



تأثیر دمای کلیسنه و درصد مولی روی قسمت‌های حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک نانو ذرات TiO₂/WO₃ سنتز شده به روش سل–ژل

جعفری تيله‌نوئی، مهدی^۱؛ میلانی مقدم، حسین^۲

^۱ گروه علوم پایه دانشکده واحد بهشهر، دانشگاه فنی و حرفه ای (TVU)، مازندران، ایران

^۲ گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه مازندران، بابلسر

مقدمه

تحقیقات نشان داده که نانوذرات TiO₂/WO₃ به دلیل خاصیت ضد انعکاسی بالا کاربرد فراوانی در حسگرهای گازی و الکترونیک نوری دارد. همچنین در سال‌های اخیر نانوذرات TiO₂/WO₃ در موارد زیادی مانند نمایش گر‌ها، کاتالیزت‌ها و سیستم‌های الکتروکرومیکی مورد اهمیت قرار گرفته‌اند[۱]. تابع دی الکتریک مواد عایق به فرکانس میدان الکتریکی اعمال شده بستگی دارد و به عنوان یک کمیت فیزیکی پیچیده توصیف می‌شود که قسمت حقیقی آن نشان دهنده ذخیره انرژی و قسمت موهومی نمایانگر اتلاف انرژی در ماده است[۲]. در این مطالعه، نانوذرات دی اکسید تیتانیوم/تری اکسید تنگستن با استفاده از روش سل-ژل سنتز شده است. اثر دمای کلیسنه و درصد مولی روی قسمت‌های حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک نانو ذرات در محدوده طول موج ۳۰۰–۸۰۰ نانومتر مورد تجزیه و تحلیل قرار گرفته است.

روش

محلول TiCl₄ (محصول شرکت Sigma-Aldrich، خلوص ۹۹٪) را به آرامی به آب مقطر اضافه می کنیم. پودر آمونیوم متا تنگستات هیدرات (محصول شرکت Sigma-Aldrich، خلوص ۸۰٪) حل شده با آب مقطر را به محلول قبلی به آرامی اضافه می کنیم. محلول حاصل را به مدت ۷۲ ساعت در دمای اتاق هم زده و به مدت ۱۸ ساعت در دمای ۸۰°C خشک می کنیم. ژل خشک شده ی زرد رنگ را به مدت ۱ ساعت در دماهای ۸۰۰°C و ۹۰۰°C کلیسنه می نماییم. سرانجام برای آنالیز و مشخصه‌یابی نمونه‌ها، از SEM، XRD و UV-Vis بهره می‌گیریم.

نتایج

با استفاده از طیف XRD اطلاعات ساختاری نمونه را بدست می آوریم (شکل ۱ را ببینید).

شکل ۱ که الگوی XRD برای بازه‌ی زاویه‌ای ۶۰–۲۰ درجه می‌باشد، نشان دهنده‌ی صفحات براگ TiO₂ و WO₃ می‌باشد. فرمول شرر اندازه نانوذرات بلوری را برحسب پهنای پیک پراش پرتو ایکس درنصف ارتفاع و سایر شرایط پراش می‌دهد [۳].

$$D=\frac{K\lambda}{\beta\cos\theta}\quad (۱)$$

در این رابطه *D* قطر نانوبلورک، *K* مقدار ثابت تقریبی ۰/۹، *λ* طول موج پرتو *X* برابر ۰/۱۵۴ نانومتر، *β* پهنای پیک در نصف ارتفاع ماکزیمم و *θ* نصف زاویه‌ی پراش است. همان طور که مشاهده می‌شود با افزایش دمای کلیسنه، شدت نسبی قله‌های اصلی بطور هماهنگ افزایش می‌یابد و این نشان می‌دهد که بطور کلی با افزایش دمای کلیسنه، اندازه متوسط نانوذرات افزایش می‌یابد. همچنین با توجه به داده‌های به‌دست آمده از نرم افزار Origin 6 و فرمول Scherrer، نشان داده شده است که با افزایش دمای کلیسنه، اندازه نانوذرات افزایش یافته است (جدول ۱ را ببینید).

با استفاده از تصویرهای SEM مورفولوژی نمونه مورد بررسی قرار می‌گیرد. شکل ۲ نشان می‌دهد که با افزایش دمای کلیسنه، قطر نانوذرات نیز افزایش یافته است که با نتیجه حاصل از طیف XRD در شکل ۱ هم-خوانی دارد.

برای تعیین تأثیر دمای کلیسنه بر قسمت‌های حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک، از رابطه‌های Kramers-Kronig و کد MATLAB استفاده شده است.

رابطه‌های کرامرز-کرونینگ ما را قادر می‌سازد قسمت حقیقی و موهومی معادله (۲) را در همه فرکانس‌ها پیدا کنیم [۴و۵۶].

$$r(\omega)=R^{1/2}(\omega)e^{i\theta(\omega)}\quad (۲)$$

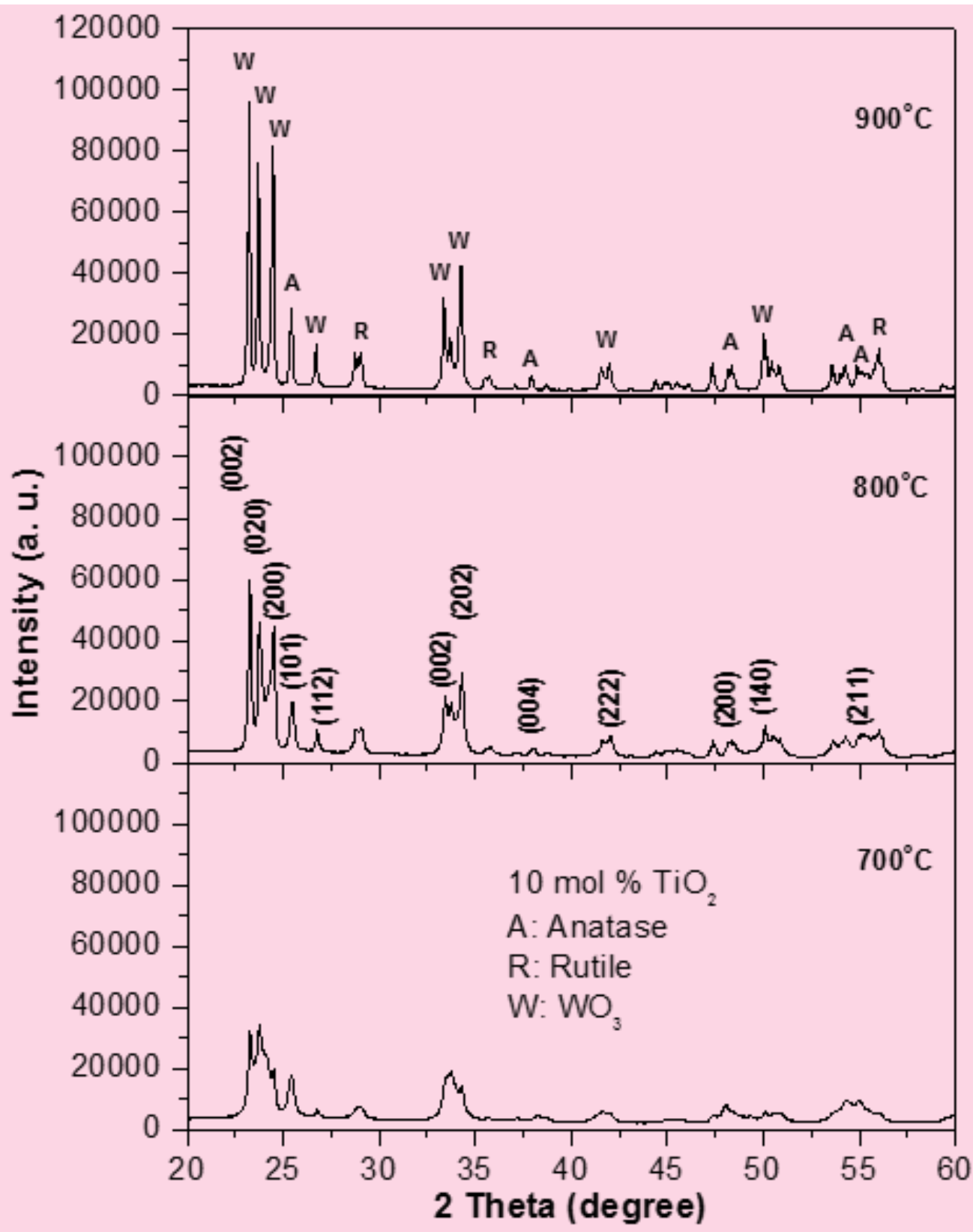
r: ضریب بازتاب فرنل در شکل قطبی، *θ*: زاویه فاز و ضریب بازتابندگی است. همچنین می توان نوشت:

$$\ln r(\omega)=\ln R^{1/2}(\omega)+i\theta(\omega)\quad (۳)$$

شکل انتگرالی رابطه‌ی کرامرز-کرونینگ برای قسمت موهومی به صورت زیر می باشد:

$$\theta(\omega)=-\frac{\omega}{\pi}\text{P}\int_0^{\infty}\frac{\ln R(\hat{\omega})}{\hat{\omega}^2-\omega^2}\text{d}\hat{\omega}\quad (۴)$$

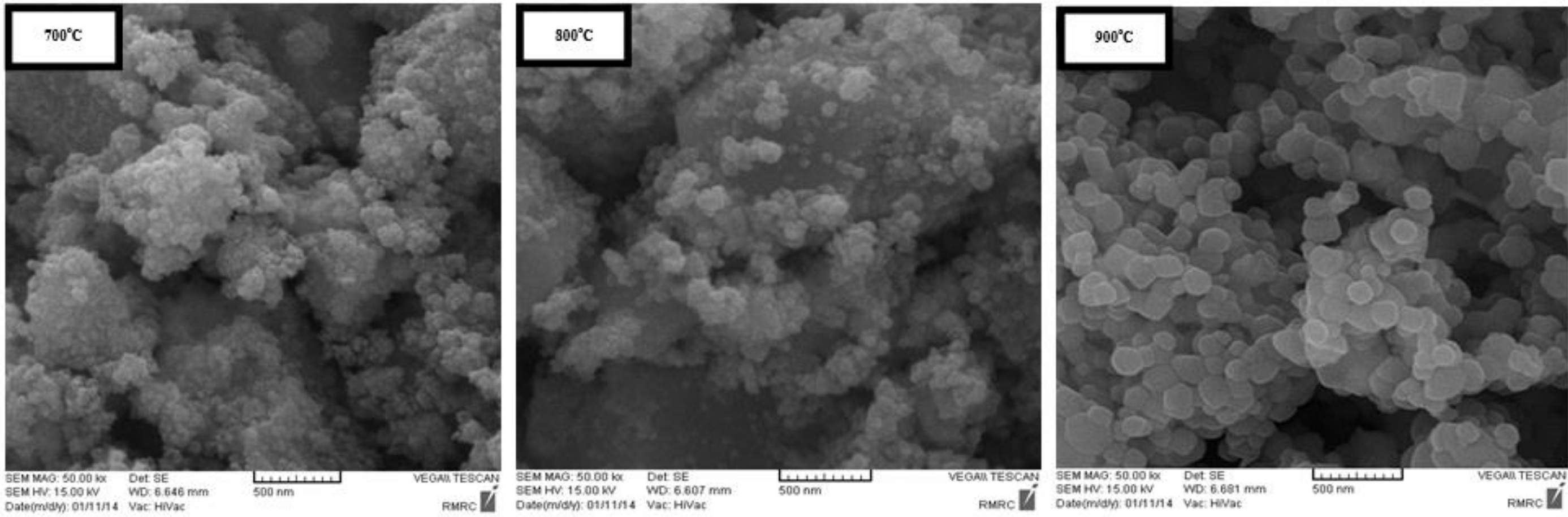
همچنین رابطه‌های مربوط به تعیین ضریب خاموشی و ضریب شکست عبارت‌اند از:



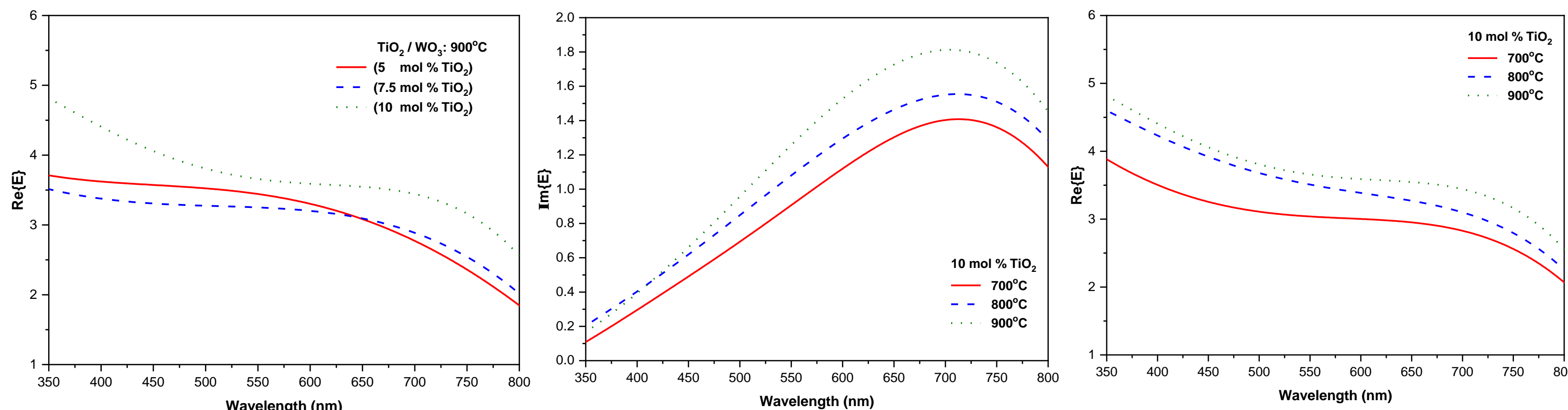
شکل ۱: الگوهای *XRD* برای نانوذرات *TiO₂/WO₃* سنتز شده در دماهای کلیسنه متفاوت

جدول ۱: اندازه نانوذرات *TiO₂/WO₃* در دمای مختلف کلیسنه توسط نرم افزار Origin 6

sample	calcination temperature (°C)	The size of nanoparticle (nm)
<i>TiO₂/WO₃</i>	700	10
	800	50
	900	100

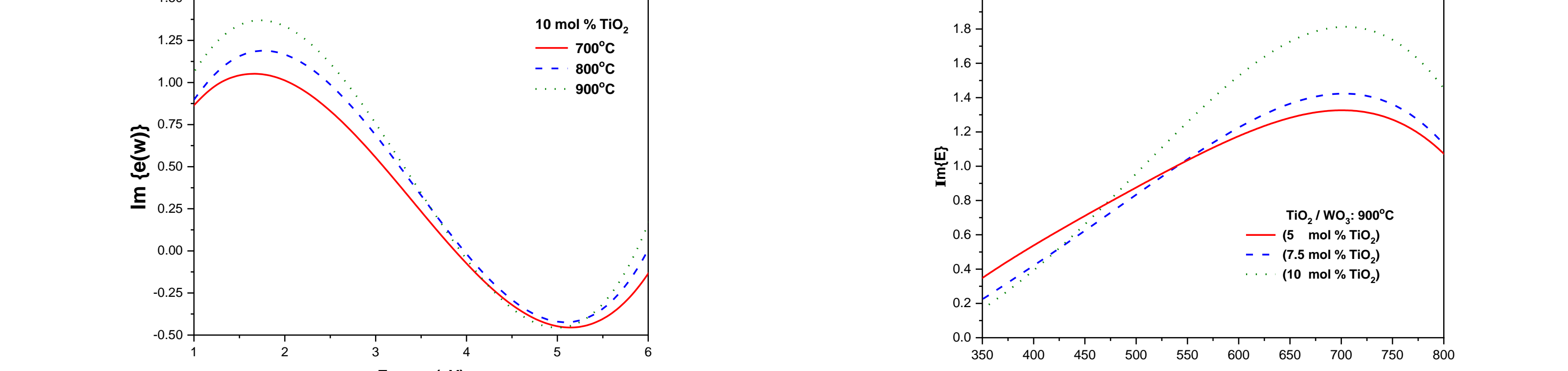


شکل ۲: تصویرهای *SEM* از نانوذرات *TiO₂/WO₃* سنتز شده در دماهای کلیسنه متفاوت



شکل ۳: نمودار بخش حقیقی تابع دی الکتریک بر حسب طول موج

در دماهای کلیسنه متفاوت

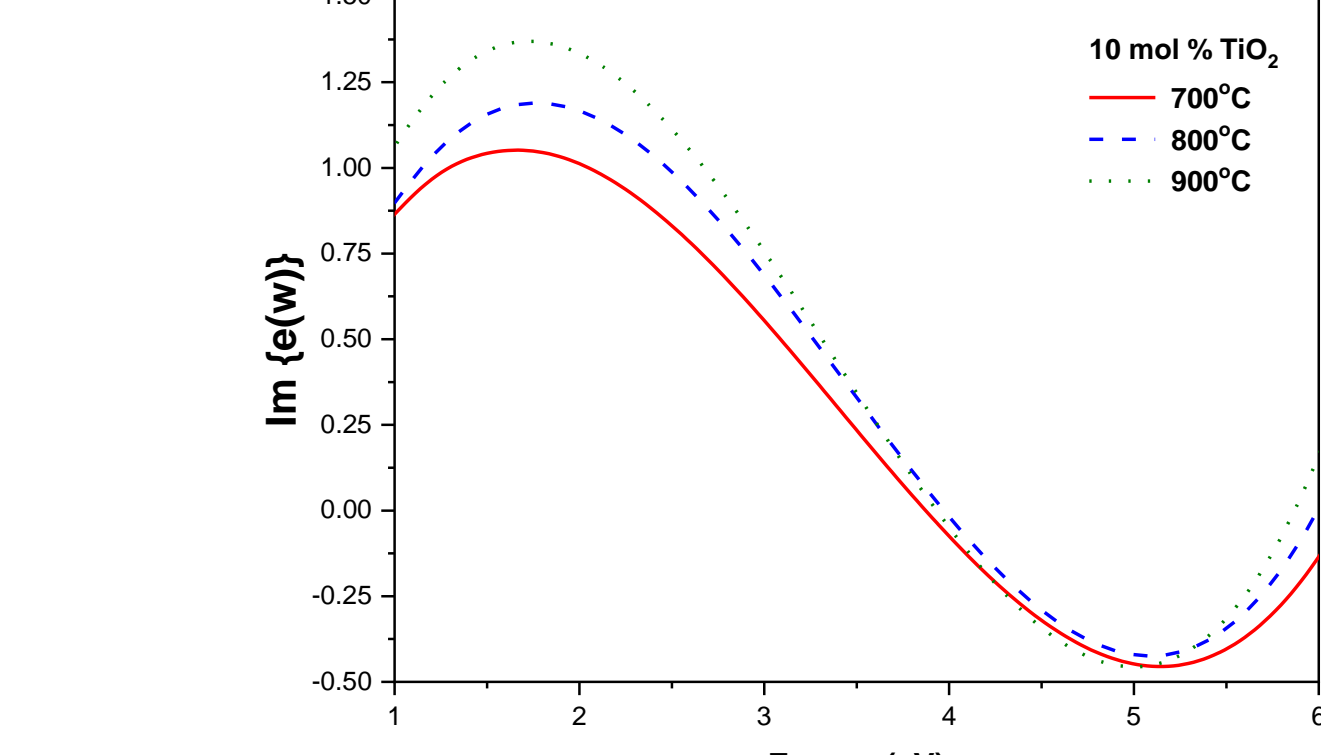


شکل ۴: نمودار بخش موهومی تابع دی الکتریک بر

حسب طول موج با درصد مولی متفاوت از *TiO₂*

شکل ۵: نمودار بخش حقیقی تابع دی الکتریک بر حسب طول موج در دماهای کلیسنه متفاوت

درصد مولی متفاوت از *TiO₂*



شکل ۷: نمودار تابع اتلاف انرژی نانوذرات

برای دماهای کلیسنه‌ی متفاوت

$$n(\omega)=\frac{1-R}{1+R-2\sqrt{R}\cos\theta}\quad (۵)$$

$$k(\omega)=\frac{2\sqrt{R}\sin\theta}{1+R-2\sqrt{R}\cos\theta}\quad (۶)$$

طبق تعریف، *n* و *k* با رابطه زیر به تابع دی الکتریک مرتبط می‌شوند:

$$\varepsilon(\omega)=\left(n(\omega)+ik(\omega)\right)^2\quad (۷)$$

با حل معادله (۷) داریم:

$$\varepsilon(\omega)=(n^2-k^2)+i2nk\quad (۸)$$

$$\varepsilon_1(\omega)=n^2-k^2\quad (۹)$$

$$\varepsilon_2(\omega)=2nk\quad (۱۰)$$

$$\varepsilon(\omega)=\varepsilon_1(\omega)+i\varepsilon_2(\omega)\quad (۱۱)$$

ε₁(ω) و *ε₂(ω)* به ترتیب بخش‌های حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک را نشان می‌دهند.

همانطور که در شکل ۳ نشان داده شده است، با افزایش دمای کلیسنه، قسمت حقیقی تابع دی الکتریک در ناحیه مرئی افزایش یافته است.

شکل ۴ نشان می‌دهد که بعد از طول موج ۴۲۵ نانومتر، با افزایش دمای کلیسنه، قسمت موهومی تابع دی الکتریک در ناحیه مرئی، به‌طور متوسط افزایش یافته است.

شکل ۵ نشان می‌دهد که تا طول موج ۶۵۰ نانومتر، قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک به ازای افزایش درصد مولی *TiO₂* از ۵ درصد به ۷/۵ درصد، کاهش و از ۷/۵ درصد به ۱۰ درصد، افزایش می‌یابد. اما بعد از طول موج ۶۵۰ نانومتر، قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک به ازای افزایش درصد مولی *TiO₂*، افزایش می‌یابد.

شکل ۶ نیز نشان می‌دهد که به‌غیر از طول موج‌های کمتر از ۵۵۰ نانومتر که افزایش قسمت موهومی تابع دی-الکتریک به ازای افزایش درصد مولی *TiO₂* با آشفتگی و نوسان همراه است، در طول موج‌های بالاتر از ۵۵۰ نانومتر، با افزایش درصد مولی *TiO₂*، قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک افزایش می‌یابد.

همانطور که در شکل ۷ نشان داده شده است، با افزایش دمای کلیسنه، قسمت موهومی تابع دی الکتریک به طور متوسط افزایش می یابد. به عبارتی دیگر می‌توان بیان کرد که با افزایش دمای کلیسنه، میزان اتلاف انرژی به‌طور متوسط افزایش می‌یابد.

تحلیل نتایج

در این مقاله، نانوذرات دی اکسید تیتانیوم/ تری اکسید تنگستن با استفاده از روش سل-ژل سنتز شده است. با تجزیه و تحلیل توسط XRD و SEM مشخص شد که قطر نانوذرات TiO₂/WO₃ با افزایش دمای کلیسنه افزایش می‌یابد. همچنین، نشان داده شده است که با افزایش دمای کلیسنه و درصد مولی TiO₂، بخش حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک به‌طور متوسط افزایش یافته است. در ادامه پژوهش، مشخص شده که با افزایش دمای کلیسنه، میزان اتلاف انرژی نیز به‌طور متوسط افزایش یافته است.

بنابراین می‌توان گفت که نانوذرات TiO₂/WO₃ با ۱۰ مول درصد TiO₂ و ۹۰۰°C دارای بالاترین مقدار بخش حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک می‌باشد.

مراجع

- E. O. Zayim; *"Optical & electrochromic properties of sol–gel made anti-reflective WO₃–TiO₂ films"*; Solar Energy Materials and Solar Cells. **87**. (2005) 695.
- B. Tony and B. David; *"Electrical Properties of Polymers, Cambridge"*; (2005) 58-72.
- N. A. Ramos-Delgadoa, L. Hinojosa-Reyesa, I. L. Guzman-Mara, M. A. Gracia-Pinillab and A. Hernandez-Ramíreza; *"Synthesis by sol–gel of WO₃/TiO₂ for solar photocatalytic degradation of malathion pesticide"*; Catalysis Today, (2013) 209.
- Ch. Kittel; *"Introduction to Solid State Physics"*. 7th edition, TBS. (2004) 307-328.
- V. Lucarini, J. J. Saarinen, K. E. Peipouen and E. M. Vartiainen; *"Kramers-kronig Relation in Optical Materials Research"*; Springer (2005) 40.
- N. S. Sariciftci; *"Primary Photoexcitation in conjugated polymers: Molecular Exciton versus Semiconductor Band Model"*; 1st edition, World Scientific. (1997) 322.

26th Annual IASBS Meeting on Condensed Matter Physics

بیست و ششمین گردهمایی فیزیک ماده چگال

دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان