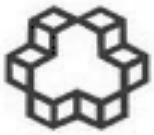
بسم الله الرحمن الرحیم



دانشکده علوم

پایان نامه دوره کارشناسی ارشد رشته شیمی (معدنی)

عنوان

سنتز و شناسایی نانوذرات اکسید فلزهای واسطه و کاربرد آن‌ها به عنوان کاتالیزور ناهمگن درسنتز ترکیبات اولیه دارویی

نگارنده:

زهرا نودهی

استاد راهنما:

دکتر فلورا حشمت پور

شهریور 92

بسمه تعالی

دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی تاسیس ۱۳۰۷	**تأییدیه هیأت داوران**	شماره: تاریخ:

هیأت داوران پس از مطالعه پایان‌نامه و شرکت در جلسه دفاع از پایان‌نامه تهیه شده تحت عنوان :

سنتز و شناسایی نانو ذرات اکسید فلزات واسطه و کاربردآن ها بعنوان کاتالیزور ناهمگن در سنتز ترکیبات اولیه دارویی

توسط خانم **زهرا نودهی** صحت و کفایت تحقیق انجام شده را برای اخذ درجه کارشناسی ارشد رشته **شیمی** گرایش **معدنی** در تاریخ **۱۳۹۲/۶/ ۳۰** مورد تأیید قرار می‌هند.

۱- استاد راهنمای اول	سرکار خانم	دکترفلورا حشمت پور	امضاء
۲- استاد راهنمای دوم	جناب آقـای	----------	امضاء
۲- استاد مشاور	سرکار خانم	----------	امضاء
۳- ممتحن داخلی	سرکار خانم	دکتربدری الزمان مومنی	امضاء
۴- ممتحن خارجی	سرکار خانم	دکترمیترا قاسم زاده	امضاء
۵- نماینده تحصیلات تکمیلی دانشکده	سرکار خانم	دکتربدری الزمان مومنی	امضاء

بسمه تعالی

تاسیس ۱۳۰۷ دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی	**اظهارنامه دانشجو**	شماره: تاریخ:

اینجانب **زهرا نودهی** دانشجوی کارشناسی‌ارشد رشته **شیمی** گرایش **معدنی**

دانشکده علوم دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی گواهی می‌نمایم که تحقیقات ارائه شده در پایان‌نامه با عنوان

سنتز و شناسایی نانو ذرات اکسید فلزات واسطه و کاربردآن ها بعنوان کاتالیزور ناهمگن در سنتز ترکیبات اولیه دارویی

با راهنمایی استاد محترم سرکار خانم **فلورا حشمت پور** و مشاوره توسط شخص اینجانب انجام شده و صحت واصالت مطالب نگارش شده در این پایان‌نامه مورد تأیید می‌باشد، و در مورد استفاده از کار دیگر محققان به مرجع مورد استفاده اشاره شده است. بعلاوه گواهی می‌نمایم که مطالب مندرج در پایان نامه تا کنون برای دریافت هیچ نوع مدرک یا امتیازی توسط اینجانب یا فرد دیگری در هیچ جا ارائه نشده است و در تدوین متن پایان‌نامه چارچوب (فرمت) مصوب دانشگاه را بطور کامل رعایت کرده‌ام.

امضاء دانشجو:

تاریخ: ۹۲/۷/۳

بسمه تعالی

تاسیس ۱۳۰۷ دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی	حق طبع و نشر و مالکیت نتایج	شماره: تاریخ:

۱- حق چاپ و تکثیر این پایان‌نامه متعلق به نویسنده آن می‌باشد. هرگونه کپی برداری بصورت کل پایان‌نامه یا بخشی از آن تنها با موافقت نویسنده یا کتابخانه دانشکده علوم دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی مجاز می‌باشد.

ضمناً متن این صفحه نیز باید در نسخه تکثیر شده وجود داشته باشد.

۲- کلیه حقوق معنوی این اثر متعلق به دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی می‌باشد و بدون اجازه کتبی دانشگاه به شخص ثالث قابل واگذاری نیست.

همچنین استفاده از اطلاعات و نتایج موجود در پایان نامه بدون ذکر مراجع مجاز نمی‌باشد.

* توجه:

این فرم می‌بایست پس از تکمیل، در نسخ تکثیر شده قرار داده شود.

چکیده

در این پروژه، نانوذرات تیتانیوم‌دی‌اکسید با استفاده از روش میکروامولسیون کمک شده با مایکروویو سنتز شدند. اندازه بلور، شکل و ساختار نانوذرات به‌دست‌آمده به وسیله پارامترهایی از قبیل نسبت مولی آب/ سورفکتانت، فاز روغنی (تک فاز و دو فاز روغنی) و تکنیک‌های اختلاط (تابش التراسونیک و هم‌زن مغناطیسی) بهینه شدند. بر این اساس نشان داده شده است که کاهش نسبت مولی آب / سورفکتانت، در حضور تک فاز روغنی و تحت تابش التراسونیک منجر به تشکیل ذرات کوچک‌تر با تبلور بهتر شده است. با توجه به نتایج بهترین محصول مربوط به استفاده از نسبت مولی آب/ سورفکتانت 2، در حضور فاز روغنی سیکلوهگزان و تحت تابش التراسونیک می‌باشد.

ساختار، اندازه بلور و مورفولوژی ذرات تهیه شده با شرایط مختلف، به وسیله روش‌های FT-IR، XRD، SEM و TEM مورد شناسایی قرار گرفت. با توجه به نتایج FT-IR، پیک‌های موجود در محدوده‌ی cm^{-1} 400-650 نشان‌دهنده حضور پیوند Ti–O–Ti می‌باشد. در ادامه ساختار این ترکیب به وسیله بلورنگاری پرتو- X تعیین شد، پنج پیک موجود در ناحیه‌های (2θ) 25، 38، 48، 55 و 63 نشان‌دهنده تشکیل فاز آناتاز می‌باشد. نتایج SEM نشان می‌دهد که ذرات یکنواخت با مورفولوژی کروی پراکنده شده‌اند. اندازه ذرات بدست‌آمده با معادله دبای- شرر 10 nm می‌باشد که به وسیله نتایج TEM تائید شده است. در نهایت، فعالیت کاتالیزوری TiO_2 در واکنش ایندول با بنزآلدئید مورد بررسی قرار گرفت. بهترین نتیجه استفاده از 20 مول درصد TiO_2 در شرایط بدون حلال به‌دست آمد.

فهرست مطالب

عنوان **صفحه**

فصل اول: مقدمه

1-1- نانومواد و خواص آن‌ها 17

2-1- بررسی ساختار و خواص تیتانیوم دی اکسید 20

3-1- استحاله فازی..... 24

4-1- نانوذرات تیتانیوم دی اکسید 24

5-1- روشهای سنتز نانوذرات تیتانیوم دی اکسید 25

1-5-1- روش سل- ژل..... 25

6-1- مروری بر تحقیقات انجام شده در زمینه ی سنتز نانوذرات تیتانیوم دی اکسید 31

7-1- کاربرد کاتالیزورهای ناهمگن در سنتز ترکیبات اولیه دارویی 36

1-7-1-کاربرد تیتانیوم‌دی‌اکسید در سنتز ترکیبات بیس (ایندول) متان‌ها..... 38

8-1- شناسایی نانوذرات 40

1-8-1- شناسایی به وسیله پراش پرتو-X 40

2-8-1- شناسایی به وسیله میکروسکوپ الکترونی روبشی 41

فصل دوم: بخش تجربی

2- 1- موادشیمیایی مورد نیاز 44

2- 2- دستگاه های مورد استفاده 44

2-2-1- دستگاه FE-SEM 44

2-2-2- دستگاه TEM 44

2-2-3- دستگاه XRD 44

2-2-4- دستگاه IR 44
2-2-5- دستگاه التراسونیک 44
2-2-6- دستگاه مایکروویو 45
2-3 - بخش سنتز..... 45
2-3-1- سنتز نانوذرات TiO_2 با نسبت مولی آب/سورفکتانت 2، فاز روغنی سیکلوهگزان (نمونه های الف، ب)..... 45
2-3-3- سنتز نانوذرات TiO_2 با نسبت مولی آب/سورفکتانت 3، فاز روغنی سیکلوهگزان (نمونه های ث، ج)..... 49
2-3-4- تولید نانوذرات TiO_2 با نسبت مولی آب/سورفکتانت 3، فاز روغنی سیکلوهگزان/ سیکلودکان (نمونه های چ، ح) 50
2-3-5- سنتز نانوذرات TiO_2 با نسبت مولی آب/سورفکتانت 4، فاز روغنی سیکلوهگزان (نمونه های د، ر)..... 50
2-3-6- سنتز نانوذرات TiO_2 با نسبت مولی آب/سورفکتانت 4، فاز روغنی سیکلوهگزان/ سیکلودکان (نمونه های و، ی)..... 51
2- 4- بخش کاربرد..... 53
2- 4 -1 - سنتز بیس (ایندول) متان ها..... 53
فصل سوم: بحث و نتیجه گیری
3-1- مقدمه..... 56
3-2-1- بررسی طیف FT-IR..... 56
3-2-2- بررسی الگوی پراش اشعه ایکس (XRD) 57
3-2-3- بررسی تصاویر FE-SEM 60
3-2-4- بررسی توزیع اندازه ذرات 61
3-3- سنتز نانوذرات TiO_2 با نسبت مولی آب/سورفکتانت 2، فاز روغنی سیکلوهگزان/ سیکلودکان 63

3-3-1- بررسی الگوی پراش اشعه ایکس (XRD)..... 63
3-3-2- بررسی تصاویر FE-SEM 64
3-3-3- بررسی توزیع اندازه ذرات 65
3-4- سنتز نانوذرات TiO_2 با نسبت مولی آب/سورفکتانت 3، فاز روغنی سیکلوهگزان (نمونه های ث، ج)..... 66
3-4-1- بررسی الگوی پراش اشعه ایکس (XRD) 66
3-4-2- بررسی تصاویر FE-SEM 67
3-4-3- بررسی توزیع اندازه ذرات 68
3-5- سنتز نانوذرات TiO_2 با نسبت مولی آب/سورفکتانت 3، فاز روغنی سیکلوهگزان/ سیکلودکان 70
3-5-1- بررسی تصاویر FE-SEM 70
3-5-2- بررسی توزیع اندازه ذرات 71
3-6- سنتز نانوذرات TiO_2 با نسبت مولی آب/ سورفکتانت 4، فاز روغنی سیکلوهگزان (نمونه های د، ر)..... 72
3-6-1- بررسی الگوی پراش اشعه ایکس (XRD) 72
3-6-2- بررسی تصاویر FE-SEM 73
3-6-3- بررسی توزیع اندازه ذرات..... 74
3-7- بررسی تاثیر پارامترهای متغیر 76
3-8- بررسی تصاویر TEM 81
3-9- سنتز بیس (ایندول) متان‌ها..... 82
3-10- نتیجه گیری..... 87
فهرست مراجع..... 89

فهرست جداول

عنوان **صفحه**

فصل اول

جدول (1-1) برخی از خواص فیزیکی فازهای آناتاز و روتایل 9

فصل دوم

جدول (1-2) نانوذرات تیتانیوم‌دی‌اکسید تهیه شده با نسبت مولی آب/ سورفکتانت 2 34

جدول (2-2) نانوذرات تیتانیوم‌دی‌اکسید تهیه شده با نسبت مولی آب/ سورفکتانت 3 35

جدول (3-2) نانوذرات تیتانیوم‌دی‌اکسید تهیه شده با نسبت مولی آب/ سورفکتانت 4 36

جدول (4-2) تمام نمونه‌های سنتز شده 37

جدول (5-2) واکنش‌های کاتالیزوری TiO_2 با آلدئیدها 39

فصل سوم

جدول (1-3) اندازه نانوذرات تیتانیوم‌دی‌اکسید با استفاده از پراش XRD (نمونه های (الف)، (ث) و (د)..... 62

جدول (2-3) اندازه نانوذرات تیتانیوم‌دی‌اکسید با استفاده از پراش XRD (نمونه های (الف)، (پ)) 64

جدول (3-3) اندازه نانوذرات تیتانیوم‌دی‌اکسید با استفاده از پراش XRD (نمونه های (الف)، (ب))..... 65

جدول (4-3) اثر شرایط واکنش کاتالیزوری با TiO_2 ،بنزآلدئید (1 مول) و ایندول (2 میلی مول)، بدون حضور حلال 70

جدول (3-5) واکنش‌های کاتالیزوری تیتانیوم دی اکسید با آلدئیدها 71

فهرست اشکال

عنوان **صفحه**

فصل اول

شکل (1-1) نحوه آرایش هشت‌وجهی‌های TiO_6 در سه فاز روتایل، آناتاز و بروکیت 5

شکل (1-2) ساختار سلول واحد آناتاز 6

شکل (1-3) ساختار سلول واحد روتایل 7

شکل (1-4) تصویر شمایی از فرایند سل- ژل 11

شکل (1-5) ساز و کار پیشنهادی جهت تشکیل نانوذرات از محلول میکروامولسیون 12

شکل (1-6) نمایی از گسترده‌ترین نوع روش میکروامولسیون 13

شکل (1-7) تصویر SEM نانوذرات پوسته کروی 14

شکل (1-8) تصویر SEM نانوذرات کروی تیتانیوم‌دی‌اکسید 15

شکل (1-9) تصویر SEM نانوذرات تیتانیوم‌دی‌اکسید سنتز شده در حضور ژلاتین 16

شکل (1-10) تصویر SEM نانوذرات تیتانیوم‌دی‌اکسید 16

شکل (1-11) سنتز بیس (ایندول) متان‌ها با استفاده از کاتالیزور TiO_2 21

فصل دوم

شکل (2-1) روش سنتز نانوذرات TiO_2 با نسبت مولی آب/ سورفکتانت 2، فاز روغنی سیکلوهگزان .. 29

شکل (2-2) روش جداسازی نانوذرات تیتانیوم‌دی‌اکسید 30

شکل (2-3) روش سنتز نانوذرات TiO_2 با نسبت مولی آب/ سورفکتانت 2، فاز روغنی سیکلوهگزان/ سیکلودکان 31

شکل (2-4) سنتز بیس ایندول متان‌ها با استفاده از کاتالیزور TiO_2، در شرایط بدون حلال و تحت دمای 80 ℃ ۳۵

فصل سوم

شکل (3-1) الگوی FT-IR، TiO_2 سنتز شده با نسبت مولی آب/ سورفکتانت 2، فاز روغنی سیکلوهگزان، تحت تابش التراسون 38

شکل (3-2) تصویر الگوی پراش اشعه ایکس (XRD)، TiO_2 سنتز شده با نسبت مولی آب/ سورفکتانت 2، فاز روغنی سیکلوهگزان، تحت تابش التراسون 39

شکل (3-3) تصویر الگوی پراش اشعه ایکس (XRD)، TiO_2 سنتز شده با نسبت مولی آب/ سورفکتانت 2، فاز روغنی سیکلوهگزان، تحت هم‌زن مغناطیسی 40

شکل (3-4) تصویر FE-SEM، TiO_2 سنتز شده با نسبت مولی آب/ سورفکتانت 2، فاز روغنی سیکلوهگزان، تحت تابش التراسونیک 41

شکل (3-5) تصویر FE-SEM، TiO_2 سنتز شده با نسبت مولی آب/ سورفکتانت 2، فاز روغنی سیکلوهگزان، تحت هم‌زن مغناطیسی 42

شکل (3-6) نمودار توزیع اندازه ذرات نمونه‌های سنتز شده با نسبت مولی آب/ سورفکتانت 2، فاز روغنی سیکلوهگزان، (الف) تحت تابش التراسون، (ب) تحت هم‌زن مغناطیسی 43

شکل (3-7) تصویر الگوی پراش اشعه ایکس (XRD)، TiO_2 سنتز شده با نسبت مولی آب/ سورفکتانت 2، فاز روغنی سیکلوهگزان/ سیکلودکان، تحت تابش التراسونیک 44

شکل (3-8) تصویر SEM، TiO_2 سنتز شده با نسبت مولی آب/ سورفکتانت 2، فاز روغنی سیکلوهگزان/ سیکلودکان، تحت تابش التراسونیک 45

شکل (3-9) نمودار توزیع اندازه ذرات TiO_2 سنتز شده با نسبت مولی آب/ سورفکتانت 2، فاز روغنی سیکلوهگزان/ سیکلودکان، تحت تابش التراسونیک 46

شکل (3-10) تصویر الگوی پراش اشعه ایکس (XRD)، TiO_2 سنتز شده با نسبت مولی آب/ سورفکتانت 3، فاز روغنی سیکلوهگزان، تحت تابش التراسونیک 47

شکل (3-11) تصویر FE-SEM، TiO_2 سنتز شده با نسبت مولی آب/ سورفکتانت 3، فاز روغنی سیکلوهگزان، تحت تابش التراسونیک 48

شکل (3-12) تصویر FE-SEM، TiO_2 سنتز شده با نسبت مولی آب/ سورفکتانت 3، فاز روغنی سیکلوهگزان، تحت هم‌زن مغناطیسی 49

شکل (3-13) نمودار توزیع اندازه ذرات نمونه‌های سنتز شده با نسبت مولی آب/ سورفکتانت 3، فاز روغنی سیکلوهگزان، (ث) تحت تابش التراسون، (ج) تحت هم‌زن مغناطیسی 50

شکل (3-14) تصویر FE-SEM، TiO_2 سنتز شده با نسبت مولی آب/ سورفکتانت 3، فاز روغنی سیکلوهگزان/ سیکلودکان، تحت تابش التراسونیک 51

شکل (3-15) نمودار توزیع اندازه ذرات TiO_2 سنتز شده با نسبت مولی آب/ سورفکتانت 3، فاز روغنی سیکلوهگزان/ سیکلودکان، تحت تابش التراسونیک 52

شکل (3-16) تصویر الگوی پراش اشعه ایکس (XRD)، TiO_2 سنتز شده با نسبت مولی آب/ سورفکتانت 4، فاز روغنی سیکلوهگزان، تحت تابش التراسونیک 53

شکل (3-17) تصویر FE-SEM، TiO_2 سنتز شده با نسبت مولی آب/ سورفکتانت 4، فاز روغنی سیکلوهگزان، تحت تابش التراسونیک 54

شکل (3-18) نمودار توزیع اندازه ذرات TiO_2 سنتز شده با نسبت مولی آب/ سورفکتانت 4، فاز روغنی سیکلوهگزان، تحت تابش التراسونیک 55

شکل (3-19) تصویر TEM، TiO_2 سنتز شده با نسبت مولی آب/ سورفکتانت 2، فاز روغنی سیکلوهگزان، تحت تابش التراسونیک 56

شکل (3-20) تصویر الگوی پراش اشعه ایکس (XRD)، TiO_2 سنتز شده با نسبت مولی آب/ سورفکتانت مختلف (الف) نسبت مولی 2 ، (ث) نسبت مولی 3 و (خ) نسبت مولی 4 ، در حضور تک فاز روغنی، تحت تابش التراسونیک 57

شکل (3-21) تصویر الگوی پراش اشعه ایکس (XRD)، TiO_2 سنتز شده با فازهای روغنی مختلف (الف) سیکلوهگزان (پ) سیکلوهگزان/ سیکلودکان (1:3)، نسبت مولی آب/ سورفکتانت 2، تحت تابش التراسونیک 58

شکل (3-22) تصویر الگوی پراش اشعه ایکس (XRD)، TiO_2 سنتز شده با تکنیک‌های اختلاط مختلف (الف) تحت امواج التراسونیک (ب) تحت هم‌زن مغناطیسی، نسبت مولی آب/ سورفکتانت 2، در حضور تک فاز روغنی 59

شکل (3-23) سنتز بیس ایندول متان‌ها با استفاده از کاتالیزور TiO_2، در شرایط بدون حلال و تحت دمای 80℃ 61

شکل (3-24) مکانیسم سنتز بیس (ایندول) متان‌ها 65

فصل اول

مقدمه

1-1- نانومواد و خواص آن‌ها

پیشوند نانو در اصل یک کلمه یونانی است. معادل لاتین این کلمه، Dwarf است که به معنی کوتوله و کوتاه قد است. واحد نانو یک میلیاردیم متر است. قطر تار موی انسان تقریبا 75000 نانومتر است. اگر 10 اتم هیدروژن به دنبال هم قرار گیرند برابر یک نانومتر است [1]. هنگامی‌که گروهی از اتم‌ها تجمع یافته و چند خوشه نانومتری را تشکیل دهند، زمینه تشکیل نانوذرات فراهم گردیده و از به‌هم پیوستن چند خوشه نانومتری، نانوذرات تشکیل می‌گردند.

نانو مواد، موادی هستند که دارای اندازه ذرات آن‌ها در یک بعد حداقل بین 1 تا 100 نانومتر می‌باشند. این مواد از تجمع خوشه‌های متشکل از اتم‌های یک عنصر یا مخلوطی از عناصر مختلف تشکیل شده‌اند. طبقه‌بندی براساس ابعاد را می‌توان کلی‌ترین نوع طبقه‌بندی به‌شمار آورد. در این طبقه‌بندی مواد و ساختارهای نانومتری را براساس نسبت ابعاد در راستای محورهای مختصاتی که واحد محورها در آن براساس 20 نانومتر در نظر گرفته می‌شود، طبقه‌بندی می‌کنند که شامل 4 گروه زیر می‌باشند:

1. مواد صفر بعدی[1] که گروهی از نانومواد هستند که در هیچ راستایی اندازه آن‌ها به 20 نانومتر نمی‌رسد مانند کلاسترهای اتمی
2. مواد یک بعدی[2] که تنها در یک راستا دارای اندازه‌ای از 20 نانومتر می‌باشند مانند فیبرهای نانومتری (نانوالیاف)
3. مواد دو بعدی[3] که تنها در دو راستای طولی بیش از 20 نانومتر می‌باشند مانند صفحاتی با ضخامت نانومتر
4. مواد سه بعدی[4] که در هر سه راستا دارای اندازه بیشتر از 20 نانومتر می‌باشند [2].

[1] Zero- Dimensionality Modulation
[2] One- Dimensionality Modulation
[3] Two- Dimensionality Modulation
[4] Three- Dimensionality Modulation

به‌طور کلی می‌توان گفت دو ویژگی مهم که مواد نانو را از دیگر گروه‌ها متمایز می‌سازد عبارتند از افزایش سطح مواد و تاثیرات کوانتومی. این عوامل می‌توانند باعث ایجاد تغییرات و یا به‌وجود آمدن خواص ویژه‌ای مانند تاثیر در واکنش‌ها، مقاومت مکانیکی و مشخصه‌های ویژه الکتریکی در نانو مواد می-شوند. همان‌گونه که اندازه این مواد کاهش می‌یابد، تعداد بیشتری از اتم‌ها در سطح قرار خواهند گرفت، در نتیجه سطح ویژه ترکیب بیشتر شده و موجب افزایش واکنش با آن‌ها می‌شود. در این‌جا تغییر در برخی از خواص مواد به‌طور خلاصه مطرح شده است.

- خواص ترمودینامیکی:

تغییر در انرژی آزاد سطح، اندازه پتانسیل شیمیایی را تغییر می‌دهد و این امر در خواص ترمودینامیکی ماده مانند نقطه ذوب تاثیر می‌گذارد [3].

- خواص الکتریکی:

افزایش هدایت الکتریکی در سرامیک‌ها و نانوکامپوزیت‌های مغناطیسی و افزایش مقاومت الکتریکی در نانوفلزات.

- خواص مکانیکی:

خواص مکانیکی همچون سختی و استحکام مکانیکی کاملا به اندازه ذرات وابسته می‌باشد. برای مثال، نانوتیوب‌های کربنی تک دیواره و چند دیواره دارای قدرت مکانیکی و ارتجاعی بالایی می-باشند [4].

- خواص نوری:

در نانوشبکه‌های کوچک، اثر کاهش اندازه بر روی ساختار الکترونی، بیشترین تاثیر را بر روی بالاترین (نوار ظرفیت) و پایین‌ترین (نوار هدایت) اوربیتال مولکولی اشغال شده دارد. نشر و جذب نوری وابسته به انتقالات الکترونی بین این حالت‌ها می‌باشد [5].

- خواص کاتالیزوری:

با کوچک شدن سایز ذرات، نسبت سطح به حجم افزایش یافته و بدین ترتیب برخی خواص کاتالیزوری بهبود می‌یابد.

در سال‌های اخیر، سنتز نانوذرات اکسیدهای فلزی به علت خواص نوری، الکترونیکی و قابلیت چگالش بهتر، بسیار مورد توجه قرار گرفته است. در این میان نانوذرات تیتانیوم‌دی‌اکسید خواص الکتریکی، نوری، فوتوکاتالیزوری و کاتالیزوری خوبی از خود نشان داده‌اند [6]. کاربرد و کارایی تیتانیوم دی اکسید به شدت تحت تاثیر ساختار بلوری، شکل و اندازه‌ی ذرات آن است [7]. بنابراین تلاش‌های بسیار زیادی برای تولید نانوذرات TiO_2 با اندازه، شکل و تخلخل کنترل شده جهت استفاده در لایه‌های نازک، سرامیک‌ها، کامپوزیت‌ها و کاتالیست‌ها صورت گرفته است [8] . تیتانیوم دی اکسید ماده‌ای است که در زمینه‌های گوناگونی چون رنگ‌ها، پلاستیک‌ها، مواد آرایشی، جوهرها، کاغذها و سنسورها کاربرد دارد [9-10]. افزایش کاربرد نانوذرات تیتانیوم دی اکسید در زمینه‌های کاتالیزوری، فوتوکاتالیزوری و سنسورها نیاز به استفاده از تجهیزات دقیق برای سنتز آن‌ها را تشدید نموده است [9].

1-2- بررسی ساختار و خواص تیتانیوم‌دی‌اکسید

1-2-1- خواص فیزیکی و شیمیایی تیتانیوم‌دی‌اکسید

تیتانیوم‌دی‌اکسید، اکسید طبیعی فلز با فرمول شیمیایی TiO_2 است که با عنوان تیتانیوم (IV) اکسید یا تیتانیا نیز شناخته می‌شود. تیتانیوم‌دی‌اکسید یک نیمه‌هادی از نوع n (n-type) است. این ماده به‌عنوان یکی از مهم‌ترین نیمه‌هادی‌ها محسوب می‌گردد که به دلیل خنثی بودن، مقاومت شیمیایی بالا، پایداری مکانیکی بالا، قیمت پائین و غیر سمی بودن آن در دو دهه گذشته به‌عنوان یک کاتالیزور نوری مطلوب برای تصفیه آب و هوا به‌کار گرفته شده است. تیتانیوم‌دی‌اکسید در آب، هیدروکلریک اسید، سولفوریک اسید رقیق و حلال‌های آلی نامحلول، ولی در هیدروفلوئوریک اسید و سولفوریک اسید غلیظ و داغ به راحتی حل می‌شود [12-11].

1-2- 2- ساختارهای تیتانیوم‌دی‌اکسید

تیتانیا دارای چندین شکل بلوری می‌باشد. ساختارهای بلوری آن روتایل[1]، آناتاز[2] و بروکیت[3] می‌باشند. واحدهای پایه بلوری در هر سه فاز هشت وجهی TiO_6 می‌باشند [13]. تفاوت این سه فاز در نحوه آرایش این هشت وجهی‌هاست (شکل 1-1). از دیگر چندشکلی‌های تیتانیوم‌دی‌اکسید می‌توان به پروسکیت[4]، بادلیت[5]، کولومبیت[6]، هولاندیت[7]، پیراتیت[8] و غیره اشاره کرد.

[1] Rutile
[2] Anatase
[3] Brookite
[4] Provskite
[5] Baddeleyite
[6] Columbite
[7] Heulandite
[8] Pyratite