

# آزمایشگاه تحقیقاتی شیمی سطح



استاد آزمایشگاه

دکتر بهشته سهرابی

فکس : +98-21-77491204

تلفن : +98-21-77240540-6275

آدرس پست الکترونیکی: [Sohrabi\\_b@iust.ac.ir](mailto:Sohrabi_b@iust.ac.ir)

## دانشجویان نکتري :

فرزانه حكمت , اعظم كرمي, مهديه پورسرگل و رضا جعفري

## دانشجویان كارشناسي ارشد :

گلناز وهاب پور, حديث عليزاده, اسماعيل فرج پور, مهسا علي محمدیان, شكوه كرمي و فرشته منصورى



## برنامه های تحقیقاتی

### شیمی سطح

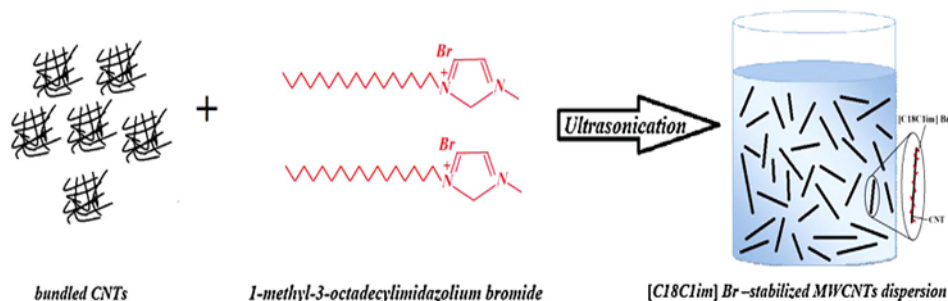
#### ۱- انرژی های جدید

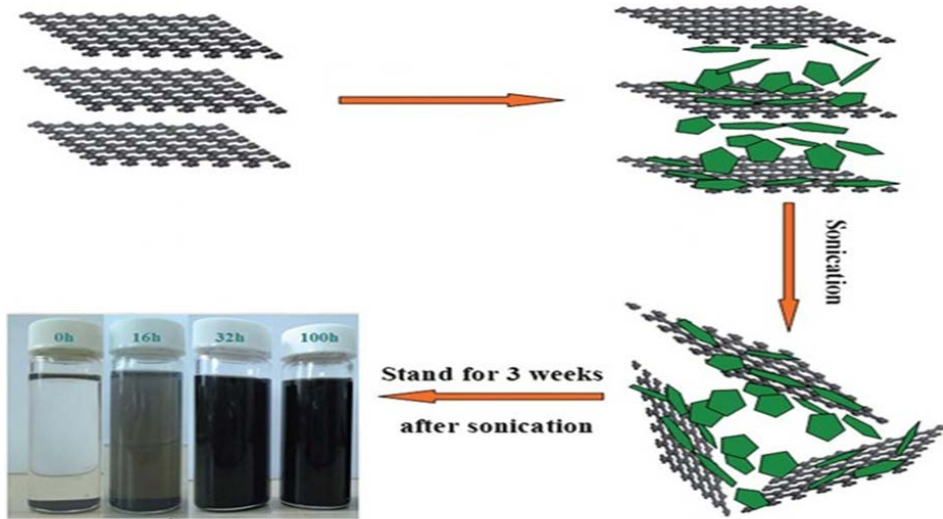
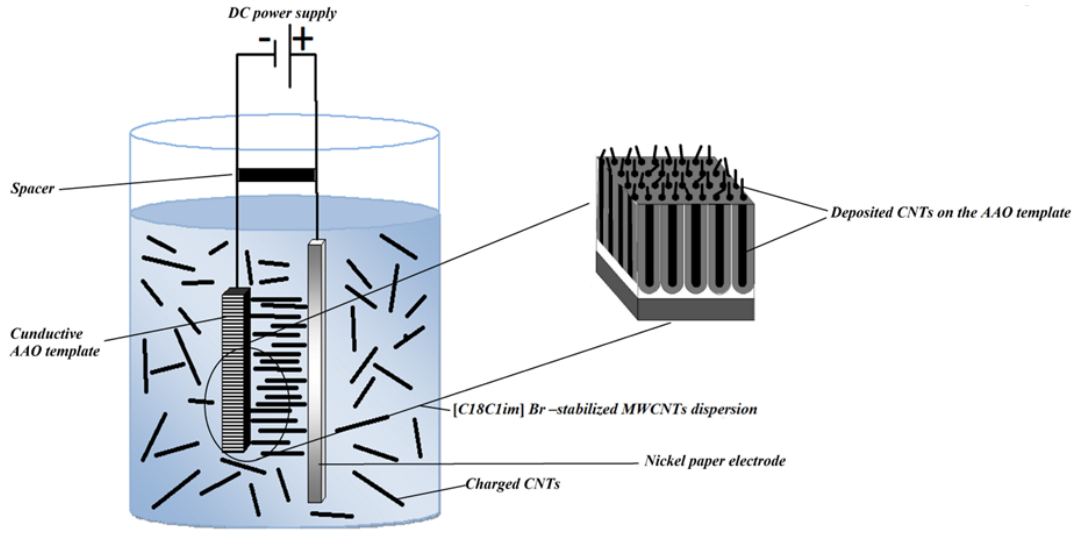
##### ۱-۱. ابرخازن ها

امروزه با افزایش اهمیت بالای استفاده از سوخت های فسیلی، به علت خطر کاهش این منابع، حرکت دانش به سمت تولید انرژی مورد نیاز است. از این رو نیاز به گسترش روش ها برای ذخیره، بازیابی آن به خوبی احساس می شود. با افزایش در انبوهی از مدارهای تجمع قابل حمل ما به ساختار هایی نیاز داریم که بتواند انرژی و دانسیته های قدرت را در حد بالایی بهبود بخشد. انرژی میتواند به طور ایستا (ساکن) در میدان های الکتریکی به جز استفاده شیمیایی برای ذخیره انرژی به طور شیمیایی، ذخیره شود. انرژی در این روش می تواند به سرعت و به طور موثری استخراج شود. انرژی الکتریکی به طور مستقیم و غیرمستقیم ذخیره می شود. در روش غیرمستقیم (در باتری ها) انرژی توسط واکنش های اکسایش کاهش بین دو الکتروود با پتانسیل های مختلف تولید می شود. در روش مستقیم (در ابرخازن ها) انرژی توسط جدایی بارهای مثبت و منفی به طور فیزیکی صورت می گیرد. بنابراین، یک لایه یونی توسط جدایی بارهای مثبت و منفی روی سطح منفی شکل می گیرد. این تراکم یون های مثبت روی یک سطح به تراکم یون های منفی (الکترون) در طرف دیگر هدایت می شود. بارها در این روش جدا می شوند و انرژی در لایه های دوگانه یونی به طور ساکن ذخیره می شود. ذخیره انرژی به طور ساکن بسیار سریع و با برگشت پذیری بالایی است. پس، ابرخازن ها می تواند صدها هزار بار با چرخه زندگی بالاتر شارژ و دشارژ شوند. استخراج و ذخیره انرژی به دلیل حرکت یون ها بین سطوح الکتروود صورت می گیرد. شارژ و دشارژ ابرخازن ها خیلی سریع تر از استخراج انرژی از واکنش های شیمیایی انجام شده در باتری ها است. ابرخازن ها چگالی های قدرت و انرژی بالایی به دلیل ظرفیت خازنی بالا دارند. ابرخازن ها با استفاده از مواد با ناحیه سطحی بالا ساخته می شوند که به ظرفیت خازنی بالا هدایت می شود.

## ۱-۱-۱. پراکندگی نانوله های کربنی و گرافن به عنوان الکتروود در ابرخازن ها

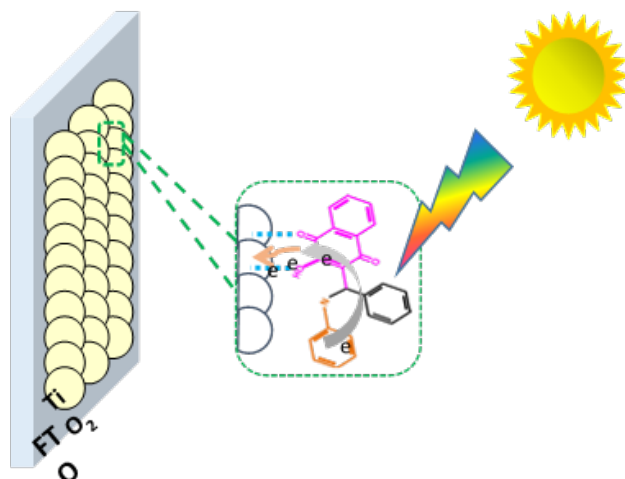
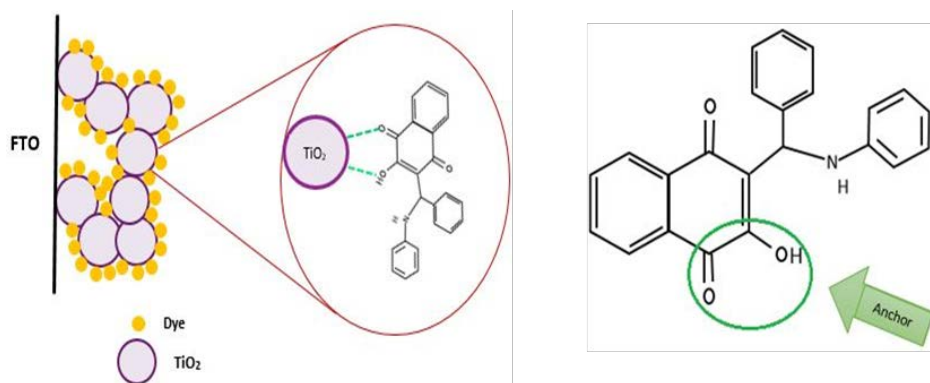
نانولوله های کربنی و گرافن مواد ارزشمندی به عنوان الکتروود ابر خازن ها به شمار می آیند. به دلیل نیروی و اندروالسی قوی بین صفحات گرافن و لوله های نانولوله ها و همچنین آبگریزی آن ها این ترکیبات انحلال پذیری کمی در بسیاری از حلال ها دارند که منجر به محدود شدن کاربرد آن ها در بسیاری از زمینه ها شده است. بنابراین پراکندگی یکسان نانولوله های کربنی و صفحات گرافن در محلول های مختلف به ویژه در محلول های آبی حائز اهمیت است. کارهای مختلفی در راستای بهبود پراکندگی آن ها از طریق روش های به هم زدن و فراصوت انجام شده است. برای پراکندگی نانولوله های کربنی در آب از روش های غیر کوالانسی با کمک مایع یونی ها و مواد فعال سطحی استفاده شده است. بعد از پراکندگی نانولوله ها توسط این مواد، نانولوله هایی که به خوبی پراکنده شده اند را با اعمال میدان الکتریکی در قالب دلخواه به صف در می آورند. این روش که رسوب الکتروفورتیک نامیده می شود، از طریق حرکت نانولوله های باردار پراکنده شده در مایع یونی به سمت الکتروود رسانا تحت اعمال میدان الکتریکی صورت می گیرد. هدف نهایی تهیه ی فیلمی است که بیشتر نانولوله ها در آن در یک سمت مشخص قرار گرفته اند. حرکت الکتروفورتیک نانولوله های کربنی باردار پراکنده شده طی این عمل باعث انباشتگی نانولوله ها در داخل میسل های مایع یونی به صورت کپسوله و تشکیل رسوب جامد و همگن در الکتروود مربوطه می شوند.





## ۲-۱. سلول های خورشیدی

سلول های خورشیدی حساس شده با رنگ به علت قیمت پایین و کارایی تبدیل انرژی نسبتاً بالا مورد توجه قرار گرفته اند. رنگهای آلی چندین مزیت دارند از جمله ضریب جذب بالا، تغییر راحت استخلاف ها برای افزایش کارایی آنها و غیر مضر بودنشان برای طبیعت. بنابراین ما در آزمایشگاه شیمی سطح از رنگ دانه ی آلی نفتوکینون و مشتقات آن در ساخت سلول خورشیدی استفاده کردیم.

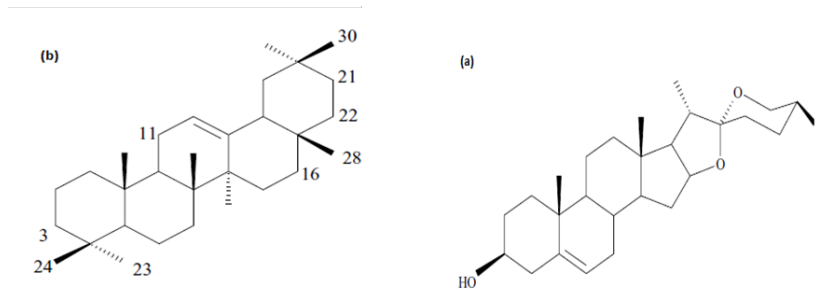


## ۲- مواد فعال سطحی طبیعی و مغناطیسی

آلودگی های محیط زیست یکی از مهم ترین نگرانی هایی است که در سال های اخیر توسط دانشمندان دوستدار محیط زیست مورد بررسی قرار گرفته است. نفت خام و مشتقات آن مثل نفت چرخه ای سبک، نفت گاز سبک و نفت خام سنگین از جمله این آلودگی ها هستند. شیمیدان ها و مهندسان شیمی بسیار علاقه مند به روش های جمع آوری و حذف نفت ریزش کرده هستند. امروزه از مواد شیمیایی مانند پراکنده کننده ها برای حذف نفت از طریق شکستن آن به قطرات امولسیون کوچکی استفاده می شود.

### ۱-۲. مواد فعال سطحی طبیعی

مواد فعال سطحی طبیعی در مقایسه با مواد فعال سطحی شیمیایی از این نظر حائز اهمیت هستند که سازگار با محیط زیست می باشند و تجزیه پذیر هستند. این مواد را از برخی گیاهان در آزمایشگاه استخراج کرده ایم.



### ۲-۲. مواد فعال سطحی مغناطیسی

مواد فعال سطحی مغناطیسی ایده ی عجیبی به نظر می آید اما کاربرد های متفاوتی دارند. به عنوان مثال بسیاری از مواد فعال سطحی زیست تخریب پذیر نیستند و اگر به جای آن ها از مواد فعال سطحی مغناطیسی استفاده شود می توان آن ها را به راحتی با کمک میدان مغناطیسی از آب جدا کرد و دوباره مورد استفاده قرار داد که این امر منجر به کاهش ورود تمیز کننده ها به محیط زیست می شود. علاوه بر این اخیراً نفت های

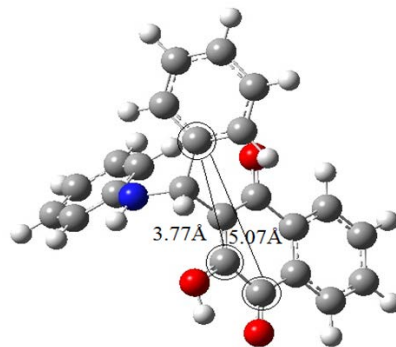
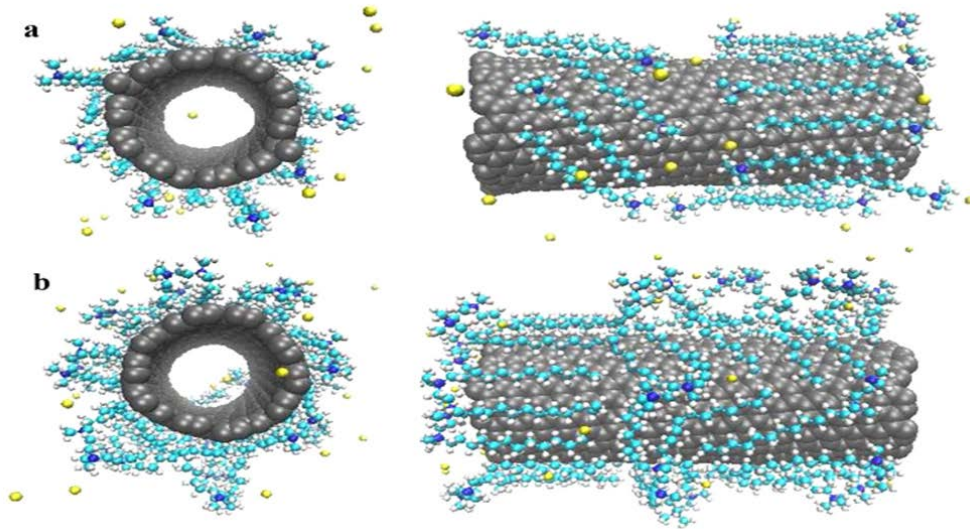
ریزش کرده به آب دریا را با کمک مواد فعال سطحی به قطرات امولسیون کوچکی تبدیل می کنند که آن ها به اقیانوس ها نفوذ می کند و در آنجا باقی می مانند اما اگر به جای آن ها از مواد فعال سطحی مغناطیسی استفاده شود می توان امولسیون های ایجاد شده را از سطح دریا جمع آوری کرد که در این حالت هم ماده فعال سطحی و هم نفت از آب دریا جدا خواهند شد.



### ۳- شبیه سازی و محاسبات کوانتومی

انحلال ناپذیری نانولوله های کربنی و گرافن در محیط آبی استفاده از آن ها را محدود کرده است. مطالعات اخیر نشان داده است که با به کارگیری مواد فعال سطحی مناسب می توان پایداری آن ها را در محلول های آبی بهبود بخشید. علی رغم این که مواد فعال سطحی متفاوتی برای این کار امتحان شده است اما مکانیسم دقیق برهمکنش آن ها با نانولوله های کربنی و گرافن به طور کامل مشخص نشده است. ما در این گروه به منظور عمیق تر شدن در فهم برهمکنش های مولکولی بین نانولوله های کربنی ( گرافن ) با مواد فعال سطحی و همچنین بررسی تاثیر دم ماده ی فعال سطحی بر روی فرایند جذب , مطالعات شبیه ساز دینامیک مولکولی جذب و مورفولوژی تجمع های مواد فعال سطحی کاتیونی بر روی سطح نانولوله های کربنی تک دیواره و ورق گرافن را مطالعه و گزارش کردیم





## زمینه های تحقیقاتی

- ابرخازن ها
- سلول خورشیدی حساس شده با رنگدانه
- مواد فعال سطحی طبیعی
- مواد فعال سطحی مغناطیسی
- برهمکنش مواد فعال سطحی با نانولوله های کربنی
- برهمکنش مواد فعال سطحی با گرافن
- حذف آلودگی های نفتی از آب با کمک مواد فعال سطحی

## روش های آزمایش

- کشش سطحی
- هدایت سنجی
- PFG-NMR
- پراکندگی دینامیکی نور
- پتانسیل زتا
- میکروسکوپ الکترونی روبشی
- میکروسکوپ الکترونی عبوری
- ولتامتری چرخه ای
- رسوب الکتروفورتیک
- امپدانس
- رسوب دهی بخار شیمیایی
- شارژ و دشارژ گالوانواستاتیک
- طیف سنجی UV-Vis

## روش های محاسباتی

- شبیه سازی دینامیکی مولکولی (MD)
- نظریه ی تابع چگالی (DFT)
- نظریه ی تابع چگالی وابسته به زمان (TD-DFT)

## دستگاه های موجود در آزمایشگاه



*UV-Vis Spectrophotometer mini Shimadzu 1240*



*Tensiometer Sigma 700*



*Sunny Simulator*



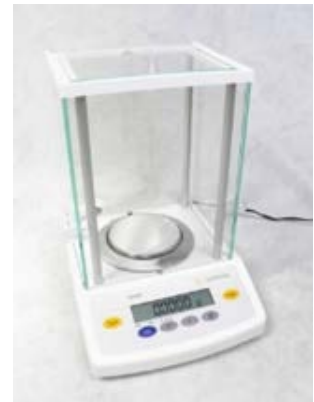
*Mettmert Water Bath*



*Mettmert Oven*



*Hot Plate 60*



*Sartorius TE124S Balance*



*Centrifuge Hettich EBA 270*



*Wise Circu*



*Wise Bath*



*Cyclic Voltammetry (Sama 500)*



*Computational System (12 core)*



*Conductometer Jenway*

### *Supercapacitors*

1. Electrophoretic deposition of multi-walled carbon nanotubes on porous anodic aluminum oxide using ionic liquid as a dispersing agent, F. Hekmat, B. Sohrabi, M.S. Rahmanifar, A. Jalali, Applied Surface Science 341 (2015) 109–119.
2. Supercapacitive properties of coiled carbon nanotubes directly grown on nickel nanowires, F. Hekmat, B. Sohrabi, M. S. Rahmanifar, Journal of material chemistry A, 2, (2014) 17446–17453.
3. Growth of the cobalt nanowires using AC electrochemical deposition on anodized Aluminum oxide templates, F. Hekmat, B. Sohrabi, M. S. Rahmanifar, J Nanostruct Chem (2014) 4:105, DOI 10.1007/s40097-014-0105-2.

### *Dispersion of CNT by using surfactants: Experimental and MD simulation*

- 1-Dispersion of Carbon Nanotubes using Mixed Surfactants Experimental and Molecular Dynamics Simulation Studies, Beheshteh Sohrabi, Niaz Poorgholami-Bejarpasi, and Nahid Nayeri, Journal of physical chemistry B, 118 (2014) 3094–3103.
- 2-Self-Assembly of Cationic Surfactants on the Carbon Nanotube Surface: Insights from Molecular Dynamics Simulations, N. Poorgholami, B. Sohrabi, Journal of molecular modeling, (2013) DOI: 10.1007/s00894-013-1948-z.
- 3-Role of surfactant structure in aqueous dispersions of carbon nanotubes Original N. Poorgholami-Bejarpasi, B. Sohrabi 2015, 394, 19-28



### *Surfactant interactions*

1-Electrolyte-Cosolvent Simultaneous Effects on Adsorption and the Phase Transition between Microstructures and Nanostructures in the Cationic-rich Region of Catanionic Mixture, B. Sohrabi, M. Moallemi, R. Amani, M. Kiasadegh, *Fluid phase equilibria*, 375 (2014) 168-175.

2-Polymer-Surfactant Interaction in Catanionic surfactant Mixtures and its Application in Nanoporous Pores Synthesis, *Colloid and surface*, 436 (2013) 890-897. B. Tajik, B. Sohrabi, R. Amani.

3-Investigation of DNA-Cationic Bolaform Surfactants Interaction with Different Spacer Length, *Colloids and surfaces B*, 110 (2013) 29-35. V. Khani, B. Sohrabi, A. A. Mosavi Movahedi, P. Moradi.

4-Adsorption and micellar phase properties of anionic surfactant in the presence of electrolyte and oil at different temperatures, *Fluid Phase Equilibria* 337 (2013) 370–378. B. Sohrabi, P. Moradi, M. Najafi.

5-The study of Sunset Yellow anionic dye interaction with gemini and conventional cationic surfactants in aqueous solution, *Dyes and Pigments* 95 (2012) 768–775. Sara Fazeli, Beheshteh Sohrabi, Alireza Tehranibagha.

6-Electrolyte Effect on Adsorption and the Phase Transition from Microstructures to Nanostructures in Ionic/Ionic Surfactants Mixture, *Journal of Colloid and Interface Science* 361 (2011) 159–169. Maryam Moallemi, Beheshteh Sohrabi, Sara Fazeli.

7- The Electrolyte Effect on Nanostructures of Mixed Anionic and Cationic Surfactants, *journal of nanostructure in chemistry*, 2 (2011), 183-188. Maryam moallemi, Beheshteh Sohrabi.

8-Investigation of the mixing behavior of surfactants by the lattice Monte carlo simulation, *J Mol Model* (2010) 16:1499–1508. N. B. Poorgholami, S. M. Hashemianzadeh, B. Sohrabi

