بیست و ششمین کنفرانس اپتیک و
فوتونیک ایران و دوازدهمین کنفرانس
مهندسی و فناوری فوتونیک ایران،
دانشگاه خوارزمی،
تهران، ایران.
۱۶-۱۵ بهمن ۱۳۹۸

سنتز و مشخصه یابی ساختاری و اپتیکی نانوذرات اکسیدتنگستن رشد یافته به روش سل- ژل

محبوبه، عباسپور[۱]، مریم علیان نژادی[۱*] و فاطمه شریعتمدار طهرانی[۱]

۱- دانشکده فیزیک، دانشگاه سمنان، سمنان، ایران

چکیده -اکسید تنگستن به دلیل ویژگی‌های متمایز آن در حسگرهای گازی، صفحات نمایش، پنجره‌های هوشمند، شاترهای نوری، تحویل دارو، نانوالکترونیک‌ها، فتوکاتالیست‌ها و درمان سرطان مورد توجه خاص قرار دارند. بنابراین در کار حاضر نانوذرات اکسید تنگستن (WO_3) بااستفاده از روش سل-ژل سنتز و مورد بررسی قرار گرفته است. به منظور تعیین طیف‌های جذبی وعبوری نانوذرات سنتز شده از دستگاه طیف سنج نوری uv-vis و برای بررسی ساختار بلوری آن از تکنیک پراش پرتو ایکس (XRD) استفاده شد. آنالیز XRD نشان داد ساختار بلوری هگزاگونال اکسید تنگستن تشکیل شده است. خواص ساختاری و اپتیکی نانوذرات اکسید تنگستن شامل اندازه بلورک‌ها، گاف انرژی، ساختار نواری و مساحت سطح ویژه مورد مطالعه قرار گرفت.

کلید واژه- اکسید تنگستن، خواص اپتیکی، سنتز سل-ژل، نانوساختار.

Synthesis, structural and optical characterization of tungsten oxide nanoparticles grown by sol–gel method

Mahbube Abbaspoor[1], Maryam Aliannezhadi*[1], Fatemeh shariatmadar Tehrani[1]

1. Faculty of Physics, Semnan University, P.O. Box: 35195-363, Semnan, Iran

In the present work, tungsten oxide nanoparticles (WO_3) were synthesized using the simple and low-cost sol-gel method. The UV-Vis optical spectrometer was used to determine the absorption and transmission spectra of tungsten nanoparticles. X-ray diffraction (XRD) technique was used to investigate the crystalline structure. XRD pattern of the sample shows formation of WO_3 with hexagonal structure. The crystallite size, micro strain and the specific surface area of the nanoparticles was estimated from XRD analysis. Optical bandgap and the band structure of the sample were evaluated from UV-Vis spectroscopy.

Keywords: Nanostructure, Optical properties, Sol-gel synthesis, Tungsten oxide.

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

[Downloaded from opsi.ir on 2026-02-04]

مقدمه

نانوساختارهای اکسید فلزی نیمه‌رسانا[1] به دلیل ویژگی-های خاص آنها مورد توجه بسیاری از محققان و صاحبان صنایع قرار گرفته‌اند و تحقیقات گسترده‌ای بر روی حسگرهای گازی مبتنی به این مواد برای بررسی گازهای احتمالی در محیط خانه‌ها و کارخانه‌ها، امنیت محصولات کارخانه‌ها و تست‌های تنفسی در حال انجام است[۱]. مطلوبیت اکسیدهای فلزی به عنوان حسگر به دلیل قیمت پایین، حساسیت بالا و پایداری مناسب آنها است[۲]. این نسبت به کروماتوگرافی گازی و طیف‌سنجی جرمی[2]، طیف‌سنجی جرمی عکس‌العمل انتقال پروتون[3]، حسگرهای نوری و ... دارای برتری‌هایی چون اصول عملکردی ساده، حجم کم، ساخت ساده و آنالیز زمان واقعی[4] هستند[۳, ۴]. اکسید تنگستن WO_3 به دلیل پایداری شیمیایی بالا و غیرسمی‌بودن به ماده‌ای مناسب برای حسگرهای گازی تبدیل شده است[۵]. ترکیب اکسید تنگستن با سایر اکسیدهای فلزی نیز برای ایجاد حسگر گازی گزارش شده تا بر محدودیت های این حسگر مثل دمای عملکردی بالا، حساسیت کم و محدودیت آشکارسازی قوی غلبه کنند[۶]. غالبا این حسگرها برای گازهای H_2, NH_3, NO_X و گازهای آلی فرار[5] مثل بوتانول[6] و C_2H_2 مورد استفاده قرار گرفته‌اند[۷]. علاوه‌براین درمان تومورهای سرطانی مهمترین چالش روز است و باعث تمرکز بسیاری از تحقیقات بر روی درمان غیرتهاجمی سرطان با استفاده از لیزر و نانوذرات مختلف شده است. درمان موفق تومور سرطانی با روش فتودینامیک (PDT) و با استفاده از نانوذرات WO_3به عنوان عامل حساس به نور گزارش شده است. همچنین نانوساختارهای WO_3 به دلیل کاربرد آنها در صفحات نمایش، پنجره‌های هوشمند، شاترهای نوری، تحویل دارو، نانوالکترونیک و فتوکاتالیست‌ها یکی از اکسیدهای فلزی مهم هستند[۸, ۹]. اخیرا فرایند پخش انتخابی ایزوتوپ‌های مختلف دی‌اکسید کربن محیط ($^{12}CO_2$,$^{13}CO_2$) توسط نانوساختارهای یک بعدی اکسید تنگستن به اثبات رسیده است و بنابراین دریچه جدیدی در راستای جداسازی ایزوتوپ‌های مختلف و غنی‌سازی با استفاده از این نانوساختارها باز شده است[۱۰].

بررسی این ساختارها با هدف دستیابی به شکل خاص، نسبت سطح به حجم بالا، ویژگی‌های خاص فیزیکی و اپتیکی انجام می‌شود. در این مقاله با توجه به اهمیت نانوساختارهای WO_3 به سنتز این ماده با روش سل-ژل پرداخته و نتایج ارائه شده است.

مواد و روش‌ها

در این پژوهش از ۳g سدیم تنگستات دو آبه ($Na_2WO_4.2H_2O$) به عنوان پیش ماده استفاده شد. این مقدار ماده در 100 ml آب حل شد. اسید هیدروکلریک (HCl) پس از انحلال کامل ماده با قطره چکان به محلول اضافه شد تا مقدار PH به ۲ برسد. محلول حاصل به مدت ۱۵ ساعت روی همزن مغناطیسی قرار گرفت. سپس محلول در آون با دمای ۸۰ درجه سانتی گراد برای ۲۴ ساعت نگه داشته شد. رسوب حاصل پس از شست و شو با آب و اتانول به مدت ۲۴ ساعت در دمای ۸۰ درجه سانتیگراد در آون خشک شد. بررسی ساختار بلوری نمونه ساخته شده با استفاده از دستگاه پراش اشعه ایکس انجام شد. به منظور تعیین طیف‌های جذبی وعبوری نانوذرات تنگستن تهیه شده از دستگاه طیف سنج نوری UV-Vis استفاده شد.

[1] Semiconductor metal oxides
[2] gas chromatography and mass spectrometry (GC-MS)
[3] proton-transfer reaction mass spectrometry (PTR-MS)
[4] real-time analysis
[5] volatile organic compounds (VOCs).
[6] *n*-butanol

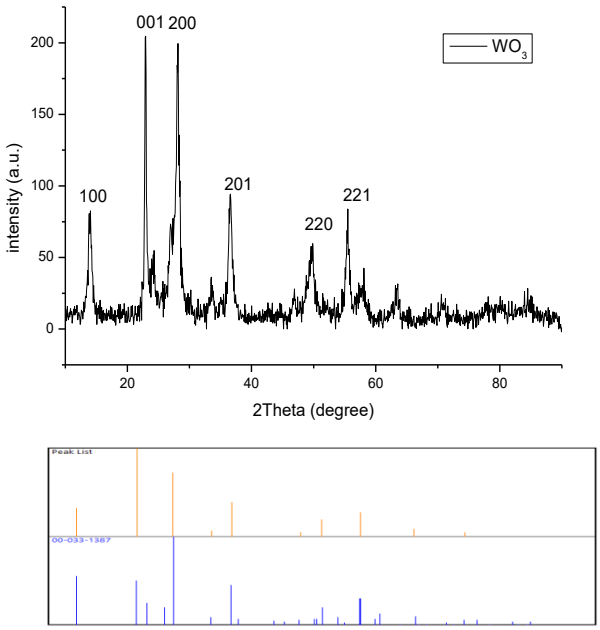
این مقاله درصورتی دارای اعتبار است که در سایت www.opsi.ir قابل دسترسی باشد.

[Downloaded from opsi.ir on 2026-02-04]

نتایج و بحث

به منظور بررسی ساختار بلوری نانوذرات اکسید تگستن از تکنیک پراش پرتو ایکس (XRD) در بازه زاویه 2θ بین ۱۰ درجه تا ۹۰ درجه استفاده شد. در شکل ۱ الگوی پراش نمونه سنتز شده اکسید تنگستن نشان داده شده است. بلوری شدن کامل نمونه و رشد صفحات بلوری با توجه به حضور قله‌های قوی در الگوی پراش نمونه تایید می‌شود. با مقایسه این الگو با الگوهای استاندارد مشخص شد که فاز هگزاگونالی به خوبی شکل گرفته‌است. همچنین ثوابت شبکه این نانوساختار $a=b=$۷/۲۹۸A و $c=$۳/۸۹۹A می‌باشد.

در شکل ۲ با استفاده از نرم افزار Xpert شدت قله‌های اکسید تنگستن سنتز شده با شدت نمونه استاندارد مقایسه شده است. باتوجه به این شکل می‌توان گفت تطابق قابل قبولی وجود دارد. همچنین بلندترین قله‌ها واقع در $2\theta=$۲۲/۹° و $2\theta=$۲۸/۱° نشان‌دهنده رشد ترجیحی به ترتیب در راستاهای (۰۰۱) و (۲۰۰) است. با توجه به قله‌های مشخص شده هیچ‌گونه فاز اضافی یا ناخالصی در نمونه مشاهده نشده است. همچنین اندازه بلورک مربوط به این جهت‌های ارجح با روش دبای-شرر محاسبه گردید. کرنش ساختار و اندازه میانگین بلورکها نیز با روش ویلیامسون-هال تعیین شد.



شکل ۱: طرح پراش اشعه x اکسید تنگستن سنتز شده با روش سل-ژل و مقایسه شدت قله‌ها در نمونه سنتز شده با شدت نمونه استاندارد .

مساحت سطح ویژه نانوساختار با استفاده از رابطه زیر محاسبه می‌شود[۱۱]:

$$SSA = \frac{6\times10^3}{\rho\times D} \qquad (۲)$$

که در اینجا D اندازه بلورک و ρ چگالی نمونه ($g.cm^{-3}$) ۶/۴۳ با توجه به نرم‌افزار X-pert و کد مرجع ۱۳۸۷-۰۰-۰۳۳) است. کمیت‌های محاسبه شده از آنالیز XRD در جدول ۱ جمع‌آوری شده است.

جدول ۱: کمیت‌های محاسبه شده از آنالیز XRD

نمونه	اندازه بلورک (روش دبای شرر)	اندازه بلورک (روش ویلیامسون-هال)	مساحت سطح ویژه($g^{-1}m^2$)	کرنش
WO_3	۳۳/۴۸ (۰۰۱) ۲۸/۸ (۲۰۰)	۶۳ nm	۵۴	۰/۰۸

برای بررسی ویژگی‌های نوری نانوساختار سنتز شده از طیف جذب مرئی-فرابنفش استفاده شد. انرژی گاف نواری (E_g) با استفاده از رابطه تاک به صورت [۱۲]

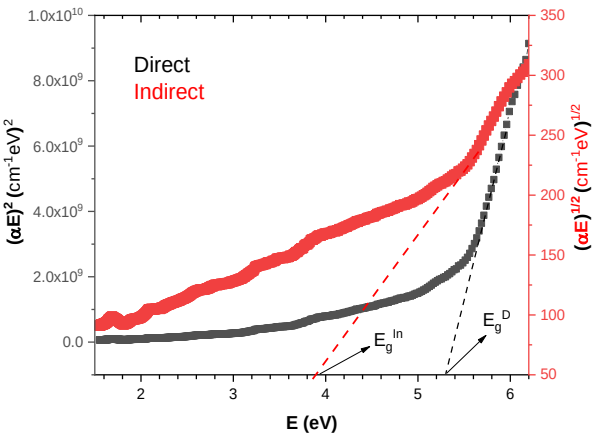
$$(\alpha E)^{2or1/2} = A(E - E_g) \qquad (۲)$$

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

[Downloaded from opsi.ir on 2026-02-04]

محاسبه می‌شود. که در اینجا A یک مقدار ثابت است. α و E به ترتیب ضریب جذب و انرژی فوتون هستند.

در شکل ۲ نمودار $(\alpha E)^2$ و $(\alpha E)^{1/2}$ برحسب انرژی به ترتیب برای بررسی گاف انرژی مستقیم و معکوس نشان داده شده است.



شکل ۲: محاسبه گاف نواری مستقیم و غیرمستقیم به روش تاک.

همان‌طور که از شکل ۲ دیده می‌شود مقادیر گاف نواری مستقیم و غیرمستقیم به ترتیب برابر با ۵/۳ eV و ۳/۹ eV به دست آمد. از آنجایی که گاف انرژی کوچکتر ساختار نواری را مشخص می‌کند، می‌توان نتیجه گرفت که این نمونه دارای ساختار نواری غیرمستقیم می‌باشد. این نتیجه با گزارش های موجود درباره مواد مشابه تطابق دارد.

نتیجه‌گیری

اکسید تنگستن با توجه به ویژگیهای مطلوب اپتیکی و الکتریکی مورد مطالعه قرار گرفت و نانو ذرات اکسید تنگستن به روش ساده و ارزان سل-زل سنتز شد. مشخصه‌یابی ساختاری حاکی از تشکیل ساختار بلوری هگزاگونال اکسید تنگستن با کیفیت مناسب و با ابعاد بلورک ۳۰ تا ۳۵ نانومتر بود. مساحت سطح ویژه نیز برای این ساختار برابر با ۵۴ محاسبه گردید. مطالعه اپتیکی بر روی نمونه نیز انجام شد و ساختار نواری غیرمستقیم با گاف انرژی ۳/۹ eV به‌دست آمد.

مرجع‌ها

[1] J. Walker, S. Akbar, and P. Morris, "Synergistic effects in gas sensing semiconducting oxide nano-heterostructures: a review," *Sensors and Actuators B: Chemical*, 2019.

[2] X. Chen *et al.*, "Cerium-doped indium oxide nanosphere arrays with enhanced ethanol-sensing properties," *Journal of Nanoparticle Research*, vol. 21, no. 4, p. 77, 2019.

[3] V. Saasa, T. Malwela, M. Beukes, M. Mokgotho, C.-P. Liu, and B. Mwakikunga, "Sensing technologies for detection of acetone in human breath for diabetes diagnosis and monitoring," *Diagnostics*, vol. 8, no. 1, p. 12, 2018.

[4] M. Jamali and F. S. Tehrani, "Effect of synthesis route on the structural and morphological properties of WO3 nanostructures," *Materials Science in Semiconductor Processing*, vol. 107, p. 104829, 2020.

[5] Y. Zeng *et al.*, "Selective detection of methanol by zeolite/Pd-WO3 gas sensors," *Sensors and Actuators B: Chemical*, vol. 273, pp. 1291-1299, 2018.

[6] F. Duanmu, Z. Shen, Q. Liu, S. Zhong, and H. Ji, "A WO3-CuWO4 nanostructured heterojunction for enhanced n-butanol sensing performance," *Chinese Chemical Letters*, 2019.

[7] Z. Wei, Q. Zhou, Z. Lu, L. Xu, Y. Gui, and C. Tang, "Morphology controllable synthesis of hierarchical WO3 nanostructures and C2H2 sensing properties," *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, vol. 109, pp. 253-260, 2019.

[8] R. M. Fernández-Domene, R. Sánchez-Tovar, B. Lucas-Granados, G. Roselló-Márquez, and J. Garcia-Anton, "A simple method to fabricate high-performance nanostructured WO3 photocatalysts with adjusted morphology in the presence of complexing agents," *Materials & Design*, vol. 116, pp. 160-170, 2017.

[9] J. Zhou, S. Lin, Y. Chen, and A. Gaskov, "Facile morphology control of WO3 nanostructure arrays with enhanced photoelectrochemical performance," *Applied Surface Science*, vol. 403, pp. 274-281, 2017.

[10] S. Roy Moulik, A. Maity, P. Chakraborty, M. Pradhan, and B. Ghosh, "Evidence of Isotope Selective Diffusion of Ambient CO2 Gas in WO3 Nanostructures," *The Journal of Physical Chemistry C*, vol. 123, no. 4, pp. 2573-2578, 2019.

[11] S. Esmaeili, M. Ehsani, and M. Fazli, "Structural, optical and photocatalytic properties of La0. 7Ba0. 3MnO3 nanoparticles prepared by microwave method," *Chemical Physics*, vol. 529, p. 110576, 2020.

[12] F. S. Tehrani, M. Fakhredin, and M. J. Tafreshi, "The Optical properties of silicon carbide thin films prepared by HWCVD from pure silane and methane under various total gas partial pressure," *Materials Research Express*, 2019.

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

[Downloaded from opsi.ir on 2026-02-04]