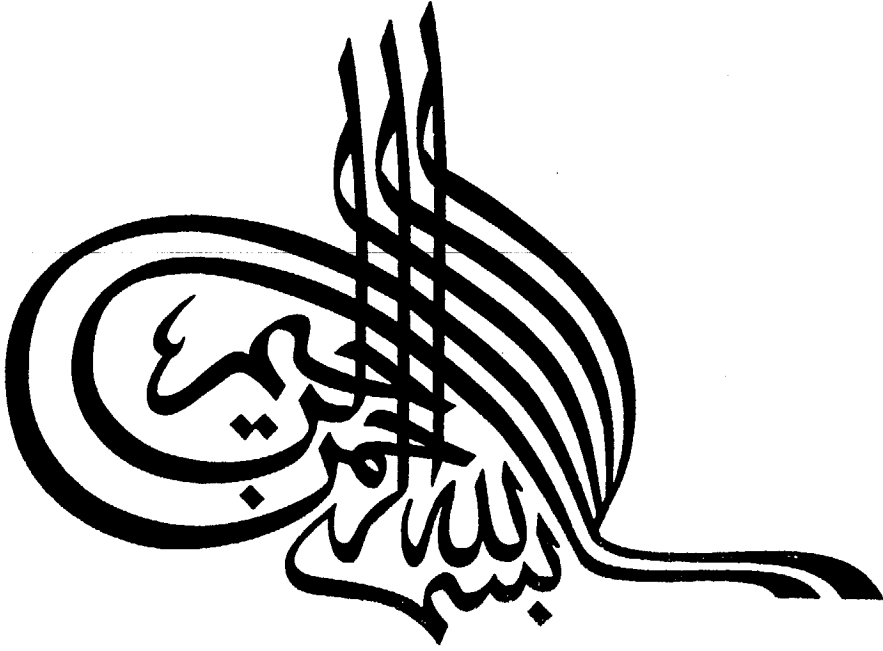


۴۹۰۲  
سازمان اسناد و کتابخانه ملی



۳۶۳۹۹

وزارت اطلاعات آذربایجان  
تیمبک  
وزارت اطلاعات آذربایجان  
تیمبک



دانشگاه تربیت مدرس  
دانشکده علوم پایه  
بخش شیمی

۱۳۸۰ / ۷ / ۲۰

پایان نامه کارشناسی ارشد رشته شیمی فیزیک

**مطالعه سیستمهای سورفکتانت با اسپکتروسکوپی NMR**

**به روش PFG**

013326

۳۷ ۳۹۹

**جواد بهشتیان**

استاد راهنما :

دکتر ناصر هادیپور

استاد مشاور :

دکتر حسین غریبی

تابستان ۱۳۸۰

سوکند نامه دانش آموختگان دانشگاه تربیت مدرس



بِسْمِ اللّٰهِ الرَّحْمٰنِ الرَّحِیْمِ

كُوْنُوْا رِبّٰیْنِیْنَ بِمَا كُنْتُمْ تُعَلِّمُوْنَ الْكِتٰبَ وَبِمَا كُنْتُمْ تَدْرُسُوْنَ<sup>۱</sup>

الکون که با عنایات و الطاف بکران الهی و بابرہ مندی از نعمت‌های شما را و

تحصیلاتم را در این دانشگاه به پایان برده‌ام و در آستانه مرحله جدیدی از ایفای وظیفه خطیر

علمی قرار دارم در برابر قرآن کریم<sup>۲</sup>، به خداوند قادر متعال که برپیدا و پنهان آگاه

است، بگویند یاد می‌کنم که همواره در عمل به وظایف آموزشی، پژوهشی و اجتماعی در صدد

کسب رضای او، تعالی انسانها و وفاداری به آرمانهای والای انقلاب اسلامی

و شکرزار ملت شریف ایران باشم و خداوند بزرگ را در همه حال، ناظر بر رفتار و کردار

خود بدانم.

اللّٰهُمَّ اَنْفَعْنِیْ بِمَا عَلَّمْتَنِیْ، وَ عَلَّمْنِیْ مَا یَنْفَعُنِیْ وَ زِدْنِیْ عِلْمًا وَ الْحَمْدُ لِلّٰهِ عَلٰی کُلِّ حَالٍ<sup>۳</sup>

۱- علّامی دین با شیبب آنگه که تبیین می‌داد و در آنگاه که در دین می‌خوانید (آل عمران- ۷۱)

۲- اقلیت‌های دینی در برابر کتاب آسمانی خود می‌گویند که کرده، درین مورد اعتقاد خود را بانه می‌برند

۳- بارضایا ابراهام دانشی که برین آموختی خود را بزرگواران و در راهی جنون ساز که مراد خود است خداوند متعال را در کتاب و آنگاه برین بزرگوار

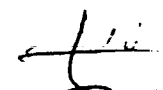

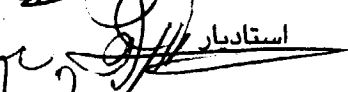

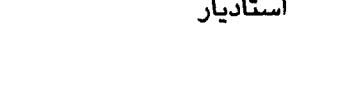
پاسخ می‌دهد تمام حالات از آن خداوند متعال است. (آداب تبیین و علم در اسلام ص ۲۸۶)

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

اعضای هیئت داوران نسخه نهایی پایان نامه خانم/ آقای جواد بهشتیان

تحت عنوان: مطالعه سیستمهای سورفکتانت با اسپکتروسکوپی NMR به روش PFG

را از نظر فرم و محتوات بررسی نموده و آنرا برای اخذ درجه درجه کارشناسی ارشد مورد تایید قرار دادند.

اعضای هیأت داوران	نام و نام خانوادگی	رتبه علمی	امضاء
۱- استاد راهنما	آقای دکتر ناصر هادیپور	استادیار	
۲- استاد مشاور	آقای دکتر حسین غریبی	دانشیار	
۳- استاد ناظر	آقای دکتر هادی زمانپور	استادیار	
۴- استاد ناظر	آقای دکتر حسین نادری منش	استادیار	
۵- نماینده تحصیلات تکمیلی	آقای دکتر حسین نادری منش	استادیار	



بسمه تعالی

## 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) ی خود، مراتب را قبلاً 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  
که در سال در دانشکده دانشگاه تربیت مدرس به راهنمایی سرکار خانم / جناب  
آقای دکتر ، مشاوره سرکار خانم / جناب آقای دکتر ، مشاوره سرکار  
خانم / جناب آقای دکتر 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 در معرض فروش قرار دهد.

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

ماده ۵ دانشجوی 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 توقیف کتابهای عرضه شده نگارنده برای فروش، تأمین نماید.

ماده ۶ اینجانب جواد بهمنیان دانشجوی رشته سیمیناریس  
مقطع کارشناسی ارشد قطعاً  
تعمد فوق  
و ضمانت اجرایی آن را قبول کرده، به آن ملتزم می شوم.

نام و نام خانوادگی: جواد بهمنیان

تاریخ و امضا: ۱۳۸۰/۰۶/۱۴

تقديم به :

ره پويان صراط معرفت و حقيقت

پدر و مادر عزيزم که همواره جرعه نوش دريای  
بيکران محبتشان هستم.

برادران و خواهرم که همواره مشوق من بوده‌اند.

همسر عزيز و فداکارم به پاس همياريهای بي دریغ  
و صبر شکیبایش.

## به نام آنکه جان را فکرت آموخت

حمد و ستایش مخصوص اوست که آدمی را خلق کرد و به نور علم و معرفت، هدایت و به زیور حلم، زینت بخشید و درود و صلوات بر پیامبر اکرم (ص) که پیامبر رحمت است و چراغ هدایت و سلام بر ائمه معصومین (ع) که مقتدای امتند و درود و صلوات بر ولیعصر حضرت حجت بن الحسن العسگری (عج).

بر خود فرض می‌دانم که از استاد گرانقدر و عزیز جناب آقای دکتر ناصر هادیپور که راهنمایی این پایان‌نامه را بر عهده داشته و همواره در مراحل پژوهش هدایتگر این تحقیق بوده‌اند کمال تشکر را بنمایم، همچنین از استاد ارجمند جناب آقای دکتر حسین غریبی که امر مشاوره این پایان‌نامه را عهده‌دار بوده‌اند تشکر و قدردانی می‌نمایم، از اساتید گرانقدر آقایان دکتر نادری‌منش و دکتر زمانپور که به عنوان ناظر در جلسه دفاع حضور یافته و نوشته اینجانب را اصلاح فرموده‌اند، تشکر و قدردانی می‌نمایم، همچنین از همفکری و همیاری دوستان گرامی آقایان حجتی، عرفانی، حاج‌حسینی و بیژن‌زاده در طول اجرای پایان‌نامه، تشکر و قدردانی می‌نمایم. در پایان از تمام کسانی که در طول اجرای پایان‌نامه بطور مستقیم یا غیر مستقیم یاریگر من بوده و ذکر نام تک تک آنها در اینجا میسر نیست کمال تشکر و قدردانی دارم و امیدوارم که این پایان‌نامه برای کسانی که می‌خواهند در این عرصه قدم بگذارند هر چند اندک، راه‌گشا باشد.

خدایا بر من ببخش آنچه را که از من بدان داناتری و اگر بدان بازگشتم، تو به بخشایش بازگرد که بدان سزاوارتری.

جواد بهشتیان

تایستان ۸۰

## چکیده

این پایان نامه در ابتدا به چگونگی اندازه گیری ضرایب نفوذ منفرد با استفاده از تکنیک PFC اسپکتروسکوپی NMR و تحلیل طیفها بوسیله برنامه CORE می پردازد و سپس با بدست آوردن ضرایب نفوذ منفرد اجزاء سیستم به مطالعه سیستم سورفکتانتهای CTAB, Triton x-100 و SDS می پردازد که نقاط CMC سورفکتانتهای CTAB و Triton x-100 بدست آمد و سپس مخلوط این دو سورفکتانت بررسی شد و وجود سینرجیسم در آنها تایید گردید در ادامه با استفاده از این تکنیک ضرایب تقسیم مولکولهای متانل، دی کلرومتان، استن و کلروفرم در مخلوط آنها با SDS بدست آمد و در مرحله بعد شعاع هیدراته این مولکولها نیز محاسبه شد و در پایان چگونگی تغییرات ضرایب نفوذ این مولکولها در سیستم CTAB با دما بررسی شد.



## فهرست مطالب

فصل اول : مقدمات	۱
۱- مقدمه	۱
۱-۲- رزونانس مغناطیس هسته (NMR)	۳
۱-۲-۱- آسایش	۶
۱-۲-۱-۱- آسایش طولی	۶
۱-۲-۱-۲- آسایش عرضی	۸
۱-۳- نفوذ	۱۰
۱-۳-۱- نفوذ منفرد	۱۰
۱-۳-۱-۲- نفوذ متقابل	۱۳
۱-۳-۱-۳- نفوذ ترکیبات چندتایی در سیستمهای غیر تعادلی	۱۴
۱-۴- سیستمهای سورفکتانت	۱۵
۱-۴-۱- تعاریف	۱۵
۱-۴-۱-۲- طبقه‌بندی سورفکتانتها	۱۶
۱-۴-۱-۳- برهمکنشهای آبگری	۱۸
۱-۴-۱-۴- سیستم مخلوط سورفکتانتها	۲۰
۱-۴-۱-۵- سینرژیسیم در مخلوط سورفکتانتها	۲۲
فصل دوم : روشهای اندازه‌گیری نفوذ بوسیله اسپکتروسکوپی NMR	۲۴
۱-۲- روش آسایش اسپین طولی و عرضی	۲۵
۱-۲-۲- روش اسپین اکو هسته (SE)	۲۶

۲۹	۳-۲- روش اسپین - اکو گوادیان میدان ایستا
۳۱	۴-۲- روش موج پیوسته NMR برای اندازه‌گیری نفوذ
۳۱	۵-۲- روشهای پالس گرادیان میدان (PFG)
۳۱	۱-۵-۲ تئوری PFG
۳۵	۲-۵-۲ آزمایش پایه‌ای ۹۰-۱۸۰
۳۹	۳-۵-۲ توسعه PGSE به صورت FT-PGSE
۴۰	۴-۵-۲ دستگاه‌های مورد نیاز برای انجام آزمایش FT-PGSE
۴۱	فصل سوم: روش انجام آزمایش
۴۲	۱-۳- مواد مصرفی
۴۲	۲-۳- دستگاهها
۴۲	۱-۲-۳ اسپکترومتر NMR
۴۳	۲-۲-۳ کامپیوتر
۴۳	۳-۳- روش انجام آزمایش
۴۳	۱-۳-۳ محلول سازی
۴۴	۴-۳- طیف‌گیری
۴۵	۱-۴-۳ برنامه پالسی
۴۷	۲-۴-۳ برنامه گرادیان
۴۸	۳-۴-۳ انتقال طیفها بصورت فایل
۴۹	۵-۳- تجزیه و تحلیل طیفها
۴۹	۱-۵-۳ برنامه CORE

۴۹.....	۱-۱-۵-۳ تغییر فرمت فایل‌های طیف
۵۰.....	۲-۱-۵-۳ تنظیم فایل ورودی پارامترهای برنامه (infile)
۵۲.....	۳-۱-۵-۳ فایل‌های خروجی برنامه و پارامترهای موردنظر (Rsulte file)
۵۳.....	۴-۱-۵-۳ ترسیم گرافیکی طیفها در برنامه مطلب
۵۵.....	فصل چهار: نتایج و بحث
۵۶.....	۱-۴-۱-۴ بدست آوردن نقطه CMC
۵۶.....	۱-۴-۱-۱ سیستم Triton X-100
۵۹.....	۲-۴-۱-۲ سیستم CTAB
۶۲.....	۳-۴-۱-۳ بحث و نتیجه‌گیری
۶۲.....	۲-۴-۲-۲ بررسی سینترژیسم در مخلوط سورفکتانتها
۶۲.....	۱-۴-۲-۱ سیستم مخلوط Triton X-100 و CTAB
۶۳.....	۲-۴-۲-۲ بحث و نتیجه‌گیری
۶۹.....	۳-۴-۲-۳ محاسبه ضریب تقسیم
۶۹.....	۱-۴-۳-۱ بدست آوردن ضریب تقسیم استن، متانل، دی‌کلرومتان و کلروفرم در سیستم SDS
۷۲.....	۲-۴-۳-۲ بحث و نتیجه‌گیری
۷۲.....	۳-۴-۳-۳ محاسبه شعاع هیدراته
۷۲.....	۱-۴-۳-۴ محاسبه شعاع هیدراته متان و استن و دکلرومتان در آب
۷۳.....	۲-۴-۳-۴ محاسبه شعاع هیدراته مایسل SDS
۷۴.....	۳-۴-۳-۴ محاسبه شعاع هیدراته مایسل CTAB
۷۴.....	۴-۴-۳-۴ محاسبه شعاع هیدراته مایسل Triton X-100

- ۷۴..... نتیجه گیری ۵-۴-۴- بحث و نتیجه گیری
- ۷۵..... بررسی تغییرات ضریب نفوذ با دما ۵-۴-۵-۴
- ۷۵..... سیستم CTAB ۱-۵-۴-۴
- ۷۶..... بحث و نتیجه گیری ۲-۵-۴-۴
- ۷۸..... نتیجه گیری کلی ۵-۴-۵-۴
- ۷۹..... منابع ۶-۴-۵-۴

فصل اول

مقدمات

## ۱-۱- مقدمه

مطالعه سیستمهای سورفکتانت<sup>۱</sup> با توجه به کاربردهای وسیع آن در صنعت و زندگی روزمره از اهمیت بسیار زیادی برخوردار است. در سیستمهای سورفکتانت، معمولاً مایسل<sup>۲</sup> تشکیل شده و همچنین اجزای مختلفی وجود دارند که باعث پیچیدگی سیستم می‌شود و به همین دلیل مطالعه این سیستمها با روشهای کلاسیک، دشوار و گاه غیرممکن می‌باشد و یا اینکه مدت زمان طولانی نیاز دارد. از اینرو مطالعه این سیستمها با اسپکتروسکوپی NMR<sup>۳</sup> به عنوان یک روش جدید که در سالهای اخیر گسترش زیادی پیدا کرده، قابل توجه به نظر می‌رسد.

روش PFG<sup>۴</sup> برای اندازه‌گیری ضرایب نفوذ<sup>۵</sup> در سیستمهای مختلف بکار می‌رود، پدیده نفوذ به عنوان یک پدیده شیمی فیزیکی همواره مورد توجه محققین علوم پایه و صنایع بوده است. با استفاده از این روش می‌توان ضرایب نفوذ اجزای مختلف در سیستمهای سورفکتانت را بدست آورد و با توجه به این ضرایب بدست آمده، می‌توان پارامترهایی نظیر: ضریب تقسیم، اجزای مختلف سیستم بین دو فاز مایسل و حلال را بدست آورد و همچنین با توجه به ضرایب نفوذ، می‌توان در تعیین اندازه و شکل مولکولها به صورت منفرد و یا مجتمع، اظهار نظر کرد.

مرکز اطلاعات آران‌اے  
تاسیس ۱۳۵۷

- ۱- Surfactant
- ۲- Micelle
- ۳- Nuclear Magnetic Resonance
- ۴- Pulse Filled Gradient
- ۵- Self diffusion Coefficient

رهنمای کلاسیک برای اندازه‌گیری ضرایب نفوذ، تکنیکهای نشاندار کردن رادیواکتیو می‌باشد و به همین سبب ضرایب نفوذ نشاندار نامیده می‌شوند [۱]. بهترین روشهای نشاندار کردن هنوز بعنوان دقیق‌ترین تکنیکها شناخته می‌شوند اما برای اندازه‌گیری در محلولهای ساده، کار سنتنری طاقت‌فرسا برای نشاندار کردن اجزاء موردنظر باید انجام گیرد همچنین زمان لازم برای اندازه‌گیری یک جزء منفرد ممکن است روزها و یا هفته‌ها به طول انجامد. حال اگر محلول پیچیده باشد تا اندازه‌ای غیرممکن بنظر می‌رسد.

از طرف دیگر بزرگترین نقص این تکنیک مربوط به اختلال ذاتی سیستم در اثر جانشینی ایزوتوپها می‌باشد. بوسیله تکنیکهای NMR می‌توان ضرایب نفوذ اجزاء سیستمهای پیچیده را با دقت خوبی در ظرف مدت چند دقیقه و بدون نشاندار کردن ایزوتوپی اندازه‌گیری کرد.

اولین بار اندازه‌گیری ضرایب نفوذ بوسیله تکنیک NMR توسط Hahn که مطالعات اسپین-اکو متعددی انجام داده گزارش شد [۲]. در مطالعات مقدماتی به وجود چندین اثر بر پدیده اسپین-اکو<sup>۱</sup> پی‌برده شد که یکی از آنها اثر نفوذ مولکولها بر مقادیر اکو در یک میدان مغناطیسی ناهمگن بود بر همین اساس تکنیک SE معرفی شد. در شکل اولیه اش تکنیکهای SE برای اندازه‌گیری ضرایب نفوذ، مستلزم تنظیم و کنترل مقادیر اسپین-اکو بدست آمده در حضور گرادیان خطی میدان  $B_0$  می‌باشد.

آزمایشهای SE در اواسط دهه شصت به شکل تکنیک گرادیان میدان اسپین-اکو (PGSE)<sup>۱</sup> در یک میدان یکنواخت، بهبود زیادی پیدا کرد. از قرار معلوم ایده بنیادی این نظریه را Mc Call و همکارانش در یک مقاله پیشنهاد دادند [۳] و روش انجام کار و اولین آزمایشها و تحلیل جزئیات بعداً توسط Tanner و Stejskal ارائه شد [۴، ۵].