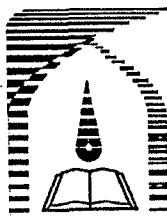


بِسْمِ اللّٰهِ الرَّحْمٰنِ الرَّحِيْمِ



دانشگاه تربیت مدرس

دانشکده علوم پایه

پایان نامه دوره کارشناسی ارشد شیمی (فیزیک)

## تأثیر طول زنجیر و سر قطبی بر برهمنکنش مخلوط مواد فعال

### سطحی یونی و غیر یونی

نگارش:

مراد عبدالهی

استاد راهنما

دکتر سهیلا جوادیان فرزانه

۱۷ / ۱۷ / ۸۸

استاد مشاور

دکتر حسین غریبی

آسفند ۸۶

۱۰۲۶۶۷

سسمه تعالی



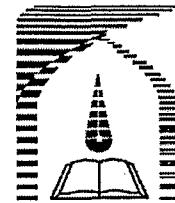
دانشکده علوم پایه

تأییدیه اعضاي هیأت داوران حاضر در جلسه دفاع از پایان نامه کارشناسی ارشد

اعضاي هیئت داوران نسخه نهایی پایان نامه آقای مراد عبداللهی رشتہ شیمی (فیزیک) تحت عنوان:  
«تأثیر طول زنجیر و سرقطبی بر بینمکنی مخلوط مواد فعال سطحی یونی و غیریونی» از نظر قرم  
و محتوا بررسی نموده و آنرا برای لخذ درجه کارشناسی ارشد مورد تائید قرار دادند.

اعضاي هیأت داوران	نام و نام خانوادگی	رتبه علمی	اعضاء
۱- استاد راهنمای	دکتر سهیلا جوادیان	استاد	استاد دیار
۲- استاد مشاور	دکتر حسین غربی	استاد	استاد دیار
۳- استاد ناظر داخلی	دکتر عبدالعلی علیزاده	استاد دیار	استاد دیار
۴- استاد ناظر خارجی	دکتر بهشتہ سهرابی	استاد دیار	استاد دیار
۵- نماینده تحصیلات تكمیلی	دکتر عبدالعلی علیزاده		

۱۰۲۷۷۷



بسمه تعالیٰ

دانشگاه تربیت مدرس  
دانشکده علوم پایه

### آیین نامه چاپ پایان نامه (رساله) های دانشجویان دانشگاه تربیت مدرس

نظر به اینکه چاپ و انتشار پایان نامه (رساله) های تحصیلی دانشجویان دانشگاه تربیت مدرس، مبین بخشی از فعالیتهای علمی - پژوهشی دانشگاه است بنابراین به منظور آگاهی و رعایت حقوق دانشگاه، دانش آموختگان این دانشگاه نسبت به رعایت موارد ذیل متعهد می شوند:

ماده ۱: در صورت اقدام به چاپ پایان نامه (رساله) خود، مراتب را قبلًا به طور کتبی به «دفتر نشر آثار علمی» دانشگاه اطلاع دهد.

ماده ۲: در صفحه سوم کتاب (پس از برگ شناسنامه) عبارت ذیل را چاپ کند:  
«کتاب حاضر، حاصل پایان نامه کارشناسی ارشد / رساله دکتری نگارنده در رشته شیمی (فیزیک) است که در سال ۱۳۸۶ در دانشکده علوم پایه دانشگاه تربیت مدرس به راهنمایی سرکار خانم دکتر سهیلا جوادیان فرزانه مشاوره جناب آقای دکتر حسین غربی از آن دفاع شده است.»  
ماده ۳: به منظور جبران بخشی از هزینه های انتشارات دانشگاه، تعداد یک درصد شمارگان کتاب (در هر نوبت چاپ) را به «دفتر نشر آثار علمی» دانشگاه اهدا کند. دانشگاه می تواند مازاد نیاز خود را به نفع مرکز نشر درعرض فروش قرار دهد.

ماده ۴: در صورت عدم رعایت ماده ۳، ۵۰٪ بهای شمارگان چاپ شده را به عنوان خسارت به دانشگاه تربیت مدرس، تأثیه کند.

ماده ۵: دانشجو تعهد و قبول می کند در صورت خودداری از پرداخت بهای خسارت، دانشگاه می تواند خسارت مذکور را از طریق مراجع قضایی مطالبه و وصول کند؛ به علاوه به دانشگاه حق می دهد به منظور استیفای حقوق خود، از طریق دادگاه، معادل وجه مذکور در ماده ۴ را از محل توقيف کتابهای عرضه شده نگارنده برای فروش، تامین نماید.

ماده ۶: اینجانب مراد عبدالهی دانشجوی رشته شیمی (فیزیک) مقطع کارشناسی ارشد تعهد فوق و ضمانت اجرایی آن را قبول کرده، به آن ملتزم می شوم.

نام و نام خانوادگی: مراد عبدالهی

تاریخ و امضا:

## دستورالعمل حق مالکیت مادی و معنوی در مورد نتایج پژوهش‌های علمی دانشگاه تربیت مدرس

**مقدمه:** با عنایت به سیاست‌های پژوهشی دانشگاه در راستای تحقق عدالت و کرامت انسانها که لازمه شکوفایی علمی و فنی است و رعایت حقوق مادی و معنوی دانشگاه و پژوهشگران، لازم است اعضای هیات علمی، دانشجویان، دانش آموختگان و دیگر همکاران طرح، در مورد نتایج پژوهش‌های علمی که تحت عناوین پایان‌نامه، رساله و طرحهای تحقیقاتی که با هماهنگی دانشگاه انجام شده است، موارد ذیل را رعایت نمایند:

**ماده ۱ - حقوق مادی و معنوی پایان نامه‌ها / رساله‌های مصوب دانشگاه** متعلق به دانشگاه است و هرگونه بهره‌برداری از آن باید با ذکر نام دانشگاه و رعایت آئین‌نامه‌ها و دستورالعمل‌های مصوب دانشگاه باشد.

**ماده ۲ - انتشار مقاله یا مقالات مستخرج از پایان نامه/ رساله به صورت چاپ در نشریات علمی و یا ارائه در مجتمع علمی باید به نام دانشگاه بوده و استاد راهنما مسئول مکاتبات مقاله باشد.**

**تبصره:** در مقالاتی که پس از دانش آموختگی بصورت ترکیبی از اطلاعات جدید و نتایج حاصل از پایان‌نامه/ رساله نیز منتشر می‌شود نیز باید نام دانشگاه درج شود.

**ماده ۳ - انتشار کتاب حاصل از نتایج پایان نامه / رساله و تمامی طرحهای تحقیقاتی دانشگاه** باید با مجوز کتبی صادره از طریق حوزه پژوهشی دانشگاه و بر اساس آئین نامه‌های مصوب انجام می‌شود.

**ماده ۴ - ثبت اختراع و تدوین دانش فنی و یا ارائه در جشنواره‌های ملی، منطقه‌ای و بین‌المللی** که حاصل نتایج مستخرج از پایان نامه/ رساله و تمامی طرحهای تحقیقاتی دانشگاه باید با هماهنگی استاد راهنما یا مجری طرح از طریق حوزه پژوهشی دانشگاه انجام گیرد.

**ماده ۵ - این دستورالعمل در ۵ ماده و یک تبصره در تاریخ ۱۳۸۴/۴/۲۵ در شورای پژوهشی دانشگاه به تصویب رسیده و از تاریخ تصویب لازم الاجرا است و هرگونه تخلف از مفاد این دستورالعمل، از طریق مراجع قانونی قابل پیگیری خواهد بود.**

تقدیم به پدر عزیز، مادر مهربان، همسر صبور و آنها بی  
که به هیچ وجه راه راست را رها نمی کنند.

تشکر و قدردانی:

از سرکار خانم دکتر سهیلا جوادیان که راهنمایی این پژوهش را بر عهده داشته و اینجانب را

تا آخرین مراحل تحقیق راهنمایی نمودند کمال تشکر را دارم.

از جناب آقای دکتر غریبی که به عنوان استاد مشاور مرا در تکمیل پایان نامه یاری نمودند،

تشکر می نمایم.

و در پایان از تمامی اساتید، مخصوصاً جناب آقای دکتر عبدالعلی علیزاده به خاطر مطالب

مربوط به برهمنکنشهای بین مولکولی و تمامی دانشجویانی که در امر تحقیق مرا یاری

نمودند، صمیمانه تقدیر و تشکر می کنم.

## چکیده

غلظت بحرانی میسل مخلوط دوتائی آلکیل تری متیل آمونیم برمیدها ( $C_{12}TAB$ ،  $C_{14}TAB$  و  $C_{16}TAB$ )، ستیل پیریدینیم کلرید (CPC) و آلکاندیل-alfa، امگا-بیس(آلکیل تری متیل آمونیم برمید) با  $Triton X-100$  بوسیله روش‌های کشش سطحی و هدایت سنجی تعیین شدند. با استفاده از کشش سطحی، غلظت اضافی سطح ( $\Gamma_{max}$ )، فشار سطحی ( $\Pi_{CMC}$ ) و حداقل مساحت سطح اشغال شده توسط مولکولهای ماده فعال سطحی، ارزیابی شدند. درجه تفکیک یون مخالف با استفاده از هدایت سنجی تخمین زده شد. نتایج با استفاده از نظریه محلول با قاعده (RST) برای بدست آوردن پارامتر برهمکنش و ترکیب میسل مخلوط و تک لایه بررسی شدند تا نوع و قدرت برهمکنشهای مواد فعال سطحی در میسل مخلوط و تک لایه ارزیابی شود. مدل مائدا برای تعیین پایداری میسلهای مخلوط بکار برده شد. نتایج نشان دادند که با افزایش طول زنجیر مواد فعال سطحی دو پیکره و رایج، پایداری میسل افزایش می‌یابد. در حالی که پارامتر برهمکنش و پایداری میسل با تغییر گروه سر از تری متیل آمونیم به پیریدینیم تغییر قابل ملاحظه‌ای ندارد. درجه تفکیک یون مخالف ( $\alpha$ ) نیز با افزایش طول زنجیر همولوگهای  $C_nTAB$  افزایش می‌یابد. در صورتی که افزایش طول زنجیر در همولوگهای مواد فعال سطحی دو پیکره باعث کاهش  $\alpha$  می‌گردد.

کلمه‌های کلیدی: غلظت بحرانی میسل، مواد فعال سطحی دو پیکره، پارامتر برهمکنش، طول زنجیر، گروه سر، غلظت اضافی سطح.

## فهرست

۱	فصل اول: مقدمه
۲	۱-۱- خواص مواد فعال سطحی و کاربرد آنها
۶	۱-۲- نیروهای بین مولکولی
۶	۱-۲-۱- نیروهای دوقطبی - دوقطبی
۷	۱-۲-۲- نیروهای لاندن
۷	۱-۳- پیوند هیدروژنی
۸	۱-۴- انواع مواد فعال سطحی
۱۱	۱-۴-۱- فرایند تشکیل میسل و انواع تجمعات مواد فعال سطحی
۱۱	۱-۴-۲- فرایند تشکیل میسل
۱۳	۱-۴-۳- انواع تجمعات مواد فعال سطحی
۱۶	۱-۵- تأثیر مواد افزودنی بر ساختار و خواص میسلی
۱۹	۱-۶- تأثیر ساختار مواد فعال سطحی بر خواص میسلی
۲۶	۱-۷- مواد فعال سطحی دو پیکره
۲۷	۱-۷-۱- خواص بنیادی مواد فعال سطحی دو پیکره
۲۸	۱-۷-۲- مزایای مواد فعال سطحی دو پیکره نسبت به مواد فعال سطحی رایج
۲۹	فصل دوم: مواد مورد استفاده و روش‌های انجام کار
۳۰	۱-۱- مواد مصرفی و تجهیزات
۳۳	۱-۲- دستگاهها و روش‌های مورد استفاده
۳۳	۱-۲-۱- روش کشش سطحی
۳۸	۱-۱-۲-۲- روش حلقه
۴۱	۱-۲-۲-۲- روش هدایت سنجی
۴۳	۱-۲-۲-۳- تعیین CMC و درجه تفکیک یون مخالف از طریق هدایت سنجی
۴۷	فصل سوم: بررسی پارامترهای شیمی فیزیکی مخلوط مواد فعال سطحی در فاز میسلی
۴۸	۱-۳- مقدمه
۴۹	۱-۲-۳- تأثیر ساختار ماده فعال سطحی بر خواص فیزیکوشیمیایی خود تجمعی در فاز میسلی
۴۹	۱-۲-۲-۳- غلظت بحرانی میسل و درجه تفکیک یون مخالف
۵۱	۱-۲-۲-۳- طول زنجیر بر مقدار CMC و $\alpha$
۵۳	۱-۳-۲-۳- اثر گروه سر قطبی
۵۵	۱-۴-۲-۳- اثر کسر مولی TX-۱۰۰
۵۹	۱-۵-۲-۳- اثر دو پیکره شدن بر مقادیر CMC و $\alpha$
۶۰	۱-۶-۲-۳- مقایسه مقادیر CMC تجربی و مقادیر بدست آمده از مدل محلول ایده آل
۶۶	۱-۷-۲-۳- مقایسه داده‌های CMC بدست آمده از روش‌های کشش سطحی و هدایت سنجی

الف

۳-۳-بررسی برهمکنش مواد فعال سطحی در فاز میسلی.....	۶۷
۴-۳- تأثیر ساختار مواد فعال سطحی بر پایداری میسل مخلوط .....	۷۵
۴-۳-۱- اثر طول زنجیر ، گروه سر قطبی و افزایش کسر مولی TX-100 .....	۷۶
۴-۳-۲- اثر دوپیکره شدن ماده فعال سطحی بر انرژی آزاد گیبس فرآیند میسلی شدن.....	۷۸
۴-۳-۵- نتایج کلی.....	۷۸
<b>فصل چهارم: بررسی پارامترهای شیمی فیزیکی مخلوط مواد فعال سطحی دو فاز تک لایه</b>	<b>۸۱</b>
۴-۱- مقدمه.....	۸۲
۴-۲- تأثیر ساختار ماده فعال سطحی بر خواص فیزیکوشیمیایی خود تجمعی در فاز تک لایه.....	۸۳
۴-۲-۱- غلظت اضافی سطح.....	۸۳
۴-۲-۱-۱- اثر طول زنجیر هیدروکربنی .....	۸۵
۴-۲-۱-۲- اثر کسر مولی TX-100 .....	۸۷
۴-۲-۱-۲-۳- اثر گروه سر قطبی .....	۹۰
۴-۲-۱-۲-۴- اثر دو پیکره شدن .....	۹۰
۴-۲-۲- کمیت حداقل مساحت سطح $A_{min}$ و مقایسه آن با حداقل مساحت سطح در حالت ایده آل $A_{ideal}$ .....	۹۲
۴-۲-۳- فشار سطحی $\Pi_{CMC}$ .....	۹۶
۴-۳- بررسی برهمکنش مواد فعال سطحی در فاز تک لایه .....	۹۷
۴-۳-۱- پارامتر برهمکنش در سطح آب- هوا $\beta^{\delta}$ .....	۹۷
۴-۳-۲- کسر مولی در فاز تک لایه .....	۱۰۳
۴-۳- نتایج کلی.....	۱۰۵
<b>فهرست مراجع:</b> .....	<b>۱۰۸</b>
<b>پیوست.....</b>	<b>۱۱۳</b>

## فهرست شکل ها

شکل ۱-۱: نمونه ای از یک مولکول ماده فعال سطحی ..... ۲
شکل ۱-۲: چگونگی خارج شدن یک لکه چربی از الیاف پارچه توسط مواد فعال سطحی ..... ۵
شکل ۱-۳: اشکال هندسی مختلفی از نانو کریستالهای مس که بوسیله میسلهای معکوس تولید شده اند ..... ۵
شکل ۱-۴: طبقه بندی مولکولهای مواد فعال سطحی از نظر تعداد گروه سر قطبی، تعداد زنجیر هیدروکربنی و نحوه اتصال سر و دم، ..... ۹
شکل ۱-۵: فرایند تشکیل میسل با افزایش غلظت ماده فعال سطحی ..... ۱۱
شکل ۱-۶: نمودارهای تغییر خواص فیزیکی در برابر افزایش غلظت ماده فعال سطحی برای بدست آوردن CMC ..... ۱۳
شکل ۱-۷: اشکال سه بعدی ایجاد شده توسط فرآیند خود تجمعی ..... ۱۴
شکل ۱-۸: اشکال هندسی فرضی جهت بدست آوردن پارامتر فشردگی ..... ۱۵
شکل ۱-۹: به ترتیب از راست به چپ: مواد فعال سطحی رایج، بلا فرم، دوپیکره، سه شاخه و میسل دوپیکره ..... ۲۶
شکل ۱-۱۰: تصویر SEM از سیلیکای مزوپروس مکعبی که از طریق مواد فعال سطحی دو پیکره (به عنوان قالب مکعب ساز) که توسط زانگ و همکاران در سال ۲۰۰۲ تهیه شده است ..... ۲۸
طیف ۱-۲: طیف NMR از ماده فعال سطحی ۱۴-۴-۱۴ ..... ۳۲
شکل ۱-۳: نمایشی از برآیند نیروهای وارد بر مولکولهای آب در داخل و سطح محلول ..... ۳۴
شکل ۲-۱: حلقه سیمی با یک میله متحرک که باعث تشکیل فیلم نازکی از آب شده است ..... ۳۵
شکل ۲-۲: نحوه بدست آوردن CMC و $\alpha$ از طریق هدایت سنجی ..... ۴۳
شکل ۱-۳: فازهای موجود در محلول حاوی ماده فعال سطحی ..... ۴۹
شکل ۲-۳: برهمنکنش جاذبه $\pi-\pi$ بین حلقه های آروماتیک پیریدینیم ..... ۵۴
شکل ۳-۳: نمایشی از چگونگی نحوه کاهش CMC با افزایش کسر مولی TX-۱۰۰ ..... ۵۶
شکل ۴-۳: طرحی از آرایش مولکولهای ۱۴-۴-۱۴ در محلول (در این شکل واصل ها از هم جدا هستند) ..... ۷۰
شکل ۱-۴ الف: یک برش مکعبی از صفحه تک لایه ب: ابعاد مولکول ماده فعال سطحی ..... ۸۲
شکل ۲-۴: طرحی از تغییر $\Gamma_{\max}$ در اثر افزایش طول زنجیر (از چپ به راست $\Gamma_{\max}$ افزایش می یابد) ..... ۸۶
شکل ۳-۴ الف: مقطعی از تک لایه، ب: طرحی از اثر جایگزینی یک مولکول TX-۱۰۰ به جای یک مولکول C <sub>n</sub> TAB ..... ۸۸
شکل ۴-۴: الف: مولکولهای ماده فعال سطحی رایج و دو پیکره محصور شده در شکل هندسی مخروط و استوانه ب: نمایش تعداد مولکولهای ماده فعال سطحی رایج و دو پیکره در یک مساحت مشخص ..... ۹۱
شکل ۵-۴: مدلهای منظم و نامنظم چینش مولکولها در فاز تک لایه ..... ۹۲
شکل ۶-۴: طرحی از فیلم لانگمویر ..... ۹۷
شکل ۷-۴: چگونگی بدست آوردن $C_1^{\circ}$ , $C_2^{\circ}$ و $C_{12}^{\circ}$ برای محاسبه $\beta^{\delta}$ در فاز تک لایه از طریق رسم خط راست ..... ۹۹
شکل ۸-۴: اختلاف زوایای ایجاد شده در فازهای میسلی و تک لایه ..... ۱۰۰
شکل ۹-۴: مولکول ماده فعال سطحی که دارای شش پیکر می باشد ..... ۱۰۷

## فهرست نمودارها

نمودار ۲-۳ تغییرات درجه تفکیک یون مخالف مواد فعال سطحی رایج و دو پیکره ..... ۵۲
نمودار ۳-۱: تغییر مقادیر CMC بر حسب کسر مولی هومولوگهای $C_n$ TAB ( $\alpha_1$ ) در دمای ۲۵ درجه سانتیگراد ..... ۵۵
نمودار ۳-۲ تغییر مقادیر CMC بر حسب کسر مولی CPC و $C_{12}$ TAB ..... ۵۷
نمودار ۴-۳ تغییر مقادیر CMC بر حسب کسر مولی مواد دو پیکره برای مخلوطهای ۱۰۰-۱۲-TX-۱۰۰ و ۱۰۰-۱۴-TX-۱۰۰ در دمای ۲۵ درجه سانتیگراد ..... ۵۸
نمودار ۵-۳ مقایسه مقادیر $CMC_{exp}$ و $CMC_{ideal}$ برای مخلوط $C_{12}$ TAB/TX-۱۰۰ ..... ۶۳
نمودار ۶-۳ مقایسه مقادیر $CMC_{exp}$ و $CMC_{ideal}$ برای مخلوط $C_{12}$ TAB/TX-۱۰۰ ..... ۶۴
نمودار ۷-۳ مقایسه مقادیر $CMC_{exp}$ و $CMC_{ideal}$ برای مخلوط $C_{12}$ TAB/TX-۱۰۰ ..... ۶۴
نمودار ۸-۳ مقایسه مقادیر $CMC_{exp}$ و $CMC_{ideal}$ برای مخلوط $CPC$ TX-۱۰۰ ..... ۶۵
نمودار ۹-۳ مقایسه مقادیر $CMC_{exp}$ و $CMC_{ideal}$ برای مخلوط $CPC$ TX-۱۰۰ ..... ۶۵
نمودار ۱۰-۳ مقایسه مقادیر $CMC_{exp}$ و $CMC_{ideal}$ برای مخلوط $CPC$ TX-۱۰۰ ..... ۶۶
نمودار ۱۱-۳ مطابقت CMC بدست آمده از داده های کشش سطحی و هدایت ویژه برای ماده فعال سطحی خالص ۱۲-۴-۱۲ (تغییرات غلظت بصورت لگاریتمی می باشد) ..... ۶۷
نمودار ۱۲-۳ تغییرات پارامتر برهمنکش بر حسب تغییرات کسر مولی جزء کاتیونی در مواد فعال سطحی رایج ..... ۶۹
نمودار ۱۳-۳ مقادیر $\beta_{ave}^M$ در مخلوط مواد فعال سطحی رایج ..... ۶۹
نمودار ۱۴-۳ تغییرات پارامتر برهمنکش مواد فعال سطحی دو پیکره با تغییر کسر مولی جزء کاتیونی ..... ۷۱
نمودار ۱۵-۳ مقایسه مقادیر $\beta_{ave}^M$ در مخلوط مواد فعال سطحی رایج و دو پیکره ..... ۷۱
نمودار ۱۶-۳: تغییرات کسر مولی جزء کاتیونی ( $\alpha_1^m$ ) در فاز میسلی نسبت به تغییرات کسر مولی همان جزء در محلول ( $\alpha_1$ ) ..... ۷۳
نمودار ۱۷-۳ تغییرات انرژی آزاد گیبس تشکیل میسل با تغییر کسر مولی جزء کاتیونی مواد فعال سطحی رایج و دو پیکره ..... ۷۷
نمودار ۴-۱: تغییرات $\Gamma_{max}$ با تغییر طول زنجیر، گروه سر و پیکر مولکول ..... ۸۵
نمودار ۴-۲: تغییرات $\Gamma_{max}$ در مقابل تغییرات کسر مولی CPC (نمودار کوچکتر بر حسب کسر مولی TX-۱۰۰ رسم شده است) ..... ۸۹
نمودار ۴-۳: تغییرات $A_{min}$ در مقابل تغییرات کسر مولی CPC ..... ۹۳
نمودار ۴-۴: تغییرات طول زنجیر، گروه سر و پیکر مولکول ..... ۱۰۲
نمودار ۴-۵: تغییرات کسر مولی در فاز تک لایه بر حسب کسر مولی جزء کاتیونی در اثر تغییر طول زنجیر در مواد فعال سطحی رایج ..... ۱۰۳
نمودار ۴-۶: تغییرات کسر مولی در فاز تک لایه بر حسب کسر مولی جزء کاتیونی در اثر تغییر طول زنجیر در مواد فعال سطحی دو پیکره ..... ۱۰۴
نمودار ۴-۷: تغییرات کسر مولی در فاز تک لایه بر حسب کسر مولی جزء کاتیونی در اثر تغییر گروه سر ..... ۱۰۴
نمودار ۴-۸: تغییرات کسر مولی در فاز تک لایه بر حسب کسر مولی جزء کاتیونی در اثر تغییر گروه سر ..... ۱۰۵

## فهرست جداول

جدول ۱-۱ کاربردهای مواد فعال سطحی در صنایع مختلف.....	۴
جدول ۱-۲ طبقه‌بندی مواد فعال سطحی بر اساس HLB.....	۹
جدول ۱-۳ انواع مواد فعال سطحی یونی و غیریونی.....	۱۰
جدول ۱-۴: پارامتر فشردگی برای انواع ساختارها.....	۱۵
جدول ۱-۵ تغییر شکل تجمعات در اثر تغییر غلظت مشتقات فنول.....	۱۷
جدول ۱-۶ مقادیر دانسیته آلkanهای راست زنجیر.....	۵۱
جدول (۲-۳): مقادیر $\alpha$ و $CMC$ بر حسب کسر مولی جزء یونی در محلول در سیستم خالص و مخلوط از مواد فعال سطحی رایج و دوپیکره در دمای ۲۵ درجه سانتیگراد.....	۶۲
جدول (۳-۳): پارامتر برهمکنش بین مواد فعال سطحی کاتیونی و غیر یونی، ضریب فعالیت مواد فعال سطحی ۲۱ و ۷۴.....	
جدول (۴-۱) غلظت اضافی سطح، فشار سطحی، کمترین مساحت تجربی و ایده آل در سطح، تغییر انرژی آزاد جذب سطحی در فاز تک لایه، در سیستم خالص و مخلوط از مواد فعال سطحی رایج و دوپیکره در دمای ۲۵ درجه سانتیگراد.....	۹۵
جدول (۴-۴) مقادیر $Z_1^{\delta}$ ، ضرایب فعالیت مواد فعال سطحی و اختلاف بین $\beta'''$ و $\beta^{\delta}$ در فاز تک لایه در سیستم خالص و مخلوط از مواد فعال سطحی رایج و دوپیکره در دمای ۲۵ درجه سانتیگراد.....	۱۰۱

## پارامترهای موجود در متن

$\alpha$  درجه تفکیک یون مخالف

$\beta'''$  پارامتر برهمنکش در فاز میسلی

$\beta''$  پارامتر بر همکنش در فاز تک لایه

$\gamma$  کشش سطحی

$\gamma_0$  کشش سطحی حلال

$\gamma_{cmc}$  مقدار کشش سطحی در نقطه CMC

$\Gamma_{max}$  غلظت اضافی سطح

$\Pi_{cmc}$  فشار سطحی

$\omega_{AA}$  انرژی بر همکنش مولکولی بین ملکولهای ماده فعال سطحی A

$\omega_{BB}$  انرژی بر همکنش مولکولی بین دومین ماده فعال سطحی B

$A_{min}$  کمترین مساحت

$C_t$  غلظت ماده فعال سطحی

$C_1^0$  غلظت مولی ماده فعال سطحی ۱ در فاز محلول

$C_2^0$  غلظت مولی ماده سطحی ۲ در فاز محلول

$C_{12}^0$  غلظت مولی ماده فعال سطحی مخلوط در فاز محلول

CMC غلظت بحرانی تشکیل میسل

CMC<sub>۱</sub> غلظت بحرانی تشکیل میسل ماده ۱

CMC<sub>۲</sub> غلظت بحرانی تشکیل میسل ماده ۲

ضریب تصحیح F

$f_i$  ضریب فعالیت گونه i

G انرژی آزاد گیبس

$\Delta G_{mic}$  انرژی آزاد استاندارد تشکیل میسل

$\Delta G_{mix}$  انرژی آزاد مخلوط شدن

n تعداد ذرات حل شونده

$N_A$  عدد آوودگارو

R ثابت جهانی گازها

$R_c$  شعاع حلقه

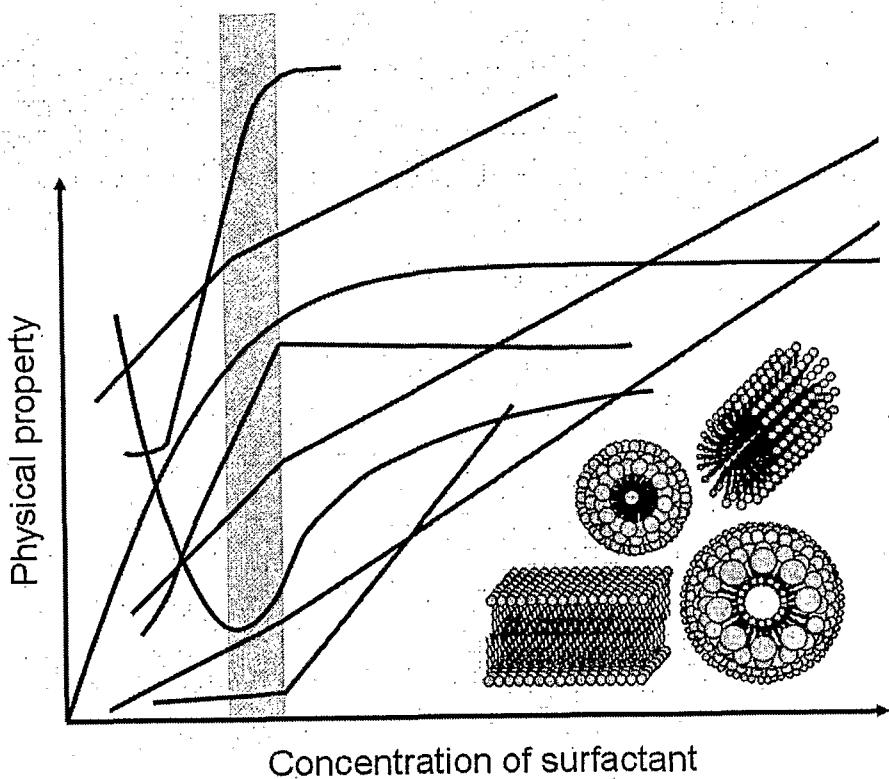
T دمای مطلق

$X_1^M$  کسر مولی ماده سطحی 1 در فاز میسلی

$Z_1^\delta$  کسر مولی ماده سطحی 1 در فاز تک لایه

# فصل اول

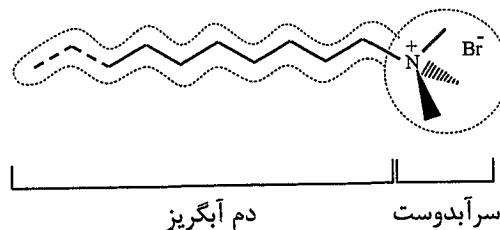
مقدمة



## ۱- مقدمه

### ۱-۱- خواص مواد فعال سطحی و کاربرد آنها

مواد فعال سطحی به علت طبیعت دوگانه آنها، یعنی داشتن بخش آبدوست و آبگریز خواص جالبی از خود نشان می‌دهند (شکل ۱-۱). بخش آبدوست (قطبی) دارای عناصر الکترونگاتیو از قبیل نیتروژن، اکسیژن، فسفر و ... و بخش آبگریز (غیر قطبی) شامل زنجیر هیدروکربنی می‌باشد. این امر منجر به کاربرد زیاد این مواد در صنایع مختلف، مخصوصاً در صنعت شوینده، صنعت بهداشت و داروسازی شده است. مواد فعال سطحی را می‌توان بصورت خالص و یا مخلوط بکار برد.



شکل ۱-۱: نمونه‌ای از یک مولکول ماده فعال سطحی (ترسیم شده در آزمایشگاه)

بررسی‌های بسیار نشان داده است که کارایی مخلوط مواد فعال سطحی به مراتب بیشتر از مواد فعال سطحی خالص است. کارایی بالای مخلوطها به علت وجود پدیده‌ای به نام هم افزایی<sup>۱</sup> در این مواد است. هم افزایی، به پارامتری به نام CMC (غلظت بحرانی میسل: غلظتی از ماده فعال

<sup>۱</sup> Synergism  
<sup>۲</sup> Critical Micelle Concentration

سطحی که در آن میسل تشکیل می‌شود) وابسته است. اگر CMC مخلوط، از میانگین CMC مواد خالص کمتر باشد، در مخلوط هم افزایی وجود دارد در غیر این صورت مخلوط هم افزایی منفی (آنتاگونیسم) دارد.

پارامتر مهم دیگری که در هم افزایی مؤثر است، پارامتر برهمکنش مولکولی است. این پارامتر بین اعداد  $+2$  تا  $-40$  متغیر می‌باشد. علامت مثبت نشان دهنده برهمکنش نامطلوب و علامت منفی نشان دهنده برهمکنش مطلوب است. بطور کلی دو شرط زیر برای وجود پدیده هم افزایی لازم است:

$$\beta_{12} < 0$$

$$\left| \ln \frac{CMC_1}{CMC_2} \right| < |\beta_{12}|$$

که  $CMC_1$  غلظت بحرانی میسلی جزء  $1$  و  $CMC_2$  غلظت بحرانی میسلی جزء  $2$  می‌باشد [۱].

دلایل زیر برای اهمیت بیشتر مخلوط مواد فعال سطحی نسبت به نوع خالص آنها، ارائه می‌شود.

۱- خالص سازی مواد فعال سطحی کاری بسیار دشوار است.

۲- از نظر فراوانی دسترسی به مخلوط مواد فعال سطحی بسیار بیشتر از خالص آنها است.

۳- مخلوطها نسبت به مواد خالص ارزان‌ترند.

۴- در مخلوط مواد فعال سطحی، پدیده هم افزایی وجود دارد که قبلاً به آن اشاره شد.

کاربرد بیشتر مخلوط مواد فعال سطحی یونی- غیر یونی نسبت به بقیه مخلوطها را می‌توان به تخریب پذیری زیستی، بالا بودن فعالیت سطحی، بالا تر بودن خواص کاتالیزی و خواص کف کنندگی و شویندگی نسبت داد [۲].

گستره کاربرد مواد فعال سطحی بسیار وسیع می‌باشد و این به خاطر خصوصیات سطحی و بین سطحی این مواد می‌باشد.

کاربردهای مختلف مواد فعال سطحی در جدول ۱-۲ گزارش شده اند [۳-۸].

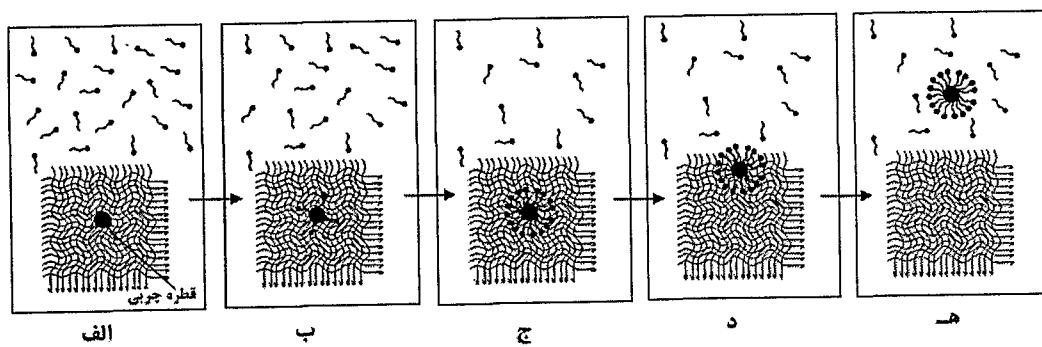
جدول ۱-۱ کاربردهای مواد فعال سطحی در صنایع مختلف [۳-۸]

۱	به عنوان حامل دارو <sup>۱</sup>
۲	در صنایع شوینده
۳	جهت استخراج ترکیبات
۴	غنى سازی کانیها به روش شناور سازی (به عنوان Collector)
۵	در متدهای حفاری نفت
۶	در روغن موتور اتومبیل ها به عنوان روان ساز
۷	در چاپگرهای الکترونیکی
۸	جهت رشد نانوذرات و نانوتیوبها و نیز برای پخش کردن نانوتیوبهای تک پوسته کربنی (TX-۱۰۰)
۹	در صفحات LCD (کریستال مایع)
۱۰	به عنوان بازدارنده خوردگی <sup>۲</sup> [۷]
۱۱	به صورت نانوکپسول متخلخل در واکنشهای nano scale
۱۲	انحلال پذیر کننده و انحلال ناپذیر کننده
۱۳	پایدار کننده <sup>۱</sup>
۱۴	عوامل ضد قارچ
۱۵	یکنواخت کننده رنگ و محافظت رنگدانه از واکنش با آب [۴]
۱۶	امولسیون کننده <sup>۲</sup>
۱۷	نرم کننده <sup>۳</sup> مواد [۸]
۱۸	جهت قالب دهی به نانوساختارها (برای مثال CTAB و TX-۱۰۰ به عنوان قالب استفاده شده اند) [۵ و ۶ و ۷]
۱۹	همیار علف کشها
۲۰	به عنوان میکروراکتور، برای تولید هیدروژن
۲۱	اصلاح کننده سطح
۲۲	استفاده از کف حاصل از مواد فعال سطحی در آتش نشانی

<sup>۱</sup> Drug delivery

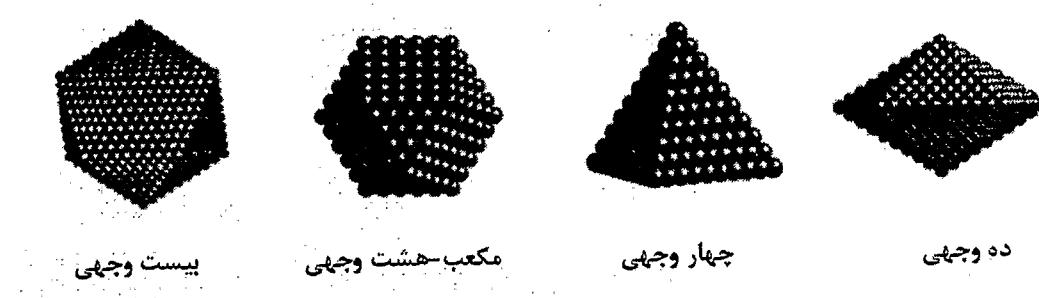
<sup>۲</sup> Corrosion inhibitor

یکی از مهمترین کاربرد مواد فعال سطحی در صنایع شوینده می باشد. نحوه عمل این مواد، برای جدا کردن مواد چربی از پارچه، همانطور که در شکل ۲-۱ نشان داده شده است، به این صورت است که ابتدا مونومرهای مواد فعال سطحی از طرف بخش آبگریز، اطراف قطره چربی را احاطه کرده سپس قطره چربی از پارچه جدا می شود و میسلی تشکیل می شود که در مرکز آن قطره چربی به دام افتاده است. در نهایت این فرآیند باعث پاک کنندگی پارچه می گردد [۹].



شکل ۱-۲: نحوه خروج لکه چربی از پارچه توسط مواد فعال سطحی (ترسیم شده در آزمایشگاه)

کاربرد دیگر مواد فعال سطحی، قالب دهی نانو ساختارها در صنعت نانوتکنولوژی می باشد.



شکل ۱-۳: اشکال هندسی نانو کریستالهای مس، که بوسیله میسلهای معکوس تولید شده اند [۱۰].

<sup>۱</sup> Stabilizer  
<sup>۲</sup> Emulsifier  
<sup>۳</sup> Plastisizer