بیستمین کنفرانس اپتیک و فوتونیک ایران
و ششمین کنفرانس مهندسی و فناوری فوتونیک ایران
۸ تا ۱۰ بهمن ماه۱۳۹۲ - دانشگاه صنعتی شیراز

سنتز و تحلیل خواص ساختاری و اپتیکی نانوذرات اکسیدنیکل تهیه شده به روش سل-ژل

جواد باعدی، داود قانعی، فرشید قلعه‌نوی و هدی اکبری
دانشگاه حکیم سبزواری، دانشکده علوم پایه، گروه فیزیک

چکیده- در این تحقیق نانوذرات اکسید نیکل به روش سل-ژل تهیه شده و الگوی پراش XRD آن گرفته شد که در آن حضور پیک هایی در زاویه‌های براگ ۳۷/۳۸ ، ۴۳/۵۱ ، ۶۲/۷۶ ، ۶۳/۱ و ۷۵/۱۲ درجه ملاحظه گردید که بیانگر تشکیل نانوذرات اکسیدنیکل با ساختار مکعبی و با جهت‌گیری ترجیحی (۱۱۱) است و اندازه آن توسط فرمول شرر- دبای ۱۰ نانومتر بدست آمد. نیز طیف UV_Vis اندازه گاف انرژی را ۳/۶۷ eV تخمین زده شده است.

کلیدواژه- اکسیدنیکل، سل-ژل، خواص ساختاری، خواص اپتیکی

Synthesis and analysis of the structural and optical properties of NiO nanoparticles prepared by sol-gel method

Baedi, Javad; Ghanei*, Davood; Ghalenovi, Farshid; Akbari, Hoda
Department of Physics, Hakim Sabzevari University, Sabzevar, Iran

Abstract-In this research, NiO nanoparticles have been prepared by Sol-gel method and XRD pattern have been taken that shows the presence of peaks in 37.38° ، 43.51° ، 62.76° ، 63.1° و 75.12° Bragg angles which represents the forming of NiO nanoparticles with cubic structure and (111) preferred direction and its size calculated 10 nm by Scherrer's formula. UV-Vis spectra estimates the gap value (E_g) about 3.67 eV.

Key word : NiO, Sol-gel, Structural Properties, Optical Properties

این مقاله در صورتی دارای اعتبار است که در سایت www.opsi.ir قابل دسترسی باشد.

۱- مقدمه

در چند دهه اخیر روش‌های سنتز نانوذرات به علت خواص ساختاری، اپتکی و الکتریکی منحصر بفردشان گسترش یافته است. نانوذرات کاربردهای گسترده‌ای در زمینه‌های متنوعی از قبیل: فوتوالکتریک، مواد ضبطی، سنسورها، موادسرامیکی، کاتالیست‌ها، مواد آرایشی و ... دارند.

اکسید نیکل یک نیمرسانای اکسید نوع p با گاف بزرگ (eV ۴/۰ – ۳/۶) و انرژی باند رسانش تقریبا ev ۱/۸ است(۱-۲). نانوذرات NiO کاربردهای متنوعی دارند که از جمله آن‌ها می‌توان در ساختن مواد ابرپارامغناطیس، الکترودهای صنعتی برای خازن-های سرامیکی چندلایه بجای پودرهای گران قیمت نقره و پلادیوم و پلاتین، کاتد باتری‌های قلیایی، سنسورهای گازی، ابرخازن‌های الکتروشیمیایی، فیلم‌های رسانای شفاف نوع p ، سنسورهای گازی، باتری‌های قلیایی، سلول‌های خورشیدی حساس به رنگ و آنود سلول‌های سوخت اکسید جامد اشاره کرد.(۳-۶).

روش‌های متنوعی برای سنتز نانوذرات NiO وجود دارد از قبیل-اسپری پاپیرولیز(۷)،سل-ژل (۸)، رسوب حمام شیمیایی(۹)، رسوب بخار شیمیایی(۱۰)، فرایند فاز مایع(۱۱) و ... ، که در میان آن‌ها فرایند سل-ژل دارای فواید زیادی از قبیل: هزینه کم، سنتز در دمای پایین، ساده بودن ابزار انجام آن، تهیه محصولات با خلوص بالا، راندمان تولید بسیار بالا، تولید قطعات اپتیکی با اشکال پیچیده و ... است.

در این تحقیق به تهیه نانوذرات اکسید نیکل با روش سل-ژل پرداخته شده است و خواص ساختاری و اپتیکی آن‌ها را بررسی شده است.

به منظور مشخصه‌یابی از پراش پرتو X توسط دستگاه D8 Advance-Bruker وابسته به خط طیفی Cu - Ka با طول موج ۰/۱۵۴۰۵۶ نانومتر و برای سنجش طیف‌های عبوری و جذب نوری نمونه‌ها در گستره طول موج ۱۸۰-۸۴۰ نانومتر از دستگاه اسپکتروفوتومتر

UV_Vis Spectrophotometer,JASCO,V-670(190-2700nm),Japan استفاده شده است.

۲- نتایج و بحث

۲-۱ آنالیز XRD

نانوذرات رشدیافته توسط پراش سنج پودری اشعه X توصیف می‌شوند که زوایای براگ بین ۳۰-۸۰ درجه اندازه گیری شده‌اند. شکل ۱ الگوی پراش XRD نمونه NiO را نشان می‌دهد. این طیف ساختار بلور را با پنج پیک نشان می‌دهد. الگوی پراش XRD یک مقدار مهم پهن شدگی خط که یک توصیف از نانوذرات است را نشان می‌دهد. الگوی پراش XRD پیک‌های مهمی را در ۳۷/۳۸ ، ۴۳/۵۱، ۶۲/۷۶ ، ۶۳/۱ و ۷۵/۱۲ درجه را نشان می‌دهد که به ترتیب مربوط به صفحات (۱۱۱)،(۲۰۰)،(۲۲۰)،(۳۱۱) و (۲۲۲) می‌باشند که تشکیل فاز خالص اکسیدنیکل مکعبی(ساختار سدیم کلرید) را نشان می‌دهد.(۸) بعلاوه ، پیکی را برای هر ناخالصی از قبیل $a - Ni(OH)_2$ و $B - NiO(OH)_2$ یا فازهای دیگر در طیف نشان نمی‌دهد که بار دیگر بلورینگی و فاز خالص اکسیدنیکل را تایید می‌کند. اندازه بلورک‌ها طبق معادله دبای-شرر می‌تواند محاسبه شود:

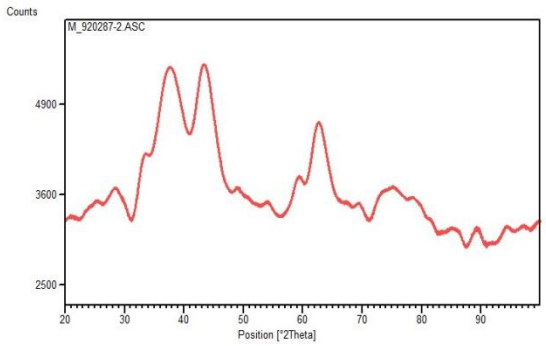
$$D = \frac{0.9\lambda}{\beta \cos\theta} \qquad (۱)$$

که λ طول موج تابش‌های Cu - Ka و برابر با ۱/۵۴۰۵۹۸ آنگستروم، β نیم پهنای بیشینه بر حسب رادیان اندازه‌گیری می‌شود که پهن شدگی به علت ابعاد بلورینگی است و θ زاویه حاصله از مقادیر 2θ منطبق با قله بیشینه در الگوی پراش XRD است. اندازه بلوری میانگین نانوذرات NiO ، ۱۰ نانومتر است. فاصله سطح داخلی با استفاده از معادله براگ محاسبه می‌شود:

$$2d \sin\theta = n\lambda \qquad (۲)$$

که n=1 در نظرگرفته می‌شود. مقدار d برای شدیدترین قله ۲/۴۰۴۰ آنگستروم است که مربوط به صفحه (۱۱۱) می-باشد. پیک‌های پراش همچنین از داده‌های حاصله XRD با الگوی استاندارد NiO مطابقت خوبی دارد. همچنین اندازه ثابت شبکه برای قوی‌ترین قله مربوط به صفحه (۱۱۱) برابر ۱/۷۳۲ آنگستروم حاصل شد که از رابطه زیر استفاده شده است:

$$a_{hkl} = \frac{d}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}} \qquad (۳)$$

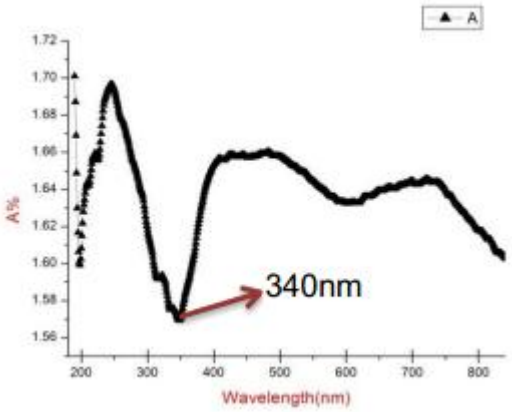


شکل ۱ الگوی پراش XRD نمونه NiO شدت بر زاویه تابش

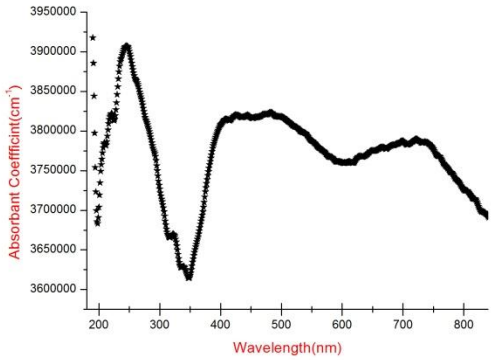
۲-۲ آنالیز UV_Vis نانوذرات NiO

تحلیل طیف جذبی نوری یکی از بهترین ابزارهای تولید شده برای فهم و گسترش ساختار باند و انرژی گاف نواری E_g *ساختار بلوری است.* طیف جذبی نور NiO در شکل ۲ نشان داده شده است که وابستگی جذب به طول موج λ را در محدوده ۱۹۰ – ۸۴۰ نانومتر برای نانوذرات اکسیدنیکل را نشان می‌دهد که می‌توان از طیف ملاحظه نمود که قویترین پیک جذبی نمونه تهیه شده در اطراف ۳۴۰ نانومتر است و بدون تردید مربوط به انتقال به سوی رنگ آبی از لبه جذب نانوذرات NiO حجیم است. همانطور که در شکل۳ مشاهده می‌شود ضریب جذب (α) با رابطه $\alpha = 2.303 \times A/d$ با فرض اینکه d قطر نانو ذرات و A جذب نانوذرات بدست آمده از طیف جذبی باشد، محاسبه و رسم می‌شود (شکل ۳). از فرمول معروف تاوک $(Tauc)$ برای بدست آوردن گاف اپتیکی استفاده شد، که به صورت کلی $(\alpha h\nu)^n = B(h\nu - E_g)$ نوشته می‌شود، که α همان ضریب جذب، $h\nu$ انرژی فوتون فرودی برحسب الکترون-ولت، B یک ثابت، E_g گاف نواری‌ای است که قرار است محاسبه شود و نمای $n = 2$ برای گذارهای مستقیم مجاز است که گاف مستقیم مجاز را می‌دهد و $n = 0.5$ برای گذارهای غیر مستقیم مجاز که گاف غیر مستقیم مجاز را می‌دهد. می‌توان با استفاده از طیف UV-Vis نمودار $(\alpha h\nu)^n$ را برحسب $h\nu$ رسم کرده و با محاسبه شیب نمودار در انرژی‌های بالا، مقدار گاف نواری را بدست آورد (۱۲)که مقدار انرژی گاف نواری برای گذار مستقیم برابر ۴/۹ev و برای گذار غیرمستقیم برابر ۳/۶۷ ev محاسبه شده است.

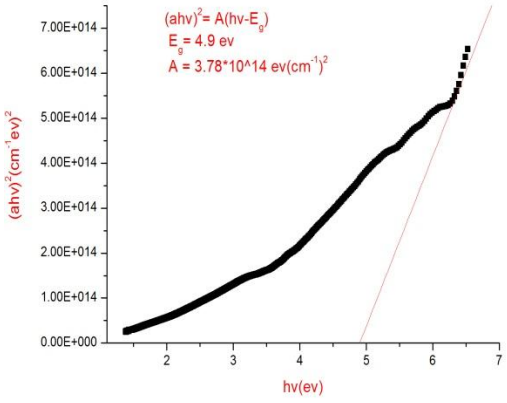
انرژی گاف نواری محاسبه شده برابر است با ۳/۶۷ev که نشان دهنده آنست که اکسیدنیکل دارای گاف غیرمستقیم می‌باشد، که موافقت خوبی با مقدار انرژی گاف نواری اکسیدنیکل دارد.



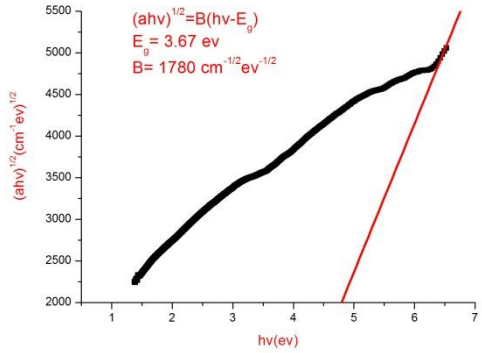
شکل ۲ طیف جذبی نانوذرات اکسید نیکل



شکل ۳ طیف ضریب جذب نانوذرات اکسید نیکل



شکل ۴ تغییرات $(h\nu)^2$ برحسب $h\nu$



شکل ۵ تغییرات $(hv)^{0.5}$ برحسب hv

۳- نتیجه‌گیری

در این تحقیق نانوذرات اکسید نیکل به روش سل-ژل تهیه شده و الگوی پراش XRD آن گرفته شد که در آن حضور پیک‌هایی در زاویه‌های براگ ۳۷/۳۸ ، ۴۳/۵۱ ، ۶۲/۷۶ ، ۶۳/۱، و ۷۵/۱۲ درجه ملاحظه گردید که بیانگر تشکیل نانوذرات اکسیدنیکل با ساختار مکعبی و با جهت-گیری ترجیحی (۱۱۱) است و اندازه آن توسط فرمول شرر-دبای ۱۰ نانومتر بدست آمد. طیف UV_Vis اندازه گاف انرژی راev ۳/۶۷ تخمین زده شده است.

مراجع

[1] A. B. Kunz, "*Electronic structure of NiO Solid State Phys. 14 (1981) L455 Electronic structure of NiO*", **J. Phys**. C: (1981) L455-L460.
[2] H. Sato, T. Minami, S. Takata, T. Yamada,"*Transparent conducting p-type NiO thin films prepared by magnetron sputtering*". **Thin Films**, 236 (1993)27
[3] Y. Bahari Molla Mahaleh, S. K. Sadrnezhaad, D. Hosseini, "*NiO Nanoparticles Synthesis by Chemical Precipitation and Effect of Applied Surfactant on Distribution of Particle Size*", **J. Nanomat**., 1(2008) 1-4.
[4] C. Luyo, R. Ionescu, L.F. Reyes, Z. Topalian, W. Estrada, E. Llobet, C.G. Granqvist, P. Heszler, "*Gas sensing response of NiO nanoparticle films made by reactive gas deposition*", **Sensors and Actuators B: Chemical**, 138 (2009) 14-20.
[5] S. A. Needham, G. X. Wang, and H. K. Liu,"*Synthesis of NiO nanotubes for use as negative electrodes in lithium ion batteries*", **J. Power Sources**, 159 (2006) 254–257.
[6] G. Boschloo, J. He, S. Lindquist, A. Hagfeldt, "*Dye Sensitization of Nanostructured NiO*", **Proceedings of the 12th Workshop on Quantum Solar Energy Conversion-(QUANTSOL 2000), Wolkenstein, Südtirol, Italy**, March 11-18, 2000.
[7] B.A. Reguig, A. Khelil, L. Cattin, M. Morsli, J.C. Bernede, **Appl. Surf. Sci**. 253 (2007)4330.
[8] E. Ozkan Zayim, I. Turhan, F.Z. Tepehan, N. Ozer, **Sol. Energy Mater. Sol. Cells** 92 (2008) 164.
[9] S.Y. Han, D.H. Lee, Y.J. Chang, S.O. Ryu, T.J. Lee, C.H. Chang, J. Electrochem. **Soc**. 153 (2006) 382.
[10] T. Maruyama, S. Arai, **Sol. Energy Mater. Sol. Cells** 30 (1993) 257.
[11] C.B.Wang, G.Y. Gau, S.J. Gau, C.W. Tang, J.L. Bi, Catal. **Lett**.101, 241 (2005).
[12] I. A. Gardun, J. C. Alonso, M. Bizarro, R. Ortega, L Rodrguez-Fernandez, A. Ortiz; "*Optical and electrical properties of lithium doped nickel oxide films deposited by spray pyrolysis onto alumina substrates*"; **Journal of 312Crystal Growth** 3281-3276 (2010)