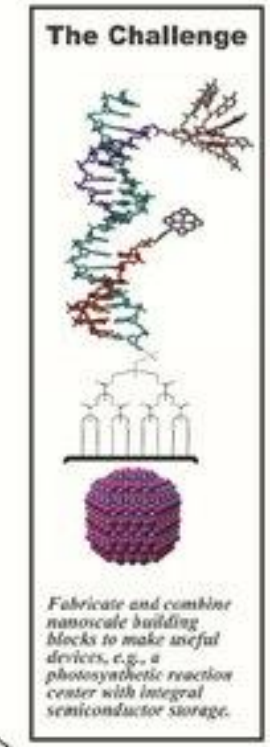
Zone plate x-ray "lens"
Outer ring spacing ~35 nm

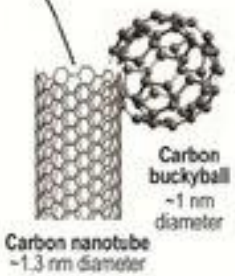
Self-assembled,
Nature-inspired structure
Many 10s of nm

Nanotube electrode

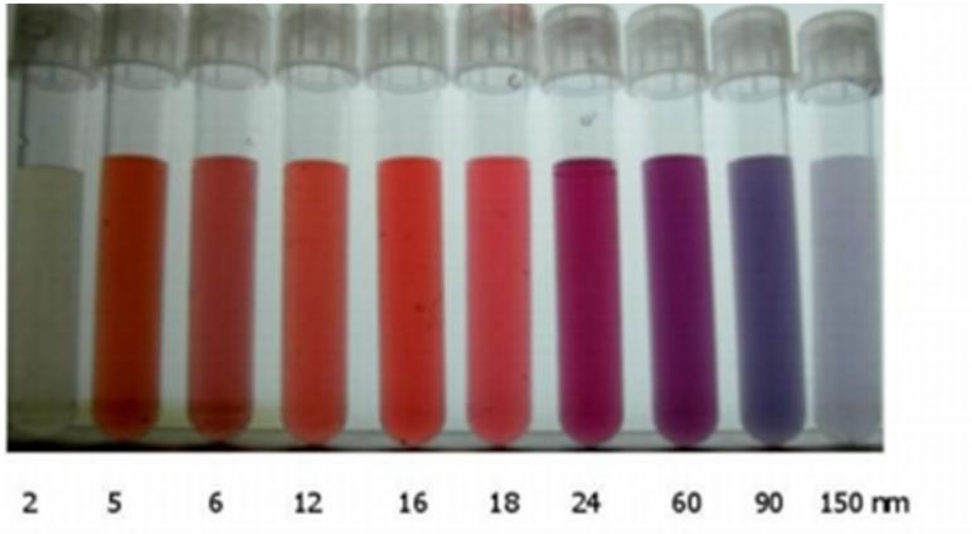


Quantum corral of 48 iron atoms on copper surface
positioned one at a time with an STM tip
Corral diameter 14 nm





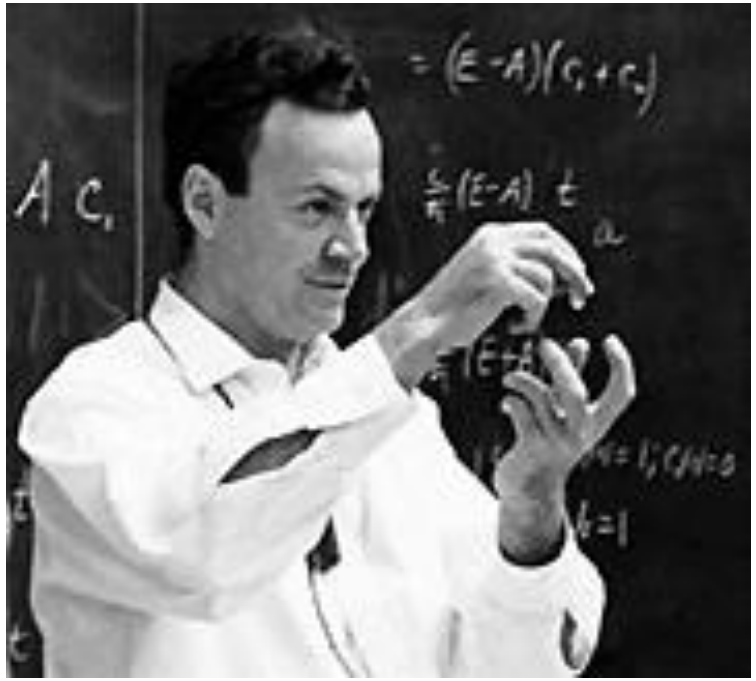
Different Sizes of Collodial Gold Particles



- نقطه ذوب
- خواص مغناطیسی
- رنگ
- خواص دارویی

- **تعریف**: نانومواد شامل آن دسته از موادی که با کاهش اندازه ذره خواص جدیدی از ماده بوجود آید یا اینکه ارتقا خواص مشاهده شود بگونه ای که در ماده بالک (bulk) این خواص وجود ندارد.

تاریخچه:



نقطه شروع و توسعه اولیه فناوری نانو بطور دقیق معلوم نیست

۱۹۶۰: Richard Feynman دانشمند کوانتوم و دارنده جایزه نوبل ملقب به پدر نانوفناوری، در همایش جامعه فیزیک آمریکا:

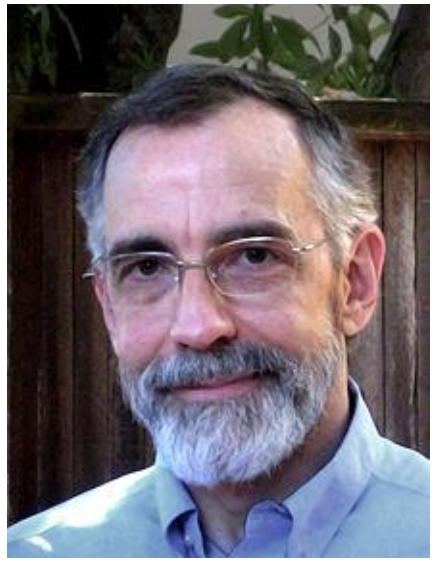
"There's Plenty of Room at the Bottom"

- فضای زیادی در پایین وجود دارد
- اصول علم فیزیک چیزی جز امکان ساختن اتم به اتم اشیا نیست.
- می توان اتمهای مجزا را دستکاری کرد و مواد و ساختارهای کوچکی را تولید نمود که خواص متفاوتی دارند

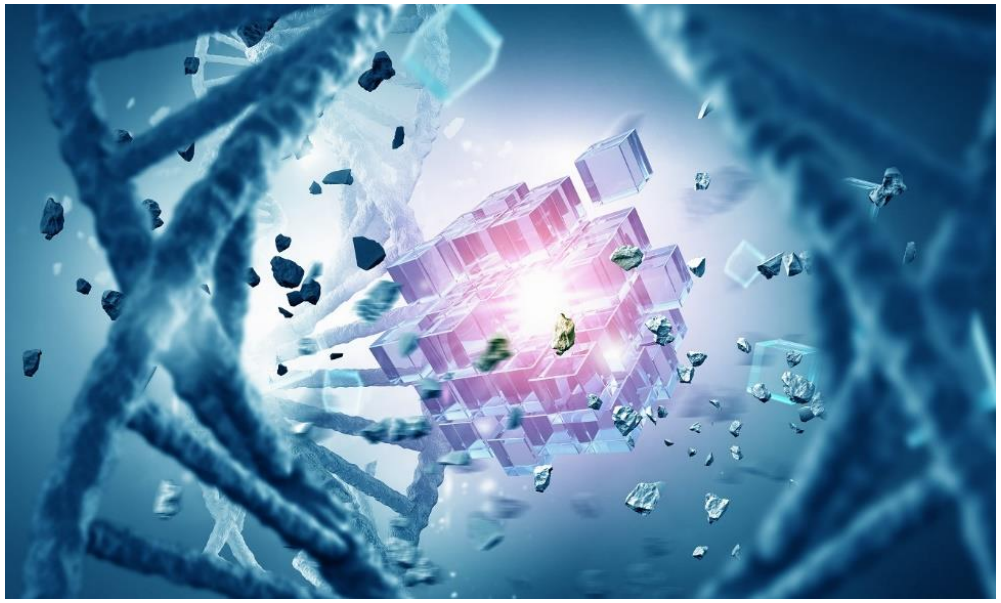
- ۱۹۷۴: نوریو تارینگوچی (Norio Taniguchi) استاد علوم دانشگاه توکیو، نخستین کاربرد واژه نانوتکنولوژی

از این لغت برای بیان میزان دقت لازم در ساخت مواد در مقیاس نانو استفاده کرده است.

- Marvin Minsky پدر هوش مصنوعی



- ۱۹۹۱: K. Eric Drexler، اولین فردی که از دانشگاه MIT مدرک دکترا نانوتکنولوژی دریافت نمود



نانوفناوری:

- علم مطالعه اصول اولیه ملکولها و ساختارهای با ابعاد ۱-۱۰۰ نانومتر
- کاربرد این ساختارها در دستگاههای با اندازه نانومتری

- نانوفناوری، توانمندی تولید مواد، ابزارها و سیستمهای جدیدی است که با کنترل کردن ملکولها و اتمها خواص جدیدی ظهور می کند.

چرا مقیاس نانو اهمیت دارد؟

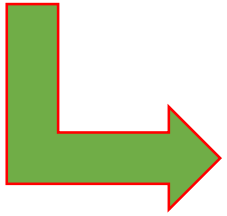
الف) اثرات سطحی

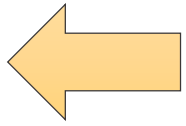
ب) اثرات کوانتومی

اثرات سطحی

- اتمهای سطح با اتمهای داخلی متفاوت هستند.
- اتمهای سطحی عدد همسایگی کمتر دارند

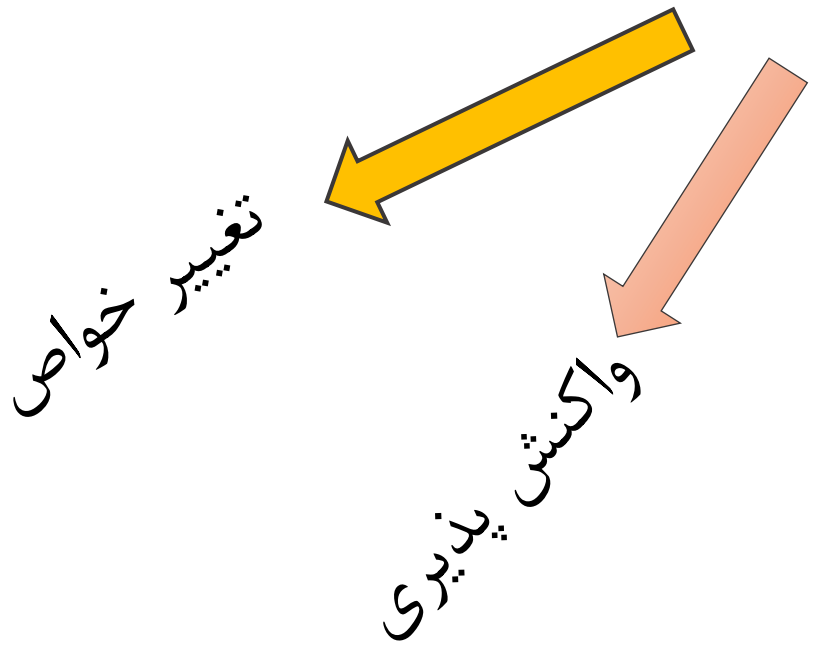
پیوندهای ناقص دارند


واکنش پذیری بالاتر

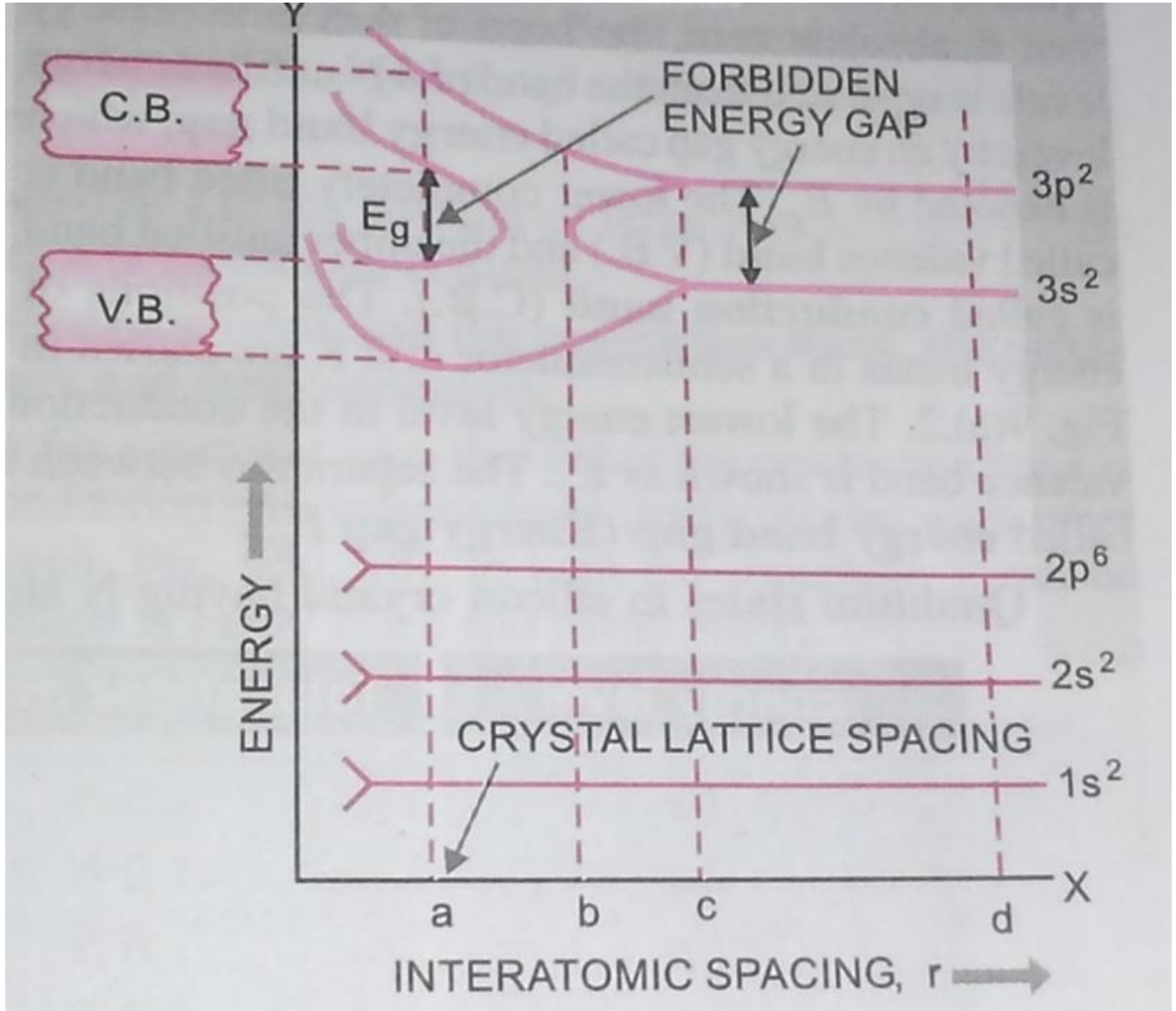
- هر چه ذره ریزتر

تعداد اتمهای سطحی بیشتر

ذره ناپایدارتر

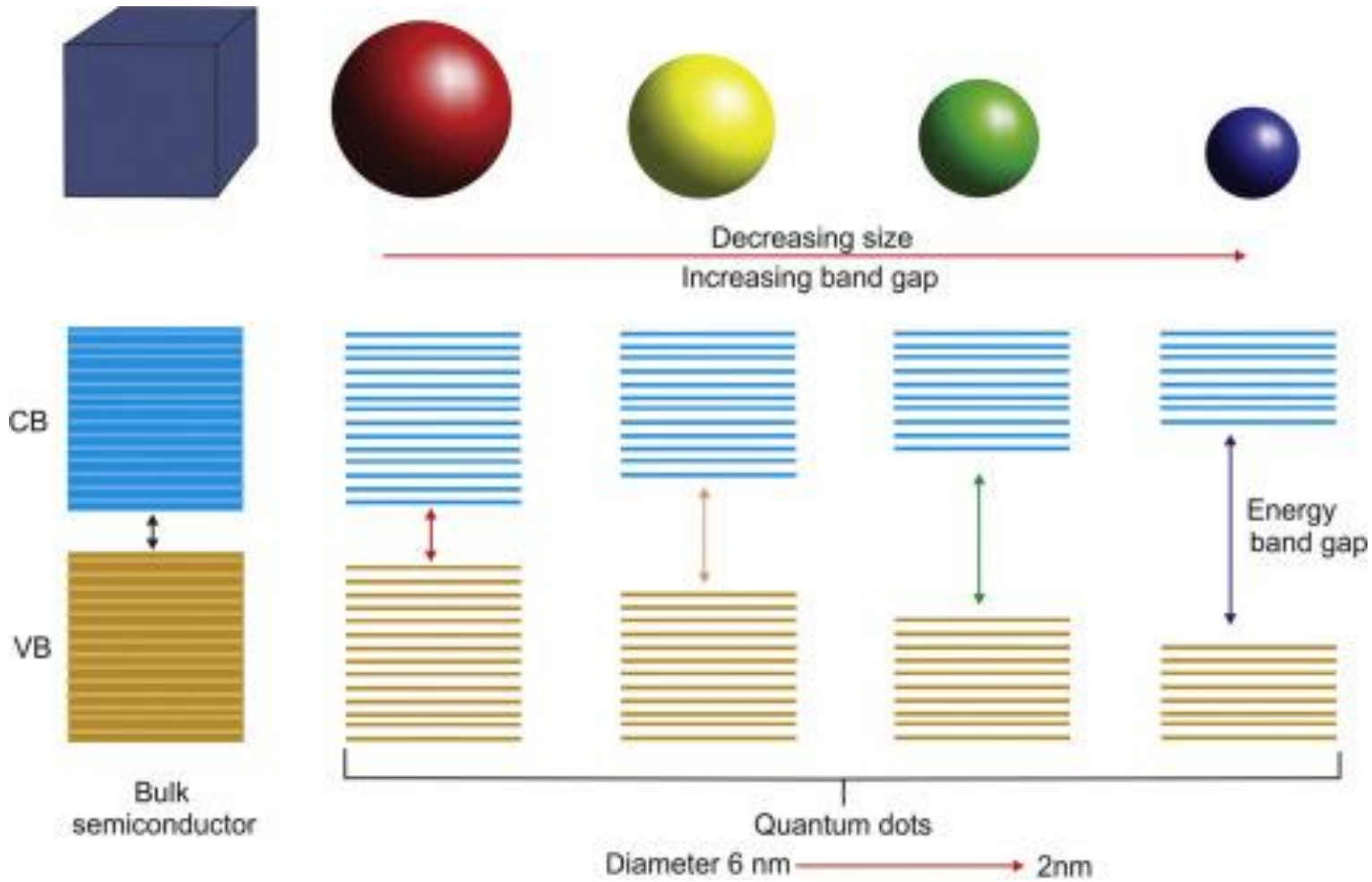
- اتمهای سطحی و شکستن پیوندها:

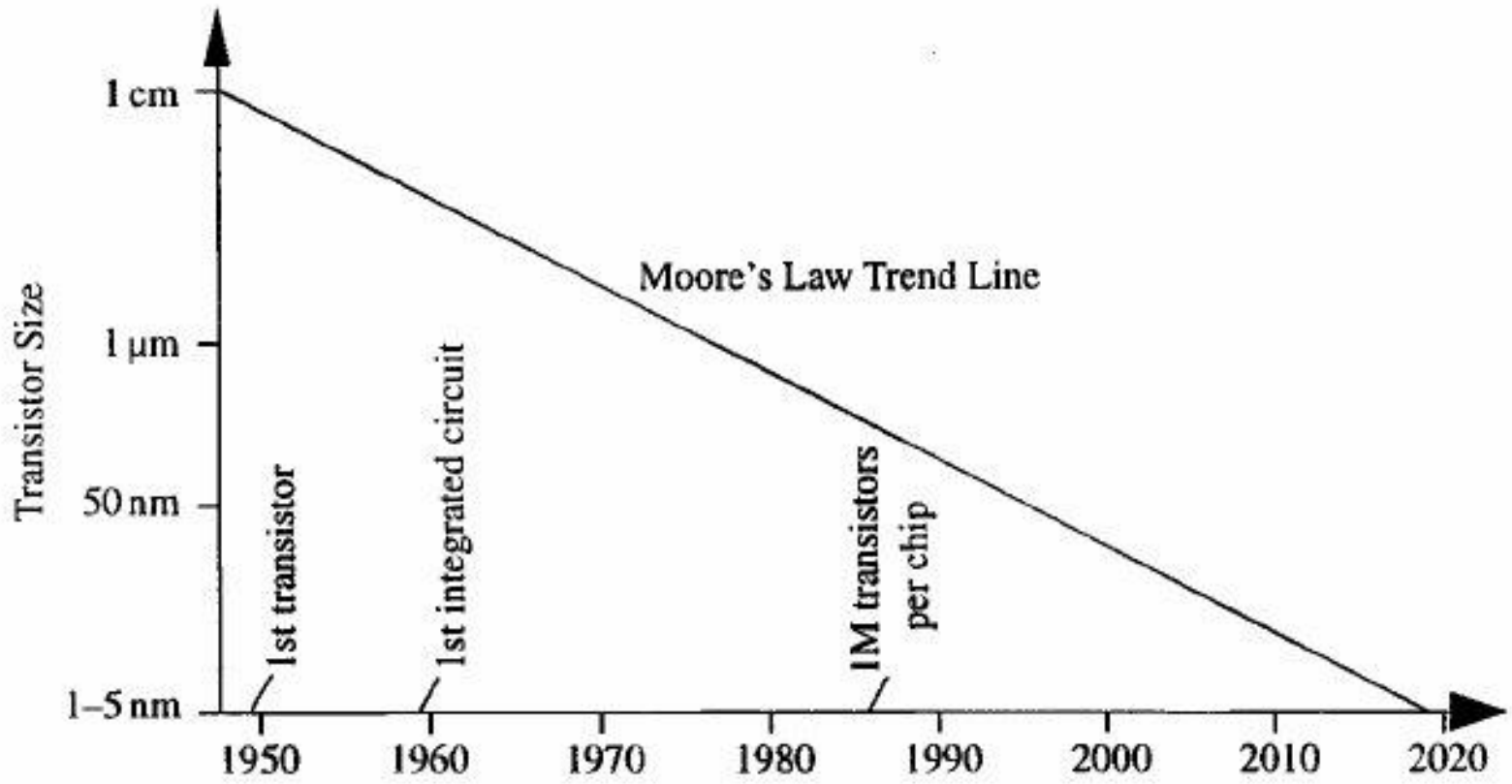


اثرات کوانتومی



- مواد رسانا
- مواد نارسانا
- مواد نیمه رسانا
  - P-type
  - N-type


Decreasing size
Increasing band gap
CB
VB
Energy
band gap
Bulk
semiconductor
Quantum dots
Diameter 6 nm
2nm


Transistor Size
1 cm
1 μm
50 nm
1–5 nm
Moore's Law Trend Line
1st transistor
1st integrated circuit
1M transistors per chip
1950
1960
1970
1980
1990
2000
2010
2020

طبقه بندی نانومواد:

بر حسب ابعاد محصول:

- نانوساختارهای صفر بعدی
- نانوساختارهای تک بعدی
- نانوساختارهای دو بعدی
- مواد حجیم نانوساختار

بر اساس محیط رشد:

- محیط گازی
- محیط مایع
- محیط جامد
- رشد هیبریدی

چالشها در نانوتکنولوژی

- مشکلات در تعیین و اندازه گیری خواص نانومواد
- سنتز ساختار یکنواخت
- غلبه بر انرژی سطحی زیاد
- رسیدن به ابعاد، ترکیب شیمیایی، ریزساختار و ... مورد نظر

تأثیر اندازه ذره بر مساحت و اتمهای سطح

- **تأثیر اندازه ذره روی مساحت سطح ذرات مکعبی**

در تبدیل مکعب بزرگ به مکعبهای کوچک، تغییر جرم وجود ندارد:

مجموع جرم کل مکعب‌های کوچک = جرم مکعب بزرگ

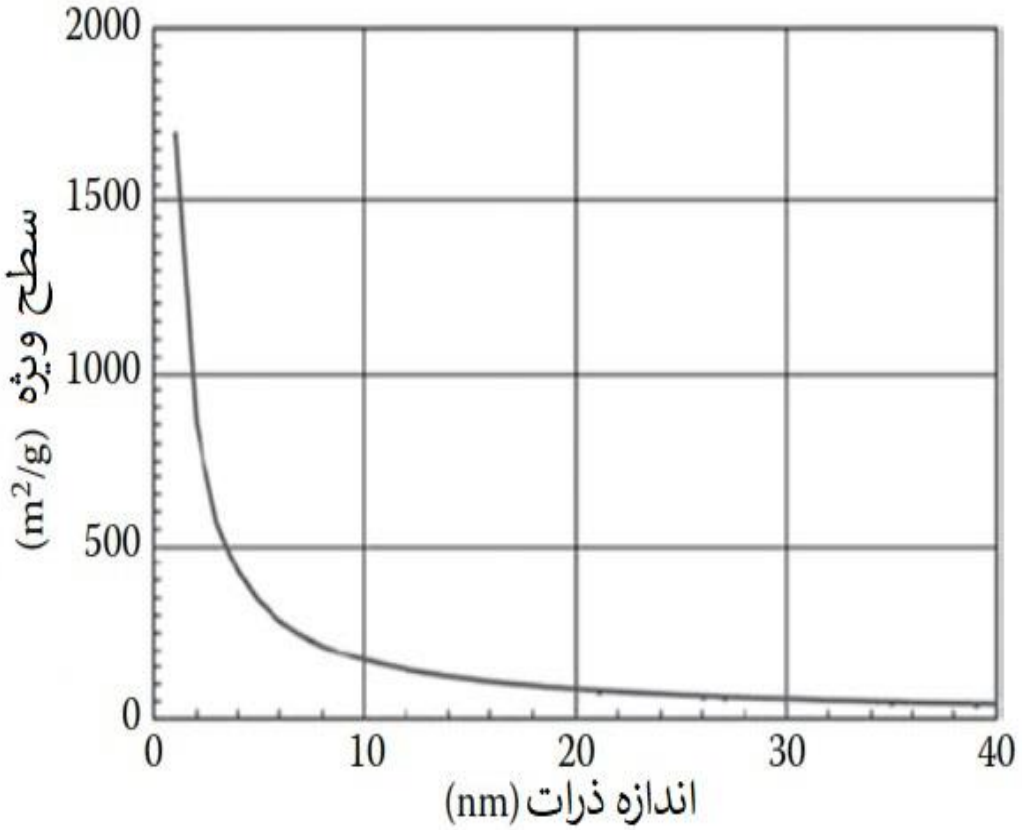
چگالی × مجموع حجم کل مکعب‌های کوچکتر = چگالی × حجم مکعب بزرگ (V)

$$V = N_C \cdot \upsilon$$

- N_c تعداد مکعب های کوچک

$$N_C = \frac{V}{v} = \left[\frac{L}{l}\right]^3$$

- V حجم مکعب بزرگ، v حجم مکعب کوچک
- L طول ضلع مکعب بزرگ، l طول ضلع مکعب کوچک



$$\text{نسبت افزایش در مساحت سطح} = \frac{N_C.\alpha}{A} = N_C\left[\frac{l}{L}\right]^2$$

- A مساحت سطح مکعب بزرگ، a مساحت سطح مکعب کوچک

- **مثال ۱.** چه تعداد مکعب با ضلع ۱ nm را می‌توان از یک مکعب با ضلع ۱ m به دست آورد؟ در ضمن، مساحت سطح مشترک مکعب‌های نانومتری را پیدا کنید.

- تعداد مکعب‌های نانومتری که از یک مکعب یک متری به دست می آید:

$$\text{حجم نانومکعب} = (1 \times 10^{-9}m)^3 = (1 \times 10^{-27}m^3)$$

$$\text{حجم مکعب بزرگتر} = 1m^3$$

- $\text{تعداد کل نانو های‌مکعب بدست آمده از یک مکعب بزرگتر} = \frac{1m^3}{(1\times10^{-27}m^3)} = 1 \times 10^{27}$

- مساحت سطح یک مکعب یک متری m^2 =۶

- مساحت سطح یک نانومکعب منفرد:

$$(1 \times 10^{-9}m)^2 \times 6 = 6 \times 10^{-18}m^2$$

- کل مساحت سطح مشترک نانومکعب‌ها:

$$(1 \times 10^{27}\text{نانومکعب}) \times (6 \times 10^{-18}m^2) = 6 \times 10^9 = 6000km^2$$

- مقدار افزایش مساحت سطح پس از کاهش اندازه مکعب از ۱ m به ۱ nm:

$$10^9 = \left[\frac{6\times10^9m^2}{6m^2}\right] \text{برابر}$$

- مساحت کل سطح نانومکعب‌ها با ضلع ۱ nm میلیون‌ها برابر بزرگتر از مکعب با ضلع ۱ m است.

تأثیر اندازه روی اتم‌های سطح ذرات مکعبی

- اگر تعداد اتم‌ها روی ضلع، n باشد، تعداد کل اتم‌ها (N) در مکعب، n^3 خواهد بود.
- اگر تعداد اتم‌ها روی یک سطح n^2 باشد، تعداد اتم‌ها در مجموع شش سطح و دو بار شمارش اتم‌ها در اضلاع $6n^2$ می‌شود.
- تعداد کل اتم‌ها در ۱۲ ضلع با دو بار شمارش ۱۲n و تعداد اتم‌های کل در گوشه‌ها ۸ می‌باشد.

- تعداد خالص اتم‌های سطح در سطوح مکعب:

$6n^2-12n$ (حذف اتم‌های دو بار شمارش شده روی اضلاع) $+8$ (قرار گیری مجدد اتم‌های گوشه) $=16n^2-12n+8$

- نسبت تعداد اتم‌ها روی سطح به کل اتم‌ها در یک ذره (F):

$$F = \frac{6n^2 - 12n + 8}{n^3} = \frac{6}{N^{\frac{1}{3}}} - \frac{12}{N^{\frac{2}{3}}} + \frac{8}{N} \cong \frac{6}{N^{\frac{1}{3}}}$$

- که $n=N^{1/3}$.
- نکته: بیشترین عدد همسایگی اتم‌های سطح ۹ است در حالیکه برای اتم‌های توده به ۱۲ می‌رسد.

- **مثال ۲.** یک مکعب با تعداد ۲۰×۲۰×۲۰ اتم به $\frac{1}{2}$ و $\frac{1}{4}$ برابر نسبت به اندازه اصلی تقسیم می‌شود. درصد اتم‌های سطح روی مکعب‌های بزرگتر و کوچکتر چقدر است؟

الف) تعداد کل اتم‌ها در یک مکعب با تعداد اتم ۲۰×۲۰×۲۰= n^3 = ۸۰۰۰

- تعداد اتم‌ها روی سطح مکعب: $6n^2-12n+8=2168$، که n تعداد اتم‌ها روی یک ضلع می‌باشد.
- از این رو درصد اتم‌های سطح: ~۲۷٪

ب) تعداد اتمها روی ضلع یک مکعب که $\frac{1}{2}$ برابر مکعب اصلی است: ۱۰

- تعداد کل اتمها روی سطح مکعب:

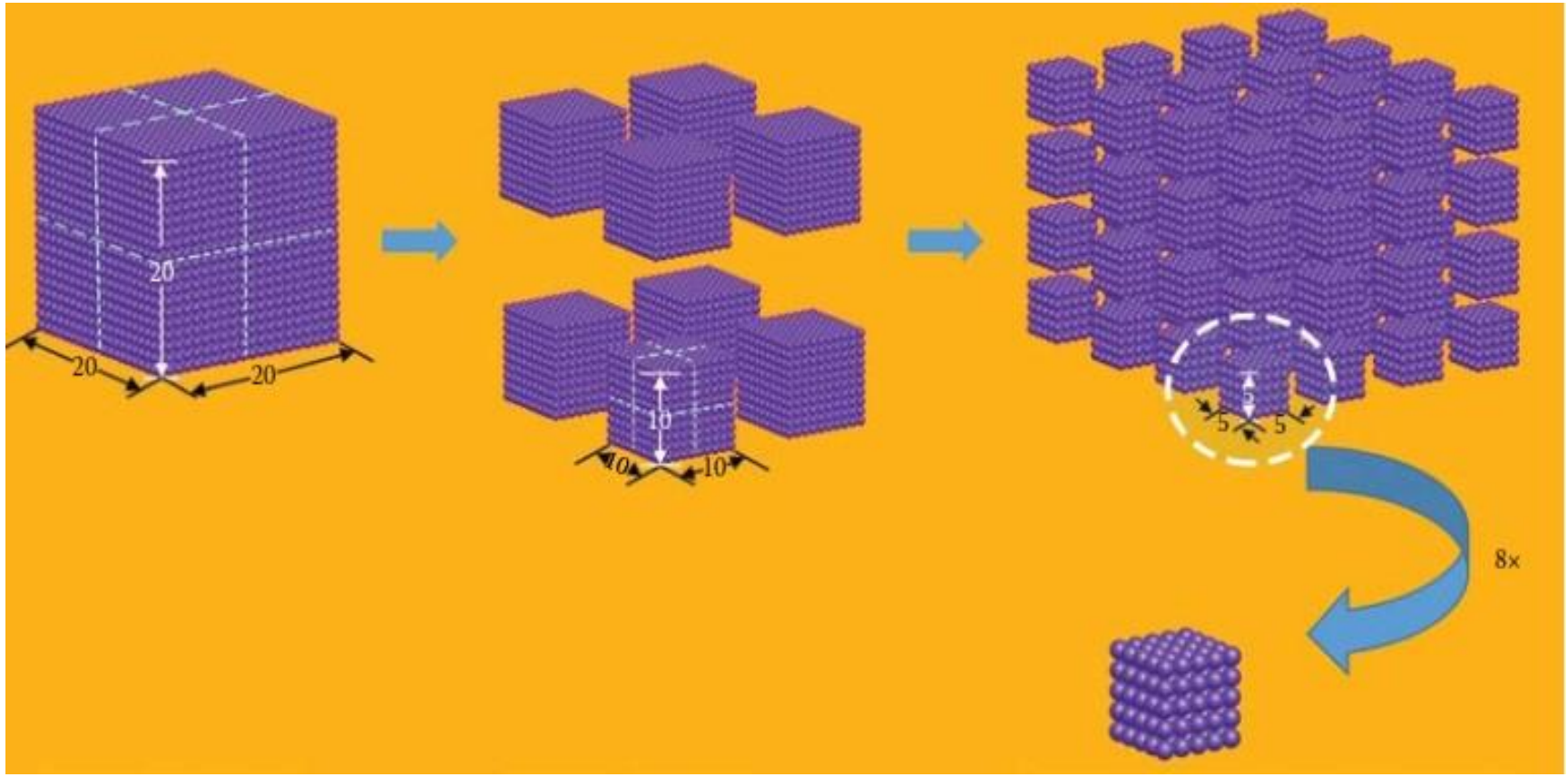
$$(6n^2 - 12n + 8) \times \underbrace{No.ofcubes}_{\text{تعداد مکعبها}}(8) = 3904$$

- پس، تعداد کل اتم‌ها: ۸۰۰۰
- بنابراین درصد اتم‌های سطح: $\sim 48.8\%$

- ج) تعداد اتم‌ها روی ضلع یک مکعب $\frac{1}{4}$ برابر مکعب اصلی: ۵
- تعداد کل اتم‌ها روی سطح مکعب:

$$(6n^2 - 12n + 8) \times \text{تعداد مکعبها } (64) = 6272$$

- پس، تعداد کل اتم‌ها: ۸۰۰۰
- از اینرو درصد اتم‌های سطح: $\sim 78.4\%$


20
20
20
10
10
10
5
5
5
8×

- **تمرین۱: بررسی ترازهای انرژی در یک اتم و چند اتم**

- **تمرین ۲: محاسبه نسبت اتمهای سطح و مساحت سطح مکعب با ۲۰ اتم، زمانیکه به مکعبهایی به ابعاد یک پنجم میرسد.**

قطر هر اتم را یک سانتیمتر در نظر بگیرید.

تأثیر اندازه روی اتم‌های سطح ذرات کروی

- تعداد کل اتم‌ها در ذرات کروی N، حجم ذره V_c ، شعاع ذره R_c و حجم یک اتم V_a آنگاه:

حجم ذره $N.V_a = (V_c)$

- حجم یک ذره کروی=حجم کل اتم‌ها با شعاع اتمی r_a

$$V_c = \frac{4}{3}\pi R_c^3 = N\left(\frac{4}{3}\pi r_a^3\right)$$

- شعاع اتمی ذره برابر است با $(R_c)=N^{1/3}r_a$ و تعداد کل اتم‌ها در ذره:

$$N = \left[\frac{R_c}{r_a}\right]^3$$

- مساحت سطح یک ذره (S_c)

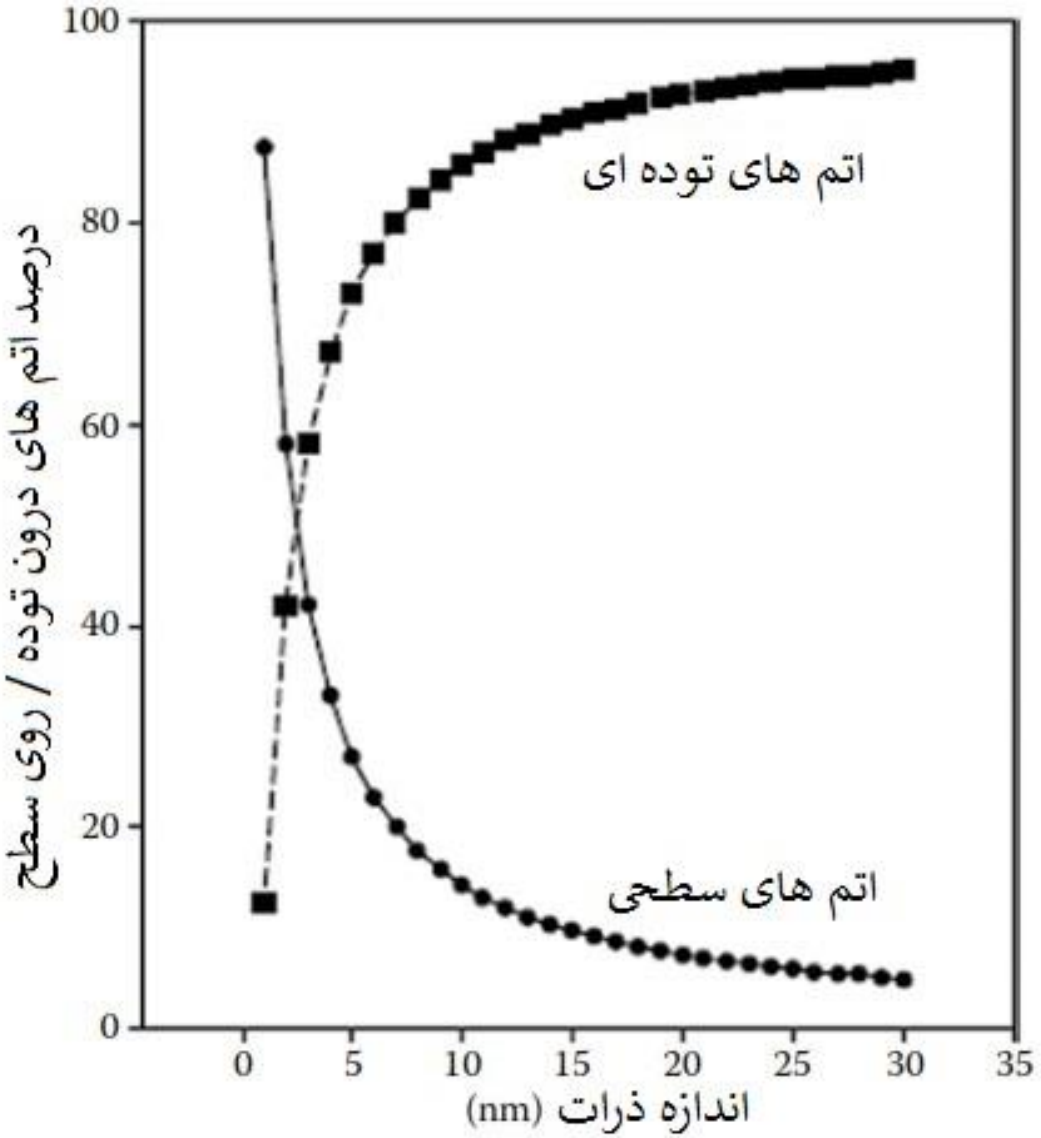
$$S_c = 4\pi R_c^2 = 4\pi\left(N^{2/3} r_a^2\right) = N^{2/3} S_a$$

(S_a = مساحت سطح یک اتم $= 4\pi r_a^2$)

- مقدار تقریبی تعداد اتم‌های روی سطح یک ذره (N_s):

$$N_s = \frac{\text{مساحت سطح یک ذره}}{\text{مساحت مقطع یک اتم}}$$

$$N_s = \frac{4\pi N^{2/3} r_a^2}{\pi r_a^2} = 4N^{2/3}$$



درصدهای اتم‌ها در توده و روی سطح ذره (برای آهن) به عنوان تابعی از اندازه ذره.

- **مثال.** چه تعداد اتم روی سطح یک نانومکعب سیلیسیوم با ضلع nm ۱۰ وجود دارد؟ با توجه به شکل سیلیسیوم یک سلول واحد الماس‌گونه دارد که پارامتر شبکه‌ای آن $5.43\ \text{Å}$ است.

- تعداد سلول‌های واحد در یک نانومکعب سیلیسیوم با ضلع nm ۱۰:

$$\frac{100\times100\times100}{5.43\times5.43\times5.43}=6246$$

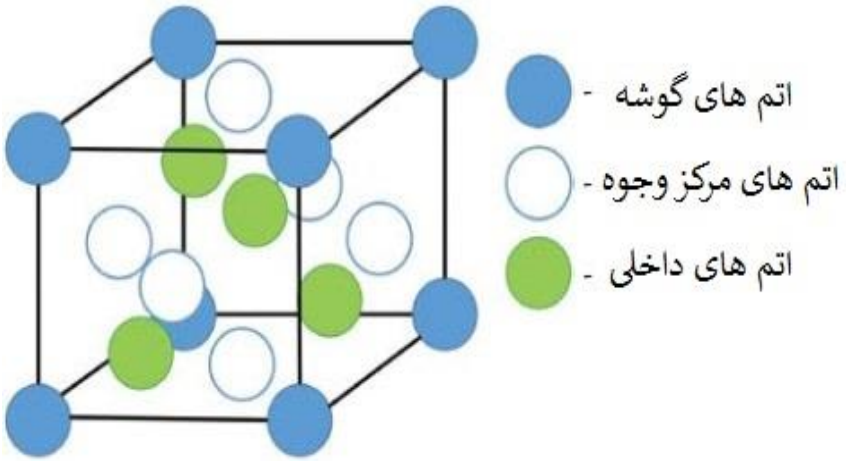
- تعداد سلول‌های واحد در طول هر ضلع:

$$\frac{\text{طول مکعب}}{\text{طول سلول واحد}}\simeq 18$$

- مساحت سطح یک وجه سلول واحد $=$ ضلع $\times$ ضلع $= 5.43 \times 5.43 = 29.49\ \text{Å}^2$

$$\text{تعداد های‌سلول واحد روی سطح مکعب} = a = \frac{\text{مساحت سطح نانومکعب}}{\text{مساحت سطح یک وجه سلول واحد}}$$

$$= \left[\frac{6 \times 100 \times 100}{5.43 \times 5.43}\right] = 2035$$



- تعداد مؤثر اتم‌ها روی هر سطح سلول واحد (b): $^1/_4 \times 4 + 1 = 2$
- تعداد اتم‌های مانده در گوشه‌ها (c): $^1/_4$ (سهم اضافی های‌اتم گوشه) $\times 8 = 2$

- تعداد کل اتم‌های تقریبی روی سطح مکعب = (تعداد سلول‌های واحد در سطح مکعب × تعداد اتم‌های مؤثر روی سطح سلول واحد) + تعداد اتم‌ها در گوشه‌ها که محاسبه نشده بودند

$$(a \times b) + c = (2035 \times 2) + 2 = 4072$$