

کترین برتر اندیشه برنگذر

به نام خداوند جان و خرد

فناوری نانو و شیمی کوانتومی

مؤلف:

دکتر شمس شریفی

عضو هیئت علمی دانشگاه آزاد اسلامی واحد رباط کریم

سرشناسه	: شریفی، شمسا، ۱۳۹۱
عنوان و نام پدیدآور	: فناوری نانو و شیمی کوانتومی / مولف شمسا شریفی
مشخصات نشر	: تهران: کتاب آوا، ۱۳۹۸
مشخصات ظاهری	: ۲۰۰ص
شابک	: ۹۷۸-۶۰۰-۳۴۶-۵۳۳-۶
وضعیت فهرست نویسی	: فیا
موضوع	: شیمی کوانتوم
موضوع	: Quantum chemistry
موضوع	: نانوتکنولوژی
موضوع	: Nanotechnology
رده بندی دیویی	: ۵۴۱/۲
شماره کتابشناسی ملی	: ۵۸۱۰۰۱

فناوری نانو و شیمی کوانتومی



انتشارات کتاب آوا

مؤلف:	دکتر شمسا شریفی
ناشر:	کتاب آوا
نوبت چاپ:	اول ۱۳۹۸
شمارگان:	۲۰۰ نسخه
قیمت:	۳۳,۰۰۰ تومان
شابک:	۹۷۸-۶۰۰-۳۴۶-۵۳۳-۶

نشانی دفتر مرکزی: انقلاب، خیابان ۱۲ فروردین، بن بست حقیقت، پلاک ۴، طبقه ۴ واحد ۴
شماره‌های تماس: ۶۶۹۷۴۶۴۵ | ۶۶۹۷۴۱۳۰ | ۶۶۴۰۷۹۹۳ | دورنگار: ۶۶۴۶۱۱۵۸

avabook_kazemi@yahoo.com

فروشگاه کتاب آوا: اسلام شهر، خیابان صیاد شیرازی (خیابان دانشگاه) جنب فرمانداری
تلفن: ۵۶۳۵۴۶۵۱

هرگونه تکثیر این اثر از طریق ارسال یا بارگذاری فایل الکترونیکی، یا چاپ و نشر کاغذی آن بدون مجوز ناشر، به هر شکل، اعم از فایل، سی‌دی، افست، ریسوگراف فتوکپی، زیراکس یا وسایل مشابه، به صورت متن کامل یا صفحاتی از آن، تحت هر نام اعم از کتاب، راهنما، جزوه، یا وسیله کمک آموزشی، در فضای واقعی یا مجازی، و همچنین توزیع، فروش، عرضه یا ارسال اثری که بدون مجوز ناشر تولید شده، موجب پیگرد قانونی است.

میلیونها سال است که در طبیعت ساختارهای بسیار پیچیده با ظرافت نانومتری (ملکولی) ساخته می‌شود. علم بشری اینک در آستانه چنگ اندازی به این عرصه است، تا ساختارهایی بی‌نظیر بسازد که در طبیعت نیز یافت نمی‌شوند. فناوری نانو کاربردهایی را به عرصه ظهور می‌رساند که بشر از انجام آن به کلی عاجز بوده است و پیامدهایی را در جامعه بر جا می‌گذارد که بشر تصور آنها را هم نکرده است. علوم و فناوری نانو به دلیل اندازه و مقیاسی که در آن معتبرند می‌توانند با بسیاری از خواص مکانیک کوانتومی در تعامل باشند. فهم بسیاری از فرایندها در این مجموعه بدون داشتن این دانش غیر ممکن می‌باشد. فناوری نانو را می‌توان نگرش عمیق در پژوهش و تحولاتی دانست که هدف آن کنترل رفتار و ساختار بنیادی مواد در حد اتم ها و مولکول ها می‌باشد. همچنین بهره برداری از خواص نوظهور این گونه ساختارها، نحوه‌ی ساخت و استفاده از آن ها از اهداف اصلی این فناوری می‌باشد. بی‌گمان زمانیکه نخستین کارها به ترها پا به عرصه علم و فناوری گذاشتند، هیچ کس حتی تصور هم نمی‌کرد روزی فرا برسد که علوم تجربی همچون شیمی فیزیک و حتی زیست شناسی تا این حد وابسته به مباحث پیشرفته در زمینه روش های تئوری باشد. در این میان علم شیمی فیزیک گوی سبقت را از سایر علوم ربوده است. اما نکته حائز اهمیت، که بایستی تمام محققان به آن بیش از پیش بپردازند، نگرش به علوم بین رشته‌ای و تلفیقی است. ابعاد آن شدیداً تا جهت استفاده هر چه بیشتر محققان مطالبی را در زمینه مباحث نوین از عمق مقالات علمی استخراج کنیم تا راهگشای دانش پژوهانی گردد که مصمم به چاپ مقالات در زمینه کارهای تحقیقاتی خویش باشند. در این کتاب علوم فناوری نانو و شیمی کوانتومی و شیمی محاسباتی بصورت تلفیقی برای بررسی امکان استفاده از نانولوله بور نیتريد بعنوان یک حامل مناسب ترکیب آنتی اکسیدانی دزاکسی همی گسیپل به سمت سلولهای بدن مورد استفاده قرار گرفته‌اند. نانولوله‌های بور نیتريد به دلیل عدم سمیت، زیست سازگاری بالا و ویژگی های منحصر به فرد دیگر مانند ویژگی های مغناطیسی و سهولت عامل دار کردن بوسیله مولکولهای مختلف، پتانسیل استفاده در پزشکی برای

مقاصد درمانی و تشخیص را تا حد بالایی دارا هستند. اگرچه هنوز در ابتدای راه تحقیق بر روی این نانو ذرات شگفت انگیز قرار داریم و شمار مطالعات درباره آنها به اندازه نانو لوله‌های کربنی نیست، اما پژوهش‌های حاضر نشان می‌دهد که آنها مناسب‌ترین جایگزین برای نانو لوله‌های کربنی هستند. امید است این تحقیق ره‌گشای مسیری در جهت درمان بسیاری از انواع سرطانها باشد و کتاب حاضر بتواند راهنمایی مناسب برای نیل به این هدف باشد.

در پایان از تمامی اساتیدی که این جنبه از شیمی را در محضر ایشان مطالعه کرده‌ام سپاسگزارم. از قبول زحمت استاد بزرگوار سرکار خانم دکتر مهنوش خالقیان قدردانی می‌نمایم.

مؤلف - تابستان ۹۸

۱۳	فصل اول: مقدمه
۱۳	مقدمه
۱۳	۱-۱- رادیکال آزاد
۱۳	۱-۱-۱- تشکیل رادیکال آزاد
۱۴	۱-۱-۲- انول پایدار رادیکال آزاد
۱۵	۱-۱-۳- فعالیت رادیکال آزاد در بدن
۱۵	۱-۱-۴- مضرات رادیکال آزاد برای سلامتی
۱۷	۱-۱-۵- نقش استرس در تولید رادیکالهای آزاد
۱۷	۲-۱- سرطان
۱۸	۳-۱- آنتی اکسیدان
۲۰	۴-۱- فلاونوئیدها
۲۲	۱-۴-۱- منبع فلاونوئیدها در طبیعت
۲۳	۲-۴-۱- ساختمان فلاونوئیدها
۲۴	۳-۴-۱- انواع فلاونوئیدها و ساختمان آنها
۲۴	۱-۳-۴-۱- آنتوسیانین ها (Anthocyanins)
۲۵	۲-۳-۴-۱- فلاون ها (Flavones)
۲۶	۳-۳-۴-۱- فلاونول ها (Flavonols)
۲۸	۴-۴-۱- چالکون ها
۳۰	۱-۴-۴-۱- دی هیدرو و چالکون ها
۳۵	۵-۱- بیوسنتز فلاونوئیدها و چالکون ها
۳۵	۱-۵-۱- بیوسنتز فلاونوئیدها
۳۷	۲-۵-۱- بیوسنتز چالکون ها
۳۸	۶-۱- شیمی چالکون ها
۳۹	۷-۱- شیمی فلاونوئیدها و ترکیبات طبیعی وابسته به آنها
۴۳	۸-۱- مشخصات طیفی فلاونوئیدها
۴۴	جدول ۱-۱- λ_{max} مشتقات فلاونوئیدها در حلالهای مختلف

۴۴	جدول ۱-۲- مشخصات طیف $^1\text{H-NMR}$ مشتقات فلاونوئیدها
۴۵	جدول ۱-۳- مشخصات طیف $^{13}\text{C-NMR}$ مشتقات فلاونوئیدها
۴۷	۹-۱- روش استخراج، جداسازی و خالص سازی فلاونوئید ها
۴۷	۹-۱-۱- روش استخراج فلاونوئیدها:
۴۷	۹-۲- آماده سازی و عصاره گیری از مواد گیاهی
۴۹	۹-۳- جداسازی و خالص سازی مواد متشکله موجود در عصاره:
۴۹	۹-۱-۳- کروماتوگرافی ستونی (Column Chromatography)
۴۹	۹-۲-۳- کروماتوگرافی لایه نازک (Thin layer chromatography) (TLC)
۵۰	۹-۳-۳- کروماتوگرافی مایع با کارکرد بالا (HPLC)
۵۰	۹-۴- کروماتوگرافی مایع با کارکرد بالا (High performance Liquid Chromatography)
۵۰	۹-۴-۲- تبلور (Crystallization)
۵۱	۱۰-۱- بررسی روش های فلاونوئید در بدن
۵۳	جدول ۱-۴- پتانسیل های اکسیدانی برای پاکسازی برخی از جفت رادیکالها
۵۳	۱۱-۱- فلاووپیریدول
۵۳	۱۱-۱-۱- نقش کلی فلاووپیریدول در بدن
۵۴	۱۲-۱- تربین ها
۵۶	۱۳-۱- مقدمه ای در زمینه فرآیند چرخه سو
۵۶	۱۳-۱-۱- بررسی فرآیند چرخه سلولی
۵۷	۱۳-۲- نقش و اهمیت آنزیمهای CDK و Cyclin
۵۸	۱۳-۳- بیماری های مربوط به چرخه سلولی
۵۹	فصل دوم: نانو
۵۹	مقدمه
۵۹	۱-۲- چگونگی پیدایش واژه نانو و فناوری نانو
۵۹	۱-۲-۱- معرفی فناوری نانو
۶۰	۲-۲- چرا (نانو) تکنولوژی؟
۶۰	۳-۲- نانو مواد
۶۱	۳-۲-۱- طبقه بندی نانو مواد بر اساس شکل ظاهری
۶۲	۳-۲-۱-۱- نانو ذرات
۶۳	۳-۲-۲- نانوالیاف
۶۳	۳-۲-۳- نانو کپسول ها
۶۳	۳-۲-۴- نانولوله ها
۶۳	۳-۲-۴-۱- نانولوله های کربنی (CNTS)

- ۶۶.....۱-۳-۲-۱-۴-۱-۱-۱ انواع نانو تیوب های کربنی
- ۶۷.....۱-۳-۲-۱-۴-۱-۲ خواص نانو لوله های کربنی
- ۶۷.....۱-۳-۲-۱-۴-۱-۳ کاربردهایی از نانو تیوب های کربنی
- ۶۷.....۱-۳-۲-۱-۴-۱-۳-۱ ترانزیستورها
- ۶۸.....۱-۳-۲-۱-۴-۱-۳-۲ حسگرها
- ۶۸.....۱-۳-۲-۱-۴-۱-۳-۳ نمایشگرها
- ۶۸.....۱-۳-۲-۱-۴-۱-۳-۴ حافظه های نانو تبویی
- ۶۸.....۱-۳-۲-۱-۴-۱-۳-۵ استحکام دهی کامپوزیت ها
- ۶۹.....۱-۳-۲-۱-۴-۱-۳-۶ دارورسانی توسط نانو تیوب های کربنی
- ۶۹.....۱-۳-۲-۱-۴-۱-۳-۷ ساخت قطعات الکترونیکی کوچک
- ۶۹.....۱-۳-۲-۱-۴-۱-۳-۸ روش های تولید نانو لوله های کربنی
- ۶۹.....۱-۳-۲-۱-۴-۱-۳-۹ رش تخلیه قوس الکتریکی
- ۷۰.....۱-۳-۲-۱-۴-۱-۳-۱۰ روش میدان مغناطیسی
- ۷۱.....۱-۳-۲-۱-۴-۱-۳-۱۱ وش تابش لیزر
- ۷۱.....۱-۳-۲-۱-۴-۱-۳-۱۲ رسوب بخار شیمیایی (CVD)
- ۷۲.....۱-۳-۲-۱-۴-۱-۳-۱۳ نانو توب های روش فرایند آمیزه سازی پلیمری
- ۷۲.....۱-۳-۲-۱-۴-۱-۳-۱۴ تولید نانو تیوب روش قالبی (template)
- ۷۳.....۱-۳-۲-۱-۴-۱-۳-۱۵ تولید نانو تیوب کربن بر پایه نانوالیاف PAN
- ۷۴.....۱-۳-۲-۱-۴-۱-۳-۱۶ نانو لوله های بور نیتريد BNNT
- ۷۶.....۱-۳-۲-۱-۴-۱-۳-۱۷ ساختار نانولوله بور نیتريد
- ۷۹.....۱-۳-۲-۱-۴-۱-۳-۱۸ عامل دار کردن نانو لوله های بور نیتريد
- ۸۰.....۱-۳-۲-۱-۴-۱-۳-۱۹ کاربرد نانو لوله های بور نیتريد در پزشکی
- ۸۰.....۱-۳-۲-۱-۴-۱-۳-۲۰ درمان سرطان با گیراندازی نوترون بور
- ۸۱.....۱-۳-۲-۱-۴-۱-۳-۲۱ افزایش الکترون فوژپذیری سلول ها با استفاده از نانولوله های بور نیتريد
- ۸۲.....۱-۳-۲-۱-۴-۱-۳-۲۲ زیست حسگرهایی از نانولوله بور نیتريد
- ۸۲.....۱-۳-۲-۱-۴-۱-۳-۲۳ تولید نانو لوله های بور نیتريد
- ۸۳.....۱-۳-۲-۱-۴-۱-۳-۲۴ نانوسیم ها
- ۸۳.....۱-۳-۲-۱-۴-۱-۳-۲۵ نانو روکش ها
- ۸۳.....۱-۳-۲-۱-۴-۱-۳-۲۶ مواد نانوحفره ای
- ۸۴.....۱-۳-۲-۱-۴-۱-۳-۲۷ خواص نانو مواد
- ۸۴.....۱-۳-۲-۱-۴-۱-۳-۲۸ خواص مغناطیسی
- ۸۵.....۱-۳-۲-۱-۴-۱-۳-۲۹ خواص آنتی باکتر بال

۸۵	۳-۲-۳- تغییر واکنش پذیری مواد
۸۶	۳-۳-۳- کاربرد نانومواد
۸۶	۳-۳-۱- صفحات خورشیدی و کیهانی
۸۷	۳-۳-۲- ترکیبات پیچیده
۸۷	۳-۳-۳- پوشش سطوح
۸۷	۳-۳-۴- ابزار برشکاری بسیار سخت
۸۷	۳-۳-۵- رنگ ها و محلول ها
۸۸	۳-۳-۶- محیط زیست
۸۸	۳-۳-۷- سلول های سوختی
۸۸	۳-۳-۸- نمایشگرها
۸۹	۳-۳-۹- باتری ها
۸۹	۳-۳-۱۰- مواد افزودنی سوخت ها
۸۹	۳-۳-۱۱- مواد مغناطیسی
۸۹	۳-۳-۱۲- وسایل پزشکی
۹۰	۳-۳-۱۳- سرامیک های سین آت
۹۰	۳-۴- نانو تکنولوژی و نقش آن در آروماتیک
۹۲	۳-۴-۱- دارورسانی هوشمند در بدن
۹۳	۳-۵- جایگاه فناوری نانو در علوم مهندسی
۹۵	فصل سوم: شیمی محاسباتی
۹۵	مقدمه
۹۵	۳-۱- مقدمه:
۹۷	۳-۲- طبقه بندی روشهای کوانتومی
۱۰۵	۳-۳ روشهای مبتنی بر تئوری اوربیتال مولکولی
۱۰۵	۳-۳-۱ روش میدان خودسازگار هارتری-فاک
۱۰۶	۳-۳-۲ روشهای ارتباط الکترونی
۱۰۸	۳-۳-۳ تئوری میدان خودسازگار چند آرایشی
۱۰۸	۳-۳-۴ برهم کنش آرایشی
۱۰۸	۳-۳-۵ تئوری اختلال
۱۰۹	۳-۳-۶ روش پاراکتریزه شده
۱۰۹	۳-۳-۷ روشهای مبتنی بر توابع دانسیته
۱۱۰	۳-۳-۸ تقریبهای اولیه
۱۱۰	۳-۳-۹ تقریب دانسیته موضعی

۱۱۱	۳-۱۰- تصحیح شیب (گرادیان) دانسیته
۱۱۲	۳-۱۱- روش اتصال آدیاباتیک
۱۱۲	۳-۴- سریهای پایه
۱۱۳	۳-۱۴- اوربیتالهای اسپلتری و گوسی
۱۱۳	۳-۲- طبقه بندی سریهای پایه
۱۱۵	۳-۴-۳- سریهای پایه دانینگ
۱۱۶	۳-۵- میدان نیرو
۱۱۸	۳-۵-۱- میدان نیروی Amber
۱۱۹	۳-۶- شبیه سازی لانگوین LD
۱۱۹	۳-۶-۱- انتگرال گیری محاسبه عددی
۱۲۱	۳-۷- شبیه سازی مونت کارلو
۱۲۲	۳-۸- محاسبات انتگرال نیم تجربی
۱۲۲	۳-۸-۱- انتخاب روش در محاسبات کوانتومی نیم تجربی
۱۲۴	۳-۹- روش های کامپیوتری
۱۲۵	۳-۱۰- نرم افزار HyperChem
۱۲۶	۳-۱۰-۱- روش های محاسباتی در HyperChem
۱۲۶	۳-۱۰-۲- ممان دو قطبی
۱۲۷	۳-۱۰-۲-۱- الکترونگاتیوی
۱۲۷	۳-۱۰-۲-۲- قطبش پذیری، سختی و نرمی
۱۲۸	۳-۱۰-۳- HOMO و LUMO
۱۳۰	۳-۱۰-۳- چگالی الکترونی کل
۱۳۰	۳-۱۰-۴- چگالی اسپین کل
۱۳۰	۳-۱۰-۵- پتانسیل الکتروستاتیک
۱۳۱	۳-۱۱- برنامه Gaussian
۱۳۲	۳-۱۱-۱- تواناییهای Gaussian
۱۳۲	فصل چهارم: جزئیات محاسبه
۱۳۳	مقدمه
۱۳۳	۴-۱- چکیده
۱۳۵	۴-۲- جزئیات محاسبات مرحله اول
	جدول ۴-۱- پارامترهای انرژی آزاد گیبس، آنتالپی، انرژی پایداری، ممان دو قطبی و شکاف پیوند HOMO-LUMO
۱۳۹	مولکول دزاکسی همی گسیل و جایگزینی متفاوت از (۱-۹) Br, Cl, F

- جدول ۲-۴- پارامترهای NMR محاسبه شده جابجایی شیمیایی ایزوتروپیک (δ_{iso}) و جابجایی شیمیایی آنیزوتروپیک (δ_{anis}) ۱۴۳
- جدول ۳-۴- پارامترهای NMR مولکول دزاکسی همی گسیل و مشتقاتش با جایگزینی متفاوت از ۱-۹ اتم Br, Cl, F ۱۴۸
- ۳-۴- نتیجه گیری مرحله اول محاسبات ۱۷۴
- ۴-۴- چکیده مرحله دوم محاسبات ۱۷۵
- ۵-۴- جزئیات محاسبات مرحله دوم ۱۷۶
- ۶-۴- انرژی جذب ۱۷۷
- ۷-۴- پهنه مازی و انرژی جذب ۱۷۸
- جدول ۴-۴- پارامترهای ترموشیمیایی مولکول دزاکسی همی گسیل، نانولوله بور نیتريد و کمپلکس دزاکسی همی گسیل - نانولوله بور نیتريد ۱۷۹
- جدول ۵-۴- پارامترهای محاسبه شده مولکول دزاکسی همی گسیل، نانولوله بور نیتريد و کمپلکس دزاکسی همی گسیل - نانولوله بور نیتريد ۱۸۰
- ۸-۴- محاسبات NBO ۱۸۰
- جدول ۶-۴- برهم کنش دهنده-گیرنده، انرژی، فوق مزدوج شدن وابسته به انتقال بار بین و نانولوله بور نیتريد و مولکول دزاکسی همی گسیل ۱۸۲
- ۹-۴- خواص الکترونی ۱۸۳
- جدول ۸-۴- بارهای طبیعی (بارهای NBO) و پارامترهای NMR شامل CS^1 و CS^A برای اتمهای انتخاب شده مولکول دزاکسی همی گسیل، نانولوله بور نیتريد و کمپلکس دزاکسی همی گسیل - نانولوله بور نیتريد ۱۸۷
- ۱۰-۴- محاسبات پارامترهای رزونانس مغناطیسی هسته ^{13}C در فاز گازی ۱۸۹
- ۱۱-۴- نتیجه گیری مرحله دوم محاسبات ۱۹۱