



قطب علمی فناوری نانو در محیط زیست

دانشگاه صنعتی اصفهان

گزارش مربوط به سال ۱۳۸۵

بسمه تعالی

گزارش فعالیت های قطب علمی فناوری نانو در محیط زیست

این گزارش بر اساس فعالیت هایی است که اعضای قطب علمی فناوری نانو در محیط زیست تدوین شده است. فعالیت های انجام شده با استفاده از بودجه سال ۱۳۸۴ قطب صورت گرفته است. البته طرح های تحقیقاتی در این گزارش بعضا از طریق منابع دیگری تامین اعتبار شده است.

۱- مشخصات اعضای قطب علمی

ردیف	نام و نام خانوادگی	مرتبۀ علمی	رشته تحصیلی	گرایش تخصصی	موسسه محل خدمت
1	هادی اکبرزاده	استاد	فیزیک	ماده چگال	دانشگاه صنعتی اصفهان
2	محمد شاهدهی باغ خندان	استاد	مهندسی کشاورزی	مهندسی صنایع غذایی	دانشگاه صنعتی اصفهان
3	ابراهیم شیرانی	استاد	مهندسی مکانیک	میکرو و نانو سیالات	دانشگاه صنعتی اصفهان
4	محمود سلیمی	استاد	مهندسی مکانیک	نانو مواد	دانشگاه صنعتی اصفهان
5	سید غلامرضا اعتماد	استاد	مهندسی شیمی	پدیده های انتقال	دانشگاه صنعتی اصفهان
6	سید عبدالکریم حسینی	استاد	مهندسی نساجی	فیزیک الیاف	دانشگاه صنعتی اصفهان
7	حسین توانایی	دانشیار	مهندسی نساجی	علوم الیاف	دانشگاه صنعتی اصفهان

۲- طرح تحقیقاتی در دست اقدام

۱. مبدل های حرارتی با ذرات ریز برای افزایش راندمان و کاهش ابعاد
۲. تدوین یک برنامه کامپیوتری برای شبیه سازی جریان سیال همراه با انتقال حرارت در میکرو کانال ها
۳. تولید پارچه های چندلایه با استفاده از ریزلایه ها
۴. تولید انواع رشته های الیاف نانو جهت کاربردهای پزشکی
۵. طرح مطالعاتی کاربرد نانو تکنولوژی در صنایع نساجی
۶. بررسی آزمایشگاهی انتقال حرارت جابجایی اجباری نانو سیالات برای شرایط مرزی حرارتی مختلف و حالت جوش
۷. اندازه گیری خواص حرارتی روغنهای موتور در حضور نانو ذرات
۸. شبیه سازی کوانتومی سیم با ابعاد نانو (nano wire) از جنس MnAs
۹. شبیه سازی خواص اپتیکی سطح CO_2MnSi با استفاده تکنیک های مبتنی بر نظریه تابعی چگالی وابسته به زمان.
۱۰. کاربرد نانو تکنولوژی در صنایع نساجی

۱۱. تولید نانو الیاف هادی پلی آکریلونیتریل
۱۲. تولید و بهینه سازی الیاف نانو اکریلیک و پلی اتیلن اکسید
۱۳. تولید و بررسی خواص نانو لایه و الیاف جهت خنثی سازی گاز های سمی
۱۴. طرح مطالعاتی کاربرد نانو تکنولوژی در صنایع نساجی
۱۵. تولید نانو الیاف هادی پلی آکریلونیتریل به کمک پوشش دهی مس سولفید
۱۶. بهینه سازی فرآیند تولید الیاف نانو توسط الکتروریسی PAN,PEO
۱۷. بررسی مطالعاتی و انجام آزمایشگاهی تولید وبهای نانوالیاف عامل دار شده با اکسید های فلزی
۱۸. تولید و بررسی خواص الیاف نانو کربن فعال شده
۱۹. ساختن بلوک های مولکولی آرامانتان با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی
۲۰. مبدل های حرارتی با ذرات ریز برای افزایش راندمان و کاهش ابعاد
۲۱. شبیه سازی کوانتومی سیم با ابعاد نانو (nano wire) از جنس MnAs
۲۲. بررسی نانو ساختارهای نیم رسانای GaAs بر پایه نظریه تابعی چگالی - خواص ساختاری - الکترونی - تراپردی و اپتیکی نانو سیم GaAs
۲۳. بررسی خواص الکترونی و مغناطیسی مرز مشترک (001) MnSb/GaSb با روش کوانتومی PAW
۲۴. اثر تابعی های مختلف تبدلی - همبستگی بر توابع وانیر در بلور CO₂MnSi
۲۵. بررسی عملکرد نانو سیال در مبدل حرارتی پوسته و لوله

۳- پروژه های تحصیلات تکمیلی و کارشناسی

موضوع پروژه	نام استاد راهنما	سطح پروژه	نام دانشجو	وضعیت پروژه
بررسی جریان خون در رگ ها	ابراهیم شیرانی و سید غلامرضا اعتماد	رساله دکتری	محمود رضا صادقی	در حال انجام
سوپر کاویتاسیون	ابراهیم شیرانی	رساله دکتری	محمد رضا عرب یار محمدی	در حال انجام
شبیه سازی جریان همراه با انتقال حرارت با روش شبکه بولتزمن	ابراهیم شیرانی	پایان نامه کارشناسی ارشد	عباس صفایی	در حال اتمام
شبیه سازی حرکت و تغییر شکل قطره روی یک سطح	ابراهیم شیرانی	پایان نامه کارشناسی ارشد	فرزان توکلی	در حال انجام
شبیه سازی جریان همراه با ذرات نانویی با روش شبکه بولتزمن	ابراهیم شیرانی	پایان نامه کارشناسی ارشد	صالح نبی	در حال انجام
شبیه سازی جریان با سطح مشترک با روش شبکه بولتزمن	ابراهیم شیرانی	پایان نامه کارشناسی ارشد	سید مهدی موسوی فرد	بزودی شروع می شود

پایان یافته است	جعفری فرسنگی سعید	پایان نامه کارشناسی ارشد	ابراهیم شیرانی	شبیه سازی جریان در هندسه های با ابعاد میکرو با استفاده از روش شبکه بولتزمن
بزودی شروع می شود	الناز السادات زهروی	پایان نامه کارشناسی ارشد	ابراهیم شیرانی	شبیه سازی جریان همراه با ذرات ریز قابل انعطاف با روش شبکه بولتزمن
در حال انجام	حسام صالحی پور	پروژه کارشناسی	ابراهیم شیرانی	بررسی حرکت خون همراه با گلبول های قرمز
در حال انجام	بابک نوبری	پروژه کارشناسی	ابراهیم شیرانی	بررسی جریان میکرو همراه با نیروی الکترو استاتیک
در حال انجام	امامی فر	رساله دکتری	محمد شاهدی	استفاده از نانو ذرات در بسته بندی محصولات غذایی برای ماندگاری بیشتر
در حال انجام	صدیقه برهانی	رساله دکتری	عبدالکریم حسینی و سیدغلامرضا اعتماد	بررسی خواص انتقال حرارت و رطوبت از نانو لایه های PAN الکترورسی شده
پایان یافته است	فرزاد دبیریان	پایان نامه کارشناسی ارشد	عبدالکریم حسینی	طراحی و ساخت دستگاه تولید نخ از نانو الیاف الکترورسی شده و بررسی خواص کششی آنها
پایان یافته است	روح الله جلیلی	پایان نامه کارشناسی ارشد	محمد مرشد و عبدالکریم حسینی	طراحی و ساخت دستگاه الکترورسی تولید نانو الیاف PAN و بررسی پارامترهای موثر بر فرآیند تولید
پایان یافته است	سمیه صفی	پایان نامه کارشناسی ارشد	محمد مرشد و عبدالکریم حسینی	بررسی امکان تولید الیاف نانو از سدیم آلجینات به روش الکترورسی شده
در حال انجام	همایونی	پایان نامه کارشناسی ارشد	عبدالکریم حسینی	تعیین شرایط پهنه تولید ریزلایه های کیتوسان و بررسی خواص فیزیکی آنها
در حال انجام	محمودرضا خدنگی	رساله دکتری	سیدغلامرضا اعتماد	بررسی آزمایشگاهی انتقال حرارت جابجایی آزاد نانو سیالات غیر نیوتنی
در حال انجام	محمد حجت	رساله دکتری	سیدغلامرضا اعتماد	بررسی آزمایشگاهی انتقال حرارت جابجایی اجباری نانو سیالات غیر نیوتنی
در حال انجام	محمد نصیری	رساله دکتری	سیدغلامرضا اعتماد	مدلسازی هدایت حرارتی نانو سیالات
در حال انجام	سهراب خان محمدی	پایان نامه کارشناسی ارشد	سیدغلامرضا اعتماد	اندازه گیری هدایت حرارتی و گرمای ویژه نانو سیالات روغن موتور
در حال انجام	شهلا صفری	پایان نامه کارشناسی ارشد	سیدغلامرضا اعتماد	اندازه گیری مشخصات حرارتی نانو سیالات غیر نیوتنی در مبدل های حرارتی دولوله ای
در حال انجام	سعیده سلطانی	پایان نامه کارشناسی ارشد	سیدغلامرضا اعتماد	اندازه گیری مشخصات حرارتی جوش نانو سیالات غیر نیوتنی
در حال انجام	هادی احمری	پایان نامه کارشناسی ارشد	سیدغلامرضا اعتماد	اندازه گیری مشخصات الکترورنولوژیکی نانو سیالات غیر نیوتنی

در حال انجام	روح... یدوی	پایان نامه کارشناسی ارشد	سیدغلامرضا اعتماد	جداسازی فلزات سنگین توسط نانو ذرات مغناطیسی
پایان یافته است	سعید زینالی هریس	رساله دکتری	سیدغلامرضا اعتماد	بررسی آزمایشگاهی انتقال حرارت جابجایی اجباری نانو سیالات در شرایط مرزی حرارتی دمای ثابت دیواره
در حال انجام	لاله قاسمی	رساله دکتری	محمد مرشد	بررسی تولید و خواص داربست نانو الیاف جهت کشت و تکثیر سلول های عصبی
در حال اتمام	غزال نداف	پایان نامه کارشناسی ارشد	محمد مرشد وامیرنصر	تولید و بررسی خواص نانو الیاف حاوی نانو ذرات نقره
در حال انجام	آزاده مصدقی راد	پایان نامه کارشناسی ارشد	محمد مرشد و غیائی	تولید نانو الیاف حاوی اکسید های فلزی
در حال انجام	مرضیه جان نثاری	پایان نامه کارشناسی ارشد	محمد مرشد	تولید نانو الیاف حاوی دارو و بررسی آزاد سازی
پایان یافته است	الهام جازان	پایان نامه کارشناسی ارشد	عزت کشاورزی	بررسی خواص ترمو دینامیکی نانو خوشه هادر ناحیه تبدیل فاز جامد-مایع
پایان یافته است	رضوان سهرابی	پایان نامه کارشناسی ارشد	عزت کشاورزی	ارائه معادله حالت برای سیالات محدود شده در فضای نانو
پایان یافته است	فاطمه حیدری نبی	پایان نامه کارشناسی ارشد	عزت کشاورزی	ارائه معادله حالت برای سیالات محدود شده در فضای نانو با دیواره دارای برهم کنش
پایان یافته است	حمید مصدقی	پایان نامه کارشناسی ارشد	عزت کشاورزی	سنتر نانو ذرات مس به روش تسهیم نا متناسب و معلق سازی آن
در حال انجام	سمیه فعال رستگار	پایان نامه کارشناسی ارشد	عزت کشاورزی	حذف فلزات سنگین آب با استفاده از ذرات نانو و پدیده اسمز
در حال انجام	سازا ازهری	پایان نامه کارشناسی ارشد	عزت کشاورزی	اندازه گیری هدایت حرارتی مخلوط نانو سیالات
در حال انجام	نجمه فانی	پایان نامه کارشناسی ارشد	عزت کشاورزی	شبیه سازی سیالات محدود شده در فضای نانو
در حال انجام	فریده صداقت	پایان نامه کارشناسی ارشد	عزت کشاورزی	محاسبه تنسور تنش سیال کره سخت محدود شده در نانو حفره و بررسی تبدیل صفحه ای فاز آنها
در حال انجام	سیده فرشته روحانی	پایان نامه کارشناسی ارشد	عزت کشاورزی	بررسی اثر انواع نانو ذرات مغناطیسی پوشش دار شده در درمان سرطان
در حال انجام	یلدا شجاع	پایان نامه کارشناسی ارشد	عزت کشاورزی	اثر سایز و شکل در وسکوزیته نانو سیالات در رقت بی نهایت

در حال انجام	صابره پروزی مقدم	پایان نامه کارشناسی ارشد	عزت کشاورزی	اثر نانو ذرات مس و اکسید مس در خواص روغن موتور
در حال انجام	زهره کم صدا آرانی	پایان نامه کارشناسی ارشد	عزت کشاورزی	اثر شکل و اندازه نانو تیوپ در هدایت گرمایی نانو سیالات
در حال انجام	زری هوشیار	پایان نامه کارشناسی ارشد	عزت کشاورزی	حذف آلاینده های آلی آب با استفاده از نانو ذرات آهن
در حال انجام	فاطمه حسین زاده	پایان نامه کارشناسی ارشد	عزت کشاورزی	بررسی قوائد و نماهای بحرانی سیالات محدود شده در فضای نانو
در حال انجام	یوسف زراعت کیش	پایان نامه کارشناسی ارشد	عزت کشاورزی	بهینه سازی سنتز نانو پودر مس با استفاده از سیستم های دو فازی و اثر برخی نمک ها
در حال انجام	محمد کمالوند	رساله دکتری	عزت کشاورزی	بررسی رفتار و خواص ترمو دینامیکی سیالات مخلوط شده در نانو لوله های کربنی با استفاده از نظریه تابع چگالی
در حال انجام	مژگان سبزه زراعی	رساله دکتری	عزت کشاورزی	شبیه سازی نانو خوشه ها و بررسی خواص ترمودینامیکی آنها
در حال انجام	محسن اشرفی	رساله دکتری	محمود سلیمی	تولید توده مواد نانو ساختار به کمک روش تغییر شکل شدید مواد
در حال انجام	علی محمد ابراهیم پور	پایان نامه کارشناسی ارشد	محمود سلیمی	ساخت نمونه های آزمایشگاهی ورقهای نانو ساختار به روش ARB
در حال انجام	محققیان	پایان نامه کارشناسی ارشد	محمود سلیمی	ارائه مدل تغییر شکل پلاستیک مواد در مقیاس نانو
پایان یافته است	حجت قلی زاده	پایان نامه کارشناسی ارشد	هادی اکبرزاده	بررسی جذب سطحی آلاینده ی CO بر روی سطح (۱۱۱) فلزات واسطه ی Pt و Cu، با محاسبات میکروسکوپی کوانتومی
در حال انجام	ناهید قادری	رساله دکتری	هادی اکبرزاده	مطالعه اثر مشترک الیاز هویسلر CO_2MnSi بازیر لایه GaAs
پایان یافته است	ساره زارعی	پایان نامه کارشناسی ارشد	هادی اکبرزاده	بررسی خواص ساختاری و مغناطیسی و الکترونی مرز مشترک $Co_2Cr_{0.5}Fe_{0.5}Al/GaAs$ در راستای [001]
پایان یافته است	زهره حفاری	پایان نامه کارشناسی ارشد	هادی اکبرزاده	بررسی سطح [001] آلیاز هویسلر $Co_2Cr_{0.5}Fe_{0.5}Al$

خواص ساختاری و الکترونی و مغناطیسی $NixCr(1-x)$	هادی اکبرزاده	پایان نامه کارشناسی ارشد	رستم گلبرخ تبار	پایان یافته است
شبیه سازی مرز مشترک CrSe/ZnSe	هادی اکبرزاده	پایان نامه کارشناسی ارشد	شهین براتی	در حال انجام
محاسبه چگالی حالت نانو ذرات ZnS با استفاده از نظریه تابعی چگالی	هادی اکبرزاده	پایان نامه کارشناسی ارشد	امین بابازاده	پایان یافته است
شبیه سازی مرز مشترک CrAs/GaAs	هادی اکبرزاده	پایان نامه کارشناسی ارشد	ابراهیم حضرتی	در حال انجام
بررسی اثر تعداد لایه ها در شبیه سازی های سطوح در فلزات واسطه	هادی اکبرزاده	رساله دکتری	مجتبی اعلائی	در حال انجام
بررسی رفتار نانو سیال در مبدل حرارتی پوسته و لوله	سیدغلامرضا اعتماد	پایان نامه ارشناسی ارشد	هدی فرج اللهی	در حال انجام

۴-مقالات منتشر شده در مجلات معتبر پژوهشی

1. Jalili, R., Hosseini, S.A., Morshed, M., The effect of operating parameters on the morphology of electrospun polyacrylonitide nano filers. Iranian polymer journal, vol 14, NO.12, pp. 4350, 2005.
2. Jalili, R., Hosseini, S.A., Morshed, M., Fundamental parameters affecting electro of PAN nanofilers as uniaxially aligned. journal of applied polymer scie , vol 101, 2006.
3. Ghasemi, L., Semnani, Morshed, M., A novel method for porosity measurement of various layers of nano filer mat for tissue engineering. vol 106, pp. 2536-2542, 2007.
4. Ghasemi, L., Esfahani, M., Morshed, M., Tissue engineering vol 13, no.7, july 2007, TERMIS-EU, 1680, nano filer Scaffold in T.E.
5. Sohrabi, R., Mansoori, G.A., Kshavarzi, E., An analytic model for nano confined fluids phase-transition: Applications for confined fluids in nanoslit, Journal of computational and Theoretical nanoscience, vol. 3, pp. 1-8, 2006.
6. Jalili, R., Hosseini, S.A., Morshed, M., Electrospinning of uniaxially aligned and molecularly oriented polyacrylonitril nanofibers, with separated collectors, Iranian Journal of Polymer science & Technology, vol. 18, No 4, pp. 248-241, 2005.
7. Jalili, R., Hosseini, S.A., Morshed, M., The Effect of Operating Parameters on the Morphology of Electrospun PAN Nanofibers, Iranian Polymer Journal , vol. 14, No. 12, pp. 1080-1086, 2005.
8. Jalili, R., Morshed, M., Hosseini, S.A., Investigation of parameters affecting the productivity of electrospun nanofibers, Iranian Journal of Polymer science & Technology, vol. 19, No. 2, 2006.

9. Jalili,R., Morshed,M., Hosseini,S.A., Fundamental parameters affecting electrospinning of PAN nanofibers as uniaxially aligned fibers, journal of Applied Polymer Science, Vol 101, Issue 6,pp.4350-4357,2006
10. Dabirian, F., Hosseini, Y., Hosseini, S.A., Manipulation of the electric field of electrospinning system to produce polyacrylonitrile nanofiber yarn,Journal of Textile Institut,In press.
11. Jalili, R., Morshed, M., Hosseini Ravandi, S.A., Fundamental parameters affecting electrospinning of PAN nanofibers as uniaxially aligned fibers, Journal of Applied Polymer Science, 12 February, 2006.
12. Tavanaei, H., The effect of operation parameters on the morphology of electrospun nanofibers, Iranian Polymer Journal, vol14, No. 12, 2005.
13. Akbarzade, H., First principle study of Co₂MnSi/GaAs(001) heterostructure, Physical Review B (in press)
14. Zeinali Heris, S., Etemad, S. Gh., and Nasr Esfahany, M., Experimental Investigation of Oxide Nanofluids Laminar Flow Convective Heat Transfer, International Communication Heat Mass Transfer, vol33, pp. 529-535, 2006.
15. Tavanaei, H., Fundamental parameters affecting electrospinning of PAN nanofibers as uniaxially aligned fibers, Journal of Applied polymer Science, 2006.
16. Jafari, S., Shirani, E., Application of LBM in Simulation of Flow in Simple Micro-Geometries and Micro Porous Media.African physical review, (2007) 1:0002.
17. Barkhordari, M., Etemad, S.Gh., Numerical study of slip flow heat transfer of non-Newtonian fluids in circular microchannels , Accepted for Publication at Int. J. Heat and Fluid Flow, vol28 ,pp.1027-1033 ,2007.
18. Zeinali Heris, S., Nasr Esfahany, M., Etemad, S.Gh., Numerical investigation of nanofluid laminar convective heat transfer through circular tube , Accepted for Publication at Numerical Heat Transfer Part A: Applications.

۱. روح...جلیلی و محمد مرشد و عبد الکریم حسینی ، الکتروریسی نانوالیاف پلی آکریلونیتریل تک محوری موازی و آرایش یافته .مجله:علوم و تکنولوژی پلیمر ،شماره ۴،سال ۱۸ مهر ماه ۱۳۸۴ صفحه ۲۴۱
۲. روح...جلیلی و محمد مرشد و عبد الکریم حسینی ، بررسی عوامل موثر بر مقدار تولید نانوالیاف پلی - آکریلونیتریل الکتروریسی شده .مجله:علوم و تکنولوژی پلیمر ،شماره ۲، سال ۱۹ خرداد ۱۳۸۵، صفحه ۱۲۱
۳. روح...جلیلی و سمیه صفی و مهران غیائی و محمد مرشد و عبد الکریم حسینی ، تولید الیاف نانو سدیم آلجینات به روش الکتروریسی و تأثیر حلال های مختلف.مجله:علوم و تکنولوژی پلیمر - سال ۲۰ و شماره ۵
۴. هادی اکبرزاده، بررسی خواص ساختاری مغناطیسی و الکترونی آلیاژ کروم- نیکل مجله پژوهش فیزیک ایران - جلد هفتم - شماره یک - بهار ۱۳۸۶
۵. حسین توانایی، بررسی پارامترهای موثر بر میزان تولید نانو الیاف، مجله علوم و تکنولوژی پلیمر، سال ۱۹، شماره ۲، ۱۳۸۵
۶. هادی اکبرزاده، بررسی خواص ساختاری مغناطیسی و الکترونی آلیاژ کروم- نیکل، " مجله پژوهش فیزیک ایران- در دست داوری

1. Shirani, E., Jafari, S., Application of Lattice Boltzmann Method in Simulation of Flow in Micro-Channels and in Micro and Nano Porous Media, Invited speaker, Proceedings of International Conference. on ,Micro and Nano-Technologies, ICMNT2006, Nov. 2006
2. Jalili R., Esfahani, N., Morshed M., Hosseini S. A., The effect of voltage on electrospinning of PAN nanofibers as uniaxially aligned fibers, The 8th Asian Textile Conference, Tehran, Iran, May 2005.
3. Borhani, S., Hosseini, S.A., Morshed, M., Evaluation of Optimal Performance of Activated Carbon Filter Media Coated with PAN Nanofibers, International Fiber Conference, Korea , 2006
4. Nazeri, K., Etemad, S. Gh., Hojat, M., Investigation about Heat Capacities of Nanofluids, Proceeding of 1st Nanotechnology in Environments Conference, Isfahan, Iran, Feb. 2007
5. Ahmari, H., and Etemad, S. Gh., Stability of Nanofluids, Proceeding of 1st Nanotechnology in Environments Conference, Isfahan, Iran, Feb. 2007.
6. Etemad, S.Gh., Nanotechnology: Environmental and Energy Applications, Keynote Speaking at 10th National Chemical Engineering Conference. Zahedan, Iran, Nov. 2005.
7. Zeinali Heris, S., Etemad, S. Gh., and Nasr Esfahany, M., Experimental Investigation of Metal Oxide Nanofluid Convection Heat Transfer, Proceeding of 4th International Nanotechnology Symposium, Dresden, Germany, pp. 181-184, Nov. 2005.
8. Zeinali Heris, S., Nasr Esfahany, M., and Etemad, S. Gh., Nanofluid Laminar Convection Heat Transfer, Proceeding of 4th International Nanotechnology Symposium, Dresden, Germany, pp. 177-180, Nov. 2005.
9. Jalili, R., Morshed, M., Hosseini, S.A., The effect of voltage on Electrospinning of PAN, 8TH Asian Textile Conference 2005.
10. Ghasemi, L., Esfahani, N., Morshed, M., Alkaline Hydrolysis of Electrospinning poly(ϵ -caprolactone) Nanofibers International Fiber Conference, pp.63, 2006.
11. Borhani, Hosseini, S.A., Morshed, M., Evaluation of optimal performance of activated carbon filter media, International fiber Conference, pp.91. Korea, 2006.
12. Esrafilzadeh, D., Morshed, M., Tavanai, H., Study on thermal stabilization of PAN nanofiber. 6th international Conference, pp.23, 2007, Liberec, Czech-Republic.
13. Ghasemi, L., Morshed, M., Esfahani, N., Effect of thickness of nanofibers scaffolds in time engineering. termisna, toronto, canada, pp.64. 2007.
14. Kamalvand, M. Keshavarzi, E., Density Profile of Hard Sphere Fluid Confined Within Slit-Like Pores and Fluids Density, 1st conference of Nanotechnology in Environments, Isfahan University of Technology, Feb 2007.
15. Jazan, E. Keshavarzi, E., Size Dependence of the Nanoclusters Melting Point, 9th Iranian Physical Chemistry Seminar, Guilan University (Rasht-Zibakeneh), 13-15 June 2006.

16. Heidari nabi, F. and Keshavarzi, E., Statistical Mechanics of Confined Fluids, 9th Iranian Physical Chemistre Seminar, Guilan University (Rasht-Zibakenar), 13-15 June 2006.
17. Zarei, S., Ghaderi, N., Hashemifar, S.J., Akbarzadeh, H., Half-Metallicity at Co₂Cr_{0.5}Fe_{0.5}Al/GaAs[001] Heterostructures Poster, 13th International Workshop on Computational Physics and Materials Science: Total Energy and Force Methods, Trieste, Italy, January 2007.
18. Zarei, S., Hashemifar, S.J., Akbarzadeh, H., Theoretical study of structural and electronic properties of Co₂Cr(0.5)Fe(0.5)Al Heusler alloy compound and its interface with GaAs, The Annual Physics Conference of Iran, Shahrood, Iran, August 2006.
19. Ziaierad, S., Ebrahimpoor, A.M., Salimi, M., Quasicontinuum(QC) Simulation of Aluminum Film Nanoindentation. 2nd conference on Nanostructures Accepted for publication in to be submitted to Journal of Materials Processing Technology.
20. Jafari, S., Shirani, E., Application of LBM for Simulation of Flow in Microchannels and Micro Porous Media. International Conference on Micro and NanoTechnologies, ICMNT06, Tizi-Ouzou Algeria, 19-23 Nov. 2006.
21. Jafari, S., Shirani, E., International School on Environmental Micro and Nano Technologie (ISEMNT2009). International Conference on Micro and NanoTechnologies, ICMNT06, Tizi-Ouzou Algeria, 19-23 Nov. 2006.

۱. ابراهیم شیرانی و عباس صفایی، بررسی انتقال حرارت به کمک روش شبکه بولتزمن در میکرو کانالها، پذیرفته شده جهت ارائه در اولین کنفرانس فناوری نانو در محیط زیست، اسفند ۱۳۸۵، دانشگاه صنعتی اصفهان

۲. سعید جعفری و ابراهیم شیرانی، شبیه سازی جریان در میکرو کانالها و محیط متخلخل با ابعاد میکرو با استفاده از روش شبکه بولتزمن، پذیرفته شده جهت ارائه اولین کنفرانس فناوری نانو در محیط زیست، اسفند ۱۳۸۵، دانشگاه صنعتی اصفهان

۳. سعید جعفری و ابراهیم شیرانی، شبیه سازی جریان در میکرو کانالها و محیط متخلخل با ابعاد میکرو با استفاده از روش شبکه بولتزمن، پذیرفته شده برای پانزدهمین کنفرانس سالانه (بین المللی) مهندسی مکانیک ایران، ISME2007، دانشگاه صنعتی امیرکبیر، ۱۳۸۶

۴. عباس صفایی و ابراهیم شیرانی، شبیه سازی جریان، و انتقال گرما در میکرو کانالها با استفاده از روش شبکه بولتزمن، پذیرفته شده برای اولین کنفرانس فناوری نانو در محیط زیست، اسفند ۱۳۸۵، دانشگاه صنعتی اصفهان

۵. سعید جعفری و ابراهیم شیرانی، شبیه سازی جریان در هندسه های با ابعاد میکرو به روش شبکه بولتزمن، مجموعه مقالات چهاردهمین کنفرانس سالانه بین المللی مهندسان مکانیک ایران، دانشگاه صنعتی اصفهان، ۱۳۸۵

۶. هادی اکبر زاده، سخنران مدعو در سیزدهمین کارگاه ماده چگال محاسباتی، دیماه ۱۳۸۵، مرکز فیزیک نظری عبدالسلام، تریست، ایتالیا

۷. هادی اکبر زاده، سختران مد عو در کنفرانس سالانه ماده چگال، بهمن ۱۳۸۵، دانشگاه فردوسی مشهد
۸. هادی اکبر زاده، ارایه مقاله در اولین کنفرانس نانو فناوری در محیط زیست - اسفند ۱۳۸۵ - دانشگاه صنعتی اصفهان
۹. هادی اکبر زاده، ارایه مقاله در کنفرانس سالانه فیزیک، شهریور ۱۳۸۵، دانشگاه شاهرود
۱۰. محمد مرشد، بررسی امکان تولید الیاف نانو از سدیم آلجینات به روش الکتروریسی، اولین کنفرانس فناوری نانو در محیط زیست، اسفند ۱۳۸۵ دانشگاه صنعتی اصفهان
۱۱. محمد مرشد، تهیه درجا محلول پلی آکریلونیتریل حاوی نانو ذرات نقره، اولین کنفرانس فناوری نانو در محیط زیست، اسفند ۱۳۸۵ دانشگاه صنعتی اصفهان
۱۲. محمد مرشد، اصلاح سطح نانوالیاف جهت کاربرد مهندسی بافت، اولین کنفرانس فناوری نانو در محیط زیست، اسفند ۱۳۸۵ دانشگاه صنعتی اصفهان
۱۳. محمد مرشد، کاربرد نانو ذرات اکسید فلزی در خنثی سازی مواد شیمیایی جنگلی، اولین کنفرانس فناوری نانو در محیط زیست، اسفند ۱۳۸۵ دانشگاه صنعتی اصفهان
۱۴. محمد مرشد، کاربرد نانو لوله های کربنی در الیاف جهت بهبود خواص مکانیکی، اولین کنفرانس فناوری نانو در محیط زیست، اسفند ۱۳۸۵ دانشگاه صنعتی اصفهان
۱۵. محمد مرشد، ساخت اسکافلد نانوالیاف به روش الکتروریسی و پتانسیل کاربرد آن در مهندسی بافت، ششمین کنفرانس ملی نساجی ۱۳۸۵
۱۶. محمد مرشد، بررسی خواص سطحی فیلتر کربن فعال روکش داده شده با نانوالیاف PNA، ششمین کنفرانس ملی نساجی ۱۳۸۶
۱۷. محمد مرشد، تولید نانوالیاف رسانای اکریلیک توسط پوشش دهی، ششمین کنفرانس ملی نساجی ۱۳۸۶
۱۸. محمد مرشد، الکتروریسی نانوالیاف حاوی نانو ذرات نقره، ششمین کنفرانس ملی نساجی ۱۳۸۶
۱۹. حسین توانایی، کاربرد نانو ذرات در تکمیل کالای نساجی، اولین کنفرانس فناوری نانو در محیط زیست، ۲-۳ اسفند ۱۳۸۵، دانشگاه صنعتی اصفهان
۲۰. فاطمه حیدری و عزت کشاورزی، ارائه معادلات حالت برای سیالات محدود شده در فضای نانو، اولین کنفرانس فناوری نانو در محیط زیست، ۲-۳ اسفند ۱۳۸۵، دانشگاه صنعتی اصفهان
۲۱. هادی اکبرزاده، سختران مدعو در سیزدهمین کارگاه ماده چگال محاسباتی - دیماه ۱۳۸۵ - مرکز فیزیک نظری عبدالسلام - تریست - ایتالیا
۲۲. هادی اکبرزاده، ارایه مقاله در سیزدهمین کارگاه ماده چگال محاسباتی - دیماه ۱۳۸۵ - تریست - ایتالیا
۲۳. هادی اکبرزاده، ارایه مقاله در چهارمین کنفرانس سمپوزیوم آسیایی علم مواد محاسباتی - شهریور ۱۳۸۶ - سئول - کره جنوبی
۲۴. هما همایونی و معصومه ولی زاده و سید عبدالکریم حسینی، تهیه ریز لایه های کیتوسانی جهت تصفیه آلاینده های زیست محیطی، اولین کنفرانس فناوری نانو در محیط زیست، ۲-۳ اسفند ۱۳۸۵، دانشگاه صنعتی اصفهان
۲۵. محمد نصیری و سید غلامرضا اعتماد، بررسی مدل های تخمین ضریب هدایت حرارتی نانو سیالات، اولین کنفرانس فناوری نانو در محیط زیست، ۲-۳ اسفند ۱۳۸۵ دانشگاه صنعتی اصفهان

۶- کنفرانس های برنامه ریزی شده

۱. برنامه ریزی و برگزاری اولین کنفرانس فناوری نانو در محیط زیست
۲. برنامه ریزی و برگزاری سمینار فناوری نانو در بسته بندی صنایع غذایی
۳. حمایت از ششمین کنفرانس نساجی ایران با هدف تاکید فعالیت های کنفرانس در زمینه نانو الیاف
۴. همکاری در برگزاری و حمایت از مدرسه تابستانه Strongly correlated electron systems

۷- فعالیت های آموزشی

۱. جمع آوری اطلاعات و آماده سازی نت های درسی برای ارائه درس "جریان های میکرو و نانو" به عنوان یک درس تحصیلات تکمیلی
۲. جمع آوری اطلاعات در خصوص مطالعات انجام شده در دنیا در زمینه فناوری نانو در بسته بندی صنایع غذایی
۳. تعریف درس تکنولوژی تولید الیاف نانو
۴. جمع آوری اطلاعات و آماده سازی نت های درسی برای ارائه درس "افزایش انتقال حرارت و نانو تکنولوژی" به عنوان یک درس تحصیلات تکمیلی
۵. جمع آوری اطلاعات و آماده سازی نت های درسی برای ارائه درس "نانو تکنولوژی و انرژی" به عنوان یک درس کارشناسی
۶. ارائه درس جریان های میکرو و نانو
۷. نانو ترمودینامیک از دیدگاه کلاسیک آماری

ضمیمه ۱ - طرح‌های تحقیقاتی

1-1 عنوان طرح: بررسی جذب سطحی آلاینده‌ی CO بر روی سطح (۱۱۱) فلزات واسطه‌ی Pt و Cu، با

محاسبات میکروسکوپی کوانتومی

مجری: دکتر هادی اکبرزاده (عضو هیات علمی)

همکاران: حجت قلی زاده (دانشجوی کارشناسی ارشد) - مجتبی اعلائی (دانشجوی دکتری)

مطالعه‌ی خواص و ویژگی‌های سطوح مواد در مقیاس اتمی و مولکولی در شاخه‌های مختلف علوم و فناوری نانو از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است. هدف فناوری نانو طراحی و ساخت ابزارهای کارآمد در زمینه‌های مختلف و در مقیاس‌های بسیار کوچک (عموماً بین چند تا چندصد نانومتر) است. از مهمترین زمینه‌های مورد توجه در نانوفناوری، می‌توان به تحقیق بر روی روش‌ها و ابزارهای مؤثر در حفظ محیط زیست اشاره کرد. در این شاخه از علوم و فناوری نانو، با هدف حفظ محیط زیست مطلوب و ترمیم آسیب‌های موجود در آن، تلاش‌ها در دو راستا ادامه دارد:

۱. طراحی و ساخت وسایل و ابزار مورد نیاز بشر، به طوری که در مقایسه با نمونه‌های فعلی آسیب و تهدید کمتری برای محیط زیست داشته باشد (رهیافت پیشگیرانه).

۲. تهیه‌ی سامانه‌های کارآمد برای رفع آلودگی‌های موجود در محیط زیست و ترمیم آسیب‌های غیرقابل پیش‌گیری و موجود در محیط زیست (رهیافت درمانی).

از زمینه‌های تحقیقاتی فعال در رهیافت اول می‌توان به شاخه‌های مختلف علم نوظهور اسپینترونیک اشاره کرد. این حوزه‌ی مشترک در علوم نانو و علم مواد تلاش دارد تا با طراحی و ساخت ابزارهای زندگی به صورتی که علی‌رغم کارایی بالاتر، مصرف مواد اولیه و انرژی در آن‌ها کمتر باشد از آسیب بیشتر به محیط زیست جلوگیری نماید.

از سوی دیگر رفع آلودگی‌های موجود در محیط زیست اعم از آب، خاک و هوا، از زمینه‌های مورد علاقه در رهیافت دوم است. اغراق نخواهد بود اگر تلاش برای کاهش و رفع آلودگی هوا را مهم‌ترین و مؤثرترین اقدام برای حفظ محیط زیست بدانیم. یک روش بسیار مؤثر برای نیل به این هدف، استفاده از کاتالیزور برای تبدیل آلاینده‌های موجود در هوا به فرآورده‌های بی‌خطر یا کم‌خطرتر است. کاتالیزور با کاهش ارتفاع سد انرژی فعال‌سازی واکنش، می‌تواند سرعت واکنش را تا هزاران برابر افزایش دهد. کاتالیزورها از مدت‌ها پیش شناسایی و در صنایع مختلف شیمی و پتروشیمی به کار رفته‌اند، اما تلاش برای یافتن کاتالیزورهای بهتر و کارآمدتر همچنان ادامه دارد. یکی از رویاهای علوم و فناوری نانو، شناخت و ساخت کاتالیزورهای هوشمند است که البته بدون شناخت کامل و دقیق رفتار کاتالیزورهای موجود دست‌یافتنی نخواهد بود. از این رو مطالعات نظری، تجربی و محاسباتی زیادی به منظور شناخت رفتار میکروسکوپی کاتالیزورها و گسترش کارایی آن‌ها در حال انجام است. برای درک رفتار و اندرکنش‌های یک کاتالیزور در یک واکنش، باید خواص و ویژگی‌های سطح کاتالیزور و واکنش‌دهنده‌ها را بدانیم. گام اول در هر واکنش کاتالیزوری، جذب سطحی واکنش‌دهنده‌ها بر روی سطح کاتالیزور است. این نکته در کنار اهمیت جذب سطحی در زمینه‌های کاربردی و نظری مهم دیگر، مانند مطالعات اصطکاک‌سنجی (در علوم

هوافضا و مکانیک سیالات)، حسگرهای حساس به گاز (در علوم الکترونیک) و ...، سبب شده است تا جذب سطحی مولکول‌های گازی بر روی سطوح فلزات واسطه توجه زیادی را به خود جلب نماید. در این میان یکی از معروف‌ترین و جالب‌ترین زمینه‌هایی که در چند دهه‌ی اخیر همواره مورد توجه بوده است، بررسی و مطالعه‌ی چگونگی جذب سطحی مولکول مونوکسید کربن، CO، روی سطوح مختلف فلزات واسطه است. جذب سطحی CO روی سطوح فلزی، یک مرحله‌ی تعیین‌کننده برای چند واکنش کاتالیزوری پرکاربرد نظیر اکسیداسیون و هیدروژن‌سازی است. علاوه بر آن به دلیل سادگی و کوچکی، این مولکول به یک مولکول مقیاس در علوم سطح تبدیل شده است. اما اگر بخواهیم انگیزه‌ی اصلی برای مطالعه‌ی جذب سطحی CO روی سطوح فلزی را نام ببریم، بی‌شک باید به اهمیت فنی و کاربردی واکنش کاتالیزوری اکسیداسیون CO و تبدیل این گاز خطرناک و سمی به گاز کم‌خطرتر CO₂ اشاره کنیم.

واکنش تبدیل CO به CO₂ در حالت عادی بسیار کند است، به طوری که می‌توان از آن صرف‌نظر کرد. افزایش سرعت واکنش نیازمند افزایش دما و غلظت اکسیژن و یا استفاده از کاتالیزور است. با توجه به صرفه‌جویی قابل توجه در مصرف انرژی و نیز ماندگاری بالا، استفاده از کاتالیزور اهمیت ویژه‌ای پیدا می‌کند. CO گازی سمی و بسیار خطرناک است و در مجموع چیزی در حدود ۱۰٪ از موجودی آن در کل جو ناشی از فعالیت‌های انسانی است. اما آنچه وضعیت را بحرانی می‌کند، توزیع نایک‌وخت و تجمع خطرناک این گاز سمی در محدوده‌ی شهرها است که به دلیل فعالیت‌های صنعتی و به ویژه از طریق خروج از آگزوز خودروها و سایر موتورهای درون‌سوز اتفاق می‌افتد. به طور مثال حدود ۹۵ تا ۹۸ درصد CO موجود در جو یک منطقه‌ی شهری ناشی از فعالیت‌های انسانی است. از این جاست که یافتن راهی برای کاهش تولید و نیز تبدیل این فراورده اهمیت می‌یابد. از میان راه‌های متفاوت برای مقابله با این خطر، آنچه در کوتاه‌مدت مفیدتر به نظر می‌رسد، استفاده از مبدل‌های کاتالیستی در آگزوز موتورهای درون‌سوز است. مطالعات نشان داده است که استفاده از یک نوع پیشرفته از مبدل کاتالیستی (موسوم به مبدل‌های سه‌راهه) در موتورهای بنزینی توانایی کاهش بیش از ۷۰٪ آلاینده‌های خروجی ناشی از هیدروکربن‌های نسوخته در موتور را دارد. همچنین این مبدل کاتالیستی می‌تواند تا ۵۰٪ آلاینده‌های اکسیدنیترژن در موتورهای بنزینی و حداقل ۳۰٪ آلاینده‌های خروجی موتورهای دیزلی را کاهش دهد. این گونه مبدل‌ها از دهه‌ی ۱۹۷۰ در ایالات متحده و از دهه‌ی ۱۹۸۰ در اروپا به کار گرفته شده‌اند. امروزه بیش از نیمی از خودروهای موجود در جهان و حدود ۸۰٪ از خودروهای در حال تولید مجهز به مبدل‌های کاتالیستی هستند. این مبدل‌ها ضمن اکسیداسیون گازهای CO و HC، احیای گازهای NO و NO₂ را نیز تسریع می‌کنند و قادرند تا ۹۵٪ از آلودگی‌های موجود در خروجی آگزوز را کاهش دهند. کاتالیزورهای به کاررفته در این مبدل‌ها معمولاً ترکیبی از فلزات پلاتین، Pt، مس، Cu، پالادیوم، Pd و رودیوم، Rh، هستند. Pt، Pd و Cu در واکنش اکسیداسیون CO و هیدروکربن‌های نسوخته، مانند HC، شرکت می‌کنند. به‌ویژه Pt برای اکسیداسیون پارافین و هیدروکربن‌های آروماتیک مناسب است. Rh در واکنش احیای اکسیدهای نیترژن به نیترژن خالص شرکت می‌کند، ضمن آنکه ظرفیت بالایی در نگهداری اکسیژن دارد. بدین ترتیب به کاربردن یک مخزن متخلخل با سطح پوشیده شده از حدود ۱/۵ گرم Pt یا Pd می‌تواند کمک بسیار مؤثری به حفظ محیط زیست نماید. از این‌روست که بررسی نحوه‌ی اندرکنش مولکول CO با سطح فلزاتی نظیر Pt، Pd و Cu اهمیت خاصی می‌یابد.

آنچه امروزه در مطالعه‌ی جذب سطحی CO روی سطح فلزاتی مانند Pt، Cu و Rh توجه زیادی را در رشته‌های فیزیک، شیمی و علوم سطح به خود جلب کرده، مقایسه‌ی جایگاه‌های ارجح جذب سطحی به‌دست‌آمده از روش-

های مختلف محاسباتی مبتنی بر نظریه‌ی تابعی چگالی با مشاهدات تجربی است. در بررسی جذب سطحی مولکول CO روی سطوح فلزات نامبرده مانند سطوح Pt(111)، Cu(111) و Rh(111)، روش‌های مختلف و متداول محاسباتی که مبتنی بر نظریه‌ی تابعی چگالی، DFT¹، هستند به اتفاق پیش‌بینی می‌کنند که در پوشش‌های کم، جذب در جایگاه‌های بین اتم‌های سطحی پایدارتر است از جذب بر روی اتم‌ها. این در حالی است که مشاهدات تجربی مختلف به اتفاق گزارش داده‌اند که در پوشش‌های کم جذب دقیقاً بر روی اتم‌ها اتفاق می‌افتد.

تاکنون دلایل مختلفی برای این نقص پیشنهاد شده است. در این مطالعه سعی شد با انتخاب دقیق‌تر پارامترهای محاسباتی (از قبیل استفاده از تقریب پتانسیل برهمکنش تبادل-همبستگی بهتر و پیشرفته‌تر، در نظر گرفتن تأثیر مراتب بالای تصحیحات نسبی و...) در بسته‌ی نرم‌افزاری محاسبات ماده چگال WIEN2k، درک بهتری از برهمکنش مولکول CO با سطح فلز به دست آید. در پایان این تحقیق نتایج مهمی به دست آمد که پاره‌ای از آن‌ها در قالب مقاله‌ای تحت عنوان «بررسی جذب سطحی آلاینده‌ی CO بر روی سطح Pt(111) با محاسبات میکروسکوپی کوانتومی» برای ارائه‌ی سخنرانی در «اولین کنفرانس فناوری نانو در محیط زیست» که در روزهای دوم و سوم اسفندماه ۱۳۸۵ در دانشگاه صنعتی اصفهان برگزار خواهد شد پذیرفته شده است. با یاری خداوند سایر نتایج به دست آمده از این مطالعه نیز در نشریات داخلی و خارجی ارائه خواهد شد.

2-1 عنوان طرح: مطالعه اثر مشترک آلیاژ هویسلر CO₂MnSi با زیرلایه GaAs

مجری: دکترهای اکبرزاده (عضو هیات علمی)

همکاران: ناهید قادری (دانشجوی دکتری) - سید جواد هاشمی فر (دانشجوی دکتری)

این طرح با موفقیت به انجام رسید و حاصل آن بصورت یک مقاله در مجله Physical Review B در دست داوری است (نسخه‌ای از این مقاله ضمیمه گزارش است). اضافه بر آن یک سخنرانی مبسوط (بعنوان سخنران مدعو) در سیزدهمین کارگاه ماده چگال محاسباتی در مرکز فیزیک نظری عبدالسلام (ICTP) واقع در تریست ایتالیا ارائه گردید. سخنرانی دیگری نیز در کنفرانس ماده چگال که از طرف انجمن فیزیک در دانشگاه فردوسی مشهد برگزار شد ارائه گردید.

3-1 عنوان طرح: بررسی خواص ساختاری و مغناطیسی و الکترونی مرز مشترک Co₂Cr_{0.5}Fe_{0.5}Al/GaAs

در راستای [001]

مجری: دکترهای اکبرزاده (عضو هیات علمی)

همکاران: ساره زارعی (دانشجوی کارشناسی ارشد)

یکی از مسائل مهم در زمینه اسپینترونیک تزریق جریان اسپینی از یک فلز فرو مغناطیس به نیم رسانا است. در سالهای اخیر فرو مغناطیس‌های نیم فلز، بدلیل توانایی بالا در تولید جریان قطبیده اسپینی مورد توجه بسیاری از محققان قرار گرفته‌اند که آلیاژهای هویسلر از این دسته هستند. نیم فلزها موادی هستند که برای یک نوع اسپین رفتار فلزی و برای نوع دیگر رفتار نیم رسانایی دارند. لذا این مواد در سطح فرمی دارای قطبش اسپینی ۱۰۰٪ هستند. در بسیاری از مواد گرچه خاصیت نیم فلزی در انبوهه بروز می‌کند لیکن تجربه نشان داده است که این خاصیت در

مرز مشترک این مواد با نیم رساناها به علت حضور اثرات مرز مشترک که از بی نظمی اتمی ناشی می شود از بین می رود. بنابراین مطالعه اتصال بین نیم فلز و نیم رسانا بویژه بررسی اثرات مرز مشترک بر روی خواص مغناطیسی و الکترونی آنها بسیار مهم است. ترکیب $\text{Co}_2\text{Cr}_{0.6}\text{Fe}_{0.4}\text{Al}$ از جمله آلیاژهای هویسلر است که خاصیت نیم فلزی در حالت انبوه آن پیش بینی شده است. از مزایای این آلیاژ هویسلر دمای کوری بالا (۶۶۵K) و مغناطیسمقاومت تونلی بزرگی در حدود (۳۷٪) در میدان ۰,۲۵ تسلا است. بنا بر اطلاعات ما تا کنون مرز مشترک این آلیاژ با نیم رسانا مورد بررسی قرار نگرفته است و بنابراین مشخص نیست که آیا قطبش بالا که در انبوه آلیاژ مشاهده در مرز مشترک آن با نیم رسانا نیز حفظ می شود؟ همین امر باعث شد که ما مرز مشترک این ترکیب با GaAs که از نیم رساناهای متعارف در صنعت الکترونیک است را برای بررسی انتخاب کنیم. در این ریاله با استفاده از نرم افزار ESPRESSO در ابتدا خواص انبوه آلیاژ $\text{Co}_2\text{Cr}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}\text{Al}$ که از نظر ساختاری به ترکیب $\text{Co}_2\text{Cr}_{0.6}\text{Fe}_{0.4}\text{Al}$ بسیار نزدیک است و از طرفی ابر یاخته کوچکتری نیز در مقایسه با آن دارد ارائه شده است. نتایج حاصل از انبوه حضور خاصیت نیم فلزی در آلیاژ را تأیید می کند. در ادامه مرز مشترک $[\text{GaAs}001]/\text{Co}_2\text{Cr}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}\text{Al}$ شبیه سازی شده و خواص الکترونی و مغناطیسی این مرز مشترک با استفاده از محاسبات اولیه کوانتومی در چارچوب نظریه تابعی چگالی اسپینی و با بکارگیری رهیافت شبه پتانسیل مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج بررسی مرز مشترک های مختلف این آلیاژ با نیم رسانا نشان می دهد که خاصیت نیم فلزی در تمامی مرز مشترک ها کاهش می یابد. با این حال پایانش CrAl-As علاوه بر اینکه پایدارترین مرز مشترک است، قطبش اسپینی آن در حد بالایی (۷۸٪) باقی می ماند. ضمناً نتایج ما از بررسی مرز مشترک تغییر یافته CrCr-As نشان می دهد که با جایگذاری اتم Cr به جای Al در پایانش CrAl-As قطبش اسپینی در مرز مشترک افزایش می یابد. در پایان ناپیوستگی نواری و مقدار سد شاتکی در مرز مشترک محاسبه شدند.

نتایج حاصل از این پروژه در قالب مقاله و پوستردر داخل و خارج کشور ارائه شده است که در زیر آمده است:

1. S. Zarei, N. Ghaderi, S. J. Hashemifar, H. Akdarzadeh, " Half-Metallicity at $\text{Co}_2\text{Cr}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}\text{Al}/\text{GaAs}[001]$ Heterostructures" Poster, 13th International Workshop on Computational Physics and Materials Science: Total Energy and Force Methods", Trieste, Italy, January 2007.
2. S. Zarei, S. J. Hashemifar, H. Akbarzadeh, "Theoretical study of structural and electronic properties of $\text{Co}_2\text{Cr}_{(0.5)}\text{Fe}_{(0.5)}\text{Al}$ Heusler alloy compound and its interface with GaAs", The Annual Physics Confrence of Iran, Shahrood, Iran, August 2006.

4-1 عنوان طرح: بررسی سطح [001] آلیاژ هویسلر $\text{Co}_2\text{Cr}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}\text{Al}$

مجری: دکترهادی اکبرزاده (عضو هیات علمی)

همکاران: زهره حفاری (دانشجوی کارشناسی ارشد)

یکی از مباحث جدید علمی که امروزه توجه بسیاری از محققان را به خود جلب کرده است مبحث اسپینترونیک است. در علم اسپینترونیک با نگرشی متفاوت به ویژگیهای الکترون تلاش می شود که کارایی ابزارهای الکترونیکی افزایش یابد. به عبارت دیگر از اسپین الکترون علاوه بر بار آن برای انتقال اطلاعات و مفاهیم استفاده می شود. پدیده ای که در مواد فرومغناطیس بکار رفته در ابزارهای اسپینترونیکی مد نظر است نابرابری تعداد الکترونها دارای اسپین اکثریت و اقلیت است. لذا هر چه قطبش اسپینی این مواد بالاتر باشد قابلیت بیشتری برای استفاده در ابزارهای اسپینترونیکی دارند. بنابراین فرومغناطیسهای نیم فلز با داشتن قطبش اسپینی ۱۰۰٪ گزینه های مناسبی برای این منظور

هستند. در منحنی چگالی حالات الکترونی این مواد در انرژی فرمی تنها الکترونها با یک نوع اسپین وجود دارد. در بین نیم فلزات آلیاژهای هویسلر به خاطر داشتن دمای کوری بالا در ارجحیت قرار می گیرند. یکی از این ترکیبات آلیاژ هویسلر Co_2CrAl است که خاصیت نیم فلزی آن در مطالعات نظری تایید شده است. همچنین مشاهده شده است که اگر این ترکیب را با اتم آهن آرایش دهند دمای کوری ترکیب حاصل یعنی $Co_2Cr(1-x)Fe_xAl$ افزایش می یابد. در مشاهدات تجربی و نظری دیده شده است که این ترکیب در غلظت $x=0/4$ از اتم آهن علاوه بر داشتن دمای کوری بالا بیشترین مقاومت مغناطیسی را از خود نشان می دهد (مقاومت مغناطیسی به تغییر مقاومت الکتریکی مواد در حضور میدان مغناطیسی خارجی گفته می شود و یکی از معیارهای انتخاب مواد سازنده قطعات اسپینترونیکی می باشد). پس می توان گفت که این غلظت برای بررسی در اولویت قرار دارد. نکته دیگری که باید به آن توجه داشت این است که در عمل با سطوح و مرز مشترک مواد سروکار داریم. خواص مواد از جمله خاصیت نیم فلزی نیز ممکن است تحت تاثیر عوامل مختلفی مانند آثار سطحی تغییر کند. بنابراین تصمیم بر آن شد که سطح آلیاژ $Co_2Cr(1-x)Fe_xAl$ به ازای $x=0/4$ در راستای [001] مورد بررسی قرار گیرد. اما از آنجا که بررسی سطح این ترکیب نیاز به ابرسلول بزرگی داشت غلظت $x=0/5$ انتخاب شد که ابرسلول کوچکتری نیاز دارد و حجم محاسبات آن کمتر است.

در این پروژه ابتدا خواص انبوهه این ترکیب استخراج شد و خاصیت نیم فلزی آن در این حالت تایید شد. همچنین دیده شد که در این ترکیب اتمهای Co هم با همسایگان مرتبه اول خود یعنی اتمهای Fe و Cr و هم با همسایگان مرتبه دوم یعنی دیگر اتمهای Co پیوند دارند. با تخمین انرژی پیوند مشاهده شد که پیوند Co-Cr از دیگر پیوندهای اتم Co قویتر است. سپس به بررسی سطوح مختلف این آلیاژ در راستای [001] یعنی سطوح CoCo با لایه زیرین CrAl، CoCo با لایه زیرین FeAl، CrAl و FeAl پرداختیم. در بررسی این سطوح از ابرسلولهای ۱۵ لایه ای و ۱۷ لایه ای با خلا ۱۶ a.u. استفاده شد. با واهلش این ابر سلولها دیدیم که فواصل بین لایه ای با دور شدن از سطح به طور نوسانی به مقدار ایده آل در حالت انبوهه نزدیک می شود. این رفتار که از نوسانات چگالی بار ناشی می شود به نوسانات فریدل موسوم است. در تمامی این سطوح دیده شد که خاصیت نیم فلزی از بین می رود. با این حال بیشترین قطبش اسپینی در سطح CrAl برابر با ۷۸٪ اندازه گیری شد. در بررسی حالات سطحی در منحنی چگالی الکترونی دیده شد که دو اثر پتانسیل سطحی که ناشی از افزایش انرژی الکترونها در سطح می باشد و تقویت سطحی تبادل که از کاهش تعداد همسایگان و تضعیف پیوند در سطح ناشی می شود، در از بین بردن خاصیت نیم فلزی دخیل هستند. همچنین دیدیم که در سطح CoCo با لایه زیرین CrAl اثر تقویت سطحی تبادل به دلیل پیوند قوی بین اتمهای Co و Cr تا حدودی تضعیف می شود. به طور کلی بیشترین حالات سطحی متعلق به اتم Co هستند که پیوند آن در سطح به دلیل از دست دادن نیمی از همسایگان مرتبه اول و دوم تضعیف می شود. در ادامه به بررسی سطح تغییر یافته CrCr پرداختیم که از جایگزین کردن اتم Al با اتم Cr در سطح CrAl بدست می آید. در این حالت دیده شد که حالات سطحی موجود در سطح CrAl به طور کامل از بین می روند. لذا می توان گفت با پوشش این آلیاژ توسط یک لایه از اتمهای Cr خاصیت نیم فلزی آن حفظ می شود. در نهایت به منظور بررسی پایداری نسبی این سطوح نمودار فاز با استفاده از نظریه ترمودینامیکی ابتدا به ساکن رسم شد. در این روش پتانسیل شیمیایی اتمهای موجود در ترکیب به عنوان پارامتر آزاد در نظر گرفته می شوند که می توانند تحت تاثیر شرایط آزمایشگاهی همانند دما و فشار تغییر کنند. با رسم این نمودار دیده شد که تنها سطح CrAl در محدوده مجاز تغییرات پتانسیل شیمیایی قرار دارد و می توان آن را در آزمایشگاه رشد داد.

5-1 عنوان طرح: بررسی خواص ساختاری، مغناطیسی و الکترونی آلیاژ Ni_xCr_{1-x} در غلظت های

$$X = \{0.125, 0.25, 0.375, 0.5, 0.625, 0.75, 0.875\}$$

مجری: دکتر هادی اکبرزاده

همکاران: رستم گل سرخ تبار (کارشناسی ارشد)، سیدجواد هاشمی فر (دانشجوی دکتری)

خواص ساختاری، مغناطیسی و الکترونی آلیاژ Ni_xCr_{1-x} در غلظت های متعددی در گستره $0.125 \leq x \leq 0.875$ با روش امواج تخت بهبود یافته خطی با پتانسیل کامل بر پایه نظریه تابعی چگالی محاسبه شد. در بررسی خواص ساختاری، انرژی تشکیل، پارامتر شبکه و مدول انبوه آلیاژها در ساختارهای *bcc* و *fcc* و فازهای فرو مغناطیس و فری مغناطیسی محاسبه شد. نتایج حاصل از محاسبه حاکی از آن است که تمایل به تشکیل آلیاژ در محدوده $x = 0.78 - 0.6$ از بقیه غلظت ها بیشتر است. ضمناً در محاسبات ما یک گذار فاز ساختاری از *bcc* به *fcc* در غلظت $x = 0.22$ و یک گذار فاز مغناطیسی از فری مغناطیس به فرو مغناطیس در محدوده غلظت $x = 0.75 - 0.875$ مشاهده شد. مطالعه پارامتر شبکه و مدول انبوه نشان می دهد که پیوند *Cr-Ni* در مقایسه با پیوندهای *Ni-Ni* و *Cr-Cr* ضعیف تر است. با بررسی نتایج مغناطیسی آلیاژها مشخص شد که برهم کنش مغناطیسی اتم ها در ساختارهای *bcc* احتمالاً از نوع *RKKY* است. محاسبه انرژی مغناطیسی و قطبیدگی اسپینی در سطح فرمی نشان داد که آلیاژ $Ni_{0.75}Cr_{0.25}$ با ساختار *fcc* و قطبیدگی اسپینی حدود ۹۰ در صد دارای بیشترین پایداری مغناطیسی، ساختاری است.

6-1 عنوان طرح: بررسی اثر تعداد لایه ها در شبیه سازی های سطوح در فلزات واسطه

مجری: دکتر هادی اکبرزاده

همکار: مجتبی اعلائی (دانشجوی دکتری)

سطوح فلزات واسطه به عنوان کاتالیزور بسیار حایز اهمیت هستند و به این علت در دهه اخیر شبیه سازی های کوانتومی بر روی این سطوح نیز بشدت افزایش یافته است. در این نوع شبیه سازی ها برای اینکه سطح را شبیه سازی نماییم بایستی تقارن بلوری در جهت عمود بر سطح را حذف کنیم و برای این کار در جهت محور *Z* تعدادی لایه همراه با یک خلا در حدود ده انگستروم در نظر گرفته می شود. تعداد لایه ها چیزی است تقریباً اختیاری و بسته به شبیه سازی با معیارهای مختلفی این تعداد انتخاب میشود. اخیراً نشان داده شده است که تعداد لایه ها در شبیه سازی سطح فلز آلومینیم باید بیش از ۲۰ لایه باشد تا بتوان تغییرات بر روی سطح را بدرستی پیش بینی کرد.

در شبیه سازی های سطوح فلزات واسطه معمولاً از ۵ تا ۷ لایه استفاده می شود. به این دلیل ما به بررسی اثر تعداد لایه ها در سه ستون از عناصر واسطه می پردازیم که عبارت اند از:

Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, Co, Rh, Ir, . انتخاب این عناصر به این علت بوده است که این عناصر کاربرد زیادی در صنعت به عنوان کاتالیزور دارند. در این تحقیق ما بر روی اثر تعداد لایه ها بر باز آرایشی سطوح و همچنین اثر تعداد لایه ها بر انرژی جذب مولکول های CO و NO می پردازیم.

7-1 عنوان طرح: طرح مطالعاتی کاربرد نانو تکنولوژی در صنایع نساجی

مجری: دکتر محمد مرشد

همکاران: دکتر سید عبدالکریم حسینی و مهندس روح اله جلیلی

نانو تکنولوژی به عنوان انقلابی در شرف و قوع، آینده اقتصادی کشورها و جایگاه آنها در جهان را تحت تاثیر جدی قرار خواهد داد در سال های اخیر تحرکات شدیدی از طرف دولتها برای سرعت بخشیدن به توسعه نانو تکنولوژی صورت گرفته است. در این تحقیق به وضعیت جهانی نانو تکنولوژی در صنعت نساجی، پیشرفت ها، محصولات و پیش بینی های صورت گرفته پرداخته شد. سپس وضعیت نانو تکنولوژی در ایران در مقیاس جهانی بررسی و مقایسه ای میان فعالیت های انجام شده در ایران با کره جنوبی در حوزه های عملی و تحقیقاتی صورت گرفت. با توجه به تحقیقات صورت گرفته، تولید و به کارگیری نانو الیاف به عنوان یک روش موفق معرفی شده و به روش های تولید آن خصوصان الکترورسی پرداخته و کاربردهای آن معرفی گردیدند.

جهت مشخص نمودن فرصت ها و موانع بکارگیری نانو تکنولوژی در صنعت نساجی به مواردی نظیر، ویژگیهای نانو تکنولوژی، شرایط جهانی، ویژگیهای کشور، مزایای حاصل از بکارگیری نانو تکنولوژی، وضعیت صنعت نساجی در ایران و محورهای دارای اولویت مورد توجه قرار گرفت. در نهایت با توجه به دست آوردهای این تحقیق، جهت بکارگیری نانو تکنولوژی در صنعت نساجی پیشنهادات و راهکارهایی به دولت ارائه شد.

8-1 عنوان طرح: تدوین یک برنامه محاسباتی برای شبیه سازی جریان سیال همراه با انتقال حرارت در

میکرو کانالها

مجری: دکتر ابراهیم شیرانی

هدف از انجام این طرح توسعه یک برنامه کامپیوتری برای شبیه سازی جریان سیال و انتقال حرارت با ابعاد میکرو بکمک روش شبکه بولتزمن است. به طور اخص به کارگیری و تست شرایط مرزی پخش مولکولی برای بررسی سرعت لغزشی و پرش دمایی روی دیوار و نیز اعمال برنامه محاسباتی تدوین شده روی چند مورد مد نظر می باشد. برنامه کامپیوتری توسعه داده شده از روش شبکه بولتزمن استفاده کرده و قابلیت شبیه سازی جریان سیال و انتقال حرارت در مجاری با هندسه های مختلف و ابعاد مختلف و در رژیم های پیوسته، لغزشی و رژیم گذار را دارد. شرایط استفاده شده در این برنامه کامپیوتری شرط مرزی پخش مولکولی روی دیوار و شرط مرزی ساکی برای دمایی ورودی و خروجی می باشد. همچنین برای محاسبه زمان آرامش از روش وابسته کردن زمان آرامش به عدد نودسن استفاده شده است.

در ابتدا یک برنامه کامپیوتری اولیه تهیه شد که جریان سیال بدون انتقال گرما را بین دو صفحه با رانش اختلاف فشار شبیه سازی می کرد. در ادامه علاوه بر ایجاد تغییرات در بخش هیدرودینامیکی برنامه و بررسی شرایط مرزی پخش مولکولی و شرایط مرزی سرعت ورودی، شبیه سازی انتقال حرارت بکمک روش شبکه بولتزمن به آن افزوده شد. به منظور اطمینان یافتن از صحت برنامه کامپیوتری، ابتدا این برنامه کامپیوتری با استفاده از روش شبکه بولتزمن برای چند مورد با ابعاد ماکرو شامل جریان سیال و انتقال حرارت در حفره با اعداد رینولدز متفاوت و جریان کوئت بررسی و نتایج با نتایج حاصل از حل معادلات ناویر-استوکز و معادله فوریه برای انتقال حرارت مقایسه گردید و صحت برنامه کامپیوتری و دقت جوابها بررسی شد. این بررسی نشان داد که برنامه کامپیوتری تهیه شده دارای دقت مناسب بوده و روش شبکه بولتزمن قادر است جریان های سیال همراه با انتقال گرما را در رژیم ماکرو بخوبی شبیه سازی کند. سپس روش شبکه بولتزمن برای هندسه های با ابعاد میکرو شامل جریان سیال و انتقال حرارت در

میکرو کانال ها، میکرو حفره ها و جریان میکرو کوئت با اعداد نودسن مختلف با استفاده از اعمال شرط مرزی پخش مولکولی و وابسته کردن زمان آرامش به عدد نودسن شبیه سازی شد. نتایج حاصل از حل جریان و انتقال حرارت در ابعاد میکرو با روشهای مونت کارلو، دینامیک مولکولی و ماکسول مقایسه شد که نشان داد که برنامه کامپیوتری تهیه شده با استفاده از روش شبکه بولتزمن قادر است جریان سیال همراه با انتقال گرما را در رژیم گذار (در هندسه های با ابعاد میکرو) نیز بخوبی و با دقت بسیار بالا شبیه سازی کند. همچنین میزان انتقال حرارت (عدد ناسلت) در طول ورودی کانالهای با ابعاد میکرو و ماکرو با هم مقایسه شد. نتایج مقایسه، تغییرات قابل توجه میزان انتقال حرارت در طول ورودی را در جریان های میکرو نسبت به جریان های ماکرو نشان می دهد.

9-1 عنوان طرح: سنتز نانو پودر مس

مجری: دکتر عزت کشاورزی

همکاران: استانداری و موسسه تحقیقات صنعتی استاندارد

فناوری نانو یکی از جدید ترین علوم روز دنیا می باشد، که دارای جایگاه ویژه ای با کاربرد های فراوان در تمامی زمینه های علوم است. از زمینه های فعال فناوری نانو می توان به نانو الکترونیک، نانومواد، دستگاه های اندازه گیری در اندازه نانومتری، نانو کاتالیستها، نانو کامپوزیتها، نانودارو ها و نانو سرامیکها و... اشاره کرد. یکی از شاخه های فناوری نانو که اخیراً مورد توجه قرار گرفته است تولید نانو ذرات است. نانو پودرها به خاطر کاربرد های فراوانی که در صنایع الکترونیک، صنایع متالورژی، پزشکی، صنایع بسته بندی، بهبود فرآیند های تبدیلات گازی، بهبود خواص بتون، صنایع هسته ای، صنایع لاستیک سازی و... دارند، دارای اهمیت بسزایی هستند. نانو پودر ها را می توان به روش های مختلفی تولید کرد به عنوان مثال: روشهای آسیاب کردن، روش های استفاده از فاز بخار، روش های استفاده از امواج ماوراء صوت، روش های استفاده از لیزر و روش های شیمیایی.

سنتز نانو پودر مس، به خاطر کاربرد های فراوان آن، به عنوان مثال: در صنایع متالورژی پودر جهت تولید آلیاژهای خاص (سگمنت سازی)، به عنوان آنتی باکتریال در پزشکی، به عنوان افزودنی در نانو روان کننده ها جهت بهسوزی سوخت در موتور و به عنوان افزودنی در نانو سیالات جهت کاهش اتلاف انرژی در سیستم های برودتی و حرارتی بسیار حائز اهمیت است. همانطوری که ذکر شد روش های مختلفی برای سنتز نانو پودر فلزی وجود دارد که از بین این روش های موجود، روش های شیمیایی جزء مهمترین روش ها رده بندی می شود چون می توان در این روش اولاً: سایز ذرات را به راحتی کنترل کرد ثانیاً: با امکانات کم و بدون نیاز به دستگاههای گران قیمت قابل انجام است. تاکنون تحقیقات زیادی در زمینه سنتز نانو پودر ها صورت گرفته است، به عنوان مثال: پلیمری و همکارانش نانو نانو پودر مسی با استفاده از میسل های برگشتی تولید کردند که سایز ذرات آنها بین ۱۳-۳ نانومتر بود. سان و همکارانش نانو پودر مسی پایداری با سایز بین ۶۰-۵۰ نانومتر را تولید کردند که دارای پوشش اتیل هگزیل هیدروژن فسفات (HDEHP) در فاز آلی بود. روزنبد و همکارانش نیز پودر مس با سایز کمتر از میکرو متر را تولید کردند. و اخیراً تانگ و همکارانش با استفاده از یکسری واکنش های شیمیایی در محیط هیدرازین ذرات مسی با سایز ۱۰۰ نانومتر تولید نمودند.

ما در این پروژه ابتدا نانو پودر مس را با استفاده از یک روش شیمیایی با صرف هزینه کم و بدون استفاده از هیچ گونه فعال کننده های سطحی یا میسل های برگشتی، با سایز کمتر از ۱۰۰ نانومتر تولید کردیم. در این روش

سایز ذرات قابل کنترل است چون تحت تأثیر عواملی از قبیل دما و غلظت نیست و به آسانی می توان این روش را به یک روش صنعتی تبدیل کرد. نهایتاً روشی مناسب برای شناور سازی پایدار این نانو پودر ها بدست آورده ایم.

10-1 عنوان طرح: تولید توده مواد نانو ساختار به کمک روش تغییر شکل شدید مواد

مجری: دکتر محمود سلیمی

در سالهای اخیر مواد توده ای نانو ساختار [NSM : bulk nano structured material] که بوسیله روشهای مختلف تغییر شکل شدید پلاستیک [SPD: Severe Plastic Deformation] تولید می شوند علاقه روزافزون متخصصین را به خود جلب کرده است. مواد " تغییر شکل پلاستیک یافته شدید" اغلب دارای اندازه ای حدود 100-200 نانو متر بوده و دانه های داخلی آن دارای چند زیر ساختار که بخاطر شبکه کریستالی شدیداً "اعوجاج یافته" می باشند.

علاوه بر آن تحلیل x-ray ابعاد کریستالی در حدود 50 nm را نشان می دهد. به این دلیل مواد SPD به عنوان مواد توده ای نانو ساختار نامیده می شوند. این علاقه نه تنها به دلیل خواص فیزیکی و مکانیکی بهتر بلکه مزایای متعدد این مواد نسبت به مواد نانو ساختار تولید شده از روشهای دیگر است. بویژه روش SPD باعث رفع بعضی ضعف های باقیمانده در مقایسه با نمونه های فشرده شده بدلیل ناخالصی ایجاد شده در آسیاب ها می شود و بنابراین اصولاً "فرآیند تولید مواد توده ای نانو ساختار بوسیله SPD جایگزین روشهای دیگر مانند متالورژی پودر این مواد می گردد.

کاملاً واضح است که تغییر شکل های زیاد به وسیله تغییر شکل های سنگین مثل نورد سرد یا کشش باعث کوچک شدن میکروساختارها در دمای پایین می شود. به هر حال ساختارهای شکل گیری شده معمولاً "زیر ساختارهای سلولی شکل کم تغییر جهت یافته هستند. در حالیکه نانو ساختارهای شکل گیری شده از SPD ساختارهایی با دانه بندی ریز داشته و عمدتاً " دارای زاویه دانه بزرگ می باشند. شکل گیری چنین ساختارهایی در SPD تحت تغییر شکل بسیار زیاد، دمای کم و فشار زیاد صورت می گیرد. چند روش تغییر شکل مکانیکی برای SPD شناخته شده است که دو روش معروف عبارتند از از کرنش پیچشی شدید تحت فشار زیاد (Severe Torsion Straining) و فشردن از کانال مساوی زاویه دار (equal channel angular pressing) که این روشها قادر به تولید مواد نانو ساختار تعدادی از آلیاژهای تجاری می باشند. مواد نانو ساختار تولید شده بوسیله SPD عموماً از جنبه های زیر قابل ملاحظه اند.

۱- افزایش فوق العاده استحکام مکانیکی و تغییر مدل الاستیسیته نسبت به ماده اولیه

۲- مقاومت در مقابل سایش و خوردگی نسبت به ماده اولیه

۳- تغییر خواص الکترومغناطیسی این مواد نسبت به ماده اولیه

برای تولید این مواد تنها به ماشین های شکل دهی و قالب احتیاج بوده و برای انجام تحقیقات در این زمینه میکروسکوپ الکترونی که قادر به تصویربرداری در حد 200 nm باشد احتیاج خواهد بود.

در این طرح تحقیقاتی موارد زیر دنبال می گردد.

۱- تحلیل ایجاد نانو ساختارها از روش SPD به روش اجزاء محدود و کران بالایی

۲- تولید نمونه های آزمایشگاهی به منظور بررسی کیفیت محصولات و کارایی این روش

11-1 عنوان طرح: ارائه مدل تغییر شکل پلاستیک در مقیاس نانو

مجری: دکتر محمود سلیمی

مطالعه برای ارائه یک مدل تئوریک که قادر به تشخیص و تحلیل مرز نابعائی ها و مناطق معیوب هنگام تغییر شکل و چرخش شبکه کریستال برای تغییر شکل های موضعی و باندهای برش آغاز شده است . این مدل تحلیلی مسائل پلاستیسیته در مقیاس نانو را امکان پذیر می سازد. مدل مذکور براساس اصول فیزیکی حرکت نابعائی ها و ارتباط آنها با عیوب مختلف را بیان میکند.

12-1 عنوان طرح: ساخت نمونه های آزمایشگاهی ورقهای نانو ساختار به روش ARB

مجری: دکتر محمود سلیمی

در این روش با نورد مکرر ورق و دولایه ، چهارلایه، هشت لایه، شانزده لایه و... که ضخامت تا مقیاس نانو ادامه مییابد. خواص مکانیکی ورق تولیدی بسیار متفاوت از ورق معمولی خواهد بود. این پروژه موارد تئوری و عملی را در بر میگیرد مواد اولیه این طرح شامل ورق و یکدستگاه نورد آزمایشگاهی برای کارهای عملی و وسائل محاسباتی میباشد.

14-1 عنوان طرح: اجرای فاز آزمایشگاهی تولید پارچه های نانو الیاف جهت بهبود و افزایش راندمان فیلتر

کربنی NBC، ساراتوگا و غشاء

مجری: دکتر سید عبدالکریم حسینی

همکاران: مهندس صدیقه برهانی

PAN به منظور ارزیابی تاثیر نانو الیاف بر راندمان فیلتراسیون و همچنین تعیین شرایط بهینه برای بهبود راندمان، نانو الیاف تحت شرایط بهینه الکترورسی و در شرایط مختلف لایه گذاری بر روی فیلتر ذغال اکتیو روکش داده شد. نتایج نشان داد که تغییر دور درام تاثیر مشخصی بر راندمان فیلتر ندارد. افزایش تعداد لایه ها با کاهش نفوذ پذیری هوا و افزایش راندمان فیلتر همراه است.

ضمیمه ۲- رساله های دکتری

1-2 نام دانشجو: محمود رضا خانگی

استاد راهنما: دکتر سید غلامرضا اعتماد

عنوان رساله: بررسی خواص حرکتی و حرارتی نانو سیالات نیوتنی و غیرنیوتنی

اگر ذرات جامد در ابعاد نانومتر را در یک سیال بصورت معلق حل کنیم به قسمی که یک سوسپانسیون پایدار بوجود آید، سیال حاصل را سیال نانویی می نامند آزمایشات نشان داده است که سیالات نانویی حاصل حل کردن نانو ذرات فلزی یا نانو ذرات اکسید فلزات می تواند خصوصیات حرارتی، از جمله هدایت حرارتی و ضریب انتقال حرارت سیال را به میزان قابل توجهی افزایش دهد. از آنجا که جنبه های مختلف انتقال حرارت در صنایع شیمیایی، داروسازی و غذایی از اهمیت ویژه ای برخوردار است، این موضوع تاثیر قابل توجهی بر صرفه جویی مصرف سوخت، کاهش ابعاد دستگاههای تبادل حرارت و جلوگیری از آلودگی محیط زیست در این صنایع خواهد داشت. در این پروژه هدف بررسی رفتار سیال نانویی در فرآیند انتقال حرارت جابجایی آزاد برای سیالات نیوتنی و غیر نیوتنی به وسیله آزمایش عملی می باشد. در این آزمایشات از نانو ذرات با جنس و ابعاد متفاوت و با درصد حجمی های مختلف استفاده خواهد شد.

2-2 نام دانشجو: محمد حجت

استاد راهنما: دکتر سید غلامرضا اعتماد

عنوان رساله: اندازه گیری ضریب انتقال حرارت جابجایی نانو سیالات غیر نیوتنی در لوله مدور با اعمال شرایط مرزی متفاوت

با پخش کردن نانو مواد در سیال، نوع جدیدی از سیال به وجود می آید که نانو سیال نامیده می شود. تحقیقات تجربی و تئوری مختلفی روی رفتار حرارتی و حرکتی نانو سیالات صورت پذیرفته است و تقریباً نتایج همه این تحقیقات مبین افزایش قابل ملاحظه ضریب هدایت حرارتی و هم چنین ضریب انتقال حرارت جابه جایی نانو سیالات نسبت به سیال پایه می باشند، بنابر این انتظار می رود استفاده از نانو سیالات انقلابی در زمینه انتقال حرارت ایجاد نماید. لازم به ذکر است که در تمام تحقیقات انجام گرفته، از سیالات پایه نیوتنی استفاده شده است. نظر به این که تا کنون هیچ کار تحقیقاتی در زمینه بررسی اثر افزودن نانوذرات به سیال پایه غیر نیوتنی انجام نگرفته و با توجه به این که بسیاری از سیالات مورد استفاده در صنایع بزرگ نظیر صنایع پتروشیمی غیر نیوتنی می باشند، در این تحقیق اثر افزودن نانوذره به سیال پایه غیر نیوتنی - که از قانون توانی تبعیت می نماید - روی ضریب انتقال حرارت جا به جایی سیال در لوله مدور با اعمال دو شرط مرزی دمای ثابت دیواره و شار حرارتی ثابت در دیواره مورد بررسی قرار می گیرد.

به طور خلاصه هدف بررسی اثر نوع نانوذره، استفاده همزمان از نانوذرات مختلف، غلظت نانوذره و عدد رینولدز روی ضریب انتقال حرارت سیال غیر نیوتنی در لوله مدور با اعمال دو شرط مرزی متفاوت در دیواره می باشد.

2-3 نام دانشجو: محمد نصیری

استاد راهنما: دکتر سید غلامرضا اعتماد

عنوان رساله: تعیین ضریب هدایت حرارتی نانو سیال با استفاده از تئوریهای مختلف افزودن ذرات جامد فلزی و اکسیدی در اندازه نانومتری به سیالات متداول انتقال حرارت نظیر آب؛ اتیلن گلاکول و روغن سبب افزایش قابل ملاحظه ضریب هدایت حرارتی سوسپانسیون حاصل (نانو سیال) می گردد. تخمین و پیش بینی ضریب هدایت حرارتی نانو سیال با استفاده از مدل های کلاسیک موجود نظیر مدل ماکسول - گارنت بخصوص اگر غلظت نانو سیال بالا باشد توام با خطای قابل توجهی است. بهمین دلیل تلاشهای علمی در

جریان است تا با اصلاح مدل‌های کلاسیک یا با ارائه مدل‌های جدید معادلاتی برای تخمین و تعیین ضریب هدایت حرارتی نانو سیال بدست آید. یکی از روش‌های مفید در این رابطه می‌تواند استفاده از شبیه سازی دینامیک ملکولی باشد.

در این پایان نامه در نظر است تا با تبیین نیروهای حاکم بر سیستم و نوشتن انرژی پتانسیل این نیروها با استفاده از نرم افزارهایی مانند HyperChem و گوسین و یا در صورت لزوم نوشتن کد کامپیوتری معادلات مربوطه حل شده و ضریب هدایت حرارتی سیستم نانو ذره - سیال تعیین گردد.

4-2 نام دانشجو: محمد ابراهیم پور

استاد راهنما: دکتر محمود سلیمی

عنوان رساله: ساخت نمونه های آزمایشگاهی ورقهای نانو ساختار به روش ARB

شبیه سازی المان محدودی خواص مکانیکی ورقهای نانو ساختار تهیه شده به روش ARB (Accumulative Roll Bonding) و ساختن نمونه های آزمایشگاهی و تست های تجربی از این ورقها به واسطه خواص منحصر به فرد از قبیل استحکام بالا، مقاومت به سایش، مقاومت به خستگی، سختی بالا، خواص نوری و مغناطیسی عالی و خواص عالی و خواص سوپر پلاستیسته نسبت به مواد با دانه بندی درشت در صنایع مختلف از قبیل الکترونیک، خودرو سازی هوا فضا، صنایع دفاعی، ... کاربرد گسترده ای پیدا کرده اند بنابراین ساخت این ورقها جز اهداف اصلی و اساسی کشورهای پیشرفته می باشد.

در این نوع فرآیندها به دلیل تغییر شکلهای شدید که باعث اعمال کرنشهای خیلی زیاد بدون تغییر در ابعاد نمونه می شود مواد نانو ساختار تولید می شوند. در فرآیند ذکر شده با روی هم قرار دادن و جفت کردن ورقها یا تسمه ها (انباشته سازی) و ایجاد اتصال توسط فرآیند نورد به عبارت دیگر جوش سرد نوردی که در سیکلهای مختلف تکرار می شود در نهایت موادی با ساختار نانو بوجود می آید، در این فرآیند ابتدا دو لایه از یک جنس بعد از آماده سازی سطحی (سطوح مقابل هم) شامل چربی زدایی و پرس کاری و در صورت نیاز برای افزایش استحکام پیوند بین فصل مشترک آنها ضمن نورد پیش گرم شده و بوسیله فرآیند نورد به یکدیگر متصل می شوند سپس در مرحله بعد تسمه دولایه حاصل به دو قسمت مساوی تقسیم شده و نوارهای بریده شده مجددا بعد از آماده سازی سطحی و پیش گرم به طور همزمان نورد می شود. و این فرآیند به صورت متوالی تکرار می شود تا ذرات به اندازه نانو ۱۰ تا ۱۰۰ نانو متر برسد. لازم به ذکر است که دمای پیش گرم باید در زیر دمای تبلور مجدد ماده انجام گیرد زیرا باعث حذف کرنشهای تجمعی می شود.

برای شبیه سازی این مواد نانو ساختار دو روش تک مقیاس و چند مقیاس استفاده می شود. روشهای تک مقیاس مثل دینامیک مولکولی، کوانتومی و و روشهای چند مقیاس مثل روشهای المان یا روشهای بدون مش و غیره. در روشهای تک مقیاس می توان کلیه جزئیات اتمها را مورد بررسی قرارداد ولی این روشها با محدودیت همراه است به خصوص برای سیستمهای در مقیاس بزرگ بسیار مشکل و پرهزینه و بعضا غیر ممکن می باشد. به همین دلیل روشهای محیط پیوسته (المان محدود) به نحوی بر این مشکل قانع آمده است. که در این روشها با توجه به مفهوم انتگرالگیری عددی در روش اجزای محدود که تنها با استفاده از چند نقطه معروف به نام نقاط گوسی انجام می شود محاسبات روش اتمی که نیاز به داشتن موقعیت تمامی اتمها را دارد با استفاده از اتمهای خاص که از کل دامنه انتخاب می شوند تقریب می زند.

روش مورد استفاده در این پروژه از روشهای المان محدودی به نام روش شبه پیوسته یا می باشد که روشی استاتیکی و بر مبنای قانون کوش بورن استوار است که در سال ۱۹۹۶ توسط او و همکارانش ارائه گردید. در این روش ابتدا یک جسم تغییر شکل داده را می توان مانند جسم پیوسته ای در نظر گرفت که یک میدان تغییر شکل برای آن تعریف کرده باشیم و سپس برخلاف سایر روشهای محیط پیوسته که از خواص تجربی بهره می گیرند در این روش از روشهای اتمی

برای محاسبه انرژی کل جسم استفاده می شود و سپس با استفاده از مینیمم سازی انرژی کل و با استفاده از یک منطقه انتقالی به محیط پیوسته (مناطق که قوانین المان محدود قابل استفاده است) و استفاده از روشهای میان یابی در المان محدود انتگرال گیری عددی با استفاده از تنها چند نقطه معروف به نقاط گوسی محاسبات به طور قابل مقایسه ای کاهش می یابد. و به این ترتیب مشکلات روشهای تک مقایسه منتفی می گردد.

2-5 نام دانشجو: محققان

استاد راهنما: دکتر محمود سلیمی

عنوان رساله: ارائه مدل تغییر شکل پلاستیک مواد در مقیاس نانو

مطالعه برای ارائه یک مدل تئوریک که قادر به تشخیص و تحلیل مرز نابجائی ها و مناطق معیوب هنگام تغییر شکل و چرخش شبکه کریستال برای تغییر شکل های موضعی و باندهای برش آغاز شده است. این مدل تحلیلی مسائل پلاستیسیته در مقیاس نانو را امکان پذیر می سازد. مدل مذکور بر اساس اصول فیزیکی حرکت نابجائی ها و ارتباط آنها با عیوب مختلف را بیان می کند.

2-6 نام دانشجو: اشرافی

استاد راهنما: دکتر محمود سلیمی

عنوان رساله: تولید توده مواد نانو ساختار به کمک روش تغییر شکل شدید مواد

در سالهای اخیر مواد توده ای نانو ساختار [NSM : bulk nano structured material] که بوسیله روشهای مختلف تغییر شکل شدید پلاستیک [SPD: Severe Plastic Deformation] تولید می شوند علاقه روزافزون متخصصین را به خود جلب کرده است. مواد "تغییر شکل پلاستیک یافته شدید" اغلب دارای اندازه ای حدود 100-200 نانو متر بوده و دانه های داخلی آن دارای چند زیر ساختار که بخاطر شبکه کریستالی شدیداً اعوجاج یافته می باشند. علاوه بر آن تحلیل X-ray ابعاد کریستالی در حدود 50 nm را نشان می دهد. به این دلیل مواد SPD به عنوان مواد توده ای نانو ساختار نامیده می شوند. این علاقه نه تنها به دلیل خواص فیزیکی و مکانیکی بهتر بلکه مزایای متعدد این مواد نسبت به مواد نانو ساختار تولید شده از روشهای دیگر است. بویژه روش SPD باعث رفع بعضی ضعف های باقیمانده در مقایسه با نمونه های فشرده شده بدلیل ناخالصی ایجاد شده در آسیاب ها میشود و بنابراین اصولاً "فرآیند تولید مواد توده ای نانو ساختار بوسیله SPD جایگزین روشهای دیگر مانند متالورژی پودر این مواد میگردد. کاملاً واضح است که تغییر شکل های زیاد به وسیله تغییر شکل های سنگین مثل نورد سرد یا کشش باعث کوچک شدن میکروساختارها در دمای پایین می شود. به هر حال ساختارهای شکل گیری شده معمولاً "زیر ساختارهای سلولی شکل کم تغییر جهت یافته هستند. در حالیکه نانو ساختارهای شکل گیری شده از SPD ساختارهایی با دانه بندی ریز داشته و عمدتاً "دارای زاویه دانه بزرگ می باشند. شکل گیری

چنین ساختارهایی در SPD تحت تغییر شکل بسیار زیاد، دمای کم و فشار زیاد صورت می گیرد. چند روش تغییر شکل مکانیکی برای SPD شناخته شده است که دو روش معروف عبارتند از از کرنش پیچشی شدید تحت فشار زیاد (Severe Torsion Straining) و فشردن از کانال مساوی زاویه دار (equal channel angular pressing). که این روشها قادر به تولید مواد نانو ساختار تعدادی از آلیاژهای تجاری می باشند. مواد نانو ساختار تولید شده بوسیله SPD عموماً از جنبه های زیر قابل ملاحظه اند.

۱- افزایش فوق العاده استحکام مکانیکی و تغییر مدل الاستیسیته نسبت به ماده اولیه

۲- مقاومت در مقابل سایش و خوردگی نسبت به ماده اولیه

۳- تغییر خواص الکترومغناطیسی این مواد نسبت به ماده اولیه

برای تولید این مواد تنها به ماشین های شکل دهی و قالب احتیاج بوده و برای انجام تحقیقات در این زمینه میکروسکوپ الکترونی که قادر به تصویربرداری در حد 200 nm باشد احتیاج خواهد بود. در این طرح تحقیقاتی موارد زیر دنبال می گردد.

۱- تحلیل ایجاد نانو ساختارها از روش SPD به روش اجزاء محدود و کران بالایی

۲- تولید نمونه های آزمایشگاهی به منظور بررسی کیفیت محصولات و کارایی این روش

7-2 نام دانشجو: امامی فر

اساتید راهنما: دکتر محمدشاهدی - دکتر مهدی کدیور

عنوان رساله: استفاده از نانو ذرات نقره در سیستم های مواد غذایی زیست تجزیه پذیر

نانو تکنولوژی، توانمندی تولید، ابزار و سیستم های جدید با در دست گرفتن کنترل در سطح مولکولی و اتمی و استفاده از خواص آنها در مقیاس نانو است. کلمه نانو از یک واژه یونانی به معنای کوچک و ریز مشتق شده است و عبارت است از فهم و کنترل مواد در ابعاد بین (۱۰۰-۱) نانومتر. که این پدیده کاربردهای جدیدی را به همراه دارد. این علم به محققان اجازه می دهد تا ارتباط میان خواص ماکروسکوپی و میکروسکوپی را در مواد بیولوژیک گیاهی و جانوری تشخیص دهند. یکی از مهمترین بخش های صنعت غذای تمام کشورها که با امنیت غذایی در ارتباط است استفاده از تکنولوژی های نو در صنایع غذایی است. استفاده از فناوری های نوین در این بخش رویکرد جدیدی است که می تواند مورد توجه باشد. یکی از موارد کاربرد فناوری نانو در صنعت غذا استفاده آن در بسته بندی های غذایی است. چشم انداز فناوری نانو، صنایع بسته بندی را پررونق نشان می دهد. سهم بازار در این صنعت در حال حاضر ۱/۱ میلیارد دلار است و پیش بینی می گردد تا سال ۲۰۱۰ به ۷/۳ میلیارد دلار برسد. امروزه عدم وجود بسته بندی مناسب در محصولات کشاورزی یکی از عوامل اصلی ضایعات ۳۰ الی ۵۰ درصدی در این بخش تولید شده است. مهاجرت گازها و میکرو ارگانسیم ها به داخل بسته و خروج گازها از بسته های خاصی که تحت اتمسفر مخصوص بسته بندی شده اند به بیرون از جمله عوامل موثر در طول عمر محصولات غذا می باشد. بکارگیری علم نانو در صنعت بسته بندی غذایی و تولید بسته هایی با قابلیت نفوذپذیری کمتر به گازها و یا بسته بندی های ضد میکروبی امری لازم و ضروری است. قوانین محیط زیست امروزه گرایش زیادی به استفاده از بسته بندی های زیست تجزیه پذیر دارند در این میان استفاده از منابع تجزیه پذیر طبیعی به عنوان ماده اصلی بسته مطلوب است. در این میان نشاسته و سلولز مثال خوبی است. اغلب مسمومیت ها و فساد مواد غذایی بدلیل حضور میکروارگانسیم های عفونت زا و مولد فساد در غذاهاست که بیشتر در مرحله پس از برداشت و یا پس از تولید (آلودگی ثانویه) اتفاق می افتد و اغلب عمر نگهداری محصول را کاهش می دهد بکارگیری بسته بندی های ضد میکروب پاسخ مناسبی به حل این مشکل است.

یکی از مشکلات بسته‌های تولید شده با ترکیبات طبیعی تجزیه پذیر تحت تاثیر قرار گرفتن آنها توسط میکروارگانیسمها و اکسیژن و ماندگاری کم آنها در طول نگهداری بسته غذا است. مشاهده شده است که نانو ذرات نقره قدرت بالایی در جلوگیری از رشد میکروارگانیسمها در بسته‌های غذایی دارد و می‌تواند عمر برخی از غذاها را ۲ الی ۳ برابر افزایش دهد و از سوی دیگر احتمال بروز مسمومیت را نیز در غذاها کاهش می‌دهد. لذا در این تحقیق سعی بر آن است تا از نانو ذرات نقره به عنوان یک ماده ضد میکروب طبیعی در بسته‌بندی‌های زیست تجزیه پذیر از جنس نشاسته استفاده و اثرات آن بر عمر نگهداری غذا و سلامت بسته در طول نگهداری از نظر اثر اکسیژن و میکروارگانیسمها مورد بررسی قرار گیرد.

8-2 نام دانشجو: لاله قاسمی

اساتید راهنما: دکتر محمد مرشد، دکتر نصر اصفهانی

عنوان رساله: بررسی ساختار و خصوصیات داربست (SCAFFOLD) نانوالیاف جهت رشد و تولید سلول های

عصبی

ضمیمه ۳- پایان نامه های کارشناسی ارشد

1-3 نام دانشجو: هادی احمري

استاد راهنما: دکتر سید غلامرضا اعتماد

عنوان پایان نامه: بررسی رفتار الکترو رئولوژیکی نانو سیالات

نانو تکنولوژی زمینه ای نو در علم و تکنولوژی با پتانسیل عظیم اجتماعی و اقتصادی است که انسان را به سمت فهم و کنترل نو بر روی ساختار و خواص همه مواد طبیعی یا ساخت دست انسان هدایت می کند. نانو سیالات به سوسپانسیونی اطلاق می شود که شامل نانو ذرات توزیع شده در یک سیال واسط است. این سیالات رفتارهای مختلفی از خود نشان می دهند که می توان از آن جمله به افزایش یا کاهش ویسکوزیته، جذب سطحی و انتقال حرارات اشاره کرد.

نانو سیالات (Electro Rheological) ER سوسپانسیونهایی هستند شامل نانو ذرات و سیالاتی با رسانایی ضعیف که در اثر تحریک میدان الکتریکی خارجی تغییر شدیدی در خواص رئولوژیکی آن صورت می گیرد. پتانسیل زیاد سیالات ER در کاربرد های صنعتی توجهات زیادی را به خود جلب کرده و فعالیتهای زیادی در صنعت و جوامع علمی به این قلمرو معطوف گشته است، که از آن جمله می توان به موارد کاربرد آن در کلاچ و ترمز ماشین، تسریع پاسخ سیال، ایجاد سیالات هوشمند و ... اشاره کرد. در پایان نامه حاضر، با اعمال جریان مستقیم بر روی برخی از نانو سیالات، خواص رئولوژیکی آنها مورد بررسی و تحلیل قرار می گیرد. اثر پارامتر های مختلف

شدت میدان، نوع سیال، نوع ذره، دما و ... بر روی خواص رئولوژیکی از عواملی است که در این پایان نامه مد نظر قرار خواهند گرفت.

2-3 نام دانشجو : سعیده سلطانی

استاد راهنما: دکتر سید غلامرضا اعتماد

عنوان پایان نامه : بررسی جوشش نانو سیالات نیوتنی و غیر نیوتنی

در میان موضوعات بسیار از سیستمهای مهندسی افزایش انتقال حرارت جوشش به عنوان پدیده ای از انتقال حرارت که تغییر فاز در آن رخ می دهد مورد توجه می باشد. از جمله روشهای نوین مورد توجه، استفاده از نانو سیال به عنوان تکنیکی جدید در سالهای اخیر می باشد. هدف از انجام این تحقیق بررسی تأثیر استفاده از نانو سیال غیر نیوتنی روی پدیده جوشش و حصول منحنی جوشش برای این گونه سیالات می باشد. این مبحث تا کنون در زمینه سیالات غیر نیوتنی مورد مطالعه قرار نگرفته است.

در این پروژه بررسی اثر افزودن نانو ذرات مختلف (CuO, Cu, Al_2O_3) به سیالات غیر نیوتنی مدل پاورلا مثل (محلول CMC) روی پدیده جوشش، محاسبه شار حرارتی و بررسی نوع جوشش در حالت های مختلف مورد نظر می باشد. در این تحقیق از سیالات پایه با اندیس پاورلاهای مختلف و همچنین از نانو ذرات مختلف و درصد وزنی متفاوت آنها استفاده و اثر این پارامترها روی پدیده جوشش بررسی خواهد گردید.

3-3 نام دانشجو: سهراب خان محمدی

استاد راهنما: دکتر سید غلامرضا اعتماد

عنوان پایان نامه: بررسی اثر افزایش نانو ذرات روی خواص حرارتی روغنهای موتور

فناوری نانو روز به روز در حال گسترش و پیشرفت است. این تکنولوژی نه تنها از لحاظ علمی حائز اهمیت است، که تبدیل به دغدغه حکومت ها شده و بسیاری از کشورها در حال سرمایه گذاری در این میدان هستند. فناوری نانو همچنین منحصر به رشته و گرایش علمی خاصی نبوده و در اغلب شاخه های علم دارای کاربرد بوده و سرآغاز پیشرفت های جدید شده و جایگاه خویش را یافته است.

یکی از این شاخه ها نانو سیالات (nano fluids) هستند. پیش از دست یابی به فناوری تولید ذرات نانو، در پی آن بودند تا ذراتی با ضریب هدایت حرارتی بالا به سیالاتی که کاربرد گرمادهی یا گرماگیری دارند (واسط های حرارتی) اضافه کنند و به این ترتیب هدایت حرارتی این واسط ها را افزایش دهند و با افزایش این خاصیت مسلما ضریب جابجایی حرارتی (convective heat transfer coefficient) نیز بالا می رود که از لحاظ کاربرد صنعتی قابل توجه است. چرا که این یعنی انتقال حرارت بیشتر، و نتیجه مستقیم آن نیاز کمتر به سطوح انتقال حرارت و سیال واسط حرارتی است. مثال بارز و آشکار آن مبدل های حرارتی هستند که در مقیاس بالایی در فرایندهای صنایع شیمیایی استفاده می شوند. سیال واسط بهتر مترادف است با مبدلهای کمتر (هزینه سرمایه گذاری پایین تر) و سیال کمتر (هزینه پمپاژ پایین تر و هزینه کارکرد کمتر). رادیاتور اتومبیل نمونه دیگری است.

ولی ذراتی در مقیاس میلی و میکرو نتوانستند پاسخگو باشند. به دلیل خوردگی بالا و ته نشینی و ... سر انجام با تولید نانو ذرات (nano particles) این امکان محقق شد.

آزمایشات نشان داده اند که افزایش نانو ذرات (nanoparticles) به سیال هدایت حرارتی آن را به میزان چشمگیری افزایش می دهد. این افزایش در حدی است که با هیچ یک از مکانیسم های شناخته شده انتقال حرارت همخوانی ندارد و بیشتر از آن چیزی است که شبیه سازی ها با مکانیسم های موجود نشان می دهند. هم اکنون تلاش بسیاری برای عملی کردن امکان استفاده از نانو سیال در صنعت و همچنین یافتن مکانیسم های دخیل در آن در جوامع علمی در جریان است و طبعاً استفاده عملی از نانو سیال در مقیاس صنعتی در گرو کار تئوریک و یافتن این مکانیسم ها است. چرا که برای طراحی نیاز به این مکانیسم ها داریم. در پروژه حاضر قصد داریم تاثیر افزودن نانو ذرات را بر روی ضریب هدایت حرارتی و ظرفیت حرارتی روغن موتور بررسی کنیم.

روغن موتور ها علاوه بر اینکه نقش روانکاری و جلوگیری از برخورد مستقیم سطوح فلزی را دارند ، حرارت را از اجزاء داخلی می گیرند و موتور را در شرائط پایدار دمایی قرار می دهند. بنا بر آنچه گفتیم افزایش خواص حرارتی روغنهای موتور از طریق افزودن نانو ذرات و بررسی تئوریک علل و عوامل مترتب بر آن می تواند به عنوان یک هدف مطرح باشد .

4-3 نام دانشجو: شهلا صفری

استاد راهنما: دکتر سید غلامرضا اعتماد

عنوان پایان نامه: بررسی رفتار انتقال حرارت نانو سیالات نیوتنی و غیر نیوتنی در مبدلهای حرارتی دو لوله ای مفهوم نانوسیال در واقع مربوط به نوع جدیدی از سیالات در زمینه انتقال حرارت می باشد. این سیالات محلولهای سوسپانسیونی حاوی ذراتی فلزی و یا اکسیدهای فلزی با قطر کمتر از ۱۰۰ نانومتر هستند. از کاربردهای نانوسیالات در صنعت میتوان استفاده از آنها در مبدلهای حرارتی به عنوان سیال خنک کننده را نام برد. در آزمایشهایی که بر روی نانوسیالات انجام خواهیم داد، سعی خواهد گردید با تهیه سیال نیوتنی و غیر نیوتنی شاخصهای حرارتی همچون ضریب انتقال حرارت جابجایی در مبدل حرارتی دو لوله ای با جریان همسو و ناهمسو بررسی گردد. با اندازه گیری دقیق دما اثر افزودن نانو ذرات مختلف مثل Cu ، Al_2O_3 و CuO با غلظتهای مختلف و اندازه های متفاوت بر شاخصهای حرارتی مطالعه و بررسی می گردد.

5-3 نام دانشجو: مجید رضا محجوب

استاد راهنما: دکتر سید غلامرضا اعتماد

عنوان پایان نامه: حرکت و انتقال حرارت سیالات غیر نیوتنی در میکروکانال های مستطیلی در تحقیق حاضر، میدان جریان و انتقال حرارت سیالات غیر نیوتنی در میکروکانالهای مستطیلی شکل، بصورت عددی مورد مطالعه قرار گرفته است. جریان بصورت لغزشی، سه بعدی ، پایدار، تراکم ناپذیر و آرام در نظر گرفته شده و از مدل تابع نمایی برای تحلیل رفتار سیال غیر نیوتنی استفاده شده است. شرایط مرزی حرارتی، شار حرارتی ثابت در دیواره و دمای دیواره ثابت در نظر گرفته می شود. اتلاف حرارتی در نظر گرفته شده و تمامی خواص فیزیکی باستانی ویسکوزیته ثابت می باشند. توزیع سرعت و دما در ورودی میکروکانال یکنواخت می باشد.

معادلات حاکم، شامل معادله پیوستگی، ممنتوم و انرژی با استفاده از متغیرهای خاص بدون بعد شده‌اند. مجموعه معادلات دیفرانسیل حاکم در کنار هم با توجه به شرایط مرزی با استفاده از روش عددی اختلاف محدود بر مبنای حجم کنترل حل شده‌اند. توزیع سرعت محوری، سرعت مرکزی، حاصلضرب عدد رینولدز و ضریب اصطکاک فیننگ، دمای حجمی بدون بعد، عدد ناسلت موضعی، دمای دیواره بدون بعد برای شرط مرزی حرارتی شار حرارتی ثابت و همچنین شار حرارتی بدون بعد دیواره برای شرط مرزی دمای دیواره ثابت برای محدوده وسیعی از شاخص مدل تابع نمایی، عدد رینولدز، عدد پراتل و ضریب لغزش و نسبت اضلاع بدست آمده‌اند. نتایج نشان می‌دهد که حاصلضرب عدد رینولدز و ضریب اصطکاک فیننگ و سرعت مرکزی با افزایش شاخص مدل تابع نمایی افزایش می‌یابد و با در نظر گرفتن لغزش در دیواره کاهش این مقادیر مشاهده می‌گردد. اختلاف نسبی حاصلضرب عدد رینولدز و ضریب اصطکاک فیننگ بین حالت لغزشی و غیرلغزشی با افزایش شاخص مدل تابع نمایی افزایش داشته و در نتیجه اثر لغزش در سیالات دایالانت قویتر از سیالات شبه‌پلاستیک می‌باشد. افزایش عدد رینولدز، عدد پراتل، نسبت اضلاع و ضریب لغزش در دو شرایط مرزی حرارتی موجب افزایش عدد ناسلت گشته در حالی که افزایش شاخص مدل تابع نمایی ضریب انتقال حرارت را کاهش می‌دهد. در دو شرط مرزی حرارتی، اختلاف نسبی عدد ناسلت بین حالت لغزشی و غیرلغزشی برای شاخصهای بالاتر مدل تابع نمایی افزایش می‌یابد و در نتیجه اثر لغزش در سیالات دایالانت بیشتر از سیالات شبه‌پلاستیک می‌باشد. اختلاف نسبی عدد ناسلت بین حالت لغزشی و غیرلغزشی در شرط مرزی حرارتی شار حرارتی ثابت در دیواره بیشتر از شرط مرزی دمای دیواره ثابت می‌باشد و بیانگر این است که اثر لغزش در شرایط مرزی حرارتی شار حرارتی ثابت در دیواره بیشتر از شرایط مرزی دمای دیواره ثابت است. در نظر گرفتن اتلاف لزجی در دو شرایط مرزی حرارتی موجب کاهش عدد ناسلت می‌گردد و اثر اتلاف لزجی در سیالات دایالانت بیشتر از سیالات شبه‌پلاستیک می‌باشد. و در نظر گرفتن تغییرات ویسکوزیته با دما سبب افزایش عدد ناسلت می‌گردد.

6-3 نام دانشجو: روح الله یدوی

استاد راهنما: دکتر سید غلامرضا اعتماد

عنوان پایان نامه : بررسی روشهای حذف فلزات سنگین از پسابها به کمک فناوری نانو

موضوع اهمیت و تاثیر آب در حیات اقتصادی، اجتماعی و فرهنگی ملتها بر همه کس واضح است. با این حال کم توجهی به این مطلب مهم، منابع آب کره زمین را در معرض نابودی و تخریب قرار داده است. گردش آب در صنعت موجب می شود تا با ورود ناخالصی ها کیفیت آب کاهش پیدا کرده و به پساب تبدیل گردد. در کشور ما با توجه به رشد صنایع و نیز استاندارد نبودن و قدیمی بودن اکثر صنایع، میزان مصرف آب و در نتیجه تولید پساب به مراتب بیشتر از کشورهای پیشرفته است.

فلزات سنگین بطور وسیعی در فرایندهای صنعتی مورد استفاده قرار می گیرند به طوری که می توان گفت پسابهای تولیدی مربوط به صنایع متفاوتی نظیر معدن، متالورژی، کاغذسازی، چرمسازی، آبکاری، ریخته گری، پلاستیک، عکاسی، الکترونیک، تولید کود و موادشیمیایی و به خصوص صنایع آهن و فولاد حاوی غلظتهای خیلی بالا از فلزات سنگینی نظیر سرب، نیکل، کادمیم، کروم، مس، آهن، روی، منگنز و جیوه هستند. این عناصر

به علت خواص سمی و تجمع پذیری و پایداری، حتی در غلظت‌های کم از اهمیت زیست محیطی بالایی برخوردار هستند. حتی هنگامی که این فلزات مستقیماً در صنعت مورد استفاده قرار نگیرند ممکن است که در بسیاری از موارد به صورت یک ناخالصی همراه با مواد اولیه مورد استفاده در صنعت وجود داشته باشند. از آنجایی که تنها بخش ناچیزی از این فلزات در فرایندهای تصفیه فیزیکوشیمیایی جدا می‌شوند (واحدهای تصفیه فیزیکوشیمیایی از نظر ساخت، نگهداری و تهیه مواد شیمیایی مورد نیاز، گران و پرهزینه می‌باشند) و اصولاً واحدی به منظور جداسازی فلزات سنگین وجود ندارد، پسابهای خروجی از تصفیه خانه‌های صنعتی مقایسه‌پذیر از این آلاینده‌ها را با خود حمل می‌کنند و از این طریق آلودگیهای ثانوی خاک و آبهای سطحی و آبهای زیرزمینی را سبب می‌گردند. در عین حال باید توجه داشت که وجود این فلزات سبب ایجاد عوارضی نظیر مسمومیت، سرطان‌زایی و اثرات ژنتیکی کوتاه و بلند مدت خواهد شد. مشکل حذف فلزات سنگین از پسابها از جمله مسائلی است که امید است به کمک فناوری نانو قابل حل باشد. کارهایی نظیر نانوفیلتراسیون و یا استفاده از نانو جاذبهای پلیمری جهت جذب این آلاینده‌ها از جمله موارد مربوط به نانوتکنولوژی در حیطه مسائل زیست محیطی است.

هدف از انجام این پروژه، انجام جداسازی فلزات سنگین با استفاده از فناوری نانو از طریق استفاده از نانو ذرات خاص و بررسی پارامترهای تاثیر گذار در جداسازی خواهد بود.

در این روش از نانو ذرات مغناطیسی استفاده خواهد گردید. اساس کار استفاده از خاصیت مغناطیسی این ذرات و تعلیق این ذرات در داخل محیطهای آبی آلوده شده به فلزات سنگین است. در این صورت مکانیسم جداسازی، جذب سطحی بر روی این نانو ذرات خواهد بود. اثر پارامترهای مختلفی نظیر دما، PH، زمان تماس، غلظت اولیه فلزات سنگین و غلظت اولیه نانو ذرات در جداسازی بررسی می‌شود. در انتها به کمک ایجاد یک میدان مغناطیسی و استفاده از خاصیت مغناطیسی این ذرات، می‌توان ذرات به کار گرفته شده را بر روی یک شبکه ماتریسی (که خود دارای خاصیت مغناطیسی است) در داخل محلول جدا کرد.

7-3 نام دانشجو: عباس صفایی

استاد راهنما: دکتر ابراهیم شیرانی

عنوان پایان نامه: شبیه سازی جریان و انتقال حرارت در هندسه‌های با ابعاد میکرو با استفاده از روش شبکه بولتزمن

هدف از انجام پایان نامه حاضر توسعه یک برنامه کامپیوتری برای شبیه‌سازی جریان و انتقال حرارت با ابعاد میکرو به کمک روش شبکه بولتزمن، به کارگیری و تست شرایط مرزی پخش مولکولی برای بررسی سرعت لغزشی و پرش دمایی روی دیوار با استفاده از روش شبکه بولتزمن است.

برای رسیدن به اهداف فوق یک برنامه کامپیوتری توسعه داده شده است که با استفاده از روش شبکه بولتزمن قابلیت شبیه‌سازی جریان و انتقال حرارت با هندسه‌های مختلف و ابعاد مختلف را دارد. این برنامه جریان و انتقال حرارت گاز را در رژیم‌های پیوسته، لغزشی و رژیم گذار را برآورد می‌تواند شبیه‌سازی کند. این برنامه کامپیوتری از روش شبکه بولتزمن بکمک شرط مرزی پخش مولکولی روی دیوار و شرط مرزی ساکی برای دمای ورودی و خروجی استفاده می‌کند. همچنین برای محاسبه زمان آرامش از روش وابسته کردن زمان آرامش به عدد نودسن استفاده شده‌است.

برنامه کامپیوتری اولیه جریان بین دو صفحه با رانش اختلاف فشار را شبیه‌سازی می‌کرد. در کار حاضر علاوه بر تغییرات هیدرودینامیکی بر روی برنامه و بررسی شرایط مرزی پخش مولکولی و شرایط مرزی سرعت ورودی، شبیه‌سازی انتقال حرارت بکمک روش شبکه بولتزمن به آن افزوده شد. ابتدا روش شبکه بولتزمن برای چند مورد با ابعاد ماکرو شامل جریان و انتقال حرارت در حفره با اعداد رینولدز متفاوت و جریان کوئت بررسی و نتایج با نتایج حاصل از حل معادلات ناویر-استوکس و معادله فوریه برای انتقال حرارت مقایسه گردید و صحت برنامه کامپیوتری و دقت جوابها بررسی شد. این بررسی نشان داد که نتایج روش حاضر با دقت بسیار خوبی به دست آمده‌اند. سپس روش شبکه بولتزمن برای هندسه‌های با ابعاد میکرو شامل جریان و انتقال حرارت در میکروکانال‌ها، میکروحفره‌ها و جریان میکرو کوئت با اعداد نودسن مختلف با استفاده از اعمال شرط مرزی پخش مولکولی و وابسته کردن زمان آرامش به عدد نودسن شبیه‌سازی شد. نتایج حاصل از حل جریان و انتقال حرارت در ابعاد میکرو با روشهای مونت کارلو، دینامیک مولکولی و ماکسول مقایسه شد که نشان داد که روش حاضر از دقت بسیار بالایی برای بررسی جریان و انتقال حرارت در ابعاد میکرو برخوردار است. همچنین میزان انتقال حرارت (عدد ناسلت) در طول ورودی کانالهای با ابعاد میکرو و ماکرو با هم مقایسه شد نتایج مقایسه، تغییرات قابل توجه میزان انتقال حرارت در طول ورودی را نشان می‌دهد.

8-3 نام دانشجو: سعید جعفری فرسنگی

استاد راهنما: دکتر ابراهیم شیرانی

عنوان پایان نامه: شبیه‌سازی جریان در هندسه‌های با ابعاد میکرو با استفاده از روش شبکه بولتزمن

هدف از این پایان نامه توسعه یک برنامه کامپیوتری برای جریانهای با ابعاد میکرو با استفاده از روش شبکه بولتزمن، به کارگیری و تست شرایط مرزی پخش مولکولی و روش ترکیبی کمانه کردن و آیینه‌ای برای اندرکنش سیال و سطح جامد و مطالعه لغزش روی سطح، بررسی پدیده می نیم نودسن و امکان مشاهده آن با استفاده از روش شبکه بولتزمن و بالاخره شبیه‌سازی جریان در محیط‌های متخلخل با ابعاد میکرو با استفاده از روش شبکه بولتزمن است. برای رسیدن به اهداف فوق یک برنامه کامپیوتری توسعه داده شده است که با استفاده از روش شبکه بولتزمن قابلیت شبیه‌سازی جریان با هندسه‌های مختلف و ابعاد مختلف را دارد. این برنامه می‌تواند جریان‌گاز را در رژیم‌های پیوسته، لغزشی و تا حدودی رژیم‌گذار شبیه‌سازی می‌کند. در این برنامه کامپیوتری از چهار روش پخش مولکولی، کمانه کردن، آیینه‌ای و ترکیبی از این دو برای اعمال شرایط مرزی روی دیوار استفاده شده است. همچنین از دو روش برای محاسبه زمان آرامش شامل وابسته کردن زمان آرامش به عدد نودسن و مرتبط کردن آن با چگالی محلی و عدد نودسن استفاده شده است.

برنامه کامپیوتری اولیه جریان بین دو صفحه با رانش اختلاف فشار را شبیه‌سازی می‌کرد. ابتدا روش شبکه بولتزمن برای چند مورد با ابعاد ماکرو شامل جریان در حفره با اعداد رینولدز متفاوت و جریان کوئت بررسی و نتایج با نتایج حاصل از حل معادلات ناویر استوکس مقایسه گردید و صحت برنامه کامپیوتری و دقت جوابها بررسی شد. این بررسی نشان داد که نتایج روش حاضر با دقت بسیار خوبی به دست آمده‌اند. سپس روش شبکه بولتزمن برای هندسه‌های با ابعاد میکرو شامل جریان در میکروکانال‌ها، میکروحفره‌ها و جریان میکرو کوئت با اعداد نودسن مختلف با استفاده از اعمال شرط مرزی پخش مولکولی و وابسته کردن زمان آرامش به عدد نودسن شبیه‌سازی شد

و با استفاده از این روش پدیده می نیمم نودسن نیز برای اولین بار با استفاده از روش شبکه بولتزمن مشاهده شد. بالاخره روش شبکه بولتزمن معرفی شد که در آن زمان آرامش به عدد نودسن و چگالی محلی وابسته شد و ترکیبی از شرایط مرزی کمانه کردن و آینه ای روی مرزهای جامد اعمال شد. با روش فوق جریان در یک میکرو کانال شبیه سازی شد و با توجه به توانایی روش برای شبیه سازی جریان با اشل های طولی مختلف از این روش برای شبیه سازی جریان در یک کانال متخلخل با ابعاد میکرو و ضرایب تخلخل متفاوت استفاده گردید. دقت نتایج حاصل از طریق محاسبه افت فشار داخل میکرو کانال متخلخل بررسی گردید

9-3 نام دانشجو: محمد ابراهیم پور

استاد راهنما: دکتر محمود سلیمی ، دکتر سعید ضیائی راد

عنوان پایان نامه: شبیه سازی فرآیند و بررسی خواص مکانیکی مواد نانو ساختار تولید شده به روش اتصال

نوردی تجمعی (ARB) به کمک روش شبه پیوسته (Quasicontinuum)

توسعه صنعتی هر کشور مدیون تلاشهایی است که در راستای پیشرفت علم همگام با کشورهای توسعه یافته صورت می گیرد. در این راستا در سالهای اخیر گسترش علم فناوری نانو را شاهد هستیم ، به طوری که بسیاری از کارشناسان فناوری نانو را انقلاب صنعتی قرن ۲۱ می دانند، بی شک بکارگیری این فناوری می تواند نقش بسزایی در رشد و توسعه کشور داشته باشد.

مواد با ساختار نانو به خاطر خواص منحصر به فردی که از خود نشان می دهند از قبیل استحکام بالا، انعطاف پذیری و مناسب ، مقاومت به خستگی ، مقاومت به سایش ، سختی بالا ، نفوذ پذیری زیاد، خواص نوری و مغناطیسی عالی و خواص سوپر پلاستیسیته ، نسبت به مواد با دانه بندی درشت و متوسط و کاربرد در صنایع مختلف از قبیل الکترونیک ، خودروسازی ، هوافضا و صنایع نظامی و ... از اهمیت بسزایی برخوردار است.

10-3 نام دانشجو: روح الله جلیلی

استاد راهنما: دکتر محمد مرشد، دکتر عبدالکریم حسینی

عنوان پایان نامه: طراحی دستگاه الکترورسی و بررسی عوامل موثر بر تولید الیاف PAN

11-3 نام دانشجو: قهرمانی، قره داغی

استاد راهنما: دکتر محمد مرشد، دکتر عبدالکریم حسینی

عنوان پایان نامه: روند رشد و توسعه نانو تکنولوژی در صنایع نساجی

12-3 نام دانشجو: سمیه صفی

استاد راهنما: دکتر محمد مرشد، دکتر عبدالکریم حسینی

عنوان پایان نامه: بررسی قابلیت الکترورسی آلجینات و تولید الیاف نانو آلجینات، آلجینات-PEO، آلجینات - PVA

3-13 نام دانشجو: الهه مسائلی

استاد راهنما: دکتر محمد مرشد، دکتر عبدالکریم حسینی
عنوان پایان نامه: نانو لوله های کربنی و کاربرد آنها در الیاف

3-14 نام دانشجو: غزال نداف

استاد راهنما: دکتر محمد مرشد، دکتر امیر نصر
عنوان پایان نامه: تهیه و بررسی خواص نانوالیاف اکریلیک حاوی نانو ذرات نقره

3-15 نام دانشجو: مائده زمانی

استاد راهنما: دکتر محمد مرشد
عنوان پایان نامه: تهیه و ارزیابی نانوالیاف پلیمری زیست تخریب پذیر حامل مائوسایکلین جهت پوشش زخم

3-16 نام دانشجو: مرضیه جان نثاری

استاد راهنما: دکتر محمد مرشد
عنوان پایان نامه: آزاد سازی کنترل شده دارو در درمان های عفونی با استفاده از نانوالیاف حاوی داکسی سایکلین

3-17 نام دانشجو: آزاده مصدقی راد

استاد راهنما: دکتر محمد مرشد، دکتر غیائی
عنوان پایان نامه: بررسی خواص جذبی و واکنشی نانوالیاف حاوی نانو ذرات اکسید های فلزی

3-18 نام دانشجو: درنا اسرافیل زاده

استاد راهنما: دکتر محمد مرشد، دکتر حسین توانایی
عنوان پایان نامه: بررسی فرآیند پایدار سازی نانوالیاف پلی اکریلوئیدیل جهت تولید پارچه های کربن فعال

3-19 نام دانشجو: حمید مصدقی

استاد راهنما: دکتر عزت کشاورزی
عنوان پایان نامه: سنتز نانو ذرات مس به روش تسهیم نامتناسب و معلق سازی آن
با توجه به اهمیت و کاربرد های فراوان نانوذرات مس در صنایع گوناگون، در این پایان نامه برای اولین بار سنتز نانوذرات مس به روش تسهیم نامتناسب انجام شد. در این روش با استفاده از مکانیسم انتقال الکترون در فضای داخلی، یون Cu^+ را

در محیط تولید کرده و سپس با استفاده از تسهیم نامتناسب آن، ذرات مس سنتز شد. به منظور کاهش اندازه ذرات مس سنتز شده به بررسی اثر عواملی از قبیل دما، غلظت لیگاند و pH پرداخته شد. بعد از آن اثر فعال کننده سطحی سدیم لورات و پلیمر غیر یونی پلی-اتیلن گلیکول روی اندازه ذرات مس سنتزی مورد بررسی قرار گرفت که از بین عوامل فوق افزایش سدیم لورات تأثیر بسزایی در کاهش اندازه ذرات داشت. همچنین در این پایان نامه سنتز نانوذرات مس در سیستم دو فازی بدون فعال کننده سطحی انجام شد که در این حالت اندازه ذرات سنتزی به شدت کاهش یافته و توزیع ذرات نیز باریکتر گردید. پس از سنتز نانوذرات مس با توجه به کاربرد های آن به بررسی معلق سازی این نانوذرات در سیال هایی از قبیل آب، اتیلن گلیکول، روغن موتور ۴۰ و روغن ترانس پرداخته شد. به منظور افزایش پایداری تعلیق نانوذرات مس در روغن ترانس و اتیلن گلیکول از اسید اولئیک به عنوان ماده معلق کننده استفاده گردید.

3-22 نام دانشجو: فرزاد دبیریان

استاد راهنما: دکتر سید عبدالکریم حسینی

عنوان پایان نامه: طراحی و ساخت دستگاه تولید نخ از نانو الیاف الکترورسی شده و بررسی خواص کششی آن در سالهای اخیر تلاشهای زیادی در جهت یافتن روشهایی برای تولید نخ از الیاف نانو صورت گرفته است، در نتیجه این تحقیقات روشهایی برای تولید نخ ابداع شده است. در این تحقیق با ایجاد تغییراتی در سیستم متداول الکترورسی دو روش جدید برای تولید نخ از الیاف نانو ابداع شد.

در روش اول با افزودن یک سوزن به سیستم معمول الکترورسی بار موجود در سطح الیاف تخلیه می شود. در این حالت تمرکز بارهای الکتریکی به نوک سوزن می افتد. تمرکز زیاد بارهای الکتریکی در نوک سوزن سبب یونیزه شدن هوا و در نتیجه تخلیه شدن الیاف در حین حرکت به سمت صفحه جمع کننده می شود. تخلیه شدن بار الیاف باعث کم شدن سرعت حرکت الیاف و یا متوقف شدن الیاف در هوا می شود. با استفاده از این قابلیت یک روش جدید برای تولید نخ از الیاف نانو ابداع شد. در این روش با قرار دادن انتهای یک نخ پیوند الیاف در مسیر حرکت الیافی تخلیه بار شده اند، الیاف با انتهای نخ پیوند در گیر می شوند، با تاب دادن به نخ پیوند الیاف در گیر شده وارد بدنه نخ می شوند و قسمتی از نخ جدید را تشکیل می دهند. با ادامه یافتن این روند، نخ به صورت ممتد تولید می شود. برای تولید نخ به این روش دستگاهی طراحی و ساخته شد که اعمال تاب را، بدون تشکیل بالون، همزمان با برداشت، مقدور می سازد. برای بررسی تأثیر تاب، در شرایط یکسان، نخهایی با تابهای متفاوت تهیه شد. و مشاهده شد که افزایش تاب در این روش سبب افزایش جزیی در مقدار استحکام نخ می شود. استحکام و مدول نخهای تهیه شده کم و ازدیاد طول آنها زیاد می باشد، که این ویژگی برای مصارف نساجی مطلوب نمی باشد. در تست هیسترسیس نخ فوق تغییرات پلاستیک ۶۳/۹٪ بوده و ۷۳٪ انرژی مصرفی صرف این تغییرات می شود.

به منظور بررسی امکان تثبیت این نوع نخ بر روی نخ فوق تثبیت ساده ای صورت گرفت. نتایج نشان داد تثبیت سبب افزایش استحکام و کاهش چشمگیر ازدیاد طول نخ می گردد به گونه ای که نخ تولیدی قابل استفاده در مصارف نساجی می باشد.

در روش دوم از دو نازل در مقابل هم استفاده می شود، یکی از نازلها به قطب مثبت و دیگری به قطب منفی منبع تغذیه وصل می باشد. در زمان الکترورسی الیاف تولید شده توسط هر یک از نازلها دارای بار هم نام با بار نازل می باشند. به دلیل همین اختلاف بار الیاف همدیگر را در فاصله بین دو نازل جذب نموده و تخلیه می شوند.

سرعت تولید الیاف در این روش نسبت به سرعت تولید در سیستم معمول الکتروریسی با شرایط مشابه، افزایش داشته است. قطر الیاف تولید شده در این روش نسبت به روش معمول الکتروریسی در شرایط مشابه بیشتر می‌باشد. در این روش با افزایش ولتاژ قطر الیاف افزایش می‌یابد. نتایج نشان داد فاصله دو نازل از هم در این روش تاثیر معنی داری بر قطر الیاف ندارد همچنین با افزایش غلظت قطر الیاف افزایش می‌یابد.

3-23 نام دانشجو: سمیه صفی

استاد راهنما: دکتر سید عبدالکریم حسینی و دکتر محمد مرشد

عنوان پایان نامه: بررسی امکان تولید الیاف نانو از سدیم آلجینات به روش الکتروریسی

در سالهای اخیر، الکتروریسی به عنوان ابزاری آسان و مؤثر برای تولید الیاف فوق العاده ظریف با قطری در حدود چند میکرومتر تا چندین نانومتر مورد توجه قرار گرفته است.

با توجه به مزایا و خواص بیولوژیکی مطلوب بیوپلیمر طبیعی آلجینات و مزایای مضاعفی که لیف نانو تولید شده از آن خواهد داشت، در این رساله، در دو بخش به بررسی امکان الکتروریسی این بیوپلیمر پرداخته شد.

در بخش اول، الکتروریسی محلول سدیم آلجینات در آب و تأثیر افزودن افزودنیهای مناسب نظیر اسید، سطح فعال و حلالهای آلی به محلول سدیم آلجینات، بر قابلیت الکتروریسی این محلول پلیمری مورد آزمایش و بررسی قرار گرفت. نتایج حاصله نشان داد که نه تنها محلول سدیم آلجینات در آب، از طریق تکنیک الکتروریسی غیر قابل رسیدن است بلکه هیچ یک از مواد افزودنی نیز تأثیر قابل توجهی در بهبود قابلیت الکتروریسی محلول پلیمری سدیم آلجینات ندارند. سپس، به منظور افزایش حلالیت پلیمر در حلالهای آلی و بهبود قابلیت الکتروریسی محلول پلیمر، ساختار سدیم آلجینات به ترتیب، به نمک آمونیوم آلجینات و آلجینیک اسید تبدیل شد اما نتایج رضایت بخشی حاصل نگردید.

بنابراین، به دلیل قابلیت الکتروریسی بسیار ضعیف این بیوپلیمر و عدم موفقیت در بخش اول آزمایشات، در بخش دوم رساله سعی شد تا با کمک برخی پلیمرهای مصنوعی مناسب (نظیر پلی وینیل الکل و پلی اتیلن اکساید) و افزودن آنها به محلول سدیم آلجینات (با نسبتهای جرمی و غلظتهای مختلف پلیمر) قابلیت الکتروریسی این بیوپلیمر بهبود داده شود. در این راستا، سه غلظت ۰.۷٪، ۰.۸٪ و ۰.۹٪ (درصد وزنی) برای پلیمر پلی وینیل الکل و غلظتهای ۰.۶٪، ۰.۷٪ و ۰.۸٪ (درصد وزنی) برای پلیمر پلی اتیلن اکساید انتخاب گردید و در نسبتهای حجمی ۷۰:۳۰، ۵۰:۵۰ و ۷۰:۳۰ (به طور جداگانه) با محلول سدیم آلجینات با غلظت ۰.۲٪ مخلوط و در شرایط بهینه الکتروریسی شد. ساختار و توزیع قطری الیاف الکتروریسی شده، به کمک تصاویر میکروسکوپ الکترونی روبشی (SEM) و میکروسکوپ نوری مورد بررسی قرار گرفت. نتایج حاصل از بررسی تصاویر SEM الیاف نانو نشان داد که بهترین نمونه‌ها، مخلوط آلجینات-پلی وینیل الکل با نسبت حجمی ۷۰:۳۰ (سدیم آلجینات-PVA با غلظت ۰.۸٪) و مخلوط آلجینات-پلی اتیلن اکساید (با غلظت ۰.۸٪) با نسبت حجمی ۵۰:۵۰ است. این نمونه‌ها، دارای ساختاری کاملاً یکدست و فاقد دانه و به ترتیب، دارای میانگین قطری ۱۱۸/۳ و ۹۹/۱ نانومتر و توزیع قطری ۲۰۴-۷۵/۸ نانومتر و ۱۲۲-۷۱ نانومتر می‌باشند.

مطالعات رئولوژیکی انجام شده روی محلولهای پلیمری نشان داد که قابلیت الکتروریسی و مورفولوژی نانو الیاف، به شدت به ویسکوزیته‌ی محلول و بنابراین به نسبت سدیم آلجینات به پلیمر مصنوعی (PVA و PEO) وابسته است. همچنین به منظور بررسی قابلیت اختلاط محلول پلیمری و مطالعه‌ی چگونگی برهم کنش این پلیمرها در مخلوط، از طیف سنجی مادون قرمز (FTIR) استفاده گردید.

ضمیمه 4- مقالات کنفرانسهای علمی (داخلی و خارجی)

1-4 اولین کنفرانس فناوری نانو در محیط زیست - اسفندماه ۱۳۸۵ - دانشگاه صنعتی اصفهان

انتقال گرما در میکرو کانالها به کمک روش شبکه بولتزن

عباس صفایی ، ابراهیم شیرانی

با کوچک شدن ابعاد مسئله و در نتیجه افزایش عدد نودسن، نمی توان از فرض پیوسته بودن جریان و روابط حاکم بر جریان که با استفاده از این فرض به دست آمده اند استفاده کرد. همچنین معادله انتقال گرمای فوریه صادق نخواهد بود. لذا در این مقاله برای بررسی انتقال گرمای جریان سیال در یک میکرو کانال از روش عددی شبکه بولتزن استفاده می کنیم. علاوه بر حل جریان سیال، از یک مدل گرمایی روش شبکه بولتزن برای پیش بینی توزیع دما در جریان میکرو کانالها بهره جسته ایم. مدل مورد استفاده، یک مدل نه سرعتی یا تابع توزیع نه جهتی برای بدست آوردن توزیع های جرم، مومنتم و دما در جریان میکرو کانال می باشد. در این مدل از یک زمان استراحت که همواره تابعی از عدد نودسن می باشد استفاده کرده ایم. بر این مبنا اثر تغییر عدد نودسن را بر روی رفتار جریان و انتقال گرما و بخصوص پرش دما در نزدیکی سطح را بررسی کرده ایم. در جریان میکرو کانالها با افزایش عدد نودسن پرش دما و سرعت لغزشی روی دیوار نیز افزایش می یابد.

واژه های کلیدی: مدل گرمایی شبکه بولتزن، میکرو کانال، تقریب BGK، شرایط پرش دما در مرز

2-4 اولین کنفرانس فناوری نانو در محیط زیست - اسفندماه ۱۳۸۵ - دانشگاه صنعتی اصفهان

شبیه سازی میکرو جریان ها با استفاده از روش شبکه بولتزن

سعید جعفری ، ابراهیم شیرانی

در کار حاضر با استفاده از روش شبکه بولتزن جریان گاز در هندسه های با ابعاد میکرو شبیه سازی شده است. برای انجام این شبیه سازی با استفاده از تئوری جنبشی زمان آرامش به عدد نودسن وابسته شد. شرط مرزی پخش مولکولی برای در نظر گرفتن لغزش روی دیوارها اعمال شد. جریان میکرو کوئت، جریان در یک میکرو حفره و جریان در یک میکرو کانال شبیه سازی شد. در کلیه موارد شبیه سازی شده نتایج حاصل با نتایج تحلیلی و عددی دیگران مقایسه شد که توافق بسیار خوبی مشاهده شد. در کار حاضر برای نخستین بار رفتار جریان در یک میکرو حفره مورد بررسی قرار گرفت. همچنین پدیده نودسن می نیمم برای اولین بار با استفاده از روش شبکه بولتزن مشاهده شد.

واژه های کلیدی: روش شبکه بولتزن - زمان آرامش - شرط مرزی پخش مولکولی - میکرو کانال

3-4 چهاردهمین کنفرانس سالانه مهندسی مکانیک - اردیبهشت ۱۳۸۵ - دانشگاه صنعتی اصفهان

شبیه سازی جریان در هندسه های با ابعاد به روش شبکه بولتزمن

سعید جعفری ، ابراهیم شیرانی

در این مقاله جریان سیال در هندسه های با ابعاد میکرو بوسیله روش شبکه بولتزمن شبیه سازی شده است. این مقاله با دو هدف نوشته شده است. یکی وابسته کردن زمان آرامش به عدد نودسن و دیگری بررسی محدوده عدد نودسن که در آن جریان جواب مناسبی می دهد. از شرط مرزی پخش مولکولی روی دیوارها استفاده شده است. جهت ارزیابی صحت نتایج جریان کوئت و جریان در یک میکرو حفره کانال مدل شده است. برای جریان کوئت در محدوده وسیعی از عدد نودسن مسئله حل شد و بر روی صحت نتایج بحث شده است. نتایج حاصل با روش مونت کارلو و روش شبکه بولتزمن انتروپیک مقایسه شد که توافق خوبی را نشان می دهد.

واژه های کلیدی: روش شبکه بولتزمن - زمان آرامش - شرط مرزی پخش مولکولی - میکرو کانال.

4-4 اولین کنفرانس فناوری نانو در محیط زیست - دوم تا سوم اسفندماه ۱۳۸۵ - دانشگاه صنعتی اصفهان

بررسی مدل های تخمین ضریب هدایت حرارتی نانو سیالات

محمد نصیری ، غلامرضا اعتماد

در استفاده از نانو سیال جهت انتقال حرارت نیاز به دانستن هدایت حرارتی آن می باشد. مدل های کلاسیکی نظیر مدل ماکسول در غلظتهای زیاد نانو ذره در سیال پایه برآورد قابل قبولی از هدایت حرارتی نانو سیال بدست نمی دهند. با لحاظ کردن پارامترهائی نظیر حرکت براونی نانو ذرات مدل های دیگری برای این مسئله ارائه گردیده است. در این مقاله پس از معرفی مدل های مختلف کارائی مدل های کلاسیک و مدل های جدید ارائه شده بررسی گردیده است.

4-5 اولین کنفرانس فناوری نانو در محیط زیست - دوم تا سوم اسفندماه ۱۳۸۵ - دانشگاه صنعتی اصفهان

تهیه ریزلایه های کیتوسانی جهت تصفیه آلاینده های زیست محیطی

هما همایونی، سید عبدالکریم حسینی و معصومه ولی زاده

ساختارهای نانو به واسطه داشتن ویژگیهای منحصر به فرد، از کاربردهای مختلفی برخوردارند. یکی از مهم ترین زمینه های کاربردی منسوجات تهیه شده از الیاف نانو، فیلتراسیون می باشد. تخلخل و نسبت سطح به حجم بالا و اندازه نانومتریک حفره ها و خواص ویژه جذب فیزیکی و شیمیایی از جمله دلایل راندمان بالای این نوع فیلترهاست. در کنار خواص فوق الذکر، استفاده از پلیمرهای فعال و با قدرت جذبی بالا امکان افزایش قدرت جذب فیلترها و ارتقاء کارآئی آن ها را فراهم می سازد. یکی از مهمترین این پلیمرها که از جایگاه بالائی در فیلتراسیون برخوردار است بیوپلیمر طبیعی کیتوسان است. بدیهی است تلفیق این دو ویژگی یعنی کاربرد بیوپلیمر کیتوسان (CS) در تولید نانو فیلترها می تواند کارائی محصول را در حد قابل توجهی افزایش دهد. البته الکترورسی

کیتوسان به واسطه ویسکوزیته بالای محلول آن فرآیندی دشوار است. در این تحقیق ابتدا وزن مولکولی (CS) کاهش داده شد و سپس محلول ۵wt CS در اسید استیک ۹۰٪ (AcOH) جهت الکتروریسی بکار گرفته شد. نتیجه این فرایند تولید نانو الیاف بدون دانه CS با میانگین قطری ۱۴۱ nm می باشد.

واژه های کلیدی: کیتوسان (CS) - اسید استیک (AcOH) - نانو فیلتر - الکتروریسی.

6-4 اولین کنفرانس فناوری نانو در محیط زیست - دوم تا سوم اسفندماه ۱۳۸۵ - دانشگاه صنعتی اصفهان

تهیه پارچه چندلایه محافظ از ریز لایه PAN و بررسی خواص مکانیکی آن

سیدعبدالکریم حسینی راوندی ، معصومه ولی زاده و راضیه هاشمی صنعتگر

ساختارهای نانو به واسطه ویژگیهای خاص فیزیکی و شیمیایی شان در دهه اخیر جایگاه ویژه ای یافته و از کاربردهای روزافزونی برخوردار گشته اند. سطح مخصوص و تخلخل بالا، قابلیت جذب فیزیکی ذرات و مواد معلق ، ویژگیهای خاص تراوایی و نفوذ پذیری هوا از جمله دلایل کارآیی بالای این ساختارها در موارد مختلفی از قبیل کاربردهای پزشکی و فیلتراسیون است . براین اساس در این مقاله روشی جهت تولید پارچه چند لایه دارای نانو فیلتر جهت کاربرد در البسه محافظ ارائه شده و خواص مکانیکی آن از قبیل ویژگیهای کششی ، برشی ، فشاری و خمشی آن مورد بررسی قرار می گیرد. پارامترهای محاسبه شده در هر دسته برای ارزیابی راحتی پوشش مورد استفاده قرار می گیرند.

واژه های کلیدی: البه محافظ - نانو فیلتر - خواص مکانیکی - راحتی پوشش

7-4 اولین کنفرانس فناوری نانو در محیط زیست - دوم تا سوم اسفندماه ۱۳۸۵ - دانشگاه صنعتی اصفهان

بررسی امکان تولید الیاف نانو از بیوپلیمر طبیعی سدیم آلجینات به روش الکتروریسی

سمیه صفی ، محمد مرشد، سیدعبدالکریم حسینی ، مهران غیاثی

بیوپلیمر طبیعی آلجینات به دلیل زیست سازگاری عالی با بدن ، زیست تخریبی ، غیر سمی بودن و اثر التیام بخشی زخمها ، کاندیدای مناسبی برای کاربردهای زیست پزشکی است و به خاطر دارا بودن خواص بیولوژیکی مطلوب در زمینه های متعددی نظیر وسایل بهداشتی و آرایشی ، مواد پزشکی ، پوشش زخم بندی و افزودنیهای غذایی و ... استفاده شده است. با توجه به مزایا و خواص مطلوب بیوپلیمر طبیعی آلجینات و مزایای مضاعفی که لیف نانو تولید شده از آن خواهد داشت ، در این مقاله ، دردو بخش به بررسی امکان الکتروریسی این بیوپلیمر پرداخته شد. در بخش اول ، الکتروریسی بیوپلیمر خالص آلجینات و تاثیر افزودن برخی افزودنیهای مناسب نظیر سطح فعال و حلالهای آلی بر افزایش قابلیت الکتروریسی این محلول پلیمری بررسی شد که نتایج رضایت بخشی حاصل نگردید. در بخش دوم ، با افزودن غلظتهای مختلف پلیمر های مصنوعی غیر سمی و زیست سازگار پلی اتیلن اکساید و پلی ویتیل الکل (به طور جداگانه) به محلول آبی سدیم آلجینات ، الکتروریسی مخلوطهای پلیمری به طور

موفقیت آمیز انجام شد. نحوه برهم کنش پلیمرها در مخلوط پلیمری با کمک طیف سنجی مادون قرمز (FTIR) ارزیابی شد. نتایج حاصله، نشان دهنده برهم کنش ضعیف بین پلیمری (نظیر پیوند هیدروژنی) مابین گروههای هیدروکسیل سدیمی آلجینات و اکسیژن اتر در زنجیر پلیمری PEO (و گروههای هیدروکسیل PVA) بود. همچنین، ساختار و توزیع قطری الیاف الکترورسی شده، به کمک تصاویر میکروسکوپ نوری و میکروسکوپ الکترونی رویی (SEM) مورد بررسی قرار گرفت. مطالعات رئولوژیکی انجام شده روی محلولهای پلیمری نیز حاکی از آن بود که قابلیت الکترورسی و مورفولوژی نانو الیاف، به شدت به ویسکوزیته محلول و در نتیجه به نسبت سدیم آلجینات به پلیمر مصنوعی وابسته است.

واژه های کلیدی: سدیم آلجینات، الکترورسی، الیاف نانو، پلی اتیلن اکساید، پلی وینیل الکل، مخلوط پلیمری

4-18 اولین کنفرانس فناوری نانو در محیط زیست - دوم تا سوم اسفند ماه 1385 - دانشگاه صنعتی اصفهان

کاربرد فناوری نانو در نساجی و اثرات آن بر محیط زیست

حسین توانایی، غزال نداف

در این مقاله با مروری بر مقالات منتشر شده در سال های اخیر به طور کلی به بررسی فناوری نانو در نساجی یعنی از یک طرف در تولید نانو کامپوزیتهای با قابلیت تولید الیاف شامل انواع پرکننده - های مرسوم نظیر نانو الیاف و نانو ذرات کربن، نانو صفحه های کالی (clay) نانو ذرات اکسید فلزی و از طرف دیگر کاربرد فناوری نانو در تکمیل کالای نساجی شامل کاربرد نانو کپسول های حاوی مواد داخلی مختلف (payload agent) (نظیر مواد ضد قارچ یا ضد باکتری، مواد محافظ UV) و کاربرد نانو ذرات (اثر لوتوس (lotus))، کاربرد نانو ذرات اکسید فلزی و نانو ذرات کربن سیاه (carbon black) جهت رنگرزی) پرداخته و سپس به اختصار مزایا و معایب کاربرد این فناوری در ارتباط با محیط زیست مطرح شده است.

واژه های کلیدی: نانو کامپوزیت، فناوری نانو، تکمیل کالای نساجی، محیط زیست

4-12 پانزدهمین کنفرانس سالانه (بین المللی) مهندسی مکانیک ایران، ISME2007، دانشگاه صنعتی امیرکبیر، 1386

شبیه سازی جریان در میکروکانالها و محیط متخلخل با ابعاد میکرو با استفاده از روش شبکه

بولتزمن

سعید جعفری، ابراهیم شیرانی

در این مقاله، جریان گاز دما ثابت در میکرو کانالها و محیط متخلخل با ابعاد میکرو با استفاده از روش شبکه بولتزمن شبیه سازی شده است. جهت در نظر گرفتن اثرات تراکم پذیری زمان آرامش به عدد نودسن و چگالی

محلی وابسته شده است. همچنین سرعت لغزشی روی دیوارها با ترکیب کردن شرایط مرزی کمانه کردن و آیینی ای به دست آمده است. توزیع فشار غیرخطی و توزیع سرعت لغزشی در طول میکرو کانال به دست آمده است و با نتایج تجربی و عددی سایر روشها مقایسه شده است. در انتها مشخصه های جریان گاز در یک محیط متخلخل با ابعاد میکرو برای اعداد نودسن مختلف و نسبت فشارهای مختلف شبیه سازی شده است. با در نظر گرفتن اثرات تراکم پذیری و رقت یک مدل برای افت فشار در محیط متخلخل با ابعاد میکرو ارائه شده است. کلمات کلیدی: روش شبکه بولتزمن - زمان آرامش - محیط متخلخل - میکرو کانال.

Quasicontinuum(QC) Simulation of Aluminum Film Nanoindentation

M.Salimi , S.ziaierad , A.M.Ebrahimpoor

Department of Mechanical Eng., Isfahan University of Technology, Isfahan, Iran,
salimi@cc.iut.ac.ir

Abstrac: The idea of the QC method is a relatively simple one. With the goal of modeling an atomistic system without explicitly treating every atom in the problem, the QC provides a framework whereby degrees of freedom are judiciously eliminated and force/energy calculations are expedited. This is combined with adaptive model refinement to ensure that full atomistic detail is retained in regions of the problem where it is required while continuum assumptions reduce the computational demand elsewhere.

This paper presents a large scale atomic resolution simulation of nanoindentation into a thin aluminum film using the quasicontinuum method. The purpose of the simulation is to study the initial stages of plastic deformation under the action of an indenter. Two different crystallographic orientations of the film are studied. We obtain macroscopic load versus indentation depth curve and detailed information regarding the atomistic mechanisms responsible for the macroscopic curves.

.Keywords: Quasicontinuum; nanoindentation; dislocation; nucleation

2nd conference on Nanostructures Accepted for publication in
To be submitted to Journal of Materials Processing Technology

1- Application of LBM for Simulation of Flow in Microchannels and Micro Porous Media

E. Shirani*, S. Jafari

Isothermal gas flow is simulated in micro-channels and in micro porous media using the lattice Boltzmann method. To consider compressibility and rarefaction effect, relaxation time is related with local density and Knudsen number. Also slip velocity in wall is obtained by combining bounce back and specular boundary conditions. Nonlinear pressure drop and velocity distribution along the streamwise direction are presented and compared with available results. Finally gas flow characteristics in micro porous media are studied for different Knudsen numbers and inlet to outlet pressure ratio. The effects of compressibility and rarefaction are considered and a model for the pressure drop is presented.

International Conference on Micro and NanoTechnologies
ICMNT06, Tizi-Ouzou Algeria, 19-23 Nov. 2006

2- International School on Environmental Micro and Nano Technologies

(ISEMNT2009)

The aim of the International School on Environmental Micro and Nano Technologies is to provide an open forum for the presentation and discussion of recent research and development results of nano for environmental applications. Two aspects of the environmental issues will be addressed at the School: 1) Applications of micro and nanotechnology for environmental monitoring, environmental treatment and remediation of pollution such as cleaning up waste streams of contaminants, particularly those substances that are highly toxic, environment-friendly devices such as development of clean energy sources, 2) The potential environmental and health risks of nanotechnology. For example the potential risks associated with nanoparticles are becoming a central cause for concern and the subject of much public debate.

ضمیمه 5- مقالات چاپ شده در مجلات علمی پژوهشی

۱-۵ مجله علوم و تکنولوژی پلیمر، مجله پلیمر فارسی جلد شماره ۴- صفحه ۲۴۱ تا ۲۴۸ - ۲۰۰۵

الکتروریسی نانو الیاف پلی آکریلونیتریل تک محوری موازی و آرایش یافته به وسیله جمع کننده های فاصله دار

روح اله جلیلی ، سیدعبدالکریم حسینی و محمد مرشد

الکتروریسی ، رسیدن مستقیم نانو الیاف از محلولهای پلیمری با تکیه بر نیروهای الکتروستاتیکی است . در این پژوهش ، ابتدا دستگاه الکتروریسی طراحی و ساخته شد. سپس با اعمال تغییراتی در روش استفاده از صفحات فلزی فاصله دار نانو الیاف تک محوری موازی شده پلی آکریلونیتریل در محلولهای ۱۰، ۱۲/۵ و ۱۵ درصد وزنی دردی متیل فرمامید، در شرایط بهینه تولید و ریسیده شدند. در این روش برخلاف شیوه متداول جمع آوری نانو الیاف که به وسیله جمع کننده ای ایستا انجام می گیرد، اجازه استراحت کامل به زنجیرهای مولکولی داده نشد، در نتیجه آرایش مولکولی اولیه نانو الیاف که در حین الکتروریسی بدست آمده بود، حفظ شد. ساختار دسته این الیاف به وسیله میکروسکوپیهای نوری و الکترون پویشی بررسی و وجود آرایش یافتگی و ضریب شکست مضاعف به کمک میکروسکوپ نور قطبیده تائید شده است.

۲-۵ مجله علوم و تکنولوژی پلیمر- سال نوزدهم - شماره ۲ - صفحه ۱۳۰-۱۲۱-، ۱۳۸۵

بررسی عوامل موثر بر مقدار تولید نانو الیاف پلی آکریلونیتریل الکتروریسی شده

روح اله جلیلی ، سیدعبدالکریم حسینی و محمد مرشد

الکتروریسی ، رسیدن مستقیم نانو الیاف از محلولها و مذاب پلیمری بر اساس نیروهای الکتروستاتیک است . این پژوهش ، تلاش برای یافتن عوامل افزاینده مقدار تولید نانو الیاف بدون تغییر در قطر آنهاست. به منظور بررسی مقدار تولید، عوامل موثر بر ولتاژ بحرانی در فرآیند الکتروریسی با توجه به معادله تیلور، مورد توجه قرار گرفت .

برای الکترورسی نانو الیاف ، از محلول ۱۵ درصد وزنی پلی آکریلونیتریل در دی متیل فرمامید استفاده شد. افزایش ولتاژ از ۱۰ به ۲۰ KV باعث افزایش تولید نانو الیاف به مقدار ۶۰۰ درصد شد. میانگین قطری نانو الیاف به تدریج از ۳۸۵ به ۳۱۵ mm کاهش یافت. اما ، توزیع قطری نانو الیاف با افزایش ولتاژ عریض تر شد. در طول ثابت سوزن سرنگ معادل ۳/۵ cm ، ولتاژ بحرانی از ۹/۵ به ۶/۵ KV کاهش و مقدار تولید نانو الیاف ۴۲ درصد افزایش یافت. نتایج نشان می دهد با تغییر در طول و قطر سوزن سرنگ ، تغییر معنی داری در میانگین و توزیع قطری نانو الیاف مشاهده نشد. برای بررسی معنی دار بودن مقایسه نتایج ، از روش تحلیل با استفاده از نرم افزار SPSS در سطح اطمینان $\alpha = 0/50$ استفاده شد. برای تعیین قطر نانو الیاف الکترورسی شده میکروسکوپ الکترون پویشی بکار گرفته شد.

واژه های کلیدی: الکترورسی، نانو الیاف ، قطر سوزن سرنگ ، طول سوزن سرنگ، مقدار تولید

Application of LBM in Simulation of Flow in Simple Micro-Geometries and Micro Porous Media

E. Shirani and S. Jafari

Isothermal gas flow is simulated in micro-Couette, micro-channel and micro porous media using the lattice Boltzmann model (LBM). To consider compressibility and rarefaction effects, two relaxation time models related to Knudsen number Kn and local density are used. Diffuse-scattering boundary condition (DSBC) and a combination of bounce back and specular boundary conditions are used to obtain slip velocity at the wall. For micro-Couette flow, the slip velocity and the slip length as a function of Kn are calculated and compared with that of MD, DSMC and Maxwell theorem. For micro-Couette, the velocity profile along with the slip velocity for different values of Kn and the slip length as a function of Knudsen number are studied. It is shown that the flow structures are changed by changing the values of Kn . The nonlinear pressure drop and the velocity distribution along the streamwise direction in the micro-channel flow are obtained and compared with available data, which resulted in good agreement. The Knudsen minimum phenomenon is successfully predicted within the LBM framework. Finally, gas flow characteristics in micro porous media for different Kn numbers, porosity and inlet to outlet pressure ratio are studied. The effects of compressibility and rarefaction are considered.

African Physical Review, (2007) 1:0002