7	شبیه‌سازی معادله ولاسف	Abbasi , Hossein
8	Simulation of transport in fractured porous media	Hamzehpour, Hossein
9	حیطه‌های کاری در برنامه‌محاسباتی Gaussian	Beheshtian, Javad
10	Evolutionary modeling of self-gravitating systems: towards direct N-body simulation of globular clusters	Haghi, Hossin
11	Wavelets for Electronic Structure Calculations: The BigDFT Project	Ghasemi, S. Alireza
12	Hybrid multiscale simulation strategy for diffusion of discrete objects in continuum media	Naji, Ali
13	Simulation of Wet Granular Materials	Ebrahimnazhad, Habib
14	First-principles study of magnetic anisotropy in Y2Fe14B	Torbatian, Zahra, ; Yoshihiro, Gohda,; Hashemifar, S.javad; Akbarzade, Hadi
18	The investigation of the electronic structure, phonon dispersion and electron-phonon coupling in MgB2 superconductor	Morshedloo, Toktam; Rezaei Roknabadi, Mahmood; Modarresi, Mohsen
22	Nematic Colloids Close to a Curved Surface	Z. Eskandari ; Nuno Silvestre; Margarida Telo da Gama; M. R. Ejtehadi1
26	Simulation of a Position Sensitive Multiplier Gas Detector by the Finite Element Method	Delbari, Mohammad Javad; Saramad , Shahyar
30	Modeling the instability of nanotweezers based on carbon nanotubes under casimir attraction	Abadian, Naeime; Kanjouri, Faramarz
34	Simulation of Nanostructures Bulk Growth with Oblique Angle Deposition	Abbas Hadi, Naeimeh; NajafiMousavi, SeyedehZainab; Minaeifard, Sakineh; Sabet Dariani, Reza
38	The Relation between Non-locality and Randomness	Adalatkhah, Fatemeh; Movahhedian, Hossein
42	The structural, electronic and optical properties of Sr1-xBaxTe alloys using density functional theory	Ahmadian, Farzad; Amirkhani Dehkordi, Tayebeh

47	First principles calculations of structural electronic , and optical properties of zinc blende Cd1-xMgxSe alloys	Ahmadian, Farzad; Mahtab, Kahyash Sardari
51	The structural, electronic and optical properties of Ba1-xMgxSe (x=0, 0.25, 0.5, 0.75, 1) alloys	Ahmadian, Farzad; Zangeneh nejad, Fereshteh
55	The investigation of electronic structure and optical properties of Ca1-xSrxSe (x=0,0.25,0.5,0.75,1) alloys	Ahmadian, Farzad; Salari, Azadeh
59	The effect of phenyl groups on the transport properties of tetracene molecule	Alizadeh, Sara,; Shahtahmassebi, Nasser,; Pilevarshahri, Raheleh
63	Investigation of topology of electron charge density in Fe2VAl Heusler-type compound	Ardali, Negar1; Jalali Asadabadi, Saeid; Rajabi, Ali; Nematollahi, Javad; Khoshhal, F; Rahnamaye Aliabad, Hossein Asghar; Ouahrani, Tarik
67	Study of Optical Properties of Titanium Nitride (TiN) Based on DFT Calculation and WIEN2k package	Baekhtyar salmani pak, Nooshin; Kangarlou, Haleh
71	The Study of Structural, Electronic and magnetic Properties of V0.5Ca0.5Sb Compound	Bagzadeh Sara ; Ahmadian Farzad
75	Therapeutic Gain Calculation in BNCT with Geant4	Badieyan, Zeinab Sadat; Zarif, Hadi ;Firoozabadi,Mohamad mehdi
79	The effect of N dopping on electronic properties of SrO compound by ELNES spectrum	Dadsetani, Mehrdad; Moradian Alvar, Mehri
83	Electronic And Optical Properties Of Quaternary Chalcogenides Cu2ZnMX4(M=Ge,Sn ; X=S,Se)	Dadsetani, Mehrdad; Beiranvand, Azadeh
87	The effect of hydrogen in two-dimensional graphene structure	Dadsetani, Mehrdad; Hosseinpour, Asma; Nejati, Hajar
91	First principle study of structural, mechanical and thermal properties and phonon spectrum of III-A compounds (BP, AIP, GaP, InP)	Ehsanfar, Somayeh; Kanjouri, Faramarz; Tashakori, Hasan
95	Thermal conductivity in a quantum− wire/ d−wave superconductor junction.	Emamippourhamidreza ; Mehrabzadnarges
99	Investigate the band gap in semiconducting Zig-Zag nanotubes	Ensaf, Hadi; Mirzaei, Mohammad Reza; Daadmehr, Vahid

103	Calculation of optical coefficients for interface MnSe/ZnSe(001)	Fakhrai tadayon, Sara; bochani, Arash
107	Third-Party CNOT Attack on MDI−QKD	Farzi, Shokoofeh,; Movahdian, Hosien,
111	Ab inito study of structural and thermodinamical properties of $\alpha - Al_2O_3$	Fazeli, Ali, Mousavi, Seyed Javad And Golshahi, Siamak
115	A new calculated method for determination of optical constants of thin films in the infrared region	Falahatpour, Samaneh; Behjat, Abbas
119	Topological metal phase of the GdxY1-xPtBi alloys for x=0,0.25,0.5,0.75,1	Feizi mohazzab,Bahare; nourbakhsh,zahra
123	Calculation of Structural parameters and investigation of mechanic stability of GaN0.75P0.25 ternary compound	Fereshteh, Mirzaei; Rasoul, Ali najimi
127	Calculation transmutation rate of 237Npand129Iin EPT for ADS reactor by using MCNPX code 2	Ghasemian, Fahimeh; Firoozabadi;MohammadMehdi
131	Evaluation of the Chinese pebble bed reactor’s temperature reactivity coefficients	Hosseini, Seyed Ali; Basiri, Hamid; Athari Allaf, Mitra
135	Investigation of energy spectrum of secondary particles in extensive air showers of cosmic rays by CORSIKA simulation code	Hosseini, Akbar ; Purmohammad, Davoud
139	Extraction of some important cluster defect’s cross sections of hadron irradiated silicon detectors at cryogenic temperatures	Hosseini, Elham; Saramad, shahyar
143	Non-equilibrium electronic transport properties in pyrene based field-effect transistor	Jalili, Seifollah; Soleimani, Maryam
146	Introducing the Lindblad Superoperator exponential functions	JafariBaraz, Samad; faizi, Esfandyar
150	The interplay of spin density wave and nano structure formation in some Gd-intermetallic compounds	Kamali Sarvestani, Ketabi, , S. Ahmad Yazdani, Ahmad
154	The Investigation of Structural and Electronic Properties of LuAuPb and LaAuPb	Karimi, Elham; Nourbakhsh, Zahra

158	The effect of input data preprocessing methods on the Artificial Neural Network (ANN) output	Kaviani, Mahshid; MirRokni, Seyed Majid; Memarian, Mohammad Hossein
162	DFT calculation for mechanical properties of TiC nanowires	Khajehmiri, Zahra;Jafari, mahmoud
165	An investigation into the dose distribution of therapeutic12C ion beams by using FLUKAas a Monte Carlo code	Khorrami, Khazar;SoltaniNabipour, Jamishid
169	Simulation of nanostructures with diamond lattice by Monte-Carlo method	Khorani, Masumeh; Sabet Dariani, Reza
173	Structural and electronic properties of CrAs bulk and nanowires	Mahdavian Mehrabani, Somaye; Tashakori, Hasan,
177	Calculation of stability regions in quadrupole ion trap by matrix method 2	Mahdavi Khatibi ; Doroudi, Alireza
181	Calculate theelectronic structureanddensity ofstates inphaseCH2(pyrite u=0.35) ,most likelystructure for newphase of carbon in the framework ofdensity functional theory	Mehrabi, Vahid
185	Effects of Vacancy Defects on elastic properties of zb-AlAs, GaAs, GaP and GaN	Mona, Koozehgaran; Esmailian, Amir Hosein
189	Comparison of beta absorbed dose from 166Ho and 177Lu isotopes in cortex and medulla in three part kidney and integrated kidney using Monte Carlo method	Mohammad Mirzaei
193	Molecular dynamic simulation of Exo and endo-hydrogenation of single, Double and triple walled carbon nanotubes and determine the optimal adsorption distance	Mohammadi, Mahnaz; Khoshnevisan, Bahram;
197	Electronic, structural and magnetic behavior of Cu / (9,0) Carbon-Nanotube Hybrid Structure: Ab-initio study	Mohammadi, Mahnaz ; Meshkati, Nooshin; Khoshnavisan, Bahram
201	Study of stability of nanohybrid systems including single walled carbon nanotubes filled by polymer	Movlarooy Tayebeh
204	Ab initio study of quantum confinement effect in SiC nanowires	Movlarooy Tayebeh
208	The Application of spectral method for the numerical solution of the quasi−geostrophic omega equation	Moradian, Fatemeh; NasrEsfahani, Mohammad Ali; MirRokni, Seyed Majid; Mohebalhojeh, Alireza

212	study of the effect of pressure on electronical properties of titanium oxide	Mokhtari, Ali; Hushmandi Ghane, Saeede
216	Modeling the instability of nanoswitchunder casimir and electrostatic attraction using modified Adomian decomposition method	Mokhtari, Javad; Abadian, Naeime; Kanjouri, Faramarz; Mardane, Mohamadreza
220	The Effect of Self-Energy on the Conductance of Electrode-Benzene-Electrode System	Mohebbi, Razie; Darvishi, Motahareh; Seyedyazdi, Jamileh
224	First principle study of elastic properties of inverse perovskite Ca3PbO	Mohammadi,Mohsen ;Kanjouri,Faramarz
228	Investigate the factors affecting of granular particle segregation based on density by using Discrete Element Method(2D)	Nasir Baghban, Ehsan; Hanifpour, Maryam; Vaez Allaie, Seyed Mehdi
232	Phase Transition of InAs Under a Lattice Expansion	Namjoo, Shirin; Rozatian, Amir S. H.
236	Investigation on the Activity Improvement of Ziegler-Natta Catalysts by Organohalide Promoters	Naeimeh Bahri-Laleh
240	Neutron Flux Calculation in the Center of a Slab Reactor by Finite Difference Method	Nasri Nasrabadi, Mehdi; Mohammadian Kohol, Mojtaba
244	Ab-initio study of ferromagnetic system of Cr xCd 1-xTe (x=0/0625, 0/125, 0/25)	Nikzad, Somayeh; Izadifard, Morteza; Ghazi, Mohammad Ebrahim
248	Investigation on electron energy distribution in multi component plasma in nuclear fuel rod gap	Pazirandeh, Ali; Golian, Fereshteh
252	Conceptual and basic design of a small fast reactor, generating neutron flux and electricity	Pazirandeh, Ali ; Mohamad alizadeh, taban
256	The numerical study of cooling effects on self-gravitating protoplanetary disks	Pak, Milad; Faghei, Kazem
260	Image Reconstruction in Optical Tomography	Payani,Amir ; Motavalli, Seyed Mohammad
264	Calculation of Deuteron and Triton binding energies by solving the Schrödinger equation using the shooting numerical method	RahmatabadiSani, Javad;Rajabi, Ali Akbar
268	Sub-band structure of Graphene Nanoribbons	Rafee, vahdat,Nezamdoost, seyd jafar; Salavati-fard, Taha
272	First-principles calculations of electronic properties of Bi_2Te_3 and Sb_2Te_3 with spin-orbit interaction	Razie, Kargar; Rezaei roknabadi, Mahmood
276	First-principles Investigation of Intersite Charge Transfer and Electrical and Magnetic Properties in TbCu3Fe4O12	Rezaei, Nafise; Arita, Ryotaro; Hashemifar, S. Javad; Akbarzadeh, Hadi
280	Study of optical properties of Sn1-xMnxO2 using	Rostami,Mona ;

	Density Functional Theory	Ghazi,Mohammad Ebrahim ; Izadifard,Morteza
284	The Study of Thermal Conductivity in Graphene Nanoribbons with Vacancy Defect	Roozbeh, Sabetvand ; Saeedeh, Mazinani ; Davoud Kamani
288	Study of mechanicalproperties of graphene using Vasili-Tersoffvalence force field	Sadeghiniaraki, masome; ghasemi, sabike;seyed-talebi,seyedehmozhgan
292	Dosimetry calculation of high activity I-125 source in the treatment of brain tumours using MCNPX code	Salimi. Seyed Mostafa:Hamidi, Saeed:, Torkzadeh, Falamarz: Poorbaygi, Hosein
296	Dynamics Evolution Of The Accretion Discs Around Neutron Stars	Salehi, Fatemeh; Faghei, Kazem
300	Investigation of structural and electronic properties of GaP in zincblend, cinnabar and Cmcm phases by using psudopotential method	Salehi, Hmadollah; Amiri, Peiman; Mokhavat, Shiva; Izadi, Zeinab
304	Structural and electronic properties of high pressure phases of HgTe: Using Density Functional Theory	Salehi, Hamdollah; Amiri, Peiman; Izadi, Zeinab; Mokhavat,Shiva,
308	Calculation of structural and electronic properties of HgSe in cinnabar phase	Salehi, Hamdollah; Anis Hoseini, Firoozeh
311	Calculation of structural and compressibility properties TiO2 in anatase phase	Salehi, Hamdollah; Izadi, Zeinab
315	The Effect of Topological Heterogeneity on the Way that a Nanodrop Sits on a Nanostructured Surface	Seyedyazdi, Jamileh
319	Simulation of Heavy Ion Beam Fusion of Shell Targets for Ignition and High Energy Gain	Shams-Ali, Mehran; Khoshbinfar, Soheil
323	Thermoelectric properties of BiNCa3	Shirkhar, Shima ; Jalali Asadabadi, Saeid ; Nematollahi, Javad ; Rahnamaye Aliabad, Hossein Asghar ; Ahmad, Iftikhar
327	Raman spectra modes of quartz: The analytical study	Talebian, Ehsan; Malekfar. Rasoul
330	Conductance properties of graphene based ferromagnet/insulator/p-wave superconductor junctio	Vali, Rashid; Talebi khoundabi, Fatemeh
334	Spin transport in graphene-based ferromagnet/insulator/ ferromagnetic superconductor thin barrier junction	Vali, Rashid ;Farsizadeh, Naghmeh

شبیه‌سازی معادله ولاسف

حسین عباسی

دانشگاه صنعتی امیرکبیر

Simulation of transport phenomena in fractured porous media

Hossein Hamzehpour
Department of Physics, K. N. Toosi Unveristy of Technology

Abstract:

Fractured porous media have generated great interest since the beginning of the exploitation of the oil and gas reservoirs. To modeling and simulation of a disordered fractured porous medium a fracture network is generated in porous matrix in which the fractures are represented by rectangles of finite widths and random location and orientations. We numerically solve the transport equations in these disordered media to obtain the macroscopic properties as functions of geometrical or microscopical properties of the medium. First we solve single phase flow to obtain the effective permeability as a function of fractures' density and width. Then two-phase flow is solved to obtain the behavior of some physical quantities as oil and water saturation and average oil pressure of various values of geometrical parameters. Finally we study the propagation of acoustic wave in fractured porous media too. The most significant result of the study is that at short distances from the wave source, which is similar to the classical problem of electron localization in disordered solids, whereas for long distances the amplitude decays and a stretched exponential function of the distance that corresponds to sulocalization.

حیطه های کاری در برنامه محاسباتی Gaussian

Javad beheshtian
Shahid Rajaee University

Abstract :

Gaussian program is a general purpose ab initio electronic structure package which can be used to perform a variety of molecular mechanics, semi-empirical and ab initio molecular orbital (MO) calculations. Computations can be carried out on systems in the gas phase or in solution, and in their ground state or in an excited state. This is capable of computing energies, geometries, vibrational frequencies, transition states, reaction paths, excited states and a variety of properties based on various uncorrelated and correlated wave functions. Gaussian is used by chemists, chemical engineers, biochemists, physicists and others for research in established and emerging areas of chemical interest. Gaussian 09 is the latest in the Gaussian series of programs.In the current version, one can also carry out HF and DFT calculations using periodic boundary conditions (PBC). Gaussian is one of the most popular quantum chemistry software packages, due to its vast range of capabilities and ease of use.Gaussian can be run in serial or parallel mode.

Evolutionary modeling of self-gravitating systems: towards direct N-body simulation of globular clusters

Hossin Haghi
IASBS

Abstract:

Gravitational dynamics of N-Body systems is an extensive and active field of research including mathematicians and physicists. Since gravitation is purely attractive, there is generically no global stability at small scales, and some results from statistical mechanics may not be directly applied to systems with long-range forces like gravity. The theoretical context to describe self-gravitating systems is not clear, a very good example of this situation is the one of the globular clusters (A gravitationally bound stellar systems containing about 10^5 stars): they endeavor their entire life for thermal equilibrium, but their negative specific heat prevents them from ever reaching it. consequently, there is a continuous flow of energy that is driven outwards by relaxation. Therefore, due to the highly non-linear nature of these systems, analytical describing of cluster evolution turns out to be very complicated. For example, the formation of just one tight binary system (a double bound stars) can strongly affect the dynamics of the overall system. On the other hand, the progresses in simulation techniques and development of the hardware which allows to simulate the evolution of star clusters with increasingly larger particle numbers. However, only within the last few years, with the introduction of GPU-accelerated N-body codes such as Nbody6 it has become feasible to compute the dynamical evolution of a globular cluster-sized system over its entire life time on a star-by-star basis. In this talk, I will first introduce two examples of evolutionary models which follow the dynamical and stellar evolution from initial state to the present day: 1) Monte Carlo models and 2) N-body models. After listing the advantages/disadvantages of each method, I will then focus on the second approach, i.e., N-body models, and give some details of numerical methods that has been used in one specific collisional N-body code, Nbody6. Nbody6 uses a 4th-order Hermite integration scheme, an individual time-step algorithm to follow the orbits of cluster members, invokes regularization schemes to deal with the internal evolution of small-N subsystems. Finally, I will present our recent results on the the direct N-body modeling of two specific globular clusters, Pal 4 and Pal 14, using GPU computers of the University of Queensland, University of Bonn and IASBS. In these cases we model the evolution of the unusually extended outer-halo globular clusters over their entire lifetime to test our understanding of globular cluster formation and evolution.

Wavelets for Electronic Structure Calculations: The BigDFT Project

Alireza Ghasemi
IASBS

Abstract:

Daubechies wavelets are a powerful systematic basis set for electronic structure calculations because they are orthogonal and localized both in real and Fourier space. We describe in detail how this basis set can be used to obtain a highly efficient and accurate method for density functional electronic structure calculations. This basis shows high systematic convergence properties, very good performances, and an excellent efficiency for parallel calculations. In addition, achieving linear scaling, which is a challenging task in electronic structure calculations, can be obtained in this basis set. Calculations of the Hartree potential is an essential part of Kohn-Sham density functional theory. By expanding the charge density and potential in terms of interpolating scaling functions and by means of Green's functions the potential function and energy are calculated. In this way, beside achieving nearly linear scaling O(N log N), the original boundary conditions is preserved. This is of particular importance for molecular systems and nano-particles.

Hybrid multiscale simulation strategy for diffusion of discrete objects in continuum media

Ali Naji
IPM

Abstract:

We describe a novel hybrid continuum-particle strategy for modeling diffusion of discrete objects in continuum media and discuss its application to the specific example of diffusion on fluctuating membrane surfaces. Diffusion processes in continuum media are of fundamental importance and appear in many applications. An interesting situation arises when the diffusing object is a small (discrete) particle that locally interacts with a (continuum) medium in the background while the latter exhibits its own temporal fluctuations. This presents an intrinsically multiscale problem with a wide range of time and length scales coupled to each other due the particle-medium interactions. In this talk, we first give a short overview of general coarse-graining strategies for physical problems with multiscale characteristics and then describe a hybrid method for simulation of dissipative dynamics of small particles (e.g., inclusions such as proteins) on elastic membranes having their own dissipative Langevin dynamics in a surrounding hydrodynamic medium. In the particular case of curved inclusions that impart a local curvature on the membrane surface, we show that a substantial reduction in diffusion coefficient relative to flat inclusions occurs which can be explained analytically by hydrodynamic considerations. This result disproves some previous theoretical models predicting that, on fluctuating membranes, curved inclusions should be expected to diffuse more rapidly than flat ones. We also argue that the diffusion coefficient of membrane inclusions should depend inversely on their size, which stands at odds with the classical Saffman-Delbruck result but agrees with recent experimental findings.

Simulation of Wet Gtanular Materials

Habib Ebrahimnazhad
Azarbaijan Shahid Madani University

Abstract:

Technological shocks due to emergence of digital computers have dramatically influenced the 20th century. Physics, as one of the major disciplines in the mainstream science, is benefited from this revolution. Although most of the physics graduates in western countries are mastered in scientific computation, our students in Iran lack such a skill. In this essay, basic requirements for developing a state-of-the-art molecular dynamics simulation are presented. Because of its importance, we argue that developing a molecular dynamics simulation is essential for those who want to work professionally in computational science. We explain that many ideas that were developed for molecular dynamics simulations, were later used for many other types of computations. At the end, we inform students that it is also inappropriate to become addicted for computers for any physical reasoning, while there are a huge variety of heuristic arguments that can help us to understand the underlying physics.

بررسی ابتدا به ساکن ناهمسانگردی مغناطیسی $Y_2Fe_{14}B$

زهرا ، تربتیان[۱]؛ گودا ، یوشی هیرا[۲]، هاشمی فر ، سیدجواد[۱]؛ اکبرزاده ، هادی[۱]

[۱]دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان

[۲]دانشکده فیزیک، دانشگاه توکیو، توکیو، ژاپن

چکیده

از آنجاییکه Y به عنوان یک عنصر بدون الکترون f در میان عناصر خاکی کمیاب است، ترکیب $Y_2Fe_{14}B$ ، برای بررسی اثرات الکترون‌های نسبتاً سرگردان d در مواد مغناطیسی دایمی مناسب می‌باشد. الکترون‌های d در مقایسه با الکترون‌های f دارای جایگزیدگی کمتری هستند، بنابراین انتظار می‌رود که نسبت به تغییر ثابت‌های شبکه حساسیت بیشتری داشته باشند. در این کار به بررسی انرژی ناهمسانگردی مغناطیسی و گشتاور مغناطیسی $Y_2Fe_{14}B$ در ثابت‌های شبکه مختلف، با استفاده از محاسبات کوانتومی نظریه تابعی چگالی می‌پردازیم. نتایج نشان می‌دهند که با فشردگی ثابت‌های شبکه، انرژی ناهمسانگردی مغناطیسی به طور قابل ملاحظه‌ای افزایش می‌یابد. برهم کنش بین اربیتالهای dx^2-y^2 و dxy اتم آهن مهمترین عامل برای افزایش ناهمسانگردی مغناطیسی شناسایی شده است.

First-principles study of magnetic anisotropy in $Y_2Fe_{14}B$

Zahra, Torbatian[1]; Gohda, Yoshihiro[2]; Hashemifar, S.javad[1]; Akbarzade, Hadi[1]

[1] Department of Physics, Isfahan University of Technology, Isfahan
[2]Department of Physics, The University of Tokyo, Japan

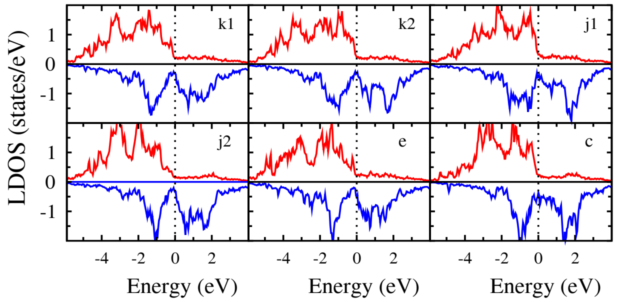
Abstract

Since yttrium is a prototypical f^0 element, $Y_2Fe_{14}B$ is a proper compound to study the effects of nearly itinerant d electrons in permanent magnetic material. Compared with the localized f electrons, the d electrons are less localized and hence expected to be more sensitive to the lattice strain. In this work, we investigate the magnetic anisotropy energy (MAE) and the magnetic moment of $Y_2Fe_{14}B$ at different lattice parameters, by using density functional theory. The results show that the MAE is significantly enhanced upon compression of the lattice. Couplings between occupied $3dx^2$-y^2 and unoccupied 3dxy states of Fe is identified to have the most significant influence in enhancing the magnetic anisotropy.

PACS No. *(۷۵)*

مقدمه

در سالهای اخیر مطالعات زیادی روی موادی که شامل عناصر خاکی کمیاب، آهن و بور ($R_2Fe_{14}B$) می‌باشند، صورت گرفته است. مهمترین ویژگی‌های این مواد ناهمسانگردی مغناطیسی قوی آنها می‌باشد، به ویژه در مواردی که اتم R دارای گشتاور مغناطیسی مداری قابل توجهی باشد. این دسته جدید از مواد مغناطیسی دائمی داری انرژی تشکیل بالا در بازه MJ/m^3 ۰/۱۱– ۰/۱۰ هستند [۱] و انرژی تشکیل MJ/m^3 ۰/۵۲ نیز در مورد $Nd_2Fe_{14}B$ گزارش شده است[۲]. این مواد دارای دمای کوری نسبتاً بالا (C ۳۰۰) می‌باشند و نظم مغناطیسی آنها غالباً ناشی از برهم کنش تبادلی بین اتمهای آهن می‌باشد. وابستگی دمایی مغناطش و ناهمسانگردی مغناطیسی برای این دسته از مواد اندازه-گیری شده است. نتایج تجربی نشان می‌دهد که ناهمسانگردی مغناطیسی $Y_2Fe_{14}B$ با افزایش دما افزایش می‌یابد و در دمای حدود $T/T_C \approx$ ۰.۴ به حداکثر مقدار خود می‌رسد و بعد از آن کاهش می‌یابد[۳]. برخلاف ناهمسانگردی مغناطیسی، مغناطش با افزایش دما کاهش می‌یابد. این مجموعه از ویژگی‌ها باعث توجه زیاد به این مواد در تکنولوژی قطعات الکترونیکی شده است.



منفی آن محور آسان در راستای محور a را نشان می‌دهد.

در این کار از بسته محاسباتی OpenMX استفاده کرده‌ایم. در این بسته محاسباتی مبتنی بر نظریه تابعی چگالی، توابع پایه بسط، اربیتال‌های شبه اتمی هستند. همچنین برای محاسبات ساختار الکترونی، تابعی تبادلی-همبستگی PBE در تقریب GGA به کار گرفته شده است. ما تعداد ۱۱ الکترون ظرفیت برای اتم ییتریم و ۱۶ و۳ الکترون ظرفیت به ترتیب برای اتم‌های آهن و بور در نظر گرفتیم. همچنین اربیتال‌های s، p و d به عنوان توابع بسط برای اتم‌های آهن و ییتریم و اربیتال‌های s، p برای اتم‌های بور استفاده شده است.

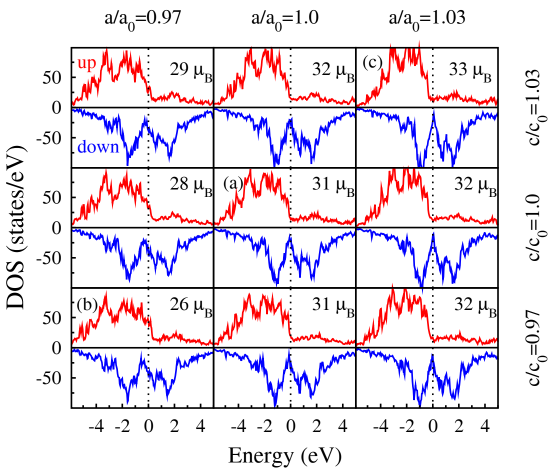
$Y_2Fe_{14}B$ دارای یاخته واحد تتراگونال (شکل ۱) با تقارن بلوری $P4_2/mnm$ و شامل ۶۸ اتم می‌باشد. در یاخته واحد، اتمهای آهن در شش جایگاه وایکوف[۴] (k1, k2, j1, j2, e و c)،

ما در ابتدا به محاسبه خواص ساختاری و مغناطیسی $Y_2Fe_{14}B$ با پارامترهای شبکه a=۸.۷۶ Å و c=۱۲.۰۰ Å [۵] می‌پردازیم. در جدول ۱ مقادیر مغناطش و انرژی ناهمسانگردی مغناطیسی با مقادیر تجربی آنها مقایسه شده است. مقدار مغناطش محاسبه شده ۳۱.۳ $\mu_B/f.u$ می‌باشد که در توافق خوبی با مقدار تجربی آن ($۳۱.۴ \mu_B/f.u$) دارد[۵] .

مقدار محاسبه شده برای انرژی ناهمسانگردی مغناطیسی، وجود محور مغناطیسی آسان در راستای محور c را نشان می‌دهد که سازگاری خوبی با نتایج تجربی گزارش شده برای محور مغناطیسی آسان $Y_2Fe_{14}B$ دارد[۶].

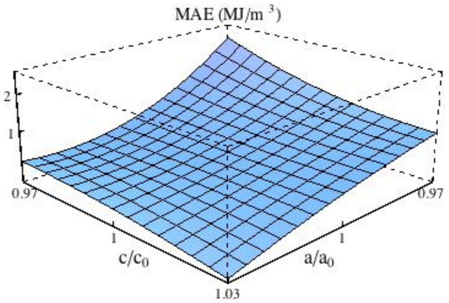
شکل ۲ چگالی حالت‌ها و جدول۲ گشتاور مغناطیسی اسپینی برای جایگاه‌های مختلف اتمهای آهن در شبکه واحد $Y_2Fe_{14}B$ را نشان می‌دهند. اتمهای آهن با تقارن بلوری j2 دارای بیشترین

جدول۲ : گشتاور مغناطیسی **اتم آهن در** جایگاههای مختلف بلور $Y_2Fe_{14}B$ با ثابت‌های شبکه تعادلی (equil) و برای حالتی که ثابت‌های شبکه به میزان ۳ درصد فشرده (compressed) و به میزان ۳ درصد کشیده (expanded) می‌شوند. مقادیر تجربی مربوط به گشتاور مغناطیسی برای $Y_2Fe_{14}B$ با ثابت‌های شبکه تعادلی می‌باشد.



گشتاور مغناطیسی و اتمهای آهن در جایگاه بلوری e دارای کمترین گشتاور مغناطیسی اسپینی هستند. این نتایج در سازگاری خوبی با سایر کارهای تئوری و تجربی می‌باشد.

برای بررسی وابستگی خواص الکترونی و مغناطیسی نسبت به ثابت‌های شبکه، ۹ حالت را در نظر گرفتیم که در آن ثابت‌های

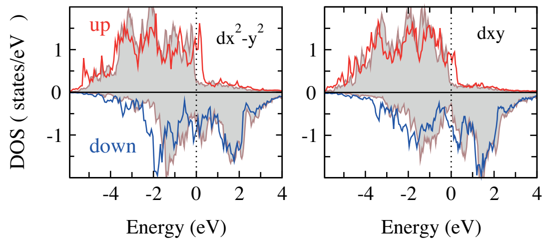


شکل ۴ : انرژی ناهمسانگردی مغناطیسی $Y_2Fe_{14}B$ نسبت به ثابت‌های شبکه a و c.

شبکه a و c به میزان ۳ درصد فشردگی تا ۳ درصد کشیدگی تغییر می‌کنند.

شکل ۳ چگالی حالت‌ها نسبت به تغییرات ثابت‌های شبکه a و c را نشان می‌دهد. همچنین مغناطش کل محاسبه شده در هر حالت، درون شکل‌ها بیان شده است. با فشردگی ثابت‌های شبکه، پهن‌شدگی چگالی حالت‌ها افزایش می‌یابد و یک جابه‌جایی به سمت راست در کانال اسپینی بالا و یک جابه‌جایی به سمت چپ در کانال اسپین پایین رخ می‌دهد. در نتیجه این تغییرات، مقداری از چگالی‌حالت‌ها در کانال اسپینی بالا، بالاتر سطح فرمی قرار می‌گیرند و تعداد الکترون‌ها در کانال اسپینی بالا کاهش می‌یابد. از طرف دیگر تعداد الکترون‌ها در کانال اسپینی پایین در سطح فرمی افزایش می یابد و در نتیجه، مغناطش نسبت به ساختار تعادلی کاهش می‌یابد. در حالتی که ثابت‌های شبکه تحت کشش قرار می‌گیرند، هر چند چگالی حالت‌ها جایگزیده‌تر می‌شوند، در سطح فرمی و در کانال اسپینی بالا تغییر نمی‌کنند و فقط تغییر کوچکی در چگالی حالت‌ها در کانال اسپینی پایین به وجود می‌آید. بنابراین کشیدگی ثابت‌های شبکه، افزایش نسبتاً کوچکی را در مغناطش به وجود می‌آورد. در جدول ۲ مغناطش آهن با جایگاه‌های مختلف برای ساختارهایی با فشردگی و کشیدگی ۳ درصد ثابت‌های شبکه آورده شده است. بیشترین افزایش مغناطش برای ساختار فشرده شده و بیشترین کاهش مغناطش برای ساختار منبسط شده و در جایگاه اتمی j1 می‌باشد.

شکل۳ رفتار انرژی ناهمسانگردی مغناطیسی را نسبت به تغییرات ثابت‌های شبکه نشان می‌دهد. انرژی ناهمسانگردی مغناطیسی با فشردگی ثابت‌های شبکه به طور قابل ملاحظه‌ای افزایش می‌یابد،



شکل۵ : چگالی حالت‌های جزیی برای اربیتال‌های $dx^2\text{-}y^2$ و dxy برای $Y_2Fe_{14}B$ که ثابت‌های شبکه ۳ درصد فشرده شده‌اند. زمینه سایه دار مربوط به ساختار تعادلی می‌باشد.

در حالی که با کشیدگی ثابت‌های شبکه این تغییرات بسیار کوچکتر می‌باشد. با فشردگی ثابت‌های شبکه a و c به میزان ۳ درصد، انرژی ناهمسانگردی مغناطیسی به مقدار ۲/۱۶ MJ/m^3 می رسد که در حدود پنج برابر مقدار ۰/۴۵ MJ/m^3، که برای ثابت-های شبکه تعادلی محاسبه شده، می‌باشد.

برای به دست آوردن دیدگاه بهتر بر روی انرژی ناهمسانگردی مغناطیسی، نظریه اختلال مرتبه دوم را در نظر می‌گیریم. انرژی ناهمسانگردی مغناطیسی می‌تواند به صورت اختلاف تصحیح مرتبه دوم انرژی، برای دو جهت مغناطش در نظر گرفته شود.

تصحیح مرتبه دوم برای انرژی حالت پایه به صورت زیر معین می‌شود:

$$E_{SO} \approx -\sum_{i}^{o}\sum_{j}^{u}\frac{\left|\langle i|H_{SO}|j\rangle\right|^2}{\varepsilon_i-\varepsilon_j} \qquad (۳)$$

که در آن i ویژه حالت‌های کوهن–شم اشغال شده و j ویژه حالت‌های اشغال نشده می‌باشد. جفت شدگی اسپین–مدار توسط رابطه $H_{SO}=\xi\,\vec{l}.\vec{s}$ بیان می‌شود که ξ ثابت این جفت شدگی است.

رابطه ۳ را می‌توان به صورت زیر در نظر گرفت:

$$E_{SO} \approx -\sum_{i}^{o}\sum_{j}^{u}\frac{\left|\sum_{\mu\nu}\langle i|\mu\rangle\langle\mu|H_{so}|\nu\rangle\langle\nu|j\rangle\right|^2}{\varepsilon_i-\varepsilon_j} \qquad (۴)$$

که در آن μ و ν اربیتال‌های اتمی هستند. در این حالت ویژه حالت‌های کوهن–شم بر روی اربیتال‌های اتمی تصویر می‌شوند و عناصر ماتریس هامیلتونی اسپین–مدار H_{so} بین اربیتال‌های اتمی محاسبه می‌شود.

از آنجایی که چگالی حالت‌های جزئی متناسب با ریشه دوم ضریب $\langle i|\mu\rangle$ می‌باشد، چگالی حالت‌های جزئی برای ساختار فشرده شده را در نظر می‌گیریم. همانطور که قبلاً بیان شد، با فشردگی ثابت‌های شبکه، مقداری از چگالی حالت‌های در کانال اسپینی بالا، به بالاتر از سطح فرمی می‌روند و چگالی حالت‌ها در کانال اسپین پایین به سطح فرمی نزدیک می‌شوند. بیشترین چگالی حالت‌ها در نزدیکی سطح فرمی مربوط به اربیتال‌های $dx^2\text{-}y^2$ و dxy (شکل ۵) می‌باشد. با توجه به رابطه ۴ چگالی حالت‌ها در نزدیکی سطح فرمی باعث افزایش قابل ملاحظه‌ی انرژی ناهمسانگردی می‌شود. از طرف دیگر عناصر ماتریس اسپین–مدار $\langle\mu|H_{so}|\nu\rangle$ بین اربیتال‌های $dx^2\text{-}y^2$ و dxy با اسپین موازی بیشترین سهم را در انرژی ناهمسانگردی در راستای c دارا می‌باشد (جزئیات بیشتر در مقاله‌ی کیونو و همکارانش آورده شده است[۸]). بنابراین جفت شدگی بین اربیتال‌های $dx^2\text{-}y^2$ و dxy در نزدیکی سطح فرمی با اسپین موازی مهمترین عامل در افزایش ناهمسانگردی مغناطیسی در ساختار فشرده شده می‌باشد.

نتیجه گیری

با استفاده از محاسبات ابتدا به ساکن، به بررسی وابستگی انرژی ناهمسانگردی مغناطیسی $Y_2Fe_{14}B$ نسبت به ثابت‌های شبکه پرداختیم. با فشردگی ثابت‌های شبکه انرژی ناهمسانگردی مغناطیسی به طور قابل ملاحظه‌ای افزایش می‌یابد. برهم کنش بین حالتهای اشغال شده و اشغال نشده اربیتال‌های $dx^2\text{-}y^2$ و dxy درکانال اسپینی بالا و پایین مهمترین عامل برای افزایش انرژی ناهمسانگردی مغناطیسی شناسایی شده است.

مرجع‌ها

[۱] J. J. Croat, J. F. Herbst, R. W. Lee, and F. E. Pinkerton, Appl. Phys. Lett. **44**, (1984) 14.

[۲] N. C. Koon, B. N. Das, M. Rubinstein and J. Tyson, J. Appl. Phys. **57** (1985) 4091.

[۳] F. Bolzoni, J. Gavigan, D. Givord, H. Li, O. Moze, and L. Pareti, J. Magn. Magn. Mat. **66**, (1987) 158.

[۴] http://www.cryst.ehu.es/cgi-bin/cryst/programs/nph-wp-list

[۵] S. Hirosawa, Y. Matsuura, H. Yamamoto, S. Fujimura, and M. Sagawa, J. Appl. Phys. **59** (1985) 873.

[۶] M. Sagawa, S. Fujimura, H. Yamamoto, Y. Matsuura, and S. Hirosawa, J. Appl. Phys. **57** (1985) 4094.

[۷] S. S. Jaswal, Phys. Rev. B. **41** (1990) 9697 .

[۸] K. kyuno, J.-G. Ha, R. Yamamoto, and S. Asano, Jpn. J. Appl. Phys. **35**, 2774 (1996).

بررسی ساختار الکترونی، پراکندگی فونون و برهمکنش الکترون- فونون در ابررسانای MgB_2

مرشدلو ، تکتم[۱] ؛ رضایی رکن آبادی ، محمود[۱] ؛ مدرسی ، محسن[۱]

[۱]گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه فردوسی مشهد ، میدان آزادی ، مشهد

چکیده

در این مقاله ساختار نواری الکترونی حالت پایه، چگالی حالت کلی (DOS) و جزئی(PDOS) الکترونی، پراکندگی فونونی، برهمکنش الکترون- فونون و تابع الیشبرگ همسانگرد $\alpha^2F(\omega)$ در چارچوب نظریه‌ی تابعی چگالی (DFT) با استفاده از محاسبات اصول اولیه محاسبه و نمودارهای آنها رسم و آنالیز شده است. نتایج ساختار نواری و چگالی حالت‌های کلی و جزئی نشان می‌دهند که حفره‌های بالای نوار σ ناشی از اربیتال‌های P_x و P_y اتم بور به میزان زیاد و حفره‌های نوار π ناشی از اربیتال P_z این اتم به میزان جزئی، زوج حفره‌های حالت ابررسانایی را تشکیل می‌دهند. بر اساس طیف تابع الیشبرگ همسانگرد محاسبه شده، بخش بزرگی از جفت شدگی، بین حفره‌های بالای نوار σ مربوط به اتم‌های B با مدهای فونونی اپتیکی با تقارن E_{2g} در نقطه‌ی Γ (ناشی از نوسانات داخل صفحه‌ای پیوندهای B-B) رخ می‌دهد. ثابت جفت شدگی الکترون- فونون (λ) محاسبه و ۰/۷۴ بدست آمد. با استفاده از فرمول مک میلان، دمای گذار K ۴۰ تخمین زده شد.

The investigation of the electronic structure, phonon dispersion and electron-phonon coupling in MgB_2 superconductor

Morshedloo, Toktam1; Rezaei Roknabadi, Mahmood[1]; Modarresi, Mohsen[1]

[1] *Department of Physics, Ferdowsi University of Mashhad, Mashhad*

Abstract

In this paper, ground-state electronic band structure, total and partial density of states (DOS and PDOS), phonon dispersion, electron-phonon coupling and isotropic Eliashberg function $\alpha^2F(\omega)$ have been calculated within the framework of density functional theory (DFT) by using first-principles calculations and their curves drown and analyzed. The results of the electronic band structure, total and partial density of states show that holes at top of σ bands, resulting from the boron P_x and P_y orbitals, sizably and holes of π band, resulting from the P_z orbital of this atom, partially consist coupled holes in superconductivity state. Based on isotropic Eliashberg function, a large part of coupling takes place between holes on the top of the boron σ bands with a optical phonon mode with E_{2g} symmetry at the Γ point (from in-plain vibrations of the B-B bonds). The electron-phonon coupling constant was calculated and obtained 0.74. By using McMillan formula, superconducting transition temperature TC was estimated 40K.

PACS No.74

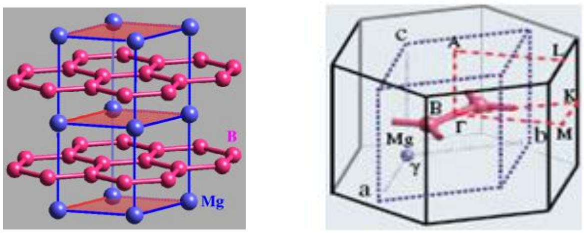
مقدمه

پس از کشف ابررسانایی در ترکیب MgB_2 با دمای گذار K ۳۹ $\approx T_C$ در سال ۲۰۰۱، تحقیقات گسترده‌ی تجربی و تئوری جهت فهم منشاء این T_C نسبتاً بالا انجام شده است[۱]. اندازه-گیری‌هایی از قبیل اثر ایزوتوپ اتم B روی دمای‌گذار، تونل‌زنی، ترابرد، خصوصیات ترمودینامیک و چگالی حالت‌های فونونی تأیید می‌کنند که به احتمال زیاد MgB_2 یک ابررسانای فونون- واسطه‌ی با تقارن نوع s وجفت‌شدگی متوسط و قوی است[۲]. محاسبه و بررسی ساختار نواری الکترونی، پراکندگی فونونی، جفت‌شدگی الکترون- فونون و حل معادلات الیشبرگ برای تعیین دمای گذار،

در فهم نقش بر همکنش الکترون- فونون در این ماده کمک می-کند[۳]. از این رو در کار حاضر به محاسبه‌ی این کمیت‌ها و تابع الیشبرگ همسانگرد در چارچوب نظریه‌ی تابعی چگالی با استفاده از نرم‌افزارQUANTUM-ESPRESSO پرداخته شده است. تابع الیشبرگ همسانگرد که از معادلات الیشبرگ با اعمال تقریب همسانگردی گاف ابررسانایی بدست می‌آید، قدرت برهمکنش جفت‌کننده‌ی فونون- واسطه را توصیف می‌کند[۴]. سپس با استفاده از نتایج بدست آمده، ثابت جفت‌شدگی الکترون- فونون کل محاسبه و در نهایت با به کارگیری فرمول تقریبی مک‌میلان (آلن- دنیس) دمای‌گذار $MgB_۲$ محاسبه می‌شود.

تئوری و جزئیات محاسبات

محاسبات اصول اولیه در چارچوب نظریه‌ی تابعی چگالی و با بکارگیری تقریب GGA برای تابعی همبستگی- تبادلی انجام شده است. ساختار هگزاگونال گرافیت مانند $MgB_۲$ از لایه‌های لانه زنبوری اتم B که اتم‌های Mg در بین این لایه‌ها قرار دارند تشکیل شده است. ثابت‌های شبکه بعد از بهینه‌سازی شبکه ۳/۰۸۳= aو c/a=۱/۱۴۶ بدست آمد که این مقادیر تطابق خوبی با نتایج تجربی a=۳/۰۸۳ و c/a=۱/۱۴۲ دارند[۲]. ساختار بلوری $MgB_۲$ ، یاخته بسیط شبکه‌ی هگزاگونال فضای حقیقی و شبکه‌ی وارون آن که هگزاگونال است در شکل ۱ نشان داده شده است.



شکل ۱ : ساختار بلوری $MgB_۲$ (در سمت چپ)، یاخته‌ی بسیط شبکه‌ی هگزاگونال فضای حقیقی (منشور با قاعده‌ی لوزی با خطوط نقطه چین در سمت راست) و شبکه وارون آن (هگزاگونال با خطوط سیاه در شکل سمت راست).

شبه پتانسیل‌های فوق‌العاده نرم که به روش واندربیلت (Vanderbilt) ساخته شده‌اند برای Mg و B بکاربرده شد. انرژی قطع امواج- تخت بعد از بهینه‌سازی نسبت به کمینه انرژی و نیروهای روی اتم‌ها ۴۵ Ry در نظر گرفته شد. در محاسبه ساختار نواری الکترونی حالت پایه، انتگرال‌گیری روی ناحیه‌ی اول بریلوئن با استفاده از روش منخورست- پک و بکارگیری شبکه نقاط-k ۲۴×۲۴×۲۴ و پهن‌شدگی ۰/۰۱ از نوع Gaussian انجام شد. چگالی حالت‌های کلی و جزئی الکترونی برای بررسی بهتر ساختار الکترونی محاسبه شد. محاسبه‌ی فرکانس‌های فونونی با استفاده از روش پاسخ – خطی بر روی شبکه بردارهای موج فونونی q ۶×۶×۶ صورت گرفت. تابع الیشبرگ همسانگرد که بر همکنش جفت‌کننده‌ی فونون – واسطه را توصیف می‌کند از رابطه-ی زیر محاسبه شد:

$$\alpha^2F(\omega)=\frac{1}{N(0)N_kN_q}\sum_{nk,mq,\nu}\left|g^{\nu}_{nk,mk+q}\right|^2 \times\delta(\varepsilon_{nk})\delta(\varepsilon_{mk+q})\delta(\omega-\omega^{\nu}_q) \qquad (۱)$$

که در آن N(0) چگالی حالت‌های الکترونی بر اتم و اسپین در انرژی فرمی و N_k و N_q به ترتیب کل تعداد نقاط k و q هستند. ویژه مقادیر الکترونی با اندیس نوار(n و m) و بردار موج‌های(k,k+q) مشخص می‌شوند در حالی که فرکانس‌های فونونی با اندیس مد ν و بردار موج q تعیین شده‌اند. $g^{\nu}_{nk,mk+q}$ عناصر ماتریس ضرایب برهمکنش الکترون – فونون را نمایش می‌دهند. ثابت جفت‌شدگی الکترون – فونون کل توسط رابطه‌ی زیر بدست می‌آید[۵]:

$$\lambda=2\int_0^{\infty}d\omega'\frac{\alpha^2F(\omega')}{\omega'} \qquad (۲)$$

در نهایت دمای‌گذار ابررسانایی $MgB_۲$ از طریق فرمول مک‌میلان (آلن – دنیس) تخمین‌زده شد:

$$T_C=\frac{\omega_{\log}}{1.2}\exp\left[\frac{-1.04(1+\lambda)}{\lambda(1-0.62\mu^*)-\mu^*}\right] \qquad (۳)$$

که

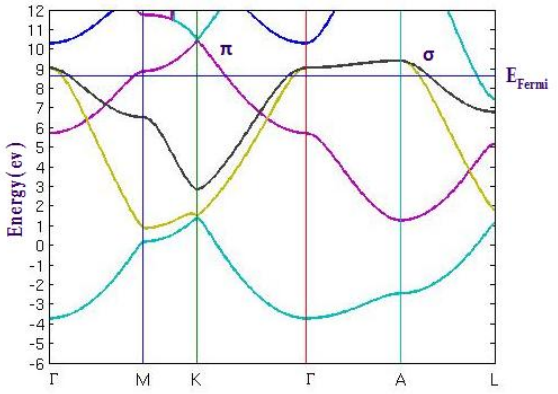
$$\omega_{\log}=\exp\left[\frac{2}{\lambda}\int_0^{\infty}\frac{d\omega}{\omega}\alpha^2F(\omega)\log(\omega)\right] \qquad (۴)$$

و μ^* ثابت برهمکنش الکترون – الکترون مؤثر است. μ^* به صورت یک پارامتر آزاد جهت تطابق T_C تئوری و تجربی در رابطه

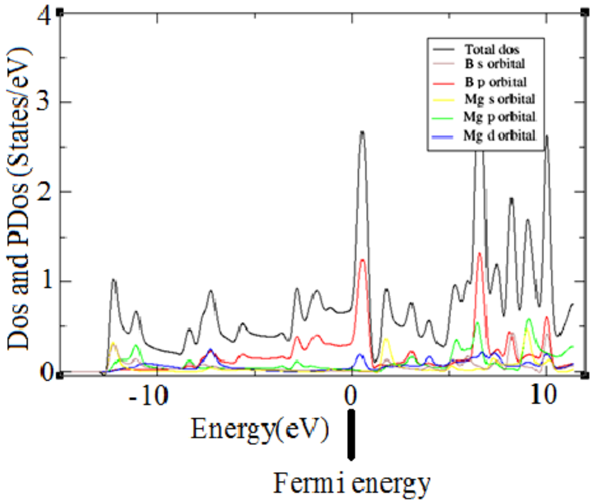
رفتار می‌کنند. همانطور که از رابطه T_C واضح است برای داشتن دمای‌گذار بالا نیاز به λ و ω_{log} بزرگ است[۴].

نتایج و بحث

ساختار نواری الکترونی حالت پایه MgB_2 درشکل ۲ نشان داده شده است که در توافق خوبی با نتایج دیگران است[۷،۶]. برای مشخص شدن اینکه کدام یک از نوارهای انرژی، تراز فرمی را قطع حالت‌های می‌کند، نمودار چگالی کلی (DOS) و جزئی (PDOS) محاسبه و در شکل ۳ نشان داده شد. انرژی فرمی در صفر تنظیم شده است. همان طور که دیده می‌شود چگالی حالت-های جزئی مربوط به اربیتال‌های P_x و P_y ($N(0)_\sigma/N(0)$ = ۰/۶۰) و P_z (۰/۲۹ = $N(0)_\pi/N(0)$) اتم B در انرژی فرمی سهم غالب را در چگالی حالت‌های کل دارند. این دلالت دارد بر اینکه سطح فرمی توسط نوارهای σ و π قطع شده است. چگالی حالت‌های جزئی مربوط به اربیتال‌های اتم Mg در انرژی فرمی سهم کمی در چگالی حالت‌های کل دارند که به علت آن یونیزه شدن Mg به Mg^{2+} و جاگزیدگی الکترون‌های باقیمانده در مکان این اتمها است. این نشان می‌دهد که اتمهای B در ایجاد ابررسانایی نقش اساسی را بازی می‌کنند. با توجه به نتایج اثر هال که حامل‌های ابررسانایی را زوج حفره‌ها تعیین کرده است [۸] حفره‌های بالای نوار σ (به میزان زیاد) و نوار π (به میزان جزئی) مربوط به اتم B، زوج حفره‌های حالت ابررسانایی را ایجاد می‌کنند.

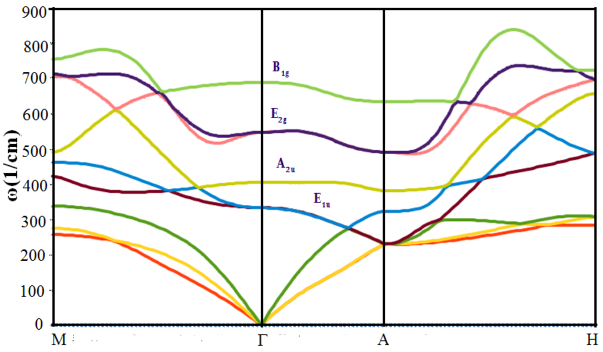


شکل ۲ : ساختار نواری الکترونی حالت پایه‌ی MgB_2



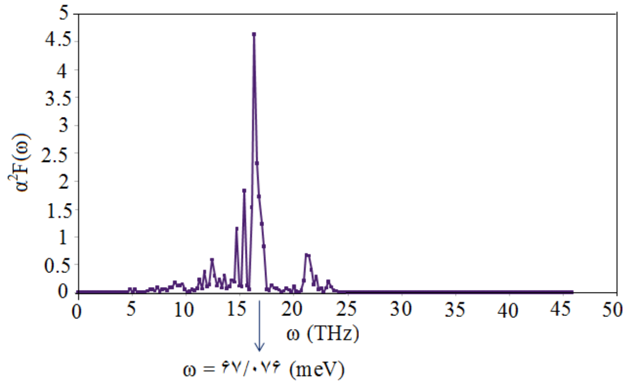
شکل۳ : چگالی حالت‌های کلی وجزئی الکترونی MgB_2

در شکل ۴ طیف پراکندگی فونونی محاسبه شده را نشان می‌دهد که در آن نام شاخه‌های اپتیکی مشخص شده است. در نقطه‌ی Γ چهار مد اپتیکی وجود دارد. به علت جرم سبک اتم B و پیوند کووالانسی قوی بین آنها، دو مد فرکانس– بالا، مربوط به نوسانات اتم‌های B می‌باشند. یکی مربوط به نوسانات کششی داخل صفحه-ای پیوندی B-B (E_{2g}) و دیگری مربوط به نوسانات خارج صفحه‌ای اتم‌های B (B_{1g}) است. دو مد اپتیکی با فرکانس پایین‌تر مربوط به نوسانات داخل – صفحه‌ای اتم‌های Mg (E_{1u}) و حرکت خارج از صفحه‌ی این اتم‌های (A_{2u}) می‌باشد[۴]. طیف پراکندگی فونونی پس از محاسبه در شکل ۴ نشان داده و نام شاخه‌های اپتیکی مشخص شده است. در نقطه‌ی Γ چهار مد اپتیکی وجود دارد.



شکل۴ : طیف پراکندگی فونونی MgB_2

برای بررسی خصوصیات ابررسانایی و عامل جفت‌کنندگی حفره‌ها یعنی بر همکنش الکترون – فونون، طیف تابع الیشبرگ همسانگرد محاسبه و نتیجه در شکل ۵ نشان داده شد. همانطور که در نمودار دیده می‌شود، پیک غالب در فرکانس ω =۶۷ meV قرار دارد که در محدوده‌ی مد اپتیکی E_{2g} است. از آنجا که این تابع مشخص کننده‌ی قدرت برهمکنش الکترون – فونون است، بنابراین این نشان می‌دهد که مد اپتیکی E_{2g} مسئول جفت‌شدگی قوی حفره‌ها در بالای نوار σ می‌باشد. ثابت جفت‌شدگی الکترون – فونون کل نیز محاسبه و ۰/۷۳ بدست آمد که در تطابق با نتیجه‌ی بدست آمده توسط ک. پ. بُهِنِن و همکارانش است[۳]. دمای-گذار با قراردادن μ^*=۰/۰۵, ۴۰K تخمین زده شد که مشابه کار ک. پ. بُهِنِن می‌باشد[۳]. مقدار μ^* در اکثر مقالات پس از محاسبه در حدود ۰/۱ در نظر گرفته شده است. این تفاوت در مقدار پارامتر μ^* به علت به کارگیری تقریب همسانگردی گاف ابررسانایی واستفاده از تابع الیشبرگ همسانگرد می‌باشد. به طوری که دیگران با حل معادلات الیشبرگ به صورت ناهمسانگرد در مدل دو نواری با μ^*=۰/۱ به نتایجی که با تجربه تطابق بیشتری دارند دست یافتند[۳].



شکل ۵ : طیف تابع الیشبرگ همسانگرد MgB_2

نتیجه‌گیری

با استفاده از محاسبات اصول اولیه در چارچوب نظریه‌ی تابعی چگالی، ساختار نواری الکترونی حالت پایه، چگالی حالت‌های کلی و جزئی الکترونی، طیف پراکندگی فونونی و ضرایب برهمکنش الکترون – فونون محاسبه شد. با استفاده از نمودار ساختار نواری و چگالی حالت‌های کلی و جزئی الکترونی مشخص شد که حفره‌های بالای نوار σ به میزان زیاد و نوار π به میزان کم، زوج حفره‌های حالت ابررسانا را تشکیل می‌دهند. سپس با محاسبه‌ی تابع الیشبرگ همسانگرد که مشخص کننده‌ی قدرت برهمکنش الکترون – فونون در فرکانس‌های فونونی مختلف است مشخص شد که فونون‌های E_{2g} ناشی از نوسانات کششی داخل صفحه‌ای اتم‌های B باعث جفت‌شدگی حفره‌های بالای نوار σ مربوط به اتم‌های B و بروز ابررسانایی درMgB_2 شده‌اند.

سپاسگزاری

از همکاری خانم راضیه کارگر و کمک‌های علمی خانم شهین براتی و پشتیبانی معنوی خانم‌ها بتول ریوندی، زهرا مرشدلو و نرگس قشونی صمیمانه تشکر می‌کنیم.

مرجع‌ها

[۱] O. De la Pena-Seaman, R. de Coss, R. Heid and K. –P. Bohnen; “Electron-phonon Coupling and Two-band Superconductivity of Al- and C-doped MgB_2 ”; *Phys. Rev. B* **82** (2010) 224508.
[۲] Y. Kong, O. V. Dolgov, O. Jepsen and O. K. Andersen; “Electron-Phonon Interaction in the Normal and Superconducting State of MgB_2”; *Phys. Rev. B* **63** (2001) 020501.
[۳] K. –P. Bohnen, R. Heid and B. Renker; “Phonon Dispersion and Electron-Phonon Coupling in MgB_2 and AlB_2”; *Phys. Rev. Lett* **86**, No. 25 (2001) 5771-5774.
[۴] R. Heid, K. –P. Bohen and B. Renker; “Electron-phonon Coupling and Superconductivity in MgB_2 and Related Diborides”; *Adv. in Solid State Phys* **42** (2002) 293-305.
[۵] G. Profeta, M. Calandra and F. Mauri; “Phonon-Mediated Superconductivity in Graphene by Lithium Deposition”; *Nature Physics* **8** (2012) 131-134.
[۶] O. De la Pena-Seaman, R. De Coss, R. Heid and K. –P. Bohnen; “Supercooled and Glassy Water”; *Phys. Rev. B* **79** (2009) 134523.
[۷] J. Kortus, I. I. Mazin, K. D. Belashchenko, V. P. Antropov and L. L. Boyer; “Superconductivity of Metallic Boron in MgB_2”; *Phys. Rev. Lett* **86**, No. 20 (2001) 4656.
[۸] T. S. Kayed; “Magnetoresistance, Voltage-current Characteristics and Hall Effect Measurements of Bulk MgB_2 Superconductors”; Cryst. Res. Technol. **39**, No. 1 (2004) 50-55.
[۹] I. I. Mazin, O. K. Andersen, O. Jepsen, A. A. Golubov, O. V. Dolgov and J. Kortus; “Comment on 'First-Principles Calculation of the Superconducting Transition in MgB2 within the Anisotropic Eliashberg Formalism”; *Phys. Rev. B* **69** (2004) 056501.

برهم‌کنش کلوئیدهای نماتیک در نزدیکی یک دیواره‌ی منحنی

اسکندری، زهرا[۱]؛ سیلوستره، نونو[۲]؛ تلوداگاما، مارگاریدا[۲]؛ اجتهادی، محمدرضا[۱]

[۱]دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی شریف، خیابان آزادی ، تهران

[۲]مرکز فیزیک نظری و محاسباتی دانشگاه لیسبون، خیابان گاماپیتو، لیسبون، پرتغال

چکیده

هنگامی که ذرات کروی کوچک با ابعاد میکرون در یک بلور مایع نماتیک قرار می‌گیرند، با توجه به برهم کنشی که سطح آن‌ها با مولکول‌های بلور مایع دارد، نظم جهتی بلندبرد نماتیک در ناحیه‌ی اطراف‌شان مختل می‌شود. برهم‌کنش این ذرات با یکدیگر و همچنین با دیواره‌های ظرف، ناشی از همین اختلال در نظم نماتیک است که منجر به ایجاد نیروهای کشسانی در کلوئیدهای نماتیک می‌شود و آن‌ها را از کلوئیدهای پخش‌شده در سیال همسانگرد متفاوت می‌سازد. هنگامی که این ذرات در نزدیک دیواره‌ی تخت با قلاب‌شدگی سطحی قوی قرار می‌گیرند، یک دافعه‌ی کوتاه‌برد از طرف دیواره احساس می‌کنند که در مطالعات قبلی آزمایشگاهی و شبیه‌سازی مشاهده شده است. این دافعه از دیواره باعث می‌شود که ذرات به دیواره نچسبند و در وسط ظرف معلق شوند. اما هنگامی که یک انحنا در حدود ابعاد ذره در دیواره وجود داشته باشد این اثر به کلی دستخوش تغییر می‌شود و حتی می‌توان با انتخاب مناسب هندسه‌ی دیوار و همچنین شرایط مرزی روی ذره‌ی کلوئیدی و روی دیواره، این دافعه را به جاذبه تبدیل کرد. به این ترتیب، اگر قلاب‌شدگی سطحی روی ذره و دیواره یکسان باشد، آن‌گاه یک فرورفتگی در دیواره می‌تواند باعث به دام افتادن ذره توسط دیواره شود، در حالی که اگر قلاب‌شدگی ذره و دیواره متفاوت باشد ذره از فرورفتگی‌ها دفع می‌شود و به سمت برآمدگی‌ها جذب می‌شود.

Nematic Colloids Close to a Curved Surface

Z. Eskandari[1]; Nuno Silvestre[2]; Margarida Telo da Gama[2]; M. R. Ejtehadi[1]

[1] Department of Physics, Sharif University of Technology, Tehran
[2] Centro de Fisica Teorica e Computacional, Universidade de Lisboa, Lisbon, Portugal

Abstract

Small spherical particle with homeotropic or planar surface anchoring in the nematic liquid crystal disturb the long-range nematic order to a distance of about the radius of the particle. When such particle is close to a flat surface with strong anchoring, it feels a short-range repulsion from the wall which is observed in the experiments as well as the simulations and prevents particles from touching the wall and stabilizes them in the center of the cell. This behavior is dramatically changed by having a particle-sized deformation in the wall. In fact, the presence of a curvature in the wall can either enhance the repulsion from the wall or turn it to a strong attraction, depending on the size and the direction of the curvature as well as the boundary conditions of the particle and the wall. For similar boundary conditions at the surfaces of both particle and wall, a cavity in the wall can trap the particle, while for different boundary conditions, the particle can be pinned to the hill, repelling away from the cavity.

PACS No. 89

مقدمه

مخلوط ذرات کلوئیدی پخش‌شده در بلور مایع نماتیک در دو دهه‌ی اخیر، به خصوص پس از مشاهده‌ی ساختارهای زنجیره‌مانند خودسامان‌ده در این مخلوط‌ها در سال ۱۹۹۷ میلادی [۱] بسیار مورد توجه و علاقه قرار گرفته‌اند. در این مدت، کلوئیدهای نماتیکِ بسیار متنوعی از نظر شکل، اندازه و همچنین شرایط مرزی مطالعه شده‌اند. برهم‌کنش بین این ذرات، به علت خواص کشسانی بلور مایع نماتیک معمولاً بلندبرد و غیرهمسانگرد است و این برهم‌کنش چه از نظر تجربی و چه به روش‌های محاسباتی و از

طریق شبیه‌سازی، به طور گسترده‌ای مورد بررسی قرار گرفته است [۵-۲]. اما از آن‌جایی‌که این مخلوط‌ها در آزمایشگاه اغلب در ظرف‌های نازک تهیه می‌شوند، اثر دیواره‌ها قابل چشم‌پوشی نیست و تأثیر وجود دیواره روی برهم‌کنش بین ذرات در آزمایش نیز مورد تأیید قرار گرفته است [٦]. اگرچه این ذرات همیشه از دیواره‌ی تخت دفع می‌شوند اما با ایجاد انحنا در دیواره می‌توان این برهم‌کنش را تغییر داد و کنترل کرد. ما در این مقاله نشان می‌دهیم که چگونه یک انحنای فرورفته یا برآمده با قلاب‌شدگی‌های سطحی مختلف باعث تقویت دافعه‌ی ذره از دیواره و یا تبدیل دافعه به جاذبه می‌شود.

نظریه و روش

انرژی آزاد یک بلور مایع نماتیک را می‌توان با استفاده از نظریه‌ی لاندائو-دوژن بر حسب یک تانسور نظم نوشت [۷]. در این روش که یک رهیافت پدیده‌شناختی است، انرژی آزاد یک سیستم به صورت بسطی از تانسور نظم $\boldsymbol{Q}$ نوشته می‌شود. تانسور نظم یک ماتریس ۳×۳ با رد صفر است که به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$Q_{ij} = \frac{S}{2}\left(3n_i n_j - \delta_{ij}\right) + \frac{B}{2}\left(l_i l_j - m_i m_j\right)$$

که S و B به ترتیب پارامتر نظم اسکالر تک‌محوری و دومحوری هستند و $\hat{n}$ و $\hat{l}$ و $\hat{m}$ سه بردار یکه‌ی متعامد، متصل به ذره‌ی iام هستند که جهت‌گیری آن را نشان می‌دهند. چگالی انرژی آزاد بلور مایع نماتیک بر حسب این تانسور نظم به صورت زیر است:

$$f_{bulk} = a\mathrm{Tr}\boldsymbol{Q}^2 - b\mathrm{Tr}\boldsymbol{Q}^3 + c\left(\mathrm{Tr}\boldsymbol{Q}^2\right)^2$$

که ضرایب a و b و c کمیت‌هایی وابسته به ماده‌اند و فقط a به طور خطی به صورت $a_0(T - T^*)$ وابسته به دماست که T^* دمای فاز همسانگرد ابرسرد است. ما در این‌جا مقادیر a_0 و b و c را معادل با پارامترهای ماده‌ی 5CB در دمای 307.24K در نظر گرفته‌ایم که در این دما 5CB در فاز نماتیک است.

انرژی کشسانی فاز نماتیک که ناشی از تغییر شکل‌های کشسانی در میدان دایرکتور است، بر حسب تانسور نظم را نیز می‌توان به شکل زیر نوشت [۸]:

$$f_{elastic} = \frac{L}{2}\partial_k Q_{ij}\partial_k Q_{ij}$$

که در آن L ضریب کشسانی است و به صورت $K_{1,2,3} = \frac{9}{2}S^2 L$ به ضرایب کشسانی فرنک مربوط می‌شود. ما در این‌جا از تقریب «تک‌ثابتی» استفاده کرده‌ایم، یعنی ضرایب کشسانی فرنک را مساوی هم در نظر گرفته‌ایم. مقدار ضریب L در محاسبات ما برابر با 6×10^{-12} J/m در نظر گرفته شده است.

علاوه بر آن‌چه تا کنون اشاره شد، جمله‌ی دیگری نیز در انرژی سیستم سهم دارد که ناشی از برهم‌کنش سطوح موجود در سیستم با ذرات بلور مایع است. به طور کلی، مولکول‌های بلور مایع به دو صورت با سطح برهم‌کنش می‌کنند، یا ترجیح می‌دهند که بر سطح عمود شوند و یا ترجیح می‌دهند که به صورت موازی با سطح قرار بگیرند. در آزمایشگاه، چنین شرایطی از طریق پوشاندن سطوح با موادی غالباً پلیمری، حاصل می‌شود به طوری که بعضی از پلیمرها قلاب‌شدگی عمودی و برخی دیگر قلاب‌شدگی مماسی روی سطح ایجاد می‌کنند. هنگامی که یک ذره‌ی کروی با قلاب‌شدگی سطحی عمودی در محیط نماتیک قرار می‌گیرد، بسته به اندازه‌ی ابعاد ذره و قدرت قلاب‌شدگی، تشکیل دو ساختار متفاوت «نقص جوجه‌تیغی هذلولی» و یا «حلقه‌ی زحلی» حول آن امکان‌پذیر است و برای ذره‌ای که قلاب‌شدگی مماسی دارد، دو تا نقص نقطه‌ای روی سطح ذره و در دو سمت آن تشکیل می‌شود که به آن‌ها «بوجوم» گفته می‌شود [۹]. انرژی سطحی در حالتی که ذره قلاب‌شدگی عمودی دارد را می‌توان به صورت یک تابع سهمی رو به بالا با کمینه‌ای در محل $\boldsymbol{Q}_0$ مدل کرد که $\boldsymbol{Q}_0$ تانسور نظم متناظر با جهت‌گیری عمودی روی سطح است [۱۰]. اما برای قلاب‌شدگی مماس بر سطح، فورنیر و همکارانش در سال ۲۰۰۴ مدل زیر را پیشنهاد کردند [۱۱]:

$$f_{surface} = W_1 \mathrm{Tr}\left(\widetilde{\boldsymbol{Q}} - \widetilde{\boldsymbol{Q}}^{\perp}\right)^2 + W_2\left(\mathrm{Tr}\widetilde{\boldsymbol{Q}}^2 - {S_0}^2\right)^2$$

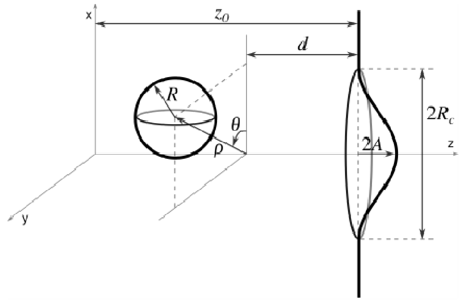
که در آن S_0 پارامتر نظم مرجع روی سطح است و $\widetilde{\boldsymbol{Q}} = S_0 n_i n_j$ و $\widetilde{\boldsymbol{Q}}^{\perp} = P\widetilde{\boldsymbol{Q}}P$ که $P = \delta_{ij} n_i n_j$ ماتریس تصویر است و W_1 و W_2 نیز قدرت قلاب‌شدگی را کنترل می‌کنند و در شبیه‌سازی ما مقداری مساوی با 2.1×10^{-3} J/m² برای آن‌ها در نظر گرفته شده است که متناظر با قلاب‌شدگی قوی است.

انرژی سیستم به این ترتیب عبارت است از مجموع انتگرال روی حجم از چگالی انرژی لاندائو-دوژن و چگالی انرژی کشسانی و انتگرال روی سطح از چگالی انرژی سطحی.

$$F = \int_{\Omega} (f_{bulk} + f_{elastic}) dV + \int_{\partial\Omega} f_{surface} dS$$

اکنون این انرژی آزاد را با استفاده از روش «المان محدود با خانه‌بندی منطبق‌شونده» کمینه می‌کنیم تا آرایش میدان دایرکتور را برای هندسه‌های دلخواه به دست بیاوریم. در این روش، در طی چند مرحله، خانه‌بندی سیستم را بازتعریف می‌کنیم و در هر مرحله، تنها در نقاطی از سیستم که تغییر تانسور نظم شدیدتر است، تعداد خانه‌ها را بیش‌تر کرده تا به تصویر دقیق‌تری دست یابیم، بدون آن که محاسبات را برای نقاط دیگر سیستم که تغییر چندانی در آن‌ها رخ نمی‌دهد دقیق کنیم و به این ترتیب برای رسیدن به دقت مورد نظر هزینه‌ی محاسباتی کم‌تری پرداخت می‌کنیم. در این‌جا این فرآیند تا چهار مرحله تکرار شده که به این ترتیب خطا در محاسبه‌ی انرژی کم‌تر از ۱٪ است. برای ساختن خانه‌بندی تصادفی همسانگرد از نرم‌افزار TETGEN استفاده شده و ابعاد المان‌ها بین ۰.۱ تا ۱ برابر شعاع ذره متغیر بوده است. شعاع ذره نیز در این‌جا برابر با ۰.۱ میکرون فرض شده که حدود ده برابر بزرگ‌تر از طول همبستگی سیال می‌باشد.

در شکل ۱ هندسه‌ی سیستم مورد مطالعه به طور شماتیک نمایش داده شده است. این سیستم شامل یک ذره‌ی کروی به شعاع R است که در ظرفی مکعبی به ابعاد $L = 20R$ قرار گرفته است. در یکی از وجوه این مکعب یک انحنای سینوسی قرار دارد که حول محور $\hat{z}$ تقارن استوانه‌ای دارد و معادله‌ی آن به صورت $z = z_0 + A\left(1 + \cos\sqrt{\pi \frac{x^2+y^2}{R_c^2}}\right)$ است. $2A$ در این‌جا مساوی با عمق انحناست و R_c شعاع ناحیه‌ای روی دیواره است که این انحنا در آن واقع شده است. $z_0 (= L/2)$ فاصله‌ی بین قسمت تخت دیواره تا مبدأ مختصات است که در مرکز جعبه فرض شده است. مقدار پارامترهای مربوط به انحنا در این هندسه به گونه‌ای انتخاب شده‌اند که برای هر عمق دلخواه ($2A$) شعاع انحنا در مرکز برابر با شعاع ذره باشد، به عنوان مثال، برای $A = R/2$، $R_c = \pi/\sqrt{2} \approx 2.22R$. جهت بردار دایرکتور دوردست برای قلاب‌شدگی مماسی (و عمودی) روی دیواره، در امتداد محور $\hat{x}$ (و محور $\hat{z}$) در نظر گرفته شده و روی تمام دیواره‌های ظرف «ثابت» است، به جز در حالتی که قلاب‌شدگی مماسی روی دیواره‌ی منحنی به کار رفته باشد که در این حالت، قلاب‌شدگی مماسی تبهگن استفاده شده است.

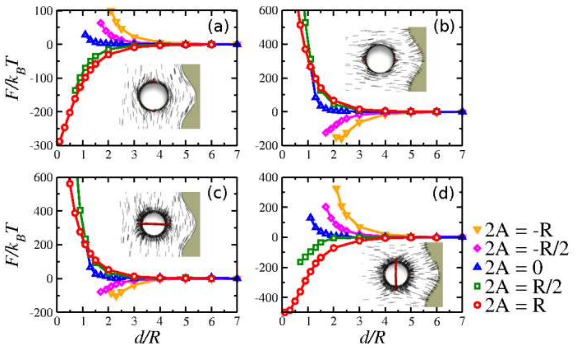


شکل ۱: تصویر شماتیک پارامترها و هندسه‌ی سیستم

تحلیل نتایج

یک ذره‌ی کروی در ابعاد میکرونی با شرایط مرزی عمودی که دارای یک حلقه‌ی زحلی است همیشه به علت دافعه‌ی کشسانی از دیواره‌ها، در مرکز ظرف قرار می‌گیرد. این دافعه‌ی کوتاه‌برد و قوی، با ایجاد انحنا در سطح تخت دیواره به شدت تغییر خواهد کرد. مطالعات قبلی نشان می‌دهد که در حالت دوبعدی در صورتی که یک فرورفتگی در دیواره وجود داشته باشد، ذره با یک مکانیسم «قفل و کلید» به سمت آن جذب می‌شود [۱۲]. در سه بعد نیز رفتار مشابهی برای نانوذرات کروی در نزدیکی یک کانال مستطیلی یا استوانه‌ای موجود در دیواره گزارش شده است [۱۳]. ما در این‌جا نشان می‌دهیم که این برهم‌کنش جاذبه همچنین برای ذرات کروی در نزدیکی یک فرورفتگی در دیواره با انحنای سینوسی نیز وجود دارد.

شکل ۲ حالت‌های مختلفی برای شرایط مرزی روی سطوح و همچنین مقادیر مختلفی از عمق گودی را نمایش می‌دهد. مقدار $2A$ نشان‌دهنده‌ی عمق انحناست و علامت آن نشان می‌دهد که این انحنا به سمت داخل جعبه است یا به سمت بیرون آن. منحنی وسطی برای $2A = 0$ برهم‌کنش با دیواره‌ی تخت را نشان می‌دهد که در تمامی موارد به روشنی رفتار دافعه از دیوار تخت را تأیید می‌کند. در این‌جا ذره در امتداد مسیر مستقیم $(\rho, \theta) = (0,0)$ به سمت دیواره نزدیک می‌شود.



شکل ۲: انرژی برهم‌کنش ذره و دیواره برای شرایط مرزی به ترتیب، هر دو مماسی (a)، مماسی و عمودی (b)، عمودی و مماسی (c)، هر دو عمودی (d). رنگ‌های مختلف برای گودی‌های متفاوت هستند و تصویر داخل هر نمودار برای حالت $2A = R$ و $d = 2R$ است.

در شکل ۲ (a) و (d) شرایط مرزی روی سطح ذره همان شرط مرزی دیواره است و برهم‌کنش بین ذره و دیواره در این دو حالت به طور کیفی مشابه هم می‌باشد. ذره‌ی بوجومی از دیواره‌ی برآمده نیز، مشابه دیواره‌ی تخت، دفع می‌شود که این پدیده یادآور برهم‌کنش دو ذره‌ی بوجومی با یکدیگر است که هنگامی که از کنار به هم نزدیک می‌شوند، همدیگر را دفع می‌کنند [۴و۱۴]. اما این ذرات به سمت فرورفتگی جذب شده و با انرژی در حدود چند صد k_BT در داخل آن به دام می‌افتند.

در حالتی که شرط مرزی روی سطح ذره متفاوت از سطح دیواره باشد، برهم‌کنش به کلی با حالت قبلی فرق خواهد داشت (شکل ۲ (b) و (c)). در این حالت، نه تنها فرورفتگی نمی‌تواند ذره را به دام بیاندازد، بلکه یک نیروی دافعه‌ی قوی ذره را به بیرون از این گودال می‌راند. در این‌جا برهم‌کنش بین ذره و دیواره‌ی بیرون‌زده ($2A = -R$) نیز یادآور شرایطی است که دو ذره با شرط مرزی متفاوت عمودی و مماسی با هم برهم‌کنش کنند. برای حالتی که این دو ذره در امتداد موازی و یا عمود بر راستای دایرکتور دوردست به هم نزدیک شوند، در یک فاصله‌ی مشخصی به حالت تعادل از هم درمی‌آیند. در این‌جا نیز فاصله‌ی ذره از قله‌ی دیواره‌ی برآمده برابر با $(2.3 \pm 0.1)R$ است که بسیار نزدیک به مقادیر گزارش‌شده برای فاصله‌ی تعادلی بین دو ذره می‌باشد [۱۵و۱۶].

جمع‌بندی

با تغییر شرایط مرزی روی سطوح و همچنین تغییر در ساختار دیواره، می‌توانیم برهم‌کنش بین ذره‌ی کلوئیدی معلق در بلور مایع نماتیک را با دیواره کنترل کنیم. این نتیجه می‌تواند به عنوان راهکاری برای تقویت خودساماندهی ذرات کلوئیدی در نزدیکی دیوار غیرتخت مورد استفاده قرار بگیرد. از آن‌جایی که این برهم‌کنش‌ها از مرتبه‌ی چندین هزار k_BT هستند، ساختارهایی که به این ترتیب تشکیل می‌شوند تحت افت‌وخیز گرمایی بسیار مقاوم و پایدار هستند.

سپاسگزاری

از حمایت مالی بنیاد علوم و فن‌آوری پرتغال (FCT) برای پروژه‌ی شماره‌ی PTDC/FIS/098254/2008 قدردانی می‌شود.

مرجع‌ها

[۱] P. Poulin, H. Stark, T. C. Lubensky, D. A. Weitz, “Novel colloidal interactions in anisotropic fluids”, *Science*, 275 (1997) 1770.

[۲] M. Yada, J. Yamamoto, H. Yokoyama, “Direct observation of anisotropic interparticle forces in nematic colloids with optical tweezers”, *Phys. Rev. Lett.*, 92 (2004) 185501.

[۳] I. Musevic, M. Skarabot,1 U. Tkalec, M. Ravnik, S. Zumer, “Two-dimensional nematic colloidal crystals self-assembled by topological defects”, *Science*, 313 (2006) 954.

[۴] I. I. Smalyukh, O. D. Lavrentovich, A. N. Kuzmin, A.V. Kachynski, P. N. Prasad, “Mediated self-organization and colloidal interactions of solid spheres with tangential anchoring in a nematic liquid crystal”, *Phys. Rev. Lett.*, 95 (2005) 157801.

[۵] U. Ognysta, A. Nych, V. Nazarenko, I. Musevic, M. Skarabot, M. Ravnik, S. Zumer, I. Poberaj, D. Babic, “2D interactions and binary crystals of dipolar and quadrupolar nematic colloids”, *Phys. Rev. Lett.*, 100 (2008) 217803.

[۶] M. Vilfan, N. Osterman, M. Copic, M. Ravnik, S. Zumer, J. Kotar, D. Babic, I. Poberaj, “Confinement effect on interparticle potential in nematic colloids”, *Phys. Rev. Lett.*, 101 (2008) 237801.

[۷] P. G. de Gennes, J. Prost, “The Physics of Liquid Crystals”, 1993, Clarendon press, 2nd Ed., Oxford.

[۸] F. C. Frank, “On the theory of liquid crystals”, *Discuss. Faraday Soc.*, 25 (1958) 19.

[۹] H. Stark, “Physics of colloidal dispersions in nematic liquid crystals”, *Physics Reports*, 351 (2001) 387.

[۱۰] M. Nobili, G. Durand, “Disorientation-induced disordering at a nematic-liquid-crystal-solid interface”, *Phys. Rev. A.*, 46 (1992) 6174.

[۱۱] J. -B. Fournier, P. Galatola, “Modeling planar degenerate wetting and anchoring in liquid crystals”, *Europhys. Lett.*, 72 (2005) 403.

[۱۲] N. M. Silvestre, P. Patricio, M. M. Telo da Gama, “Key-lock mechanism in nematic colloidal dispersions”, *Phys. Rev. E.*, 69 (2004) 061402.

[۱۳] F. R. Hung, B. T. Gettelfinger, G. M. Koenig, Jr., N. L. Abbott, J. J. de Pablo, “Nanoparticles in nematic liquid crystals Interactions with nanochannels”, J. Chem. Phys., 127 (2007) 124702.

[۱۴] M. R. Mozaffari, M. Babadi, J. Fukuda, M. R. Ejtehadi, “Interaction of Spherical Colloidal Particles in Nematic Media with Degenerate Planar Anchoring”, *Soft Matter*, 7 (2011) 1107.

[۱۵] U. M. Ognysta, A. B. Nych, V. A. Uzunova, V. M. Pergamenschik, V. G. Nazarenko, M. Skarabot, I. Musevic, “Square colloidal lattices and pair interaction in a binary system of quadrupolar nematic colloids”, *Phys. Rev. E.*, 83 (2012) 041709.

[۱۶] Z. Eskandari, N. M. Silvestre, M. Tasinkevych, M. M. Telo da Gama, “Interactions of distinct quadrupolar nematic colloids”, *Soft Matter*, 8 (2012) 10100.

شبیه سازی آشکارسازتکثیر کننده گازی حساس موقعیت GEM به روش المان محدود

دلبری ، محمد جواد[۱] ؛ سرآمد ، شهیار[۲]

[۱] دانشکده فیزیک ، دانشگاه آزاد اسلامی واحد علوم و تحقیقات ، تهران

[۲] دانشکده مهندسی انرژی و فیزیک ، دانشگاه صنعتی امیرکبیر ، تهران

چکیده

تکثیر کننده گازی الکترون(GEM)ازیک فویل متخلخل با سوراخ های ریزبه قطر۷۰ μm با چگالی بالاو منظم بر روی آن که به منزله یک تکثیر کننده عمل می کند، تشکیل شده است. در این تحقیق ابتدا ضرایب گازی برحسب میدان الکتریکی برای گازمورد نظر با نرم افزارGARFIELD محاسبه گردیده سپس میدان الکتریکی با حل معادله پواسون باروش محاسباتی المان محدود(FEM) با کمک نرم افزارComsol Multiphysics برای دو نوع هندسه مختلف با مش بندی متفات به دست می آید. سپس با کمک ضرایب گاز ومیدان الکتریکی،بهره موثر باحل معادلات پیوستگی وابسته به زمان با نرم افزارComsol Multiphysics محاسبه ومقایسه گردیده است. نتایج توافق بسیارخوبی با نتایج تجربی دارند.

Simulation of a Position Sensitive Gas Electron Multiplier (GEM) Detector by Finite Element Method

Delbari, Mohammad Javad[1]; Saramad , Shahyar[2]

[1] Department of Physics, Science & Research Branch of Islamic Azad University, Tehran
[2] Department of Energy Engineering and Physics , Amirkabir University of Technology , Tehran

Abstract. *The GEM is a position sensitive gas electron multiplier detector with high-density and regular arrangement of holes inside an insulation foil. In this paper at first step the important parameters of the gas were extracted by the GARFIELD software. For two different geometries by using the Finite Element Method (FEM), the electric field was obtained by solving the Poisson's equation. Finally the time dependent continuity equation is solved by considering the gas parameters and also the electric field in the previous steps to obtain the gas gain. The Results show a good agreement with experiment data.*

PACS No.

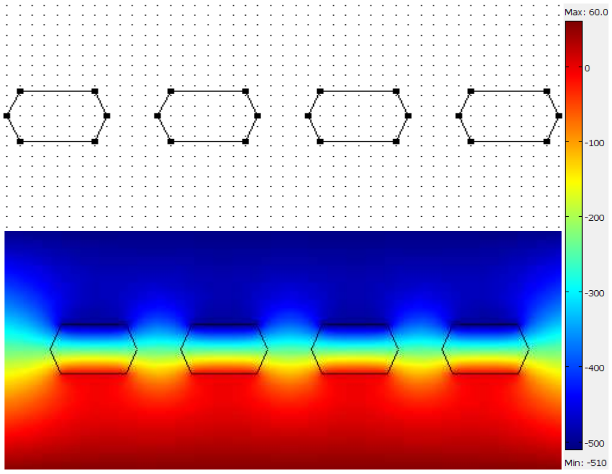
مقدمه

تکثیر کننده گازی الکترون GEM از یک فویل متخلخل عایق از جنس کاپتون به ضخامت ۵۰μm که بر روی آنμm ۵ تاμm ۱۵ از فلز مس لایه نشانی شده تشکیل می شود. بر روی این فویل سوراخ های ریزی با چگالی بالاوجود دارد به طوری که آرایش هندسی منظمی ایجاد شده است. فاصله بین سوراخ ها (پیچ) معمولاً بین ۱۴۰μm تا μm ۲۰۰ و قطر حفره ها بینμm ۷۰ تاμm ۸۰ می باشد.آرایش هندسی دوبعدی و سه بعدی آشکارساز در شکل های شماره ۱و۲ نشان داده شده است.

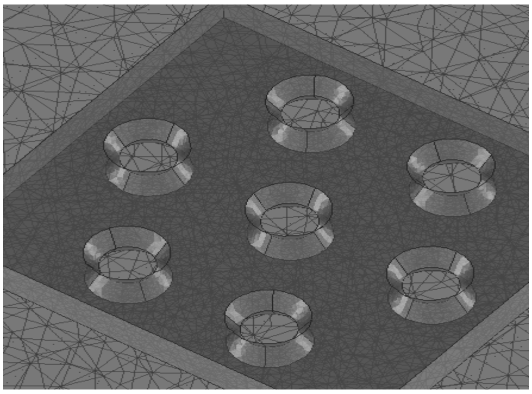
اعمال پتانسیل متفاوت بین دو سر فویل یک میدان الکتریکی در حفره به وجود می آورد که سبب می شوند هر حفره به منزله یک تکثیر کننده عمل کند و الکترون های ایجاد شده از تشعشع در داخل گاز از حفره عبور کرده و به سبب وجود میدان الکتریکی قوی تکثیر شوند.شکل حفره ها به صورت دو مخروطی معکوس ویا استوانه ای بوده که سبب تمرکز میدان الکتریکی و افزایش

سرعت الکترون و در نهایت افزایش تکثیر می شود[1,2].در این مقاله سعی شده است تا میدان الکتریکی به گونه ای دقیق محاسبه و شبیه سازی شود زیرا چنانچه میدان الکتریکی رانشی E_{drift} خیلی قوی باشد به علت غیر کانونی شدن میدان الکتریکی به سمت بالای فویل، میدان الکتریکی به شدت کاهش می یابد و همچنین اگر میدان القایی E_{induce} ضعیف باشد به علت کاهش گرد آوری الکترونها توسط آند بهره به شدت کاهش می یابد[3,4].

تکثیر کننده گازی الکترون در بسیاری از شاخه ها از جمله فیزیک هسته ای، فیزیک انرژی بالا،آشکارسازی پرتو ایکس وفوتون UV ،کریستالوگرافی ،پلاریزاسیون پرتو **X**، در آشکار سازهای فیزیک انرژی بالا، آشکارسازی μ در آزمایش CMS و... کاربرد دارد.



شکل ۱ : طراحی دو بعدی هندسه آشکار ساز (بالا) – پتانسیل الکتریکی دو بعدی آشکارساز (پایین)



شکل۲ : مش بندی سه بعدی ساختار مخروطی آشکارساز

روش کار

برای شبیه سازی ومحاسبه پارامترهای GEM از قبیل بهره موثر و تکثیر حفره از نرم افزار شبیه سازی و محاسبه آشکار ساز های گازی گارفیلد (GARFIELD) [5] استفاده می شود.

گارفیلد ضرایب گازی نظیر(سرعت رانش،ضریب دیفیوژن وضریب تکثیر) را شبیه سازی و محاسبه می کند. برای هر الکترون احتمال تولید یونش های بیشتر در واحد طول در طی مسیر حرکت را ضریب تاون سند (α) می نامند که α^{-1} متوسط پویش آزاد بین برخوردهای یوننده است. در این شبیه سازی ترکیب گازی CO_2–Ar (٪۷۰-٪۳۰) ودمای۲۹۳.۱۵K وفشار Torr ۷۶۰ به کار رفته است.

برای محاسبه و شبیه سازی میدان الکتریکی روش محاسباتی المان محدود استفاده شده است.در روش محاسباتی و شبیه سازی المان محدودتقسیم بندی فضا و زمان به کوچکترین جزء ممکن از اهمیت بالایی برخوردار است.در اینجا همانطور که در شکل ۲ ملاحظه می شود هندسه آشکار ساز به قسمت های بسیار ریزی به صورت مثلثی شکل تقسیم شده اند برای به دست آوردن میدان الکتریکی اصلی دقیق باید این المانها به حد کافی ریز باشند و مش بندی مسئله به اندازه لازم کوچک باشد[6].

روش المان محدود با استفاده از معادله‌ی پواسون (معادله2) میدان الکتریکی را برای تمام نقاط در فضا (گره‌های رئوس مش‌ها در فضا) به‌دست می دهد.

$$\vec{E} = -\vec{\nabla}\varphi \qquad (۱)$$

$$-\nabla^2\varphi = \frac{\rho}{\varepsilon} \qquad (۲)$$

در این روابط $\vec{E}$ میدان الکتریکی، φ پتانسیل الکتریکی، ρ چگالی بار و ϵ_0 ثابت گذردهی خلا می باشد. میدان رانشی ۱ $\frac{kV}{cm}$ ومیدان القایی ۶ $\frac{kV}{cm}$ و پتانسیل دو سر فویل ۴۰۰،۵۰۰ و۶۰۰ ولت در نظر گرفته شده است .

پس از محاسبه میدان الکتریکی وپارامتر ها و ضرایب گاز،رابطه غلظت الکترون یعنی مقدار الکترون تولید شده در محیط گاز در آشکار سازتوسط معادلات پیوستگی به روش **المان محدود** حل می شود.

$$\vec{V} = \mu(\vec{E})\,\vec{E} \qquad (۳)$$

$$S_e = S_p = \alpha\,\frac{J_e}{e} \qquad (۴)$$

$$D_{e,p} = K\,T\,\frac{\mu(\vec{E})}{e} \qquad (۵)$$

$$\vec{J}_e = -|e|\,\vec{\Gamma}_e \qquad (۶)$$

$$\vec{\Gamma}e = -\,\mu(\vec{E})\,n_e\,\vec{E} - D_e\,\vec{\nabla}\,n_e \qquad (۷)$$

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \vec{\nabla}\cdot\vec{\Gamma}_e = S_e \qquad (۸)$$

در این معادلات μ تحرک الکترون، α ضریب تکثیر، Dضریب دیفیوژن، T دما، $\vec{\Gamma}_e$ چگالی جریان ذره الکترون ، $S_{e,p}$ جملهٔ منبع الکترون و یون و n_e غلظت الکترون می باشد.

معادلات پیوستگی مربوطه وابسته به زمان هستند. برای حل این معادلات باید علاوه بر مش‌بندی فضا، زمان نیز تقسیم‌بندی شده و معادله در گامهای زمانی حل شود. تقسیم بندی زمانی و مش‌بندی فضا به طور مناسب، به میزان زیادی بر همگرایی در روند حل مؤثر است و هرچه این تقسیم بندی و المان ها مناسب تر و بیشتر باشد نتیجه حاصل بسیار دقیق می باشد.

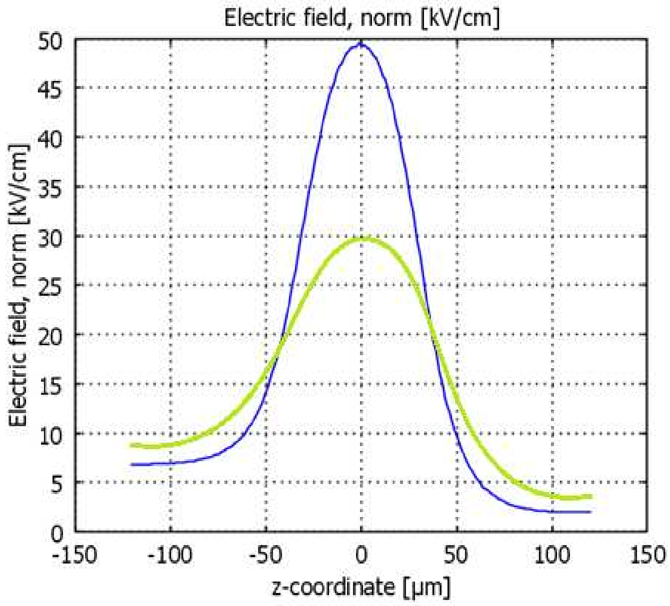
نتایج

در شکل (۳) نتایج مربوط به محاسبه و شبیه سازی میدان الکتریکی مشاهده می شود. این محاسبات برای ولتاژهای۴۰۰ و۵۰۰ و۶۰۰ ولت بین دوسرفویل برای ساختار استوانه ای (نمودار سبز رنگ) و نیز ساختار مخروطی (نمودار آبی رنگ) انجام شده است .محاسبه نشان می دهدکه شرایط برای تکثیر ذره در ساختار مخروطی بیشتر مهیا است.

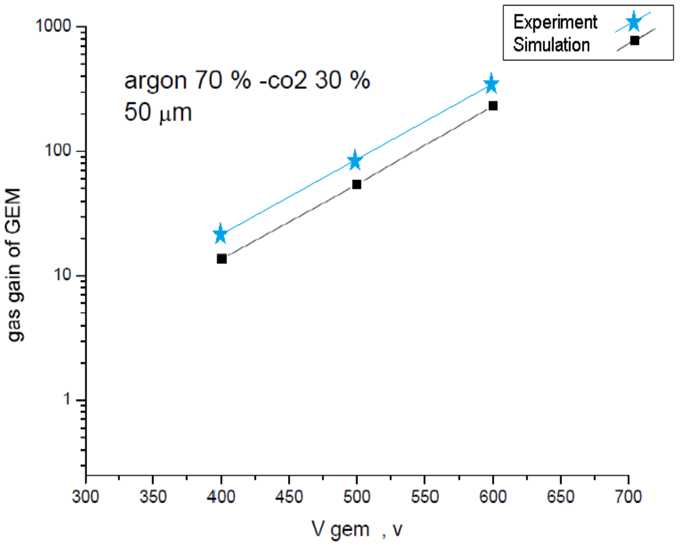
در نهایت بهره وضریب تکثیر برای حفره یعنی بهره موثر آشکارساز در کل فضای بین الکترود ها نمایش داده شده است وبرای اعتبار سنجی با نتایج تجربی[7] مقایسه می شود.

بحث و نتیجه گیری

در این تحقیق یک مدل دقیق برای شبیه سازی تکثیر کننده گازی ارائه ورفتار ذره به طور کامل در تکثیر کننده گازی شبیه سازی شد.در شبیه سازی به روش المان محدود ریز بودن المان ها و مش دقیق میدان الکتریکی برای تکثیر به دست آمد.



شکل۳ : میدان الکتریکی محاسبه شده برای ساختار استوانه ای(سبز) و ساختار مخروطی (آبی رنگ) در ولتاژ ۵۰۰ ولت



شکل۴ : مقدار بهره شبیه سازی و محاسبه شده آشکار ساز با روش المان محدود(نمودار مشکی) و مقدار تجربی بهره آشکارساز(نمودار آبی)[۷]

ترکیب گازی (٪۷۰-٪۳۰) CO_2-ar به جهت رفتار مناسب (سرعت رانشی بالا، ضریب تکثیر وپخش مناسب) ونیز ساختار مخروطی به جهت هندسه آن نسبت به ساختار استوانه ای که سبب تمرکز میدان الکتریکی در داخل حفره آشکارساز می شود انتخاب شد . با افزایش ولتاژ به دلیل افزایش میدان داخل حفره، بهره به شدت افزایش می یابد.مقدار بهره گاز در آشکارساز با مقدار

تجربی آن (GEM واقعی) برای اعتبار سنجی مقایسه شده است که همانطور که مشخص است اختلاف بسیار کمی مشاهده می شود. اختلاف به دلیل خطای محاسباتی ،تفاوت در هندسه وشرایط کاری آشکار ساز می باشد.

سپاسگزاری

از همکاری ها و رهنمود های دلسوزانه پروفسور راب وین هوف در سازمان تحقیقات هسته ای اروپا (سرن) و نیز جناب آقای دکتر وحید اسماعیلی ثانی در دانشگاه امیرکبیر در پیشبرد این طرح صمیمانه تشکر می کنیم .

منابع

1 . F. Sauli, GEM: A new concept for electron amplification in gas detectors, *Nucl. Instr. and Meth*. (1997) A 386.
2 . J. Benlloch, et al., Development of the Gas Electron Multiplier (GEM), *IEEE Trans. Nucl. Sci.* (1998) 45.
3. O. Bouianov, M. Bouianov, R. Orava, P. Semenov, V. Tikhonov, Progress in GEM Simulation, *Nucl. Instr. And Meth.* (2000) A 450-277
4. S. Bachmann, A. Bressan, L. Ropelewski and F. Sauli “Charge amplification & transfer processes in the GEM “*CERN-EP/*99-48 12.04. (1999).
5. R. Veenhof, Garfield, a Drift-Chamber Simulation Program, Version 6.3
6. M. Alfonsi , et al. , Simulation of the dielectric charging-up effect in a GEM detector , *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research* A (2012) 671 6–9 .
7 .R.Veenhof ,“GEM simulation method” , *Nucl. Instrum. and Meth* , A (2002) 487 452-459.

شبیه‌سازی ناپایداری نانوانبرک‌های ساخته شده از نانولوله‌های کربنی تحت نیروی جاذبه کازیمیر

آبادیان، نعیمه[۱]؛ کنجوری، فرامرز[۲]

[۱]دانشکده علوم پایه، دانشگاه آزاد قم، قم

[۲]دانشکده فیزیک، دانشگاه خوارزمی، کرج

چکیده

در این پژوهش،اثر نیروی کازیمیر بر ناپایداری نانوانبرک‌ها (هندسه استوانه- استوانه)که مورد رایجی در نانوساختارهای واقعی می‌باشندمورد بررسی گرفته است. بدین منظور در مقیاس نانو، یک مدل پارامتر متمرکز برای شبیه سازی رفتار ناپایداری سیستم ارائه شده است. دراین مدل رفتار الاستیک سیستم به کمک یک فنر مدلسازی شده و پس از نوشتن رابطه تعادل، معادله مشخصه سیستم استخراج و حل شده است. همچنین برای مقایسه بهتر، معادله بر اساس روش تفاضل محدود (روش عددی) نیز بررسی شده است.نتایج نشان می‌دهد که نیروی کازیمیربه تنهایی می‌تواندباعث ناپایداری ناونوساختارها شود و بنابر این در محاسبات ساختاری باید آن را مد نظر گرفت.

Modeling the instability of nanotweezers based on carbon nanotubes under casimir attraction

Abadian, Naeime[1]; Kanjouri, Faramarz[2]

[1]Faculty of Science, Islamic Azad University, Qom, Iran

[2]Faculty of Science, kharazmi University, karaj, Iran

In this study, effects of the Casimir force on the instability of nanotweezers (Cylinder-Cylinder geometries) are investigated, which are commonly encountered in real nanodevices.A continuum lumped parameter model is employed to investigate the mechanical response of thenano-tubes. The elastic response of the system is modeled using a spring element and the governing nonlinear constitutive equationof the nanostructures is derived.alsothe equation of the nanostructures is solved using numerical finite difference method.

Results shows that Casimir force can induce instability and adhesion in freestanding nanostructures.

PACS:

۱. مقدمه

باپیشرفت‌های اخیر در فناوری نانو بسیاری از محققان در بررسی اثر جاذبه کازیمیر روی عملکرد محرک‌های نانوالکترومکانیکال تمرکز کرده‌اند[۱]. به طور معمول برای فواصل جدایی کمتر از چند میکرومتر، نیروی کازیمیر می‌تواند به طور قابل توجهی ناپایداری نانوساختارها را تحت تأثیر قرار دهد.مقاله قبل روی مدل‌سازی ناپایداری ساختارهایی باهندسه استوانه–صفحه تحت تاثیر نیروهای کازیمیر و الکترواستاتیک متمرکز شده بود [۲]. در این پژوهش تأثیر نیروی کازیمیر روی ناپایداری هندسه استوانه–استوانه یک سرگیردار که مورد رایجی در نانوانبرک‌های واقعی می‌باشد، بررسی شده است. با کاهش فاصله بین دو نانولولهو گذر آن از حد بحرانی، نانولوله‌ها ناگهان ناپایدار می‌شوند وبه این ترتیب، اگر حداقل فاصله بین نانولوله‌ها در نظر گرفته نشود، یک سیستم نانوالکترومکانیکال ممکن است حتی بدون اعمال هیچ‌گونه ولتاژی و تنها به دلیل حضور نیروی کازیمیر به یکدیگر بچسبد[۳–۵]. تعیین این نقطه ناپایداری و شبیه‌سازی میزان خم‌شدگی نانولوله مهمترین نکته در پیش‌بینی عملکرد آن است.

در بخش‌های بعد نیروی کازیمیر برای هندسه استوانه–استوانه با روش مرجع [۶] محاسبه شده است و همچنین یک مدل پیوسته در ابعاد نانو، به منظور شبیه‌سازی انحراف و ناپایداری ناشی از جاذبه کازیمیر نانوانبرک مبتنی بر نانولوله کربنی، برای بدست آوردن معادله ساختاری غیر خطی، بکارگرفته شده است و معادله حاکم بر نانولوله‌های کربنی با استفاده از دو روشمدل پارامتر جرم متمرکز و تحلیل عددی حل شده است.

۲. مدل نظری

۲–۱. نیروی کازیمیر بر واحد طول

انرژی کازیمیر بر واحد طول برای هندسه استوانه–استوانه که در شکل ۱ نشان داده شده است درمرجع[۶]به صورت زیر محاسبه شده است.

$$\mathrm{E} = -\frac{\pi^3}{1920}\hbar C L\sqrt{R/(D-2R)^5} \quad (۱)$$

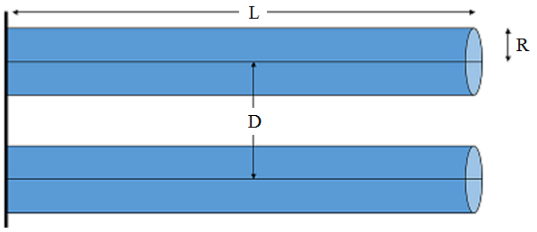
با گرفتن مشتق انرژی کازیمیر نسبت به فاصلهD،نیروی کازیمیر به صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$F = -\frac{\pi^3}{768}\hbar C L\sqrt{R/(D-2R)^7} \quad (۲)$$

نهایتا نیروی کازیمیر بر واحد طول برای حالت تعادل به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$f_{cas} = -\frac{\pi^3}{768}\hbar C\sqrt{R/(D-2R-U)^7} \quad (۳)$$

در روابط بالا $\hbar = 1.055\times 10^{-34}\mathrm{Js}$ ثابت پلانک تقسیم بر 2πو $c = 2.998\times(10)^8\ \mathrm{m/s}$سرعت نور می باشد.



شکل ۱. دو نانولوله کربنی که از یک طرف بسته شده اند.

۲–۲ –معادله حاکم بر سیستم

درحالت تعادل نیروی کازیمیر با نیروی الاستیک برابر است، بنابراین داریم:

$$EI\frac{d^4U}{dx^4} = f_{cas} \quad (۴)$$

با توجه به:

شرط مرزی در انتهای بسته: $U(0) = \frac{dU}{dX} = 0$

شرط مرزی در انتهای باز: $\frac{d^2U}{dX^2}(L) = \frac{d^3U}{dX^3}(L) = 0$

معادله (۴) را با استفاده از روابط زیر بی‌بعد می‌کنیم:

$$u = \frac{U}{D}\ ,\ x = \frac{X}{L}\ ,\ k = \frac{D}{R} \quad (۵)$$

بنابراین:

$$\frac{d^4u}{dx^4} = \frac{\pi^3\hbar C L^4}{768EID^4}\sqrt{{}^{1}\!\Big/_{k(1-\frac{2}{K}-u)^7}} \quad (۶)$$

با استفاده از تعریف زیر معادله ۶ را ساده می‌کنیم:

$$\gamma = \frac{\bar{h}cL^4}{8\pi EID^4} \quad (۷)$$

در نتیجه:

$$\frac{d^4u}{dx^4} = \frac{\pi^4\gamma}{96}\sqrt{{}^{1}\!\Big/_{k(1-\frac{2}{K}-u)^7}} \quad (۸)$$

۳. حل معادله

۳-۱. حل عددی [۱]

در روش عددی معادله دیفرانسیل غیر خطی حاکم(۸) با شرایط مرزی مشخص شده در بالا وبه ازای k=5 به کمک نرم‌افزار maple حل شده و نتایج در شکل‌های ۳ و۴ ارائه شده است.شایان ذکر است نرم افزار برای حل معادله از روش تفاضل محدود استفاده می-کند.

۳-۲. مدل پارامتر جرم متمرکز [۲]

شکل۲مدل ساده پارامتر متمرکز نانومحرک را نشان می‌دهد. این مدل برای فهم فیزیک پدیده‌هابدون پیچیدگی ریاضی بسیار کاربردی است.این ساختار ازیک فنر با ضریب سختی K تشکیل شده است و سختی الاستیک ساختار یک سر گیردار برابر است با [۱]:

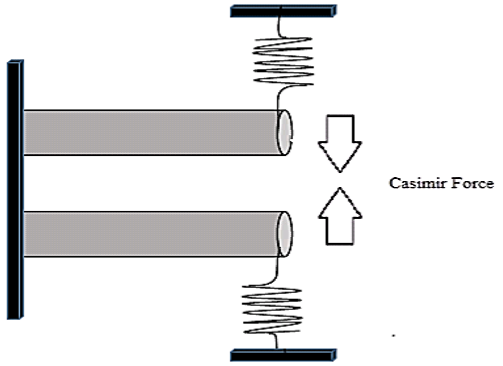
$$K = \frac{8EI}{L^3} \quad (۹)$$

که در این رابطه E مدول یانگ و I گشتاور سطح مقطع می‌باشد.در مدل پارامتر متمرکز فرض می‌شود که توزیع بار روی تیر یکنواخت می‌باشد و بنابراین این روش تنها برای نوک تیر جواب دارد.به این ترتیبمیزان خمیدگینانولولهاز تعادل نیروهای کازیمیر و الاستیک فنر به صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$\frac{8EI}{L^3}U = f_{cas}L \quad (۱۰)$$

پس از جانشینی روابط (۳) و(۵)و (۷) در معادله (۱۰) می‌توان معادله را به شکل زیر بی بعد کرد:

$$8u_{tip} = \frac{\pi^4\gamma}{96}\sqrt{{}^{1}\!\Big/_{k(1-\frac{2}{K}-u_{tip})^7}} \quad (۱۱)$$



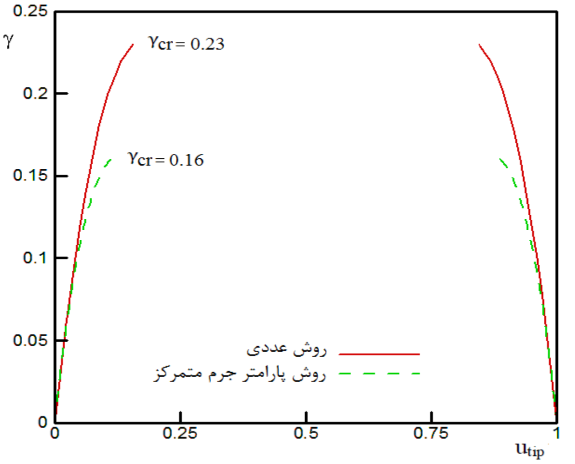
شکل ۲. مدل پارامتر جرم متمرکز سیستم

۴. نتایج و بحث

در معادلات (۸) و (۱۱) با استفاده از رابطه $\frac{\partial\gamma}{\partial u_{tip}} = 0$ میزان γ بحرانی محاسبه می‌شود که آن را γ_{cr} می‌تامیم. در شکل ۳ منحنی تغییرات γ بر حسب u_{tip} آورده شده است. نقطه بیشینه (قله) نمودار بیانگر میزان γ_{cr} است.

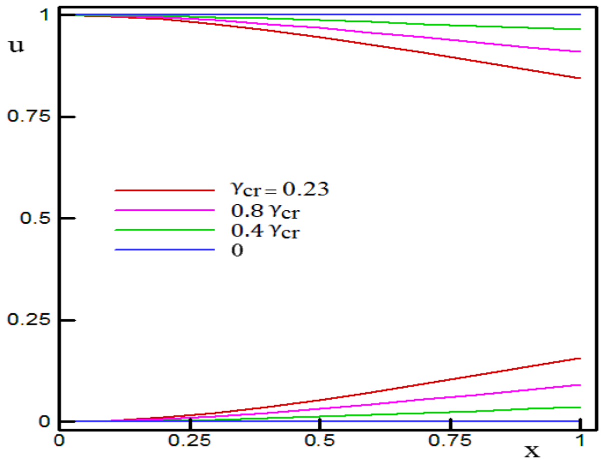
این بدان معناست که اگر $\gamma>\gamma_{cr}$ شود، سیستم ناپایدار شده و به سطح زیرین می‌چسبد؛ برای چنین حالتی جوابی برای u_{tip} وجود ندارد و بیان‌گر آن است که نیروی کازیمیر بیشتر از حد تحمل الاستیک نانولوله است.

---
[1] Numerical Solution
[2] lumped parameter model (LPM)



شکل۳.نمودار γ برحسب u_{tip} به ازای k=5برای روش عددی و روش پارامتر جرم متمرکز

در شکل۴ تغییرات u_{tip} *برحسب فاصله از سر بسته تیر برای* γ*های مختلف نشان داده شده است.شایان ذکر است این نمودار تنها برای روش عددی قابل رسم است زیرا روش جرم متمرکز تنها برای نوک تیر جواب دارد.*



شکل ۴. نمودار u برحسب x بادر نظرگرفتن

$\gamma = 0, \gamma_{cr}, 0.4\gamma_{cr}, 0.8\gamma_{cr}$ وبه ازای $k = 5$

۵. نتیجه گیری

در این مقاله ناپایداری نانوانبرک با استفاده از مدل پارامتر جرم متمرکز و روش عددی مطالعه شد. جواب‌های دو روش عددی و مدل پارامتر جرم متمرکز متفاوت می‌باشند که نشان دهنده این است که روش پارامتر جرم متمرکز بیشتر به منظور شبیه‌سازی رفتار فیزیکی نانوساختار مفید است و به صورت دقیق پارامترهای آستانه ناپایداری سیستم را نمی‌تواند پیش‌بینی کند ولی با توجه به عدم استفاده از محاسبات پیچیده در آن، می‌توان از این روش برای تقریب اولیه محاسبات استفاده نمود.

نتایج نشان می‌دهد که:

وجود نیروی کازیمیر موجب می‌شود که حتی اگر هیچ ولتاژی به سیستم اعمال نشود، باز نانولوله‌ها یک خمیدگی در اثر جاذبه کازیمیر داشته باشند و اگر در طراحی پارامترهای ساختاری نظیر شعاع و طول نانولوله به درستی انتخاب نشوند و مقدار پارامتر گاما به مقدار بیشینه برسد، نیروی کازیمیر به تنهایی می‌تواند باعث ناپایداری ناونوساختارها شود و بنابراین در محاسبات ساختاری اولیه حتما باید نیروی کازیمیر مد نظر گرفته شود.

مراجع

1. Ali Koochi, Asieh Sadat Kazemi, YaghoubTadiBeni, AlirezaYekrangi , MohamadrezaAbadyan , Theoretical study of the effect of Casimir attraction on the pull-in behavior of beam-type NEMS using modified Adomian method, Physica E,43, 2010, 625–632

2. AbadianNaeime, Kanjouri, Faramarz, Modeling the instability of CNT under electrostatic and casimir attraction, Iran physics conference, 969, 2013

3. Y. P. Zhao, L. S. Wang and T. X. Yu, *J. Adhes. Sci.Tech.* **17**, 519 (2003).

4. W. H. Lin and Y. P. Zhao, *Chaos SolitonFract.* **23**,1777 (2005).

5. N. Sasaki, A. Toyoda, H. Saitoh, N. Itamura, M.Ohyama and K. Miura, *e-J. Surf.Sci. Nanotech.*.**4**,133 (2006).

6. S. J. Rahi, T. Emig, R. L. Jaffe and M. Kardar, Casimir forces between cylinders and plates. Phys. Rev. A 78, 012104 (2008).

شبیه سازی رشد حجمی نانوساختارهای لایه نشانی شده با زاویه مایل

عباس هادی ، نعیمه؛ نجفی موسوی، سیده زینب؛ مینائی فرد، سکینه؛ ثابت داریانی، رضا

گروه فیزیک دانشگاه الزهرا،ونک، تهران

چکیده

با استفاده از روش مونت کارلو، رشد حجمی نانو ستون ها را شبیه سازی کردیم. پوشش سطحی را که یکی از پارامترهای مهم در پدیده ی رشد می باشد مورد مطالعه و بررسی قرار دادیم. نتایج نشان می دهد، پوشش سطحی در حین رشد با زاویه فرود مایل تغییر می کند و در زوایای بالا، میزان آن کاهش می یابد و در نتیجه تخلخل ساختار بیشتر می شود. همچنین تراکم بسته بندی با زاویه فرود تغییر می کند و در زاویه فرود بالاتر شروع به کاهش می کند.

Simulation of Nanostructures Bulk Growth with Oblique Angle Deposition

Abbas Hadi, Naeimeh; NajafiMousavi, SeyedehZainab; Minaeifard, Sakineh; Sabet Dariani, Reza

Department of Physics, Alzahra University, Tehran

Abstract

Bulk growth of Nano columns are simulated by Monte Carlo method. Surface coverage which is important parameters in growth phenomena are studied. Our results showed that surface coverage is varying with oblique incident angle and at higher angles is decreasing and therefore structure porosity increasing. Also, packing density is varying with incident angle and at higher angles starts to decrease.

PACS No.03.67.Lx

مقدمه

امروزه رایانه یکی از ابزارهای مهم و جدا نشدنی در کارهای علمی شده است و این امکان را میدهد تا بسیاری از پدیده ها را شبیه سازی نماییم، از جمله میتوان به شبیه سازی رایانه ای رشد لایه نازک اشاره کرد که توجه محققان زیادی را در سال های اخیر به خود جلب کرده است. روش های محاسباتی مورد استفاده در شبیهسازی رایانه ای به دو دسته تقسیم می شوند: تصادفی، نظیر روش مونت کارلو و غیر تصادفی، نظیر دینامیک مولکولی. در تحقیقاتی که مورد بررسی واقع شد، افراد با استفاده از روش رونشست زاویه مایل[1] و گام گام های تصادفی مونت کارلو به شبیه سازی ساختار ستونی پرداخته اند و مدل رشد بکار رفته رونشست بالستیک میباشد. لایه نشانی زاویه مایل بر اساس روش رونشست بخار فیزیکی[2] است که در آن شار ذرات فرودی تحت زاویه ای مشخص نسبت به نرمال سطح به سمت زیرلایه فرود می آیند.وقتیذرات روی زیرلایه می رسند، آنها ابتدا حالت جذب فیزیکی را اشغال می کنندو در طول سطح پخش می شوندو اگر انرژی کافی برای گذر از سد پتانسیل را داشته باشند با زیر لایه پیوند

[1] Oblique Angle Deposition
[2] Physical Vapor Deposition

برقرار کرده و روی سطح ثابت می شوند .وقتی که ذرات روی زیرلایه پخش می شوند، در حالت جذب فیزیکی به سوی هم جذب می شوند تا به صورت هستکی[۳] که شامل تعداد کمی از اتم ها می باشد، درآیند.رشد ادامه پیدا می کند در حالی که هستک ها برای پوشش بقیه سطح زیرلایه توسعه پیدا می کنند و پس از تماس یافتن با یکدیگر مرحله بهم پیوستن جزایر روی فیلم شروع می شود. رشد ادامه یافته تا جایی که ستون ها تشکیل شوند[1-3]

شرح مدل

مدل شبیه سازی شامل شبکه مربعی سه بعدی به ابعاد ۳۰۰ × ۳۰۰ × 300 با شرایط مرزی تناوبی می باشد که به زبان فرترن ۹۰ نوشته شده است.

فیزیک مدل ارائه شده براساس شبیه سازی مونت کارلو و تولید اعداد تصادفی می باشد و مدل رشد بصورت رونشست بالستیک[٤] انتخاب شده است.در هر مرحله از شبیه سازی، یک ذره بصورت تصادفی در صفحه ای موازی صفحه زیر لایه که در ارتفاع h بالاتر از بلندترین ستون در حال رشد قرار دارد، تولید میشود و سپس در مسیری مستقیم که تحت زاویه ی α نسبت به نرمال سطح است به سمت زیر لایه فرستاده میشود.
فرض شده ذرات در مسیر خود تا زمان رسیدن به ساختار در حال رشد، هیچ برخوردی با اتم ها در جهت بخار فرودی ندارند.رشد لایه نازک زمانی آغاز می شود که اولین ذرات از شار فرودی به زیرلایه رسیده باشند و روی زیرلایه ثابت شوند. در مرحله ابتدایی رشد، ذرات هنگام فرود با سطح صاف زیرلایه روبرو می شوند و پس از آن پدیده ی پخش سطحی اتفاق می افتد، به این ترتیب که ذرات با "گام های تصادفی مونت کارلو" شروع به پخش می کنند تا به اولین همسایگی رسیده یا تعداد گام های مجاز تعریف شده به پایان برسد.
معادله ۱ رابطه پخش استفاده شده دراین مقاله می باشد[3] :

$$\wp = \frac{2a}{\sqrt{3}} d \qquad (۱)$$

که در آن a ثابت شبکه، d طول پخش و D تعداد گام های مجاز برای یک ذره است.

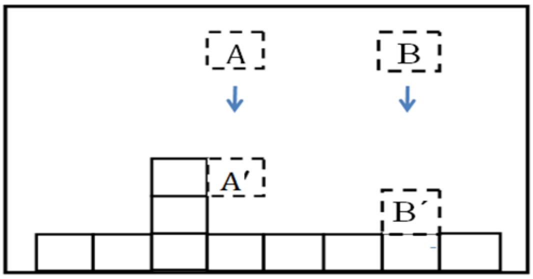
اگر ذره ی در حال پخش قبل از رسیدن به گام D به ذره ی دیگری برخورد کند به آن متصل شده، در جای خود ثابت می شود و تشکیل یک جزیره ی دو ذره ای را می دهند. این امکان نیز وجود دارد که ذره حین پخش به یک جزیره ی در حال رشد برسد، که در این صورت در جای خود ثابت شده و جزئی از آن جزیره می شود. در غیر این صورت ذره پس از طی D گام از حرکت می ایستد و تبدیل به یک مونومر[٥] می شود. در این مدل، برهمکنش میان اتم های روی سطح با یکدیگر به شکل پتانسیل لنارد-جونز فرض شده است.یکی از پارامتر های مهم در تشکیل نانوساختار ها پوشش سطحی[٦] است که در واقع نسبت خانه های پر شده به کل خانه ها در انتهای مرحله ی هسته بندی را نشان می دهد[۳].

در کار قبلی گروه [3] پوشش سطحی برای تمام زوایا یک مقدار مشخص بود و با توجه به آن مرحله هسته بندی تشکیل می شد، در

[۳] nucleation
[٤] Ballistic Deposition
[٥] monomer
[٦] Surface coverage

صورتیکه در تجربه[4]پوشش سطحی در زوایای بالاتغییر میکند.

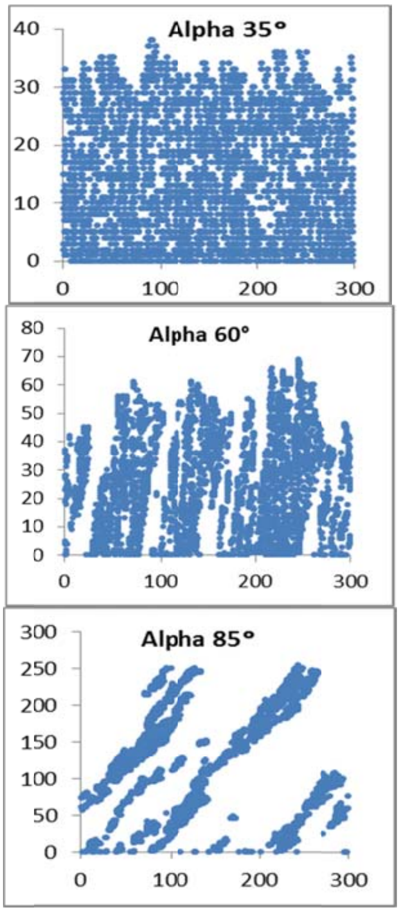
آنچه که در این مقاله به آن پرداختیم بررسی اثر تغییر زاویه در پوشش سطحی و نزدیک کردن مدل به واقعیت است. اولین لایه که بدین ترتیب روی زیر لایه شکل می یابد را به عنوان هسته بندی ساختار در نظر میگیریم ودر لایه های بعدی، ذرات با رونشست بالستیکی بر روی یکدیگر انباشت می شوند و ساختار رشد تکمیل می گردد.به عبارتی فرود ذرات، یک فرود بالستیک تحت زاویه مایل است که اجازه معلق بودن هم به ذرات داده شده است.نشست بالستیک نشان دهنده یک مدل متراکم چسبناک است و به وسیله آن، صفات یک توده متخلخل مورد مطالعه قرار می گیرد. مطالعه ی این صفات وهمچنین بررسی خواص آماری مانند محاسبه نماهای مقیاس وخواص مقیاسی را میتوان بعنوان یک مساله جدیدبرای این مدل پیشنهاد کرد.



شکل ۱: مدل *BD* – قانون چسبندگی به نزدیکترین همسایه (*NN*).

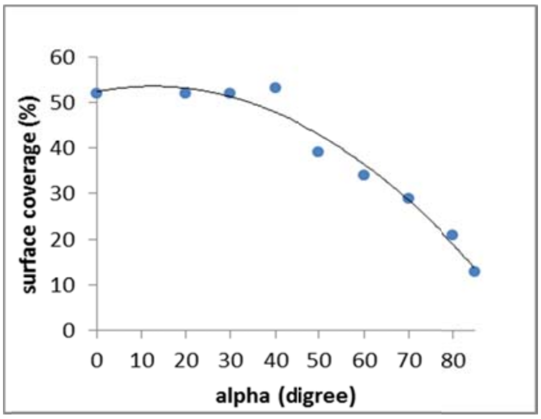
بحث و بررسی

آنچه که ما در این بررسی به آن دست یافتیم این است که زاویه ی فرودی بر پوشش سطحی اثر می گذارد و با افزایش زاویه فرودی بدلیل اثر سایه اندازی پوشش سطحی کم می شود، در نتیجه میزان هسته بندی و جزایر کاهش می یابد. بنابراین ستون های مجزا ی رشد یافته قابل مشاهده می گردد و با توجه به شکل میتوان آن ها را جزو ستون های فراکتالیخودمتشابهدانست(شکل ۲).



شکل ۲. سطح مقطعرشد سه بعدی نانو ستونها در سه زاویه۳۵ و۶۰ و۸۵ درجه، در d=2000، h=3 و تعداد ذره ۱۰۰۰۰۰۰.

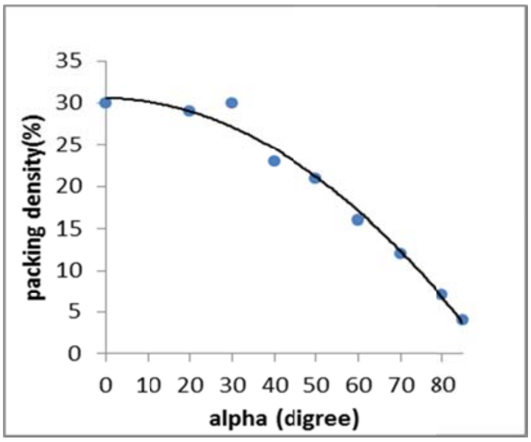
در این مدل تغییرات پوشش سطح مورد بررسی قرار گرفته ونتایج آن درشکل ۳نشان داده شده است:



شکل ۳: تغییرات پوشش سطحی در زوایایفرود متفاوت.

همان طور که مشاهده می شود برای زوایای کم پوشش سطحی نسبت به تغییر زاویه حساس نمی باشد ولی برای زوایای بالاتر به دلیل تشدید اثر سایه اندازی در رشد، پوشش سطحی کاهش می یابد. بنابراین رشد نانوستون ها به طور خودبه خودی میزان پوشش سطح را تعیین می کند و نمی توان در تمام زاویه های فرود یک پوشش سطحی مشخص را در نظر گرفت.

یکی از پارامترهای مهم دیگر در بررسی رشد نانو ستونها " تراکم بسته بندی[۷]" است که نسبت خانه های پر شده به کل خانه های خالی می باشد. در شکل ٤ تغیرات تراکم بسته بندی بر حسب زاویه فرودی رسم شده است:



نشکل ٤: تغییرات تراکم بسته بندی در زوایای مختلف.

مطابق شکل ٤ در زوایای کم میزان تراکم بسته بندی تغییرات چندانی ندارد اما در زوایای بالاتر به دلیل اثر سایه اندازی کاهش قابل ملاحظه ای را در این کمیت مشاهده می کنیم که مطابق با انتظار است .

نتیجه گیری

با استفاده از روش مونت کارلو رشد حجمی نانو ستون ها را شبیه سازی و بررسی نمودیم. نتایج نشان می دهد که با افزایش زاویه ی فرودی به دلیل پدیده ی سایه اندازی، پوشش سطحی کاهش می یابد و ستون ها به صورت جدا از هم رشد می کنند.

سپاسگزاری

از همکاری آقای دکتر حسین حکیمی پژوه و خانم معصومه خورانی صمیمانه تشکر می‌کنیم.

مرجع‌ها

[۱]عبدالهی، محبوبه؛ ثابت داریانی، رضا؛ " تاثیر دمای زیرلایه بر شبیه سازی رشد نانو ذرات به کمک الگوریتم متروپلیس"، مجله فیزیک کاربردی دانشگاه الزهرا، پذیرفته شده (۱۳۹۲).

[۲]خدیویان آذر، صبا؛ عبدالهی، محبوبه؛ ثابت داریانی، رضا؛ "شبیه سازی رشد نانوساختارهای لایه نشانی شده با زاویه مایل به روش مونت کارلو"، کنفرانس سالانه فیزیک ایران، ٢٤١٥ (۱۳۹۰).

[۳] R. S. Dariani, S. Minaeifard, and M. Rajabi, Journal of Optoelectronicsand Advanced Materials, **14**, No.11-12 (2012) 890.

[4]K. Robbie, PhD Thesis, Alberta University, Canada (1996).

[۷]Packing density

ارتباط میان ناموضعیت و کاتوره‌ای

عدالتخواه، فاطمه[۱]؛ موحدیان، حسین[۲]

[۱] دانشکده فیزیک، دانشگاه شاهرود، شاهرود

چکیده

خروجی‌های یک حالت در هم‌تنیده که آزمایش بل رانقض می‌کنند، الزاما مقداری کاتوره‌ای را نشان می‌دهند. در اینجا قصد داریم تا ارتباط میان ناموضعیت و کاتوره‌ای را که در یک آزمایش بل وجود دارد بررسی کنیم. به سادگی انتظار داریم ارتباط مستقیمی میان آنها برقرار باشد. یعنی هرچه میزان ناموضعیت کمتر باشد کاتوره‌ای سیستم نیز کمتر است. نتایج ما نشان می‌دهد که این ارتباط مستقیم درست نمی باشد و ارتباط میان این دو مفهوم دقیقتر از آن است که ما انتظار داریم. میزان طبیعی ناموضعیت سیستم را، میزان کمی نقص نامساوی بل در نظر می‌گیریم هم‌چنین میزان کمی کاتوره‌ای سیستم را بدست می‌آوریم. در این مقاله مانشان می‌دهیم همبستگی‌های ناموضعی کم، که نامساوی CHSH را به دلخواه کم نقض می کنند، با این‌حال حداکثر کاتوره‌ای را دارند.

The Relation between Non-locality and Randomness

Adalatkhah, Fatemeh [1]; Movahhedian, Hossein [2]

[1] Department of Physics, Shahrood University, Shahrood

Abstract

According to quantum theory, the outcomes obtained by measuring an entangled state necessarily exhibit some randomness if they violate a Bell inequality.We are going to investigate the relation between non-locality, and the amount of randomness necessarily present in a Bell experiment. Naively, we expect a direct relation between the amount of nonlocallity and the randomness produced in a Bell-type experiment, i.e., the less nonlocality, the less randomness.Our analysis, however, show that this intuition is not correct and that the relation between these two concepts is much subtler than expected. We can consider the amount of violation of the CHSH inequality a natural measure of non-locality too compute the amount of randomness in system. in this article We introduce little non-local correlations that violate arbitrarily little the CHSH inequality yet which necessarily imply that the maximal amounts of randomness.

PACS No.:3

مقدمه

اطلاعات یکی ازمفاهیم مهم در کوانتم است. اطلاعات کوانتمی به صورت رشته‌ای با n بیت ارائه می‌شود. در اینجا به‌دلیل خاصیت کوانتمی سیستم دنباله اعداد ما قابل شناسایی نیست.

این رشته از اطلاعات شامل توالی از اعداد ۰ و ۱ است که این مجموعه اعداد را در قالب آنتروپی فشرده می‌کنیم. در واقع می‌توان گفت آنتروپی میزان حافظه‌ای است که برای ذخیره‌سازی اطلاعات لازم داریم.

در اینجا نتایجی که از خروجی‌های اندازه‌گیری یک آزمایش بل، بر روی یک سیستم خالص درهم‌تنیده به‌دست می‌آید، اطلاعات ما را تشکیل می‌دهد. به دلیل نقض نامساوی بل نتایج آزمایش ما قطعی نیست و به صورت تصادفی می‌باشد میزان این تصادفی بودن را به صورت کمی نشان می‌دهیم و به آن کاتوره‌ای می‌گوییم. در واقع کاتوره‌ای همان حداقل آنتروپی شانون است و میزان حداقل ناآگاهی ما از نتیجه‌ی آزمایش است.

حداقل آنتروپی مربوط به این اطلاعات یک منبع اطلاعاتی خوب در کوانتوم مطرح می‌شود. چرا که این مقدار به ازای حداکثر میزان

احتمالات حاصل می‌شود. و حداقل بی‌نظمی را در سیستم قبل از اندازه‌گیری نشان می‌دهد و میزان حداکثر اطلاعاتی را که پس از اندازه‌گیری از سیستم به دست می‌آید، می‌رساند.

در این مقاله یک حالت خالص درهم‌تنیده‌ی ۲ کیوبیتی را در نظر می‌گیریم می‌دانیم که این حالت خالص درهم‌تنیده نامساوی بل را الزاما نقض می‌کند. میزان نقص نامساوی بل میزان ناموضعیت را نشان می‌دهد.

در ادامه با استفاده از حداکثر احتمالات میزان کاتوره‌ای سیستم را به‌دست می‌آوریم.

. با توجه به دانش ما انتظار داریم هر چه نامساوی بل بیشتر نقض شود با توجه به اینکه ناموضعیت سیستم را نشان می‌دهد لذا کاتوره‌ای بیشتر می‌شود ولی گاه اتفاق می‌افتد که به ازای ناموضعیت کم حداکثر کاتوره‌ای را داریم.در این مقاله با مقایسه‌ی کمی میزان نقض نامساوی بل و میزان کاتوره‌ای سیستم مشاهده می‌کنیم که الزاما رابطه‌ی مستقیمی میان این دو مفهوم برقرار نمی‌باشد.

محاسبه‌ی کاتوره‌ای

در ابتدا یک آزمایش بل را ترتیب می‌دهیم. اندازه‌گیری‌هایمان را بر روی یک سیستم خالص ۲ کیوبیتی به فرم کلی زیر انجام می‌دهیم:

$$|\psi\rangle = \cos\theta|00\rangle + \sin\theta|11\rangle \qquad 0 \le \theta \le \pi/4 \qquad (۱)$$

این حالت میان طرفین آلیس و باب به اشتراک گذاشته شده. سیستم آلیس دارای دو عملگر اندازه‌گیری u است، که $u \in \{1,2\}$ می‌باشد که به ازای هر اندازه‌گیری دو خروجی داریم که خروجی‌ها را با $a \in \{0,1\}$ نشان می‌دهیم به همین ترتیب سیستم باب نیز دارای دو عملگر اندازه‌گیری v می‌باشد که $v \in \{1,2\}$است و به ازای هر اندازه‌گیری باب بر روی ذره مربوط به خود دو خروجی داریم که خروجی‌ها را با $b \in \{0,1\}$ نشان می‌دهیم.

هر یک از این طرفین عملگرهای زیر را بر روی کیوبیت مربوط به خود اعمال می‌کنند:

$$A_u = \vec{a}_u.\vec{\sigma}$$
$$B_v = \vec{b}_v.\vec{\sigma} \qquad (۲)$$

بردارهای یکه $\vec{b}_v = (b_v^1, b_v^2, b_v^3)$ و $\vec{a}_u = (a_u^1, a_u^2, a_u^3)$ به‌ترتیب جهت قطبشهای عملگرهای آلیس و باب هستند و $\vec{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ عملگرهای پاولی می‌باشند.

خروجی‌های آزمایش به‌صورت احتمالاتی بیان می‌شود. احتمال توامان اینکه آلیس با اعمال عملگر A_u بر روی ذره‌ی خود مقدار a را بدست آورد و باب با اعمال عملگر B_v بر روی ذره‌ی خود مقدار b را بدست آورد مقدار زیر می‌شود:

$$P(ab\,|\,uv) = \langle\psi|M_{a|u} \otimes M_{b|v}|\psi\rangle = \frac{1}{4}(1 + a\langle A_u\rangle + b\langle B_v\rangle + ab\langle A_u B_v\rangle) \qquad (۳)$$

$M_{b|v}$ و $M_{a|u}$ عملگرهای اندازه‌گیری می‌باشند.

این احتمالات توام کوانتمی ناموضع می‌باشند زیرا بستگی به جهت اندازه‌گیری‌ها دارند. ناموضعیت همان طور که می‌دانیم به این معناست که تصمیم آلیس برای به‌کارگیری عملگر اندازه‌گیری بر روی ذره‌ی خودش بر روی احتمال نتیجه‌ی باب تاثیر بگذارد. با استفاده از بسطی که با این احتمالات نوشته می‌شود می‌توان به نامساوی‌های بل دست یافت.

نامساوی بل به فرم کلی زیر می‌باشد که توسط احتمالات توام ناموضع نقض می‌شود:

$$I = \sum_{abuv} I_{abuv} P(ab\,|\,uv) \le I_L \qquad (٤)$$

I_L مرز موضعیت نامیده می‌شود.

هدف این است که با بررسی مقدار نقض در واقع میزان ناموضعیت سیستم را بدست آوریم و در انتها میزان کاتوره‌ای را حساب کنیم و بررسی کنیم چه رابطه‌ای میان آنها برقرار است. در واقع آنچه فکر می‌کنیم این است که رابطه‌ی مستقیمی میان این مفاهیم برقرار است یعنی هر چه میزان ناموضعیت سیستم بیشتر باشد به دنبال آن میزان کاتوره‌ای سیستم نیز بیشتر است.

لذا در ادامه به دنبال حداکثر میزان نقض نامساوی بل هستیم تا در واقع به حداکثر ناموضعیت سیستم دست یابیم.

عبارت بل به فرم کلی زیر می‌باشد:

$$I_\alpha^\beta = \beta\langle A_1\rangle + \alpha\langle A_1B_1\rangle + \alpha\langle A_1B_2\rangle + \langle A_2B_1\rangle - \langle A_2B_2\rangle \qquad (۵)$$

همانطور که ملاحظه می‌کنید مقدار بالا وابسته است به دو مقدار β و α بدون اینکه از کلیت مسئله بکاهیم فرض می‌کنیم $\beta \ge 0$ و $\alpha \ge 1$.

در ابتدا برای سادگی $\beta=0$ *قرار می‌دهیم و مقدار حداکثر* I_α^0 *را حساب می‌کنیم.*

چنانچه مشاهده‌پذیرهای آلیس وباب را به‌صورت زیر انتخاب کنیم:

$$\begin{aligned} A_1 &= \sigma_x \\ A_2 &= \sigma_z \\ B_1 &= \cos\gamma\sigma_x + \sin\gamma\sigma_z \\ B_2 &= \cos\gamma\sigma_x - \sin\gamma\sigma_z \end{aligned} \quad (٦)$$

به ازای جایگذاری مقادیر انتظاری مشاهده‌پذیرها (رابطه(٦)) در رابطه (٥) مقدار حداکثر I_α^0، $I_\alpha^0=2(\sin\gamma+\alpha\cos\gamma\sin 2\theta)$ می‌شود. و با توجه به درنظر گرفتن $\cot\mu=\alpha\sin 2\theta$ به مقدار حداکثر I_α^0 می‌رسیم.

بنابراین نامساوی بل به ازای این مقدار حداکثری به‌صورت زیر درمی‌آید:

$$I_\alpha^0 \le 2\sqrt{\alpha^2+\sin^2 2\theta} \quad (٧)$$

مقدار حداکثر سمت راست عبارت بالا به ازای $\theta=\pi/4$ حاصل می‌شود. که به ازای این مقدار θ حالت کلی سیستم به‌صورت زیر درمی‌آید:

$$|\psi\rangle=\frac{|00\rangle+|11\rangle}{\sqrt{2}} \quad (٨)$$

که این حالت دارای حداکثر درهم‌تنیدگی است که به ازای حداکثر ناموضعیت پدید آمده است. به ازای این حداکثر درهم‌تنیدگی مقادیر انتظاری روابط (٦) نیز به‌صورت زیر درمی‌آید:

(٩)

$$\begin{aligned} \langle A_u\rangle &= \langle B_v\rangle = 0 \\ \langle A_1B_v\rangle &= \frac{\alpha}{\sqrt{1+\alpha^2}} \\ \langle A_2B_v\rangle &= \frac{(-1)^v}{\sqrt{1+\alpha^2}} \end{aligned}$$

در ادامه مقدار کاتوره‌ای سیستم حداکثر درهم‌تنیده که با رابطه‌ی (٨) نشان داده شده را بدست می‌آوریم.

در واقع حداکثر احتمال را از میان توزیع احتمالاتمان برمی‌گزینیم و به آن احتمال حدسی می‌گوییم:

$$G(P,u,v)=\max P(ab\,|\,uv) \quad (١٠)$$

برای محاسبه‌ی میزان کاتوره‌ای باید از احتمال حدسی لگاریتم بگیریم ومقدار آن را با بیت نشان می‌دهیم:

$$H_\infty(P,A,B)=-\log_2 G(P,u,v) \quad (١١)$$

برای بدست آوردن مقدار کاتوره‌ای لازم است که از احتمالات توام که با رابطه (٣) نشان داده می‌شود استفاده کنیم و روابط (٩) را در آن جایگذاری کنیم. بنابراین احتمالات توام را بدین صورت داریم:

$$\begin{aligned} P(ab\,|\,1v) &= \frac{1}{4}\left(1+\frac{\alpha}{\sqrt{1+\alpha^2}}\right) \\ P(ab\,|\,2v) &= \frac{1}{4}\left(1+\frac{(-1)^v}{\sqrt{1+\alpha^2}}\right) \end{aligned} \quad (١٢)$$

به ازای $\alpha=1$ رابطه (٥) به عبارت بل CHSH تبدیل می‌شود:

$$I_1=\langle A_1B_1\rangle+\langle A_1B_2\rangle+\langle A_2B_1\rangle-\langle A_2B_2\rangle \quad (١٣)$$

لذا مقدار حداکثر نامساوی بل CHSH به ازای حداکثر درهم‌تنیدگی به میزان، $I_1=2\sqrt{2}$ می‌شود.

به ازای $\alpha=1$ مقدار حداکثر روابط (١٢) یعنی در واقع احتمال حدسی ما $G(P,u,v)=\frac{1}{4}+\frac{\sqrt{2}}{8}\approx 0.427$ می‌شود. از احتمال حدسی لگاریتم می‌گیریم و میزان کاتوره‌ای سیستم را بدست می‌آوریم:

$$H_\infty=-\log G(P,u,v)=-\log(0.427)=1.23 \quad (١٤)$$

پس به ازای $\alpha=1$ نامساوی بل به میزان $2\sqrt{2}$ نقض می‌شود و به ازای این درجه از نقض که حداکثر درجه نقض نامساوی بل شماره (١٣) می‌باشد دارای ١/٢٣ بیت کاتوره‌ای هستیم.

با توجه به اینکه میزان حداکثر کاتوره‌ای ٢ بیت می‌باشد ولی شاهد هستیم که این میزان کاتوره‌ای به ازای یک سیستم حداکثر درهم‌تنیده که نامساوی بل را به صورت حداکثری نقض می‌کند و یا به عبارتی دارای حداکثر ناموضعیت است حاصل نمی‌شود. پس نتیجه می‌گیریم که به ازای حداکثر ناموضعیت الزاما حداکثر کاتوره‌ای را نداریم. در ادامه بررسی می‌کنیم که این میزان حداکثر کاتوره‌ای به ازای چه درجه از نقض حاصل می‌شود.

چنانچه $\alpha>1$ قرار دهیم. آنگاه میزان حداکثر نامساوی بل CHSH با توجه به اینکه باید مقادیر انتظاری حداکثری رابطه (١٣) را وارد کنیم به این صورت می‌شود:

$$I_1=\frac{2(\alpha+1)}{\sqrt{\alpha^2+1}}\approx 2+\frac{2}{\alpha} \quad (١٥)$$

با بزرگتر شدن مقدار α میزان عبارت بالا که همان میزان نقض نامساوی CHSH است کاهش می‌یابد. در ادامه کاتوره‌ای سیستم را به ازای $\alpha>1$ محاسبه می‌کنیم.

در واقع باید در ابتدا میزان حداکثر روابط (۱۲) را بدست بیاوریم که همانطور که می‌بینیم مقدار زیر می‌شود:

$$G(P,2,v)=\frac{1}{4}(1+\frac{1}{\sqrt{1+\alpha^2}}) \quad (۱۶)$$

از این مقدار لگاریتم می‌گیریم تا به میزان کاتوره‌ای سیستم دست یابیم:

$$H_\infty=-\log G(P,2,v)\approx 2-\ln(2)/\alpha \quad (۱۷)$$

چنانچه میزان α افزایش یابد شاهد خواهیم بود که میزان کاتوره‌ای سیستم افزایش می‌یابد. و به میزان حداکثری ۲ بیت می‌رسد.

لذا به ازای $\alpha>1$ میزان درجه نقض نامساوی بل کاهش می‌یابد و از ناموضعیت سیستم کاسته می‌شود ولی میزان کاتوره‌ای سیستم افزایش می‌یابد. پس به ازای ناموضعیت کم حداکثر کاتوره‌ای سیستم که به میزان ۲ بیت می‌باشد حاصل می‌شود.

نتیجه گیری

در ابتدا به اشتباه فکر می‌کردیم رابطه‌ی مستقیمی میان ناموضعیت و کاتوره‌ای برقرار است. یعنی انتظار داشتیم هر چه میزان نقض نامساوی بل بیشتر است که به دنبال آن ناموضعیت سیستم نیز بیشتر است کاتوره‌ای سیستم هم باید بیشتر باشد آنچه در این مقاله دریافت کردیم این بود که این برداشت ما درست نمی‌باشد و گاه به ازای حداکثر نقض، میزان کاتوره‌ای حداکثری را نداریم. و گاه کاتوره‌ای حداکثری به ازای ناموضعیت کمتری اتفاق می‌افتد.

مرجع‌ها

[۱] arXiv:1107.2754v1 [quant-ph] 14 Jul 2011.
[۲] arXiv:quant-ph/9505020v1 26 May 1995.

خواص ساختاری ، الکترونیو اپتیکی آلیاژهای$Sr_{1-x}Ba_xTe$با استفاده از نظریه تابعی چگالی

احمدیان، فرزاد؛ امیرخانی دهکردی، طیبه

گروه فیزیک، دانشگاه آزاد اسلامی واحد شهرضا، شهرضا

چکیده

در این مطالعه، خواص ساختاری، الکترونی و اپتیکی آلیاژهای$Sr_{1-x}Ba_xTe$ در غلظت‌هایمتفاوت ۱و ۰/۷۵ ، ۰/۵ ، ۰/۲۵ ، ۰ =x و باستفاده از روش امواج تخت بهبود یافته خطی با پتانسیل کامل در چارچوب نظریه تابعی چگالی(DFT) بررسی شد. در بخش خواص ساختاری، پارامترهای شبکه و مدول حجمی به ازای غلظت‌های مختلف در دو فاز نمک‌طعام و بلندروی محاسبه و با نتایج قانون وگارد مقایسه شد. در بخش خواص الکترونی، مقادیر گاف نواری با تقریب های PBE-GGA و EV-GGA محاسبه و با نتایج قانون وگارد مقایسه شد. میزان خمش گاف نواری از قانون وگارد با روش برنارد زونگر محاسبه گردید. در بخش خواص اپتیکی، بخش‌های حقیقی$(\varepsilon_1(\omega))$ و موهومی$(\varepsilon_2(\omega))$ تابع دی‌الکتریک، تابع اتلاف انرژی الکترون $(L(\omega))$، ضریب شکست $(n(\omega))$ و ضریب خاموشی$(k(\omega))$برای آلیاژهای مختلف محاسبه و مورد تجزیه و تحلیل قرار گرفت.

The structural, electronic and optical properties of $Sr_{1-x}Ba_xTe$ alloys using density functional theory

Ahmadian, Farzad; Amirkhani Dehkordi, Tayebeh

Department of Physics, Shahreza branch, Islamic Azad University, Shahreza, Iran

Abstract

In this study,the structural, electronic and optical properties of $Sr_{1-x}Ba_xTe$(x=0, 0.25, 0.5, 0.75, and 1)were investigated using full potential linearized augmented plane wave (FPLAPW) method within density functional theory (DFT). In section of structural properties, the lattice parameters and bulk moduli at different concentrations in both NaCl and zincblende phases were calculated and compared with Vegard's law. In section of electronic properties, The energy band gapvalues using both PBE-GGA and EV-GGA schemeswere calculated and compared with Vegard's law.The bowing of band gaps was calculated using Bernard and Zunger method. In section of optical properties, the real part $\varepsilon_1(\omega)$ and imaginary part $\varepsilon_2(\omega)$ of the dielectric function, energy loss function $L(\omega)$, refractive index $n(\omega)$ and extinction Cofficientk(ω) for different alloys were calculated and analyzed.

PACS No.70,71, 78

مقدمه

امروزه چالکوجنایدها به دلیل تنوع فازی و خواص اپتیکی والکترونی منحصر به فردی که از خود نشان می‌دهند، مورد توجه محققان قرار گرفته‌اند[۱]. چالکوجنایدهای استرانسیوم و باریومکه جزءچالکوجنایدهای قلیایی خاکی به شمار می‌روندکاربردهای فراوانی در صنایع الکترواپتیکی از جمله در دیودهای گسیل نور(LED)،دیودهای لیزری(LDS)، مغناطواپتیک و حافظه های الکترونیکی دارندو جانشین‌های مناسبی برای نیمرساناهای IV و III-Vجدول تناوبی محسوب می‌شوند.لی‌وی‌شین و همکارانش به‌طور کلی خواص ساختاری، الکترونی، الاستیکی و اپتیکی همه‌ی فازهایچالکوجنایدSrTeرا با استفاده از روش شبه پتانسیل مورد مطالعه قرار داده‌اند[۲]. بوهه مادو و همکارانش نیز با استفاده از روشFP-APW+loخواص ساختاری، الکترونی و الاستیکی چالکوجنایدهایباریوم BaX (X= S , Se , Te , Po)را بررسی کرده اند[۳]. در این مطالعه ما قصد داریم به مطالعه خواص فیزیکی آلیاژهای $Sr_{1-x}Ba_xTe$بپردازیم.

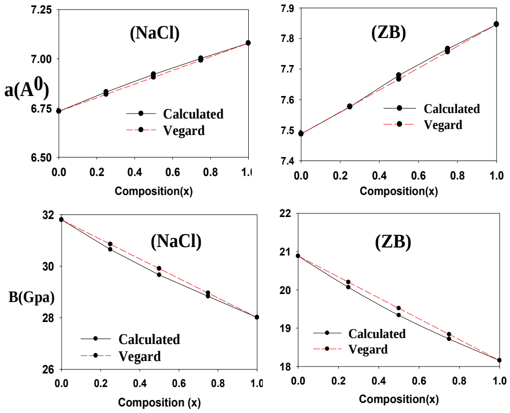
روش محاسبات

محاسبات با استفاده از نرم افزار Wien2kبا روش امواج تخت بهبودیافته خطی با پتانسیل کامل (FPLAPW) در چارچوب - نظریه تابعی‌چگالی(DFT)انجام شده است.تعداد نقاط k در منطقهاولبریلوئن‌برای محاسبات خواص اپتیکی به ازای غلظت‌های ۱ و۰/۷۵، ۰/۵، ۰/۲۵، x=۰در فاز نمک طعام به ترتیب ۱۰۹۰۰و

۹۳۰۰،۸۱۰۰،۸۱۰۰،۱۲۳۰۰ودرفازبلندروی ۱۰۷۰۰ و ۹۳۰۰،۹۳۰۰،۸۱۰۰ ، ۸۱۰۰ انتخاب شده است. شعاع کرات موفین- تین(R_{MT}) برای اتم‌های Ba,Sr وTeبرابر(a.u)۲، اندازه پارامتر G_{MAX} برابر $^{-1}$(a.u)۱۲ و پارامترRK_{MAX}برابر ۸ انتخاب شده است.

خواص ساختاری

در این قسمت مقادیر ثابت‌شبکه(a)و مدول‌حجمی (B)آلیاژهای $Sr_{1-x}Ba_xTe$ به ازای غلظت‌های ۱ و۰/۷۵ ، ۰/۵ ، ۰/۲۵ ، x=۰ در دو فاز بلندروی و نمک طعام محاسبهو با مقادیر حاصل از قانون وگارد[۴]در شکل(۱) مقایسه شده است (انتظار می رود بر طبق قانون وگارد پارامترهای ساختاری به طور خطی با مقدار x تغییرکنند).



شکل ۱:مقایسه مقادیر ثابت شبکه و مدول حجمی محاسبه شده و مقادیرحاصل از قانون وگارد در فازهای نمک طعام و بلندروی

بین نتایج حاصل از محاسبات حاضر با مقادیر حاصل از قانون وگارد انحراف بسیارکمیمشاهده می‌شود. برای محاسبه این انحراف(خمش) مقادیر پارامترهای بدست آمده با یک معادله درجهدوم برازش داده شده‌اند که این معادلات به صورت زیر می-باشند.

$$(NaCl)\ a(x) = 0.068\,x^2 + 0.42\,x + 6.73 \quad (۱)$$

$$(ZB)\ a(x) = -0.03\,x^2 + 0.39\,x + 7.48 \quad (۲)$$

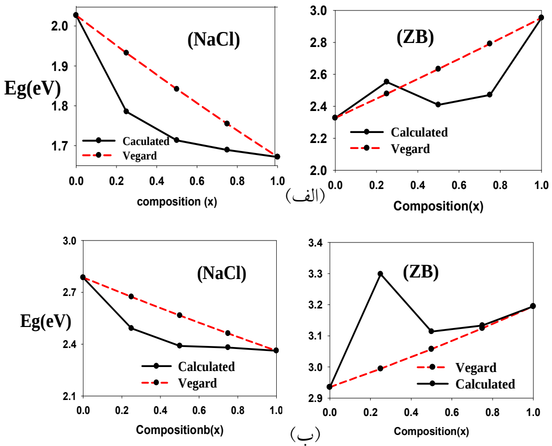
$$(NaCl)\ B(x) = 0.96\,x^2 - 4.71\,x + 31.77 \quad (۳)$$

$$(ZB)\ B(x) = 0.72\,x^2 - 3.44\,x + 20.87 \quad (۴)$$

ضریب درجه دوم در هر معادله میزان خمش را مشخص می‌کند.

خواص الکترونی

مقادیر گاف نواری برای تمامی غلظت‌های موجود در دو فاز نمک‌طعام و بلندروی با دو تقریب PBE-GGA و EV-GGAمحاسبه شده است. گافهای نواری در هر دو فاز با هر دو تقریب برای ترکیبات SrTeو BaTe به‌صورت غیرمستقیم Γ -X و در ترکیبات آلیاژی سه‌تایی به صورت مستقیم در نقطهΓمی‌باشند. گاف‌نواری محاسبه شده در ترکیب SrTeدر فاز نمک‌طعامبا استفاده از تقریبEV-GGAبرابر ۲/۷۸eVاست که در مقایسه با گافنواری محاسبه شده با تقریبPBE-GGAبرابر۲/۰۳eV،به مقدار تجربی۳/۷۸eVنزدیک‌تر است. علت آنست که تقریب EV-GGAپتانسیل تبادل همبستگی را دقیق‌تر از تقریب PBE-GGAمحاسبه می‌کند. مقادیر گاف نواری محاسبه شده برای این ترکیبات با مقادیر قانون وگارددر شکل (۲) مقایسه شده است.



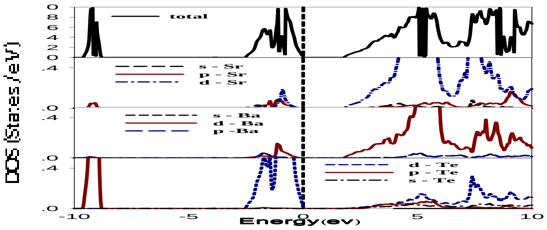
شکل۲: مقایسه مقادیر گاف انرژی محاسبه شده و مقادیرحاصل از قانون وگارد در فازهای نمک طعام و بلندرویبا تقریب‌های PBE-GGA (الف) وEV-GGA(ب)

میزان خمش مقادیرگاف نواری از قانون وگارد با استفاده از معادلات درجه دوم (b) با پارامترخمش روش برنارد-زونگر[۵](b_{bz})در جدول(۱) مقایسه شده است. پارامتر خمش کل b_{bz} به سه مرحله سهم‌تغییرحجم(VD)،سهم‌تبادل‌بار(CE)وسهم-واهلش ساختاری(SR) تقسیم می‌شود.

$$b_{bz} = b_{VD} + b_{CE} + b_{SR} \quad (۵)$$

جدول۱: مقایسه پارامتر خمش روش برنارد(b_{bz}) و روش محاسبات حاضر(b)

مشاهده می‌شود که‌پارامتر خمش حاصل از روش برنارد زونگربا نتایج محاسبات ما در فاز نمک‌طعام در هر دو تقریب توافق خوبی دارد. چگالی حالت‌های الکترونی آلیاژ $Sr_{0.5}Ba_{0.5}Te$در فاز نمک‌طعام برای نمونه در شکل(۳) آورده شده است.درگستره‌یانرژی بین۹/۶۶- تا۸/۷۹- الکترون ولتسهم‌عمده‌اوربیتال‌هایاشغال شده مربوطبه‌اوربیتالsاتمتلوریوم ودربازه‌ی۲/۵۶- تا ۰/۰۷۷ الکترونولتمربوط به اوربیتالpاتمتلوریوممی‌باشد.گافانرژیبه‌بزرگی ۱/۷۱ الکترون‌ولت حکایت از خاصیت نیمه‌رسانایی این آلیاژ دارد. حالات الکترونی بالای سطح فرمی عمدتاً به اوربیتال dاتم‌های‌استرانسیوم و باریوم تعلق دارد.



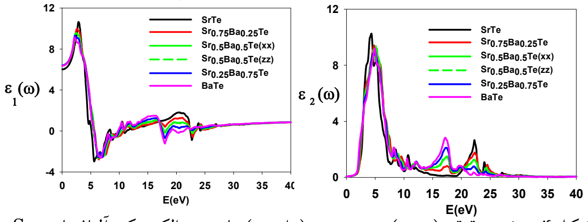
شکل۳ : چگالی حالت‌های الکترونی آلیاژ $Sr_{0.5}Ba_{0.5}Te$

خواص اپتیکی

تابع دی‌الکتریک مختلط $\varepsilon(\omega)$مهم‌ترینپارامتربرای توصیف خواصاپتیکی یک ترکیب است، که به دو بخش حقیقی و موهومی تقسیم می‌شود.

$$\varepsilon(\omega)= \varepsilon_1(\omega) + i\, \varepsilon_2(\omega) \qquad (۶)$$

نمودار بخش‌های‌حقیقی $\varepsilon_1(\omega)$وموهومی $\varepsilon_2(\omega)$ تابع دی‌الکتریک برای آلیاژهای $Sr_{1-x}Ba_xTe$ در فاز نمک طعام در شکل (۴) نشان داده شده است.، (ب) ثابت دی‌الکتریک در فرکانس صفر $\varepsilon_1(0)$برای این ترکیات با افزایش غلظت ناخالصی به ترتیب برابر با ۶/۰۱۱، ۶/۴۰۲ ، ۶/۴۰۵، ۶/۴۰۶، ۶/۴۰۱، ۶/۳۶ الکترون‌ولت می‌باشند. در نمودار قسمت حقیقیبه‌طورکلی می‌توانديد که با افزایش غلظت ناخالصیاتم باریوم قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک به سمت انرژی‌هایکمترانتقال می‌یابد. هم‌چنین دیده می‌شود که در حالت x=۰/۵دو بخش xxوzzتابع دی‌الکتریک سازگاری بسیارخوبی دارند که حکایت از وجود ناهمسانگردی ناچیز در این ساختار بلوری دارد. مقدار موهومی تابع دی‌الکتریک برای این ترکیبات به ترتیباز انرژی‌های ۲ و ۱/۹۷ و ۱/۹۳ و ۱/۸۶ و۱/۸۳ الکترون‌ولت شروع به افزایش می‌کند که به این مقدار آستانه جذب انرژی گفته می‌شود. پیک‌های نمودار قسمت موهومی نشان دهنده گذارهای بین نواری است. برای آلیاژهای $Sr_{1-x}Ba_xTe$در فاز نمک‌طعام برای تمامی غلظت‌ها، اوربیتالp اتم تلوریوم به عنوان حالت اولیه و اوربیتالs اتم استرانسیوم برای غلظت(x=۱)، اوربیتال‌های s وpاتم استرانسیوم برای غلظت(x=۰/۵)،اوربیتال-sاتم‌های استرانسیوم و باریوم برای غلظت(x=۰/۲۵)، اوربیتال p اتم استرانسیوم برای غلظت(x=۰/۷۵)واوربیتالs اتم استرانسیوم برای غلظت (x=۰) به عنوان حالت‌های نهایی، نقش اصلی را در گذارهای بین نواری برعهده دارند.



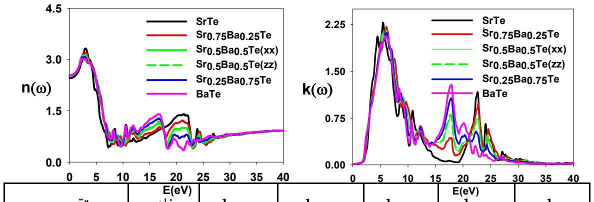
شکل۴:بخش حقیقی(چپ) و موهومی(راست) تابع دی‌الکتریک آلیاژهای $Sr_{1-x}Ba_xTe$در فاز نمک‌طعام

ضریب شکست یکی از پارامترهای مهم اپتیکی می باشد که به دو بخش حقیقی (ضریب شکست حقیقی $n(\omega)$)وبخش موهومی(ضریب خاموشی $k(\omega)$)تقسیم می‌شود که روابط آن‌ها به صورت زیر می‌باشد.

$$k(\omega)=\frac{[-\varepsilon_1+(\varepsilon_1^2+\varepsilon_2^2)^2]^{1/2}}{\sqrt{2}} \qquad (۷)$$

$$n(\omega)=\frac{[\varepsilon_1+(\varepsilon_1^2+\varepsilon_2^2)^2]^{1/2}}{\sqrt{2}} \qquad (۸)$$

طیف مربوط به ضریب شکست و ضریب خاموشی آلیاژهای $Sr_{1-x}Ba_xTe$ به ازای غلظت‌های مختلفx در فاز نمک طعام در شکل(۵) آورده شده است.



تقریب	فاز	b_{VD}	b_{CE}	b_{SR}	b_{bz}	b
PBE-GGA	NaCl	۰/۳۸	۰/۱۷	۰	۰/۵۵	۰/۵۹
	ZB	۰/۱۲	۰/۸۱	۰/۰۶	۰/۹۹	۰/۸۲
EV-GGA	NaCl	−۰/۲۲	۰/۹۷	۰	۰/۷۵	۰/۷
	ZB	−۰/۸۷	۰/۶۷	۰/۰۶	−۰/۱۴	−۰/۳۴

شکل۵ : طیف ضریب شکست(چپ) و ضریب خاموشی(راست) آلیاژهای $Sr_{1-x}Ba_xTe$ در فاز نمک‌طعام

ضریب خاموشی برای ترکیبات آلیاژی $Sr_{1-x}Ba_xTe$ به ازای غلظت‌های ۱و۰/۷۵ ، ۰/۵ ، ۰/۲۵ ، ۰x= به ترتیب برابر۳/۵۲ و۳/۳۶، ۳/۲۹، ۲/۰۸،۲/۱۶ الکترون ولت می‌باشند.مهم‌ترینپارامتردر نمودار ضریب شکست، مقادیر ضریب شکست در فرکانس صفر می‌باشد که ضریب شکست استاتیکی n(0)نامیده می‌شود. که این ضریب به ازای غلظت‌های ۱و۰/۷۵، ۰/۵، ۰/۲۵و ۰ x= به ترتیب-برابر۲/۵۲ و ۲/۵۳، ۲/۵۳۴، ۲/۴۵،۲/۵۳۰الکترون‌ولت بدست آمده است. ضریب شکست را می توان با استفاده از روابط تجربی‌به گاف نواری مربوط ساخت. در مدل Moss رابطه بین ضریب شکست و گاف انرژی به صورت زیر می‌باشد.

$$Egn^4 = k \qquad (۹)$$

که ثابتk ۱۰۸ eV= می باشد. در مدل [Ravindra۶]داریم.

$$n = \alpha + \qquad (۱۰)$$

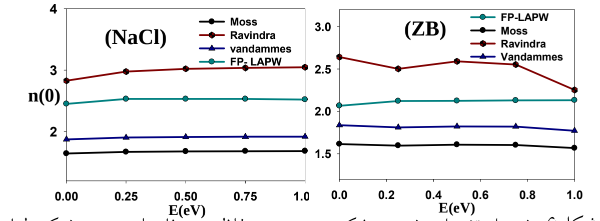
β EgError! Bookmark not defined.

ثابت‌های α و β به ترتیب برابرeV^{-1} ۴/۰۸۴و $^{-1}$ ۰/۶۲eV− می-باشند. در مدل [۷Vandammes]ضریب شکست طبق رابطه زیر محاسبه می‌شود.

$$n = \sqrt{1 + \left(\frac{A}{E_g + B}\right)^2} \qquad (۱۱)$$

که A ۱۳/۶ eV=و B ۳/۴ eV= می باشند.

در شکل(۶) مقادیر ضریب شکست حاصل از محاسبات با مقادیر حاصل از مدل‌های فوق مقایسه شده‌اند.همان‌طور که دیده می‌شود در فاز نمک‌طعام نتایج محاسبات انجام شده به مدل Ravindra و در فاز بلندروی به مدل Vandammesنزدیک تر است

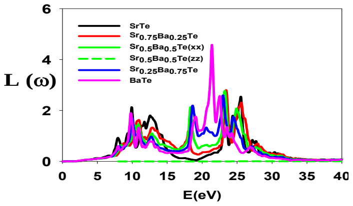


شکل۶ : نمودار تغییرات ضریب شکست برحسب غلظت در فاز بلندروی و نمک طعام با مدل‌های مختلف

اسپکتروسکوپی اتلاف انرژی الکترون روش قدرتمندی درتجزیه و تحلیل حالات تحریک شده بالای تراز فرمی یا تفکیکجزئی زیر نانومتر است.این طیف دربردارنده تحریک دسته‌جمعی الکترونهای ظرفیت (پلاسمونها) در داخل حالاتاشغال شده در نوار ظرفیت است. رابطه بین تابع دی‌الکتریک و تابع اتلاف انرژی به صورت زیرمی‌باشد.

$$EElS(\omega)/ (\varepsilon_1^2+\varepsilon_2^2)= Im [-1/\varepsilon(\omega)] =(\varepsilon_2) \qquad (۱۲)$$

طیف اتلاف انرژی برای آلیاژهای $Sr_{1-x}Ba_xTe$ به ازای غلظت‌های مختلف در شکل(۷) نشان داده شده است.



شکل۷ : طیف اتلاف آلیاژهای$Sr_{1-x}Ba_xTe$ در فاز نمک‌طعام

بلندترین‌پیک(پیک تشدید پلاسمونی) در نمودارتابع اتلاف آلیاژهای $Sr_{1-x}Ba_xTe$ به ازای مقادیر۱و۰/۷۵، ۰/۵، ۰/۲۵، ۰x=درانرژی‌های ۲۲/۵۱ و ۲۲/۹۸ ، ۲۳/۲۱ ، ۲۳/۴۴ ، ۲۵/۵۳ الکترون ولت رخ داده‌است. در فرکانس‌های بالاتر از فرکانس پلاسما، آلیاژها معمولاًرفتار فلزی از خود نشان می‌دهند.به طورکلیمی‌توان گفت که با افزایش ناخالصیاتم باریوم نمودار به سمت انرژی‌های کمتر انتقال می‌یابد.

نتیجه گیری

در آلیاژ$Sr_{0.5}Ba_{0.5}Te$سهم عمده حالت‌های زیر سطح فرمی مربوط به اوربیتال P اتم تلوریوم و بالای سطح فرمی عمدتاً مربوط به اوربیتالd اتمهای استرانسیوم و باریوم می‌باشد. پیک‌های نمودار قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک بیان کننده گذارهای بین نواری است. فرکانس پلاسما در آلیاژهای $Sr_{1-x}Ba_xTe$به ازای مقادیر۱و۰/۷۵، ۰/۵، ۰/۲۵، ۰x=به ترتیب متناظر با انرژی‌های ۲۲/۵۱ و ۲۲/۹۸ ، ۲۳/۲۱ ، ۲۳/۴۴ ، ۲۵/۵۳ الکترون ولت می‌باشند. مقادیر ضریب شکست با افزایش غلظت اتم باریوم تا غلظت ۰/۵ افزایش و سپس روند کاهشی دارند.

مرجع‌ها

[1] R. Khenata, H. Baltache, M. Rerat, M. Driz, M. Sahnoun, B. Bouhaf and B. Abbar, Physica B 339. **(2003)** 208–215.
[2] Liwei Shi, YifengDuan, XianqingYang and LixiaQin, Physica B 406 **(2011)** 181–186.

[3] A. Bouhemadou, R. Khenata, F. Zegrar, M. Sahnoun, H. Baltache and A.H. Reshak, , Published in "Computational Materials Science 2 **.(2006)** 263-270.
[4] L.Vegard, , Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology, J. Membr. Sci., 350, p.(**1921)** 333–339.
[5] J. E. Bernard, A. Zunger, 1986, Phys. Rev. B 34 **(1986)** 5992
[6] N. M. Ravindra, S. Auluck, V.K. Srivastava, Phys. Stat. Sol. b 93.(**1979)** 155.
[7] J. P. L. Herve, L.K.J. Vandamme, , Infrared Phys. Technol**.** 35. **(1994)** 609.

مطالعه خواص ساختاری، الکترونی و اپتیکی آلیاژهای $Cd_{1-x}Mg_xSe$ بر پایه اصول اولیه

احمدیان ، فرزاد[۱] ؛ کهیش سرداری، مهتاب [۲]

[۱] گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه آزاد اسلامی واحد شهرضا، شهرضا

[۲] گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه آزاد اسلامی واحد شهرضا، شهرضا

چکیده

در این مطالعه، خواص ساختاری، الکترونی و اپتیکی آلیاژهای $Cd_{1-x}Mg_xSe$ با استفاده از روش امواج تخت بهبود یافته خطی با پتانسیل کامل در چارچوب نظریه تابعی چگالی بررسی شد. برای این آلیاژها پارامترهای شبکه، مدول حجمی، انرژی بستگی، گاف نوار انرژی و چگالی حالتهای الکترونی محاسبه شد.علاوه بر این، ما به محاسبه پارامترهای اپتیکی (بخشهای حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک، تابع اتلاف انرژی و ضریب شکست) پرداخته ایم. نتایج مشخص می کنند که حالتهای Se 4p نقش حالتهای اولیه و حالتهای Cd 5s, Mg 3s و Se3s نقش حالتهای نهایی را در گذارهای اپتیکی بازی می کنند.

First principles calculations of structural electronic , and optical properties of zinc blende $Cd_{1-x}Mg_xSe$ alloys

Farzad, Ahmadian[1]; Mahtab, Kahyash Sardari [2]

[1] Physics Groups, Department of Science, Islamic Azad University, Shahreza Branch, Shahreza
[2] Physics Groups, Department of Science, Islamic Azad University, Shahreza Branch, Shahreza,

Abstract

In this study, the structural, electronic and optical properties of $Cd_{1-x}Mg_xSe$ ternary alloys were investigated using FPLAPW method within density functional theory (DFT). For these alloys lattice parameters, bulk modulus, cohesive energy, band gap energy and density of states were calculated. Besides, we have calculated the optical parameters (the real and imaginary dielectric functions, energy loss function, and refractive index) of these semiconductor alloys. The results indicate that the Se 4p states are initial states while Cd 5s, Mg 3s and Se 3s states are final states in the optical transitions.

PACS No. *(۷۱, ۷۸)*

مقدمه

نیمرساناهای گروه II-IV به دلیل گاف پهن نواری و قابلیت کاربرد برای قطعات اپتوالکترونیک بسیار مورد توجه قرار گرفته اند.انرژی گاف آن ها بین ۱تا ۳ الکترون ولت می باشد، از اینرو ابزار مناسبی برای این قطعات در ناحیه مرئی طیف هستند[۱]. نیمرساناهای II-IV شامل Mg با گاف پهن نواری، برای قطعات اپتوالکترونیک به کار می روند[۲] از اینرو از این مواد برای ساختن آشکارسازهای پرتو x و γ استفاده شده است. آلیاژهای $Cd_{1-x}Mg_xS$ که به آلیاژهای ترکیبی معروف هستند دارای گاف های مستقیم و بزرگ می باشند و همواره از نظر تکنولوژی مد نظر بوده اند[۳]. خواص ساختاری، ترابری و اپتیکی این نیمرساناها با تغییر مقدار x تغییر می کند و از این نظر این مواد کاربردهای زیادی دارند[۴] و در زمینه های مختلف علمی و فناوری، پزشکی، زیست فناوری و ساخت وسایل الکترونیکی استفاده می شوند[۵]. علیرغم اهمیت و کاربردهای فراوان این آلیاژها تا کنون هیچ مطالعه ای بر

روی خواص ساختاری، الکترونی و اپتیکی این آلیاژها صورت نگرفته است.

روش انجام محاسبات

محاسبات بر پایهٔ نظریهٔ تابعی چگالی و بـه روش امـواج تخـت بهبود یافتهٔ خطی با پتانسیل کامل (FPLAPW) و با استفاده از نرم افزار محاسباتی WIEN2K صورت گرفته است. در این محاسبات پارامتر R_{kmax} (R شعاع کـوچکترین کـره مـوفین تـین و Kmax بردار موج قطع است) برابـر ۸ در نظـر گرفتـه شـده اسـت. تعـداد ۲۲۰۰ نقطعــه k بــرای همگرایــی انــرژی در منطقـهٔ اول بریلـوئن انتخاب شده است که ایـن تعـداد بـرای محاسـبهٔ خـواص اپتیکـی ترکیبات سه تایی به ۱۰۰۰۰ و برای ترکیبات دوتایی به ۸۰۰۰ نقطه افــزایش یافتــه اســت. در محاســبات از دو تقریــبEV-GGA و PBE-GGA استفاده شده است.

نتایج و بحث

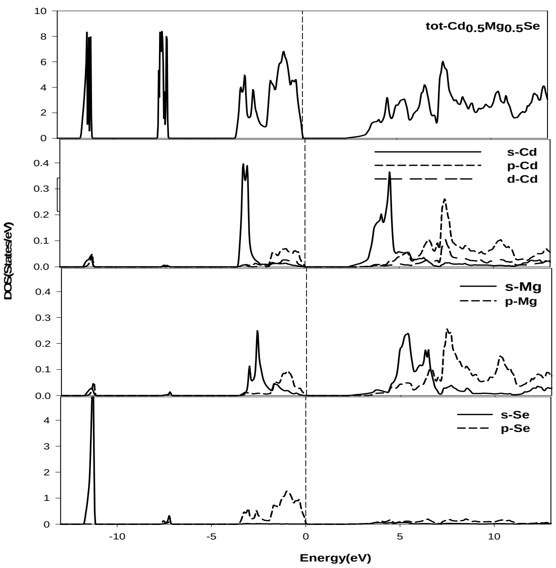
ساختار بلوری آلیاژهای $Cd_{1-x}Mg_xSe$ به ازای مقادیر x=۰،۱ ترکیبات CdSe وMgSe با گروه فضایی (F43m) می باشد که در یاخته بسیط آنها دو اتم یکی در مکان (۰و۰و۰) و دیگری در مکان (۱/۴و۱/۴و۱/۴) قرار گرفته است. برای مقادیر x=۰/۲۵و۰/۷۵ شبکه مکعبی ساده شامل ۸ اتم با گروه فضایی P-43m ایجاد می شود و به ازای x=۰/۵، ساختار تتراگونال شامل ۴ اتم با گروه فضایی P-42m می باشد. برای محاسبه پارامترهای ساختار تعادلی این آلیاژها، انرژی کل بلور بر حسب حجم یاخته بسیط محاسبه و با معادله حالت بریش مورناگون برازش داده می شود. پارامترهای ساختار تعادلی نمودار انرژی بر حسب حجم در جدول ۱ گزارش شده است.

جدول۱:مقادیر پارامتر شبکه(a,c)، مدول حجمی(B)، انرژی ترکیبی(E_{mix}) و انرژی بستگی (E_c)

$Cd_{1-x}Mg_xSe$	a (A^0)	B(GPa)	Emix(Ry)	Ec(Ry)
CdSe	۶/۲	۴۴/۰۷	۰	-۰/۴۰
$Cd_{0.75}Mg_{025}Se$	۶/۱۶	۴۴/۳۱	۰/۰۰۱۲	-۰/۴۴
$Cd_{0.5}Mg_{0.5}Se$	a=۴/۳۲ c=۶/۱۱	۴۴/۴۵	۰/۰۰۱۵	-۰/۴۷
$Cd0_{.25}Mg_{0.75}Se$	۶/۰۶	۴۴/۴۸	۰/۰۰۱۳	-۰/۵۱
MgSe	۶	۴۴/۳۶	۰	-۰/۵۵

برطبق مقادیر جدول ۱، با افزایش غلظت اتم Mg، پارامتر شبکه افزایش می یابد که این ناشی از شعاع اتمی بزرگ اتم Mg نسبت به اتم Cd است. همچنین با افزایش غلظت اتم Mg، انرژی بستگی کاهش می یابد که حکایت از پایداری بیشتر آلیاژ دارد.

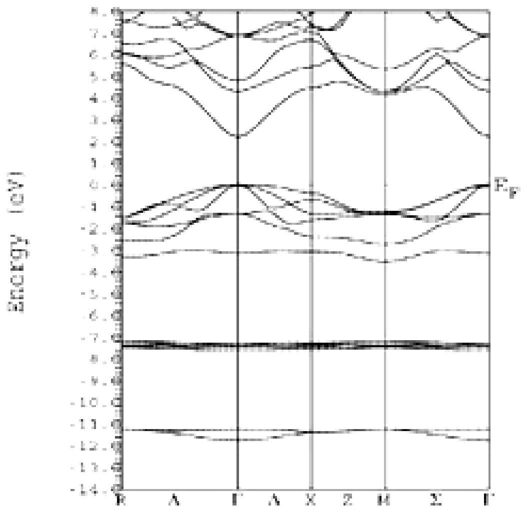
چگالی حالتهای کلی وجزئی یک بلور که نشان دهنده نحوه توزیع حالتهای الکترونی بلور در نواحی مختلف انرژی است برای تمامی آلیاژها محاسبه شده است، که در شکل ۱ چگالی حا لت های کلی و جزئی آلیاژ $Cd_{0.5}Mg_{0.5}Se$ نشان داده شده است.



شکل ۱: چگالی حالت های کلی و جزئی آلیاژ $Cd_{0.5}Mg_{0.5}Se$

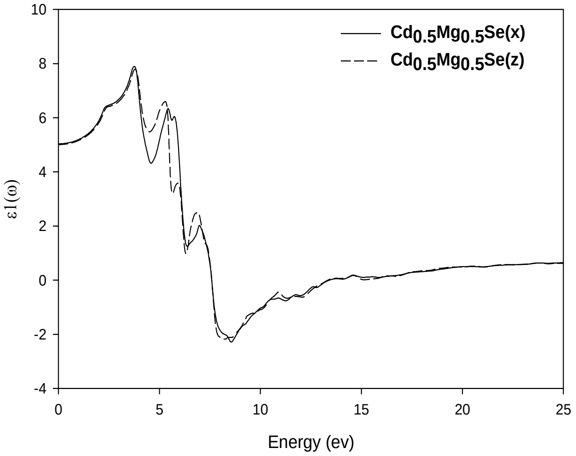
طبق شکل ۱ سهم عمده حالت های اشغال شده مربوط به اربیتال های p اتم s،Se وp اتم Mg وs اتم Cd می باشد و اربیتال s اتم Se کاملا جایگزیده است و در رسانش شرکت نمی کند. همچنین محاسبات ساختار نواری برای تمامی آلیاژها با استفاده از دو تقریب EV-GGA وPBE-GGA انجام شده است. محاسبات ساختار نواری نشان می دهد که همه این ترکیبات، نیمرسانا و دارای گاف نواری مستقیم در نقطه Γ در مرکز منطقه اول بریلوئن هستند. مقادیر گاف انرژی آلیاژها به ازای مقادیر ۱، ۰/۷۵، ۰/۵، ۰/۲۵، x=۰، با استفاده از تقریب EV-GGA به ترتیب(۳/۵۹، ۲/۸۹، ۲/۱۹، ۱/۶۶، ۱/۲۳) و با استفاده از تقریب PBE-GGA (۲/۶۷، ۲/۲۴، ۱/۵۱، ۱، ۰/۲۸) می باشد، که نشان مید هد مقادیر گاف انرژی با استفاده از تقریب EV-GGA بهبود یافته اند. نمودار

ساختار نواری به عنوان نمونه برای آلیاژ $Cd_{0.5}Mg_{0.5}Se$ در شکل ۲ آورده شده است.



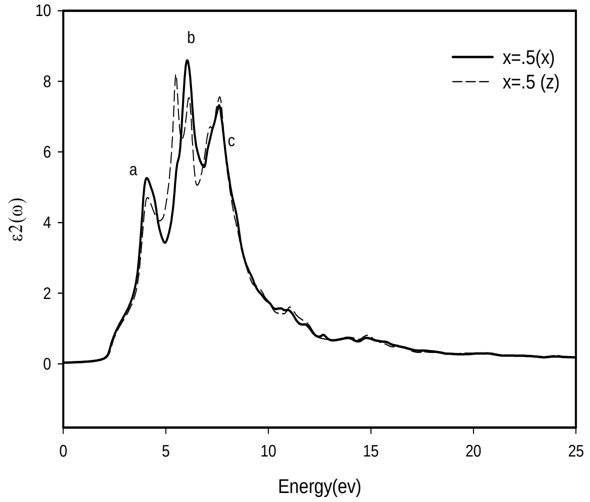
شکل۲: ساختار نوار ظرفیت ترکیب $Cd_{0.5}Mg_{0.5}Se$

ویژگی های اپتیکی مواد با محاسبهٔ تابع دی الکتریک $\varepsilon(\omega)$ بررسی می شوند. تابع دی الکتریک دارای دو سهم درون نواری و بین نواری است که سهم درون نواری برای فلزات به کار می رود. در اینجا برای محاسبهٔ خواص اپتیکی از گذارهای بین نواری مستقیم که شامل پراکندگی فونون هاست و همچنین دارای سهم اندکی در تابع دی الکتریک است چشم پوشی می کنیم. در شکل۶، قسمت حقیقی تابع دی الکتریک که با به کارگیری تبدیلات کرامرز کرونیگ محاسبه می شود برای آلیاژ $Cd_{0.5}Mg_{0.5}Se$ نشان داده شده ا ست.



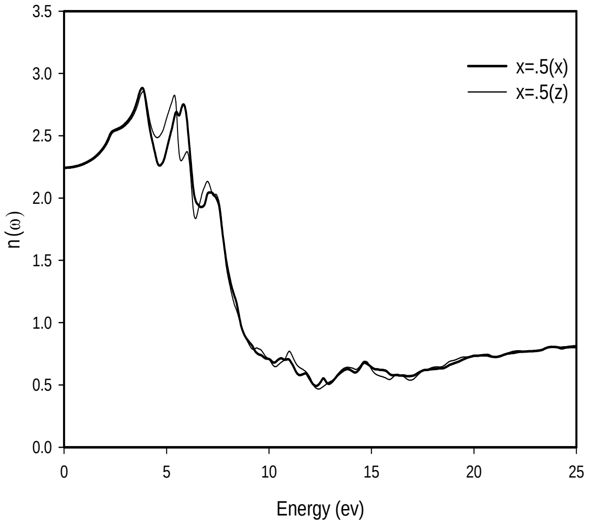
شکل۳: بخش حقیقی تابع دی الکتریک آلیاژ Cd0.5Mg0.5Se

طبق شکل ۳ برای آلیاژهای $Cd_{1-x}Mg_xSe$ به ازای مقادیر ۱، ۰/۷۵، ۰/۵، ۰/۲۵، ۰=x(از چپ به راست) یک پیک قابل توجه در مکان های ۳/۴۳، ۳/۵۱، ۳/۷۱، ۵/۷۸، ۵/۲ الکترون ولت وجود دارد.پس از آن یک کاهش قابل ملاحظه در گستره (۷/۳۰-۸/۱۷)،(۷/۹۱-۶/۹۸)،(۷/۳-۸/۰۲)،(۷/۰۸-۸/۰۲)،(۷/۷۰-۸/۶۴) دیده می شود که پس از آن $\varepsilon_1(\omega)$ برای تمام ترکیبات منفی می شود. همچنین مقادیر ثابت دی الکتریک استاتیک محاسبه شده برای این ترکیبات به ترتیب مقادیر ۴/۱۶، ۴/۵۸، ۵/۰۴، ۵/۵۸، ۶/۲۴ می باشد. بخش موهومی تابع دی الکتریک $\varepsilon_2(\omega)$ آلیاژ $Cd_{0.5}Mg_{0.5}Se$ در شکل ۴ نشان داده شده است. پیکهای عمده در قسمت موهومی دی الکتریک با حروف a,b,c مشخص شده اند.



شکل ۴: بخش موهومی تابع دی الکتریک الیاژهای $Cd_{0.5}Mg_{0.5}Se$

با توجه به شکل۴ و همچنین چگالی حالتها وطبق آنالیز نواری صورت گرفته نتیجه می شود که اربیتال 4p در اتم Se به عنوان حالت اولیه و اربیتالهای 5s در اتم Cd و 3s در اتم Mg و 4p اتم Se به عنوان حالتهای نهایی نقش اصلی را در گذارهای اپتیکی بر عهده دارند. در ادامه طیف مربوط به ضریب شکست n(ω) برای آلیاژ $Cd_{0.5}Mg_{0.5}Se$ در شکل ۵ نشان داده شده است.



شکل ۵: طیف ضریب شکست آلیاژ $Cd_{0.5}Mg_{0.5}Se$

شکل مذکور نشان می دهد که مقدار ضریب شکست در فرکانس صفر به ازای ۱، ۰/۷۵، ۰/۵، ۰/۲۵، x=۰ به ترتیب برابر ۲/۰۵، ۲/۱۳، ۲/۲۳، ۲/۳۶، ۲/۵ می باشد. در نهایت با استفاده از بخش های حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک، مقدار تابع اتلاف انرژی برای تمامی آلیاژها محاسبه شده است. این تابع دارای یک پیک عمده می باشد که به اصطلاحا به فرکانس پلاسما معروف است و مقدار آن برای آلیاژ $Cd_{0.5}Mg_{0.5}Se$ به ازای ۱، ۰/۷۵، ۰/۵، ۰/۲۵، x=۰ به ترتیب برابر ۱۶/۹۲، ۱۶/۸۲، ۱۶/۹۸، ۱۶/۹۲، ۱۷/۰۸، ۱۷/۳۴ می باشد.

نتیجه گیری

با بکارگیری روش (FP-LAPW) در چارچوب نظریه تابعی چگالی خواص ساختاری، الکترونی واپتیکی ترکیب نیمرساناهای $Cd_{1-x}Mg_xSe$ بررسی شد. نتایج ساختار نواری نشان میدهد که این ترکیبات دارای گاف نواری مستقیم در نقطه Γ می باشند. محاسبات مربوط به چگالی حالت ها حاکی از آن است که حالت-های 4p اتم Se بعنوان حالت اولیه و حالت‌های 5s اتم Cd، 3s اتم Mg و 4p اتم Se بعنوان حالت نهایی نقش اصلی را در انتقالهای بین نواری در طیف‌های اپتیکی بر عهده دارند. همچنین طیف های اپتیکی برای تمامی آلیاژها به دست آمد. لازم به ذکر است که فرکانس پلاسما برای آلیاژ مذکور به ازای ۱، ۰/۷۵، ۰/۵، ۰/۲۵، x=۰ به ترتیب برابر ۱۶/۹۲، ۱۶/۸۲، ۱۶/۹۸، ۱۶/۹۲، ۱۷/۰۸، ۱۷/۳۴ می باشد.

مرجع ها

[1] X. Liu and J. K. Furdyna; J. Appl. Phys. **95** (2004) 7754.
[2] M.A. Hasse, J. Qiu, J.M. DePuydt, H. Cheng, Appl. Phys. Lett. **59**(1991) 1272.
[3] A. Marini, C. Hogan, M. Grüning, and D. Varsano, Comput. Phys. Commun. **180**, 1392 _.
[4] M.C.GUPTA,J,JBallato(Eds),Handbook of photonics ,Tylor and Francis.2006
[5] Katayama, K., et al., *ZnSe-based white LEDs.* Journal of Crystal Growth, 2000. **214-215**:.

خواص ساختاری، الکترونی و اپتیکی آلیاژهای $Ba_{1-x}Mg_xSe$ (۱ ،۰/۷۵، ۰/۵، ۰/۲۵، ۰=x)

احمدیان ، فرزاد ؛ زنگنه نژاد، فرشته

گروه فیزیک، دانشگاه آزاد اسلامی واحد شهرضا

چکیده

در این مطالعه خواص ساختاری، الکترونی و اپتیکی آلیاژهای $Ba_{1-x}Mg_xSe$ بااستفاده از روش امواج تخت بهبود یافته خطی با پتانسیل کامل(FP-LAPW) و در چارچوب نظریه تابعی چگالی مورد بررسی قرار گرفت. در بخش خواص ساختاری، پارامترهای شبکه و مدول حجمی به ازای غلظت‌های مختلف در دو فاز نمک - طعام و بلند روی محاسبه و با نتایج قانون وگارد مقایسه شد. در بخش خواص الکترونی، گاف‌های نواری آلیاژهای مختلف با دو تقریب PBE-GGA و EV-GGA محاسبه شد. در بخش خواص اپتیکی، بخش‌های حقیقی $\varepsilon_1(\omega)$ و موهومی $\varepsilon_2(\omega)$ تابع دی‌الکتریک، تابع اتلاف انرژی الکترون $L(\omega)$ و ضریب شکست $n(\omega)$ آلیاژهای مختلف محاسبه و مورد تجزیه و تحلیل قرار گرفت.

The structural, electronic and optical properties of $Ba_{1-x}Mg_xSe$ (x=0, 0.25, 0.5, 0.75, 1) alloys

Ahmadian, Farzad; Zangeneh nejad, Fereshteh

Department of Physics, Shahreza branch, Islamic Azad University, Shahreza, Iran

Abstract

In this study, the structural, electronic and optical properties of $Ba_{1-x}Mg_xSe$ were investigated using full potential linearized augmented plane wave (FPLAPW) method within density functional theory (DFT). In section of structural properties, the lattice parameters and bulk moduli at different concentrations in both NaCl and zincblende phases were calculated and compared with Vegard's law. In section of electronic properties, the energy band gap values for $Ba_{1-x}Mg_xSe$ were estimated using both PBE-GGA and EV-GGA schemes. In section of optical properties, the real part $\varepsilon_1(\omega)$ and imaginary part $\varepsilon_2(\omega)$ of the dielectric function, energy loss function $L(\omega)$ and refractive index $n(\omega)$ for different alloys were calculated and analyzed.

PACS No. 70, 71, 78

مقدمه

اجسام نیمه‌رسانا گروهی از مواد هستند که از نظر الکتریکی بین هادی‌ها و مواد عایق قرار دارند. نیمه‌رساناهای گروه II -VI از جمله BaSe و MgSe به علت گاف نواری بزرگ و ثابت دی-الکتریک کوچک در صنایع اپتیکی با طول موج آبی و فرابنفش و صنایع الکترونیکی دمای بالا مورد استفاده قرار می‌گیرند. به علاوه این نیمه‌رساناها به دلیل سختی بالا، نقطه ذوب بالا، رسانندگی گرمایی و مدول حجمی بالا یک انتخاب مناسب برای پوشش‌های محافظ می‌باشند[۱]. تاکنون مطالعات زیادی بر روی دو ترکیب نیمه‌رسانای BaSe و MgSe انجام شده است. از مطالعات انجام گرفته بر روی ترکیب‌های BaSe و MgSe می‌توان به بررسی خواص ساختاری و الکترونی این دو ترکیب توسط مدیو و همکارانش اشاره کرد[۲]. در این تحقیق خواص ساختاری، الکترونی و اپتیکی آلیاژهای $Ba_{1-x}Mg_xSe$ (۱و۰/۷۵ ،۰/۵ ،۰/۲۵ ،۰ = x) مورد بررسی قرار گرفته است.

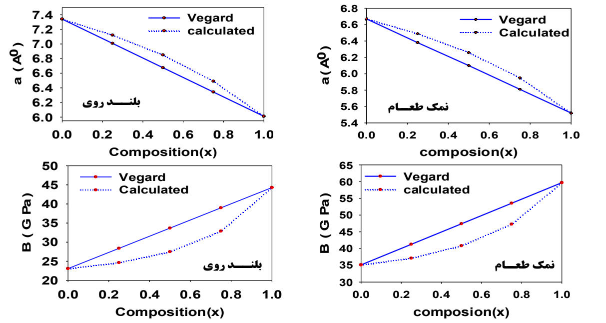
روش محاسبات

محاسبات، با استفاده از روش FP-LAPW در چارچوب نظریه تابعی چگالی و با کد محاسباتی Wien2k انجام شده است[۳] .تعداد نقاط k در منطقه اول بریلوئن برای محاسبات خواص اپتیکی به ازای غلظتهای (۱و۰/۷۵ ،۰/۵ ،۰/۲۵ ،۰ = x) در فاز نمک طعام به ترتیب برابر۸۷۰۰ و۹۳۰۰ ،۱۱۵۰۰ ،۸۱۰۰ ،۸۸۰۰،

در فاز بلند روی برابر ۸۷۰۰ و ۱۰۵۰۰، ۸۰۰۰، ۸۲۰۰ ، ۹۶۰۰انتخاب شده است.در این محاسبات پارامتر شعاع کره موفین‌تین(R_{mt}) برای هر سه اتم Ba ،Mg وSe برابر ۲a.u، $R_{mt}K_{max}$ برابر ۸ و بردار موج قطع برای بسط پتانسیل و چگالی بار در ناحیه بین جایگاهی(G_{max}) ، برابر $^{-1}$(a.u)۱۲ انتخاب شده است.

خواص ساختاری

پارامترهای شبکه تعادلی (a) و مدول حجمی (B)، برای آلیاژهای $Ba_{1-x}Mg_xSe$ در دو فاز نمک‌طعام و بلندروی محاسبه و با مقادیر حاصل از قانون وگارد[۴]، در شکل (۱) مقایسه شده است.



شکل ۱: مقایسه مقادیر ثابت شبکه و مدول حجمی محاسبه شده و مقادیر حاصل از قانون وگارد در فازهای نمک طعام و بلند روی

نتایج حاصل از محاسبات حاضر دارای انحرافی از قانون وگارد است. برای محاسبه میزان این انحراف، مقادیر پارامترهای بدست آمده را با یک معادله درجه دوم برازش داده‌ایم. در این معادلات، ضریب درجه دوم میزان انحراف از قانون وگارد را نشان می‌دهد.

(۱) فاز نمک‌طعام $a(x) = -0.66x^2 - 0.47x + 6.6$

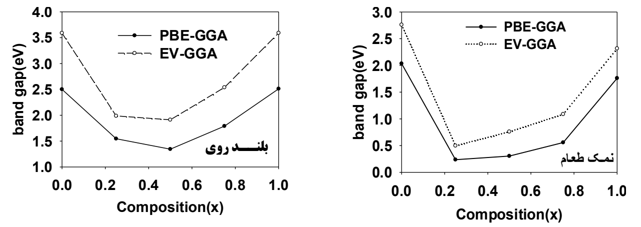
(۲) فاز بلندروی $a(x) = -0.7x^2 - 0.62x + 7.33$

(۳) فاز نمک‌طعام $B(x) = 26.92x^2 - 3.23x + 35.52$

(۴) فاز بلندروی $B(x) = 25.44x^2 - 5.17x + 23.51$

خواص الکترونی

به طور کلی ساختار نواری، اطلاعات مفیدی در ارتباط با نوع ماده اعم از رسانا، نیمه‌رسانا و عایق بودن را در اختیار ما قرار می‌دهد. بدین منظور مقادیر گاف نواری به ازای تمامی غلظت‌ها در دو فاز نمک طعام و بلندروی با دو تقریب PBE-GGA و EV-GGA محاسبه شده و در شکل (۲) مقایسه شده است. همان طور که دیده می‌شود تقریب EV-GGA ، برای گاف نواری مقادیر بزرگتری نسبت به PBE-GGA معرفی می‌کند. گاف نواری در هر دو فاز برای ترکیب BaSe به صورت غیرمستقیم $\Gamma\text{–}X$ و برای ترکیب MgSe در فاز بلند روی مستقیم در نقطه Γ و در فاز نمک-طعام غیر مستقیم $\Gamma\text{–}X$ می باشند. گاف نواری در ترکیبات آلیاژی سه‌تایی به جز ترکیبات $Ba_{0.5}Mg_{0.5}Se$ و $Ba_{0.25}Mg_{0.75}Se$ در فاز بلند روی، به صورت مستقیم در نقطه Γ می باشند. نتایج نشان می‌دهد که گاف نواری محاسبه شده با تقریب EV-GGA به مقادیر تجربی در دسترس نزدیک‌تر است که علت آن محاسبه دقیق‌تر پتانسیل همبستگی به کمک این تقریب می‌باشد. برای مثال، گاف نواری محاسبه شده برای ترکیب MgSe در فاز نمک طعام با تقریب EV-GGA (۲/۳۲eV)در مقایسه با گاف نواری محاسبه شده با تقریب PBE-GGA (۱/۷۶eV) به مقدار تجربی (۲/۴۷eV) نزدیکتر است.



شکل ۲:مقایسه گاف نوار انرژی با دو تقریب PBE-GGAوEV-GGA

در ادامه میزان خمش مقادیر گاف نواری از قانون وگارد محاسبه شده است. همچنین پارامتر خمش با روش برنارد زونگر [۵] محاسبه و با پارامترهای خمش بدست آمده از معادلات درجه دوم در جدول(۱) مقایسه شده است. پارامتر خمش گاف در قانون برنارد زونگر(b_{bz}) توسط رابطه زیر محاسبه می‌شود.

$$b_{bz} = b_{VD} + b_{CE} + b_{SR} \quad (۶)$$

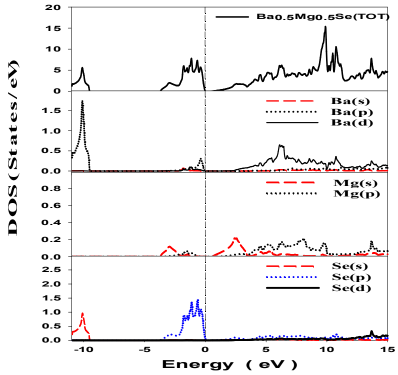
که b_{VD} سهم تغییر حجم بلور، b_{CE} سهم تبادل بار و b_{SR} سهم واهلش ساختاری در پارامتر خمش است.

جدول۱: مقایسه پارامتر خمش روش برنارد(b_{bz}) و روش محاسبات حاضر(b)

تقریب	فاز	b_{VD}	b_{CE}	b_{SR}	b_{bz}	b
PBE-GGA	نمک طعام	۳/۱۲	۳/۲۶	۱/۲	۷/۵۸	۷/۰۶
	بلندروی	۲/۱۲	۲/۵۱	۰/۱۶	۴/۸	۴/۵۵
EV-GGA	نمک طعام	۳/۲۲	۴/۷	۲/۲۴	۱۰/۱۶	۸/۰۶
	بلندروی	۳/۰۲	۳/۶۸	۲/۴۴	۹/۱۴	۶/۸۵

با توجه به جدول (۱)، مشاهده می‌شود که نتایج حاصل از روش برنارد زونگر با نتایج محاسبات ما در فاز نمک طعام توافق خوبی دارد. شکل (۳)، نمودار چگالی حالت‌های الکترونی (DOS) آلیاژ $Ba_{0.5}Mg_{0.5}Se$ در فاز نمک طعام آورده شده است. در این آلیاژ

سهم عمده حالت‌های زیر سطح فرمی مربوط به اوربیتالp اتم سلنیوم می‌باشد. پیک اول بالای سطح فرمی مربوط به اوربیتال s اتم منیزیوم است و حالت‌های الکترونی بعد از آن عمدتاً به اوربیتال d اتم باریم، همراه با سهم اندکی از اوربیتال p اتم منیزیوم مربوط می‌شود.



شکل۳ : چگالی حالت‌های الکترونی آلیاژ $Ba_{0.5}Mg_{0.5}Se$ در فاز نمک طعام

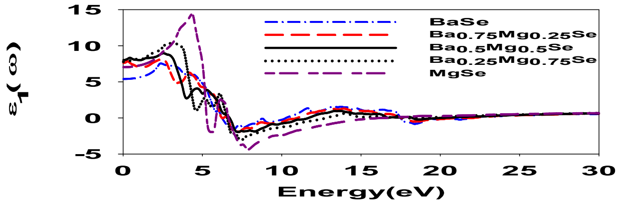
خواص اپتیکی

خواص اپتیکی جامدات به عنوان مهم‌ترین ابزار، برای مطالعه ساختار نوارانرژی بلور، ارتعاشات شبکه و ... به شمار می‌آید.تابع دی الکتریک $\varepsilon(\omega)$ یک بلور که در آن وابستگی به بسامد و بردار موج قوی است، پیامدهای چشمگیری در مورد ویژگی‌های فیزیکی جامدات دربردارد. نمودارهای بخش حقیقی $\varepsilon_1(\omega)$و موهومی $\varepsilon_2(\omega)$ تابع دی‌الکتریک بر حسب انرژی فوتون فرودی آلیاژهای $Ba_{1-x}Mg_xSe$ در فاز نمک طعام به ترتیب در شکل‌های (۴) و (۵) نشان داده شده است. ثابت دی الکتریک استاتیک، بخش حقیقی تابع دی‌الکتریک به ازای فرکانس صفر $\varepsilon_1(0)$ می‌باشد. این مقادیر برای دو فاز نمک طعام و بلندروی در جدول(۲) آورده شده است. نتایج نشان می‌دهد که مقادیر بدست آمده در توافق نسبتاً خوبی با نتایج دیگران است.

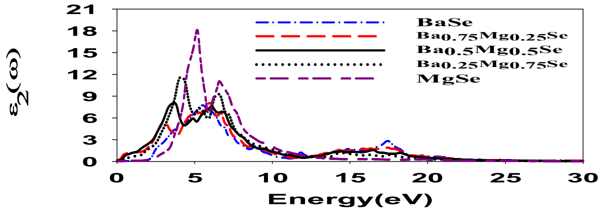
جدول۲: ثابت دی‌الکتریک استاتیکی آلیاژهای $Ba_{1-x}Mg_xSe$برای مقادیر مختلف x

نام آلیاژ	فاز نمک طعام		فاز بلندروی	
	کار حاضر	کار دیگران	کار حاضر	کار دیگران
BaSe	۵/۳۹	--	۴/۳۰	--
$Ba_{0.75}Mg_{0.25}Se$	۷/۶۳	--	۴/۷۵	--
$Ba_{0.5}Mg_{0.5}Se$	۸/۰۱	--	۵/۰۷	--
$Ba_{0.25}Mg_{0.75}Se$	۷/۷۷	--	۵/۲۱	--
MgSe	۷/۰۲	۶/۸۵[۶]	۵/۰۳	۵/۱۷[۶]

پیک‌های متعددی که در نمودار قسمت موهومی تابع دی الکتریک در محدوده ۰ تا۷ الکترون ولت مشاهده می‌شود متناظر با گذارهای بین نواری می‌باشد. به کمک آنالیز نواری مشخص شد که در فاز نمک طعام، برای تمامی غلظت‌ها، اوربیتالp اتم سلنیوم به عنوان حالت اولیه و اوربیتال d اتم باریم به همراه سهم اندکی از p اتم سلنیوم برای غلظت x=۱، اوربیتال‌های s و p اتم منیزیوم برای x=۰/۲۵، اوربیتال d اتم باریم به همراه سهم اندکی از اوربیتال‌های sو p اتم منیزیوم برای۰/۵و x=۱ به عنوان حالت‌های نهایی، نقش اصلی را در گذارهای بین نواری برعهده دارند.



شکل۴:بخش حقیقی تابع دی‌الکتریک آلیاژهای$Ba_{1-x}Mg_xSe$در فاز نمک طعام

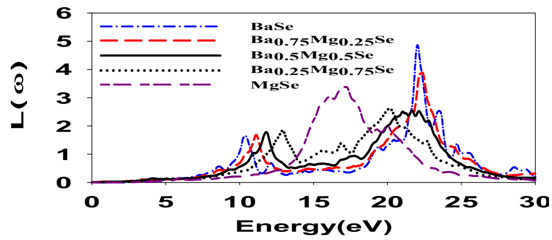


شکل۵:بخش موهومی تابع دی‌الکتریک آلیاژهای $Ba_{1-x}Mg_xSe$ درفاز نمک‌طعام

تابع اتلاف انرژی الکترون $L(\omega)$ یکی از مهم‌ترین کمیتهای اپتیکی می‌باشد. این تابع متناسب با احتمال اتلاف انرژی در واحد طول، برای یک الکترون در حال عبور از محیط است و به صورت زیر می‌باشد.

$$L(\omega) = -\operatorname{Im}(\frac{1}{\varepsilon}) = \frac{\varepsilon_2(\omega)}{\varepsilon_1^2(\omega)+\varepsilon_2^2(\omega)} \qquad (۷)$$

شکل (۶)، طیف اتلاف انرژی الکترون آلیاژهای $Ba_{1-x}Mg_xSe$ به ازای غلظت‌های مختلف را نشان می‌دهد.



شکل۶ : طیف اتلاف انرژی آلیاژهای $Ba_{1-x}Mg_xSe$ در فاز نمک‌طعام

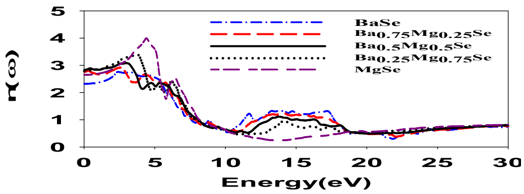
شاخص‌ترین قله در نمودار تابع اتلاف آلیاژهای $Ba_{1-x}Mg_xSe$ به ازای مقادیر۰/۱،۷۵، ۰/۵، ۰/۲۵، x= ۰ در فاز نمک طعام به ترتیب

در انرژی‌های ۲۳/۲۲،۳۸/۰۲، ۲۱/۵۳، ۲۰/۱۷ و۱۶/۹۶ و برای فاز بلند روی در انرژی‌های۲۱/۱۰، ۱۹/۶۶، ۲۰/۱۵، ۱۹/۳۰و۱۶/۸۸ الکترون‌ولت قرار دارد که به عنوان قله پلاسمونی (فرکانس پلاسما) شناخته می‌شوند و بیانگر برانگیختگی‌های جمعی چگالی بار الکترونی در بلور می‌باشند.

یکی دیگر از پارامترهای مهم اپتیکی، ضریب شکست است که از رابطه زیر بدست می‌آید

$$n(\omega) = \sqrt{\frac{\sqrt{\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)} + \varepsilon_1(\omega)}{2}} \qquad (۸)$$

نمودار ضریب شکست آلیاژهای $Ba_{1-x}Mg_xSe$ به ازای مقادیر مختلف x در فاز نمک طعام در شکل(۷) ترسیم شده است.



شکل۷ : طیف ضریب شکست آلیاژهای $Ba_{1-x}Mg_xSe$ در فاز نمک‌طعام

ضریب شکست استاتیکی مواد برابر با ضریب شکست به ازای فرکانس صفر می‌باشد. این مقادیر در فاز نمک طعام به‌ازای مقادیر ۱،۰/۷۵، ۰/۵، ۰/۲۵، ۰ =x به ترتیب برابر ۲/۳۲، ۲/۷۶، ۲/۸۳، ۲/۷۸ و ۲/۶۵ و در فاز بلند روی به ترتیب برابر ۲/۰۷، ۲/۱۸، ۲/۲۵، ۲/۲۸ و ۲/۲۴ بدست آمده است. همچنین ضریب شکست با استفاده از سه مدل Moss [۷]، Ravindra [۸]و Vandamme [۹]محاسبه شد. روابط این سه مدل به شرح زیر است:

۱- مدل Moss $\qquad E_g n^4 = k$

که E_g گاف انرژی و ثابت k برابر ۱۰۸ eV می‌باشد.

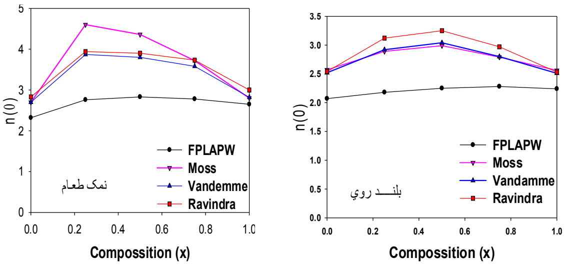
۲- مدل Ravindra $\qquad n = \alpha + \beta E_g$

مقادیر α و β به ترتیب برابر $4/084\ eV^{-1}$ و $-0/62\ eV^{-1}$ می‌باشند.

۳- مدل Vandamme $\qquad n = \sqrt{1 + \left(\frac{A}{E_g + B}\right)^2}$

مقادیر A و B به ترتیب برابر ۱۳/۶ و ۳/۴ الکترون ولت می‌باشد.

مقادیر ضریب شکست حاصل از محاسبات با مقادیر حاصل از مدل‌های فوق در شکل(۸) مقایسه شده‌اند. همان‌طور که مشاهده می‌شود در فاز نمک طعام، نتایج دو تقریب Ravindra و Vadamme و در فاز بلندروی، نتایج دو تقریب Moss و Vadamme به یکدیگر بسیار نزدیک هستند.



شکل ۸: تغییرات ضریب شکست برحسب غلظت در دو فاز نمک طعام و بلندروی با مدل‌های مختلف

نتیجه گیری

در این مطالعه با بکارگیری روش FP-LAPW در چارچوب نظریه تابعی چگالی، خواص ساختاری، الکترونی و اپتیکی آلیاژهای $Ba_{1-x}Mg_xSe$ بررسی شد. با بررسی چگالی حالت‌های کلی وجزئی این آلیاژها مشخص گردید که سهم عمده چگالی حالت‌ها قبل از سطح فرمی مربوط به اوربیتال p اتم سلنیوم می باشد. پیک‌های نمودار قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک بیان کننده گذارهای بین نواری است. در آلیاژهای $Ba_{1-x}Mg_xSe$، فرکانس پلاسما به ازای مقادیر۱،۰/۷۵، ۰/۵، ۰/۲۵، ۰ =x در فاز نمک طعام به ترتیب متناظر با انرژی‌های۲۲/۰۲، ۲۳/۳۸، ۲۱/۵۳، ۲۰/۱۷، و۱۶/۹۶ و برای فاز بلندروی متناظر با انرژی‌های ۲۱/۱۰،۱۹/۶۶، ۲۰/۱۵، ۱۹/۳۰و ۱۶/۸۸ می‌باشند.

مرجع‌ها

[۱] S. Bagci, H. M. Tütüncü, and G. P. Srivastava, "First-principles studies of groundstateand dynamical properties of MgS, MgSe, and MgTe in the rocksalt, zinc blende, wurtzite, and nickel arsenide phases," Physical Review B **73**, (2006)205201.

[۲] C. A. Madu and B. N. Onwuagba,, "Electronic and Structural Properties of MgSe, CaSe, SrSe, and BaSe", The African Review of Physics **7**(2012).

[۳] P. Balaha and K.Schwarz; “Wien2k an augmented plane wave plus local orbital program for calculating crystal properties”; *J. Ind. Eng. Chem. Res.*, **48**, (2001) 3118–3125.

[۴] L.Vegard, “Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology”, *J. Membr. Sci*. **350**,(1921), 333–339.

[۵] J. E. Bernard, A. Zunger, "Optical bowing in zinc chalcogenide semiconductor alloys", Phys. Rev. B **34** 5992 (1986)

[۶] F.Drief, A.Tadjer, D.Mesri, H.Aourag,, "First principles study of structural, electronic, elastic and optical properties of MgS, MgSe and MgTe"Catalysis Today **89**, 343(2004).

[۷] V.P.Gupta, N.M.Ravindra, "Comments on the moss formula", Phys. Sol.b(1980) 10 715.

[۸] N.M.Ravindra, S.Auluck, V.K.Srivastava, "Energy gap-refractive index relation -some observations" Phys. Stat. Sol. b **93** (1979)155.

[۹] J.P.L.Herve, L.K.J. Vandamme, "General relation between refractive index and energy gap in semiconductors" Infrared Phys. Technol. **35** (1994)609.

بررسی ساختار الکترونی و خواص اپتیکی آلیاژهای $Ca_{1-x}Sr_xSe$ (x=۰،۰/۲۵، ۰/۵، ۰/۷۵و ۱)

احمدیان ، فرزاد ؛ سالاری، آزاده

گروه فیزیک، دانشگاه آزاد اسلامی واحد شهرضا، شهرضا

چکیده

در این مطالعه، خواص ساختاری، الکترونی و اپتیکی آلیاژهای $Ca_{1-x}Sr_xSe$ بر پایه نظریه تابعی چگالی و با استفاده از روش امواج تخت بهبود یافته خطی با پتانسیل کامل(FP-LAPW) مورد بررسی قرار گرفت. در بخش خواص ساختاری، پارامترهای شبکه و مدول‌های حجمی به ازای غلظت‌های مختلف در دو فاز نمک‌طعام و بلندروی محاسبه و با نتایج قانون وگارد مقایسه شد. در بخش خواص الکترونی، گاف‌های نواری آلیاژهای $Ca_{1-x}Sr_xSe$ با دو تقریب PBE-GGA و EV-GGA محاسبه شد. در بخش خواص اپتیکی، بخش‌های حقیقی$\varepsilon_1(\omega)$ و موهومی$\varepsilon_2(\omega)$ تابع دی‌الکتریک، تابع اتلاف انرژی الکترون$L(\omega)$ و ضریب شکست$n(\omega)$ آلیاژهای مختلف محاسبه و مورد تجزیه و تحلیل قرار گرفت.

The investigation of electronic structure and optical properties of $Ca_{1-x}Sr_xSe$ (x=0,0.25,0.5,0.75,1) alloys

Ahmadian, Farzad; Salari, Azadeh

Department of Physics, Shahreza branch, Islamic Azad University, Shahreza, Iran

Abstract

In this study, the structural, electronic and optical properties of $Ca_{1-x}Sr_xSe$ were investigated using full potential linearized augmented plane wave (FPLAPW) method within density functional theory (DFT). In section of structural properties, the lattice parameters and bulk moduli at different concentrations in both NaCl and Zincblende phases were calculated and compared with Vegard's law. In section of electronic properties, the energy band gap values for $Ca_{1-x}Sr_xSe$ were estimated using both PBE-GGA and EV-GGA schemes. In section of optical properties, the real part $\pounds_1(\mu)$ and imaginary part $\pounds_2(\mu)$ of the dielectric function, energy loss function $L(\mu)$ and refractive index $n(\mu)$ for different alloys were calculated and analyzed.

PACS No. 70,71, 78

مقدمه

نیمرساناهای گروه II -VI به علت گاف نواری بزرگ و ثابت دی‌الکتریک کوچک در صنایع اپتیکی و الکترونیکی مورد استفاده قرار می‌گیرند. چالکوجنایدهای کلسیم و استرانسیوم که به چالکوجنایدهای قلیایی خاکی معروفند جزء این گروه محسوب می‌شوند و جانشین‌های مناسبی برای نیمرساناهای III-V وIV هستند. مدیو و همکارانش با روشFP-LAPW، پارامترهای ساختاری، ساختار نواری و چگالی حالت‌های ترکیبات CaSe و SrSe را در فاز نمک طعام با تقریب PBE-GGA محاسبه کرده‌اند [۱]. سوراکو و همکارانش پارامترهای ساختاری و اپتیکی ترکیب CaSe را در فاز بلندروی بدست آورده‌اند[۲]. همچنین دادستانی و همکارش قسمت‌های حقیقی و موهومی تابع دی-الکتریک ترکیب SrSe را مورد مطالعه قرار داده‌اند[۳].

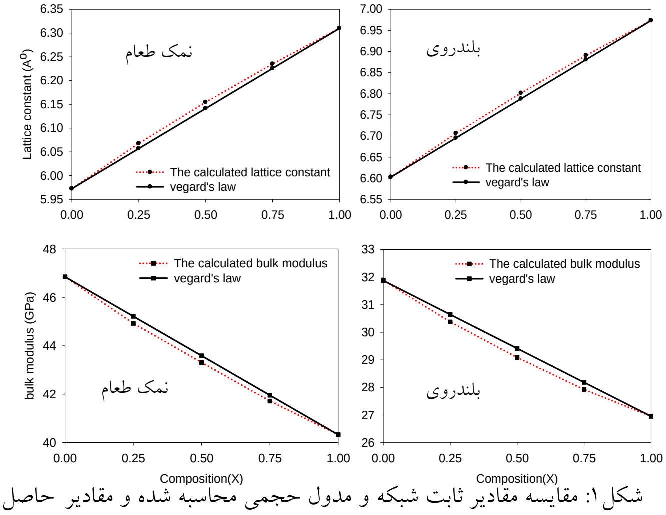
روش محاسبات

محاسبات بر پایه نظریه تابعی چگالی و روش امواج تخت بهبود یافته‌ی خطی با پتانسیل کامل(FP-LAPW) و با کد محاسباتی WIEN2K صورت گرفته است. در محاسبات حاضر، شعاع کره موفین‌تین(R_{mt}) برای هر سه اتم Ca، Sr وSe برابر

۲a.u ، پارامتر $R_{mt}K_{max}$ برابر ۸ و بردار موج قطع برای بسط پتانسیل و چگالی بار در ناحیه بین جایگاهی(G_{max})، برابر ۱۲$(a.u)^{-1}$ اختیار شده است.

خواص ساختاری

در این بخش پارامترهای شبکه و مدول حجمی آلیاژهای $Ca_{1-x}Sr_xSe$ به ازای غلظت‌های مختلف در دو فاز بلندروی و نمک طعام محاسبه شده و با مقادیر حاصل از قانون وگارد [۴] (قانون وگارد پیش‌بینی می‌کند که پارامترهای ساختاری به طور خطی با مقدار x تغییر می‌کنند) در شکل(۱) مقایسه شده است.



شکل ۱: مقایسه مقادیر ثابت شبکه و مدول حجمی محاسبه شده و مقادیر حاصل از قانون وگارد در فازهای نمک طعام و بلندروی

همان‌طور که مشاهده می‌شود، نتایج حاصل از محاسبات حاضر با مقادیر حاصل از قانون وگارد اختلاف اندکی دارد. برای محاسبه این انحراف، مقادیر پارامترهای بدست آمده را با یک معادله درجه دوم برازش داده‌ایم که این معادلات به صورت زیر هستند. ضریب درجه دوم در معادلات فوق میزان خمش(انحراف از قانون وگارد) را نشان می‌دهد.

(۱) فاز نمک‌طعام $$a(x) = -0.05x^2 + 0.39x + 5.97$$

(۲) فاز بلندروی $$a(x) = -0.05x^2 + 0.42x + 6.60$$

(۳) فاز نمک‌طعام $$B(x) = 1.24x^2 - 7.75x + 46.83$$

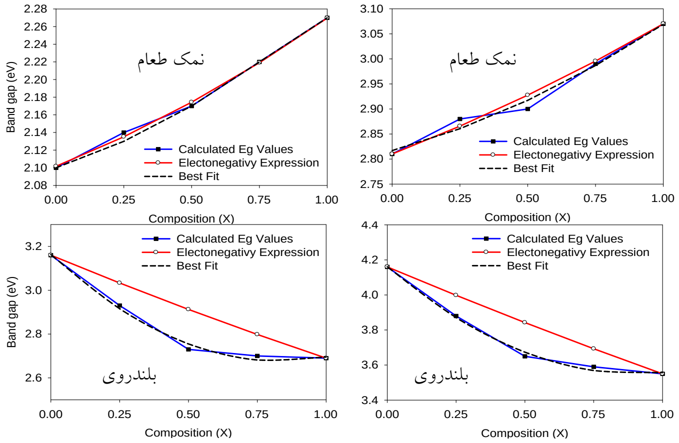
(۴) فاز بلندروی $$B(x) = 1.36x^2 - 6.27x + 31.87$$

خواص الکترونی

مقادیر گاف نواری به‌ازای تمامی غلظت‌ها در دو فاز نمک‌طعام و بلندروی با دو تقریب PBE-GGA و EV-GGA محاسبه شده است. گاف نواری محاسبه شده برای ترکیب SrSe در فاز نمک‌طعام با تقریب EV-GGA (۳/۰۷eV) در مقایسه با گاف نواری محاسبه شده با تقریب PBE-GGA (۲/۲۷eV) به مقدار تجربی(۳/۸۱eV) نزدیک‌تر است. علت آنست که تقریب EV-GGA پتانسیل همبستگی را دقیق‌تر از تقریب PBE-GGA محاسبه می‌کند. همچنین مقادیر گاف نواری با استفاده از قانون مربوط به اختلاف الکترونگاتیوی که در زیر آمده، محاسبه شده است.

$$E_g^{Ca_{1-x}Sr_xSe} = (1-x)E_g^{CaSe} + xE_g^{SrSe} - \Delta\chi\, x(1-x) \qquad (۵)$$

که $\Delta\chi$ اختلاف الکترونگاتیوی دو اتم کلسیم و استرانسیوم ($\Delta\chi$ =۰/۰۵) می‌باشد. مقادیر حاصل در شکل(۲) نمایش داده شده است. همان‌طور که دیده می‌شود، در فاز نمک‌طعام، نتایج قانون الکترونگاتیوی به مقادیر گاف نواری محاسباتی نزدیک‌تر است.



شکل۲: مقایسه مقادیر گاف نواری محاسبه شده با اختلاف الکترونگاتیوی و مقادیر برازش داده شده با معادله درجه دوم در فازهای نمک طعام و بلندروی با تقریب‌های PBE-GGA (سمت چپ)وEV-GGA (سمت راست)

در ادامه میزان خمش مقادیر گاف نواری از قانون وگارد(b) و همچنین پارامتر خمش با روش برنارد زونگر(b_{bz})[۵] محاسبه و در جدول(۱) گزارش شده است. پارامتر خمش گاف در قانون برنارد زونگر(b_{bz}) توسط رابطه زیر محاسبه می‌شود.

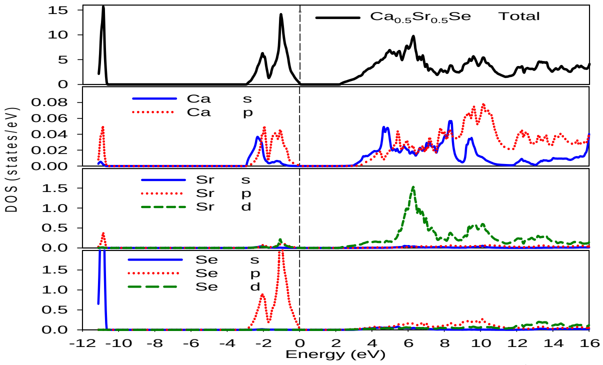
$$b_{bz} = b_{VD} + b_{CE} + b_{SR} \qquad (۶)$$

که b_{VD} اثر تغییر شکل حجم و b_{CE} سهم تبادل بار روی پارامتر خمش و b_{SR} تغییرات بواسطه واهلش ساختاری است.

جدول ۱:مقایسه پارامتر خمش روش برنارد(b_{bz}) و روش محاسبات حاضر(b)

تقریب	فاز	b_{VD}	b_{CE}	b_{SR}	b_{bz}	b
PBE-GGA	نمک طعام	-۰/۰۱	۰/۰۵	۰	۰/۰۴	۰/۰۴
	بلندروی	۰/۰۵	۰/۷۲	۰/۲۰	۰/۹۷	۰/۷
EV-GGA	نمک طعام	۰/۰۳	۰/۱۳	۰	۰/۱۶	۰/۱
	بلندروی	۰/۲۴	۰/۵۶	۰/۲۴	۱/۰۴	۰/۷۴

همان‌طور که مشاهده می‌شود نتایج حاصل از روش برنارد زونگر با نتایج محاسبات ما در فاز نمک‌طعام توافق خوبی دارد. سپس چگالی حالت‌های الکترونی آلیاژ $Ca_{0.5}Sr_{0.5}Se$ در فاز نمک‌طعام برای نمونه در شکل(۳) آورده شده است. در این آلیاژ سهم عمده حالت‌های زیر سطح فرمی مربوط به اوربیتال P اتم سلنیوم و بالای سطح فرمی نیز عمدتاً مربوط به اوربیتال d اتم استرانسیوم است.



شکل۳ : چگالی حالت‌های الکترونی آلیاژ $Ca_{0.5}Sr_{0.5}Se$ در فاز نمک طعام

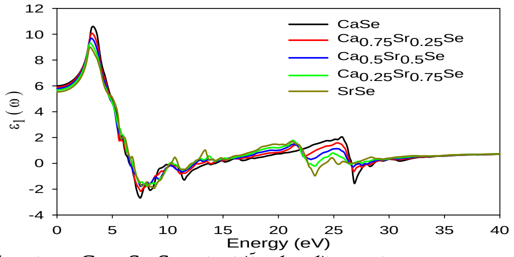
خواص اپتیکی

مهم‌ترین پارامتر در خواص اپتیکی، تابع دی‌الکتریک $\varepsilon(\omega)$ می‌باشد. نمودار بخش‌های حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک بر حسب انرژی فوتون فرودی آلیاژهای $Ca_{1-x}Sr_xSe$ در فاز نمک‌طعام به ترتیب در شکل‌های(۴)و(۵) نشان داده شده است. مقدار $\varepsilon_1(\omega)$ به ازای فرکانس صفر، ثابت دی‌الکتریک استاتیکی نامیده می‌شود. این مقادیر برای دو فاز نمک طعام و بلندروی در جدول(۲) آورده شده است. مقادیر بدست آمده در توافق نسبتاً خوبی با نتایج دیگران است. همان‌طور که دیده می‌شود، با افزایش غلظت اتم استرانسیوم ثابت دی‌الکتریک استاتیکی کاهش یافته است.

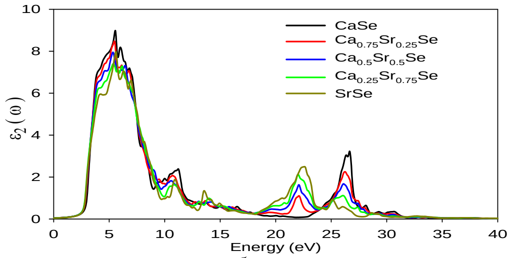
جدول۲: ثابت دی‌الکتریک استاتیکی آلیاژهای $Ca_{1-x}Sr_xSe$ برای مقادیر مختلف x

نام آلیاژ	فاز نمک طعام			فاز بلندروی	
	کار حاضر	کار دیگران	کار تجربی	کار حاضر	کار دیگران
CaSe	۶/۰۰	۶/۰۲[۷]	۴/۵۸[۶]	۴/۳۵	۳/۱۴[۲]
$Ca_{0.75}Sr_{0.25}Se$	۵/۹۰	--	--	۴/۳۱	--
$Ca_{0.5}Sr_{0.5}Se$	۵/۷۹	--	--	۴/۲۶	--
$Ca_{0.25}Sr_{0.75}Se$	۵/۶۸	--	--	۴/۲۱	--
SrSe	۵/۵۳	۵/۵۷[۷]	۴/۳۳ [۶]	۴/۱۵	--

پیک‌های نمودار قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک در محدوده ۰ تا ۷ الکترون ولت نشان دهنده گذارهای بین نواری است. مطابق آنالیز نواری صورت گرفته برای آلیاژهای $Ca_{1-x}Sr_xSe$ در فاز نمک‌طعام برای تمامی غلظت‌ها، اوربیتال p اتم سلنیوم به عنوان حالت اولیه و عمدتاً اوربیتال d اتم سلنیوم به عنوان حالت نهایی، نقش اصلی را در گذارهای بین نواری برعهده دارند.



شکل۴: بخش حقیقی تابع دی‌الکتریک آلیاژهای $Ca_{1-x}Sr_xSe$ در فاز نمک‌طعام

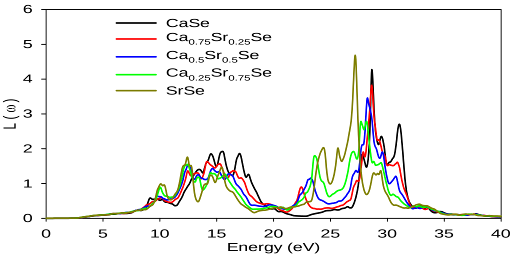


شکل۵: بخش موهومی تابع دی‌الکتریک آلیاژهای $Ca_{1-x}Sr_xSe$ در فاز نمک‌طعام

تابع اتلاف انرژی الکترون معرف اتلاف انرژی سریع‌ترین الکترون‌هایی است که در درون ماده حرکت می‌کنند و از رابطه زیر بدست می‌آید.

$$L(\mu) = -\mathrm{Im}(1/\pounds) = \pounds_2(\mu) / \left[\pounds_1^2(\mu) + \pounds_2^2(\mu)\right] \quad (۷)$$

طیف اتلاف انرژی برای آلیاژهای $Ca_{1-x}Sr_xSe$ به ازای غلظت‌های مختلف در شکل(۶) نشان داده شده است.



شکل۶ : طیف اتلاف انرژی الکترون آلیاژهای $Ca_{1-x}Sr_xSe$ در فاز نمک‌طعام

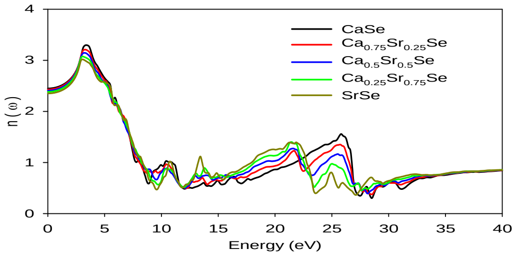
بلندترین پیک در نمودار تابع اتلاف آلیاژهای $Ca_{1-x}Sr_xSe$ به ازای مقادیر x= ۰، ۰/۲۵، ۰/۵، ۰/۷۵و۱ در فاز نمک طعام به ترتیب در انرژی‌های۲۷/۱۷ و۲۸/۱۵، ۲۸/۲۶، ۲۸/۶۱، ۲۸/۶۴ و برای فاز بلندروی در انرژی‌های ۲۶/۱۹ و۲۳/۶۰، ۲۷/۶۶، ۲۷/۹۶، ۲۷/۸۵ الکترون‌ولت رخ داده که این پیک‌ها مربوط به تشدید پلاسمونی است و به فرکانس پلاسما مشهور است. در فرکانس‌های بالاتر از

فرکانس پلاسما آلیاژها معمولاًرفتار فلزی از خود نشان می‌دهند.

ضریب شکست نیز یکی دیگر از پارامترهای مهم اپتیکی است و از رابطه زیر بدست می‌آید.

$$n(\mu) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\sqrt{\pounds_1^2(\mu) + \pounds_2^2(\mu)} + \pounds_1\right]^{\frac{1}{2}} \qquad (۸)$$

طیف مربوط به ضریب شکست آلیاژهای $Ca_{1-x}Sr_xSe$ به ازای مقادیر مختلف x در فاز نمک طعام در شکل(۷) ترسیم شده است.



شکل۷ :طیف مربوط به ضریب شکست آلیاژهای $Ca_{1-x}Sr_xSe$ در فاز نمک‌طعام

مهم‌ترین پارامتر حاصل شده از نمودار ضریب شکست، مقادیر ضریب شکست در فرکانس صفر می‌باشد که ضریب شکست استاتیکی نامیده می‌شود. این مقادیر در فاز نمک‌طعام به‌ازای مقادیر x= ۰ ،۰/۲۵ ،۰/۵ ،۰/۷۵و۱ به ترتیب برابر ۲/۳۵ و ۲/۳۸، ۲/۴۱، ۲/۴۳، ۲/۴۵ و در فاز بلندروی به ترتیب برابر ۲/۰۴و ۲/۰۵، ۲/۰۶، ۲/۰۷، ۲/۰۸ بدست آمده است. تعدادی روابط تجربی برای نیمرساناها وجود دارد که ضریب شکست را به گاف نواری مربوط می‌سازد[۸]. این روابط عبارتند از:

۱- مدل Moss $\qquad (۹) \qquad E_g n^4 = k$

که E_g گاف انرژی و ثابت k برابر ۱۰۸ الکترون‌ولت می‌باشد.

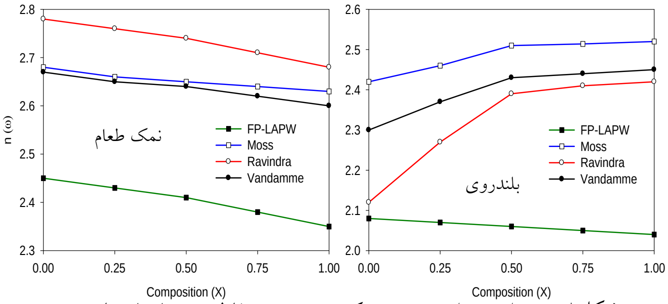
۲- مدل Ravindra $\qquad (۱۰) \qquad n = \sim + \quad E_g$

که مقادیر α و β به ترتیب برابر ۴/۰۸۴ و۰/۶۲- الکترون ولت می‌باشند.

۳- مدل Vandammes $\qquad (۱۱) \qquad n = \sqrt{1 + \left(\frac{A}{E_g + B}\right)^2}$

که مقادیر A وB به ترتیب برابر ۱۳/۶ و ۳/۴ الکترون‌ولت می‌باشد.

در شکل(۸) مقادیر ضریب شکست حاصل از محاسبات با مقادیر حاصل از مدل‌های فوق مقایسه شده‌اند. همان‌طور که مشاهده می‌شود در فاز نمک‌طعام روند تغییرات در هر چهار روش مشابه است و اختلاف اندکی بین محاسبات حاضر و مدل‌های دیگر وجود دارد. در فاز بلندروی روند تغییرات یکسان نیست و اختلاف اندکی بین مدل‌های فوق و محاسبات فعلی وجود دارد.



شکل۸ : نمودار تغییرات ضریب شکست برحسب غلظت در فازهای بلندروی و نمک طعام با مدل‌های مختلف

نتیجه گیری

در آلیاژ $Ca_{0.5}Sr_{0.5}Se$ سهم عمده حالت‌های زیر سطح فرمی مربوط به اوربیتال P اتم سلنیوم و بالای سطح فرمی عمدتاً مربوط به اوربیتالd اتم استرانسیوم می‌باشد. در آلیاژهای $Ca_{1-x}Sr_xSe$ ثابت دی‌الکتریک استاتیکی با افزایش غلظت اتم استرانسیوم کاهش می‌یابد. پیک‌های نمودار قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک بیان کننده گذارهای بین نواری است. فرکانس پلاسما در آلیاژهای $Ca_{1-x}Sr_xSe$ به ازای مقادیر x= ۰ ،۰/۲۵ ،۰/۵ ،۰/۷۵و۱ در فاز نمک طعام به ترتیب متناظر با انرژی‌های۲۷/۱۷ و۲۸/۱۵، ۲۸/۲۶، ۲۸/۶۱، ۲۸/۶۴الکترون ولت و برای فاز بلندروی متناظر با انرژی‌های ۲۶/۱۹ و۲۳/۶۰، ۲۷/۶۶، ۲۷/۹۶، ۲۷/۸۵ الکترون‌ولت می‌باشند. مقادیر ضریب شکست در دو فاز نمک‌طعام و بلندروی با افزایش غلظت اتم استرانسیوم روند کاهشی دارند.

مرجع‌ها

[۱] C. A. Madu and B. N. Onwuagba, “Electronic and Structural Properties of MgSe, CaSe, SrSe, and BaSe”, *The African Review of Physics* (2012) **7:0017**, 171-176.

[۲] G. Surucu , K. Colakoglu, E. Deligoz, N. Korozlu, Y.O. Ciftci, “The electronic and optical properties of $Zn_{1-x}Ca_xSe$ mixed alloys”, *Solid State Communications* **150** (2010) 1413_1418.

[۳] M. Dadsetani, and A. Pourghazi, “Optical properties of strontium monochalcogenides from first principles”, *PHYSICAL REVIEW B* **73**, (2006) 195102.

[۴] L.Vegard, “Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology”, *J. Membr. Sci.* **350**,(1921), 333–339.

[۵] J. E. Bernard, A. Zunger, 1986, *Phys. Rev. B* **34** (1986) 5992.

[۶] G. A. Saum, and E. B. Hensley, *Phys. Rev* **113** *(1959) 1019*.

[۷] M.A. Ghebouli, B. Ghebouli, A. Bouhemadou, M. Fatmi, K. Bouamama, “Structural, electronic, optical and thermodynamic properties of $Sr_xCa_{1-x}O$, $Ba_xSr_{1-x}O$ and $Ba_xCa_{1-x}O$ alloys”, *Journal of Alloys and Compounds* **509** (2011) 1440–1447.

[۸] S. Labidi, M.Labidi, H.Meradji, S.Ghemid, F.El HajHassan, “Structural, electronic, thermodynamic and optical properties of $SrS_{1-x}O_x$ mixedcrystals”, *Physica B* **404** (2009) 4100–4105

بررسی اثر گروه فنیل بر روی خواص ترابرد مولکول تتراسین

علیزاده، سارا[۱،۲]؛ شاه طهماسبی، ناصر[۱،۲]؛ پیله ور شهری، راحله[۳]

[۱] دانشکده علوم پایه، دانشگاه فردوسی، مشهد

[۲] آزمایشگاه نانو دانشگاه فردوسی، مشهد

[۳] دانشگاه پیام نور، نیشابور

چکیده

در این پژوهش خواص ترابرد الکترونی مولکول تتراسین خالص و نیز در حضور چهار حلقه فنیل توسط کد محاسباتی اسمیگل که بر اساس نظریه تابع گرین غیر تعادلی می‌باشد، با استفاده هامیلتونی ساخته شده بر اساس نظریه تابعی چگالی، بررسی می‌شود. از مقایسه ضریب ترابرد ولتاژ صفر مولکول روبرین با تتراسین متوجه حضور قله‌هایی شدیم که به علت افزودن حلقه‌های فنیل متصل به روبرین ظاهر شده‌اند. در نتیجه بررسی مشخصه جریان بر حسب ولتاژ تا حوالی ۲/۷ ولت برای مولکول تتراسین و روبرین دریافتیم که جریان بر حسب ولتاژ تا حدود ۲/۱ ولت برای هر دو مولکول تقریبا برابر بود ولی بعد از این ولتاژ، به علت تاثیر حلقه‌های فنیل، جریان در روبرین از جریان مربوط به مولکول تتراسین بیشتر شد.

The effect of phenyl groups on the transport properties of tetracene molecule

Alizadeh, Sara[1,2]; Shahtahmassebi, Nasser[1,2]; Pilevarshahri, Raheleh[3]

[1] Nanoresearch Centre of Ferdowsi University of Mashhad,Iran
[2] Physics Dep., Faculty of Sciences, Ferdowsi University of Mashhad, Iran
[3] Physics Dep., Faculty of Sciences, Payamenoor University of Neyshaboor, Iran

Abstract

Electronic transport properties of pure tetracene molecules and rubrene are studied ,using density functional theory within the non-equilibrium Green's function method. Transmission coefficient and I-V curve for were calculated for both molecules. Comparison of transport coefficients for tetracene and rubrene molecules showes that there are some extra peaks that belong to phenyl rings which are attached to rubrene. Finally, we find that up to 2.1(V) the current is almost the same in both rubrene and tetracene and beyond this value the current in rubrene increases above the values in tetracene which is the result of attachment of additional phenyl groups to rubrene molecule.

PACS No. 31,72,73

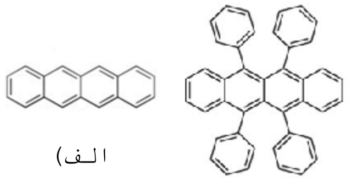
مقدمه

تتراسین($C_{18}H_{12}$) عضوی از خانواده اسن‌ها است که مطابق شکل ۱- الف چهار حلقه بنزنی دارد، دارای خواص نیمه رسانایی است و به علت تحرک بار بالا در دیودهای نور گسیل آلی[۱]، ترانزیستورهای اثر میدان آلی[۲] و نیز به دلیل پایداری خوبی که در مقابل اکسیداسیون دارد، خواص فلورسانس و تحرک زیاد حفره در سلول‌های فوتو ولتایی آلی[۳] به کار می‌روند.

روبرین، $C_{42}H_{28}$، مطابق شکل۱–ب، به صورت تتراسین همراه با چهار حلقه فنیل می‌باشد. یکی از دلایلی که روبرین بسیار مورد توجه می‌باشد، تحرک پذیری بسیار بالای حامل‌های بار

آن، $20\,cm^2 v^{-1} s^{-1}$، در دمای اتاق است[٤]. به همین دلیل روبرین به عنوان یک نیمه رسانای آلی مناسب در ترانزیستورهای آلی اثرمیدان[٥]، دیودهای آلی نور گسیل [٦] و نیز سلول‌های خورشیدی[٣] استفاده می‌گردد.

شکل ۱: نمای کلی مولکول الف)تتراسین ب)روبرین



هدف این پژوهش محاسبه و مقایسه ضریب ترابرد، مشخصه جریان ولتاژ و رسانندگی تتراسین خالص و همراه با چهار حلقه فنیل می‌باشد.

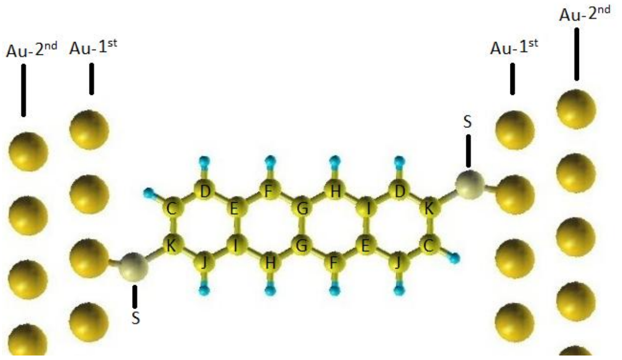
روش محاسبه

بررسی خواص ترابرد الکترونی توسط کد محاسباتی SMEAGOL که بر اساس تابع گرین غیر تعادلی انجام شده است و از هامیلتونی کوهن–شم که توسط کد محاسباتی SIESTA محاسبه شده، استفاده شده است. در این پژوهش، میزان هم‌گرایی برابر با مقدار10^{-4} و تابعی تبادلی مورد استفاده، تبادل– همبستگی LDA بوده است. پایه دوگانه زتا برای الکترون‌های ظرفیت مولکول و پایه تک گانه زتا برای الکترون‌هایS الکترودهای طلا در نظر گرفته شده است. مولکول‌ها به وسیله اتصال دهنده گوگرد با طول پیوند ۱/۹ آنگستروم به سطح(۱۱۱) طلا متصل شده‌اند. لازم به ذکر است که در کد محاسباتی SIESTA از شبه پتانسیل‌های ترویلر– مارتین[۷] استفاده می‌شود.

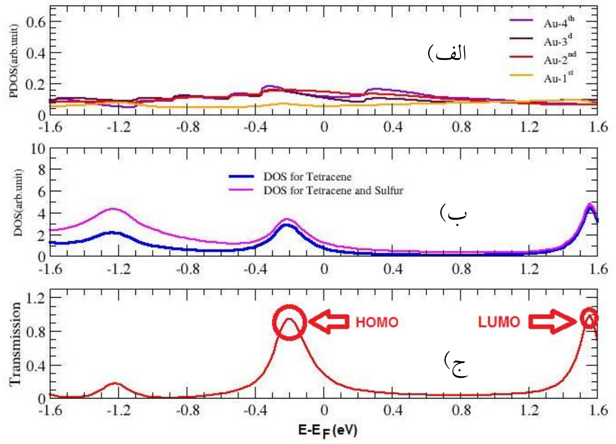
نتایج

ابتدا تتراسین را، مطابق شکل۲، توسط اتصال دهنده سولفور، بین دو الکترود طلا به صورت متقارن قرار دادیم. طبق شکل۳، ضریب ترابرد مولکول تتراسین در ولتاژ صفر، چگالی حالت‌های جزئی(PDOS) مولکول تتراسین به صورت منفرد و نیز همراه با سولفور و چگالی حالت‌های اتم‌های طلا واقع در صفحه متصل شده به سولفور و صفحات دورتر نشان داده شده است.

از مقایسه شکل ۳–ج و ۳–ب مشاهده می‌شود، قله‌های حوالی مقادیر ۱/۵ الکترون ولت و ۰/۲– الکترون ولت در ضریب ترابرد ولتاژ صفر، به ترتیب با قله‌های HOMO و LUMO در نمودار چگالی حالت‌های مولکول تتراسین منفرد و همراه با سولفور مطابقت دارد. از طرفی به دلیل آن که مطابق شکل۳–الف، چگالی حالت‌های مربوط به اتم‌های صفحه‌های (۱۱۱) طلا، در بازه انرژی مورد بررسی، تقریبا به صورت یکنواخت است، لذا در این بازه قله‌ای در ضریب ترابرد مربوط به اتم‌های طلا مشاهده نمی‌شود. لذا مشارکت اصلی در ساخت قله‌هایHOMO و LUMO مربوط به سهم اتم‌های مولکول تتراسین می‌باشد.



شکل ۲ : پیوندگاه مولکول تتراسین به سطح(۱۱۱) طلا توسط اتصال دهنده سولفور. اتم‌های کربن دارای چگالی حالت‌های جزئی یکسان با حروف مشابه نشان داده شده‌اند.



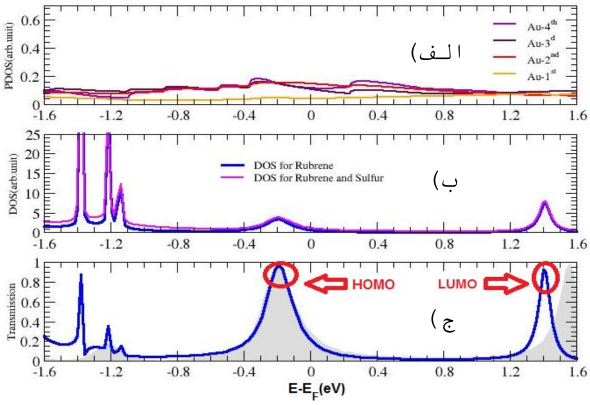
شکل۳: الف) چگالی حالت‌های صفحه‌های مختلف طلا ب) چگالی حالت‌های جزئی(PDOS) مولکول تتراسین به صورت منفرد و نیز همراه با سولفور ج) ضریب ترابرد مولکول تتراسین در ولتاژ صفر

در ادامه، به منظور مشخص نمودن تاثیر افزودن گروه‌های فنیل بر روی تتراسین، مولکول روبرین در شرایط مشابه با مولکول تتراسین، توسط اتصال دهنده سولفور، به طلا متصل شد.

مطابق شکل ٤–ج، ضریب ترابرد در ولتاژ صفر برای مولکول روبرین با خط آبی و برای مقایسه بهتر با مولکول تتراسین، ضریب ترابرد موبوط به مولکول تتراسین به صورت سایه مشخص شده است. هم‌چنین در شکل ٤–ب ، چگالی حالت‌های جزئی(PDOS) مولکول به صورت منفرد و نیز همراه با سولفور و در شکل ٤–الف نیز، چگالی حالت‌های اتم‌های طلا نشان داده شده است.

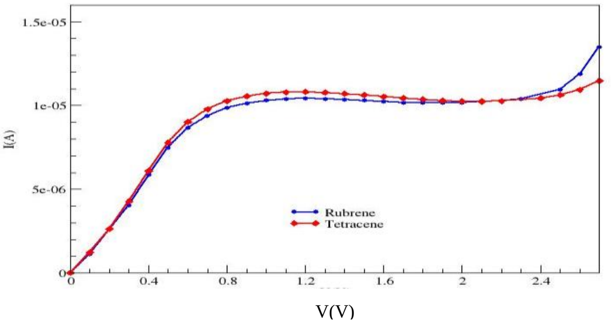
با مقایسه شکل ٤–ج و ٤–ب مشاهده می‌شود، قله‌های حوالی مقادیر ۱/٤ الکترون ولت و ۰/۳- الکترون ولت در ضریب ترابرد ولتاژ صفر، به ترتیب با قله‌های HOMO و LUMO در نمودار چگالی حالت‌های مولکول روبرین منفرد و همراه با سولفور مطابقت دارد. از طرفی به دلیل آن که مطابق شکل ٤–الف، چگالی حالت‌های مربوط به اتم‌های صفحه‌های (۱۱۱) طلا، در بازه انرژی مورد بررسی، تقریبا به صورت یکنواخت است، لذا در این بازه قله‌ای در ضریب ترابرد مربوط به اتم‌های طلا مشاهده نمی‌شود. لذا مشارکت اصلی در ساخت قله‌هایHOMO و LUMO مربوط به سهم اتم‌های مولکول روبرین می‌باشد.

با مقایسه شکل‌های ۳–ج و ٤–ج، مشاهده می‌شود، محل قله‌های HOMO وLUMO در روبرین، تقریبا در محلی مشابه با تتراسین قرار دارند و تفاوت عمده ای که در مقایسه این دو شکل دیده می‌شود، مربوط به حضورچند قله‌ی تیز در محدوده‌ی ۱/۱- تا ۱/۵- ولت است، که به دلیل افزودن گروه فنیل به تتراسین ظاهر شده‌اند.



شکل ٤: الف) چگالی حالت‌های صفحه‌های مختلف طلا ب) چگالی حالت‌های جزئی(PDOS) مولکول تتراسین به صورت منفرد و نیز همراه با سولفور ج) ضریب ترابرد در ولتاژ صفر که برای مولکول تتراسین به صورت سایه و برای مولکول روبرین با نمایش خط آبی نمایش داده شده.

سپس مشخصه جریان–ولتاژ با استفاده از رابطه $I = \frac{1}{\pi\hbar}\int T(E)[f(E,\mu_L)-f(E,\mu_R)]dE$، برای این دو مولکول محاسبه و برای مقایسه بهتر نتیجه جریان دو مولکول به طورهم‌زمان در شکل ۵ رسم شد.



شکل۵: مقایسه مشخصه جریان– ولتاژ به صورت تابعی از ولتاژ، برای دو مولکول روبرین و تتراسین در پنجره ولتاژ بین ۰ تا ۲/۷ ولت

با توجه به شکل ۵ ، مشاهده می‌شود که با افزایش ولتاژ تا ۲/۱ ولت، جریان برای مولکول روبرین وتتراسین تقریبا یکسان است. ولی در ولتاژهای بیش از ۲/۱ ولت، جریان در روبرین به مقدار قابل توجهی از تتراسین بیشتر می‌گردد، که روند تغییر جریان با شکل ٤–ج هم‌خوانی دارد و به راحتی می‌توان مشاهده نمود که در ولتاژهای بیشتر از ۲/۱ ولت، در مولکول روبرین قله‌های مربوط به حلقه‌های فنیل وارد پنجره تغییر ولتاژ می‌شوند، لذا جریان از تتراسین بیشتر می‌گردد.

نتیجه گیری

دراین پژوهش به بررسی خواص ترابرد مولکول تتراسین خالص و در حضور چهار حلقه فنیل(روبرین) پرداخته شد.

برای این منظور، هر کدام از این مولکول‌ها را به صورت متقارن توسط اتصال دهنده سولفور به صفحه‌های (۱۱۱) طلا متصل کردیم و نمودار ضریب ترابرد ولتاژ صفر، چگالی حالت‌های جزئی مولکول به صورت منفرد، همراه با سولفور و چگالی حالت‌های مربوط به اتم‌های صفحه‌های (۱۱۱) طلا را رسم نمودیم. از مقایسه نمودارهای مذکور مشاهده شد، که برای هر کدام از این مولکول‌ها قله‌های HOMO و LUMO در نمودار چگالی حالت‌های مولکول به صورت منفرد و همراه با سولفور مطابقت دارد. از طرفی به دلیل آن که چگالی حالت‌های مربوط به اتم‌های صفحه‌های (۱۱۱) طلا، در بازه انرژی مورد بررسی، تقریبا به صورت یکنواخت است، لذا

در این بازه قله‌ای در ضریب ترابرد مربوط به اتم‌های طلا مشاهده نشد. لذا دریافتیم که مشارکت اصلی در ساخت قله‌هایHOMO وLUMO مربوط به سهم اتم‌های مولکول می‌باشد. در ادامه، با مقایسه نمودارهای ضریب ترابرد در دو مولکول، قله‌هایی در نمودار ضریب ترابرد مولکول روبرین مشاهده کردیم که در نمودار ضریب ترابرد مولکول تتراسین وجود نداشت. علت حضور این قله‌ها، حلقه‌های فنیل موجود در روبرین می‌باشد.

در قسمت بعد، مشخصه جریان–ولتاژ را محاسبه و رسم کردیم. برای این منظور، جریان بر حسب ولتاژ تا حوالی ۲/۷ ولت و با فاصله های ۰/۱ محاسبه و نمودار مربوط به آن رسم شد. همان‌طور که از شکل ۵ مشاهده می‌شود، جریان در این دو مولکول تا ولتاژ در حدود ۲/۱ ولت، تقریبا برابر بود ولی در ولتاژهای بیشتر از آن،جریان در روبرین، به علت تاثیر حلقه‌های فنیل، از جریان مربوط به مولکول تتراسین بیشتر شد.

مرجع‌ها

[۱] B. B. Jang, S. H .Lee and Z. H. Kafafi; "Asymmetric pentacene derivatives for organic light-emitting diodes"; *Chem. Mater* **18**, No. 2 (2006) 449-457.

[۲] G .Brocks, J. Bring and A. Morpurgo; "Electronic Correlations in Oligo acene and Thiopene Organic Molecular Crystals"; *Phys. Rev. Lett* **93**, No. 14 (2004) 146405-146409.

[۳] B. P. Rand, J. Genoe, P. Heremans and J. Poortmans; "Solar cells utilizing small molecular weight organic semiconductors"; *Progress in Photovoltaics* **15,** No. 8 (2007) 659-676.

[٤] V. C. Sundar, J. Zaumsei, V. Podzorov, E. Menar, R. L. Willet, T. Somey, M. E. Gershenson, and J. A. Rogers; "Elastomeric Transistor Stamps: Reversible Probing of Charge Transport in Organic Crystals"; *Science* **303,** NO. 5664 (2004) 1644-1646.

[٥] R. W. M. E. Gershenson, A. F. Morpurgo and V. Podzorov; "Organic Single-Crystal Field-Effect Transistor"*; Phys. Sta.t* **201,** No. 6 (2004) 1302-1331.

[۶] T. Oyamad, H. Uchiuzou, S. Akiyama, Y. Oku, N. Shimoji and K. Matsushige; "Electroluminescence of thiophene in organic light-emitting field-effect transistors"; *Appl. Phys.* **86,** NO. 9 (2005) 093505-093507.

[۷] N. Troullier and J. Martins; "Efficient pseudopotentials for plane-wave calculations"; *Phys. Rev. B* **43,** NO. 3 (1991) 1993-2006.

بررسی توپولوژی چگالی بار الکترونی ترکیب هویسلر-گونه Fe_2VAl

اردلی، نگار[۱]؛ جلالی اسد آبادی، سعید[۱]؛ رجبی، علی[۲]؛ نعمت اللهی، جواد[۱]؛ خوشحال، فاطمه[۱]؛ رهنمای علی آباد، حسین اصغر[۳]؛ وهرانی، طارق[۴]

[۱] گروه فیزیک، دانشگاه اصفهان، اصفهان

[۲] پژوهشکده لیزر و پلاسما، دانشگاه شهید بهشتی، تهران

[۳] گروه فیزیک، دانشگاه حکیم سبزواری، سبزوار

[۴] آزمایشگاه فیزیک نظری، دانشگاه تلمسن، الجزایر

چکیده

توپولوژی چگالی بارالکترونی به عنوان یک میدان نرده‌ای برای ترکیب هویسلر-گونه Fe_2VAl توسط تعداد و نوع نقاط بحرانی آن مشخص شده است. نقاط بحرانی این ترکیب، نوع نقاط و فراوانی آنها در یک سلول واحد بررسی شده‌اند. جایگاه این نقاط در چارچوب نظریه تابعی چگالی (DFT) با استفاده از کد WIEN2k و با اعمال نظریه کوانتومی اتمها در مولکولها (AIM) با استفاده از کد CRITIC2 محاسبه و در اطراف اتم‌ها نمایش داده شده‌اند. خمره‌های اتمی در سلول مکعبی در اطراف سه اتم Fe، V و Al محاسبه و به صورت یکجا با در نظر گرفتن همه اتم‌ها نمایش داده شده‌اند. میزان همواری توپولوژی محاسبه و نوع پیوندها با استفاده از علامت لاپلاسی چگالی بار مورد بررسی قرار گرفته‌اند. نتایج نشان می‌دهند که پیوندهای موجود در این ترکیب در حدود ۸۳ درصد از نوع فلزی می‌باشند.

کلمات کلیدی: چگالی بار الکترونی، نقاط بحرانی، خمره‌های اتمی

Investigation of topology of electron charge density in Fe_2VAl Heusler-type compound

Ardali, Negar[1]; Jalali Asadabadi, Saeid[1]; Rajabi, Ali[2]; Nematollahi, Javad[1]; Khoshhal, F[1]; Rahnamaye Aliabad, Hossein Asghar[3]; Ouahrani, Tarik[4]

[1]*Department of Physics, University of Isfahan, Isfahan*
[2]*Laser and Plasma Research Institute, Shahid Beheshti University, Tehran*
[3]*Department of Physics, Hakim Sabzevary University, Sabzevar*
[4]*Laboratoire de Physique Théorique, Universitéde Tlemcen, 13000 Tlemcen Algeria*

Abstract

Topology of electron charge density as scalar field has been characterized for the Heusler-type Fe_2VAl compound by its number and types of critical points (CPs). The CPs, types of the CPs and abundance of them have been investigated. The positions of the CPs have been calculated in the framework of the density functional theory (DFT) using the WIEN2k code and applying the theory of atoms in molecules (AIM) employing CRITIC2 code and the results are visualized around the atoms in the unit cell of the crystal. Atomic basins, the cubic unit cell around the Fe, V and Al atoms are calculated and the results are represented for whole of the unit cell taking all of the atoms into account. Finally, density flatness, and the kind of the bonds by means of the sign of the Laplacian of the density of bonds are investigated. Our results show that the existed bonds in this compound are almost 83% metallic-like.

Key Words: Topology of electron charge density, Critical Points, Atomic basins

مقدمه

ترکیب Fe_2VAl به عنوان یک ترکیب هویسلر-گونه [۱]، دسته‌ای از ترکیبات بین فلزی با فرمول شیمیایی کلی X_2YZ را تشکیل می‌دهد، که در آن X و Y فلزات واسطه می‌باشند و Z اغلب عنصری از گروه اصلی III و VI جدول تناوبی می‌باشد. این دسته از ترکیبات با آرایش‌های ۰۱:۰۱:۰۱ و ۰۲:۰۱:۰۱ شامل بیش از ۱۵۰۰ عضو می‌باشند. ناهنجاری آنتیزیت موجب تغییرات قابل توجه در ساختار پیوند شبه فلزی ترکیب Fe_2VAl می‌شود. با در نظر گرفتن ناهنجاری آنتیزیت می توان بیشتر خواص Fe_2VAl را توصیف کرد [۲]. برای بررسی توپولوژی چگالی بار الکترونی، پس از محاسبه چگالی بار الکترونی، نقاط بحرانی آن محاسبه شده‌اند. برای این منظور از نظریه کوانتومی اتم‌ها در مولکول‌ها استفاده شده است. نظریه کوانتومی اتم‌ها در مولکول‌ها (QTAIM) [۳] ارتباط مستقیمی بین خاصیت توپولوژی چگالی بار، نقاط بحرانی و نمودارهای مولکولی یا بلوری را برقرار پیوندها و ساختار شیمیایی بلور را توسط توپولوژی چگالی بار تعیین می‌کند. در این نظریه اثبات می‌شود که توپولوژی چگالی بار، قادر به تعیین یک شرط مرزی یکتا، برای هر دستگاه اتمی است. چگالی بار الکترونی مثل هر رویه دیگری دارای هندسه و توپولوژی یکتایی است. توپولوژی میدان نرده‌ای سه بعدی با تعیین نقاط بحرانی مشخص می‌شود. مهم‌ترین خاصیت توپولوژی چگالی بار وجود یک بیشینه موضعی است که در مکان هسته رخ می دهد. با استفاده از این موضوع خمره‌های اتمی را در اطراف اتم‌ها رسم کرده‌ایم. توپولوژی یک روش منحصر به فرد و کمی را برای تفکیک فضاهای اتمی از یکدیگر مبتنی بر سطوح شار صفر پیشنهاد می‌کند. سطوح شار-صفر که یک هسته را در بر می‌گیرند، خمره‌های اتمی نامیده می‌شوند [۳]. پس از آن با استفاده از چگالی بار در نقاط بحرانی هموار توپولوژی [۴, ۵] را به دست آورده‌ایم. در اینجا منظور از هموار، میزان پستی و بلندی در رویه چگالی بار است. همچنین علامت لاپلاسی چگالی بار الکترونی در نقاط پیوند اطلاعاتی درمورد نوع پیوند می‌دهد [۶] که در اینجا به بررسی این موضوع نیز پرداخته‌ایم.

روش محاسباتی

برای محاسبه نقاط بحرانی و بررسی توپولوژی یک بلور، می‌بایست ابتدا ساختار آن رسم شود و سپس چگالی بار الکترونی از آن استخراج شود. در اینجا برای محاسبه چگالی بار از روش FP-LAPW با استفاده از کد محاسباتی WIEN2k [۷] بهره گرفته‌ایم .پس از محاسبه دقیق چگالی بار با استفاده از کد CRITIC2 [۸] که بر پایه نظریه اتم‌ها در مولکول‌ها می‌باشد، نقاط بحرانی، چگالی بار و لاپلاسی چگالی بار را در این نقاط و خمره‌های اتمی به دست آورده‌ایم. برای به دست آوردن نقاط بحرانی مشتق اول چگالی بار را طبق رابطه (۱) برابر صفر قرار می‌دهیم،

$$\vec{\nabla}\rho(r)=\frac{\partial\rho}{\partial x}i+\frac{\partial\rho}{\partial y}j+\frac{\partial\rho}{\partial z}k\rightarrow\begin{cases}=0 & \text{در نقاط بحرانی و در بینهایت}\\ \neq 0 & \text{در جاهای دیگر}\end{cases}\qquad(۱)$$

برای به دست آوردن بیشینه و کمینه نقاط بحرانی نیاز به مشتق دوم است. مشتق دوم برای تابع A(x) یک بعدی در نقطه بحرانی x، حد تفاضل شیب یا مشتق تابع در همسایگی چپ و راست نقطه x است. آرایه ۳×۳ از مشتقات دوم چگالی را، ماتریس هسیان چگالی بار گویند [۹]. مقدار این ماتریس برای نقطه بحرانی r_c به صورت زیر است،

$$A(r)=\begin{bmatrix}\frac{\partial^2\rho}{\partial^2 x} & \frac{\partial^2\rho}{\partial x\partial y} & \frac{\partial^2\rho}{\partial x\partial z}\\ \frac{\partial^2\rho}{\partial y\partial x} & \frac{\partial^2\rho}{\partial^2 y} & \frac{\partial^2\rho}{\partial y\partial z}\\ \frac{\partial^2\rho}{\partial z\partial x} & \frac{\partial^2\rho}{\partial z\partial y} & \frac{\partial^2\rho}{\partial^2 z}\end{bmatrix}\qquad(۲)$$

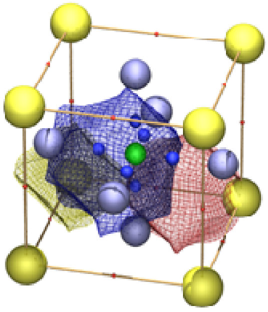
به علت حقیقی و متقارن بودن این ماتریس، می توان آن را قطری کرد. قطری کردن این دستگاه معادل با گردش محورهای مختصات است که در اثر این گردش، محورهای مختصات روی محورهای انحنای اصلی نقاط بحرانی قرار می‌گیرند.

$$A(r)=\begin{bmatrix}\frac{\partial^2\rho}{\partial^2 x} & 0 & 0\\ 0 & \frac{\partial^2\rho}{\partial^2 y} & 0\\ 0 & 0 & \frac{\partial^2\rho}{\partial^2 z}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\alpha_1 & 0 & 0\\ 0 & \alpha_2 & 0\\ 0 & 0 & \alpha_3\end{bmatrix}\qquad(۳)$$

عناصر روی قطر اصلی، ویژه مقادیر این ماتریس هستند. بدین ترتیب ویژه مقادیر و نوع نقاط بحرانی مشخص می‌شوند. چگالی بار الکترونی در نقاط بحرانی که شامل اتمها می‌شود، بیشینه است. توپولوژی در تقسیم بندی طبیعی، حجم (Ω) یک اتم در مولکول را مشخص می کند. سطح محدود به یک اتم با حجم Ω در یک مولکول دارای شار-صفر الکترونی است، زیرا خطوط شار گرادیان از آن عبور نمی‌کنند. در نتیجه شرط زیر را داریم:

$$\nabla\rho(\mathbf{r}).\mathbf{n}(\mathbf{r}) = ٠ \qquad (۴)$$

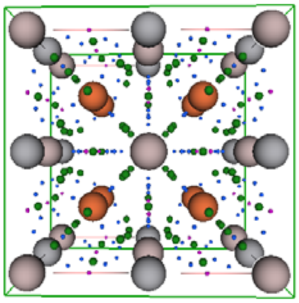
که در این رابطه $\mathbf{r}$ بردار مکان و $\mathbf{n}(\mathbf{r})$ بردار عمود به سطح $S(\Omega)$ می‌باشد. سطوح شار-صفر که یک هسته را در بر می‌گیرند، خمره‌های اتمی نامیده می‌شوند. یک اتم در مولکول به عنوان یک هسته وخمره مربوط به آن تعریف می‌شود. نتایج محاسبات در شکل‌های (۱) و (۲) با استفاده از برنامه‌های TESSEL و GEOMVIEW به طور کیفی، و در جدول (۱) به طور کمی با استفاده از کد CRITIC2 نشان داده شده‌اند.



شکل ۱.خمره‌های اتمی رسم شده برای ترکیب Fe_2VAl

جدول ۱ . ویژگی‌های خمره‌های اتمی

نام عنصر	بار	چگالی بار الکترونی	Mult
F	۱/۳۵۸۴۵۸۹۱	۱/۵۳۰۹۹	۸
V	۰/۸۶۰۱۲۱۸۸	۹/۹۸۵۱۴	۴
Al	۱/۸۵۶۸۷۹۰۱	۱/۴۹۰۸	۴



شکل ۲.نقاط بحرانی برای ترکیب Fe_2VAl

با کمک داده‌های خروجی کد CRITIC2 که در جدول (۲) آورده شده‌اند، می‌توان همواری توپولوژی بلور Fe_2VAl را به دست آورد.

$$\mathrm{fa} = \frac{\rho_c^{\mathrm{min}}}{\rho_b^{\mathrm{max}}} \qquad (۵)$$

در این رابطه ρ_c^{min} مقدار کمینه چگالی بار در نقطه قفس و ρ_b^{max} مقدار بیشینه چگالی بار در نقطه پیوند می‌باشند. همواری توپولوژی معمولاً تنها برای الکترون‌های ظرفیت بررسی می‌شود، زیرا این الکترون‌ها هستند که نقش عمده در تشکیل پیوندها و نحوه گذار توپولوژی دارند. این عبارت مشخص کننده خواص فلزی مواد است.

جدول ۲ .هموار ی توپولوژی در ترکیب Fe_2VAL

نام ترکیب	ρ_c^{min}	ρ_b^{max}	fa هموار ی چگالی برحسب درصد
Fe_2VAl	۳/۸۵۷۰۳	۴/۶۱۶۵۰	۸۳/۵۴

علامت لاپلاسی چگالی بار در نقطه پیوند بین اتم‌های مختلف اطلاعاتی درباره نوع پیوند بین اتمها می‌دهد. در ترکیب Fe_2VAl این علامت مثبت می‌باشد. علامت مثبت لاپلاسی در این نقاط

نشانه فرورفتگی در چگالی بار است، در نتیجـه آن پیونـد از نـوع قوی یونی یا ضعیف مولکولی(واندروالسی) می‌باشد.

جدول ۳. چگالی بار الکترونی و لاپلاسی در نقاط پیوند

لاپلاسی در نقطه پیوند	چگالی در نقطه پیوند	نقاط پیوند Pg
۶/۵۲۶۵۲	۴/۵۴۹۹۷	C۳v
۳/۴۴۲۳۶	۴/۶۱۶۵۰	D۲h
۳/۶۵۷۳۷	۶/۴۳۴۴۲	C۳v

نتیجه گیری

نقاط بحرانی و خمره‌های اتمی برای Fe_2VAl رسم شده‌اند. هموارى توپولوژی به دست آمده برای این ترکیب نشان‌دهنده این است که ۸۳ درصد پیوندها یونی می‌باشند. این نکته و علامت لاپلاسی به دست آمده، نشان می‌دهند که پیوند از نوع قوی یونی می‌باشد. با توجه به مطالب فوق و اتم های سازنده این ترکیب می‌توان نتیجه گرفت درصد بیشتری از پیوندها از نوع فلزی هستند. بنابراین انتظار بر این است که Fe_2VAl به صورت یک ترکیب شبه فلزی عمل کند و در اثر برخی محرک‌های خارجی از خود ویژگی‌های فلزی بروز دهد.

مراجع:

۱. C.-S. Lue, R.-F. Liu, M. Song, K. Wu, and Y. Kuo, "*Chemical pressure effect on the transport and electronic band structure of $Fe_2V_{1-x}Nb_xAl$,*" PHYSICAL REVIEW B **78**, 165117 (2008).

۲. Y. Feng, J. Y. Rhee, T. A. Wiener, D. W. Lynch, B. E. Hubbard, A. J. Sievers, D. L. Schlagel, T. A. Lograsso, and L. L. Miller, "*Physical properties of Heusler-like Fe_2VAl,*" PHYSICAL REVIEW B **63**, 165109 (2001).

۳. R. F. W. Bader, "*Atoms in molecules: a quantum theory. International series of monographs on chemistry 22,*" (Clarendon Press, Oxford, 1990).

۴. B. Lasri, I. M. Boudia, and T. Ouahrani, "*Full potential calculations and atom in molecule analysis of the bonding properties of perovskites Borides XRh3B (X= Dy, Ho, Er),*" in *EPJ Web of Conferences*(EDP Sciences), p. 03002.

۵. A. Otero-De-La-Roza, and V. Luaña, "*Topological Characterization of the Electron Density Laplacian in Crystals. The Case of the Group IV Elements,*" Journal of Chemical Theory and Computation **6**, 3761-3779.

۶. محمد بیات بیاتانی، برومند نوروزی و سعید جلالی اسدآبادی, "*مطالعه توپولوژی چگالی بار در بلور خالص fcc_C60 بمنظور بررسی ماهیت پیوندهای بین اتمها و مولکولهای این ترکیب,*" اولین همایش ملی نانومواد و نانوتکنولوژی، شاهرود، (۱۳۹۰).

۷. P. Blaha, K. Schwarz, G. K. H. Madsen, D. Kvasnicka, and J. Luitz *" ,WIEN2k,"* An augmented plane wave plus local orbitals program for calculating crystal properties, Vienna University of Technology, Austria (2001).

۸. A. Otero-de-la-Roza, M. A. Blanco, A. M. Pendás, and V. Luaña, "*Critic: a new program for the topological analysis of solid-state electron densities,*" Computer Physics Communications **180**, 157-166 (2009).

۹. C. r. F. Matta, and R. J. Boyd, *The quantum theory of atoms in molecules* (John Wiley & Sons, 2007).

بررسی خواص اپتیکی نیترید تیتانیوم (TiN) بر اساس نظریه تابعی چگالی و کد محاسباتی WIEN2k

بااختیار سلمانی پاک ، نوشین ؛ کنگرلو، هاله

گروه فیزیک، دانشگاه آزاد اسلامی واحد ارومیه، ارومیه

چکیده

*در این مقاله خواص اپتیکی ساختار نیترید تیتانیوم مورد بررسی قرار گرفت. محاسبات با استفاده از روش امواج تخت تقویت شده ی خطی (**LAPW**) بر اساس نظریه تابعی چگالی (**DFT**) و کد محاسباتی **WIEN2k** انجام شده است. برای بدست آوردن خواص اپتیکی این ترکیب از جمله، قسمت حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک، ضریب شکست و ضریب خاموشی، تابع اتلاف انرژی و رسانندگی اپتیکی از تقریب چگالی موضعی(**LSDA**) و تقریب گرادیان تعمیم یافته (**GGA**) و تابعی **PBE** بهره گرفته شده است و در نهایت نتایج با هم مقایسه شده اند. نتایج بدست آمده برای ثابت شبکه سازگاری خوبی با نتایج تجربی دارد.*

Study of Optical Properties of Titanium Nitride (TiN) Based on DFT Calculation and WIEN2k package

Baekhtyar salmani pak, Nooshin; Kangarlou, Haleh

Department of physics, Urmia Branch, Islamic Azad University, Urmia

Abstract

In this paper, the optical properties of TiN have been investigated. These investigations are done by using the linearized augmented plane wave method (LAPW) within density functional theory (DFT) with WIEN2k package. To obtain the optical properties of this composition such as real and imaginary part of dielectric function, refractive index and the extinction coefficient, energy loss function and optical conductivity have been used local spin density approximation (LSDA) and generalized gradient approximation (GGA) and PBE functional and finally, the results have been compared. Obtained results for lattice parameters are in good agreement with experimental results.

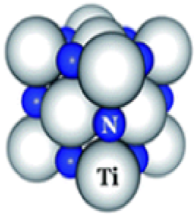
PACS No. 78

مقدمه

نیترید تیتانیوم به عنوان یک ماده با خواص مکانیکی بسیار عالی(سختی زیاد و مقاومت بسیار خوب در برابر خوردگی)، مقاومت الکتریکی بسیار پایین، پایداری شیمیایی و حرارتی بالا، خواص اپتیکی جالب توجه (تنوع رنگ از طلایی تا قهوه ای تیره) شناخته شده است[۳-۱]. این ماده به دلیل دارا بودن ویژگی های خاص، کاربردهای وسیعی در صنعت دارد که از آن جمله میتوان به افزایش طول عمر مفید قطعات و ابزار، ایجاد مقاومت در برابر خوردگی، استفاده در صنعت نیمه هادی ها به عنوان سد رسانایی بین یک فلز رسانا و سیلیکون، پوشش های حفاظتی و تزیینی و ساخت جواهرات، همچنین به دلیل غیر سمی بودن و سازگاری خوب با بدن انسان در ساخت پروتزهای پزشکی و دندانپزشکی اشاره کرد[۵-۴].

روش محاسبات

در محاسبات نظری حاضر، خواص اپتیکی بلـور نیترید تیتـانیوم (TiN) با استفاده از روش امـواج تخـت تقویـت شـده خطـی بـا پتانسیل کامـل(FP-LAPW) درچـارچوب نظریـه تـابعی چگـالی (DFT) [۶] توسط کد محاسباتیWIEN2k [۷] انجام شده است کلیه محاسبات ساختار الکترونـی در چـارچوب دو نـوع تقریـب، گرادیان تعمیم یافته (GGA) بـا تـابعی PBE و چگـالی موضعـی (LSDA) و با اعمـال پارامترهـای یکسـان انجـام گردیـد. شـعاع کره های مافین تین با توجه به طول پیوند آنها و بیشـینه بـار درون کرات برای تیتانیوم و نیتروژن بـه ترتیـب۲/۱۵۰۰ و ۱/۸۵۰۰ (در واحـد اتمـی) انتخـاب شـده انـد. پـارامتر هـم گرایـی RK_{max} (R کوچکترین شعاع مافین-تین و K_{max} بردار مـوج قطـع اسـت) برابر۷ در نظر گرفته شده است. بـرای جـدا سـازی حالـت هـای ظرفیت از حالات مغزه انـرژی جـدایی ۶- ریـدبرگ را مبنـا قـرار دادیـم. در اجـرای برنامـه بـازه هـم گرایـی انـرژی را در حـدود ۰/۰۰۰۱ Ry قرار دادیم و به هم گرایی رسـیدیم. بـرای محاسـبات تعداد نقاط درنظرگرفته شده در منطقه اول بریلیون ۲۵۶ نقطـه بـود کـه بـازای آن یـک شـبکه ی ۲۰×۲۰×۲۰ ایجـاد شـده اسـت. نیترید تیتانیوم دارای ساختار NaCl گونه است محاسبات برای این بلور در فاز مکعبی fcc و گـروه فضـایی(Fm-3m) و$\alpha=\beta=\gamma=90°$ انجام شده است. شکل ۱ نمایی از این ساختار را در فضای حقیقی نشان میدهد



شکل ۱ : ساختار بلوری نیترید تیتانوم

بحث و نتایج

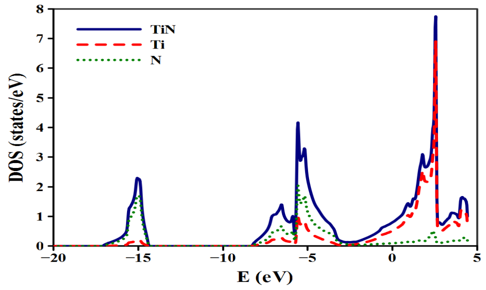
با محاسبه و رسم منحنی انرژی بر حسب حجم، پارامترهای بهینه شده شبکه برای این ترکیب به دست آمده است.

جدول ۱: نتایج بهینه سازی ثابت شبکه با مقایسه تقریب های اعمال شده در این تحقیق، نتایج دیگران و نتایج تجربی

ثابت شبکه (A°)		
نتایج بدست آمده در این تحقیق	تابعی PBE	۴/۲۶۴
	تابعی LSDA	۴/۱۹
نتایج نظری سایر محققین [۸]	تابعی PBE	۴/۲۴۷
	تابعی LSDA	۴/۱۷۱
نتایج تجربی	[۹]	۴/۲۶
	[۱۰]	۴/۲۴

با توجه به جدول فوق بهترین سازگاری بـا نتـایج تجربـی [۱۰-۹] مقدار مربوط به تابعی PBE می باشد.

چگالی حالت های ترکیب TiN در شکل ۲ رسم شده است که در آن انرژی صفر نشان دهنده تراز فرمی می باشد.



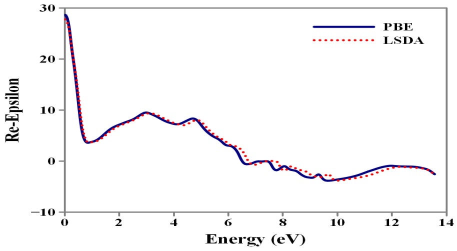
شکل ۲: چگالی حالت های الکترونی TiN

تابع دی الکتریک برای توصیف پاسخ بلور به میدان الکترومغناطیسی به کار برده می شود. در یک حد؛ $\varepsilon(\omega,0)$ پلاسمون های حجمی و سطحی را توصیف می کند. در حد دیگر $\varepsilon(0,k)$ و استتار الکترواستاتیکی برهمکنش های الکترون-الکترون، الکترون- شبکه، و الکترون- ناخالصی در بلورها را توصیف می کند. تابع دی الکتریک از دو قسمت حقیقی و موهومی تشکیل یافته است و دارای دوسهم درون نواری و بین نواری است که سهم درون نواری برای فلزات بکار می رود. تابع دی الکتریک یک تابع مختلط است که به صورت زیر نشان داده می شود:

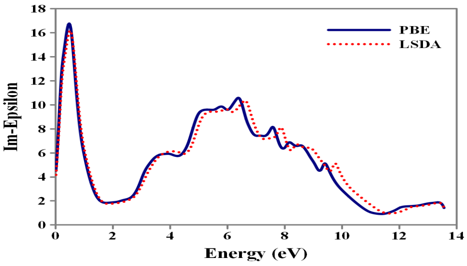
$$\varepsilon(\omega)=\varepsilon_1(\omega)+i\varepsilon_2(\omega) \quad (۱)$$

قسمت حقیقی این تابع بیانگر بخش پراکندگی و اتلاف در جسم و نیز اثر آن روی تابع دی الکتریک است. بخش های حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک برای TiN درشکل ۳ نشان داده شده

است. محاسبات به انرژی کمتر از ۱۴ eV محدود شده است.



شکل۳ (الف) : قسمت حقیقی تابع دی الکتریک TiN



شکل ۳ (ب) : قسمت موهومی تابع دی الکتریک TiN

شکل ۳ (ب) قسمت موهومی تابع دی الکتریک را نشان می دهد که با توجه به شکل قله اول در انرژی حدود ۱ الکترون ولت و قله دوم در انرژی حدود ۷ الکترون ولت مشاهده می شود.

ضریب شکست نیز به مانند تابع دی الکتریک یک تابع مختلط بوده و از رابطه زیر محاسبه می شود:

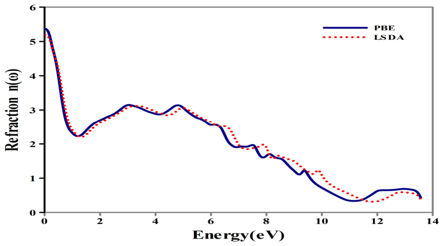
$$n(\omega) = (\omega) + ik(\omega) \qquad (2)$$

که در آن n(ω) قسمت حقیقی ضریب شکست و k(ω) قسمت موهومی ضریب شکست یا ضریب خاموشی است. ضریب خاموشی برای یک ماده، سنجشی از میزان جذب پرتوی الکترومغناطیسی توسط آن ماده است. اگر موج الکترومغناطیسی از داخل آن به آسانی عبور کند ماده ضریب خاموشی پایینی دارد و برعکس اگر پرتویی به سختی داخل ماده نفوذ کند ماده دارای ضریب خاموشی بالاست. قسمت حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک از روابط زیر بدست آیند:

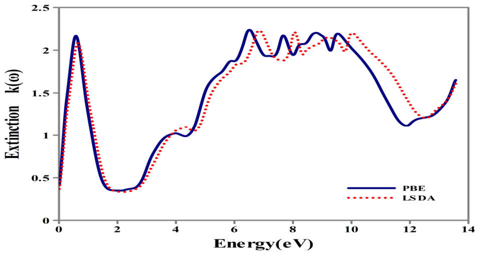
$$n_{ij}(\omega) = \sqrt{\frac{|\varepsilon_{ij}(\omega)| + \mathrm{Re}\,\varepsilon_{ij}(\omega)}{2}} \qquad (۳)$$

$$k_{ij}(\omega) = \sqrt{\frac{|\varepsilon_{ij}(\omega)| - \mathrm{Re}\,\varepsilon_{ij}(\omega)}{2}} \qquad (۴)$$

در نمودارهای شکل۴ (الف) و ۴ (ب) به ترتیب ضریب شکست n(ω) و ضریب خاموشیk(ω) برای ترکیب TiN نشان داده شده است. با توجه به شکل ۴ (الف) مشاهده می شود که برای ترکیب TiN بیشینه ضریب شکست در انرژی صفر الکترون ولت و دارای مقدار حدود ۵/۲ است.



شکل ۴ (الف): قسمت حقیقی تابع ضریب شکست TiN



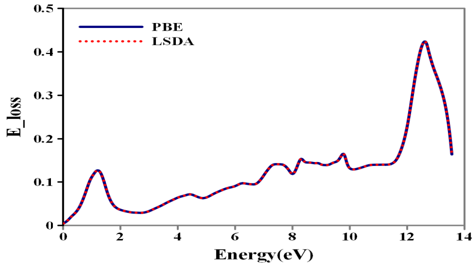
شکل ۴ (ب): قسمت موهومی تابع ضریب شکست TiN

به منظور بررسی بیشتر خواص اپتیکی این ترکیب تابع اتلاف انرژی (EELS) که یکی از مهمترین کمیت ها به منظور بررسی خواص ماکروسکوپی و میکروسکوپی جامدات می باشد محاسبه و در شکل ۵ نشان داده شده است. تابع اتلاف انرژی متناسب با احتمال اتلاف انرژی E در واحد طول، برای یک الکترون در حال عبور از محیط است. رابطه بین تابع دی الکتریک و تابع اتلاف انرژی به صورت زیر است:

$$L_{ij}(\omega) = -\mathrm{Im}\left(\frac{1}{\varepsilon_{ij}(\omega)}\right) \qquad (۵)$$

شاخص ترین پیک در EELS، به عنوان پیک پلاسمونی شناخته می شود که بیانگر برانگیختگی های جمعی چگالی بار الکترونی در بلور است. همانگونه که از شکل پیداست اولین قله در ۱ الکترون ولت دیده می شود و انرژی ماکزیمم اصلی برابر ۱۲/۵ الکترون

ولت است. که متناظر با پلاسمون حجمی است، زیرا در این نقطه $\varepsilon_1=0$.



شکل ۵: تابع اتلاف انرژی TiN

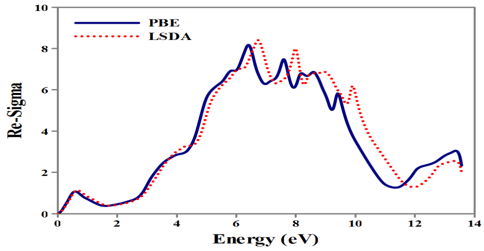
رابطه رسانندگی اپتیکی درون نواری، $\sigma(\omega)$ با بخش موهومی تابع دی الکتریک به صورت زیر است:

$$\sigma(\omega)=(\frac{\omega}{4\pi})\varepsilon_2(\omega) \qquad (۶)$$

تابع رسانندگی یک تابع مختلط است و از رابطه زیر محاسبه می شود:

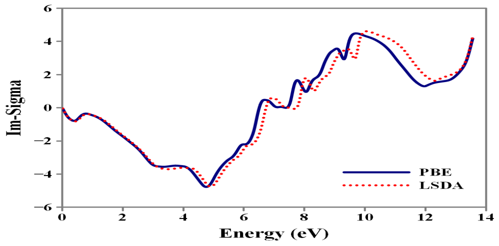
$$\sigma(\omega)=\sigma_1(\omega)+i\,\sigma_2(\omega) \qquad (۷)$$

که در آن $\sigma_1(\omega)$ بخش حقیقی رسانندگی و $\sigma_2(\omega)$ بخش موهومی رسانندگی است. قسمت حقیقی رسانندگی اپتیکی بر حسب انرژی برای ترکیب TiN درشکل ۶ (الف) نشان داده شده است.



شکل ۶ (الف): قسمت حقیقی تابع رسانندگی TiN

با توجه به شکل ۶ (الف) رسانندگی اپتیکی در انرژی حدود ۶/۵ الکترون ولت به مقدار بیشینه خود میرسد که این قله به سبب گذار الکترون ها از حالت های اشغال شده زیر تراز فرمی به اولین قله حالت های اشغال نشده در نوار رسانش می باشد. قسمت موهومی رسانندگی اپتیکی برای TiN درشکل ۶ (ب) نشان داده شده است.



شکل ۶ (ب): قسمت موهومی تابع رسانندگی TiN

نتیجه گیری

در این مقاله خواص اپتیکی نیترید تیتانیوم با استفاده از روش LAPW در چارچوب نظریه تابعی چگالی، با استفاده از بسته محاسباتی WIEN2k با اعمال دو تقریب GGA-PBE و LSDA مورد بررسی قرار گرفت. با مقایسه نتایج مشاهده می شود که خواص اپتیکی با اعمال هر دو تقریب برای ترکیب TiN در یک راستا میباشد و تفاوت اندکی با هم دارند. با این حال نتایج در مورد تمام خواص اپتیکی با اعمال هر دو تقریب در فرکانس های پایین بر هم منطبق و در فرکانس های بالاتر مقادیر قله ها در تقریب LSDA نسبت به تقریب GGA-PBE در راستای فرکانس مقدار کمی جلوتر می رود که این جابجایی متناسب با مقدار فرکانس است. تنها در مورد تابع اتلاف انرژی, مقدار این جابجای به صفر رسیده و نتایج هردو تابعی مطابقت کامل با هم دارند.

مراجع

[1] Allmaier H, Chioncel L and Arrigoni E, "Titanum Nitride – acorrelated metal at the threshold of a Mott transition"; *cond-mat.str-el*, **2**, (2009)
[2]Yeh T.S, Wu J.M and Hu L.J, "The ptoperties of TiN thin films deposited by pulsed direct current magnetron sputtering"; *Thin Solid Films Journal*, **516**, (2008) 21
[3] Saoul N, Henda K, Kesri R, Influence of Nitrogen Content on the Structural and Mechanical Properties of TiN Thin Film, Plasma Fusion **Re, Journal**, Vol. 8, (2009)
[4] Al Jabbari Y.S, Fehrman J, Barnes A. C., Zapf A. M., Zinelis S. and Berzins D. W., Titanium Nitride and Nitrogen Ion Implanted Coated Dental Materials, *Coatings* **2079**, (2012), 160-178
[5] Chen H.C, Tseng B.H, Houng N.P and Wang Y.H, "Titanium nitride diffusion barrier for copper metallization On gallium arsenide"; *thin solid films Journal*, Vol. **445**, (2003) 112-11.
[6] Gross E.K.U. and Kohn W, "Local Density-Functional Theory of Frequency-Dependent Linear Response"; *Phys. Rev. Lett journal*, (2008)
[7] Blaha P, Schwarz et al, "Wien2k, An local orbital Program Calculation the Crystal Properties"; *Techn. Universitat*, Wien, Austria, ISBN 3-951031-1-2, (2001)
[8] Hao P, Fang Y, Sun J, Csonka G.I, Philipsen P.H.T, and Perdew J.P, Lattice constants from semilocal density functionals with zero-point phonon correction, Phys. Rev. B **85**, (2012)
[9] Stampfl C., Mannstadt W., Asahi R., and Freeman A. J., "Electronic structure and physical properties of early transition metal mononitrides Density-functional theory LDA, GGA, and screened-exchange LDA FLAPW calculation"; *Physical Review B 63*, issue **15**, (2001) 155106-155106-11
[10] Nagakura S, Kusunoki T, Kakimoto F. and Hirotsu Y, "Lattice parameter of the non-stoichiometric compound TiN_x"; *Applied Crystallography journal*; **8**, (1975) 65-66.

مطالعه خواص ساختاری، الکترونی و مغناطیسی ترکیب $V_{0.5}Ca_{0.5}Sb$

بگ زاده سارا ؛ احمدیان فرزاد

گروه فیزیک، دانشگاه آزاد اسلامی واحد شهرضا

چکیده

خواص ساختاری، الکترونی و مغناطیسی آلیاژ $V_{0.5}Ca_{0.5}Sb$ در ساختار بلند روی با روش امواج تخت بهبود یافته خطی با پتانسیل کامل در چارچوب نظریه تابعی چگالی مورد بررسی قرار گرفت. محاسبات ساختار نواری خاصیت نیمه فلزی آلیاژ $V_{0.5}Ca_{0.5}Sb$ را در ثابت شبکه تعادلی تایید می کند. گاف در حالت اسپین پایین برابر ۱/۵۵ الکترون ولت است. هیبریداسیون بین اربیتالهای حالتهای V d, Ca p و Sb p مسئول تشکیل گاف نیمه فلزی در آلیاژ $V_{0.5}Ca_{0.5}Sb$ است.

کلید واژه ها : *نظریه تابعی چگالی، نیم فلز، تقریب GGA، خواص الکترونی، خواص مغناطیسی*

The Study of Structural, Electronic and magnetic Properties of $V_{0.5}Ca_{0.5}Sb$ Compound

Bagzadeh Sara ; Ahmadian Farzad

Department of Physics, Islamic Azad University of Shahreza, Shahreza

Abstract

The structural, electronic and magnetic properties of zincblende (ZB) $V_{0.5}Ca_{0.5}Sb$ alloy were investigated using full-potential linearized augmented plane wave (FPLAPW) method based on spin-polarized density functional theory (DFT). The band structure calculation confirms the half-metallic (HM) characteristic of $V_{0.5}Ca_{0.5}Sb$ alloy at its equilibrium lattice constant. The spin-down state gap is 1.55 eV. The hybridization between V d, Ca p, and Sb p states is responsible for the formation of the half metallicity gap in the $V_{0.5}Ca_{0.5}Sb$ alloy.

Key Word : *Density Functional Theory, Half-Metal, GGA Approximation, Electronic Properties, Magnetic Properties*

PACS No. 70

مقدمه

خاصیت نیمه فلزی اولین بار در سال ۱۹۸۳ توسط دی گروت در آلیاژ نیمه هویسلرNiMnSb کشف گردید. سپس در ادامه مطالعات زیادی بر روی نیمه فلزات انجام گرفت. یکی از این دسته مواد، نیمه فلزات آنتی فرومغناطیس هستند که اولین بار در سال ۱۹۹۵ با جایگزینی اتم V با اتم Mn وSb با In در آلیاژ نیمه هویسلر VFeSb مورد مطالعه قرار گرفت [1]. این مواد به دلیل داشتن قطبش اسپینی ۱۰۰ درصد در سطح فرمی و ممان مغناطیس صفر از اهمیت ویژه ای برخوردارند. سپس در ادامه دسته های دیگری از نیمه فلزات شامل ترکیبات پروسکیت ها مانند K_2MnRhO_6, $Sr_7RbCaRe_3Cu_4O_{24}$[2] و La_2CrWO_6[3] نیمرسانای مغناطیسی رقیق جایگزین شده با اتم های تیواسپنیل[4] آلیاژهای هویسلر CrMnZ[5] و Cr_2MnZ(Z=P,As,Sb)[6] و

Mn_2VAl جایگزین شده با Co [7] ، ابرياخته های تک لایه ای [8] و زنجیره های فلزی یک بعدی [9] مورد مطالعه و بررسی قرار گرفته اند. اخیرا روی ترکیبات CaSb وVSb در ساختار ZB کارهای نظری و تجربی زیادی انجام شده است. [10] CrSb دارای خاصیت نیمه فلزی است و مسئولیت اصلی خاصیت نیمه- فلزی به الکترونهای d اتم Cr مربوط است. همچنین خاصیت نیمه فلزی در ترکیب CaSb تحقیق شده است[11] در مورد CaSb مسئول اصلی خاصیت نیمه فلزی به اربیتال p اتم Sb مربوط است. در ادامه روی آلیاژهای ترکیبی $Cr_{1-x}Ca_xSb$ مطالعاتی انجام شده است و خاصیت نیمه فلزی به ازای غلظت های مختلف , x= 0 0.25, 0.5, 0.75 مطالعه گردیده و خاصیت نیمه فلزی در همه غلظت ها مشاهده شده است.[12] چونکه خاصیت نیمه فلزی در ساختار بلندروی ترکیب VSb نیز به اثبات رسیده است[13] لذا به نظر می رسد کار برروی ترکیب $V_{0.5}Ca_{0.5}Sb$ نتایج جدیدی دربرداشته باشد. در این مقاله خواص ساختاری، الکترونی و مغناطیسی ترکیب $V_{0.5}Ca_{0.5}Sb$ را مورد بررسی قرار می دهیم.

روش محاسبات

محاسبات با استفاده از روش امواج تخت بهبود یافته خطی با پتانسیل کامل(FP-LAPW) بر مبنای نظریه تابعی چگالی و با نرم افزار Wien2k انجام شده است. پارامتر $R_{mt}K_{max}$ (R_{mt} شعاع کوچکترین کره موفین-تین و K_{max} بیشینه مقدار بردار موج در بسط تابع در ناحیه بین جایگاهی است) برابر ۸ و پارامتر Kpoint (تعداد بردارهای موج داخل منطقه اول بریلوئن) برابر ۳۴۰۰ انتخاب شده است.

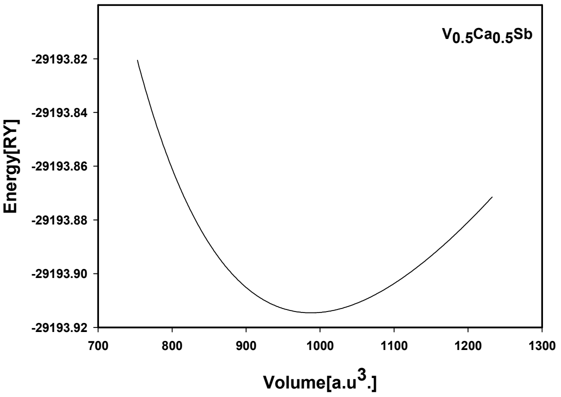
خواص ساختاری

نمودار انرژی بر حسب حجم ياخته بسيط حاوی نکات بسیار مهمی نظیر ثابت شبکه، مدول حجمی و مشتق مدول حجمی بلور می باشد. برای محاسبه خواص ساختاری آلیاژ $V_{0.5}Ca_{0.5}Sb$ ابتدا مقادیر انرژی بر حسب حجم را برای این ساختار محاسبه و سپس آن را با معادله حالت مورناگون برازش می دهیم. معادله زیر به معادله حالت مورناگون[14] معروف است:

معادله ۱:

$$E = E_0 + V\frac{B_0}{B_0'}\left[\frac{(\frac{V_0}{V})^{B_0'}}{B_0'-1}+1\right]-\frac{B_0V_0}{B_0'-1}$$

در این معادله V_0 حجم ياخته بسيط، E_0 انرژی حالت پایه در دما و فشار صفر، B_0 مدول حجمی و 'B مشتق مدول حجمی است. در شکل ۱ نمودار انرژی-حجم برای آلیاژ $V_{0.5}Ca_{0.5}Sb$ نشان داده شده است. کمینه این نمودار، حجم ياخته بسيط را ارائه می دهد که با استفاده از آن پارامتر شبکه بهینه شده، مدول حجمی و مشتق مدول حجمی به دست می آید. پارامترهای ساختاری تعادلی آلیاژ $V_{0.5}Ca_{0.5}Sb$ در جدول (۱) گزارش شده است.



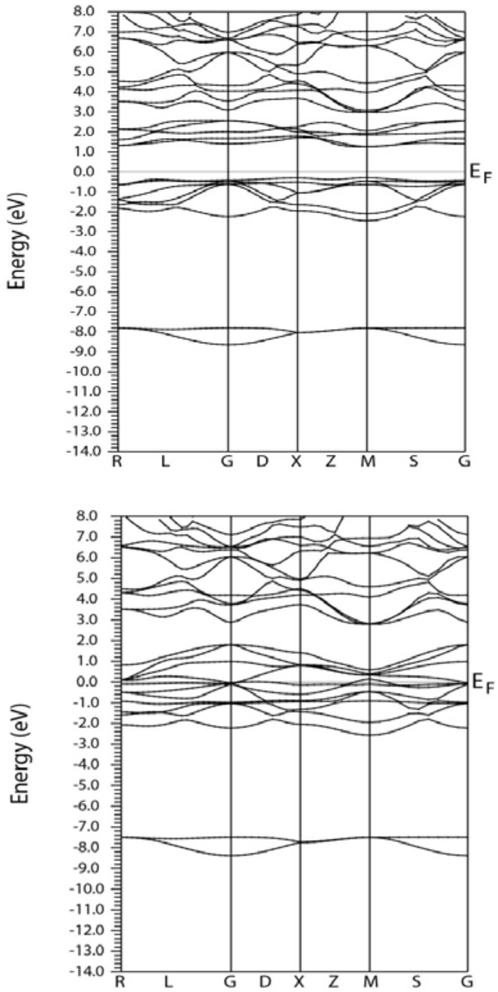
شکل ۱: نمودار انرژی بر حسب حجم ياخته بسيط $V_{0.5}Ca_{0.5}Sb$ در فاز بلندروی

جدول ۱: پارامترهای ساختاری محاسبه شده برای ترکیب $V_{0.5}Ca_{0.5}Sb$

پارامتر	B'	B(Gpa)	$a(A^0)$
اندازه پارامتر	۴/۱۹	۳۰/۲۲	۴/۷

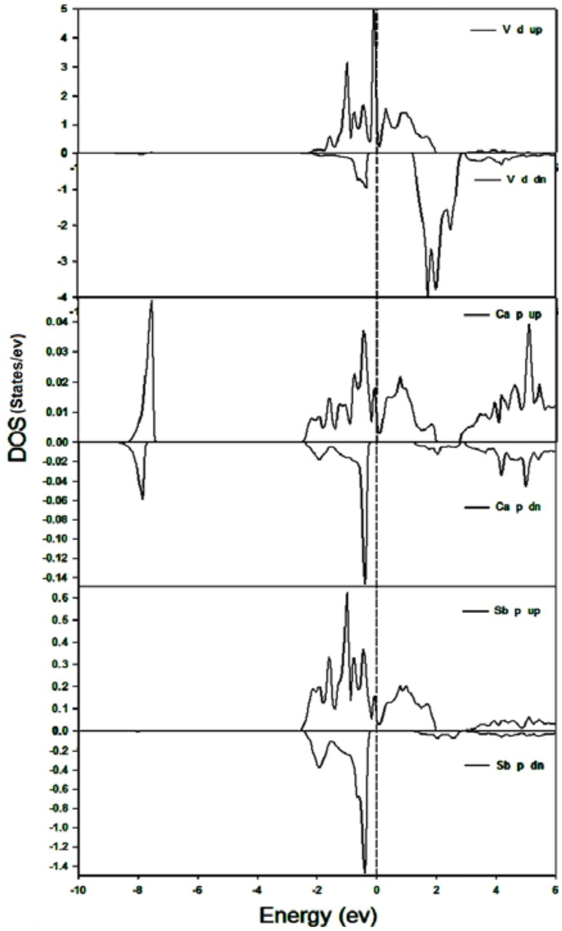
خواص الکترونی

با محاسبه ی ساختار نواری هر ترکیب می توان به ماهیت بلور و خواص آن پی برد. در شکل۱ نمودار ساختار نواری ترکیب $V_{0.5}Ca_{0.5}Sb$ برای حالت های اسپین بالا و پایین نشان داده شده است.



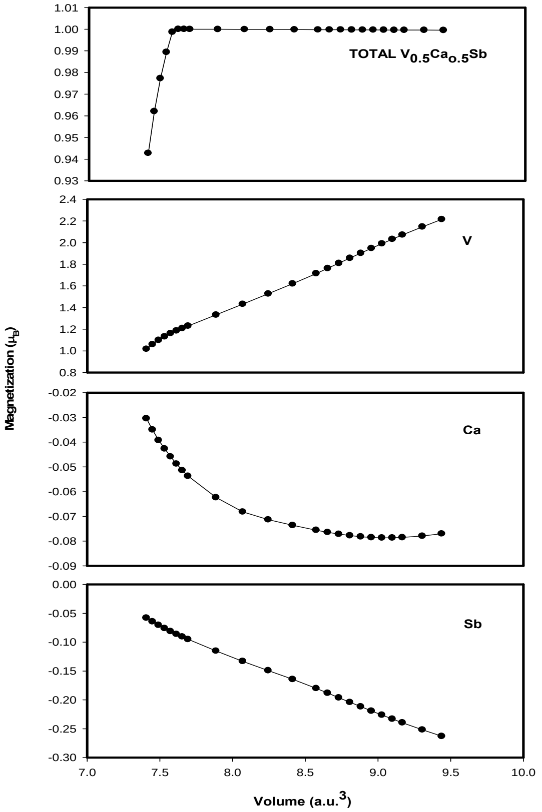
شکل ۲: ساختار نواری ترکیب $V_{0.5}Ca_{0.5}Sb$ برای حالت اسپین پایین (شکل بالا) و اسپین بالا (شکل پایین)

همانطور که ساختار نواری نشان می دهد این ترکیب دارای گاف نواری مستقیم در حالت اسپین پایین در نقطه M می باشد و مقدار این گاف برای این ترکیب برابر ۱/۵۵ الکترون ولت به دست آمده است. در حالت اسپین بالا ساختار نواری خاصیت فلزی ترکیب را پیش بینی می کند. بنابراین آلیاژ $V_{0.5}Ca_{0.5}Sb$ از خاصیت نیمه فلزی برخوردار است. برای بررسی بیشتر خاصیت نیم فلزی به بحث و بررسی منحنی چگالی حالات الکترونی این ترکیب می‌پردازیم. نمودار چگالی حالتها نحوه مشارکت اتم های مختلف هر ترکیب را در نواحی انرژیهای متفاوت بیان می کند. حضور سطح فرمی در گاف اسپین پایین و حالات الکترونی موجود در سطح فرمی حالت اسپین بالا، خاصیت نیمه فلزی این آلیاژ را تایید می‌کند. حالتهای الکترونی در ناحیه نزدیک سطح فرمی عمدتا مربوط به اوربیتال d اتم V است. نمودار چگالی حالتها نشان میدهد که هیبریدشدگی بین اربیتال های p اتم p، Sb اتم Ca و اربیتال d اتم V مسئول اصلی خاصیت نیمه فلزی ترکیب $V_{0.5}Ca_{0.5}Sb$ است.



شکل ۳: نمودار چگالی حالت های جزئی برای ساختار $V_{0.5}Ca_{0.5}Sb$

در ادامه به بررسی خواص مغناطیسی می پردازیم.



شکل ۴: نمودار گشتاور مغناطیسی کلی و اتمی ترکیب $V_{0.5}Ca_{0.5}Sb$ بر حسب پارامتر شبکه

مقدار گشتاور مغناطیسی کل برای این ترکیب در ساختار بلندروی در حالت تعادلی برابر۱ مگنتون بوهر به دست آمده است و صحیح بودن آن خاصیت نیمه فلزی این ترکیب را تایید می کند. گشتاور مغناطیسی اتمهای V , Ca وSb به ترتیب برابر ۱/۹، ۰/۰۸- و ۰/۲۱- مگنتون بوهر محاسبه شده است. در شکل ۳ نمودار گشتاورمغناطیسی کلی و اتمی ترکیب $V_{0.5}Ca_{0.5}Sb$ نشان داده شده است. همانطور که مشاهده می شود در حجم های پایین گشتاور مغناطیسی به کمتر از یک کاهش می یابد. علت آن است که با کاهش حجم و افزایش فشار هیبریدشدگی بین اتم های همسایه افزایش یافته که این خود باعث کاهش گشتاور مغناطیسی کل می شود. همچنین علامت مثبت گشتاور مغناطیسی اتم V و علامت منفی گشتاور مغناطیسی اتم های Ca و Sb حکایت از نظم فری مغناطیسی ترکیب $V_{0.5}Ca_{0.5}Sb$ دارد.

نتیجه گیری

در این مطالعه محاسبات بر پایه نظریه تابعی چگالی و با روش امواج تخت بهبود یافته خطی با پتانسیل کامل(FP-LAPW) و با تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) انجام شده است. خواص ساختاری، الکترونی ومغناطیسی آلیاژ $V_{0.5}Ca_{0.5}Sb$ در ساختار بلند روی بررسی شد. نتایج ساختار نواری و چگالی حالت ها نشان میدهد که این ترکیب دارای خاصیت نیمه فلزی است. مقدار گاف اسپینی برابر ۱/۵۵ الکترون ولت بدست آمده است. منشا اصلی گاف نیم فلزی ناشی از هیبریداسیون قوی بین اوربیتالهای p اتمهای Ca وSb و d اتم V است.

مراجع:

[1] H. van Leuken, R.A. de Groot, Phys. Rev. Lett. 74 (1995) 1171.

[2] Y. Nie, Xiao Hu, Phys. Rev. Lett. 100 (2008) 117203.

[3] V. Pardo, W.E. Pickett, Phys. Rev. B 80 (2009) 054415.

[4] M.S. Park, S.K. Kwon, B.I. Min, Phys. Rev. B 64 (2001) 100403(R).

[5] E. S, as, ıogˇlu, Phys. Rev. B 79 (2009) 100406(R).

[6] I. Galanakis, K. Ozdogˇan, E. S, as, ıogˇlu, B. Aktas, , Phys. Rev. B 75 (2007) 172405.

[7] I. Galanakis, K. Ozdogˇan, E. S, as, ıogˇlu, B. Aktas, , Phys. Rev. B 75 (2007) 092407.

[8] M. Nakao, Phys. Rev. B 77 (2008) 134414.

[9] K. Yamaura, et al., Phys. Rev. Lett. 99 (2007) 196601.

[10] I. Galanakis, P. Mavropoulos, Phys. Rev. B 67 (2003) 104417.

[11] M. Sieberer, J. Redinger, S. Khmelevskyi, P. Mohn, Phys. Rev. B 73 (2006) 024404

[12] G.Y. Gao, K.L. Yao, Appl. Phys. Lett. 91 (2007) 082512; G.Y. Gao, K.L. Yao, E. S, as, ıogˇlu, L.M. Sandratskii, Z.L. Liu, J.L. Jiang, Phys. Rev. B 75 (2007) 174442;

[13] M.S. Miao and Walter R.L. Lambrecht, Phys. Rev. B 71 (2005) 064407

[14] Brich, F,. Theeffect of Pressure Upon The Elastic Parameters of Finitstrain, J.Apll. Phys,9.279,(1938).

محاسبه‌ی بهره‌ی درمان در BNCT به کمک نرم افزار Geant4

بدیعیان ، زینب سادات[۱] ؛فیروزآبادی، محمدمهدی[۲] ؛ ظریف، هادی[۳]

[۱] دانشکده علوم، گروه فیزیک ، دانشگاه بیرجند

[۲] دانشکده علوم، گروه فیزیک ، دانشگاه بیرجند

[۳] دانشکده علوم، گروه فیزیک، دانشگاه فردوسی

چکیده

محاسبه‌ی بهره‌ی درمان در BNCT یکی از معیارهای اندازه‌گیری در فانتوم می‌باشد. در این مقاله با استفاده از روش مونت کارلو و کد Geant4 فانتوم سر و تومور طراحی شد و سپس با تغییر انرژی نوترون فرودی از بازه‌ی حرارتی تا سریع ، دوز جذبی کل در تومور و بافت سالم در هر انرژی بدست آمد سپس بهره‌ی درمان محاسبه شد. نتایج نشان می‌دهد در حالتی که غلظت بور در تومور 43ppm و در بافت سالم 10ppm باشد و تومور کروی و به شعاع ۲سانتیمتر در عمق ۲ سانتیمتری از سر باشد بیشترین بهره‌ی درمان را با انرژی نوترون فرودی بین 1keV تا 5keV داریم.

Therapeutic Gain Calculation in BNCT with Geant4

Badieyan, Zeinab Sadat[1]; Zarif, Hadi[2] ;Firoozabadi,Mohamad mehdi[3]

[1] Department of Physics, University of Birjand
[2] Department of Physics, University of Birjand
[3]Department of Physics, Ferdowsi University, Mashhad

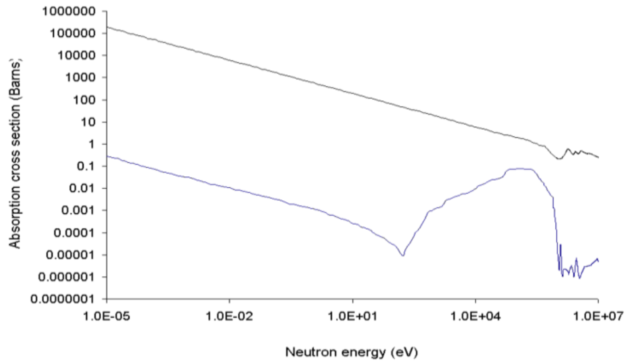
Abstract

The calculation of Therapeutic gain is one of the basic metrics in the effectiveness of BNCT treatment. In this paper, using the Geant4 Monte Carlo code and the phantom was designed and tumors. Then the incident neutron energy range from thermal to fast, the total absorbed dose in the tumor and normal tissues were obtained at each energy. The gain was calculated for each treatment . The results showed that when the concentration of boron in the tumor is 43ppm and 10ppm in normal tissue and tumor spherical radius of 2 cm and a depth of 2 cm from the scalp we have most of the treatments with the incident neutron energy of 1keV to 5keV.

مقدمه

روش درمانی BNCT درمان بوسیله‌ی گیراندازی نوترون توسط بور می‌باشد که به خصوص برای تومورهایی مانند تومورمغزی گلیوبلاستوما که جراحی برای آن سخت و پرمخاطره است به کار می‌رود[۱]. اولین بار لوچر مفهوم نوترون درمانی با بور را بیان کرد [۲]و پس از او پروفسور هاتاناکا در ژاپن در سال ۱۹۶۸ درمان‌های موفقیت آمیزی را انجام داد.[۳] نوترون تراپی بر پایه‌ی واکنش هسته‌ای می‌باشد، نوترون حرارتی با برخورد به هسته‌ی بور به علت سطح مقطع بالای واکنش (۳۸۳۶بارن) به عناصر آلفا و لیتیوم پرانرژی شکافته می‌شود همانطور که در شکل ۱مشاهده می‌شود، بیشترین سطح مقطع واکنش نوترون با بور در بازه‌ی نوترون‌های حرارتی است و با بیشتر شدن انرژی نوترون سطح مقطع واکنش به شدت کاهش می یابد عناصرتولید شده به

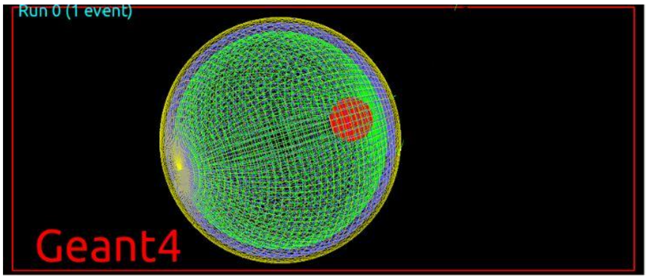
علت برد کم بیشتر انرژی خود را در سلول سرطانی برجای می-گذارند و سبب تخریب تومور می‌شود [٤].



شکل۱:سطح مقطع واکنش ^{10}B و ^{11}B با نوترون–نمودار بالایی سطح مقطع واکنش برای ^{10}B ونمودار پایینی سطح مقطع واکنش برای ^{11}B می-باشد.[ENDF]

شبیه سازی فانتوم سر، تومور و چشمه‌ی نوترونی

فانتوم سری که در اینجا با استفاده از کد Geant4 طراحی شد با الگوگیری از فانتوم اسنایدر رسم شد با این تفاوت که فانتوم سر را به‌جای بیضوی، کروی به قطر ۲۲/٦سانتیمتر در نظر گرفته شد.همچنین توموری کروی به شعاع ۲ سانتیمتر در عمق ۲ سانتیمتری در داخل فانتوم سر قرار داده شد. در این شبیه سازی تومور حاوی 43ppm بور(^{10}B) و مغز حاوی 10ppmبور می-باشد. فانتوم شبیه‌سازی شده در شکل ۲نشان داده شده‌است.



شکل۲: فانتوم سری که در کد Geant4 تعریف شده است

از پارامترهای اساسی برای تعریف چشمه در کد مونت کارلوی Geant4 می‌توان به شکل، ابعاد، نوع ذره، انرژی،موقعیت اولیه ذرات و راستای انتشار ذرات چشمه اشاره کرد. در اینجا از یک چشمه ی نوترون گاوسی دایروی و به شعاع ۵ سانتی متر استفاده شده است که در نقطه‌ای به مختصات (x=0,y=0,z=15cm) یعنی در فاصله‌ی تقریبا ۵سانتی‌متری از فانتوم قرار داده شده است که نوترون‌ها را با انرژی‌های متعدد از 0.001keV تا1000keV به سمت هدف گسیل می کند.لازم به ذکر است چشمه‌های نوترون در واقعیت طیفی تقریبا گاوسی شکل دارند و تک انرژی نمی-باشند.

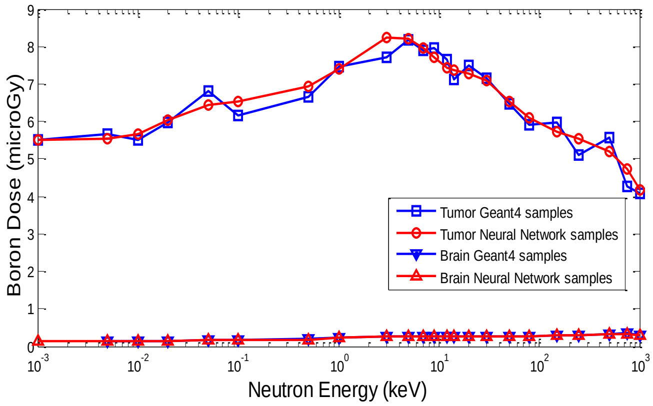
محاسبه‌ی بهره‌ی درمان

روشی برای درمان تومورها مناسب است که کمترین آسیب را به بافت سالم و بیشترین آسیب را به تومور برساند و بیشترین بهره‌ی درمان (نسبت دوز جذبی کل در تومور به بیشینه‌ی دوز جذبی در بافت سالم) را داشته باشد .برای محاسبه‌ی بهره‌ی درمان دوز جذبی کل در تومور و بافت سالم محاسبه شد. عموما دوز جذبی در BNCT را شامل ٤ مولفه در نظر می‌گیرند و از تاثیر برخورد تونرون به سایر عناصر بافت چشم‌پوشی می‌کننددر جدول ۱مولفه‌های دوز جذبی و ضرایب RBE هرکدام(به علت تاثیر بیولوژیکی مختلف هر کدام از عناصر بر بافت بدن هر واکنش ضریب RBE مخصوص به خود را دارد[۵].

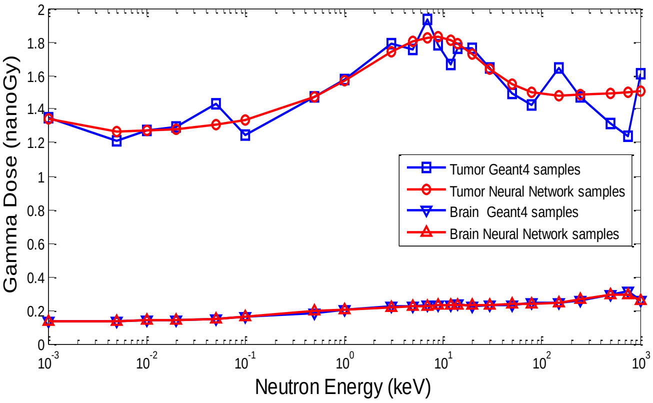
جدول۱: مولفه‌های مختلف دوز و ضرایب RBE انها

مولفه‌های دوز	واکنش غالب	مقدار RBE
دوز ناشی از بور	$^{10}B(n,\alpha)^{7}Li$	در مغز 1.35 درتومور 3.8
دوز ناشی ازنوترون‌های حرارتی	$^{14}N(n,p)^{14}C$	3.2
دوز ناشی از نوترون‌های سریع	$^{1}H(n,n)p$	3.2
دوز ناشی از تابش‌های گاما	$^{1}H(n,\gamma)^{2}H$	1

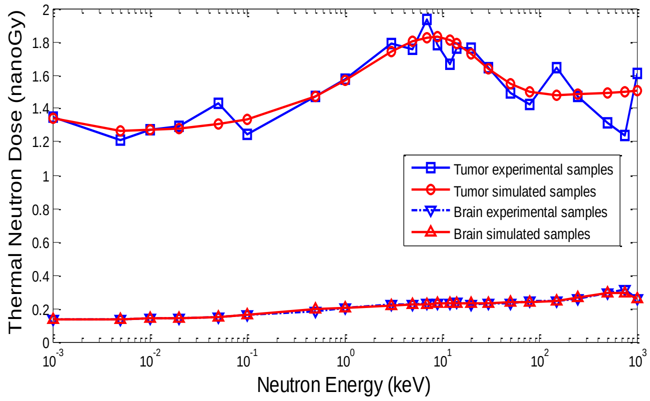
برای بدست آوردن دوز جذبی کل در هر انرژی نوترون دوز جذبی ناشی از بور، گاما ، نوترون حرارتی و نوترون سریع محاسبه شد.در شکل ۳ دوزجذبی ناشی از بور در تومور و بافت سالم، در شکل ٤ دوز جذبی ناشی از گاما در تومور و بافت سالم در شکل۵ دوز جذبی ناشی از نوترون‌های حرارتی در تومور و بافت سالم و در شکل٦ دوز جذبی ناشی از نوترون‌های سریع مشاهده می‌شود



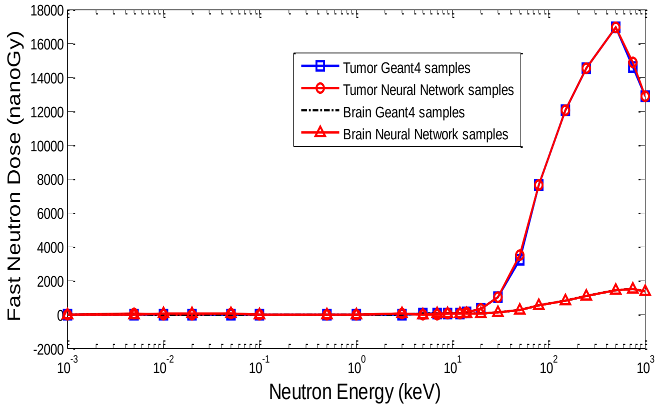
شکل ۳:دوزجذبی ناشی از بور در تومور و بافت سالم



شکل ٤: دوز جذبی ناشی از گاما در تومور و بافت سالم

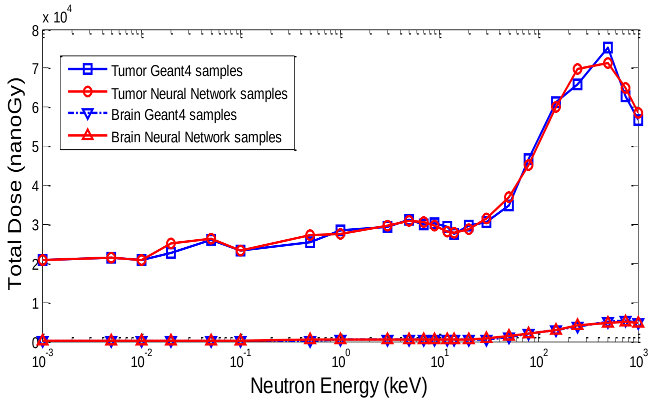


شکل ۵: دوز جذبی ناشی از نوترون‌های حرارتی در تومور و بافت سالم



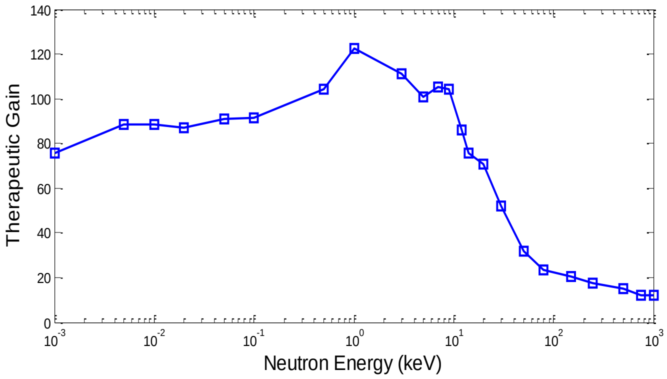
شکل ٦ : دوز جذبی ناشی از نوترون‌های سریع

پس از بدست آوردن دوز جذبی ناشی از بور، گاما، نوترون حرارتی و نوترون سریع ، دوز جذبی کل را برای تومور و بافت سالم بدست آورده که در شکل۷ مشاهده می‌شود.



شکل ۷: دوز جذبی کل برای تومور و بافت سالم

پس از محاسبه‌ی دوز جذبی کل در تومور و بافت سالم بهره‌ی درمان محاسبه شد. در شکل ۸ بهره‌ی درمان بر حسب انرژی نوترون رسم شده است



شکل۸: بهره‌ی درمان برحسب انرژی نوترون

نتیجه گیری

همانطور که در شکل۳مشاهده می‌شود بیشترین دوز جذبی ناشی از بور درتومور در بازه‌ی انرژی نوترون های فوق حرارتی می‌باشد و در مغز با افزایش انرژی نوترون دوز جذبی افزایش می-یابد که نشان دهنده‌ی آسیب نوترون‌های سریع به بافت سالم می-باشد . در شکل۷ مشاهده می‌شود که دوز جذبی کل در تومور خیلی بیشتر از دوز جذبی کل در بافت سالم می‌باشد که نشان-دهنده‌ی آسیب کم این روش درمانی بر بافت سالم می‌باشد.

همانطور که در شکل۸ مشاهده می‌شود بهره‌ی درمان با افزایش انرژی از محدوده‌ی حرارتی به فوق حرارتی افزایش یافته و پس از آن با افزایش انرژی نوترون از محدوده‌ی فوق حرارتی به سریع روندی کاهشی دارد . مناسب ترین بازه‌ی انرژی نوترون برای توموری با مشخصات فوق و در عمق ۲ سانتی‌متری و حاوی 43ppm بور بین 1keV تا 5keVمی‌باشد

مرجع‌ها

[1] Zamenhof R G ,Murray B W , Brownell G L , Wellum G R and Tolpin E I,” Boron neutron capture therapy for the treatment of cerebral gliomas “, Theoretical evaluation of the efficacy of various neutron beam Med.Phys.2 47-60,1975.

[۲] G L Locher, *Am. J. Roentgenel*, **36** (1936). (8 normal)

[۳] Hatanaka H,”*Clinical experience of boron-neutron capture therapy for gliomas-A comparison with conventional chemo-immuno-radiotherapy*”. in Hatanaka H (ed):Boron-Neutron Capture Therapy for Tumours. Niigata,Nishimura Co. Ltd, 349–379. 1986.

[4] IAEA(International Atomic Energy Agancy)-TECDOC-1223.”*Current status of neutron capture therapy*”,May 2001.

[۵]یاسر کاسه ساز، مجید شهریاری، ارزیابی انرژی بهینه نوترون برای درمان تومورهای مغزی براساس محاسبات دزیمتری در BNCT ، کنفرانس فیزیک هسته‌ای اصفهان، ۱۳۸۹.

اثر آلایش N بر ویژگی‌های الکترونی ترکیب SrO با استفاده از طیف اتلاف انرژی الکترون

دادستانی، مهرداد؛ مرادیان‌الوار، مهری

گروه فیزیک، دانشگاه لرستان

چکیده

نتایج تجربی بیانگر آن است که جایگزینی نیتروژن بجای اکسیژن در SrO منجر به بروز خواص مغناطیسی برجسته‌ای در این آلیاژ می‌شود. در این مطالعه، با شبیه‌سازی برهمکنش باریکه الکترونی با اکسید استرانسیوم آلائیده با درصد کم نیتروژن و محاسبه طیف اتلاف انرژی الکترون (EELS) در ساختارهای نزدیک لبه K اکسیژن و نیتروژن به بررسی تغییر خواص الکترونی این آلیاژ پرداخته‌ایم. محاسبات به روش امواج تخت بهساخته خطی با پتانسیل کامل (FP-LAPW) در چارچوب نظریه تابعی چگالی (DFT) انجام می‌شود. طیف ELNES لبه K برای ترکیب $SrO_{0.75}N_{0.25}$ محاسبه و با نتایج تجربی مقایسه شده است، که بیانگر تغییر در خواص الکترونی و مغناطیسی ماده به علت مشاهده پیک واقع در اتلاف کم طیف ELNES این ترکیب است .

The effect of N dopping on electronic properties of SrO compound by ELNES spectrum

Dadsetani,Mehrdad;MoradianAlvar,Mehri

Department of Physics, University of Lorestan

Abstract

Experimental results shows that substitution of Nitrogen for Oxygen in SrO leads to outstanding magnetic properties in this alloy. In this work, we have studied the electronic properties of this alloy by simulation of electron beam interaction with percent less Nitrogen-doped with SrO and calculation the EEL spectrum N and O near K-edge structures. Calculations were performed within the density functional theory using FP-LAPW method. K-edge ELNES spectrum of $SrO_{0.75}N_{0.25}$ is calculatedand compared with experimental results, that shows changes in electronic and magnetic properties of matter because of the abserved peak in low loss ELNES spectrum of this compound.

PACS NO.

مقدمه

امروزه تولید مواد فرومغناطیس بدون استفاده از مواد مغناطیسی رایج با اوربیتال‌های نیمه‌پر d یا f، بسیار مورد توجه قرار گرفته است. این خاصیت فرومغناطیس که توسط ناخالصی‌های غیرمغناطیسی با اوربیتال‌های نیمه‌پر p ایجاد می‌شود، فرومغناطیس d^0 نامگذاری شده است. آلایش اکسید استرانسیوم غیرمغناطیسی با درصد کمی از نیتروژن که یک عنصر غیرمغناطیسی است، منجر بهایجاد حفره‌هایی به شکل گشتاورهای مغناطیسی در حالت 2p اتم N شده که با ایجاد خاصیت فرومغناطیس کاربردهای گسترده‌ای در زمینه الکترواپتیک، اسپینترونیک و

مغناطواپتیک دارد[۳-۱]. به همین منظور مطالعات گسترده‌ای روی خواص الکترونی این ترکیب صورت گرفته است. نتایج تجربی موجود بیانگر تغییرات گسترده-ای در خواص الکترونی و مغناطیسی SrO در حضور ناخالصی نیتروژن است. یکی از روش‌های بررسی ساختار نواری مواد محاسبه طیف اتلاف انرژی الکترون در ساختارهای نزدیک لبه(ELNES) است. که در تمامی مطالعات قبلی صورت نگرفته است، لذا در این مطالعه ما برآنیم تا با محاسبه طیف ELNES لبه K برای N و O در ترکیب $SrO_{0.75}N_{025}$ به بررسی تغییرات ساختار نواری و خواص مغناطیسی اکسید استرانسیوم در اثر حضور نیتروژن بپردازیم.

روش محاسبات

محاسبات با استفاده از روش امواج تخت بهساخته خطی با پتانسیل کامل (FP-LAPW) در چارچوب نظریه تابعی چگالی (DFT) و با استفاده از کد کامپیوتری WIEN2k انجام شده است[۴]. بیشینه‌ی عدد کوانتومی مداری برای توابع موج داخل کرات اتمی l_{max}=۱۰و پارامتر RK_{max}برابر ۸ می‌باشد. انرژی تبادلی همبستگی با استفاده از تقریب GGA با تابعی پردو-بورک-ارنزرهوف (PBE) [۵]محاسبه شده است.در رهیافت ساختار نواری، طیف ELNES با استفاده از تقریب اول بورن با فرض آنکه الکترون‌های فرودی و پراکنده بصورت امواج تخت با بردارهای موج k_i وk_f هستند محاسبه می‌شود. سطح مقطع دیفرانسیلی مرتبه دوم برای پراکندگی غیر الاستیک الکترون عبارتست از:

$$\frac{\partial^2\sigma}{\partial\Omega\,\partial E}=\frac{4\gamma^2}{a_0^2q^4}\frac{k_f}{k_i}\sum\left|\langle f|e^{iq.r}|i\rangle\right|^2\delta(E_i-E_f-E)$$

جمع‌بندی حالت‌های اولیه‌ی اشغال شده $|i>$ با انرژی E_i و حالت‌های نهایی اشغال نشده $|f>$ با انرژی E_f است. با بسط $|i>$ به توابع موج اتمی با استفاده از رابطه رایلی و بسط حالت بلوخ در هارمونیک‌های کروی و توابع موج تخت بهساخته شعاعی، سطح مقطع دیفرانسیلی مرتبه دوم بصورت زیر محاسبه می‌شود:

$$\frac{\partial^2\sigma}{\partial\Omega\,\partial E}=\frac{4\gamma^2}{a_0^2q^4}\frac{k_f}{k_i}\sum_{l'=0}^{\infty}\sum_{\lambda=|l-l'|}^{l+l'}(2\lambda+1)\begin{pmatrix} l & \lambda & l' \\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}(<J_\lambda(q)>_{nl\varepsilon'l'})^2X_{l'}^t(\varepsilon')$$

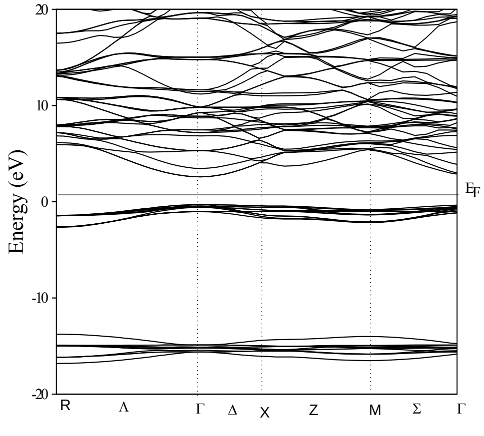
که $X_{l'}^t(\varepsilon')$بیانگر چگالی حالت جزئی مربوط به اتم t در انرژی ε' است. انتگرال شعاعی $<J_\lambda(q)>_{nl\varepsilon'l'}$ بصورت زیر تعریف می‌شود:

$$<J_\lambda(q)>_{nl\varepsilon'l'}=\int_0^{R_t}u_{nl}(R)\,J_\lambda(qR)u_{\varepsilon'l'}(R)dR$$

که R_tشعاع کره موفین تین، J_λ تابع بسل کروی مرتبه λ و $u_{nl}(R)$ و $u_{\varepsilon'l'}(R)$ قسمت‌های شعاعی حالت اولیه و نهایی هستند. برای محاسبه طیف ELNESلبهKنیتروژن و اکسیژن از یک باریکه الکترونی فرودی با انرژی ۲۰۰keV و نیم‌زاویه‌های همگرایی و جمع‌کننده بترتیب برابر با ۱۰ و ۹/۲ میلی‌رادیان استفاده شده است. برای مقایسه محاسبات با نتایج تجربی از یک تابع پهن‌شدگی گاوسی وابسته به انرژی استفاده شده است .

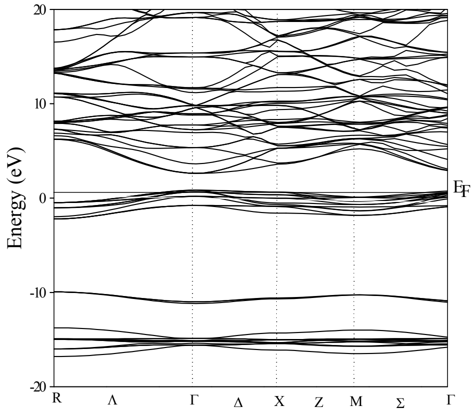
نتایج و بحث

برای محاسبه طیف ELNES و بررسی تغییرات در ساختار نواری و خواص آلیاژ $SrO_{0.75}N_{0.25}$می‌بایست ابتدا ساختار نواری آلیاژ محاسبه و بررسی شود.



شکل ۱. ساختار نواری SrO

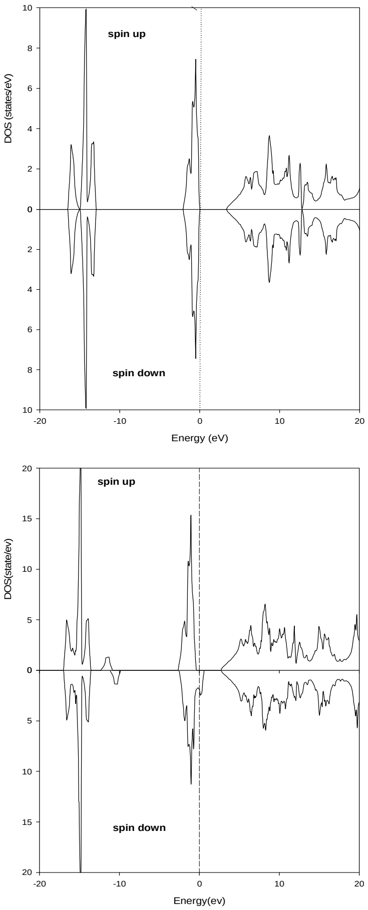
به همین منظور در شکل ۱ و شکل ۲ به ترتیب ساختار نواری SrO و $SrO_{0.75}N_{0.25}$ نشان داده شدهاست.



شکل۲. ساختار نواری $SrO_{0.75}N_{0.25}$

همان طور که مشاهده می‌شود هردو ترکیب دارای گاف نواری مستقیم در نقطه Γ هستند. گاف انرژی SrO و $SrO_{0.75}N_{0.25}$ بترتیب برابر با ۳/۲۶eV و ۲/۷۷eV محاسبه شده‌اند، حضورN باعث کاهش گاف و ایجاد خاصیت نیمرسانایی در آلیاژ $SrO_{0.75}N_{0.25}$می‌شود.چگالی حالات الکترونی کلی برای SrOو $SrO_{0.75}N_{0.25}$ با در نظرگرفتن قطبش اسپینی در شکل ۳ نشان داده شده‌اند.با توجه به شکل می‌توان مشاهده کرد که چگالی حالات برای جهت اسپینی بالا و جهت اسپینی پایین برای SrO کاملاً متقارن است در حالیکه این تقارن برای $SrO_{0.75}N_{0.25}$ مشاهده نمی‌شود، این عدم تقارن در چگالی حالات اسپینی نشان دهنده وجود گشتاورهای مغناطیسی و در نتیجه مغناطش خالص در این آلیاژ می-باشد.همچنین گشتاور مغناطیسی اتم N برابر ۰/۸۶μ_B محاسبه شده که بسیار نزدیک به مقدار تجربی ۰/۹μ_B [۱] است. بنابراین آلایش اکسید استرانسیوم با نیتروژن باعث ایجاد خاصیت فرومغناطیسی دمای اتاق در این آلیاژ می-شود.

در ادامه طیف محاسباتی ELNESبرای لبه K نیتروژن و اکسیژن در آلیاژ $SrO_{0.75}N_{0.25}$با تقریب حفره-مغزه که اطلاعاتی در مورد ساختار، نوع پیوند و ... به ما می‌دهد و از طرفی بیانگر چگالی حالات اشغال نشده بالای سطح فرمی است، در شکل ۴ نشان داده شده و با نتایج تجربی موجود مقایسه شده است.



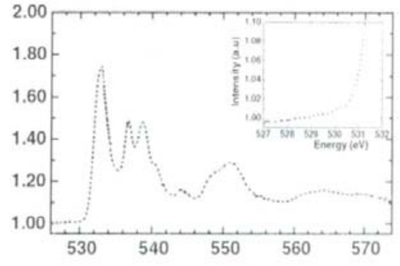
شکل ۳. چگالی حالات کلی SrO (بالا) و $SrO_{0.75}N_{0.25}$ (پایین) با در نظر گرفتن قطبش اسپینی

همان طور که از شکل ۴مشاهده می‌شود طیف محاسباتی و طیف تجربی سازگاری خوبی با هم دارند و برای اتم N و O بترتیب در انرژی ۳۹۸/۵eV و ۵۳۳eV این دو طیف بر هم منطبق شده‌اند. پیک‌های aو c بترتیب در اثر گذار الکترون مغزه از حالت 1s به حالات اشغال نشده $2p_{3/2}$ و $2p_{1/2}$ ایجاد شده‌اند. در شکل ۴ طیف ELNES تجربی

لبه K اکسیژن در SrO نشان داده شده است [۱].پیک کوچک اولیه (f) که بصورت بزرگ‌نمایی در گوشه تصاویر آمده است، در طیف $SrO_{0.75}N_{0.25}$دیده می‌شود در حالیکه در طیف SrO (شکل ۵) مشاهده نمی‌شود، بدلیل حضور اتم نیتروژن در آلیاژ $SrO_{0.75}N_{0.25}$است و بیانگر حضور حفره در حالت ۲p اتم N بشکل گشتاورهای مغناطیسی و تأثیر آن روی اتم‌های همسایه

است که تأییدی بر وجود خاصیت فرومغناطیس در اکسید استرانسیوم آلائیده با نیتروژن است.

شکل ۴. مقایسه طیفمحاسباتی (قرمز رنگ)ELNES لبه kاکسیژن (بالا) و نیتروژن (پایین) با طیف تجربی (سیاه رنگ)در ترکیب [۱$SrO_{0.75}N_{0.25}$]



شکل ۵. طیفELNESتجربی لبه K اکسیژن در [۱SrO]

نتیجه گیری

به منظور بررسی اثر حضور ناخالصی نیتروژن در ترکیب SrO طیف اتلاف انرژی لبه K نیتروژن و اکسیژن محاسبه شده است. همچنین محاسبه چگالی حالات الکترونیSrO و $SrO_{0.75}N_{0.25}$با در نظر گرفتن قطبش اسپینی محاسبه و بررسی شد، نتایج این محاسبات نشان دهنده تأثیر عمده اتم N در ایجاد خاصیت فرومغناطیس دمای اتاق برای این آلیاژ است. محاسبه طیف ELNES لبه kبرای N و O در آلیاژ $SrO_{0.75}N_{0.25}$با در نظر گرفتنتقریبحفره-مغزه و مقایسه آن‌ها با نتایج تجربی بیانگر تأثیر حضور نیتروژن در ایجاد گشتاورهای مغناطیسی در آلیاژ $SrO_{0.75}N_{0.25}$است. بنابراین با آلایشSrO با N که هر دو غیرمغناطیسی هستند، می‌توان یک آلیاژ فرومغناطیس دمای اتاق تولید کرد که کاربردهای گسترده-ای در صنعت دارد.

مرجع‌ها

[۱] I. S. Elfimov, A. Rusydi, S. I. Csiszar, Z. Hu, H. H. Hsieh, H. J. Lin, C. T. Chen, R. Liang, and G. A. Sawatzky; "Magnetizing Oxides by Substituting Nitrogen for Oxygen"; *Phys. Rev. Lett***98**, (2007) 137202.

[۲]M. Seike, V. A. Dinh, K. Sato, H. K. Yoshida; "First-Principles study of the magnetic properties of Nitrogen-doped alkaline earth metal oxides"; *Physica B* **8**, (2011) 1-4.

[۳] F. Gao, J. Hu, J. Wang, C. Yang, H. Qin, M. Jiang; "Ferromagnetism driven by vacancies and C/N substitution at SrO (100) surface"; *Solid state science***13**, (2011) 126-130.

] P. Blaha, K. Schwarz, K. H. Madsen, D. Kvasnicka, J. Luitz, ; "*An Augmented Plan Wave Plus Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties*"; WIEN2k,Universitate, Wien, Austria, (2001).

[۵]John P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof; "Generalized Gradient Approximation Made simple"; *Phys. Rev. Lett***77**, (1996) 3865-8.

[۶] R. Brydson; "*Electron Energy Loss spectroscopy*"; University of Leeds, New York, (2001).

خواص الکترونی و اپتیکی کالکوژنیدهای چهارتاییCu_2ZnMX_4(M=Ge,Sn ; X=S,Se)

دادستانی ، مهرداد ؛ بیرانوند، آزاده

گروه فیزیک، دانشگاه لرستان، خرم‌آباد

چکیده

در این مطالعه، با بکارگیری روش امواج تخت بهساخته خطی با پتانسیل کامل در چارچوب نظریه‌ی تابعی چگالی(DFT)، خواص الکترونی و اپتیکی ساختار کستریت(KS) ترکیبات Cu_2ZnMX_4(M=Ge.Sn ;X=S,Se) ، از خانواده‌ی نیمرساناهای کالکوژنید چهارتایی I_2-II-IV-VI_4 ، بررسی شده و نتایج حاصل با داده‌های تجربی موجود مقایسه شده‌اند. مطابق با محاسبات مربوط به خواص الکترونی، این کالکوژنیدها نیمه‌رسانا و دارای ساختار نواری مشابهی هستند. آنالیز ساختار نواری به همراه طیف چگالی‌حالت‌ها، نشان می‌دهد که نوار ظرفیت این ترکیبات از هیبریداسیون بین حالت‌های Cu d و X p استخراج می‌شود در حالی که در نوار رسانش حالت‌های M s و X p حالت‌های غالب هستند. طیف‌های اپتیکی مورد بررسی شامل قسمت‌های حقیقی و موهومی تابع دی‌الکریک، ضریب جذب و طیف اتلاف انرژی الکترون می‌باشند که در محاسبه آنها از تقریب فاز کاتوره‌ای(RPA) استفاده شده است. مهمترین ویژگی حاصل از بررسی این طیف‌ها، ضریب جذب بالا و پهن بودن طیف جذب این ترکیبات است که این مشخصه، استفاده از آنها را برای کاربردهای فوتوولتایی مناسب می‌سازد.

Electronic And Optical Properties Of Quaternary Chalcogenides Cu_2ZnMX_4(M=Ge,Sn ; X=S,Se)

Dadsetani, Mehrdad; Beiranvand, Azadeh

Department of Physics, University of Lorestan, Khorramabad

Abstract

In this study, the electronic and optical properties of quaternary compounds Cu_2ZnMX_4(M= Ge,Sn and X=S,Se,) have been studied using the full potential linearized augmented plane wave(FPLAPW) method within the density functional theory(DFT) and compared the results with those of available experiments . These compounds are semiconductors and have the similar band structure. Analyzing the band structure and DOS show that valence band of these compounds are derived from hybridized Cu d and X p states whereas the counduction band are composed of states of M s and X p. Optical properties have been presented in terms of the dielectric function $\varepsilon(\omega)$, the absorption coefficient $I(\omega)$, and the electron energy loss function within the random phase approximation (RPA). High absorption coefficient and wide absorption spectrum are the most important properties of these spectra which make them good choices for photovoltaics usage.

PACS No. 70, 78

مقدمه

کالکوژنیدهای چهارتایی I_2-II-IV-VI_4 که از ترکیب عناصر مجاور گروه IVA، از طریق جانشینی‌های کاتیونی در سیستم‌های سه‌تایی I-II-VI_2 تشکیل می‌شوند[۱]، ترکیبات نیمرسانایی هستند که به علت داشتن پتانسیل لازم برای کاربرد در جاذب‌های خورشیدی، اپتیک غیرخطی، فرآیند تجزیه‌ی نوری آب به عنوان مواد فوتوکاتالیست، صنایع اسپینترونیک و ترموالکتریک، و حتی کاربرد به عنوان دسته‌ی جدیدی از نارساناهای توپولوژیکی توجه گسترده‌ای را به خود جلب کرده‌اند[۳،۲]. نمونه‌های شناخته‌شده‌ی این ترکیبات Cu_2ZnSnS_4 و $Cu_2ZnSnSe_4$ می‌باشند که به طور طبیعی فراوان یافت می‌شوند و به عنوان مواد جاذب لایه‌ی نازک سلولهای خورشیدی بازده تبدیل (انرژی خورشیدی به انرژی الکتریکی) ۱۰ درصدی از آنها گزارش شده است [۲]. متأسفانه

علی‌رغم کاربرد گسترده، به دلیل پیچیدگی این ترکیبات در حال توسعه و فقدان اطلاعات موجود در زمینه‌ی خواص فیزیکی بنیادی‌شان، بررسی کاملی از آن‌ها صورت نگرفته است. به عنوان مثال ساختارهای حالت پایه و نیز چگونگی تأثیر این ساختارهای بلوری بر روی خواص ساختاری و اپتیکی آن‌ها هنوز به صورت دقیق مشخص نیست. از این رو با توجه به اهمیت این ترکیبات، در کار حاضر به مطالعه‌ی خواص الکترونی و اپتیکی دسته‌ی کوچکی از این ترکیبات به صورت Cu_2ZnMX_4 پرداخته شده و اثرات جانشینی کاتیونی (Sn به جای Ge) و آنیونی (Se به جای S) بررسی شده است.

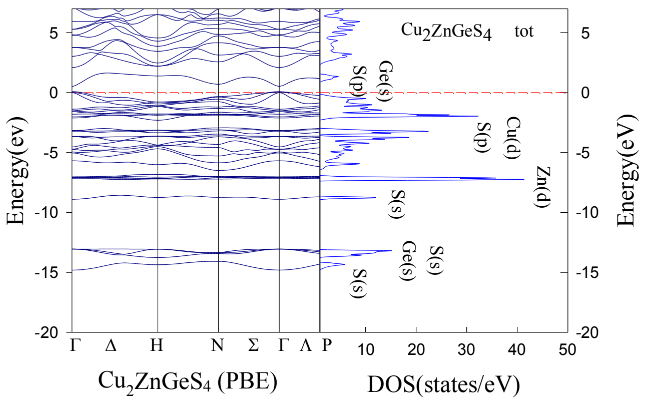
روش انجام محاسبات

محاسبات با استفاده از روش امواج تخت بهساخته خطی با پتانسیل کامل(FPLAPW) بر پایه نظری تابعی چگالی وبا استفاده از کد محاسباتی WIEN2K انجام شده است. برای تمامی ترکیبات پارامتر RK_{max} (R شعاع کوچکترین کره‌ی موفین–تین و K_{max} بردار موج قطع است) برابر ۸ ، عدد کوانتومی تکانه زاویه‌ای بیشینه l_{max} برابر ۱۰، و بردار موج قطع برای بسط پتانسیل G_{max} برابر ۱۲ انتخاب شده‌است.تعداد نقاط k منظور شده در منطقه‌ی اول بریلوئن برای ترکیب Cu_2ZnGeS_4 معادل ۵۲ نقطه و برای سایر ترکیبات معادل ۱۴۴ نقطه می‌باشد که در محاسبه خواص اپتیکی برای هر چهار ترکیب، این تعداد به ۶۵۷ نقطه افزایش یافته است.در محاسبه‌ی انرژی تبادلی–همبستگی نیز از تقریب شیب تعمیم یافته با تابعی‌های پردو–بورک–انزرهوف (PBE) [۴] و انگل–وسکو (EV) [۵] استفاده شده است.

نتایج و بحث

ساختارهای پایدار پیشنهادی برای کالکوژنیدهای Cu_2ZnMX_4 دو ساختار تتراگونال کستریت (KS) و استنیت (ST) می‌باشند که ارتباط خیلی نزدیکی با هم دارند ولی به علت اختلاف در توزیع کاتیون‌های Cu^{+} ، Zn^{2+} و M^{4+} با گروههای فضایی مختلفی بیان می‌شوند: $I\bar{4}$ برای KS و $I\bar{4}2m$ برای ST. در مورد فاز پایدارتر این ترکیبات (KS یا ST) میان پژوهشگران نظری و تجربی اتفاق‌نظر وجود ندارد. در حالی که مطابق با آزمایشات تجربی، این ترکیبات در ساختار ST متبلور می‌شوند[۶]، در مطالعات نظری با تأکید بر اختلاف کوچک انرژی این دو ساختار، KS به عنوان فاز پایدارتر پیش‌بینی شده است[۲]. ضمن اینکه بایستی اشاره کنیم که در بعضی از مطالعات تجربی اخیر موافق با نتایج نظری فاز پایدار دو ترکیب Cu_2ZnSnS_4 و $Cu_2ZnSnSe_4$ کستریت گزارش شده است[۷]. بنابراین بر اساس مطالب بیان شده و با توجه به اتخاذ شیوه‌ی محاسباتی، در این پژوهش همسو با مطالعات نظری فاز KS مورد بررسی قرار گرفته است.

به منظور درک دقیق ساختار نواری و با توجه به یکسان بودن ساختار بلوری ترکیبات، در شکل ۱ ساختار نواری و طیف چگالی‌حالت ترکیب Cu_2ZnGeS_4 به عنوان نمونه آورده شده است. سایر ترکیبات دارای ساختارها و طیف‌های مشابهی هستند.

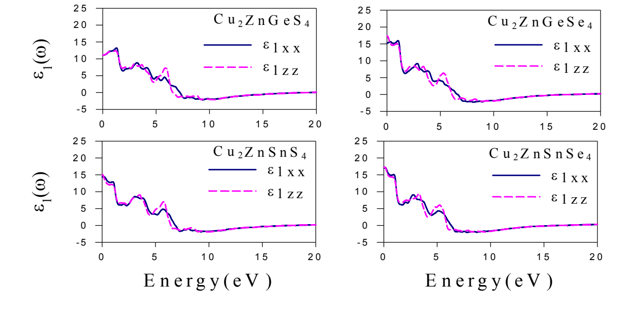


شکل ۱: ساختار نواری و طیف چگالی‌حالت ترکیب Cu_2ZnGeS_4

همانگونه که مشاهده می‌شود نوار رسانش این ترکیب شامل یک تک نوار ناشی از هیبریداسیون اوربیتال‌های Cu d و S p ، و نوار ظرفیت آن شامل ساختار پیوسته‌ای ناشی از هیبریداسیون اوربیتال‌های Ge s وS p است. بنابراین با توجه به تشابه ترکیبات (به عبارت دیگر تشابه خصلت پیوندی) به طور کلی می‌توان گفت که نوار ظرفیت ترکیبات Cu_2ZnMX_4 از اوربیتال‌های Cu d و X p و نوار رسانش آنها از حالت‌های M s و X p تشکیل شده است. گاف نواری محاسبه شده برای هر چهار ترکیب مستقیم است و در نقطه‌ی Γ اتفاق می‌افتد. پهنای گاف برای Cu_2ZnGeS_4 و $Cu_2ZnGeSe_4$ با تابعی PBE (EV) به ترتیب ۰/۴۳ (۰/۷۴) و

۰/۰۰۵eV (۰/۳۹eV) و برای ترکیبات Cu_2ZnSnS_4 و $Cu_2ZnSnSe_4$ ۰/۰۳ (۰/۳۵) و ۰/۰۰۴eV (۰/۱۸eV) برآورد شده است. از مقایسه‌ی این گاف‌ها با مقادیر تجربی که تنها برای دو ترکیب شامل قلع دردسترس هستند (۱/۵eV برای Cu_2ZnSnS_4 [۸] و۱/۶۵eV –۱/۴ برای $Cu_2ZnSnSe_4$ [۹]) می‌بینیم که مقادیر محاسباتی ما کوچکتر از گاف‌های تجربی هستند که این تفاوت گاف را می‌توان به استفاده از تابعی GGA نسبت داد. مقایسه‌ی گاف نواری ۴ ترکیب نشان می‌دهد که افزایش سایز کاتیون گروه چهار (از Ge به Sn) و همچنین افزایش سایز آنیون گروه شش (از S به Se) گاف نواری را کاهش می‌دهد.در مورد اول، تضعیف نیروی دافعه‌ی تراز s-p بین اتم‌های M و X، و به تبع آن پایین آمدن نوار رسانش دلیل اصلی کاهش پهنای گاف است در حالی که در مورد دوم کم شدن هیبریداسیون بین حالت‌های Cu d و X p ، و بالا رفتن نوار ظرفیت نیز در کاهش گاف نقش دارد.

طیف‌های اپتیکی مواد با محاسبه‌ی تابع دی‌الکتریک بررسی می‌شود. به علت نیمه‌رسانا بودن ترکیبات موردنظر و کوچک بودن سهم گذارهای غیرمستقیم، در محاسبه‌ی این تابع تنها سهم گذارهای مستقیم (انتقال‌های بین‌نواری) با استفاده از تقریب فاز کاتوره‌ای محاسبه شده است. قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک ترکیبات که با استفاده از تبدیلات کرامرز–کرونیک محاسبه شده، در شکل ۲ قابل مشاهده است.



شکل۲: قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک

در تمامی طیف‌ها، پس از وقوع چندین پیک مقدار ε_1 در منطقه‌ی انرژی ۵/۵ تا ۷/۵eV صفر می‌شود (ریشه‌های تابع ε_1). این ریشه‌ها یک شرط لازم برای ایجاد نوسانات پلاسمونی هستند اما تفسیر دقیق این نوسانات به همراه طیف اتلاف انرژی الکترون صورت می‌گیرد. دنباله‌ی طیف ترکیبات نیز عبارت است از: یک شیب کاهشی در جهت منفی شدن ε_1، وقوع یک می‌نیمم و در نهایت افزایش آهسته به سمت صفر در انرژی‌های بالاتر. مقایسه‌ی طیف‌ها نشان می‌دهد که افزایش سایز کاتیون و همچنین افزایش سایز آنیون سبب انتقال ساختار اصلی طیف‌ها به سمت انرژی‌های پایین‌تر می‌شود. این روند ناشی از انتقال نوارهای رسانش است. تفاوت‌های مشاهده شده در راستاهای xx و zz طیف ترکیبات نیز، حاکی از ناهمسانگردی طیف‌ها در راستاهای مذکور می‌باشد. مقادیر ثابت دی‌الکتریک محاسبه شده در جدول ۱ آورده شده است. روند تغییرات این مقادیر با روند تغییر گاف نواری سازگار است یعنی شاهد افزایش(کاهش) ثابت دی‌الکتریک با کاهش (افزایش) گاف نواری هستیم.

جدول۱: مقادیر ثابت دی‌الکتریک ترکیبات Cu_2ZnMX_4 که در فرکانس صفر [$\varepsilon_1(0)$] محاسبه شده‌اند.

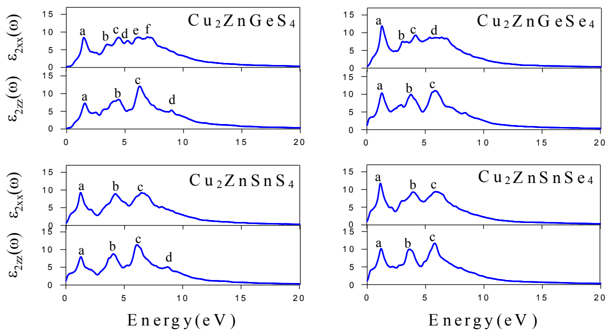
۱۵/۱۸	Cu_2ZnSnS_4	۱۱/۱۱	Cu_2ZnGeS_4
۱۷/۶۶	$Cu_2ZnSnSe_4$	۱۶/۳۵	$Cu_2ZnGeSe_4$

در شکل ۳ قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک که بیانگر جذب تابش است و پیک‌های موجود در آن سهم اصلی را در گذارهای اپتیکی بین‌نواری به عهده دارند، نشان داده شده است. با توجه به موقعیت این پیک‌ها، که منطبق بر نقاط بحرانی در چگالی‌حالت‌های توأم هستند، می‌توان حالت‌های اولیه و نهایی را در گذارهای اپتیکی مشخص کرد.

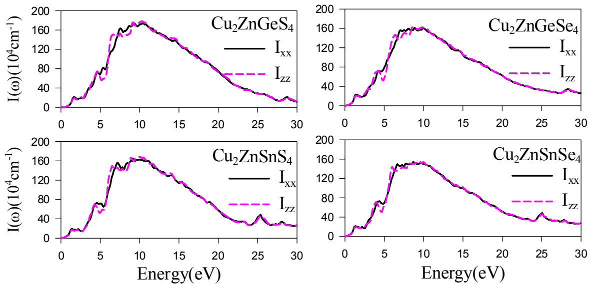
در ادامه با بررسی طیف ضریب جذب ترکیبات(شکل۴) ملاحظه می‌شود که تمامی ترکیبات دارای طیف جذب پهن و ضریب جذب بالایی هستند. با مطالعه‌ی اثرات جانشینی کاتیونی و آنیونی بر روی روند تغییرات ساختار اصلی طیف‌ها(کاهش شدت پیک‌ها و انتقال ساختار اصلی طیف‌ها به سمت انرژی‌های پایین‌تر با افزایش سایز کاتیون و همچنین افزایش سایز آنیون)، می‌توان دریافت که در میان چهار ترکیب تقریباً در منطقه‌ی انرژی ۸ تا ۱۷eV Cu_2ZnGeS_4 دارای بیشترین ضریب جذب است.

در شکل ۵ نیز طیف اتلاف انرژی الکترون که بیانگر نوسان دسته جمعی چگالی بار الکترون‌های ظرفیت است، نشان داده شده است. قله‌های موجود در این طیف در مکان‌هایی اتفاق می‌افتند که دامنه‌ی هر دو تابع ε_1 و ε_2 کوچک باشد. بنابراین به دلیل بزرگ

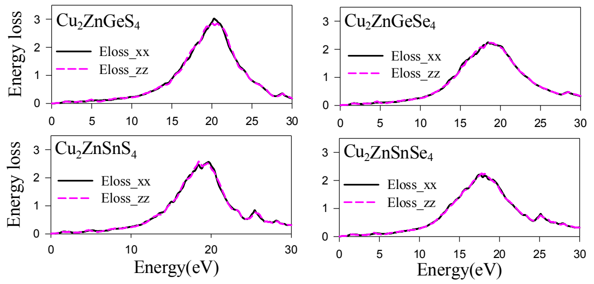
بودن دامنه‌ی تابع ε_2 در مکان صفر شدن تابع ε_1 ترکیبات (درنواحی کم‌انرژی(شکل۲))، در این نقاط پیک قابل توجهی مشاهده نمی‌شود.



شکل۳: قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک. **پیک‌های مشخص شده (a,b,..) متناظر با نقاط بحرانی در چگالی حالت‌های تؤام هستند.**

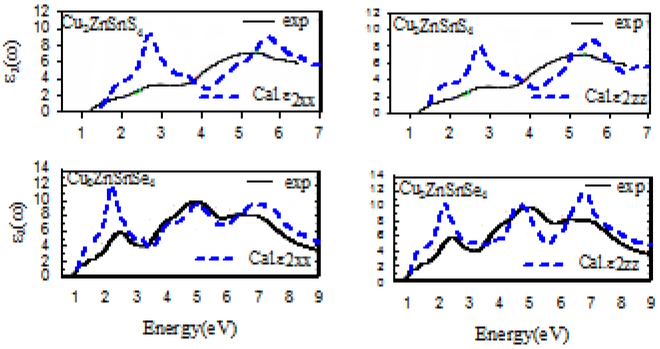


شکل ۴:طیف‌های ضریب جذب ترکیبات



شکل ۵: طیف‌های اتلاف انرژی الکترون

در پایان نیز به منظور مقایسه‌ی نتایج محاسباتی کار حاضر با نتایج تجربی، طیف‌های قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک دو ترکیب شامل قلع به همراه طیف‌های حاصل از نتایج تجربی آن‌ها[۱۰،۱۱] آورده شده است(شکل ۶). همانگونه که مشخص است انطباق نسبتاً خوبی میان طیف‌های تجربی و محاسباتی به ویژه در راستای xx وجود دارد. تفاوت دامنه‌ی طیف‌های تجربی و محاسباتی، و همچنین وجود نقاط بحرانی پهن‌تر در طیف‌های تجربی، به تشکیل نقص‌های بلوری و احتمال وجود تهی‌جاها در نمونه‌های تجربی برمی‌گردد. بایستی توجه کرد که به منظور مقایسه‌ی بهتر، طیف‌های محاسباتی به سمت انرژی‌های بالاتر شیفت داده شده‌اند.



شکل ۶: مقایسه‌ی طیف‌های محاسباتی و تجربی تابع ε_2

نتیجه گیری

با استفاده از روش FP-LAPW در چارچوب نظریه تابعی چگالی خواص الکترونی و اپتیکی کالکوژنیدهای چهارتایی Cu_2ZnMX_4 بررسی شد. نتایج محاسبات نشان داد که این ترکیبات نیمه‌رسانا و دارای گاف انرژی مستقیم هستند. با افزایش سایز کاتیون از ژرمانیوم به قلع و همچنین افزایش سایز آنیون از سولفور به سلنیم مقدار گاف نواری کاهش و ثابت دی‌الکتریک افزایش می‌یابد. هر چهار ترکیب به علت داشتن ضریب جذب بالا و طیف جذب پهن برای کاربرد در سلول‌های خورشیدی مناسب هستند.

مرجع‌ها

[۱] B.R.Pamplin, *J.Phys.Chem.Solids* **25**, (1964) 675.
[۲] S.Chen, A.Walsh, Y.Luo, J.H.Yang, X.G.Gong, and S.-H.Wei, *Phys.Rev.B* **82**, (2010) 195203.
[۳] A.Walsh, S.Chen, S.-H.Wei, and X.G.Gong, *Adv.Energy Mater* **2**, (2012) 400.
[۴] J.P.Perdew, K.Burk, and M.Ernzerhof: *Phys.Rev.Lett* **77**, (1996) 3865.
[۵] E.Engel and S.H.Vosko, *Phys.Rev.B* **47**, (1993) 13164.
[۶] H.Matsushita, T.Maeda, A.Katsui, and T.Takizawa, *J.Cryst.Growth* **208**, (2000) 416.
[۷] S.Schorr, *Sol.Energy.Mater.Sol.Cells* **95**, (2011) 1482.
[۸] N.Kamoun, H.Bouzouita, and B.Rezig, *Thin Solid Films* **515**, (2007) 5949.
[۹]G.S.Babu,Y.K.Kumar,P.U.Bhaskar,andV.S.Raja,*Semicond.Sci.Technol.* **23**, (2008) 085023.
[۱۰] J.Li, H.Du, J.Yarbrough, A.Norman, K.Jones, G.Teeter, F.L.T. Jr, and D.Levi, *Optics Experess* **20**, (2012) A327.
[۱۱] S.G.Choi, H.Y.Zhao, C.Persson, C.L.Perkins, A.L.Donhue, B.To, A.G.Norman, J.li, and L.Repins, *J.Appl.Phys* **111**, (2012) 033506.

بررسی اثر حضور هیدروژن در ساختار دوبعدی گرافین

دادستانی، مهرداد؛ حسین‌پور، اسماء؛ نجاتی، هاجر

دانشکده علوم پایه دانشگاه لرستان ، خرم‌آباد

چکیده

گرافین و مشتق کشف شده‌ی اخیر آن، گرافین هیدروژندار (graphane)، ساختارهای پایداری از کربن دوبعدی هستند. گرافین هیدروژندار یک سیستم دوبعدی شامل یک لایه‌ی خطی منفرد از اتم‌های کربن کاملاً اشباع شده (هیبریداسیون sp^3) با اتم‌های هیدروژن متصل به آن‌ها در یک الگوی تناوبی (بالا و پایین صفحه‌ی تعیین شده توسط اتم‌های کربن) است. محاسبه‌ی ساختار نواری گرافین هیدروژندار نشان می‌دهد که هیدروژن‌دار کردن کامل صفحات گرافین، سبب ایجاد گاف در ساختار نواری گرافین می‌شود و گذاری از یک نیم‌رسانا با گاف نواری صفر (گرافین) به یک نارسانا با گاف نواری پهن (گرافین هیدروژندار) صورت می‌پذیرد. همچنین *در این مطالعه در چارچوب نظریه‌ی تابعی چگالی (DFT) و از طریق محاسبه سطح مقطع پراکندگی برهم‌کنش باریکه‌ی الکترونی با نمونه برای اولین بار به محاسبه طیف ELNES لبه‌ی K کربن درساختار گرافین هیدروژندار پرداخته‌ایم. پیش‌بینی می‌شود که طیف ELNES محاسبه شده برای ابریاخته‌ی گرافین هیدروژندار با اعمال اثر حفره مغزه‌ی کامل تطابق مناسبی با نتایج تجربی خواهد داشت.*

واژه های کلیدی: گرافین هیدروژندار، طیف اتلاف انرژی الکترون در نزدیک ساختار لبه، نظریه تابعی چگالی

The effect of hydrogen in two-dimensional graphene structure

Dadsetani, Mehrdad; Hosseinpour, Asma; Nejati, Hajar

Department of Physics, University of Lorestan, Khorramabad

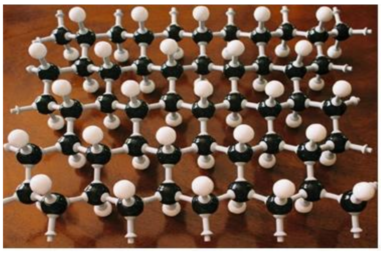
Abstract

Graphene and its recently discovered derivative, graphane, are stable, two dimensional carbon structures. Graphane is a two-dimensional system consisting of a single planar layer of fully saturated (sp^3 hybridization) carbon atoms with H atoms attached to them in an alternating pattern (up and down with relation to the plane defined by the carbon atoms). The calculation of the graphane band scheme shows that the complete hydrogenation of graphene planes causes a gap in the band structure of the graphene and a transition from a semiconductor with a zero band gap (graphene) to a insulator with a wide band gap (graphane). Also in this paper for the first time in the frame of the density functional theory (DFT) and via calculating the scattering cross section of the electron beam with the specimen, the ELNES spectrum of carbon K-edge is calculated. It is expected that the calculated ELNES spectrum for a super cell of graphane by applying the effect of the complete core hole, has a convenient adaption to the experimental results.

مقدمه

شاید بتوان عصر حاضر را عصر کربن نام نهاد، زیرا این ماده کاربرد وسیعی در صنایع مختلف پیدا کرده است. کربن عنصری است با نماد شیمیایی C و عدد اتمی شش که در گروه چهار از جدول تناوبی قرار دارد. کربن دارای ساختار الکترونی پایه $1s^2 2s^2 2p^2$ می‌باشد و بطور طبیعی در ساختارهای بلوری مختلفی ظاهر می‌شود. کربن دارای سه آلوتروپ (ساختارهای مختلف از یک عنصر که خواص و ویژگی‌های متفاوتی دارند به آلوتروپ‌های آن عنصر معروفند) معروف الماس (sp^3)، گرافیت (sp^2) و کرباین(sp^1) است که به واسطه‌ی نوع هیبریداسیون الکترونی از یکدیگر متمایز می‌شوند. گرافین به‌عنوان یک نیم‌رسانای بدون گاف انرژی (دارای گاف صفر) تک لایه‌ای گرافیتی است که سال‌ها تصور می‌شد به‌علت دوبعدی بودنش امکان پایداری آن به‌طور گسترده امکان‌پذیر نیست. فرضی که بعدها در سال ۲۰۰۴ با کشف این ماده‌ی پایدار توسط گروهی از دانشمندان دانشگاه منچستر به سرپرستی گایم و نوسلووف [۴-۲] نقض شد. ورقه‌ی گرافینی کاملاً هیدروژن‌دار شده (گرافین هیدروژندار) یک هیدروکربن دوبعدی گسترده با پیوندهای کووالانسی است که هیبریداسیون تمامی اتم‌های کربن در آن sp^3 است. در شکل (۱) ساختار گرافین هیدروژندار نشان داده شده است.

طیف‌سنجی اتلاف انرژی الکترون نزدیک ساختار لبه، ELNES، که اغلب در دستگاه TEM اندازه‌گیری می‌شود، روشی قابل اعتماد برای اندازه‌گیری و آشکارسازی ساختار الکترونی موضعی و پیوندهای شیمیایی در مواد است. حساسیت بالای این طیف نسبت به تغییرات موضعی در ساختار الکترونی مواد، امکان مطالعه با قدرت تفکیک بالای ساختارهای ریز را فراهم می‌کند. در این مقاله به منظور بررسی تاثیر جذب هیدروژن بر روی ورقه‌ی گرافین و تولید گرافین هیدروژندار، ابتدا خواص ساختاری و الکترونی و سپس طیف اتلاف انرژی الکترون در نزدیک لبه‌ی K کربن برای گرافین هیدروژندار در پیکربندی Chair مورد بررسی و تجزیه و تحلیل قرار گرفته است.



شکل ۱ : ساختار کریستالی گرافین هیدروژندار (پیکربندی chair). کره‌های تیره و روشن به‌ترتیب اتم‌های کربن و هیدروژن می‌باشند.

روش محاسبات

محاسبات بر پایه‌ی نظریه‌ی تابعی چگالی (DFT) و بکارگیری روش امواج تخت بهساخته خطی با پتانسیل کامل (FP-LAPW) با استفاده از برنامه TELNES2 که قسمتی از کد محاسباتی WIEN2k [۵] می‌باشد، انجام شده است. شعاع کره‌های موفین‌تین برای اتم‌های کربن و هیدروژن به ترتیب ۱/۲۵ و ۰/۶۷ Å، تعداد نقاط K در ناحیه‌ی اول بریلوئن ۴۳ نقطه، پارامتر $R_{MT}K_{Max}$ برابر با ۷/۵، عدد کوانتومی تکانهٔ زاویه‌ای بیشینه l برای توابع موج درون کره‌های اتمی ۱۰ و بردار موج قطع برای بسط پتانسیل و چگالی بار در ناحیه‌ی بین جایگاهی ۱۴ در نظر گرفته شده است. برای محاسبه‌ی انرژی تبادلی-همبستگی از تقریب شیب تعمیم‌یافته GGA با تابعی پردو وهمکاران[۶] استفاده شده است.

محاسبات ابتدا به ساکن در طیف سنجی ELNES را می‌توان به دو دسته‌ی کلی تقسیم کرد: روش پراکندگی چندگانه (MS) و روش ساختار نواری (BS). محاسبات روش MS در فضای حقیقی صورت می‌گیرد، درحالیکه روش BS بر پایه‌ی نظریه تابعی چگالی است و محاسبات آن در فضای وارون صورت می‌گیرد.

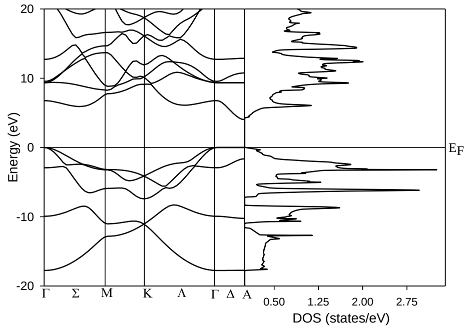
در روشBS، که طیف ELNES در چارچوب اولین تقریب بورن با فرض اینکه الکترون‌های سریع فرودی و خروجی به‌صورت امواج تختی با بردار موج K_f و K_i هستند محاسبه می‌شود، سطح مقطع پراکندگی دیفرانسیلی مرتبه دوم برای پراکندگی غیرالاستیک الکترون‌ها بوسیله عبارت زیر [۷] بیان می‌شود:

$$\frac{\partial^2\sigma}{\partial\Omega\partial E}=\frac{4\gamma^2}{a_0^2q^4}\frac{k_f}{k_i}\sum_{i,f}\left|\langle f\left|e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}\right|i\rangle\right|^2\delta(E-E_f+E_i) \quad (۱)$$

که در آن $\gamma=\sqrt{1-\beta^2}$ عامل نسبیتی، $\vec{q}=(\vec{K}_i-\vec{K}_f)$ تکانه‌ی انتقالی به نمونه، a_0 شعاع بوهر، E انرژی اتلافی، و $|i\rangle$ و $\langle f|$ به‌ترتیب حالت اولیه و نهایی اشغال شده توسط الکترون است. برای محاسبه عناصر ماتریسی در این معادلات می‌بایست حالت‌های $|i\rangle$و $\langle f|$محاسبه شوند که این کار توسط معادلات خود سازگار کان-شم برای محاسبه چگالی الکترونی انجام می‌شود. به دلیل تغییرات ناچیز عناصر ماتریسی نسبت به انرژی و تکانه، می‌توان سطح مقطع دیفرانسیلی را متناسب با چگالی حالتهای جزئی اشغال نشده‌ی اتم برانگیخته شده دانست.

لازم به ذکر است که برانگیزش الکترون مغزه یک فرآیند دینامیکی است، به این معنی که الکترون برانگیخته شده از یک حالت به حالت دیگر می‌رود و یک حفره در حالت مغزه باقی می‌گذارد. این حفره‌ی به‌وجود آمده در مغزه، پتانسیل موضعی و همچنین حالتهای نهایی که الکترون می‌تواند به درون آن‌ها گذار کند را تحت تاثیر قرار می‌دهد. پتانسیل جاذب حفره مغزه تمایل به مقید کردن حالتهای الکترونی بیرونی دارد، از این‌رو این حالت‌های الکترونی را به درون (در فضا) و به سمت انرژی‌های پایین‌تر می‌کشاند. بنابراین، در محاسبات مربوط به شبیه‌سازی ELNES می‌بایست تأثیر حفره‌ی بجا مانده در واهلش پتانسیل برهم‌کنشی و ویژه مقادیر انرژی لحاظ شود. این اثر با استفاده از تقریب حفره-مغزه (core-hole) لحاظ می‌شود. اثرحفره-مغزه ممکن است به وسیله‌ی الکترون‌های دیگر در نمونه مانند الکترون‌های ظرفیت، خصوصاً در نمونه‌های فلزی استتار شود که باعث کمتر شدن اثر حفره-مغزه بر روی حالت‌های الکترونی دورتر می‌شود. در

بکارگیری تقریب حفره-مغزه باید محاسبات به نحوی صورت گیرد که برهم‌کنش بین حفره و مغزه‌های مجاور با یکدیگر بسیار ناچیز باشد. بهترین راه برای اعمال این امر استفاده از ابریاخته است. نتایج ارائه شده در اینجا با انتخاب یک باریکه‌ی الکترونی سریع با انرژی ۲۰۰ کیلوالکترون‌ولت، نیم‌زاویه همگرایی ۲۴ میلی رادیان و نیم‌زاویه جمع‌کننده‌ی ۵ میلی‌رادیان بدست آمده است.

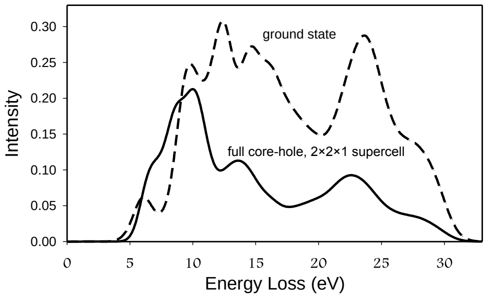


شکل ۲ : ساختار نواری(شکل سمت چپ) و چگالی حالات (شکل سمت راست) ساختار گرافین هیدروژندار

نتایج و بحث

نوارهای انرژی در راستاهای تقارنی و همچنین چگالی حالت‌ها (DOS) برای ساختار گرافین هیدروژندار محاسبه و در شکل (۲) نمایش داده شده است. با توجه به منحنی چگالی حالت‌ها، مشاهده می‌شود که گرافین هیدروژندار ساختاری نارسانا با گاف نواری ۴/۱۹ eV است. ساختار نواری این ترکیب نیز بر این موضوع صحه می‌گذارد. در این ترکیب همان‌گونه که از نمودار چگالی حالات کل پیداست، مقدار چگالی حالت‌ها در سطح فرمی صفر می‌باشد. همان‌گونه که از ساختار چگالی حالات برای گرافین هیدروژندار در شکل(۲) پیداست، این ساختار در زیر تراز فرمی به سه ناحیه‌ی مجزا با چگالی حالات غیر صفر، تقسیم شده است: ناحیه اول در بازه‌ی انرژی (۱۱/۵۶eV- و ۱۸/۷-) مربوط به اوربیتال s اتم کربن، ناحیه دوم در بازه‌ی انرژی (۸/۲eV- و ۱۱-) مربوط به اوربیتال‌های s و p اتم کربن و همچنین اوربیتال s اتم هیدروژن و ناحیه سوم در بازه‌ی انرژی (eV ۰ و ۷/۲-) که نزدیک‌ترین بازه‌ی انرژی به سطح فرمی است، عمدتاً ناشی از اوربیتال p اتم کربن است.

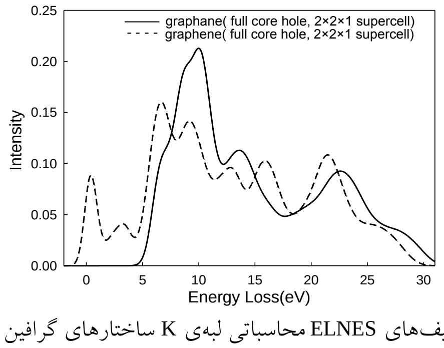
در ادامه طیف ELNES این ترکیب در غیاب و حضور اثر حفره-مغزه و با استفاده از ابریاخته‌ای به ابعاد ۱×۲×۲ که شامل ۱۶ اتم است محاسبه گردید، که نتایج آن در شکل(۳) نشان داده شده است.



شکل ۳ : طیف ELNES لبه K کربن گرافین هیدروژندار با و بدون اعمال اثرحفره مغزه

ابعاد ابریاخته به گونه‌ای انتخاب می‌شود که باعث همگرایی نتایج در طیف شود. در طیف ELNES محاسبه شده می‌بایست قبل از مقایسه با نتایج تجربی، اثرات پهن‌شدگی را لحاظ کرد. در مطالعه‌ی حاضر یک تابع گوسی با پهنای ۰/۳ eV برای پهن‌شدگی ناشی از ابزار اندازه‌گیری، یک پهن‌شدگی لورنتس با ۰/۴ eV برای لحاظ کردن طول عمر حفره-مغزه لبه‌ی K و یک پهن‌شدگی وابسته به انرژی لورنتسی خطی Γ(E)=۰/۱E برای طول عمر حالت‌های برانگیخته لحاظ شده است.

با توجه به مقدار زیاد گاف انرژی گرافین هیدروژندار، ۴/۱۹eV، اثرات استتار در این ساختار ضعیف است. بنابراین، همانطور که در شکل (۳) نشان داده شده است، اعمال تقریب حفره-مغزه بر طیف ELNES این ساختار تغییرات قابل توجهی را نسبت به طیف متناظر در حالت پایه ایجاد کرده است.

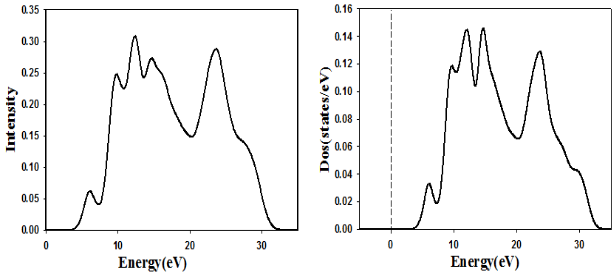


شکل ۴ : طیف‌های ELNES محاسباتی لبه‌ی K ساختارهای گرافین و گرافین هیدروژندار

در شکل (۴) طیف ELNES محاسباتی ساختار گرافین هیدروژندار با اعمال تقریب حفره-مغزه با طیف متناظر محاسباتی ساختار گرافین که توسط دادستانی وهمکاران [۸] گزارش شده، مقایسه شده است. مشاهده می‌شود که اضافه کردن هیدروژن به

صفحات گرافین و ایجاد ساختار گرافین هیدروژندار (پیکربندی chair)، تأثیر بسزایی بر روی طیف ELNES لبه‌ی K کربن در ابریاخته‌ی گرافین دارد. همان‌گونه که از شکل (۴) پیداست، با افزودن هیدروژن به صفحات گرافین تعداد پیک‌ها در طیف ELNES لبه‌ی K کربن در ابریاخته‌ی گرافین از تعداد ۷ بیشینه به ۳ بیشینه کاهش می‌یابد. ضمن اینکه آستانه‌ی انرژی برای برانگیختگی الکترون تراز 1s کربن افزایش می‌یابد، مکان بیشینه‌ها در گرافین هیدروژندار نسبت به گرافین به انرژی‌های بالاتر جابجا شده است. اولین ساختار در طیف گرافین، متناظر با انتقال به حالت‌های اشغال نشده‌ی π بالای تراز فرمی است. این ساختار در طیف گرافین هیدروژندار به‌صورت شانه‌ای و در انرژی بالاتر نسبت به گرافین ظاهر شده است. ساختار دارای بیشترین شدت در طیف گرافین در انرژی ۶ eV متناظر با حالات اشغال نشده‌ی σ است که در طیف گرافین هیدروژندار این بیشینه در انرژی بالاتر در ۱۱ eV باز تولید شده است.

با توجه به تناظر بین طیف ELNES و چگالی حالت‌های اشغال نشده، مقایسه‌ای بین این دو طیف در شکل (۵) انجام داده‌ایم. در چارچوب تقریب اول بورن (تقریب دوقطبی)، حالت‌های مجاز نهایی در دسترس برای الکترون برانگیخته از اوربیتال 1s کربن، حالتهای اشغال نشده‌ی p بالای تراز فرمی می‌باشند. انطباق بسیار خوب نتایج با یکدیگر، بیانگر این نکته است که چگالی حالات اشغال نشده بالای تراز فرمی در ساختار گرافین هیدروژندار، عمدتاً ناشی از حالت‌های p اتم کربن است.



شکل ۵ : مقایسه‌ی طیف ELNES (شکل سمت چپ) با سهم اربیتال P اتم کربن ساختار گرافین هیدروژندار (شکل سمت راست)

نتیجه گیری

در این مطالعه خواص ساختاری، الکترونی و طیف ELNES ساختار گرافین هیدروژن‌دار را در چارچوب نظریه‌ی تابعی چگالی و با روش FP-LAPW مورد بررسی قرار دادیم که نتایج زیر حاصل گردید: از بررسی چگالی حالت‌ها و ساختار نواری گرافین هیدروژندار مشاهده شد که این ترکیب نارسانایی با گاف انرژی ۴/۱۹eV می‌باشد. در واقع می‌توان گفت هیدروژن‌دار کردن کامل صفحات گرافین و تولید گرافین هیدروژن‌دار، سبب ایجاد گاف در ساختار نواری گرافین می‌شود و گذاری از یک نیم‌رسانا با گاف نواری صفر (گرافین) به یک نارسانا با گاف نواری پهن (گرافین هیدروژندار) صورت می‌پذیرد.

در ادامه نیز طیف ELNES لبه‌ی K کربن مربوط به این ترکیب، در حضور و غیاب اثر حفره–مغزه محاسبه شد. از مقایسه‌ی طیف ELNES لبه‌ی K کربن ساختار گرافین هیدروژندار با اعمال اثر حفره–مغزه و مقایسه با نتایج محاسباتی پیشین تحت شرایط مشابه برای گرافین، تاثیر حضور هیدروژن بر روی این طیف کاملاً محسوس می‌باشد و با در نظر گرفتن اینکه روش محاسباتی در هر دو ساختار کاملا مشابه می‌باشد و با وجود تطابق نتایج محاسباتی و تجربی برای ساختار گرافین، پیش‌بینی می‌شود که طیف ELNES محاسبه شده برای ابریاخته‌ی گرافین هیدروژن‌دار با اعمال اثر حفره–مغزه، تطابق مناسبی با نتایج تجربی خواهد داشت. در نهایت از مقایسه‌ی طیف ELNES لبه‌ی K کربن با چگالی حالت‌های اشغال‌نشده‌ی بالای تراز فرمی مشخص شد که چگالی حالت‌های بالای تراز فرمی در این ساختار عمدتاً از حالت‌های p اتم کربن تشکیل شده‌اند.

مرجع‌ها:

[1] S. Jarkov, Y. Titarenko, G. Churilov; "Electron microscopy studies of fcc carbon particles"; *Carbon* **36**, 595-597 (1998).
[2] K. S. Novoselov, D. Jiang, F. Schedin, T. J. Booth, V. V. Khotkevich, S. V. Morozov and A. K. Geim, Proc. Natl. Acad. Sci. USA 102, 10451-10453 (2005).
[3] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva and A. A. Firsov, Science 306, 666-669 (2004).
[4] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, M. I. Katsnelson, I. V. Grigorieva, S. V. Dubonos and A. A. Firsov, Nature 438, 197-200 (2005).
[5] P. Blaha, K. Schwarz, G. Madsen, D. Kvasnicka, J. Luitz; "WIEN2K, An Augmented plane wave plus local orbitals program for calculating crystal properties"; Vienna university of Technology. Austria, 2008.
[6] J. P. Perdew, S. Burke, M. Ernzerhof; "Generalized Gradient Approximation Made simple"; *Phys. Rev. Letters* **77**, 3865-3868 (1996).
[7] P. Schattschneider, C. Hebert, H. Franco, and B. Jouffrey; " Anisotropic relativistic cross section for inelastic electron scattering, and the magic angle"; *phys. Rev B* **72**, 0451 (2005).
[8] دادستانی، مهرداد؛ ترابی، نسرین؛ "محاسبه ابتدا به ساکن طیف ELNES لبه K کربن در گرافین"، مقاله‌نامه کنفرانس فیزیک ایران (۱۳۹۱)

محاسبه ابتدا به ساکن خواص ساختاری، مکانیکی، گرمایی و طیف فونونی فسفایدهای گروه IIIA (InP, GaP, AlP, BP)

احسان‌فر، سمیه[۱]؛ کنجوری، فرامرز[۲]؛ تشکری، حسن[۱]

[۱] *گروه فیزیک، آزمایشگاه فیزیک محاسباتی، دانشگاه آزاد اسلامی، واحد قم، ایران*

۲ گروه فیزیک، دانشگاه خوارزمی، کرج، ایران

چکیده

در این تحقیق، ثابت‌های ساختاری، مکانیکی و گرمایی فسفایدهای گروه III-A متبلورشده در ساختار زینک‌بلند، با استفاده از نرم‌افزار Espresso و کد محاسباتی pwscf بررسی شده است. طیف فونونی با استفاده از نظریه‌ی DFPT محاسبه شده، این محاسبات در تقریب GGA به دست آمده است که با داده‌های تجربی و نتایج دیگران در تقریب LDA مقایسه شده است.

First principle study of structural, mechanical and thermal properties and phonon spectrum of III-A compounds (BP, AlP, GaP, InP)

Ehsanfar, Somayeh[1]; Kanjouri, Faramarz[2]; Tashakori, Hasan[1]

[1] *Department of Physics, Islamic Azad University, Qom, Iran*

[2] *Department of Physics, Kharazmi University, Karaj, Iran*

Abstract

In this study, we investigated the structural, mechanical and thermal constants of III-A compounds, crystalline in zinc blend structure by pwscf code in quantum espresso package. The phonon spectrum are calculated by DFPT theory. These calculations have been obtained by using GGA approximation. Our results have been compared with the other experimental and theoretical works in LDA approximation.

مقدمه

ترکیبات دوظرفیتی گروه فسفاید مشترک آنیون‌ها و نیمه‌رساناهای گروه III-V که در ساخت دستگاه‌های الکتریکی و اپتوالکترونیکی مانند ترانزیستورها و لیزرهای ایندیوم- گالیم- آلومینیوم- فسفاید با طول موج ٦٨٥-٦٣٠ nm کاربرد دارند، مورد توجه واقع شده‌اند. این ترکیبات در ساختار زینک‌بلند متبلور شده و به استثناء InP دارای گاف نواری غیرمستقیم‌اند [٤-١]. فسفر با چندین آلوتروپی در طبیعت یافت می‌شود و یکی از عناصر حیاتی برای زندگی ارگانیسم‌های طبیعی(ترکیب موجودات زنده) است و چندین شکل فسفر وجود دارند که عبارت‌اند از: فسفر سفید، قرمز، سیاه. BP ماهیت کووالانسی قوی دارد، GaP در دیودهای نوری مورد استفاده قرار می‌گیرد و InP اهمیت خاصی در طراحی دستگاه انتقال الکترون دارد [٥].

روش محاسبات

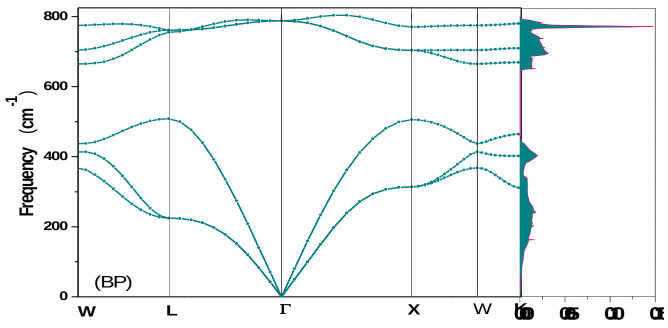
محاسبات بر اساس نظریه‌ی تابعی چگالی و با استفاده از پایه-های موج تخت توسط بسته نرم‌افزاری Espresso انجام گرفته است. در این محاسبات از شبه پتانسیل‌های ساخته شده به روش فوق نرم و از تقریب شیب تعمیم‌یافته استفاده شده است. انرژی قطع برای فسفایدهای گروه IIIA بر حسب ریدبرگ محاسبه شده و تقسیم‌بندی منطقه‌ی بریلوئن به روش منخورست - پک انجام شده است، که مقادیر بهینه‌شده برای هر چهار ماده برابر ٤×٤×٤ به دست آمده است. ثابت‌های شبکه نیز در جدول ۱ ذکر شده که با نتایج تجربی و محاسبات دیگران سازگاری دارد.

a(A°)	حاضر	تجربی[۷]	دیگران [۷][b],[۶][a]
BP	٤/٥٤	٤/٥٨	٤/٥٥[a],٤/٥٤٦[b]
AlP	٥/٥٠	٥/٤٦٧	٥/٥١[a] ,٥/٤٠ [b]
GaP	٥/٥٠	٥/٤٥٠	٥/٥٢[a],٥/٥١[b]
InP	٥/٩٦	٥/٨٦٩	٦[a],٥/٩٨[b]

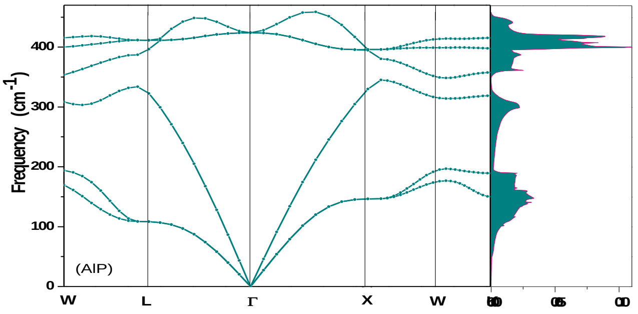
جدول ۱: مقادیر بهینه‌شده پارامتر شبکه گروه III-P

خواص فونونی

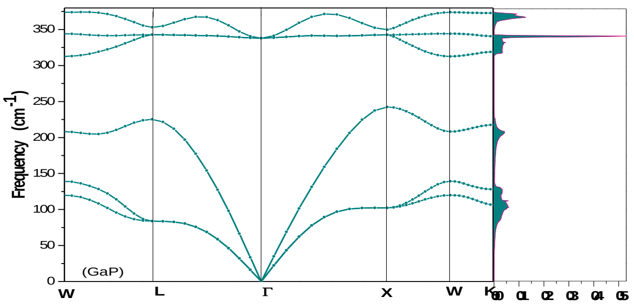
در شکل‌های (۱)، (۲)، (۳) و (٤) طیف پاشندگی و چگالی مدهای فونونی فسفایدهای گروه IIIA رسم شده‌اند. با توجه به پایه‌ی دواتمی این مواد، شش مد فونونی داریم (سه مد آکوستیکی و سه مد اپتیکی). مدهای آکوستیکی شامل مدهای طولی و عرضی تبهگن می‌باشند. بین بالاترین مد آکوستیکی و پایین‌ترین مد اپتیکی گاف یا منطقه‌ی ممنوعه‌ای وجود دارد که اندازه‌ی این گاف فرکانسی با توجه به نمودار چگالی حالات محاسبه می‌شود. اندازه-ی این گاف برای BP، AlP، GaP و InP بر حسب cm^{-1} به ترتیب برابر ۱۵۵، ۵، ٦۹ و ۸۷ به دست آمده است.



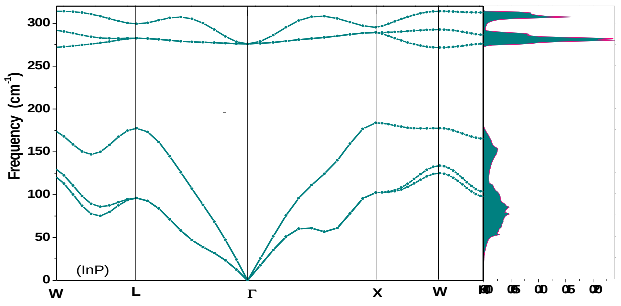
شکل ۱: نمودار پاشندگی فونونی و چگالی مدهای فونونی BP



شکل ۲: نمودار پاشندگی فونونی و چگالی مدهای فونونی AlP



شکل ۳: نمودار پاشندگی فونونی و چگالی مدهای فونونی GaP



شکل ٤: نمودار پاشندگی فونونی و چگالی مدهای فونونی InP

خواص کشسانی و مکانیکی

به خاصیتی از مواد که تحت تنش تغییر شکل پیدا کرده و با توقف تنش به شکل اصلی خودشان بازمی‌گردند خاصیت کشسانی گفته می‌شود. ثابت‌های کشسانی را در راستاهای مختلف می‌توان با استفاده از روابط زیر محاسبه نمود:

$$\left(\frac{d\omega}{d\kappa}\right)_{LA[100]}=\sqrt{\frac{C_{11}}{\rho}} \qquad \left(\frac{d\omega}{d\kappa}\right)_{TA[100]}=\sqrt{\frac{C_{44}}{\rho}} \qquad (١)$$

با توجه به رابطه فوق $\frac{d\omega}{dk}$ *شیب مدهای آکوستیکی نمودار ساختار نواری فونونی و* ρ چگالی بلور است. فاز زینک‌بلند دارای دومدول مستقل (C_{11} و C_{44}) است.

	C_{11}	C_{12}	c_{44}
BP کار حاضر	٣٥٢/١	٦٦/٣٥	١٣٢/٨
کار تجربی[٨]	٣١٥	١٠٠	١٦٠
کار دیگران[٨]	٣٤٩/٣	٨٧/٤	٢٠٨/٩
AlP کار حاضر	١٣٧/٣	٥٥/٢٥	٤٨/٢٣
کار تجربی[٩]	١٣٢/٢٥	٦١/٢	٦١/٥
کار دیگران[٨]	١٣٤/٥	٦٨/٣٠	٨٤/٢
GaP کار حاضر	١٤٠/٩	٥٧/٥	٥٧/٤
کار تجربی[٨]	١٤٠/٥	٦٢	٧٠/٣
کار دیگران[٨]	١٤٠/٨	٦٥/٧	٨٢/٢
InP کار حاضر	١٠٣/٢	٢٢/٥	٤٨/٦
کار تجربی[٨]	١٠١/١	٥٦/١	٤٥/٦
کار دیگران[٨]	١٠١/٦	٥٧/٦	٧٥/٣

جدول ۲: ضرایب کشسانی بر حسب (GPa)

هر چه ثابت‌های کشسانی بزرگ‌تر، ماده مقاومت بیشتری در مقابل تغییر شکل دارد، با توجه به جدول فوق مقاومت BP، GaP، AlP و InP از راست به چپ رو به کاهش است.

در جدول ۳ ثابت‌های مکانیکی از جمله مدول حجمی B، مدول یانگ E، مدول برشی G، بر حسب (Gpa) پارامتر کلاینمن ζ و مدول ناهمسان گرد برشی A به دست آمده است.

لازم به ذکر است که ثابت‌های مکانیکی به دست آمده برای روش تجربی با توجه به ضرایب الاستیکی موجود در جدول ۲ محاسبه شده است.

	B	G	E	A	ζ
BP (**GGA**)کار حاضر	١٦١/٦	٢٧٣/٤	٥٢٤/٤	٠/٩٢	٠/٣٣٩
کار تجربی	١٧١/٦	٢٧٢/٨	٥٣٤/٩	١/٤٨	٠/٤٦٣
(**LDA**)کار دیگران	–	١٧٣	٣٩٠/٦	–	٠/٤٠٠
AlP(**GGA**)کار حاضر	٨٢/٦	٣٢/٥٣	٨٦/٢٨	١/١٧	٠/٥٤٠
کار تجربی	٨٤/٨	٢٤/٨٩	٦٨/٠٢	١/٧٣	٠/٥٩٣
(**LDA**)کار دیگران	–	٥٩/١	١٤٥/٦	–	٠/٦٣١
GaP(**GGA**)کار حاضر	٨٥/٣	٣٢/١٢	٨٥/٦٣	١/٣٧	٠/٥٤٥
کار تجربی	٨٨/١	٢٦/٩٢	٧٣/٢٩	١/٧٩	٠/٥٧٤
(**LDA**)کار دیگران	–	٥٩/٩	١٤٧/٤	–	٠/٥٩٦
InP (**GGA**)کار حاضر	٤٩/٤	٣١/٩٠	٧٨/٧٦	١/٢٠	٠/٣٦٩
کار تجربی	٧١/١	١٣/٩٦	٣٩/٣٢	٢/٠٢	٠/٦٧٠
(**LDA**)کار دیگران	–	٤٦/١	١١٤/١	–	٠/٦٨٠

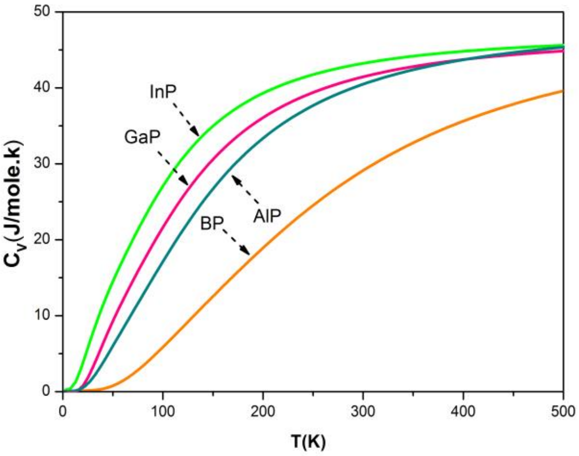
جدول ۳: ثابت‌های مکانیکی G،E،B بر حسب (Gpa) پارامتر ζ و مدول ناهمسان‌گرد برشی A

خواص گرمایی

با توجه به داده‌های فونونی و کد محاسباتی QHA می‌توان خواص ترمودینامیکی مانند ظرفیت گرمای ویژه را به دست آورد. ظرفیت گرمایی در حجم ثابت از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$C_V=\left[\frac{\partial U}{\partial T}\right]_V=TK_B\int_0^{\infty} g(\omega)\left[\frac{\hbar\omega}{K_BT}\right]^2\frac{e^{\frac{\hbar\omega}{K_BT}}}{\left(e^{\frac{\hbar\omega}{K_BT}}-1\right)^2}d\omega$$

در رابطه فوق T دمای مطلق، u انرژی در حجم ثابت، g(ω) چگالی حالات فونونی است. با توجه به شکل زیر همان طور که انتظار می‌رود در دمای پایین ظرفیت گرمایی به طور قابل ملاحظه‌ای افت می‌کند. این افت به صورت T^3 است و در دمای بالا طبق قانون دولون- پتی به 3R نزدیک می‌شود.



شکل۵: نمودار ظرفیت گرمایی فسفایدهای گروه IIIA

نتیجه‌گیری

در این تحقیق با استفاده از نظریه‌ی تابعی چگالی و تقریب شیب تعمیم‌یافته GGA به بررسی محاسبات ابتدا به ساکن خواص الکترونی، کشسانی و مکانیکی ترکیبات فسفاید پرداخته شد. با توجه به منحنی پاشندگی فونونی فسفایدهای گروه IIIA ، تعداد مدهای اکوستیکی و اپتیکی با تعداد اتم‌های موجود در مولکول این ترکیبات هم‌خوانی دارد. همچنین با محاسبه‌ی ثابت‌های کشسانی مقاومت BP، GaP، AlP و InP از راست به چپ رو به کاهش است. در بررسی خواص ترمودینامیکی در حجم ثابت، مقدار ظرفیت گرمایی به ترتیب زیر از راست به چپ رو به کاهش است:

BP, GaP, AlP, InP

مرجع‌ها

[۱] J.D. Werking, C.R. Chang, L.D. Chang, C. Nguyen, H. Kroemer, IEEE *Electron. Dev*. Lett. 13 (1992) 164.

[۲] J.R. Soderstrom, D.H. Chow, T.C. McGill, *Appl. Phys*. Lett. 55 (1989) 1094.

[۳] A. Mujica, Angel Rubio, A. Muñoz, R.J. Needs, Rev. *Modern Phys*. 75 (2003) 868.

[۴] R.W.G. Wyckoff, *Crystal Structures, second ed., Krieger*, Malabar, 1986.

[۵] O. Arbouche a,*, B. Belgoumène b, B. Soudini a, Y. Azzaz c, H. Bendaoud a, K. Amara, *First-principles study on structural properties and phase stability of III-phosphide (BP, GaP, AlP and InP) ,Science* 47 (2010) 685–692

[۶] E. Schroten, A. Geossens, J. Schoonman, *J. Appl. Phys*. 83 (3) (1998) 1660.

[۷] F. El Haj Hassan, H. Akbarzadeh, M. Zoaeter, J. *Phys. Condens. Matter* 16 (2004*) 293.*

[۸] A. Bouhemadou a,*, R. Khenata b,*, M. Kharoubi a, T. Seddik b, Ali H. Reshak c, Y. Al-Douri d, *FP-APW + lo calculations of the elastic properties in zinc-blende III-P compounds under pressure effects, Science* 45 (2009) 474–479

[۹] A. Bouhemadou a, M.A.Ghebouli b,n, B.Ghebouli c, M.Fatmi d, S.Bin-Omran e, E.Uc-gun f, H.Y. Ocak f,*Structural, elastic, electronic and lattice dynamical properties of III-P quaternary alloys matched to AlP,Science in Semiconductor Processing*, lists available at SciVerse ScienceDirect

رسانش دمایی در نانو سیم کوانتومی- ابررسانای موج-d

امامی پور، حمیدرضا [۱]؛ مهراب زاد، نرگس [۲]

[۱] دانشکده علوم پایه،بخش فیزیک، دانشگاه ایلام

[۲] گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه آزاد، تهران مرکز

چکیده:

در این مقاله رسانش دمایی را در اتصالی مطالعه می کنیم که بین یک ابررسانای موج-dویک سیم کوانتومی فلزی(فلز نرمال یک بعدی) واقع شده است. نتایج نشان می دهندکه بر خلاف اتصالات دو بعدی که در آنها به خاطر تشکیل حالت های مقید آندریف در فصل مشترک، پیک های رسانش در ولتاژ صفر ظاهر می شوند، در مورد اتصال سیم کوانتومی به ابررسانای موج-d این پیک های رسانش ناپدید می شوند. ناپدید شدن پیک های رسانش به کاهش فلز نرمال از دو بعد به یک بعد مربوط می شود به گونه ای که در مورد یک بعدی(سیم کوانتومی) اثرات کوانتومی ظاهر شده باعث ناپدید شدن پیک های رسانش می گردد

Thermal conductivity in a quantum- wire/ d-wave superconductor junction.

[1]Emamippourhamidreza ;[2]Mehrabzadnarges

[1]*Department of physics, Ilam University*

[2]*Department of physics, Tehran Markaz University*

Abstract:

In this paper, we study thermal conductivity in a junction which is placed between a quantum_ wire and a d-wave superconductor. The results show thatdespite the two dimensional junctions in which we have zero-bias conductance peaks due to Andreev bound states, in the case of quantum- wire/ d-wave superconductors, the peaks are disappeared completely. This is because; in the case of quantum-wire the quantum effects appear. So conductance peaks at zero voltage disappear.

مقدمه:

امروزه طیف سنجی تونلی به صورت ابزاری قوی جهت آشکار سازی حالت های الکترونی در ابررسانای_s شناخته می شود.بلوندر، تینکهام وکلاپویج در سال ۱۹۸۲ برای اولین بار نظریه مربوط به طیف سنجی تونلی را با در نظر گرفتن بازتاب آندریف در اتصالات فلز نرمال_ ابررسانای عادی(موج_s) ارائه کردند که به نظریه BTK معروف شده است[۱]. پدیده آندریف پدیده ای است که در فصل مشترک بین یک ابررسانا وفلز به وجود می آید و باعث می شود الکترونی با اسپین بالا که به سمت فصل مشترک حرکت می کند به صورت حفره ای با اسپین پایین به داخل فلز نرمال برگردد و باعث می شود که یک جفت کوپر در ابررسانا ظاهر گردد[۲]. نظریه BTK بسیاری از نتایج تجربی رسانش در اتصالات عادی را به خوبی توجیه می کرد[۴و۳]. پس از کشف ابررساناهای دمای بالا در سال ۱۹۸۶ مهمترین سؤالات درباره نوع تقارن این ابررساناها به وجود آمد. برای پاسخ به این سؤالات تاناکا و کاشیوایا در سال ۱۹۹۵ نظریه

طیف سنجی تونلی برای ابررساناهای غیر عادی را ارائه کردند[۵]. آنها نظریه اولیه ارائه شده توسط BTK را به یک ابررسانای غیر عادی با تقارن موج- d تعمیم دادند. نتیجه به دست آمده توسط آنهاوجود یک پیک رسانش در ولتاژ صفر را نشان می داد. حضور پیک های رسانش به عنوان نشانه ای قوی از وجود تقارن موج-d برای ابررساناهای دمای بالا شناخته می شود. موارد اشاره شده همگی برای اتصالات دو و سه بعدی به انجام رسیده اند. هرگاه فلز نرمال دو بعدی را با یک فلز یک بعدی(سیم کوانتومی)جایگزین کنیم به دلیل کاهش ابعاد فلز، خواص فیزیکی جدیدی به وجود می آید. به عنوان مثال در سیم

کوانتومی به دلیل اثرات کوانتومی پیک های رسانش از بین می روند[۶].

در این مقاله رسانش تونلی بر حسب ولتاژ اعمال شده به اتصال سیم کوانتومی/ ابررسانای موج_ d در دماهای مخالف صفر را مورد مطالعه قرار می دهیم. لازم است اشاره کنیم که وابستگی به دما در این نوع اتصال تاکنون مطالعه نشده است.

مدل مورد مطالعه:

مدل مورد نظر اتصالی است که بین یک ابررسانای موج-d و یک سیم کوانتومی فلزی قرار گرفته است. پهنای سیم W بوده و در صفحه ab یک ابررسانا با تقارن موج-d قرار گرفته است. برای مطالعه رسانش نظریه BTK را اعمال می کنیم و بنابر این نیازمند دانستن توابع موج شبه ذرات در ناحیه سیم کوانتومی و در ناحیه ابررسانا می باشیم. توابع موج دو مولفه ای شبه ذرات در معادلات بوگلیوبوف- دژن صدق می کنند که به شکل زیر می باشد:

$$\begin{aligned} H_0 u_{\vec{k}} + \Delta\left(\vec{k},\vec{r}\right) v_{\vec{k}} &= E u_{\vec{k}} \\ -H_0 v_{\vec{k}} + \Delta\left(\vec{k},\vec{r}\right) u_{\vec{k}} &= E v_{\vec{k}} \end{aligned} \qquad (۱)$$

که در اینجا $H_0 = \frac{p^2}{2m} + V\left(\vec{r}\right) - E_f$ هامیلتونی تک ذره بوده و E_f انرژی در سطح فرمی می باشد. همچنین فرض می کنیم جرم مؤثر و انرژی فرمی در هر دو ناحیه یکسان می باشند و یک مدل تابع پله ای را برای پتانسیل جفتی ابررسانا $\Delta\left(\vec{k},\vec{r}\right)$ در نظر می گیریم. به این ترتیب در ناحیه سیم کوانتومی پتانسیل جفتی صفر بوده و در ناحیه ابررسانا برابر $\Delta\left(\vec{k},\vec{r}\right) = \Delta\left(\vec{k}\right)$ می باشد. از آنجائیکه $\vec{k}$ برای جفت های کوپر در نزدیکی سطح فرمی تعریف می شود لذا اندازه آنرا می توان با بردار موج فرمی یکسان در نظر گرفت $\left(\left|\vec{k}\right| = k_f\right)$ با فرضیات در نظر گرفته شده در بالا، اکنون آماده ایم که معادلات(۱) را حل کنیم. حل معادلات (۱) منجر به روابط زیر برای سیم کوانتومی می گردد:

$$\psi_N\left(x,y\right) = f\left(x\right) g\left(y\right) \qquad (۲)$$

که f(x) , g(y) به صورت زیر می باشند:

$$\begin{aligned} f\left(x\right) &= \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} e^{ixk_x} + a\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} e^{ixk_x} + b\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} e^{-ixk_x} \\ g\left(y\right) &= \sqrt{2/w}\cos\left(\frac{\pi}{w} y\right) \end{aligned} \qquad (۳)$$

در اینجا a و b به ترتیب ضریب آندریف و ضریب نرمال می باشند، k_x نیز به صورت $k_x = k_f\sqrt{1-\left(\frac{\pi}{wk_f}\right)^2}$ تعریف می شود که در آن خود را به حالت پایه محدود و از تمام مدهای بالاتر صرفنظر کرده ایم. تابع موج در ابررسانا به صورت زیر می باشد:

$$\begin{aligned} \psi_S\left(x,y\right) &= \int_{-k_f}^{+k_f} C\left(s\right)\begin{pmatrix}u\\v\end{pmatrix} e^{ixk(s)} \phi_S\left(y\right) ds \\ &+ \int_{-k_f}^{+k_f} D\left(s\right)\begin{pmatrix}\alpha\\\beta\end{pmatrix} \phi_S\left(y\right) ds \end{aligned} \qquad (۴)$$

در اینجا $\phi_S\left(y\right) = \frac{e^{isy}}{\sqrt{2\pi}}$ بوده و α, v, u و β نیز به صورت زیر تعریف می شوند:

$$\begin{aligned} u &= \frac{\sqrt{E+\Omega_+}}{\sqrt{2E}};\ v = \frac{\sqrt{E-\Omega_+}}{\sqrt{2E}} e^{-i\varphi_+} \\ \alpha &= \frac{\sqrt{E-\Omega_-}}{\sqrt{2E}} e^{+i\varphi_-};\ \beta = \frac{\sqrt{E+\Omega_-}}{\sqrt{2E}} \end{aligned} \qquad (۵)$$

که در اینجا $\Omega_\pm = \sqrt{E^2 - \left|\Delta_\pm\right|^2}$. پتانسیل جفتی که برانگیختگی های الکترون گونه و حفره گونه احساس می کنند عبارتند از Δ_+ و Δ_- که به صورت $\Delta_\pm = \Delta(T)\cos(2\theta \mp 2\beta)$ تعریف می شوند. پتانسیل فصل مشترک نیز به صورت $V(x) = V_0\delta(x)$ می باشد که V_0 شدت پتانسیل در اتصال را

نشان می دهد. رسانش اتصال N/S به N/N تعریف می شود به صورت زیر می باشد[۷]:

$$G\left(V,T\right)=\frac{\int_{-\infty}^{+\infty} g_{NS}\,\operatorname{sec}h^2\left(\frac{E-V}{2k_BT}\right)dE}{\int_{-\infty}^{+\infty} g_{NN}\left(E\right)\operatorname{sec}h^2\left(\frac{E-V}{2k_BT}\right)dE} \quad (۶)$$

که در اینجا $g_{NS}=1+|a|^2-|b|^2$ بوده و g_{NN} نیز به صورت زیر تعریف می شود:

$$g_{NN}=\frac{4\gamma_x F_0}{z^2+\left(\gamma_x+F_0\right)^2}$$

$$F_0=\frac{4}{\pi}\int_{-\gamma_f}^{+\gamma_f}\sqrt{{\gamma_f}^2-\rho^2}\,\frac{\cos^2\left(\frac{\pi}{2}\rho\right)}{\left(1-\rho^2\right)^2}d\rho \quad (۷)$$

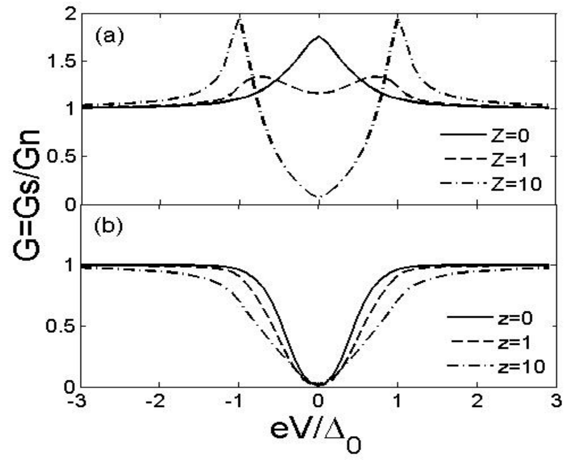
در این روابط z ، γ_fو γ_xپارامترهای بدون بعدی هستند که به صورت زیر تعریف می شوند:

$$z=\frac{2mwV_0}{\pi\hbar^2};\gamma_f=k_f\frac{w}{\pi};\gamma_x=k_x\frac{w}{\pi} \quad (۸)$$

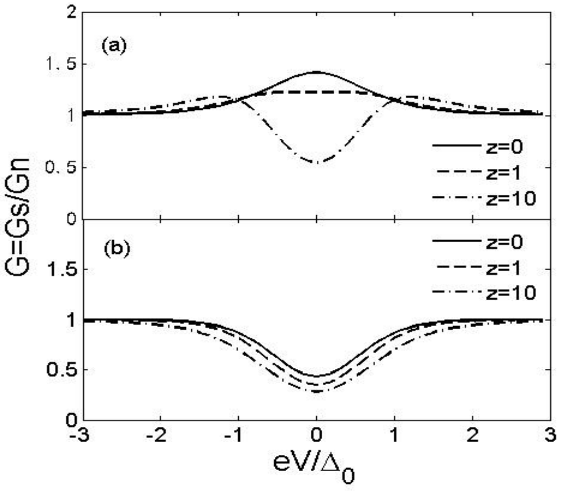
با ترکیب معادلات (۲)،(۳)، (۴) واعمال شرایط مرزی ضرایب aو b نیز به دست می آیند که با جایگزینی در رابطه(۶) رسانش دمایی به دست می آید.

نتایج عددی:

شکل (۲) و(۳) رسانش بهنجار شده بر حسب ولتاژ اعمال شده بر اتصال را در دمای $\frac{k_BT}{\Delta_0}=0.05$ و $\frac{k_BT}{\Delta_0}=0.3$ به ازای z های مختلف(۱۰و۱و۰ =z) نشان می دهد.



شکل۲: منحنی رسانش بر حسب ولتاژ اعمال شده در دمای $\frac{k_BT}{\Delta_0}=0.05$.



شکل۳: منحنی رسانش بر حسب ولتاژ اعمال شده در دمای $\frac{k_BT}{\Delta_0}=0.3$.

شکل (a)۲ و(a)۳ برای β=۰ و شکل های (b)۲ و(b)۳ برای $\beta=\frac{\pi}{4}$رسم شده است. همانگونه که در شکل (a)۲ نشان می دهد هنگامیکه پتانسیل سد اتصال صفر می شود(z=0) برای ولتاژ صفر یک مقدار بیشینه وجود دارد در حالیکه با افزایش ولتاژ اعمال شده رسانش به سمت یک کاهش می یابد. با افزایش پتانسیل سد اتصال مقدار رسانش خصوصا در ناحیه زیر گاف کم می شود به گونه ای که به ازای z=10 مقدار رسانش در ولتاژ صفر تقریبا صفر می شود. اما بر خلاف z=0،مقدار رسانش با

افزایش ولتاژ اعمال شده در مورد z=10 افزایش می یابد.شکل ۳(a)رسانش را به ازای $\frac{k_B T}{\Delta_0} = 0.3$ نشان می دهد. در مقایسه با شکل ۲(a) به ازای z=0 مشاهده میکنیم که ارتفاع قله ایجاد شده با افزایش دما کاهشمییابد. از طرف دیگر مقدار رسانش در ولتاژ صفر با افزایش دما، به ازای z=10 افزایش می یابد که این نکته از مقایسه شکل ۲(a) و ۳(a) به ازای z=10 به دست می آید. به طور کلی می توان چنین نتیجه گرفت که صرف نظر از این که مقدار z چه مقداری باشد با افزایش دما مقدار رسانش به سمت یک میل می کند.دلیل به وجود آمدن این نکته، به این مسئله بر می گردد که با افزایش دما پارامتر نظم ابررسانایی بر حسب دما $\Delta(T)$ ،به سمت صفر میل می کند و بنابراین حالت ابررسانایی به حالت نرمال میل می کند.در این صورت رسانش بهنجار شده که به صورت $\frac{G_{NS}}{G_{NN}}$ تعریف می شود به سمت یک میل می کند.

شکل های ۲(b) و۳(b) منحنی های رسانش را به ازای $\beta = \frac{\pi}{4}$ نشان می دهند. مهمترین نکته ای که از شکل ۲(b) فهمیده می شود این است که به ازای تمامی مقادیر سد پتانسیل z، مقدار رسانش در ولتاژ صفر به سمت صفر میل می کند. این نکته بر خلاف موردی است که در فلز نرمال دو بعدی می باشد و هنگامی به وجود می آید که در اتصال دو بعدی فلز نرمال/ابررسانای موج- d (N/S)، فلز نرمال دو بعدی به یک سیم کوانتومی(فلز یک بعدی) تبدیل می شود. همانگونه که مراجع[۵] نشان می دهد در مورد دو بعدی N/S باتقارن موج- d در ولتاژ صفر، پیک های رسانش به وجود می آیند که بهZBCPs[۱]معروف می باشند. وجود ZBCPs از مشخصه های مهم اتصالات دو بعدی و سه بعدی ابررساناهای غیر عادی می باشند و از آن ها به عنوان نشانه های قوی برای وجود تقارن موج-d در ابررساناهای دمای بالا یاد می شود. اما همانگونه که از شکل های ۲(b) و۳(b) ملاحظه می گردد ZBCPها برای اتصال سیم کوانتومی به ابررسانای موج-d کاملا حذف شده اند که دلیل آن بروز اثرات کوانتومی در سیم کوانتومی می باشد در حالیکه این اثرات هنگامیکه فلز نرمال دو بعدی یا سه بعدی باشند بسیار ناچیز می باشد. در واقع اثرات کوانتومی ظاهر شده، باعث می شوند ضریب آندریف در اتصال سیم کوانتومی/ ابررسانای موج-dبه سمت صفر میل کند بدون آن که به مقدار سد پتانسیل وابسته باشد. صفر شدن ضریب آندریف، صفر شدن رسانش در بایاس صفر را به همراه دارد.

بطور خلاصه، در این مقاله به مطالعه رسانش تونلی وابسته به دما در اتصال سیم کوانتومی/ ابررسانای موج-d پرداختیم ونتایج را با موارد دو بعدی مقایسه کردیم. نتایج به دست آمده نشان می دهند که در مورد سیم کوانتومی به دلیل کاهش ابعاد فلز،اثرات کوانتومی ظاهر شده باعث ناپدید شدن پیک های رسانش بایاس صفر می گردند.

مرجع ها:

[1]G. Blonder, M. Tinkham and T. Klapwijk, phys. Rev. B 25, 4515 (1982).
[2]A. Andreev,Sov, phys. JETP 19, 1228 (1964).
[3] W. Park, etal.phys. Rev. Lett. 100, 177001 (2008).
[4] S. Mukhopadhyay, etal.Phys. Rev. B 75, 014504 (2007).
[5] Y. Tanaka and S. Kashiwaya, phys.Rev.let. 74, 3451 (1995).
[6] W. Herrera, J. Giraldo, phys. Rev. B 71, 094515 (2005).
[7] H. Emamipour and M. Abolhasani, Supercond. Sci. Technol. 23, 105001 (2010).

[1]-Zero Bias Codu ctance Peaks

بررسی گاف نواری در نانولوله‌های زیگ-زاگ نیمه رسانا

انصاف، هادی[1]؛ میرزایی، محمدرضا[2]؛ دادمهر، وحید[3]

[1] *دانشکده فیزیک، دانشگاه قم، قم*

[2] *بخش فیزیک، دانشگاه علمی کاربردی، شیراز*

[3] *دانشکده فیزیک، دانشگاه الزهراء، تهران*

چکیده

با بکار بردن نظریهٔ تابعی چگالی به بررسی ساختار و گاف نوار انرژی نانولوله‌های کربنی نیمه رسانای زیگ-زاگ $(n,0)$ پرداخته‌ایم. نظریهٔ تابعی چگالی پیشگوئی می‌کند که نانولوله‌های تک دیواره زیگ-زاگ $(n,0)$ بر اساس اینکه باقیماندهٔ n بر ۳ مساوی ۱ باشد (گافهای نواری کوچکتر) یا ۲ (گافهای بزرگتر) به دو دسته طبقه بندی می‌شوند. اثر کشش طولی بر روی گاف نواری نیز وجود این دو دسته را تایید می‌کند. برای دستهٔ اول و دوم، به ازاء هر ۱٪ کشش، گاف نواری (Eg) در حدود $\pm 110meV$ تغییر می‌کند که علامت مثبت برای دستهٔ اول و علامت منفی برای دستهٔ دوم است.

Investigate the band gap in semiconducting Zig-Zag nanotubes

Ensaf, Hadi[1]; Mirzaei, Mohammad Reza[2]; Daadmehr, Vahid[3]

[1] *Department of physics, University of Gom,Gom*

[2] *Department of physics, Applied Science University, Shiraz*

[3] *Department of physics, University of Al-Zahra, Tehran*

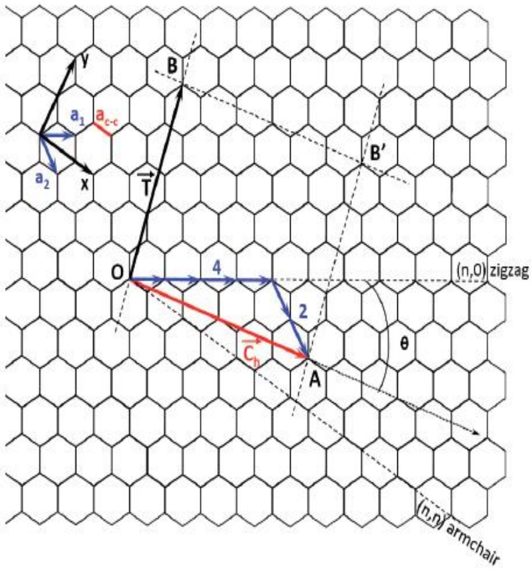
Abstract

By using the density functional theory (DFT) we present a comprehensive study of the geometry and energy band gap in zig-zag semiconducting (n,0)carbon nanotubes. DFT predict that the single wall (n,0) carbon nanotubes fall into two distinct classes depending n mod 3 equal to 1 (smaller band gaps) or 2 (larger gaps). The effect of longitudinal strain on the band gap further confirms the existence of two. for the both group, for each %1strain, the band gap(E_g)changes about ±110meV that + for first group and – for second group.

مقدمه

نانولوله‌های کربنی استوانه‌های تو خالی از ورقه‌های گرافیت با طبعیت شبه تک بعدی می‌باشند که در سالهای اخیر مورد توجه دانشمندان علوم مختلف بوده است[۱]. ساختار نانولوله‌های کربنی بوسیلهٔ یک بردار کایرال $\vec{C} = n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2$ توصیف می‌شود که بوسیله یک جفت اندیس (n,m) نشان داده می‌شود بطوریکه m و n اعداد صحیح [m≥n] و $\vec{a}_1$، $\vec{a}_2$ بردارهای واحد گرافیت می‌باشند(شکل۱). نانولوله‌های کربنی بر اساس نحوهٔ پیچش ورقه‌های گرافیت (به عبارت دیگر بر اساس کایرالیتیشان) در سه نوع دسته صندلی (n=m) ، زیگ-زاگ (m=۰) و کایرال (n>m) طبقه بندی می‌شوند. البته این نانولوله‌ها بر اساس اینکه از چند ورقهٔ گرافیت تشکیل شده باشند به دو دستهٔ نانولوله‌های کربنی تک دیواره و نانولوله‌های کربنی چند دیواره تقسیم بندی می‌شوند[۲]. به کمک مدل بستگی قوی پیش بینی شده که یک نانولولهٔ کربنی تک دیواره به شرطی که $n-m=3r(r\in z)$ خاصیت فلزی از خود نشان می‌دهدو در بقیهٔ موارد یک نیمه رسانا با گاف متوسط می‌باشد. به علاوه پیشگویی شده که گاف انرژی E_g در یک نانولولهٔ تک دیواره نیمه رسانا با گاف متوسط با قطرش رابطهٔ عکس دارد و بطوریکنواخت با افزایش قطر نانولوله کاهش می‌یابد[۳]. یوریکاوا و همکارانش [۴] نشان دادند که یک بسط مرتبهٔ سوم تیلور برای رابطهٔ پراکندگی انرژی اطراف نقطهٔ K، یک معادله برای E_g می‌دهد که وابسته به کایرالیتی لوله‌ها می‌باشند (بعدها یک عبارت تحلیلی و کلی تر توسط ریچ و همکارانش [۵]

ارائه شد.) در مقالات بعدی یک پارامتر تجربی (δ) به کار برده شد تا اثرات انحناء که نه تنها باعث همپوشانی اوربیتالهای π بلکه باعث اختلاط میان اوربیتال‌های π ،σ می‌شود را نیز به حساب آورد[۶].



شکل۱ : یک تک ورقهٔ گرافیت بردار $\vec{c}$ مشخص شده است[۱].

برای یک نانولولهٔ کربنی تک دیواره زیگ-زاگ(n،۰)گاف نوار انرژی به صورت زیر می‌باشد

$$E_g = \frac{2\pi}{3}\delta[\frac{1}{n} + (-1)^{n mod\ 3}\delta\frac{2\pi}{\sqrt{3}}\frac{1}{2^n} \qquad (۱)$$

بطوریکه E_g گاف نوار انرژی، δ=۲/۵۳eV یک پارامتر، n اندیس کایرال و منظور از n mod 3 باقیمانده n بر۳ می‌باشد. پیشگویی‌های مدل بستگی قوی و طیف سنجی رامان نشان دادند که نانولوله‌های کربنی تک دیواره بسته به اینکه n-m=3r+1(rϵz) یا n-m=3r+2(rϵz) به دو دسته تقسیم می‌شوند[7]. کارهای تجربی بعدی یک انحراف مشخصی از پیشگویی‌های بستگی قوی برای لوله‌های با قطر کمتر از ۳/۵Å را گزارش داد [8]. دی پاچکوف و هرمان با بکار بردن روش موج استوانه‌ای تقویت شدهٔ خطی (LACW) نشان دادند که گاف نواری در نانولوله‌های کربنی تک دیواره بسته به اینکه $n-m=۳r+۱(r\in z)$ یا $n-m=۳r+۲(r\in z)$ نوسان می‌کند اما نتایج متناقضی برای این دو دسته بدست آمد به طوریکه دسته‌ای که $n-m=۳r+۱(r\in z)$ دارای گاف نواری بزرگتری از دسته‌ای است که $n-m=۳r+۲(r\in z)$ [۹]. اخیرا یک مطالعهٔ تجربی با بکار بردن تفرق الکترون با تکنیک پراکندگی رایلی خواص الکترونیکی و اپتیکی نانولوله‌های کربنی را اندازه گیری کرده و آنها بر اساس اینکه باقیمانده تفاضل n و m بر ۳ مساوی ۱ باشد یا ۲ به دو دسته طبقه بندی کرده‌اند[۱۰]. این مطالعه بر خلاف کارهای تجربی قبلی که با تکیه بر کارهای تئوری برای تفسیر داده‌ها می‌باشد اولین گواه تجربی برای تمایز رفتار طبقه‌ها بر اساس مقدار باقیمانده n بر ۳ می‌باشد.

تئوری

یکی از روشهای حل معادله شرودینگر استفاده از نظریهٔ تابعی چگالی است. در این روش انرژی کل سیستم به صورت تابعی از چگالی بار الکترون نوشته می‌شود و سپس با کمینه کردن آن، چگالی حالت پایه بدست می‌آید. در دستگاه‌هایی که حالت پایه ناتبهگن دارند، مقدار انتظاری هر عملگر در حالت پایه را می‌توان به صورت تابعی یکتا از چگالی نمایش داد. بدین ترتیب می‌توان کلیه خواص حالت پایه دستگاه را ارزیابی کرد . اگر چه فرمول بندی نظریه تابعی چگالی دقیق است اما بخاطر نامشخص بودن سهم انرژی تبادلی ـ همبستگی به صورت تابعی از چگالی در آن، به تقریب‌هایی متوسل می‌شویم که شناخته شده‌ترین آنها تقریب چگالی موضعی است. روشهای متعددی برای کاهش تعداد ذرات در حال بر هم‌کنش وجود دارد که یکی از آنها تقریب بورن ـ اپنهایمر می‌باشد که در آن از انرژی جنبشی هسته‌ها صرف نظر می‌شود. در سال ۱۹۲۷ بلافاصله پس از اینکه شرودینگر معادلهٔ موجش را ارائه کرد، توماس و فرمی یک مدل را برای تقریب زدن توزیع الکترون‌ها در هر اتم ارائه کردند. این مدل برای یک گاز الکترونی آزاد همگن در فضای فاز پیشنهاد شد. آنها نشان دادند که انرژی جنبشی یک سیستم بس ذره‌ای را می‌توان به صورت تابعی از چگالی الکترونها بیان کرد

$$T_{TF}[n(r)] = C_F \int n^{\frac{5}{3}}(r) d^3r \qquad (۲)$$

جائیکه، T_{TF} انرژی جنبشی، $n(\vec{r})$ چگالی الکترونها و C_F ثابتی است که وابسته به انرژی فرمی می‌باشد. در مدل توماس ـ فرمی اندرکنش‌های کولنی از معادلات کلاسیکی آورده می‌شود. در سال

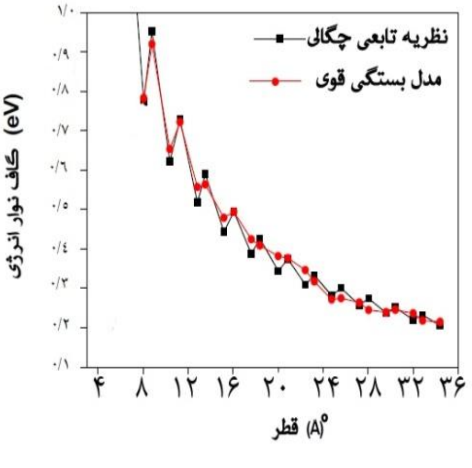
۱۹۳۵ ویزسکار تصحیح تابع انرژی جنبشی را به صورت زیر پیشنهاد کرد[۱].

$$T[n(r)]=C_F\int n^{\frac{5}{3}}(r)d^3r+\frac{1}{8}\frac{\hbar^2}{m}\int\frac{|\nabla(n(r))|^2}{n(r)}dr \qquad (3)$$

در اینجا ما برای بررسی‌های خود از نرم افزار VASP استفاده کرده‌ایم. نرم افزار VASP یک نرم افزار پیچیده است که براساس نظریهٔ تابعی چگالی کار می‌کند[۱۱].

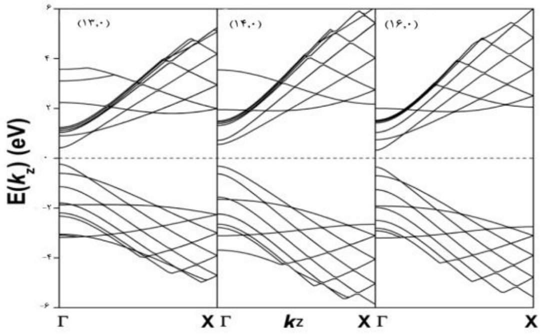
بحث نتایج

شکل(۲) گاف نواری بر حسب قطر نانولوله را نشان می‌دهد. این شکل یک انحراف را از کاهش یکنواخت گاف نواری با افزایش قطر که توسط مدل بستگی قوی پیشگویی شده بود را نشان می‌دهد. در نانولوله‌های زیگ‌ـزاگ با قطر کوچک (n≤ 9)، اثرات انحناء موجب این انحراف از پیشگویی مدل بستگی قوی می‌شود اما از (n>10) این انحراف دیده نمی‌شود. با بکار بردن نظریهٔ تابعی چگالی متوجه می‌شویم که نانولوله‌های کربنی تک دیواره زیگ‌ـزاگ (n,۰) بسته به اینکه باقیماندهٔ n بر ۳ مساوی ۱ (دستهٔ اول) یا مساوی ۲ (دستهٔ دوم) باشد به دو دسته تقسیم می‌شود که گاف نوار انرژی دستهٔ اول کمتر از دستهٔ دوم می‌باشد.



شکل۲ : گاف نوار انرژی نانولوله‌های کربنی زیگ ـ زاگ بر حسب قطر.

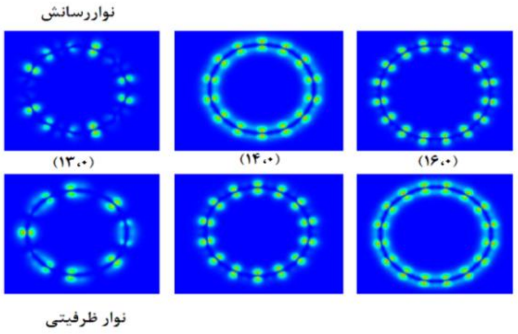
البته این دو دسته در حقیقت نیمه رساناهایی با گاف متوسط می‌باشند زیرا اگر n بر ۳ بخش پذیر باشد با نیمه رساناهایی با گاف بسیار کوچک مواجه هستیم. با توجه به شکل ۲، گاف نواری بر حسب قطر نانولوله نوسان میکند و دامنهٔ این نوسان با افزایش قطر به تدریج کاهش می یابد بطوریکه از $n\geq$ ۱۹ گاف نواری بطوریکنواخت با افزایش قطر کاهش می‌یابد و متناسب با عکس قطر ($\frac{1}{\mathrm{d}}$) می‌شود یعنی همان چیزی که مدل بستگی قوی پیشگویی کرده است. شکل(۳) ساختار نوار انرژی را برای سه نانولولهٔ تک دیوارهٔ زیگ‌ـزاگ نشان می‌دهد. این شکل تایید می‌کند که گاف نواری نوسان می‌کند. هر نوار انرژی اطرف سطح فرمی در شکل (۳) دوگانه تبهگن است.



شکل۳ : ساختار نوار انرژی نانولوله‌های کربنی تک دیواره (۱۳،۰)،(۱٤،۰)، (۱٦،۰).

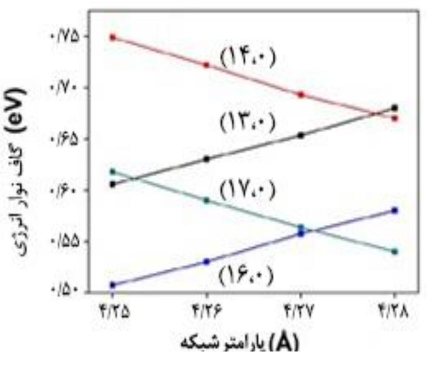
در شکل (٤)، چگالی بار را درنقطهٔ Γ برای سه نانولولهٔ تک دیواره نشان داده‌ایم. مطابق با این شکل، نوار ظرفیت در (۱۳،۰) و (۱٦،۰) یک خاصیت پیوستگی دارند که در (۱٦،۰) بیشتر دیده می‌شود و نوار رسانش در این دسته (دسته‌ای که باقیماندهٔ n بر۳ مساوی ۱ می‌باشد) یک خاصیت غیر پیوستگی را نشان می‌دهد بطوریکه الکترون ها در اطراف اتم ها جایگزیده شده‌اند اما در دستهٔ دوم (دسته‌ای که باقیمانده n بر ۳ مساوی ۲ می‌باشد) این امر برعکس است. این امر خود تائیدی بر درست بودن دسته بندی نانولوله‌های زیگ–زاگ (n،۰) به دو دسته است که در ابتدا ذکر شد. با تغییر ثابت شبکه در امتداد محور نانولوله از ۴/۲۵Å به ۴/۲۸Å می‌توان اثر کشش طولی بر روی گاف نوار انرژی را یافت. در دو دستهٔ نانولوله‌های کربنی تک دیواره زیگ–زاگ رفتارهای بر عکسی دیده شده است بطوریکه گاف نواری در دستهٔ اول با افزایش طول نانولوله، افزایش می‌یابد و در دستهٔ دوم، گاف نواری

با افزایش طول نانولوله، کاهش می‌یابد که این امر نیز خود تائیدی بر درستی این طبقه بندی است.



شکل٤ : چگالی بار در نقطهٔ Γ برای (۱۳،۰)، (۱٤،۰)، (۱٦،۰).

شکل(۵). به ازاء هر ۱٪ کشش طولی گاف نواری نانولوله‌ها ±۱۱۰meV تغییر می‌کند که علامت + برای دستهٔ اول و علامت- برای دستهٔ دوم، می باشد. این نتایج نظریهٔ تابعی چگالی در توافق با پیشگوییهای مدل بستگی قوی است که طبق آن $\Delta E_g = \pm 3\delta(1+\delta)\sigma$ جائیکه σ، تغییر کسری در امتداد محور کشش، δ نسبت پواسون و δ یک پارامتر تجربی است. بطوریکه برای $\delta =./2eV$، ۳eV =δ و $\sigma =/01$ (کشش ۱٪) داریم: $\Delta Eg = 108meV$.



شکل۵ : گاف نوار انرژی برحسب تابعی ازثابت شبکه در امتداد محور طولی نانولوله.

نتیجه گیری

با بکار بردن نظریهٔ تابعی چگالی برای محاسبهٔ گاف نوار انرژی نسبت به قطر لوله در نانولوله‌های کربنی تک دیواره زیگ_زاگ (n،۰) می توان بر اساس اینکه باقیماندهٔ n بر ۳ مساوی ۱ (گاف کوچکتر) یا ۲ (گاف بزرگتر) باشد آنها را به دو دسته طبقه بندی کرد. این نظریهٔ پیشگوئی می کند که گاف نواری بر حسب قطر نوسان می‌کند که دامنهٔ این نوسانات با افزایش قطر رو به میرایی می‌گراید. از طرفی انتقال از نیمه رسانایی به فلز در حوالی (۴۳،۰) رخ می‌دهد. این به ما اجازه می‌دهد که یک حد بالایی را برای قطر نانولوله‌های تک دیوارهٔ تا ۴۰Å قرار دهیم که بالاتر از آن دیگر نانولولهٔ کربنی تک دیوارهٔ زیگ_زاگ مشاهده نشود.

مراجع

[1] Zienert, Andreas"Electonic Transport in metallic carbon Nanotubes with Metal contacts"DOCTORAL DISSERTIONS (2013).
[2] Ying Tian, “Optical Properties of Single Walled Carbon Nanotubes and Nanobuds”, DOCTORAL DISSERTATIONS (2012)
[3] J.C.charlier,X.Blasé.S.Roche, phys. Rev. 79(2007)677.
[4] Yorikawa,H. and S.Muramatsu," Chirality Dependence of Energy Gaps of Semiconducting Nanotubules". Solid State Communications, 1995. 94(6): p. 435-437.
[5] Reich, S. and C. Thomsen, "Chirality dependence of the density-of-states singularities in carbon nanotubes." Physical Review B, 2000.62(7): P. 4273-4276.
[6] Yorikawa, H. and S.Muramatsu, "Energy Gaps of Semiconducting Nanotubules". Physical Review B, 1995. 52(4): P. 2723-2727.
[7] Gulseren, O., T. Yildirim, and S. Ciraci, "Systematic ab initio study of curvature effects in carbon nanotubes". Physical ReviewB, 2002.65(15).
[8] Bachilo, S.M., et al., "structure-assigned optical spectra of singlewalled carbon nanotubes". Science2002. 298(5602):p.2361-2366.
[9] Dyachkov, P.N. and H. Hermann, "Electronic structure and interband transitions of semi-conducting carbon nanotubes".Journal of Applied Physics, 2004.95(1).
[10] Sfeir, M.Y., et al.,"Optical spectroscopy of individual single-walled carbon nanotubes of defined chiral structure". Science, 2006. 312(5773): P. 554-556.
[11] Georg Kresse and j. furthmuller, "VASP The GUIDE" (2010).

محاسبه ثابت های اپتیکی برای زیر لایه (۰۰۱) MnSe/ZnSe

فخرایی تدین، سارا [۱]؛ بوچانی، آرش [۲]

[۱] *دانشگاه آزاد اسلامی واحد علوم و تحقیقات کرمانشاه،باغ نی*

[۲] *دانشگاه آزاد اسلامی واحد علوم و تحقیقات کرمانشاه،باغ نی*

چکیده

در این مقاله خواص اپتیکی ترکیب MnSe که روی زیرلایه ZnSe(001) رشد داده شده را با استفاده از کد محاسباتی wien2k بدست آورده ایم. محاسبات بااستفاده از روش امواج تخت بهساخته خطی با پتانسیل کامل در چارچوب نظریه تابعی چگالی با تقریب شیب تعمیم یافته(GGA) [1]انجام گرفته است.

Calculation of optical coefficients for interface MnSe/ZnSe(001)

Fakhrai tadayon, Sara[1]; bochani, Arash[2]

[1] *Department of Physics, islamic azad University of kermanshah, kermanshah*
[2] *Department of Physics, islamic azad University of kermanshah, Kermanshah*

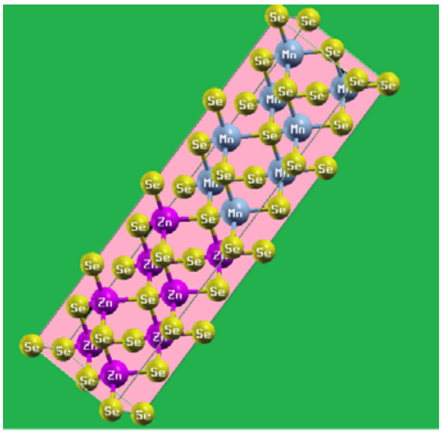
Abstract

In this article we obtained optical properties of MnSe that grown on ZnSe(001) with use of computational cod Wien2k.calculations done by using of FP-LAPW in Density Functional Theory with Generalized Gradiant Approximation [1].

PACS No.

مقدمه

با استفاده از کدکامپیوتری[2] Wein2k MnSeرا روی زیر لایه ی ZnSe رشد می دهیم و سپس minipositon (کمینه موقعیت) می کنیم و بعد خواص موردنظر را برای آن بررسی می کنیم.تعداد kpoint(نقاط همگرایی انرژی در منطقه بریلوئن) را ۱۰۰ انتخاب کرده ایم وتعداد توابع پایه در ناحیه بین جایگاهی 7 RK_{max}است. در حالیکه G_{max} و انرژی قطع به ترتیب مقدار ۱۲$Bohr^{-1}$ و ۶/۵Redberg– است.



شکل ۱:تصویر سه بعدی زیرلایه MnSe/ZnSe(001)

لازم به ذکر است که محاسبه خواص اپتیکی براساس رابطه کرامرز-کرونیگ انجام شده است.این رابطه، یک نتیجه ریاضی

است که قسمت حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک را به یکدیگر مرتبط می کند.در واقع، زمانی که ما تابع دی الکتریک مختلط را اندازه می گیریم،بخش های حقیقی و موهومی آن به طور خودکار محاسبه می شوند ولی محاسبه هر یک از آنها به تنهایی و به طور مجزا با استفاده از رابطه کرامرز- کرونیگ امکان پذیر است.

محاسبه ثابت های اپتیکی

الف)تابع دی الکتریک

ویژگی اپتیکی مواد با محاسبه تابع دی الکتریک ε(ω)، بررسی می شود. همانطور که می دانیم تابع دی الکتریک برای توصیف پاسخ ماده به میدان الکترومغناطیسی به کار برده می شود. در دهه اخیر، طیف سنجی اپتیکی به عنوان مهم ترین وسیله تجربی برای تعیین ساختار نواری گسترش یافته است.

قسمت حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک MnSe در شکل (2) الف و ب نشان داده شده است.

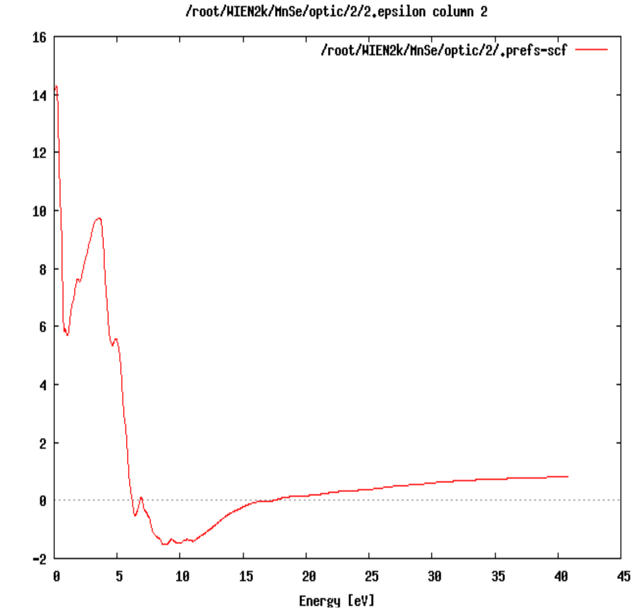
در راستای قطبش موازی و عمود در حالت حقیقی تا حدودی همسانگرد است.ثابت دی الکتریک در هر دو راستا ی قطبش موازی و عمود حقیقی دارای ۲ ریشه انرژی در ٦ و ۱۷ الکترون ولت است.یعنی در هر دو راستا جذب کامل صورت گرفته است و بیشترین جذب در ۰/۵ev است.

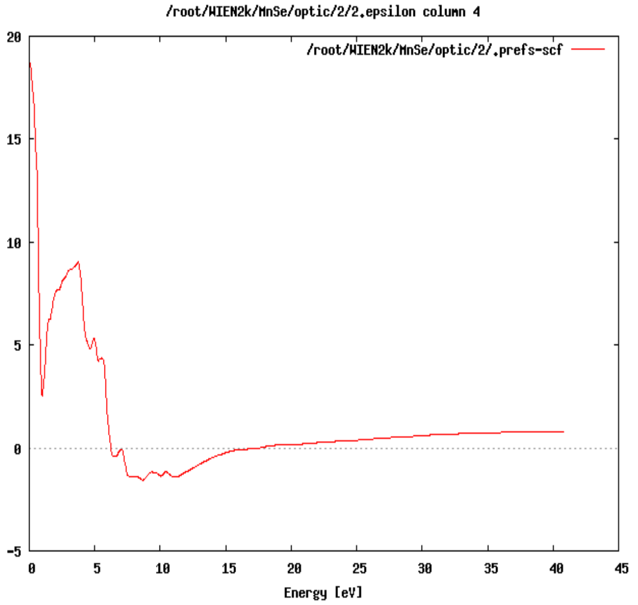
شکل (2الف) یک پیک در مکان تقریبی ٤ev، یک شیب در حال کاهش در گستره ی ٤ تا ۷ev که پس از آن ε(ω) منفی می شود، یک کمینه در ۹ev وجود دارد و در ادامه افزایش آهسته به طرف صفر در انرژی های بالتر که برای هر دو قطبش موازی و عمود تقریباً یکسان است.

مقدار ثابت دی الکتریک و ضریب شکست برای قطبش موازی به ترتیب ۱۵/٦۳ و ۳/۹۵ است و برای قطبش عمود به ترتیب ۱۸/۵ و ٤/۳۰۱ است.

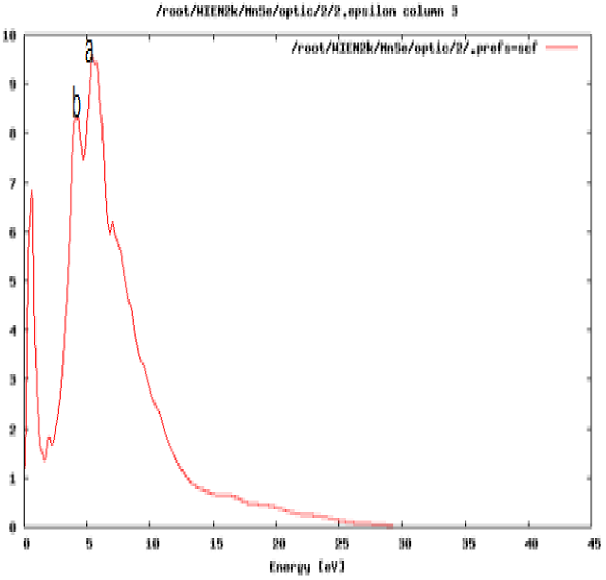
شکل (۲ب) قسمت موهومی را نشان می دهد که محور انرژی قطع نشده است و در هیچ نقطه ای جذب کامل ندارد. بیشترین جذب در راستای قطبش موازی ۰/۵ev است و در راستای قطبش عمود حدود ۷ev است.

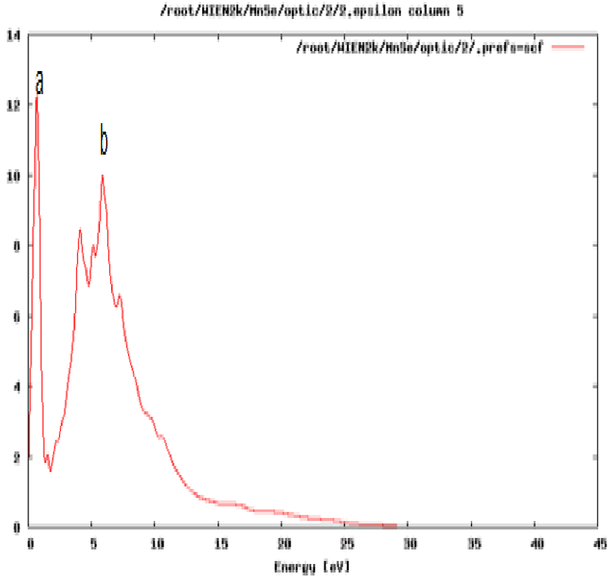
برای قطبش موازی و عمود یکسان نیست و پیک های اصلی برای هر کدام با aو b نامگذاری شده اند که با توجه به چگالی حالت هایی که قبلا محاسبه کرده ایم ناشی از اوربیتال d اتم Zn و Mn، و اوربیتال s,p اتم Se است که برای قطبش موازی a در ۷ev و b ۵ev است و برای قطبش عمود a ۰/۵ev و ۷ev است.





شکل(۲الف):نمودار بخش حقیقی تابع دی الکتریک در دو راستای قطبش موازی و عمود



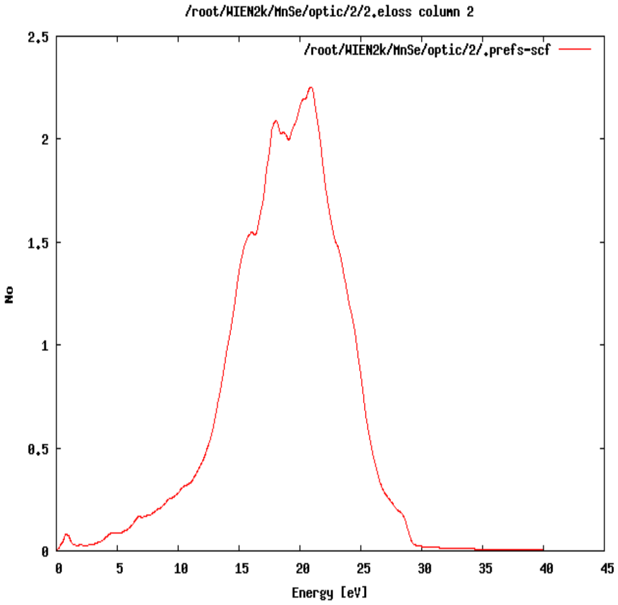


شـکل (۲ب):نمـودار بخـش موهـومی تـابع دی الکتریـک در دو راسـتای قطبش موازی و عمود

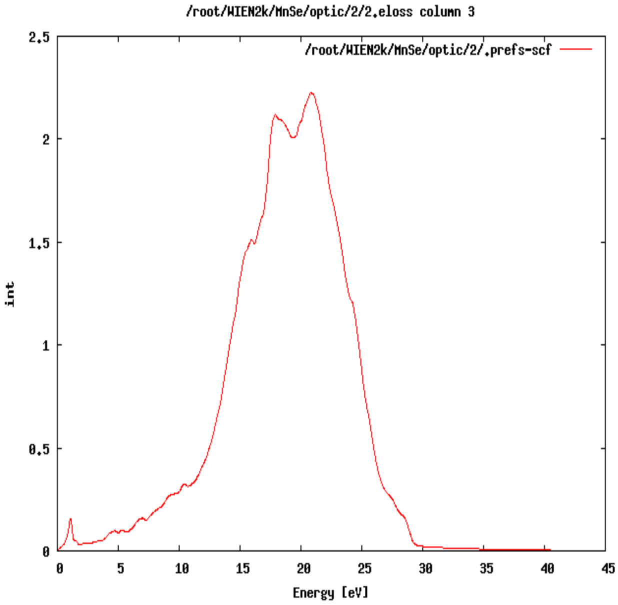
ب) طیف اتلاف انرژی الکترون EELS

همانطور که می دانیم طیف سنجی اتلاف انرژی الکترون روش توانمندی در تجزیه و تحلیل حالتهای اشغال شده بالای تراز فرمی با تفکیک نانومتر است. در ادامه به منظرو بررسی بیشتر خواص اپتیکی این طیف اتلاف را به یکی از مهمترین کمیت ها به منظور بررسی خواص ماکروسکوپی و میکروسکوپی جامدات می باشد، محاسبه می شود. این تابع متناسب با احتمال اتلاف انرژی E در واحدطول، برای یک الکترون در حال عبور از محیط است. شاخص ترین پیک به عنوان پیک پلاسمونی شناخته می شود که بیانگر برانگیختگی های جمعی چگالی بار الکترونی در بلور است. در یک بلور، امکان وجود چند پیک پلاسمونی وجود دارد.

همانگونه که در شکل ۳ دیده می شود یک ماکزیمم پیک در حدود ۲۲ev است ویک پیک نسبتاً پهن (شانه ای) در ۱۷ev است و بعد از ماکزیمم پیک اتلاف برای هر دو کاهش می یابد تا جائیکه از ۳۰ev مقدارش ثابت می شود. ماکزیمم متناظر با پلاسمون سطحی است.



شکل(3الف):نمودار بخش حقیقی طیف اتلاف انرژی الکترون



شکل(3ب):نمودار بخش موهومی طیف اتلاف انرژی الکترون

همچنین می تـوان جـدولی از انـرژی پیـک هـا در طیـف اتـلاف تهیه کرد.

جدول (۱) انرژی پیک ها در طیف اتلاف انرژی الکترون زیر لایه (۰۰۱) Mnse/ZnSe

ترکیب	انرژی ها (ev)
MnSe	١ ٤/٨ ٨ ١٠/٥ ١٦ ١٧ ٢٢

نتیجه گیری

در این مقاله ما ثابت های اپتیکی تابع دی الکتریک و طیف اتـلاف انرژیEELS را با استفاده از تقریب GGA (تقریب شیب تعمـیم یافته)محاسبه کرده ایم.

سپاسگزاری

با تشکر از زحمات بی شائبه استاد گرانقدر دکتر بوچانی که مرا یاری نمودند.

مرجع ها

[1]J.P.Perdew,K.Burke,and M.Ernzerhof,"Generalized Gradiant Approximation Made Simple,"Phys.Rev.Lett.77,3865(1966).

[2] www.Wien2k.at

[3]D.C.Langreth,and J.P.Perdew.Theory of nonuniform electronic systems.I.Analysis of the gradient approximatioin and a generalization that work,Phys.Rev.B 21,5469-5493(1980).

[4]M.Dadsetani,R.Beiranvand,"optical proprties o alkaline-earth metal oxides from first principles,"Solid.State.Sci.11,2099(2009)

[5]F.Wooten,'Optical Properties of Solids'Academic Press,New York(1972).

[6]C.Ambrosch-Drexel,j.O.Sofo,'linear optical properties of solids,'Department of Physics and Astronomy University of St.Andrews,Scotland and Center for Research and Education in Optics and Lasers(CREOL) University of Central Florida Orlando.

حمله NOT کنترلی شخص ثالث در پروتکل توزیع کلید کوانتومی مستقل از دستگاه اندازه‌گیری

فرضی، شکوفه[۱]؛ موحدیان، حسین[۲]

[۱] *دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی شاهرود، شاهرود*

[۲] *دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی شاهرود، شاهرود*

چکیده

در این مقاله ما به بررسی حمله NOT کنترلی در پروتکل توزیع کلید کوانتومی مستقل از دستگاه اندازه‌گیری (MDI-QKD) که اخیرا مورد بررسی قرار گرفته می‌پردازیم. ما یک روش استراق سمع را مطالعه می‌کنیم که می‌توان این روش را به طور مناسب در پروتکل توزیع کلید کوانتومی مستقل از دستگاه اندازه‌گیری نمایش داد. در این روش ایو قادر خواهد بود نصف بیت‌های رمز چشمداشتی بین آلیس وباب را با اطمینان (احتمال۱) بدون ایجاد هیچ خطایی به دست آورد. بنابراین برای بیت‌های باقی مانده ایو فقط قادر خواهد بود مقادیر بیت را با حدس تصادفی (با احتمال ۱/۲) پیش بینی کند، او به طور حتم پی خواهد برد که برهم‌کنش‌اش سبب ایجاد خطایی در بیت‌های رمز بین طرفین ارتباط (آلیس و باب) می‌شود. با توجه به ماهیت نامتقارن حمله NOT کنترلی، ما همچنین گیت‌های هادامارد را با نمایش یک حمله NOT کنترلی متقارن مطرح می‌کنیم. این تحلیل ما ادعاهای ایمنی در توزیع کلید کوانتومی مستقل از دستگاه اندازه‌گیری را تکذیب نمی‌کند، با تطبیق حمله NOT کنترلی در این پروتکل روش غیر بدیهی معاوضه درهم‌تنیدگی لازم است. کاربرد معاوضه درهم‌تنیدگی در این قبیل پروتکل‌ها به سبب پیچیدگی شخص ثالث کاملا نمایان است.

Third-Party CNOT Attack on MDI-QKD

***Shokoofeh, Farzi* [1]*; Hosien, Movahdian* [2]**

[1] *Department of Physics, University of Technological Shahrood, Shahrood*

[2] *Department of Physics, University of Technological Shahrood, Shahrood*

Abstract

In this Article, we concentrate on the very recently Measurement Device Independent Quantum Key Distribution (MDI QKD) protocol. We study how one can suitably present an eavesdropping strategy on MDI QKD. In this strategy, Eve will be able to know expected half of the secret bits communicated between Alice and Bob with certainty (probability 1) without introducing any error. Further, for the remaining bits, where Eve will only be able to predict the bit values as in random guess (with probability 1/2), she will certainly find out whether her interaction induced an error in the secret bits between the communicating parties (Alice and Bob). Given the asymmetric nature of the CNOT attack, we also introduce Hadamard gates to present a symmetric CNOT attack. This our analysis does not refute the security claims in MDI QKD, adapting the CNOT attack in this scenario requires nontrivial approach using entanglement swapping. The application of entanglement swapping is evident in such protocols due to the involvement of the third-party.

PACS No.: 3

مقدمه

فرضیات اخیر [۲,۳] از مقاومت در برابر حملات کانال جانبی سبب شده‌اند تا یک شخص ثالث غیر قابل اعتماد در پروتکل منظور شود. ما نشان خواهیم داد که ایده بنیادی حمله NOT کنترلی به طور مناسبی با تطبیق در این پروتکل اصلاح می‌شود. حمله NOT کنترلی ذاتا نامتقارن است. بنابراین ما گیت هادامارد را درباره یک حمله NOT کنترلی متقارن به کار می‌بریم. در پروتکل توزیع کلید کوانتومی مستقل از دستگاه اندازه‌گیری [۳] نیازی نیست که آلیس و باب هیچ کیوبیتی را اندازه‌گیری کنند همه اندازه‌گیری‌ها در محل ایو یک شخص ثالث غیر قابل اعتماد انجام شده است. بنابراین، برای روش‌های استراق سمع طبیعی است بررسی کنیم که ایو تلاش می‌کند تا اطلاعات درباره کلید رمز بین طرفین ارتباط (آلیس و باب) را به دست آورد. این حمله، حمله شخص ثالث نامیده می‌شود

حمله NOT کنترلی در توزیع کلید کوانتومی مستقل از دستگاه اندازه‌گیری

با درک این الگوریتم ما از حالت‌های بل، حالت‌های درهم‌تنیده دو کیوبیتی متعامد استفاده می‌کنیم. که به‌صورت $\left|\varphi^{\pm}\right\rangle=\frac{\left[|00\rangle \pm|11\rangle\right]}{\sqrt{2}}$

و $\left|\psi^{\pm}\right\rangle=\frac{\left[|01\rangle \pm|10\rangle\right]}{\sqrt{2}}$ داریم.

ایو حالت‌های دریافتی از آلیس و باب را در این پایه‌ها اندازه‌گیری می‌کند و نتیجه اندازه‌گیری را به آن‌ها اطلاع می‌دهد. برای اهداف استراق سمع، تعدادی اندازه‌گیری دیگر توسط ایو را بررسی می‌کنیم که در این اندازه‌گیری‌ها کیوبیت‌های ایو با کیوبیت‌های فرستاده شده توسط آلیس و باب برهم‌کنش دارند. برای این چنین اهدافی، مبنی بر بحث عمومی بین آلیس و باب، ایو همچنین در پایه‌های بل یا در پایه‌های محاسباتی $\left(|00\rangle,|01\rangle,|10\rangle,|11\rangle\right)$ اندازه‌گیری می‌کند

پروتکل توزیع کلید کوانتومی مستقل از دستگاه اندازه‌گیری

۱) آلیس و باب رشته بیت‌ها را به صورت تصادفی انتخاب می‌کنند و بیت‌ها را به صورت تصادفی در پایه‌های z , x همچنین کدگذاری می‌کنند و آن‌ها را به ایو می‌فرستند.

۲) ایو هر کدام جفت کیوبیت‌ها را (یکی از آلیس و یکی از باب) دریافت می‌کند و آن‌ها را در پایه‌های بل اندازه‌گیری می‌کند. نتایج آشکارسازی به طور علنی منتشر شده است.

۳) برای حالت‌هایی که پایه‌های آلیس و باب مطابقت دارند

الف) اگر کیوبیت‌های آلیس و باب در پایه z باشد و نتایج اندازه‌گیری ایو $\left|\psi^{\pm}\right\rangle$ باشد یک نفر از آلیس یا باب باید بیت را پرتاب کند؛

ب) اگر کیوبیت‌های آلیس و باب در پایه x باشد و نتیجه اندازه‌گیری ایو $\left|\psi^{-}\right\rangle$ یا $\left|\varphi^{-}\right\rangle$ **باشد** یک نفر از آلیس یا باب باید بیت را پرتاب کند؛

۴) اصلاح اطلاعات (با استفاده کدهای تصحیح خطا) و تقویت خصوصی به وسیله آلیس و باب در n بیت باقیمانده (که کلید خام می‌نامیم) با بدست آوردن m بیت کلید مشترک (کلید پایانی) انجام شده است

حمله NOT کنترلی

مدل استراق سمع در این حالت به شرح زیر است که ایو تلاش می‌کند تا اطلاعات را بدست آورد. ایو کیوبیت‌ها را از آلیس و باب می‌گیرد و هر یک از آن‌ها را در ورودی کنترل یک گیت NOT کنترلی ثبت می‌کند و او $\langle 0|$ را در هدف به کار خواهد گرفت.

خروجی‌های مطابق کیوبیت‌های کنترل گیت‌های NOT کنترلی در پایه‌های بل به وسیله ایو اندازه‌گیری خواهد شد و نتیجه با آلیس و باب مرتبط خواهد بود. ایو خروجی مطابق با هدف را در حافظه کوانتومی‌اش ذخیره می‌کند. سپس آلیس و باب برای بحث عمومی پایه‌هایشان را اعلان می‌کنند. ایو تلاش خواهد کرد تا اطلاعات را از خروجی‌های مطابق با کیوبیت‌های هدف گیت‌هایNOT کنترلی استخراج کند. اگر آلیس و باب پایه Z را برای ارتباط انتخاب کنند. در این حالت، ایو قادر خواهد بود کیوبیت‌ها را به طور کامل با استفاده گیت‌های NOT کنترلی بدون ایجاد هیچ اختلالی برای کیوبیت‌های فرستاده شده به وسیله آلیس و باب کپی کند. اگر خروجی اندازه‌گیری ایو $|\varphi^{\pm}\rangle$ باشد سپس بیت‌های آلیس و باب مطابقت دارند. به طور مشابه اگر خروجی اندازه‌گیری ایو $|\psi^{\pm}\rangle$ باشد سپس بیت‌های آلیس و باب مطابقت ندارند بنابراین در این حالت ایو همه اطلاعات را بدون ایجاد هیچ اختلالی بدست خواهد آورد. توجه کنیم که در این حالت، ایو کیوبیت هدف‌اش را در پایه‌های محاسباتی اندازه‌گیری می‌کند. هنگامی که آلیس و باب پایه X را برای ارتباط انتخاب کنند سپس خطا به وسیله حمله NOT کنترلی ایجاد شده است و این شرایط یک نمونه معاوضه درهم‌تنیدگی [۴] است. یک حالت خاص را در اینجا بررسی می‌کنیم. و حالت‌های دیگر نیز به طور مشابه بررسی خواهند شد. آلیس و باب هر دو $|+\rangle$ را می‌فرستند. بنابراین بعد از استفاده گیت‌های NOT کنترلی به وسیله ایو حالت‌های درهم‌تنیده $\frac{|0_A 0_{E_1}\rangle+|1_A 1_{E_1}\rangle}{\sqrt{2}}$ و $\frac{|0_B 0_{E_2}\rangle+|1_B 1_{E_2}\rangle}{\sqrt{2}}$ مطابق با آلیس و باب به ترتیب خواهند بود. کیوبیت‌های مطابق با آلیس و باب در پایه‌های بل اندازه‌گیری شده‌اند $\left(\frac{|0_A 0_{E_1}\rangle+|1_A 1_{E_1}\rangle}{\sqrt{2}}\right)\otimes\left(\frac{|0_B 0_{E_2}\rangle+|1_B 1_{E_2}\rangle}{\sqrt{2}}\right)$ که این حالت سیستم مرکب با بازنویسی در پایه‌های ایو و سپس اندازه‌گیری در پایه‌های بل به صورت زیر نوشته می‌شود

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\varphi^{+}{}_{AB}\rangle|\varphi^{+}{}_{E_1E_2}\rangle+|\varphi_{AB}{}^{-}\rangle|\varphi^{-}{}_{E_1E_2}\rangle+|\psi^{+}{}_{AB}\rangle|\psi^{+}{}_{E_1E_2}\rangle+|\psi^{-}{}_{AB}\rangle|\psi^{-}{}_{E_1E_2}\rangle\right).$$

اندازه‌گیری صحیح در این حالت $|\varphi^{+}{}_{AB}\rangle$ یا $|\psi^{+}{}_{AB}\rangle$ است که با احتمال ۱/۲ اتفاق می‌افتد و در یک چنین حالتی بعد از پایه‌های آلیس و باب اعلان شده است، ایو همچنین $|\varphi^{+}{}_{E_1E_2}\rangle$ یا $|\psi^{+}{}_{E_1E_2}\rangle$ را اندازه‌گیری خواهد کرد و او قادر خواهد بود بفهمد که بدون خطا منتشر شده‌اند. هر چند اگر نتیجه اندازه‌گیری $|\varphi^{-}{}_{E_1E_2}\rangle$ یا $|\psi^{-}{}_{E_1E_2}\rangle$ شود (این همچنین با احتمال ۱/۲ اتفاق می‌افتد)، سپس ایو متوجه می‌شود که یک خطا ایجاد شده و او قادر نیست بیت رمز را بدست آورد.

حمله NOT کنترلی متقارن

ما در بخش قبلی دیدیم حمله NOT کنترلی شخص ثالث هیچ خطایی در پایه Z ایجاد نمی‌کند، اما خطاهایی در نصف حالت‌ها در پایه X موجب می‌شود. بنابراین این حمله NOT کنترلی استراق سمع نامتقارن است. با تدارک یک حمله NOT کنترلی متقارن، ما اصلاح زیر را انجام می‌دهیم. H گیت هادامارد و I گیت همانی و C گیت NOT کنترلی می‌باشند. به صورت زیر تعریف داریم

$$\mathrm{P}_u=(H\otimes I)^u\,C\,(H\otimes I)^u \qquad \text{for} \qquad u=0,1$$

$$\text{If} \quad u=0\Rightarrow \mathrm{P}_0=C$$

یا این تعریف حالت‌های زیر را بررسی می‌کنیم

$$\text{If} \quad u=1\Rightarrow \mathrm{P}_1=(H\otimes I)\,C\,(H\otimes I)$$

$$\mathrm{P}_0(|00\rangle)=|00\rangle \quad , \quad \mathrm{P}_0(|10\rangle)=|11\rangle$$

$$\mathrm{P}_0(|{+}0\rangle)=\frac{|{+}{+}\rangle+|{-}{-}\rangle}{\sqrt{2}} \quad , \quad \mathrm{P}_0(|{-}0\rangle)=\frac{|{+}{-}\rangle+|{-}{+}\rangle}{\sqrt{2}}$$

$$\mathrm{P}_1(|00\rangle)=\frac{|0{+}\rangle+|1{-}\rangle}{\sqrt{2}} \quad , \quad \mathrm{P}_1(|10\rangle)=\frac{|0{-}\rangle+|1{+}\rangle}{\sqrt{2}}$$

$$\mathrm{P}_1(|{+}0\rangle)=|{+}0\rangle \quad , \quad \mathrm{P}_1(|{-}0\rangle)=|{-}1\rangle$$

ایو همچنین P_0 یا P_1 را مبنی بر نتیجه یک پرتاب صحیح سکه به کار می‌گیرد. استفاده P_0 برای هر یک از آلیس و باب در بخش قبلی شرح داده شده است. برای حالتی که P_1 به کار برده شده است و هر دو آلیس و باب پایه X را انتخاب کرده باشند سپس ایو قادر خواهد بود بیت‌های رمز را به طور کامل بدون ایجاد هیچ اختلالی به وسیله

اندازه‌گیری کیوبیت‌های هدف‌اش در پایه‌های محاسباتی بدست آورد. هر چند اگر آلیس و باب پایه Z را به کار گیرند و P_1 به کار گرفته شود سپس ایو فقط قادر خواهد بود بیت رمز را با حدس تصادفی پیش بینی کند (یعنی این که با احتمال ۱/۲)، ولی او قادر خواهد بود دقیقا خطای ایجاد شده را تشخیص دهد. این حالت شبیه به این است که آلیس و باب پایه X را برای ارتباط انتخاب کرده اند و P_0 به کار گرفته شده است.

الگوریتم کامل برای هادامارد تقویت کننده حمله N0T کنترلی به شرح زیر است

۱)ایو همچنین P_0 یا P_1 را در کیوبیت‌های $|\mu_A\rangle, |\mu_B\rangle$ (حالت بین آلیس و باب با ایو) و $\langle 0|$ (منبع کمکی به وسیله ایو) برای هر دو حالت به کار می‌گیرد.

۱) حالت دوکیوبیتی (خروجی‌های مطابق با $|\mu_A\rangle, |\mu_B\rangle$) در پایه بل اندازه‌گیری شده است و نتیجه با آلیس و باب مرتبط است. بعلاوه هر دو خروجی مطابق با کیوبیت‌های $\langle 0|$ (از کیوبیت‌های هدف) با ایو در نظر گرفته شده‌اند.

۳) بعد از بحث عمومی بین آلیس و باب، ایو درباره حالت‌هایی که آلیس و باب پایه‌های یکسان دارند را می‌فهمد و حالت‌هایی که باب و آلیس پایه‌های مختلف دارند هر حالت دور انداخته شده است.

۴) اگر آلیس و باب هر دو کیوبیت‌هایی در پایه Z (به ترتیب X) انتخاب کنند و ایو P_1 را (به ترتیب P_0) به کار گیرد سپس ایو بیت رمز متناظر را به درستی بدون ایجاد هیچ خطایی به وسیله اندازه‌گیری جفت کیوبیت‌ها در پایه‌های محاسباتی به دست می‌آورد.

۵) اگر آلیس و باب هر دو کیوبیت‌هایی در پایه Z (به ترتیب X) برای ارتباط انتخاب کنند و ایو P_1 را (به ترتیب P_0) به کار گیرد سپس ایو فقط می‌تواند بیت بین طرفین ارتباط را با احتمال ۱/۲ با ایجاد خطای بیت با احتمال ۱/۲ حدس بزند.

در چنین حالت‌هایی ایو کیوبیت‌هایش را در پایه بل اندازه‌گیری می‌کند و اگر خروجی اندازه‌گیری $|\varphi^+_{E_1E_2}\rangle$ یا $|\psi^+_{E_1E_2}\rangle$ باشد (به ترتیب $|\varphi^-_{E_1E_2}\rangle$ یا $|\psi^-_{E_1E_2}\rangle$) سپس ایو می‌داند که در طول ارتباط خطا نبوده است (به ترتیب بوده است)

نتیجه‌گیری

در این مقاله ما بررسی کردیم برای این که حمله NOT کنترلی در پروتکل توزیع کلید کوانتومی مستقل از دستگاه اندازه‌گیری [۳] به کار گرفته شود نیاز به یک شخص ثالث دارد تا حمله را با استفاده از معاوضه درهم‌تنیدگی اجرا کند. با این استراق سمع ایو به طور دقیق حدود نصف بیت‌های رمز بین طرفین ارتباط (آلیس و باب) را به دست می‌آورد. برای بقیه بیت‌ها ایو فقط قادر خواهد بود مقادیر بیت را با حدس تصادفی پیش بینی کند. هر چند ایو به طور دقیق پی خواهد برد که برهم‌کنش او یک خطا بین آلیس و باب ایجاد خواهد کرد.

مرجع‌ها

[1] Applied Statistics Unit, Indian Statistical Institute, arxiv:1208.5223v2 [quant-ph] 6 sep 2012

[2] S. L. Braunstein and S. Pirandola. Physical Review Letters, 108, 130502 (2012)

[3] H. -K. Lo, M. Curty and B. Qi. Physical Review Letters, 108, 130503 (2012)

[4] M. Zukowski, A. Zeilinger, M. A. Horne and A. K. Ekert. Physical Review Letters, 71, 4287–4290 (1993).

محاسبات ابتدابه ساکن خواص ساختاری وترمودینامیکی فاز آلفای اکسید آلومینیوم

فاضلی، علی[۱]، موسوی، سید جواد[۲] و گلشاهی، سیامک[۲]

[۱] دانشگاه آزاد اسلامی، واحدتهران مرکز، گروه فیزیک، تهران، ایران

[۲] دانشگاه آزاداسلامی، واحد رشت، گروه فیزیک، رشت، ایران

چکیده

هدف ما در این مقاله بررسی محاسبات نظری خواص ساختاری وترمودینامیکی فاز آلفای آلومینا می باشد. در این بررسی از روش نظریه تابعی چگالی (DFT) استفاده شده است. پتانسیل تبادلی-همبستگی به کار رفته در این محاسبات تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) می باشد. محاسبه خواص ترمودینامیکی با استفاده از مدل شبه هماهنگ دبای انجام شده است. نتایج به دست آمده برای ثابت شبکه توافق معناداری را با نتایج کارهای تجربی نشان می دهد. درضمن سایر پارامترهای محاسبه شده با استفاده از این مدل، همچون، ظرفیت گرمایی درحجم ثابت، ضریب انبساط حرارتی و همچنین تغییرات مدول کپه ای با فشار و دما با نتایج مورد انتظار به خوبی سازگار می باشند.

Ab inito study of structural and thermodinamical properties of $\alpha - Al_2O_3$

Fazeli, Ali[1], Mousavi, Seyed Javad[2] And Golshahi, Siamak[2]

[1] *Department of Physics, Centeral Tehran Branch, Islamic Azad University, Tehran, Iran.*
[2] *Department of Physics, Rasht Branch, Islamic Azad University, Rasht, Iran.*

Abstract

In this paper, we purpose to investigate the theoretical calculations of structural and thermodynamical properties of $\alpha - Al_2O_3$. In this study the Density Functional Theory (DFT) by the use of Generalized Gradient Approximation (GGA) as the exchange-correlation potential is used for the calculations. Thermodynamic properties of $\alpha - Al_2O_3$ are obtained by applying the quasi-harmonic Debye model as the basis of calculations. Achieved results for lattice constant demonstrate a meaningful combatibility with experimental research data. Moreover, other calculated parameters by this model like heat capacity in constant volume, thermal expansion coefficient and bulk modulus variations over a wide pressure and temperature range all are in good agreement with expectations.
PACS No. 65

مقدمه

آلومینا یکی از پرکاربرد ترین مواد سرامیکی است که به علت سختی، مقاومت در برابر ساییدگی، قدرت مکانیکی، مقاومت در برابر خوردگی، نارسانایی قوی الکتریکی، خواص اپتیکی مفید، اندازه ریزدانه ها و سطح مسطح کاربردهای فراوانی در صنعت و فناوری دارد. $\alpha - Al_2O_3$ پایدارترین فاز اکسیدآلومینیوم می باشد. آلومینا علاوه بر فاز آلفا درفازهای دیگری مانند $\chi, \theta, \eta, \lambda, \kappa, \gamma$,... یافت می شود[۱]. آلفا آلومینا به عنوان زیر لایه برای کاربردهای الکترونیکی، به عنوان ماده دی الکتریک، ماده میزبان لیزر، تشعشع سنجها وعایق برای راکتورهای هسته ای به کار می رود[۲]. سلول واحد $\alpha - Al_2O_3$ از نوع لوزی پهلو است که از دو واحد مولکولی Al_2O_3 شامل ۱۰ اتم تشکیل شده است. این ساختار را می توان به صورت یک دستگاه شش گوشه دارای ٦ واحد مولکولی شامل ۳۰ اتم نمایش داد. ساختار کریستالی آلومینا عموما به شکل فشرده شده ABAB است که از صفحات اکسیژن و آلومینیوم تشکیل می شود.

هدف این مقاله محاسبه بعضی از خواص مهم ساختاری و ترمودینامیکی $\alpha - Al_2O_3$ در چارچوب نظریه تابعی چگالی و با استفاده از امواج تخت بهبود یافته و تقریب شیب تعمیم یافته ومدل شبه هماهنگ دبای می باشد.

روش نظری

درسالهای اخیر محاسبات ابتدا به ساکن انرژی کل وابسته به نظریه تابعی چگالی در پیش بینی ساختار کریستالی، خواص الکترونیکی و اپتیکی و همچنین ویژگیهای ترمودینامیکی مواد بسیار موفق بوده است. علی رغم نتایج بسیار خوبی که از خواص الکترونیکی و اپتیکی آلومینا در دست است[۳و٤]، ولی ویژگیهای ترمودینامیکی این ماده چندان مورد مطالعه قرار نگرفته است.

با استفاده از برنامه گیبس در قالب مدل شبه هماهنگ دبای تابع عدم تعادل گیبس به صورت زیر نوشته می شود[۵].

$$G^*(V;P,T) = E(V) + PV + F_{Vib}[\theta(V);T] \quad (1)$$

که $E(V)$ انرژی کل هر سلول واحد می باشد و PV مربوط به وضعیت فشار هیدرواستاتیک است $\theta(V)$ دمای دبای می باشد و F انرژی آزاد هلمهلتز است که به شکل رابطه زیر نوشته می شود:

$$F_{Vib}[\theta(V);T] = Nk_BT\left[\frac{9\theta}{8T} + 3\ln\left(1-e^{-\frac{\theta}{T}}\right) - D\left(\frac{\theta}{T}\right)\right] \quad (2)$$

که $D\left(\frac{\theta}{T}\right)$ انتگرال دبای و N تعداد اتمهای موجود در فرمول شیمیایی یک اتم و k_B ثابت بولتزمن می باشد. که θ به صورت زیر نوشته می شود[۵و۶]:

$$\theta = \frac{\hbar}{k}\left[6\pi^2 V^{\frac{1}{2}} N\right]^{\frac{1}{3}} f(\sigma)\sqrt{\frac{B_s}{M}} \quad (3)$$

که M جرم مولکولی هر سلول واحد و B_S مقدار مدول حجمی بی دررو است که مشخص کننده میزان فشردگی بلور بوده و به صورت زیر نوشته می شود.

$$B_S \cong B_{static}\left(V\frac{d^2E(V)}{dV^2}\right) \quad (4)$$

σ نسبت پوآسون بوده و تابع $f(\sigma)$ با عبارت زیر بیان می شود:

$$f(\sigma) = \left\{3\left[2\left(\frac{2}{3}\frac{1+\sigma}{1-2\sigma}\right)^{\frac{3}{2}} + \left(\frac{1}{3}\frac{1+\sigma}{1-\sigma}\right)^{\frac{3}{2}}\right]^{-1}\right\}^{\frac{1}{3}} \quad (5)$$

مقدار نسبت پوآسون معمولا درحدود۰/۲۵ انتخاب می شود[۷] در این صورت تابع غیر تعادلی گیبس را می توان نسبت به حجم کمینه نمود.

$$\left[\frac{\partial G^*(V;P.T)}{\partial V}\right]_{P,T} = 0 \quad (6)$$

با حل معادله فوق ظرفیت گرمایی حجم ثابتC_V، ضریب انبساط حرارتیα و مدول کپه ای تکدما B_T به صورت زیر به دست می آیند:

$$C_V = C_V(V(P,T),T) = \left(\frac{\partial G^*}{\partial T}\right)_V =$$

$$3Nk_B\left[4D\left(\frac{\theta}{T}\right) - \frac{3\theta/T}{e^{\frac{\theta}{T}}-1}\right] \quad (7)$$

$$\alpha = \frac{\gamma C_V}{B_T V} \quad (8)$$

$$B_T = -V\left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_T = V\left(\frac{\partial^2 F_{Vib}}{\partial V^2}\right)_T \quad (9)$$

که γ پارامتر گرون آیزن است که مطابق رابطه زیر به دست می آید:

$$\gamma_D = \frac{\partial \ln\theta}{\partial V}\,. \quad (10)$$

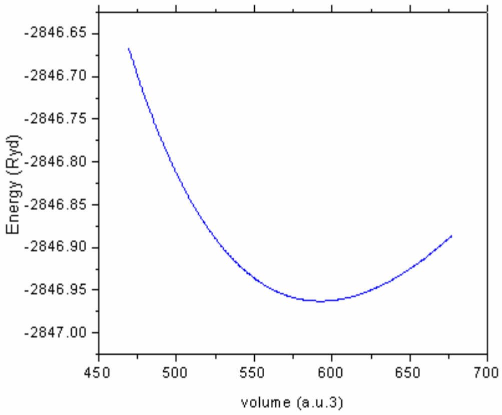
نتایج و بحث

در ورودی برنامه گیبس، از داده های انرژی بر حسب حجم شبکه بلوری $\alpha - Al_2O_3$ و جرم مولکولی آن که برابر ۱۰۱/۹٦ گرم می باشد و تعداد اتم ها در فرمول شیمیایی که برابر ۵ است استفاده می شود.

زوج مقادیر انرژی–حجم را با استفاده از برنامه wien2k استخراج می نماییم. با توجه به ساختار الکترونی آلومینا پارامترهای ورودی

برنامه wien2k به صورت زیر انتخاب و بهینه سازی گردید که در آن RK_{max} برابر ۷ و شعاع کره های مافین تین آلومینیوم و اکسیژن برابر ۱/۷ a.u و تعداد نقاط k برابر ۲۰۰۰ و مقدار انرژی قطع E_{cut} = −۸ Ryd می باشد.

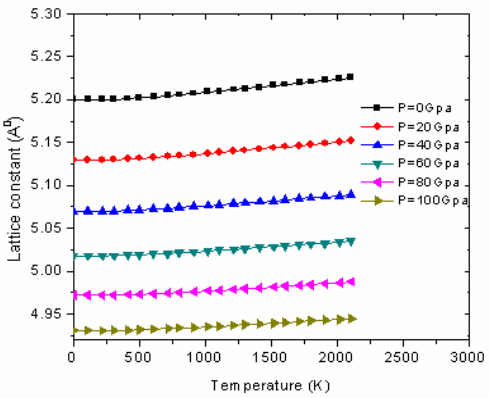
انرژی کل $\alpha - Al_2O_3$ درحجمهای مختلف و در اطراف ثابت شبکه تعادلی a محاسبه شد و مدول حجمی B_0 بر اساس آن به دست آمد. تغییرات انرژی بر حسب حجم با استفاده از برازش منحنی با تابع حالت مورناگان[۸] به صورت شکل (۱) به دست آمد. مقدار ثابت شبکه A^o a=۵/۱۹ و B_0=۲۳۰ GPa به دست آمد که مقادیر تجربی این دو پارامتر به ترتیب A^o a=۵/۱۲۸ و B_0=۲۳۹GPa گزارش شده است[۹].



شکل ۱– نمودار انرژی برحسب حجم

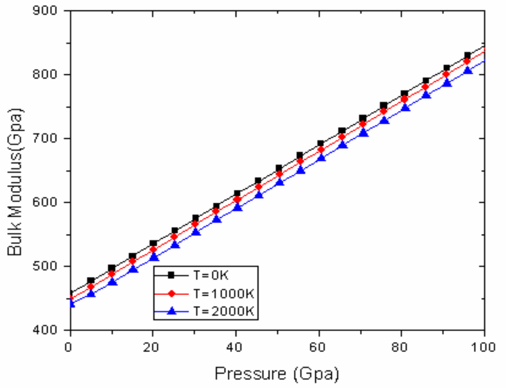
خواص ترمودینامیکی Al_2O_3 در بازه دمایی ۰ تا K ۲۰۰۰ وبازه فشار ۰ تا۱۰۰ GPa بررسی شده است که در این بازه، مدل شبه هماهنگ دبای بسیارکاراست. تغییرات ثابت شبکه برحسب دما در چندین فشار در شکل۲ نشان داده شده است مشاهده می‌گردد که با افزایش دما، ثابت شبکه افزایش می یابد ولی افزایش فشار باعث کاهش ثابت شبکه می گردد.

شکل۳رابطه بین مدول حجمی با فشار را در دماهای مختلف نشان می دهد. مشاهده می شود که رابطه میان مدول حجمی وفشاردر دماهای مختلف به صورت خطی است. همچنین با مقایسه نمودارهای مختلف در یک دمای ثابت می توان نتیجه گیری کرد



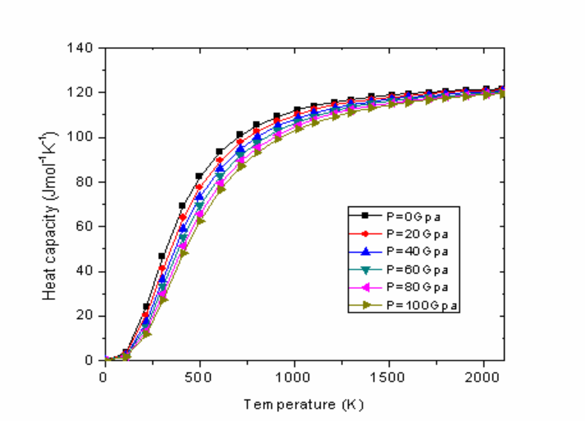
شکل۲- نمودار ثابت شبکه برحسب دما درفشار های مختلف

که مدول حجمی با فشار در دمای ثابت افزایش می‌یابد وبا افزایش دما در یک فشار ثابت، مقدار آن کاهش پیدا می کند.



شکل۳- نمودارمدول کپه ای برحسب فشار دردماهای مختلف

شکل ٤ تغییرات ظرفیت گرمایی ویژه $\alpha - Al_2O_3$ بر حسب دما را نشان می دهد. رفتار این کمیت کاملاً در انطباق خوبی با نتایج تئوری دولون- پتی[۱۰] است. تغییرات ظرفیت گرمایی در دماهای پایین با توان سوم دما متناسب بوده و در دماهای بالا مقدار آن به یک حد اشباع در محدوده ۱۲۰ $(Jmol^{-1}K^{-1})$ می رسد. همچنین تغییرات ظرفیت گرمایی در فشارهای مختلف تا محدوده ۱۰۰ (GPa) نشان می‌دهد که با افزایش فشار در یک دمای ثابت مقدار ظرفیت گرمایی کاهش می یابد. این موضوع نیز از منظر ارتعاشی بلور قابل قبول است زیرا افزایش فشار باعث کاهش ارتعاشات بلوری و در نتیجه کاهش توانایی بلور در جذب انرژی گرمایی می‌شود.

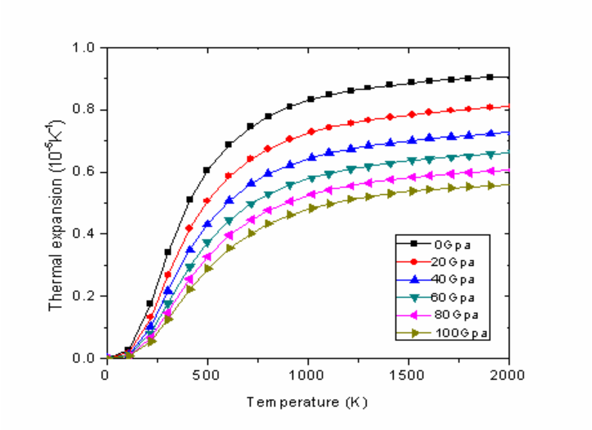


شکل٤- نمودار تغییرات ضریب انبساط حرارتی برحسب دما در فشارهای مختلف

در شکل٥ تغییرات ضریب انبساط حرارتی به صورت تابعی از دما نشان داده شده است. همان طور که از یک جامد بلوری انتظار می-رود مشاهده می کنیم افزایش دما باعث انبساط بلور می‌گردد ولی میزان انبساط در بازه های دمایی مختلف متفاوت است. افزایش سریع این کمیت با دما در دماهای پایین را می توان به جملات غیر هماهنگ در تقریب شبه هماهنگ دبای مربوط دانست. در دماهای بالا مقدار ضریب انبساط خطی به یک حد اشباع نزدیک می‌شود که اگر این موضوع را به همراه اثر تغییرات فشار مورد بررسی قرار دهیم مطابق شکل مشاهده می نماییم که افزایش فشار باعث کاهش ضریب انبساط خطی $\alpha - Al_2O_3$ می‌گردد.

نتیجه گیری

خواص ساختاری آلومینا را در دمای صفر با استفاده از نظریه تابعی چگالی و امواج تخت بهبود یافته با تقریب شیب گرادیان محاسبه نمودیم و با استفاده از تقریب شبه هماهنگ دبای برخی از پارامترهای مهم ترمودینامیکی آن ازجمله تغییرات ثابت شبکه، مدول حجمی، ظرفیت گرمایی و ضریب انبساط خطی اندازه گیری گردید. نتایج به دست آمده از ثابت شبکه و مدول حجمی با نتایج تجربی سازگاری خوبی دارد. محاسبه تغییرات ظرفیت گرمایی ویژه با دما با نتایج نظریه دولون و پتی در انطباق کامل می باشد.



شکل٥- نمودار تغییرات ضریب انبساط حرارتی برحسب دما در فشارهای مختلف

مرجع ها

[1] S.J.Mousavi,M.R.Abolhassani,S.M.Hosseini and S.A.Sebt "Comparison of electronic and optical properties of the α and κ phases of alumina using density functional theory" *Chinese journal of physics* **47**(2009) 862-873.

[2] W.Y.Ching and Yong Nian Xu "First Principles Calculation of electronic, optical and structural properties of alpha-Al_2O_3" *Journal of American Ceramic Society* ,**77** (1994) 404-411.

[3] S.M. Hosseini, H.A. Rahnamaye Aliabad, A. Kompany "Influence of La on electronic structure of alpha-Al_2O_3 high k-gate from first principles", *Ceramics International* **31** (2005) 671–675.

[4] S. Kohiki, M. Arai, H. Yoshikawa and S. Fukushima, "Energy Loss Structure of X-ray Photoelectron Spectra of MgO and γ-Al_2O_3", *Journal Of Physical Chemistry* B, **103**, (1999) 5296-5299.

[5] A.Otero-de-la-Roza,D.Abbasi-Perez,V.Luana "a new version of quasi-harmonic debye model code.II.models for solid- state thermodynamics,features and implementations" *Computer Physics Communication*, **182**(2011)2232-2248.

[6] A.Otero-de-la-Roza, V.Luana," *Equation of state in solid:fitting theorical data,possibly including noise and jump" computational and theorical chimestry*,**975**(2011)111-115

[7] J.P.Poirier,*"Introduction to the physics of the Earth's Interior".Camberidge University Press*,1991.

[8] F.D.Murnaghan,*"The compressibility of media under exterem pressures"proceeding of the National Academy of Science,*. **30**(1994) 244-247 .

[9] Sato and S. Akimoto, "Hydrostatic compression of four corundum-type compounds: $\alpha -$ Al_2O_3, V_2O_3, Cr_2O_3, and α -Fe_2O_3" *Journal Of Applied Physics*. **50**, (1979) 5285-5290.

[10] A.Petit,P.L.Dulong,"Recherches sur qulques points importants de la chaleur" *Annales de chimie et de physique***10**, (1819)395-413.

یک روش جدید محاسباتی برای تعیین ثابت‌های اپتیکی لایه‌های نازک در گستره مادون قرمز

فلاحت پور، سمانه[۱]؛ بهجت، عباس[۱]

[۱] گروه اتمی مولکولی، دانشکده فیزیک دانشگاه یزد ، صفاییه ، یزد

چکیده

در این مقاله برآنیم که پارامترهای اپتیکی(ضریب شکست n و ضریب خاموشی k) لایه نازک اکسیدهافنیوم HfO_2 را که روی بستره ژرمانیوم باتکنیک تبخیر حرارتی در خلأ نشانده شده است، بروش بهینه‌سازی الگوریتم ژنتیک استخراج نماییم. بدین منظور ابتدا یک برنامه کامپیوتری در MATLAB برای این الگوریتم نوشتیم که بصورت گام به گام معرفی شد. سپس برای امتحان آن، طیف عبور تهیه شده از نمونه در ناحیه مادون قرمز، بهمراه مقادیر دیگر بعنوان ورودی به برنامه داده شدند. بدین طریق ضرایب سلمایر و بدنبال آن ضرایب شکست و خاموشی لایه، بهینه شدند. بنابراین توانستیم برای الگوریتم ژنتیک نرم‌افزاری طراحی کنیم که بکمک آن ثوابت اپتیکی لایه نازک با دقت خوبی قابل محاسبه‌اند.

A new calculated method for determination of optical constants of thin films in the infrared region

Falahatpour, Samaneh[1]; Behjat, Abbas[1]

[1] *Atomic-Molecular group, Department of Physics, University of Yazd, Yazd*

Abstract

In this article, we want to extract optical parameters(refractive index and extinction coefficient) of HfO_2 thin film that coated onto Ge substrate by vacuum evaporation technique by genetic algorithm optimization method. Thus, a computer program written in MATLAB for this method that introduced step by step. Then for test, transmittance spectra of sample in the infrared region and other values as input gave to program. Subsequently, Sellmeier coefficients and (n,k) of layer were optimized. So we could design a software for genetic algorithm and with its help calculated optical constants of thin film with good accuracy.

PACS No. ۷۸, ۷۳

مقدمه

در سال‌های اخیر پیشرفت‌های سریع در فناوری ساخت رایانه-ها پاسخگوی بسیاری از نیازهای قدیمی بوده است اما روند روبه رشد حجم محاسبات علمی بخصوص در کاربردهایی که نیازمند محاسبات پیچیده و یا درگیر با داده‌های فراوان می‌باشند، توان پردازش بیشتری را طلب می‌کند.

روش بهینه‌سازی الگوریتم ژنتیک یکی از این موارد است که در این مقاله سعی کرده‌ایم برای اولین بار، پارامترهای اپتیکی لایه‌های نازک را با استفاده از این روش استخراج نماییم.

الگوریتم ژنتیک یک تکنیک برنامه‌نویسی است که از تکامل ژنتیکی و فرایندهای زیست شناسی مانند وراثت و جهش، به‌عنوان یک الگوی حل مسئله استفاده می‌کند[۱].

الگوریتم ژنتیک

الگوریتم ژنتیک(Genetic Algorithm:GA) در سال **۱۹۷۰** توسط "جان هولند" ارائه شد[۲]. اساس این الگوریتم، نظریه تکاملی داروین(**۱۸۵۹**) است که برطبق آن گونه‌های دارای خصوصیات نامطلوب به‌تدریج ازبین می‌روند[۳] .

قبل از تشریح این روش به معرفی چند اصطلاح از آن می‌پردازیم.

عدد باینری روبرو را درنظر بگیرید: **۱۰۱۰۰۰۱۱۰**

به هر بیت از عدد بالا یک ژن و به زنجیره ژنها، کروموزوم گفته می‌شود. از مجموعه چند کروموزوم یک نسل خواهیم داشت.

روش تجربی و محاسباتی

ابتدا یک لایه‌نشانی عملی متشکل از لایه نازک اکسیدهافنیوم(HfO_2) با ضخامت **۳۳۲/۰۳nm** بر روی بستره ژرمانیوم، به‌روش تبخیر حرارتی در خلأ انجام شد. سپس طیف عبور نمونه را توسط دستگاه طیف‌سنج اندازه‌گرفتیم.

پس از یک پروسه مطالعاتی دقیق و گسترده، برای روش بهینه‌سازی الگوریتم ژنتیک، یک برنامه کامپیوتری در MATLAB نوشتیم. نحوه عملکرد این نرم‌افزار را درقالب چند گام معرفی می‌نماییم:

- ✓ ورودی: ابتدا مقادیر بیشینه و کمینه متغیرهای موردنظر، میزان عبور تجربی سیستم لایه-زیرلایه در گستره طول-موجی موردنظر، ضریب شکست زیرلایه در این گستره، مرتبه دقت و نیز پارامترهای ژنتیکی مانند تعداد نسل‌ها، تعداد کروموزوم‌های هرنسل، احتمال پیوند و جهش و... بعنوان ورودی به نرم‌افزار داده می‌شوند.
- ✓ مرحله اول: حال نسل اول- بصورت تصادفی- به‌تعداد کروموزوم‌های دلخواه تولید می‌شود که در آن، طول هرکروموزوم از مجموع طول رشته ژنی متعلق به هر متغیر مانند A که از فرمول(۱) قابل محاسبه است، بدست می‌آید[٤].

$$lA = (\log_2 (A_{\max} - A_{\min}) \times 10^m) + 1 \qquad (1)$$

در رابطه بالا، m مرتبه دقت پاسخ‌های نهایی است. از محاسن روش این است که مرتبه دقت پاسخهای نهایی از ابتدا توسط کاربر تعیین می‌گردد.

- ✓ مرحله دوم: در این مرحله تابع ارزیابی را بصورت

$$f(n(\lambda), k(\lambda)) = \sum_{\lambda} (T_{meas}(\lambda) - T_{calc}(\lambda))^2 \qquad (2)$$

تعریف می‌کنیم که در آن، T_{meas}از طیف عبور تجربی نمونه و T_{calc}از طیف عبور محاسباتی حاصل از فرمول(۳) جایگذاری می-شود. هدف از اینگونه تعریف، کمینه نمودن اختلاف طیف تجربی و تئوری و تطابق هرچه بیشتر ایندو است. عبور اپتیکی یک لایه دارای جذب که روی یک زیرلایه بدون جذب نشانده شده است، در فرود عمودی نور عبارتست از[**۵**]:

$$T_{calc} = \frac{Ax}{D + Cx + Bx^2} \qquad (3)$$

$$A = 16s(n^2 + k^2)$$

$$B = [(n-1)^2 + k^2][(n-s)^2 + k^2]$$

$$C = 2c_1 \cos\varphi + cs_2 \sin\varphi$$

$$c_1 = -[(n^2 - 1 + k^2)(n^2 - s^2 + k^2)] + 4k^2 s$$

$$c_2 = [2ks(n^2 - 1 + k^2)] + [2k(n^2 - s^2 + k^2)]$$

$$D=[(n+1)^2+k^2][(n+s)^2+k^2]$$
$$\alpha=4\pi nk/\lambda \quad x=\exp(-\alpha d) \quad \varphi=4\pi nd/\lambda$$

اکنون تابع ارزیابی هر کروموزوم را با قرار دادن مقدار عددی متغیرها حاصل از فرمول(٤) محاسبه می‌کنیم.

$$A=A_{\min}+\left\lfloor A^*(A_{\max}-A_{\min})\Big/_{2^{lA}-1}\right\rfloor \qquad (٤)$$

A^* تبدیل رشته ژنی متغیر A از مبنای ۲ به ۱۰ است.

کروموزومی که متناظر با کمترین مقدار تابع f است را ذخیره می‌کنیم.

- ✓ مرحله سوم: عملگرهای ژنتیکی انتخاب، پیوند و جهش بر روی سایر کروموزوم‌ها، بمنظور بهبود آنها اعمال می‌شود. پس از ارزیابی جمعیت جدید، مجدداً کروموزوم‌های برتر ذخیره می‌شوند.

این مرحله آنقدر تکرار می‌شود که درنهایت، ماتریسی از برترین‌ها خواهیم داشت.

- ✓ مرحله چهارم: در آخرین مرحله از بین مولفه‌های این ماتریس، کروموزومی که دارای کمترین میزان خطا می‌باشد، انتخاب شده و رمزگشایی می‌شود.
- ✓ خروجی: درپایان، مقادیر بهینه متغیرها را بعنوان خروجی برنامه خواهیم داشت.

با استفاده از این روش، مقادیر بهینه ضرایب سلمایر لایه نازک HfO_2 استخراج شدند[٦] و سپس با قراردادن در فرمول‌های(۵) که به روابط پاشندگی سلمایر معروفند[۷]، جفت بهینه ثابت‌های اپتیکی(ضریب شکستn و ضریب خاموشیk) در طول موج متناظر تعیین می‌شوند و این فرایند برای تمام گستره طول موجی تکرار می‌شود.

$$n(\lambda)=(A_n+\frac{B_n\lambda^2}{\lambda^2-C_n^{\,2}})^{1/2} \qquad (۵)$$
$$k(\lambda)=[n(\lambda)(B_1+\frac{B_2}{\lambda}+\frac{B_3}{\lambda^3})]^{-1}$$

علت استفاده از این رابطه از میان تعدد روابط پاشندگی، اعتبار آن در ناحیه مادون قرمز است.

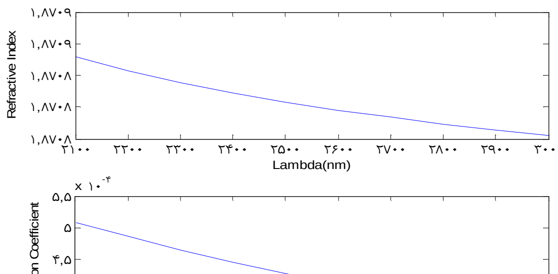
بررسی میزان صحت و دقت نتایج

پس از استخراج ضرایب شکست و خاموشی نمونه، نتایج را با داده‌هایی که از کارهای محققان پیشین برروی همین نمونه بدست آمده مقایسه کردیم که به‌جهت مقایسه، بخشی از نتایج در جدول(۱) آورده شده است.

جدول۱- ثابتهای اپتیکی فیلم نازکHfO۲ با ضخامتnm ۳۳۲/۰۳ بروش الگوریتم ژنتیک و نتایج محققان گذشته

λ(nm)	n_{ga}	k_{ga}	n	k
۲۱۰۰	۱/۸۷۰۸۵۳	۰/۰۰۰۵۰۹	۱/۸۸٤٤۷	۰/۰۰٦٦۸
۲۲۰۰	۱/۸۷۰۸۵۱	۰/۰۰۰٤۸٦	۱/۸۸۳۹٤	۰/۰۰۱۱۳٦
۲۳۰۰	۱/۸۷۰۸٤۹	۰/۰۰۰٤٦۵	۱/۸۸۳٤۰	۰/۰۱٦۰٤
۲٤۰۰	۱/۸۷۰۸٤۷	۰/۰۰۰٤٤۵	۱/۸۸۲۸۷	۰/۰۲۰۷۲
۲۵۰۰	۱/۸۷۰۸٤٦	۰/۰۰۰٤۲۸	۱/۸۸۲۳٤	۰/۰۲۵٤
۲٦۰۰	۱/۸۷۰۸٤۵	۰/۰۰۰٤۱۱	۱/۸۸۱۸۱	۰/۰۳۰۰۹
۲۷۰۰	۱/۸۷۰۸٤۳	۰/۰۰۰۳۹٦	۱/۸۸۱۲۸	۰/۰۳٤۷۷
۲۸۰۰	۱/۸۷۰۸٤۲	۰/۰۰۰۳۸۲	۱/۸۸۰۷٤	۰/۰۳۹٤۵
۲۹۰۰	۱/۸۷۰۸٤۱	۰/۰۰۰۳٦۹	۱/۸۸۰۲۱	۰/۰٤٤۱۳
۳۰۰۰	۱/۸۷۰۸٤۱	۰/۰۰۰۳۵٦	۱/۸۸۰۰۰	۰/۰٤۵۵۳

در شکل(۱) نمودار تغییرات ضریب شکست و ضریب خاموشی نمونه که توسط برنامه رسم شده است را مشاهده می‌نماییم:



شکل۱- تغییرات ضرایب شکست و خاموشی نمونه

نتیجه‌گیری

در این پژوهش، یک نرم‌افزار کامپیوتری برای روش بهینه‌سازی الگوریتم ژنتیک نوشته شد. پس از انجام یک لایه‌نشانی عملی، طیف عبور سیستم(HfO_2/Ge) اندازه‌گیری شد و بهمراه مقادیر دیگر بعنوان ورودی به برنامه داده شد. سپس ضرایب سلمایر و درنتیجه ضرایب شکست و خاموشی لایه در گستره مادون قرمز نزدیک بهینه شدند. از مقایسه این نتایج با داده‌های پیشین دریافتیم که می‌توان به روش بهینه‌سازی الگوریتم ژنتیک، پارامترهای اپتیکی این لایه نازک را با دقت خوبی(خطای نسبی از مرتبه 10^{-3}) استخراج نمود؛ بگونه‌ای که نسبت به نتایج قبلی حداقل تا یک رقم اعشار مطابق و قابل مقایسه‌اند.

سپاسگزاری

از همکاری جناب آقای مهدی بیدرنگ از شرکت صنایع الکترواپتیک صاایران اصفهان که اینجانب را در نوشتن نرم‌افزار یاری نمودند، کمال تشکر را دارم.

مرجع‌ها

[۱] S. N. Sivanandam, S. N. Deepa, *Introduction to Genetic Algorithms*, Springer Berlin Heidelberg New York, (۲۰۰۸).

[۲] L. Haupt, E. Haupt, *Practical Genetic Algorithms*, second edition, (۲۰۰٤).

[۳] D. E. Goldberg, *The Design of Innovation: Lessons from and for Competent Genetic Algorithms*, Addison-Wesley, Reading, MA, (۲۰۰۲).

[٤] F. Rothlauf, *Representations for Genetic and Evolutionary Algorithms*, second edition, university of Mannheim, (۲۰۰٦).

[۵]J. C. Manifacier, J. Gasiot, J. P. Fillard, J. Phy, E: Scientific Instruments, *A simple method for the determination of the optical constants n,k and the thickness of a weakly absorbing thin film*, Vol۹, (۱۹۷٦), ۱۰۰۲-۱۰۰٤.

[٦]D. Palik, *Handbook of Optical constants of Solids*, Academic Press, (۱۹۹۸).

[۷] D. poelman, P. F. Smet, J. Phy, D: Appl. Phys, *Methods for the determination of the optical constants of thin films from single transmission measurements*, Vol۳٦, (۲۰۰۳), ۱۸۵۰-۱۸۵۷.

بررسی تشکیل فاز رسانای توپولوژی در آلیاژ $Gd_xY_{1-x}PtBi$ به ازای x=0,0.25,0.5,0.75,1

فیضی مهذب،بهاره[1]؛ نوربخش، زهرا[1]

[1]گروه فیزیک،دانشگاه اصفهان،خیابان هزارجریب

چکیده

در این مقاله، خواص الکترونی و فاز توپولوژی آلیاژ $Gd_xY_{1-x}PtBi$ مورد بررسی و مطالعه قرار می دهیم. محاسبات بر اساس نظریه تابعی چگالی و با استفاده از کد محاسباتی Wien2k انجام شده است. برای بدست آوردن خواص الکترونی این آلیاژها از تقریب های، LDA ، GGA-96، EV-GGA و GGAmBJبهره گرفته شده است. تغییرات ساختار نواری ، چگالی حالت های الکترونی، گشتاور مغناطیسی، ضریب رسانندگی گرمایی و قدرت وارونی نوار این آلیاژها با توجه به افزایش x محاسبه و بررسی شده است.

Topological metal phase of the $Gd_xY_{1-x}PtBi$ alloys for x=0,0.25,0.5,0.75,1

Feizi mohazzab,Bahare[1]; nourbakhsh,zahra[1]

[1]Department of Physics, Isfahan University, Hezarjarib street.

Abstract

In this paper the electronic properties and existence topological phase of $Gd_xY_{1-x}PtBi$ alloys are investigated. These investigations are done by the density functional theory and WIEN2k package. The electronic properties of these alloys are calculated by LDA, GGA-96, EV-GGA and MBJGGAapproximations. In this paper variations of band structure, electron density of states, magnetic momentum, thermal conductivity ratio and band inversion of these alloys in respect of increases x, has been studied.

PACS NO. 70,71

مقدمه

اولین ترکیب هاسلر Cu_2MnAlدر سال ۱۹۰۳ توسط هاسلر شناخته شد. ترکیبات هاسلر دارای خواص فرومغناطیس بودند در حالی‌که هیچ یک از عناصر سازنده خواص و رفتار مغناطیسی نداشتند. استوکیومتری ترکیبات هاسلر به صورت X_2YZ است اگر یکی از جایگاه‌های زیر شبکه ترکیبات هاسلرخالی باشد ترکیبات نیم‌هاسلر تشکیل می‌شود.. لذا آلیاژهای نیم هاسلر با استوکیومتریXYZ دارای ساختار $MgAgAs$می باشند، سلول واحد این ترکیبات دارای گروه فضایی$f\bar{4}3m$ هستند[۱].جایگاه های اتمی این ترکیب ها به صورت سه زیر ساختار fccدر هم تنیده با مکان های،(۱/۲، ۱/۲، ۱/۲)برای اتم X و (۱/۴، ۱/۴، ۱/۴) برای اتم Yو (۰،۰،۰) برای اتم Z می باشند.در سال ۱۹۸۰ با کشف اثر کوانتومی هال اولین مورد از ترازهای کوانتومی که تقارن آن ها خود به خود شکسته نمی شود و رفتار آن ها به توپولوژی و هندسه خاص آن ها بستگی دارد معرفی شد[۲].در سال های اخیر محققان به بررسی دسته جدیدی از مواد با نام رسانا[1] و نارسانای[2] توپولوژی پرداخته اند[۳]. در سال ۲۰۰۶ برنویگ و همکارانش از وارونی نوار[3] برای توصیف انتقال فاز در عایق های توپولوژیکی استفاده کردند[۴]. ساختار نواری نارسانا یا رسانای توپولوژی با وارونی نوار بین تراز انرژی Γ_6(مربوط

---

[1].Topological Metal
[2].Topological Insulator
[3]Band inversion

به‌الکترون‌های نوار s در نقطه Γ) و Γ_8 (مربوط به الکترون‌های نوار p در نقطه Γ) مشخص می شود، به همین منظور قدرت وارونی نوار را به صورت $\Delta=E_{\Gamma 8}-E_{\Gamma 6}$ تعریف کردند[۲]. بدیهی است برای مقادیر مثبت Δ، فاز توپولوژی مشاهده شده است و برای مقادیر منفی این فاز وجود ندارد.

در بخش اول این مقاله به تشریح جزئیات محاسبات می پردازیم، در بخش دوم چگالی حالت‌های الکترونی، تغیرات ضریب رسانندگی گرمایی و گشتاور مغناطیسی آلیاژ $Gd_xY_{1-x}PtBi$ به ازاء x=0,0.25,0.5,0.75,1 را محاسبه می‌کنیم، در بخش سوم به بررسی خواص الکترونی بلور که شامل بررسی ساختار نواری و قدرت وارونی نواری این آلیاژ استمی‌پردازیم.

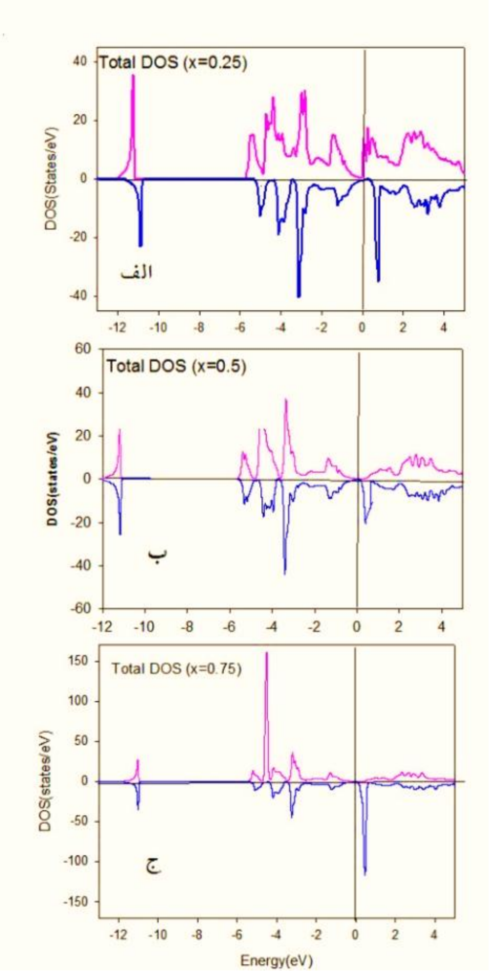
جزئیات محاسبات

محاسبات این مقاله در چارچوب نظریه تابعی چگالی و با استفاده از کد محاسباتی WIEN2k[۵] انجام گرفته است که به صورت پتانسیل کامل با روش امواج تخت بهبود یافته بعلاوه اوربیتال‌های موضعی (LAPW+lo) به حل معادله‌های تک ذره‌ای کان–شم می‌پردازد [۶]. انرژی تبادلی همبستگی را با استفاده از رهیافت‌های GGA96، LDA، EV-GGA و mBJGGA محاسبه کرده‌ایم. با استفاده از همگرایی انرژی پارامتر $R_{Mt}K_{Max}$ را در محاسبات برابر ۸ به دست آورده‌ایم که در آن R_{Mt} کوچکترین شعاع کرات موفین‌تین و K_{Max} اندازه بیشینه بردار شبکه وارون است. شعاع قطعبرای بسط فوریه پتانسیل $G_{Max}=12$ در نظر گرفته شده است، همچنین با استفاده از همگرایی انرژی تعداد نقاط بهینه شده در فضای وارون را برابر ۳۵۰۰ نقطه محاسبه کرده‌ایم. برای افزایش دقت در محاسبات اثر اسپین–مدار و محاسبات اسپین قطبیده را نیز اعمال کرده‌ایم.

خواص الکترونی

برای بررسی خواص الکترونی، چگالی حالت‌های الکترونی آلیاژها را بررسی می‌کنیم. همینطور برای بررسی تشکیل فاز توپولوژی نحوه توزیع الکترون‌های s و p را در ساختار نواری این آلیاژهایرا بررسی می‌کنیم. خواص الکترونی این آلیاژها به ازاء x=0,1[۷] بررسی شده است که این آلیاژها به ترتیب دارای خواص شبه-رسانایی و رسانای فرومغناطیس هستند. برای بررسی خواص الکترونی این آلیاژ به ازاء xهای مختلف (x=0.25,0.5,0.75) ، ابرسلول‌های این آلیاژ با هشت برابر کردن یاخته یکه ترکیب GdPtBi ساخته می‌شود.

نمودار چگالی حالت‌های الکترونیاین ترکیب با استفاده از رهیافت EV-GGAبه ازاء x=0.25، x=0.5 و x=0.75محاسبه و نتایج آن در شکل ۱ آورده شده است.



شکل۱.چگالی حالت‌های الکترونی آلیاژ $Gd_xY_{1-x}PtBi$، الف–x=0.25، x=0.5، x=0.75

با توجه به شکل۱، رفتار الکترون‌های با اسپین بالا و پایین قبل و بعد از انرژی فرمی متفاوت است، همچنین چگالی حالت‌های الکترونی روی سطح فرمی غیر صفر است، بنابراین آلیاژ $Gd_xY_{1-x}PtBi$ به ازاء x=0.25,0.5,0.75 یک شبه رسانای فرومغناطیسی با شکاف نواری صفر است. مقدار گشتاور مغناطیسی و ضریب رسانندگی گرمایی آلیاژ $Gd_xY_{1-x}PtBi$ به ازاء xهای مختلف با استفاده از رهیافت‌های متفاوت محاسبه و نتایج آن به ترتیب در جدول۱ و۲ آورده شده است.

جدول۱: گشتاور مغناطیسی(μ_B) آلیاژ $Gd_xY_{1-x}PtBi$ با استفاده از رهیافت-های متفاوت.

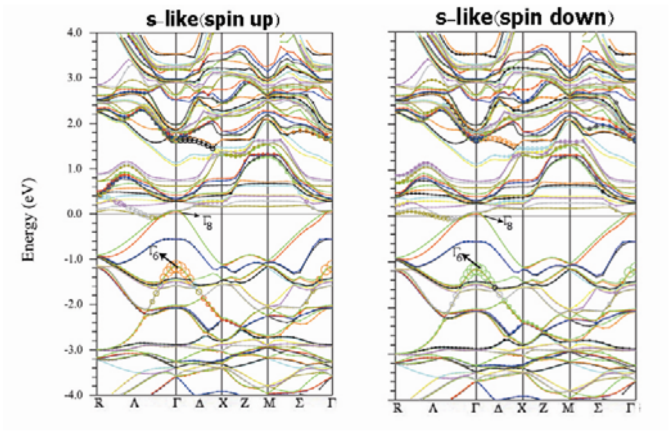
	GGA96	LDA	EV-GGA	mBJGGA
X=0[۷]	۰	۰	۰	۰
X=0.25	۱/۷۲	۱/۷۳	۱/۷۳	۱/۷۴
X=0.5	۳/۴۷	۳/۴۸	۳/۴۹	۳/۴۵
X=0.75	۵/۲۱	۵/۲	۵/۲۱	۵/۱۷
X=1[۷]	۶/۹۶	۶/۹۵	۶/۹۶	۶/۹۹

جدول۲. ضریب رسانندگی گرمایی آلیاژ $Gd_xY_{1-x}PtBi$ با استفاده از رهیافت‌های متفاوت.

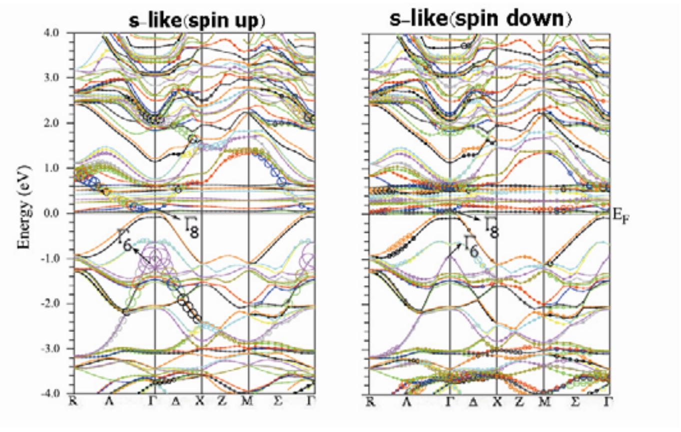
	GGA96		LDA		EV-GGA		mBJGGA	
	up	down	up	down	up	Down	up	down
X=0[۷]	۰/۰۵	۰/۰۳	۰	۰	۰	۰	۰	۰
X=0.25	۰/۵۱	۰/۴۸	۰/۷۴	۰/۷۲	۰/۷۳	۰/۶۸	۰/۸۷	۰/۷۲
X=0.5	۰/۲۱	۰/۲۵	۰/۵۸	۰/۵۳	۰/۴۸	۰/۵۶	۰/۶۹	۰/۶۳
X=0.75	۰/۱۹	۰/۱۸	۰/۴۰	۰/۳۸	۰/۴۲	۰/۲۶	۰/۵۶	۰/۳۴
X=1[۷]	۰/۰۷	۰/۰۱	۱/۱۰	۰/۰۷	۰/۴۰	۰/۲۲	۱/۰۸	۰/۳۵

همانطور که از نتایج جدول ۱ مشخص است، با افزایش درصد اتم Gd در آلیاژ $Gd_xY_{1-x}PtBi$ مقدار گشتاور مغناطیسی افزایش می‌یابد. بنابراین می‌توان نتیجه گرفت خاصیت فرومغناطیسی ناشی از حضور اتم Gd در این آلیاژ است. با توجه به نتایج جدول ۲با افزایش درصد اتم Gd ضریب رسانندگی گرماییالکترون‌های با اسپین‌های بالا واسپین پایین کاهش یافته است.

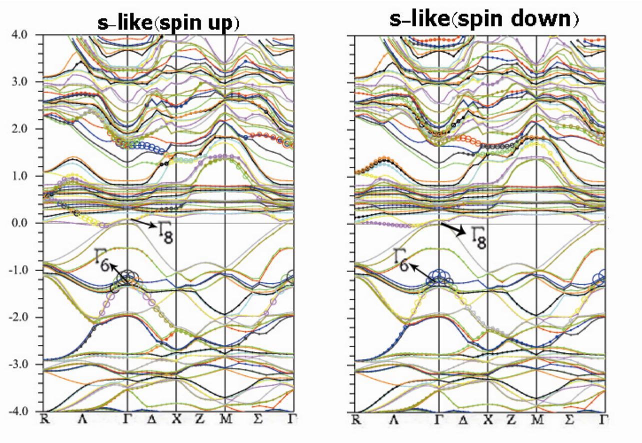
به منظور بررسی فاز توپولوژی در این آلیاژها توزیع الکترون‌های اوربیتال‌های s و p را روی نوار انرژی بررسی می‌کنیم. به دلیل تشابه ساختار نواری در رهیافت‌های مختلف، تنها ساختار نواری مربوط به رهیافت EV-GGA را در شکل‌های ۲تا ۴ به ترتیب برای مقادیر x=0.25، x=0.5، x=0.75 آورده شده است. بررسی نحوه توزیع الکترون‌ها بر روی نوار انرژی به ازاء x=0,1 نشان می‌دهد، این آلیاژها دارای فاز توپولوژی هستند[۷].



شکل۲: چگونگی توزیع الکترون‌های s و p بر نوار انرژی آلیاژ $Gd_{0.25}Y_{0.75}PtBi$.



شکل۳:چگونگی توزیع الکترون‌های s و p بر نوار انرژی آلیاژ $Gd_{0.5}Y_{0.5}PtBi$.



شکل ۴: چگونگی توزیع الکترون‌های s و p بر نوار انرژی آلیاژ $Gd_{0.75}Y_{0.25}PtBi$.

با توجه به شکل۲، ۳ و ۴ نوار s برای الکترون‌های با اسپین بالا و پایین پایین‌تر از نوار p قرار گرفته است، در واقع این آلیاژها دارای نظم نواری معمولی نیستند،بنابراین وارونی نوار اتفاق افتاده است و آلیاژها دارای فاز توپولوژی است.

با مقایسه توزیع الکترون‌های اسپین بالا و پایین در ساختار نواری آلیاژ $Gd_xY_{1-x}PtBi$ نظم نواری یکسان است، اما در x=0.5 الکترون‌ها تمایل بیشتری به حضور در حالت‌های با اسپین بالا دارند که به دلیل افزایش اتم Gd (که عامل فرومغناطیسی آلیاژها می‌باشد) است. در x=0.75 با افزایش اتم Gd در ساختار توزیع الکترون‌ها روی نوارهای انرژی تقارن بیشتری دارند.در جدول۳ قدرت وارونی نوار آلیاژها آورده شده است.

جدول ۳. قدرت وارونی نوار در آلیاژ $Gd_xY_{1-x}PtBi$ با استفاده از رهیافت-های مختلف.

	GGA96		LDA		EV-GGA		mBJGGA	
	up	down	up	down	up	down	up	down
X=0 [۷]	۰/۴۲	۰/۴۳	۰/۴۰	۰/۴۱	۰/۴۰	۰/۴۳	۰/۳۲	۰/۳۴
X=0.25	۱/۲۵	۱/۱۸	۱/۲۸	۱/۲۶	۱/۰۴	۱/۰۱	۱/۱۸	۱/۹
X=0.5	۱/۲۹	۰/۷۴	۱/۰۶	۰/۹۱	۱/۰۳	۰/۸۹	۱/۰۵	۰/۸۷
X=0.75	۱/۲۵	۱/۱۱	۱/۲۰	۱/۱۶	۱/۰۱	۰/۹۷	۱/۲۳	۱/۱۹
X=1 [۷]	۰/۴۵	۰/۴۵	۰/۴۳	۰/۴۲	۰/۳۳	۰/۴۲	۰/۳۶	۰/۴۲

با توجه به نتایج جدول۳، قدرت وارونی نوار برای این آلیاژها مقداری مثبت است، که تائیدی بر دارا بودنفاز توپولوژی این آلیاژها است.

نتیجه‌گیری

با توجه به چگالی حالت‌های الکترونی آلیاژ $Gd_xY_{1-x}PtBi$، این آلیاژ به ازاء x=0,0.25,0.5,0.75,1 دارای خاصیت رسانندگی می‌باشد، که با افزایش درصد اتم Gd این رسانندگی بیشتر می-شود. همچنین این آلیاژها دارای خاصیت فرومغناطیسی هستند(به جز x=0) که عامل وجود این خاصیت اتم Gd در این آلیاژ می-باشد، به طوریکه با افزایش درصد اتم Gd میزان گشتاور مغناطیسی نیز افزایش می‌یابد. با توجه به ساختار نواری این آلیاژها وارونی نوار انرژی در نقطه Γ اتفاق می‌افتد،لذا این آلیاژها رسانای توپولوژی هستند. همچنین توزیع الکترون‌های با اسپین بالا و پایین با افزایش اتم Gd در آلیاژ نامتقارن‌تر می‌شوند.

مراجع:

[۱]W. Al-Sawai, H. Lin, R. S. Markiewicz, L. A. Wray, Y. Xia, S. Y. Xu, M. Z. Hasan, and A. Bansil, "Topological electronic structure in half-Heusler topological insulators," *Physical Review B* **82**, 125208.

[۲]H. Stormer, "The Fractional Quantum Hall Effect ",*Nobel Lecture*, (1998).

[۳]D. Xiao, Y. Yao, W. Feng, J. Wen, W. Zhu, X.-Q. Chen, G. M. Stocks, and Z. Zhang, "Half-Heusler Compounds as a New Class of Three-Dimensional Topological Insulators," *Physical Review Letters* **105**, 096404.

[۴]B. A. Bernevig, T .L. Hughes, and T. L. Hughes, "Quantum Spin Hall Effect and Topological Phase Transition in HgTe Quantum Wells," *Science Magazine* **314** (2006).

[۵] www.wien2k.at

[۶]K. S. P. Blaha, G. K. H.Madsen, D. Kvasnicka, and J. Luitz, "WIEN2k An Augmented PlaneWave + Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties," (2010).

[۷].بهاره فیضی مهذب، زهرا نوربخش (بررسیخواص ساختاري و الکترونینیم هاسلر YPtBi و GdPtBi) کنفرانس فیزیک ایران ۹۲ دانشگاه بیرجند (۴-۷ شهریور۹۲)

محاسبه پارامترهای ساختاری و بررسی پایداری مکانیکی ترکیب سه‌تایی $GaN_{0.75}P_{0.25}$

میرزایی، فرشته[۱]؛ علی نجیمی، رسول[۲]

[۱] گروه فیزیک، دانشکده علوم دانشگاه آزاد اسلامی واحد شهرضا، شهرضا

[۲] گروه فیزیک، دانشکده علوم دانشگاه آزاد اسلامی واحد شهرضا، شهرضا

چکیده

در کار حاضر ویژگی‌های ساختاری و الکترونی ترکیب $GaN_{0.75}P_{0.25}$ از جمله ثابت شبکه، مدول حجمی، چگالی حالت‌ها و ثابت‌های الاستیکی با استفاده از روش امواج تخت بهساخته خطی با پتانسیل کامل (FP-LAPW) در چارچوب نظریه تابعی چگالی محاسبه شده است. نتایج محاسبات نشان می‌دهد که ترکیب $GaN_{0.75}P_{0.25}$ یک نیمرسانا با گاف نواری مستقیم است. همچنین این ترکیب از نظر مکانیکی یک ترکیب پایدار محسوب می‌شود.

Calculation of Structural parameters and investigation of mechanic stability of $GaN_{0.75}P_{0.25}$ ternary compound

Fereshteh, Mirzaei[1]; Rasoul, Ali najimi[2]

[1] Physics Groups, Department of Science, Islamic Azad University, Shahreza Branch, Shahreza
[2] Physics Groups, Department of Science, Islamic Azad University, Shahreza Branch, Shahreza

Abstract

At present work, structural and electronic properties of $GaN_{0.75}P_{0.25}$ such as lattice constant, bulk module, density of state and elastic constants have been calculated using full potential linear approximation plane wave method in density functional theory. The results show that $GaN_{0.75}P_{0.25}$ compound is a semiconductor with direct band gap. Also from the mechanical standpoint, this compound is considered a stable compound.

PACS No. 60, 71

مقدمه

نیمرساناها از جالب‌ترین و مفیدترین گروه جامدات هستند. در این میان نیمرساناهای گروه III-V به دلیل گاف پهن نواری و قابلیت کاربرد برای قطعات اپتوالکترونیک بسیار مورد توجه قرار گرفته‌اند. گاف انرژی آن‌ها بین ۳-۱ الکترون ولت می‌باشد از این رو ابزار مناسبی برای این قطعات در ناحیه طیف مرئی هستند[۱و۲].

با وجود کاربردهای فراوان ترکیب $GaN_{0.75}P_{0.25}$ در صنایع الکترونیکی، تاکنون مطالعه‌ای جامع در خصوص ویژگی‌های ساختاری و کشسانی این ترکیب صورت نگرفته است. در این مطالعه یک بررسی کامل و جامع بر روی خواص ساختاری، الکترونی و کشسانی این ترکیب با استفاده از تقریب GGA صورت می‌گیرد.

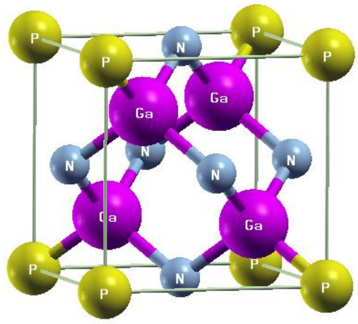
روش انجام محاسبات

محاسبات به روش امواج تخت بهساخته خطی با پتانسیل کامل (FP-LAPW) در چارچوب نظریه تابعی چگالی انجام شده است. برای محاسبه انرژی تبادلی- همبستگی از تقریب شیب تعمیم یافته با تابعی پردو و همکاران استفاده شده است[۳]. در این محاسبات پارامتر $R_{mt}K_{max}$ (R_{mt} شعاع کوچکترین کره موفین-تین و K_{max} بردار موج قطع است) برابر ۸، بیشینه عدد کوانتومی تکانه زاویه‌ای

برای بسط تابع موج درون کره‌های اتمی برابر ۱۰ و بردار موج قطع برای بسط پتانسیل و چگالی بار G_{max}۱۲=(Ryd) $^{1/2}$ در نظر گرفته شده است. تعداد ۲۲۰۰ نقطه k برای همگرایی انرژی در منطقه اول بریلوئن انتخاب شده است.

نتایج و بحث

ساختار بلوری ترکیب $GaN_{0.75}P_{0.25}$ یک شبکه مکعبی ساده شامل ۸ اتم با گروه فضایی ($P\,4\bar{3}m$) است. ساختار این ترکیب در شکل ۱ نشان داده شده است.

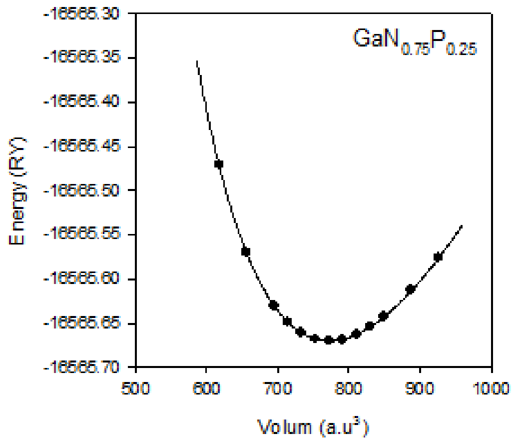


شکل ۱ : ساختار سلول واحد ترکیب $GaN_{0.75}P_{0.25}$

برای محاسبه خواص ساختاری، انرژی حالت پایه ترکیب به ازای حجم‌های مختلف، اطراف حجم تعادلی محاسبه و سپس با تغییرات جزئی در اطراف حجم تعادلی وردش داده می‌شود. تغییرات انرژی بر حسب حجم از طریق معادله حالت مورناگون [٤] داده می‌شود. نمودار انرژی بر حسب حجم سلول واحد برای ترکیب $GaN_{0.75}P_{0.25}$ در شکل۲ نشان داده شده است. در این معادله انرژی کل بصورت تابعی از حجم بصورت زیر بیان می‌شود:

$$E(V) = E_0 + V\frac{B_0}{B_0'}\left[\frac{\left(\frac{V_0}{V}\right)^{B_0'}}{B_0'-1}+1\right] - \frac{V_0 B_0}{B_0'-1} \qquad (۱)$$

که در آن V_0 حجم سلول اولیه، E_0 انرژی حالت پایه در دما و فشار صفر، B_0 مدول حجمی و B' مشتق آن است. در این محاسبات ابتدا وابستگی انرژی به حجم محاسبه شده و سپس با بکار بردن معادله حالت مورناگون، ثابت شبکه، مدول حجمی و مشتق مدول حجمی محاسبه شده است. این محاسبات با استفاده از تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) انجام شده است. لازم به ذکر است که حجم تعادلی، انرژی تعادلی و پارامترهای شبکه از طریق کمینه کردن انرژی بر حسب حجم به دست می‌آیند. نتایج محاسبات در جدول۱ گزارش شده است.



شکل۲ : نمودار انرژی بر حسب حجم سلول واحد برای ترکیب $GaN_{0.75}P_{0.25}$

جدول۱ : پارامترهای ساختاری محاسبه شده برای ترکیب $GaN_{0.75}P_{0.25}$

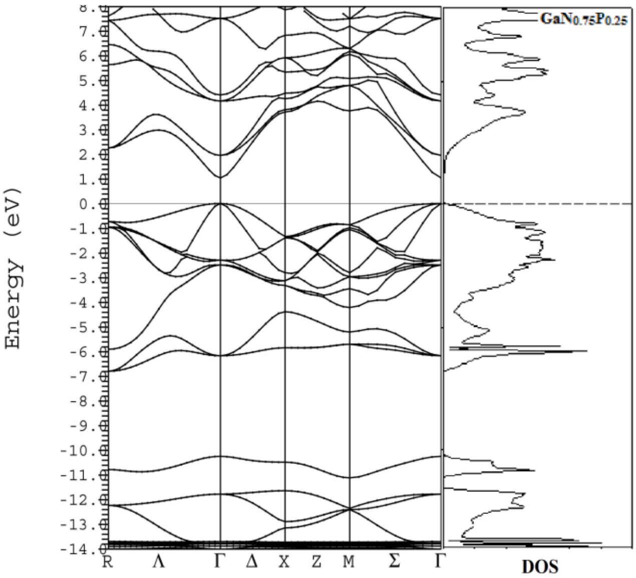
نام ترکیب	a(Å)	B(GPa)	B´(GPa)
$GaN_{0.75}P_{0.25}$	٤/٨٦٢	١٢٣/٨٢٨	٤/٤٣٤

مدول حجمی عکس تراکم‌پذیری و معیاری از سختی بلور است. هرچه مدول حجمی یک بلور بیشتر باشد، آن بلور تراکم-پذیری کمتری خواهد داشت و در نتیجه استحکام بلور بیشتر است. بنابراین می‌توان نتیجه گرفت نحوه تغییرات مدول حجمی و همچنین حجم تعادلی رابطه‌ای عکس با یکدیگر دارند. لازم به ذکر است که بر پایه دانش ما هیچ نتیجه تجربی برای پارامترهای ساختاری این ترکیب سه‌تایی گزارش نشده است.

ساختار نواری، اطلاعات مفیدی در ارتباط با نوع ماده اعم از رسانا، نیمرسانا و عایق بودن را در اختیار ما قرار می‌دهد. اجسام رسانا، عایق و نیمرسانا، ساختارهای نواری مختلفی دارند و به کمک این ساختار نواری می‌توان خواص الکتریکی و رسانایی این اجسام را توجیه کرد. محاسبات ساختار نواری نشان می‌دهد که ترکیب $GaN_{0.75}P_{0.25}$ یک نیمرسانا با گاف نواری مستقیم در نقطه Γ در مرکز ناحیه بریلوئن است. مقدار گاف انرژی محاسبه

شده برای این ترکیب ۱/۰۶۷ الکترون ولت می‌باشد که تا کنون هیچ نتیجه تجربی برای گاف انرژی این ترکیب سه‌تایی گزارش نشده است.

چگالی حالت‌های الکترونی بیانگر تعداد حالت‌های مجاز در واحد گستره انرژی است. منحنی چگالی حالت‌های الکترونی طیفی است که نحوه توزیع الکترون‌ها را درون هر یک از اوربیتال‌های اتمی نشان می‌دهد و به کمک آن می‌توان سهم مربوط به اوربیتال هر یک از اتم‌های شرکت کننده در ترکیب را به درستی بیان نمود. نمودار چگالی حالت‌ها نیز نشان می‌دهد که سهم عمده چگالی حالت‌ها قبل و بعد از سطح فرمی عمدتاً ناشی از اربیتال ۲p اتم نیتروژن می‌باشد. در شکل۳ ساختار نواری و چگالی حالت‌های کلی ترکیب $GaN_{0.75}P_{0.25}$ نشان داده شده است.



شکل۳ : ساختار نواری و چگالی حالت‌های کلی ترکیب $GaN_{0.75}P_{0.25}$

خواص کشسانی به خاصیتی از مواد گفته می‌شود که تحت تنش تغییر شکل پیدا کرده و هنگامی که تنش متوقف می‌شود به حالت اصلی خودشان باز می‌گردند. هرگاه به یک بلور تنش وارد شود انرژی ذخیره شده در آن بر حسب ثابت‌های کشسانی و مولفه‌های تانسور کرنش برابر است با[۵]:

$$E = \frac{V_0}{2}\sum_{i,j=1}^{6} C_{ij}\delta_i\delta_j \qquad (۲)$$

در این رابطه C_{ij} مولفه های تانسور الاستیک هستند. این تانسور از مرتبه ٤ است که در کمترین تقارن بلورین، ۲۱ مولفه مستقل دارد. در مورد یک تتراگونال تعداد مولفه های مستقل به ٦ و برای مکعب این تعداد به ۳ کاهش می یابد. پس یک بلور مکعبی ۳ ثابت الاستیکی مستقل دارد. ثابت های الاستیکی می تواند از انرژی که تابع کشش شبکه است گرفته شود. در مورد شبکه مکعبی امکان انتخاب کششی که حجم سلول واحد حفظ شود و انرژی تابع یکنواختی از کشش باشد وجود دارد. به عبارت دیگر از شکل طبیعی خارج کردن بلور در یک رفتار الاستیکی خطی انجام شود [٦]. برای تعیین این سه ثابت الاستیکی (C_{11},C_{12},C_{44}) سه معادله زیر کافی است.

اولین معادله مربوط به مدول حجمی است:

$$B = \frac{1}{3}(C_{11} + 2C_{12}) \qquad (۳)$$

دومین معادله از تانسور کششی حجم - ثابت تتراگونال به دست می‌آید:

$$\overleftrightarrow{\delta} = \begin{bmatrix} \delta & 0 & 0 \\ 0 & \delta & 0 \\ 0 & 0 & \dfrac{1}{(1+\delta^2)} - 1 \end{bmatrix} \qquad (٤)$$

با اعمال این تغییر، انرژی نسبت به مقدار اولیه اش چنین می شود:

$$E(\delta) = 3(C_{11} - C_{12})V_0\delta^2 + O(\delta^3) \qquad (٥)$$

که V_0 حجم سلول واحد است. سرانجام برای آخرین تغییر شکل از تانسور کششی حجم –ثابت رومبوهدرال استفاده می‌شود.

$$\overleftrightarrow{\delta} = \frac{\delta}{3}\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} \qquad (٦)$$

که تغییر شکل انرژی کل این گونه است [۷و۸]:

$$E(\delta) = \frac{1}{6}(C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44})V_0\delta^2 + O(\delta^3) \qquad (۷)$$

برای ترکیب مورد نظر محاسبه و در جدول۲ آورده شده است. لازم به ذکر است که هیچ نتیجه تجربی برای ثابت‌های کشسانی ترکیب $GaN_{0.75}P_{0.25}$ در دسترس نمی‌باشد.

جدول۲ : ثابت‌های کشسانی محاسبه شده برای ترکیب $GaN_{0.75}P_{0.25}$

نام ترکیب	C_{11}(GPa)	C_{12}(GPa)	C_{44}(GPa)
$GaN_{0.75}P_{0.25}$	۱۸۵/۰۱۶	۹۲/۵۰۴	۷۷/۴۰۲

پایداری یک ساختار جامد نیازمند کمیت‌های ترمودینامیکی و کشسانی است. لزوم پایداری مکانیکی در یک بلور مکعبی منجر به قیدهای زیر بر روی ثابت‌های کشسانی می‌شود[۸]:

$$C_{11}-C_{12}>0\ ,\ C_{11}+2C_{12}>0\ ,\ C_{11}>0\ ,\ C_{44}>0 \qquad (۸)$$

همان طور که داده‌های جدول شماره۲ نشان می‌دهد، ترکیب $GaN_{0.75}P_{0.25}$ تمام شرایط بالا را دارد و می‌توان گفت که از لحاظ مکانیکی پایدار است. همچنین به غیر از مدول حجمی مدول یانگ E (Young's modulus) و مدول برشی G (shear modulus) و مقدار B/G محاسبه و در جدول شماره۳ گزارش شده است.

$$G = (C_{11} - C_{12} + 3C_{44}) \qquad (۹)$$

$$E = 9BG/(3B + G) \qquad (۱۰)$$

جدول۳ : پارامترهای کشسانی محاسبه شده برای ترکیب $GaN_{0.75}P_{0.25}$

نام ترکیب	B/G	G(GPa)	B(GPa)	E(GPa)
$GaN_{0.75}P_{0.25}$	۳/۶۲	۳۳/۹۸۲	۱۲۳/۳۴۱	۹۳/۳۷۳

کمیت B/G معیار شکنندگی یا چکش‌خواری یک ماده است. اگر این مقدار از مقدار بحرانی ۱/۷۵ بیشتر باشد ماده ترد و شکننده است و اگر از این مقدار کمتر باشد ماده نرم وچکش‌خوار است [۹]. با توجه به مقدار بدست آمده در جدول شماره۳، ترکیب $GaN_{0.75}P_{0.25}$ جزء مواد ترد وشکننده قرار می‌گیرد.

نتیجه گیری

در این مطالعه خواص ساختاری، الکترونی و کشسانی ترکیب نیمرسانای $GaN_{0.75}P_{0.25}$ بررسی شد. محاسبات با استفاده از روش امواج تخت بهساخته خطی با پتانسیل کامل در چارجوب نظریه تابعی چگالی انجام شده است. نتایج ساختار نواری نشان می دهد که این ترکیب دارای گاف نواری مستقیم برابر ۱/۰۶۷ الکترون ولت در نقطه Γ در مرکز ناحیه بریلوئن است و خاصیت نیمرسانایی این ترکیب تایید می شود. محاسبات مربوط به چگالی حالتها نشان می‌دهد که قسمت عمده حالت‌های اشغال شده قبل و بعد از سطح فرمی عمدتاً مربوط به اوربیتال‌های 2p اتم نیتروژن است. همچنین ثابت‌های کشسانی محاسبه شده برای این ترکیب نشان می‌دهد که ترکیب $GaN_{0.75}P_{0.25}$ از نظر مکانیکی پایدار است. ضمناً این ترکیب خاصیت ترد و شکننده دارد.

مرجع‌ها

[۱] M.C. Gupta, J. J. Ballato (Eds.), Handbook of Photonics, Taylor & Francis, 2006.
[۲] H.E. Ruda, Wide-gap II–VI Compounds for Opto-electronic Applications, Springer, 1992.
[۳] J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof; Phys. Rev. Lett. **77** (1996) 3865.
[٤] F. D. Murnaghan, Proc. Natl. Acad. *Sci. USA*. **30** (1944) 244.
[٥] C. Kittel "Introduction to solid state physics", 8thedition,John Wiley & Sons , Inc.(2005)
[٦] Z. F. Hou, "Effect of Cu, N, and Li intercalation on the structural stability and electronic structure of cubic Cu3N", *Solid state Sciences*. **10**, 1651-1657 (2008)
[۷] F. E. Haj Hassan, H. Akbarzadeh; "First-principles elastic and bonding properties of barium chalcogenides" Computational Materials Science 38 (2006) 362-368
[۸] E. Schreiber, O.L. Anderson, N. Soga; " Elastic constant and their measurement" McGraw-Hill, New York, 1973
[۹] G. Grimvall; "Thermophysical properties of Materials" Elsevier/north-Holland, Amsterdam, 1999, enlarged and resived edition

محاسبه ی میزان تبدیل ^{237}Np و ^{129}I در EPT برای راکتور ADS با استفاده از کد MVNPX

قاسمیان، فهیمه[۱]؛ فیروزآبادی، محمد مهدی[۲]

دانشکده علوم،گروه فیزیک، دانشگاه بیرجند

چکیده

EPT یک پروژه ی بین المللی برای مطالعه و بررسی برهم کنش های تلاشی، تولید و ترابرد نوترون و تبدیل محصولات شکافت و آکتینیدهای سبک با استفاده از نوترون های تلاشی است. مجموعه EPT شامل یک هدف ضخیم سرب با پوشش زیربحرانی اورانیوم طبیعی است که با محفظه ای از پلی اتیلن احاطه شده است .پروتون ها با انرژی های ۰/۷ ، ۱/۰ ، ۱/۵ و ۲GeV با هدف بر همکنش می کنند و واکنش های تلاشی و شارهای نوترونی قدرتمندی ایجاد می شوند که از این شار نوترونی برای تبدیل هسته های بلند عمر انتخابی استفاده شده است. در این تحقیق به بررسی یک نمونه نوعی از سیستم واداشته با شتابگر (ADS) پرداخته و با استفاده از کد MCNPX این فرآیند شبیه سازی شده است. محاسبات نشان می دهد که بعد از گذشت یک ماه کار راکتور ADS با استفاده از پروتون های ۱۰mA حاصل از شتابگر با انرژی ۲GeV می توان ۲/۱۱٪ از ^{129}I اولیه را به ^{130}I و ۲/۶۸٪ ^{237}Np اولیه را به ^{238}Np تبدیل کرد.

کلمات کلیدی: تلاشی، تبدیل، تولید نوترون، سیستم واداشته با شتابگر، کد MCNPX

Calculation transmutation rate of ^{237}Np and ^{129}I in EPT for ADS reactor by using MCNPX code

Ghasemian, Fahimeh[1]; FiroozabadiMohammadMehdi[2]

1, 2 Department of Physics, University of Birjand, Birjand

Abstract

'Energy plus Transmutation" is an international project for the study of spallation reactions, neutron production and transport, and the transmutation of fission products and higher actinides by spallation neutrons. The 'Energy plus Transmutation" setup consists of a thick, lead target with a subcritical, natural uranium blanket surrounded by polyethylene shielding. Protons with energies of 0.7, 1.0, 1.5, and 2.0 GeV interacting with the target induced spallation reactions and intense neutron fluxes were created that From this neutron fluencies used for transmutation of selected long lived nuclear .In this work a sample of accelerator driven system (ADS) studied and simulated this process by using MCNPX code and calculation show that after a month of using the ADS reactor using 10mA protons from accelerator with an energy of 2GeV can be transmute 2/11% initial ^{129}I to ^{130}I and 2/68% initial ^{237}Np to ^{238}Np.

Key Words: Spallation, Transmutation, Neutron production, Accelerator driven system, MCNPX Code,

مقدمه

آکتنیدهای سبک یا عناصر فرااورانیومی، حدود ۱٪ از سوخت مصرف شده را تشکیل می دهند که با گیراندازی نوترون درون هسته ی ^{235}U و ^{238}U یا ^{239}Pu تولید و دستخوش واپاشی بتا می شوند. برای تبدیل آکتنیدهای سبک به هسته های پایدار ، باید این ایزوتوپ ها دستخوش گیراندازی نوترون و شکافت های متوالی شوند، که با فرآیند تبدیل و تولید انرژی همراه می باشد.

سیستم ADS ، از پروژه های اخیری است که ایده های جدیدی در ارتباط با چرخه ی سوخت ارائه می دهد. یک چنین سیستمی می تواند جهت سوزاندن محصولات شکافت بلند عمر و محصولات آکتینیدهای سبک توسط راکتورهای شکافت به کار گرفته شود.

تبدیل هسته‌ای از جمله روش هایی است که می توان با آن هسته-های بلند عمر را بوسیله واکنش‌های هسته‌ای انجام شده توسط یک شتابگر یا راکتور به هسته‌های کوتاه‌عمرتر یا پایدارتبدیل کرد. به عبارت دیگر تبدیل[1] می‌تواند به عنوان تبدیل یک ایزوتوپ به ایزوتوپ دیگر به همراه تغییر در ساختار هسته‌ای آن تعریف شود. تبدیل هسته‌ای می تواند با استفاده از ذرات مختلفی مثل الکترون-ها، پروتون‌ها، یون‌ها، نوترون‌ها و یا حتی پرتوهای گاما انجام گیرد؛ اما نوترون‌ها به دلیل نداشتن محدودیت‌های کولنی و همچنین سطح مقطع برهمکنش مطلوبشان مفیدتر هستند .

در این تحقیق سعی شده با استفاده از کد شبیه سازی MCNPX شار نوترون های حاصل از تلاشی مجموعه ی هدف سرب با پوشش اورانیوم و همچنین فرآیند تبدیل نمونه های رادیواکتیو بلند عمر ^{129}I و ^{237}NP که جزء آکتنیدهای سبک با درجه ی مسمومیت بالا محسوب می شود ، بر اساس پروژه EPT[2] ،محاسبه شوند.

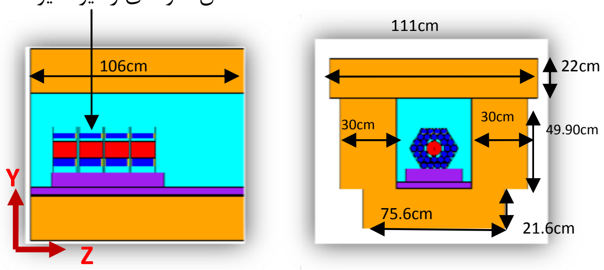
شرح آزمایش تجربی به همراه نتیجه گیری:

مجموعهEPT شامل ۴ بخش جداگانه است که به فاصله ۰.۸سانتی متر از هم جدا شده اند. در هر بخش هدف سربی به قطر ۸/۴ سانتی متر در مرکز واقع شده و ۳۰ عدد میله ی اورانیومی به قطر ۳/۴ سانتی متر با روکش آلومینیومی به صورت هگزاگونال به دور هدف چیده شده اند. نمونه های رادیواکتیو ید و نپتونیوم در بالای بخش دوم جای گذاری شده اند [۱].

آزمایشات در JINR با پرتویی با شار۱۰^{۱۳}پروتون و جریان 10mA در محدوده های انرژی ۰/۷و۱/۰و ۱/۵و ۲GeV انجام گرفته است . بر اثر برخورد این پروتون ها با مجموعه ی هدف ، فرآیندهای تلاشی و شکافت به وقوع می پیوندد که طی آن نوترون هایی با شار بالا تولید می شوند[۲و۵].

کل مجموعه ی هدف در پوششی از پلی اتیلن و کادمیوم قرار گرفته است که پلی اتیلن به عنوان کند کننده، انرژی نوترون های سریع را به حد نوترون های حرارتی پایین می آورد تا بیشترین میزان تبدیل حاصل شود[۳].

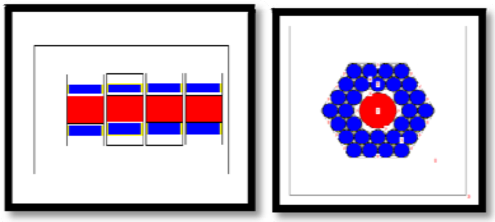
هندسه ی اصلی مجموعه یEPT شبیه سازی شده با کد برای تبدیل دو ایزوتوپ رادیواکتیو ^{129}I و ^{237}NP در شکل ذیل نشان داده شده است.



شکل ۱: هندسه ی شبیه سازی شده مجموعه ی Pb-U در پوششی از پلی اتیلن و کادمیوم با استفاده از کد MCNPX(d)

در این تحقیق میزان تبدیل نمونه ها و شارسطحی درهندسه های متفاوت مورد بررسی قرار گرفته است.

در ابتدای کار با تعریف هندسه ی ساده ای بدون کندکننده (a)، شکل۲، مناسب ترین مکان قرار گرفتن نمونه ها یال فوقانی بخش دوم اختیار گردید که بیشترین شار سطحی در انرژی GeV E_P=۲به مقدار ۷/۵۱ ×۱۰$^{-۲}$ g/cm^2 به دست می دهد.

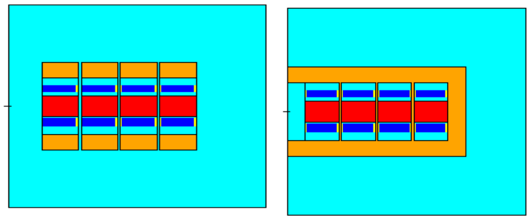


شکل۲. مجموعه ی شبیه سازی هدف بدون کند کننده (a)

[1]transmutation
[2]Energy plus Transmutation

در تعریف هندسه جدید که در آن کندکننده پلی اتیلنی به ضخامت۶Cm به صورت غلافی به دور کل مجموعه پیچیده شده است (b)مانند شکل ۳الف. به دلیل وجود کندکننده پلی اتیلن با افزایش تعداد نوترون ها به ازای یک پروتون فرودی برای انرژی ۲GeV، میزان زایش ^{130}Iنیز افزایش می یابد.

حال اگر همین ضخامت پلی اتیلن به دور هر بخش مجموعه به صورت جداگانه قرار گیرد (c)،مانند شکل۳.ب.میزان تبدیل ^{129}Iدر یک ماه نسبت به هندسه ای که پلی اتیلن به صورت غلافی به دور کل مجموعه قرار گرفته است افزایش داشته است.



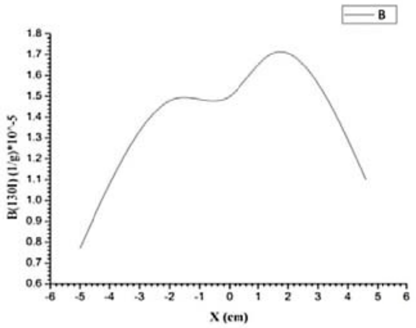
شکل۳.الف.تصویر راستنمایی از هندسه شبیه سازی شده(b)وب. تصویر چپ هندسه (c) را نشان می دهد

جدول۱:مقایسه میزان تبدیل در یک ماه برای ۳ هندسه aوbوc

هندسه	میزان تبدیل ید در یک ماه
مجموعه هدف (a)	٪۰/۰۶
مجموعه هدف (b)	٪۲/۱۴
مجموعه هدف (c)	٪۳/۲۹

علاوه بر حضور کنندکننده در مجموعه، می توان گفت میزان تبدیل تابعی از جابه جایی مکان نمونه در راستای محور X و Y و تابعی از فاصله ی شعاعی نمونه از مبدا هدف می باشد .بطوریکه با کوچکتر شدن فاصله شعاعی از میزان تبدیل به نسبت قبل کاسته و با حذف کامل میله های اورانیوم از هندسه مساله میزان زایش^{130}I دستخوش کاهش محسوسی می شود[۴].

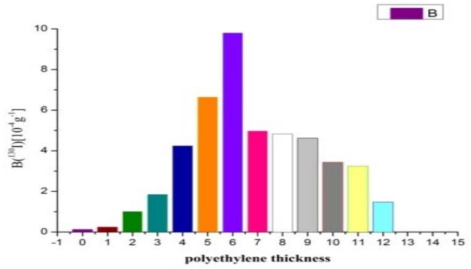
همچنین افزایش انرژی پروتون فرودی که منجر به تکثیر نوترونی می شود، میزان تبدیل نمونه رادیواکتیو را دست خوش تغییر می کند. در هندسه (a)برای انرژی ۲GeV بیشترین مقدار تکثیر نوترون به ازای یک پروتون فرودی ۵۳/۷۶ نوتون می باشد. درشکل۴ وابستگی میزان تبدیل تابعی ید ۱۲۹ به محورXوضوح نمایان است.



شکل۴:منحنی وابستگی میزان تبدیل ید ۱۲۹ به محورX بااستفاده از داده های حاصل از شبیه سازی با کدMCNPX

نسبت به هندسه های قبل، اگرچه برای انرژیهای ۱/۵ و ۲GeV میزان تبدیل ید افزایش ولی در انرژی های ۱ و ۰/۷ کاهش داشته است.برای نمونه نپتونیم میزان زایش ^{238}Np در تمامی انرژی ها افزایش داشته است، و بیشترین میزان تبدیل برای انرژی ۲GeV به مقدار ۳۲/۵۷×۱۰$^{-۴}$ و بیشترین میزان تبدیل در یک ماه ۲۰٪ بوده است. مقدار تأثیر تبدیل نیز با افزایش انرژی افزایش می یابد(با افزایش انرژی ، رفتار منظمی داشته است).

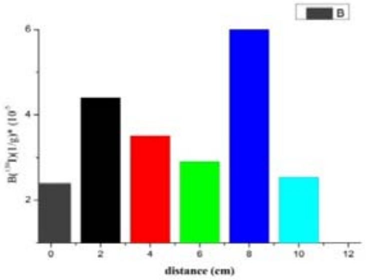
با اضافه کردن کند کننده، میزان زایش ^{130}I تا زمانی که ضخامت کند کننده به ۶ سانتی متر می رسد، افزایش می یابد و سپس با اضافه شدن کند کننده B(^{130}I)کاهش می یابد. این کاهش میزان زایش پس از یک ضخامت مشخص به این موضوع بستگی دارد که با اضافه شدن لایه های کند کننده از یک ضخامت مشخص به بعد، انرژی نوترون ها از حد مجاز و آستانه برای برهم کنش (n,γ) کمتر می شود و در نتیجه میزان زایش هم پایین می آید.در شکل ۵ می توان تغییراتB(^{130}I)را با کم و زیاد شدن ضخامت پلی اتیلن مشاهده نمود.



شکل۵:B(^{130}I)تابعی از ضخامت پلی اتیلن

در هندسه ی کامل EPT، (d)،شبیه سازی شده با کد نسبت به هندسه ها ی دیگر میزان زایش ^{130}I به دلیل حضور ^{113}Cd در

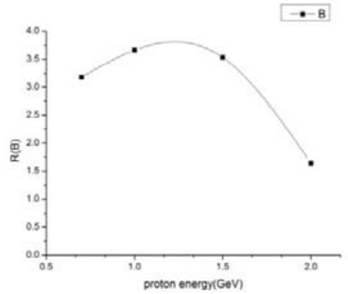
مجموعه که نقش جذب کننده ی نوترون های حرارتی را دارد، کمتر به دست می آمد،اما میزان تأثیر تبدیل با افزایش انرژی ، افزایش می یابد و می توان گفت میزان تأثیر تبدیل با افزایش انرژی ، رفتار منظمی دارد.در این هندسهبا تغییر فاصله ی چشمه و مبدا هدف ، بیشترین میزان تبدیل در فاصله ی ۸cm چشمه به مقدار ۲/۱۱ درصد حاصل می شود .



شکل۶:تغییرات $B(^{130}I)$ نسبت به فاصله هدف تا چشمه در انرژی 2GeV

ایزوتوپ ^{113}Cdبه دلیل داشتن سطح مقطع بالای گیراندازی ،نوترون های حرارتی و فوق حرارتی ، مقداری از نوترون ها را در خود جذب می کند[۳]در نتیجه با حذف کادمیم از مجموعه، میزان تبدیل ید نسبت به قبل ، افزایش چشمگیری دارد. در انرژی ۲GeV میزان تبدیل در یک ماه، ۰/۹۵٪ به دست آمد و تأثیر تبدیل در تمامی انرژی ها افزایش قابل ملاحظه ای داشته است و بیشترین میزان تأثیر تبدیل برای انرژی ۱GeVحاصل شد.

در هندسه (a)بیشترین میزان تبدیل ^{237}Np ،در محدوده ی ۴ انرژی ذکر شده، برای انرژی ۱/۵GeV به مقدار ۰/۴۱ × 10^{-4}و بیشترین میزان تبدیل در یک ماه برای این انرژی به مقدار ۰/۲۵٪ به دست آمد.بر خلاف نمونه ی ید، مقدار تأثیر تبدیل در نپتونیوم برای انرژی های بالاتر از ۱ GeV با افزایش انرژی ذره ی فرودی کاهش می یابد.



شکل۷: وابستگی تأثیر تبدیل نپتونیوم ۲۳۸ نسبت به انرژی پروتون فرودی

اگرچه در هندسه (d)، میزان تبدیل ^{237}Np کاهش داشته است و بیشترین میزان تبدیل در این هندسه در انرژی ۲GeV به مقدار ۱/۸۸٪ در یک ماه بوده است. اما تأثیر تبدیل با افزایش انرژی ، افزایش یافته است.

با تغییر یکنواخت ضخامت پلی اتیلن در کل مجموعه ، بیشترین میزان تبدیل ^{237}Npبرای زمانی حاصل می شود، که به ضخامت پلی اتیلن در کل مجموعه ۱۰cm اضافه کنیم یعنی برای ضخامت ۴۰cmدر این شرایط بیشترین میزان تبدیل برای نپتونیوم در یک ماه ۲/۹٪ به دست خواهد آمد.

با تغییر فاصله ی چشمه تا هدف، برای چشمه ای به شعاع ۴/۲cm در مجموعه ی کامل EPT ، به همراه کادمیم، بیشترین میزان تبدیل ^{237}Np برای فاصله ی ۶cm به مقدار ۲/۶۸٪ به دست آمد.

در نهایت می توان گفت بیشترین میزان تبدیل در یک ماه برای ^{237}Np برای مجموعه ای که پوششی از پلی اتیلن به ضخامت ۶cm به دور هر بخش قرار گرفته در انرژی۲GeV ، به مقدار ۲۰٪در ماه به دست می آیدو همینطور بیشترین میزان تبدیل ^{129}I در یک ماه برای مجموعه ای که پوششی از پلی اتیلن به ضخامت ۶cm به دور هر بخش قرار گرفته و شعاع چشمه ۴/۲cm می باشد در انرژی۲GeV ، به مقدار ۳/۲۹٪ در ماه به دست می آید.

مراجع:

[1] M. Krivopustov, M. Manolopoulou, et al, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A 599 (2009) 106–112
[2] ADAM J. et al., PRAMANA journal of physics, vol. 68, No. 2, 2007, pp. 201-212
[3] S. Stoulos et al. / Nuclear Instruments and1.. Methods in Physics Research A 599 (2009) 106–112
[4] M. Zamani et al. / Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A 508 (2003) 454–459
[5] M.I.Krivopustov, D.Chultem, Ts.Tumendelger et al. "On the First Experiment on Calorimetry of the Uranium Blanket of the Model U/Pb-Assembly of Electronuclear Installation "Energy plus transmutation"from the JINR Synchrophasotron at proton Energy 1.5 GeV". JINR - Preprint P1-2000 168, Dubna, 2000 // Journal "Kerntechnik", 2003, V.68, P.48-55.

محاسبه ی ضرایب دمایی رآکتیویته رآکتور توپکی چین

حسینی، سید علی [۱]؛ بصیری، حمید [۲]؛اطهری علاف، میترا [۳]

[۱] باشگاه پژوهشگران جوان و نخبگان، دانشگاه آزاد اسلامی، واحد ابهر، ابهر

[۲] دانشگاه آزاد اسلامی، واحد مشهد، باشگاه پژوهشگران جوان و نخبگان، مشهد، ایران

[۳] دانشگاه آزاد اسلامی، واحد علوم و تحقیقات تهران، دانشکده فنی و مهندسی، گروه مهندسی هسته ای

چکیده

در این مقاله نویسندگان بدنبال محاسبه پارامترهای سینتیک مهم رآکتور HTR-10 نظیر ضرایب دمایی رآکتیویته کل، سوخت وکند کننده می باشند.در این راستا از مدل هندسی توزیع توپک جدید پیشنهاد شده توسط نویسنده در مقالات پیشین و کد MCNP4c بهره گرفته شد. علاوه بر تثبیت ایمنی ذاتی رآکتور، همخوانی قابل توجه نتایج با اعداد تجربی حاکی از دقت مدل هندسی بکار گرفته شده می باشد.

Evaluation of the Chinese pebble bed reactor's temperature reactivity coefficients

Hosseini, Seyed Ali [1]; Basiri, Hamid [2]; Athari Allaf, Mitra [3]

[1] Young Researchers and Elites Club, Abhar Branch, Islamic Azad University, Abhar, Iran
[2] Young Researchers and Elites Club, Mashhad Branch, Islamic Azad University, Mashhad, Iran
[3] Islamic Azad University, Tehran Science and Research branch, Faculty of engineering, nuclear engineering group

Abstract

During the current work, the authors intend to calculate multiple reactor kinetic parameters such as the total, fuel and moderator reactivity coefficients of the HTR-10 reactor. The calculations are performed using a pebble distribution model proposed and benchmarked previously by the author and the MCNP4c code. While demonstrating the innate safety of this reactor, the results emphasize the accuracy of the pebble distribution mode.
PACS No: 28

مقدمه

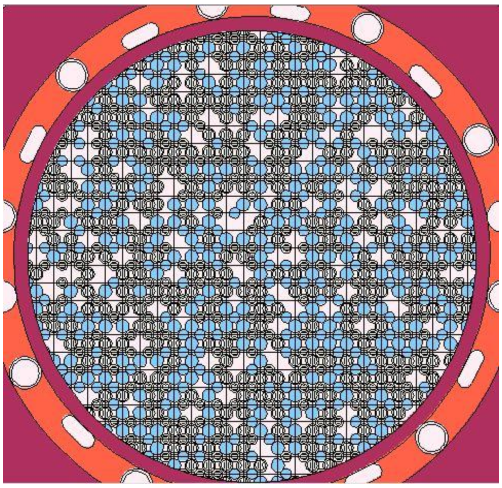
امروزه کشورهای دارای تکنولوژی هسته ای دنیا برنامه ویژه ای برای توسعه راکتورهای پیشرفته دارای ایمنی بالا و صرفه اقتصادی دارند. یکی از بهترین گزینه ها راکتورهای HTGR هستند که دارای قابلیت منحصر بفرد رساندن دمای خنک کننده به 950°C می باشند. این راکتورها بواسطه ی کیفیت بالای استانداردهای رعایت شده در آنها در دسته راکتورهای نسل چهارم قرار گرفته اند و به دلیل کار در دمای بالا، بازده بیشتری نسبت به سایر راکتور ها دارند. در حال حاضر دو نوع طراحی برای این نوع راکتورها مورد استفاده قرار گرفته است. نوع اول، رآکتورهای با سوخت میله ای می باشند که از جمله نمونه های در حال کار آن می توان به رآکتور HTR ژاپن اشاره کرد[1,2]. نوع دیگر راکتورهای با سوخت توپکی می باشند که در مقایسه با دیگر راکتورهای ساخته شده تا به امروز دارای طراحی جدیدی هستند. از جمله این راکتورها می توان به راکتور HTR-10 چین اشاره کرد. در این مقاله به محاسبه ضریب رآکتیویته دمایی کل راکتور HTR-10 و همچنین ضریب دمایی سوخت کند کننده آن پرداخته ایم.

مدل سازی راکتور HTR-10

راکتور HTR-10 یک رآکتور تحقیقاتی با قدرت 10MW می باشد. سوخت این راکتور به صورت توپکهایی با شعاع 3cm است. در داخل توپک های سوخت، کره های ذرات سوخت با شعاع 0.9mm قرار دارند. در مرکز کره سوخت UO_2 با چگالی $10gr/cm^3$ و غنای ۱۷ درصد قرار دارد. این ناحیه بوسیله ی دو لایه ی گرافیت پیرولیتی و بدنبال آنها یک لایه ی سیلیکن کاربید و نهایتا یک لایه ی بیرونی گرافیت پیرولیتی پوشیده شده است. این ساختار لایه ای با عنوان TRISO شناخته می شود. علاوه بر توپک های سوخت نوعی توپکهای گرافیتی نیز وجود دارند که نقش کند کننده را ایفا می کنند.

قلب رآکتور در منتها الیه پایین متشکل از یک لوله ی تخلیه ی توپک و بدنبال آن یک ناحیه به صورت قیف می باشد. ناحیه ی

قیفی در نهایت به یک استوانه ختم می شود. در حالت مورد بررسی قسمت تحتانی قلب تا مرز میان ناحیه ی قیفی و استوانه ای بوسیله ی توپکهای گرافیت پر می شود. ناحیه ی استوانه ای نیز تا حد مقتضی به وسیله ی مخلوطی از توپکهای سوخت و گرافیت با نسبت ۵۷ به ۴۳ پر می شود. این رآکتور دارای ۱۰ میله ی کنترل می باشد که در اطراف قلب در بازتابنده ی گرافیتی تعبیه شده اند. از B_4C بعنوان جاذب نوترونی استفاده می شود.



شکل ۱: دید فوقانی از قلب رآکتور

هندسه بسیار پیچیده راکتورهای نوع PBM به همراه محدودیت های نرم افزاری، شبیه سازی این نوع راکتورها را حتی با وجود نرم افزار های انعطاف پذیری مانند MCNP دشوار کرده است. کدهای مبتنی بر مونت کارلو از نظر قابلیت تعریف هندسه بسیار انعطاف پذیر هستند و تقریبا تنها انتخاب برای شبیه سازی این راکتورها هستند.

در این مقاله از مدل پیشنهاد شده در سال ۲۰۱۲ استفاده شده است[3]. در این مدل، قلب به وسیله آرایش مکعبی شبکه BCC پر می شود. هرکدام از واحدهای سلولی نوع BCC شامل ۹ ناحیه دارای توپک است. با توجه به این که دو نوع توپک داریم، می توان فهمید که ۲۹ نوع سلول واحد BCC مورد نیاز است[4]. اگر احتمال اینکه ناحیه ای در قلب فاقد توپک بوده و با هلیوم پر شده باشد را به این مدل اضافه کنیم، مجموع تعداد سلول های واحد به ۳۹ افزایش پیدا می کند که مقداری بیش از توانایی محاسباتی MCNP است. برای رفع این مشکل، سلول واحد جدیدی مبتنی بر BCC پیشنهاد شد. علاوه بر این، به منظور کاهش دادن احتمالات و در نتیجه تعداد سلول های واحد، سلول واحد تدارک دیده شده به دو قسمت بالایی و پایینی تقسیم شد که این تقسیم تعداد مجموع سلول های واحد را به $2 \times 3^4 - 1$ کاهش می دهد. بنابراین برای پر کردن قلب راکتور، ۱۶۱ سلول واحد محتمل به عنوان universe های جداگانه تعریف می گرد[3]. در مدل سازی انجام شده از سطح مقطع های موجود در کتابخانه ENDFVII استفاده شده است. همچنین کد NJOY به منظور محاسبه سطح مقطع در دماهای مختلف به کار گرفته شده است[5]. بواسطه محدودیت در تولید سطوح مقطع در دماهای مختلف، جهت انجام شبیه سازی در دماهای غیر موجود از مفهوم سطح مقطع موثر بهره جستیم. در این راستا بعنوان مثال جهت شبیه سازی در دمای T که میان دو دمای T_1و T_2 قرار دارد، سلول مورد بررسی بترتیب با نسبت های μ و $1 - \mu$ متشکل از ماده در دماهای ذکر شده تعریف گردید. ضریب μ اینگونه تعریف می گردد:

$$\mu = \frac{T - T_2}{T_1 - T_2} \qquad (1-1)$$

ضرایب دمایی راکتیویته

ایمنی ذاتی یکی از اولویت ها در طراحی رآکتورها می باشد. ضرایب دمایی رآکتیویته عملا مهمترین پارامترها در تعیین و تثبیت ایمنی ذاتی رآکتور می باشند. در عمل برای آنکه رآکتور پایدار بماند لازم است ضرایب دمایی رآکتیویته قلب در همهٔ شرایط منفی باشند[1]. دو ضریب دمایی مهم، ضریب دمایی کندکننده و ضریب دمایی سوخت هستند.

$$\alpha = \frac{d\rho}{dT} = \frac{1}{k}\frac{dk}{dT} \qquad (2-1)$$

تغییر راکتیویته به ازای هر درجه تغییر دمای کند کننده، ضریب دمایی راکتیویته کند کننده نامیده می شود[2].

ضریب دمایی راکتیویته مهم دیگر، ضریب دمایی سوخت است که در برخی راکتورها اثر بیشتری نسبت به ضریب دمایی کند کننده دارد. ضریب دمایی سوخت عبارتست از تغییرات راکتیویته به ازای تغییر دمای سوخت. به این علت که افزایش قدرت راکتور بلافاصله منجر به افزایش دمای سوخت می شود، به این ضریب دمایی ضریب دمایی آنی نیز گفته می شود. به این علت که دمای سوخت

بلافاصله پس از افزایش قدرت راکتور افزایش می یابد، ضریب دمایی منفی سوخت از ضریب دمایی منفی کند کننده مهم تر است. زمانی که طول می کشد تا حرارت به کندکننده منتقل شود چند ثانیه است. در اتفاقاتی که منجر به تزریق راکتیویته مثبت می شوند، کند کننده نمی تواند جلوی افزایش قدرت را برای چند ثانیه بگیرد و این در حالی است که ضریب دمایی سوخت بلافاصله شروع به اضافه کردن راکتیویته منفی می کند.

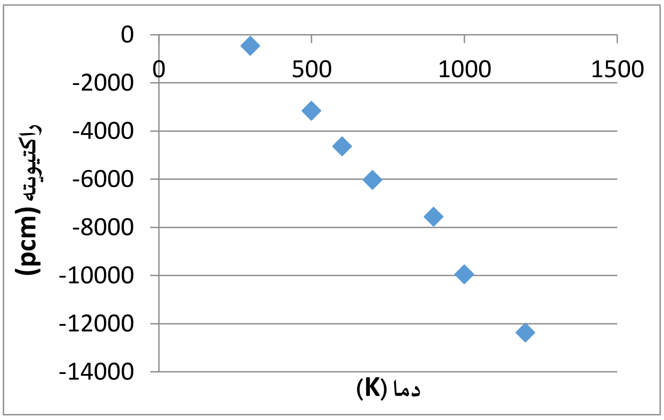
هر تغییری در دمای میله سوخت منجر به تغییرات فیزیکی آشکار و تعدادی تغییرات فیزیکی نه چندان واضح می گردد. این تغییرات فیزیکی می توانند به چند طریق بر توازن نوترونی داخل قلب تاثیر بگذارد. از همه واضح تر انبساط قلب است که منجر به کاهش چگالی اتمی مواد داخل قلب می گردد. در نتیجه سطح مقطع های ماکروسکوپی کاهش یافته، پویش آزاد میانگین و سطح پخش افزایش می یابد. از آنجا که احتمال نشت نوترون ها متناسب با سطح پخش است، بنابراین نشت افزایش پیدا می کند. این فرایندهای فیزیکی می تواند اثر راکتیویته زیادی بر راکتورهای با قلب کوچک و متوسط داشته باشد، اما در مورد راکتور های قدرت جدید که دارای حجم بزرگ است، درصد نشت بسیار جزئی می باشد. لذا کاهش احتمال نشت اثر خیلی زیادی بر راکتیویته نخواهد داشت.

بحث و نتیجه گیری

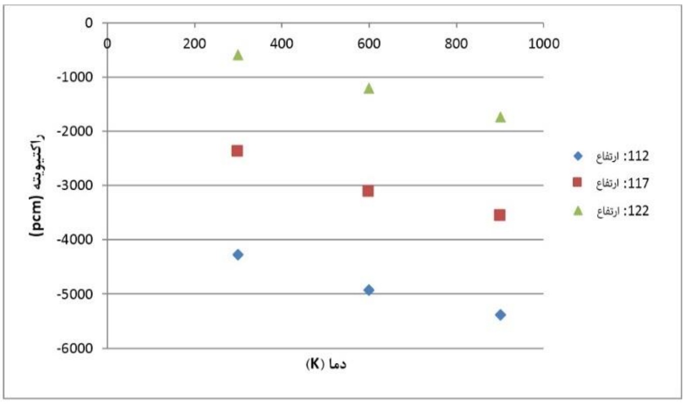
پس از انجام شبیه سازی راکتور HTR-10 ، با استفاده از روش توزیع تصادفی توپک ها ۹ آرایش مختلف پر شدن قلب را تولید کردیم و برای این ۹ آرایش در ۷ دمای مختلف به محاسبه ضریب تکثیر و از روی آن محاسبه مقدار راکتیویته پرداختیم. در نهایت برای هر دما روی ۹ آرایش میانگین گرفته شد.

در این مقاله با استفاده از تغییر ارتفاعی که قلب از توپک ها پر می شود به اعمال تغییر راکتیویته پرداختیم و برای بدست آوردن ضریب دمایی سوخت و کند کننده، سطح مقطع مواد هر کدام را در ۳ دما تعویض کردیم. ارتفاعاتی که قلب را از سوخت پر کردیم 112cm و 117cm و 122cm می باشد.

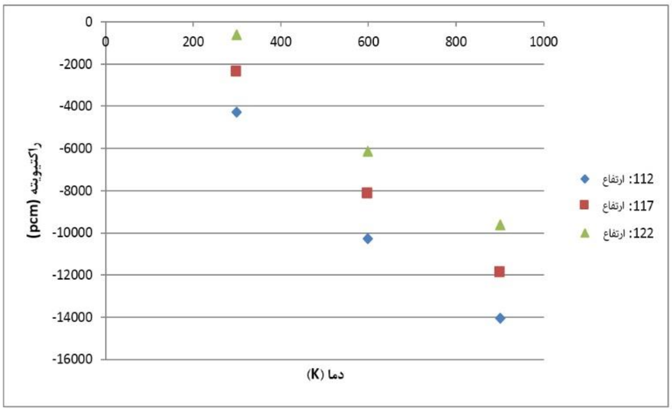
برای بدست آوردن ضرایب دمایی سوخت و کندکننده نمودار تغییرات راکتیویته بر حسب دما را در ارتفاع های مختلف رسم کرده و شیب خط را بدست آوردیم. با توجه به اینکه در سه ارتفاع مختلف به محاسبه ضریب دمایی پرداختیم، روی سه مقدار ضریب دمایی بدست آمده میانگین گیری کرده و مقادیر را گزارش کردیم.



شکل ۲: تغییرات راکتیویته بر حسب دمای قلب



شکل ۳: تغییرات راکتیویته بر حسب دما سوخت



شکل ۴: تغییرات راکتیویته بر حسب دما کند کننده

مقدار ضریب دمایی سوخت از روی نمودار -1.91 pcm/K بدست می آید که با مقدار گزارش شده IAEA در مرجع [6] که میزان -2.13 pcm/K می باشد تفاوت اندکی دارد.

ضریب دمایی کندکننده از روی نمودار -15.74 pcm/K بدست می آید که با مقدار گزارش شده IAEA در مرجع [6] که میزان -16.2 pcm/K می باشد همخوانی قابل قبولی را دارد.

در نتیجه محاسبات مشاهده شد ضریب دمایی راکتیوبته برای راکتور و سوخت و کندکننده این راکتور همواره منفی است که تصادفی توپک ها استفاده شد که زمان مورد نیاز برای محاسبه را کاهش می دهد و به نتایج تجربی نزدیک تر است[7]. اختلاف اندک بین مقادیر محاسبه شده و مقادیر تجربی اولا به طبیعت توزیع تصادفی توپک ها در راکتور و ثانیا به پیچیدگی های موجود در شبیه سازی این راکتور ها باز می گردد[7,8]. از جمله این مشکلات می توان به توپک های منقطع ایجاد شده در لبه های قلب و یا عدم قطعیت در غلظت بور داخل گرافیت اشاره نمود[7].

مرجع ها

[1] D.L. Hetrick, "*Dynamics of Nuclear Reactors*"; American Nuclear Society, 1993.

[2] J.R. Lamarsh, *"Introduction to nuclear reactor theory"*; American Nuclear Society, 2002.

[3] S.A. Hosseini, *"A new random distribution method to simulate PBM type reactors with MCN"*; progress in Nuclear Energy 50 (2012)

[4] S.A. Hosseini and M. Athari Allaf, *"Implementation and benchmarking of ENDFVII based library for PBM reactor analysis with MCNP4c"*; Progress in Nuclear Energy 60(2011) 27–30.

[5] H.C. Kim, S.H. Kim, J.K. Kim, *"A new strategy to simulate a random geometry in a pebble-bed core with the Monte Carlo code MCNP"*; Annals of Nuclear Energy 38 No.9 (2011) 1877–1883.

[6] IAEA, *"Evaluation of High Temperature Gas Cooled Reactor performance: Benchmark Analysis Related to the PBMR-400, PBMM, GT-MHR, HTR-10 and the ASTRA Critical Facility"*; (2013)

[7] حسینی، سید علی؛ «شبیه سازی راکتور HTR-10 با کد mcnp4c» ، دانشگاه آزاد اسلامی واحد علوم و تحقیقات دانشکده فنی (۲۰۱۱)

[8] بصیری، حمید؛ «بررسی حوزه پایداری راکتور توپکی HTR-10 در برابر تزریق راکتیویته»؛ دانشگاه آزاد اسلامی واحد علوم و تحقیقات دانشکده فنی (۲۰۱۳)

بررسی طیف انرژی ذرات ثانویه در بهمن‌های گسترده هوایی پرتوهای کیهانی بوسیله کد شبیه سازی کورسیکا

حسینی، اکبر؛ پورمحمّد، داود

گروه فیزیک، دانشگاه بین المللی امام خمینی ، قزوین

چکیده

پرتوهای کیهانی در برخورد با جو زمین ، بهمن‌های هوایی گسترده ایجاد می کنند ، حاصل این بهمن‌ها ، جبهه‌ای از ذرات باردار ، بیشتر الکترون‌ها ، پوزیترون‌ها و موئون‌ها می‌باشند . چنین بهمن‌هایی با روش‌های متنوعی در سطح زمین آشکارسازی می شوند . برای بهینه‌سازی آشکارسازی ذرات ثانویه‌ی بهمن‌ها لازم است طیف انرژی این ذرات شناسایی شود. در این پژوهش با استفاده از کد کورسیکا که مبتنی بر الگوریتم مونت کارلو می باشد بهمن‌های هوایی متعددی تولید می‌شود و اطلاعات هر یک از ذرات ثانویه استخراج ، و طیف انرژی برخی از ذرات در ارتفاعات گوناگون مورد بررسی قرارمی‌گیرد.

Investigation of energy spectrum of secondary particles in extensive air showers of cosmic rays by CORSIKA simulation code

Hosseini, Akbar ; Purmohammad, Davoud

Department of Physics, Imam Khomeini International University, Qazvin

Abstract

Cosmic rays create extensive air showers when hitting the Earth's atmosphere. These showers are cascades of charged particles, mostly electrons and positrons and Muons. Such showers can be detected on the earth's surface by variety of methods. To optimize the detection of secondary particles, it is required to know their energy spectrum. In this research many showers is produced by CORSIKA code that has Monte Carlo-based algorithm and then information of each secondary particle is extracted, and the energy spectrum of some particles investigated.

مقدمه

پرتوهای کیهانی ذرات پرانرژی هستند که بیشتر شامل پروتون‌ها(85%) ، ذرات آلفا (12%) و دیگر هسته‌های سنگین (3٪) می باشند و انرژی آنها بین 10^6 Mev تا 10^{20} Mev می‌باشد. منشاء آنها هسته‌های فعال کهکشانی ، ابر نواخترها ، دیسک‌های کهکشانی ،ستاره‌های نوترونی وبعضی دیگر منابع ناشناخته می باشند . پرتوهای کیهانی پس از برخورد به مولکول‌های جو زمین زنجیره ای از بر هم کنش‌های الکترومغناطیسی و هسته ای را ایجاد می کنند و محصولات هر برهم کنش اگر از انرژی کافی برخوردار باشند شروع کننده واکنش‌های بیشتر خواهد بود. به آبشار گسترده ای از ذرات یونیزه شده و تابش الکترومغناطیس تولیده شده در جو توسط پرتوهای کیهانی، بهمن‌های گسترده هوایی می گویند . اگر بهمن، حاصل برهم کنش الکترون و فوتون‌ها با هسته‌های جو باشد به آن بهمن الکترومغناطیسی و و اگر حاصل برهم کنش یک هادرون پر انرژی مانند نوکلئون ، پایون ، باشد به آن بهمن هادرونی گفته می‌شود.ساده ترین مدل برای بررسی ذرات بهمنها ، مدل اسباب بازی هیتلر (heitler toy model) می باشد. در این مدل ذره

اولیه با انرژی E_0 پس از طی اولین طول اندرکنش λ، به 2 ذره تبدیل می شود و انرژی هرکدام $E_0/2$ خواهد شد. بعد از طی دو برابر طول اندرکنش ، تعداد ذرات 2^2 و انرژی هر کدام $E_0/4$ خواهد شد.

معادلات بهمن برای ذرات ثانویه به شکل زیر می باشد:

$$\frac{dN_i(E_i,X)}{dX} = -\left(\frac{1}{\lambda_i}+\frac{1}{d_i}\right)N_i(E_i,X) + \sum_j \int \frac{dn_i(E_i,E_j)}{dE_i}\frac{N_j(E_j,X)}{\lambda_j}dEj$$

$N_i(E_i,X)dE_i$ شار ذرات در عمق x (برحسب g/cm^2)

λ_i طول اندرکنش ذره در جو

$dn_i(E_i,E_j)$ تعداد ذرات نوع i که در بازه (E_i,E_i+dE_i) از اندرکنش ذرات نوع j با انرژی E_j تولید می شود.

آشکار سازی بهمن‌ها روی زمین با استفاده از تلسکوپ‌های چرنکوف ، آرایه‌های بهمن‌های هوایی گسترده با آشکارسازهای سوسوزن و دیگر آشکارسازها صورت می‌پذیرد. ذرات ثانویه‌ی بهمن بسته به انرژی ذره اولیه، نوع ذره اولیه، نوع ذره ثانویه، ارتفاع آشکارسازی می تواند انرژی‌های مختلفی داشته باشد و در نتیجه ابزارها و روش‌های متفاوتی برای مشاهده آنها می‌توان به کار برد. هدف از این پژوهش آنست که بوسیله کد کورسیکا که یک برنامه شبیه سازی مونت کارلو برای مطالعه سیر تکامل و ویژگی‌های بهمن‌های گسترده هوایی است ، بهمن‌های متعددی با فاکتورهای گوناگون مانند: نوع ذره اولیه مختلف ، انرژی‌های اولیه مختلف ، ارتفاعات مشاهده مختلف ایجاد شود و سپس طیف انرژی ذرات ثانویه را بدست آوریم و ارتباط آنها را با فاکتورهای گوناگون بیابیم.

روش کار

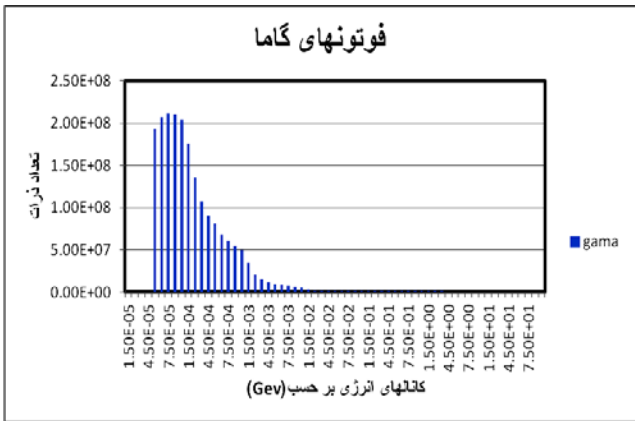
در این پژوهش، شبیه سازی برای سه ذره اولیه پروتون ، فوتون‌های گاما و هسته آهن با چهار انرژی مختلف 10^3 GeV ، 10^4 GeV ، 10^5 GeV و 10^6 GeV صورت گرفت. این شبیه سازی که با استفاده از ابر رایانه دانشگاه بین المللی امام خمینی صورت گرفت شامل 12 اجرای برنامه کورسیکا بود. ورودی‌های هر اجرا شامل شماره اجرا، تعداد بهمن‌ها، زاویه سمتی ، زاویه سرسویی ، ارتفاع مشاهده و انرژی قطع می باشد.

خروجی هر اجرا کورسیکا شامل یک فایل باینری می باشد که اطلاعات بهمن‌ها بصورت بلوک‌هایی در آن ذخیره شده است. پس از دریافت خروجی کورسیکا ، برنامه ای به زبان فرترن نوشتیم که اطلاعات ذرات ثانویه را از هر فایل باینری استخراج کند. این برنامه تعداد هر نوع ذره را درهرکانال انرژی وهرارتفاع وهر بهمن را می‌شمارد ودر یک آرایه چهار بعدی ذخیره می‌کند. سپس نسبت به 100 بهمن میانگین گرفته و انحراف معیار آنر نیز حساب می‌کند . اطلاعات مطلوب را می‌توانیم براحتی از این آرایه چهاربعدی استخراج کنیم. ذرات ثانویه‌یی که در این پژوهش مورد بررسی قرار گرفتند شامل فوتون‌های گاما ، پوزیترون ، الکترون ، موئون مثبت و منفی می باشد.کانال‌های انرژی مورد بحث شامل 63 کانال انرژی می باشد که از 1×10^{-5} GeV تا GeV 1×10^{2} می باشد.

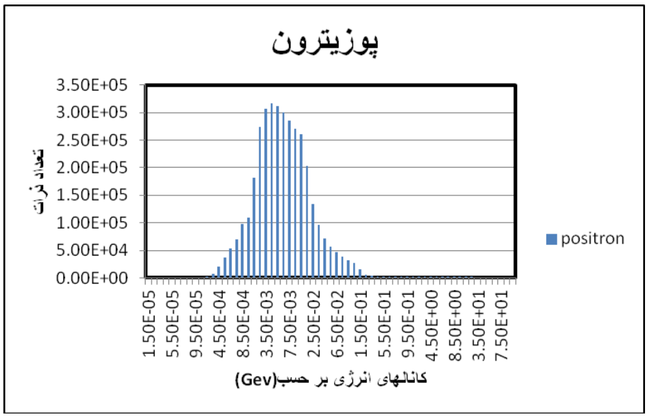
نتایج اولیه شبیه سازی

فراوانی ذرات ثانویه در کانال‌های انرژی

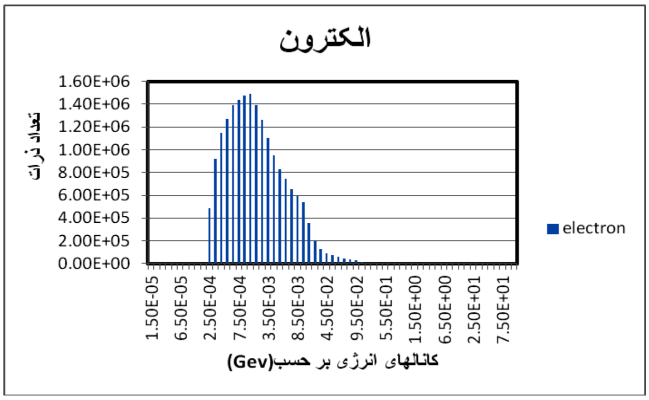
سیر تحول فراوانی ذرات نسبت به ذره اولیه و ارتفاع مشاهده و انرژی اولیه تقریبا یکسان است اما نسبت به نوع ثانویه تغییر می‌کند. برای نمونه نمودار های فراوانی ذرات ثانویه برای ذره اولیه پرتون وارتفاع 2000متری از سطح دریا و انرژی 10^5 GeV ذره اولیه ، را می‌توانیم در شکل‌های 1 تا 5 ببینیم.



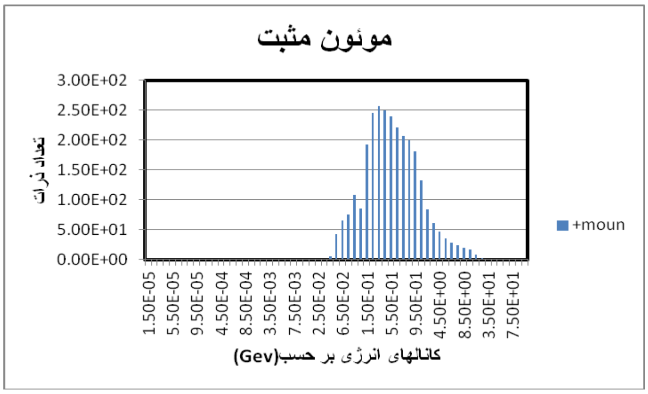
شکل1. نمودار تعداد فوتون‌های گاما بر حسب کانال‌های انرژی



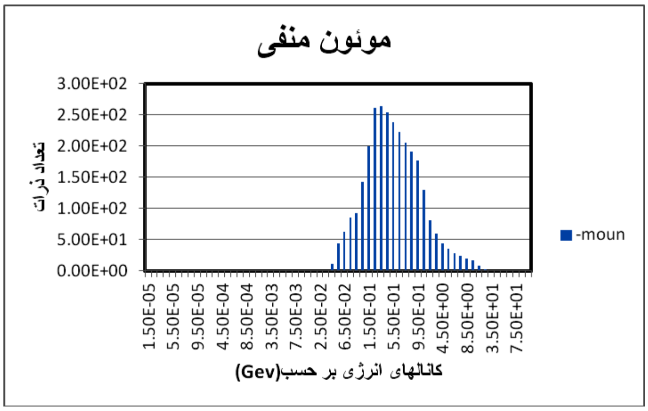
شکل 2. نمودار تعداد پوزیترون بر حسب کانال‌های انرژی



شکل3. نمودار تعداد الکترون‌ها در کانال‌های انرژی

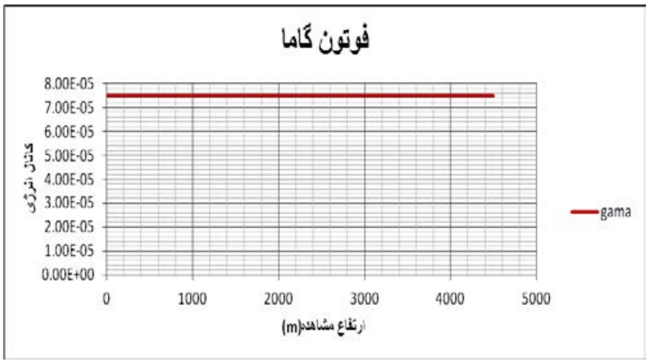


شکل4. نمودار تعداد موئون‌های مثبت در کانال‌های انرژی

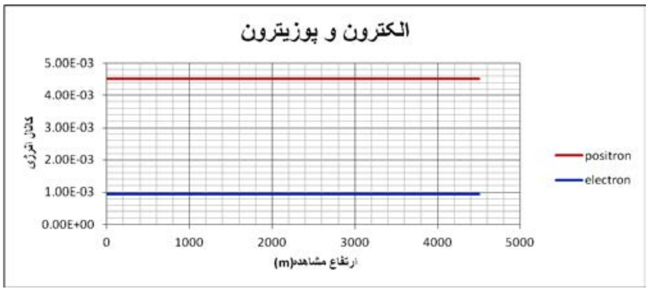


شکل 5. نمودار تعداد موئون‌های منفی در کانال‌های انرژی

در نمودارهای فراوانی ذرات ثانویه درکانال‌های انرژی ، کانال‌های انرژیی وجود دارند که تعداد ذارت ثانویه در آنها ماکزیمم است. در گام بعد می‌خواهیم که بدانیم که این کانال‌ها نسبت به ارتفاع مشاهده ، انرژی ذره اولیه ، نوع ذره اولیه چگونه تغییر می‌کند. سیر تغییرات کانال‌های انرژی ماکزیمم (کانال‌هایی که تعداد ذرات درآنها ماکزیمم است) نسبت به ارتفاع مشاهده بستگی به انرژی ذره اولیه دارد . بطوریکه در انرژی‌های پایین تغییرات کانال‌های انرژی ماکزیمم دارای نظم خاصی نیست ولی اگر ذره اولیه دارای انرژی بالایی باشد ، کانال‌های انرژی ماکزیمم نسبت به ارتفاع، نسبت به سه ذره ثانویه‌ی فوتون گاما و پوزیترون و الکترون ثابت می‌ماند.(شکل‌های 6و7) ولی برای میون مثبت ومنفی ، از نظم خاصی پیروی نمی‌کند.

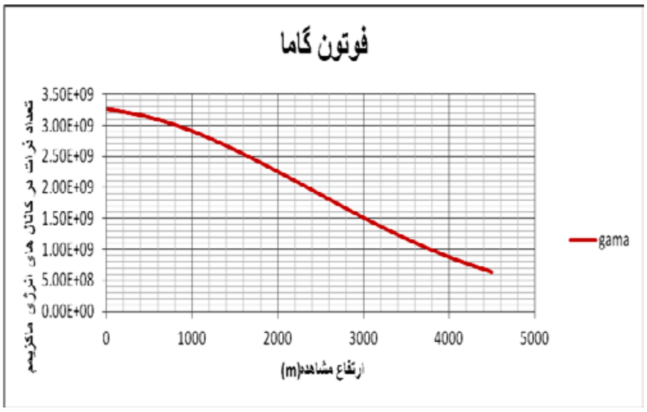


شکل6.نمودار کانال‌های انرژی ماکزیمم فوتون گاما بر حسب ارتفاع مشاهده

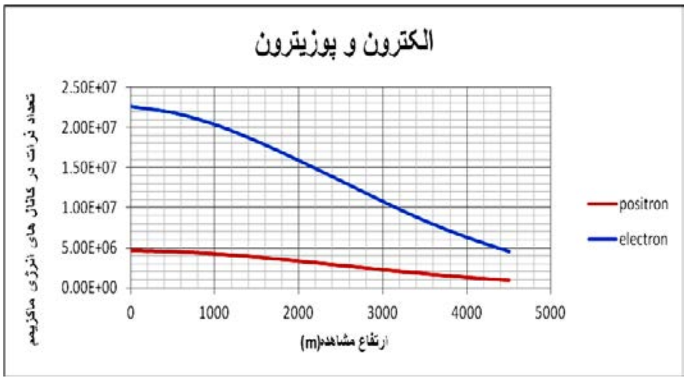


شکل7. نمودار کانال‌های انرژی ماکزیمم الکترون وپوزیترون بر حسب ارتفاع مشاهده

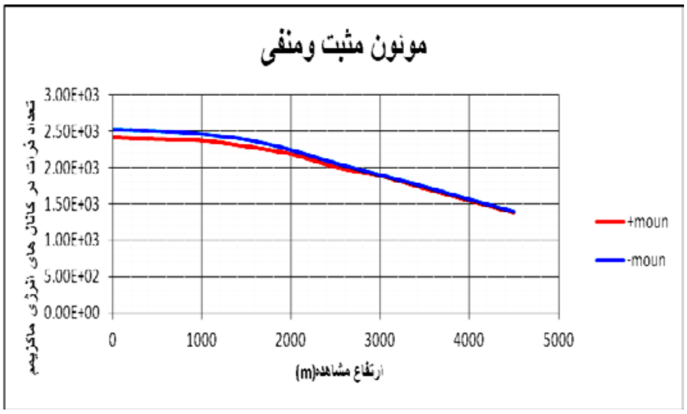
همچنین تغییرات فراوانی ذرات در کانال‌های انرژی ماکزیمم نسبت به ارتفاع مشاهده قابل ملاحظه است.تعداد ذرات در این کانال‌ها با افزایش ارتفاع کاهش می یابد.(شکل‌های 8و9و10)



شکل8.نمودار فراوانی فوتون‌های گاما در کانال‌های انرژی ماکزیمم نسبت به ارتفاع مشاهده



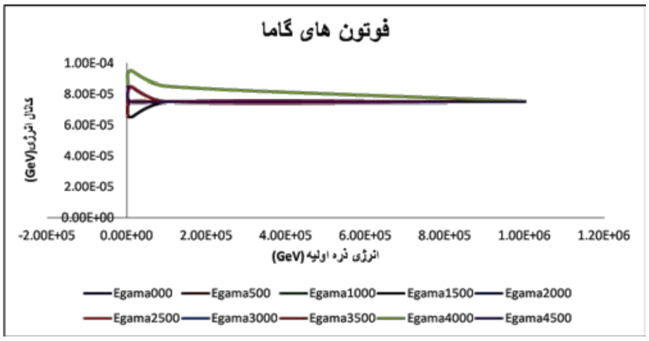
شکل9. نمودار فراوانی الکترون وپوزیترون در کانال‌های انرژی ماکزیمم نسبت به ارتفاع مشاهده



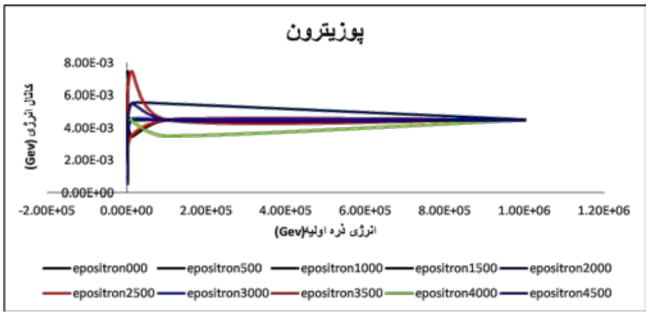
شکل10. نمودار فراوانی موئون مثبت ومنفی در کانال‌های انرژی ماکزیمم نسبت به ارتفاع مشاهده

مطلب قابل ملاحظه دیگر، این است که تعداد الکترون‌ها نسبت به پوزیترون‌ها در همه حالت‌ها بیشتر بوده است.

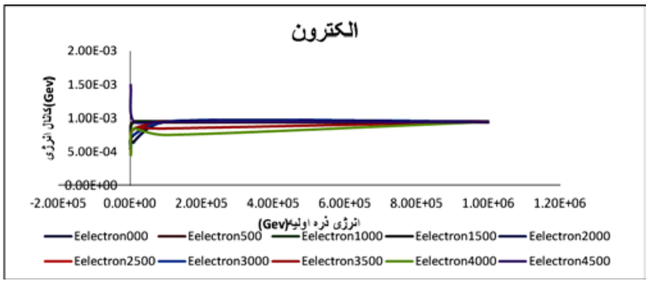
بررسی تغییرات کانال‌های انرژی ماکزیمم نسبت به انرژی ذره اولیه نشان می‌دهد که این کانال برای همه ارتفاعات بسته به نوع ثانویه به مقدار مشخص میل می‌کند.



شکل 11. نمودار کانال‌های انرژی ماکزیمم فوتون گاما نسبت به انرژی ذره اولیه برای 10 ارتفاع مشاهده



شکل 12. نمودار کانال‌های انرژی ماکزیمم پوزیترون نسبت به انرژی ذره اولیه برای 10 ارتفاع مشاهده.



شکل13. نمودار کانال‌های انرژی ماکزیمم الکترون نسبت به انرژی ذره اولیه برای 10 ارتفاع مشاهده.

نتیجه گیری

کانال‌های انرژی ماکزیمم برای ذرات اولیه با انرژی بیشتر از GeV 10^5 نسبت به ارتفاع تغییر نخواهدکرد و فقط بستگی به نوع ثانویه دارد. فراوانی ذرات ثانویه در کانال‌های انرژی ماکزیمم با افزایش ارتفاع کاهش می‌یابد. نتایج شبیه‌سازی بیشتر بودن تعداد الکترون‌ها نسبت به پوزیترون‌ها را تایید می‌کند.

مراجع

1. C.Grupen; *Astroparticle Physics*, Springer, 2005
2. D. Heck et al., Report **FZKA 6019** (1998), Forschungszentrum Karlsruhe

استخراج سطح مقطع‌های مؤثر ناراستی‌های خوشه‌ای آشکارسازهای سیلیسیومی تابش یافته با ذرات سنگین در دماهای پایین

حسینی، الهام[1]؛ سرآمد، شهیار[2]

[1] *دانشکده مهندسی انرژی و فیزیک دانشگاه صنعتی امیرکبیر، تهران*

[2] *دانشکده مهندسی انرژی و فیزیک دانشگاه صنعتی امیرکبیر ، دانشگاه صنعتی امیرکبیر، تهران*

چکیده

توجیه نتایج حاصل از تغییرات دما بر روی غلظت مؤثر مسئله‌ی است که تقریباً لاینحل باقی مانده است. بهینه‌سازی پارامترهای مربوط به مدل تبادل بار یکی از مهم‌ترین ایده‌های ممکن برای حل این ناسازگاری بین نتایج تجربی و تئوریست. برای این منظور برای سطح مقطع‌ها توابعی نمایی بر حسب دما در نظر گرفته شده است.

واژه‌های کلیدی: *آشکارسازهای سیلیسیومی- ناراستی نقطه‌ای- ناراستی خوشه‌ای، مدل سینماتیک، مدل تبادل باری، غلظت مؤثر بخشنده‌ها و پذیرنده‌ها.*

Extraction of some important cluster defect's cross sections of hadron irradiated silicon detectors at cryogenic temperatures

Hosseini, Elham[1]; Saramad, shahyar[2]

[1] *Department of Energy engineering and Physics, Amirkabir university of technology, Tehran*
[2] *Department of Energy engineering and Physics Amirkabir university of technology, Tehran*

Abstract

Problem associated with the result of effective doping concentration with temperature deviation. Optimization of cross section of exchange charge between two levels over a range of temperature is given in this paper. We tried to find reasonable function for cross sections.

Key Words: Silicon Detector, Point defects, Cluster defects, Kinetics model, Exchange charge model, Effective doping concentration.

مقدمه

از آشکارسازهای نیمه‌رسانا برای مسیریابی ذرات ،آنالیز مواد، عکس برداری پزشکی، ماموریت‌های فضایی و... استفاده می‌شود. با توجه به داشتن تکنولوژی‌های منحصر به فرد این نوع آشکارسازها کاربرد آن در آزمایش‌های (LHC) روزبه‌روز گسترش یافته است [۱]. هدف از تحقیق بر روی عوامل مؤثر در تغییرات پارامترهای نیمه رسانا اعم از غلظت مؤثر و جریان نشتی، بدست آوردن روش‌هایی برای مقاوم سازی بیش‌تر آشکارسازهای نیمه رسانا نسبت به تشعشع و پرتودهی‌های مختلف می‌باشد. این مسئله علاوه بر فیزیک انرژی‌های بالا، در سلول‌های خورشیدی و همچنین آشکارسازهای مورد استفاده در ماهواره‌ها که تحت تابش پرتوهای کیهانی قرار دارند، دارای اهمیت ویژه‌ای است.

تئوری مورد استفاده در شبیه‌سازی و وارد نمودن اثرات ناراستی‌های نقطه‌ای، آمار شاکلی- رید- هال (SRH) است [۳،٤]. این تئوری نتایج تجربی ناشی از پرتودهی گاما را به خوبی بیان می‌نماید [۵]، اما در پرتودهی نوترون، تفاوت فاحشی بین نتایج تجربی و تئوری وجود دارد. از این رو تصحیحات لازم باید لحاظ شود [٦]. در پرتودهی نوترون‌ها نوع جدیدی از ناراستی‌ها به وجود می‌آیند که به ناراستی‌های خوشه‌ای مرسوم هستند [۷]. در

نظر گرفتن این گونه از ناراستی‌ها از قبیل E170 ،V2 و E70 و استفاده از تئوری جدید می‌توان پاسخ‌گوی نتایج تجربی بود.
توجیه نتایج حاصل از تغییرات دما بر روی غلظت مؤثر پذیرنده‌ها و بخشنده‌ها مسئله‌ی است که تقریباً لاینحل باقی مانده است. اگر تمام پارامترهای متغیر با دما به تنهایی در شبیه‌سازی در نظر گرفته شود، جواب مطلوبی حاصل نخواهد شد. مهم‌ترین پارامتر مؤثر در این مسئله سطح مقطع‌های تبادل بار است. در بعضی از نتایج بدست آمده در شبیه‌سازی‌های انجام شده [۸]، مقادیر پارامترهای اولیه به دور از واقعیت در نظر گرفته شده‌اند و همچنین محدوده تغییرات سطح مقطع‌ها بر حسب دما بسیار وسیع است. در این مقاله با بهینه‌سازی سطح مقطع‌های تبادل بار بین ترازها، می‌توان نتایجی منطبق بر مقادیر تجربی را بدست آورد. برای این منظور برای سطح مقطع‌ها توابعی نمایی بر حسب دما در نظر گرفته شده است و سعی بر این بوده است که سطح مقطع‌ها در محدوده‌ی بسیارمنطقی‌تری قرار بدست آیند.

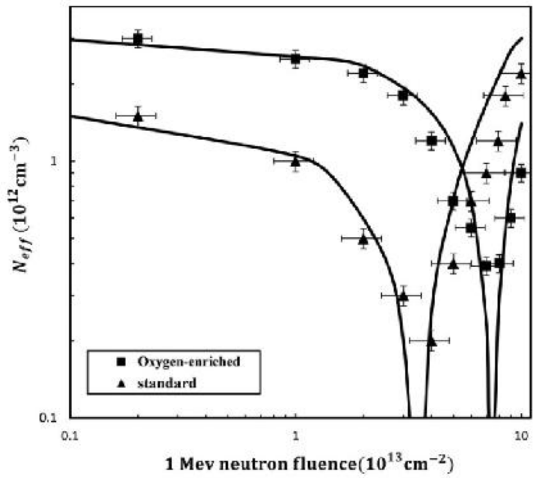
آسیب‌های ناشی از پرتودهی

هنگامی که یون‌های پر انرژی وارد زمینه نیمه‌رسانا می‌شوند، در مجموعه‌ای از برخوردهای هسته‌ای انرژی خود را از دست می‌دهند و در نهایت به حال سکون در می‌آیند. این برهمکنش‌ها موجب می‌شود که ذره‌ی فرودی انرژی خود را به اتم‌های شبکه بدهد [۹] به‌طوری که اتم‌های سیلیسیم جابه‌جا شوند و به نا-آراستگی شبکه (که آسیب هم گفته می‌شود) منجر گردد. این اتم جابه‌جا شده به نام اولین اتم ضربه خورده (PKA[1]) نامیده می‌شود [۱]. اتم جابه‌جا شده را می‌توان به این صورت در نظر گرفت که در یک موقعیت بین جایگاهی (I)[2] قرار گیرد و یک جای‌خالی (V)[3] را به جای خود بر جای گذارد، که به نام جفت" Frenkel" [۱] معروف هستند. طیف اتم‌های جابه‌جا شده به نوع و انرژی ذره‌ی فرودی بستگی دارد. این اتم‌ها ممکن است دارای انرژی پس‌زنی بالایی باشند که به نوبه خود موجب آبشارهایی از برانگیختگی‌های بیشتر و جابه‌جایی‌های ثانویه می‌شوند. این سازوکار در پرتودهی‌های گاما و ذرات سنگین یکسان بوده، اما در پرتودهی گاما، اتم‌های پس زده شده تنها می‌تواند یک یا دو اتم را از شبکه جابه‌جا کند. بعضی از جاهای‌خالی و بین‌جایگاهی ممکن است مجدداً بازترکیب شود و هیچ گونه خرابی بر جای نگذارد و بعضی دیگر ممکن است به هم متصل شوند و دو جای‌خالی را که تا دمای ۶۰۰ K [۱۰] پایدار است، به‌وجود آورند. برخی دیگر ممکن است به خارج از منطقه‌ی تخریب شده نفوذ پیدا کرده و به سطح برسند و یا با ناخالصی‌هایی همانند کربن، اکسیژن و یا فسفر که بیش از همه در ساختمان سیلیسیم وارد می‌شوند واکنش انجام دهند و ناراستی‌های جدیدی را بوجود آورند [۱۱]. این ناراستی‌ها به نام ناراستی‌های نقطه‌ای معروف هستند و انرژی آنها به صورت تک تراز انرژی در باند ممنوعه انرژی سیلیسیوم مشخص می‌گردد. محاسبات عددی برای پیش‌بینی ناراستی اولین بار توسط داویس ارائه شد [۱۲]. برای این مدل، مقادیر اولیه ناخالصی‌هایی از قبیل فسفر، کربن و اکسیژن باید مشخص گردد. اطلاعات اضافه‌تر در مورد مدل سینماتیک در منبع [۱۱] یافت می‌شود.

شبیه سازی اثرات تشعشع در آشکارساز نیمه‌رسانا

تنها با بکاربردن ناراستی‌های نقطه‌ای در پرتودهی نوترون، همخوانی نتایج به‌دست آمده با مقادیر تجربه به دست نمی‌آید [۱۳]. ناراستی‌های دیگر مرسوم به ناراستی‌های خوشه‌ای در جریان نشتی و غلظت مؤثر بخشنده‌ها و پذیرنده‌ها، نقش مؤثری دارند. از این رو با استفاده از مدل تبادل بار قادر خواهیم بود، نتایج مورد نظر در پرتودهی نوترون را به‌دست آوریم. ناراستی‌های خوشه‌ای دارای یک یا چندین تراز در باند ممنوعه هستند و در مدل تبادل بار از تابش یا گیراندازی حامل‌های بار بین هر کدام از این ترازها صحبت می‌شود [۱٤].
نتایج حاصل از شبیه‌سازی ناراستی‌های خوشه‌ای و نقطه‌ای در شکل ۱ آمده است. با توجه به این شکل واضح است که مدل استفاده شده همخوانی خوبی با نتایج تجربی دارد [۱۵]. تغییرات غلظت مؤثر بر حسب شار معادل نوترونی یکی از مهم‌ترین پارامترها در جهت شناسایی آسیب¬های وارده بر بدنه آشکارساز است.

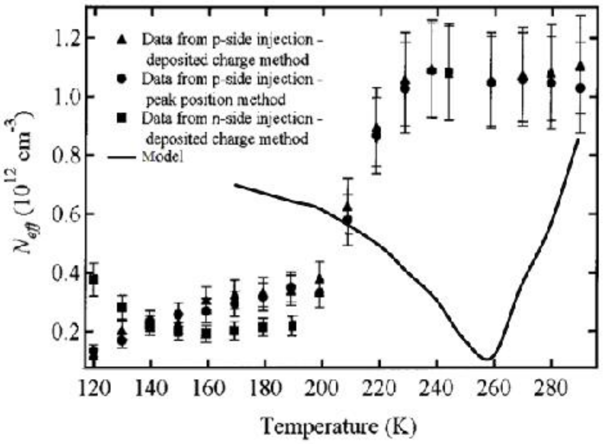
[1] Primary Knock on Atom
[2] Interstitial
[3] Vacancy



شکل۱ : پیش بینی مدل شاکلی رید هال و تبادل باری در غلظت مؤثر بخشنده‌ها و پذیرنده‌ها.

بررسی اثرات دما بر روی سطح مقطع‌های تبادل باری

تغییرات دما و اثرات آنها بر روی غلظت مؤثر مسئله مهم دیگری می‌باشد. اگر در حین تغییرات دما فقط پارامترهای مربوط به نیمه‌رسانا اعم از تحرک پذیری، انرژی ممنوعه، سرعت گرمایی، غلظت ذاتی حامل‌ها و نهایتاً احتمال اشغال ترازها تغییر کند نتایج بدست آمده تفاوت فاحشی با نتایج تجربی [۸] دارد. در شبیه‌سازی این نمودار و نتایج بدست آمده تمامی سطح مقطع‌ها یکسان و برابر با مقدار آنها در دمای ۳۰۰ K ($۱۰^{-۱۵}$ (cm^{-2})) در نظر گرفته شده است.



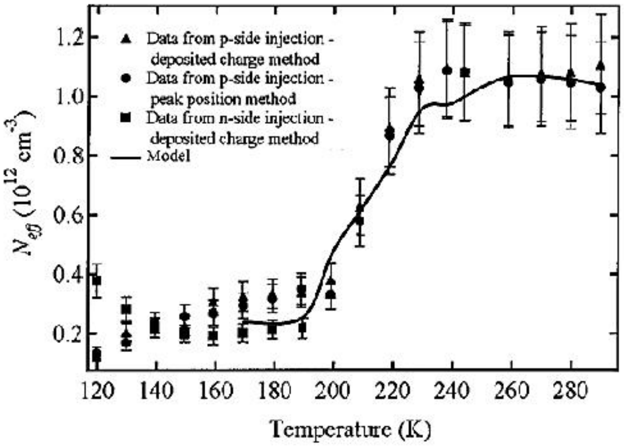
شکل۲ : مقایسه‌ی تجربی و شبیه‌سازی تغییرات دمایی غلظت مؤثر با در نظر گرفتن سطح مقطع یکسان (اطلاعات تجربی در منبع [۸] یافت می‌شود).

در این مورد اولین گزینه برای تغییر دادن، سطح مقطع تبادل باری بین ترازهاست، یا به عبارت دیگر سطح مقطع‌ها باید نسبت به دما حساس باشند. ترازهای ناراستی‌ها را به ترتیب از باند رسانش شماره گذاری کرده و تبادل با بین هر کدام را مشخص می‌کنیم. همانند دمای ۳۰۰ K باید برای هر دمایی با توجه به آهنگ تولید بار منفی و ضریب چگالی جریان مربوط به همان دما بهینه‌سازی صورت گیرد و میزان هر سطح مقطع مؤثر یادداشت شود. مقدار غلظت مؤثر را در هر دما با توجه به نمودار تجربی ۸.۵ بدست آورده و با شبیه‌سازی های صورت گرفته برای ناراستی‌های نقطه‌ای و خوشه‌ای به همراه مقدار تجربی ضریب آلفا می‌توان آهنگ تولید بار منفی ناراستی‌های خوشه‌ای را محاسبه نمود. نهایتاً با محاسبه‌های مربوط به مدل تبادل بار، مقدار بهینه‌ی سطح مقطع‌ها بدست می‌آید. تمامی محاسبه‌ها مربوطه به شبیه‌سازی انجام شده با در نظر گرفتن $\eta_{v_2} =$ ۰/۹۶ cm^{-1} انجام گرفته‌اند. جدول ٤.٥ نتایج بدست آمده از تطبیق تابع نمایی ($\sigma_n = a * \exp(bT)$) بر روی سطح مقطع‌های بهینه‌سازی شده می‌باشد. در این معادله ضرایب a و b ثابت و مختص با هر سطح مقطع تبادل بار هستند. اندیس n نیز اشاره بر تبادل الکترون‌ها دارد.

جدول۱ : مقادیر پارامترهای مربوط به تغییرات سطح مقطع تبادل باری

تراز	ضریب a (۱۰$^{-۱۵}$ (cm^{-2}))	ضریب b (K^{-1})
6 → V	$۱/۴۹۶\times ۱۰^{۴}$	$-۲/۳۹۸\times ۱۰^{-۲}$
5 → V	۴/۲۰۶	$-۴/۷۲۲\times ۱۰^{-۳}$
5 → 6	۵/۸۶۳	$-۴/۹۶۷\times ۱۰^{-۴}$
4 → 6	۲/۱۸۱	$-۲/۵۸۱\times ۱۰^{-۳}$
4 → C	$۱/۳۳۷\times ۱۰^{-۴}$	$۲/۸۸۸\times ۱۰^{-۲}$
5 → C	$۵/۶۹۸\times ۱۰^{-۶}$	$۳/۹۷۶\times ۱۰^{-۲}$
3 → C	$۳/۱۵۲\times ۱۰^{-۴}$	$۲/۵۹۲\times ۱۰^{-۲}$
2 → C	$۲/۰۱۱\times ۱۰^{-۹}$	$۶/۹۰۵\times ۱۰^{-۲}$
1 → C	$۳/۸۵۱\times ۱۰^{-۸}$	$۵/۸۸۷\times ۱۰^{-۲}$

باتوجه به اطلاعات جدول ۱ اگر شبیه سازی را تکرار کنیم شکل ۳ حاصل خواهد شد. به خوبی قابل مشاهده است که تطابق بین نتایج تجربی و شبیه سازی وجود دارد.



شکل۳ : مقایسه‌ی تجربی و شبیه‌سازی تغییرات دمایی غلظت مؤثر با در نظر گرفتن سطح مقطع متغیر (اطلاعات تجربی در منبع [۸] یافت می‌شود).

نتیجه گیری

سطح مقطع‌های تبادل بار ناراستی V2 از مهم‌ترین سطح مقطع‌های تبادل باری هستند. زیرا تغییرات چشم‌گیری نسبت به بقیه‌ی سطح مقطع‌ها دارند. همچنین سطح مقطع تبادل بار با باند رسانش یک نمونه از سطح مقطع‌هایی است که با افزایش دما - بر خلاف دو نمونه ذکر شده در بالا – افزایش می‌یابند. همانطور که می‌دانیم در نیمه‌رساناها با افزایش دما، رسانش نیز افزایش می‌یابد. بنابراین منطقی به‌نظر می‌رسد که تبادل الکترون بین تراز ناراستی و باند رسانش نیز افزایش یابد. اهمیت شبیه‌سازی انجام شده این است که توانستیم محدوده‌ی مقعول‌تری برای تغییرات دمایی سطح مقطع‌ها داشته باشیم و همچنین مقادیر اولیه پارامترها را مطابق با نتایج تجربی لحاظ نموده‌ایم.

به کارگیری راه‌های تجربی برای اعتبار سنجی نتایج بدست آمده خود مسئله‌ی مهم دیگری است. به عنوان مثال، اگر آزمایش‌های تغییرات دمایی در شارش‌های مختلف انجام پذیرد، بهتر می‌توان صحت نتایج بدست آمده را مورد بررسی قرار داد. زیرا نتایج تغییرات دمایی در یک شارش (cm^{-2} ۱۰^۱۳× ۶/۲) خاص بدست آمده‌اند و اگر توابع دمایی سطح مقطع‌ها به درستی برآورد شده باشند، باید برای در هر شارش دیگر نیز جواب سازگار با نتایج تجربی بدست آید. اگر صحت محاسبه‌های انجام شده مشخص شود می‌توان به طور قطع بیان نمود که با استفاده از مقادیر بدست آمده، قادر خواهیم بود بدون نیاز به آزمایش‌های تجربی بیشتری، مقادیر غلظت مؤثر با توجه به تغییرات دما را در هر شارشی پیش بینی کنیم که خود راهکار مؤثر در افزایش توانایی تحمل آشکارسازهاست.

مرجع‌ها

[1] G. Lindstroem, E. Fretwurst, G. Kramberger, I. Pintilie, "Toward super radiation tolerant semiconductor detectors for future elementary particle research", Journal of Optoelectronics and advanced materials, vol. 6, pp. 23-38, (2004).

[۲] ش. سرآمد، "بررسی آثار میکروسکوپیک تشعشعات نوترونی بر عملکرد آشکارسازهای سیلیسیمی" ، پایان نامه دکترا، (۱۳۸۰).

[3] W. Shockley, W. Read, "Statistics of the Recombinations of Holes and Electrons" Phys. Rev., Vol.87, No. 5, 835 (1995).

[4] R. Hall. Phys. Rev., Vol.87, 387 (1994).

[5] B. MacEvoy, G. Hall, A. Santocchia, "Cryogenic investigations and modeling of inter-defect charge exchange in silicon particle detectors", Journal of Nuclear Instrument and Methods, vol. B186, pp. 138-143, 2002.

[6] B.C. MacEvoy, "Defect evolution in silicon detector material", Nucl. Instrum. Method, vol. A388, pp. 365-369, 1997.

[7] S. J. Watts, J. Matheson, I. H. Hopkins-Bond, A. Holmes-Siedle, A. Mohammadzadeh, and R. Pace, "A new model for generation-recombination in silicon depletion regions neutron irradiation", IEEE Trans. Nucl. Sci., vol. 43, pp. 2587-2594, Dec. 1996.

[8] B. MacEvoy, A. Santocchia, G. Hall, F. Moscatelli, D. Passeri, G.M. Bilei, "Interdefect Charge Exchange in Silicon Particle Detectors at Cryogenic Temperature", *IEEE Trans. Nucl. Sci*., vol. 49, 2002.

[۹] اس.ام.زی ،"فیزیک و تکنولوژی قطعات نیمه رسانا"، انتشارات دانشگاه امام رضا (ع) ،۱۳۷۵.

[10] M. Ahmed, S. J Watts, J. Matheson, and A. Holmes-Siedle, "Deep-level transient spectroscopy studies of silicon detectors after 24 GeV proton irradiation and 1 MeV neutron irradiation," Journal of Nuclear Instrument and Methods, vol. A457, pp. 588-594, 2001.

[11] B. C. MacEvoy, G. Hall, K. Gill, "Defect evolution in irradiated silicon detector material," Journal of Nuclear Instrument and Methods, vol. A374, pp. 12-26, 1996.

[12] G. Davies, et al. "A model for radiation damage effects in carbon-doped crystalline silicon", Semicond. Sci. Technol. Vol. 2, No. 8, pp. 524. 1987.

[13] K. Gill, G. Hall, B. MacEvoy, "Bulk damage effects in irradiation silicon detectors due to clustered divacancies" , Journal of Applied Physics , vol. 82, 126, 1997.

[14] B. C. MacEvoy, A. Santocchia, G. Hall, "Defect-engineering rad-hard particle detectors: The role of impurities and inter-defect charge exchange," Journal of Physica B, vol. 273-274, pp. 1045-1049, 1999.

[15] S. Saramad, A. Moussavi-Zarandi, "The exchange charge model of clustered defects in bulk damaged silicon detectors", unpublished.

e- Mail address:
elham.hosseini@aut.ac.ir (Hosseini. E)
ssaramad@aut.ac.ir (Saramad. S)

مطالعه مشخصات انتقال الکترونی غیرتعادلی در ترانزیستور اثر میدانی مولکول پیرن

جلیلی، سیف اله[۱و۲]؛ سلیمانی، مریم[۱]

[۱] *دانشکده شیمی، دانشگاه صنعتی خواجه نصیر الدین طوسی، تهران*

[۲] *گروه فیزیک محاسباتی، پژوهشکده علوم نانو، مرکز تحقیقات فیزیک نظری و ریاضیات (IPM)، تهران*

چکیده

در این مطالعه با بکارگیری تابع گرین غیر تعادلی ترکیب شده با نظریه تابعی چگالی مشخصات انتقال الکترونی ترانزیستور اثر میدان مولکول پیرن مدلسازی و بررسی شده‌است. نتایج نشان می‌دهد مشخصات انتقال الکترونی در این اتصال مولکولی به ولتاژ گیت حساس است. علاوه بر این در منحنی‌های جریان–ولتاژ این سیستم رفتار قابل توجه مقاومت دیفرانسیلی منفی مشاهده می‌شود. برای توضیح پدیده های ذکر شده، طیف عبور و هامیلتونی خودسازگار تصویر شده مولکولی فراهم شده‌اند. به علاوه محاسبات مقاومت انجام شدند و ما امکان ساخت گیت منطقی با استفاده از مولکول پیرن را پیشنهاد دادیم. نتایج این بررسی در توسعه ترانزیستورهای اثر میدان مبتنی بر مولکول و گیت های منطقی کاربرد دارد.

Non-equilibrium electronic transport properties in pyrene based field-effect transistor

Seifollah, Jalili[1,2]; Soleimani, Maryam[1]

[1] *Department of Chemistry, K. N. Toosi University of Technology, Tehran,*
[2] *Computational Physical Sciences Research Laboratory, School of Nano-Science, Institute for Research in Fundamental Sciences (IPM), Tehran, Iran*

Abstract

By applying none-equilibrium Green's functions in combination with density-functional theory, we investigate pyrene based field effect transistor. The results show that electronic transport properties in this device, is sensitive to gate voltage. Moreover, a negative differential resistance (NDR) behavior is observed in the gated I–V curves. Molecular projected self-consistent Hamiltonian (MPSH) and the transmission spectra are provided to explain these features. In addition, resistance calculations are performed, and we proposed the possibility of building different logic gates using pyrene molecule as units in nanoscale devices. Our results have implications for developing high-performance molecule based field effect transistor and logic gates.

PACS No. 82

مقدمه

با پیشرفت فناوری نانو، الکترونیک مولکولی توجه ویژه‌ای را به خود معطوف کرده‌است. مزیت اصلی الکترونیک مولکولی، بهره‌گیری از ساختار الکترونی متنوع و تنظیم پذیر مولکول‌های ارگانیک در دستیابی به مشخصات انتقال الکترونی مطلوب است. در دهه اخیر تلاش‌های موفقیت آمیز بسیاری برای ساخت سیستم‌های دو الکترودی مبتنی بر مولکول انجام شده‌است که بر اساس آنها انواع دیودها و حافظه‌ها ساخته‌شده‌است[۱]. اما هنوز ساخت سیستم‌های سه الکترودی و ترانزیستورهای اثر میدان که در آنها الکترود گیت به الکترود منبع و چاه اضافه می‌شود، در حد آزمایشگاهی قابل اجرا است. به طور کلی در میان همه ادوات الکترونی، ترانزیستورهای اثر میدان Field Effect Transistor

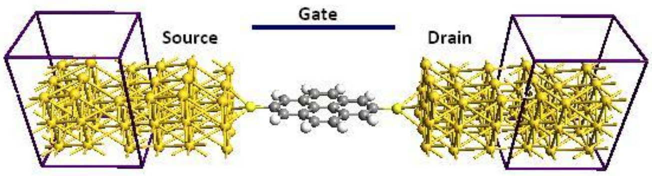
(FET)، به عنوان عامل اساسی در عملکرد مناسب مدارهای یکپارچه به شمار می‌روند[۲]. متناظر با اندازه گیری‌های تجربی مدلسازی های مبتنی بر تئوری لانداور که هدایت همدوس الکترونی را در ترم‌های مسئله پراکندگی کوانتومی بیان می کند به خوبی توانسته‌است چالش‌های فیزیکی و الکتریکی ادوات مولکولی را بررسی کند و یا ساختار مطلوب را پیشنهاد دهد[۳]. امروزه روش‌های محاسباتی مبتنی برتابع گرین غیر تعادلی non-equilibrium Green's function(NEGF)، ترکیب شده با نظریه تابعی چگالی Density Functional Theory (DFT) با توافق خوبی که با نتایج تجربی نشان داده‌است، به طور گسترده‌ای در مطالعات مربوط به اتصالات مولکولی به کار برده می‌شود. این روش به خوبی توانسته است انتقال الکترونی را در شرایط باز و غیر تعادلی توصیف کند[۵و۴]. در این مطالعه، با استفاده از روش-های ذکر شده، مدلسازی یک ترانزیستور مولکولی اثر میدان مناسب انجام شده‌است که در آن، پیرن به عنوان یک مولکول مزدوج با ویژگی‌های منحصر زیادی به عنوان پل مولکولی ترانزیستور اثر میدان انتخاب شده‌است. نتایج نشان می‌دهد مشخصات انتقال الکترونی در این اتصال مولکولی به ولتاژ گیت حساس است. علاوه بر این در منحنی‌های جریان–ولتاژ این سیستم رفتار قابل توجه مقاومت دیفرانسیلی منفی مشاهده می‌شود. برای توضیح پدیده‌های ذکر شده، طیف عبور و هامیلتونی خودسازگار تصویر شده مولکولی فراهم شده است. به علاوه محاسبات مقاومت انجام شده‌است و امکان ساخت گیت منطقی با استفاده از مولکول پیرن پیشنهاد داده شده‌است.

روش‌های محاسباتی

در شکل ۱، ترانزیستور اثر میدان مولکولی مورد مطالعه نشان داده-شده است. مولکول پیرن با اتم‌های انتهایی گوگرد به دو الکترود طلا،(۱۱۱)Au نیمه بینهایت وصل شده است. بهینه‌سازی ساختار مورد نظر تا زمانی که همه نیروهای باقیمانده بر روی هر اتم کوچکتر از ۰/۰۵ eV/Å شود ادامه داشته‌است. .لازم به ذکر است سیستم به سه منطقه تقسیم می‌شود: الکترود منبع، الکترود چاه و ناحیه پراکندگی. سرانجام با اضافه کردن یک گیت فلزی و دی-الکتریک بر بالای مولکول پیرن، ترانزیستور مورد نظر طراحی می-شود. محاسبات مشخصات انتقال الکترونی با استفاده از نرم افزار کوانتومی Atomistix ToolKit مبتنی بر DFT–NEGF انجام شده‌است[۶]. مشخصات جریان–ولتاژ با استفاده از فرمول لانداور–بوتیکر بدست می‌آید[۸و۷]:

$$I(V_b) = G_0 \int_{\mu_L}^{\mu_R} [f(E-\mu_L) - f(E-\mu_R)] T(E,V_b)dE \quad (۱)$$

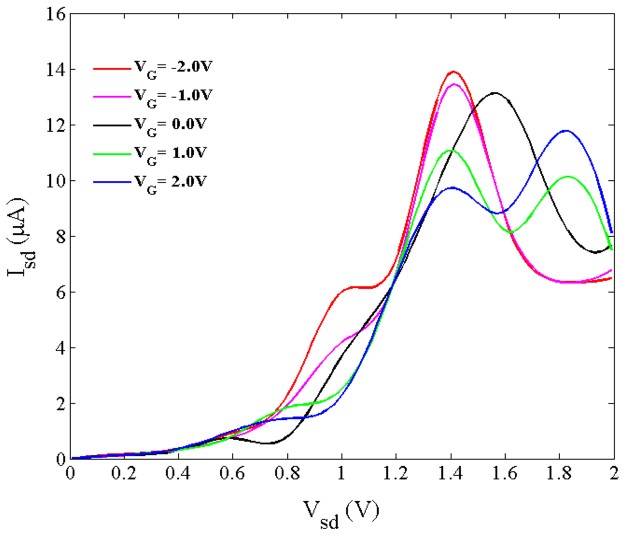
که در آن G_0 هدایت کوانتومی، f تابع توزیع فرمی–دیراک، $T(E,V_b)$ احتمال عبور الکترونها، μ_R و μ_L پتانسیل الکتروشیمیایی الکترودهای منبع و چاه و $[\mu_R(V_b), \mu_L(V_b)]$ پنجره انتگرالگیری است. لازم به ذکر است هنوز در معادله فوق اثر گیت اعمال نشده‌است.



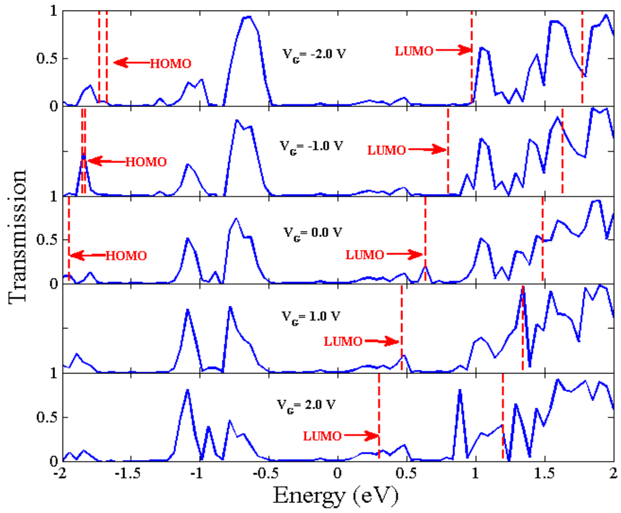
شکل۱: ساختار ترانزیستور اثر میدان مولکول پیرن. گیت در حدود ۱ nm بالای مولکول قرار دارد و دی الکتریک در بین آنها فرض شده است.

بحث و نتیجه‌گیری

در شکل۲، منحنی جریان–ولتاژ ترانزیستور اثر میدان مولکول پیرن نمایش داده شده‌است. نتایج نشان می‌دهد منحنی‌های جریان–ولتاژ این سیستم به ولتاژ گیت حساس هستند. همچنین رفتار مقاومت دیفرانسیلی منفی در ولتاژهای مختلف دیده می‌شود. این رفتار نشان می‌دهد که با افزایش ولتاژ جریان کاهش یافته است. همچنین در شکل۳، طیف عبور نشان می‌دهد حالت‌های انرژی خالی، اصلی‌ترین کانال‌های انتقال الکترون‌ها در این سیستم هستند. بررسی بیشتر نشان می‌دهد، الکترود گیت موقعیت و ارتفاع پیکهای انتقال را تغییر داده و در نتیجه آن درجه جفت شدگی اوربیتال‌های مولکولی و حالت‌های الکترود منبع و چاه تغییر کرده‌است. در این مورد، محاسبات مقاومت نشان می‌دهد این سیستم به عنوان یک گیت منطقی عمل می کند.



شکل۲: جریان I_{sd} به عنوان تابعی از ولتاژ منبع و چاه در ولتاژهای گیت مختلف V_G= −۲/۰، −۱/۰، ۰/۰، ۱/۰ و ۲/۰ V.



شکل۳: طیف عبور در V_{sd}=۰/۰ V (ولتاژ منبع و چاه)، در ولتاژهای گیت مختلف. خطوط قرمز عمودی موقعیت اوربیتال‌های مولکولی را نشان می‌دهند. سطح فرمی (E_f) صفر در نظر گرفته شده است.

نتیجه‌گیری

در این مطالعه با بکارگیری تابع گرین غیر تعادلی ترکیب شده با نظریه تابعی چگالی، مشخصات انتقال الکترونی ترانزیستور اثر میدان مولکول پیرن مدلسازی و بررسی شده‌است. نتایج نشان می‌دهد، ترانزیستور مورد بررسی حساس به ولتاژ گیت بوده و مشخصات انتقالی مهمی در نتیجه آن وجود دارد. همچنین این سیستم می‌تواند به عنوان گیت منطقی عمل کند.

نتایج این تحقیق راهی برای توسعه نانوالکترونیک مبتنی بر ترانزیستورهای اثر میدان مولکولی فراهم می‌آورد.

مرجع‌ها

[۱] S, Jalili; H, Ra fi i-Tabar; "Electronic conductance through organic nanowires"; Phys. Rev. B **71**, No. 165410 (2005).

[۲] Song**,** H; Kim, Y; Jang, Y. H; Jeong, H; Reed, M. A; Lee, T; "Observation of molecular orbital gating"; Nature**.** 462**,** **(**2009**)** 1039.

[۳] S, Datta; "Electronic Transport in Mesoscopic Systems"; Cambridge University Press: Cambridge, U.K., 1995.

[۴] K, Stokbro; J, Taylor; M, Brandbyge; "Do Aviram-Ratner diodes rectify?"; J. Am. Chem. Soc. **125**, (2003) 3674 – 3675.

[۵] M, Paulsson; T, Frederiksen; M, Brandbyge; "Inelastic Transport through Molecules: Comparing First-Principles Calculations to Experiments"; Nano Lett. **6**, (2006) 258 –262.

[۶] Atomistix ToolKit version 11.2.2.; QuantumWise A/S (www. quantumwise.com).

[۷] M, Büttiker; Y, Imry; R, Landauer; S, Pinhas; "Generalized many-channel conductance formula with application to small rings"; Phys. Rev. B **31** (1985) 6207.

[۸] M, Büttiker; "Absence of backscattering in the quantum Hall effect in multiprobe conductors"; Phys. Rev. B **38** **(**1988) 9375.

معرفی توابع نمایی سوپر عملگرهای لیند بلد

جعفری‌باراز، صمد[۱] ؛ فیضی، اسفندیار[۲]

[۱]*دانشکده علوم پایه دانشگاه بناب ، دانشگاه بناب، بناب*

[۲]*گروه فیزیک، دانشگاه شهید مدنی آذربایجان، تبریز*

چکیده

در این مقاله برای معرفی توابع نمایی سوپرعملگرهای لیند بلد، معادله تحول زمانی سیستم کاواک اتلافی QED شامل یک اتم دوترازه بررسی .شده است.

Introducing the Lindblad Superoperator exponential functions

JafariBaraz, Samad[1]; faizi, Esfandyar[2]

[1] *Department of Physics, University of Bonab, Bonab,*
[2] *Department of Physics, AZerbayjan Shahid Madani University, Tabriz*

Abstract

In this paper for introducing the Lindblad Superoperator exponential functions, the master equation of dissipative cavity QED system which consists a two-level atom was investigated.

PACS No. 02

مقدمه

در مکانیک کوانتومی ماتریس چگالی یک سیستم، حالت‌های کوانتومی آن سیستم را توصیف می‌کند و کار کردن با آن به جای تابع، موج بهتر است. همچنین محاسبه تحول زمانی سیستم و ماتریس چگالی سیستم در زمان‌های دیگر برای توصیف سیستم در سایر زمان‌ها از اهمیت زیادی برخوردار است. معادله تحول زمانی، دینامیک تحول سیستم را توصیف می‌کند. حل معادلات تحول زمانی سیستم منجر به ظهور معادلات لیند بلد می‌شود.

بحث

برای بررسی دینامیک تحول یک سیستم، معادله تحول زمانی (master equation) را برای سیستم می‌نویسیم. معادله تحول زمانی یک سیستم کوانتومی شامل یک کاواک که دارای یک اتم دوترازه می‌باشد، در تصویر اندرکنش با رابطه زیر داده می‌شود.

$$\frac{d\rho(t)}{dt} = -i[V,\rho(t)] + \mathcal{D}\rho(t) \qquad (۱)$$

که در آن سوپر عملگرهای $\mathcal{D}$اتلاف در کاواک را نشان می‌دهد. $\rho(t)$ ماتریس چگالی سیستم می‌باشد. سوپر عملگر $\mathcal{D}$ به شکل زیر نوشته می‌شود.

$$\mathcal{D}. = k(2a\,.\,a^{\dagger} - a^{\dagger}a\,. - .\,a^{\dagger}a) \qquad (۲)$$

که در آن k ثابت اتلاف (فروپاشی) کاواک است.

سوپر عملگرهای $\mathcal{M}$ ، $\mathcal{L}$ و$\mathcal{R}$ را به شکل زیر تعریف می‌کنیم:

$$\begin{cases} \mathcal{M}\rho = (a\,.\,a^{\dagger})\rho = a\rho a^{\dagger} \\ \mathcal{L}\rho = (.\,a^{\dagger}a)\rho = \rho a^{\dagger}a \\ \mathcal{R}\rho = (a^{\dagger}a\,.)\rho = a^{\dagger}a\rho \end{cases} \qquad (۳)$$

سوپر عملگرهای$(a.)$، $(.a)$، $(a^{\dagger}.)$ و $(.a^{\dagger})$،عمل عملگرهای خلق و فنا را بر روی یک عملگر نشان می‌دهد.

$$\begin{cases} (a\,.)o = ao \\ (.\,a)o = oa \\ (a^{\dagger}.)o = a^{\dagger}o \\ (.\,a^{\dagger})o = oa^{\dagger} \end{cases} \qquad (۴)$$

سوپر عملگرهای $\mathcal{M}$، $\mathcal{L}$ و $\mathcal{R}$ روابط جابجایی زیر را دارند.

$$\begin{aligned} &[\mathcal{M},\mathcal{L}] = [\mathcal{M},\mathcal{R}] = \mathcal{M} \\ &[\mathcal{R},\mathcal{L}] = 0, \\ &[\mathcal{M},\mathcal{R}+\mathcal{L}] = 2\mathcal{M} \end{aligned} \qquad (۵)$$

با در نظر گرفتن رابطه‌های (۳) سوپر عملگر $\mathcal{D}$ برای کاواک بدین صورت نوشته می‌شود.

$$\mathcal{D} = k(2\mathcal{M} - \mathcal{R} - \mathcal{L}) \qquad (۶)$$

با توجه به روابط بالا، معادله تحول زمانی دینامیک سیستم به شکل زیر نوشته می‌شود:

$$\frac{d\rho(t)}{dt} = -i[V,\rho(t)] + k(2\mathcal{M} - \mathcal{R} - \mathcal{L})\rho(t), \qquad (۷)$$

برای سیستم کوانتومی یک اتم دو ترازی (با تراز پایه $|g\rangle$ و تراز برانگیخته $|e\rangle$) در کاواک اتلافی می‌توانیم ماتریس چگالی سیستم را به شکل زیر بیان کنیم:

$$\rho(t) = \begin{pmatrix} \rho_{ee}(t) & \rho_{eg}(t) \\ \rho_{ge}(t) & \rho_{gg}(t) \end{pmatrix} = \rho_{ee}(t)|e\rangle\langle e| + \rho_{eg}(t)|e\rangle\langle g| + \rho_{ge}(t)|g\rangle\langle e| + \rho_{gg}(t)|g\rangle\langle g| \qquad (۸)$$

که در آن:

$$\rho_{ij} = \langle i|\rho|j\rangle ، \rho_{ji} = \rho_{ij}^{\dagger} ، i,j = e,g, \qquad (۹)$$

پس برای سیستم در لحظه $t = 0$ داریم:

$$\rho(0) = \rho_{ee}(0)|e\rangle\langle e| + \rho_{eg}(0)|e\rangle\langle g| + \rho_{ge}(0)|g\rangle\langle e| + \rho_{gg}(0)|g\rangle\langle g|, \qquad (۱۰)$$

تحول زمانی همه عناصر ماترس چگالی سیستم را بدست می‌آوریم. داریم:

$$\begin{cases} \langle e|e\rangle = \langle g|g\rangle = 1 \\ \langle e|g\rangle = \langle g|e\rangle = 0 \end{cases} \qquad (۱۱)$$

با توجه به روابط بالا برای تحول زمانی $\rho_{ee}(t)$ می‌توانیم بنویسیم:

$$\frac{d\rho_{ee}(t)}{dt} = \langle e|\{-i[V,\rho(t)] + \mathcal{D}\rho(t)\}|e\rangle = \{-i\Omega(\mathcal{R} - \mathcal{L}) + k(2\mathcal{M} - \mathcal{R} - \mathcal{L})\}\rho_{ee}(t) \qquad (۱۲)$$

با انجام روش مشابه داریم:

$$\frac{d\rho_{ee}(t)}{dt} = \{-i\Omega(\mathcal{R} - \mathcal{L}) + k(2\mathcal{M} - \mathcal{R} - \mathcal{L})\}\rho_{ee}(t) = \mathcal{L}_{ee}\rho_{ee}(t),$$
$$\frac{d\rho_{gg}(t)}{dt} = \{i\Omega(\mathcal{R} - \mathcal{L}) + k(2\mathcal{M} - \mathcal{R} - \mathcal{L})\}\rho_{gg}(t) = \mathcal{L}_{gg}\rho_{gg}(t),$$
$$\frac{d\rho_{eg}(t)}{dt} = \{-i\Omega(\mathcal{R} + \mathcal{L} + 1) + k(2\mathcal{M} - \mathcal{R} - \mathcal{L})\}\rho_{eg}(t) = \mathcal{L}_{eg}\rho_{eg}(t),$$
$$\rho_{ge}(t) = \rho_{eg}^{\dagger}(t), \qquad (۱۳)$$

که در آن $\mathcal{L}_{ee}$، $\mathcal{L}_{gg}$ و $\mathcal{L}_{eg}$ سوپر عملگرهای لیندبلد (*lindblad*) می‌باشند.

با در نظر گرفتن روابط جابجایی (۵) و فرمول بیکر –کمبل– هاسدروف بسط نمایی سوپر عملگرهای لیندبلد را بررسی می‌کنیم.

معادله بیکر–کمبل– هاسدروف به شکل زیر است:

$$e^{x}e^{y} = e^{u} \qquad (۱۴)$$
$$u = x + y + \frac{1}{2}[x,y] + \frac{1}{12}([x,[x,y]] - [y,[x,y]]) - \frac{1}{24}[x,[y,[y,x]]] + \frac{1}{720}([[[[x,y],y],y],y] + [[[[x,y],x],x],x]) + \frac{1}{360}([[[[x,y],y],y],x] + [[[[y,x],x],x],y]) + \frac{1}{120}([[[[x,y],x],y],x] + [[[[y,x],y],x],y]) + \cdots$$

بنابراین:

$$e^{\mathcal{L}_{ee}t} = e^{(e^{2kt}-1)\mathcal{M}} e^{-(i\Omega+k)t\mathcal{R}} e^{(i\Omega-k)t\mathcal{L}} \Rightarrow \mathcal{L}_{ee} = ? \qquad (۱۵)$$

طرف دوم معادله را با استفاده از فرمول بیکر–کمبل– هاسدروف (۱۴)، بسط می‌دهیم.

$$W = e^{(e^{2kt}-1)\mathcal{M}} e^{-(i\Omega+k)t\mathcal{R}} e^{(i\Omega-k)t\mathcal{L}} = e^{(e^{2kt}-1)\mathcal{M}} Z$$
$$Z = e^{-(i\Omega+k)t\mathcal{R}} e^{(i\Omega-k)t\mathcal{L}} = ?$$
$$x = -(i\Omega + k)t\mathcal{R}$$
$$y = (i\Omega - k)t\mathcal{L} \qquad (۱۶)$$

می‌نویسیم:

$$x + y = -i\Omega t(\mathcal{R} - \mathcal{L}) - kt(\mathcal{R} + \mathcal{L})$$
$$[x,y] = [-(i\Omega + k)t\mathcal{R}, (i\Omega - k)t\mathcal{L}] = 0$$
$$Z = e^{-i\Omega t(\mathcal{R}-\mathcal{L}) - kt(\mathcal{R}+\mathcal{L})} \qquad (۱۷)$$

با توجه به (۱۷) جملات بعدی جابجایی صفر می‌شود.

$$W = e^{(e^{2kt}-1)\mathcal{M}} Z = e^{(e^{2kt}-1)\mathcal{M}} e^{-i\Omega t(\mathcal{R}-\mathcal{L}) - kt(\mathcal{R}+\mathcal{L})}$$
$$X = (e^{2kt} - 1)\mathcal{M}$$
$$Y = -i\Omega t(\mathcal{R} - \mathcal{L}) - kt(\mathcal{R} + \mathcal{L})$$
$$X + Y = (e^{2kt} - 1)\mathcal{M} + -i\Omega t(\mathcal{R} - \mathcal{L}) - kt(\mathcal{R} + \mathcal{L}) \qquad (۱۸)$$

با در نظر گرفتن روابط جابجایی می‌توانیم بنویسیم:

$$[X,Y] = [(e^{2kt} - 1)\mathcal{M}, -i\Omega t(\mathcal{R} - \mathcal{L}) - kt(\mathcal{R} + \mathcal{L})] = -2kt(e^{2kt} - 1)\mathcal{M}$$
$$[Y,X] = 2kt(e^{2kt} - 1)\mathcal{M} \qquad (۱۹)$$

با توجه به (۱۷) بقیه جملات جابجایی‌ها صفر می‌شوند. داریم:

$$[X,[X,Y]]=0$$
$$[Y,[X,Y]]=-4k^2t^2(e^{2kt}-1)\mathcal{M}$$
$$[[X,Y],X]=0$$
$$[[X,Y],Y]=4k^2t^2(e^{2kt}-1)\mathcal{M}$$
$$\Big[X,\big[Y,[X,Y]\big]\Big]=[\ldots\mathcal{M},\ldots\mathcal{M}]=0 \qquad (۲۰)$$
$$[[X,Y],Y]=4k^2t^2(e^{2kt}-1)\mathcal{M}$$
$$\big[[[X,Y],Y],Y\big]=-8k^3t^3(e^{2kt}-1)\mathcal{M}$$
$$\Big[\big[[[X,Y],Y],Y\big],Y\Big]=16k^4t^4(e^{2kt}-1)\mathcal{M}$$
$$\Big[X,\big[Y,[Y,X]\big]\Big]=0$$

با توجه به روابط بالا بقیه جملات جابجایی‌ها صفر می‌شوند.

$$w=e^{X}$$
$$\mathcal{U}=(e^{2kt}-1)\mathcal{M}-i\Omega t(\mathcal{R}-\mathcal{L})$$
$$-kt(\mathcal{R}+\mathcal{L})-kt(e^{2kt}-1)\mathcal{M}$$
$$+\frac{1}{3}k^2t^2(e^{2kt}-1)\mathcal{M}$$
$$-\frac{1}{48}k^4t^4(e^{2kt}-1)\mathcal{M}$$
$$=-i\Omega(\mathcal{R}-\mathcal{L})t-k(\mathcal{R}+\mathcal{L})t$$
$$+(e^{2kt}-1)\left(1-kt+\frac{1}{3}k^2t^2-\frac{1}{48}k^4t^4\right)\mathcal{M} \qquad (۲۱)$$

با توجه به رابطه بالا و بسط تیلور تابع نمایی e^x یعنی رابطه:

$$e^x=\sum_n\frac{x^n}{n!}=1+x+\frac{x^2}{2!}+\frac{x^3}{3!}+\cdots \qquad (۲۲)$$

می‌توان نوشت:

$$(e^{2kt}-1)\left(1-kt+\frac{1}{3}k^2t^2-\frac{1}{48}k^4t^4\right)=2kt \qquad (۲۳)$$

چون می‌توانیم بنویسیم:

$$x=2kt$$
$$\frac{x}{e^x-1}=A+Bx+Cx^2+Dx^3+Ex^4+\cdots \qquad (۲۴)$$

با توجه به بسط e^x ورابطه بالا می‌نویسیم:

$$x=Ax+\left(\frac{A}{2}+B\right)x^2$$
$$+\left(\frac{A}{6}+\frac{B}{2}+C\right)x^3$$
$$+\left(\frac{A}{24}+\frac{B}{6}+\frac{C}{2}+D\right)x^4$$
$$+\left(\frac{A}{120}+\frac{B}{24}+\frac{C}{6}+\frac{D}{2}+E\right)x^5+\cdots$$

$$\Rightarrow\begin{cases}A=1\\ \frac{A}{2}+B=0\\ \frac{A}{6}+\frac{B}{2}+C=0\\ \frac{A}{24}+\frac{B}{6}+\frac{C}{2}+D=0\\ \frac{A}{120}+\frac{B}{24}+\frac{C}{6}+\frac{D}{2}+E=0\end{cases}\Rightarrow\begin{cases}A=1\\ B=-\frac{1}{2}\\ C=\frac{1}{12}\\ D=0\\ E=-\frac{1}{720}\end{cases} \qquad (۲۵)$$

پس می‌توانیم بنویسیم:

$$\frac{x}{e^x-1}=1-\frac{1}{2}x+\frac{1}{12}x^2-\frac{1}{720}x^4+\cdots \qquad (۲۶)$$

در نتیجه:

$$(e^{2kt}-1)\left(1-kt+\frac{1}{3}k^2t^2-\frac{1}{48}k^4t^4\right)=2kt \qquad (۲۷)$$

بنابراین:

$$\mathcal{L}_{ee}=-i\Omega(\mathcal{R}-\mathcal{L})+k(2\mathcal{M}-\mathcal{R}-\mathcal{L}) \qquad (۲۸)$$

با اعمال روش مشابه داریم:

$$e^{\mathcal{L}_{gg}t}=e^{(e^{2kt}-1)\mathcal{M}}e^{(i\Omega-k)t\mathcal{R}}e^{-(i\Omega+k)t\mathcal{L}}\Rightarrow\mathcal{L}_{gg}=?$$
$$\mathcal{L}_{gg}=-i\Omega(\mathcal{R}-\mathcal{L})+k(2\mathcal{M}-\mathcal{R}-\mathcal{L}) \qquad (۲۹)$$

همچنین:

$$e^{\mathcal{L}_{eg}t}=e^{-i\Omega t}e^{[e^{2(i\Omega+k)t}-1]\mathcal{M}k/(i\Omega+k)}e^{-(i\Omega+k)t\mathcal{R}}e^{-(i\Omega+k)t\mathcal{L}}$$
$$\Rightarrow\mathcal{L}_{eg}=?$$
$$\mathcal{L}_{eg}=-i\Omega(1+\mathcal{R}+\mathcal{L})+k(2\mathcal{M}-\mathcal{R}-\mathcal{L}) \qquad (۳۰)$$

به همین ترتیب:

$$\mathcal{L}_{ge}=\mathcal{L}_{eg}{}^{\dagger} \qquad (۳۱)$$

بنابراین داریم:

$$e^{\mathcal{L}_{ee}t}=e^{(e^{2kt}-1)\mathcal{M}}e^{-(i\Omega+k)t\mathcal{R}}e^{(i\Omega-k)t\mathcal{L}},$$
$$e^{\mathcal{L}_{gg}t}=e^{(e^{2kt}-1)\mathcal{M}}e^{(i\Omega-k)t\mathcal{R}}e^{-(i\Omega+k)t\mathcal{L}},$$
$$e^{\mathcal{L}_{eg}t}=e^{-i\Omega t}e^{[e^{2(i\Omega+k)t}-1]\mathcal{M}k/(i\Omega+k)}e^{-(i\Omega+k)t\mathcal{R}}e^{-(i\Omega+k)t\mathcal{L}}, \qquad (۳۲)$$

که کار کردن با بسط نمایی این معادلات راحت تر است.

نتیجه گیری

در این تحقیق ما سوپر عملگرهای (معادلات) لیندبلد را به شکل:

$$\mathcal{L}_{ee} = -i\Omega(\mathcal{R} - \mathcal{L}) + k(2\mathcal{M} - \mathcal{R} - \mathcal{L}),$$
$$\mathcal{L}_{gg} = i\Omega(\mathcal{R} - \mathcal{L}) + k(2\mathcal{M} - \mathcal{R} - \mathcal{L}),$$
$$\mathcal{L}_{eg} = -i\Omega(\mathcal{R} + \mathcal{L} + 1) + k(2\mathcal{M} - \mathcal{R} - \mathcal{L}),$$

بدست آوردیم. همچنین نشان دادیم که بسط نمایی سوپرعملگرهای لیند بلد به شکل:

$$e^{\mathcal{L}_{ee}t} = e^{(e^{2kt}-1)\mathcal{M}} e^{-(i\Omega+k)t\mathcal{R}} e^{(i\Omega-k)t\mathcal{L}},$$
$$e^{\mathcal{L}_{gg}t} = e^{(e^{2kt}-1)\mathcal{M}} e^{(i\Omega-k)t\mathcal{R}} e^{-(i\Omega+k)t\mathcal{L}},$$
$$e^{\mathcal{L}_{eg}t} = e^{-i\Omega t} e^{[e^{2(i\Omega+k)t}-1]\mathcal{M}k/(i\Omega+k)} e^{-(i\Omega+k)t\mathcal{R}} e^{-(i\Omega+k)t\mathcal{L}},$$

به دست می‌آیند.

مرجع‌ها

[1] F. Casas, A.Murua, “*An efficient algorithm for computing the Baker–Campbell–Hausdorff series and some of its applications*”, J. of Math. Phys. 50, 033513 (2009).

[2] J. S. Zhang, A. X. Chen, and M. Abdel-Aty, “*Two atoms in dissipative cavities in dispersive limit: entanglement sudden death and long-lived entanglement*”, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 43 025501 (2010).

تشکر و قدردانی

از همراهی‌های همسرم خانم دکتر زرنشان و زحمات استاد راهنمای گرامی آقای دکتر فیضی و استاد ارجمند آقای دکتر فیروزنیا از دانشگاه شهید مدنی آذربایجان تشکر می‌کنم.

تاثیر متقابل بروز پدیده موج چگالی اسپینی و شکل گیری نانو ساختارها در برخی ترکیبات بین فلزی گادلینیم

نگین کمالی سروستانی[۱]، سید احمد کتابی[۱]، احمد یزدانی[۲]

[۱] دانشکده فیزیک، دانشگاه دامغان،دامغان، ایران

[۲] دانشکده فیزیک،دانشگاه تربیت مدرس، تهران، ایران

چکیده

پایداری ساختار کریستالی – مغناطیسی به غلظت الکترون آزاد بستگی دارد به‌گونه‌ای که تاثیر متقابل دو ساختار فوق در درصد مشخصی از الکترون‌های آزاد می‌تواند عامل بروز ناپایداری یکی یا هر دوی آنها گردد.یکی از پدیده‌هایی که ناپایداری فوق را می‌تواند بیان نماید، احتمال بروز پدیده موج چگالی اسپینی در ترکیبات بین فلزی ناشی از جابجایی یونهای مغناطیسی است که خود می‌تواند به عنوان یک عامل نهفته در شکل گیری نانو ساختارهای مغناطیسی در چنین ترکیباتی بشمار آید. برای نیل به چنین هدفی اثر تغییر درصد الکترون آزاد را در ترکیب $Gd_2Au_xAl_{(1-x)}$ با کمک نتایج تجربی و برنامه محاسباتی Wien2K بررسی نموده ایم. بررسی پارامتر تقارنی نشان داده است که با عدم تقارن ابر الکترونی از یکسو و از سوی دیگر جابجایی جایگاه یونها که هر دو مبین ایجاد اعواج در شبکه هستند، مواجهیم که این خود زمینه ساز پیش بینی شکل گیری نانو ساختارها در چنین ترکیباتی می باشد.

The interplay of spin density wave and nano structure formation in some Gd-intermetallic compounds

Negin Kamali Sarvestani[1], S. Ahmad Ketabi[1], Ahmad Yazdani[2]

[1] *school of physics, Damghan University, Damghan, Iran*

[2] *Department of Physics, Tarbiat Modares University, Tehran, Iran*

Abstract

Since the stability of magnetic and crystal structure depends on conduction electron concentration, the formation of the spin density wave in intermetallic compound due to the relocation of magnetic ions could be possible. The causes of coexistence both of the nano structure and spin density wave in these compounds are investigated. To achieve this goal, we consider the effect of conduction electron concentration in $Gd_2Au_xAl_{(1-x)}$ by experimental results and Wien2k package. The study of symmetry parameter at certain concentration is illustrated. In this case the lack of electron cloud symmetry and relocation the magnetic ions which both of them indicate the distortion in these compounds can be the cause of this phenomenon.

PACS No. 70, 71

مقدمه

در دهه اخیر ساختار مغناطیسی ترکیباتی از گادلینیم به ویژه $Gd_2Au_xAl_{(1-x)}$ به دلیل بروز خصلت های متعدد[1,2,3,4] که رفتاری غیر عادی با توجه به تقارن و پایداری ساختار الکترونی گادلینیم محسوب می‌شود و هنوز دلیلی برای آن وجود ندارد، مورد

مطالعه قرار گرفته اند.گادلینیم عنصری متقارن، پایدار، دارای پوسته ناکامل $4f^7$ می‌باشد که توسط سپر الکترونی ظرفیت $5d^1\ 6s^2$ از الکترونهای رسانش جدا گردیده است و در نتیجه عنصری سه ظرفیتی ، فاقد هیبریدشدگی و عدم تاثیرپذیری از اثر میدان بلوری می‌باشد و ترکیب بین فلزی آن با عنصر Al و Au نیز فاقد هیبریدشدگی خواهد بود.

برای عنصر گادلینیم ، می‌توان بروز رفتار غیر عادی ترکیبات $Gd_2Au_xAl_{(1-x)}$ را به پدیده ای نو که پارامتر اصلی در آن وجود ناهمسانگردی در ساختار کریستالی که ناشی از حوزه نواری الکترونهای آزاد – ظرفیت زیر دمای نظم می‌باشد ، نسبت داد که به آن پدیده موج چگالی اسپینی گویند[5] . این پدیده نام حالت پایه ای از ماده با انرژی از مرتبه پایین جامدات است که در دماهای پایین و در مواد ناهمسانگرد و کم بعد و یا در فلزاتی با چگالی حالات زیاد در سطح فرمی $N(E_f)$ رخ می‌دهد [6].

نتیجه و بحث:

در مدل موج چگالی اسپینی تنها فرض افزوده شده به مدل ویگنر وجود زمینه غیر صلب در سامانه مورد مطالعه می‌باشد در حالیکه به نظر می‌رسد در بروز این پدیده حضور برهم کنش قوی الکترون – یون که منجر به بدام افتادن الکترون در چاه پتاسیل ناشی از یون می شود، را نباید نادیده گرفت. ضمن اینکه بر این عقیده هستیم که احتمال بروز این پدیده در فلزات سه و چهار ظرفیتی با توجه به چگالی حالات الکترونی بالا بیشتر است که می‌تواند باعث

۱)تغییر طول آزاد میانگین

۲)تغییر طول همبستگی بین یونهای مغناطیسی $R_c = 2K_F R_{ij}$

۳)تغییر فاصله بین یونی

شود. هر چند که جابجایی یون در ساختار کریستالی می‌تواند عامل تغییر فاز ساختاری در عناصر خالص باشد اما در ترکیباتی که مورد نظر ماست، جابجایی یون‌ها در سیستم ناشی از فشار شیمیایی درون سیستمی است که این خود ناشی از وجود درصد بالای الکترون آزاد در سامانه مورد مطالعه ما می‌باشد به‌گونه‌ای که تغییر ساختار کریستالی مشاهده نگردیده است در حالیکه تغییر ثابت‌های شبکه و در نتیجه آن تغییر KF را شاهد هستیم که خود را در تغییر ساختار مغناطیسی (گذار فاز مغناطیسی) قویا نشان می‌دهد. در واقع ما در این مقاله با بالا بردن درصد الکترون آزاد در سامانه متوجه تغییر جایگاه یون‌ها از یکسو و از بین رفتن تقارن ابر الکترونی اطراف بعضی از اتم‌ها از سوی دیگر شدیم که اولی منجر به بروز موج چگالی اسپنی خواهد شد چرا که سامانه مورد مطالعه مغناطیسی است و دومی می‌تواند عامل اساسی دربروز ذاتی خصلت نانو در چنین ترکیباتی باشد.

هر دو ترکیب Gd_2Al و Gd_2Au دارای شبکه مکعب مستطیلی (اورترمبیک) با گروه فضایی 62-pnma می‌باشند و هر دوی آنها دارای سلول اولیه‌ای شامل ۸ اتم مغناطیسی گادلنیم و ٤ اتم غیر مغناطیسی Al و Au هستند. تنها تفاوت این دو ترکیب تفاوت جزیی در ابعاد شبکه، جایگاه اتم‌ها و سهم مشارکت الکترون‌های آزاد است چرا که گادلینیم و آلومنیم سه ظرفیتی و طلا یک ظرفیتی است. با توجه به ساختار بلوری دو ترکیب فوق ، ترکیب $Gd_2Au_xAl_{(1-x)}$ نیز باید دارای ساختار اورترمبیک باشد همچنان که طیف اشعه ایکس تایید کننده چنین مطلبی هست. تغییر ابعاد شبکه (ثوابت شبکه) بر حسب x (غلظت الکترون آزاد) با توجه به تجربه (شکل ۱) به صورت زیر می‌باشد.

$$a(x) = 6.526 - 0.264x + 2.409x^2 - 1.591x^3$$
$$b(x) = 5.370 - 0.504x - 2.997x^2 + 2.072x^3$$
$$c(x) = 9.489 - 0.043x - 1.173x^2 + 0.736x^3$$

با توجه به جایگاه‌های اتمی در شبکه های Gd_2Al و Gd_2Au می توان جایگاه‌های اتمی را در ترکیبات$Gd_2Au_xAl_{(1-x)}$ با توجه غلظت الکترون آزاد بدست آورد. البته در گذار از Gd_2Al به Gd_2Au جایگاه‌های اتمهای GdI و Al و Au چندان تغییر نمی‌کند و تغییر عمده در جایگاه‌های اتم‌های گادلینیم نوع دوم می‌باشد. برای این سری از ترکیبات جایگاه‌های اتمی را به صورت زیر بدست آوردیم:

$$(x,\frac{1}{4},z),(\overline{x},\frac{3}{4},z),(\frac{1}{2}x,\frac{3}{4},\frac{1}{2}+z),(\frac{1}{2}+x,\frac{1}{4},\frac{1}{2}z)$$

که در آن x و z به صورت زیر هستند:

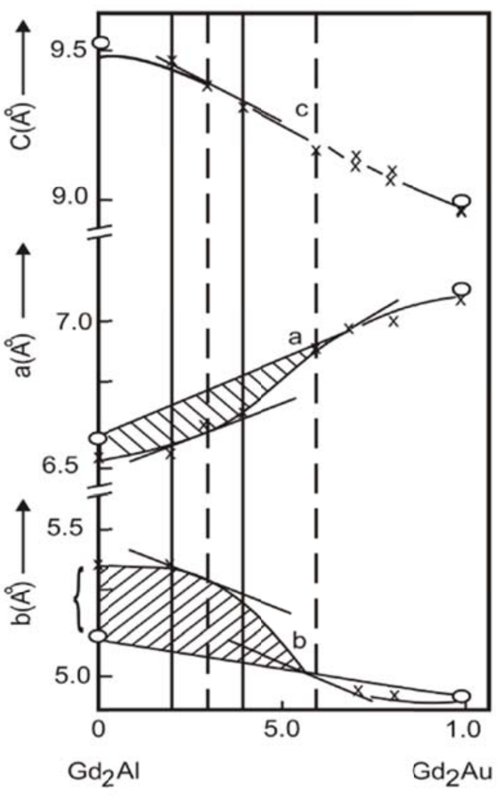
$$GdI : x = 0.84, z = 0.07$$

$$Al : x = 0.26, z = 0.11$$

$$Au : x = 0.26, z = 0.11$$

و تغییرات جایگاه GdII را با فرض خطی بودن به صورت زیر می-باشد:

$$GdII : x = -0.473x + 0.96, z = 0.067x + 0.75$$



شکل ۱: نمودار تغییرات ثوابت شبکه بر حسب غلظت الکترون آزاد

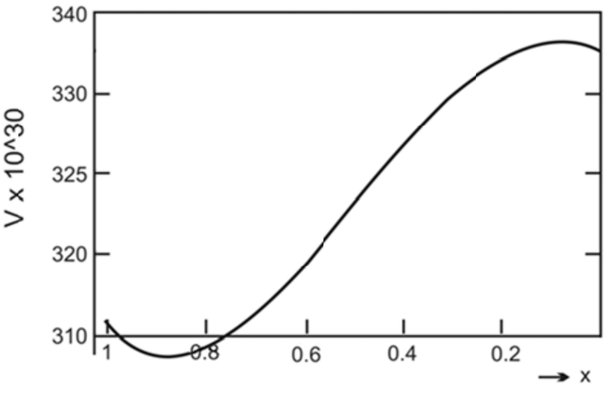
با توجه به شکل درمی‌یابیم که تغییرات پارامتر شبکه از قانون وگارد تبعیت نمی‌کند. بر طبق قانون وگارد، پارامترهای شبکه با افزایش الکترون آزاد به صورت خطی افزایش پیدا می‌کنند. عدم تبعیت از این قانون نشان‌دهنده این است که با افزایش الکترون آزاد، این الکترون‌ها تا اندازه‌ای از حالت آزاد خارج شده‌اند به‌گونه‌ای که اعوجاجی در شبکه ایجاد می‌کنند.از آنجا که جابجایی یون مغناطیس در سامانه‌هایی با درصد بالای الکترون آزاد طبق نظریه اورهایزر مبین شکل‌گیری پدیده موج چگالی اسپینی است، پس احتمال بروز آنرا در ترکیبات خود پیش بینی می‌کنیم.

از طرفی نمودار حجم بر حسب تغییرات غلظت نشان می‌دهد (شکل۲) که با کاهش x (یعنی جانشینی Au به جای Al) حجم سلول اولیه افزایش می‌یابد. می‌دانیم که عوامل موثر در افزایش حجم

۱)اختلاف شعاع یونی

۲)درصد الکترون آزاد

می‌باشند. از آنجا که شعاع یونی Au از Al بزرگتر است، لذا می‌توان نتیجه گرفت که افزایش حجم در این سری ترکیبات تنها به درصد یا به عبارتی غلظت الکترون آزاد وابسته است.



شکل ۲: نمودار تغییرات حجم بر حسب تغییر درصد الکترون آزاد

از سوی دیگر استخراج پارامتر تقارنی که مبین تقارن ابر الکترونی اطراف هر اتم است، تایید کننده وقوع اعوجاج در ترکیبات مورد مطالعه است. با توجه به نتایج بدست آمده، شاهد ناهمسانگردی درون صفحه‌ای هستیم که می‌تواند نشاندهنده احتمال بروز ذاتی نانو(بدون اعمال عوامل خارجی) در چنین ترکیباتی باشد جداول ۱ (الف و ب) و جداول ۲ (الف–ج).

جدول۲: تغییرات جایگاه هندسی یونهای شرکت کننده در ساختار الف) $Gd_2Al_{0.75}Au_{0.25}$ ب) Gd_2Au

$Gd_2Al_{0.75}Au_{0.25}$	x	y	z
GdI	0.787	0.25	0.071
	0.197	0.75	0.929
	0.291	0.25	0.529
	0.709	0.75	0.575
GdII	0.459	0.25	0.777
	0.536	0.75	0.221
	0.970	0.25	0.717
	0.037	0.75	0.280
Al	0.287	0.25	0.104
	0.720	0.75	0.895
	0.790	0.25	0.397
	0.209	0.75	0.602

جدول ۲ الف .

Gd_2Au	x	y	z
GdI	0.847	0.25	0.076
	0.152	0.75	0.923
	0.347	0.25	0.423
	0.652	0.75	0.576
GdII	0.481	0.25	0.821
	0.518	0.75	0.178
	0.981	0.25	0.678
	0.018	0.75	0.321
Au	0.258	0.25	0.105
	0.774	0.75	0.894
	0.758	0.25	0.394
	0.241	0.75	0.605

جدول۲ الف : بررسی پارمتر تقارنی برای انواع یون‌های موجود در ساختار الف) Gd_2Al ب) Gd_2Au ج) $Gd_2Au_{0.25}Al_{0.75}$

Sample	Type	Symmetric parameter	Type	Symmetric parameter
Gd_2Al	Gd1	0.15171	Gd2	0.14689
	Gd3	0.16100	Gd4	0.15609
	Gd5	0.57930	Gd6	0.57944
	Gd7	0.58096	Gd8	0.58109
	Al 1	0.69004	Al2	0.69133
	Al 3	0.68054	Al4	0.68184

جدول ۳ ب

Sample	Type	Symmetric parameter	Type	Symmetric parameter
Gd_2Au	Gd1	0.41488	Gd2	0.41548
	Gd3	0.42274	Gd4	0.42338
	Gd5	0.41427	Gd6	0.41159
	Gd7	0.42148	Gd8	0.41907
	Au 1	0.98258	Au2	0.98327
	Au 3	0.99005	Au4	0.99060

جدول ۳ ج

Sample	Type	Symmetric parameter	Type	Symmetric parameter
$Gd_2Au_{0.25}Al_{0.75}$	Gd1	0.15900	Gd2	0.34021
	Gd3	0.38207	Gd4	0.46796
	Gd5	0.3737	Gd6	0.22196
	Gd7	0.46102	Gd8	0.39388
	Au 1	0.03927	Al 2	0.98561
	Al 3	0.84884	Al4	0.91882

نتیجه‌گیری:

در این سری ترکیبات عامل غالب در ایجاد اعوجاج ساختاری غلظت الکترون آزاد نسبت به اثر اندازه شعاع یونی بوده است به طوریکه منجر به بروز همزمان دو پدیده موج چگالی اسپینی و نانو کلاسترهای مغناطیسی بین نزدیکترین همسایه‌ها گردیده است.

مراجع:

[1] A. Yazdani, J.ST. Gardner, Phys. Stat. Sol. (b), 208 (1998) 465

[2] Helen Gamari-Seale, Journal of magnetism and magnetic materials **20** (1980) 67-70

[3] Sill and J. Biggers, Journal of applied physics **49** (1978) 1500

[4] N.Kmali, A.Yazdani, L. Shahsavari, Journal of Physics: conference series **92**, (2007) 012127

[5] A. W. Overhauser, Phys. Rev. Lett. **4** (1960) 462

[6] G.Gruner, Review of Modern Physics **66**, (1994), 1-24

ویژگی‌های ساختاری و الکترونی ترکیب های LuAuPbوLaAuPb

کریمی ، الهام[۱]؛ نوربخش، زهرا[۱]

[۱]گروه فیزیک دانشگاه اصفهان، خیابان هزارجریب، اصفهان

چکیده

LuAuPbوLaAuPb از مهمترین ترکیب ها در خانواده نیم هاسلرها محسوب می شوند. در این پژوهش با استفاده از روش های محاسباتی ویژگی های ساختاری و الکترونی این دو ترکیب بررسی شده است.نتایج حاصل ازاین محاسبه ها بر اساس نظریه تابعی چگالی و امواج تخت بهبود یافته به همراه اوربینال های موضعی می باشند، که همگی در کد محاسباتی WIEN2k گنجانده شده اند. ثابت شبکه وخواص مغناطیسی این ترکیب بررسی شد برهمکنش اسپین مدار باعث وارونی نوار انرژی در این ترکیب شدکه نشاندهنده فاز رسانای توپولوژی در این ترکیب است. نتیجه های بدست آمده از محاسبه های این پژوهش در سازگاری کاملی با مقادیر تجربی و هم چنین نتایج دیگران می باشد.

The Investigation of Structural and Electronic Properties of LuAuPb and LaAuPb

Karimi, Elham[1]; Nourbakhsh, Zahra[1]

[1] Department of Physics, University of Isfahan, Isfahan,

Abstract

LuAuPb and LaAuPb are considered one of the most important compound in half-Heusler alloy. In this paper, the electronic and structural properties of theret two compound were investigated by using computational methods. The calculated results are based on density functional theory (DFT) and augmented plane wave plus local orbital (APW+LO), which are included in the WIEN2k code. The lattice parameter was computed and magnetic properties of thiscompourd were investigated. Also this compound had a topological sulator phase. The results of this research are in good agreement with experimental data and others results.

PACS No

مقدمه

در سال های اخیر تعداد زیادی از پژوهشگران، مطالعه‌های خود را روی ترکیب‌های هاسلر متمرکز کرده‌اند [۹-۱]. این ترکیب ها که نخستین بار اوایل قرن بیستم توسط هاسلر کشف شدند [۲]، ترکیب‌های سه‌تایی هستند که ویژگی‌های مغناطیسی متفاوتی از خود نشان می‌دهند. این ترکیب‌ها را معمولاً به دو گروه تمام‌هاسلر و نیم‌هاسلر تقسیم‌بندی می‌کنند، که به ترتیب دارای استوکیومتری X_2YZ و XYZ می‌باشند. X اشاره به عنصرهایی هم‌چون Pt, Pd Ni, Co, Cu, Lu دارد، Y عنصرهای واسطه را شامل می‌شود و Z شبه فلزهایی هم‌چون Al, Ga, Sn, Sb,Pbرا دربر می‌گیرد [۳]. ترکیب های LuAuPb و LaAuPb از اعضای خانواده نیم‌هاسلرهاهستند. ساختار بلوری این ترکیب‌ها Clb می باشد که مکعبی است. در واقع این ساختار از زیرساختار FCC تشکیل شده است که عنصر X در مکان(۵/و۵/و۵/) و عنصر Y در مکان (۲۵/و۲۵/و۲۵/) وعنصر Z در مکان (۰،۰،۰) قرار دارد. گروه فضایی این ترکیب‌ها، گروه ۲۱۶ با گروه تقارنی $F\bar{4}3m$ است.

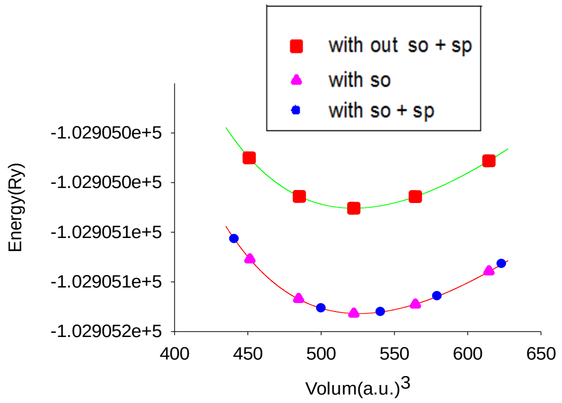
مطالعه‌های نظری و تجربی متعددی روی این ترکیب صورت گرفته است [۶-۵]. در این مقاله، با استفاده از تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) برای محاسبه انرژی تبادلی همبستگی به کمک کد محاسباتی وین [۸-۷]، ثابت شبکه این ترکیب محاسبه وبا نتایج تجربی مقایسه شده است. علاوه براین خواص الکترونی این ترکیب از جمله نظم نوار انرژی بررسی شده است.

روش انجام محاسبه‌ها

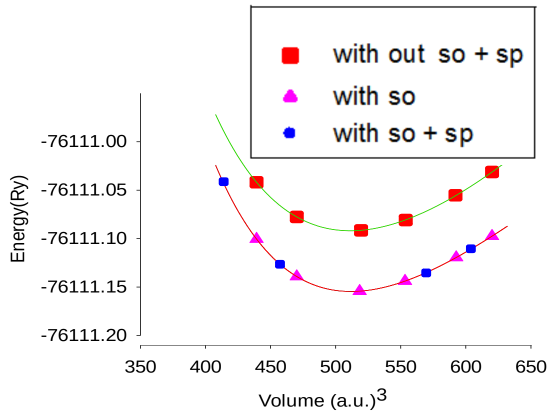
برای حل هامیلتونی جامد بلوری از نظریه تابعی چگالی که در اصل برگرفته ازنظریه توماس- فرمی است، استفاده شده است. دراین رهیافت، مسألهی N الکترون بلوری به N معادله‌ی تک الکترونی کان– شم تبدیل می‌شود. همه‌ی محاسبه‌های این مقاله با استفاده از پتانسیل کامل و با روش امواج تخت بهبود یافته به اضافه اوربیتال‌های موضعی، به کمک کد محاسباتی WIEN2k انجام گرفته است. هم چنین برای محاسبه انرژی تبادلی- همبستگی، تقریب شیب تعمیم یافته (GGA-PBE) به کار گرفته شده است. مقدار بهینه ی $R_{mt}K_{max}$ در این دو ترکیب ۷/۵ بوده، که در آن R_{mt} بزرگترین شعاع کره مفین – تین و K_{max} بیشترین بردار موج برای بسط تابع موج در فضای بین جایگاهی است. و مقدار بهینه برای قطع بسط پتانسیل و چگالی الکترونی در ناحیه بین جایگاهی (G_{max}) $Ry^{1/2}$ ۱۲محاسبه شد. در منطقه اول بریلوئن، تعداد نقطه‌های فضای وارون (Kpoint) با استفاده از همگرایی انرژی، به ۳۵۰۰ نقطه، معادل با ۱۲۸ نقطه‌ی کاهش ناپذیر، بهینه شدند. همچنین شعاع کره مافین تین را برای هر یک از اتم های این دو ترکیب برابر 2.03 a.u. در نظر گرفته شد[۹-۱۰-۱۱].

ویژگی‌های ساختاری

برای بررسی ویژگی‌های ساختاری دوترکیب LuAuPbو LaAuPb، نمودار انرژی بر حسب حجم با کمینه کردن انرژی و در سه حالت بدون در نظر گرفتن برهمکنش اسپین- مدار، با در نظرگرفتن برهمکنش اسپین- مدار(So) و با در نظر گرفتن قطبش اسپینی به همراه برهمکنش اسپین- مدار(So+Sp) در شکل(۱) رسم شده است در این شکل می‌توان با استفاده از معادله حالت بریچ- مورناگان [۹] علاوه بر ثابت شبکه‌ی بهینه، مدول حجمی، که معیاری از استحکام و سختی ماده است، و نیز مشتق مدول حجمی را به دست آورد. نتیجه‌های به‌دست آمده از محاسبه با در نظر گرفتن برهمکنش اسپین- مدار و قطبش اسپینی در جدول (۱) آورده شده است.



(الف)



(ب)

شکل ۱: نمودار انرژی بر حسب حجم برای الف)LaAuPb ب)LuAuPb

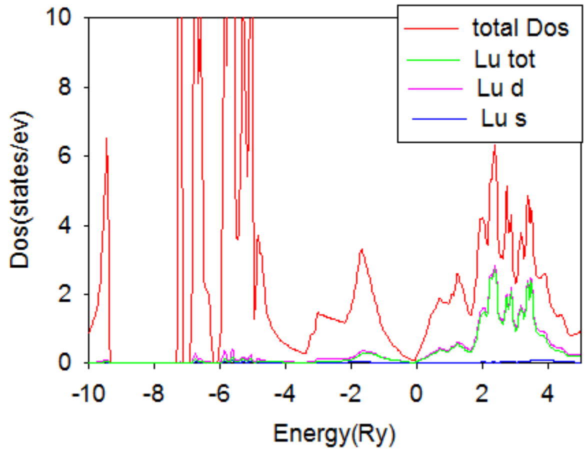
نوع ماده	مشتق مدول حجمی	مدول حجمی (GPa)	ثابت شبکه بهینه(Å)	ثابت شبکه تجربی(Å)
LuAuPb	۴/۱۰	۱۰۰/۰۶	۶/۸۱	۶/۷۹[۱۰]
LaAuPb	۴/۳۷	۹۴/۹۸	۶/۸۹	۷/۱۱[۱۰]

جدول ۱: نتیجه‌های به دست آمده از برازش بریچ- مورناگان بر منحنی انرژی- حجم با در نظر گرفتن برهمکنش اسپین- مدار و قطبش اسپینی

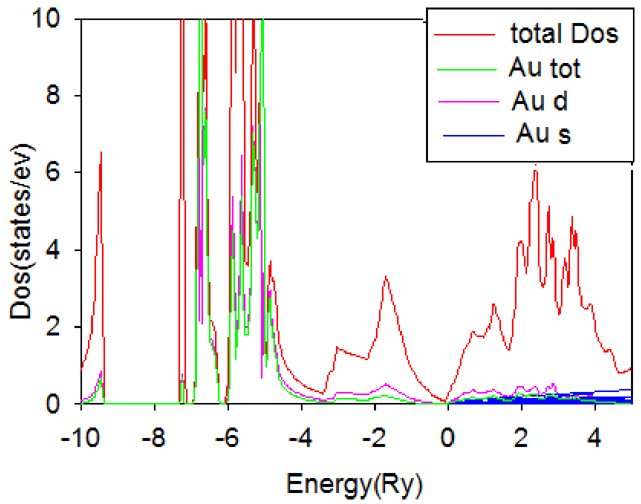
ویژگی های الکترونی

برای بررسی ویژگی‌های الکترونی بلورها، از چگالی حالت های الکترونی (DOS)، و ساختار نواری (Band Structure) استفاده

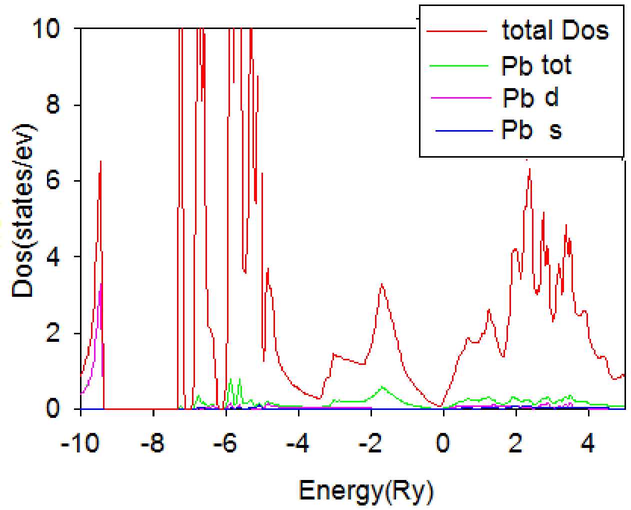
می شود لذا برای بررسی ویژگی های الکترونی ترکیب LuAuPb، چگالی حالتهای الکترونی این ترکیب محاسبه ونتایج آن بر حسب انرژی در نمودار های شکل۲و۳و۴ آورده شده، همانطور که این نمودار ها نشان می دهند چگالی حالت های الکترونی این ترکیب روی انرژی فرمی غیرصفر است وگاف انرژی بین حالت های اشغال شده واشغال نشده وجود نداردکه نشان دهنده رسانا بودن این ترکیب است.در شکل ۲ سهم چگالی حالت های الکترونی اوربیتال های Sو d اتم Lu ، در شکل ۳ سهم چگالی حالت های الکترونی اوربیتال های Sو d اتمAu و در شکل ۴ سهم چگالی حالت های الکترونی اوربیتال های Sو d اتم Pb روی چگالی حالتهای الکترونی کل بلور بررسی شده است قله قبل از انرژی فرمی مربوط به اوربیتال d اتم Au وقله به بعد از انرژی فرمی مربوط به اوربیتال dاتم Lu می باشد واوربیتال اتم های Pb توزیع زیادی اطراف انرژی فرمی ندارند..



شکل ۲:نمودارچگالی حالت الکترونی کل ترکیب LuAuPbو اربیتال های tot وSو d اتم Lu



شکل۳:نمودارچگالی حالت الکترونی کل ترکیب LuAuPbو اربیتال های tot وSو d اتم Au



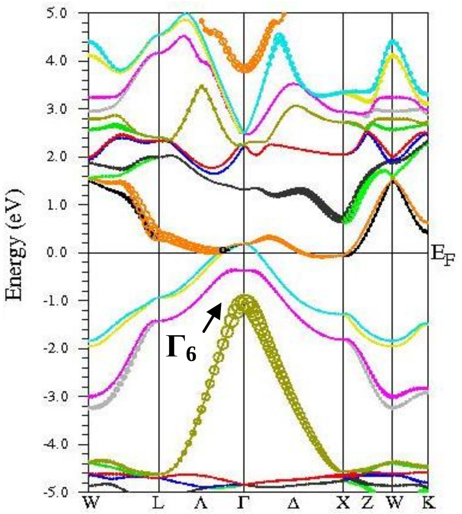
شکل۴:نمودارچگالی حالت الکترونی کل ترکیب LuAuPbو اربیتال های tot و s و d اتم Pb

همچنین از نمودار چگالی حالت های الکترونی آلیاژ LaAuPbمی توان نتیجه گرفت که قله قبل از انرژی فرمی مربوط به اوربیتال d اتم Au وقله به بعد از انرژی فرمی مربوط به اوربیتال fاتمLa می باشد.همچنین اتم های La و Au بیشترین سهم از نمودار چگالی حالت های الکترونی کل بلور در اطراف انرژی فرمی را به خود اختصاص داده اند واوربیتال اتم های Pb توزیع زیادی اطراف انرژی فرمی ندارند..

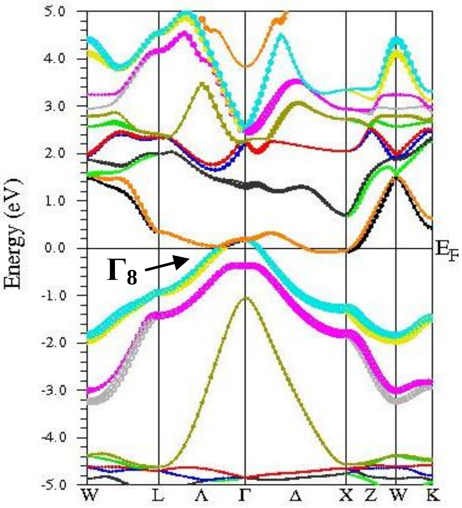
ساختار نواری و بررسی فاز توپولوژی

الکترونهای اوربیتال p تبهگنی شش گانه دارندکه نوارانرژی این الکترونها در نقط Γ ، Γ_8 وΓ_7 نامگذاری می شود.

همچنین نوار انرژی الکترونهای اوربیتال s درنقطه Γ، Γ_6 نامیده می شود. در عایق های معمولی، Γ_6 بالای Γ_8 قرار می گیرد.اما در مواردی این نظم وارونه می شود وتراز Γ_8 بالای تراز Γ_6 قرار می گیرد. در این وضعیت وارونی نوار انرژی رخ داده است وفاز عایق یا رسانای توپولوژی ایجاد شده است.بارسم نوار انرژی این ترکیب، چگونگی توزیع الکترون های p، s را روی نوارهای انرژی مورد بررسی قرار داده ایم نقاط تقارنی Γ_6 و Γ_8 در نمودارهای شکل های۵و۶ آورده شده است.به بررسی وارونی نوارهای انرژی در دو نقطه پرداخته می شود. این نمودارها نشان می دهد که وارونی نوارانرژی در این ترکیب رخ داده است لذا ترکیب LuAuPb رسانای توپولوژی است[۱۱].



شکل ۵: چگونگی توزیع الکترونهای s بر نوار انرژی ترکیب LuAuPb



شکل ۶: چگونگی توزیع الکترونهای p بر نوار انرژی ترکیب LuAuPb

برای بررسی نظم نوار انرژی در ترکیب LaAuPb نمودار نوار انرژی وچگونگی توزیع الکترونهای s وp این ترکیب را روی نوارهای انرژی مورد بررسی قرار دادیم ووارونگی نوار انرژی در نقطه Γ اتفاق افتاده لذا ترکیب LaAuPb نارسانای توپولوژی است.

نتیجه گیری

دوترکیب LuAuPb وLaAuPb غیر مغناطیسی هستند که برهمکنش اسپین مدار در آنها مهم وغیر قابل چشمپوشی است. بررسی خواص الکترونی این دو ترکیب نشان دادکه وارونی نوار انرژی بین اوربیتال های s و p در نقطه Γ رخ می دهد و این دو ترکیب دارای فاز توپولوژی هستند.

مرجع‌ها

[1] G. B. j. a. E. O.Hall, "Studies on the Heusler alloys , the structure of Cu_3Mn_2Al," J. Phys. Chem. Solids **193** (1968).

[۲] فرهی، مریم؛ « رساله کارشناسی ارشد: خواص الکترونی نانو لایه های LaPdBi و LaPtBi »، دانشگاه اصفهان، (۱۳۹۱)

[3] W.Kohn, and L.J.Sham, *Phys. Rev.* **140** (1965) A1133.

[٤] S.Kulkov, G.E.Eremeev, T.Kakeshita "The Electronic Structure and Magnetic Properties of Full- and Half-Heusler Alloys", Osaka University,Suita 565-0871, Japan(2006)

[5] C.M. Fang, G.A. De Wijs, R.A.De Groot, *J. Appl. Phys*. 91, 8340 (2002).

[6] V.N. Antonov, P.M. Oppeneer, A.N.Yaresko, A.Y. Perlov, T. Kraft,*Phy.Rev. B* 56, 13012 (1997).

[۷] ..P.Blaha, K.Schwarz, G.K.H Madsen, D.Kvasnicka and J.Luitz, "*WIEN2K: An Augmented Plane Waveplus Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties*", Vienna University of Technology,Austria (2001)

[8] P. Hohenberg, W. Kohn, *Phys. Rev.B*136, 864 (1964).

[9] C.Walle, L. Offernes, A. Kjekshus, J. Alloys Compd. 349 (2003) 105–110

[10] A. Neumann, L. Offernes, A. Kjekshus, B. Klewe, J. Alloys Compd. 274 (1998) 136–141

[11] J. Tobola, J. Pierre, S. Kaprzyk, R.V. Skolozdra, M.A. Kouacou, J. Phys.Condens. Matter 10 (1998) 1013–1032.

تأثیر روش‌های پیش‌پردازش داده‌های ورودی بر خروجی شبکه عصبی مصنوعی

کاویانی ، مهشید[۱]؛ میررکنی، سید مجید[۱]؛ معماریان، محمد حسین[۱]

[۱] *گروه هواشناسی، دانشکده فیزیک، دانشگاه یزد، چهارراه پژوهش، یزد*

چکیده

توانایی شبکه عصبی مصنوعی در پیش‌بینی توابع غیرخطی و سامانه‌های آشوبی، رهیافت مناسبی برای پیش‌بینی پراسنج‌های هواشناختی ارائه می‌دهد. خطا در اندازه‌گیری داده‌های هواشناختی، تغییرپذیری الگوهای وضع هوا و همبستگی بین داده‌های ورودی شبکه، باعث افزایش خطا و کاهش دقت پیش‌بینی در این روش می‌شود. از این‌رو پیش‌پردازش داده‌های ورودی جهت انتخاب ترکیب مناسبی از آن‌ها و حذف داده‌های غیرعادی، حائز اهمیت است. در پژوهش حاضر، ابتدا، شبکه با داده‌های خام دمای میانگین روزانه در دوره آماری ۳۰ ساله (۲۰۰۹-۱۹۸۰ میلادی) آموزش داده شد. سپس، به‌منظور بررسی تاثیر پیش‌پردازش بر روی داده‌های ورودی، شبکه دیگری با استفاده از روش‌های نرمال سازی و تحلیل مولفه اصلی طراحی شد. مقایسه نتایج این دو شبکه نشان می‌دهد که پیش‌پردازش سبب افزایش دقت، کاهش خطا و بهبود عمومیت شبکه در پیش‌بینی می‌شود.

The effect of input data preprocessing methods on the Artificial Neural Network (ANN) output

Mahshid, Kaviani[1]; MirRokni, Seyed Majid[1]; Memarian, Mohammad Hossein

[1] *Meteorology Group, Department of Physics, University of Yazd, Yazd*

Abstract

The ability of ANN to predict nonlinear functions and chaotic systems, offer a suitable approach to forecast meteorological Parameters. Meteorological data measured with error, variability of weather patterns and correlation between the data inputs of the network, increase errors and reduce the prediction accuracy of this method. So select the right combination of input data preprocessing and remove anomalous data is important. At present research, firstly, the ANN was trained using the raw data of daily mean temperature in the 30-year period (2009-1980 AD). Then, in order to investigate the effect of preprocessing on the input data, another network was designed using normalization and principal component analysis methods. Comparison of the results shows that the preprocessing of input data causes the increase of accuracy, the reduction of errors, and the improvement of the generalization of the network in forecasting.

PACS No. *89*

مقدمه

در چند دهه اخیر، استفاده از شبکه‌های عصبی مصنوعی به‌منظور شناسایی و پیش‌بینی روند تغییرات در یک مجموعه از متغیرها، با هدف تقریب توابع غیرخطی و بررسی سامانه‌های آشوبی، مورد توجه قرار گرفته است. تغییرات در فرایندهای دینامیکی و ترمودینامیکی جو روابط بین پراسنج‌های هواشناختی را غیرخطی و پیچیده می‌کند. برای بررسی سامانه‌های آشوبی جو، شبکه‌ی عصبی با استفاده از فرایند آموزش داده‌های ورودی مناسب، هدف مورد نظر را پیش‌بینی می‌کند. یکی از عوامل موثر در طراحی شبکه بهینه، انتخاب داده‌های ورودی مناسب است. اما

داده‌های نامأنوس و غیرعادی نیز در این مجموعه وجود دارند. گروهی از این داده‌ها به‌علت خطای اندازه‌گیری ناشی از عواملی مانند؛ ضعف در سامانه ثبت اطلاعات، خطای دستگاه‌های اندازه‌گیری، خطاهای انسانی و... باعث انحراف شبکه می‌شوند و از بین‌بردن آن‌ها ضروری است و حذف آن‌ها در کاهش خطا تأثیر قابل توجهی دارد (مشاری و همکاران: ۱۳۸۸). شرایط جوی خاص نیز می‌تواند تغییراتی در الگوهای آب‌وهوایی ایجاد کند که در یک زمان خاص، پراسنج هواشناختی موردنظر، از الگوی عادی منحرف می‌شود. این داده‌ها واقعی هستند، اما حضور آنها، به‌ویژه در پیش‌بینی کوتاه‌مدت و در شرایطی که با کمبود داده مواجه هستیم، سبب خطا در فرایند آموزش شبکه می‌شوند. از طرفی در شرایطی که ابعاد بردار ورودی بزرگ باشد، اجزای این بردار (متغیرهای ورودی)، شامل اطلاعات همبسته‌ای هستند که در طی فرایند آموزش، شبکه را از رسیدن به هدف گمراه می‌کنند و قابلیت عمومیت دادن شبکه برای داده‌های جدید را کاهش می‌دهند(جانیتا و برین: ۲۰۰۸). برخی از داده‌های ورودی دارای مقادیر بسیار بزرگی هستند. در این حالت در فرایند آموزش و بهینه‌سازی خروجی شبکه، برای تعدیل این داده‌ها به تعداد زیادی داده احتیاج است یا سایر ورودی‌ها می‌بایست چندین مرتبه به شبکه اعمال شوند تا بتوانند بر روی شبکه تاثیر بگذارند و اثر آن ورودی را تا حدی متعادل کنند(کیا: ۱۳۸۷).

نتایج شبکه‌هایی که داده‌های ورودی آن‌ها قبل از آموزش با روش‌های گوناگون پیش‌پردازش شده‌اند، با شبکه‌هایی که داده‌هایشان خام هستند وپیش‌پردازش نشده‌اند، متفاوت‌اند. (آزاده و همکاران: ۲۰۱۱)

در پژوهش حاضر، با استفاده از داده‌های دمای میانگین روزانه در دوره آماری ۳۰ ساله (۲۰۰۹-۱۹۸۰ میلادی) و نرم‌افزار متلب شبکه عصبی مصنوعی را جهت پیش‌بینی دمای میانگین روزانه یک سال طراحی می‌کنیم. هدف از این پژوهش بررسی تاثیر دو نمونه از روش‌های پیش‌پردازش داده‌های ورودی شبکه، نرمال‌کردن داده‌ها و تحلیل مولفه اصلی، است. در ادامه شبکه عصبی مصنوعی و مجموعه داده‌ها، روش‌های نرمال کردن داده‌ها و تحلیل مولفه اصلی بررسی شده و در نهایت نتیجه اعمال روش‌های پیش‌پردازش روی داده‌های ورودی، بر خروجی شبکه ارزیابی می‌شود.

شبکه عصبی مصنوعی

هر شبکه عصبی مصنوعی شامل یک یا چند نرون است که اطلاعات ورودی را با وزن‌هایی دریافت می‌کنند و با در نظر گرفتن بایاس (عامل قابل تنظیم برای هر نرون) آن‌ها را با هم جمع کرده و حاصل را به یک تابع محرک اعمال می‌کند. شبکه‌هایی که با یک نرون ایجاد می‌شوند توانایی پیش‌بینی توابع غیرخطی را ندارند. برای رفع این محدودیت از شبکه‌های چندلایه پرسپترون جلورونده استفاده می‌شود که متشکل از چندلایه شامل یک یا چند نرون هستند. در لایه ورودی، داده‌های ورودی با وزن‌های اولیه به هر نرون وارد شده و پس از اعمال عملیات، خروجی آن‌ها برای هر یک از نرون‌های لایه‌ی بعد یک ورودی در نظر گرفته می‌شود. تا در نهایت به لایه آخر برسند. بعد از لایه‌های میانی (پنهان)، در لایه آخر یا همان لایه خروجی، تعداد نرون‌ها می‌بایست برابر تعداد خروجی‌های شبکه باشد. سپس با استفاده از یک الگوریتم آموزشی بهینه‌سازی، با روال انتشار به‌عقب، ابتدا وزن‌های لایه آخر تصحیح شده و سپس به‌ترتیب وزن‌های لایه‌های قبلی تصحیح می‌شوند. این فرایند آموزشی بارها تکرار می‌شود تا زمانی که یکی از شرایط توقف مورد نظر در طراحی شبکه پیش‌آید.

نرمال‌کردن داده‌ها

توابع نرمال‌سازی مجموعه داده‌ها را به یک بازه مورد نظر سوق می‌دهند. این روش باعث می‌شود بین مقادیر یک مجموعه از داده‌ها تفاوت قابل توجهی نباشد. این بازه می تواند مقادیری بین ۱ و ۱- یا ۰ و ۰/۹ و یا هر مقدار مورد نظر دیگر باشد.

یکی از روش‌های نرمال‌سازی استفاده از میانگین و انحراف معیار است. این تابع داده‌های ورودی و هدف را به‌گونه‌ای نرمال می‌کند که میانگین‌آن‌ها صفر و انحراف معیار آن‌ها یک شود. با استفاده از تابع کتابخانه‌ای متلب، اعمال این روش روی داده‌ها امکان‌پذیر است.

تحلیل مولفه اصلی

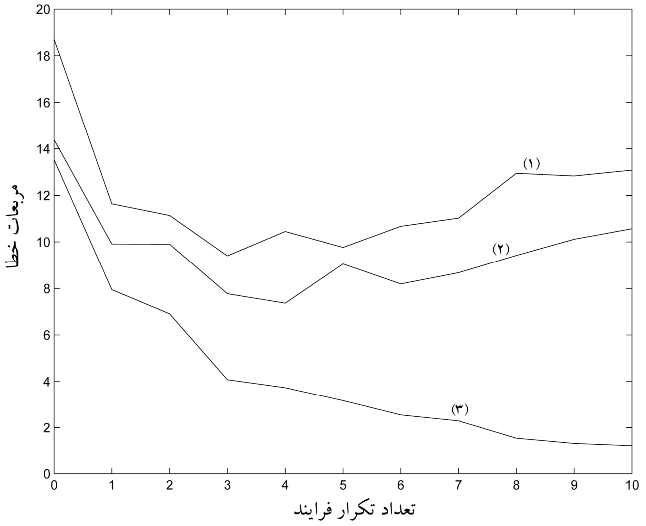
تحلیل مولفه‌های اصلی در تعریف ریاضی، یک تبدیل خطی متعامد است که داده‌ها را به دستگاه مختصات جدید می‌برد. به‌گونه‌ای که بزرگ‌ترین واریانس داده بر روی اولین محور مختصات قرار می‌گیرد، دومین واریانس بر روی دومین محور مختصات و به‌همین صورت برای سایر داده‌ها ادامه می‌یابد. تحلیل مولفه‌های اصلی می‌تواند برای کاهش ابعاد داده نیز مورد استفاده قرار بگیرد. با این روال، مولفه‌هایی از مجموعه داده که بیشترین تأثیر در واریانس را دارند حفظ می‌شوند. تحلیل مولفه اصلی، بعد از نرمال‌سازی داده‌ها، با استفاده از تابع کتابخانه‌ای (prepca) امکان‌پذیر است.

مجموعه داده‌ها و روش کار

در این پژوهش، از داده‌های دمای میانگین روزانه در یک دوره آماری ۳۰ ساله (۲۰۰۹-۱۹۸۰) استفاده شده است. داده‌های سال‌های ۱۹۸۰ تا ۲۰۰۸ داده‌های ورودی و داده‌های سال ۲۰۰۹ هدف شبکه عصبی است. با استفاده از این داده‌ها، محیط نرم‌افزار متلب و توابع کتابخانه‌ای آن به طراحی شبکه می‌پردازیم. قبل از اعمال داده‌ها به شبکه، برای بررسی عملکرد شبکه در حین آموزش و پس از آموزش و بهبود عمومیت شبکه برای داده‌های جدید، داده‌ها را به سه زیرمجموعه تقسیم می‌کنیم؛ داده‌های آموزش، داده‌های اعتبارسنجی و داده‌های آزمون. یک دوم از مجموعه داده‌ها به داده‌های آموزش، یک‌چهارم به داده‌های اعتبارسنجی و یک‌چهارم دیگر به داده‌های آزمون اختصاص داده شده است. شبکه چندلایه جلورونده، با پنج نرون در لایه پنهان و یک نرون در لایه خروجی و تابع محرک لگاریتم سیگموئیدی و خطی و تابع آموزش ماکوارت–لونبرگ طراحی شده است. ابتدا برای داده‌های خام دمای میانگین روزانه، شبکه آموزش داده شده است. سپس درشبکه‌ای دیگر با همین شرایط، این داده‌ها نرمال و تحلیل مولفه اصلی بر آنها اعمال شده و شبکه را با داده‌های پیش‌پردازش شده آموزش می‌دهیم.

بحث و نتیجه‌گیری

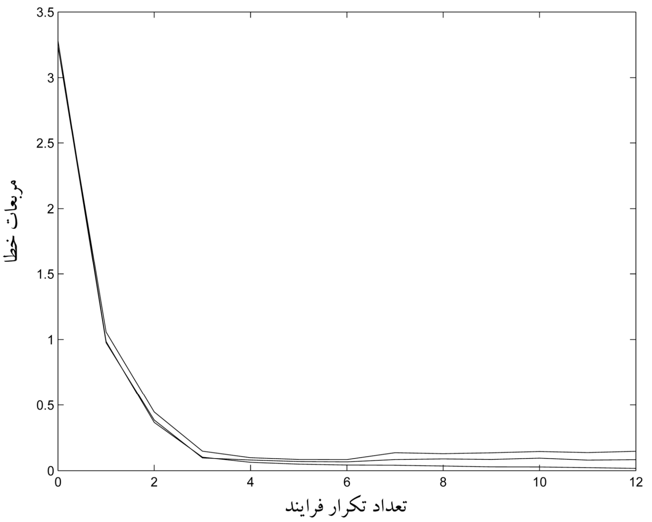
شبکه عصبی مصنوعی رهیافتی برای تقریب توابع غیرخطی و بررسی روند تغییرات در سامانه‌های آشوبی است. یکی از عوامل مهم در معماری شبکه‌های عصبی مصنوعی، انتخاب داده‌های ورودی است. داده‌های ورودی می‌بایست با هدف مورد نظر متناسب باشند و از بررسی روند آن‌ها بتوان هدف مورد نظر را طی یک مسأله بهینه‌سازی، به‌کمک الگوریتم آموزشی شبکه، پیش‌بینی کرد. وارد کردن داده‌ها به‌صورت خام، باعث کاهش سرعت و دقت می‌شود. وجود داده‌هایی با مقادیر بزرگ در کنار داده‌هایی با مقادیر کوچک، سبب می‌شود برای رسیدن به خروجی مطلوب، فرایند آموزش شبکه و تعیین وزن‌های مناسب چندین بار تکرار شود و یا برای تعدیل کل مسأله، داده‌های کوچک چندین بار به شبکه وارد شوند تا اثر داده‌های بزرگ را متعادل کنند. همان‌طور که از مقایسه نتایج دو شبکه عصبی با ورودی‌های متفاوت در شرایط یکسان مشهود است (شکل‌های ۱و۲)، در این شکل‌ها محور افقی تعداد تکرار فرایند آموزش و محور قائم مقدار مربعات خطا را نشان می‌دهد.



شکل ۱. مربعات خطا برای داده‌های (۱) آزمون، (۲) اعتبارسنجی و (۳) آموزش با استفاده از داده‌های ورودی خام (بدون پیش‌پردازش).

هر یک از منحنی‌ها روند تغییرات مربعات خطا داده‌های (۱) آزمون، (۲) اعتبارسنجی و (۳) آموزش را در هر تکرار از فرایند آموزشی تعیین می‌کند. شبکه با داده‌های خام با سرعت کمتری آموزش می‌بیند و با توجه به اختلاف بین هر سه منحنی، شبکه با این روال قابلیت عمومیت برای داده‌های جدید را ندارد (شکل۱). وجود داده‌های غیرعادی که ناشی از خطای اندازه‌گیری، تغییرات

ناگهانی در الگوهای آب‌وهوایی و همبستگی بین متغیرهای ورودی، سبب می‌شود، شبکه از سیر آموزش صحیح منحرف شود.



شکل ۲. مانند شکل ۱ ولی با استفاده از داده‌های پیش‌پردازش شده.

با نرمال‌سازی داده‌ها، مقدار مربعات خطا برای هر سه زیرمجموعه از داده‌ها به‌سرعت کاهش یافته و تقریبا روال کاهش خطای هر سه منحنی یکسان است (شکل ۲). بنابراین، تحلیل مولفه اصلی، بعد از نرمال‌سازی داده‌ها با استفاده از میانگین و انحراف معیار، برای حذف داده‌های غیرعادی و نامأنوس مفید است.

آنچه از مقایسه نتایج جذر مربعات میانگین خطای دو شبکه به‌دست آمده است (جدول۱)، اهمیت اعمال روش‌های نرمال‌سازی و تحلیل مولفه اصلی بر داده‌ها قبل از مراحل آموزش را آشکار می‌کند. تفاوت مقدار جذر مربعات میانگین خطای دو شبکه مقدار قابل ملاحظه‌ای نیست. اما مقدار اختلاف بین خطا در نتایج داده‌های آموزش و داده‌های آزمون، در شبکه‌ای که روی داده‌های آن پیش‌پردازش انجام نشده است، نماینگر عدم توانایی این شبکه در پیش‌بینی داده‌های جدید است. بنابراین، پیش‌پردازش در بهبود روند آموزش و عمومیت شبکه بسیار موثر است.

جدول۱ مقادیر جذر مربعات میانگین خطا

نوع داده شبکه	جذر مربعات میانگین خطای کل	جذر مربعات میانگین خطای داده آموزش	جذر مربعات میانگین خطای داده اعتبارسنجی	جذر مربعات میانگین خطای داده آزمون
پیش‌پردازش‌شده	2.28	2.40	2.23	2.09
پیش‌پردازش‌نشده	2.51	1.932	2.71	3.23

مرجع‌ها

[۱] آزاده، الف ؛ و همکاران؛ « تأثیر روش‌های پیش‌پردازش در بهبود پیش‌بینی شبکه عصبی مصنوعی »؛ *مجلهٔ علوم پایه و کاربردی*، سال **۵**، شمارهٔ ٦، ۱۳۹۰، صفحه ۵۷۰ تا ۵۸۰.

[۲] اسفندیاری درآباد، فریبا ؛ و همکاران؛ «پیش‌بینی میانگین دمای ماهانه ایستگاه سینوپتیک سنندج با استفاده از مدل شبکه عصبی مصنوعی پرسپترون چندلایه (MLP) »؛ *فصلنامه علمی- پژوهشی انجمن جغرافیای ایران*، سال ۸، شمارهٔ ۲۷، ۱۳۸۹، صفحه ٤۵ تا ٦۵.

[۳] حیاتی، محسن ؛ و محبی، زهرا؛ « پیش‌بینی دما بر اساس رهیافت شبکه عصبی مصنوعی »؛ *مجلهٔ علوم کاربردی جهان*، سال **۲**، شمارهٔ ٦، ۱۳۸٦، صفحه ٦۱۳ تا ٦۲۰.

[٤] قبائی سوق، محمد ؛ و همکاران؛ «ارزیابی تأثیر پیش‌پردازش پارامترهای ورودیبه شبکه عصبی مصنوعی (ANNs) با استفاده از روش‌های رگرسیون گام به گام و گاما تست به‌منظور تخمین سریع‌تر تبخیر و تعرق روزانه »؛ *نشریه آب و خاک*، سال **۲٤**، شمارهٔ ۳، ۱۳۸۹، صفحه ٦۱۰ تا ٦۲٤.

[۵] کیا، مصطفی؛ «*شبکه‌های عصبی در MATLAB*» خدمات نشر کیان رایانه سبز؛ صفحه ۲۹ تا ۱۲۱.

[٦] مشاری، امیر؛ و همکاران؛ « پالایش داده‌های آموزشی شبکه عصبی و بررسی تأثیر آن در کاهش خطای پیش‌بینی کوتاه‌مدتبار سیستم‌های قدرت »؛ *مجلهٔ روش‌های عددی در مهندسی*، سال **۲۸**، شمارهٔ ۲، ۱۳۸۸، صفحه ٦۷ تا ۷۹.

[۷] M. S. Junita and S. H. Brain; “Improved Neural Network Performance Using Principal Component Analysis on Matlab”; *International Journal of The Computer* **16**, No. 2 (2008) 1-80.

[۸] k. Poorani and k. Brindha; “Data Mining Based on Principal Component Analysis for Rainfall Forecasting in India”; *International Journal of Advanced Research in Computer Science and Software Engineering* **3**, No. 9 (2013) 1254-1256.

محاسبات نظریهٔتابعی چگالی برای خواص مکانیکی نانوسیمTiC

خواجه میری ، زهرا [۱]؛ جعفری ، محمود [۱]

[۱]دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی ،خیابان شریعتی ،خیابان شهیدمجتبایی ،خیابان شهیدکاویان، تهران

چکیده

در این مقاله خواص مکانیکی نانوسیمTiC با استفاده از نظریهٔ تابعی چگالی (DFT)وامواج تخت بهبود یافتهٔ خطی به روش پتانسیل کامل(FP-LAPW)بوسیله نرم افزار Wein2k مورد بررسی قرار گرفته است .مدول یانگ این ساختار با تقریب GGA ومدول حجمی آن با استفاده از نرم افزار فونوپی بدست آمده است.دیگرمدولها رانیزبا استفاده ازاین دو مدول بدست آوردیم.با توجه به نتایج بدست آمده،مشاهده می شود مدول یانگ در حالت نانو۴/۰۹ برابر حالت بالک است.مدول حجمی و برشی درحالت نانونیز بترتیب ۴/۷۸و ۳/۹۶ برابر حالت بالک می باشند.علت افزایش مقدار مدول ها، پیوند اتمهایTi درحالت پایداراست.

DFT calculation for mechanical properties of TiC nanowires

Khajehmiri , Zahra[1] ; Jafari , mahmoud[1]

[1] Department of Physics, K.N.TOOSI university of technology, Tehran

Abstract

In this paper, mechanical properties of TiC nanowires have been investigated through density functional theory (DFT), the full potential augmented plane wave plus local orbital method ((FP-LAPW), using Wein2k package. Young's modulus of TiC nanowire is obtained by the generalized gradient approximation (GGA) and bulk modulus using phonopy package. Additional modules are also obtained using these two modules. According to our results, Young's modulus of TiC nanowire is 4.09 times bigger than that of bulk TiC. Bulk modulus and shear modulus of TiCNW are 4.78 and 3.96 times bigger than bulk TiC, respectively. The Increase in Young's modulus Bulk modulus and shear modulus is due to bonding of Ti atoms to each other, in relaxed structure.

PACS No. 71.15.Mb , 62.23.Hj , 62.25.-g ,62.20.de

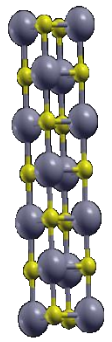
مقدمه

امروزه، یکی از زمینه هایی که به طور جدی مورد توجه قرار گرفته و به سرعت در حال پیشرفت است طراحی هوشمندانه مواد برای استفاده در شرایط سخت و خاص است . به جرات می توان گفت که مهمترین خاصیتی که در هر ماده برای استفاده در صنایع مختلف باید مورد توجه قرار گیرد، خواص مکانیکی آن ماده است .در طراحی قطعاتی که به علل مختلف (گرما، فشار و...)تحت تنش هستند، توجه به خواص مکانیکی از اهمیت فوق العاده ای برخوردار است، به عنوان مثال، در مهندسی کرنش ازطریق اعمال تنش های کنترل شده در جهات خاص، تقارن سیستم را تغییر داده و در نتیجه گاف نواری و تحرک پذیری الکترون ها تغییر می یابدو قطعه تحت تنش خواص الکترونیکی متفاوتی ازخود نشان می دهد[۱].

TiC از ترکیبات فلزات واسطه می باشدکه بخاطر نقطه ذوب وسختی بالا،پوشش خوب و مقاوم در برابر خوردگی وچگالی پایین،به خوبی شناخته شده است .بواسطه این خواص فیزیکی وشیمیایی عالی،تیتانیوم کاربید بطور گسترده ای به عنوان پوششهای سخت [۲و۳] وفازهای تقویتی [۴] که می تواند بطور چشمگیری عملکرد مکانیکی بسیاری از مواد را بهبـود بخشند، استفاده می‌شود.بنابراین تحقیق بر روی خواص مکانیکی TiC اهمیت زیادی در مطالعات نظری و کاربردهای عملی دارد[۵].

روش انجام محاسبات

بخش عمده محاسبات در چارچوب نظر یهٔ تابعی چگالی، امواج تخت بهبود یافتهٔ خطی به روش پتانسیل کامل(FP-LAPW) وتقریب گرادیان تعمیم یافته (GGA) با استفاده ازپارامترسازی پردو - بورک -ارنزرهوف(PBE) [۶] انجام شد . در این مقاله برای شبیه سازی نانوسیم ازتکنیک ابرسلول استفاده گردید که برای جلوگیری ازبرهم کنش های بین اتمی فاصله سیم ها را ۱۲آنگستروم درنظرگرفتیم. شعاع کرات موفین–تین رابرای Ti وC به ترتیب ۲/۶۰و۱/۷۶بوهردرنظرگرفته شد. ساختارسلول واحد برای شکل گیری این نانوساختار P می باشد،ما نانوسیم تیتانیوم کاربید را در جهت Z تعریف می کنیم.طول بهینه در این حالت ۲/۱۶۴ آنگستروم است.تعداد اتمها در سلول واحد برابر ۸ می باشد. پارامترهای $R_{mt}k_{max}$ و G_{max} با همگرایی انرژی بترتیب ۸ و۱۲انتخاب شد.تعداد شبکه k-point در منطقه اول بریلوئن(۱۸×۱×۱)که مربوط به ۹ نقطه غیر تقلیل پذیرk می شود.



شکل۱:نمایشی از نانوسیم تیتانیوم کاربید قبل از relaxation

خواص مکانیکی

ابتدا حالت پایدار (relaxed) سیستم را بدست می آوریم .وقتی سیستم بحالت تعادل رسید اتمهای Ti باهم پیوند برقرار میکنند.در ادامه برای بدست آوردن مدول یانگ، با اعمال تغییرات (۱٪± تا٤٪±)بر روی پارامتر C شبکه وبدست آوردن انرژیهای هرکدام از حالتها،با استفاده از فرمول زیر ،مدول یانگ را حساب نمودیم:

$$E=\frac{\text{تنش}}{\text{کرنش}}=\frac{\sigma}{\varepsilon}=\frac{F/A_0}{\Delta L/L_0}=\frac{FL_0}{A_0\Delta L} \qquad (۱)$$

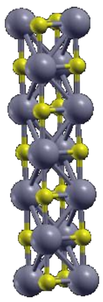
که درآن F نیروی اعمال شده به جسم تحت تنش است،A_0 سطح مقطع اصلی که به آن نیرو وارد می شودکه دراینجا برابر٤/٦٨٢٨٩٦ آنگستروم می باشد،ΔL مقدار تغییرات طول وL_0طول اولیهٔ جسم می باشد.برای بدست آوردنF ، ابتدانمودار انرژیهای بدست آمده برحسبC رارسم نموده ،سپس ازمعادله سهمی بدست آمده مشتق گرفته تاF بدست آید.معادله نمودارابراست با :

$$E = ۰/۰۰۱c^{۲}-۰/۰۲۱۴c-۷/۳۵۰۱ \qquad (۲)$$

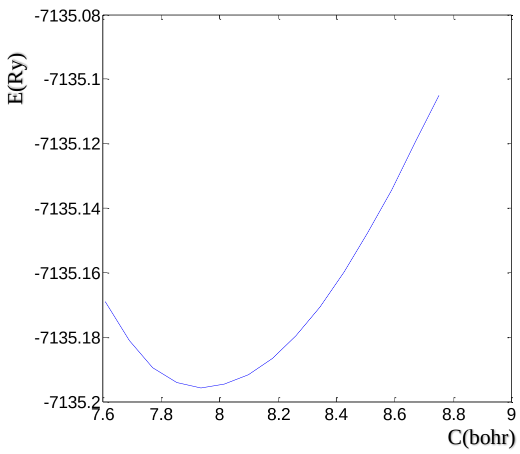
اگرازمعادله فوق مشتق بگیریم نیرو بصورت معادله(۳)خواهدبود.

$$F = ۰/۰۰۲c-۰/۰۲۱۴ \qquad (۳)$$

وسپس با محاسبه نیروی هریک از پارامترهای C،مدول یانگ را می توان بدست آورد.مدول یانگ بدست آمده برای نانوسیم تیتانیوم کاربید برابر۱۸٦۳ GPمی باشد.



شکل۲:نمایش نانوسیم تیتانیوم کاربید درحالت تعادل



نمودار۱:نمودار انرژی برحسب پارامتر C برای بدست آوردن مدول یانگ.(واحدانرژی ریدبرگ و واحد پارامتر C بوهر است)

مدول حجمی(B) را نیزبا استفاده از نرم افزار فونوپی بدست آوردیم که مقدارش۱۱۸۷GPمی باشد.حال با داشتن این دو مدول می توان

مدول برشی (G)که واحدشGP است و نسبت پواسون (υ)را با فرمولهای صفحه بعد بدست آورد.

$$G=\frac{3BE}{9B-E} \qquad (٤)$$

$$\upsilon=\frac{3B-E}{6B} \qquad (٥)$$

که مدول برشی برابر۷۵۲GP ونسبت پواسون برابر۰/۲۳ میباشد،که درجدول (۲) نشان داده شده است.یادآور شویم مدولهای بدست آمده در دمای صفرکلوین هستند.

باتوجه به مقدار بدست آمده وقیاس آن با کارهای که قبلا بر روی حالت بالک تیتانیوم کاربید انجام شده،مشاهده می شود در حالت نانومدول یانگ ٤/۰۹ برابر حالت بالک است.همچنین مدول حجمی ومدول برشی هرکدام بترتیب ٤/۷۸و ۳/۹٦ برابر حالت بالکشان می باشد.علت افزایش مدولها، بدلیل پیوندی است که درحالت تعادل اتمهای Tiباهم برقرار کردند.درجدول(۱)کارهایی که افراد دیگر بصورت تجربی وتئوری انجام شده است،نشان داده شده است.

جدول۱:نتایج بدست آمده از روشهای تجربی وتئوری برای مدول یانگ(E)،مدول برشی(G)،مدول حجمی(B)ونسبت پواسون(υ) در حالت بالک تیتانیوم کاربید(۵)

TiC		
	GGA	Exp
B	۲۴۹(۵)	۲۴۲(۷),۲۳۳(۸)
G	۱۹۰(۵)	۱۸۲(۷),۱۸۴(۸)
E	۴۵۵(۵)	۴۳۷(۷),۴۳۶(۸)
υ	۰/۱۹۶(۵)	۰/۱۹۹(۷),۰/۱۸۷(۸)

جدول۲:نتایج بدست آمده ازروش تئوری برای مدول یانگ(E)،مدول برشی(G)،مدول حجمی(B)ونسبت پواسون(υ) در حالت نانوسیم تیتانیوم کاربید

TiC nanowire	
	GGA
B	۱۱۸۷
G	۷۵۲
E	۱۸۶۳
υ	۰/۲۳

نتیجه گیری

مدول یانگ بدست آمده درحالت نانو٤/۰۹برابر حالت بالک است که نشان میدهددر حالت نانو، تیتانیوم کاربید فشار بیشتری را در اثرتغییرات می تواند متحمل گردد.مدول برشی وحجمی در حالت نانوبیشتراز حالت بالک است که این نیزنشان می دهد نانوسیم تیتانیوم کاربید قابلیت تحمل نیروی بیشتری را دارد.افزایش در مقدار مدولها بدلیل پیوندی است که اتمهای Tiدر حالت پایداردارند.

سپاسگزاری

از زحمات آقای مصطفی توکلی که مرا بسیار راهنمایی ویاری نموده اند،تشکر می کنیم.

مرجع ها

[۱]. S E Thompson, et al., *IEEE Electron Dev. Lett.*, **25**, 4 (2004), 191
[۲]X.H. Zhang, D.X. Liu, H.B. Tan, X.F. Wang, Surf. Coat. *Technol*. **203** (2009)2315–2321.
[۳] Y.T. Pei, C.Q. Chen, K.P. Shaha, J. Th, M. De Hosson, J.W. Bradley, S.A. Voronin, M.Cada, *Acta Mater*. **56** (2008) 696–709.
[٤] F. Akhtar, *J. Alloys Compd*. **45**9 (2008) 491–497
[٥] Y. Yang, H. Lu, C. Yu, J.M. Chen, *Journal of Alloys and Compounds* **485** (2009) 542–547
[٦] J P Perdew, K Becke, M Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett*. **77** (1996) 3865.
[٧] J.J. Gilman, B.W. Roberts, *J. Appl. Phys*. **32** (1961) 1405–11405.
[٨] S.P. Dodd, M. Cankurtaran, B. James, *J. Mater. Sci*. **38** (2003) 1107–1115

بررسی توزیع دوز ناشی از یون‌های ^{12}C در آب در انرژی‌های مورد استفاده در پرتودرمانی توسّط کُد مونت‌کارلوی فلوکا

خرمی، خزر[۱]؛سلطانی نبی پور، جمشید[۲]

[۱]دانشگاه آزاد اسلامی واحد تهران مرکزی، تهران

[۲]دانشگاه تحصیلات تکمیلی و فناوری پیشرفته، کرمان

چکیده

مقدمه: *امروزه عملکرد بهینۀ پرتو یون‌های سنگین پر انرژی در تخریب تومورهای عمقی و همچنین تومورهای موجود در اعضای متحرک بدن مانند شش‌ها به اثبات رسیده استو مطالعه و تحقیق در مورد این پرتوها و برهم‌کنش‌های آنها با بافت زنده به طور وسیعی مورد توجه است.* ***مواد و روش‌ها:*** *در این تحقیق کد کامپیوتری فلوکاکه بر مبنای روش مونت‌کارلو برای محاسبۀ کمیّات مربوط به ترابرد ذرات از ماده در مرکز تحقیقاتی CERN توسعه یافته به منظور انجام محاسبات مربوط به توزیع دوز یون‌های کربن به کار گرفته شده است.* ***نتایج:*** *منحنی دوز جذب‌شدهیون‌های کربن۱۹۵MeV/u در فانتوم آب و همچنین میزان تولید ذرّات ثانویه در طول مسیر عبور پرتوهای کربن ۴۰۰ MeV/u از آب توسّط کُد فلوکا محاسبه شده و نتایج حاصل با داده‌های تجربی مقایسه شدند.* ***نتیجه‌گیری:*** *پروفایل دوز جذبی محاسبه‌شده توسط کُد فلوکا در تمام طول مسیر پیشروی پرتوهای کربن ۱۹۵MeV//u توافق خوبی با داده‌های تجربی در ابعاد میلی‌متری دارد. عدم توافق کامل نتایج حاصل برای تعداد تولید ذرّات ثانویه با داده‌های تجربی موجود در این زمینه بیانگر لزوم اعمال اصلاحاتی به ویژه در مدل‌های محاسباتی مورد استفاده در برهم‌کنش‌های هسته‌ای در کُد فلوکا می-باشد.*

An investigation into the dose distribution of therapeutic ^{12}C ion beams by using FLUKAas a Monte Carlo code

Khorrami, Khazar[1];SoltaniNabipour, Jamishid[2]

[1]Islamic Azad University, Tehran Central Branch, Tehran
[2] Graduate university of advanced Technology, Kerman

Abstract

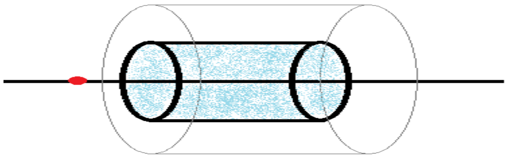
Background: Recently, high energy carbon ion beams and their interaction with the live tissue have been broadly investigated. Theyrepresent one of the most advanced tools in radio-therapy of deep-seated tumors as well as tumors in Moving Organs such as lungs. **Material and methods:** The general purpose Monte Carlo code FLUKA which has been developed in CERN was used for Carbon ion dose distribution calculations. **Results**: The dose distribution in water irradiated by 195 MeV/u carbon ion beams andalso build-up of secondary fragments for 400 MeV/u carbon ion beams passing throughwater phantom was simulated byFLUKAcode and compared with available experimental data. **Discussion:**FLUKA Monte Carlo code shows good agreement with experimental results for dose distribution of 195 MeV/u carbon ions in water. The disagreements in some regions for build-up of secondary fragments at high energies imply that further improvements in the nuclear interaction models are required to enhance the accuracy of the code.

مقدّمه

منحنی دوز جذبی پروتون‌ها و یون‌های سنگین در بافت‌های بدن که به منحنی براگ مشهور است، ناحیهٔ فلات‌گونه‌ای در ابتدای مسیر آنهاست که به قلّهٔ تندی–موسوم به قلّهٔ براگ– در انتهای برد این ذرّات ختم می‌شود. اگر چه قسمت اعظم اتلاف انرژی ذرّات سنگین در عبور از مادّه از طریق برخوردهای الاستیک و غیرالاستیک با الکترون‌های مادّهٔ هدف صورت می‌پذیرد امّا این پرتوها در مسیر پیشروی خود برخوردهایی نیز با هسته‌های مادّهٔ هدف دارند. طّی این برخوردها ذرّهٔ پرتابی ضمن از دست دادن بخشی از انرژی خود وارد برهم‌کنش‌های هسته‌ای می‌شود. از این رو بررسی نحوهٔ تولید ذرّات ثانویه و توزیع دوز ناشی از آنها در طرّاحی درمان با یون‌های سنگین از اهمیّت بسزایی برخوردار است. به دلیل محدودیّت‌های موجود در انجام آزمایش‌های تجربی در انرژی‌های بالا، کُدهای محاسباتی در این حیطه از استقبال زیادی برخوردارند. کُد کامپیوتری فلوکا که بر مبنای روش مونت-کارلو نوشته شده است، یکی از ابزار دقیق و قابل‌اطمینان در شبیه-سازی کمیّات مربوط به ترابرد ذرّات سنگین در ماده شمرده می-شود[9]. در این تحقیق با استفاده از کد کامپیوتری فلوکا عبور پرتوهای ^{12}C از آب را در برخی از انرژی‌های مورد استفاده در کربن‌تراپی شبیه‌سازی نموده و محاسبات کُد فلوکا در مورد تولید ذرات ثانویه را با مقادیر تجربی موجود مقایسه نموده‌ایم.

موادّ و روش‌ها

همانطور که اشاره شد برای شبیه‌سازی عبور پرتوهای ^{12}C از آب و انجام محاسبات مرتبط با این فرآیند از کدُ کامپیوتری فلوکا استفاده شده است.فلوکا یک کد کامپیوتری همه منظوره و عمومی است که به ویژه به منظور محاسبهٔ کمیّت‌های مرتبط با عبور ذرّات از مادّه و برهم‌کنش‌های آنها و بر مبنای روش مونت‌کارلو نوشته شده است . در این اینجا مادّهٔ هدف را فانتوم آب به شکل استوانه-ای با شعاع R = ۵cm و ارتفاع H = ۴۰cm در نظر گرفته‌ایم که داخل استوانهٔ بزرگتری که پوشیده از هواست جای دارد. این ابعاد با توجّه به ابعاد تقریبی یک تومور نوعی و همچنین برد یونهای ^{12}C در آب انتخاب شده‌است. پرتوهای کربن از یک منبع تک انرژی در خارج از استوانه، در جهت محور اصلی تابش شده و وارد استوانه می‌شوند (شکل ۱).



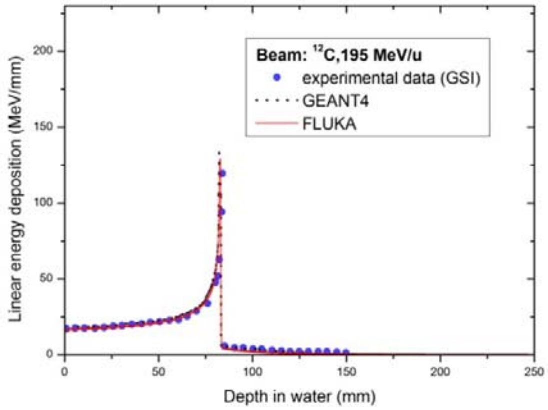
شکل ۱ : مادّهٔ هدف آب در استوانه‌ای پوشیده از هوا جا داده‌شده است و پرتوهای کربن از منبع گاوسی شکل در امتداد محور استوانه تابش می‌شوند.

برای تطابق هندسهٔ شبیه‌سازی شده با آزمایشات تجربی صورت گرفته در GSI، منبع تابش گاوسی شکل با FWHM برابر با ۵mm در نظر گرفته شده است. به علاوه در تمام شبیه‌سازی‌های انجام گرفته با کُد فلوکا از پیش‌فرض‌های هادرون‌تراپی این کُد برای تعریف پارامترهای مختلف دخیل در فرآیند ردیابی ذرّات استفاده شده است . در این حالت ذرّات سنگین باردار تا آستانهٔ انرژی ۱۰۰keV و نوترون‌ها تا رسیدن به انرژی گرمایی ردیابی می‌شوند. در فلوکا می‌توان برای دنبال کردن برهم‌کنش‌های هادرونیک تا انرژی ۱۰۰MeV/u از مدلی که برپایهٔ معادلهٔ پیشرفتهٔ بولتزمن (BME) قرار دارد و برای انرژی‌های بالاتر تا از ۱۰۰MeV/u تا انرژی ۵GeV/u از مدل مبتنی بر دینامیک مولکولی کوانتوم نسبیتی (RQMD) بهره برد. کد فلوکا در پراکندگی‌های چندگانه در عبور یون‌های سنگین از مادّه عامل شکل اتمی را لحاظ می‌کند. همچنین در این کُد پارامترهای مربوط به بار مؤثّر به روز شده و اعمال می‌گردند و پراکندگی در انرژی در تقریب مرتبهٔ اوّل بورن و با در نظر گرفتن اثرات جابجایی در محاسبات وارد می‌شود. از آنجا که تخمین دقیق برد ذرّات در مادّه در دوزیمتری و کاربردهای پرتوپزشکی اهمیّت بسیار دارد، نتایج کد فلوکا در این زمینه و در مورد یون‌ها و ذرّات مورد استفاده در پرتودرمانی در مقالات متعددی با نتایج تجربی موجود مقایسه شده و به خوبی محّک زده شده است [9].

نتایج

شبیه‌سازی منحنی براگ پرتوهای کربن در آب

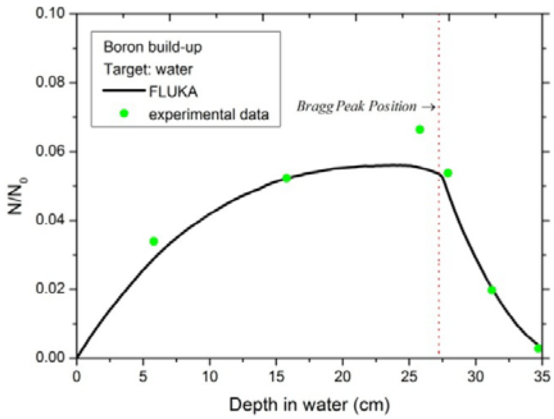
در اغلب آزمایش‌های تجربی در پرتودرمانی از فانتوم آب به عنوان مادّهٔ هدف استفاده می‌شود. بنابراین برای اعتبار یک کد در هادرون‌تراپی باید نتایج حاصل از آن با اندازه‌گیری‌های تجربی در آب در حدّ زیر میلی‌متری توافق داشته باشد. برای انجام این مقایسه، ابتدا نحوهٔفرونشست انرژی پرتوهای ^{12}Cدر آب را با استفاده از کد فلوکا بدست آورده‌ایم .نمودار۲ فرونشست خطیّ انرژی پرتوهای کربن را در طول پیشروی در آب در انرژی ۱۹۵MeV/u با مقادیر تجربی اندازه‌گیری شده در مرکز GSIو همچنین نتایج حاصل از شبیه‌سازی کُد کامپیوتری Geant4 مقایسه می‌کنند [10]. همانطور که مشاهده می‌شود، در این انرژی-داده‌های بدست آمده توسّط کد فلوکا برای پروفایل فرونشست انرژی پرتوهای کربن در آب در ابعاد میلی‌متری توافق بسیار خوبی با داده‌های تجربی دارند.



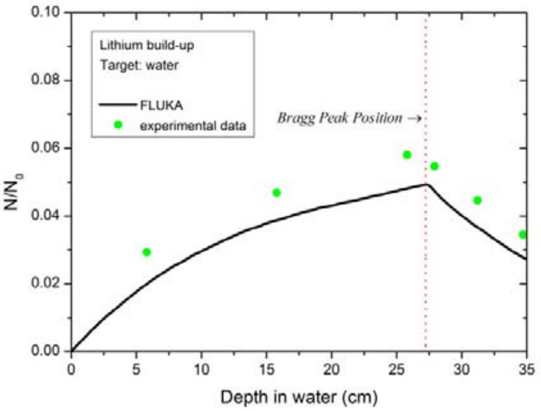
نمودار ۲ : منحنی براگ پرتوهای فرودی کربن MeV/u ۱۹۵ در آب. نتایج کُد فلوکا (منحنی قرمز رنگ) با داده‌های تجربی اندازه‌گیری شده در GSI (نقاط آبی‌رنگ) و همچنین نتایج حاصل از کُد فلوکا (خطوط نقطه‌چین مشکی) مقایسه شده است.

تضعیف پرتو اولیه و تولید ذرّات ثانویه

در عبور ذرّات سنگین باردار از میان مادّه و در برخوردهای ناکشسان آنها با هسته‌های مادّهٔ هدف، هسته‌های جدیدی به وجود می‌آیند [3]. ذرّات ثانویهٔتولید شده به طور کلّی به دو دستهٔ هسته-های جداشده از یون پرتابی و هسته‌های جداشده از اتم‌های مادّهٔ هدف تقسیم می‌شوند.در تابش یون‌های کربن پرانرژی به آب بخش اعظم دوز منتقل‌شده به مادّه توسّط هسته‌های جداشده از یون‌های اولیّهٔ ^{12}Cصورت می‌پذیرد[4] . پرتوهای کربن اولیّه در واکنش‌های مختلف هسته‌ای ممکناست به هسته‌های سبک‌تری مانند ^{11}C، B (بور)، Be(برلیم)، Li (لیتیم)، He (هلیم) و H (هیدروژن) تبدیل شوند. میزان رخداد فرایندهای مختلف هسته‌ای در عبور یون‌های سنگین از مادّه به انرژی ذرّهٔ اولیّه بستگی دارد. با شبیه‌سازی عبور یون‌های کربن با انرژی اولیهٔ۴۰۰MeV/u از آب توسّط کُد فلوکا و شمارش تعداد ذرّات مختلف در طول پیشروی پرتو در ماده، میزان تولید اتم‌های بور و لیتم مورد محاسبه قرار گرفته است و نتایج حاصل در نمودارهای ۳ و ۴ با داده‌های تجربی بدست آمده در GSI[7] مقایسه شده‌است.با نزدیک شدن به قلّهٔ براگ میزان تولید هر دو ذرّه افزایش می‌یابد.باید اشاره کرد که در این انرژی تنها حدود ۳۰٪ از یونهای کربن اولیّه تا قلّهٔ براگ که در عمق ۲۷٫۳ سانتی‌متری آب ، پیش می‌روند. همانطور که مشاهده می‌شود اگر چه داده‌های حاصل از شبیه‌سازی روند درستی را در مورد تولید این ذرّات پیش‌بینی می‌کند امّا در تمام نقاط بر اندازه-گیری‌های تجربی منطبق نیستند و به ویژه در محلّ قلّهٔ براگ انحرافاتی از نتایج تجربی مشاهده می‌شود.



نمودار ۳ : تولید هسته‌های بور. نتایج کُد فلوکا (منحنی سیاه‌رنگ) با داده‌های تجربی بدست‌آمده در GSI (نقاط سبزرنگ) مقایسه شده‌اند.



نمودار ۴ : تولید هسته‌های لیتم. نتایج کُد فلوکا (منحنی سیاه‌رنگ) با داده‌های تجربی بدست‌آمده در GSI (نقاط سبزرنگ) مقایسه شده‌اند.

خلاصه و نتیجه‌گیری

با توجه به محدودیت‌های موجود در انجام آزمایشات تجربی در حیطهٔ پرتودرمانی، کُدهای شبیه‌سازی یکی از ابزار اصلی و مورد نیاز در طراحی درمان با پرتوها به‌شمار می‌آیند. در این راستا سنجش عملکرد کُدهای محاسباتیبه منظور تایید میزان اعتبار آنها در هر زمینه امری ضروری می‌باشد. در این تحقیق صحت و دقت کُد فلوکا در تعیین دوز جذب‌شده در تابش پرتوهای کربن پرانرژی به بافت در بازهٔ انرژی‌های مورد استفاده در کربن‌تراپی مورد بررسی قرار گرفت. نتایج حاصل نشان می‌دهد که محاسبات کُد فلوکا در تعیین میزان دوز جذب‌شده طولی در بخش‌های مختلف مسیر پیشروی پرتو در محدودهٔ انرژی‌های ۲۰۰MeV/u در ابعاد میلی‌متری بر داده‌های تجربی موجود در این زمینه منطبق است. همچنین نتایج شبیه‌سازی برای تعداد ذرّات بور و لیتم تولید شده در طول مسیر عبور پرتوهای کربن در انرژی ۴۰۰MeV/u با داده‌های تجربی مقایسه شده‌اند. این انرژی حدّ بالای مورد استفاده در درمان‌های رایج کنونی با پرتوهای کربن است و از این رو اثرات تولید ذرّات ثانویه در این حالت بسیار برجسته‌تر نمایان می‌شود. بررسی نمودارها در این قسمت نشان می‌دهد که کُد فلوکا در برخی از نقاط برآورد درستی از تعداد ذرّات ثانویه تولید شده در واکنش‌های هسته‌ای ارائه می‌دهد.اگر چه نتایج این بخش می‌تواند به عنوان محکی به منظور تایید نسبی اعتبار کُد فلوکا در انجام محاسبات مربوط به میزان تولید ذرّات ثانویه ارزیابی شود امّا در عین حال انحراف از داده‌های تجربی و محدودهٔ خطای پیش‌بینی‌شده آنها در برخی از نقاط بر لزوم اعمال اصلاحاتی در مدل‌های مرتبط با برهم‌کنش‌های هسته‌ای اعمال‌شده در کُد فلوکا تاکید می‌کند.

فهرست منابع

[1] G. KRAFT, Tumor Therapy with Heavy Charged Particles, *Progress in Particle and Nuclear Physics***45**, S473-S544, 2000

[2] Bevelacqua, J. J., Systematics of Heavy Ion Radiotherapy, *Radiation Protection Management*, Volume **22**, No. 6, 2005

[3] Soltani-Nabipour, Jamshid, Residual Radioactivity Induced in Therapy with Accelerated Hadrons, Ph.D. Thesis, University POLITEHNICA of Bucharest, 2010

[4] K Gunzert-Marx, H Iwase, D Schardt, R S Simon, Secondary beam fragments produced by 200MeV/u ^{12}C ions in water and their dose contributions in carbon ion radiotherapy, *New Journal of Physics***10**, 075003 , 2008

[5] Haettner, Emma, Experimental study on carbon ion fragmentation in water using GSI therapy beams, M.s. thesis,Royal Institute of TechnologyStockholm, 2006

[6] J. Soltani-Nabipour, M. A. Popovici, L. Strasser, Gh. Cata-Danil, Monte Carlo Investigation of Light-Ions Fragmentation in water Targets, U.P.B. Sci. Bull., Series A,Vol.72, 2010

[7] E. Haettner, H. Iwase, D. Schardt, Experimental fragmentation study with ^{12}C therapy beams,*Radiation Protection Dosimetry* , Vol. **122**, 2006

[8] http://www.FLUKA.org

[9] F. Sommerer, K. Parodi, A. Ferrari,K.Poljanc, W. Enghardt, H. Aiginger, Investigating the accuracy of FLUKA code for transport of therapeutic ion beams in matter, *Phys.Med.Biol*. **51**, 2006

[10] Till Tobias Bohlen, *DRAFT Literature Research: Comparisons of Monte Carlo Transport Codes with Experimental Data DRAFT*, 2009

شبیه سازی نانوساختارها با شبکه الماسی به روش مونت کارلو

خورانی،معصومه ؛ ثابت داریانی،رضا
گروه فیزیک دانشگاه الزهرا، خیابان ونک، تهران

چکیده

*رشد نانوساختارها را در شبکه الماسی با روش مونت کارلو و تولید اعداد تصادفی شبیه سازی نمودیم. مرحله هسته بندی به صورت مثلثی انجام شد. در این هسته بندی،تعداد همسایه ها برای یک نقطه (**i,j**)،به صورت (**i±1,j**)، (**i,j±1**)، (**i+1,j-1**) و(**i-1,j+1**) در نظر گرفته شده است و بر هم کنش ذرات با یکدیگر با پتانسیل لنارد-جونز محاسبه می شود. معیار شبیه سازی بخش حجمی ساختار نیز تعداد نزدیکترین همسایگی ها می باشد که در شبکه الماسی ٤ تا فرض شده است.*

Simulation of nanostructures with diamond lattice by Monte-Carlo method

Khorani, Masumeh; Sabet Dariani, Reza
Department of Physics, Alzahra University, Tehran

Abstract

Nanostructures growth is simulated in diamond lattice by Monte-Carlo method and generation of random numbers. Nucleation stage is done as a triangular. In this nucleation, number of neighbors for a (i,j) point is assumed (i±1,j), (i,j±1), (i+1,j-1) and (i-1,j+1) and particles interaction are calculated by Lennard-Jonse potential. Simulation scale of bulk structure is also nearest neighbor numbers which are assumed 4 in diamond lattice.

PACS No. 89

مقدمه

شبیه سازی کامپیوتری از تحقیقات گسترده علم مواد که در توسعه و پردازش مواد جدید است پشتیبانی می کند. یک شبیه سازی کامپیوتری اقدام به تفسیر مشاهدات تجربی می کند و تئوری و تجربه را به هم پیوند می دهد[۱].

از آنجایی که دستگاه های اصلی، میکروبردازشگرها و حافظه ها از سیلیکان ساخته می شوند ساخت دستگاه های اپتوالکترونیکی بر پایه سیلیکان موثرترین روش برای مجتمع کردن سیستم های اپتیکی – الکتریکی است. علاوه بر این، تکنولوژی سیلیکان خواص زیر را دارد از جمله این که بزرگترین و اصلی ترین تکنولوژی قابل دسترس تا به امروز بوده است. از لحظ پیچیدگی به خوبی می تواند ساختاری در حد نانومتر و ساختاری بزرگ در مقیاس گیگا داشته باشد. با تکنولوژی سیلیکان می توانیم هر نوع هندسه ای را بسازیم برای مثال کاواک اپتیکی، ساختار سه بعدی، نانوساختارها[۲]. از آنجایی که عنصر سیلیکان دارای ساختار الماسی است، به همین دلیل در این مقاله شبکه الماسی را شبیه سازی نمودیم. . این شبیه سازی خصوصا در نانوفناوری از اهمیت بسزایی برخوردار است. رشد و شبیه سازی این شبکه با روش نشست بخار فیزیکی (PVD)[۱] و نشست زاویه مایل (OAD)[۲] که

---

۱ Physical Vapor Deposition

یکی از روش های نشست بخار فیزیکی است انجام می شود. در این روش، مسیر ذرات فرودی مستقیم و تحت زاویه مشخص α می باشد. دو پدیده مهم، خود سایه اندازی[۳] و محدودیت در تحرک پذیری ذرات فرودی، باعث ایجاد ساختارهایی می شوند که به صورت ستون هایی مجزا هستند و اندازه و چگالی این نانوستون های متخلخل تابعی از زاویه ورودی α است [۳و٤]. رشد شامل دو مرحله می باشد، یکی تشکیل جزایر دو بعدی روی سطح زیرلایه (مرحله هسته بندی[٤]) که به صورت تصادفی تشکیل می گردند و سپس ایجاد ساختارهای ستونی در زاویه فرود صفر (مرحله رشد حجمی[٥]) است. ایجاد شبکه الماسی در این مرحله از رشد انجام می گیرد.

الگوریتم مدل

به دلیل کاهش زمان اجرای برنامه شبیه سازی، زبان فرترن ۹۰ انتخاب شده است. سیستم در نظر گرفته شده دارای ابعاد ۳۰۰*۳۰۰*۳۰۰ است. فیزیک مدل ارائه شده دراین مقاله، بر اساس شبیه سازی مونت کارلو و تولید اعداد تصادفی می باشد. در این سیستم سه بعدی و مکعبی شکل، رشد در راستای محور z صورت می گیرد و صفحه x-y در ارتفاع صفر همان سطح زیرلایه محسوب می شود و تا زمانی که ذره ای روی آن فرود نیامده باشد کاملا هموار فرض شده است. در این صفحه به دلیل داشتن مرز و محدود بودن، شرایط مرزی دوره ای اعمال شده است تا اثرات مرزها از بین رود. تولید ذرات به صورت تصادفی است و از ارتفاع h به سمت زیر لایه فرستاده می شوند. پس از فرود ذرات با زاویه α بر روی سطح زیرلایه، پدیده پخش سطحی اتفاق می افتد به این ترتیب که ذرات با گام های تصادفی که "گام مونت کارلو" نامیده می شود شروع به پخش می کنند تا به اولین همسایگی خود برسند یا تعداد گام های تعریف شده به پایان برسد[٥و٦]. رابطه استفاده شده در این برنامه، برای به دست آوردن تعداد گام های مونت کارلو به صورت زیر است[۷]:

$$D = \frac{2a}{\sqrt{3}} d \qquad (۱)$$

که در آن d ثابت طول پخش می باشد و مقدار آن در برنامه ثابت فرض شده است، a ثابت شبکه و D گام مونت کارلو برای یک ذره است. اگر ذره پس از پایان D گام بایستد تبدیل به یک مونومر (تک ذره) می شود.اما اگر قبل از اتمام D گام به ذره دیگری برخورد کند تشکیل جزیره می دهد و ساکن خواهد شد. در مرحله هسته بندی توصیف شده، پوشش سطحی معینی (نسبت تعداد خانه های پر به کل خانه ها) تعریف می شود و بر هم کنش ذرات با یکدیگر با پتانسیل لنارد-جونز محاسبه می شود که این پتانسیل اولین بار در سال ۱۹۵۷ توسط وود و پارکر در شبیه سازی مونت کارلو استفاده شد[٥].

پس از مرحله هسته بندی، مرحله رشد حجمی صورت می گیرد. مدل رشد در این مرحله رونشست بالستیک (BD) است که در این مدل ذره با زاویه مایل وارد فضای خلا موجود شده و با دیدن اولین همسایگی به آن می چسبد و این گونه ساختار رشد می یابد. مدل محاسباتی شرح داده شده به صورت فلوچارت در شکل ۱ نشان داده شده است.

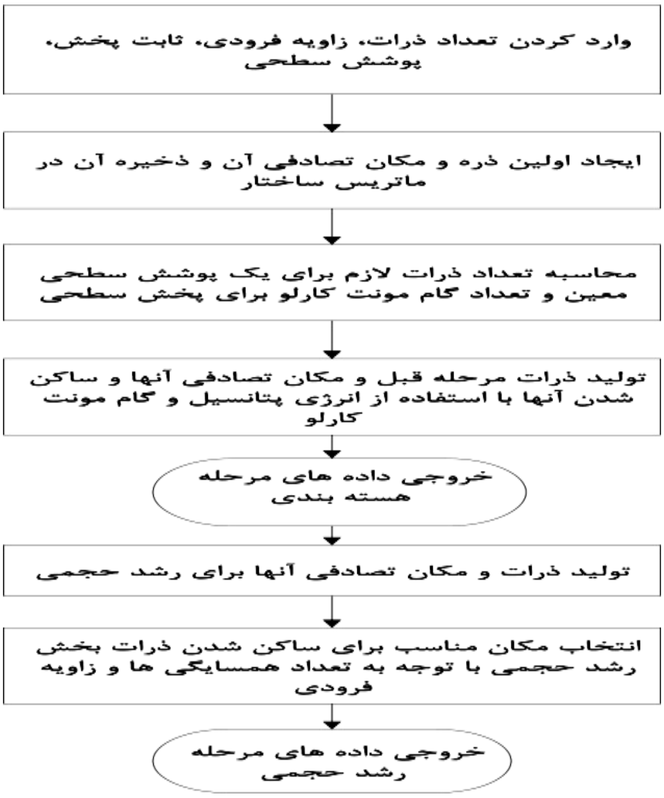
بحث و بررسی نتایج

در این مقاله شبکه الماسی (diamond) شبیه سازی و بررسی شده است. مرحله هسته بندی به صورت مثلثی مطابق شکل ۲ می باشد. در این هسته بندی تعداد همسایه ها برایک نقطه (i,j)،به صورت (i±1,j)، (i,j±1)، (i+1,j-1) و(i-1,j+1) در نظر گرفته شده است. معیار شبیه سازی قسمت حجمی ساختار تعداد نزدیکترین همسایگی ها می باشد که در شبکه الماسی ٤ تا فرض شده است[۸]. در شکل ۳ این تعداد همسایگی ها نشان داده شده است. پس از اجرای برنامه، مختصات ذرات نشانده شده در پوشه هایی ذخیره شد و با استفاده از نرم افزار VMDVersion9.1 این ساختار ترسیم گردید. VMD (ویژوال دینامیک مولکولی) یک بسته نرم افزاری برای تجسم سه بعدی، مدلسازی و تجزیه و

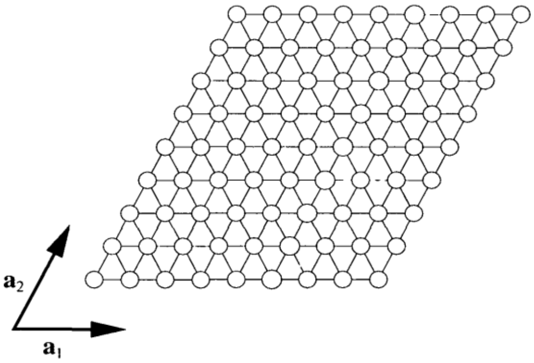
---

۲ Oblique Angle Deposition
۳ Self-Shadowing
٤ Nucleation
٥ Bulk Growth

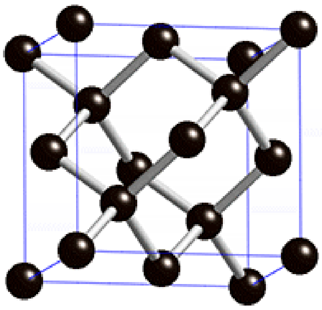
تحلیل سیستم های مولکولی است و به این ترتیب به عنوان یک ابزار قدرتمند، مورد استفاده در پژوهش های علمی می باشد. این شبیه سازی توسط نیومن[۶] نیز انجام شده است که او نیز در شبیه سازی شبکه الماسی تعداد نزدیکترین همسایگی ها را ٤ تا در نظر گرفته است و اینگونه ساختار را به دست می آورد [۸].



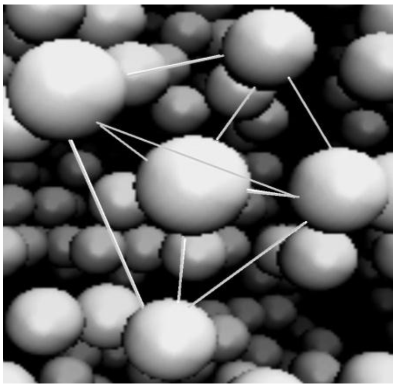
شکل۱: فلوچارت الگوریتم مدل شبیه سازی



شکل۲– مرحله هسته بندی مثلثی [۸].



شکل ۳– نمایش نزدیکترین همسایه ها در شبکه الماسی[۹].



شکل٤– نمایش هرم تشکیل شده درشبکه الماسی با کمک نرم افزار VMD.

نتیجه گیری

این شبیه سازی با روش مونت کارلو تصادفی انجام شد. در مرحله هسته بندی، شبکه به صورت مثلثی در نظر گرفته شد و رشد حجمی نیز با توجه به تعداد نزدیکترین همسایگی های اول انجام شد. تعداد این همسایگی ها ٤ بوده و تشکیل شکل هرمی را می دهند. پس از انجام شبیه سازی و رشد شبکه سه بعدی، برای مشاهده هرم تشکیل شده و شکل سه بعدی ساختار آن، از نرم افزار VMD استفاده شد. نتایج نشان داد که شبیه سازی نانوساختارها با شبکه الماسی انجام شد و صحت درستی داده ها و نتایج با کمک این نرم افزار تایید گردید.

[۶] Newman

سپاسگزاری

از همکاری صمیمانه علمی خانم صبا خدیویان تشکر می‌کنیم.

مرجع‌ها

[1] A. Fantoni,M.Vieira,R.Mortins,*Simulation of hydrogenated amorphous and microcrystalline silicon optoelectronic devices*,Sci.Mathematics and computers in simulation **49**(1999)381-401.

[2] H.Wang, *Recent developments in silicon optoelectronic devices*,Sci.Microelectronics Reliability **42**(2002)317-326.

[3] H. Huang, G. H. Gilmer, T. D. de la Rubia, J. Appl. Phys. **84**, No.7 (1998) 3636.

[4] L. Dong, R. W. Smith, and D. J. Srolovitz, J. Appl. Phys. **80**, No. 10 (1996) 5682.

[۵] نیک عمل، مهدی؛ واعظ، امین الله؛ لهراسبی، امیر؛ "آشنایی با روش های شبیه سازی در فیزیک"، موسسه انتشارات علمی دانشگاه شریف؛ سال (۱۳۸٦) صفحه ۹۱ تا ۱۴۰.

[6] T. Karabacak, G-C. Wang, and T-M Lu, J.Vac**.** *Sci. Technol*. **A22**, No.4 (2004)1778.

[7] R. S. Dariani, S. Minaeifard, and M. Rajabi, *Journal of Optoelectronics and Advanced Materials*, **14**, No.11-12 (2012) 890.

[8] M. E. J. Newman and G. T. Barakema, “Monte Carlo methods in statistical physics”, Oxford university press,1991. 335-342.

[9] C. Kittel, Introduction to Solid State Physics. 4th Edition, John Wiley & Sons, New York, ۱۹۷۱.

خواص ساختاری و الکترونی انبوهه و نانوسیم CrAs

مهدویان مهربانی، سمیه[۱]؛ تشکری، حسن[۱و۲]
[۱] آزمایشگاه فیزیک محاسباتی، گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه آزاد اسلامی واحد قم، قم
[۲] گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه کاشان، کاشان

چکیده

در این مقاله خواص ساختاری و الکترونی انبوهه و نانوسیم CrAs مورد بررسی قرار گرفته است. محاسبات با استفاده از بسته محاسباتی Espresso بر مبنای نظریه تابعی چگالی و نظریه‌ی تابعی چگالی اختلالی، با تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) انجام شده است. نتایج بیانگر پایدار بودن انبوهه‌ی CrAs در فاز NiAsاست و این ترکیب در فاز زینک‌بلند شبه‌پایدار می‌باشد. خواص الکترونی انبوهه CrAs نشان می‌دهد که این ترکیب در فاز پایدار NiAs، فلز است. همچنین ویژگی الکترونی نانوسیم‌های شبیه سازی شده از فاز پایدار NiAs، برای دو حالت Cr-Center و As-Center مورد بررسی قرار گرفت.

Structural and electronic properties of CrAs bulk and nanowires

Mahdavian Mehrabani, Somaye[1]; Tashakori, Hasan[1,2]
[1] *Calculating Physics lab, Department of Physics, Islamic Azad University, Qom*
[2] *Department of Physics, Kashan University, Kashan*

Abstract

In this paper the structural and electronic properties of CrAs bulk and nanowires have been investigated. The calculations are based on the Density Functional Theory (DFT) and the Density Functional Perturbation Theory (DFPT) with the generalized gradient approximation (GGA). The results show that CrAs in NiAs phase is stable and in zinc-blende phase is metastable. Electronic properties indicate that this compound in NiAs phase is metal. Also the electronic properties of NiAs phase nanowires, both Cr-center and As-center, have been calculated.

PACS No. 71

مقدمه

یکی از پرکاربردترین شاخه‌های نانو تکنولوژی، نانوالکترونیک است که با کوچک نمودن قطعات الکترونیکی علاوه بر افزایش سرعت پردازش، توان مصرفی آن را نیز کاهش می‌دهد. در میان نانوساختارها، نانوساختارهای یک بعدی (نانوسیم‌ها) ساختارهای نوینی برای انتقال بار و ترابرد الکترون هستند و از این‌رو اهمیت بسزایی در ساخت ابزارهای الکترونی و فوتونیکی مدرن ایفا می‌کند.

نانوسیم‌ها، نانوساختارهای یک بعدی هستند که نسبت سطح به حجم آن‌ها زیاد است. از جمله کاربردهای نانوسیم‌ها می‌توان به گیت‌های منطقی [۱]، ترانزیستورهای اثرمیدان [۲] و سلول‌های خوشیدی اشاره کرد.

ترکیبات عناصر واسطه با As مانند بلورCrAs ، که در دمای بالا دارای ساختار شش‌گوشی NiAs می‌باشند، به دلیل خواص فیزیکی متنوع در دماهای مختلف بسیار مورد توجه می‌باشند [۳]. این ترکیب در فاز شبه‌پایدار زینک‌بلند با داشتن خاصیت نیم‌فلزی و قطبش اسپینی ۱۰۰٪ در ترازفرمی آن [۸-۴]، مانند نیم‌فلزات فرومغناطیسی دیگر، قابل استفاده در قطعات اسپینترونیک برای تولید جریانی با قطبیدگی اسپینی بالا است[۹،۱۰].

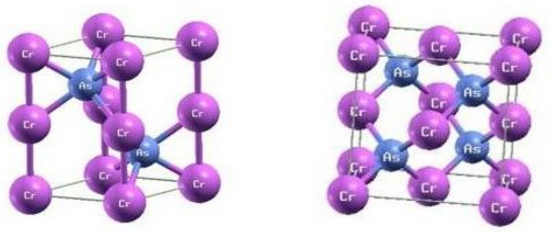
روش محاسباتی

در این مقاله ضمن بررسی خواص ساختاری انبوههی CrAs به بررسی خواص الکترونی انبوهه و نانوسیمهای این ترکیب با کوچکترین شعاع در فاز پایدار NiAs میپردازیم.
به منظور بررسی خواص ساختاری و الکترونی ترکیب CrAs از کد شبیهسازی pwscf در نرمافزار کوانتوم اسپرسو که مبتنی بر نظریه تابعی چگالی، بسط توابع موج تخت و شبه پتانسیل میباشد[۱۱] ، استفاده شده است. محاسبات با استفاده از شبه پتانسیلهای ایجاد شده با تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) انجام شده است. تقسیمبندی منطقه بریلوئن به روش مونخورست-پک بوده و مقادیر بهینه شده انبوهه برای فازهای NiAs و زینکبلند، به ترتیب ٤×٦×٦ و ۸×۸×۸ و برای نانوسیمها ۱۰×۱×۱ به دست آمده است.

خواص ساختاری

ترکیب CrAs در دو فاز NiAs و زینکبلند متبلور میشود. در فاز NiAs، هر یاختهی واحد شامل دو اتم کروم در مکانهای $(0,0,0)$ و $(0,0,\frac{1}{2})$ و دو اتم آرسنیک در مکانهای $(\frac{1}{3},\frac{2}{3},\frac{1}{4})$ و $(\frac{2}{3},\frac{1}{3},\frac{3}{4})$ است.

در فاز زینکبلند، که ساختار الماس مانند با پایه دو اتمی غیریکسان است، هر یاختهی واحد شامل اتمهای کروم و آرسنیک است که به ترتیب در مکانهای $(0,0,0)$ و $(\frac{1}{4},\frac{1}{4},\frac{1}{4})$ قرار دارند.

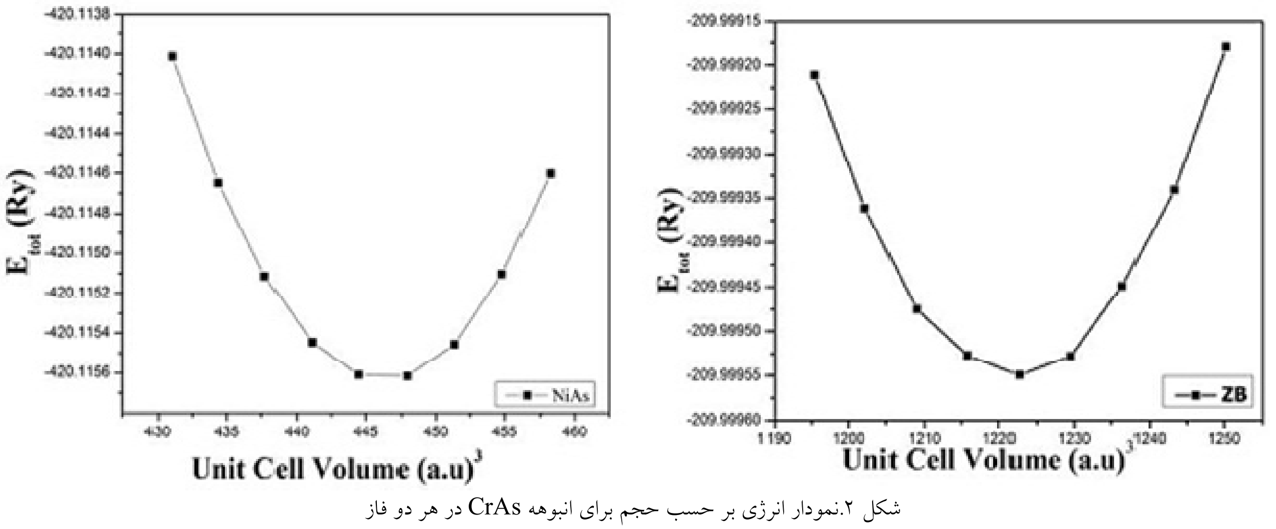


شکل۱. ترکیب CrAs در فازهای زینکبلند (راست) و NiAs (چپ)

در ابتدا ثابتهای شبکه انبوهه در هر دو فاز بهینه شد که نتایج بدست آمده و نتایج دیگران در جدول ۱ ارائه شده است. با مقایسه نمودار انرژی-حجم (شکل۲)، پایداری انبوهه CrAs در دو فاز مورد بررسی قرار گرفت؛ همانطور که در شکل ۲ دیده میشود این ترکیب در فاز NiAs پایدارتر است.

جدول۱ : ثابتهای شبکه بهینه شده برای هر دوفاز

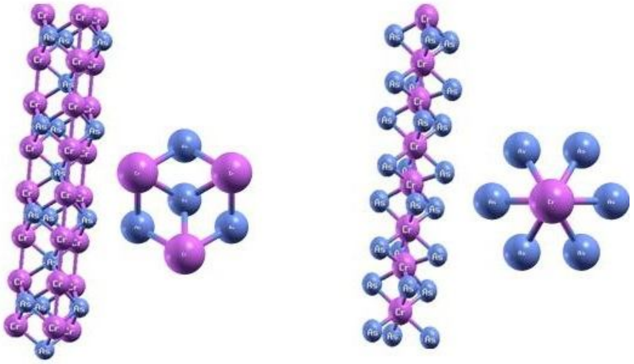
فاز	$a(\mathring{A})$		$\frac{c}{a}$	
	حاضر	دیگران	حاضر	دیگران
زینکبلند	۵/٦٤۸	[۷] ۵/٦۵۹	–	–
NiAs	۳/٦۵۵	[۸] ۳/٦٦	۱/۵۵۷	[۸] ۱/۵۳



شکل ۲.نمودار انرژی بر حسب حجم برای انبوهه CrAs در هر دو فاز

نانوسیم‌های فاز پایدار NiAs با کوچکترین شعاع در راستای [۰۰۱] شبیه‌سازی شده‌اند. این نانوسیم‌ها دو ساختار Cr-Center (به محوریت یک زنجیره Cr) و As-Center (به محوریت یک زنجیره As) دارند (شکل۳).

یاخته واحد نانوسیم Cr-Center دارای ۸ اتم (۲ اتم کروم و ٦ اتم آرسنیک) است که اتم‌های آرسنیک در دو لایه سه اتمی با چرخش زاویه‌ای ٦۰ درجه نسبت به هم قرار دارند و اتم‌های کروم بر روی محور Z مانند یک زنجیره قرار گرفته‌اند.

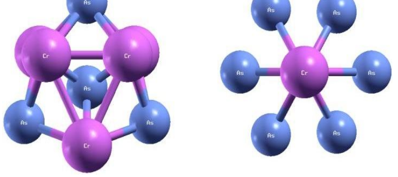


شکل ۳. نانوسیم‌های شعاع اول فاز NiAs
نانوسیم Cr -center (راست) نانوسیم As-center (چپ)

یاخته واحد نانوسیم As-Center دارای ۱۰ اتم (٦ اتم کروم و ٤ اتم آرسنیک) است که اتم‌های کروم در دو لایه سه اتمی کاملا متقارن نسبت به هم قرار گرفته‌اند.

خلا بین نانوسیم‌ها به گونه‌ای است که اثرات برهم کنشی بین نانوسیم‌ها ناچیز باشد. بهینه خلا برای نانوسیم Cr-Center مقدار a.u ۲۰ و برای نانوسیم As-Center مقدارa.u ۲۳ بدست آمد.

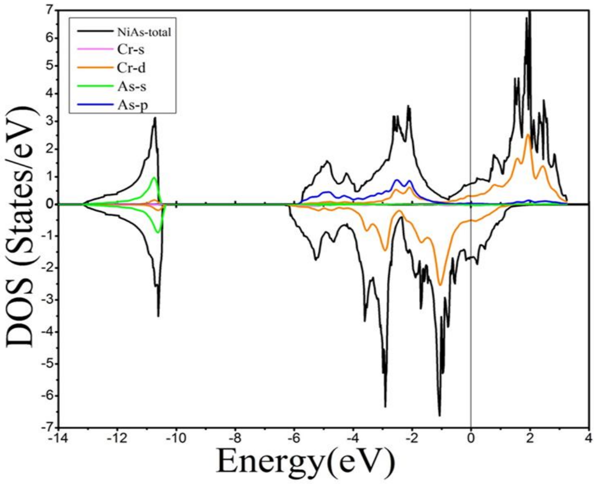
موقعیت واهلش یافته اتمها با استفاده از الگوریتم bfgs مشخص شده‌اند. شکل نهایی نانوسیم‌ها بعد از واهلش در شکل ٤ آمده است.



شکل ٤. سطح مقطع نانوسیم‌های واهش یافته فاز NiAs

خواص الکترونی

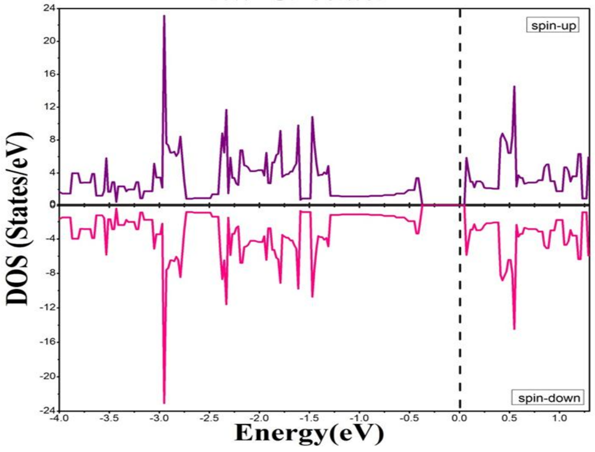
در ادامه با محاسبه چگالی حالات به بررسی خواص الکترونی انبوهه و نانوسیم‌های CrAs در این فاز پرداخته‌ایم. همانطور که در شکل ۵ مشاهده می‌شود ، نمودار چگالی حالات انبوهه برای اسپین بالا و پایین نامتقارن است؛ این عدم تقارن بیانگر مغناطیده بودن این ترکیب است که با نتایج ارائه شده در مرجع [۲] هم‌خوانی دارد. به علاوه رفتار چگالی حالت‌ها در تراز فرمی، بیانگر خاصیت فلزی این ترکیب در فاز NiAs است.



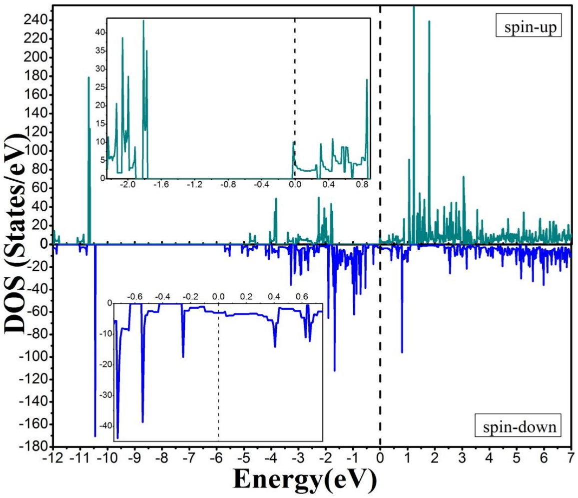
شکل۵. نمودار چگالی حالات الکترونی انبوهه CrAs در فاز NiAs

همچنین نمودار چگالی حالات جزئی در شکل ۵ نشان می‌دهد که در هر دو کانال اسپینی اوربیتال d اتم Cr عامل رسانش است.

پس از به دست آوردن ساختار واهلش یافته نانوسیم‌ها با محاسبه نمودار چگالی حالات، خواص الکترونی این دو نانوسیم بررسی شده است.



شکل٦. نمودار چگالی حالات الکترونی نانوسیم Cr-center



شکل۷. نمودار چگالی حالات الکترونی نانوسیم As-center

نمودار چگالی حالات الکترونی نانوسیم‌ها، با اعمال قطبیدگی اسپینی در محاسبات، در شکل‌های ۶ و۷ ارائه شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود به علت وجود تقارن در منحنی چگالی حالات کانال‌های اسپینی، نانوسیم Cr-Center غیرمغناطیسی است و با توجه به نتایج دارای گشتاور مغناطیسی صفر می‌باشد درحالیکه عدم تقارن در منحنی چگالی حالات نانوسیم As-Center نشانگر مغناطیده بودن این نانوسیم است. همچنین با توجه نمودار چگالی حالات، نانوسیم Cr-Center یک نیم‌رسانا با گاف انرژی 0.43 eV است و مقدار غیر صفر چگالی در سطح فرمی نانوسیم As-Center ، در دو کانال اسپین بالا و پایین، بیانگر خاصیت فلزی این نانوسیم است.

نتیجه گیری

در ابتدا پایداری انبوهه CrAs در دو فاز NiAs و زینک‌بلند با رسم نمودار انرژی–حجم مورد بررسی قرار گرفت و نتایج نشان داد که این ترکیب در فاز NiAs پایدارتر است.

در ادامه با رسم نمودار چگالی حالات به بررسی خواص الکترونی انبوهه و کوچکترین شعاع نانوسیم‌های فاز پایدار NiAs این ترکیب پرداختیم.

در نمودار چگالی حالات الکترونی انبوهه CrAs مشاهده شد که این انبوهه در فاز NiAs فلز است. نانوسیم‌های فاز پایدار NiAs با کوچکترین شعاع در راستای [۰۰۱] با ساختارهای Cr-Center و As-Center شبیه‌سازی شدند. در بررسی خواص الکترونی *نانوسیم‌ها مشخص شد که* نانوسیم Cr-Center غیرمغناطیسی و نیمرساناست در حالیکه نانوسیم As-Center فلز و مغناطیده است.

مرجع‌ها

[۱] E. Lind, A. I. Persson, L. Samuelson and L. E. Wernersson; "Improved Subthreshold Slope in an InAs Nanowire Heterostructure Field-Effect Transistor"; *Nano Lett* **6** (2006) 1842.

[۲] T. M. Schmidt, R. H. Miwa, P. Venezuela and A. Fazzio; "Stability and electronic confinement of free-standing InP nanowires: Ab initio calculations"; *Physical Review B* **72**, (2005) 193404.

[۳] K. Motizuki, K. Katoh, A. Yanase; "band structure of NiAs type compound: I Non Magnetic state"; *Solid State Physics* **19** (1986) 495-509.

[٤] Mavropoulos, I. Galanakis; "A review of the electronic and magnetic properties of tetrahedrally bonded half-metallic ferromagnets"; *Condensed Matter* **19**, (2007) 315221.

[٥] H. Akinaga, T. Manago and M. Shirai; "Material Design of Half-Metallic Zinc-Blende CrAs and the by Molecular-Beam Epitaxy"; *Applied Physics* **19**, (2000) L1118-L1120.

[٦] M. Shirai, K. Ikeuchi, H. Taguchi, H. Akinaga; "Material Design of Cr-Based Half-Metallic Ferromagnets"; *journal of superconductivity* **16**, No. 1 (2003) 27-29.

[٧] L. She, B. Lie; "Half- metallic zinc-blende pnictides in real environments"; *Condensed Matter* **17**, (2005) 1209-1216.

[٨] J.E. Pask, L.H. Yang, C.Y. Fong, W.E. Pickett, S. Dag; "Six low-strain zinc-blende half metals: An ab initio investigation"*; Physical review B* **67**, (200).

[٩] C.J. Garcia-Cervera, X.-p. Wang; "Spin-Polorized currents in ferromagnetic multilayers"; *Computational Physics* (2006).

[١٠] C.Y. Fong, M.C. Qian; "New spintronic superlattices composed of half-metallic compounds with zinc-blend structure"; *Condensed Matter* **16**, (2006) S5669-S5676145-151.

[١١]http://www.quantum-espresso.org.

محاسبه نواحی پایداری در دام یون چهار قطبی به روش ماتریسی

مهدوی خطیبی، مریم[۱] ؛ درودی، علیرضا [۲]

[۱] دانشکده فیزیک دانشگاه آزاد اسلامی واحد تهران مرکزی، شهرک غرب، تهران

[۲] گروه فیزیک، پژوهشکده‌ی علوم هسته‌ای، پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، تهران

چکیده

در این مقاله روش ماتریسی محاسبه نواحی پایداری دام یون چهار قطبی ایده‌آل معرفی می‌شود. سپس با در نظر گرفتن پتانسیل‌های با شکل موج‌های مختلف از جمله شکل موج مثلثی (دندانه اره‌ای)، یک چهارم دایره‌ای و قدر مطلق سینوسی نواحی پایداری دام یون مورد محاسبه قرار می‌گیرند و نمودارهای پایداری در صفحه a-q رسم می‌شوند. در این محاسبات از اثرات معایب میدان و برهم کنش کولنی و برخوردهای یونی با گاز زمینه محیطی صرف نظر شده است.

Calculation of stability regions in quadrupole ion trap by matrix method

Mahdavi Khatibi [1] ; Doroudi, Alireza [2]

[1] Department of Physics, central Tehran branch, Islamic Azad University, Tehran
[2] Department of Physics, Nuclear Science Research School, Nuclear Science and Technology Research Institute , Tehran

Abstract

In this paper, the matrix method for calculations of stability regions in ideal quadrupole ion trap is introduced. Then, by considering different potentials with various waveforms such as triangular (Sawtooth waveform), one quarter circular shape and the absolute value of sinusoidal waveform, the stability regions of the ion trap are calculated and are drawn in a-q plane. In this study defects of field, coulomb interaction between ions and ion collisions with the environment background gas is ignored.

PACS No. (05.45.-a37.10.Ty)

مقدمه

طیف‌سنج جرمی اساساً دستگاهی است که می‌تواند برای اندازه‌گیری جرم یا به بیان درست‌تر نسبت خاص بار/جرم از یک اتم یونیزه شده یا بقیه ذرات باردار الکتریکی استفاده شود. طیف‌سنج‌های جرمی اکنون در فیزیک، زمین‌شناسی، شیمی، زیست‌شناسی و پزشکی برای تعیین ترکیبات، اندازه‌گیری نسبت‌های ایزوتوپیک استفاده می‌شود. انواع مختلفی از این نوع دستگاه‌ها مانند تفکیک کننده جرمی چهار قطبی، دام یون چهار قطبی، دام یون استوانه‌ای و ... وجود دارند. یکی از مهمترین انواع طیف‌سنج‌ها، طیف‌سنج دام یون چهار قطبی است که به طور گسترده‌ای در طیف‌سنجی جرم، خنک‌سازی یونی، اسپکتروسکوپی، استانداردهای فرکانس و محاسبات کوانتومی کاربرد دارد. تفکیک کننده جرمی چهار قطبی شامل چهار الکترود مدور می‌باشد که این الکترودها توسط پتانسیل به هم متصل می‌شوند. طیف‌سنج جرمی دیگر، دام یون چهار قطبی نام دارد. این دام شامل یک الکترود حلقه هذلولوی است که بین دو الکترود هذلولوی شبیه به هم به نام کلاهک قرار می‌گیرد. این الکترودها تشکیل محفظه‌ای را می‌دهند که با اتصال آن‌ها به ولتاژهای مناسب مستقیم و متناوب با فرکانس رادیویی، میدان الکتریکی در فضای درون دام ایجاد می‌شود و باعث محصور شدن یون‌ها می‌شود [۲]، در چنین شرایطی می‌توان با تغییر ولتاژهای اعمال شده، به طور مناسب، هر یون مشخصی را به نسبت دلخواه از جرم به بار، در نظر گرفت. این دسته از یون‌ها می‌توانند از طیف‌سنج عبور کرده و به آشکارساز برسند. باقی یون‌ها دارای مسیر پایدار نبوده و به

الکترودها برخورد می‌کنند و از بین می‌روند. اصل استفاده از میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی برای دادن شتاب و برقراری مسیرهای یون در داخل دستگاه مطابق با نسبت بار/جرم، در تمامی طیف‌سنج‌ها مشترک است. تحت وجود این شتاب، نواحی پایداری و ناپایداری یون‌ها به خوبی تعریف شده و به راحتی محاسبه می‌شود. مسیر حرکت یون‌ها در میدان‌های چهار قطبی از لحاظ ریاضی به وسیله جواب‌های معادله دیفرانسیل خطی مرتبه دوم توصیف شده توسط ماتیو در سال ۱۸۶۸ به دست می‌آید. روابط ریاضی مربوط به معادلات حاکم بر مسیر یون در میدان‌های چهار قطبی به وسیله مک‌لشلن استخراج شده است [۱]. معادله ماتیو دارای دو جواب پایدار و ناپایدار می‌باشد که با استفاده از آن می‌توان نواحی پایداری یا ناپایداری یون در دام را محاسبه نمود.

روش بررسی

برای مسائل فیزیکی مختلفی از جمله به دست آوردن نواحی پایداری، تحلیل‌های ریاضی منجر به فرمولی شامل معادله دیفرانسیلی شده است، که می‌توان آن را به شکل کلی زیر نشان داد:

$$\frac{d^2x}{dt^2}+F(t)x=0 \qquad (۱)$$

در این جا F(t) یک تابع تناوبی با تناوب اولیه T است که می‌توان به وسیله سری فوریه با شکل کلی زیر نشان داد:

$$F(t)=A_0+\sum_1^\infty A_n\cos(n\omega t)+\sum_1^\infty B_n\sin(n\omega t) \qquad (۲)$$

که در آن $\omega=2\pi/T$ می‌باشد. با در نظر گرفتن $n=1$ در دو جمله اول معادله فوق، معادله ماتیو به صورت زیر حاصل می‌شود:

$$F(t)=A_0+A_1\cos(\omega t) \qquad (۳)$$

با در نظر گرفتن مقادیر $A_0=a_u$ و $A_1=-2q_u$ در معادله فوق، و نیز با جاگذاری این معادله در معادله (۱) رابطه زیر حاصل می‌شود که می‌توان این معادله را با معادله حرکت یون در دام شبیه‌سازی نمود:

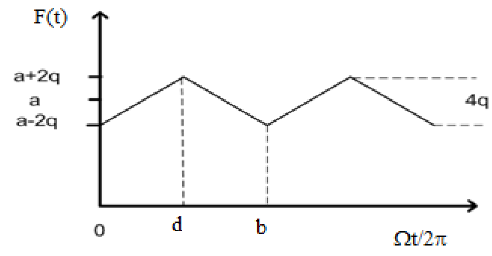
$$\frac{d^2u}{d\xi^2}+(a_u-2q_u\cos 2\xi)u=0 \qquad (۴)$$

a_u و q_u پارامترهای پایداری بدون بعدی هستند که در مفهوم موجود در دستگاه‌های چهار قطبی، در حقیقت پارامترهای به دام اندازی محسوب می‌شوند.

u جابه‌جایی، ξ یک پارامتر بدون بعد و برابر با $\Omega t/2$ است و Ω هم فرکانس می‌باشد و t نیز زمان است.

به وسیله تئوری ماتریس‌ها، یک روش کلی برای تعیین جواب معادله (۱) با مقادیر اولیه مشخص برای x(t) و $x'(t)=v(t)$ در مرجع شماره [۳] بیان شده است. در این روش تابع پریودیک F(t) را که به عنوان ولتاژهای اعمال شده به دام یون می‌باشد را به عنوان یک تابع چند پله‌ای، به تعدادی بازه در نقاط τ_k که در این جا $k=0,1,2,3,\dots K-1$ است، تقسیم می‌شود. τ_k به تناوب هر بازه اتلاق می‌شود و $0\le\tau\le T$ می‌باشد. ولتاژها درطول $\Delta_k=\tau_k-\tau_{k+1}$ برابر با $F_k=F(\tau_k)$ هستند. با ولتاژ ثابت $F(\tau)=F_k$ می‌توان معادله (۱) را به روش تحلیلی حل نمود و نواحی پایداری را با استفاده از شکل موج‌های گوناگون ترسیم کرد.

در گام نخست به ترسیم نمودار پایداری با استفاده از شکل موج‌های مثلثی شکل زیر می‌پردازیم. با توجه به توضیحات فوق جواب‌های معادله ماتیو برای ما قابل دسترس است و ما می‌توانیم شرایط مسیر پایداری (ناپایداری) را در هر دو جهت x و y، در کل میدان چهار قطبی تفسیر کنیم. به دلیل غیر جفت بودن میدان‌ها در طیف‌سنج، جواب‌های معادله ماتیو را فقط در یک جهت آزمایش می‌کنیم.



شکل ۱. تابع بدون بعد F(t)، که به صورت شکل موج‌های مثلثی می‌باشد.

در این شکل موج، q برابر با یک چهارم اختلاف ماکسیمم و مینیمم تابع F(t) شکل است و پارامتر a برابر با میانگین ولتاژ اعمالی می‌باشد.

معادله تابع پریودیک F(t) برای شکل موج بالا در یک پریود به صورت زیر می‌باشد:

(۵)

$$F_1(t) = -\frac{4*q}{b-d}\times t + [\frac{4\times d\times q}{b-d} + (a+2\times q)] \qquad kb<t<d+kb$$

(٦)

$$F_2(t) = -\frac{4*q}{d}\times t + (a+2\times q) \qquad kb+d<t<b+kb$$

در معادلات فوق $k=0,1,2,3,...$ می‌باشد.

همان طور که در شکل (۱) مشاهده می‌شود، از پارامترهای زیر استفاده می‌کنیم:

$$d=\frac{t_1}{T_{RF}}=\frac{1}{2} \quad , \quad b=1 \qquad (۷)$$

$$\Delta_1=\pi\times d \quad , \quad \Delta_2=\pi\times(1-d) \qquad (۸)$$

با جاگذاری تابع $F(t)$ در معادله (۱) و حل این معادله، می‌توان ماتریس گذار برای این شکل موج به دست می‌آید.

$$U(\tau_k)=V(F_k,\Delta_k)\times V(F_{k-1},\Delta_{k-1})\times ...\times V(F_1,\Delta_1) \qquad (۹)$$

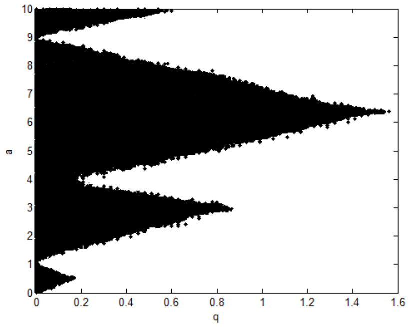
اگر دو جواب مستقل $u_1(t)$ و $u_2(t)$ از معادله (۱) را در یک پریود از تابع $F(t)$ در نظر بگیریم آنگاه ماتریس $[M]=U(\tau)$ به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$U(\tau)=\begin{bmatrix} u_1(\tau) & u_2(\tau) \\ u_1'(\tau) & u_2'(\tau) \end{bmatrix} \qquad (۱۰)$$

V در معادله (۹) اشاره به ولتاژ اعمال شده در هر پله دارد.

ماتریس فوق کلیه جواب‌های پایدار یک معادله با ضرایب پریودیک را تعیین می‌کند. برای جواب‌های پایدار لازم است که $|u_1(\tau)+u_2(\tau)|<2$ و برای جواب‌های ناپایدار $|u_1(\tau)+u_2(\tau)|>2$ می‌باشد.

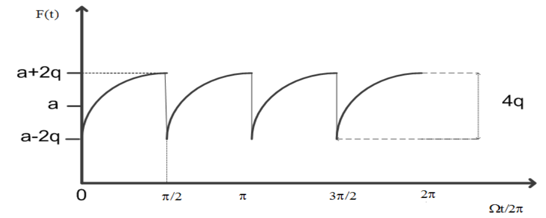
نمودارپایداری برای این شکل موج را بر روی صفحه a و q مطابق با شکل ۲ ترسیم می‌کنیم.



شکل ۲: نمودار پایداری برای شکل موج مثلثی شکل

هر نقطه روی صفحه پارامترها با رنگ سیاه یعنی جایی که مطابق با حرکت پایدار یون است علامت‌گذاری شده است و رنگ سفید در موارد عکس آن به کار می‌رود.

در گام بعدی نمودار پایداری برای شکل موج‌هایی که به صورت یک چهارم دایره هستند، ترسیم می‌شود:



شکل ۳. تابع بدون بعد F(t)، که به صورت شکل موج‌های یک چهارم دایره‌ای می‌باشد

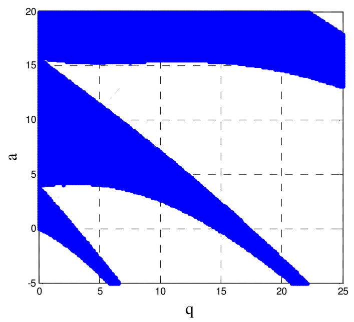
تابع بدون بعد $F(t)$ را برای شکل موج (۳)، به صورت زیر تعریف می‌کنیم:

$$F(t)=4q\sin(t)+(a-2q) \ , \ 0<t<\frac{\pi}{2} \qquad (۱۱)$$

با توجه به این که این نوع پتانسیل نسبت به t متغیر است، اگر دوره تناوب را به تعداد زیادی بازه تقسیم کنیم به گونه‌ای که این بازه‌ها مقدار $F(t)$ ثابت باشد، می‌توان در هر بازه معادله را به صورت تحلیلی حل کرد. برای حل عددی دوره تناوب را به ۲۵۰ بازه زمانی مساوی تقسیم کردیم. اگر تعداد بازه‌ها را بیشتر کنیم دقت بیشتر می‌شود. با استفاده از این رهیافت، ماتریس گذار به صورت زیر محاسبه می شود.

$$M=V(F_{250},\Delta_{250})\times V(F_{249},\Delta_{249})\times V(F_{248},\Delta_{248})\times ....\times V(F_1,\Delta_1) \qquad (۱۲)$$

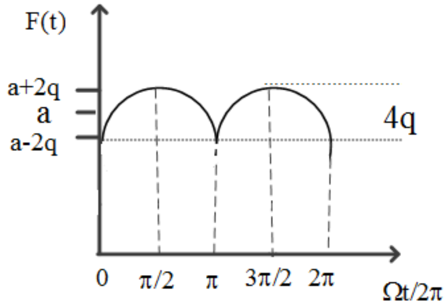
نمودار پایداری برای شکل موج یک چهارم دایره‌ای فوق به صورت زیر می‌باشد.



شکل ٤. نمودار پایداری برای شکل موج یک چهارم دایره‌ای

در شکل (٤) نقاط تیره رنگ نشان‌دهنده ناحیه پایداری حرکت یون در دام می‌باشد و قسمت‌های سفید رنگ نیز نشان می‌دهد که در این نواحی یون دارای مسیر پایدار نیست.

در گام آخر به ترسیم نمودارهای پایداری برای شکل موج قدر مطلق سینوسی می‌پردازیم:

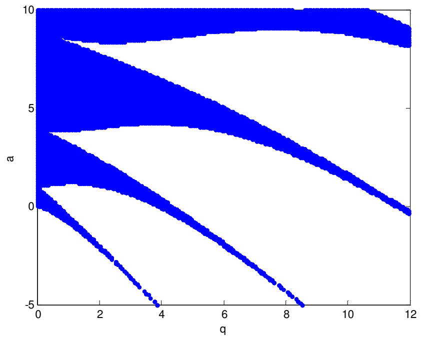


شکل ٥. تابع بدون بعد F(t)، که به صورت شکل موج‌های قدر مطلق سینوسی می‌باشد.

تابع بدون بعد F(t) را به صورت زیر تعریف می‌کنیم:

$$F(t) = 4q|\sin(t)| + (a - 2q)\ ,\ 0 < t < \frac{\pi}{2} \qquad (۱۳)$$

ماتریس گذار این ولتاژ موجی شکل نیز شبیه به معادله (۱۲) می‌باشد و نمودار پایداری برای این شکل موج برای آن به صورت شکل (٦) می‌باشد.



شکل ٦. نمودار پایداری برای شکل موج یک قدر مطلق سینوسی

نتیجه‌گیری

این تحقیق به منظور محاسبه نواحی پایداری دام یون چهار قطبی ایده‌آل با پتانسیل‌های متغیر متناوب نسبت به زمان مانند پتانسیل‌هایی با شکل موج‌های مختلف از جمله شکل موج پالسی یک چهارم دایره، قدر مطلق سینوسی و شکل موج مثلثی (دندانه اره‌ای)، انجام پذیرفته است. برای انجام این کار، به حل عددی معادلات حرکت یون (معادله هیل) در دام، با استفاده از این پتانسل‌ها پرداخته‌ایم.

حل عددی و محاسبه کامپیوتری این معادلات برای به دست آوردن نواحی پایدرای در میدان‌های چهار قطبی تناوبی در دام یون، کاملاً بر اساس روش‌های ماتریسی استوار می‌باشد.

با استفاده از این روش، جواب‌هایی که در شرایط پایداری صدق کرده‌اند، پایدار محسوب شده و آن‌ها را با نقاط تیره، در فضای a و q نمایش داده‌ایم. قسمت سفید رنگ در نمودارهای پایداری متعلق به جواب‌های ناپایدار می‌باشد. که نشان می‌دهد، یون‌ها در این ناحیه ناپایدارند [٤].

مرجع‌ها

[۱] N. W. McLachan, Theory and Applications of Mathieu Functions, Clarendon, Oxford, 1947. See also R. Campbell, Théorie Générale de l'Equation de Mathieu, Masson, Paris, 1955

[۲] R.E.March,J.F.J.Todd, Quadrupole Ion Trap Mass Spectrometry, John Wiley and Sons,

[۳] L.A. pipes, Matrix solution of equation of the Mathieu-hill type.J.Appl.phys.24,902 (1953).

[٤]. N. V. Konenkov and M. Sudakov Matrix Methods for the Calculation of Stability Diagrams in Quadrupole Mass Spectrometry J Am Soc Mass Spectrom 2002, 13, 597–613

محاسبه ساختار الکترونی و چگالی حالتهای فاز CH_2 (پیریت با u=۰/۳۵)، محتملترین ساختار برای فاز جدید کربنی در چارچوب نظریه تابعی چگالی

مهرابی ، وحید

آموزشکده فنی و حرفه ای سما، دانشگاه آزاد اسلامی، واحد بروجرد، بروجرد، ایران

چکیده

اخیراً ساختار بلوری جدیدی از کربن تحت عنوان n-diamond گزارش شده که با دیگر ساختارهای کربنی متفاوت است. علیرغم دلایل تجربی فراوان مبنی بر وجود این فاز جدید کربنی بر روی ساختار آن اتفاق نظر وجود ندارد محتملترین ساختار پیشنهادی برای n-diamond، ساختار $CH_۲$(پیریت با u=۰/۳۵) می باشد. دراین مطالعه ساختار الکترونی و چگالی حالتهای جزئی و کل برای ساختار $CH_۲$(پیریت با u=۰/۳۵) با استفاده از روش امواج تخت بهساخته خطی با پتانسیل کامل(FP-LAPW) در چارچوب نظریه تابعی چگالی(DFT) با تقریب شیب تعمیم یافته(GGA) با تابعی پردو- بورک- انزرهوف محاسبه شده است.

واژه های کلیدی: ساختار الکترونی، نظریه تابعی چگالی، *n-diamond*

Calculate theelectronic structureanddensity ofstates inphase*CH_2(pyrite u=0.35)* ,most likelystructure for newphase of carbon in the framework ofdensity functional theory

Mehrabi, Vahid

Sama technical and vocational training college, Islamic Azad University, Borujerd Branch, Borujerd, Iran

Abstract

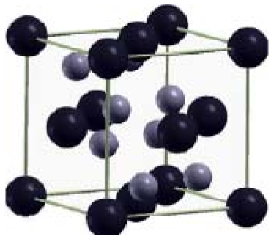
Recently, A new carbon modification, namely n-diamond have been reported, that its structure is very different from other structures of carbon.Despit the successful synthesis of n-diamond the crystal structure of n-diamond is still nuclear. The most likelystructurefor theproposedstructure ofn-diamond,theCH_2(pyrite u=0.35) is.The studyof the electronic structureandpartialdensityofstatesfortheCH_2(pyrite u=0.35) using thefull-potential linear augmented plane wave(FP-LAPW)within the framework ofdensity functional theory(DFT) withGeneralized gradiant approximation (GGA)with thefunctionalPerdew-Burke-Ernzerhofcalculated.

مقدمه

عصر حاضر را شاید بتوان عصر کربن نام نهاد زیرا این ماده کاربرد وسیعی در صنایع مختلف پیدا کرده است.کربن عنصری است با نماد شیمیایی C و عدد اتمی شش که در گروه چهار از جدول تناوبی قرار دارد. کربن دارای ساختار الکترونی پایه $1s^2 2s^2 2p^2$می باشد و بطور طبیعی در ساختارهای بلوری مختلفی ظاهر می شود. ساختارهای مختلف از یک عنصر که خواص و ویژگی های متفاوتی دارند به آلوتروپ های آن عنصر معروفند.

کربن دارای سه آلوتروپ معروف الماس$\left(sp^3\right)$، گرافیت$\left(sp^2\right)$ و کرباین$\left(sp^1\right)$ است که بواسطه نوع هیبریداسیون الکترونی از یکدیگر متمایز می شوند. دیگر ساختارهای کربنی از قبیل فولرین،کربن آمورف،کربن شیشه ای و ... ترکیبی از این سه نوع هیبریداسیون الکترونی هستند[۱].اخیراً در آزمایش های مختلفی که انجام گرفته ساختاری بلوری از عنصر کربن بنام n-diamond مشاهده شده که با دیگر ساختارهای کربنی متفاوت است.تفاوت در الگوهای پراش الکترونی با الماس [۵-۳]،متفاوت بودن فاصله

بین صفحات مجاوردر مقایسه با الماس[۴]، تفاوت چگالی حالات الکترونی در مقایسه با دیگر آلوتروپ های کربن مانند الماس و گرافیت[۴]، تفاوت در طیف اتلاف انرژی الکترون(EELS)[1][۴]،تفاوت در طیف اتلاف انرژی الکترون در نزدیک لبه ساختار(ELNES)[2][۳]و تفاوت در طیف نمایی اوژه[۴]فاز جدید کربنی در مقایسه با دیگر آلوتروپ های کربن همگی دلیل بر وجود این فاز جدید کربنی است. اما علیرغم این دلایل همچنان ساختار این فاز ناشناخته است بر همین اساس ساختار های متعددی برای n-diamondبا در نظر گرفتن نتایج حاصل از اندازه گیری های تجربی پیشنهاد شده است که شرح آن درمراجع[۱و۲و۳و۷و ۸و۹و۱۰و۱۴و۱۵]آمده است.از بین تمام ساختارهای پیشنهادی محتملترین ساختار برایn-diamond، ساختارCH_2 (پیریت با u=۰/۳۵) می باشد. به همین دلیل برای شناخت بیشتر این ترکیب برآن شدیم تا با محاسبه ساختار الکترونی و چگالی حالتهای جزئی و کل برای ساختار CH_2(پیریت با u=۰/۳۵) پیشنهاد شده برای فاز جدید کربنی (n-diamond)این ساختار پیشنهادی برای n-diamondرا مورد بررسی قرار دهیم. در شکل ۱ یاخته واحد ساختارCH_2(پیریت با u=۰/۳۵) مورد مطالعه نشان داده شده است.



شکل ۱: ساختار کریستالی CH_2(پیریت با u=۰/۳۵). کره های تیره و روشن به ترتیب اتم های کربن و هیدروژن می باشند

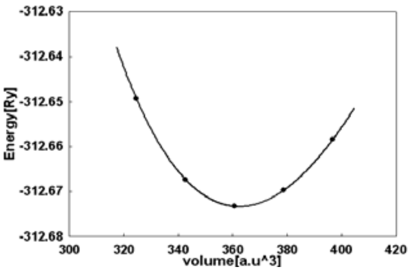
روش محاسبات

محاسبات با استفاده از روش امواج تخت بهساخته خطی با پتانسیل کامل(FP-LAPW) در چارچوب نظریه تابعی چگالی(DFT) با تقریب شیب تعمیم یافته(GGA) انجام گرفته است.در این روش برای جدا کردن حالتهای والانس از حالتهای مغزه مبنا را انرژی قرار دادیم که برابر با ۶- ریدبرگ مرز جدایی بین الکترون های حالت مغزه از حالت والانس می باشد.لازم به ذکر است که در معادلات تک ذره ای کان-شم بدلیل نامشخص بودن جمله تبادلی-همبستگی معمولاً یکی از تقریب های چگالی موضعی(LDA) و یا شیب تعمیم یافته(GGA) اعمال می شود. در این محاسبات تقریب GGA96(PBE)[3] طبق مرجع[۱۱] بکار گرفته شده است. برای انجام محاسبات از کد محاسباتیWIEN2Kکه توسط بلاها[4] و همکارانش نوشته شده است[۱۴]استفاده شد. ساختار CH_2(پیریت با u=۰/۳۵) دارای گروه تقارنی$pa\bar{3}$ است که در این ساختار اتم های کربن یک زیر شبکه fccرا تشکیل می دهند و اتم های هیدروژن به صورت گروه های دوتایی در جایگاه هایی که به وسیله پارامتر درونی u=۰/۳۵ تعریف می شوند قرار دارند. شعاع کره های موفین تین C و H به ترتیب ۱/۸۴ و ۰/۹۷ آنگستروم انتخاب شدند. درون کره ها چگالی بار و پتانسیل بر حسب هارمونیک های بلوری تا L_{max}=۱۰ و در ناحیه بین جایگاهی چگالی بار و پتانسیل بر حسب بردار موج قطع تا G_{max} = ۲۰ بسط داده شد. تعداد نقطه هایK در ناحیه اول بریلوئن ۴۵ نقطه و تعداد توابع پایه در ناحیه بین جایگاهی با مقدار= $R_{mt} \times K_{max}$ ۷ (R_{mt} ، شعاع کوچکترین کره موفین تین وK_{max} ، بردار موج قطع برای بسط تابع موج بر حسب امواج تخت در ناحیه بین جایگاهی است)محدود شد.

[1] Electron energy loss spectroscopy
[2] Electron energy loss near-edge structure
[3] Perdew-Burke-Ernzerhof
[4] Blaha

نتایج و بحث

برای یافتن خواص ساختاری حالت پایه ساختار $CH_۲$(پیریت با u=۰/۳۵) ، انرژی یاخته بسیط به ازاء حجم های مختلف اطراف حجم تعادلی محاسبه شد. انرژی های محاسبه شده را با معادله حالت مورناگون برازش داده و نمودار انرژی بر حسب حجم مطابق شکل(۲) رسم شد.



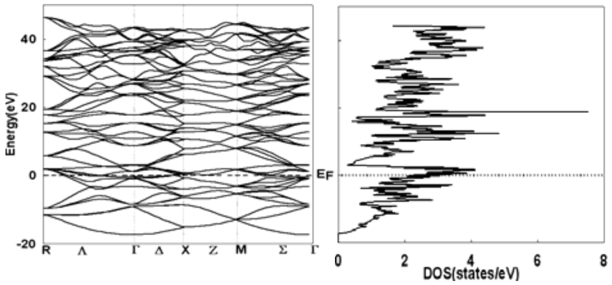
شکل۲: نمودار انرژی (Ryd) بر حسب حجم ($a.u^3$)

همانگونه که مشاهده می شودمحنی انرژیکل بر حسب حجم دارای کمینه می باشد که این به معنی مثبت بودن مدول حجمی است. بنابراین این ترکیب در تغییر شکل همگن پایدار می باشد البته پایداری کشسانی این ترکیب توسط موریتا و همکاران[۸] در مطالعات قبلی تایید شده است که در توافق با پایداری n-diamond[۶]می باشد. ثابت شبکه محاسبه شده بسیار نزدیک به مقدار تجربی گزارش شده ی۳/۵۶۳ آنگستروم برای n-diamond[۳] است.با بکار بردن معادله مورناگون ، ثابت شبکه(a_0)، مدول حجمی(B) که معیاری از سختی بلور است و مشتق مدول حجمی نسبت به فشار(B′) که معیاری از تغییر سختی بلور با اعمال فشار است، محاسبه شد که نتایج درجدول(۱)آمده است.

جدول۱: پارامترهای ساختاری محاسبه شده برای ساختار $CH_۲$(پیریت با u=۰/۳۵)با بکار بردن تقریب GGA(PBE)

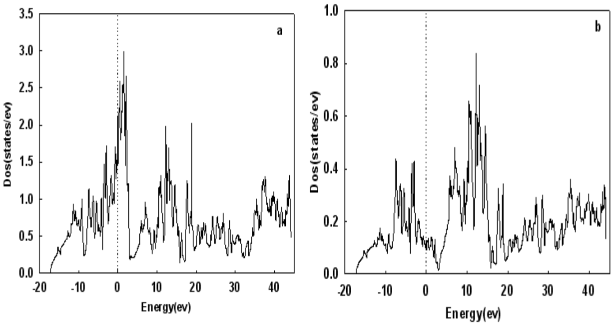
$a_0(A^o)$(ثابت شبکه)	B(Gpa)(مدول حجمی)	B′(مشتق مدول حجمی)
۳/۷۷	۱۵۳/۰۳	۳/۵۲

نوارهای انرژی در راستاهای تقارنی و همچنین چگالی حالات(DOS)برای ساختار$CH_۲$(پیریت باu=۰/۳۵)محاسبه و در شکل (۳) نمایش داده شده است.با توجه به شکل (۳) مشاهده می شود که ساختار $CH_۲$(پیریت باu= ۰/۳۵) دارای چگالی حالات غیر صفر در سطح فرمی است که نشان دهنده خاصیت فلزی این ترکیب است. ساختار نواری این ترکیب نیز بر این موضوع صحه می گذارد.وجود خاصیت فلزی ترکیب $CH_۲$(پیریت باu= ۰/۳۵) سازگار با نتایج تجربی گزارش شده برای[n-diamond ۳]است. خاصیت فلزی از ویژگیهای خاص این ترکیب جدید(n-diamond) است که در ساختارهای دیگر کربن مشاهده نشده است. مقدار DOSدر سطح فرمی برابر با$\left(\frac{states}{eV}\right)$ ۲/۶۲ می باشد.



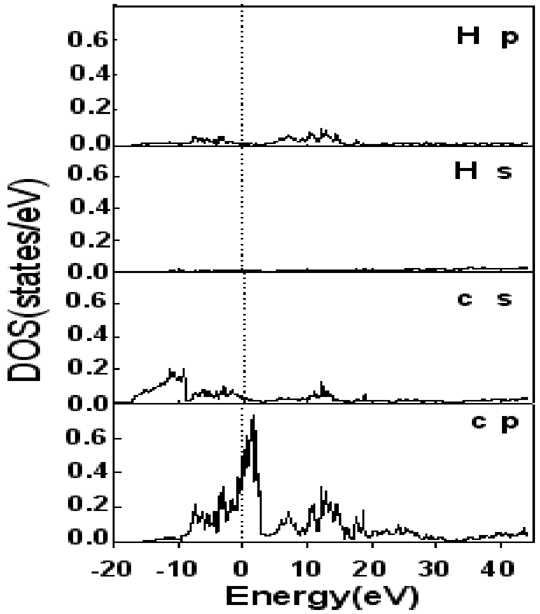
شکل۳: ساختار نواری(چپ) و چگالی حالات (راست) ساختار $CH_۲$ (پیریت باu=۰/۳۵)

چگالی حالات مربوط به اتم های CوH در شکل(۴) نمایش داده شده است. با توجه به شکل (۴) مشاهده می شود که الکترون های اتم کربن بیشترین سهم را در نزدیکی سطح فرمی با مقدار$\left(\frac{states}{eV}\right)$ ۱/۷،در ساختار $CH_۲$را دارا می باشد.



شکل۴:چگالی حالات(DOS) مربوط به: (*a*) اتم کربن– (*b*) اتم هیدروژن

چگالی حالتهای جزیی برای اربیتال های مختلف اتم های C و H در شکل (۵) رسم شده اند.مشاهده می شود که بیشترین سهم در نزدیکی سطح فرمی برای ساختار $CH_۲$مربوط به اربیتال pاتم کربن با مقدار برابر با ۰/۴ $\left(\frac{states}{eV}\right)$ است.از مقایسه شکل های(۳) و (۵) می توان نتیجه گرفت که ساختار موجود در بازه انرژی (۱۰- و ۱۸-) مربوط به اربیتال sاتم کربن ، ساختار موجود در بازه انرژی (۵- و ۱۰-) مربوط به اربیتال pاتم کربن، ساختار موجود در بازه انرژی (۰و ۵-) مربوط به اربیتال pاتم کربن، ساختار موجود در بازه انرژی (۰و ۱۰) مربوط به اربیتال pاتم کربن، ساختار موجود در بازه انرژی (۱۰و ۲۰) مربوط به اربیتال pاتم کربن می باشد.



شکل ۵: چگالی حالتهای اربیتال های s و p اتم های کربن و هیدروژن

نتیجه گیری

در این مطالعه، ساختارCH_2 (پیریت باu=۰/۳۵) پیشنهادی برای فاز جدید کربنی(n-diamond) را در چارچوب نظریه تابعی چگالی و با روش FP-LAPW مورد بررسی قرار دادیم که نتایج زیر حاصل شد.

وجود چگالی حالات غیر صفر در سطح فرمی با مقدار ۲/۶۲ $\left(\frac{states}{eV}\right)$ نشاندهنده خاصیت فلزی این ترکیب است که با نتایج تجربی موجود برای فاز جدید کربنی (n-diamond)تطابق دارد .همچنینمشاهده شد کهالکترون های اتم کربن با مقدار ۱/۷ $\left(\frac{states}{eV}\right)$ دارای بیشترین سهم در نزدیکی سطح فرمی در ساختار $CH_۲$ می باشند.و در نهایت با محاسبه چگالی حالات جزیی اتم های کربن و هیدروژن در این ساختار این نتیجه حاصل شد که بیشترین سهم چگالی حالات اشغال نشده در بالای سطح فرمی فاز جدید کربنی(n-diamond) با فرض$CH_۲$ (پیریت باu=۰/۳۵) بودن ساختار آن مربوط به اربیتال های p اتم کربن است.

مراجع:

[1] S. Jarkov, Y. Titarenko, G. Churilov;“Electron microscopy studies of fcc carbon particles”;*Carbon***36**,(1998) 595-597.
[2] L. Palatnik, M. Guseva, V. Babaev, N. Savchenko, I. Falko; “on γ-carbon”;*Sov. Phys. JETP***60**,(1984) 520-522.
[3] I. Konyashin, A. Zern, J. Mayer, F. Aldinger, V. Babaev, V. Khvostov, M. Guseva;“A new carbon modification: ‘n-diamond’ or face-centred cubic carbon?”;*Diamond and Related Materials***10**,(2001) 99-102.
[4] I. Konyashin, V. Khvostov, V. Babaev, M. Guseva, J. Mayer, A. Sirenko;“A new hard allotropic form of carbon: Dream or reality?”;*In J Refractory Metals & Hard Materials***24**,(2006) 17-23.
[5] I. Konyashin, V. Babaev, M. Guseva, V. Khvostov, N. Savtchenko, M. Fatow;“Carbon modification with the fcc crystal structure”;*Vacuum***66**,(2002) 175-178.
[6] B. Wen, T. Li, C. Dong, X. Zhang, S. Yao, Z. Cao, D. Wang, S. Ji, J. Jin;“Study of the stability of n-diamond”;*J. Phys. Condens. Matter***16**,(2004) 2991-2994.
[7] G. Murrieta, A. Tapia, R. de Coss;“Structural stability of carbon in the face-centered-cubic(Fm$\bar{3}$m) phase”;*Carbon***42**, (2004) 771-774.
[8] C. Cab, G. Murrieta, G. Canto, G. Oskam, R. de Coss; “Ab initio study of the structural stability of fcc-CH_x phases”;*Carbon***47**, (2009) 1637-1642.
[9] M. Dadsetani, J. T. Titantah, D. Lamoen; “Ab initio calculation of the energy-loss near-edge structure of some carbon allotropes: Comparison with n-diamond”;*Diamond & Related Materials***19**, (2010) 73-77.
[10] J. M. Cowley, R. C. Mani, M. K. Sunkara, M. O’keeffe, C. Bonneau;“Structures of Carbon Nanocrystals”;*Chem. Mater***16**,(2004) 4905-4911.
[11] J. P. Perdew, S. Burke, M. Ernzerhof;“Generalized Gradient Approximation Made simple”;*Phys. Rev. Letters***77**, (1996) 3865-3868.
[12] P. Schattschneider, C. Hebert, H. Franco, and B. Jouffrey; “ Anisotropic relativistic cross section for inelastic electron scattering, and the magic angle”;*phys. Rev B***72**, (2005) 045142.
[13] P. Blaha, K. Schwarz, G. Madsen, D. Kvasnicka, J. Luitz;“WIEN2K, An Augmented plane wave plus local orbitals program for calculating crystal properties”; Vienna university of Technology. Austria, 2008.
[14] M. J. Bucknum, I. Stamatin, E. A. Castro;“A chemically intuitive proposal for the structure of n-diamond”;*Molecular Physics* **103**,(2005) 2707-2715.
[15] B. Wen, J. Zhao, T. Li , C. Dong;“n-diamond:an intermediate state between rhombohedral graphite and diamond?”;*New journal of Physics***8**, (2006)62-71.

اثر ناراستی تهی‌جا بر خواص ساختاری و مکانیکی ترکیبات AlAs، GaAs، GaP و GaN در فاز زینک‌بلند

کوزه‌گران ، منا[1]؛ اسماعیلیان، امیر حسین[1]

[1]آزمایشگاه فیزیک محاسباتی،دانشکده‌ی علوم پایه ،دانشگاه آزاد قم، قم

چکیده

در این مقاله خواص ساختاری و مکانیکی ترکیب‌هایAlAs ، GaAs، GaP و GaN در فاز زینک‌بلند برای بلور کامل و هم‌چنین با نقص تهی‌جا بررسی شده است. محاسبات در چارچوب نظریه‌ی تابعی چگالی و با استفاده از تقریب GGA انجام شده است. محاسبات نشان می‌دهد که نقص تهی‌جا در رفتار مکانیکی این مواد قابل توجه است. نتایج نشان می‌دهند که که وجود تهی‌جاها ناهمسانگردی مکانیکی و مفتول‌پذیری این ترکیبات را افزایش می‌دهند.

Effects of Vacancy Defects on elastic properties of zb- AlAs, GaAs, GaP and GaN

Mona, Koozehgaran[1]; Esmailian, Amir Hosein[1]

Computational La.b ,Department of Physics, Azad University of Qom, Qom

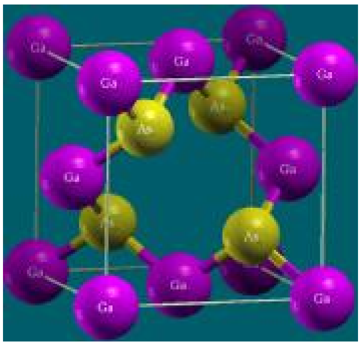
Abstract

In this article the structural and mechanical properties of zinc belende- AlAs,GaAs,GaP,GaN and their cation vacancies crystals have been investigated using density-functional theory within generalized gradient approximation (GGA). The results show the vacancies increase the mechanical anisotropy and ductility of these compounds.

PACS No

مقدمه

برخی ناراستی‌ها در بلور تأثیر بسیار زیادی بر خواص فیزیکی آن‌ها از قبیل خواص الکتریکی و مکانیکی دارد. به همین سبب بررسی نقش ناراستی‌های بلوری در ویژگی‌های فیزیکی جامدات بسیار حائز اهمیت است. در این مقاله به بررسی اثر ناراستی تهی‌جا بر خواص الاستیکی ترکیبات AlAs، GaAs، GaP و GaN می‌پردازیم. ترکیبات نام برده دارای ساختار روی-سولفید هستند. در این ترکیبات نواقص در نظر گرفته شده، 12,5% است. ولی تقارن شبکهfcc همچنان حفظ می‌شود (شکل 1).



شکل1.ساختار تهی‌جای GaAs

روش انجام محاسبات

در این مقاله محاسبات با استفاده از روش پتانسیل کامل در چارچوب نظریه‌ی تابعی چگالی و با استفاده از کدWIEN2k انجام شده است. محاسبات با تقریب GGA انجام شده است. پارامتر همگراییRK_{max}در این محاسبات برابر8 در نظر گرفته شد و تعداد نقاط K در ناحیه کاهش ناپذیر بریلوئن به منظور محاسبه خواص الکتریکی 1000 در نظر گرفته شده است. انرژی جداسازی برای AlAs معادل 6Ry- و برای بقیه‌ی اتم‌ها9 Ry- انتخاب شده است. با توجه با انرژی جداسازی انتخاب شده اوربیتال‌های ظرفیت برای Al(2p،3s،3p)؛ As(3d،4s،4p)؛ Ga(3p،3d،4s،4p)؛ N(2s،2 p)؛ P(3s،3 p) بدست آمد.

خواص ساختاری

برای استخراج خواص ساختاری بلورهای مورد بررسی نمودار انرژی بر حجم آنها در تقریب GGA رسم شده است.و با توجه

به نمودارها مقادیر ثابت شبکه مطابق جدول 1 بدست آمده است.

جدول1. مقادیر محاسبه شده برای ثابت شبکه(انگستروم)

Compound	Lattice Parameter(A°)	Compound	Lattice Parameter(A°)
AlAs	5/7284 (GGA)	AlAs-V_{Al}	5/6607 (GGA)
GaN	4/5488 (GGA)	GaAs-V_{Ga}	5/6621 (GGA)
GaP	5/5077 (GGA)	GaP-V_{Ga}	5/4211 (GGA)
GaAs	5/7423 (GGA)	GaN-V_{Ga}	4/5079 (GGA)

خواص الاستیکی

ثابتهای الاستیکی با خواص بسیاری از مواد جامد از جمله، پتانسیل بین اتمی و از همه مهمتر اینکه به طور مستقیم با خواص مکـانیکی مواد در ارتباط هستند .این ثابت‌ها، پارامترهای مهمـی هسـتند کـه پاسخ به فشار ماکروسکپی وارد شده به مواد را توصیف مـی‌کننـد . پارامترهای الاستیکی محاسـبه شـده بـرای ***ترکیـب‌هـای*** AlAs ، GaAs، GaP و GaN، هم بدون نقص و هم با نقص تهی‌جا، بـه همراه داده‌های نظری و تجربـی موجـود، در جـدول 2 نشـان داده شده‌اند .مقدار مدول حجمی محاسبه شده از ثابت‌های الاستیکی به مقدار بدست آمده از معادله حالت مورناگون بسـیار نزدیـک اسـت. مقدار ضریب ناهمسانگردی(زینر)، مدول حجمـی، مـدول برشـی، مدول یانگ همگی از روابط زیر بدست آمده‌اند[1-5] :

$$A=\frac{2C_{44}}{\left(C_{11}-C_{12}\right)} \tag{1}$$

$$B_{Voitght}=\frac{\left(C_{11}+2C_{12}\right)}{3} \tag{2}$$

$$B_{Reuss}=\frac{1}{3\left(S_{11}+S_{12}\right)} \tag{3}$$

$$\langle B\rangle=B_{Hill}=\frac{B_V+B_R}{2} \tag{4}$$

$$G_{Voitght}=\frac{3C_{44}-C_{12}+C_{11}}{5} \tag{5}$$

$$G_{Reuss}=\frac{5}{4S_{11}-4S_{12}+3S_{44}} \tag{6}$$

$$\langle G\rangle=G_{Hill}=\frac{G_V+G_R}{2} \tag{7}$$

$$E_V=\frac{\left(C_{11}-C_{12}+3C_{44}\right)\left(C_{11}+2C_{12}\right)}{2C_{11}+3C_{12}+C_{44}} \tag{8}$$

$$E_{Reuss}=\frac{5}{3S_{11}+2S_{12}+S_{44}} \tag{9}$$

$$\langle E\rangle=E_{Hill}=\frac{E_V+E_R}{2} \tag{10}$$

$$\nu_V=\frac{C_{11}+4C_{12}-2C_{44}}{4C_{11}+6C_{12}+2C_{44}} \tag{11}$$

$$\nu_{Reuss}=\frac{-S_{12}-\frac{1}{5}\left(S_{11}-S_{12}-\frac{S_{44}}{2}\right)}{S_{11}-\frac{2}{5}\left(S_{11}-S_{12}-\frac{S_{44}}{2}\right)} \tag{12}$$

$$\langle \nu\rangle=\nu_{Hill}=\frac{\nu_V+\nu_R}{2} \tag{13}$$

که S_{ij}ها عناصر ماتریس تن‌دهی (وارونC_{ij}ها) هستند[6]

$$S_{11}=\frac{C_{11}+C_{12}}{\left[\left(C_{11}-C_{12}\right).\left(C_{11}+2C_{12}\right)\right]} \tag{14}$$

$$S_{12}=\frac{-C_{12}}{\left[\left(C_{11}-C_{12}\right).\left(C_{11}+2C_{12}\right)\right]} \tag{15}$$

$$S_{44}=\frac{1}{C_{44}} \tag{16}$$

با توجه به ضرایب ناهمسانگردی دیده می‌شود که تمـام ترکیبـات، ناهمسانگرد هستند. چرا که هرگونه انحراف از مقدار واحـد نشـان دهنده میزان ناهمسانگردی در بلور است[10] و در صـورت ایجـاد نقص در شبکه، ناهمسانگردی آن‌ها افزایش می‌یابد.

در مکانیک مواد مدول برشی نشان دهنده مقاومـت در برابـر تغییـر شکل پلاستیکی و مـدول حجمـی مقاومـت در برابـر شـکنندگی را نشان می دهد برطبق محاسبات انجام شده ترکیـب ***GaN*** تـراکم-ناپذیرتر از دیگر ترکیبات است و با ایجاد ناراستی در شبکه تراکم-ناپذیری ترکیبات کـاهش مـی‌یابـد. ولـی همچنـان ترکیـب ***GaN*** دارای تراکم‌ناپذیری بیشتری می‌باشد.

در ترکیبات اصلی ***GaN*** دارای مدول برشـی بیشـتری نسـبت بـه ترکیب‌های دیگر است. و وجود تهی‌جاها مدول برشـی را کـاهش می‌دهد. یعنی این ترکیب با وجود تهی‌جا نسـبت بـه تغییـر شـکل مقاومت کمتری دارند. قانون تجربی پـوق، رفتـار پلاسـتیکی را بـا نسبت مدول برشی به مدل حجمی مربوط می‌کند.

جدول2 .ثابت‌های کشسانی، مدول حجمی، مدول یانگ و مدول برشی برای ترکیبات مورد نظر هم بدون نقص و هم با نقص تهی‌جا. نماد V_X به معنی نقص تهی‌جا برای اتم X است.در ردیف آخر مقادیر مدول حجمی استخراج شده از مراجع.a[7] و b[8] ارائه شده است.

Compound	AlAs	GaN	GaP	GaAs	$AlAs-V_{Al}$	$GaN-V_{Ga}$	$GaP-V_{Ga}$	$GaAs-V_{Ga}$
C_{11} (GPa)	101/86	231/65	120/33	101/08	64/17	161/51	80/76	70/409
C_{12} (GPa)	51/45	148/11	57/72	43/22	51/40	111/50	56/06	43/19
C_{44} (GPa)	68/69	172/42	78/51	68/08	45/82	103/31	62/35	49/405
A	2/72	4/12	2/508	2/35	7/17	4/13	5/04	3/63
B_H (GPa)	68/25	175/96	78/59	62/51	55/66	128/17	64/29	52/26
G_H (GPa)	45/96	98/37	54/301	48/29	21/62	58/92	33/07	29/57
$\frac{G}{B}$	0/67	0/57	0/69	0/77	0/39	0/46	0/52	0/57
E_H (GPa)	118/17	247/15	132/21	115/07	56/54	152/42	83/88	95/48
ν_H	0/22	0/26	0/21	0/19	0/33	0/30	0/28	0/26
B (GPa)	77/3[a]	179-195[b]	88/7[a]	74/8[a]	-	-	-	-

طبق این قانون اگر نسبت G/B کمتر از 0/57 باشد، مواد دارای خاصیت مفتول شدگی هستند و برای مقادیر بیشتر از آن، ترکیبات خاصیت شکنندگی دارند [9]. .با توجه به نتایج بدست آمده در جدول 2 دیده می‌شود که این ترکیب‌ها دارای خاصیت شکنندگی هستند و با در نظر گرفتن تهی‌جا مواد خاصیت مفتول‌پذیری پیدا می‌کنند. با توجه به جدول تهی‌جای **AlAs** دارای خاصیت مفتول‌پذیری بیشتری می‌باشد.

با توجه به مدول یانگ دیده می‌شود که ترکیب **GaN** دارای سختی بیشتری می‌باشد و با وارد شدن تهی‌جا در ترکیب‌ها این سختی کاهش می‌یابد.

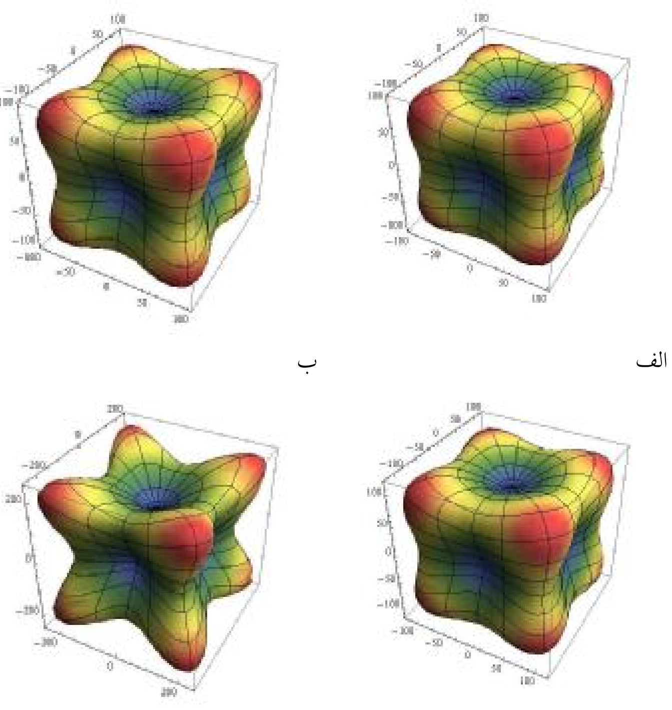
همچنین برای نشان دادن میزان ناهمسانگردی در این سیستم وابستگی جهتی مدول یانگ و برشی را که بصورت زیر تعیین می-شوند[11]، مورد بررسی قرار گرفت.

$$\frac{1}{E} = S_{11} - 2\left(S_{11} - S_{12} - \frac{S_{44}}{2}\right)\left(l_1^2 l_2^2 + l_2^2 l_3^2 + l_3^2 l_1^2\right)$$

$$\frac{1}{G} = S_{44} + 4\left(S_{11} - S_{12} - \frac{S_{44}}{2}\right)\left(l_1^2 l_2^2 + l_2^2 l_3^2 + l_3^2 l_1^2\right)$$

S_{ij} ثابت‌های تن‌دهی و l_iها کسینوس‌های هادی نسبت به محورهای x،y و z می‌باشند.

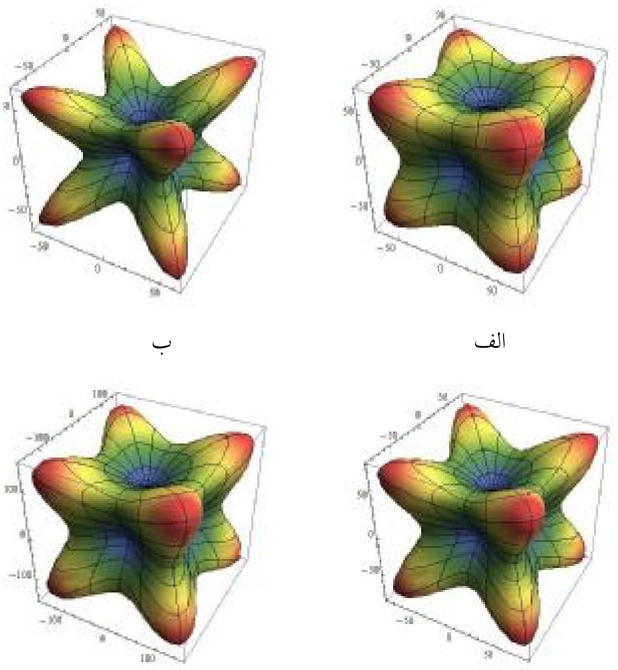
وابستگی جهتی مدول یانگ برای ترکیبات فوق در شکل‌های زیر آمده است:



الف ب

پ ت

شکل2. وابستگی جهتی مدول یانگ بر حسب GPa در سه بعد برای ترکیب (الف) **GaAs**(ب) **AlAs** (پ) **GaP**(ت) **GaN**



شکل 3. وابستگی جهتی مدول یانگ بر حسب GPa در سه بعد برای تهی-جاهای ترکیب (الف) ***GaAs***(ب) ***AlAs*** (پ) ***GaP***(ت) ***GaN***

با توجه به شکل‌ها میزان ناهمسانگردی ترکیب‌ها قابل مشاهده است. همانطور که دیده می‌شود تهی‌جای AlAs دارای ناهمسانگردی بالایی است. این نتیجه به خوبی با مقدار بدست آمده از ضریب زینر در توافق است.

نسبت پواسون از جمله پارامترهای مهم در بررسی خواص الاستیکی مواد جامد است که علاوه بر اینکه به طور کمّی پایداری بلور را در برابر بُرش نشان می‌دهد، اطلاعاتی در مورد نوع پیوند در یک جسم جامد را بدست می‌دهد. مقدار ضریب پواسون در یک ماده‌ی کووالانس برابر $\nu=0/1$ در حالی که در مواد یونی مقدار آن $\nu=0/25$ است[12]. با توجه به مقدارهای بدست آمده برای ترکیب‌های فوق می‌بینیم که ترکیبGaN یونی و بقیه ترکیب‌ها آمیخته‌ای از نوع کووالانسی و یونی هستند. و زمانی که در آنها نقص ایجاد می‌کنیم ترکیب‌ها بسمت پیوندهای یونی متمایل شده-اند.

نتیجه‌گیری

با توجه به محاسبات در ترکیب‌های اصلی ناهمسانگردی دیده می-شود که با ایجاد ناراستی این ناهمسانگردی افزایش یافته است. همچنین کریستال‌های مورد بررسی از مقاومت کمتری در برابر برش تتراگونالی از خود نشان می‌دهند. و کریستال‌ها شکننده می-باشند و در صورت ایجاد نقص کریستال‌ها، کریستال‌ها خاصیت مفتول پذیری پیدا می‌کنند. ومقاومت تتراگونالی آن‌ها نیز کاهش می‌یابد.

مرجع‌ها

[1] W. Voigt, in: Lehrbuch der Kristallphysik, Teubner, Leipzig, 1928.
[2] A. Reuss, Z. Angew, Math. Mech. 9 (1929) 49.
[3] R. Hill, Proc. Phys. Soc. London 65 (1952) 349.
[4] C. Zener, "Elasticite et Anelasticite des Metaux ", Dunod, Paris, (1955).
[5] Antonio Cazzani , Marco Rovati, "Extrema of Young's modulus for cubic and transversely
[6] H.S. Chen, in: Anisotropy of Elasticity about Metal, Metallurgy Industry Press, Beijing, 1996.
[7] Muramatsu, S. and Kitamura, M., Simple Expressions for Elastic Constants *c*11, *c*12, and *c*44 and Internal Displacements of Semiconductors, *J. Appl. Phys*., 1993, vol. 73, no. 9, pp. 4270–4272
[8] P.Perlin, I.Gorczyca, S.Porowski and T.Suski. III-V Semiconducting Nitrides: Physical Properties under Pressure. High pressure Research Center, Polish Academy of Sciences, Sokolowska 29, 01-142 Warzawa,Poland(1993)
[9] S. F. Pugh, "Relation between the elastic modull and the plastic properties polycrystalline pure metals", Philos. Mag, 45, 367 , (1954), 823.
[10]A.Bouhemadou,ModellingSimul.Mater.Sci.Eng.16(2008) 055007.
[11].M.Kikuchi ,J.Japan Inst.Metalls,35(1971) 518.
[12]J. Haines, J. M. Leger, G. Bocquillon, Ann. Rev. Mater. Res. 31(2001)1.

مقایسه دوز جذبی بتای ایزوتوپ های ^{166}Ho و^{177}LU در کورتکس و مدولای کلیه سه پارچه و کلیه یکپارچه به روش مونت کارلو

محمد میرزائی

گروه فیزیک، دانشکده شهید چمران ، دانشگاه فنی و حرفه ای، خیابان شهید مصطفی خمینی، کرمان

چکیده

مقدار زیادی ازرادیوداروهای تجویز شده برای درمان و تشخیص بیماری از طریق کلیه دفع می شود بنابراین دوز ناخواسته تابش در کلیه ایجاد می شود. پس محاسبه دقیق مقدار داروی تجویز شده اهمیت دارد. در این تحقیق یک بار کلیه بصورت یکپارچه و بار دیگر متشکل از سه ناحیه لگنچه، مدولا و کورتکس در نظر گرفته شده و فرض شده رادیودارو بصورت یکنواخت در مدولا توزیع شده است. سپس بوسیله کدMCNPX دوز جذبی بتا در کلیه یکپارچه، کورتکس و مدولامحاسبه و با هم مقایسه شده است. این تحقیق نشان داد، دوز جذبی بتای ایزوتوپ های ^{166}Ho و^{177}LU در مدولا ٤برابر دوز در کلیه یکپارچه است و دوز بتادر کورتکس۰/۰۰٤ تا ۰/۰۱۲ برابر دوزبتا در کلیه یکپارچه است پیشنهاد می شود. برای رسیدن به دوز تجویزی دقیق تر نتایج شبیه سازی کلیه سه پارچه بانتایج کلیه یکپارچه جایگزین شود تا از مسمومیت کلیه پیشگیری شود.

کلمات کلیدی:دوزجذبی، مدولا، کورتکس، روش مونت کارلو

Comparison of beta absorbed dose from ^{166}Ho and ^{177}Lu isotopes in cortex and medulla in three part kidney and integrated kidney using Monte Carlo method

Mohammad Mirzaei

Department of Physics, School of Shahid Chamran,Technical and Vocational University,Shahid Mostafa Khomeini sthreet, Kerman

Abstract

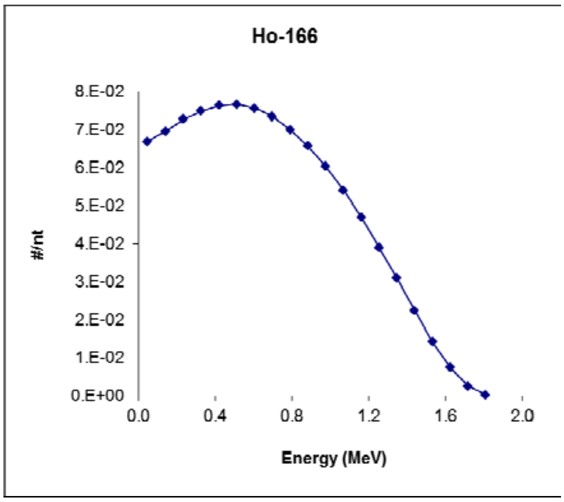
Large quantities of radiopharmaceuticals prescribed for treatment and diagnosis are excreted through kidney. Therefore, unwanted radiation dose is created in kidney. As a result, exact calculation of prescribed medicine amount is important. . In this research, for the first time kidney is considered integrated shape and for the second time has been considered that it is consisted of three areas, pelvis, medulla and cortex. It is supposed that radiopharmaceutical is distributed in medulla. Then, beta absorbed dose is calculated in medulla and cortex using MCNPX code and is compared with integrated kidney results. This research has been showed that beta absorbed dose from ^{166}Ho and ^{177}Lu isotopes in medulla is four times as much as dose in integrated kidney and beta dose in cortex is 0. 004 to 0. 012 times as much as beta dose in integrated kidney. Internal structure of kidney should be considered in simulation to achieve a more accurate prescribed dose. It is recommended that simulation results of three areas kidney are replaced with integrated kidney to prevent from renal toxicity.

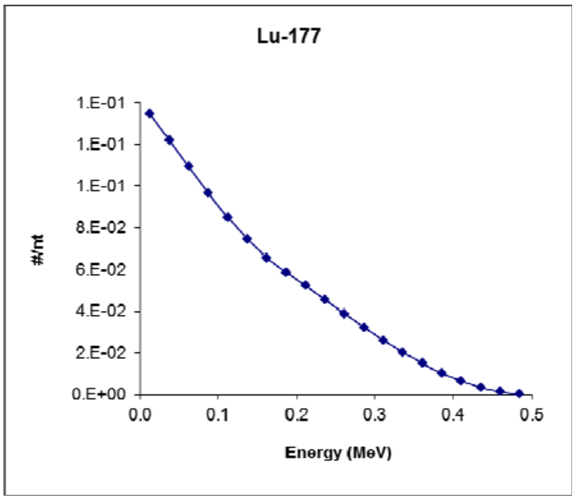
Key words: Absorbed dose, Medulla, Cortex, Monte Carlo method

مقدمه: استفاده‌از رادیوایزوتوپ ها برای مقاصد تشخیصی و درمانی در پزشکی به دهه ی ۱۹۵۰ میلادی برمی گردد(۱). وقتی یک رادیوایزوتوپ برای درمان یا تشخیص به بیمار داده می شود دوز جذبی تابش در اندامهای مختلف می تواند یک عامل محدود کننده باشدزیرا تابش علاوه بر سلولهای سرطانی به سلول های سالم هم آسیب می رساند(۲). به عنوان مثال تجویز بیش از حد ید ۱۳۱ در درمان پرکاری تیروئید می تواند باعث بروز هیپوتیروئیدشود (۳) . وقتی بیمار، به منظور تشخیص یا درمان ، رادیودارو دریافت می کند بخش بزرگی از رادیو دارو از طریق کلیه و مجاری ادراری دفع می شود . بنا براین تجمع رادیودارو در کلیه باعث دوز ناخواسته و عوارض جانبی در کلیه بیمار می گردد. تحقیقات نشان داده که مسمومیت وابسته به مولکولهای کوچک رادیونوکلید در کلیه باعث محدودیت در دوز تجویزی میشود(٤). برای کنترل و نابود کردن سلولهای سرطانی به طوری که کمترین آسیب به بافتهای سالم اطراف برسد، باید محاسبات دوزیمتری با دقت بسیار بالایی انجام شود (۵).

در جزوه MIRD-5 کلیه به شکل بیضیگون در نظر گرفته شده و فرض شده رادیودارو بطور یکنواخت درحجم آن توزیع شده و کسر جذب گاما، در آن محاسبه گردیده و در جداول ثبت و منتشر شده و کسر جذب بتا واحد در نظر گرفته شده است . در صورتیکه اولا"کلیه دارای اجزای داخلی است و رادیو دارو بصورت یکنواخت در آن توزیع نمی شود ودوما"کسر جذب بتا واقعا واحد نیست . در این پژوهش سعی شده این دوفرض نادرست تصحیح شود بنابراین کلیه یک بار بصورت بیضیگون یکپارچه و بار دیگر متشکل از سه ناحیه‌لگنچه ،مدولا و کورتکس در نظر گرفته‌شده‌است. فرض شده رادیو دارو بطور یکنواخت در حجم مدولا توزیع شده و سپس دوز جذبی بتا در مدولا و کورتکس بوسیله کد MCNPX محاسبه و بانتایج‌کلیه‌یکپارچه مقایسه گردیده است .

روش محاسبه :ابتدا داده های تابش بتای رادیوایزوتوپ های ^{177}LU و ^{166}Ho و از سایت اینترنتی TORI دانلود شد(٦).





شکل (۱) : طیف بتای ایزوتوپ های ^{166}Ho و^{177}LU

کد MCNPX در ترابرد تابش بسیار قدرتمنداست(۷).به‌این‌منظورداده‌های طیف‌ایزوتوپ‌هادرفایل‌ورودی کدMCNPX وارد گردید. ابعادتنه و کلیه برای سنین‌نوزادی،۱،۵،۱۰،۱۵ساله

وبزرگسال براساس داده های جزوهORNL/TM8381/V1 محاسبه گردیده است (۸).

همچنینابعاداجزای داخلی کلیه یعنی لگنچه،مدولا وکورتکس‌از جزوه MIRD-19 استخراج شده است(۹). جنس کلیه و جنس بافت اطراف آن بر اساس داده های‌کمیته ICRP[1] با چگالی ۱/۰٤ g/cm^3 از نوع بافت نرم درنظر گرفته شده ست(۱۰).

یافته‌ها:ابتدا کلیه بصورت بیضیگون یکپارچه‌فرض شد که رادیو دارو بطور یکنواخت در حجم کلیه توزیع شده وفایل‌ورودی برای تالی$F8^*$ برای تابش بتای رادیوایزوتوپ های^{177}LU و ^{166}Ho برای سن های نوزاد، ۱، ۵، ۱۰، ۱۵ساله وبزرگسال تهیه شد. پس از اجرای کد انرژی جذبی بتا از فایل های خروجی استخراج و با توجه به جرم کلیه دوزجذبی‌بتامحاسبه گردید. در مرحله دوم فرض شد کلیه از سه ناحیه لگنچه، مدولا وکورتکس تشکیل‌شده و رادیودارو بطور یکنواخت در حجم مدولا توزیع شده وفایل ورودی‌برای تالی$F8^*$ برای تابش بتای رادیوایزوتوپ های- ^{77}LU و ^{166}Hoبرای سن های نوزاد،۱،۵،۱۰،۱۵ساله وبزرگسال تهیه و اجرا شد سپس انرژی جذبی از فایل خروجی استخراج و با توجه به جرم کلیه دوز جذبی بتا محاسبه گردید. نهایتا" به منظور مقایسه دوز جذبی در مدل کلیه یکپارچه با سه پارچه *نسبت دوز جذبی بتای ایزوتوپ های مختلف در کورتکس به دوز جذبی بتا در کلیه یکپارچه* محاسبه و در جدول (۱) درج گردید.

جدول (۱): نسبت دوزجذبی بتای کورتکس در مدل سه پارچه به کسر جذب بتا در کلیه یکپارچه

	^{166}Ho	^{177}LU
نوزاد	۱/۲۱E-۲	۲/۹۷E-۲
۱ ساله	۸/۸۱E-۳	۲/۱٤E-۲
۵ ساله	۷/۸۳E-۳	۱/۸۹E-۲
۱۰ ساله	۷/۳٤E-۳	۱/۷۷E-۲
۱۵ ساله	٦/۸٥E-۳	۱/٦٦E-۲
بزرگسال	۷/۱۱E-۳	۱/۷۲E-۲

همچنین نسبت دوز جذبی بتای مدولا در مدل سه ناحیه ای به کسر جذب بتا در کلیه یکپارچه محاسبه ودر جدول (۲) ثبت گردید.

جدول (۲): نسبت دوزجذبی بتای مدولا در مدل سه پارچه به کسر جذب بتا در کلیه یکپارچه

	^{166}Ho	^{177}LU
نوزاد	۳/۹۸	۳/۹٥
۱ ساله	۳/۹۸	۳/۹٥
۵ ساله	۳/۹۸	۳/۹٦
۱۰ ساله	۳/۹۸	۳/۹٥
۱۵ ساله	۳/۹۸	۳/۹٦
بزرگسال	۳/۹۹	۳/۹٦

[1] International Commission on Radiological Protection

بحث: واضح است که برای رسیدن به بیشترین‌اثردرمانی با کمترین عوارض جانبی‌باید مناسب ترین مقدار رادیو دارو به بیمار داده شود بنابراین برای تجویز دوز مناسب رادیودارو لازم است دوز جذبی بوسیله کدMCNPX محاسبه‌گردد.طبعاهرچه‌نتایج-شبیه‌سازی‌دقیق‌ترباشدمحاسبه‌بادقت‌بیشتری‌انجام می شود.

مقایسه نتایج شبیه سازی، کلیه سه پارچه با یکپارچه که درجدول (۱) درج شده نشان می دهدکه دوز بتای ایزوتوپ های ^{166}Ho و^{177}LU در کورتکس کمتر از دوز در کلیه یکپارچه است بطوریکه نسبت دوز کورتکس به کلیه یکپارچه برحسب نوع رادیوایزوتوپ‌از۰/۰۰٤ تا۰/۰۱۲متغیر است یعنی سهم بسیار کمی از تابش به کورتکس می رسد. همچنین دوزبتا در مدولا حدود ٤ برابر دوز در مدل یکپارچه است با توجه به اینکه کلیه واقعا یکپارچه نیست تجویز دارو بر مبنای مدل یکپارچه‌باعث عوارض جانبی ومسمومیت در مدولا می شود . از آنجائیکه علاوه بر مدولا رادیودارو در کورتکس هم تجمع می کند بایستی این تحقیق در مورد حالتی که رادیودارو در کورتکس جمع شده باشد نیز تکرار شود.

نتیجه گیری : اگر بر اساس کلیه یکپارچه‌پیشنهاد شده در جزوه MIRD-5 محاسبات مقدار داروی تجویز شده انجام شود دوز بتا که درواقع در مدولا جذب می شود تقریبا ٤ برابر مقدار محاسبه شده خواهد بود و منجر به مسمومیت در کلیه خواهد شد.لذا پیشنهاد می شود نتایج شبیه سازی کلیه سه پارچه با یکپارچه جایگزین شود تا از مسمومیت کلیه پیشگیری گردد.

References:

1. Mowlavi AA . Monte Carlo Dose Calculation of ^{90}Sr/^{90}Y Source in Water Phantom (Persian). **Iran J Med Phys** 2008; 5(1):67-72

2. Mirzaie M, Mowlavi A, Mirshekarpour H, et al. Absorbed dose calculation from beta and gamma rays of ^{131}I in ellipsoidal thyroid and other organs of neck with MCNPX code(Persian). **Iran South Med J** (ISMJ). 2012; 15 (3) :201-208

3. Kalantar Hormozi M, Nabipour I, Assadi M, et al. Subclinical Hypothyroid(Persian). **Iran South Med J** (ISMJ). 2011; 14 (1):51-60

4. Wessels BW, Konijnenberg MW, Dale RG, et al . The Effect of Model Assumptions on Kidney Dosimetry and Response—Implications for Radionuclide Therapy. **J Nucl Med** 2008; 49:1884-1899

5. Binesh A, Mowlavi AA , Mokhtari N. Dose calculation due to a ^{125}I source model 6711 and determination of its dosimetry parameters in water and soft tissue phantom(Persian). **Iran J Med Phys.** 2006; 3(12) :9-16

6. Firestone RB, Ekström LP. LBNL Isotopes Project - LUNDS Universitet WWW Table of Radioactive Isotopes. Nuclear Science Division. (Accessed in Jun 5, 2013 at http://ie. lbl. gov/toi/).

7. Waters LS. MCNPX User's Manual. Los Alamos. (Accesed in Jun 10, 2013 at http://mcnpx. lanl. gov/opendocs/versions/v230 /MCNPX_2. 3. 0_Manual. pdf).

8. Cristy M and Eckerman KF. Specific absorbed fraction of energy at various ages from internal photonsources(1987);OakRidgeNational Laboratory(ORNL). ORNL/TM-8381/V1:67-68

9. Bouchet LG, Bloch WE, Blanco HP, et al . Absorbed Fractions and Radionuclide S Values for Six Age-Dependent Multiregion Models of the Kidney. MIRD Pamphlet NO. 19. **J Nucl Med** 2003; 44:1113-1147

10. ICRP. Radiation Dose to Patients from Radiopharmaceuticals. ICRP Publication 53. **Ann. ICRP** 1988; 18(1-4)

شبیه سازی دینامیک مولکولی جذب فیزیکی هیدروژن در داخل و خارج نانولوله های کربنی یک ، دو و سه جداره و تعیین بهینه فاصله جذب

مهناز محمدی *، بهرام خوشنویسان،

دانشکده فیزیک، دانشگاه کاشان

چکیده

ذخیره سازی هیدروژن در نانولوله های کربنی چند دیواره از طریق شبیه سازی دینامیک مولکولی مورد بررسی قرار گرفت. پتانسیل بر همکنش میان H_2-H_2 و C-H هر دو توسط توابع لنارد جونز بیان شده است. میزان جذب هیدروژن در خارج نانولوله با افزایش قطر و تعداد لوله های هم محور افزایش می یابد، علاوه بر آن جذب بین لوله ها نیز افزایش می یابد. درحالی که مقدار کل جذب هیدروژن در دمای K 82 به ترتیب 9/19، 3/34 و 2/86 درصد وزنی درنانولوله های (۵،۵)، (۵،۵) @(۱۰،۱۰) و (۵،۵)@ (۱۰،۱۰)@(۱۵،۱۵) محاسبه شد. بنابراین، نانولوله های تک جداره برای ذخیره سازی هیدروژن سیستم های مناسب تری به نظر می رسند. علاوه بر آن بهترین بازه جذب فاصله 3/2 تا 3/6 Å از نانولوله می باشد که به شعاع نانولوله یا تعداد نانولوله های هم محور بستگی ندارد.

Molecular dynamic simulation of Exo and endo-hydrogenation of single, Double and triple walled carbon nanotubes and determine the optimal adsorption distance

Mohammadi, Mahnaz*; Khoshnevisan, Bahram;

Department of Physics, University of Kashan,

Abstract

The hydrogen storage in multi wall carbon nanotubes MWNTs was studied through molecular dynamics simulations. Potential forms between H_2-H_2 and C-H were both expressed by Lennard-Jones functions. The amount of hydrogen adsorption outside MWNTs increased with increasing diameter, adsorption between tubes was also increased. Total amount of hydrogen adsorption for 82 K was predicted as 9.19, 3.34, and 2.86 wt % for (5,5),(5,5)@(10,10) and (5,5)@(10,10)@(15,15) nanotubes, respectively. Thus, single-walled nanotubes systems seem more appropriate for hydrogen storage. In addition the best range for hydrogen adsorption is 3.2 to 3.6Å away from the CNTs which does not depend on the radius of the tubes or the number of coaxial tubes.

PACS No. 61

مقدمه

امروزه تولید و استفاده از سوخت های پاک و سازگار با محیط زیست بسیار مورد توجه قرار گرفته اند. بدلیل اینکه سوخت های فسیلی درحال به اتمام رسیدن هستند و همچنین به لحاظ قیمت، تأمین امنیت و از طرف دیگر آلودگی های ایجاد شده توسط این سو خت ها که یکی از مهم ترین عوامل آلو دگی محیط زیست می باشد جایگزینی سوختی مناسب ضروری به نظر می رسد که از این میان سوخت های هیدروژنی بسیار مورد توجه قرار گرفته اند.

مزیت کلیدی هیدروژن قابلیت تولید آن از منابع مختلفی همچون سوخت‌های فسیلی، زیست توده، انرژی هسته‌ای و انرژی‌های تجدیدپذیر است. این گاز پس از احتراق بخارات آب تولید می کند که کاملاً از نظر زیست محیطی پاک است و قابلیت چرخش در طبیعت را داراست ونیز محدودیت کمتری برای اشتعال نسبت

به دیگر سوخت های فسیلی دارد. از این رو از هیدروژن به عنوان پایه سوخت در آینده نام برده می شود.

اما چالش اصلی در این راستا ذخیره سازی و حمل ایمن و با صرفه هیدروژن می باشد. روش های فعلی برای ذخیره سازی هیدروژن گران قیمت و نا کارآمد هستند. پس از کشف نانو لوله های کربنی به دلیل ساختار توخالی و توانایی ویژه ای که در ذخیره سازی هیدروژن داشتند بسیار مورد توجه قرار گرفتند [1-4]. ظرفیت ذخیره سازی هیدروژن در نانولوله های کربنی خالص حدود 8 درصد وزنی در 377 K گزارش شد[5]. چن و همکارانش گزارش کردند برای نانولوله های چند لایه که ناخالصی پتاسیم ولیتیم دارند جذب هیدرون به 14 تا 20 درصد وزنی می تواند برسد[6]. بنابراین در مقایسه با دیگر ذخیره ساز های هیدروژن نظیر سیستم هیدروژن مایع، هیدروژن فشرده و هیدرید های فلزی نانولوله های کربنی بهترین انتخاب برای اهداف مورد نظر بوده و می تواند به عنوان سیستمی سبک فشرده ایمن و با قابلیت استفاده مجدد در ذخیره سازی هیدروژن مورد استفاده قرار گیرد.

در این پژوهش جذب فیزیکی مولکول هیدروژن در نانولوله های کربنی یک ، دو و سه جداره با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی مورد بررسی قرار خواهدگرفت و بهترین فاصله جذب محاسبه خواهد شد.

روش و جزئیات محاسبات

در این پژوهش محاسبات دینامیک مولکولی به وسیله بسته نرم افزاری DL-POLY انجام شده است[7]. جذب گاز هیدروژن در هنگرد NVT و در دمای 82 K شبیه سازی شده است[8]. برای ثابت نگه داشتن دما ازترموستات نوز-هوور (بدلیل انرژی تعادلی پایینتر و زمان تعادل کمتر در مقایسه با موارد دیگر) استفاده شده [9] و برای حل معادلات حرکت از الگوریتم پرش قورباغه استفاده شده است. بعلاوه گام زمانی 0/0001 انتخاب شده بدلیل اینکه شرایط ذکرشده سیستم پایدارتری را برای محاسبات به وجود می‌آورند. طول نانولوله‌های کربنی در همه قسمتهای شبیه‌سازی Å 30 در نظر گرفته شد در نتیجه بسته به نوع نانولوله تعداد اتم های کربن متغیر است. شبیه‌سازی ها در جعبه‌ای به ابعاد Å 50×40×40 انجام گرفته و از شرایط مرزی دوره‌ای استفاده شده است.

پتانسیل بین اتم‌های کربن-کربن با پتانسیل ترسف توصیف شده است[10]. برای پتانسیل بین اتمی هیدروژن-هیدروژن از پتانسیل مورس استفاده شده است [11] و همچنین نیروی بین مولکولی کربن-هیدروژن و هیدروژن-هیدروژن با پتانسیل لنارد-جونز شبیه‌سازی شده است (معادله 1)[12].

$$U_{ij} = 4\varepsilon\left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^{6}\right] \qquad (1)$$

که در آن ε نشان دهنده بزرگی برهمکنش یا عمق پتانسیل با بعد انرژی و σ نشان دهنده شعاع تقریبی ذره با بعد طول است. برای نانولوله های چند جداره پتانسیل بین اتمهای کربن – کربن مانند نانولوله تک دیواره با پتانسیل ترسف توصیف شده و برهمکنش اتم های کربن بین دو نانولوله با استفاده از پتانسیل لنارد جونز شبیه سازی شد؛ که پارامترهای این پتانسیل با در نظر گرفتن اختلاف شعاع دو نانولوله به دلیل وابسته بودن پارامترهای مذکور به اختلاف شعاع دو نانولوله انتخاب گردید. طول پیوند کربن-کربن در ابتدای شبیه‌سازیÅ1/42 و طول پیوند هیدروژن-هیدروژن Å 0/74 انتخاب شده است.

بحث و نتیجه گیری

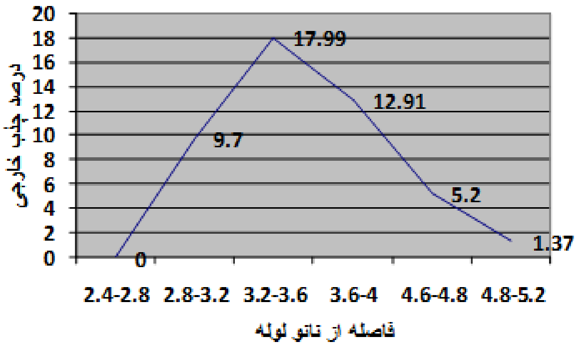
به منظور بررسی جذب فیزیکی مولکول هیدروژن ابتدا 400 مولکول هیدروژن در چند ستون در جعبه شبیه سازی در خارج و داخل نانو لوله چیده شد و محاسبات بهینه برای رسیدن سیستم به مینیمم انرژی و مکان های تعادلی مولکول ها انجام شد. زمان تعادل 30 ps در نظر گرفته شد تا سیستم زمان کافی برای برهمکنش و فرآیند جذب را در اختیار داشته باشد و پس از آن شبیه‌سازی به مدت 100 ps ادامه داده شد تا پایداری سیستم ها مورد بررسی قرار گیرد.

نانولوله (۵،۵) دارای 260 اتم کربن و شعاعی برابر 3/39 انگستروم است و با توجه به آن که هرچه شعاع نانولوله کوچکتر باشد میزان جذب داخلی کمتر می شود بنابراین شعاع کوچک این نانولوله منجر به کوچک شدن سهم جذب داخلی هیدروژن در آن شده است و بیشترین سهم جذب مربوط به جذب خارجی بوده است.جدول(1)

جدول 1: میزان جذب هیدروژن در نانولوله(5و5)

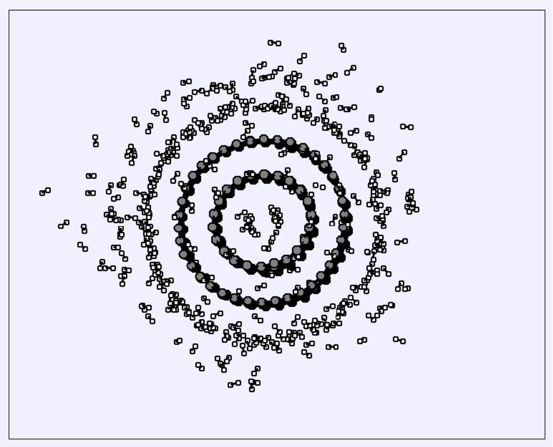
	(۵،۵)
جذب داخلی	3/29
جذب خارجی	36/12
جذب کل	39/41
درصدوزنی	9/19

برای بررسی دقیق بهترین بازه برای جذب خارجی از یک برنامه رایانه ای استفاده شد و تعداد مولکول های جذب شده در بازه هایی به طول 0/4 انگستروم ازفاصله 0 تا 5/2 انگستروم محاسبه شد. همان طور که در نمودار1 مشخص است بهترین بازه جذب خارجی برای نانولوله (۵،۵) بازه 3/2 تا 3/6 انگستروم می باشد.



نمودار1: تغییر جذب خارجی با فاصله برای نانولوله (5,5)در دمای 82 K

برای بررسی اثر شعاع نانولوله بر روی جذب فیزیکی داخلی و خارجی هیدروژن نانولوله دو دیواره (۵،۵) @(۱۰،۱۰) را انتخاب کردیم. شکل(2) ساختار بهینه شده نهایی نانو لوله (۵،۵)@(۱۰،۱۰) را نشان می دهد. همان طورکه در تصویر قابل مشاهده است مولکول های هیدروژن در داخل، خارج و میان دو جداره نانولوله جذب می شوند.



شکل 2: ساختار بهینه شده نهایی نانو لوله (۵،۵) @(۱۰،۱۰) پس از جذب هیدروژن

نتایج حاصل از میزان جذب در نانولوله دو دیـواره ، درسـتون دوم جدول (2) ذکرشده است.

جدول 2: میزان جذب هیدروژن در نانولوله های دو دیواره و سه دیواره

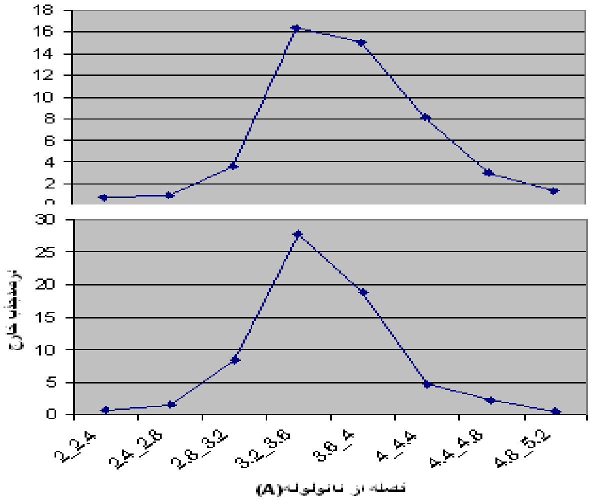
	دو دیواره	سه دیواره
جذب داخلی	5/90	4/64
جذب بین دیواره ها	4/25	41/12
جذب خارجی	32/82	63/32
جذب کل	42/97	80/38
درصدوزنی	3/34	2/86

با توجه به نتایج فوق مشاهده می شود در نانولوله دو دیواره (5,5)@ (10,10) جذب داخلی وخارجی وجود دارد ولی با افزودن یک نانولوله دیگر به نانولوله تک دیواره و ساخت نانولوله دو دیواره میزان جذب داخلی نسبت به نانولوله تک دیواره افزایش می یابد و جذب خارجی اندکی کاهش نشان می دهد ولی در مجموع درصد وزنی جذب کاهش چشمگیری دارد. بنابراین نتایج در مورد نانولوله دو جداره نشان می دهند که در این نانولوله با وجود جذب بین دیواره ها درصد وزنی جذب تا حدود یک سوم کاهش می یابد و جذب کمتری نسبت به نانولوله های تک دیواره با شعاعی برابر با شعاع نانولوله داخلی وجود دارد، ولی در مجموع جذب کل در این نانولوله افزایش یافته است.

به منظور بررسی تعداد دیواره ها در جذب نانولوله سه دیواره (۵،۵) @(۱۰،۱۰)@ (۱۵،۱۵) نیز مورد بررسی قرار گرفت.

جدول (2)میزان هیدروژن جذب شده در داخل و بین نانولوله ها وهمچنین میزان جذب خارجی را نشان می دهد. همانطور که مشاهده می شود میزان جذب کل در نانولوله سه دیواره بیشتر است ولی با این وجود میزان در صد وزنی جذب در نانولوله دو جداره بیشتر است که بدلیل افزایش تعداد اتم های کربن در نانولوله سه دیواره می باشد. علاوه بر این میزان هیدروژن جذب شده در فضای بین نانولوله ها به طور قابل ملاحظه ای نسبت به نانولوله دو دیواره افزایش یافته است وعلاوه بر آن جذب خارجی هیدروژن نیز نسبت به نانولوله دو دیواره افزایش یافته است، که نشان دهنده تاثیر شعاع نانولوله خارجی در جذب می باشد بنابراین با افزایش شعاع میزان جذب خارجی افزایش می یابد.

بررسی بهترین بازه برای جذب خارجی نشان می دهد که بهترین بازه جذب خارجی برای تمام نانولوله ها فاصله 3/2 تا 3/6 آنگستروم می باشد. که نشان می دهد نانولوله های داخلی تاثیر کمی در فاصله جذب خارجی دارند. به علاوه شعاع نانولوله خارجی نیز موثر نبوده و در تمام موارد بهترین بازه جذب تغییر نمی کند.(نمودار2)



نمودار2: تغییر جذب خارجی با فاصله برای نانولوله دوجداره (بالا) و نانولوله سه جداره (پایین)

نتیجه گیری

محاسبه درصد وزنی جذب در نانولوله های یک ، دو و سه جداره نشان می دهد که درصد وزنی جذب در نانولوله های تک دیواره بیش از نانولوله های دو دیواره و سه دیواره می باشد و میزان جذب در نانولوله های دو دیواره بیش از نانولوله سه دیواره می باشد، بنابراین با افزایش تعداد نانولوله های هم محور در صد وزنی جذب کاهش می یابد. بنابراین نانولوله های تک دیواره برای جذب هیدروژن سیستم های مناسب‌تری نسبت به نانولوله های چند جداره به نظر می رسند. محاسبه بهترین بازه برای جذب خارجی در تمام نانولوله های مورد بررسی نشان می دهد که بهترین بازه برای جذب خارجی فاصله 3/2 تا 3/6 انگستروم از نانولوله است. بنابراین نانولوله های داخلی تاثیر کمی در فاصله جذب خارجی دارند، به علاوه شعاع نانولوله خارجی نیز موثر نبوده و در تمام موارد بهترین بازه جذب ثابت است.

مرجع‌ها

[1] A. C Dillon, K. M Jones, T. A Bekkedahl, C.H Kiang, D. S Bethune**,** M. J. Heben; “Storage of hydrogen in single-walled carbon Nanotubes”; *Nature* **386** (1997) 377–9.

[2] A. Chambers, C. Park, R. T. K. Baker, N. M. Rodriguez; “Hydrogen storage in graphite nanofibers”; *J Phys Chem B* **102** (1998) 4253–6.

[3] R. K. Agarwal, J. S. Noh, J. A. Schwarz;” Effect of surface acidity of activated carbon on hydrogen storage”; *Carbon* **25** (1987) 219–26.

[4] M. S. Dresselhaus, K. A. Williams, P. C. Eklund;” Hydrogen adsorption in carbon Materials”; *MRS Bull*,**24** (1999) 45–50.

[5] Y. Ye, C. C. Ahn, C. Witham, B. Fultz, J. Liu, A. G. Rinzler, D. Colbert, K. A. Smith, R. E. Smalley;” Hydrogen adsorption and cohesive energy of single-walled carbon nanotubes”; *Appl Phys Lett* **74** 16(1999) 2307–709.

[6] P. Chen, X .Wu, J. Lin, K. L. Tan; ” High H uptake by alkali-doped carbon nanotubes under ambient pressure and moderate temperatures”; *Science* **285**(1999)91–3.

[7] S. Wei , J. Karl Johnson;” Gas adsorption on heterogeneous single-walled carbon nanotube bundles"; *Physical Review Letters* **91**(2003) 015504.

[8] J. H. Lii, and N. L. Alliger;” Molecular mechanics. The MM3 force field for hydrocarbons. 3. The van der Waals' potentials and crystal data for aliphatic and aromatic hydrocarbons”; *J. Am. Chem. Soc* **111**(1989) 8576-82.

[9]W.G. Hoover;”Nosé Thermostat and Nosé - Hoover Thermostat ”; *Phys. Rev. A* **31** (1985)1695-1705.

[10] J. Tersoff;” New empirical model for the structural properties of silicon”; *Phys. Rev. Lett* **56** (1986) 632.

[11] M. P. Allen, D. J. Tildesley;” Computer Simulation of Liquids”; *Clarendon Press, Oxford* (1987).

[12] S. J. V. Frankland, V. M. Harik, G. M. Odegard, D.W. Brenner, T. S. Gates;” The stress–strain behavior of polymer–nanotube composites from molecular dynamics simulation”; *Compos. Sci. Technol.* **63** (2003) 1655–1661

خواص الکترونی، ساختاری و مغناطیسی سیستم هیبریدی مس/ نانولوله کربنی (۹،۰): محاسبه ابتدا به ساکن

محمدی مهناز* ؛ **مشکاتی نوشین؛ خوشنویسان بهرام**

دانشکده فیزیک، دانشگاه کاشان

چکیده

نانولوله های کربنی (CNT) پر شده از فلزات فرومغناطیس مانند آهن، کبالت یا مس نانو ساختارهایی جدید و با خواص منحصر به فردی می باشند که تولید ساختارهای شبه یک بعدی را امکان پذیر می سازند. در این پژوهش محاسبات نظریه ی تابعی چگالی برای مطالعه خواص الکترونیکی، ساختاری و مغناطیسی ساختار هیبریدی مس /نانو لوله کربنی (۹،۰) استفاده شده است. گاف نواری نانولوله شبه فلز (۹،۰) توسط فرایند پر شدن حذف می شود. از سوی دیگر، سیستم غیر مغناطیسی است. نانولوله های پر شده پتانسیل کابردی بالایی در زمینه پزشکی، فناوری نانو و اسپینترونیک دارند.

Electronic, structural and magnetic behavior of Cu / (9,0) Carbon-Nanotube Hybrid Structure: Ab-initio study

Mohammadi, Mahnaz* ; Meshkati, Nooshin; Khoshnavisan, Bahram

Faculty of Physics, University of Kashan

Abstract

Carbon nanotubes (CNT) filled with ferromagnetic metals like iron, cobalt or Cupper are new and very interesting nano structured materials with a number of unique properties that opens new possibilities of generating nearly one dimensional nanostrutures. In this paper Density functional theory calculations were employed to study the electronic, structural and magnetic properties of (9,0) tube filled with cupper. Quasi-metallic band gap of the (9,0)CNT is eliminated by the filling process. On the other hand, this system is non-magnetic. Metal filled nanotubes have high potential applications in the field of medicine and nanotechnology and the emerging field of spintronics.

PACS No. 61

مقدمه

نانو لوله‌های کربنی دسته منحصربه فردی در نانو مواد می‌باشند که از صفحات کربن به ضخامت یک اتم و به شکل استوانه‌ای توخالی ساخته شده‌اند و در سال 1991 توسط سامیو ایجیما (از شرکت NEC ژاپن) کشف شدند[1]. حفره داخلی نانولوله‌های کربنی یک فضای یک بعدی بسیار کوچک و مناسب برای ذخیره مواد می باشد. در دهه‌ی گذشته تلاش‌های فراوانی به منظور تولید نانو لوله‌های پر شده با مواد معدنی مختلف از جمله فلزات ، آلیاژها، نیمه رساناها و عایق‌ها با استفاده از روش‌ها و سنتزهای مختلفی مانند رسوب شیمیایی بخار و پر کردن با استفاده از خاصیت مویینگی انجام گرفته شده است[5-2]. این سیستم ها شامل ترکیبی از خواص هر دو، یعنی نانولوله کربنی و مواد پر شده می باشند. تمایز و تفاوت واضح بین این دسته از مواد (ساختارهای هیدریدی فلز/ نانولوله) وسایر نانو ساختارها، وجود یک ناحیه عظیم سطحی بین نانولوله کربنی و مواد پر شده می باشد[6]. تحقیقات نظری نشان می دهند که عدم تطابق شبکه و واکنش تبادلی قوی نانو لوله با مواد مهمان (پر شده) در سراسر سطح منجر

به مرتب سازی مجدد ساختار کریستالی مواد مهمان وغیر فعال کردن پیوند سطحی و در نتیجه ایجاد یک ماده جدید با ویژگی های فیزیکی متفاوت می باشد.

از کاربردهای بالقوه این مواد (هیدریدهای فلز/ نانولوله) می توان اندازه گیری دما در مقیاس نانو ، نقطه جوش نانویی ، ذخیرسازی و تحویل مواد در مقادیر بسیار کم را نام برد[7-9]. علاوه بر آن محاسبات ابتدا به ساکن نشان می دهند که ساختار ترکیبی از نانو لوله کربنی و فلزات واسطه، مغناطش قابل توجهی دارند. به ویژه اتم کبالت قرار داده شده در داخل نانولوله دارای قطبش اسپینی قوی در سطح فرمی می‌باشد[10]. بنابراین ساختارهای هیبریدی فلزات واسطه/ نانولوله‌های کربنی یک کاندید مناسب برای استفاده در صنعت اسپینترونیک هستند.

با وجود موفقیت‌های اولیه هنوز درک کاملی از خواص فیزیکی و پارامترهای ساختاری این ترکیبات وجود ندارد. بنابراین در این پژوهش به بررسی خواص ساختاری، مغناطیسی و الکتریکی ساختار هیبریدی مس/ نانولوله کربنی(9،0) می پردازیم.

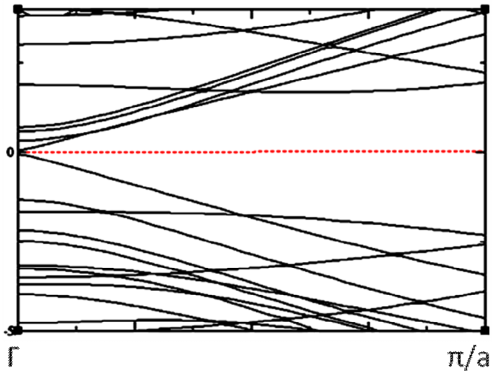
روش و جزئیات محاسبات:

محاسبات درچارچوب نظریه‌ی تابعی چگالی (DFT)، با استفاده از کد محاسباتی PWscf که به حل معادلات کوهن –شم با روش موج تخت و شبه پتانسیل می پردازد، انجام شده است. برای محاسبه پتانسیل تبادلی- همبستگی از تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) استفاده کردیم [11-12]. درتمام محاسبات، شرط همگرایی انرژی کل 0/0001 Ry انتخاب شده بصورتیکه نیروی کل وارد بر اتمها تا 0/001Ry/a.u کاهش یافته است. برای محاسبات نانو لوله یک سلول با ساختار هگزاگونال در نظر گرفته شده است، همچنین برای حذف اثر نانولوله ها بر یکدیگر فاصله میان آن ها 18 Å انتخاب شده است.

نتایج:

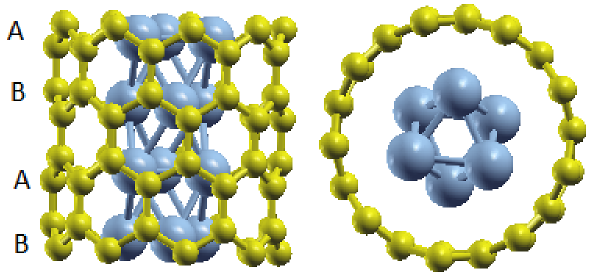
به منظور تجزیه و تحلیل خواص ساختاری و الکترونی مربوط به ساختار هیبریدی مس/ نانولوله ابتدا به بررسی نانولوله‌ی خالص می پردازیم.

چگالی حالت الکترونی نانولوله خالص(9،0) و ساختار نواری آن نشان می دهد که این نانولوله دارای گافی به اندازه 0/1 eV در سطح فرمی می باشد، بنابراین این نانولوله خواص شبه فلزی نشان می دهد که مطابق با تقریب زون- فولدینگ می باشد(شکل1). از طرفی نانولوله (9،0) دارای ساختاری نزدیک به گرافن می باشد زیرا با زیاد شدن شعاع انحنا کاهش یافته و همانطور که اثبات شده است برای نانولوله هایی با شعاع بزرگتر از 7 Å می توان اثرات انحنا را در نظر نگرفت.



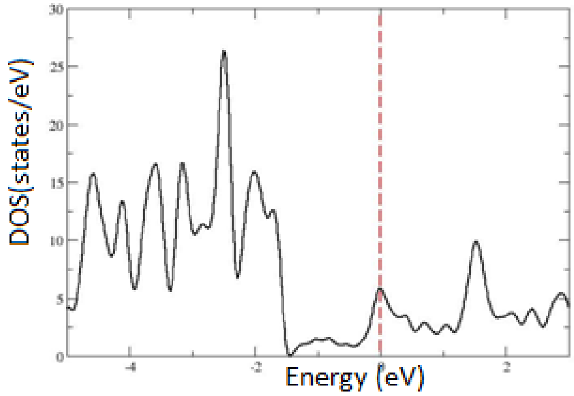
شکل 1: نمودار ساختار نواری نانولوله (۹،۰). انرژی فرمی بر صفر منطبق شده است.

به منظور پر کردن نانولوله می‌توان جایگاه های مختلفی برای اتم های مس با توجه به شعاع نانولوله در نظر گرفت. در این مقاله در هر سلول واحد نانولوله، شش اتم مس در دو ردیف درون نانولوله قرار داده شدند، که در ردیف اول سه اتم مس روی رئوس یک مثلث قرار گرفته و در ردیف دوم اتم های مس در جاهای خالی بین اتم‌های ردیف اول قرار می گیرند و به صورت ABABAB فضای داخلی نانولوله را پر می کنند. شکل (2) ساختار بهینه شده پس از محاسبات واهلش را نشان می دهد بصورتیکه نیروی کل وارد بر اتمها تا 0/001Ry/a.u کاهش یافته است. اتم های مس دارای زاویه° 60 با یکدیگر هستند و متوسط فاصله آن ها از یکدیگر Å 2/65 می‌باشد. علاوه بر آن طول پیوند اتم های کربن در نانولوله به اندازه‌ی 0/5 آنگستروم (143 Å) و زاویه‌ی میان آنها به میزان 0/31 درجه (119/31°) نسبت به نانولوله خالص افزایش یافته است.



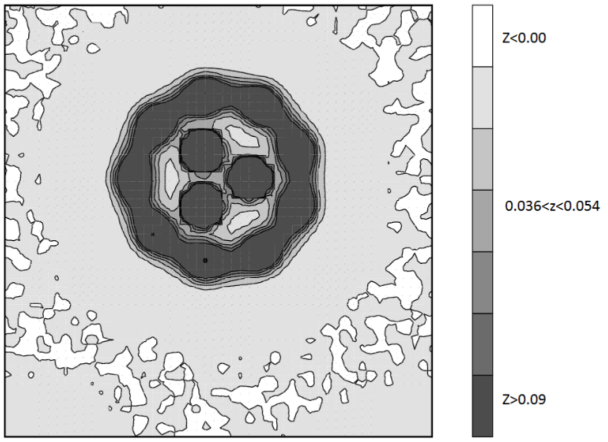
شکل 2 : ساختار بهینه شده پس از محاسبات واهلش. سطح مقطع (سمت راست) و در راستای محور نانولوله (سمت چپ)

بررسی ساختار الکترونی ساختار هیبریدی مس/نانولوله نشان می‌دهد که ساختار الکترونی نانولوله پس از جذب ناخالصی تغییر کرده و سیستم خاصیت فلزی نشان می‌دهد. چگالی حالت ها در سطح فرمی تا 5/5 States/eV افزایش یافته که مربوط به الکترون های اوربیتال p اتم کربن و الکترون های اوربیتال d اتم مس می باشد. (شکل3)

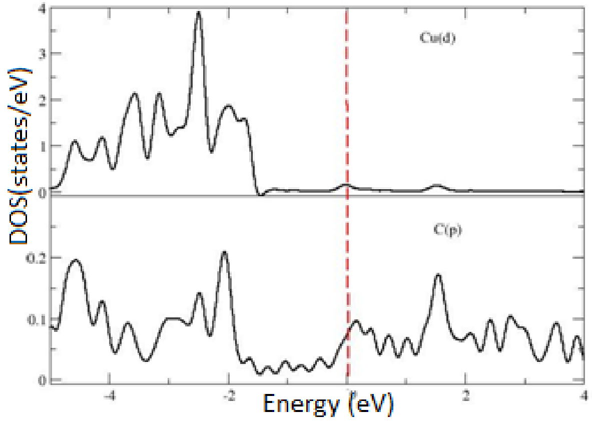


شکل3 : چگالی حالات الکترونی ساختار هیبریدی مس/ نانولوله (سطح فرمی در صفر قرار داده شده است)

متوسط فاصله اتم مس با اتم های کربن مجاور آن Å 2/95 است. طول پیوند ها نشان دهنده عدم تشکیل پیوند شیمیایی بین اتم های کربن و مس می‌باشد. به منظور بررسی دقیق‌تر پیوندها چگالی الکترونی رسم شده است. تراکم زیاد الکترون در میان دو اتم نشان دهنده قوی بودن پیوند میان آن‌هاست و با کاهش تراکم پیوند ضعیف تر می‌شود (شکل4). همانطور که مشاهده می شود میان اتم های کربن نانولوله و اتم های مهمان پیوند صورت نگرفته (بدلیل تراکم جزئی الکترون ها) و باعث ایجاد یک ناحیه سطحی میان نانولوله و اتم‌های مهمان شده است. شکل 5 چگالی حالات الکترونی جزئی اوربیتال های P اتم کربن و اوربیتال های d اتم مس را نشان می دهد که در تأیید با موارد ذکر شده هیبریداسیونی جزئی فقط در ناحیه زیر سطح فرمی میان آن ها مشاهده می شود.



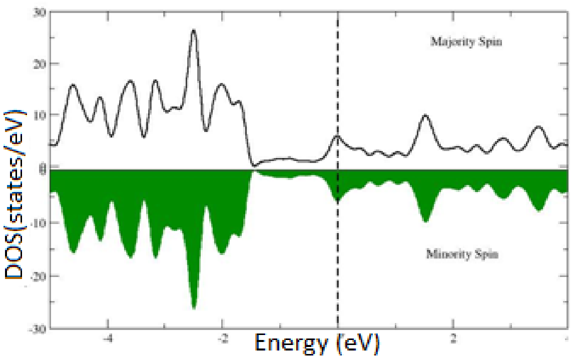
شکل4 : چگالی الکترونی ساختار هیبریدی مس/ نانولوله (سطح مقطع نانولوله و عمود بر محور آن)



شکل 5: چگالی حالت های جزئی اوربیتال d اتم مس (بالا) و اوربیتال p اتم کربن (پایین).

بررسی چگالی حالت‌های کل سیستم مذکور نشان می دهد که چگالی حالات مربوط به اسپین بالا و پایین بر هم منطبق اند بنابراین سیستم دارای ممنتوم مغناطیسی صفر می باشد(شکل6). این ترکیب از لحاظ مغناطیسی مشابه نانو سیم های مسی است که آن‌ها نیز دارای ممنتوم مغناطیسی صفر هستند. از طرفی ممنتوم مغناطیسی اتم مس نیز در حالت کپه‌ای صفر است ولی با این وجود با کاهش بعد می توان اظهار داشت، که سیستم به یک نانوساختار اسپین قطبیده فرومغناطیس تبدیل شود که در این مورد این اثر مشاهده نشده است [13]. علاوه بر آن لازم به ذکر است که

ساختار هیبریدی کبالت/ نانولوله دارای ممنتوم مغناطیسی قابل توجهی (در نانولوله (۹،۰) مغناطش سیستم 1/4 μ_B در هر اتم کبالت) می باشد.



شکل 6 : چگالی حالات الکترونی مربوط به اسپین بالا (بالا) و اسپین پایین (پایین) ساختار هیبریدی مس/ نانولوله.

نتیجه گیری

در این پژوهش خواص ساختار هیبریدی مس/ نانولوله کربنی (9،0) با استفاده از محاسبات ابتدا به ساکن مورد مطالعه قرار گرفت. نتایج محاسبات نشان می دهد که اتم های مس با نانولوله پیوند برقرار نکرده و یک لایه سطحی بین آن دو بوجود می آید. علاوه بر آن بررسی خواص مغناطیسی این سیستم نشان می دهد که دارای ممنتوم مغناطیسی صفر می باشد و حضور اتم های مس موجب شده که نانولوله از نیمه فلز به فلز تغییر یابد.

مرجع‌ها

[1] S. Iijima Helical; “ microtubules of graphitic carbon” ; *Nature* **354 (1991)** 56.
[2] P. M. Ajayan and S. Iijima S; "Capillarity-induced filling of carbon nanotubes" ; *Nature* **361** (1993) 333.
[3] D. Ugarte, T. Stöckli, J. M. Bonard, A. Châtelain and W. A. de Heer ;"Filling Carbon Nanotubes"; *Appl. Phys.* A **67** (1998) 101.
[4] M. Monthioux, E. Flahaut and J. P. Cleuziou, "Hybrid carbon nanotubes: strategy, progress and perspectives" *J. Mater. Res.* **21** (2006) 2774.
[5] P. M. Ajayan, T. W. Ebbsen, T. Ichihashi,S. Iijima , K. Tanigaki and H. Hiura ;" Opening carbon nanotubes with oxygen and implications for filling"; *Nature* **362** (1993) 522 .
[6] U. K. Gautam, P. M. FJ Costa, Y. Bando,X. Fan X, L. Li, M. Imura and D. Golberg; "Recent developments in inorganicallyfilled carbon nanotubes: successes and challenges "; *Sci. Technol. Adv. Mater.* **11** (2010) 054501.
[7] P. S. Dorozhkin, S. V. Tovstonog, D. Golberg,J. Zhan, Y. Ishikawa , M. Shiozawa,H. Nakanishi, K. Nakata and Y. Bando ; "A liquid-Ga-filled carbon nanotube: a miniaturized temperature sensor and electrical switch"; *Small* **1** (2005) 1088.
[8] K. Svensson, H. Olin and E. Olsson ; “Nanopipettes for metal transport"; *Phys. Rev. Lett.* **94** (2004) 145901
[9] J. H. Zhan, Y.Bando, J.Q. Hu, D. Golberg; "Liquid gallium columns sheathed with carbon: bulk synthesis and manipulation"; *J.Phys.Chem.B* **109** (2005) 11580.
[10] CK. Yang , J. Zhao , J. Lu ;" Magnetism of Transition-Metal/Carbon-Nanotube Hybrid Structures ";*Physical Review Letters* **93** (2003)257203.
[11] S. Wei , J. Karl Johnson;” Gas adsorption on heterogeneous single-walled carbon nanotube bundles"; *Physical Review Letters* **91**(2003) 015504.
[12] J. H. Lii, and N. L. Alliger;” Molecular mechanics. The MM3 force field for hydrocarbons. 3. The van der Waals' potentials and crystal data for aliphatic and aromatic hydrocarbons”; *J. Am. Chem. Soc* **111**(1989) 8576-82.
[13] H. Jisang , R.Q. Wu; “Oxygen-Induced Spin-Polarized Ferromagnetic State of a 1D CuO Nanowire”; *Journal of the Korean Physical Society* **47** No4 (2005).

بررسی پایداری سیستم های نانوهیبرید شامل نانولوله های تک جداره پر شده با پلیمر

طیبه مولاروی

دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی شاهرود، شاهرود.

چکیده

در این پژوهش پایداری سیستم های نانوهیبریدی متشکل از پلی تایوفین تزریق شده داخل نانولوله های کربنی تک جداره زیگزاگ، با استفاده از اصول اولیه مورد بررسی قرار گرفته است. یک و دو زنجیر موازی پلی تایوفین داخل نانولوله های تک جداره زیگزاگ (۱۰،۰)، (۱۱،۰)، (۱۲،۰)، (۱۳،۰)، (۱۴،۰)، (۱۵،۰)، (۱۶،۰)، (۱۷،۰)، (۱۸،۰) با قطر حدود ۷ الی ۱٤ آنگستروم تزریق شده است. محاسبه انرژی بستگی این سیستم های نانوهیبرید نشان می دهد که یک زنجیر پلی تایوفین در داخل نانولوله (۱۲،۰) و دو زنجیر موازی پلی تایوفین در داخل نانولوله بزرگتر (۱۵،۰) بیشترین پایداری را نشان می دهد.

Study of stability of nanohybrid systems including single walled carbon nanotubes filled by polymer

Tayebeh Movlarooy

Department of Physics, Shahrood University of Technology, shahrood.

Abstract

In this work the stability of nanohybrid systems including polythiophene encapsulated in zigzag single walled carbon nanotube have been investigated using first-principles. One and two parallel chains of polythiophene have been embedded inside (10,0), (11,0), (12,0), (13,0), (14,0), (15,0), (16,0), (17,0) and (18,0) zigzag single walled carbon nanotubes by diameter about 7 to 14 angstrom. The calculated binding energy of these nanohybrid systems revealed that one chain of polythiophene is more stable in (12,0) and two parallel chains of polythiophene is more stable in (15,0) carbon nanotube.

مقدمه

یک نوع ساختار بسیار جالب، نانولوله‌های کربنی پرشده با مولکول‌های نیمرساناست که به سیستم های نانوهیبرید معروفند و به علت برهمکنش بین مولکول و نانولوله، دارای خواص فیزیکی جالب توجه‌ای بوده و می‌توانند کاربرد گسترده‌ای در شاخه‌های مختلف علمی و صنعتی داشته باشند. معمولا از این سیستم های نانوهیبریدی پیپاد که از تزریق مولکول داخل نانولوله شکل می گیرد، در بیوفیزیک و درمان سرطانها استفاده می شود[۱-٦]. تا کنون تعداد محدودی نانولوله تک جداره پر شده با مولکول های آلی مورد مطالعه قرار گرفته است[۷-۱۰]. در این پژوهش سیستم نانوهیبرید مورد مطالعه متشکل از یک پلیمر آلی (پلی تایوفین) که داخل قفس استوانه ای نانولوله های تک جداره تزریق شده است، را مورد مطالعه قرار می دهیم. پلیمر آرگانیک پلی‌تایوفین با فرمول شیمیایی $(C_8H_4S_2)_n$ در راستای موازی با محور نانولوله داخل نانولوله تزریق شده است.

روش محاسبات

محاسبات این مقاله با استفاده از اصول اولیه به روش پتانسیل کامل امواج تخت تقویت شده خطی در چارچوب نظریه تابعی

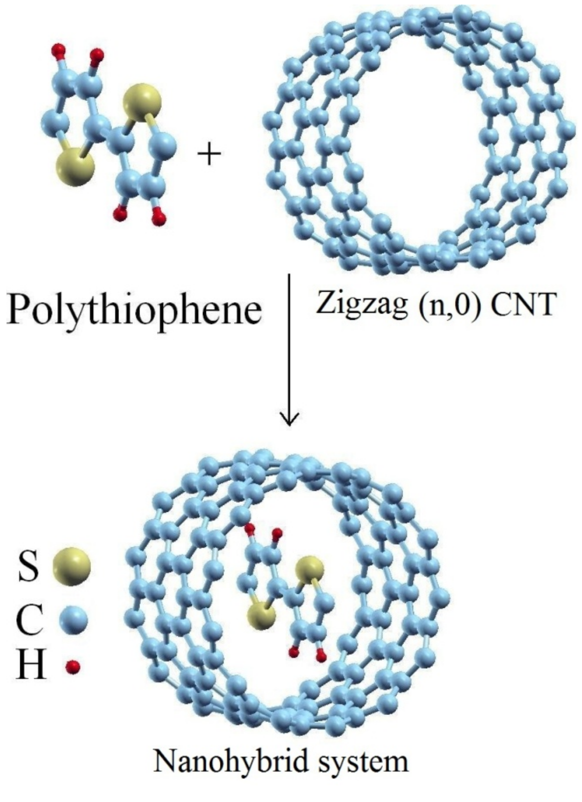
چگالی [۱۱] هوهنبرگ،کوهن شم با تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) به کمک نرم افزار Wien2k و با استفاده از محاسبات موازیMPI صورت گرفته است[۱۳-۱۲]. حدود ۱۰Å خلا جهت اجتناب از برهم کنش های درون لوله ای در نظر گرفته شده است. تمامی محاسبات این فاز با همگرایی در حدود ۰/۰۰۰۰۱ ویژه مقادیر انرژی به دست آمده است. مقدار پارامتر همگرایی RK_{Max} که در محاسبات اندازه انتخاب پایه را کنترل می کند، ٦ در نظر گرفته شده است.

بحث و نتایج

پلی‌تایوفین با فرمول شیمیایی $(C_8H_4S_2)_n$ در راستای موازی با محور نانولوله داخل نانولوله های کربنی تک جداره زیگزاگ (۱۰،۰)، (۱۱،۰)، (۱۲،۰)، (۱۳،۰)، (۱٤،۰)، (۱٥،۰)، (۱٦،۰)، (۱۷،۰)، (۱۸،۰) با قطر حدود ۷ الی ۱٤ آنگستروم تزریق شده است. نمایی از این سیستم های نانوهیبریدی در شکل ۱ نشان داده شده است. پلی‌تایوفین در راستای موازی با محور نانولوله تزریق شده است. با وارد کردن پلی تایوفین به داخل نانولوله ، تقارن سیستم به طور چشمگیری کاهش یافته و بنابراین محاسبات مربوط به سیستم نانوهیبرید بسیار دشوار و زمان بر می‌شود، به طوری‌که انجام محاسبات مربوط به سیستم مرکب با رایانه‌های معمولی امکان پذیر نیست. در جدول۱ قطر، طول، تعداد اتم و گاف انرژی محاسبه شده نانولوله‌های کربنی تک جداره زیگزاگ مقایسه شده است. با افزایش کایرالیتی، قطر نانولوله ها افزایش می یابد. یک و دو زنجیر موازی پلی تایوفین داخل نانولوله های تک جداره زیگزاگ (۱۰،۰)، (۱۱،۰)، (۱۲،۰)، (۱۳،۰)، (۱٤،۰)، (۱٥،۰)، (۱٦،۰)، (۱۷،۰)، (۱۸،۰) تزریق شده است. انرژی بستگی سیستم از رابطه زیر محاسبه می شود:

$$E_b=E_{T+P}-E_T-E_P$$

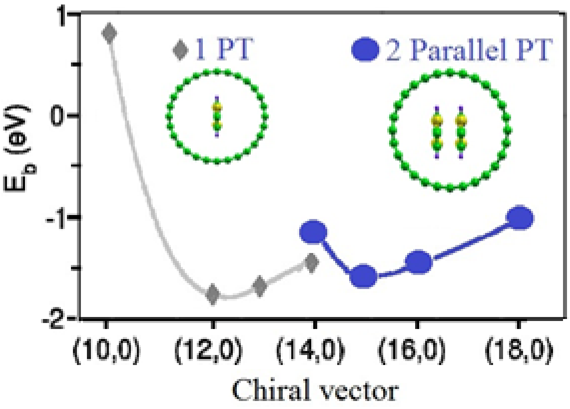
که در آن T و P به ترتیب نشان دهنده نانولوله و پلیمراند. انرژی بستگی بر حسب کایرالیتی نانولوله، برای این سیستم های نانوهیبرید شامل یک و دو زنجیر پلی تایوفین موازی کپسوله شده در نانولوله در شکل۲ نشان داده شده است. با توجه به شکل۲ انرژی بستگی این سیستم های نانوهیبرید نشان می دهد که یک زنجیر پلی تایوفین در داخل نانولوله (۱۲،۰) و دو زنجیر موازی پلی تایوفین در داخل نانولوله بزرگتر (۱٥،۰) بیشترین پایداری را نشان می دهد. در نانولوله های کوچک به دلیل برهمکنش های داخلی بین مولکول و نانولوله، معمولا سیستم نانو هیبرید پایدار نیست. قطر نانولوله باید به اندازه کافی بزرگ باشد تا برهمکنش های داخلی بین مولکول و نانولوله قابل چشم پوشی باشد تا بتوان مولکول را داخل نانولوله تزریق نمود. همان طور که شکل ۲ نشان می دهد، نانولوله (۱۰،۰) به علت قطرکوچک آن جهت تزریق پلی تایوفین مناسب نمی باشد و لذا انرژی بستگی این سیستم مثبت به دست آمده و عملا یک چنین سیستمی پایدار نمی باشد.



شکل۱ : نمایی از سیستم نانوهیبرید، پلی‌تایوفین در راستای موازی با محور نانولوله تزریق شده است.

جدول ۱: مقایسه قطر، طول، تعداد اتم و گاف انرژی نانولوله‌های کربنی تک جداره زیگزاگ

کایرالیتی (n,m)	قطر نانولوله (Å)	طول نانولوله (Å)	تعداد اتم N	گاف انرژی [۱٤] (eV)
(۱۸،۰)	۱٤/۱۰	٤/۲٦	۷۲	۰/۰۳
(۱۷،۰)	۱۳/۳۲	٤/۲٦	٦۸	۰/٥۲
(۱٦،۰)	۱۲/٥٤	٤/۲٦	٦٤	۰/٥۹
(۱٥،۰)	۱۱/۷٥	٤/۲٦	٦۰	۰/۰۹
(۱٤،۰)	۱۰/۹۷	٤/۲٦	٥٦	۰/٦۳
(۱۳،۰)	۱۰/۱۸	٤/۲٦	٥۲	۰/٦
(۱۲،۰)	۹/٤۰	٤/۲٦	٤۸	۰/۰۰۹
(۱۱،۰)	۸/٦۲	٤/۲٦	٤٤	۰/۷۹
(۱۰،۰)	۷/۸۳	٤/۲٦	٤۰	۰/۷۱



شکل۲: انرژی بستگی بر حسب کایرالیتی نانولوله، برای سیستم های نانوهیبرید شامل یک و دو زنجیر پلی تایوفین موازی کپسوله شده در نانولوله.

نتیجه گیری

یک و دو زنجیر موازی پلی تایوفین داخل نانولوله های تک جداره زیگزاگ با قطر حدود ۷ الی ۱٤ آنگستروم تزریق شده است. انرژی بستگی این سیستم های نانوهیبرید نشان می دهد که یک زنجیر پلی تایوفین در داخل نانولوله (۱۲،۰) و دو زنجیر موازی پلی تایوفین در داخل نانولوله بزرگتر (۱٥،۰) بیشترین پایداری را نشان می دهد.

مرجع‌ها

[1] J. Gao , P. Blondeau , P. Salice , E. Menna , B. Bartova ,C. Hébert , J. Leschner , U. Kaiser , M. Milko , C. Ambrosch-Draxl , M. Antonietta Loi, Small 7, (2011) 1807–1815.
[2] M. Monthioux, Carbon 40, (2002)1809.
[3] J. Chen , V. Perebeinos , M. Freitag , J. Tsang , Q. Fu and J. Liu , Ph. Avouris , Science 310, (2005) 1171.
[4] Ph. Avouris , M. Freitag and V. Perebeinos , Nat. Photonics 2 , (2008) 341.
[5] A. Rochefort, Electronic and transport properties of carbon nanotube peapods, Phys. Rev. B 67, (2003) 115401.
[6] J. Bernholc, D. Brenner, M. B. Nardelli, V. Meunier and C. Roland, Mechanical and electrical properties of nanotubes, Annu. Rev. Mater. Res. 32, (2002) 347–375.
[7] N. Tschirner , K. Brose , J. Maultzsch , K. Yanagi , H. Kataura and C. Thomsen , Phys. Status Solidi B 247, (2010) 2734.
[8] K. Yanagi , K. Iakoubovskii , S. Kazaoui , N. Minami , Y. Maniwa , Y. Miyata and H. Kataura , Phys. Rev. B 74 , (2006) 55420.
[9] K. Yanagi , Y. Miyata , Z. Liu , K. Suenaga , S. Okada and H. Kataura , J. Phys. Chem. C , 114 , (2010) 2524.
[10] Y. Fujita , S. Bandow and S. Iijima , Chem. Phys. Lett 413 , (2005) 410.
[11] P. Blaha, D.Singh, P.I. Sorantin and K. Schwarz, Phys. Rev. B 46, (1992) 1321.
[12] P. Blaha, K. Schwarz, WIEN2k, Vienna University of Technology Austria (2002).
[13] M. Peterson, F. Wanger, L. Hufnagel, M. Scheffler, P. Blaha and K. Schwarz, Comput. Phys. Commun. 126, (2002) 294.
[14] T. Movlarooy, et. al, *"Optical absorption and electron energy loss spectra of single-walled carbon nanotubes"*, Computational Materials Science 49 (2010) 450–456.

مطالعه نظری اثر حبس کوانتومی در نانو سیم های سیلیکون کاربايد

طیبه مولاروی[1]

[1] *گروه فیزیک، دانشگاه صنعتی شاهرود،*

چکیده

در این پژوهش خواص ساختاری و الکترونی نانو سیم های سیلیکون کاربايد با ساختار زینک بلند رشد یافته در راستای [111] در چارچوب نظریه تابعی چگالی (DFT) بررسی شده است. ساختار نواری و گاف انرژی برای نانو سیم های سیلیکون کاربايد با قطر حدود 4 الی 15 آنگستروم، با تقریب چگالی موضعی محاسبه شده است. نتایج نشان می دهد که به دلیل اثر حبس کوانتومی، با کاهش قطر نانوسیم گاف انرژی افزایش می یابد. نتایج حاصل از این پژوهش در توافق خوبی با داده های گزارش شده تجربی می باشد.

Ab initio study of quantum confinement effect in SiC nanowires

Tayebeh Movlarooy [1]

[1] *Department of Physics, Shahrood University of Technology, Shahrood*

Abstract

In this work the structural and electronic properties of the [111]-orientated SiC nanowires (SiCNWs) with zinc blende structure, have been investigated within the framework of density functional theory (DFT). Electronic structure and band gap energy of SiCNWs with diameters of 4 to 15 angstrom have been calculated with local density approximation (LDA). The results revealed that the band gap energy increase with decreasing nanowires diameter, due to the quantum confinement effect. Our results are in good agreement with the reported experimental data.

PACS No. 73,81

مقدمه

مفهوم سیمها و نقاط کوانتومی اولین بار در سال 1970 توسط ایساکی و تیسو ارائه شده اند [1] و پیشرفتهای اخیر باعث تولید مواد جدید با ابعاد شبه صفر بعدی در سالهای اخیر شده است. ساختارهای کوانتومی، در سالهای اخیر بسیار مورد توجه واقع شده و مطالعه آنها باعث ایجاد شاخه های جدید در فیزیک بنیادی و شیمی شده است. در این مطالعات، ساختار سیمهای کوانتومی نیمرسانا با پتانسیل های حبس کوانتومی مختلف بصورت ویژه مورد توجه قرار گرفته است، چرا که مشخصه بارز این سیستمها توانایی آنها برای کوانتش کامل طیف انرژی حاملهای بار در آنها است [2-3]. نانوساختارهای نیمرسانای سیلیکون کاربايد با توجه به دامنه وسیع کاربردهایی که پیدا کرده اند در سالهای اخیر بسیار مورد توجه محققین واقع شده اند. در این ساختارهای نانویی توابع موج مکانیک کوانتومی الکترونها و حفره ها در داخل مواد محبوسند و منجر به اثراتی می شوند که آنها را اثرات حبس کوانتومی (quantum confinement) می گویند. از جمله این ساختارها، چاههای کوانتومی نیمرسانا (ابرشبکه ها) هستند که الکترونها در یک بعد فضا محبوسند [4]. علاوه بر حبس حاملها در طول یک بعد فضا، حبس شدیدتر نیز امکان پذیر است، اگر حبس

دو بعدی را معرفی کنیم ساختار را یک سیم کوانتومی می گویند. حال اگر حبس در تمامی سه بعد فضا صورت گیرد از یک نقطه کوانتومی صحبت خواهیم کرد. وجود پدیده حبس کوانتومی منجر به تجزیه نوارهای انرژی حالت توده ای به ترازهای مجزا یا حتی اربیتالهای مولکولی (برای ذرات فوق العاده ریز) و بنابراین تغییر گاف انرژی و افزایش آن در نانوذرات می شود. این حالت زمانی رخ می دهد که شعاع ذرات از شعاع بوهر اکسایتونهای ماده مورد نظر کوچکتر بوده یا با آن قابل مقایسه باشد [5]. به دلیل قابلیت دستیابی به ذرات با ابعاد بسیار کوچکتر از شعاع بوهر اکسایتونی موضوع به کارگیری آنها در ادوات اپتیکی، سلولهای خورشیدی، دیودهای نوری و ...اهمیت فراوانی پیدا کرده است. نانو ساختارهای نیمرسانای سیلیکون کارباید به دلیل داشتن گاف نواری مستقیم و وابسته به اندازه و اثر حبس کوانتومی، کاندیدای مناسبی در ساخت نانو قطعات اپتوالکترونیک اند. اغلب نانوسیم‌های سیلیکون کارباید دارای ساختار زینک بلند اند که در جهت بلوری [111] رشد یافته اند و خواص مکانیکی منحصر به فردی دارند.
حبس کوانتومی نانو ساختارهای سیلیکون کاربايد بوسیله فوتولومینسانس نانو بلورکهای سیلیکون کاربايد زینک بلند مشاهده شده است [6]. پایداری و ساختار الکترونی نانوسیم های سیلیکون کاربايد در ساختار ورتسایت و نانولوله های سیلیکون کاربايد با قطر حدود 0/9 تا 5/8 نانومتر به روش نظریه تابعی چگالی بررسی شده است [7]. در این پژوهش ساختار نواری نانو سیم های سیلیکون کاربايد در ساختار زینک بلند رشد یافته در جهت [111] به روش نظریه تابعی چگالی مطالعه شده است.

روش محاسبات

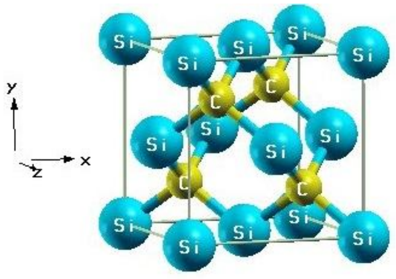
محاسبات این مقاله با استفاده از اصول اولیه و با تقریب چگالی موضعی (LDA) [8] در چارچوب نظریه تابعی چگالی DFT [9-10] هوهنبرگ،کوهن شم صورت گرفته است. حدود 10Å خلا در راستای غیر محوری جهت اجتناب از برهم کنشهای بین نانو سیم ها در نظر گرفته شده است.

بحث و نتایج

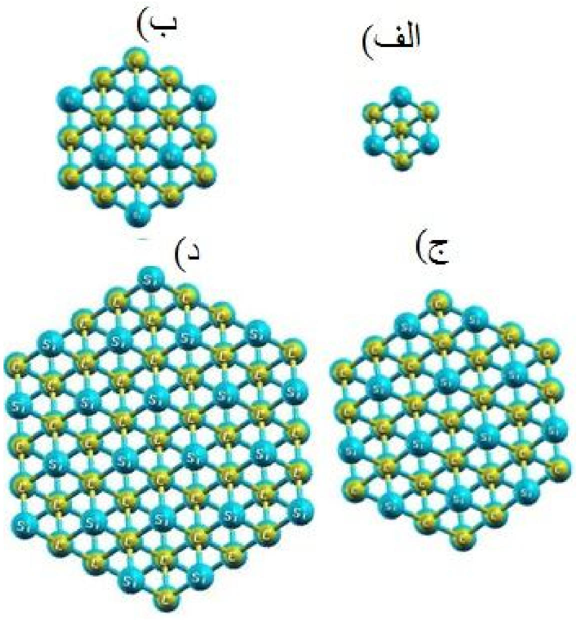
ساختار الکترونی

شکل1 یاخته قراردادی سیلیکون کاربايد در ساختار زینک بلند را نشان می دهد. سطح مقطع نانوسیم های سیلیکون کاربايد در ساختار زینک بلند رشد یافته در راستای [111] با قطرهای مختلف، در شکل 2 نشان داده شده است. ساختار نواری را برای سیلیکون کاربايد در حالت بلوری و همچنین برای نانوسیم های آن با قطر های متفاوت در ساختار زینک بلند با استفاده از نظریه تابعی چگالی محاسبه نموده ایم. و نتایج در شکل های 3 و 4 نشان داده شده است. علی رقم اینکه سیلیکون کاربايد در حالت توده دارای گاف غیر مستقیم می باشد، همانطور که از شکل 4 استنباط می گردد، نانوسیم های سیلیکون کاربايد با قطر کمتر از 20 آنگستروم دارای گاف نواری بزرگتر و مستقیم در نقطه Γ می باشند. به خاطر اثرات حبس کوانتومی در نانوسیم های سیلیکون کاربايد و بستگی ساختار نواری نانوسیم به اندازه و جهت نانوسیم رشد یافته، تراز انرژی در کمینه نوار رسانش در ساختار نواری به سمت نقطه گاما شیفت نموده و گاف نواری غیر مستقیم ساختار بلوری به گاف مستقیم در نانو سیم تبدیل می شود. نانوسیم های سیلیکون کاربايد به دلیل دارا بودن گاف انرژی مستقیم کاربردهای ویژه ای در صنعت اپتوالکترونیک دارند در حالیکه سیلیکون کاربايد توده ای دارای این قابلیت نمی باشد و این یک مزیت از ساختارهای نانویی سیلیکون کاربايد نسبت به حالت توده ای آن می باشد. با توجه به ساختار نواری محاسبه شده سیلیکون کاربايد در شکل 3 ، مشاهده می کنیم که سیلیکون کاربايد در حالت بلوری در ساختار زینک بلند دارای گاف نواری حدود 1.27eV غیر مستقیم از Γ به X می باشد. تغییرات گاف انرژی نانوسیم های سیلیکون کاربايد در ساختار زینک بلند در راستای [111] بر حسب قطر نانوسیم در شکل 5 نشان داده شده است. مشاهده می شود که به دلیل اثر حبس کوانتومی، با کاهش قطر نانوسیم گاف انرژی افزایش می یابد. حبس کوانتومی پدیده ایست که با کاهش سایز در مواد مشاهده می شود. از یک سایزی پایین تر این زندان برای الکترون ها ایجاد می شود و دیگر انتقال الکترون پیوسته نیست و کوانتومی

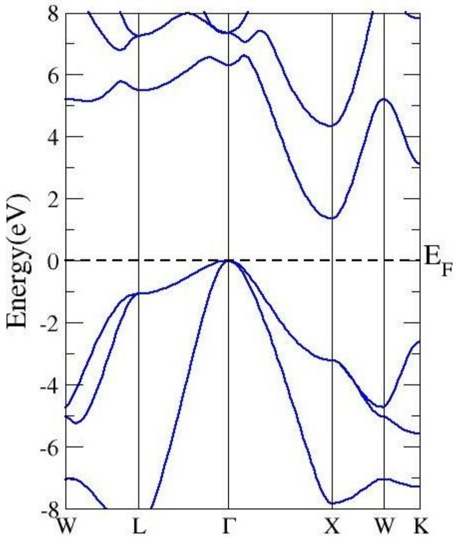
صورت می پذیرد. شعاع اکسایتون بور که در پایین تر از این شعاع با پدیده حبس کوانتومی مواجه هستیم، برای مواد مختلف متفاوت است. با کاهش اندازه ذره و گذشتن از شعاع اکسایتون بور گاف انرژی زیاد تر می شود.



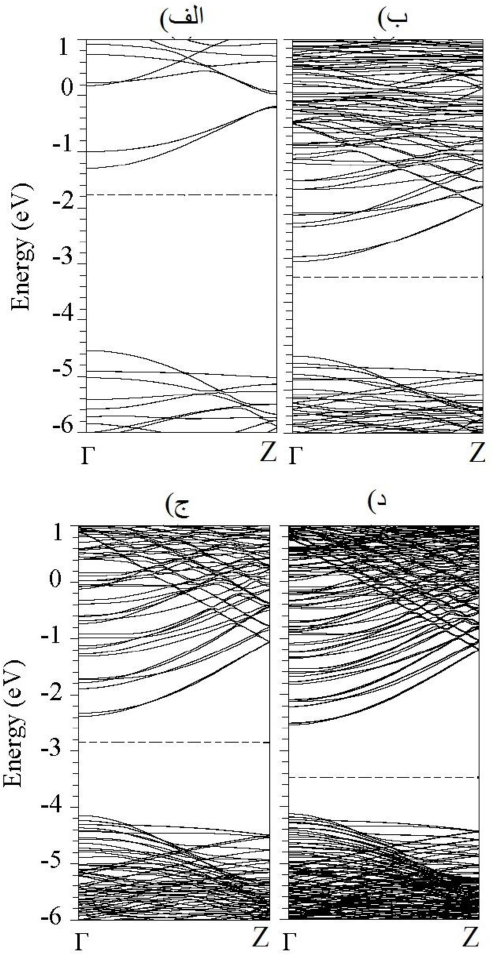
شکل1 : یاخته قراردادی سیلیکون کارباید در ساختار زینک بلند.



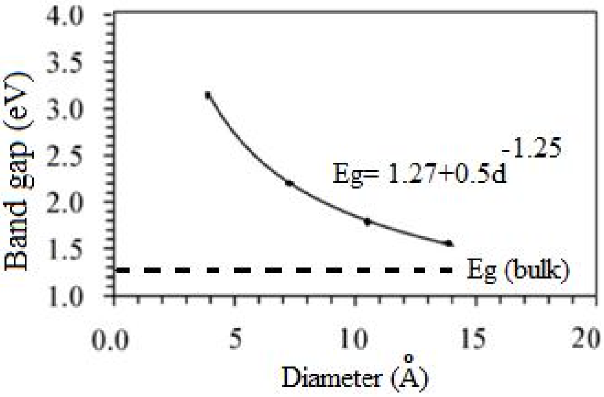
شکل2 : سطح مقطع نانوسیم های سیلیکون کارباید در ساختار زینک بلند در راستای [111] با قطرهای الف) 4 ب) 7 ج) 10.5 و د) 14 آنگسترم.



شکل 3: ساختار نواری محاسبه شده سیلیکون کارباید بلوری در ساختار زینک بلند.



شکل4 : ساختار نواری نانوسیم های سیلیکون کارباید در ساختار زینک بلند در راستای [111] با قطرهای الف) 4 ب) 7 ج) 10.5 و د) 14 آنگسترم.



شکل5 : تغییرات گاف انرژی نانوسیم های سیلیکون کارباید در ساختار زینک بلند در راستای [111] بر حسب قطر نانو سیم، خط چین گاف انرژی ساختار بلوری سیلیکون کارباید را نشان می دهد.

اندازه گاف انرژی نانوسیم ها ی سیلیکون کارباید بر حسب قطر نانوسیم از رابطه زیر تبعیت می کند:

$$E_g(r) = E_g^{bulk} + \beta/d^{\alpha} \qquad (1)$$

که E_g^{bulk} گاف انرژی ساختار توده سیلیکون کارباید که 1.27eV می باشد و d قطر نانوسیم، β و α ثابتهایی اند که با فیت کردن منحنی 5 بدست می آیند. با استفاده از شکل 5 مقدار پارامترهای فیت $\beta = 0.5$ و $\alpha = 1.25$ بدست آمد. لذا اندازه گاف انرژی نانوسیم های سیلیکون کاربایدرشد یافته در جهت [111] در ساختار زینک بلند طبق محاسبات این پژوهش، از رابطه زیر بدست می آید:

$$E_g(r) = 1.27 + 0.5/d^{1.25} \qquad (2)$$

نتایج محاسبات تئوری این پژوهش درباره نانوسیم های سیلیکون کاربایددر ساختار زینک بلند در راستای [111] در توافق خوبی با گزارش های تجربی است [11-14].

نتیجه گیری

خواص ساختاری و الکترونی نانو سیم های کوانتومی سیلیکون کاربایدبا ساختار زینک بلند رشد یافته در راستای [111] در چارچوب نظریه تابعی چگالی (DFT) مطالعه شد. ساختار نواری و گاف انرژی برای نانو سیم های سیلیکون کاربایدبا قطرهای مختلف، با تقریب چگالی موضعی محاسبه شد. نتایج نشان داد علی رقم اینکه سیلیکون کاربایددر ساختار بلوری دارای گاف غیر مستقیم می باشد، نانو سیم های سیلیکون کاربایددارای گافی بزرگتر و مستقیم در نقطه گاما می باشند. مشاهده شد به دلیل اثر حبس کوانتومی، با کاهش قطر نانوسیم گاف انرژی افزایش می یابد. گاف انرژی نانوسیم های سیلیکون کاربایدرشد یافته در جهت [111] در ساختار زینک بلند طبق محاسبات این پژوهش، از رابطه $E_g(r) = 1.27 + 0.5/d^{1.25}$ بدست می آید.

مرجع‌ها

[1] L. Esaki and R. Tsu, IBM J. Res. Dev. 14 (1970) 61.
[2] S. Ünlü, İ.Karabulut, and H. Şafak, "Linear and Nonlinear Intersubband Optical Absorption Coefficients and Refractive Index Changes in a Quantum Box with Finite Confining Potentia." Physica E 33 (2006) 319-324.
[3] D. Bimberg, N. Ledentsov, "Quantom Dot Heterstructures", Wiley, New York, (1999).
[4] L L Chang, et al., J. Vac. Sci. Technol. 10 (1973) 11; AY Cho and J R Arthur, Prog. Solid State Chem. 10 (1975) 157.
[5] A I Ekimov, et al., Solid State Commun. 56, 7 (1985) 921.
[6] X L Wu, J Y Fan, T Qiu, X Yang, G G Siu, and P K Chu, Phys. Rev. Lett. 94 (2005) 026102.
[7] Z H Wang, M W Zhao, T He, X J Zhang, Z X Xi, S S Yan, X D Liu, and Y Xia, J. Phys. Chem. C 113 Y (2009) 856.
[8] D. M. Ceperley, B. J. Alder, Phys. Rev. Lett. 45, (1980) 566.
[9] P. Hohenberg and W. Kohn, Phys. Rev. 136, B864 (1964).
[10] R.O. Jones and O. Gunnarsson, *The density functional formalism, its applications and prospects*, Rev. Mod. Phys. 61, 689 (1989).
[11] D D D Ma, C S Lee, F C K Au, S Y Tong, and S T Lee, Science 299 (2003) 1874.
[12] D. H. Yean, Jr. J. R. Riter, J. Phys. Chem. Solids 32, (1971) 653.
[13] H K Seong, H J Choi, S K Lee, J I Lee, and D J Choi, Appl. Phys. Lett. 85(2004) 1256.
[14] M Bechelany, A Brioude, D Cornu, G Ferro, and P Miele, Adv. Funct. Mater. 17(2007) 939.

کاربست روش طیفی در حل عددی معادله شبه‌زمینگرد امگا

مرادیان ، فاطمه[1]؛میررکنی، سید مجید[1]؛ نصر اصفهانی، محمدعلی[2]؛محب‌الحجه، علیرضا[3]؛

[1]گروه هواشناسی، دانشکده فیزیک دانشگاه یزد، یزد

[2]گروه مهندسی آب، دانشگاه شهرکرد، شهرکرد

[3]گروه فیزیک فضا، موسسه ژئوفیزیک، دانشگاه تهران، انتهای کارگر شمالی، تهران

چکیده

حرکت قائم نقش اساسی در تحول سامانه‌های آب‌وهوا و وضع هوا دارد. سرعت قائم محاسبه‌شده بر اساس شکل‌های مختلف معادله امگا، به‌صورت گسترده در مطالعات فرایابی سامانه‌های وضع هوا و اقلیم به‌کار برده می‌شود. برای محاسبه سرعت قائم، معادله‌ی شبه‌زمینگرد امگا با به‌کمک روش طیفی و با استفاده از توابع هماهنگ کروی حل شده است. در پژوهش حاضر، از داده‌های باز تحلیل مرکز ملی پیش‌بینی محیط زیست و مرکز ملی تحقیقات جوی با تفکیک فضایی درشت که برای شبیه‌سازی پدیده‌های بزرگ‌مقیاس هواشناختی و اقلیم‌شناختی مناسب است استفاده شده است. همخوانی نتایج حاصل از محاسبه‌ی سرعت‌های قائم با الگوی ارتفاع ژئوپتانسیل و سرعت‌های قائم باز تحلیل نشان می‌دهد که روش طیفی برای حل عددی معادله‌ی شبه‌زمینگرد امگا مناسب است.

The Application of spectral method for the numerical solution of the quasi–geostrophic omega equation

Moradian, Fatemeh[1]; NasrEsfahani, Mohammad Ali[2]; MirRokni, Seyed Majid[1]; Mohebalhojeh, Alireza[3]

[1]Meteorology Group, Department of Physics, University of Yazd, Yazd
[2]Departmentof Water Engineering, Shahrekord University, Shahrekord
[3]Department of Space Physics, Institute of Geophysics, University of Tehran, Tehran

Abstract

Vertical motion plays main role in evolution of climate and weather systems. Vertical velocity Calculated on the basis of various forms of the omega equation, widely used in prognostic studies of weather and climate systems. To calculate vertical velocity, quasi–geostrophic omega equation solved using spectral method and spherical harmonic functions. In the present research, reanalysis data from the National Center for Environmental Prediction and National Center for Atmospheric Research with coarse spatial resolution that is appropriate for simulation of meteorological and climatological large−scale phenomena have been used. Results of calculating vertical velocities consistent with the pattern of geopotential height and reanalysis vertical velocities show that spectral methods are suitable for the numerical solution of the omega quasi–geostrophic equation.

PACS No..47...

مقدمه

حرکت قائم جو بر اساس نظریه سنتی شبه‌زمینگرد بی‌دررو، حاصل از فرارفت زمینگرد دما و تاوایی است (هلتون، ۱۹۹۲). استفاده گسترده از این معادله در مورد شارش بزرگ مقیاس فوق حاره‌ای، تخمین قابل قبولی از سرعت قائم جو ارائه می‌دهد.

تحلیل حرکت‌های جوی همدیدی نشان می‌دهد که این حرکت‌ها در راستای قائم دو تا سه مرتبه بزرگی از حرکت‌های راستای افقی کوچک‌تر هستند (هلتون، ۲۰۰۴). حرکت‌های قائم با وجود مقادیر کوچکشان، به‌دلیل انتقال قائم ویژگی‌های جوی که منجر به تغییرات بی‌دررو دما می‌شوند، اهمیت زیادی دارند چراکه این امر

سبب شکل‌گیری یا از بین رفتن پدیده‌های جوی، ابرها و بارش خواهد شد. پیامد نامطلوب اندازه کوچک حرکت‌های قائم این است که این حرکت‌ها (که در دستگاه مختصات فشاری به صورت $\omega = \partial p/\partial t$ است) نمی‌توانند به صورت مستقیم اندازه‌گیری شوند بلکه باید با استفاده از سایر متغیرهای هواشناختی، توسط حل عددی معادله امگا محاسبه گردند (اسمیت و لین، ۱۹۷۸).

در حل عددی معادلات دیفرانسیل با مشتقات جزئی،استفاده از روش‌های عددی مانند تفاضل‌های متناهی، اجزاء متناهی و احجام متناهی سابقه‌ای طولانی دارند علاوه بر این روش‌های طیفی در تعیین جواب‌های تقریبی معادلات دیفرانسیل با مشتقات جزئی مربوط به مسائل واقعی گوناگونی مانند :دینامیک شاره‌ها، حرکت موج، پیشبینی وضع هوا، مدلسازی– تلاطم و مدلسازی لرزه، در مقایسه باروش‌های مرسوم ذکر شده، بسیار دقیق و قدرت‌مند ظاهرشده یا دست کم در کنار آنها، به‌عنوان رقیب قدرتمندی مطرح است (فورنبرگ، ۱۳۷۸).

هدف این مقاله،حل عددی معادله امگا با واداشت‌های شبه‌زمینگردبه روش طیفی است.

روش طیفی

روش طیفی، یک روش عددی برای حل معادلات دیفرانسیل است. در این روش متغیرهای وابسته به شکل سری‌هایی از توابع متعامد بسط داده می‌شوند (ازسری فوریه استفاده می‌شود). باجای گذاری این متغیرها، معادلات اصلی به یک سری از معادلات دیفرانسیل معمولی تبدیل می‌شوند که ضرایب بسط معمولا توابعی از زمان هستند. از روش طیفی برای مدلسازی جهانی استفاده می‌شود. برای این‌گونه مدلسازی از هماهنگ‌های کروی استفاده می‌شود که از سری فوریه پیچیده‌تر هستند. این مدل‌ها متغیرهای جوی را در فضای طیفی پیش‌بینی می‌کنند و سپس برای نمایش آنها را به فضای فیزیکی تبدیل می‌نمایند (غفاریان، ۱۳۸۵).

معادله امگا

سرعت قائم یک فراسنج مورد توجه در پیش‌بینی وضع هوا و مطالعه سامانه‌های جوی است. سرعت قائم محاسبه‌شده بر اساس شکل‌های مختلف معادله امگا، به‌صورت گسترده در مطالعات فرایابی سامانه‌های جوی استفاده می‌شود. بنابراین ضروری است که معادله امگا به منظور تفسیر حرکت قائم با واداشت‌های مختلف امگا حل و تحلیل شود.

کریشنا مورتی (۱۹۶۸) روشی را برای بخش‌بندی معادله حرکت قائم به سازوکارهای ایجادکننده آن ارائه نمود. شکل خطی‌شده معادله امگای شبه‌زمینگرد به صورت زیر است:

$$L_1(\omega) = f\frac{\partial}{\partial p}J(\overline{\psi},\zeta) + f\frac{\partial}{\partial p}J(\psi,\overline{\zeta}+f) + \overline{\pi}\nabla^2 J(\overline{\psi},\theta) + \overline{\pi}\nabla^2 J(\psi,\overline{\theta}) \qquad (1)$$

عبارت‌هایی که با برخط $(^{-})$ شخص شده‌اند، نشانگر مقادیر میانگین یک دوره زمانی است. L_1 عملگری خطی است که سرعت قائم را به فضای سه‌بعدی انتقال می‌دهند و $\pi = RT/P\theta$ است. عموماً اگر یک عبارت واداشت بزرگ‌تر از صفر باشد، حرکت بالاسو را موجب می‌شود. سمت راست معادله (۱)، عبارت‌های واداشت هستند، دو عبارت اول، اثر فرارفت تاوایی دیفرانسیلی حاصل از مؤلفه باد ناواگراست. عبارت‌های سوم و چهارم، لاپلاسین فرارفت حرارتی حاصل از باد ناواگرا بوده و عبارت آخر اثر گرمایش نهان حاصل از همرفت بزرگ‌مقیاس است. از آنجاکه $\nabla^2 < 0$، نشانگر وجود بیشینه است، گرمایش مثبت، حرکت صعودی را به همراه خواهد داشت.

عملگر L_1 به‌صورت زیر تعریف می‌شوند:

$$L_1(\omega) = \nabla^2(\overline{\sigma}\omega) + f^2\frac{\partial^2\omega}{\partial p^2} \qquad (2)$$

که متناظر با معادله امگای شبه‌زمینگرد است؛ البته باید توجه داشت که عبارت‌های معادله امگای شبه‌زمینگرد، دقیقا متناظر با این شکل کاهش‌یافته نیستند. تابع جریان به‌کار رفته در نظریه‌شبه‌زمینگرد، زمینگرد است $(\psi = \phi/f)$. به‌علاوه f ثابت است و $\overline{\sigma}$ فراسنج ایستایی است که در سامانه‌شبه‌زمینگرد تنها تابعی از فشار است.

دامنه محاسباتی تمام کره زمین بوده و داده‌ی مورد استفاده در این پژوهش، داده‌های باز تحلیل مرکز ملی پیش‌بینی محیطی و مرکزملی پژوهش‌های جوی است. تفکیک افقی داده‌ها ۲/۵×۲/۵ درجه در راستاهای طول و عرض جغرافیایی بوده و شامل۱۲ تراز در راستای قائم است که درساعت‌های ۰۰، ۰۶، ۱۲ و ۱۸ (چهار مرتبه در روز) در دسترس می‌باشند.

حل عددی معادله (۱) مستلزم محاسبات سنگین و پیچیده است و برای مدل‌سازی حرکت قائم شبه‌زمینگرد، برنامه‌نویسی به زبان ویژوال فرترن صورت گرفته است.

اولین فاز در حل عددی معادله (۱) تعیین واداشت‌های سمت راست معادله است، این فاز همچنین شامل یک درون‌یابی مکعبی از یک شبکه ۱۲ سطح فشاری، به یک شبکه منظم ۱۰ سطحی می‌باشد، که برای سادگی محاسبات انجام می‌شود. تمام واداشت‌ها در سطوح اصلی محاسبه می‌شوند و سپس برای محاسبه ω به سطوح منظم با بازه ۱۰۰ میلی‌بار درون‌یابی می‌شوند.

از آنجایی‌که عملگرهای سمت چپ معادلات نسبت به ω خطی هستند، سهم عبارت‌های واداشت منحصر به‌فرد می‌تواند با درنظر گرفتن شرایط مرزی همگن ($\omega=0$ در بالاترین و پایین‌ترین سطح) به‌صورت جداگانه محاسبه شوند (رایزانن، ۱۹۹۵).

برای حل معادله (۱)، بر اساس روش طیفی واداشت‌های سمت راست در هر سطح فشاری باید به‌صورت یک سری از هماهنگ‌های کروی بسط داده شود:

$$F=\sum\nolimits_{n,m} C_n^m(p)Y_n^m \qquad (۳\text{-الف})$$

که در آن n عدد موج مجموع و m عدد موج مداری است، Y تابع هماهنگ کروی و C یک ثابت وابسته به فشار است. اگر بسط متناظری برای ω به‌صورت زیر بنویسیم:

$$\omega=\sum\nolimits_{n,m} X_n^m(p)Y_n^m \qquad (۳\text{-ب})$$

معادله (۳) می‌تواند به صورت مجزا برای هر m و n نوشته شود:

$$\left[-\sigma_0(p)\frac{n(n+1)}{a^2}+f_0^2\frac{\partial^2}{\partial p^2}\right]X_n^m=C_n^m \qquad (۴)$$

که a شعاع کره زمین است، ثابت‌های X، با حل (۴) روی یک شبکه ۱۰ سطحی با استفاده از روش ماتریس نواری به‌دست خواهد آمد (دهل‌کوئیست و بجورک، ۱۹۶۹). در بالاترین و پایین‌ترین سطوح، ثابت X صفر در نظر گرفته می‌شود، بنابراین در این سطوح $\omega=0$ است.

در روش ماتریس نواری، باید مشتق‌های موجود در رابطه را با معادل تفاضلی آن جایگزین نمود. بنابراین :

$$\frac{\partial^2}{\partial p^2}X_n^m \approx \frac{X_n^m(p+1)-2X_n^m(p)+X_n^m(p-1)}{h^2} \qquad (۵)$$

در اینجا h فاصله بین سطوح فشار ی است که باید یکسان باشد.

با جای‌گذاری رابطه فوق در معادله (۵) خواهیم داشت:

$$f_0^2X_n^m(p+1)+\left(-\sigma_0(p)\frac{n(n+1)}{a^2}h^2-2\right)X_n^m(p)+ f_0^2X_n^m(p-1)=h^2C_n^m \qquad p=2,3,\ldots,9 \qquad (۶)$$

که در شکل ماتریسی می‌توان آن را به صورت زیر نوشت:

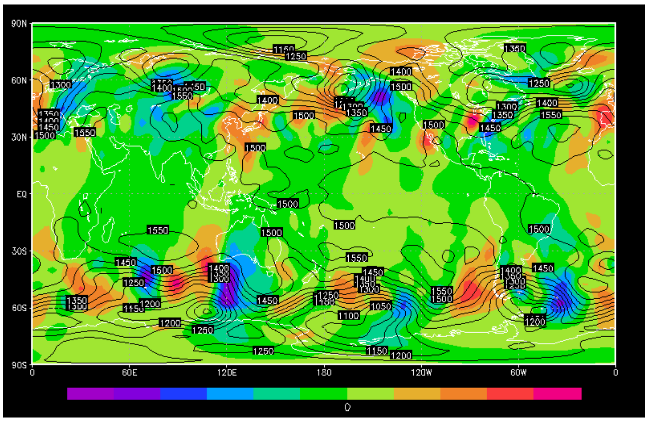
$$AX_n^m=h^2C_n^m$$

که:

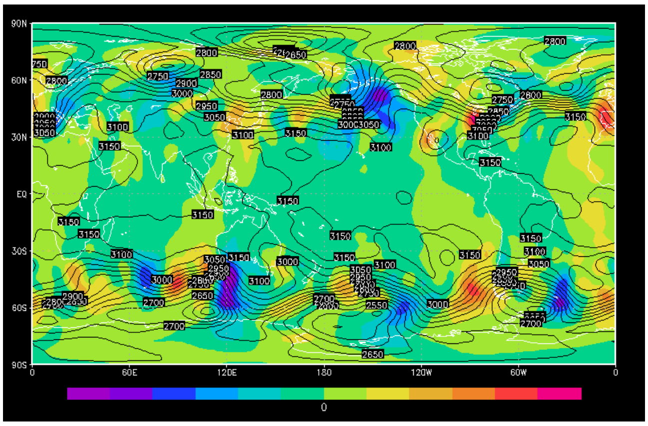
$$a=\begin{bmatrix} a & f_0^2 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ f_0^2 & a & f_0^2 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & f_0^2 & a & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & f_0^2 & a \end{bmatrix}, \qquad a=-\sigma_0(p)\frac{n(n+1)}{a^2}h^2-2$$

به ماتریس A ، ماتریس نواری اطلاق می شود. A یک ماتریس سه قطری است و با استفاده از روش حل معادلات با ماتریس ضرایب سه‌قطری، می‌توان ثابت‌های X را به‌دست آورد وبا استفاده از رابطه (۳-ب) می‌توان ω حاصل از واداشت‌های شبه‌زمینگرد را به‌دست آورد.

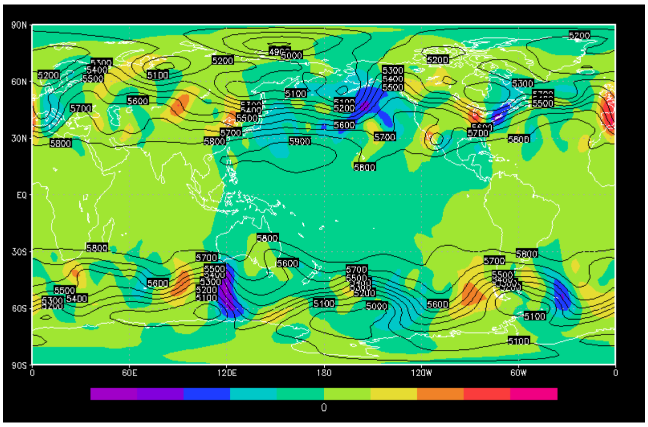
شکل ۱ الگوهای سرعت قائم (سایه‌دار) و ارتفاع ژئوپتانسیلی (خط مشکی) را نشان می‌دهد. محور افقی طول و محور عمودی عرض جغرافیایی را نشان می‌دهد. مناطق شامل حرکت‌های صعودی (رنگ سرد) و نزولی (رنگ گرم) در شکل دیده می‌شود. الگوی سرعت قائم با الگوی ارتفاع ژئوپتانسیلی همخوانی دارد. در جریان‌سوی ناوه‌ها (پشته‌ها)، حرکت صعودی (نزولی) دیده می‌شود. به‌علاوه، سرعت قائم همراه با افزایش (کاهش) شیو ارتفاع ژئوپتانسیلی تقویت (تعضیف) می‌شود.



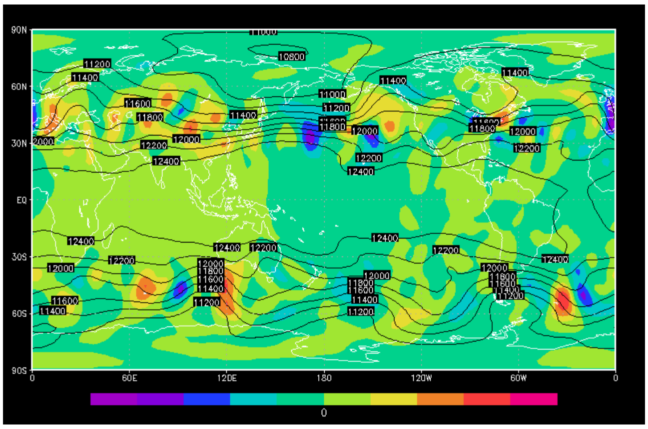
شکل ۱. سرعت قائم (سایه‌دار) و پربندهای ارتفاع ژئوپتانسیلی (خط مشکی) در تراز ۸۰۰ هکتوپاسکال، بازه‌ی پربندی ۱۰۰ متر است.



شکل ۲. مانند شکل ۱ ولی برای تراز ۷۰۰ هکتوپاسکال.



شکل ۳. مانند شکل ۱ ولی برای تراز ۵۰۰ هکتوپاسکال.



شکل ۴. مانند شکل ۱ ولی برای تراز ۲۰۰ هکتوپاسکال.

برای رعایت اختصار، نتایج در ترازهای انتخابی (۸۰۰، ۷۰۰، ۵۰۰ و ۲۰۰ هکتوپاسکال) نشان داده شده‌اند. بررسی شکل‌های ۲، ۳ و ۴، نتایج به‌دست آمده از شکل ۱ را تایید می‌کنند. شایان ذکر است، با افزایش ارتفاع سرعت قائم کاهش می‌یابد.

نتیجه‌گیری

الگوهای حاصل از حل عددی معادله‌ی شبه‌زمینگرد امگا به‌کمک هماهنگ‌های کروی و روش ماتریس باند نشانگر مناطق صعودی و نزولی در جو است. مقایسه‌ی الگوهای به‌دست آمده برای سرعت قائم با الگوهای ارتفاع ژئوپتانسیلی هماهنگی بین این دو الگو را نشان می‌دهد. در جریان‌سوی ناوه‌ها (پشته‌ها)، حرکت صعودی (نزولی) دیده می‌شود. به‌علاوه، سرعت قائم همراه با افزایش (کاهش) شیو ارتفاع ژئوپتانسیلی تقویت (تضعیف) می‌شود. همانطور که انتظار می‌رود با افزایش ارتفاع سرعت قائم کاهش می‌یابد و می‌توان روش طیفی را با توجه به ویژگی‌های آن، روش مناسبی برای حل عددی معادله شبه‌زمینگرد امگا ارزیابی نمود.

مرجع‌ها

غفاریان، پ.، ۱۳۸۵؛ «پیش‌بینی میدان تاوایی به روش طیفی در محیط فشارگرای». پایان‌نامه کارشناسی ارشد هواشناسی، دانشگاه آزاد اسلامی واحد تهران شمال.

فورنبرگ، بنت، ۱۳۷۸؛ «راهنمای عملی برای روش‌های شبه‌طیفی» ترجمه دکتر سید محمد حسینی.

G. Dahlquist and Å. Björck; “ *Numerical Methods*”; Prentice Hall, (1969) 573 pp.

J. Räisänen; “Factors affecting synoptic-scale vertical motions: A statistical study using a generalized omega equation”;*Mon. Weather Rev*., **123** (1995) 2447–2460

J. R.Holton;“*An Introduction to Dynamic Meteorology*”; 3d ed. Academic Press, (2004) 511 pp.

P. J., Smith, C. P. Lin, 1978;“*A Comparison of Synoptic-Scale Vertical Motions Computed by the Kinematic Method and Two Forms of the Omega Equation*”.Mon. Wea. Rev.,**106**, 1687–1694.

T. N.Krishnamurti;“*A diagnostic balance model for studies of weather systems of lowand high latitudes, Rossby number less than 1*”;*Mon. Weather Rev*., **96** (1968) 197–207.

بررسی اثر فشار بر ویژگی‌های الکترونی اکسید تیتانیوم

مختاری ، علی؛ هوشمندی قانع، سعیده

ترکیب اکسید تیتانیوم، Ti_2O_3، مورد مطالعه قرار گرفته‌است. ویژگی‌های ساختاری و الکترونی مانند گاف‌های انرژی، پهناهای نواری، جرم موثر الکترون و حفره، در چند مسیر تقارنی، بررسی و با شبیه‌سازی اثر فشار بر این سامانه، وابستگی این کمیت‌ها به این شاخصه مطالعه شده‌است. همان‌طور که انتظار می‌رود، این کمیت‌ها با افزایش فشار تغییر کرده و به هم‌تای خود در سامانه‌های رسانا نزدیک می‌شوند.

study of the effect of pressure on electronical properties of titanium oxide

Mokhtari, Ali; Hushmandi Ghane, Saeede

Titanium oxide, Ti_2O_3, has been studied. Structural and electronical properties such as energy gaps, width of bands, effective masses of electrons and holes in a number of symmetrical paths, has been evaluated and with simulating the effect of pressure on the system, the dependence of these quantities on this parameter has been studied. As it has been expected, all the quantities have changed and approached to the similar ones in conducting systems.

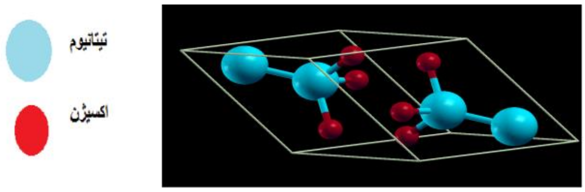
PACS No.

مقدمه

اکسید تیتانیوم در کاتالیزورها، صنایع الکترونیک و ساخت دیودها، صنایع غذایی و دارویی، و سرامیک‌سازی کاربرد دارد.

این ترکیب، در دو سامانه‌ی لوزی‌گون و راست‌گوشه متبلور می‌شود. در سامانه‌ی لوزی‌گون که در این مقاله بررسی شده‌است، ثابت شبکه ۱۰٫۲۶ واحد اتمی و زاویه‌ی مشخصه ۵۶٫۷۵ درجه اندازه‌گیری شده‌است [۱]. در این سامانه که در شکل ۱ نشان داده شده‌است، در هر یاخته دو ملکول یا چهار اتم تیتانیوم و شش اتم اکسیژن وجود دارند [۲].

این ماده‌ی نیمه‌رسانا در دمای بالا، فشار بالا یا هر دو گذار هم‌ساختار به حالت فلزی را تجربه می‌کند [۳].



شکل ۱ : اکسید تیتانیوم در یاخته‌ی بسیط؛

بررسی ویژگی‌های ساختاری

با استفاده از بسته‌ی محاسباتی کوانتوم اسپرسو، مقدار بهینه‌ی زاویه‌ی مشخصه‌ی سامانه‌ی لوزی‌گون ۵۷٫۸۷ درجه به دست آمده‌است.

از آن جا که این شبیه‌سازیّ‌ها در دمای ثابت انجا می‌شوند، می‌توان انرژی را به صورت تابعی از حجم نوشته و برای این منظور از تابعی که مورناگان پیشنهاد می‌دهد، استفاده کنیم:

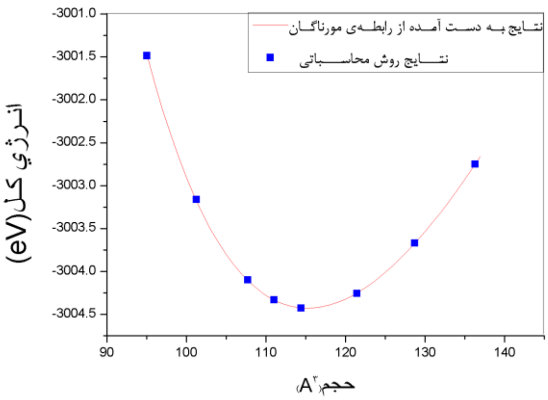
$$E(V) = \frac{B_0 V}{B'_0}\left[\frac{\left(\frac{V_0}{V}\right)^{B'_0}}{B'_0 - ۱} + ۱\right] + E_0 - \frac{B_0 V_0}{B'_0 - ۱} \quad (۱)$$

با مشتق‌گیری از انرژی، نسبت به حجم، می‌توان به رابطه‌ی فشار رسید.

$$P = -\frac{dE}{dV} = \frac{B}{B'}\left[\left(\frac{V_0}{V}\right)^{B'} - ۱\right]. \quad (۲)$$

با ترکیب روش محاسباتی و برازش مورناگان (رابطه‌ی ۱)، مقدار بهینه برای ثابت شبکه ۱۰٫۲۶۶ واحد اتمی به دست آمده‌است (شکل‌های ۲).

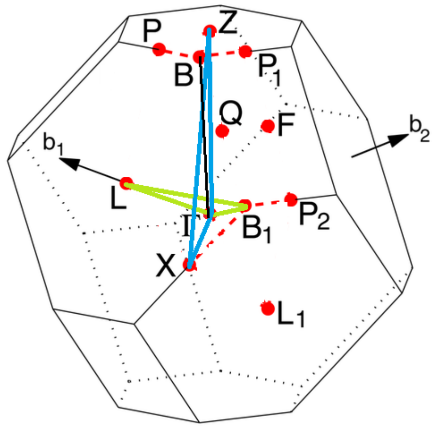
از تطابق نتایج به دست آمده از دو روش محاسباتی و برازش مورناگان، درمیابیم که معادله‌ی حالت مورناگان با تقریب خوبی این دستگاه را توصیف می‌کند (شکل ۲).



شکل۲ : تطابق نتایج دو روش محاسباتی و برازش مورناگان.

بررسی ویژگی‌های الکترونی

در مسیرهای تقارنی Γ-L-B۱-Γ، Γ-X-Z-Γ و Γ-B ساختار نواری محاسبه شده‌است (شکل‌های ۳ و ۴). در نمودار نشان داده‌شده در شکل ٤، در تمامی مسیرهای گفته‌شده، گاف مستقیم Γ-Γ با اندازه‌ی ۱٫۵الکترون‌ولت خوانده می‌شود.

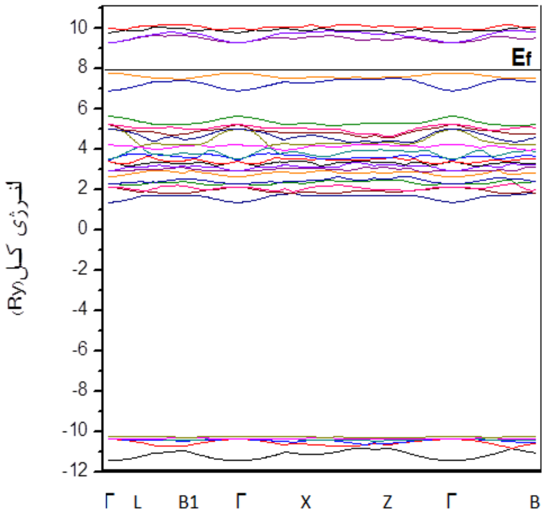


شکل۳ : نقاط تقارنی و مسیرهای بررسی‌شده، در یاخته‌ی اکسید تیتانیوم در فضای وارون.

می‌توان از نمودار ساختار نواری گاف‌های فرعی و پهناهای نواری را نیز استخراج کرد (جدول۱).

در ساختار نواری، دو کمیت بسیار مهم، تقعرهای نوارهای رسانش و ظرفیت به ترتیب در پایین‌ترین و بالاترین نقطه‌ی خود می‌باشند. با استفاده از این کمیت‌ها و با توجه به واحدهای آن‌ها، می‌توان جرم موثر را محاسبه نمود [٤]:

$$m^* = \hbar^2 \frac{1}{\frac{d^2E}{dk^2}} . \qquad (۳)$$



شکل٤ : ساختار نواری ترکیب اکسید تیتانیوم.

جدول۱ : کمیت‌هایی که از نمودار ساختار نواری خوانده می‌شوند.

کمیت	انرژی‌های خوانده‌شده از نمودار ساختار نواری (الکترون‌ولت)
گاف اصلی	۱٫۵۱
پهنای بالاترین نوار	۰٫۸۸
بالاترین گاف فرعی	۱٫۲۸
پهنای دومین نوار	۴٫۲۶
پایین‌ترین گاف فرعی	۱۱٫۶۰
پهنای پایین‌ترین نوار	۱٫۲۳

در تمامی مسیرهای تقارنی مورد مطالعه گاف، در نقطه‌ی گاما مشاهده شده‌است؛ بنابراین نسبت جرم موثر الکترون و حفره نسبت به جرم الکترون آزاد، در این نقطه بررسی گشته‌است (جدول۲).

جدول۲ : نسبت جرم موثر الکترون و حفره به جرم الکترون آزاد در مسیرهای تقارنی متفاوت.

مسیر	$\frac{m^*_e}{m_e}$	$\frac{m^*_h}{m_e}$
$\Gamma \rightarrow L$	۵٫۷۴	۹٫۰۱
$\Gamma \rightarrow B1$	۸٫۵۱	۱۰٫۱۱
$\Gamma \rightarrow X$	۴٫۴۷	۸٫۲۶
$\Gamma \rightarrow Z$	۱۰٫۸۶	۱۴٫۸۰
$\Gamma \rightarrow B$	۹٫۹۳	۱۳٫۹۱

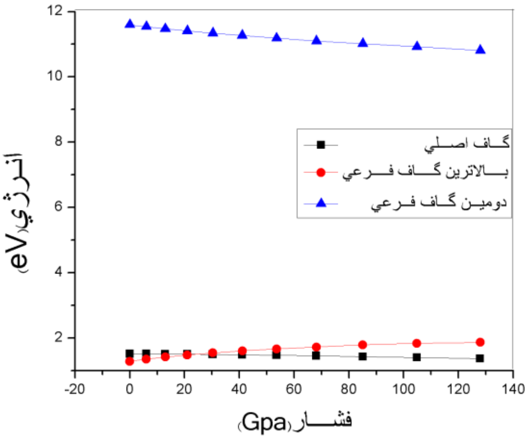
بررسی اثر فشار بر ویژگی‌های الکترونی

با کاهش ثابت شبکه اثر فشار را شبیه‌سازی کرده‌ایم. همان طور که پیش از این اشاره شد، معادله‌ی حالت مورناگان به خوبی این سامانه را توصیف می‌کند؛ بنابراین در هر حجم که معادل با میزانی از ثابت شبکه است، با کمک رابطه‌ی ۲ فشار را محاسبه نموده‌ایم.

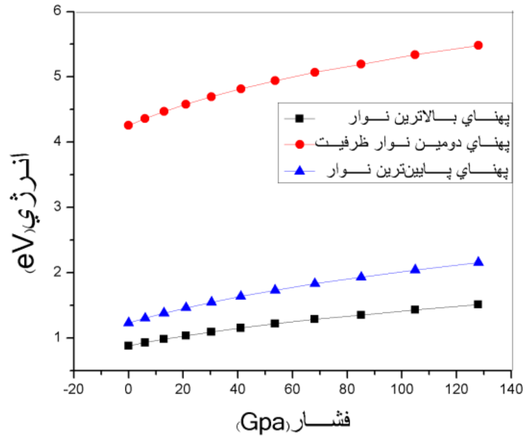
وابستگی کمیت‌هایی را که از نمودار نواری خوانده می‌شوند، به فشار در بازه‌ی ۰ تا ۱۲۸ گیگاپاسکال بررسی نموده‌ایم (شکل‌های ۵ تا ۸).

در شکل ۵ گاف اصلی، با افزایش فشار، از ۱٫۵۱ به ۱٫۳۶ الکترون‌ولت کاهش می‌یابد. با توجه به آن که با افزایش فشار این سامانه به حالت فلزی نزدیک می‌شود، چنین کاهشی مورد انتظار است.

در شکل ٦ پهناهای نواری، با افزایش فشار، افزایش می‌یابند. با توجه به کاهش گاف انرژی، محدوده‌ی انرژی‌های در دسترس و مجاز برای الکترون‌ها و در نتیجه پهناهای نواری افزایش می‌یابند. این مورد نیز در تطابق با نزدیکتر شدن الکترون‌ها به حالت فلزی و کمرنگتر شدن نقش پتانسیل بلور در ایجاد محدودیت در انرژی‌های الکترون‌ها می‌باشد.



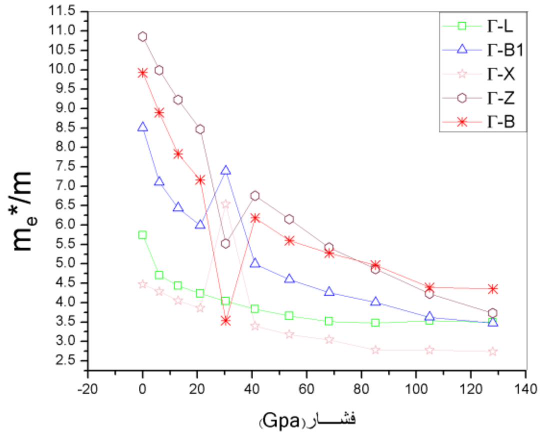
شکل۵ : تغییرات گاف‌های انرژی با افزایش فشار.



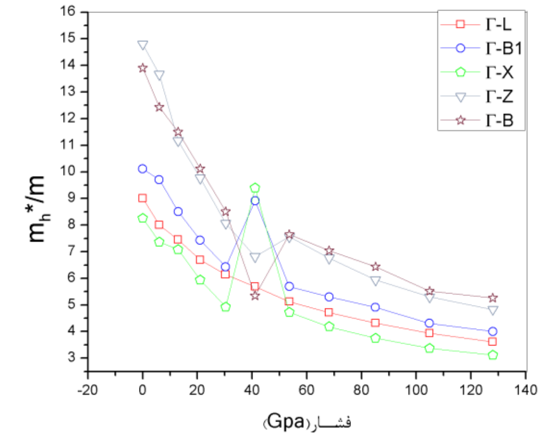
شکل٦ : تغییرات پهنای نوارها با افزایش فشار.

همان طور که در شکل ۷ دیده‌می‌شود، به صورت کلی، با افزایش فشار نسبت جرم موثر الکترون به جرم الکترون آزاد کاهش یافته و از مرتبه‌ی یک می‌گردد. الکترون‌ها در حالت فلزی بسیار به الکترون آزاد نزدیک بوده و در نتیجه جرم موثر نیز که نماینده‌ی نیروهای وارد بر ذره است، باید به جرم همتای آزاد نزدیک شود. در نمونه‌ی تحت فشار که به حالت فلزی نزدیک می‌شود نیز جرم موثر الکترون‌ها به جرم ذره‌ی آزاد نزدیک می‌شود.

همان طور که در شکل ۸ دیده‌می‌شود، نسبت جرم موثر حفره‌ها به جرم الکترون آزاد از مرتبه‌ی یک می‌شود.



شکل۷ : تغییرات نسبت جرم موثر الکترون به جرم الکترون آزاد، با افزایش فشار، در مسیرهای تقارنی متفاوت.



شکل۸ : تغییرات نسبت جرم موثر حفره به جرم الکترون آزاد، با افزایش فشار، در مسیرهای تقارنی متفاوت.

نتیجه گیری

با افزایش فشار نسبت جرم‌های موثر الکترون‌ها و حفره‌ها به جرم الکترون آزاد، در تمامی مسیرهای تقارنی بررسی‌شده، کاهش یافته و از مرتبه‌ی یک می‌شوند که با نزدیکتر شدن به حالت فلزی قابل‌توجیه است. با افزایش فشار، گاف اصلی کاهش می‌یابد. تمامی این نتایج مورد انتظار بودند چراکه در فشارهای بالاتر این سامانه باید به حالت رسانا گذار کند و در آن حالت الکترون‌ها به الکترون آزاد نزدیک شده و جرم موثر الکترون‌های سامانه باید به جرم همتای آزاد خود نزدیک شود.

مرجع‌ها

[۱] W. R. Robinson; “*The crystal structures of Ti_2O_3, a semiconductor, and $(Ti_{0.90}V_{0.10})_2O_3$, a semimetal* ”; J. solid state chemistry **۹**, ۲۵۵-۲۶۰ (۱۹۷۴).

[۲] R. W. G. Wyckoff, crystal structures, ۲nd edn. Krieger, Malabar (۱۹۸۶).

[۳] S. V. Ovsyannikov, X. Wu, V. V. Shchennikov, A. E. Karkin and G. M. Manthilake; “*Pressure-temperature phase diagram of Ti_2O_3 and physical properties in the golden Th_3S_4-type phase*”; Phys. Rev. B, Vol. ۸۶, ۰۲۴۱۰۶ (۲۰۱۲).

[٤] م. صدیقی، «شبیه‌سازی خواص فیزیکی ترکیبات Be_3As_2 و Mg_3As_2 بـا اسـتفاده از نظریــه‌ی تـابعی چگـالی» پایـان‌نامـه‌ی کارشناسی ارشد، دانشکده علوم پایه، دانشگاه شهرکرد، مهر ۸۸.

شبیه‌سازی ناپایداری نانوکلیدها تحت نیروهای جاذبه کازیمیر و الکترواستاتیک با استفاده از روش تجزیه ادومین اصلاح‌شده

مختاری، جواد[۱]؛آبادیان، نعیمه[۲]؛ کنجوری، فرامرز[۳]؛ مردانه، محمدرضا[۴]

[۱]گروه مهندسی هسته ای، دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه شیراز، شیراز
[۲]دانشکده علوم پایه، دانشگاه آزاد قم، قم
[۳]دانشکده فیزیک، دانشگاه خوارزمی، کرج
[۴]گروه فیزیک، دانشگاه صنعتیمالک اشتر شاهین‌شهر، اصفهان

چکیده

در این پژوهش، رفتار ناپایداری نانولوله‌های کربنی تحتتأثیر نیروهای کازیمیر و الکترواستاتیک برای هندسه استوانه-صفحه یک سر بسته مورد بررسیقرار گرفته است. بدین منظوریک مدل پیوسته در ابعاد نانو برایمدلسازی انحراف و ناپایداری ناشی از جاذبه الکترواستاتیک و کازیمیر سیستم نانوالکترومکانیکال مبتنی بر نانولوله کربنیبکارگرفته شده ومعادله حاکم بر نانوساختار با استفاده از روشتجزیه ادومین اصلاح شده حل شده است.نتایج نشان می‌دهد که نیروی کازیمیر ناپایداری نانوالکترومکانیکال کلید را تحت تاثیر قرار می‌دهد.

Modeling the instability of nanoswitchunder casimir and electrostatic attraction using modified Adomian decomposition method

Mokhtari, Javad[1]; Abadian, Naeime[2]; Kanjouri, Faramarz[3]; Mardane, Mohamadreza[3]

[1]Nuclear engineering Department, Shiraz University, Shiraz, Iran
[2]Faculty of Science, Islamic Azad University, Qom, Iran
[3]Faculty of Science, Kharazmi University, karaj, Iran
[4]Department of Physics, MalekAshtar University of technology, Esfahan, Iran

Abstract

In this paper, effect of Casimir force on the pull-in instability of electrostatically actuated carbon nano-tubes (CNTs) for cantilever plate-cylinder geometry is investigated.For modeling deflection and instability of CNT-based nanoelectromechanical switches (NEMS) under electrostatic and casimir attraction, A nanoscale continuum model is employedto obtain nonlinear constitutive equation of CNT. The governing nonlinear constitutive equations of the nanostructures are solved using modified Adomian decomposition method. Results shows that the Casimir force has significant effects on instability and deflection of nanostructures.

PACS:

۱. مقدمه

سیستم‌های نانوالکترومکانیکال به موضوع داغ در پژوهش سال‌های اخیر تبدیل شده است. در[۱]سیستم‌های نانوالکترومکانیکال مبتنی بر نانولوله کربنی ساخته و امتحان شده‌اند و اندازه‌گیری انحراف سوئیچ یک سرگیردار در محل اسکن میکروسکوپ الکترونی تحت تحریک الکتروستاتیک گزارش شده است.

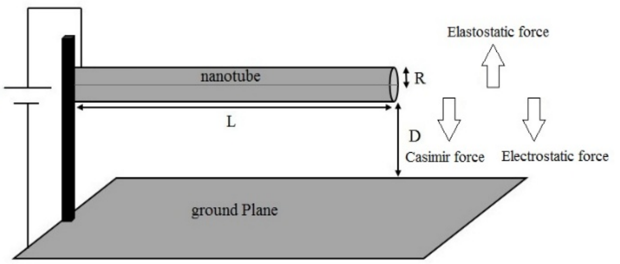
محرک‌های تیرشکل[1]یکی از اجزای سازنده سیستم‌های میکرو/نانو الکترومکانیکال می‌باشند[۲و۳].رفتار آستانه ناپایداری سیستم‌های میکرو/نانوالکترومکانیکال بیش از دو دهه بدون در نظر گرفتن نیروی کازیمیر مطالعه می‌شد[۴و۵].مقیمی و همکارانش از روش المان محدود[2] برای شبیه‌سازی نفوذ انرژی کازیمیر روی پارامترهای آستانه ناپایداری میکروتیرها استفاده کرده‌اند[۶].رمضانی و همکارانش تابع گرین را برای تخمین پارامترهایآستانه ناپایداری محرک‌های تیر شکل یک سرگیردار با توجه به نیروی کازیمیر بکار برده‌اند[۷].

بورداگ و همکارانش نیروی کازیمیر بین یک اتم و یک سطح صاف و بین یک اتم و یک استوانه و همچنین بین ۲ صفحه رسانا را محاسبه کردند. در روند مطالعاتشان، نیروی بین اتم‌های (مولکول‌های) هیدروژن و صفحات گرافیت و همچنین نانولوله‌های چند جداره محاسبه می‌شود[۸].

لین و ژائو پارامترهای آستانه ناپایداری محرک‌های استاتیک نانومقیاس با سطح مقطع چهارگوش را با توجه به نیروی کازیمیر مطالعه کردند[۹و۱۰].پژوهش پیشین آبادیان و کنجوری،روی مدل‌سازی ناپایداری نانوکلید تحت تاثیر نیروهای کازیمیر و الکترواستاتیک برای هندسه استوانه–صفحه انجام شده که در آن معادله حاکم بر سیستم با استفاده از روش پارامتر جرم متمرکز انجام شده است[۱۱]. از آنجایی که روش مذکور فقط برای نوک تیر معتبر است و از دقت بالایی برخوردار نیست، لذا انجام پژوهش بر اساس یک روش تحلیلی که برای تمام نقاط نانولوله جواب داشته باشد ضروری است. در این پژوهش روش ادومین اصلاح شده به عنوان یک روش تحلیلی برای بررسی ناپایداری سیستم، مورد استفاده قرار گرفته است.

۲. معادله حاکم بر سیستم

سیستم نانوکلید و نیروهای وارد بر آن به صورت نمادین در شکل ۱ نمایش داده شده است.



شکل ۱. نانوکلید یک سر بسته و نیروهای وارد بر آن در حالت تعادل

نیروهای الکترواستاتیک و کازیمیر بین نانو لوله و زیرلایه در مرجع [۱۱] برای حالت تعادل به ترتیب صورت زیر محاسبه شده است:

$$f_{elec} = \frac{\pi\varepsilon_0 V^2}{(D-U)\operatorname{arccosh}^2(\frac{D-U}{R_W})} = \frac{\pi\varepsilon_0 V^2}{(D-U)\ln^2(2\frac{D-U}{R_W})} \qquad (۱)$$

$$f_{cas} = -\frac{\pi^3}{768}\hbar C\sqrt{2R_w/(D-U)^7} \qquad (۲)$$

در این معادلات، Dفاصله اولیه بین نانولوله و صفحه،R_Wشعاع نانولوله کربنی، v ولتاژ اعمال شده و u میزان جابجایی عرضی نانولوله از حالت تعادل است.در روابطبالاضریب گذردهی خلاء $\varepsilon_0=8.854\times10^{-12}\ C^2/Nm^2$، $\hbar = 1.055\times10^{-34}$ Js برابر ثابت پلانک تقسیم بر 2π و$c = 2.998\times(10)^8$ m/s سرعت نور می باشند.

درحالت تعادل مجموع نیروهای کازیمیر و الکترواستاتیک با نیروی الاستیک برابر است، بنابراین داریم:

$$EI\frac{d^4U}{dx^4} = f_{elc} + f_{cas} \qquad (۳)$$

شرایط مرزی برای سر بسته نانولوله برابر $U(0) = \frac{dU}{dX} = 0$ وبرای سر آزادآن برابر $\frac{d^2U}{dX^2}(L) = \frac{d^3U}{dX^3}(L) = 0$ می‌باشند.

معادلات ۲و ۵ را در معادله ۶ می‌گذاریم و نتیجه‌ی آن را با استفاده از روابط $x = \frac{X}{L}$،$u = \frac{U}{D}$ و$k = \frac{D}{R_W}$بی‌بعد می‌کنیم. بنابراین:

$$\frac{d^4u}{dx^4} = \frac{\pi\varepsilon_0 V^2 L^4}{EID^2(1-u)ln^2[2k(1-u)]} + \frac{\pi^3\hbar CL^4}{768EID^4}\sqrt{2/k(1-u)^7} \qquad (۴)$$

---

[1]beam-type
[2] finite element method

با استفاده از تعاریف $\beta = \frac{\pi\varepsilon_0 V^2 L^4}{EID^2}$ و $f = \frac{\hbar c L^4}{8\pi EID^4}$ و تغییر متغیر $y = 1 - u$ معادله ۷ را ساده می‌کنیم، در نتیجه:

$$\frac{d^4y}{dx^4} = -\frac{\beta}{y(x)ln^2\left[2ky(x)\right]} - \frac{\pi^4 f}{96}\sqrt{\frac{2}{ky^7(x)}} \quad (۵)$$

۳. حل معادله

ایده اولیه روش تجزیه ادومین اصلاح شده[3] در مرجع[۱۲] توضیح داده شده است.به منظور حل معادله ۸ با استفاده از روش تحلیلی MAD معادله ۵ را به صورت زیر در نظر می‌گیریم.

$$L^{(4)}\left[y(x)\right] = N(x,y) \quad (۶)$$

$L^{(4)}$ اپراتور مشتق‌گیری درجه چهار است که اپراتور متناظر معکوس آن $L^{-(4)}$ (اپراتور انتگرال ۴گانه) به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$L^{-(4)} = \underbrace{\int_0^x ... \int_0^x (.)dx ... dx}_{4} \quad (۷)$$

به منظور اعمال روش تجزیه ادومین، تابع غیر خطی N(x,y) می‌تواندبه صورت یک سری از چندجمله‌ای‌های ادومین نوشته شود:

$$N(x,y) = \sum_{n=0}^{\infty} N_n(x) \quad (۸)$$

که در آن سری N_n تقریبی از تابع غیر خطی N می‌باشد و به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$N_n = \sum_{v=1}^{n} C(v,n)A_v(y_0) \quad (۹)$$

که

$$C(v,n) = \sum_{p_i}\prod_{i=1}^{v}\frac{1}{k_i!}y_{p_i}^{k_i}, \quad \sum_{i=1}^{v}k_i p_i = n,$$

$$n > 0, \quad 0 \le i \le n, \quad 1 \le p_i \le n - v + 1.$$

$$A_v(y_0) = \frac{d^v}{d^v y_0}N(y_0)$$

بنابراین چندجمله‌ایهای ادومین به صورت زیر بدست می‌آید:

$$\begin{aligned} N_0 &= A_0(y_0) \\ N_1 &= C(1,1)A_1(y_0) = y_1A_1(y_0) \\ N_2 &= C(1,2)A_1(y_0)+C(2,2)A_2(y_0) = y_2A_1(y_0)+\frac{1}{2!}y_1^2A_2(y_0) \\ N_3 &= C(1,3)A_1(y_0)+C(2,3)A_2(y_0)+C(3,3)A_3(y_0) \\ &= y_3A_1(y_0)+y_1y_2A_2(y_0)+\frac{1}{3!}y_1^3A_3(y_0) \end{aligned} \quad (۱۰)$$

......

معادله ۸ را در معادله ۶ قرار داده و با چهار مرتبه انتگرال‌گیری از آن داریم:

$$y(x) = \sum_{n=0}^{\infty}y_n(x) = C_0 + C_1x + \frac{1}{2!}C_2x^2 + \frac{1}{3!}C_3x^3 + L^4\left[\sum_{N=0}^{\infty}N_n(x)\right] \quad (۱۱)$$

با استفاده از شرایط مرزی در x=0 داریم:

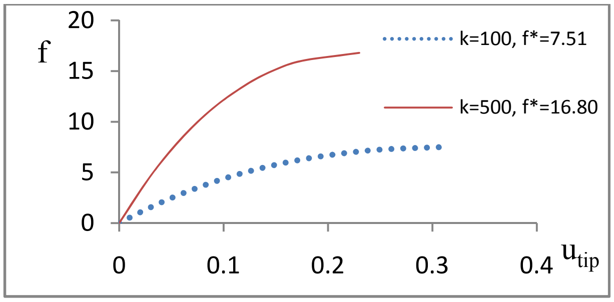
$$y(0) = 1 = C_0, \qquad y'(0) = 1 = C_1 \quad (۱۲)$$

با اعمال شروط مرزی در انتهای بسته به ۲ معادله می‌رسیم. با حل همزمان ۲ معادله در نرم افزار maple مقادیر c2 و c3 بدست می‌آیند.بدین ترتیب با استفاده از روش MAD ابتدا y و به دنبال آن U را بدست می‌آوریم.

۳. نتایج و بحث

۳-۱. نانولوله بدون وجود میدان الکتریکی

اگر فرض شود هیچ ولتاژی به سیستم اعمال نشود ($\beta = 0$) وتنها سهم نیروی کازیمیر را در نظر بگیریم با استفاده از حل معادله برای *n=5* برای مقادیر مختلف *f* مقدار u_{tip} محاسبه شد، هنگامی که مقدار *f* از حد بحرانی آن گذشت معادله برای *c2* و *c3* جواب حقیقی ندارد.این بدان معناست که اگر *f>f** شود، سیستم ناپایدار شده وحتی بدون اعمال هیچ گونه ولتاژی نانولوله به سطح زیرین می‌چسبد؛ برای چنین حالتی جوابی برای u_{tip} وجود ندارد و معرف آن است که نیروی کازیمیر بسیار بیشتر از حد تحمل الاستیک نانولوله است. مقدار بحرانی *f* را *f** می‌نامیم. در شکل ۲ منحنی تغییرات *f* بر حسب u_{tip} آورده شده است. نقطه بیشینه (قله) نمودار بیانگر میزان *f** است.



شکل ۲.نمودار *f* برحسب u_{tip} با درنظرگرفتن $\beta = 0$ برای *k=100* و *k=500*

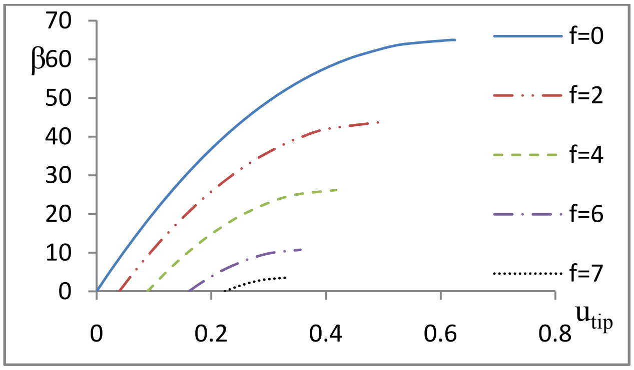
۳-۲. نانولوله با وجود میدان الکتریکی

[3]Modified Adomian Decomposition (MAD)

برای کلیه مقادیر$f<f^*$، به ازای هر میزان از ولتاژ اعمالی (β)، میزان خم شدگی نانولوله (u_{tip}) قابل محاسبه است.به ازای کلیه مقادیر f با افزایش مقدار β خمیدگی افزایش می‌یابد تا با صفر شدن شیب منحنی، سازه به ولتاژ ناپایداری برسد و در اثر نیروی الکتریکی نانولوله به سطح بچسبد.

با در نظر گرفتن $k=100$ منحنی ولتاژ-خمیدگی با در نظر گرفتنمقائیر مختلف نیروی کازیمیر ($f_n = 0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.7$)در شکل ۳ رسم شده است. چنانکه دیده می‌شود افزایش نیروی کازیمیر موجب حرکت قله گرافها به سمت پایین و چپ نمودار می‌شود و بیانگر آن است که نیروی کازیمیر موجب کاهش ولتاژ و خمیدگی ناپایداری سیستم می‌شود.

همچنین توجه شود که محل تقاطع منحنی ها با محور افقی شکل بیانگر آن است که وجود نیروی کازیمیر موجب می‌شود که حتی اگر هیچ ولتاژی به سیستم اعمال نشود، باز نانولوله یک خمیدگی اولیه در اثر جاذبه کازیمیر داشته باشد.



شکل ۳: نمودار β برحسب u_{tip} بادر نظرگرفتن $f_n = 0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.7$ به ازای $k = 100$

۴. نتیجه‌گیری

- وقتیهیچ ولتاژی به سیستم اعمال نشود ($\beta = 0$) اگر نیروی کازیمیر (f) از مقدار بحرانی (f^*) بیشتر شود، نانولوله کربن ناپایدار می‌شود.
- رابطه بین β وu_{tip} نشان می‌دهد که وقتی ولتاژ اعمال شده بیش از مقدار بحرانی β_{pi} می‌شود هیچ راه حلی برایu_{tip} وجود ندارد و ناپایداری اتفاق می‌افتد.
- افزایش فاصله اولیه به نسبت شعاع (k) سیستم، ولتاژ آستانه ناپایداری را افزایش می‌دهد اما k تأثیر قابل توجهی روی انحراف آستانه ناپایداری ندارد.
- اگر هیچ ولتاژی به سوئیچ/محرک مبتنی بر نانولوله کربنی اعمال نشود و اگر نیروی کازیمیر از مقدار بحرانی بیشتر شود، سیستم می‌تواند به صفحه زیرین بچسبد. اگر k افزایش یابد این مقدار بحرانی نیز افزایش می‌آید.
- MADیک روش قابل اعتماد برای مطالعه رفتار آستانه ناپایداری سوئیچ مبتنی بر نانولوله کربنی می‌باشد.

مراجع

1. C.-H. Ke, N. Pugno, B. Peng, H.D. Espinosa, Experiments and modelingof carbonnanotube-based NEMS devices, Journal of the Mechanics and Physics of solids 53 (2005) 1314–1333
2. L. Zhang, S.V. Golod, E. Deckardt, V. Prinz, D. Gr ¨ utzmacher Free-standing, Physica E 23 (3,4) (2004) 280.
3. C.-H. Ke, H.D. Espinosa, Nanoelectromechanical systems (NEMS) and modeling, in: M. Rieth, W. Schommers, P.D. Gennes (Eds.), Handbook of Theoretical and Computational Nanotechnology, American Scientific Publishers, Valencia, CA, 2006 Chapter 121.
4. P.M. Osterberg, R.K. Gupta, J.R. Gilbert ,mS.D. Senturia, Quantitative models for the measurement of residual stress, poissonratio and young’s modulus using electrostatic pull-in of beams and diaphragms, in: Proceedings of the Solid-State Sensor and Actuator Workshop, Hilton Head, SC, 1994, pp. 184–188.
5. H. Sadeghian, G. Rezazadeh, P. Osterberg, J. Microelectromech. Syst. 16 (6)(2007) 1334.
6. M. MoghimiZand, M.T. Ahmadian, Proc. Inst. Mech. Eng. C—J. Mech. Eng. 224 (9) (2010) 2037.
7. A. Ramezani, A. Alasty, J. Akbari, Microsyst. Technol. 14 (2008) 145.
8. M. Bordag, U. Mohideen, V. M. Mostepanenko, Phys.Rep. 353, 1 (2001).
9. W.H. Lin, Y.P. Zhao, Microsyst. Thechnol. 11 (2005) 80.
10. W.H. Lin, Y.P. Zhao, Chaos SolitonFract. 23 (2005) 1777.
11. AbadianNaeime, Kanjouri, Faramarz, Modeling the instability of CNT under electrostatic and casimir attraction,Physics conference of Iran, 969, 2013
12. Rotkin RV, Shrivastava V, Bulashevich KA, Aluru NR. Atomisticcapacitance of a nanotube electromechanical device. Int J Nanosci2002;1:337–46.

اثر تغییرات خودانرژی بر رسانش الکتریکی سیستم الکترود-بنزن-الکترود

محبی، راضیه؛ درویشی، مطهره؛ سیدیزدی، جمیله

گروه فیزیک دانشگاه ولی عصر (عج) رفسنجان

چکیده

در این مقاله رسانش الکتریکی مولکول بنزن با استفاده از تابع گرین در رهیافت تنگابست مورد بررسی قرار گرفته است. سپس ضرایب عبور مربوط به اثر مسیرهای مختلف که معرف رسانندگی‌های متفاوت می‌باشد محاسبه شده است. در ضمن اثر خودانرژی بر ضریب عبور/رسانندگی در مورد یکی از اتصال‌ها مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج نشان می‌دهد که ضریب عبور و در نتیجه رسانندگی با افزایش خودانرژی کاهش می‌یابد.

The Effect of Self-Energy on the Conductance of Electrode-Benzene-Electrode System

Mohebbi, Razie; Darvishi, Motahareh; Seyedyazdi, Jamileh

Depatment of Physics, Faculty of Science, Vali-e-Asr University of Rafsanjan

Abstract

In this study we investigate electronic properties of benzene molecule using Green's function method considering tight-binding model. Transmission coefficient has been calculated for different pathways. Also we investigate the effect of self-energy on transport properties for one path. It is demonstrated that increase in self-energy, decrease conductance.

PACS No.   (73,21)

مقدمه

ابزارهای الکترونیکی تک مولکولی پنجره‌ی جدیدی را برای مینیاتوری کردن مدارهای الکتریکی پیش روی محققان باز کرده است. ترابرد الکترونی از یک پل مولکولی را نخستین بار راتنر و آویرام در سال ۱۹۷٤ مورد بررسی قرار دادند [۱]. از میان مولکول‌های به کار رفته در این ابزارها مولکول بنزن به دلیل حالت‌های شبه جایگزیده‌ی اربیتال پی از اهمیت بالایی برخوردار است. این اربیتال خواص رسانش الکترونی ویژه‌ای به حلقه‌ی بنزنی می دهد.

برای بررسی رسانش الکترونی مولکول بنزن، مولکول بین دو الکترود فلزی قرار داده می شود. در دهه‌ی اخیر در مورد سیستم الکترود-بنزن-الکترود تحقیقات مختلفی انجام گرفته است [۲]. اما مسیرهای مختلف و خودانرژی‌های متفاوت چه تأثیری بر رسانش آن دارد، پرسشی است که در این تحقیق به آن پاسخ داده می‌شود. روش مورد استفاده، روش تابع گرین بر پایه‌ی رهیافت تنگابست است. پس از محاسبه‌ی تابع گرین، ضریب عبور سیستم و سپس با استفاده از رابطه‌ی لاندایر رسانش الکتریکی به دست می‌آید و در نهایت اثر خودانرژی در یک مسیر خاص بررسی شده است.

فرمولبندی

هامیلتونی حاکم بر اربیتال‌های پی مولکول بنزن (شکل ۱) با استفاده از رهیافت تنگابست تا تقریب نزدیکترین همسایگی به شکل زیر است [۳]:

$$H = E_0 \sum_i c_i^\dagger c_i - t_0 \sum_{<ij>} c_i^\dagger c_j + h.c. \quad (۱)$$

در این رابطه E_0 انرژی جایگاهی اتم کربن است که در اینجا صفر در نظر گرفته شده است. $c_i^\dagger$ عملگر خلق در جایگاه iام، c_i (c_j) عملگر نابودی در جایگاه i(j)ام و t انرژی پرش بین جایگاه‌های i و j است.

تابع گرین تولید شده از این هامیلتونی، گرین تأخیری مولکول منزوی (بدون اتصال) را به دست می‌دهد

$$G_0 = \left(E + i\eta - H\right)^{-1} \quad (۲)$$

که در آن E انرژی، η یک مقدار مثبت بسیار کوچک است. هامیلتونی کل سیستم که به سه بخش شامل یک بخش مولکولی و دو الکترود تقسیم می‌شود به صورت زیر است

$$H = H_L + H_M + H_R \quad (۳)$$

هامیلتونی الکترود سمت چپ و مولکول و الکترود سمت راست به ترتیب H_L، H_M و H_R است [٤].

اثر الکترودها به صورت خود انرژی در تابع گرین وارد می شود

$$G^{-1} = G_0^{-1} - \Sigma_L - \Sigma_R \quad (٤)$$

Σ_L و Σ_R خود انرژی مولکول در زمان اتصال است. هامیلتونی الکترودها نیز از رهیافت تنگابست به دست می‌آید

$$H = E_0^{'} \sum_i c_i^\dagger c_i - t_0 \sum_{<i,j>} c_i^\dagger c_j + h.c. \quad (۵)$$

حالا با استفاده از رابطه‌ی فیشر-لی ضریب عبور به تابع گرین مرتبط می‌شود [۵]

$$T_{LR} = Tr\left[\Gamma_L G_{LR} \Gamma_R G_{LR}^\dagger\right] \quad (٦)$$

$$\Gamma_L = i\left[\Sigma_L - \Sigma_R^\dagger\right] \quad (۷)$$

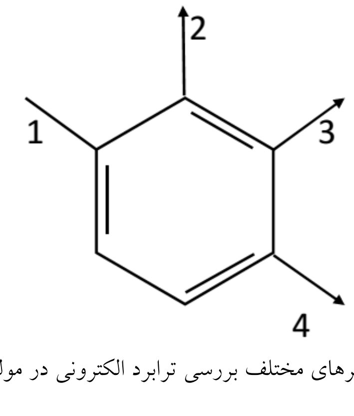
$$T(E) = 4\,\mathrm{Im}\,\Sigma_L\,\mathrm{Im}\,\Sigma_R \left|G_{ij}\right|^2 \quad (۸)$$

سرانجام رسانش با استفاده از فرمول لانداور-بوتیکر به شکل زیر محاسبه می‌شود[۳]

$$G(E) = \frac{2e^2}{\hbar} T(E) \quad (۹)$$

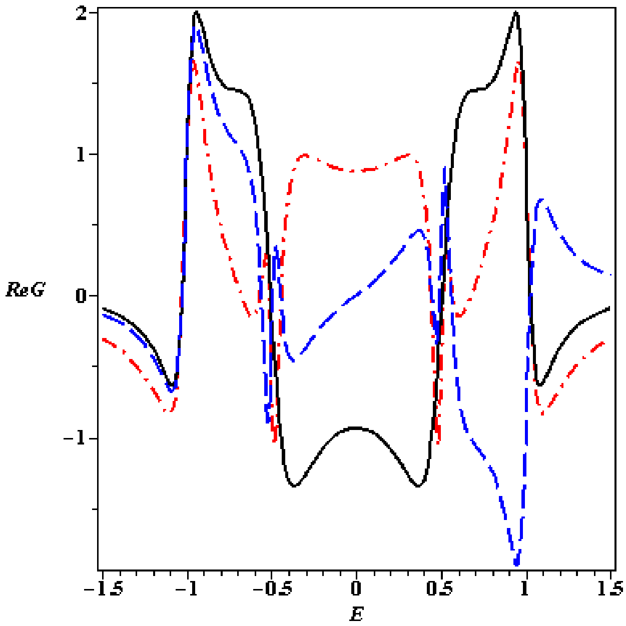
بررسی و تحلیل نتایج

ساختار مورد بررسی مولکول بنزن می‌باشد که مسیرهای مختلف در نظر گرفته شده در شکل ۱ آمده است

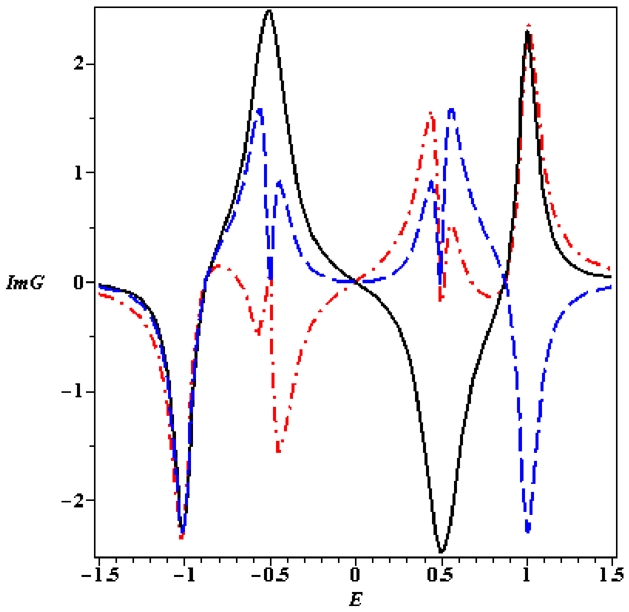


شکل۱ : مسیرهای مختلف بررسی ترابرد الکترونی در مولکول بنزن.

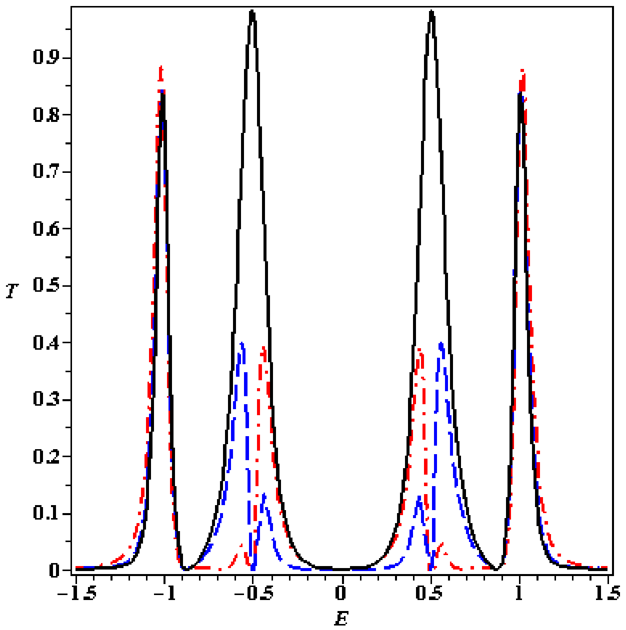
در ابتدا تابع گرین ساختار در وضعیت اتصال‌های مختلف محاسبه شد (شکل‌های ۲ و ۳) و با استفاده از رابطه‌ی ٦ ضریب عبور برای اتصال‌های مختلف محاسبه شد (شکل ٤). برای مقایسه وضعیت‌های مختلف، همه‌ی آنها در یک نمودار آمده است.



شکل۲ : قسمت حقیقی تابع گرین، بر حسب انرژی (الکترون–ولت) مربوط به اتصال‌های مختلف مسیر ٤–۱ (منحنی خط ممتد، سیاه)، مسیر ۳–۱ (منحنی خط‌چین، آبی)، مسیر ۲–۱ (منحنی خط‌نقطه، قرمز).



شکل۳ : قسمت موهومی تابع گرین، بر حسب انرژی (الکترون–ولت) مربوط به اتصال‌های مختلف مسیر ٤–۱ (منحنی خط ممتد، سیاه)، مسیر ۳–۱ (منحنی خط‌چین، آبی)، مسیر ۲–۱ (منحنی خط‌نقطه، قرمز).



شکل٤ : ضریب عبور بر حسب انرژی (الکترون–ولت) مربوط به اتصال‌های مختلف مسیر ٤–۱ (منحنی خط ممتد، سیاه)، مسیر ۳–۱ (منحنی خط‌چین، آبی)، مسیر ۲–۱ (منحنی خط‌نقطه، قرمز).

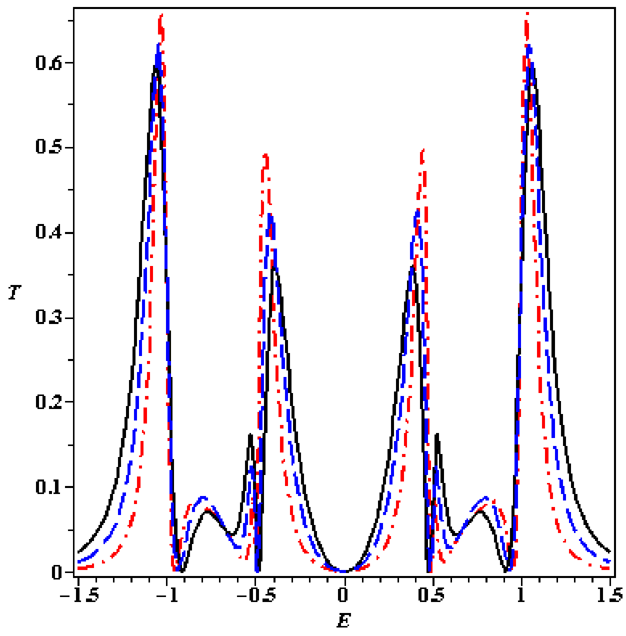
شکل ٤ نشان می‌دهد که همه‌ی نمودارها (به ازای اتصال‌های متفاوت) حول انرژی فرمی تقارن دارند. که با نتایج دیگران توافق

دارد [٦] و بیشترین عبور از مسیر ٤-١ است و در نتیجه بیشترین رسانش از این مسیر است.

در ادامه اثر خودانرژی بر ضریب عبور اتصال ٢-١ مورد بررسی قرار گرفته است (شکل ٥). همان طور که از نمودار دیده می‌شود با افزایش خودانرژی به ترتیب از ٠/٤ به ٦/. و ٨/. ارتفاع قله‌ها کاهش می‌یابد و در کل میزان عبور کمتر می‌شود. از ارتباط مستقیم ضریب عبور با رسانندگی به نظر می‌آید که در این مورد با افزایش خودانرژی رسانندگی کاهش می‌یابد.

خود انرژی به صورت یک جمله مختلط در هامیلتونی ظاهر می-شود [٧].

پهن شدگی مشاهده شده در طیف عبوری ناشی از افزایش بخش موهومی خود انرژی است. بنابراین با افزایش این بخش، ضریب عبور کاهش پیدا می‌کند که در نهایت منجر به کاهش رسانش سیستم می‌شود.



شکل٤ : ضریب عبور بر حسب انرژی (الکترون-ولت) مربوط به اتصال مسیر ٢-١ با خودانرژی‌های متفاوت ٠/٨ خط ممتد سیاه، ٠/٦ خط‌چین آبی، ٤/. خط-نقطه، قرمز.

نتیجه گیری

به منظور بررسی رسانش الکتریکی مولکول بنزن از مسیرهای مختلف ، تابع گرین مربوطه به دست آمده است. با استفاده از تابع گرین، ضرایب عبور مربوط به اثر مسیرهای مختلف که معرف رسانندگی‌های متفاوت می‌باشد به دست آمده است. در ضمن اثر خودانرژی بر ضریب عبور/رسانش در مورد یکی از اتصال‌ها مورد بررسی قرار گرفته است. این بررسی نشان می‌دهد که افزایش خودانرژی، ضریب عبور را کاهش داده و در نهایت منجر به کاهش رسانش سیستم می‌شود.

مرجع‌ها

[1] A. Aviram and M. Ratner, “Molecular Rectifiers” *Chem. Phys. Lett*,. **29** (1974) 277.

[2] M. A. Reed, C. Zhou, C. J. Muller, T. P. Burgin, and J. M. Tour, "Conductance of a Molecular Junction " , *Science*, **278** (1997) 252.

[3] Petra Dietl "Numerical Studies of Electronic Transport through Graphene Nanoribbons with Disorder", Ph.D. Thesis, January 2009.

[٤] ربانی حسن، مردانی محمد، مظلوم‌شهرکی آزاده؛ وثوقی‌نیا سکینه؛ «اثر مکان اتصال الکترودها بر ترابرد الکتریکی یک نانوروبان گرافن» کنفرانس فیزیک ایران ۱۳۹۰

[5] D. S. Fisher and P. A. Lee, *Phys. Rev. B*, **23** (1981) 6851.

[٦] کاظمی شریعت‌پناهی سیده‌فاطمه؛ ساسان‌پور مهرزاد؛ نمیرانیان افشین؛ «بررسی خصوصیات الکترونیکی مولکول بنزن با روش‌های ترکیبی بستگی قوی و نظریه تابعی چگالی» کنفرانس ماده چگال ایران، ۱۳۹۱

[7] Hansen A. Gemma C. Solomon, David Q. Andrews, and Mark A. Ratner, "Interfering pathways in benzene: An analytical treatment" *J. Chem. Phys.*, **131** (2009) 194704.

بررسی خواص الاستیکی پیروسکایت معکوسCa_3PbO

محمدی،محسن[۱] ؛کنجوری،فرامرز[۱]

[۱]دانشکده‌ی فیزیک،دانشگاه خوارزمی،خیابان شهید بهشتی،کرج،ایران

چکیده

خواص الاستیکی پیروسکایت معکوس Ca_3PbOدر فاز مکعبی با استفاده از روش امواج تخت بهبود یافته به همراه پتانسیل کامل در چهارچوب نظریه‌ی تابعی چگالی بررسی شده است. هم‌چنین از تقریب شیب تعمیم یافته (GGA)برای پتانسیل تبادلی- همبستگی استفاده شده است..شباهت ساختارنواری انرژی پیروسکایت معکوسCa_3PbOازجهت وجود نقاطدیراک با دیگر ترکیباتی مانند گرافین، این ساختار را به گزینه‌ی مناسبی برای معرفی به عنوان یک عایق توپولوژیکیمطرح کرده است .ثابت شبکه به‌دست‌آمده در توافق خوبی باداده‌های تجربی است. همچنین ثابت‌های الاستیکی(C_{ij})، مدول برشی، نسبت پواسن ،نسبت B/G و ضریب ناهمسانگردی(A) محاسبه و مورد بررسی قرار گرفته است.

First principle study of elastic properties of inverse perovskite Ca_3PbO

Mohammadi,Mohsen[1] ;Kanjouri,Faramarz[1]

[1]*Faculty of Physics, Kharazmi University, ShahidBeheshti avenue, Karaj, Iran*

Abstract

The elastic properties of inverse cubic perovskite Ca_3PbO are calculated through the full potential linearized augment plane wave method using density functional theory.And using the exchange correlation potential is treated by the generalized gradient approximation (GGA).Theband structure similarity between Ca_3PbO and other material such as graphene in Dirac points makes this choice appropriate to using as a topological insulator. The calculated equilibrium lattice constant is in good agreement with available experimental result.And elastic constants (C_{ij}) shear module (G), Poisson ratio (σ), B/G ratioand anisotropy parameter (A) are calculated and then will be analyzed..

مقدمه

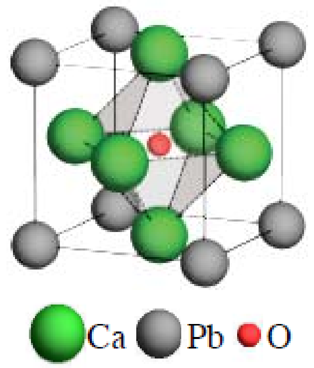
در سال‌های اخیر ساختارهای پیروسکایت معکوس به علت وجود خواص گسترده‌ی‌شان از جمله پهنای گاف اندک و خواص فروالکتریکی و ابررسانایی مورد توجه فیزیکدان‌ها و مهندسین حوزه‌ی الکترونیک قرار گرفته‌اند[۱].نقاط دیراک دو بعدی که علاوه بر گرافین، در بیسموت و برخی ترکیبات آلی به صورت سه بعدی نیز وجود دارند، در ساختارنواری پیروسکایت معکوس دیده شده و به آن اهمیت ویژه‌ای بخشیده‌اند. هم‌چنین وجود دیگر ترکیبات پیروسکایتی همانند آنتی پیروسکایت‌هایی چون$ANMn_3$و کاربرد گسترده‌ی آنها در صنایع از جمله صنایع هوایی فضایی انگیزه‌ی بررسی این ساختار شد[۲و۳].

روش محاسباتی

محاسبات بر پایه نظریه‌ی تابعی چگالی با استفاده از بسته‌ی محاسباتی Wien2k، روش امواج تخت بهبود یافته و پتانسیل کامل با تقریب شیب تعمیم یافته(GGA) انجام شده‌اند.ثابت شبکه با استفاده از داده‌های تجربی و کمینه‌سازی انرژی بر حسب حجم‌های مختلف بهینه شده است.
انتگرالگیریدرمنطقهبریلوئنبوسیلهچرخههایخودسازگارباروشتتراهد رونوبااستفادهازتعداد ۲۲۰نقطهدرمنطقهکاهش ناپذیربریلوئنانجامشدهاست.برای RkmaxوGmaxنیز به ترتیب مقادیر ۸/۵ و۱۴ در نظر گرفته شده‌اند.

خواص ساختاری

ساختار پیروسکایت معکوس از فرمول عمومی $(A,R)_3EZ$پیروی می‌کند که در آن A عنصری از فلزات قلیایی و R عنصری از فلزات کمیاب است.عنصر E از گروهPعناصر جدول تناوبی و Z نیز کربن، اکسیژن یا نیتروژن است.در ساختار پیروسکایت معکوس مکعبیCa_3PbO عنصر اکسیژن در مرکز مکعبی قرار گرفته است که از گوشه‌ها توسط عنصر سرب و از مرکز وجوه مکعب توسط عنصر کلسیم محاصره شده است (شکل۱) [۱و۲].این ساختار دارای گروه فضایی p3m3 می‌باشد که برای به‌دست آوردن ثابت شبکه‌ی تعادلی آن از منحنی مورناگون استفاده شده است.ثابت شبکه‌ی به‌دست آمده با مقدار تجربی[۴]و محاسبه‌ی نظری دیگران[۱] در جدول ۱ آورده شده است.



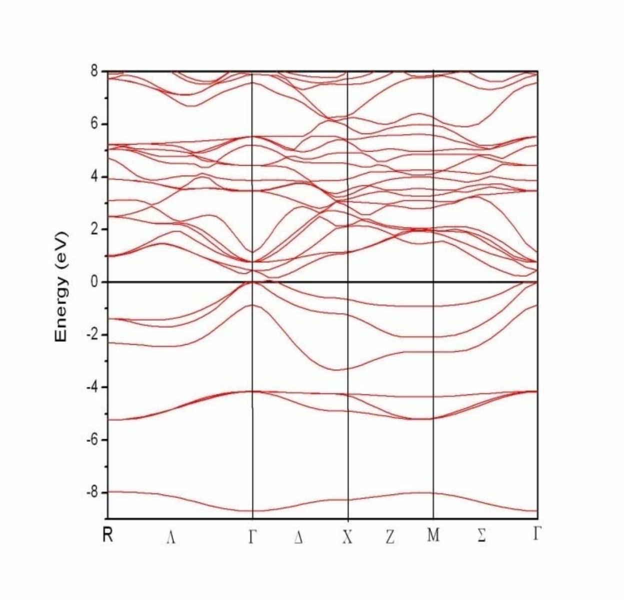
شکل ۱: ساختار مکعبیCa_3PbO [۲]

جدول ۱ : مقایسه‌ی مقادیر به‌دست آمده برای ثابت شبکه‌ی ساختار Ca_3PbO

	کار فعلی	کار دیگران(نظری)	کارتجربی
ثابت‌شبکه A^o	۴/۸۸۰۰	۴/۸۷۹۴	۴/۷۴۸۱

خواص الکترونی

ساختار نواری انرژی که با استفاده از محاسبات اصول اولیه به‌دست آمده است (شکل ۲) نشان می‌دهد که پیروسکایت معکوس Ca_3PbO دارای یک نقطه‌ی شبه دیراک است که به علت تقارن‌های این ساختار مکعبی۶نقطه‌ی شبه دیراک درناحیه‌ی اول بریلوین وجود دارد که دلیلی است برای این که پیروسکایت معکوسCa_3PbO یک عایق توپولوژیکی باشد[۶] .منشا این نقاط را با استفاده از ساختار نواری انرژی و نظریه‌ی تنگ‌بست(TB) می‌توان توضیح داد.[۶].در ساختار نواریانرژی مشاهده می‌شود که آمیختگی اربیتال‌های۶pدر Pbو ۳dدرCa تقریبا در تراز فرمی موجب ایجاد نقاط شبه دیراک می‌شود.از طرفی باید در نظر داشت که این وضعیت هنگامی اتفاق می‌افتد که اثر اسپین مدار را برای اتم Pbدر رسم ساختار نواری انرژی در نظر بگیریم[۲].



شکل ۲: ساختار نواری انرژی Ca_3PbO نقطه‌ی شبه دیراک با پیکان مشخص شده است.

خواص الاستیکی

در ساختارهای مکعبی از ۲۱ مولفه‌ی مستقل ضرایب الاستیکی تنها سه مولفه‌ی غیر صفر C_{11}، C_{12} و C_{44} باقی می‌مانند که می‌توان خواص مکانیکی و الاستیکی ساختار کریستالی مکعبی را با استفاده از آن‌ها شرح داد[۳].ثابت کشسانی C_{11} نشان دهنده‌ی خاصیت کسشانی در طول ماده است،به این معنی که با اعمال یک تنش در طول ماده مقدار آن تغییر می‌کند.ثابت‌های C_{12} و C_{44} نیز خواص وابسته به شکل بلور را توصیف می‌کنند.با جای‌گذاری ضرایب فوق در روابط زیر پایداری ماده را بررسی می‌کنیم:

$$(C_{44} - P) > 0$$
$$\frac{1}{2}(C_{11} - C_{12} - 2P) > 0 \quad (۱)$$
$$\frac{1}{3}(C_{11} + 2C_{12} + P) > 0$$

برای ساختار پیروسکایت معکوس مکعبی Ca_3Pbo با توجه به مقادیر ۱۰۰/۱۳۸، ۲۶/۴۳۲ و ۴۸/۶۰۵ که به ترتیب برای ضرایب الاستیکی C_{11}، C_{12} و C_{44} بدست آمده‌اند و هم‌چنین در نظر گرفتن محدوده‌ی فشاری که محاسبات در آن انجام می‌شود [۵] می‌توان گفت که این ماده از پایداری برخوردار است هم‌چنین با توجه به نسبت پواسون می‌توان نوع پیوند ساختار را معین کرد.نسبت پواسون از رابطه‌ی:

$$\sigma = \frac{3B-E}{6B} \quad (۲)$$

به‌دست می‌آیدکه E و B به ترتیب مدول یانگ ومدول حجمی هستند.نسبت پواسون مقادیر ۱- تا ۰/۵ را در بر می‌گیرد.۱- هنگامی اتفاق می‌افتد که در ماده تغییر شکل وجود ندارد و ۰/۵ نیز هنگامیحاصل می‌شود که حجم تغییر نکند.برای مواد با پیوند یونی نسبت پواسون نزدیک به ۰/۲۵ است.این نسبت برای مواد کووالانسی از مرتبه‌ی ۰/۱است[۳].مقدار محاسبه شده نشان می‌دهد که ساختارپیروسکایت معکوس با σ=۰.۱٦۷ تقریبا یک ماده‌ی کووالانسی است. نسبت مدول حجمی B به مدول برشی G خاصیت شکنندگی یا چکش‌خواری ماده را معین می‌کند.مقدار مرزی این نسبت ۱/۷۵ است که برای مقادیر کوچک‌تر از آن ماده دارای خاصیت شکنندگی و برای مقادیر بیش از ۱/۷۵دارای خاصیت چکش خواری است.برای ساختار پیروسکایت معکوس Ca_3PbO این نسبت ۱/۱۷است بنابراین ساختار Ca_3PbO شکننده است [۱و۷].ضریب ناهمسانگردی A از رابطه‌ی:

$$A = \frac{2C_{44}}{C_{11} - C_{12}} \quad (۳)$$

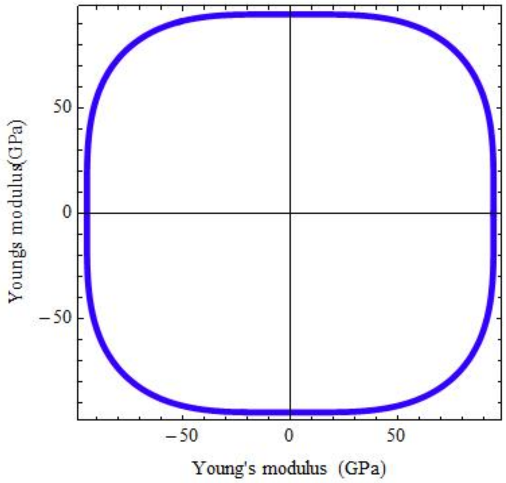
به‌دست می‌آید. و انحراف آن از واحد میزان ناهمسانگردی کشسانی بلور را نشان می‌دهد [۸]. مقدار به‌دست آمده برای ساختار Ca_3PbO، ۱/۳۰ می‌باشد.هم‌چنین برای نشان دادن میزانناهمسانگردی می‌توان از روابط زیر که وابستگی جهتی مدول یانگ و برشی را بیان می‌کنند استفاده کرد:

$$\frac{1}{E} = S_{11} - 2\left(S_{11} - S_{12} - \frac{S_{44}}{2}\right)(l_1^2 l_2^2 + l_2^2 l_3^2 + l_3^2 l_1^2) \quad (۴)$$

$$\frac{1}{G} = S_{11}$$

(۵)

S_{ij}ها ثابت‌های تن دهی و l_iها کسینوس‌های هادی نسبت به محورهای مختصات هستند [۷و۸]. برای سیستم‌های همسانگرد منحنی در دو بعد باید به شکل دایره باشد [۸]. همانگونه که در شکل۳ مشاهده می‌شود منحنی رسم شده که وابستگی جهتی مادول یانگ را نشان می‌دهد دایره نیست و این مطلب به خوبی با ضریب ناهمسانگردA در توافق است.



شکل ۳ : وابستگی جهتی مدول یانگ Ca_3PbO

نتایج

بررسی ساختار نواری انرژی و مشاهده‌ی نقاط شبه دیراک در ساختار Ca_3PbO این ساختار به یک نامزد ویژه برای عایق توپولوژیکی تبدیل کرده است.خواص ساختاری و الکترونی بررسی شده و هم چنین ساختار نواری انرژی در شکل شماره ی ۲ در تطابق کامل با نتایج مرجع ۲ هستند. محاسبات انجام شده نشان داد که ساختار مکعبی پیروسکایت Ca_3PbO از نظر الاستیکی ساختاری پایدار و کووالانسی است. هم‌چنین این ساختار دارای خاصیت شکنندگی می‌باشد. ضریب ناهمسانگردی برای ساختار Ca_3PbOمحاسبه شد وملاحظه شد که این ماده از نظر کشسانی کاملا همسانگرد نیست هم‌چنین وابستگی جهتی ضریب یانگ در توافق خوبی با ضریب ناهمسانگردیAقرار دارد.

مرجع‌ها

[۱]K. HaddadiandA. BouhemadouandL. Louail, S. Bin-Omran ,"Inverse-perovskite oxides Ca3EO with E = Si, Ge, Sn, Pb: Structural, elastic andthermal properties";Solid State Communications**150** (2010) 1995–2000

[۲]ToshikazeKariyadoand Masao Ogata,"Three-Dimensional Dirac Electrons at the Fermi Energy in CubicInversePerovskites: Ca3PbO and Its Family";Journal of the Physical Society of Japan**80**(2011)083704

[۳]J.RamannaandN.YedukondaluandK.RameshBabuandG. Vaitheeswaran,"Ab initio study of electronic structure, elastic and optical properties ofanti-perovskite type alkali metal oxyhalides"; Solid State Sciences **20** (2013) 120e126

[۴] A. Widera, H. Schafer, Mater. Res. Bull. 15 (1980) 1805.

[۵]I.N. Frantsevich, F.F. Voronov,S.A. Bokuta, in: I.N. Frantsevich (Ed.), Elastic Constants and Elastic Moduli of Metals and Insulators Handbook, Naukova Dumka, Kiev, 1983, pp. 60–180.

[۶]M.Klintenberg1,"The search for strong topological insulators";arXiv:1007.4838v1[cond-mat.mtrl-sci]27Jul2010

[۷] رحیمی، ندا ؛«بررسی‌خواص کشسانی هویسلر $Fe_{2-x}Co_xMnSi$»؛پنجمین همایش فیزیک ملی پیام نور، ۱۵-۱۶ مهرماه ۱۳۹۰،مرکز تبریز.

[۸]**سلیمانپور، شهرام؛کنجوری، فرامرز؛« بررسیخواصساختاریوالاستیکیپروسکایتباریماستاناتدرفازمکعبی »مقاله‌نامه‌ی کنفرانس فیزیک‌ایران ۱۳۹۱،دانشگاه یزد.**

عوامل موثر بر تفکیک ذرات دانه ای، بر اساس چگالی با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی دو بعدی

نصیرباغبان، احسان[۱] ؛ حنیف پور، مریم[۲] ؛ واعظ علایی، سید مهدی[۳]

[۱،۲،۳]دانشکده فیزیک دانشگاه تهران ، انتهای خیابان کارگر شمالی ، تهران

چکیده

پدیده تفکیک مواد دانه ای بر اساس اندازه یا چگالی مساله مهمی در صنایعی است که عمدتا با حمل و نقل و بسته بندی این مواد سر و کار دارند. جداسازی مواد دانه‌ای به وسیله استوانه‌های چرخان از روش های رایج جداسازی این مواد است. تفکیک ایجاد شده در استوانه‌های دوار به عوامل متعددی بستگی دارد که از مهم‌ترین آن‌ها سرعت دوران و خواص اصطکاکی بین خود ذرات و همچنین بین ذرات و دیواره می‌باشد. به منظور درک بهتر این پدیده ما با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی به بررسی نقش اصطکاک بین اجزاء و سرعت چرخش استوانه در زمان تفکیک ذرات و همچنین الگوی تفکیک ایجاد شده پرداخته‌ایم. نتایج مانشان می‌دهد که مهمترین عامل در تفکیک ذرات ، اصطکاک بین ذرات با دیواره استوانه است.

Investigate the factors affecting of granular particle segregation based on density by using Discrete Element Method(2D)

Nasir Baghban, Ehsan[1]; Hanifpour, Maryam[2]; Vaez Allaie, Seyed Mehdi[3]

[1,2,3] *Department of Physics, University of Tehran, Tehran*

Abstract

Segregation of a mixture of granular materials is an important problem in the transport and packaging of materials. When a cylindrical container, partially filled with a binary granular mixture of particles that differ in size or density, is rotated around its axis, a segregation of the two granular components may occur. In order to better understand this phenomenon , we use molecular dynamics simulations to investigate the role of friction between the components of the system and speed of rotation of the drum on time and pattern of separation. We have shown that the most important element in segregation of grains is the friction between the grains and the wall of the cylinder.

PACS No.　*45.70.-n* 45.70.Cc, 45.70.Qj, 45.70.Mg

مقدمه

مواد دانه ای انبوهی از ذرات ماکروسکوپیک جامد و قابل رویت هستند که مکانیک حاکم بر اندرکنش آنها برخورد غیر الاستیک (به خاطر حضور نیروهای اصطکاکی اتلافی) است. این مواد از نظر حضور در صنعت و زندگی روزانه دومین رده از مواد پرکاربرد محسوب می شوند. ذرات دانه ای رفتاری متفاوت از دسته بندی مرسوم جامدات مایعات و گازها دارند. در گذشته مطالعه این مواد در حوزه علوم مهندسی قرار می‌گرفت و مطالعات بیشتر حول و حوش روش های تجربی برای به‌دست آوردن اطلاعات لازم جهت جابجایی و استعمال این مواد در صنعت بود[۱و۲]. در بسیاری از فرآیند های صنعتی مانند متالورژی پودر و داروسازی از مواد دانه ای استفاده می شود. به تناسب اهمیت کاربردی این مواد، مطالعه نظری رفتار مکانیکی آن ها نیز اهمیت یافته است.

یکی از زمینه های حائز اهمیت در دینامیک مواد دانه ای، پدیده جداسازی است. وقتی اندازه یا چگالی ذرات یک توده یکنواخت

نباشد، وجود حرکات نوسانی وارتعاشی سبب حرکت هم سوی ذرات با مشخصات مشابه میشود. دوران یک نوع از این حرکات نوسانی است که ممکن است منجر به پدیده تفکیک شود[٤و٥]. تحقیقات نشان داده که سایز ذرات[٦] چگالی ذرات و اصطکاک[٧و٨] نقش بسیار زیادی را در تفکیک ذرات بازی می کنند. استوانه های چرخان یکی از وسایلی است که از آن که می توان برای تفکیک ذرات دانه ای استفاده کرد. فاکتورهای مختلفی در تفکیک ذرات با این وسیله می توانند تاثیر گذار باشند که مهمترین آن ها اصطکاک بین اجزای سیستم(شامل اصطکاک بین ذرات با هم و ذرات با دیواره استوانه) و همچنین سرعت چرخش استوانه به دور محور اصلی خود می باشد.[٦]در این مقاله به بررسی اثر این پارامترها بر تفکیک مواد دانه ای می پردازیم.

روش شبیه سازی

به دلیل هزینه های بالای آزمایشگاهی در بررسی دینامیک مواد دانه ای، روشهای عددی و محاسباتی جزو روشهایی کارآمد برای مطالعه این مواد به شمار می آیند. دینامیک مولکولی یک روش کاملا شناخته شده برای شبیه سازی سیستم های متشکل از اجزاء زیاد همچون مواد دانه ای است. در این مقاله از لایتس (LIGGGHTS) که یک نرم افزار دینامیک مولکولی بر پایه مدل الاستیک هرتز بنا شده است استفاده می شود. ابتدا هندسه مسئله وارد نرم افزار می شود. سپس خواص اساسی مواد بکار رفته در برنامه به صورت مجزا وارد می گردد. این خواص شامل ضریب اصطکاک ، ضریب پواسون ، مدول یانگ و چگالی است. بنابراین میتوان با تعریف خواص هر ماده، از آن ماده در شبیه سازی استفاده کرد. برای مشاهده نتایج خروجی لایتس می توان از برنامه Paraview و Pizza استفاده کرد.

طرح مسئله

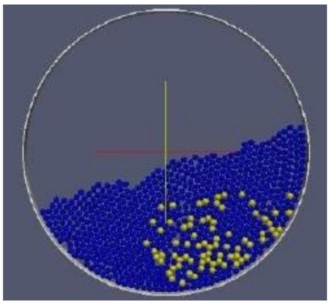
محیط کار شامل یک حلقه است که ذرات درون آن ریخته می شوند و حلقه حول محور خود، شروع به چرخش میکند. تمام ذرات شعاع برابر دارند ولی از نظر چگالی به دو دسته تقسیم می شوند. تعداد کل ذرات در تمام مراحل شبیه سازی یکسان است. پس از گذشت زمانی از چرخش حلقه، ذرات شروع به تفکیک شدن براساس چگالی می کنند وکم کم حوزه هایی تشکیل می شود که تراکم یک نوع ذره (با یک نوع چگالی) در آن بیشتر است. همچنین نوع تفکیک ذرات نیز با توجه به شرایط مسئله می تواند تغییر کند که در این حالت عوامل موثر در تعیین نوع تفکیک ذرات باید مورد بررسی قرار گیرد. جدول۱ خلاصه خواص ذرات استفاده شده را ارائه می‌دهد. (تمام واحدها SI است)

جدول ۱ : مقدار پارامترهای مهم شبیه سازی

قطر حلقه(m)	ضریب پواسون	جاذبه(m/s^2)	مدول یانگ(pa)	قطر ذرات(m)
۱٫۵	۰٫٤۵	۹٫۸	۵*۱۰^{6}	۰٫۰۲

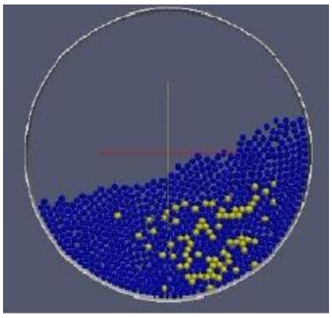
بررسی تاثیر اصطکاک بین ذرات

سیستم شامل ۲نوع ذره است.نوع اول ذرات سبک تر(آبی رنگ



شکل۱:تفکیک ذرات وقتی که بین تمام عناصر سیستم اصطکاک داریم

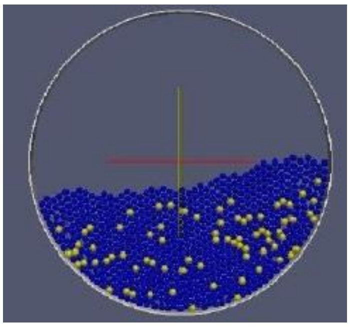
-تیره با چگالی ۲۵۰۰) و نوع دوم ذرات سنگین تر(زرد رنگ-روشن با چگالی ۲۵۰۰۰) می باشد. بررسی اصطکاک شامل نقش جداگانه اصطکاک ذرات سبک با سبک، اصطکاک ذرات سنگین با سنگین و اصطکاک ذرات سبک با سنگین در تفکیک ذرات، است.



شکل۲:تفکیک ذرات پس از حذف اصطکاک ذرات سنگسن با سنگین(زرد)

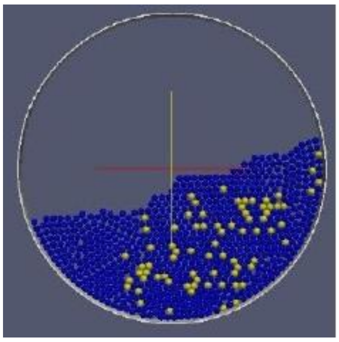
ابتدا اصطکاک بین تمام عناصر سیستم را برابر ۰٫۲ قرار داده و پس

از گذشت ۲۵۰ ثانیه وضعیت سیستم را مشاهده کردیم (شکل۱).
در ادامه برای اینکه مشخص شود اصطکاک بین کدام عوامل نقش بیشتری در تفکیک دارد، ۳مرحله شبیه سازی انجام شد.
در مرحله اول اصطکاک بین ذرات سنگین با سنگین (زرد با زرد) را حذف کردیم. مطابق شکل۲ پس از ۲۵۰ ثانیه، تفکیک تقریبا مثل گذشته اتفاق افتاده است.
در مرحله دوم اصطکاک بین ذرات سبک با سبک (آبی با آبی) را حذف کردیم. شکل۳ نشان می دهد که پس از گذشت زمان، هیچ



شکل۳:حالت سیستم بعد از حذف اصطکاک ذرات سبک با سبک(آبی)

تفکیکی در ذرات رخ نداده است.
در مرحله آخر اصطکاک بین ذرات سبک و سنگین(آبی با زرد) را حذف کردیم. همانگونه که در شکل٤ مشاهده می شود، تاحدودی ذرات از هم تفکیک شده اند. با توجه به ۳ مرحله انجام شده در بالا و مشاهده نتایج، میتوان گفت در تفکیک ذرات هم سایز با

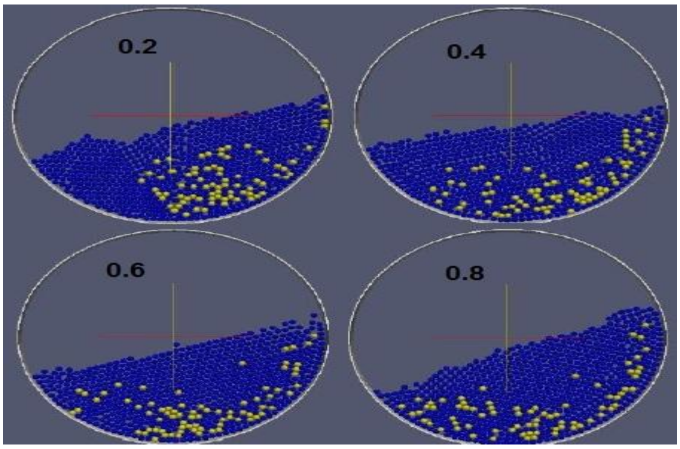


شکل٤: تفکیک ذرات پس از حذف اصطکاک ذرات سبک با سنگین(آبی با زرد)

چگالی متفاوت، بیشترین نقش را، در بین اصطکاک بین ذرات، اصطکاک ذرات سبک با سبک ایفا می کند.

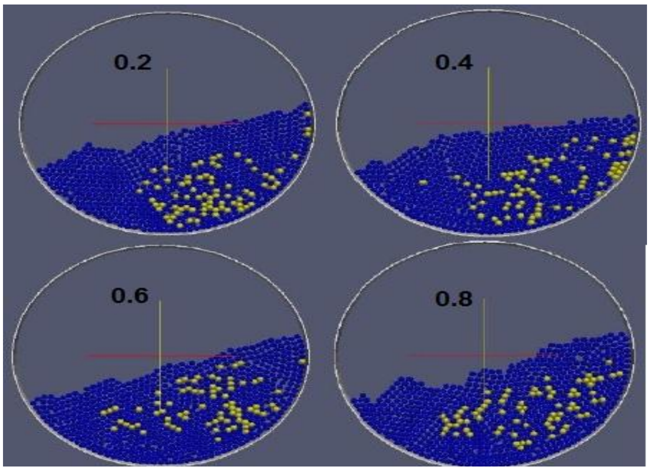
بررسی تاثیر اصطکاک دیواره حلقه باذرات در تفکیک

در مرحله اول اصطکاک تمام ذرات با دیواره حلقه را از ۰٫۲تا ۰٫۸ تغییر دادیم. پس از گذشت ۱۵۰ ثانیه وضعیت سیستم مطابق شکل ۵ مشاهده شد، که نشان می دهد با افزایش اصطکاک شکل تفکیک ذرات تغییر کرده و ذرات سنگین که ابتدا در وسط حلقه جمع شده بودند اکنون بیشتر به صورت نواری دوره محیط حلقه، از ذرات آبی تفکیک شده اند.



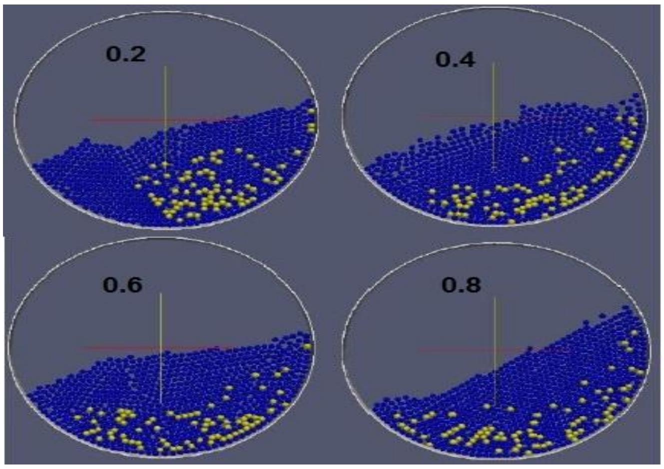
شکل۵: تغییر شکل تفکیک ذرات در اثر افزایش اصطکاک بین حلقه وتمام ذرات

در مرحله دوم اصطکاک بین ذرات آبی (سبک) با حلقه را ثابت و تنها اصطکاک بین ذرات زرد(سنگین) با حلقه را از ۰٫۲ تا ۰٫۸ تغییر دادیم. مطابق شکل ٦ ، تغییر قابل توجهی در شکل تفکیک ذرات مشاهده نشد.



شکل ٦:حالات سیستم پا از افزایش اصطکاک بین دیواره حلقه و ذرات سنگین

در مرحله سوم اصطکاک بین ذرات سبک(آبی) با حلقه را از ۰٫۲ تا ۰٫٤ تغییر داده و اصطکاک بین ذرات سنگین با حلقه را ثابت قرار دادیم. مطابق شکل ۷ با افزایش اصطکاک بین ذرات سبک با حلقه، شکل تفکیک ذرات تغییر کرده و ذرات سنگین (زرد) در دور حلقه تراکم بیشتری دارند.

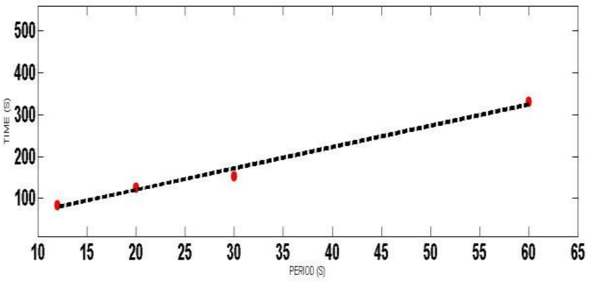


شکل ۷: تغییر شکل تفکیک ذرات بر اثر افزایش اصطکاک بین ذرات سبک(آبی) با حلقه

بررسی تاثیر سرعت چرخش حلقه در تفکیک ذرات

در این مرحله دوره تناوب چرخش حلقه را از ۱۲ تا ۶۰ ثانیه تغییر دادیم و زمان رسیدن به حالت تفکیک(حالت تفکیکی که تقریبا برای تمام مراحل یکسان بود) را ثبت کردیم. همانگونه که از نمودار ۱ مشخص است با افزایش دوره تناوب چرخش حلقه (معادل کاهش سرعت چرخش) زمان رسیدن به تفکیک افزایش یافته است.

نمودار ۱: دوره تناوب چرخش حلقه برحسب زمان رسیدن به تفکیک



نتیجه گیری:

با توجه به مراحل انجام شده در بالا، در تفکیک ذرات با سایز یکسان و چگالی متفاوت، در بررسی تاثیر اصطکاک بین ذرات در تفکیک، مشاهده شد که مهمترین عامل، اصطکاک بین ذرات سبک با سبک است چراکه با حذف اصطکاک بین ذرات سبک با سبک، هیچگونه تفکیکی در ذرات مشاهده نمی شود. همچنین اصطکاک بین ذرات سنگین با سبک از اهمیت برخوردار است زیرا با حذف اصطکاک بین ذرات سبک با سنگین، از میزان تفکیک ذرات کاسته شده است.

در بررسی تاثیر اصطکاک دیواره حلقه با ذرات، اولا مشخص شد که با افزایش اصطکاک بین حلقه و ذرات، شکل تفکیک ذرات تغییر می کند و ذرات سنگین که در ابتدا در وسط حلقه دور هم جمع می شدند، اکنون با افزایش اصطکاک، بیشتر دور محیط رینگ و به صورت نواری از ذرات سبک تفکیک می شوند.

در ادامه مشخص شد که آنچه که نقش اساسی تری در تغییر شکل تفکیک ذرات ایفا می کند، اصطکاک بین ذرات سبک(آبی) با حلقه است و هرچه اصطکاک بین ذرات سبک با حلقه بیشتر می شود، ذرات سنگین(زرد) بیشتر در دور محیط حلقه تجمع می کنند.

همچنین سرعت چرخش حلقه در سرعت تفکیک ذرات سنگین تر از سبک تر، موثر است. زمان رسیدن به تفکیک با دوره تناوب چرخش نسبت مستقیم دارد و به صورت خطی تغییر می کند.

لازم به ذکر است که کلیه مراحل برای حالتی از سیستم که ذرات سنگین بیشتر از ذرات سبک باشند نیز انجام شد ولی نتایج بدست آمده از قانون خاصی پیروی نمیکرد.

مرجع‌ها

[۱] E. Aharonov and D. Sparks. *Shear profiles and localization in simulations of granular materials*. Physical Review **E, 65**(2002)

[۲] P. G. de Gennes. *Granular matter: a tentative view*. Rev. Mod. Phys., **71**(2):374_382, (1999)

[۳] R.Chanda, M.A.Khaskheli, *Discrete particle simulation of radial segregation in horizontally rotating drum: Effects of drum-length and non-rotating end-plates*, Physica A **391** (2012) 4590–4596

[٤] J. C. Williams. The *segregation of particulate materials*. a review. Powder Technology, **15**:245_251, (1976)..

[٥] K. R. LaMarche, M. J. Metzger, B. J. Glasser, and T. Shinbrot. Shapemediated ordering in granular blends. Physical Review E, **81**(5):052301_052304, (2010).

[٦] Y.Xu, Ch. Xu, Z. Zhou, *2D DEM simulation of particle mixing in rotating drum: A parametric study*. Particuology **8** (2010) 141–149

[۷] N. Rivas, P. Cordero, D. Risso, and R. Soto. *Segregation in quasi-twodimensionalgranular systems*. New Journal of Physics, **13**(2011)

[۸] N. Rivas, S. Ponce, B. Gallet, D. Risso, R. Soto, P. Cordero, and N. Mujica. *Sudden chain energy transfer events in vibrated granular media*. Phys. Rev.Lett., **106**(80), (2011)

بررسی گذار فاز ترکیب InAs تحت تاثیر کشش شبکه

نامجو ، شیرین؛ روضاتیان، امیر سید حسن

اصفهان، خیابان هزار جریب، دانشگاه اصفهان، گروه فیزیک، کد پستی ۷۳۴۴۱ – ۸۱۷۴۶

چکیده

InAs دارای پهنای گاف بسیار کوچک و ترتیب نواری عادی است بنابراین این قابلیت را دارد که تحت تاثیر کشش در شبکه به یک نیمرسانا با گاف صفر با ترتیب نواری وارون تبدیل شود با توجه به اهمیت زیاد نیمرساناها با ترتیب نواری وارون که در واقع عایق‌های توپولوژی نامیده می‌شوند، در این مطالعه در اولین گام ثابت‌های شبکه ترکیب InAs در راستای محورها بطور یکسان بسط داده می‌شود. با بسط هیدرواستاتیک ثابت شبکه در حدود ۳/۲ درصد مشاهده میشود که InAS به یک نیمرسانا با گاف صفر و ترتیب نواری وارون تبدیل می‌شود. در مرحله بعد با قراردادن این ترکیب تحت کشش غیرهیدرواستاتیک (کشش در صفحه ab و بهینه کردن پارامتر شبکه در راستای محور c) با تغییر ۶ درصدی در پارامتر شبکه در صفحه ab و با پارامتر c بهینه شده InAs به یک نیمرسانا با ترتیب نواری وارون تبدیل می‌شود.

Phase Transition of InAs Under a Lattice Expansion

Namjoo, Shirin; Rozatian, Amir S. H.

Department of Physics, University of Isfahan, Hezar Jarib Street, Isfahan 81746-73441, Iran

Abstract

InAs has a narrow band gap and normal band order so it has the potential to become a zero band gap semiconductor with an inverted band order under a reasonable lattice expansion. Due to the importance of semiconductors with inverted band order (topological insulators), the lattice constant of InAs is increased equally along all the three axes. For a 3.2% change in the lattice constant InAs is converted into a zero band gap semiconductor with an invert band order. A series of calculations of the strain using the lattice expansion in the ab-plane by leaving the c-axis free to relax is then performed. It was observed that for a 6% change in the lattice expansion in the ab-plane with a relaxed c parameter, InAs is converted into a semiconductor with an inverted band order.

PACS No. 70, 71

مقدمه

نیمرساناها از جالب ترین و مفیدترین گروه جامدها هستند که کاربردهای فراوانی در صنعت دارند.. نیمرساناها با توجه به ویژگی های فیزیکی و شیمیایی متفاوتشان در گروههایی که رفتارهای مشابهی دارند، طبقه‌بندی می‌شوند. این طبقه‌بندی بر اساس موقعیت آنها در جدول تناوبی عناصر صورت می‌گیرد. از جمله ترکیب های نیمرسانا می‌توان به ترکیب های نیمرسانای III-V اشاره کرد. این ترکیب ها در ساختار مکعبی مرکز سطحی با گروه فضایی $F\bar{4}3m$ متبلور می شوند. ترکیب های نیمرسانای III-V دارای ساختار سولفید روی هستند. InAs یکی از ترکیب های نیمرسانای III-V، با پهنای گاف کوچکی است. نیمرساناها با پهنای گاف کم کاربردهای فراوانی در صنعت دارند که از جمله آنها می توان به کاربرد در ابزار های اپتوالکترونیکی فرو سرخ مانند لیزرها و آشکارسازهای نوری اشاره کرد [۱]. از آن‌جا که مطالعه ویژگی‌های بنیادی این نوع از ترکیب ها برای فهم ویژگی های این ابزار ها و بهبود بخشیدن به کارایی آنها از اهمیت بالایی

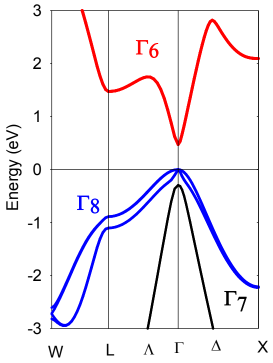
برخوردار است، بنابراین در این مطالعه در گام نخست با بکارگیری تقریب MBJLDA برای انرژی تبادلی همبستگی به بررسی ساختارنواری این نیمرسانا در حالت طبیعی پرداخته می‌شود. از آن‌جا که ساختار نواری نیمرساناها با گاف کوچک به تغییر های اعمال شده بر آن‌ها از قبیل کشش هیدرواستاتیکی و غیر-هیدرواستاتیکی بسیار حساس خواهند بود، بنابراین در گام بعد گذارفاز های ممکن این ترکیب تحت کشش هیدرواستاتیک و غیر هیدرواستاتیک مورد بررسی قرار می‌گیرد. این ترکیب تحت تاثیر این تغییرات به سمت گروهی از ترکیب ها تحت عنوان عایق‌های توپولوژی میل می‌کند. این مواد در درون نارسانا بوده ولی بر روی سطح خود رساناهای خوبی هستند این ویژگی‌منحصربفرد عایق-های توپولوژی در صنعت اسپینترونیک و همچنین محاسبات کوانتومی بسیار مفید واقع می‌شود. باتوجه به کاربرد بسیار زیاد عایق‌های توپولوژی در صنعت، می‌توان به اهمیت فوق‌العاده زیاد تبدیل ترکیب‌ها با ترتیب نواری عادی به عایق‌های توپولوژی پی برد.

روش محاسبات

محاسبات بر پایه نظریه تابعی چگالی و روش امواج تخت بهساخته خطی با پتانسیل کامل(FP-LAPW) و با استفاده از کد کامپیوتری WIEN2k [۲] انجام شده است. در این محاسبات شعاع کره موفین- تین برای اتم‌های ایندیوم و آرسنید a.u. ۲/۴۸ انتخاب شده است. پارامتر R_{Kmax} برابر ۹ و بردار موج قطع برای بسط پتانسیل و چگالی بار در ناحیه بین جایگاهی G_{max}=۱۲ انتخاب شد. انتگرال فضای فاز با استفاده از ۲۸۶ نقطه k در منطقه کاهش ناپذیر بریلوئن انجام شد. برای محاسبه انرژی تبادلی همبستگی نیز از تقریب MBJLDA استفاده شده است [۳]. برای بررسی ساختار نواری برهم‌کنش اسپین- مدار نیز در نظرگرفته شده است.

نتایج

در ترکیبات با ساختار سولفید روی نوارهای انرژی در مرکز ناحیه اول بریلوئن نزدیک سطح فرمی به حالت‌های Γ_6 (تبهگن دوگانه)، Γ_8 (تبهگن چهارگانه) و Γ_7 (تبهگن دوگانه) شکافته می-شوند [٤]. این امر به‌علت تقارن کریستالی ساختار سولفید روی و همچنین برهمکنش قوی اسپین- مدار رخ می‌دهد. ترتیب نواری در دسته ترکیب ها با ساختار سولفیدروی (از انرژی بالا به سمت انرژی پایین) به‌صورت Γ_6، Γ_8 و Γ_7 است. این ترتیب نواری عادی در ساختارنواری ترکیب InAs مطابق شکل ۱ دیده می‌شود. با بکارگیری تقریب MBJLDA گاف نواری این ترکیب در حدود ۰/٤۷ الکترون‌ولت محاسبه شده است که در توافق بسیار خوبی با مقدار تجربی ۰/٤۲ الکترون‌ولت است [۵].



شکل ۱ : ساختار نواری ترکیب InAS

مطابق مدل بستگی قوی انرژی حالت‌های Γ_6،Γ_8 و Γ_7 به‌صورت زیر تعریف می‌شود [٦ و ۷]

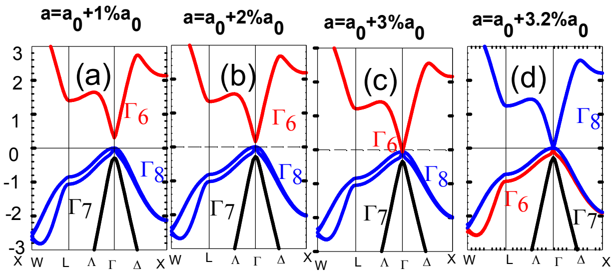
$$E_{\Gamma_6} = \frac{\varepsilon_{s1}+\varepsilon_{s2}}{2} + \sqrt{\left(\frac{\varepsilon_{s1}-\varepsilon_{s2}}{2}\right)^2 + V_{ss}^2} \qquad (1)$$

$$E_{\Gamma_7} = \frac{\varepsilon_{p1}+\varepsilon_{p2}}{2} - \sqrt{\left(\frac{\varepsilon_{p1}-\varepsilon_{p2}}{2}\right)^2 + V_{pp}^2 - \lambda_{SO}} \qquad (2)$$

$$E_{\Gamma_8} = \frac{\varepsilon_{p1}+\varepsilon_{p2}}{2} - \sqrt{\left(\frac{\varepsilon_{p1}-\varepsilon_{p2}}{2}\right)^2 + V_{pp}^2 + \frac{1}{2}\lambda_{SO}} \qquad (3)$$

$\varepsilon_{s1,2}$ و $\varepsilon_{p1,2}$ انرژی اوربیتال‌های s و p مربوط به کاتیون‌ها و همچنین آنیون‌ها هستند. V_{ss} و V_{pp} در واقع پتانسیل‌های جفت-شدگی پیوندهای ss و pp هستند. λ_{so} قدرت جفت‌شدگی اسپین مدار است. یک راه برای تغییر ترتیب نواری ترکیب ها با ساختار سولفیدروی افزایش ثابت شبکه است. مطابق روابط فوق [٦, ۷] افزایش ثابت شبکه منجر به کاهش پتانسیل های جفت‌شدگی می-شود و بنابراین علاوه بر اینکه گاف نواری این ترکیب ها با افزایش ثابت‌شبکه کاهش می‌یابد و رفته رفته این ترکیب ها به سمت نیمرساناها با گاف صفر پیش‌می‌روند، امکان تغییر ترتیب‌نواری در

این دسته از ترکیب ها نیز وجود خواهد داشت، بنابراین پیش‌بینی می‌شود که در این ترکیب با کاهش پتانسیل‌های جفت‌شدگی (افزایش پارامتر شبکه)، نوار تبهگن دوگانه Γ_6 پایین می‌آید و زیر سطح فرمی قرار می‌گیرد. بنابراین این امکان وجود دارد که یک ترتیب نواری وارون در ثابت شبکه به‌اندازه کافی بزرگ بروز پیدا کند از آنجا که عایق‌های توپولوژی دارای ترتیب نواری وارون هستند بنابراین این امکان وجود دارد که با تغییر ثابت شبکه InAs به سمت دسته‌ترکیبات موسوم به عایق‌های توپولوژی میل کند. از آنجا که عایق‌های توپولوژی به‌دلیل ویژگی‌های منحصر بفرد خود بسیار در صنعت حائز اهمیت هستند، بنابراین می‌توان به اهمیت گذار فاز به سمت این دسته از عایق‌ها پی برد. باتوجه به آنچه که ذکر شد می‌توان یک فاکتور نحت عنوان قدرت وارونگی نواری ΔE تعریف کرد. این فاکتور اختلاف انرژی نوار تبهگن دو گانه Γ_6 و نوار تبهگن چهارگانه Γ_8 را نشان می‌دهد. ترکیب‌ها با ترتیب نواری عادی دارای قدرت وارونگی نواری مثبت و ترکیبات با ترتیب‌نواری وارون دارای قدرت وارونگی نواری منفی هستند. با‌توجه به کوچک بودن گاف نواری ترکیب InAs این امکان وجود دارد که با بسط هیدرواستاتیک ثابت شبکه در این ترکیب وارونگی نواری ایجاد شود. بنابراین در این مطالعه تغییر ساختار نواری InAs با افزایش ثابت شبکه از یک درصد تا پنج درصد مورد بررسی قرار گرفته است. همان‌گونه که از شکل ۲ مشخص است، پهنای گاف این ترکیب با افزایش ثابت شبکه رفته رفته کاهش می‌یابد و تا افزایش ۳ درصدی ثابت شبکه (a)، ضمن کوچک شدن پهنای گاف نواری، ترتیب نواری عادی حفظ می‌شود و نوار تبهگن دوگانه Γ_6، بالای نوار تبهگن چهارگانه Γ_8 قرار می‌گیرد. همان‌گونه که مشاهده می‌شود در درصد ۳/۲ وارونگی نواری رخ می‌دهد . به محض افزایش ثابت‌شبکه به‌اندازه ۳/۲ درصد نوار تبهگن دوگانه Γ_6 به زیر سطح فرمی منتقل می‌شود و در ساختار‌نواری وارونگی مشاهده می‌شود. بنابراین تحت بسط هیدرو‌استاتیک ثابت‌شبکه به‌اندازه ۳/۲ درصد ترکیب InAs به یک نیمرسانا با گاف نواری صفر و ترتیب نواری وارون تبدیل می‌شود. تغییرات انرژی حالت‌های Γ_6، Γ_8 و Γ_7 در جدول ۱ مشاهده می‌شود. همان‌گونه که جدول ۱ نشان می‌دهد، قدرت جفت‌شدگی اسپین- مدار که بصورت $E_{\Gamma 8} - E_{\Gamma 7}$، نشان داده می‌شود با افزایش ثابت‌شبکه به مقدار جزئی تغییر پیدا می‌کند، بنابراین می‌توان این‌گونه نتیجه‌گیری کرد که عامل موثر در تغییر قدرت وارونگی نواری تغییر پتانسیل‌های جفت‌شدگی V_{ss} و V_{pp} تحت کشش شبکه است.



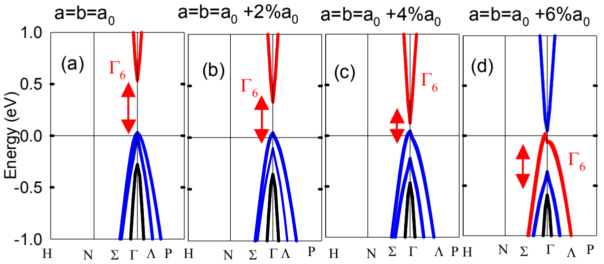
شکل۲ : ساختار نواری ترکیب InAS با ۱درصد(a)، ۲ درصد ۱(b)، ۳ درصد (c) و ۳/۲ درصد (d) بسط هیدرواستاتیک ثابت شبکه

جدول۱ : تغییر انرژی حالت‌های Γ_6،Γ_8 و Γ_7 تحت بسط هیدرواستاتیکی ثابت شبکه از ۰ تا ۵درصد

(a%)	$E_{\Gamma 6} - E_{\Gamma 8}$(eV)	$E_{\Gamma 8} - E_{\Gamma 7}$(eV)
1	0.30449	0.29329
2	0.15628	0.29014
3	0.00043	0.28739
3.2	-0.04771	0 .2873
4	-0.14121	0.28451
5	- 0.29508	0.28201

اگرچه مطابق شکل (۲)، تحت تاثیر بسط هیدرواستاتیک ثابت شبکه، ترتیب‌نواری عادی به ترتیب نواری وارون تبدیل می‌شود اما هنوز یک بسط غیرهیدرواستاتیک برای ایجاد یگ گاف نواری در نقطه Γ نیاز است. در بسط غیرهیدرواستاتیک، ثابت‌های شبکه در صفحه ab بسط داده می‌شوند و ثابت شبکه در راستای محور c با استفاده از تابعی Wu- Cohen بهینه می‌شود. در این حالت همان‌گونه که شکل (۳) نشان می‌دهد به‌علت از بین رفتن تقارن مکعبی مربوط به ساختار سولفیدروی، تبهگنی چهارگانه Γ_8 از بین می‌رود. مطابق این شکل علاوه بر اینکه وارونگی نواری حفظ می‌شود یک گاف نواری نیز بین بیشینه نوار ظرفیت و کمینه نوار رسانش ایجاد

می‌شود. مطابق شکل (۳) تا افزایش ثابت‌های شبکه در صفحه ab به اندازه ٤ درصد ساختارنواری با ترتیب عادی حفظ می‌شود. اما در افزایش پارامترهای شبکه در صفحه ab به اندازه ٦ درصد وارونگی در ساختار نواری ترکیب InAs دیده می‌شود، زیرا مطابق شکل ۳ نوار تبهگن دوگانه Γ_6 به زیر سطح فرمی منتقل شده است. اندازه قدرت وارونگی نواری با پیکان در شکل ۳ نشان داده شده است. همچنین مقدار پارامتر c بهینه شده و قدرت وارونگی نواری در جدول ۲ آورده شده است.



شکل۳ : ساختار نواری ترکیب InAS با ثابت شبکه c بهینه شده و پارامترهای شبکه a و b افزایش یافته به اندازه ۰درصد(a)، ۲ درصد (b)، ٤ درصد (c) و ٦درصد (d)

جدول۱ : پارامتر c بهینه شده و همچنین قدرت وارونگی نواری برای بسط غیر هیدرواستاتیک شبکه InAs به اندازه ۰،۲،٤و ٦ درصد

$\alpha = \frac{a_0 + x\,\%a_0}{a_0}, x = 0,2,4,6$	ΔE (eV)	c_0 (A°)
1	0.5323	6.05
1.02	0.3428	5.95
1.04	0.077	5.84
1.06	- 0.2877	5.68

همان‌گونه که شکل ۳ نشان می‌دهد با بسط ثابت شبکه در صفحه ab و بهینه‌کردن ثابت‌شبکه در راستای محور c حالتی مشاهده می‌شود که نه تنها وارونگی نواری در آن وجود دارد بلکه یک گاف نواری بسیار کوچک بین بیشینه نوار ظرفیت و کمینه نوار رسانش در نقطه Γ ایجاد می‌شود.

نتیجه‌گیری

با استفاده از روش امواج تخت بهساخته خطی با پتانسیل کامل، در چارچوب نظریه تابعی چگالی، ساختار نواری InAs با استفاده از تابعی MBJLDA برای انرژی تبادلی همبستگی مورد بررسی قرار گرفت. محاسبات نشان می‌دهد که InAs یک نیمرسانا با ترتیب نواری عادی و پهنای گافی به اندازه ۰/٤۷ الکترون‌ولت است که این مقدار در توافق خوبی با مقدار تجربی ۰/٤۲ الکترون-ولت است. با بسط هیدرواستاتیک ثابت‌شبکه به اندازه ۳/۲ درصد یک وارونگی در ساختار نواری InAs ایجاد شد و در این درصد از بسط، InAs به یک عایق توپولوژی تبدیل می‌شود. در بسط غیرهیدرواستاتیک با بسط ثابت‌شبکه در صفحه ab به اندازه ٦ درصد و بهینه‌کردن ثابت شبکه در راستای محور c،علاوه‌بر ایجاد شدن یک وارونگی در ساختار نواری بین ماکسیمم نوار ظرفیت و همچنین مینیمم نوار رسانش یگ گاف ایجاد می‌شود. این امر در تجربه با رشد نمونه روی یک زیرلایه با ثابت شبکه بزرگتر ایجاد می‌شود. باتوجه به کاربرد بسیار زیاد عایق‌های توپولوژی در صنعت، می‌توان به اهمیت فوق‌العاده زیاد تبدیل ترکیب‌ها با ترتیب نواری عادی به عایق‌های توپولوژی پی برد.

سپاسگزاری

نویسندگان از تحصیلات تکمیلی دانشگاه اصفهان به دلیل حمایت مالی و از مرکز محاسبات سریع دانشکده علوم و فناوریهای نوین دانشگاه اصفهان سپاسگزاری می کنند.

مراجع

[۱] V. Tetyorkin, A. Sukach, and A. Tkachuk, "*Photodiodes From Fundamentals to Applications*" edited by Ilgu Yun, ISBN 978-953-51-0895-5, 215 (2012).
[۲] P. Blaha, K. Schwarz, G. K. H. Madsen, D. Kavanicka, and J. Luitz, "*An Augmented Plane Wave PlusLocal Orbitals Program for Calculating Crystal Properties*", Vienna University of Technology (2001).
[۳] F. Tran, and P. Blaha, "*Accurate Band Gaps of Semiconductors and Insulators with a Semilocal Exchange-Correlation Potential*", Physical Review Letters **102**, (2009) 226401.
[۴] N. Peyghambarian, S. W. Khoch, and A. Mysyrowicz, "*Introduction to Semiconductor Optics*", (Prentice Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1993).
[۵] Kittel. C., "*Introduction to Solid State Physics*", 6th Ed., New York:John Wiley, (1986)1
[۶]. D. J. Chadi, "*Spin-orbit splitting in crystalline and comyositionally disordered semiconductors*". Physical Review B **16**, (1977)790.
[۷].J. C. Slater, and G. F. Koster, "*Simplified LCAO Method for the Periodic Potential Problem*", Physical Review **94**, (1954) 1498.

شبیه‌سازی نحوه عملکرد پروموتورهای ارگانوهالیدی در افزایش فعالیت کاتالیست‌های زیگلر-ناتا

نعیمه بحری لاله

پژوهشکده مهندسی پلیمریزاسیون، پژوهشگاه پلیمر و پتروشیمی ایران، صندوق پستی ۱۴۹۶۵/۱۱۵

چکیده

پروموتورهای ارگانوهالیدی نقش مهمی در افزایش فعالیت کاتالیست‌های زیگلر-ناتا دارند. علیرغم نقش مهم این دسته از مواد در پلیمریزاسیون الفینها، ساز و کار تاثیر این مواد هنوز به درستی مشخص نیست. در این مطالعه برای بررسی نحوه تاثیر این مواد، استفاده از مدلسازی مولکولی مد نظر می‌باشد. نحوه کار به این صورت بوده که با استفاده از n-کلرومتان‌ها (n=۱-۴) اکسایش مرکز حاوی Ti^{+2} (که فعالیت کمتری نسبت به تیتانیم Ti^{+3} دارد) به Ti^{+3} و Ti^{+4} به ترتیب توسط مکانیسم‌های رادیکالی و اکسایشی-افزایشی مورد مطالعه قرار گرفت. سپس برای اثبات صحت نتایج بدست آمده از شبیه‌سازی، تاثیر ارگانوهالیدها بر روی توزیع حالت‌های اکسیداسیونی اتم مرکزی در کاتالیست $TiCl_4$/(نوع اتوکسیدی)$MgCl_2$ به روش تیتراسیون بررسی گردید. نتایج فوق همراستا با نتایج بدست آمده از شبیه‌سازی بود.

Investigation on the Activity Improvement of Ziegler-Natta Catalysts by Organohalide Promoters

Naeimeh Bahri-Laleh

Iran Polymer and Petrochemical Institute, Polymerization Engineering Department, P.O. Box 14965/115, Tehran, Iran

Abstract

It is well known that in Ziegler-Natta catalyzed olefin polymerization productivity can be increased if halogenated organic compounds are added during the polymerization reaction. To shed light on possible activation mechanisms of this effect, density functional theory (DFT) molecular modeling studies were undertaken. The DFT calculations were carried out using the Gaussian03 package, and the B3LYP hybrid GGA functional was adopted. Studies was focused on Ti species octahedrally coordinated to the (110) lateral cut of $MgCl_2$ with formula $TiCl_2/(MgCl_2)_3$. The mechanism of reactivation of catalyst species by $CH_{4-n}Cl_n$ (n=1-4) molecules was studied via radical and oxidative-addition mechanisms. Results suggest that organohalides reproduce catalyst centre by preferential oxidation of Ti^{+2} to Ti^{+4} rather than Ti^{+3} species and Cl rich organohalides have more impact in restoring active centre. Then to evaluate information obtained from calculation, effect of promoters on the Ti oxidation state distribution was studied using titration method. The results were in accordance with the data obtained from DFT calculation.

PACS No.

مقدمه

کاتالیست‌های زیگلر-ناتا متداول‌ترین نوع کاتالیست‌ها برای پلیمریزاسیون الفین‌ها می‌باشد. در میان نگهدارنده‌های متفاوت و زیادی که برای ساخت کاتالیست‌های زیگلر- ناتا مورد استفاده قرار گرفته‌اند تا کنون منیزیم‌کلراید به عنوان بهترین آنها شناخته شده است و سیستم کاتالیستی $MgCl_2/TiCl_4$ پیشرفته ترین نوع کاتالیست در کاربردهای صنعتی به شمار می‌رود[۱]. مطالعات انجام شده در زمینه شناسایی کاتالیست‌ها نشان می‌دهند که با عمل آماده‌سازی نگهدارنده منیزیم‌کلراید، صفحات پایدار (۱۰۴) و نیمه پایدار (۱۱۰) تشکیل می‌شوند[۲,۳] و بر روی یونهای منیزیم موجود در این صفحات، جذب تیتانیم‌تتراکلراید اتفاق می‌افتد.

محاسبات نشان می‌دهد که کوئوردیناسیون تیتانیم‌تتراکلراید روی صفحه (۱۰۴) ضعیف و حتی ناپایدار است در حالی‌که کوئوردیناسیون بر روی صفحه (۱۱۰) از لحاظ انرژی مطلوب می‌باشد. به همین دلیل اتم تیتانیم هشت وجهی که بر روی صفحه (۱۱۰) جذب شده مدل مناسبی برای نشان دادن سایت فعال است.

از سوی دیگر، همانطور که گزارش شده، در پلیمریزاسیون اتیلن و پروپیلن به روش زیگلر-ناتا، تیتانیم در سه حالت اکسیداسیونی ۲+، ۳+ و ۴+ یافت می‌شود. از بین این سه حالت اکسیداسیونی، Ti^{+3} گونه فعال بوده که از کاهش تیتانیم‌تتراکلراید اولیه حاصل می‌شود. کاهش بیشتر این ماده منجر به تشکیل Ti^{+2} می‌شود که در پلیمریزاسیون پروپیلن غیر فعال و در پلیمریزاسیون اتیلن به صورت جزئی فعال است[۴]. شناخته شده‌ترین روش برای اکسیداسیون دوباه Ti^{+2} استفاده از ترکیبات ارگانوهالید مانند کربن-تتراکلراید، کلروفرم، دی‌کلرواتان، و یا حتی مولکول کلر می‌باشد که به عنوان ترکیب اکسیدکننده مورد استفاده قرار می‌گیرند[۵]. بعد از عمل اکسید شدن، مراکز فعال کاتالیستی بازیابی شده و دوباره فعال شده و وارد چرخه پلیمریزاسیون می‌گردند.

در این مقاله با استفاده از مطالعات تئوری تابعیت چگالی، در حضور n-کلرومتان‌ها (n=۱-۴) مکانیسم اکسایش مرکز حاوی Ti^{+2} به Ti^{+3} و Ti^{+4} بررسی شد.

جزئیات محاسباتی و مدل مورد استفاده

مدل تیتانیم‌دی‌کلراید نشانده شده بر یک شبکه کلاستری کاملا منعطف با فرمول $(MgCl_2)_3$ در شبیه‌سازی‌ها مورد استفاده قرار گرفت. در مورد ساختارهایی که به صورت رادیکال می‌باشند محاسبات لایه باز مورد استفاده قرار گرفت. محاسبات تئوری تابعیت چگالی با استفاده نرم‌افزار گوسین [۶] با تابعی B3LYP [۷] انجام گرفت. برای تشریح ساختار الکترونی اتمها از سری پایه TZVP [۸] استفاده گردید.

اندازه گیری حالت های اکسیداسیونی تیتانیوم

برای اندازه‌گیری تاثیر ارگانوهالیدها بر روی توزیع حالتهای اکسیداسیونی تیتانیم از روش تیتراسیون اکسایش-کاهشی پیشنهاد شده توسط شین استفاده شد [۹].

نتایج و بحث

همانطور که قبلا هم گفته شد حالت اکسیداسیونی Ti^{+3} فعال‌ترین حالت در پلیمریزاسیون الفین‌ها می‌باشد[۱۰]. بنابراین کاهش فعالیت کاتالیست در پلیمریزاسیون اتیلن می‌تواند مربوط به کاهش جزء فوق به حالت اکسیداسیونی Ti^{+2} باشد. یکی از روش‌های فعال کردن دوباره Ti^{+2} استفاده از ترکیبات ارگانوهالیدی به منظور اکسایش مرکز فوق می‌باشد. به همین دلیل در این بخش اکسایش مرکز Ti^{+2} توسط ارگانوهالیدهای مختلف مورد مطالعه قرار گرفت. به منظور حذف اثرات مربوط به کانفورماسیون‌های مختلف مربوط به ارگانوهالیدهای بزرگ‌تر، فقط اکسایش توسط n-کلرومتان‌ها (n=۱-۴) بررسی شد. برای واکنش اکسایشی فوق دو مسیر اکسایشی-افزایشی جدید طراحی و انرژی مراحل مختلف مربوط به آنها اندازه‌گیری گردید. واکنش‌های فوق عبارتند از:

۱- اکسایش Ti^{+2} به Ti^{+4} به وسیله افزایش مجزای اتم کلر و بخش آلی به مرکز فوق (مکانیسم افزایشی-اکسایشی)؛

۲- اکسایش Ti^{+2} به Ti^{+3} از طریق افزایش رادیکالی اتم کلر ارگانوهالید به مرکز فوق و دور شدن بخش باقی‌مانده از مرکز فعال به صورت رادیکال.

انرژی‌های محاسبه شده برای اکسایش Ti^{+2} به Ti^{+4} در جدول ۱ آورده شده است. همانطور که دیده می‌شود انرژی آزاد شده برای کوئوردیناسیون ارگانوهالیدهای مورد مطالعه مابین $kcal \cdot mol^{-1}$ ۱۶-۱۱ می‌باشد. در این قسمت رویه مناسبی برای افزایش انرژی کوئوردیناسیون با کاهش تعداد اتمهای کلر موجود در ارگانوهالید وجود دارد و کوئوردیناسیون کربن تتراکلراید از نظر ترمودینامیکی نامطلوب‌تر از بقیه می‌باشد.

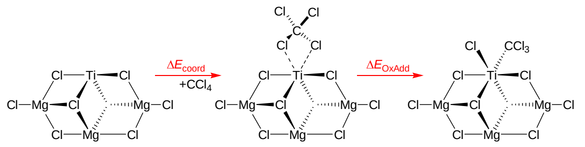
جدول ۱- انرژی مربوط به مراحل مختلف مکانیسم اکسایشی-افزایشی ($kcal \cdot mol^{-1}$).

	واکنش	ΔE_{Coord} [۱]	ΔE_{OxAdd} [۲]	ΔE_{Tot} [۳]
۱	$[Mg]/TiCl_2 + CH_3Cl \rightarrow [Mg]/TiCl_3CH_3$	-۱۵/۹	-۱۶/۲	-۳۲/۱
۲	$[Mg]/TiCl_2 + CH_2Cl_2 \rightarrow Mg]/TiCl_3CH_2Cl$	-۱۵/۶	-۱۸/۶	-۳۴/۲
۳	$[Mg]/TiCl_2 + CHCl_3 \rightarrow [Mg]/TiCl_3CHCl_2$	-۱۳/۷	-۲۰/۹	-۳۴/۶
۴	$[Mg]/TiCl_2 + CCl_4 \rightarrow [Mg]/TiCl_3CCl_3$	-۱۱/۸	-۲۵/۲	-۳۷/۰

(با توجه به مکانیسم نشان داده شده در شکل ۱) [۱](انرژی مواد اولیه-انرژی محصول حاصل از کوئوردیناسیون)=ΔE_{Coord}؛ [۲](انرژی مواد اولیه-انرژی حالت میانی)=ΔE_{OxAdd}، و [۳]ΔE_{Tot}=(ΔE_{Coord}+ ΔE_{OxAdd}).

محاسبات نشان داد برای ارگانوهالیدهای دارای بیش از یک اتم کلر، کوئوردیناسیون از طریق دو تا از کلرهای آن رخ می‌دهد به

طوریکه کوئوردیناسیون اطراف تیتانیم تقریبا به کوئوردیناسیون هشت‌وجهی نزدیک می‌شود (شکل ۱ را ببینید).

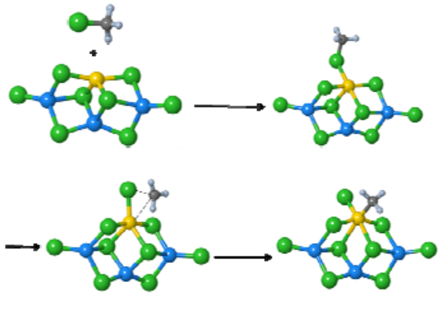


شکل ۱- مکانیسم مربوط به اکسایش مرکز $Ti^{+۲}$ توسط کربن‌تتراکلرید.

بنابراین برای سیستم‌های فوق مرحله بعدی افزایش اکسایشی ارگانوهالید کوئوردینه شده است. در این قسمت با افزایش تعداد اتم‌های کلر ارگانوهالید مرحله اکسایشی-افزایشی مطلوب‌تر می‌شود (ΔE_{OxAdd} های جدول ۱ را مقایسه کنید)؛ به‌طوریکه ΔE_{OxAdd} در صورت استفاده از $CCl_۴$ برابر $-۲۵/۲$ kcal mol^{-1} و در مورد $CH_۳Cl$ برابر $-۱۶/۲$ kcal mol^{-1} می‌باشد.

رویه مشاهده شده برای ΔE_{OxAdd} مطابق با رویه انرژی برای تجزیه همجور پیوند C—Cl است. انرژی لازم برای شکستن پیوند فوق در $CCl_۴$، $CHCl_۳$، $CH_۲Cl_۲$، و $CH_۳Cl$ به‌ترتیب برابر ۵۸/۶، ۶۷/۱، ۷۴/۳، و ۸۰/۶ kcal mol^{-1} می‌باشد. به عبارت دیگر بالاتر بودن میزان انرژی بدست آمده در $CCl_۴$ در مقایسه با $CH_۳Cl$ به ضعیف‌تر بودن پیوند C—Cl در $CCl_۴$ مربوط می‌شود.

علاوه‌براین؛ رویه مشاهده شده برای انرژی کلی واکنش (ΔE_{Tot}) همانند رویه مشاهده شده در ΔE_{OxAdd} است با این تفاوت که در اینجا تفاوت بین انرژی‌ها در حضور ارگانوهالیدهای مختلف کمتر است. در مورد کلرومتان که حاوی یک اتم کلر بوده، حالت گذاری مشاهده می‌شود که مواد اولیه را به محصولات ارتباط می‌دهد. در حالت گذرا پیوند C—Cl به طور جزئی شکسته می‌شود و پیوند C—Ti به طور جزئی تشکیل شده است (شکل ۲).



شکل ۲- واکنش اکسایشی-افزایشی مربوط به برهمکنش $Ti^{+۲}$ با کلرومتان.

مکانیسم دوم یک مکانیسم رادیکالی می‌باشد که مربوط به کوئوردیناسیون n-کلرومتان‌ها با مرکز $Ti^{+۲}$ از طریق اتم کلرشان است که با دور شدن بخش آلی به صورت رادیکال، به تشکیل $Ti^{+۳}$ می‌انجامد. در این تحقیق ترمودینامیک مربوط به واکنش‌های فوق بررسی شد و نتایج در جدول ۲- **ترمودینامیک مربوط به اکسایش $Ti^{+۲}$ به $Ti^{+۳}$ برای تشکیل (n=۰-۳) $[Mg]/TiCl_۲CH_nCl_{۳-n}$ ، واحد انرژی kcal·mol^{-1}**

	واکنش	$\Delta E_{Products}$[۱]
۱	$[Mg]/TiCl_2 + CH_3Cl \rightarrow [Mg]/TiCl_3\bullet + CH_3\bullet$	۲/۲
۲	$[Mg]/TiCl_2 + CH_2Cl_2 \rightarrow [Mg]/TiCl_3\bullet + CH_2Cl\bullet$	-۴/۳
۳	$[Mg]/TiCl_2 + CHCl_3 \rightarrow [Mg]/TiCl_3\bullet + CHCl_2\bullet$	-۱۱/۴
۴	$[Mg]/TiCl_2 + CCl_4 \rightarrow [Mg]/TiCl_3\bullet + CCl_3\bullet$	-۱۹/۸

[۱] $\Delta E_{Products}$=(انرژی مواد اولیه-انرژی محصولات)

گردآوری شده است. کوئوردیناسیون ارگانوهالیدها به مرکز $Mg/TiCl_۲$ همانند مکانیسم اول است که قبلا در مورد آن به طور مفصل بحث شد. در این قسمت فرض بر این است که بعد از کوئوردیناسیون ارگانوهالیدها، پیوند C—Cl به اندازه‌ای طولانی می‌شود که حذف بخش آلی را امکان‌پذیر می‌سازد. انرژی محاسبه شده برای این مکانیسم در صورت استفاده از $CH_۳Cl$ و $CH_۲Cl_۲$ به ترتیب برابر ۲/۲ و $-۴/۳$ kcal·mol^{-1} می‌باشد. بنابراین ترکیبات فوق کمک چندانی به مکانیسم افزایشی $Ti^{+۲}$ به $Ti^{+۳}$ نمی‌کنند. از سوی دیگر $CHCl_۳$ و $CCl_۴$ با ΔE_{Tot} برابر با $-۱۱/۴$ و $-۱۹/۸$ kcal·mol^{-1} توانایی اکسید کردن $Ti^{+۲}$ به $Ti^{+۳}$ توسط مکانیسم رادیکالی را دارند.

جدول ۲- ترمودینامیک مربوط به اکسایش $Ti^{+۲}$ به $Ti^{+۳}$ برای تشکیل (n=۰-۳) $[Mg]/TiCl_۲CH_nCl_{۳-n}$ ، واحد انرژی kcal·mol^{-1}

	واکنش	$\Delta E_{Products}$[۱]
۱	$[Mg]/TiCl_2 + CH_3Cl \rightarrow [Mg]/TiCl_3\bullet + CH_3\bullet$	۲/۲
۲	$[Mg]/TiCl_2 + CH_2Cl_2 \rightarrow [Mg]/TiCl_3\bullet + CH_2Cl\bullet$	-۴/۳
۳	$[Mg]/TiCl_2 + CHCl_3 \rightarrow [Mg]/TiCl_3\bullet + CHCl_2\bullet$	-۱۱/۴
۴	$[Mg]/TiCl_2 + CCl_4 \rightarrow [Mg]/TiCl_3\bullet + CCl_3\bullet$	-۱۹/۸

[۱] $\Delta E_{Products}$=(انرژی مواد اولیه-انرژی محصولات)

با مقایسه انرژی‌های گزارش شده در جداول ۱ و ۲ می‌توان این‌طور نتیجه گرفت که اکسایش $Ti^{+۲}$ به $Ti^{+۴}$ از لحاظ ترمودینامیکی

مطلوب‌تر از اکسایش آن به $Ti^{+۳}$ از طریق مکانیسم رادیکالی می‌باشد زیرا انرژی آزاد شده در مکانیسم فوق بیشتر است.

برای مطالعه تاثیر ارگانوهالیدها بر حالت‌های اکسیداسیونی اتم تیتانیم، سه ارگانوهالید کلرومتان، دی‌کلرومتان و کلروفرم انتخاب و توزیع حالت‌های اکسیداسیونی اتم تیتانیم به روش تیتراسیون در حضور آنها و در غیاب آنها انجام شد. نتایج در جدول ۳ گردآوری شده است.

جدول ۳- تاثیر ارگانوهالیدها بر روی توزیع حالت‌های اکسیداسیونی فلز تیتانیم.

نوع ارگانوهالید	دما (°C)	نسبت مولی Al/Ti	نسبت مولی ارگانوهالید به Ti	$Ti^{+۲}$ (٪)	$Ti^{+۳}$ (٪)	$Ti^{+۴}$ (٪)
–	۸۳	۱۸۰	–	۴۶	۳۹	۱۵
$CH_۳Cl$	۸۳	۱۸۰	۲۰	۴۰	۴۳	۱۷
$CH_۲Cl_۲$	۸۳	۱۸۰	۰/۵۴	۳۳	۴۸	۱۹
$CHCl_۳$	۸۳	۱۸۰	۰/۰۳۳	۲۷	۵۰	۲۳

همانطور که دیده می‌شود در حضور ارگانوهالیدهای مورد استفاده مقادیر $Ti^{+۴}$ و $Ti^{+۳}$ هر دو افزایش می‌یابند. به عنوان مثال مقدار $Ti^{+۴}$ از ۱۵ ٪ در نمونه بدون پروموتور به ۱۷، ۱۹ و ۲۳ ٪ و مقدار $Ti^{+۳}$ از ۳۹ ٪ به ۴۳، ۴۸ و ۵۰ ٪ به ترتیب در حضور کلرومتان، دی‌کلرومتان و کلروفرم می‌رسند.

این مطلب که تاثیر ارگانوهالیدها در افزایش مقدار $Ti^{+۳}$ اندکی بیشتر از $Ti^{+۴}$ می‌باشد، می‌تواند به دلیل کاهش $Ti^{+۴}$ در اثر تری-اتیل‌آلومینیوم مازاد در محیط نیز باشد. اما چیزی که در اینجا حائز اهمیت است وجود این افزایش مقدار $Ti^{+۴}$ در حضور ارگانوهالیدها است که شاهد محکمی بر مکانیسم اکسایشی-افزایشی ارائه شده در بخش شبیه‌سازی می‌باشد.

علاوه‌براین با افزایش تعداد اتم‌های کلر در ارگانوهالیدها مقدار $Ti^{+۴}$ و $Ti^{+۳}$ تولید شده نیز افزایش می‌یابد که به کمتر بودن ΔE_{OxAdd} و یا به منفی‌تر بودن $\Delta E_{Products}$ بدست آمده در قسمت مدلسازی مربوط می‌شود.

۶- نتایج

با استفاده از مطالعات تئوری حالت چگالی تاثیر پروموتورهای ارگانوهالیدی بر روی کاتالیست زیگلر-ناتا توسط دو مکانیسم مختلف بررسی شد. محاسبات انرژی واکنش برای اکسایش $Ti^{+۲}$ به $Ti^{+۳}$ و $Ti^{+۴}$ نشان داد که اکسایش $Ti^{+۲}$ به $Ti^{+۴}$ از لحاظ ترمودینامیکی مطلوب‌تر از اکسایش آن به $Ti^{+۳}$ از طریق مکانیسم رادیکالی می‌باشد. اندازه‌گیری توزیع حالت اکسیداسیونی اتم تیتانیم در حضور n-کلرومتان‌ها (n=۱-۳) با استفاده از تیتراسیون نشان از افزایش $Ti^{+۳}$ از ۳۹٪ در محیط بدون پروموتور به ۴۳-۵۰٪ و $Ti^{+۴}$ از ۱۵٪ به ۱۷-۲۳٪ در حضور n-کلرومتان‌ها داد.

مراجع:

[1]. Albizzati, E.; Giannini, U.; Collina, G.; Noristi, L.; Resconi, L. In *Polypropylene Handbook*; Moore, E. P., Ed.; Hanser: Munich, 1996, p 11.

[2]. R. Credendino; V. Busico; M. Causa, V. Barone; P. H. M. Budzelaard,; C. Zicovich-Wilsone ,*Physical Chemistry Chemical Physics* **11** (2009) 6525–6532.

[3]. U. Giannini, G. Giunchi, E. Albizzati, P.C. Barbè, *Frontiers in Polymerization Catalysis* **NATO Advanced Research Workshop**: Feb. 1-6 (1987).

[4]. D. Fragonese, S. Mortara, S. Bresadola, *J. Mol. Catal. A: Chem.* **172** (2001) 89-95.

[5]. H. Fuhrmann, W. Herrmann, *Macronol. Chem. Phys.* **195** (1994) 3509-3521.

[6]. M.J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegele, *Gaussian, Inc., Pittsburgh PA* (2004).

[7]. A. Turner-Jones, J. M. Aizlewood, D. R. Beckett, *Makromolekulare Chemie* **75** (1964) 134-158.

[8]. A. Schäfer, H. Horn, R. Ahlrichs, *J. Chem. Phys.* **97** (1992) 2571-2579.

[9]. A. S. N. Al-arifi *J Appl Polym Sci* **93** (2004) 56-62.

[10]. K. Soga, S.I. Chen, R. Ohnishi, *Polym. Bull.* **8** (2012) 473-478.

محاسبه شار نوترونی در مرکز یک راکتور تیغه‌ای با روش تفاضل محدود

نصری نصر آبادی، مهدی؛ محمدیان کهل، مجتبی

دانشکده علوم و فناوری‌های نوین دانشگاه اصفهان، گروه مهندسی هسته‌ای، خیابان هزار جریب، اصفهان

چکیده

شار نوترونی بر حسب زمان برای دو گروه از نوترون ها شامل طیف سریع و حرارتی بدون حضور نوترون‌های تأخیری در مرکز یک راکتور تیغه‌ای مربعی شکل به دو روش محاسبات عددی یعنی روش تفاضل محدود و روش کرانک - نیکلسون محاسبه شده است. محاسبات بر اساس یک راکتور دو بعدی، بدون بازتابنده و با لحاظ کردن شرایط مرزی دیریکله همگن انجام گرفت. این نتایج توسط نرم‌افزار متلب بدست آمد و برای دو روش مذکور تطابق خوبی را نشان داد.

Neutron Flux Calculation in the Center of a Slab Reactor by Finite Difference Method

Nasri Nasrabadi, Mehdi; Mohammadian Kohol, Mojtaba

Department of Nuclear Engineering, Faculty of advanced Sciences and Technologies, University of Isfahan, Isfahan, Iran

Abstract

The flux as a function of time for two neutron groups, including fast and thermal without considering delayed neutrons has been calculated in the center of a slab reactor (square-shaped) using two numerical methods: finite difference method (FDM) and Crank-Nicolson method. Calculations have been done based upon considering the reactor as two-dimensional, without reflector and using homogeneous Dirichlet boundary conditions. The results obtained by MATLAB software and showed a good agreement for these two mentioned methods.

PACS No. 28, 2

مقدمه

در عصر جدید نیاز انسان به منابع انرژی به شدت احساس می‌شود به همین دلیل امروزه واکنش شکافت هسته‌ای به‌عنوان یکی از منابع انرژی مورد توجه قرارگرفته و بایستی با کنترل دقیق این واکنش در رآکتورهای هسته ای بتوان از آن در تامین انرژی استفاده نمود. در این راستا استفاده از روش‌های حل عددی توسط نرم‌افزار این امکان را به ما می‌دهد تا بتوان توزیع تعداد نوترون‌ها را در هر کدام از نقاط مختلف قلب راکتور محاسبه کرد.

توزیع نوترون‌ها در قلب راکتور با حل معادله ترابرد نوترون به‌دست می‌آید. این معادله توزیع انرژی، زاویه‌ای، فضایی و زمانی نوترون‌ها را توصیف می کند. با اینحال حل این معادله خیلی هم راحت نیست و با در نظر گرفتن ابعاد کوچک برای سیستم و اعمال شرایط فرضی می‌توان معادله را حل نمود [۱]. سیستم معادلات پخش نوترون در قلب راکتور به‌صورت مشتق‌های جزئی بیان می‌شود. برای حل این‌گونه معادلات به طور کلی دو روش تحلیلی و عددی وجود دارد. در روش‌های تحلیلی تابع پاسخ به‌دست می‌آید ولی خروجی حاصل از روش‌های عددی به‌صورت عدد می‌باشد. روش تفاضل محدود و کرانک - نیکلسون از جمله روش‌های عددی برای حل تقریبی معادلات دیفرانسیل هستند. در این روش‌ها مشتق توابع با تفاضلات معادل آنها تقریب زده‌شده و یک فرآیند تکراری با گام‌های مناسب و بهینه، برای تقریب زدن تابع مورد نظر انجام می‌پذیرد.

به‌کارگیری روش‌های تحلیلی در بسیاری از موارد به‌راحتی میسر نبوده و فقط در برخی از حالات خاص و اعمال فرض‌های ساده کننده، دستیابی به حل نهایی را میسر می‌سازند. بدین ترتیب با پیشرفت روش‌های عددی و افزایش توان محاسباتی کامپیوترها و نرم‌افزارهای محاسباتی، استفاده از روش‌های عددی، حل و تحلیل مسائل پیچیده مهندسی را امکان‌پذیر کرده است. لذا در این تحقیق بنا داریم از روش تفاضل محدود برای توصیف رفتار نوترون‌ها در داخل قلب یک راکتور دو بعدی استفاده کنیم. بررسی چگونگی توزیع نوترون در راکتور به دلیل آگاهی از آهنگ وقوع اندر کنش‌های مختلف و قضاوت در مورد پایداری زنجیره‌های-شکافت صورت می‌پذیرد. در یک راکتور بررسی توزیع نوترون با بکارگیری معادله ترابرد امکان پذیر است و در این معادله حرکت نوترون‌ها به‌صورت جریانی در اطراف قلب راکتور در نظر گرفته می‌شود. این نوترون‌ها پیوسته در حال پراکندگی از هسته‌ی اتم‌ها می‌باشند تا اینکه نهایتاً جذب می‌شوند یا به خارج از قلب راکتور فرار می‌کنند. معادله ترابرد نوترون یک معادله خطی است که شامل یک متغیر وابسته (شار) و متغیرهای مستقل شامل مکان، زاویه، انرژی و زمان می باشد [۲].

ازآنجاکه امروزه نرم‌افزارهای برنامه‌نویسی برای حل دستگاه‌های معادلات جبری به‌کار می‌روند، بایستی ابتدا معادله ترابرد به‌صورت معادلات جبری قابل‌فهم برای رایانه تبدیل شود که این عمل با انجام گسسته سازی متغیرهای پیوسته صورت می‌گیرد. بدین ترتیب با استفاده از گسسته‌سازی متغیر زاویه‌ای، انرژی و مکان معادله ساده‌تر می‌شود. با بسط دادن وابستگی زاویه‌ای به شار نوترون بر حسب هماهنگ‌های کروی و قرار دادن در معادله ترابرد نوترون معادلات P_n وابسته به انرژی حاصل می‌شوند و همچنین برای گسسته سازی متغیر انرژی، انرژی نوترون‌ها را به تعدادی گروه‌های انرژی تقسیم‌بندی می‌کنیم. سپس با انتگرال‌گیری از معادلات P_n روی هر گروه انرژی، معادلات P_n چند گروهی حاصل خواهد شد. با در نظر گرفتن تعداد متناهی از جملات سری و همچنین در نظر گرفتن شبکه‌های فضایی گسسته می‌توان یک سری معادلات جبری جهت محاسبات نرم‌افزاری در نظر گرفت. پس از اعمال فرض‌های ساده کننده بر روی معادله ترابرد نوترون، معادله پخش نوترون چند گروهی بدون حضور نوترون‌های تأخیری برای گروه‌های انرژی g به‌دست خواهد آمد [۲].

(۱)

$$\frac{1}{v_g}\frac{\partial}{\partial t}\phi_g(r,t) = \nabla . D_g(r,t)\nabla\phi_g(r,t) - \Sigma_{a_g}\phi_g(r,t)$$
$$- \sum_{g'\geq g}^{G}\Sigma_{s_{g,g'}}\phi_g(r,t) + \chi_1\sum_{g'=1}^{G}\upsilon_{g'}\Sigma_{f_{g'}}\phi_{g'}(r,t) + \sum_{g'\leq g}^{G}\Sigma_{s_{g',g}}\phi_{g'}(r,t)$$
$$g = 1,2,\ldots, G$$

معمولاً برای راکتورهای حرارتی دو گروه انرژی کفایت می‌کند. در راکتورهای حرارتی تعیین تغییرات مکانی و زمانی شار نوترون و همچنین اندازه بحرانی قلب از جمله کاربردهای معادله پخش می‌باشد [۱].

روش محاسباتی تفاضل محدود

روش تفاضل محدود (FDM) یکی از روش‌های عددی برای حل تقریبی معادلات دیفرانسیل است. در این روش مشتق توابع با تفاضلات معادل آنها تقریب زده می‌شود و خطای محاسبات از مرتبه $O(\Delta t)$ و $O(\Delta x)^2$ می‌باشد [۳]. در این روش، یک ورقه مربعی شکل به ابعاد ۲۰۰ سانتی‌متر را به شبکه‌های منظم ۲۰ در ۲۰ سانتی‌متری تقسیم می‌کنیم به شکلی که هر رأس این شبکه یک گره را تشکیل می‌دهد. با این تکنیک معادلات دیفرانسیل حاکم بر رفتار نوترون و شرایط مرزی توسط یک سری معادلات تفاضلی جایگزین می‌شود. از این رو حل مسئله اصلی یعنی محاسبه شار نوترون در مرکز ورقه، به حل همزمان دستگاه‌های معادلات جبری نوشته‌شده برای هر گره داخل صفحه منجر می‌شود که با حل دستگاه‌ها، مجهولات ما که همان مقادیر شار در هر گره است را به‌دست می‌دهد. در این تحقیق به بررسی مقدار شار در مرکز راکتور بر حسب زمان پرداخته شده است. در ابتدا حل تحلیلی شار نوترون در مرکز ورقه مربعی شکل با شرایط مرزی را انجام داده و سپس در ادامه حل عددی معادله ترابرد بر اساس مرتبه‌های خطای ذکر شده، بررسی شده است. حل عددی معادلات حاصل با استفاده از کد نوشته‌شده توسط نرم‌افزار متلب اجرا شد و بدین ترتیب شار نوترون در دو بعد برای تمام نودها در یک زمان به‌دست آمد و برای زمانهای بعدی دوباره محاسبات تکرار گردید.
با در نظر گرفتن محیطی همگن و یکنواخت، سطح مقطع‌ها و ضریب پخش نوترونی گروه‌ها D_g دیگر تابع مکان نیستند.

جدول۱ : مقادیر عددی پارامترهای استفاده‌شده برای دو گروه انرژی

مقادیر پارامترها	گروه ۱ (سریع)	گروه ۲ (حرارتی)
D(cm)	۱/۳۵	۱/۰۸
$\Sigma_a(cm^{-1})$	۰/۰۰۱۳۸۲	۰/۰۰۵۴۸۶۹
υ (neutron)	۲/۴۱	۲/۴۱
$\Sigma_f(cm^{-1})$	۰/۰۰۰۲۴۲	۰/۰۰۴۰۸
$\Sigma_{S_{g,g+1}}(cm^{-1})$	۰/۰۰۲۳	۰
V(cm/sec)	۳ × ۱۰^{۷}	۲/۲ ×۱۰^{۷}
χ_g	۱	۰

در جدول (۱) مقادیر پارامترهای استفاده شده در محاسبات شامل سطح‌مقطع‌ها، ضریب‌پخش، ضریب‌تکثیر و سرعت‌نوترون برای دو گروه انرژی آورده شده است. معادله (۱) را برای دو گروه انرژی به روش صریح گسسته سازی می‌کنیم.

$$\frac{\partial\phi}{\partial t}=\frac{\phi_{i,j}^{k+1}-\phi_{i,j}^{k}}{\Delta t}+O(\Delta t) \quad (۲)$$

$$\nabla^2\phi=\left[\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\phi}{\partial y^2}\right] \quad (۳)$$

$$=\frac{\phi_{i+1,j}^{k}-4\phi_{i,j}^{k}+\phi_{i-1,j}^{k}+\phi_{i,j+1}^{k}+\phi_{i,j-1}^{k}}{(\Delta x)^2}+O(\Delta x)^2$$

برای محاسبه شار در زمان‌های بعدی از زمان قبلش، دو رابطه (۲) و (۳) را در رابطه (۱) استفاده کنیم. در اینصورت دو رابطه برای هر گروه انرژی خواهیم داشت:

برای گروه سریع:

$$\phi_{1_{i,j}}^{k+1}=a_1\phi_{1_{i,j}}^{k}+b_1\left[\phi_{1_{i+1,j}}^{k}+\phi_{1_{i-1,j}}^{k}+\phi_{1_{i,j+1}}^{k}+\phi_{1_{i,j-1}}^{k}\right]+c_1\phi_{2_{i,j}}^{k} \quad (۴)$$

و برای گروه حرارتی:

$$\phi_{2_{i,j}}^{k+1}=a_2\phi_{2_{i,j}}^{k}+b_2\left[\phi_{2_{i+1,j}}^{k}+\phi_{2_{i-1,j}}^{k}+\phi_{2_{i,j+1}}^{k}+\phi_{2_{i,j-1}}^{k}\right]+c_2\phi_{1_{i,j}}^{k} \quad (۵)$$

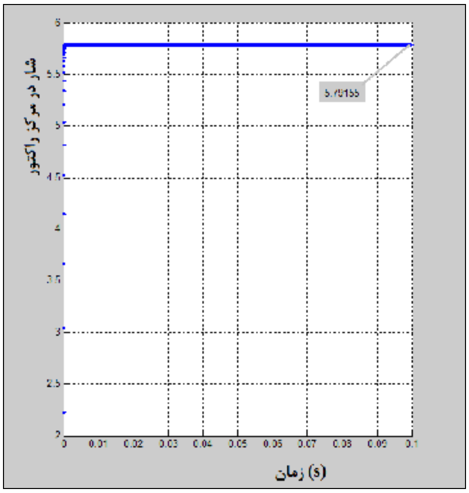
مقادیر a و b و c ثابت هستند و برای دو گروه انرژی متفاوت‌اند. در روش تفاضل محدود تغییر در بازه های زمانی باید با شرط پایداری معادله انجام شود. برای برقراری شرط پایداری در معادلات (۴) و (۵) باید مقادیر a مثبت باشند ($a_1, a_2 > 0$).

الگوریتم و برنامه‌نویسی

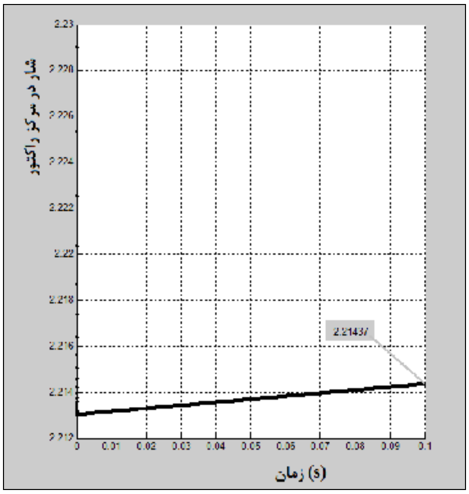
پس از ساده‌سازی معادله ترابرد نوترون به‌صورت معادلات (۴) و (۵) می‌توان الگوریتم مورد نظر را بر اساس روش تفاضل محدود پیاده‌سازی کرد و سپس با استفاده از یک زبان برنامه‌نویسی و رعایت قواعد و دستورات آن زبان، برنامه مطلوب را نوشته و توسعه داد. در این محاسبه از نرم‌افزار محاسباتی متلب (MATLAB) استفاده شده است. این نرم‌افزار جزء نرم‌افزارهای قوی برنامه‌نویسی سمبلیک است. الگوریتم را در برنامه‌نویسی بکار گرفته و آنگاه شرایط مرزی را اعمال می کنیم [۴]. در این روش با استفاده از مش بندی های با ابعاد ۲۰ سانتی متر، شار در مرزها صفر و شار اولیه در هر نقطه، بصورت تابعی با مقدار زیر در نظر گرفته شد:

$$\phi_1(x,y,0)=\phi_2(x,y,0)=2.229\,Sin(\frac{\pi x}{200})Sin(\frac{\pi y}{200}) \quad (۶)$$

خروجی برنامه با استفاده از روش تفاضل محدود در شکل (۱) آمده است.



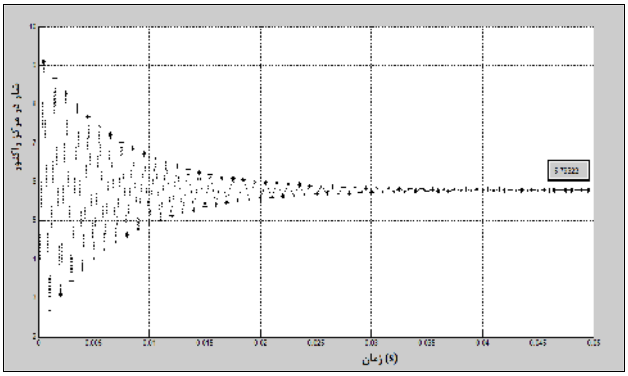
شکل۱ : شار نوترون های سریع در مرکز بر حسب زمان به روش FDM



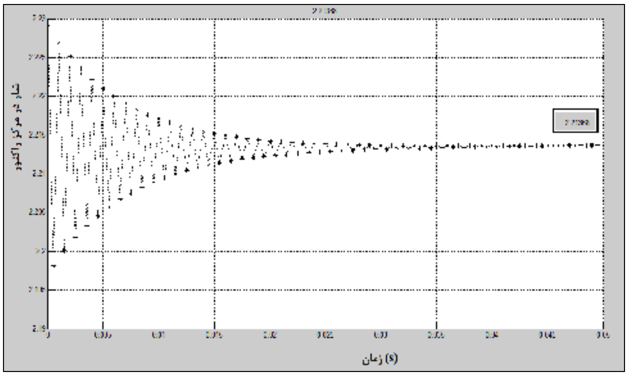
شکل۲: شار نوترون های حرارتی در مرکز بر حسب زمان به روش FDM

روش محاسباتی کرانک - نیکلسون

این روش از روش‌های پرکاربرد در حل معادلات دیفرانسیل است و نیازی به‌شرط پایداری ندارد یعنی باوجود ضمنی بودن روش و نیاز به حل دستگاه برای تعیین جواب در هر گام زمانی امکان استفاده از گام زمانی بزرگ‌تر ممکن می‌باشد که در نهایت موجب کاهش زمان و هزینه محاسباتی می‌شود. در این تحقیق فقط برای راستی آزمایی روش حل عددی تفاضل محدود از این روش استفاده کردیم. با ثابت بودن Δx، دقت این روش به Δt بستگی دارد. هر چقدر این مقدار کاهش یابد، خطا هم کمتر می‌شود [۵]. در نمودارهای زیر، خروجی برنامه برای گام‌های زمانی ۰/۰۰۰۵ ثانیه رسم شده است.



شکل۳: شار نوترون های سریع در مرکز رآکتور بر حسب زمان به روش کرانک - نیکلسون



شکل۴: شار نوترون های حرارتی در مرکز رآکتور بر حسب زمان به روش کرانک - نیکلسون

نتیجه‌گیری

شار نوترون در مرکز راکتور برحسب زمان با روش تفاضل محدود محاسبه و جهت راستی آزمایی از روش کرانک - نیکلسون استفاده شد. همان طور که از خروجی برنامه برای دو روش محاسباتی شامل روش تفاضل محدود و روش کرانک - نیکلسون در شکل‌های (۱) و (۳) برای شار نوترون سریع و شکل‌های (۲) و (۴) برای شار نوترون حرارتی مشاهده می‌شود، شار نوترونی برای دو گروه با خطای یک هزارم محاسبه گردید.

مرجع‌ها

[۱] H. Ozturk, F. Anlib and S. Güngöra; "T_n method for the critical thickness one-speed neutrons in a slab with forward and backward scattering"; *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* **105**, (2007) 211-216.

[۲] J. R. Lamarsh; "*Introduction to Nuclear Reactor Theory*"; 2th edition, Addison-Wesley Publishing Company Inc. (1983).

[۳] M. Tamsir, V. K. Srivastava; "A semi-implicit finite-difference approach for two-dimensional coupled Burgers' equations"; *International Journal of Scientific & Engineering Research* **2**, Issue 6 (2011).

[۴] L. F. Shampine, L. Gladwell; "*Solving ODEs with Matlab*"; Cambridge University Press. (2008).

[۵] V. K. Srivastava, and et al; "Crank-Nicolson Scheme for Numerical Solutions of Two-dimensional Coupled Burgers' Equations"; *International Journal of Scientific & Engineering Research* **2**, Issue 5 (2011).

مطالعه ابتدا به ساکن سیستم فرومغناطیس

$Cd_{1-x}Cr_xTe$ (x=0/0625, 0/125, 0/25)

نیکزاد ، سمیه[1] ؛ ایزدی فرد، مرتضی[2] ؛ قاضی، محمد ابراهیم[2]

[1] دانشجوی کارشناسی ارشد فیزیک دانشگاه شاهرود

[2] گروه فیزیک دانشگاه شاهرود

چکیده

در این مقاله با استفاده از نظریه تابعی چگالی و روش امواج تخت تقویت شده خطی با پتانسیل کامل، خواص الکترونی و مغناطیسی کادمیم تلوراید (CdTe) آلاییده با غلظت های مختلف کروم(Cr)مورد بررسی قرار می گیرد. نتایج بدست آمده نشان می دهد که با افزایش غلظت اتم آلاینده (Cr) ثابت شبکه کمی کاهش می یابد. همچنین مشاهده شد که در تمام ترکیبات، گشتاور مغناطیسی موضعی Cr از مقدار عنصری خود($4\mu_B$)، به دلیل هیبریداسیون قوی بین حالت های Cr-d و Te-p، کاهش می یابد.

Ab-initio study of ferromagnetic system of $Cr_xCd_{1-x}Te$ (x=0/0625, 0/125, 0/25)

Nikzad, Somayeh; Izadifard, Morteza; Ghazi, Mohammad Ebrahim .

Department of Physics, Shahrood University, Shahrood

Abstract

In this paper, electronic and magnetic properties of Cr-doped CdTe for various Cr concentrations using density functional theory (DFT) and full potential linearized augmented plane wave method, have been investigated. The results showed that increasing the concentration of dopant atom decreases lattice constant .It is also observbed that in all compounds, the local magnetic moments of Cr has reduced from it's elemental value ($۴\mu_B$)due to the strong hybridization between Cr-d and Te-p states.

PACS No. *(۷۵)*

مقدمه

کادمیم تلوراید(CdTe) یکی از ترکیبات مهم گروه II-VI است که مدت مدیدی است موضوع مطالعه فیزیکدانان قرار گرفته است.این ماده دارای گاف نواری مستقیم حدود 1/529 *eV* و ثابت شبکه تجربی 6/481 Å است[1]. CdTe در دمای اتاق ساختار زینک بلند با تقارن چهار وجهی دارد که در آن هر کاتیون Cd با4اتم Teاحاطه شده است [2].این ترکیب زمانی که با یک فلز واسطه آلایش می یابد، به یک نیمرسانای مغناطیسی رقیق شده تبدیل می شود.

نیمرساناهای مغناطیسی رقیق شده ترکیباتی هستند که در آن ها کسری از اتم ها با عناصری که قادر به افزایش گشتاورهای مغناطیسی هستند، جایگزین می شوند. به دلیل این جایگزینی نه تنها این ترکیبات خواص نیمرسانایی خود را حفظ می کنند، بلکه مغناطش نیز کسب می کنند. در این ترکیبات یک جفت شدگی وابسته به اسپین قوی بین حالت های الکترونی نیمرسانای اولیه و اتم های مغناطیسی مهمان بوجود می آید؛ که نتیجه آن رفتار فلزی برای یک کانال اسپینی و نیمرسانایی برای کانال اسپینی دیگر در ترکیب نهایی است. به بیان دیگر این ترکیبات در تراز فرمی قطبش اسپینی 100% و مغناطش مناسبی که آن ها را در رده فرومغناطیس های نیم فلزی قرار می دهد، از خود نشان می دهند. علاوه بر این،این ترکیبات معمولا دمای کوری بالایی دارند. تمام این ویژگی ها ترکیبات فوق را برای کاربردهای اسپینترونیک مفید قرار داده است[3].

اخیرا تلاش های چشمگیری برای کشف مکانیزم وراء فرومغناطیس نیم فلزی و یافتن فرومغناطیس های نیم فلزی بدیع و مفید انجام شده است.

در این کار برای انجام محاسبات از کد محاسباتی Wien2k که بر پایه نظریه تابعی چگالی نوشته شده است و با استفاده از تقریب

شیب تعمیم یافته و روش امواج تخت تقویت شده خطی با پتانسیل کامل به محاسبه خواص الکترونی و مغناطیسی CdTe آلایش یافته با غلظت های0/25و0/125و 0/0625 کروم در فاز پایدار فرومغناطیس، به منظور یافتن منشا فرومغناطیس در این نیمرساناهای مغناطیسی رقیق شده می پردازیم.

روش انجام محاسبات

برای انجام محاسبات شعاع کرات مافین–تین برای اتم های Cd، Te و Cr به ترتیب $2/4\ a.u.$ و$2/5\ a.u.$ و$2/0\ a.u.$ در نظر گرفته شد به طوری که این کره ها همپوشانی نداشته باشند. پارامتر همگرایی بهینه $R \times K_{max} = 8$ محاسبه شد که R شعاع کوچکترین کره مافین–تین و K_{max} بیشینه بردار موج در شبکه وارون است. برای تفکیک حالت های ظرفیت از مغزه نیز انرژی جداسازی Ry -8 در نظر گرفته شد.

نتایج و بحث

الف–بهینه سازی

به منظور یافتن ثابت شبکه بهینه و انرژی تعادلی ، برای هر یک از این ترکیبات انرژی کل آن ها را بر حسب تابعی از حجم سلول محاسبه و سپس ثابت شبکه و مدول حجمی را تعیین کردیم. مدول حجمی عکس تراکم پذیری است و مقدار تجربی آن برای CdTe، 44/5 GPa گزارش شده است[5]. نتایج محاسبات ثابت شبکه و مدول حجمی در جدول 1 آورده شده است.

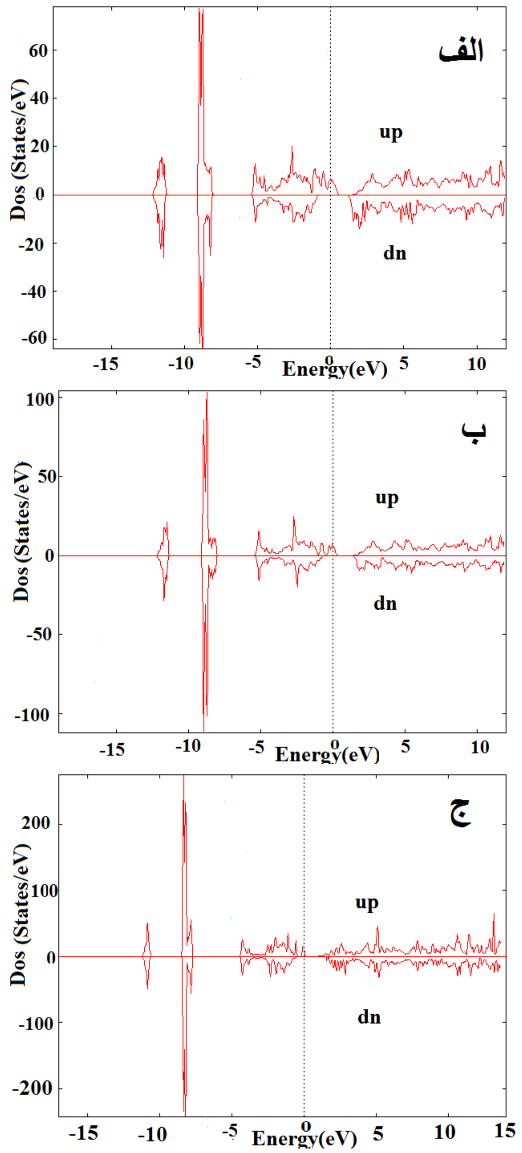
جدول 1:مقادیر ثابت شبکه و مدول حجمی محاسبه شده برای ترکیبات $Cd_{1-x}Cr_xTe$

درصد آلایش کروم(x)	ثابت شبکه(Å)	ثابت شبکه(Å)	مدول حجمی(GPa)	مدول حجمی(GPa)
	این پژوهش	پژوهش دیگران	این پژوهش	پژوهش دیگران
6/25	6/65	---	42/37	---
12/5	6/48	6/58[4]	43/91	42/8[4]
25	6/26	6/36[2]	46/10	43/78[3]

همان طور که داده های جدول 1 نشان می دهند با افزایش غلظت کروم ثابت شبکه کاهش پیدا می کند که می تواند به علت جایگزین شدن اتم کادمیم با اتمی با شعاع اتمی کوچکتر (Cr) در ساختار باشد؛ این جانشینی با افزایش مدول حجمی همراه است.

ب–چگالی حالت ها

منحنی های چگالی حالت های کل این ترکیبات با در نظر گرفتن اسپین های بالا و پایین در شکل 1 آورده شده اند.

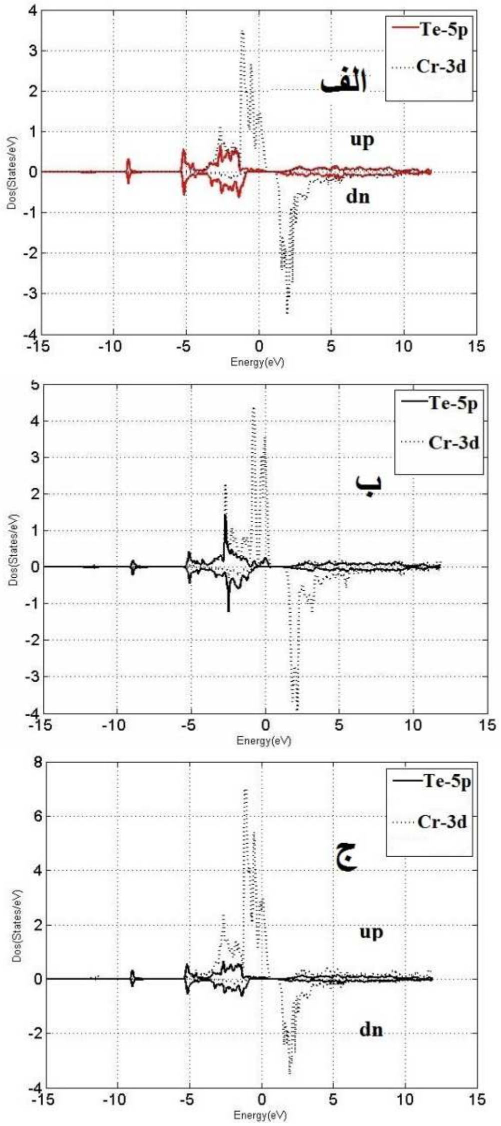


شکل 1:چگالی حالت های کل $Cd_{1-x}Cr_xTe$ الف)x=0/25، ب)x=0/125، ج)x=0/0625.

همان گونه که در شکل 1 مشاهده می کنیم شکل کلی هر سه چگالی حالت یکسان است و شکافتگی DOS اسپین پایین در مجاورت تراز فرمی کاملا واضح است؛ که نشان دهنده قطبش اسپینی 100% با یک گاف نواری در این کانال اسپینی است.

در شکل 2 چگالی حالت های جزئی ترازهای Cr-3d و Te-5p را نشان می دهد. در این نمودارها مشاهده می کنیم که Dos کل حوالی تراز فرمی عمدتا از هیبریداسیون حالت های Cr-3d و Te-5p تشکیل شده است. اصولا خاصیت نیم فلزی این ترکیبات از

هیبریداسیون p-d آن ها نشات می گیرد[3]. با افزایش غلظت کروم حالت های Cr-3d همچنان در نوار رسانش جایگزیده باقی می مانند و تنها یک گاف نواری در این کانال اسپینی برای ترکیب نهایی باقی می گذارند.



شکل 2:چگالی حالت های جزئی جزئی ترازهای Cr-3d و Te-5p برای آلایش های الف)x=0/25، ب)x=0/125، ج)x=0/0625.

ج-ساختار نواری

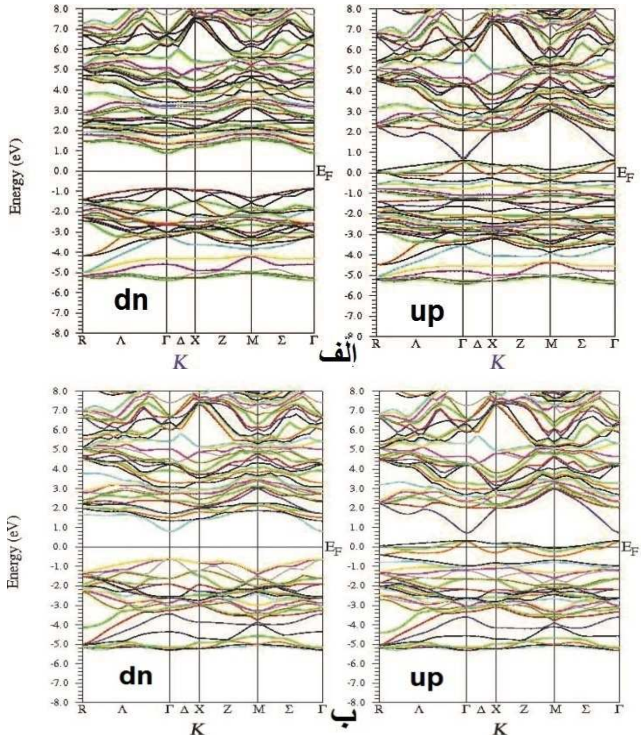
محاسبات ساختار نواری انجام و نتایج این محاسبات در شکل 3 برای اسپین بالا و پایین آورده شده است. همان گونه که در این شکل مشاهده می کنیم هر سه ترکیب دارای گاف نواری مستقیم در نقطه Γ هستند. مقادیر این گاف های نواری در جدول 2 آورده شده است.

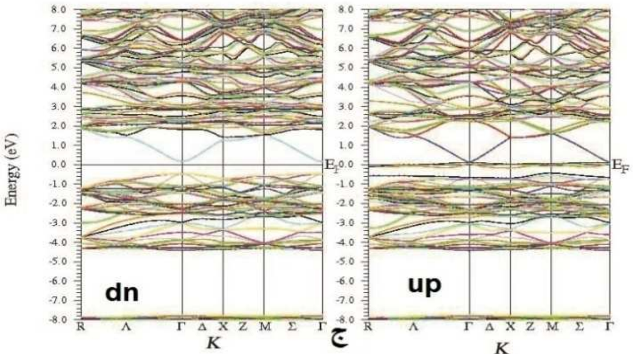
جدول 2:مقادیر گاف نواری اسپین پایین ترکیبات $Cd_{1-x}Cr_xTe$.

درصد آلایش کروم(X)	این پژوهش(eV)	پژوهش دیگران(eV)
6/25	0/65	---
12/5	1/30	1/10 [4]
25	1/75	1/58 [4]

همانطور که مشاهده می کنیم مقدار گاف نواری اسپین پایین با افزایش غلظت کروم افزایش می یابد. این رفتار به تمایل حالت های Cr-3d به جایگزیدگی کمتر برای غلظت های بالاتر نسبت داده می شود. حالت های Cr-3d در غلظت های پایین تر نسبت به غلظت های بالاتر ضعیف تر با حالت های Te-5p هیبرید می شوند.

در نمودارهای ساختار نواری(شکل 3)، در نوار ظرفیت از تراز فرمی تا انرژی حدود5eV- نوارهای Te-5p گسترده شده اند. دو نوار نزدیک تراز فرمی عمدتا از حالت های Cr-3d و سهم کوچکی از Te-5p، که رفتار فلزی این ترکیب را برای اسپین بالا کنترل می کند، ناشی می شوند. در کانال اسپین پایین هیچ نواری درون تراز فرمی وجود ندارد.





شکل 3:ساختار نواری سه ترکیب با اسپین بالا (راست)و پایین(چپ)برای الف)x=0/25 و ب)x=0/125 و ج)x=0/0625.

د-گشتاور مغناطیسی

مقادیر محاسبه شده گشتاور مغناطیسی کل به ازاء سلول واحد و گشتاورهای مغناطیسی موضعی هر اتم در ترکیبات فوق در جدول3 آورده شده است.

جدول 3:گشتاور مغناطیسی کل و موضعی ترکیبات $Cd_{1-x}Cr_xTe$.

درصد آلایش کروم(x)		M_{Cr} (μ_B)	M_{Cd} (μ_B)	M_{Te} (μ_B)	M_{tot} (μ_B)
6/25	این پژوهش	3/416	0/0005	-0/007	4/01
	پژوهش دیگران	---	---	---	---
12/5	این پژوهش	3/28	0/001	-0/009	4/004
	پژوهش دیگران	3/745 [4]	3/021 [4]	-0/056 [4]	3/994[4]
25	این پژوهش	3/279	0/022	-0/088	4/0009
	پژوهش دیگران	3/745 [3]	3/013 [3]	-0/054 [3]	4/0 [3]

با توجه به داده های جدول3 می توان گفت که در تمام ترکیبات گشتاور مغناطیسی موضعی Cr از مقدار عنصری خود($4\mu_B$)، به علت هیبریداسیون قوی بین حالت های d اتم Cr و p آنیون Te، کاهش می یابد. گشتاور مغناطیسی اسپینی القا شده به اتم Cd و Te بسیار کوچک است و برای اتم Cd موازی گشتاور مغناطیسی Cr است و بنابراین این اتم برهمکنش فرومغناطیسی با اتم Cr دارد، اما برای اتم Te پادموازی است و این اتم برهمکنش آنتی فرومغناطیسی با اتم Cr دارد.

همچنین با توجه به داده های جدول3 مشاهده می کنیم که با افزایش غلظت Cr از گشتاور مغناطیسی آن کم می شود و در عوض به گشتاورهای مغناطیسی دو اتم دیگر افزوده می شود. برهمکنش p-d منفی بین حالت های d اتم Cr و p اتم Te انرژی کل را کم می کند و حالت فرومغناطیسی این ترکیبات را پایدار نگه می دارد. بنابراین گشتاور مغناطیسی کل این ترکیبات عمدتا سهم اتم Cr است و اتم های دیگر سهم ناچیزی در این گشتاور دارند[3].

نتیجه گیری

در این مقاله خواص الکترونی و مغناطیسی ترکیبات مغناطیسی رقیق شده حاصل از آلایش CdTe با Cr با غلظت های0/25و0/125و0/0625 مطالعه شد. با بررسی نمودارهای ساختار نواری مشاهده شد که با افزایش غلظت Cr گاف نواری اسپین پایین افزایش می یابد؛ اما خاصیت نیم فلزی همچنان پایدار می ماند. این خاصیت از هیبریداسیون p-d نشات می گیرد. برهمکنش p-d گشتاور مغناطیسی Cr را کاهش می دهد و در عوض گشتاورهای مغناطیسی موضعی کوچکی در مکان های Cd و Te بوجود می آورد؛ که برای اتم Cd موازی گشتاور مغناطیسی اتم Cr و برای اتم Te پادموازی با گشتاور مغناطیسی اتم Cr می باشد.

مرجع ها

[۱] R. O. Bell; “*Review of optical applications of CdTe*”1th eddition (2008) 392.

[۲] Wen-Hui Xio and Bang-Gui Liu; “Half-metallic ferromagnetism in ternary transition-metal compounds based on ZnTe and CdTe semiconductors”; *Applied Physics* **96**, No. 6 (2004) 3559-3561.

[۳] N. A. .Noor and S.Ali and A.Shaukat; “First principles study of half-metallic ferromagnetism in Cr-doped CdTe ”; *Physics and chemistry of solids* **72**, No. 3 (2011) 836-841.

[٤] Hardev S.Saini and Mukhtiyar Singh and Ali H.Reshak and Manish K.Kashyap; “Variation of half-metallicity and magnetism of $Cd_{1-x}Cr_x$ Z(Z=S,Se,Te) DMS compounds on reducing dilute limit.”; *Magnetism and magnatic materials* 331, No. 8 (2013) 1-6.

[٥]S.A.Touat and F.Litimein and A.Tadjer and B.Bouhafs.; “Ferromagnetism in transition-metal-doped II-VI compounds”; *Magnetism and magnatic materials 307(2006)245-249.*

بررسی توزیع انرژی الکترون ها در پلاسمای چند مولفه ای درگپ میله سوخت هسته ای

پذیرنده،علی[1]؛گلیان، فرشته[2]

[1]*دانشکده فیزیک دانشگاه تهران، انتهای خیابان کارگر شمالی، تهران*

[2]*تحصیلات تکمیلی دانشگاه پیام نور تهران، خیابان دیباجی شمالی، تهران*

چکیده

در این مقاله، با استفاده از معادله فوکر- پلانک به بررسی تابع توزیع انرژی الکترون ها در گپ میله سوخت در راکتور هسته ای VVER-1000 بوشهر می پردازیم. در این راستا، با استفاده از روش حل عددی رونژ- کوتا معادله فوکر- پلانک را حل کرده و رفتار غیر تعادلی الکترون های عبوری از محیط جاذب گپ را تحلیل می کنیم. برای بالا بردن دقت کاراز زبان برنامه نویسی C^{++} استفاده کرده ایم. همچنین با به کارگیری کد مونت کارلو GEANT4، واکنش شکافت هسته ای در میله سوخت شبیه سازی شد و تابع توزیع انرژی الکترون هادر گپ بین سوخت هسته ای و غلاف آن بدست آمد. نتایج نشان می دهند که اغلب الکترون ها در این ناحیه حرارتی هستند و تابع توزیع انرژی آنها از تابع توزیع ماکسول دور است.

Investigation on electron energy distribution in multi component plasma in nuclear fuel rod gap

Pazirande, Ali[1]; Golian, Fereshteh[2]

Department of Physics, University of Tehran, Tehran [1]

Tehran PNU Graduate Center, North Dibaji Ave, Tehran[2]

Abstract

In this paper, by using the Fokker- Planck equation, the electron energy distribution function in fuel rod gap of Busheher's VVER-1000 reactor was investigated. In this regard, the Fokker-Planck equation was solved by utilizing the Runge-Kutta numerical method, and the non-equilibrium behavior of electrons passing through the gap as an absorbing medium was analyzed. The programming language c^{++} was employed to acquire high accuracy. Besides, by utilizing the Monte Carlo GEANT4 code, the fission reaction in the fuel rod was simulated and the energy distribution of electrons was calculated. Furthermore, it was found that most of the electrons are essentially thermal in the fuel rod gap and the electron energy distribution is far from Maxwellian distribution.

مقدمه

در عصر حاضر تحقیقات بسیاری در ارتباط با سوخت هسته ای و واکنش شکافت در راکتورهای هسته ای انجام گرفته است.در این زمینه محصولات شکافت تولید شده در میله سوخت از اهمیت بسزایی برخوردار هستند. این محصولات پس از تولید در سوخت به دو دسته تقسیم می شوند، تعدادی از آنها در سوخت حل شده و در بستر سوخت باقی می مانند، ولی برخی از محصولات گازی مانند زنون و کریپتون و یا محصولات فرار همچون ید، سزیوم و

روبیدیم در سوخت نامحلول هستند وتحت حرکات تصادفی از سوخت خارج می شوند.

فضای گپ بین سوخت و غلاف در ابتدای کار راکتور با گاز هلیوم پر شده ومحصولات شکافت پس از خروج از سوخت وارد این فضا می شوند و تشکیل یک پلاسمای چند مولفه ای را می دهند که دارای یونهایی با درجه یونیزاسیون بالا(حدود ۲۰-۲۲ مرتبه) است(۱). از طرف دیگر الکترون ها، ذرات بتای پر انرژی و پرتوهای گاما نیز وارد گپ می شوند و محیطی با گرادیان دمایی و فشار بوجود می آوردکه سبب ایجاد مقاومت دمایی می گردد.

یکی از نکات مهم در سلامت راکتور هسته ای، پایین بودن دمای میله سوخت می باشد. از این رو در این مقاله به بررسی تابع توزیع انرژی الکترون ها در گپ بین سوخت و غلاف می پردازیم که در انتقال دمای سوخت موثر است. در واقع به بررسی مسئله عبور ذرات باردار سبک از یک محیط جاذب می پردازیم.

در این زمینه چند تحقیق در ارتباط با محاسبه تابع توزیع انرژی الکترون انجام شده است(۴-۲). در این تحقیقات تابع توزیع انرژی الکترون در پلاسمای تک مولفه ای محاسبه شده است. در این مقاله با استفاده از معادله فوکر- پلانک توزیع انرژی الکترونها را در گپ میله سوخت هسته ای راکتور VVER-10000 بوشهر با به کار گیری روش حل عددی رونژ- کوتا بدست آورده ایم. این معادله فرم ساده ای از معادله ترابرد بولتزمن می باشد که ابزار مناسبی برای پدیده ترابرد ذره درون سیستم های دارای گرادیان دانسیته و دما می باشد.

به منظور بالا بردن دقت محاسبات از زبان برنامه نویسی C^{++} استفاده کردیم. همچنین با استفاده از کد مونت کارلو GEANT4 رفتار تصادفی الکترون ها درون این پلاسما را شبیه سازی کردیم و نتایج حاصل از حل معادله فوکر- پلانک را با نتایج کد مقایسه نمودیم که توافق خوبی مشاهده می شود. شایان ذکر است که نتایج بدست آمده در این تحقیق با نتایج تحقیقات قبلی قابل مقایسه می باشد.

معادله فوکر- پلانک

معادله بولتزمن توصیف کننده رفتار غیر تعادلی ذرات در یک محیط جاذب است. در این راستا می توان معادله زیر را در مورد پدیده ترابرد ذرات در سیستم هایی که دارای گرادیان دانسیته و دما هستند به کار برد(۵) :

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}+\mathcal{V}\cdot\nabla_r+\frac{F(x)}{m}\nabla_v\right)f(x,v,t)=\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll} \qquad (1)$$

که ∇_r و ∇_v به ترتیب گرادیان نسبت به دما و موقعیت هستند.

با در نظر گرفتن پراکندگی های زاویه کوچک در برهم کنش های کولنی از معادله بولتزمن به معادله فوکر- پلانک می رسیم. معادله فوکر- پلانک یک معادله پخش با مشتقات مرتبه دوم است که در ریاضیات تحت عنوان Kolmogrove Equation نامیده می شود و می توان آن را از بسط معادله کرامرز- مویال بدست آورد(۵):

$$\frac{\partial w}{\partial t}=\sum_{\nu=1}^{\infty}\left(-\frac{\partial}{\partial x}\right)^{\nu}D^{\nu}(x)w \qquad (2)$$

ضرایب $D^{\nu}(x)$ برای $\nu\geq 3$ صفر فرض می شوند و در این حالت بسط کرامرز- مویال به معادله فوکر- پلانک تبدیل می شود. در این مقاله ما از این معادله برای تعیین تابع توزیع انرژی الکترون ها در گپ میله سوخت هسته ای در راکتور هسته ای VVER-1000 بوشهر استفاده کرده ایم. به منظور حل این معادله به تعیین ضرایب پخش و رانش نیاز داریم. در این تحقیق ضریب رانش را برابر توان توقف بته در نظر گرفتیم که در راستای حرکت ذرات باردار از یک محیط و برهمکنش آنها با محیط می باشد. الکترون ها در حین عبور از یک محیط می توانند واکنش های زیر را انجام دهند:

جدول۱: طبقه بندی برهمکنشهای الکترون با ماده(۶)

Reacting Constituent	Charges in Radiation	Charges in Medium
Shell Electrons	Slowing-down, Absorption	Excitation, ionization, transition radiation, Cherenkov radiation, chemical changes
Coulomb field of the nucleus	Scattering, slowing-down, absorption	Nuclear reaction, chemical changes

تئوری بته به توصیف فرایند کند شدن الکترون از طریق فرایند برخورد و تابش(یونیزاسیون و تابش ترمزی) می پردازد و داریم(۶):

$$\frac{dE}{dx} = \left(\frac{dE}{dx}\right)_{ion} + \left(\frac{dE}{dx}\right)_{brams} \qquad (3)$$

در نظر گرفتیم که الکترون های با انرژی غیر نسبیتی دارای اتلاف انرژی به صورت یونیزاسیون هستند که با رابطه زیر داده می شود(۷):

$$-\left(\frac{dE}{dx}\right)_c = \left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2 \frac{2\pi N_0 Z\rho}{mc^2\beta^2 A}\left[\ln\frac{T\left(T+mc^2\right)^2\beta^2}{2I^2mc^2} + (1-\beta^2) - \left(2\sqrt{1-\beta^2}-1+\beta^2\right)\ln 2 + \frac{1}{8}\left(1-\sqrt{1-\beta^2}\right)^2\right] \qquad (4)$$

الکترون های با انرژی نسبیتی علاوه بر اتلافات برخوردی دارای اتلاف به شکل تابش نیز هستند:

$$-\left(\frac{dE}{dx}\right)_{rad} = \left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2\frac{N_0Z^2\rho(T+mc^2)}{137m^2c^4A}\left[4\ln\frac{2(T+mc^2)}{mc^2} - \frac{4}{3}\right] \qquad (5)$$

در این رابطه T معرف انرژی جنبشی الکترون هاست.Z ،A ،ρ و I نیز عدد اتمی، وزن اتمی، دانسیته ماده و انرژی بر انگیختگی میانگین را نشان می دهند.

تجزیه و تحلیل محاسباتی

استفاده از معادله فوکر- پلانک در تعیین توزیع انرژی الکترون ها

شکل پیشنهادی معادله فوکر- پلانک برای الکترون های عبوری از محیط جاذب گپ را به صورت زیر معرفی می کنیم:

$$\frac{\partial w(\beta c,t)}{\partial t} = \left[-\frac{1}{mc}\left\{\frac{\partial}{\partial\beta}\left(\frac{dE}{dx}\right)w(\beta c,t)\right\} + \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial\beta^2}\left\{\frac{\gamma kT}{m}w(\beta c,t)\right\}\right] \qquad (6)$$

همان گونه که اشاره شد، ضریب رانش را برابر توان توقف و ضریب پخش را برابر $\frac{\gamma kT}{m}$ در نظر گرفتیم. بازه انرژی الکترون های درون گپ را به دو ناحیه کلاسیک و نسبیتی تقسیم می کنیم و تقریب کند شدن پیوسته را در نظر می گیریم. برای محاسبه ضریب پخش به زمان واهلش نیاز داریم که از رابطه زیر استفاده کردیم(۸):

$$\tau = \frac{u}{(1+\frac{m}{m_f})\alpha_r\beta_r^2\psi(\beta_r u)} \qquad (7)$$

در این رابطه m جرم ذرات ورودی و m_f جرم ذرات زمینه است و α_r نیز ثابت پخش است که با رابطه زیر داده می شود:

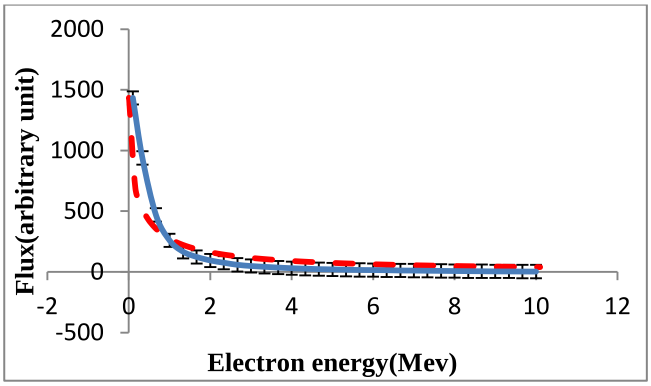
$$\alpha_r = \frac{8\pi Z_f^2 Z^2 e^4 \ln\Lambda}{m^2} \qquad (c.g.s) \qquad (8)$$

$\ln\Lambda$ لگاریتم کولنی است. در محاسبات از U.S.NRC Regulatory Guide No.1.183 (۹) استفاده کردیم. برای حل معادله از روش عددی رونژ- کوتا استفاده کردیم و به منظور بالا بردن دقت محاسبات برنامه ای به زبان C^{++} نوشتیم. حالت پایا را در نظر گرفته و معادله را حل کردیم.

استفاده از کد GEANT4 در تعیین توزیع انرژی الکترون ها

کد مونت کارلو GEANT4 ، یک ابزار شبیه سازی آشکار ساز است که به زبان برنامه نویسی C^{++} نوشته می شود و در این تحقیق به منظور شبیه سازی رفتار تصادفی الکترون ها مورد

استفاده قرار گرفته است. شکل زیر نتایج حاصل از حل عددی معادله فوکر- پلانک با بکار گیری روش رونژ- کوتا (خط تیره فاصله) و کد GEANT4 (خط پر) را نمایش می دهد و از نوار خطای استاندارد برای مقایسه نتایج بدست آمده استفاده کردیم که توافق رضایت بخشی مشاهده می شود:



شکل(۱): مقایسه تابع توزیع انرژی الکترون ها از طریق رونژ- کوتا (خط تیره فاصله) و کد GEANT4 (خط پر).

نتیجه گیری

تابع توزیع انرژی الکترون توسط معادله فوکر- پلانک بدست آمد و معادله پیشنهادی را با روش عددی رونژ- کوتا مرتبه ۴ حل کردیم و برای بالا بردن دقت محاسبات برنامه ای به زبان C^{++} نوشتیم. همچنین با کمک کد مونت کارلو GEANT4 رفتار الکترون ها درون گپ میله سوخت هسته ای را شبیه سازی نمودیم و نتایج بدست آمده را در شکل (۱) نمایش دادیم. همچنانکه از شکل(۱) مشاهده می شود، در طیف انرژی، اغلب الکترون ها دارای انرژی پایینی هستند و این موضوع به علت برهمکنش الکترون ها با ماده جاذب می باشد که باعث از دست دادن انرژی آنها می گردد. ملا حظات دقیق عددی و شبیه سازی نشان می دهد که تابع توزیع انرژی الکترون ها از تابع ماکسولی دور است ، اما بسیاری از الکترون ها حرارتی هستند.

از طرف دیگر ، درمورد صحت تحقیق انجام شده، محاسباتی در مورد تعیین تابع توزیع انرژی الکترون ها توسط Desse و Hassan (۴) انجام شده است که با نتایج منتج از این مقاله همخوانی دارد. در آزمایش آنها تابع توزیع انرژی الکترون ها در لوله ای که با مواد شکافت پذیر پوشش داده شده بود، محاسبه شده است.

مراجع

[۱] N. Soulfanidis; *"Measurement and detection of radiation"*; (1983).

[۲] H.A. Hasssan, J. Deese; *" The electron Boltzmann Equation in a plasma generated by fission products"*, U.S. National Aeronautics and Space Administration, Washington. (1974).

[۳] R.H. Lo, G.H. Miley; *"Electron energy distribution in helium plasma created by nuclear radiations"*; IEEE T Plasma Sci, vol.ps-2.(1974).

[۴] J. Deese, H.A. Hassan; *"Analysis of plasma generated by fission fragments"*; U.S. National Aeronautics and Space Administration, Washington.(1976).

[۵] .H. Risken; *" The Fokker-Planck Equation"*; 2th edition, Springer.(1988)

[۶] D. Horvath, A. Vertes; *" Hand book of nuclear chemistry"*; 2th edition, Springer. (2011)374-379.

[۷] K.S. Krane; *" Introductory Nuclear Physics"*; John Wiley and Sons, New York, United States(1988)195-198.

[۸] D. Diver; *"A plasma formulary for physics ,Technology and Astrophysics"*; WILEY- VCH .(2011)79- 80.

[۹] *U.S.NRC Regulatory Guide* No.1.183,428.

طراحی مفهومی و پایه ی یک راکتور کوچک مولد نوترون و برق

پذیرنده ، علی[۱]؛محمد علی زاده ، تابان[۲]
دانشکده مهندسی هسته ای دانشگاه آزاد اسلامی واحد علوم و تحقیقات تهران ، انتهای خیابان اشرفی اصفهانی ، تهران

چکیده

در شبیه سازی از طرح راکتور 4S استفاده شده است که یک راکتور کوچک سریع با خنک کننده ی سدیم و سوخت فلزی می باشد. طرح جدید پیشنهادی از لحاظ تعداد مجتمع های سوخت،تعداد میله سوخت،غنای سوخت و تعداد قسمت های کنترلی با طرح مرجع متفاوت است و به طور کلی اندازه قلب طراحی شده از اندازه اصلی کوچک تر می باشد.این طراحی با استفاده از کد شبیه ساز هسته ای MCNPX2.6.0 انجام گرفت و سپس محاسبات بحرانی،محاسبه راکتیویته قلب ،محاسبات شار نوترونی در قلب،محاسبه ضریب قله شار و محاسبه ی توان حرارتی قلب برای این راکتور انجام شد.

Conceptual and basic design of a small fast reactor, generating neutron flux and electricity

Pazirandeh, Ali [1] ; Mohamad alizadeh, taban[2]
Department of Science and Research branch, Islamic Azad university, Tehran, Iran

Abstract

Toshiba 4S(super-safe ,small and simple)reactor design used in the simulation that is the small fast reactor with sodium coolant and the metallic fuel. The proposed new design ,is different from the reference design in terms of the number of fuel assemblies, number of fuel rods, enrichment and number of control parts, and in general, the size of core design is smaller than original size and less fuel is used to start. this design was done using MCNPX2.6.0 nuclear simulator code. then, critical calculations, calculation of core reactivity, calculation of neutron flux in the core, calculating peaking factor, and reactor core thermal power calculation was done to this reactor.

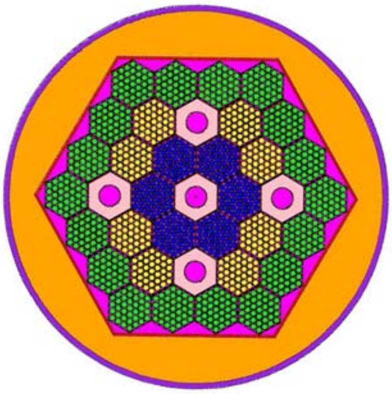
مقدمه

در شرایط حاضر نیروی برق حاصل ازنیروگاه های اتمی با یک مشکل اساسی مواجه است وآن متمرکز بودن کلیه فعالیت ها در یک مکان که باعث دشواری های متعددی است از جمله اثرات زیست محیطی،انتقال انرژی،تجمع افراد وسیستم هاواحیانا حرارت.به همین دلیل بعضی از کشورهای پیشرفته در صدد ساخت راکتور هایی هستند در ابعاد کوچک که حتی بتوان آنها را از مکانی به مکان دیگر انتقال داد.راکتورهای کوچک،کاربردهای زیادی از جمله تولید رادیو ایزوتوپ ها تولید الکتریسیته و حرارت و سایر کاربردها را دارند.همچنین می توانند برق و گرمای مورد نیاز کارخانجات را در محل تأمین کرده و آن ها را از شبکه برق سراسری بی نیاز کنند.همچنین می تواند در مناطق دوردست و بدون زیرساخت های پیشرفته انتقال برق مورد استفاده قرار گیرد.ابعاد قلب در این راکتورها کوچک است.این راکتورها قابلیت های زیادی از جمله استفاده از سوخت های مختلف وکاهش ضایعات هسته ای را دارا می باشند و سیکل کاری آن ها طولانی تر از راکتور های حرارتی است.برای آغاز کار ازطرح راکتور TOSHIBA 4Sبه عنوان مبنا استفاده شد.راکتور 4s،یک راکتور سریع با خنک کننده ی سدیم و سوخت فلزی U-Pu-Zr می باشد که توسط موسسه تحقیقات مرکزی صنعت برق با همکاری شرکت توشیبا به منظور تحقق بخشیدن به یک راکتور هسته ای کوچک برای تامین نیاز به منابع قدرت پراکنده در بازارهای جهانی و راکتورهای چند منظوره طراحی شده است.

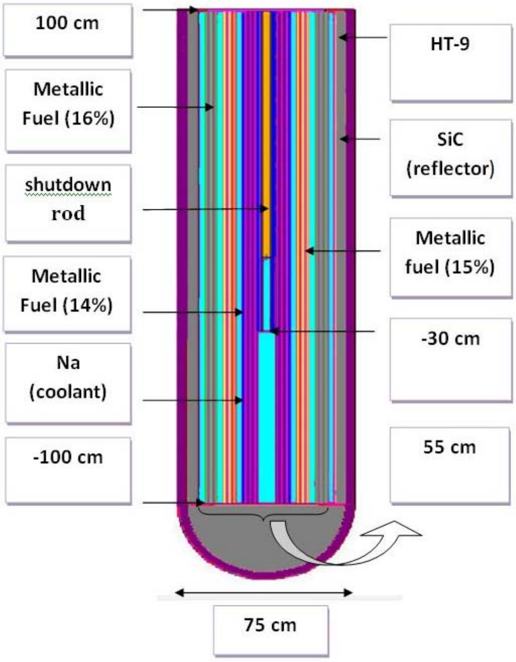
روش کار

در مدلسازی با MCNPX2.6.0 ابتدا باید هندسه و همچنین مواد ساختاری قلب برای کد تعریف شود .قلب این راکتور از یک سری مجتمع های سوخت هگزاگونال تشکیل شده است . هر کدام از مجتمع های سوخت دارای ۳۷ میله ی سوخت می باشد.قطر میله سوخت ۱ cm ،ضخامت گپ ۰/۰۱cm و ضخامت غلاف سوخت ۰/۰۵ cm می باشد. در طراحی این قلب از سوخت با سه غنای مختلف استفاده شده است .قلب طراحی شده شامل سه قسمت درونی ، میانی و خارجی است . قسمت درونی از شش مجتمع سوخت با غنای ١٤٪ ، قسمت درونی از هشت مجتمع سوخت با غنای ١٥٪ و قسمت خارجی از ١٨ مجتمع سوخت با غنای ١٦٪ تشکیل شده است و به طور کلی دارای ٣٢ مجتمع سوخت می باشد.در ابتدای بهره برداری راکتور سوخت های با غنای بالاتر را در لایه های کناری قلب می گذاریم تا توزیع قدرت مسطحی داشته باشیم.قطر قلب در این مدل ۵۵ cm است.قلب راکتور شامل پنج مجتمع کنترلی است که شامل دو قسمت جاذب و میله خاموشی می باشد .

قسمت های دیگر قلب شامل بازتابنده و محفظه مرکزی است .در شکل ۲و۳ شکل قلب شبیه سازی شده نمایش داده شده است.



شکل ۲. نمایش قلب شبیه سازی شده باستفاده از کد MCNPX در نمای افقی



شکل ۳. نمایش قلب شبیه سازی شده باستفاده از کد MCNPX در نمای عمودی

محاسبه ی ضریب تکثیر موثر

هدف اولیه،طراحی راکتور هسته ای بحرانی است.با انتخاب یک ترکیب مادوی و پیکر بندی خاص برای راکتور،ضریب تکثیر محاسبه شده است.با تغییرات غنای سوخت و محاسبه ی مکرر k_{eff} در نهایت وضعیت بحرانی مورد نظر حاصل شد.ضریب تکثیر برای قلب راکتور با سه قسمت درونی ،میانی و بیرونی که شامل مجتمع های سوخت با سه غنای متفاوت ١٤٪،١٥٪ و ١٦٪ است،توسط کد MCNPX2.6.0 با اجرای دستور KCODE محاسبه شد.خروجی کد این مقدار را نشان داد:

$$k_{eff} = 1.04907$$

ضریب تکثیر قلب طی بهره برداری،در نتیجه ی فرایند های نظیر تولید فراورده ی شکافت و مصرف سوخت تغییر می کند از این رو راکتور هسته ای باید ابتدا با مقدار بیشتری سوخت بارگذاری شود.این راکتیویته ی مثبت اضافی همچنین برای جبران راکتیویته ی منفی ناشی از تغییرات دمایی و قدرت لازم است.مقدار واکنش پذیری قلب هنگامی که تمامی میله های کنترل بیرون کشیده شده باشد،به این صورت محاسبه شد:

$$\rho_{ex} = 1 - \frac{1}{k_{eff}}$$

$\rho_{ex} = 0.0467$

هر چه ρ_{ex} بزرگ تر باشد عمر قلب طولانی تر خواهد بود.برای کنترل واکنش پذیری و رساندن قلب به حالت بحرانی قسمت های جاذب ۱۳۰ cm داخل قلب قرار داده می شود. در این حالت k_{eff} برابر ۱ می شود و راکتور بحرانی است.همچنین حاشیه خاموش سازی و واکنش پذیری منفی موجود در قلب هنگامی که تمام میله های کنترل به صورت کامل وارد قلب شده اند،محاسبه گردید.ابتدا باقراردادن تمامی میله های کنترل داخل قلب واجرای دستور KCODE، k_{eff} محاسبه شد:

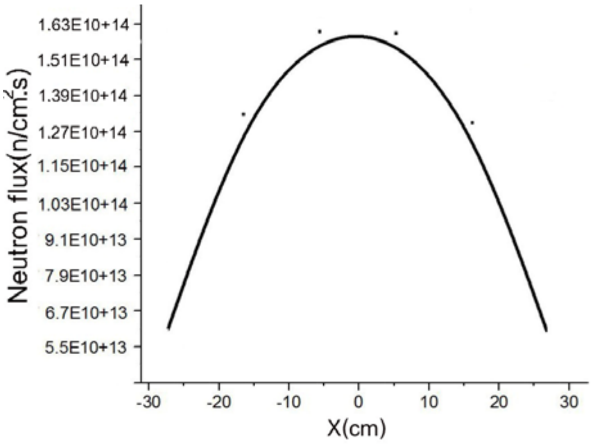
$K_{eff} = 0.91119$

$$\rho_{sm} = 1 - \frac{1}{k_{eff}}$$

$\rho_{sm} = -0.0974$

محاسبه شارحجمی درقلب با کد MCNPX2.6.0

کد به منظور محاسبه ی شار برای همه ی مجتمع های سوخت با هر سه غنا به طور جداگانه اجرا شد.شکل ٤،شار خروجی را برای کل قلب نشان می دهد.



شکل ٤. نمایش شار خروجی قلب در راستای محور x

در این قلب متوسط شار که از خروجی کد بدست آمد،این مقدار می باشد :

$$(\Phi_{fuel})_{ave} = 1.26E{+}14 \left(\frac{n}{cm^2.\,s}\right)$$

محاسبه ی ضریب قله ی شار

برای محاسبه ی ضریب قله،ابتدا شار حداکثر و شار متوسط به صورت مجزا برای هر یک از مجتمع های سوخت از خروجی کد محاسبه شد و در هر مجتمع سوخت مشخص شد که شار خروجی چقدر می باشد.نتایج بدست آمده به شرح زیر است:

$$(\text{Peaking factor})_{14\%} = \frac{\Phi_{Max}}{\Phi_{ave}} = 1.063$$

$$(\text{Peaking factor})_{15\%} = \frac{\Phi_{Max}}{\Phi_{ave}} = 1.177$$

$$(\text{Peaking factor})_{16\%} = \frac{\Phi_{Max}}{\Phi_{ave}} = 1.344$$

همچنین با در نظر گرفتن همه ی مجتمع های سوخت و اجرای کد،شار متوسط و شار بیشینه محاسبه شد و ضریب قله را برای کل قلب بدست آمد.میله ی سوخت با بیشترین شار خروجی در قسمت مرکزی قلب قرار دارد.

$$(\text{Peaking factor})_{total} = \frac{\Phi_{Max}}{\Phi_{ave}} = 1.27$$

محاسبه ی توان حرارتی قلب

با توجه به ابعاد میله ی سوخت به کار رفته در 4S و چگالی قدرت بدست آمده،قدرت پیش بینی شده برای قلب شبیه سازی شده را بدست آمد:

$P = 11.70\ MW_{th}$

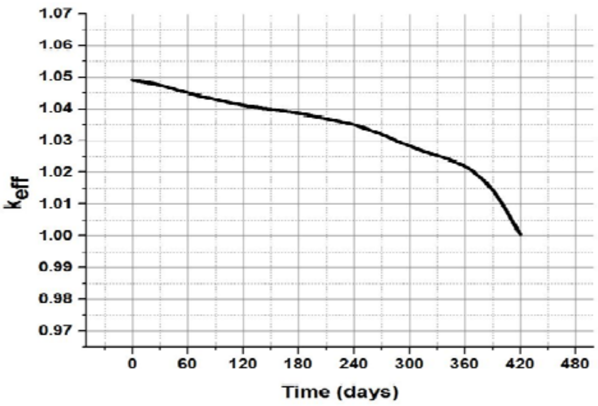
برای اطمینان از نتایج محاسبات انجام شده،تالی F7 برای همه ی میله های سوخت قلب نوشته شده و کد اجرا گردید و میزان خروجی انرژی حاصل از شکافت در میله های سوخت بدست آمد:

$P_{total} = 11\ MW_{th}$

به این صورت توان حرارتی قلب یک بار به صورت تئوری و با توجه به طرح مرجع بدست آمد و در مرحله بعد ،از خروجی کد MCNPX2.6 استفاده شد.

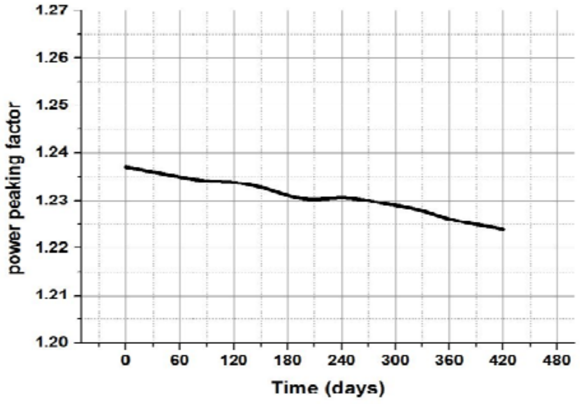
محاسبه مدت زمان سیکل راکتور

پس از ٤٢٠ روز بهره برداری از راکتور،راکتیویته ی موجود در قلب خنثی شده و راکتور به حالت بحرانی می رسد،به این طریق مدت زمان سیکل راکتور محاسبه می شود.در شکل ٤ تغییرات k_{eff} در طول سیکل مشاهده می شود.



شکل ۵. تغییرات k_{eff} در طول سیکل

همچنین در شکل ۵ تغییرات ضریب قله در طول سیکل به این صورت نشان داده شده است:



شکل ٦ . تغییرات ضریب قله در طول سیکل

بحث و نتیجه گیری

طرح جدید پیشنهادی از لحاظ ابعاد،تعداد مجتمع های سوخت،تعداد میله سوخت،غنای سوخت به کار رفته در قلب و تعداد قسمت های کنترلی با طرح مرجع متفاوت است وبه طور کلی اندازه قلب طراحی شده از اندازه اصلی کوچک تر می باشد.غنای سوخت به کار رفته در طرح جدید کمتر از طرح مرجع می باشد.طرح مرجع دارای یک قسمت کنترلی است وطرح جدید پیشنهادی دارای پنج قسمت کنترلی است که از لحاظ ایمنی بهتر می باشد.این طراحی با استفاده از کد شبیه ساز هسته ای MCNPX2.6.0 انجام گرفت.این کد کاربردهای زیادی در مدلسازی قلب راکتور حتی در فشار و دمای بالا دارد.از آنجا که باید مقداری راکتیویته ی اضافی در قلب راکتور برای شروع کار موجود باشد،مقدار بهره تکثیر بدست آمده برای قلب یک راکتور سریع مناسب می باشد.با توجه به نتایج بدست آمده،بیشترین مقدار شار در مجتمع های قسمت مرکزی قلب وجود دارد و شکل شار در کل قلب همانطور که پیش بینی می شد،متقارن می باشد.مقادیر بدست آمده برای ضریب قله قابل قبول می باشد. مقدار قدرت محاسبه شده به صورت تئوری با مقدار قدرت محاسبه شده توسط کد به میزان اندکی متفاوت است.این تفاوت مربوط به غنای سوخت کمتری است که در قلب شبیه سازی شده به کار رفته است.با بررسی نتایج مشاهده می شود که ضریب قله و ضریب تکثیر موثر در طول سیکل روند کاهشی دارند.می توان نتیجه گرفت که با گذشت زمان در طول سیکل و مصرف شدن سوخت،شار متوسط به شار حداکثر نزدیک شده و ضریب قله کاهش میابد.

مرجع‌ها

[1] CRIEPI:N. Ueda, I. Kinoshita, A. Minato, Toshiba:S. Kasai, T. Yokoyama, S. Maruyama “SODIUM COOLED SMALL FAST LONG-LIFE REACTOR 4S” Central Research Institute of Electric Power Industry Nuclear Technology Research Laboratory, COE-INES International Symposium, INES-1, November 2, 2004

[۳] Steven L. Hayes and Douglas L. Porter, “Fast Reactor Fuels” Nuclear Fuels and Materials Division, Fuel Performance and Design Department, June 5, 2009

[٤] Thomas H. Fanning, Nuclear Engineering Division “Sodium as a Fast Reactor Coolant” U.S. Department of Energy U.S. Nuclear Regulatory Commission, Topical Seminar Series on Sodium Fast Reactors, May 3, 2007

[٥] Y. Sagayama, M. Ichimiya and L. Cinotti,“OVERVIEW OF GENERATION IV LIQUID METAL-COOLED FAST REACTORS: SODIUM-COOLED FAST REACTOR (SFR) AND LEAD-COOLED FAST REACTOR (LFR)” (1) Yutaka Sagayama – Japan Atomic Energy Agency, (2) Masakazu Ichimiya – Japan Atomic Energy Agency, (3) Luciano Cinotti – Del Fungo Giera Energia, GIF Symposium – Paris (France) – 9-10 September, 2009

[۷] Nobuyuki UEDA, Izumi KINOSHITA, Akio MINATO, Shigeo KASAI and Shigeki MARUYAMA “Design Study of Sodium Cooled Small Fast Reactor” Central Research Institute of Electric Power Industry (CRIEPI), Toshiba Corporation, GENES4/ANP2003, Sep. 15-19, 2003, Kyoto, JAPAN, Paper 1114

[۸] INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY, “Innovative Small and Medium Sized Reactors”: Design Features, Safety Approaches and R&D Trends, Final report of a technical meeting held in Vienna, 7-11 June 2004, IAEA-TECDOC-1451, Vienna (2005).

[۹] Jams J. Duderstadt , Louis J. Hamilton , “Nuclear Reactor Analysis” Department of Nuclear Engineering ,*The University of Michigan,1942*

[۱۰] MCNPX-2.6.0 (manual)

مطالعه‌ی عددی اثر سرمایش بر روی قرص‌های پیش سیاره‌ای خود گرانش

پاک، میلاد؛ فاقعی، کاظم

دانشکده فیزیک، دانشگاه دامغان، دامغان

چکیده

در سال‌های اخیر مطالعه‌ی قرص‌های پیش ستاره‌ای به طور چشم‌گیری افزایش یافته است که می‌تواند به علت پیشرفت منابع محاسباتی و داده‌های مشاهداتی حاصل از چنین سیستم‌هایی باشد. در این پژوهش اثرات خود گرانش و سرمایش را بر قرص‌های پیش سیاره‌ای مورد مطالعه قراردادیم. در مدل مورد مطالعه، توصیف ارائه شده‌ی α را برای ضریب سینماتیک ویسکوزیته بکار برده‌ایم. همچنین برای مطالعه‌ی اثر سرمایش، مدل ارائه‌شده توسط گامی را اعمال نموده‌ایم. برای بررسی پایداری گرانشی از پارامتر تومره استفاده نموده‌ایم که احتمال تکه‌تکه شدن قرص و به دنبال آن تشکیل کپه‌ها و در نهایت شکل‌گیری سیارات را برای ما بیان می‌کند. برای بررسی عددی مدل، معادلات دیفرانسیل حاصل را به روش رانگ- کوتا- فلبرگ به صورت عددی حل نمودیم که از روش‌های اندازه گام تطبیقی می‌باشد و از نظر دقت و روشی مناسب محسوب می‌گردد.

The numerical study of cooling effects on self-gravitating protoplanetary disks

Pak, Milad; Faghei, Kazem

Department of Physics, Damghan University, Damghan

Abstract

In recent years, the study on the protostellar disks has a significant progress which can be due to the developments of computational resources and observational data of such systems. In this paper, we study cooling and self-gravity effects on protoplanetary disk. Here, the α-prescription is used for viscosity kinematic coefficient. To study the cooling influences, we use Gammie's model. The gravitational instability of disk is considered through use of Tomere parameter, which denotes to probability of formation of fragments and clump in the disk. For numerical study of present model, we solved the governing ordinary differential equation through use of Runge-Kutta-Fehlferg method, which is an adaptive step size method and shows sufficient accuracy in the numerical integration.

PACS No. 98

مقدمه

در سال‌های اخیر، اهمیت مطالعه‌ی قرص‌های خود گرانشی به ویژه در قرص‌های پیش ستاره‌ای و قرص‌هایی که در هسته‌های فعال کهکشانی شکل می‌گیرند به طور چشمگیری افزایش یافته است که به سبب جمع‌آوری مدارک و شواهد از طریق مشاهدات است که خود مؤید اهمیت خود گرانشی در این قرص‌ها است. همچنین توسعه و پیشرفت منابع محاسباتی نیز نقش مؤثری در مطالعه‌ی قرص‌های خود گرانشی از طریق شبیه‌سازی‌های عددی داشته است.

پازینسکی (۱۹۷۸) مؤثر بودن خود گرانشی در یک قرص پر جرم را به شرط وجود سرمایش ناشی از تابش در انتقال اندازه حرکت زاویه‌ای و برافزایش را مورد مطالعه قرارداد [۱].

تومره (۱۹۶۴) با ارائه‌ی پارامتر $Q_{Toomre}[\equiv c_s\kappa/\pi G\Sigma]$ پایداری خطی یک قرص نازک متقارن را اندازه‌گیری کرد [۲]. او دریافت که ناپایداری برای رشد آشفتگی‌های متقارن در $Q\lesssim1$ رخ می‌دهد که این مقدار برای ناپایداری‌های غیرمتقارن در حدود $Q\lesssim$۱٫۵-۱٫۷ است؛ اما این شرایط برای کپه و یا تکه‌تکه شدن کافی نیست، لذا گامی (۲۰۰۱) دریافت قرص برافزایشی که از نظر گرانشی ناپایدار شده است می‌تواند تکه‌تکه شود و کپه‌ها در آن تشکیل شوند تنها

اگر قرصی که به علت ناپایداری گرانشی گرم شده، به سرعت سرد شود. او همچنین نشان داد که اگر بتوان مقیاس زمانی سرمایش را به صورت $\tau_{cool}=\beta/\Omega$ نوشت آنگاه تکه‌تکه شدن تنها زمانی رخ می‌دهد که $\beta\leq\beta_{crit}$ که در آن $\beta_{crit}\sim 3$ و Ω سرعت زاویه‌ای قرص یا عکس مقیاس زمانی دینامیکی است [۳].

فاقعی (۲۰۱۲) با استفاده از دستورالعمل فوق و با فرض تعادل بین گرمایش و سرمایش و حل عددی معادلات حاکم بر این مدل دریافت که ساختار قرص به شدت به این تابع سرمایش بستگی دارد.

ساختار و تحول قرص‌های خود گرانشی از طریق روش‌های تحلیلی، نیمه تحلیلی و شبیه‌سازی‌ها مورد مطالعه قرار گرفته است. از آنجایی که مطالعات نیمه تحلیلی قرص‌های پیش سیاره‌ای خود گرانش و سرمایشی عمدتاً به طور یک بعدی است، در این پژوهش در نظر داریم که نقش خود گرانش را در قرص‌های پیش سیاره‌ای، با راه‌کارهای ارائه‌شده توسط فاقعی (۲۰۱۲)، در دو بعد مورد مطالعه قرار دهیم.

معادلات اساسی

در این مدل از دستگاه مختصات کروی (r,θ,φ) برای بررسی قرص استفاده خواهیم کرد که مرکز آن بر روی جسم مرکزی خواهد بود. پس بدین منظور از فرضیات زیر بهره خواهیم برد:

۱. شاره‌ی مورد مطالعه در حالت پایا و با تقارن محوری در نظر گرفته‌شده است یعنی $(\partial_t=\partial_\phi=0)$، بنابراین تمام متغیرهای سیستم توابعی از r و θ هستند.
۲. ما همچنین فرض می‌کنیم که سرعت شعاعی بسیار کوچک‌تر از سرعت سمتی است. $(v_r \ll v_\varphi)$.
۳. اثرات گرانش جرم مرکزی به صورت $\Psi=GM_*/r$ در نظر گرفته می‌شود.

حال با توجه به این فرضیات و معادلات هیدرودینامیک، معادلات حاکم بر این مدل را به صورت زیر فرمول‌بندی می‌کنیم. ابتدا برای معادله‌ی انرژی و با در نظر گرفتن توصیف α برای اتلاف ویسکوزیته خواهیم داشت:

$$\rho v_r\frac{\partial e}{\partial r}-\left(\frac{P}{\rho}\right)v_r\frac{\partial\rho}{\partial r}=-\alpha p\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{v_\varphi}{r}\right)-\frac{\rho e}{\tau_{\rm cool}} \qquad (۱)$$

که در این معادله ρ چگالی جرمی، v بردار سرعت، P فشار گاز و e انرژی درونی هستند. انرژی درونی را به صورت $e=p/(\gamma-1)\rho$ می‌نویسیم که در این رابطه γ همان نسبت ضریب گرماهای ویژه‌ی گاز است. اولین جمله‌ی سمت راست معادله‌ی انرژی بیانگر انرژی اتلافی در سیستم است. جمله‌ی دوم از سمت راست این معادله نیز بیانگر سرمایش است.

سه مؤلفه‌ی معادله‌ی تکانه به شکل زیر می‌باشد:

$$\frac{v_\varphi^2}{r}=\frac{\partial\Psi}{\partial r}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial P}{\partial r}+\frac{GM_*}{r^2} \qquad (۲)$$

$$-\frac{v_\varphi^2}{r}\cot(\theta)=-\frac{1}{\rho r}\frac{\partial P}{\partial\theta}-\frac{1}{r}\frac{\partial\Psi}{\partial\theta} \qquad (۳)$$

$$v_r\frac{\partial v_\varphi}{\partial r}+\frac{v_\varphi v_r}{r}=-\frac{\alpha}{\rho r^3}\frac{\partial}{\partial r}(r^3 p) \qquad (۴)$$

و در انتها معادله‌ی پواسون را به فرم زیر خواهیم داشت:

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\Psi}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2\sin(\theta)}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin(\theta)\frac{\partial\Psi}{\partial\theta}\right)=4\pi G\rho \qquad (۵)$$

راه‌حل خود مشابهی

در دینامیک سیالات، یک راه برای حل چنین روابطی راه‌حل‌های خود مشابهی است. اگرچه این روش برای بیان جزئیات مدل مناسب نیست، اما یک درک فیزیکی مناسب از مدل را ممکن می‌سازد. حال ابتدا کمیات فیزیکی مسئله را به صورت زیر در نظر می‌گیریم:

$$\rho(r,\theta)=\frac{R(\theta)}{r^{\epsilon_1}} \qquad (۶)$$

$$p(r,\theta)=\frac{P(\theta)}{r^{\epsilon_2}} \qquad (۷)$$

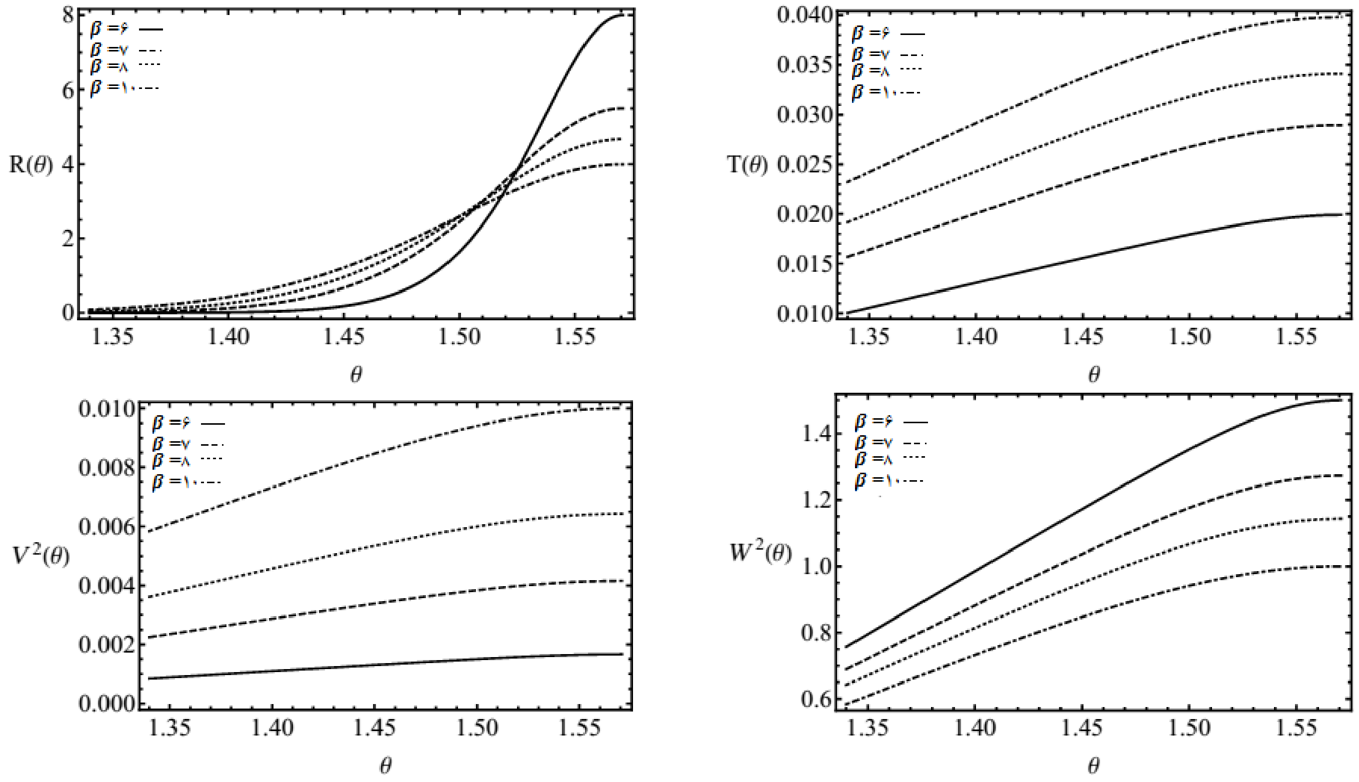
$$v_r(r,\theta)=\frac{V(\theta)}{r^{\epsilon_3}} \qquad (۸)$$

$$v_\phi(r,\theta)=\frac{W(\theta)}{r^{\epsilon_4}} \qquad (۹)$$

$$\psi(r,\theta)=\frac{\phi(\theta)}{r^{\epsilon_5}} \qquad (۱۰)$$

مقادیر ϵ_iها را با برابر قرار دادن توان‌های r در معادلات می‌یابیم:

$$\epsilon_1=3,\ \epsilon_2=4,\ \epsilon_3=\epsilon_4=\frac{1}{2},\ \epsilon_5=1$$



شکل۱: در این شکل خط ممتد، خط چین، نقطه‌چین و نقطه خط به ترتیب برای $\beta = ۶$، $\beta = ۷$، $\beta = ۸$ و $\beta = ۱۰$ با پارامترهای ورودی $\alpha = ۰/۲$ و $\gamma = ۵/۳$ رسم شده است.

با جاگذاری مقادیر ϵ_iها در معادلات اساسی تمام معادلات تنها تابعیت (θ) داشته و با ساده‌سازی معادلات به دو معادله دیفرانسیل زیر می‌رسیم:

$$\lambda_۱ \phi'(\theta) p(\theta) + \lambda_۲ (\phi(\theta) - ۱) \mathrm{Cot}(\theta) p(\theta) + (\phi(\theta) - ۱) p'(\theta) = 0 \quad (۱۱)$$

$$-۴\pi \lambda_۱ p(\theta) + \mathrm{Cot}(\theta) \phi'(\theta)(\phi(\theta) - ۱) + (\phi(\theta) - ۱)\phi''(\theta) = 0 \quad (۱۲)$$

که در این معادلات داریم:

$$\lambda_۱ = \frac{۴(۲ + \alpha\beta(۷ - ۶\gamma))}{-۲ + ۳\alpha\beta(\gamma - ۱)} \quad (۱۳)$$

$$\lambda_۲ = \frac{۴\alpha\beta(۴ - ۳\gamma)}{-۲ + ۳\alpha\beta(\gamma - ۱)} \quad (۱۴)$$

نتایج عددی

در بخش قبل دو معادله‌ی دیفرانسیل حاکم بر سیستم را به دست آوردیم. در مواجهه با این معادلات دیفرانسیل، و به دلیل غیرخطی بودن معادلات یافتن یک حل تحلیلی و دقیق کار ساده‌ای نیست و بنابراین می‌بایستی به صورت عددی حل شوند. بدین منظور برای حل آن‌ها شرایط مرزی مناسب مورد نیاز است. این شرایط مرزی به صورت زیر خواهند بود:

$$P|_{\theta=\frac{\pi}{۲}} = ۱ \,,\; \phi|_{\theta=\frac{\pi}{۲}} = -۱$$

$$\theta = \frac{\pi}{۲}: \quad \frac{d\phi}{d\theta} = \frac{dP}{d\theta} = ۰$$

روش رانگ-کوتا-فلبرگ برای حل معادلات دیفرانسیل معمولی با شرایط مرزی اولیه می‌باشد که یکی از روش‌های با اندازه‌ی گام تطبیقی می‌باشد که از نظر دقت روشی بهینه محسوب می‌گردد. مزیت این روش به سایر روش‌های حل معادلات دیفرانسیل علاوه بر دقت، تعداد گام‌های کمتر آن برای رسیدن به جواب است که برای مثال تعداد ارزیابی‌های تابع می‌تواند حداقل ۴۰٪ نسبت به روش‌های دلخواه رانگ- کوتا کاهش یابد.

حال معادلاتمان را به روش رانگ-کوتا-فلبرگ به صورت عددی حل می‌کنیم و نمودارهای مربوطه در شکل‌های ۱ و۲ نشان داده‌شده‌اند.

با افزایش پارامتر β چنانچه انتظار داریم مقیاس زمانی سرمایش افزایش می‌یابد و بنابراین دما افزایش می‌یابد که چنین خصوصیتی برای نمایه‌های دما در شکل۱ دیده می‌شود.

با افزایش دما ناپایداری‌های گرانشی افزایش‌یافته و در نتیجه تلاطم‌های ویسکوزیته افزایش می‌یابد که منجر به افزایش برافزایش (سرعت شعاعی) و کاهش سرعت دورانی قرص می‌شود که در نمایه‌های سرعت‌های دورانی و شعاعی دیده می‌شوند.

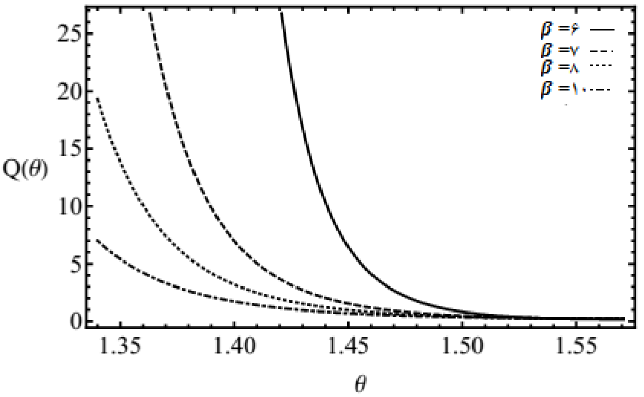
همچنین برای βهای بزرگ در نواحی نزدیک به صفحه‌ی استوایی چگالی جرمی کاهش و در نواحی با عرض بالاتر افزایش می‌یابد.

با توجه به رابطه‌ی پارامتر تومره که در مقدمه بیان شد، این پارامتر (Q) با مجذور سرعت دورانی رابطه‌ی مستقیم و با چگالی رابطه‌ی عکس دارد لذا در نواحی نزدیک به صفحه‌ی استوایی همان طور که در شکل۲ مشخص است تقریباً ثابت و به علت اینکه $Q \lesssim ۱$ است از لحاظ گرانشی ناپایدار است. در نواحی با عرض بالاتر افزایش β باعث کاهش پارامتر تومره و در نتیجه افزایش ناپایداری گرانشی می‌شود که در شکل۲ به وضوح دیده می‌شود.

نتیجه‌گیری

در این پژوهش ساختار یک قرص پیش سیاره‌ای خودگرانشی در حضور تابع سرمایش را در دو بعد مورد بررسی قراردادیم. برای بررسی ساختار این قرص، معادلات هیدرودینامیک را به کار برده‌ایم. سپس از راه‌کارهایی که فاقعی در سال ۲۰۱۲ از آن‌ها بهره برده بود استفاده کردیم با این تفاوت که مسئله را به طور دوبعدی مورد بررسی قراردادیم. در اینجا انتقال تکانه زاویه‌ای به علت وشکسانی تلاطمی است و از توصیف α برای بیان ضریب سینماتیک وشکسانی استفاده کردیم. از روش گامی برای سرمایش و از روش تومره برای ناپایداری گرانشی استفاده کرده تا حاصل را که تشکیل سیارات است بررسی کنیم. به منظور حل معادلات حاکم بر رفتار این نوع از قرص‌های برافزایشی خودگرانشی در حضور سرمایش، از روش خود–مشابهی استفاده کردیم.

از بررسی روی پارامتر سرمایش گامی، نمودارهای حاصله چنین نشان می‌دهند که اولاً با افزایش این پارامتر در قرص زمان‌بندی سرمایش در قرص افزایش می‌یابد که این خود باعث افزایش دما در قرص می‌شود. دوماً این افزایش دما باعث کاهش سرعت زاویه‌ای در قرص و به سبب آن افزایش سرعت شعاعی و افزایش برافزایش می‌شود. سوماً چگالی در نواحی نزدیک به استوا کاهش را نشان می‌دهد و این در حالی است که در عرض‌های بالاتر از استوا این چگالی با افزایش این پارامتر افزایش می‌یابد. پس در این نواحی پارامتر تومره با افزایش β کاهش‌یافته و قرص در این نواحی از لحاظ گرانشی ناپایدارتر می‌شود.



شکل۲: در این شکل خط ممتد، خط چین، نقطه‌چین و نقطه خط به ترتیب برای $\beta=۶$، $\beta=۷$، $\beta=۸$ و $\beta=۱۰$ با پارامترهای ورودی $\alpha=۰٫۲$ و $\gamma=۵/۳$ رسم شده است.

مرجع‌ها

[1] Paczynski, B; "A model of selfgravitating accretion disk"; *Acta Astronomica*, **28**, No. 2 (1978) 91-109.

[2] Toomre, A; "On the gravitational stability of a disk of stars"; *The Astrophysical Journal*, **139** (1964) 1217-1238.

[3] Gammie, C. F; "Nonlinear Outcome of Gravitational Instability in Cooling, Gaseous Disks"; *The Astrophysical Journal*, **553** (2001) 174-183.

[4] Faghei, K; "A numerical study of self-gravitating protoplanetary disks"; *Research in Astronomy and Astrophysics*, 12 (2012) 331-344.

[5] Shakura, N. I. Sunyaev, R. A; "Black holes in binary systems. Observational appearance"; *Astronomy and Astrophysics*, 24 (1973) 337 - 355.

بازسازی تصویر درتصویر برداری سطح مقطعی نوری

پایانی، امیر؛ متولی، سید محمد

گروه فیزیک هسته ای، دانشکده علوم پایه، دانشگاه مازندران

چکیده

نور NIR پس از نفوذ در بافت بدن دچار دو برهمکنش جذب و پراکندگی می شود. از آنجا که بر همکنش پراکندگی، برهمکنش غالب می باشد محاسبه توزیع نور در بافت و بازسازی تصویر ضرایب جذب و پراکندگی مشکل می شود. در این مقاله نتایج شبیه سازی یک سیستم تصویر برداری سطح مقطعی نوری ارائه شده است. این شبیه سازی شامل دو مرحله است: (الف) شبیه سازی مساله مستقیم (یا نفوذ نور در بافت) که با حل معادله تقریب پخش در حالت مانا توسط روش المان محدود انجام گرفته است. (ب) شبیه سازی مساله معکوس (بازسازی تصویر) که با استفاده از الگوریتم بهینه سازی موسوم به Broyden Quasi Newton انجام گرفته است. این روش بازسازی تصویر دارای سرعت خیلی بیشتری نسبت به سایر روش های بازسازی مانند Newton - Raphson و Levenberg - Marquardt می باشد.

Image Reconstruction in Optical Tomography

Payani,Amir ; Motavalli, Seyed Mohammad

Department of Nuclear Physics, Faculty of Science, University of Mazandran

Abstract

NIR light has two interactions involving absorption and scattering when penetrates in the tissue. Since scattering is predominant interaction, the calculation of light distribution in tissue and image reconstruction of absorption and scattering coefficients are complicate. In this paper the results of simulation of an optical tomography system is presented. This simulation involves two stages: (a) Simulation of forward problem (or light penetration in the tissue) which is performed by solving the diffusion approximation equation in stationary state using FEM. (b) Simulation of inverse problem (or image reconstruction) which is performed by optimization algorithm is called "Broyden Quasi-Newton". This method of image reconstruction has more speed comparing with other methods such as Newton - Raphson and Levenberg – Marquardt.

PACS No.87,89

مقدمه :

امروزه تصویربرداری پزشکی یک بخش اساسی در روال های تشخیص پزشکی می باشد . برخی از روشهای تصویربرداری متداول عبارتند از: رادیوگرافی اشعهX ، تصویربرداری تشدید مغناطیسی (MRI)، تصویربرداری سطحی مقطعی کامپیوتری (CT) ، التراسونوگرافی. اکثر این روشها تصاویر با رزولوشن بالا از ساختارهای داخلی بدن بدست می دهند اما دارای اشکالاتی نیز می باشند ، مثلاً نمی توان از آنها در ثبت بلادرنگ وضعیت بیمار استفاده کرد. همچنین بیشتر آنها قابل حمل و نقل نمی باشند و نیز بسیار گران قیمت هستند. علاوه بر این دستگاههای رادیوگرافی و CT نیز از پرتوهای X استفاده می کنند که برای بدن زیان بار می باشد. توموگرافی نوری از این جهت ها دارای مزیت نسبی می باشد. در توموگرافی نوری چون از پرتو نور NIR (زیر قرمز مریی) که یک پرتو غیریونساز است استفاده می شود برای بدن مضر نمی باشد و برای ثبت بلادرنگ و پیوسته وضعیت بیمار می تواند استفاده شود. تاکنون کاربردهای گوناگونی از تصویربرداری نوری گزارش شده

است که برخی از مهمترین آنها عبارتند از : مطالعه فعالیت های مغزی، تصویربرداری سطح مقطعی مغز، مطالعه دیستروفی ماهیچه‌ای در طب ورزشی، تشخیص سرطان سینه زنان، تشخیص سرطان پوست، تشخیص رماتیسم مفصلی، تشخیص آلزایمر، تشخیص پوسیدگی دندان و بیماریهای لثه، تصویربرداری از ساختار چشم. [1]

خواص نوری بافت :

نور IR در برهمکنش با بافت پراکنده و یا جذب می شود. در نور NIR (طول موج های 1300nm-700) برهمکنش پراکندگی بر جذب غالب است و انتشار نور توسط تقریب پخش مدل سازی می‌شود. در تقریب پخش فرض می‌شود که تمام برخوردهای فوتونی الاستیک می باشد و در آنها هیچ انرژی از دست نمی رود و فوتون در هر برخورد تنها تغییر جهت می دهد. همچنین پراکندگی نور در بافت ناشی از تغییر ضریب شکست نور در مرزهای میکروسکوپی و ماکروسکوپی بافت می باشد.بطورکلی خواص نوری در بافت با چهار پارامتر ضریب شکست نسبی محیط بافت و هوا (n) ، ضریب جذب (m_a) ، ضریب پراکندگی (m_s) و عامل ناهمسانگردی بافت (g) بیان می شوند. [1]

مدل پخش فوتونی :

برای توصیف انتقال فوتون هایی که پراکندگی الاستیک دارند، معادله انتقال تابش (RTE) تک سرعته استفاده می شود. حل این معادله مشکل است و تاکنون فقط برای حالت های خاص حل شده است. بنابراین بایستی تقریب هایی برای حل مساله انجام گیرد. در حالتی که ضریب جذب در محیط در مقایسه با ضریب پراکندگی کاهش یافته که بصورت زیر تعریف می شود :

$$m_s' = m_s(1-g) \tag{1}$$

خیلی کوچک باشد یعنی $m_s' >> m_a$ باشد می توان تقریب پخش (Diffusion) را بکار برد. از آنجا که در اکثر بافت های بدن شرط فوق برقرار است تقریب پخش برای مساله نفوذ نور در بافت تقریب مناسبی است .تقریب پخش در حالت وابسته به زمان به صورت زیر بیان می شود :

$$\frac{1}{c}\frac{\partial U(r,t)}{\partial t} - \nabla . D(r)\nabla U(r,t) + m_a(r)U(r,t) = S(r,t) \tag{2}$$

که در آن U(r) چگالی فوتونی و D ضریب پخش می‌باشد که بصورت زیر تعریف می شود :

$$D(r) = \frac{1}{3[m_a(r) + m_s'(r)]} \tag{3}$$

همچنین C سرعت نور در محیط و S توزیع منبع نور در مکان r می باشد وضریب پراکندگی کاهش یافته، m_s'، اثر پراکندگی غیرهمسانگرد را در تقریب پخش وارد می‌کند [6و2]. برای حل معادله دیفرانسیل تقریب پخش معمولاً روش های عددی مانند روش المان محدود بکار می رود. [2]

روال فرمول بندی المان محدود :

در اینجا چون مساله را در حالت مانا حل می کنیم لذا فرض می کنیم که در معادله (2)، $\frac{\partial f(r,t)}{\partial t} = 0$ باشد بنابراین در حالت دو بعدی یک معادله بیضی به شکل زیر خواهیم داشت:

$$-\nabla . D(r)\nabla U(r,t) + m_a(r)U(r,t) = S(r,t) \tag{4}$$

برای فرمول بندی مساله به روش FEM ، روش باقیمانده وزن دار استفاده شده است که تابع گالرکین به عنوان تابع وزنی آن در نظر شده است. با انتگرالگیری از شکل ضعیف معادله پخش بر روی هر المان و اسمبل کردن معادلات المان‌ها، سیستم معادلات ماتریسی بصورت $KU = b$ بدست می آید که طرف چپ معادله، ماتریس های پخش المان و طرف راست آن شامل بردارهای منبع می باشد و بردار چگالی فوتونی نور خروجی در گره های مش، U ، توسط آن قابل محاسبه است. [6 و 2]

بازسازی تصویر با استفاده از روش BQN:

روش Broyden Quasi Newton یک روش بهینه سازی غیر خطی است که مبتنی بر محاسبه ماتریس ژاکوبین است. برای ساختن

ماتریس ژاکوبین بایستی $\partial U_i / \partial m_{a_j}$ و $\partial U_i / \partial D_j$ را محاسبه کنیم که i شماره گره مرزی که شدت نور خروجی در آن اندازه گیری می شود بوده و j شماره گره مش است [3و6]. در این روش تکرار از یک روش استقرائی برای محاسبه معکوس ماتریس ژاکوبین در هر مرحله نسبت به مرحله قبلی استفاده می‌شود.اگر:

$$G = F(p) - U_m \tag{5}$$

$$g_i = G_{i+1} - G_i \tag{6}$$

$$\Delta p_i = p_{i+1} - p_i \tag{7}$$

باشد که در آن G اختلاف بین شدت نور محاسبه شده در روی مرز ، $F(p)$، و شدت نور اندازه گیری شده روی مرز ، U_m، بوده و P بردار خواص نوری بافت باشد. یک روش تکرار بر اساس رابطه زیراستفاده می‌شود:

$$p_{i+1} = p_i - H_i G_i \tag{8}$$

که در آن H_i تقریبی از معکوس ماتریس ژاکوبین می‌باشد. H_1 را به ازای حدس اولیه p_1 محاسبه می‌کنیم و سپس طبق فرمول زیر معکوس ماتریس ژاکوبین تکرارهای بعدی را بدست می‌آوریم[3و4و5] :

$$H_{i+1} = H_i - \frac{(\Delta p_i - H_i g_i)\, \Delta p_i^{\mathrm{T}} H_i}{\Delta p_i^{\mathrm{T}} H_i g_i} \tag{9}$$

همانگونه که ذکر شد چون در روش فوق فقط در یک مرحله از معکوس کردن ماتریس ژاکوبین استفاده می‌شود واضح است که سرعت به جواب رسیدن این روش نسبت به روش‌های تکرار دیگر مانند نیوتون-رفسون بهتر است.

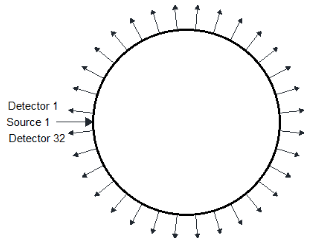
شبیه سازی سیستم سطح مقطعی نوری :

شبیه سازی سیستم توموگرافی نوری شامل دو بخش می شود: (1)حل مساله مستقیم (یا نفوذ نور در بافت) (2) حل مساله معکوس(بازسازی تصویر سطح مقطع بافت با استفاده از شدت های نور ثبت شده در روی مرز).

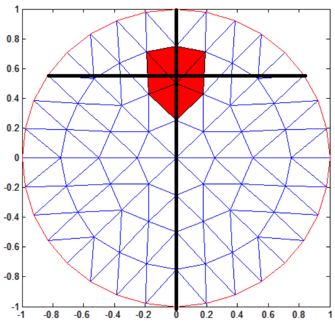
برای حل مسأله مستقیم از روش المان محدود استفاده شده است. یک فانتوم دایره‌ای با المان های مثلثی ایجاد شده و با قرار دادن مشخصه های جذب و پراکندگی و منابع نور فرودی در المانهای فانتوم مش بندی شده ، معادله پخش فوتون در حالت مانا در گره‌های مش حل شده و شدت نور خروجی در گره‌های مرزی بدست می آیند.

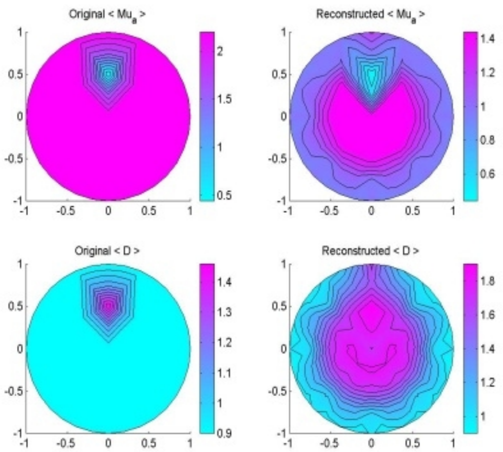
انتخاب تعداد المان ها ، مسأله مهمی است زیرا هر چه تعداد المان‌ها بیشتر باشد جواب دقیق‌تر و بهتری داریم و کیفیت تصویرافزایش می یابد ، ولی زمان محاسبات نیز افزایش می یابد. بنابر این باید بین این دو پارامتر یک انتخاب بهینه صورت گیرد. باتوجه به نکات فوق در این شبیه سازی یک مش دایره ای به شعاع 10 cm ودارای 128 المان و 81 گره برای انجام شبیه سازی انتخاب شد .

در شکل(1) وضعیت قرار گرفتن آشکار سازها در روی مرز را مشاهده می کنیم. منابع نوردر 32 نقطه روی مرزقرار می‌گیرند که معادل با منبع لیزر می‌باشند ودر32 نقطه متوالی روی مرز شدت‌های نور خروجی اندازه گیری می‌شوند. دو نوع ضریب جذب و ضریب پراکندگی متفاوت جهت ایجاد تمایز برای المان‌های جسم داخل فانتوم و المانهای زمینه فانتوم درنظر گرفته شدند.

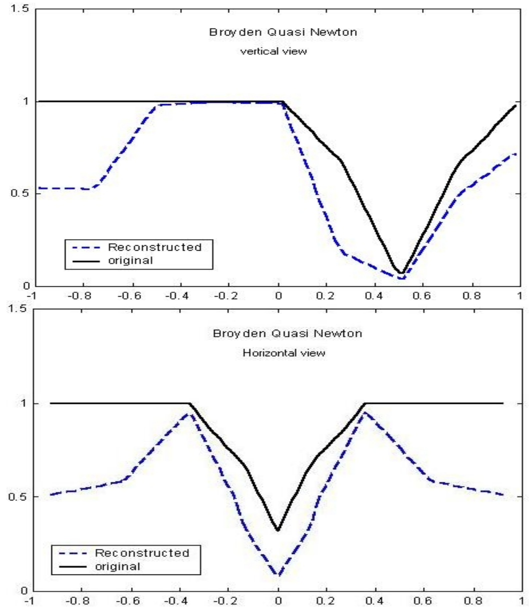


شکل1- نحوه قرار گرفتن آشکارسازها و منابع نور در روی مرز


شکل2-فانتوم مدلسازی شده (جسم با رنگ قرمز مشخص شده است)



شکل3- (بالا) نمایش کانتوری تصاویرضرایب جذب اصلی و بازسازی شده
(پایین) نمایش کانتوری تصاویرضرایب پراکندگی اصلی و بازسازی شده



شکل4-منحنی جذب در تصاویر اصلی وبازسازی شده در امتداد محور های متعامد گذرنده از مرکز جسم (بالا) در امتدادمحور عمودی (پایین) در امتدادمحور افقی

نتایج شبیه سازی:

نتایج شبیه سازی فانتوم در شکل (3) آورده شده‌اند که در آن نتایج بازسازی ضرایب جذب و پراکندگی بصورت نمایش کانتوری در تصاویر هموار سازی شده ارائه شده است. همچنین برای مقایسه کمی نتایج ، ضرایب جذب اصلی و بازسازی شده در امتداد دو خط متعامد گذرنده از مرکز جسم در فانتوم در شکل4 رسم شده اند.

نتیجه گیری :

- ماتریس ژاکوبین که در حل مساله معکوس در سیستم های توموگرافی نوری نقش مهمی دارد نسبت به المان های نزیک به مرکز حساسیت کمی دارد، لذا برای اجسام نزدیک به مرکز نتایج بازسازی دقت کمی دارند اما جواب ها برای اجسام چسپیده به مرز مطلوب می باشند.

- در روش بازسازی بکار گرفته شده ، تصاویر مطلوب با تعداد تکرار حدود 30 بار بدست آمدند .

- در این روش بازسازی تصویر ، فقط نتایج بازسازی ضرایب جذب قابل قبول می باشد ونتایج بازسازی ضرایب پراکندگی فقط وقتی که اندازه اجسام در فانتوم بزرگ باشد تصویر قابل قبولی می سازند.

- مقادیر ضرایب جذب و پراکندگی بازسازی شده دقیق نمی باشند و در تصاویر بازسازی شده ،کنتراست بین زمینه و جسم است که محدوده جسم در زمینه نشان می دهد .همچنین در بازسازی ضرایب جذب اندازه تصویر بازسازی شده جسم ومحل قرار گرفتن آن در محیط زمینه فانتوم در مقایسه با تصویر اصلی فانتوم از دقت مناسبی برخوردار است.

مراجع:

[1] J. C. Hebden, S. R. Arridge, and D. T. Delpy,"Optical Imaging in Medicine I: Experimental techniques", *Phys. Med. Biol*., vol.42, pp.825-840, 1997.

[2] J. C. Schotland, "Continuous wave diffusion imaging," *J. Opt. Soc. Am.* A 14(1), 275–279 ,1997.

[3] V. A. Markel, V. Mital, and J. C. Schotland, "The inverse problem in optical diffusion tomography. III. Inversion formulas and singular value decomposition," *J. Opt. Soc. Am*. A 20(5), 890–902 ,2003.

[4] S. R. Arridge and J. C. Schotland, "Optical tomography: forward and inverse problems," *Inverse Probl.* 25(12), 123010 ,2009.

[5] Artola,J.Dell," Broyden Quasi-Newton method applied to electrical impendence tomography", *Electron.Lett*,vol.30, pp. 27-28, 1994.

[6] A. Gibson and H. Dehghani, "Diffuse Optical Imaging," *Phil. Trans. R. Soc.* A 367, 3055–3072 و2009.

محاسبه ی انرژی بستگی دوترون وتریتون به کمک حل معادله شرودینگر به روش عددی پرتاب

رحمت آبادی ثانی، جواد ؛ رجبی ، علی اکبر [۱]

دانشکده فیزیک ، دانشگاه شاهرود ، شاهرود

چکیده

در این مقاله، دو سیستم هسته ای دو و سه ذره ای را به وسیله ی معادلات شعاعی و فوق شعاعی شرودینگر مورد مطالعه قرار داده ایم. معادله ی شعاعی مربوط به دوترون در حضور هریک از پتانسیل های یوکاوا و وودز- ساکسون به طور جداگانه حل شده است. در مورد تریتون، باید معادله ی شرودینگر فوق شعاعی در فضای فوق کروی حل گردد که این کار را برای پتانسیل یوکاوا انجام داده ایم. روش حل که آن را در ادامه شرح داده ایم، روش عددی پرتاب است که خود مبتنی بر روش های عددی رانگه کوتا و نیوتون رافسن است. نتایج در سازگاری بسیار خوب با داده های تجربی و انتظارات فیزیکی هستند و به ازای مقادیر مناسب ثابت های پتانسیل های یوکاوا و وودز- ساکسون ارائه و تابع موج های شعاعی برای حالت پایه رسم شده اند.

Calculation of Deuteron and Triton binding energies by solving the Schrödinger equation using the shooting numerical method

Rahmatabadi Sani, Javad ; Rajabi, Ali Akbar[1]

Department of physics, University of Shahrood, Shahrood

Abstract

In this paper, we have studied two and three body nuclear systems by using the radial and hyperradial Schrödinger equations. The radial equation for Deuteron has been solved separately in the Presence of Yukawa and Woods-Saxon potentials. For Triton, the heperradial Schrödinger equation in hyperspherical space must be solve that we have done this work in the presence of Yukawa potential.The solving method,which we have described it in the following, is the shooting numerical method that is based on Runge-Kutta and Newton-Raphson numerical algorithms. The results are in good agreement whit experimental data and physical expectations and have been presented for some suitable constants of Yukawa and Woods-Saxon potentials. Also, the radial wave functions of ground state have been plotted.

PACS No.3, 21,27

مقدمه

از آنجا که دوترون $({}^2_1\mathrm{H})$ ساده ترین حالت مقید نوکلئون ها به شمار می آید، بررسی آن نخستین گام در جهت شناخت نیروی نوکلئون–نوکلئون و ارائه ی پتانسیل های پدیده شناختی برای این نیرو خواهد بود. سرعت نوکلئون ها در هسته فقط در حدود ۱۵ درصد سرعت نور است بنابراین اثرات نسبیتی در بررسی حرکت نوکلئون ها اهمیتی ندارند [۱] و ما می توانیم معادله ی شرودینگر که یک معادله ی غیرنسبیتی است را برای بررسی سیستم های شامل نوکلئون ها به کار بریم. دوترون تنها یک حالت مقید دارد که با حل معادله ی شرودینگر شعاعی دوجسمی می توان انرژی آن رابه دست آورد. اما بررسی دوترون به تنهایی برای شناخت نیروی هسته ای کافی نیست. هرچند بخش عمده ی نیروی نوکلئون – نوکلئون از نوع نیروی دوجسمی است اما سهم نیروهای سه جسمی بین نوکلئون ها که در دوترون امکان بررسی آنها وجود ندارد نیز قابل صرف نظر نمی باشد. بهترین راه شناخت این نیروها مطالعه ی سیستم های هسته ای سه جسمی مانند تریتون $({}^3_1\mathrm{H})$ است. برای حل معادله ی شرودینگر روش های تحلیلی زیادی

ارائه شده است اما می دانیم که اکثر پتانسیل ها حل تحلیلی ندارند، همچنین اغلب پاسخ های تحلیلی برای پتانسیل های نمایی همراه با اعمال تقریب هستند. از این رو ما تصمیم داریم معادلهٔ شرودینگر را با روش عددی پرتاب (shooting) که روشی مناسب برای رویارویی با مسائل مقدار مرزی است [۲] حل کنیم.

معادله ی شرودینگر برای دوترون و تریتون

معادله ی شعاعی شرودینگر که برای محاسبه ی حالت مقید دوترون مورد استفاده قرار می دهیم به شکل زیر است [۳]

$$\left(\frac{d^2}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{d}{dr}-\frac{l(l+1)}{r^2}\right)R(r)=-\frac{2\mu}{\hbar^2}\big(E-V(r)\big)R(r) \quad (۱)$$

که در آن l نکانه ی زاویه ای مداری و μ جرم کاهش یافتهٔ سیستم پروتون و نوترون است. با تغییر متغیر $R(r)=u(r)/r$

$$\left(\frac{d^2}{dr^2}-\frac{l(l+1)}{r^2}\right)u(r)=-\frac{2\mu}{\hbar^2}\big(E-V(r)\big)u(r) \quad (۲)$$

که در آن $u(r)$ تابع موج شعاعی است. حالت مقید دوترون ترکیبی از حالات $l=0$ و $l=2$ است اما دوترون اکثر اوقات (حدود ۹٦ درصد) را در حالت $l=0$ به سر می برد.

در مورد تریتون وضعیت پیچیده تر است زیرا اصطلاحاً با یک سیستم چند ذره ای سرو کار داریم که دیگر معادله ی (۲) برای آن صادق نیست. از میان روش های مختلف حل مسألهٔ چند جسمی، روش بسط هماهنگهای فوق کروی به طور ویژه مورد توجه است [٤]. لاپلاسی سیستم در فضای D بعدی در این روش به شکل

$$\nabla^2=\frac{d^2}{dr^2}+\frac{(D-1)}{r}\frac{d}{dr}-\frac{l(l+D-2)}{r^2} \quad (۳)$$

در می آید که در آن $r=\sqrt{\frac{1}{3}(r_{12}^2+r_{23}^2+r_{31}^2)}$ فوق شعاع($r_{ij}=r_i-r_j$فاصله نسبی بین ذرات i و j است)، $D=3A-3$ ابعاد فضای فوق کروی، A تعداد ذرات سیستم و l عدد کوانتومی تکانه زاویه ای مداری بزرگ است. بنابراین معادله ی شرودینگر فوق شعاعی در فضای D بعدی به صورت

$$\left(\frac{d^2}{dr^2}+\frac{D-1}{r}\frac{d}{dr}-\frac{l(l+D-2)}{r^2}\right)R(r)=-\frac{2\mu}{\hbar^2}\big(E-V(r)\big)R(r) \quad (٤)$$

است [٥]. در اینجا $V(r)$ پتانسیل وابسته به فاصله ی نسبی ذرات و μ جرم کاهش یافته ی دستگاه پروتون و نوترون است. با قرار دادن $D=6$ در معادله ی (٤) به معادله ی شرودینگر سه جسمی

$$\left(\frac{d^2}{dr^2}+\frac{5}{r}\frac{d}{dr}-\frac{l(l+4)}{r^2}\right)R(r)=-\frac{2\mu}{\hbar^2}\big(E-V(r)\big)R(r) \quad (٥)$$

برای تریتون می رسیم. با تغییر متغیر $R(r)=u(r)/r^{5/2}$ داریم

$$\left[\frac{d^2}{dr^2}-\frac{15+4l(l+4)}{4r^2}\right]u(r)=-\frac{2\mu}{\hbar^2}\big(E-V(r)\big)u(r) \quad (٦)$$

که $u(r)$ تابع موج فوق شعاعی است. تریتون نیز در حالت پایه ترکیبی از حالت های $l=0$ و $l=2$ است اما مانند دوترون سهم $l=0$ بسیار بیشتر است[٦] و ما برای محاسبه ی انرژی بستگی تریتون این مقدار را به کار خواهیم برد. یکاها باید از مرتبه ی یکاهای هسته ای باشند (MeV برای انرژی، fm برای فاصله). از $\mu=469.463MeV/c^2$ و $\hbar c=197.329MeV.fm$ داریم

$$\frac{\mu}{\hbar^2}=0.0120 \quad MeV^{-1}.fm^{-2} \quad (۷)$$

پتانسیل های یوکاوا و وودز – ساکسون

فرم عمومی پتانسیل یوکاوا به صورت زیر است

$$V(r)=-V_0\frac{\exp(-kr)}{r} \quad (۸)$$

که r فاصله ی نسبی ذرات، V_0قدرت پتانسیل و kپارامتر پوششی است. این پتانسیل بر اساس نظریه ی مزونی یوکاوا ارائه شده و از معروف ترین پتانسیل های بین نوکلئونی است.

فرم عمومی پتانسیل وودز– ساکسون (Woods-Saxon) نیز

$$V(r)=\frac{-V_0}{1+\exp(\frac{r-R}{a})} \quad (۹)$$

می باشد که در آن r فاصله از مرکز هسته، $R=1.25A^{1/3}$ شعاع میانگین، $a=0.524\,fm$ ضخامت پوسته و V_0 عمق چاه پتانسیل و از مرتبه ی $50MeV$ است [۳].

روش رانگه کوتا با اندازه ی گام قابل کنترل

نخستین مرحله در برخورد با یک معادله دیفرانسیل مرتبه N (بزرگتر از یک) تبدیل آن به N معادلهٔ دیفرانسیل مرتبه اول

$$\frac{dy_i}{dx}=f_i(x,y_1,\ldots,y_n),\quad i=1,\ldots,N \tag{۱۰}$$

برای توابع y_i استکه در آن توابع f_i برای ما مشخص اند. برای پیشروی در این معادله از روش رانگه کوتای مرتبه پنجم استفاده می کنیم که نیازمند شش بار سنجش تابع سمت راست معادله ی (۱۰) است. ترکیب دیگری از شش تابع به یک فرمول مرتبه چهارم منجر می شود که آن را فرمول جایگزین شده می نامیم. هریک از این دو تخمینی از $y(x+h)$ (h اندازه ی گام است) ارائه می دهند که اختلاف آنها را به عنوان خطا در نظر می گیریم. فرمول کلی روش رانگه کوتای مرتبه پنجم به شکل زیر است [۷]

$$\begin{aligned} k_1&=hf(x_n,y_n)\\ k_2&=hf(x_n+a_2h,y_n+b_{21}k_1)\\ &\vdots\\ k_6&=hf(x_n+a_6h,y_n+b_{61}k_1+\cdots+b_{65}k_5)\\ y_{n+1}&=y_n+c_1k_1+c_2k_2+c_3k_3+c_4k_4+c_5k_5+c_6k_6+o(h^6) \end{aligned} \tag{۱۱}$$

و فرمول روش جایگزین شده ی مرتبه چهارم عبارتست از

$$y^*_{n+1}=y_n+c^*_1k_1+c^*_2k_2+c^*_3k_3+c^*_4k_4+c^*_5k_5+c^*_6k_6+o(h^5) \tag{۱۲}$$

که در آنها ضرایب عددی c_i,b_{ij},a_i و c^*_i به ضرایب cash-karp معروفند و در مرجع[۷] آمده اند.پس برآورد خطا به صورت

$$\Delta\equiv y_{n+1}-y^*_{n+1}=\sum_{i=1}^{6}(c_i-c^*_i)k_i \tag{۱۳}$$

است. با یافتن یک رابطه میان خطا و اندازه گام می توانیم اندازه ی گام را در جهت کاهش خطا کنترل کنیم. Δ از مرتبه ی h^5 است. پس اگر ما در گام h_1 خطای Δ_1 را تولید کنیم،آنگاه اندازه گام h_0 که خطای Δ_0 را تولید می کند، عبارت است از

$$h_0=h_1\left|\frac{\Delta_0}{\Delta_1}\right|^{0.2} \tag{۱٤}$$

Δ_0 در واقع دقت مورد نظر ماست. اگر $\Delta_1>\Delta_0$ باشد باید اندازهٔ گام طبق رابطه (۱٤) کاهش یابد و مرحلهٔ فعلی تکرار شود اما اگر $\Delta_1<\Delta_0$ باشد، باید اندازهٔ گام برای مرحلهٔ بعدی افزایش یابد.

روش پرتاب

معادلات (۲) و (٦) نوعی از معادلات دو مقدار مرزی (یعنی معادلاتی که باید شرایط مرزی را در دو نقطه برآورده کنند) به نام معادلات ویژه مقداری هستند . در چنین معادلاتی طرف راست رابطه ی (۱۰) وابسته به یک پارامتر مانند λ است

$$\frac{dy_i(x)}{dx}=f_i(x,y_1,\ldots,y_N,\lambda)\quad i=1,\ldots,N \tag{۱۵}$$

این معادلات شامل $N+1$ مقدار اولیه برای n_1 شرط مرزی در نقطه ی ابتدایی x_1 و $n_2=N+1-n_1$ شرط مرزی در نقطه ی انتهایی x_2 هستند. با معرفی یک متغیر و افزودن یک معادله جدید

$$y_{N+1}=\lambda,\quad \frac{dy_{N+1}}{dx}=0 \tag{۱٦}$$

به N معادلهٔ قبلی، به شکل استاندارد می رسیم. در نقطهٔ x_1 تعداد $n_2=N+1-n_1$ مقدار اولیهٔ اختیاری وجود دارد که مربوط به حدس های اولیه برای ویژه مقادیر است. حال فرض می کنیم این مقادیر اختیاری مؤلفه های یک آرایهٔ n_2 مؤلفه ای مثل V باشند

$$y_i(x_1)=y_i(x_1,V_1,\ldots,V_{n_2})\quad i=1,\ldots,N \tag{۱۷}$$

با دادن یک مقدار برای V ادامه ی کار تبدیل به حل یک مسأله ی مقدار اولیه می شود که در آن $y(x_1)$ با پیشروی در معادله ی دیفرانسیل (به روش شرح داده شده در بخش قبل) به $y(x_2)$

تبدیل می شود. انطباق $y(x_2)$ی بدست آمده با شرایط مرزی در x_2 را با معرفی یک آرایه ی n_2 مؤلفه ای F تحقیق می کنیم

$$F_k = B_k(x_2, y_1, \ldots, y_N), \quad k = 1, \ldots, n_2 \qquad (۱۸)$$

که در آن B_kها توابعی هستند که باید شرایط مرزی در x_2 را تأمین کنند و می توان آنها را به گونه ای به برنامه داد که تنها وقتی شرایط را تأمین کنند که مؤلفه های F صفر شوند. صفر شدن F را روش ریشه یابی نیوتون رافسن بررسی می کند، به این ترتیب که درهر مرحله در صورت ارضا نشدن شرایط در x_2، تصحیحی را در ویژه مقدار حدسی انجام می دهد تا نهایتاً ویژه مقداری که شرایط مرزی را برآورده و F راصفر می کند، حاصل شود [۷]. آنچه تا کنون گفتیم برای معادلات (۲) و (٦) یعنی:

$$u_1 = u(r), \quad u_2 = \frac{du(r)}{dr}, \quad u_3 = E \qquad (۱۹)$$

$$N = 2, \quad n_1 = 2, \quad n_2 = 1$$

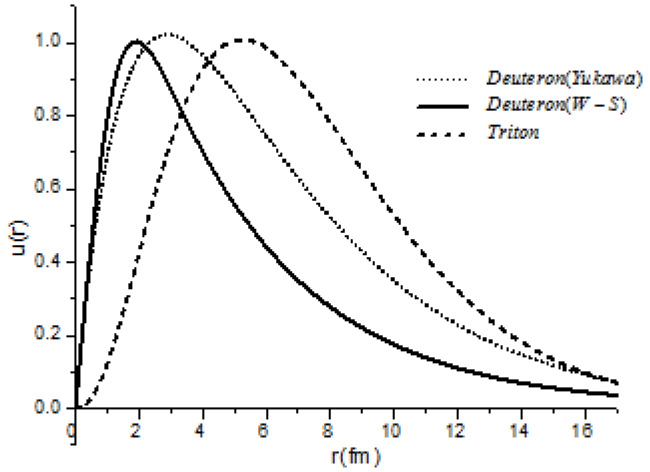
V_1 حدس اولیهٔ انرژی و F_1 مقدار $u(x_2)$ی حاصل از پیشروی عددی در معادله است. شرایط مرزی در $r_1 = 0.001 fm$ و $r_2 \to \infty$ عبارتند از

$$u(r_1) = cte, \quad \frac{du(r_1)}{dr} = 1000, \quad u(r_2) = 0 \qquad (۲۰)$$

نتایج در جدول و شکل (۱) آمده اند.

جدول۱ : مقادیر انرژی بستگی دوترون و تریتون حاصل از روش پرتاب

دوترون ($^2_1$H)				تریتون ($^3_1$H)	
پتانسیل یوکاوا ($k = 0.15 fm^{-1}$)		پتانسیل w-s		پتانسیل یوکاوا ($k = 0.01 fm^{-1}$)	
V_0 / MeV	E / MeV	V_0 / MeV	E / MeV	V_0 / MeV	E / MeV
۳۰،۵	-۲،۱۷٦	۵۰،۵	-۲،۱٤٦	۹۸،۸	-۸،٤۵۷
۳۰،٦	-۲،۱۹۸	۵۰،٦	-۲،۱٦۸	۹۸،۹	-۸،٤۷۵
۳۰،۷	-۲،۲۲۱	۵۰،۷	-۲،۱۹۰	۹۹،۰	-۸،٤۹۳
۳۰،۸	-۲،۲٤۳	۵۰،۸	-۲،۲۱۲	۹۹،۱	-۸،۵۱۱
۳۰،۹	-۲،۲٦٦	۵۰،۹	-۲،۲۳۵	۹۹،۲	-۸،۵۲۹
تجربی	-۲،۲۲٤			-۸،٤۸۲	



شکل۱ :تابع موج شعاعی دوترون (برای پتانسیل یوکاوا با $V_0 = 30.7$ و پتانسیل w-s با $V_0 = 50.9$) و تریتون $(V_0 = 98.9)$

نتیجه گیری

در این مقاله انرژی بستگی دوترون و تریتون را با حل معادله ی شرودینگر با استفاده از روش عددی پرتاب برای پتانسیل های هسته ای مناسب محاسبه کردیم که نتایج به دست آمده برای انرژی های بستگی در توافق بسیار خوبی با داده های تجربی هستند. همچنین توابع موج شعاعی حاصل شده رفتاری متناسب با منطق فیزیکی و ویژگی های نیروی هسته ای را ارائه می دهند که نشانه ی دقت و کارایی روش های عددی در حل مسائل کوانتومی و همچنین توصیف مناسب پتانسیل های یوکاوا و وودز – ساکسون از ماهیت نیروی هسته ای می باشد.

مرجع ها

[۱]کوهن، برنارد؛«*مفاهیم فیزیک هسته ای*» مرکز نشر دانشگاهی؛ صفحه ۸

[۲]Nicholas J. Giordano, "*computational physics*" Prentice-Hall, 264

[۳] کرین، کنت؛ «*آشنایی با فیزیک هسته ای*» مرکز نشر دانشگاهی؛ صفحه۱۱۲

[٤]A.A. Rajabi, "Bound States for Hypercentral Singular and Exponential Potentials "*Commun. Theor. Phys*.**45**, No 4 (2006) 669-674

[۵]A.A. Rajabi" Exact Analytical solution of the Schrödinger equation for an N-identical body-force system"*Few-body systems*.**37**(2005)197-213

[۶]J.L. Ballot and M. Fabre de la Ripelle, "Application of hyperspherical formalism to the trinucleon bound state problems" *Ann. Phys.* **127** (1980) 62-125

[۷]W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling and B. P. Flannery. "*Numerical Recipes in FORTRAN*". Press Syndicate of the University of Cambridge. 701-751

نوار انرژی نانو ریبون های گرافین

وحدت رفیعی[۱]، سیدجعفر نظام دوست[۲]، طاها صلواتی فرد[۳]

[۱] *عضو علمی، گروه فیزیک، دانشگاه پیام نور، صندوق پستی ۳۶۹۷-۱۹۳۹۵ تهران، ایران*

[۲] *جهاد دانشگاهی*

[۳] *گروه فیزیک، دانشگاه شهید بهشتی، تهران،ایران*

چکیده:

در این مقاله، با استفاده از روش های "تایت بایندینگ" و "نظریه تابعی چگالی" به بررسی نوار انرژی نانو ریبون های گرافین می پردازیم و نتایج بدست آمده از محاسبات را با هم مقایسه می کنیم. سپس روش تایت بایندینگ را از تقریب همسایه اول به همسایه سوم ارتقا داده و خواص را مجدداً محاسبه می نمائیم. پس از مقایسه با نتایج حاصل از نظریه تابع چگالی نشان می دهیم نتایج حاصل از تقریب همسایه سوم قابل قبول می باشد.

Sub-band structure of Graphene Nanoribbons

Rafee, vahdat [1],Nezamdoost, seyd jafar[2]; Salavati-fard, Taha[3]

[1] *Department of Physics, payame Noor University, Po Box19395-3697, Tehran, Iran*

[2] *Iranian Academic for Education, Culture and Research(ACECR)*

[3] *Department of Physics and Astronomy, University of shahid behshti,Tehran, Iran*

Abstract

In this paper, we use both tight binding model and Density Functional Theory to analyze the properties of sub band structure of graphene nanoribbons, and compare the results form both methods. Then we extend our TB method from nearest neighbor up to third nearest neighbor and found that some properties have been changed. The results from this tight binding model are found to be reliable in some condition by comparing with results from Density functional theory (DFT).

PACS No: 01.55.+b, 01.65.+g

مقدمه:

مطالعات بر روی گرافین روز به روز وسیعتر و جامع تر می شود. علت این امر را میتوان در خواص فوق العاده این ساختار بر پایه کربن جستجو کرد[۱]. بسیاری بر این باورند که گرافین اصلی ترین جزء دنیای نانو الکترونیک خواهد بود. گرافین ساختاری دو بعدی از اتم های کربن است که بصورت شبکه ای شش ضلعی با پیوند های کوالانسی به یکدیگر متصل شده اند. از منظر دیگر می توان گرافین را تک لایه ای از گرافیت دانست.

در بخش بعد، ابتدا معرفی مقدماتی از تئوری تایت بایندینگ (Tight-Binding) ارائه خواهد شد و با استفاده از آن به بررسی خواص مختلف ناریبونهای زیگ زاگ و آرم چیر در پهناهای مختلف می پردازیم. سپس با افزودن اثرات اسپین–مدار و همسایه های سوم به تئوری، محاسبات را بهبود

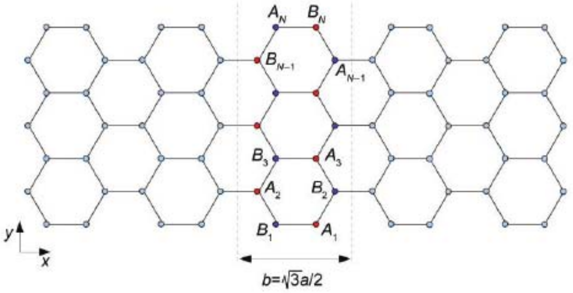
می بخشیم. بخش نهایی به مقاسیه نتایج حاصل از این تئوری با نتایج محاسبات نظریه تابع چگالی (DFT) اختصاص دارد[۲].

تئوری :

در این مقاله، محاسبات بر پایه تئوری تایت بایندینگ است و همسایه های اول در محاسبات در نظر گرفته می شوند. هامیلتونی سیستم به صورت زیر است:

$$H = \sum_i V_i C_i^\dagger C_i - t_1 \sum_{<ij>} C_i^\dagger C_j$$

در رابطه بالا، جمله اول پتانسیل هر سایت را نشان می دهد. این جمله در غیاب ناخالصی می تواند برابر صفر در نظر گرفته شود. جمله دوم هم پوشانی توابع موج سایت های مجاور را نشان می دهد و به جمله هاپینگ معروف است. هامیلتونین فوق را می توان بصورت ماتریس بدست آورد که بعد این ماتریس به تعداد اتم های موجود در نانوریبون گرافین بستگی دارد. با استفاده از خواص تقارنی سیستم می توان کل ماتریس هامیلتونی را با استفاده از بخش کوچکی از آن تشکیل داد. این بخش کوچک سلول ویژه نام دارد. اینجا می توان از نظریه بلاخ بهره برد و فاز های $\exp(\pm ikb)$ را برای همسایه های اول که بیرون از سلول ویژه قرار دارند در نظر گرفت. با استفاده از روش های عددی می توان ماتریس هامیلتونی را قطری نمود. در این وضعیت هر مقدار ویژه متناظر یکی از نوار های مجاز انرژی می باشد.



شکل (۱): سلول ویژه که با تکرار آن می توان کل نانو ریبون گرافین را باز تولید نمود.

نتایج:

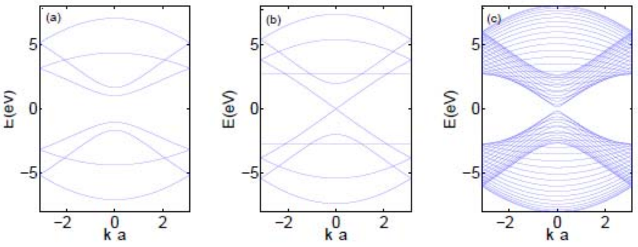
الف) ساختار نوار انرژی نانو گرافین آرم چیر:

در این بخش ساختار نوار انرژی نانوریبون گرافین آرم چیر با سه پهنای متفاوت $N_a = ۴,۵,۳۰$ در تقریب همسایه اول محاسبه شده است. نتایج در شکل (۲) ارائه گردیده است.

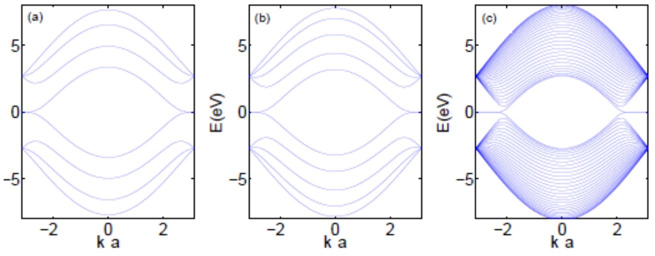
با مشاهده نتایج می توان دریافت که نانو ریبون آرم چیر با پهنای ۵ رفتاری شبیه فلزات رسانا دارد چرا که نوار رسانش و نوار ظرفیت یکدیگر را لمس می کنند. پهنای **۴** رفتاری شبیه عایق خواهد داشت زیرا گاف انرژی بزرگی معادل **۲.۱** الکترون ولت وجود دارد. نانو ریبون گرافین آرم چیر با پهنای **۳۰** ، رفتاری شبیه نیم رسانا خواهد داشت. این نکته را می توان از گاف انرژی کوچک موجود بین نوار رسانش و نوار ظرفیت می توان دریافت.

ب) ساختار نوار انرژی نانو ریبون گرافین زیگ زاگ:

با استفاده از تقریب همسایه اول و در نظر گرفتن $t_1 = ۲/۷(eV)$ و تک اوربیتال P_z موجود در هر سایت، نوار انرژی ساختار ها با پهنای $N_z = ۴,۵,۳۰$ مورد محاسبه قرار گرفته است. با توجه به شکل (۳) که نمایانگر نتایج محاسبات است می توان دریافت که در هر سه حالت رفتار ساختار انرژی شبیه باقی می ماند. نکته جالب اینجاست که ۲ نوار انرژی مستقیم بین نقطه دیراک و لبه های ناحیه بریلوئن وجود دارد.



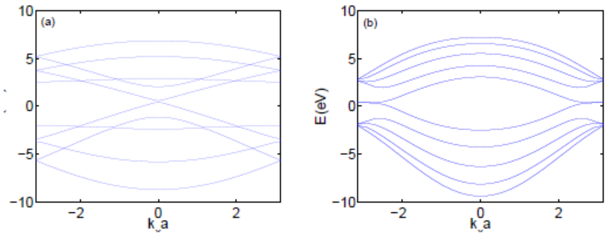
شکل (۲): ساختار انرژی حالت آرم چیر برای پهنا های ۴،۵،۳۰



شکل (۳): ساختار انرژی حالت زیگ زاگ برای پهنا های ۴،۵،۳۰

ج) ساختار نوار انرژی آرم چیر و زیگ زاگ محاسبه شده در تقریب همسایه سوم:

در این قسمت محاسبات را در تقریب همسایه سوم برای $N_a = ۵$، $N_z = ۵$ تکرار می کنیم پارامتر های هاپینگ $t_۱ = ۲/۷(eV)$، $t_۳ = ۰/۱۸(eV)$ $t_۲ = ۰/۲۰(eV)$, است. با نگاهی به نتایج محاسبات چند تغییر جالب به چشم می رسد. در حالت زیگ زاگ خواص رسانشی اولیه نا پدید شده و گاف انرژی کوچکی پدید آمده است. در حالتیکه در حالت آرم چیر، نزدیک لبه های ناحیه بریلوئن نوار های مستقیم اندکی منحنی شده اند. علاوه بر اینها، برای هر دو حالت شکل کلی دیگر نسبت به انرژی صفر متقارن نیست.



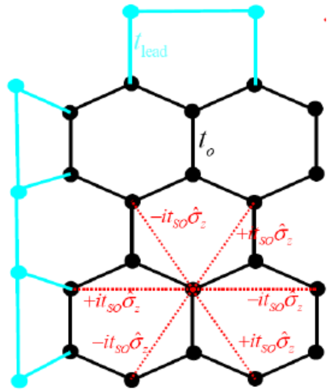
شکل (۴) حالت آرم چیر و زیگ زاگ در تقریب همسایه سوم.

د) ساختار انرژی نانو ریبون ها در دمای کمتر از ۰/۵ کلوین و عایق های هندسی:

در دما های پائین گاف انرژی ناشی از جفت شدگی اسپین – مدار باید در آزمایش قابل مشاهده باشد. این گونه سیستم ها که به عایق هندسی معروفند دارای ویژگی تقارن زمانی بوده و تقاطع نوار های انرژی در ناحیه بریلوئن پدید می آید. برای چنین سیستم هایی همیلتونی زیر مورد استفاده قرار می گیرد:

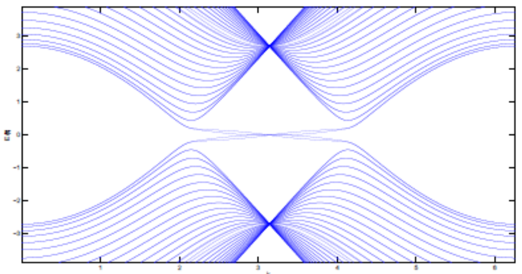
$$\hat{H}_{TI} = -t_۱ \sum_{<ij>} C_i^{\dagger} C_j + \frac{۲i}{\sqrt{۳}} t_{so} \sum_{<<ij>>} C_i^{\dagger} \vec{\sigma}.(\vec{d}_{kj}\vec{d}_{ik}) C_j$$

که عملگر های خلق الکترونی $C_i^{\dagger} = \left(C_{i\uparrow}^{\dagger}, C_{i\downarrow}^{\dagger}\right)$ و بردار $\vec{\sigma}$ ماتریس های پائولی است.



شکل (۵): جفت شدگی اسپین – مدار

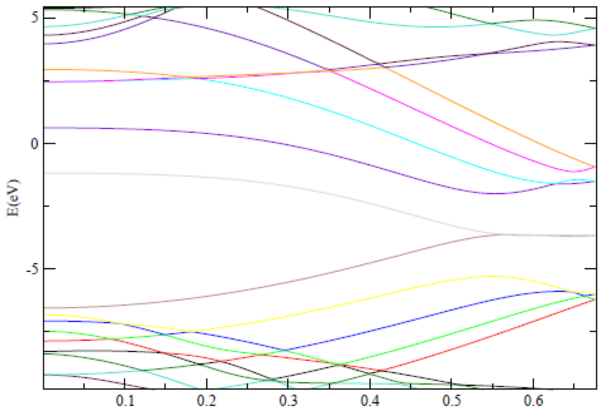
در این قسمت با فرض $t_۱ = ۲/۷(eV)$ و $t_{so} = ۰/۰۳t_۱$ ساختار نوار انرژی برای حالت زیگ زاگ با پهنای $N_z = ۳۰$ محاسبه شده است. در مقایسه با حالتی که اثرات اسپین – مدار در نظر گرفته نمی شود، می بینیم که گاف انرژی بزرگتر شده است. همچنین حالت جفت شدگی اسپین – مدار از تبهندگی سیستم می کاهد.



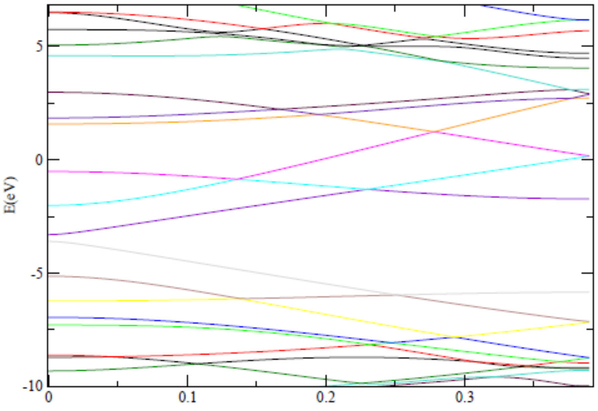
شکل (۶): گاف انرژی حاصل از اسپین – مدار

هـ) ساختار انرژی نانو ریبون های گرافین با استفاده از نظریه تابع چگالی:

در این بخش با استفاده از SIESTA به محاسبه ساختار نوار انرژی حالت های $N_a = ۵$ ، $N_z = ۵$ پرداخته ایم و نتایج را با قسمت (ج) مقایسه می کنیم. همانطورکه مشاهده می شود نتایج حاصل از همسایه تقریب سوم با نتایج DFT قابل مقایسه است. در حالت زیگ زاگ هم DFT، هم TB تقریب همسایه سوم رفتاری تقریباً مسطح را در نزدیکی لبه های منطقه بریلوئن نشان می دهند. تفاوت عمده در انرژی فرمی دو سیستم است. در حالت آرم چیر نیز نتایج حاصل از *DFT* و *TB* شبیه هم هستند.



شکل (۷): ساختار انرژی حالت زیگ زاگ با پهنای $N_z = ۵$ محاسبه شده با *DFT*



شکل (۸): ساختار انرژی حالت آرم چیر با پهنای $N_a = ۵$ محاسبه شده با *DFT*

نتیجه گیری:

در این تحقیق نشان داده ایم که نانو ریبون های گرافین با لبه های آرم چیر و زیگ زاگ بسیاری از خواص متفاوت را در ساختار انرژی شان دارا هستند. حالت آرم چیر به شدت تبهگن و حالت زیگ زاگ به پهنای نانو ریبون بسیار حساس است. همچنین با افزودن اثرات تا همسایگی سوم و اثرات اسپین – مدار تغییرات پدید آمده در ساختار نوار انرژی نمایش داده شد. نهایتاً نتایج حاصل از TB با نتایج DFT مقایسه شد و نتیجه این مقایسه این است که TB با تقریب همسایه سوم به خوبی نوار انرژی سیستم را تشریح می کند.

مرجع‌ها:

[1] *A. Cresti, N. Nemec, B. Biel, G.Niebler, F.Triozon, G. Cuniberti, and S. Roche, Charge transport in disordered graphene-based low-dimensional materials, Nano Research 1, 361* (2008).

[2] C. K. Kane and E. J. Mele, Quantum spin Hall e_ect in graphene, Phys. Rev. Le tt. 95, 226801 (2005).

بررسی خواص الکترونی بیسموت تلوراید و آنتیموان تلوراید با در نظر گرفتن برهمکنش اسپین-مدار با استفاده از محاسبات اصول اولیه

کارگر ، راضیه[۱]؛رضایی رکن آبادی، محمود[۱]

[۱]دانشکده علوم دانشگاه فردوسی مشهد

چکیده

بیسموت تلوارید و آنتیموان تلوراید به دلیل داشتن نوار ممنوعه انرژی باریک به عنوان بهترین مواد ترموالکتریک شناخته شده تا کنون می باشند. بنابراین بررسی ساختار و خواص این مواد اهمیت بالایی دارد.در این مقاله با تکیه بر نظریه تابعی چگالی به محاسبه ساختار الکترونی این مواد بدون در نظر گرفتن برهمکنش اسپین – مدار و با در نظر گرفتن این اثر پرداخته شده است.این برهمکنش نقش بسزایی در ساختار نواری الکترونی و سطح انرژی این مواد دارد که در این تحقیق به بحث و بررسی می پردازیم.

First-principles calculations of electronic properties of Bi_2Te_3 and Sb_2Te_3 with spin-orbit interaction

Razie, Kargar1; Rezaei roknabadi, Mahmood[1]

[1]Department of Science, Ferdowsi University of Mashhad

Abstract

Bismuth telluride (Bi_2Te_3) and antimony telluride (Sb_2Te_3) because of having narrow band gap are known as best thermoelectric materials today. Therefore studying structure and properties of this material is very important. In this article density functional theory has been applied and we calculated electron band structure with and without spin- orbit interaction. This interaction has important role in band structure and energy of system that we discuss about them.

PACS NO (71)

مقدمه

در دهه های اخیر روی مواد ترموالکتریک تحقیقات زیادی انجام شده است. مواد ترموالکتریک می توانند انرژی گرمایی اتلافی را بدون هیچ قسمت متحرکی تبدیل به الکتریسیته نمایند. بهره وری مواد ترموالکتریک توسط مشخصه ضریب ارزشی ZT تعیین می گردد، که این ضریب توسط فرمول $ZT = \frac{\sigma S^2}{K}$ تعریف می شود که S ضریب سیبک ، σ رسانندگی الکتریکی ، K رسانندگی گرمایی که شامل هر دو جمله رسانندگی گرمایی الکتریکی و نوسانات شبکه بوده و T دمای مطلق می باشد. [۱]و[۲]

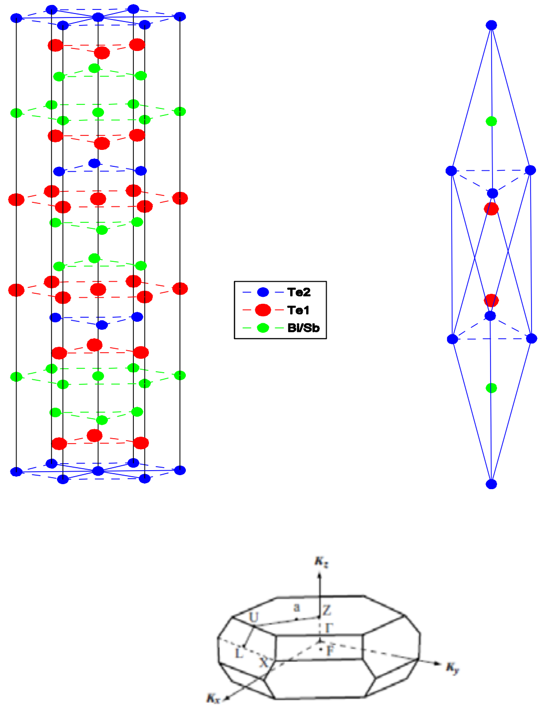
مواد Bi_2Te_3 و Sb_2Te_3 و همچنین آلیاژهای آنها به عنوان بهترین مواد ترموالکتریک شناخته شده می باشند که در دمای اتاق ZT حدود یک دارند. در دهه اخیر بهبود بهره وری این مواد به وسیله فناوری نانو حاصل شده است.[۱]

در این مقاله ابتدا به بررسی ساختار Bi_2Te_3 و Sb_2Te_3 پرداخته می شود و سپس با استفاده از اصول اولیه که اساس آن نظریه تابعی

چگالی است به محاسبه ساختار نواری الکترونی با در نظر گرفتن برهمکنش اسپین-مدار و بدون در نظر گرفتن آن پرداخته و به بررسی و تحلیل نتایج می پردازیم.

ساختار کریستالی

ساختار فضایی $(Bi/Sb)_2Te_3$ متعلق به گروه R_{3m} با ساختار شبکه هگزاگونال بوده که نظم ساختاری آن به صورت لایه ای بوده و از ۱۵ لایه اتمی تشکیل شده است. لایه های آن به ترتیب شامل اتم های Te1-Bi/Sb-Te2-Bi/Sb-Te1 می باشند که تشکیل یک بلوک می دهند، بلوک ها توسط نیروهای ضعیف واندروالسی به یکدیگر متصل شده اند که هر ساختار شامل ۳ بلوک می باشد. ساختار این ماده اغلب در محاسبات توسط سلول واحد رومبوهدرال توصیف می شود. در حالت رومبوهدرال سلول واحد اولیه آن شامل ۵ اتم می باشد که در مکان های: Te1=±(u,u,u)و Bi=±(v,v,v)و Te2=(0,0,0) قرارگرفته اند.[۲] و[۳]. ثابت های شبکه ساختار در جدول۱ نشان داده شده است.



شکل۱:ساختار کریستالی $(Bi/Sb)_2Te_3$ با سلول واحد هگزاگونال و رومبوهدرال و شبکه وارون در حالت رومبوهدرال

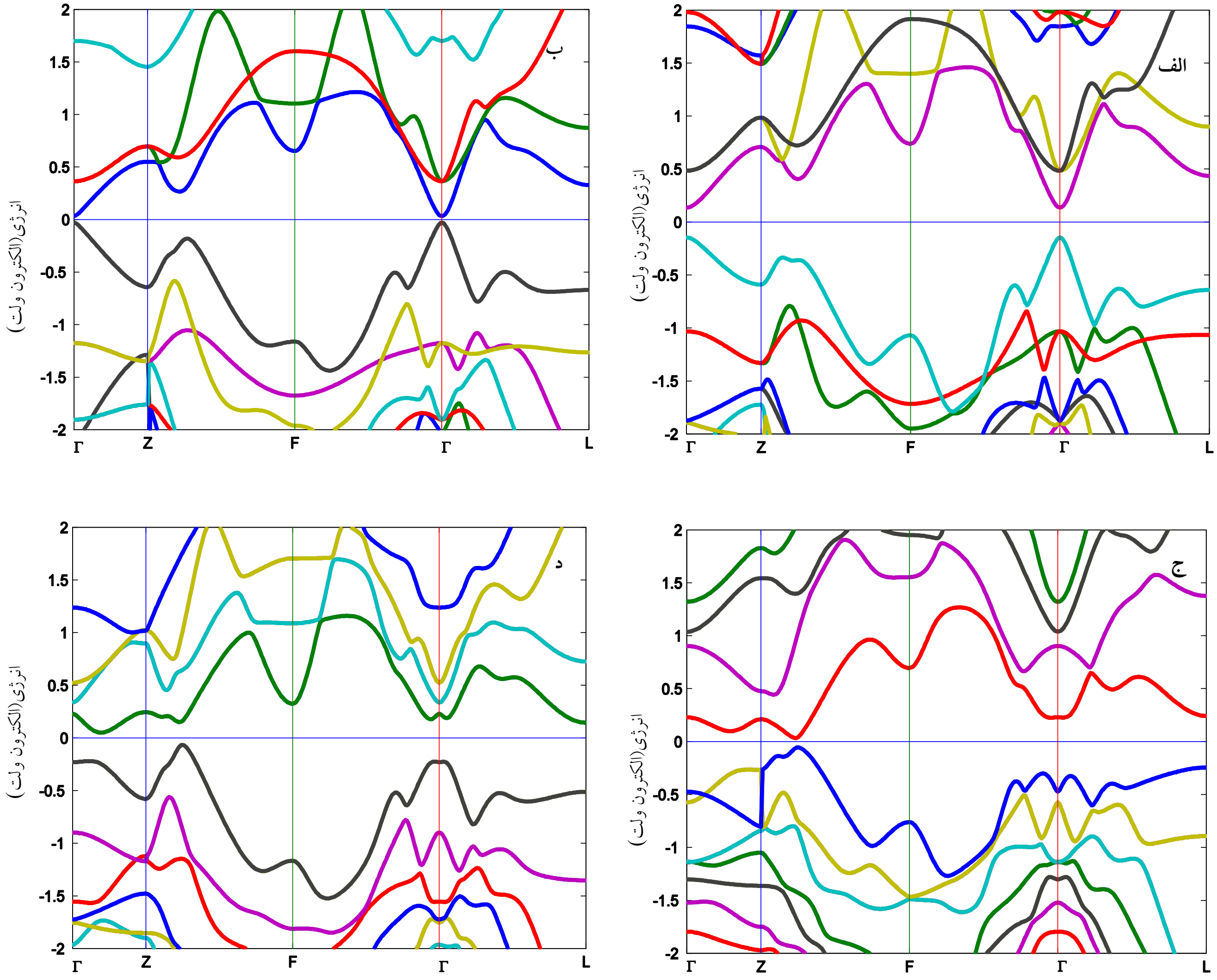
جدول۱:ثابت های شبکه ساختار $(Bi/Sb)_2Te_3$ [۴]و[۵]و[۸]

	ساختار هگزاگونال		ساختار رومبوهدرال			
	$a_h(Å)$	$c_h(Å)$	$a_R(Å)$	θ_R	V(A)	u(A)
Bi_2Te_3	٤.٣٨	٣٠.٥٠	١٠.٤٨	٢٤.١٧°	٠.٤٠٠	٠.٢١٢
Sb_2Te_3	٤.٢٥٠	٣٠.٣٥	١٠.٤٣	٢٣.٥٢°	٠.٤٠٠	٠.٢١١

روش انجام محاسبات

در این تحقیق محاسبات بر اساس اصول اولیه و نظریه تابعی چگالی انجام گرفته است. محاسبات با تقرب چگالی موضعی (LDA) و تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) انجام شد و این نتیجه حاصل شد که برای این مواد شبه پتانسیل هایی که بر اساس تقریب شیب تعمیم یافته بدست آمده مناسب می باشند. در این تحقیق از شبه پتانسیل هایی از نوع scalar relativistic که نوع تابعی آن (PBE) Perdew-Burke-Ernzerhof می باشد، استفاده کردیم. سلول واحد اولیه به صورت رومبوهدرال و با ثابت های شبکه مطابق باجدول ۱ در نظر گرفته شد و انرژی جنبشی قطع صفحات موجی را ٤٠ ریدبرگ قرار دادیم. ریلکس سازی و محاسبات خود سازگار با استفاده از نقاط شبکه وارون با ابعاد ۱۱×۱۱×۱۱صورت گرفت. ساختار نواری الکترونی بدست آمده در شکل ۲-الف و۲-ب نشان داده شده است.

در مرحله بعد برای در نظر گرفتن برهمکنش اسپین- مدار از شبه پتانسیل هایی از نوع fully relativistic استفاده کرده و پارامترهای مربوط به برهمکنش اسپین- مدار را اضافه نمودیم. ساختار نواری الکترونی با در نظر گرفتن برهمکنش اسپین- مدار در شکل ۲-ج و ۲-د نشان داده شده است.



شکل۲: ساختار نواری الکترونی(الف) Bi_2Te_3 بدون در نظر گرفتن برهمکنش اسپین– مدار (ب)Bi_2Te_3 با در نظر گرفتن برهمکنش اسپین–مدار (ج) Sb_2Te_3 بدون در نظر گرفتن برهمکنش اسپین– مدار (د)Sb_2Te_3 با در نظر گرفتن برهمکنش اسپین–مدار

تحلیل و بررسی نتایج و نمودار ها

محاسبه ساختار الکترونی در راستایی که سیستم دارای تقارن بالاست صورت گرفته که شامل راستای Γ-Z-F-Γ-L می باشد. همانطور که در شکل۲ مشاهده می شود، بدون در نظر گرفتن برهمکنش اسپین مدار در راستای گاما نوارهای انرژی دارای بیشینه مقدار مربوط به الکترون های ظرفیت و کمینه مقدار مربوط به الکترون های رسانش می باشند و در این راستا نوار ممنوعه مستقیم داریم. علاوه بر آن در در نقاط مختلفی از این نوارها تبهگنی مشاهده می شود.

با در نظر گرفتن برهمکنش اسپین – مدار که نیاز به محاسبات طولانی تر داشته و حافظه بیشتری از کامپیوتر را نیاز دارد، ساختارهای نواری الکترونی تغییر کرد که در شکل های ۲–ج و ۲–د نشان داده شده است.

بنابراین برهمکنش اسپین–مدار نقش عمده ای در خواص الکترونی وبه تبع در خواص فونونی و ترموالکتریکی این مواد ایفا می کند. در واقع این اثر مربوط به برهمکنش میدان مغناطیسی هسته با میدان مغناطیسی ناشی از حرکت الکترون ها می باشد.

با اضافه کردن این برهمکنش به محاسبات همان طور که در شکل ها مشاهده می شود، فاصله نوارهای انرژی از یکدیگر بیشتر شده وتبهگنی ها تا حد زیادی از بین می رود. علاوه بر آن در این حالت مکان و پهنای نوار ممنوعه نیز تغییر می کند. داده های مربوطه در جدول ۲ نشان داده شده است.

با توجه به داده ها مشاهده می شود که با افزودن اثر اسپین- مدار پهنای نوار ممنوعه به مقادیر تجربی نزدیک تر می شود.

جدول۲: پهنای نوار ممنوعه و انرژی فرمی $(Bi/Sb)_2Te_3$

	Sb_2Te_3	Sb_2Te_3	Bi_2Te_3	Bi_2Te_3
روش محاسبات	GGA+SO	GGA	GGA+SO	GGA
پهنای نوار ممنوعه(ev)	۰.۲۳	۰.۰٦	۰.۱۰	۰.۲۸
انرژی فرمی(ev)	٦.٧٨	٦.۰٧	۹.۲۲	۹.٤۲
پهنای نوار ممنوعه تجربی(ev)	۰.۲۸ [٦]		۰.۱۵ [٧]	

نتیجه گیری

در این تحقیق به بررسی ساختار الکترونی با استفاده اصول اولیه ونظریه تابعی چگالی پرداخته شده است. با استفاده از این روش ساختار نواری الکترونی $(Bi/Sb)_2Te_3$ را که سلول واحد اولیه آن به صورت ساختار رومبوهدرال در نظر گرفته شد، با در نظر گرفتن برهمکنش اسپین مدار بدست آوردیم که در شکل های ۲ نشان داده شده است. این اثر به دلیل جرم اتمی بزرگ عناصر Bi,Te,Sb در این محاسبات تاثیر بسزایی دارد. با در نظر گرفتن برهمکنش اسپین - مدار به هامیلتونین سیستم جمله برهمکنشی اضافه می شود که انرژی سیستم را تغییر داده و فاصله نوارهای انرژی از یکدیگر بیشتر می گردد و تبهگنی سیستم را کاهش می دهد. در مورد Bi_2Te_3 این اثر باعث کاهش پهنای نوار ممنوعه می گردد و علاوه بر آن مکان نوار ممنوعه نسبت به حالت بدون اسپین جا به جا شده و در راستای تقارنی Z-F قرار می گیرد. در مورد Sb_2Te_3 برهمکنش باعث افزایش پهنای نوار ممنوعه شده و مکان آن را تغییر می دهد.

سپاسگزاری

با تشکر از راهنمایی های صمیمانه آقای مهندس علی داوری عدالت پناه و سرکار خانم تکتم مرشدلو و دانشجویان آزمایشگاه لایه نازک آنگستروم دانشگاه فردوسی مشهد

مرجع‌ها

[۱] D. M. Rowe , Ph. D., D. SC *“ CRC Handbook of THERMOELECTRICS ”* . (1990)
[۲] B. Qiu. and X.Ruan. , Physical Review B **80.** 165203 (2009)
[۳]W. Cheng. and S-F. Ren , Physicsl Review B **83.** 094301 (2011)
[۴] Xin Luo, Michael B. Sullivan, and Su Ying Quek. Physical Review B **86**. 184111 (2012)
[۵] V. Chis, I. Yu. Sklyadneva, K. A. Kokh, V. A. Volodin, O. E. Tereshchenko, E. V. Chulkov ,Physical review B **86**. 174304 (2012)
[۶] Min Sik Park, Jung-Hwan Song, Julia E. Medvedeva,Miyoung Kim, In Gee Kim, and Arthur J. Freeman , Physical Review B **81**. 155211 (2010)
[۷] L.M. Goncalves, C. Couto , P. Alpuim , A.G. Rolo , Friedemann Völklein , J.H. Correia ,” *Optimization of thermoelectric properties on Bi2Te3 thin films deposited by thermal co-evaporation*”(2006)
[۸] Wei Zhang, Rui Yu, Hai-Jun Zhang, Xi Dai and Zhong Fang ,” *First-principles studies of the three-dimensional strong topological insulators Bi2Te3, Bi2Se3 and Sb2Te3”* New Journal of Physics **12** (2010) 065013 (14pp) (2010)

بررسی ابتدا به ساکن انتقال بار بین-جایگاهی و خواص الکتریکی و مغناطیسی $TbCu_3Fe_4O_{12}$

رضائی ، نفیسه[۱] ؛ آریتا، ریوتارو[۲] ؛ هاشمی‌فر ، سیدجواد[۱] ؛ اکبرزاده ، هادی[۱]

[۱] دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی اصفهان ، ایران

[۲] دانشکده فیزیک کاربردی، دانشگاه توکیو، ژاپن

چکیده

با استفاده از محاسبات ابتدا به ساکن بر پایه نظریه تابعی چگالی به بررسی ویژگی‌های الکتریکی، مغناطیسی و انتقال بار بین-جایگاهی در ساختار پروسکایت دوگانه $TbCu_3Fe_4O_{12}$ می‌پردازیم. نتایج تجربی نشان می‌دهد که کاهش دما تا حد ۲۳۵K منجر به انتقال بار از Cu به Fe در این ترکیب می‌شود. نتایج محاسباتی ما نشان می دهد که هیبریدشدگی اربیتال‌ها نقش مهمی در این انتقال بار دارد و انتقال بار به صورت $3d^9+4(d^5L^{0.75})\rightarrow 3(d^9L)+4d^5$ (که در آن L نشان‌دهنده حفره لیگاند است) انجام می‌گیرد. این انتقال بار منجر به گذار فاز از حالت فری‌مغناطیس به حالت پادفرومغناطیس همراه با گذار فلز-عایق می‌شود.

First-principles Investigation of Intersite Charge Transfer and Electrical and Magnetic Properties in $TbCu_3Fe_4O_{12}$

Rezaei, Nafise[1]; Arita, Ryotaro[2]; Hashemifar, S. Javad[1]; Akbarzadeh, Hadi[1]

[1] Department of Physics, Isfahan University of Technology, Isfahan, Iran
[2] Department of Applied Physics, University of Tokyo, Tokyo, Japan

Abstract

We study the electrical and magnetic properties and A-B intersite charge transfer in $TbCu_3Fe_4O_{12}$ double perovskite by using first-principle calculations based on density functional theory. Experimental observations show an intersite charge transfer from Cu to Fe at reduced temperature of about $T_c\approx 235K$. Our findings reveal that the orbital hybridization plays an important role in this charge transfer and the charge transfer is happened as $3d^9+4(d^5L^{0.75})\rightarrow 3(d^9L)+4d^5$ (L indicates the ligand hole). This intersite charge transfer leads to a ferrimagnetism-to-antiferomagnetism along with metal-to-insulator isostructural phase transition.

PACS No.

مقدمه

ساختارهای پروسکایت دوگانه با فرمول شیمیایی $AA'_3B_4O_{12}$ به دلیل نظم‌های ساختاری خاص و ویژگی‌های فیزیکی متنوع توجه زیادی را به خود جلب کرده‌اند[۲،۱]. در این ترکیبات کاتیون‌های A و ʹA به نسبت ۳:۱ در مکان A یک ساختار پروسکایت ساده‌ی (ABO_3) قرار دارند. بر خلاف مکان A در یک پروسکایت ساده که معمولاً با عناصر فلزات قلیایی، قلیایی خاکی و یا خاک‌های نادر اشغال می‌شود، در این دسته از مواد ʹA می‌تواند توسط کاتیون‌های فلز واسطه از قبیل Cu^{+2} و Mn^{+3} اشغال شود. بنابراین برهمکنش‌های جدید A'-A' و A'-B علاوه بر همکنش B-B ویژگی‌های جدیدی را ایجاد خواهند کرد. به عنوان مثال مغناطومقاومت بزرگ تحت میدان مغناطیسی ضعیف در ترکیب‌های $La/BiCu_3Mn_4O_{12}$ ناشی از برهمکنش پاد-فرومغناطیس بین اسپین‌های Cu در مکان 'A و Mn در مکان B است[۴،۳]. $CaCu_3Fe_4O_{12}$ که اولین اکسید Fe^{4+} کشف شده است، با کاهش دما یک گذار فاز به یک حالت فری‌مغناطیس با تسهیم نامتوازن بار ($2Fe^{4+}\rightarrow Fe^{3+}+Fe^{5+}$) در دمای ۲۱۰K نشان می‌دهد[۵]. اخیراً یامادا و همکارانش [۶] دسته‌ایی از مواد $LnCu_3Fe_4O_{12}$ (Ln = لانتانید) را مورد بررسی قرار داده‌اند. نتایج آن‌ها نشان می‌دهد که تمامی ساختارها در دمای بالا به صورت $Ln^{3+}Cu^{2+}_3Fe^{3.75+}_4O^{2-}_{12}$ هستند. با کاهش دما در ترکیبات با یون بزرگ (Ln=La, Pr, Nd, Sm, Eu, Cd, Tb)

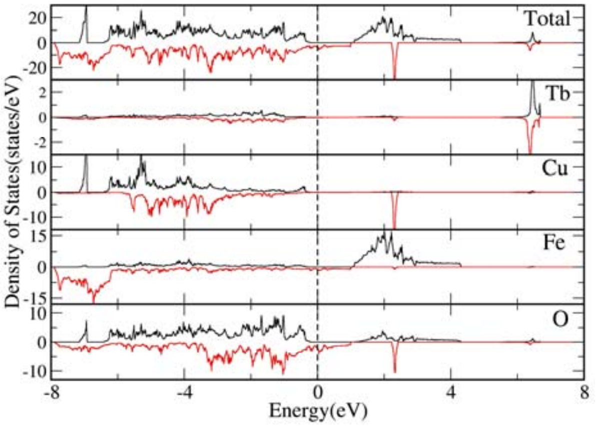
یک انتقال بار $3Cu^{2+}+4Fe^{3.75+}\rightarrow 3Cu^{3+}+4Fe^{3+}$ رخ می‌دهد. دمای گذار با کاهش اندازه یون Ln از ۳۶۰ تا ۲۴۰ درجه کلوین کاهش می‌یابد. در ترکیبات با یون کوچک (Ln=Dy, Ho, Er, , Yb, Lu)تسهیم ناموازن بار $8Fe^{3.75+}\rightarrow 5Fe^{3+}+3Fe^{3+}$ بین اتم-های آهن صورت می‌گیرد. جالب توجه است که تنها با تغییر ۴/۱ اتم‌های مکان A در یک پروسکایت ساده ویژگی‌های ساختاری و مغناطیسی کاملاً متفاوتی به دست می‌آید. تسهیم ناموازن بار در دماهای بین ۲۵۰ تا ۲۶۰ درجه کلوین، همراه با گذار فلز به نیم-رسانا و پارامغناطیس به فری‌مغناطیس است. حال آنکه در گروه اول، انتقال بار همراه با گذار فلز به عایق و پارامغناطیس به پاد-فرومغناطیس است. ما از بین این گروه از مواد ساختار $TbCu_3Fe_4O_{12}$ با دمای گذار حدود ۲۳۵K را برای بررسی ویژگی‌های مغناطیسی، الکتریکی و انتقال بار انتخاب کرده‌ایم.

روش محاسبات

تمامی محاسبات حالت پایه با استفاده از نرم‌افزار محاسباتی VASP [۷] و بر پایه نظریه تابعی چگالی و روش شبه پتانسیل صورت گرفته است. انرژی قطع ۵۰۰eV برای بسط موج تخت و تابعی PBE برای انرژی تبادلی-همبستگی انتخاب شده است. منطقه بریلوئن با یک مش‌بندی منخرست-پک ۱۱×۱۱×۱۱تقسیم-بندی شده است. برای توصیف دقیق همبستگی قوی الکترون‌های 3d از روش GGA+U و مقادیر U_{Fe}=4eV وU_{Cu}=7eV استفاده شده است.

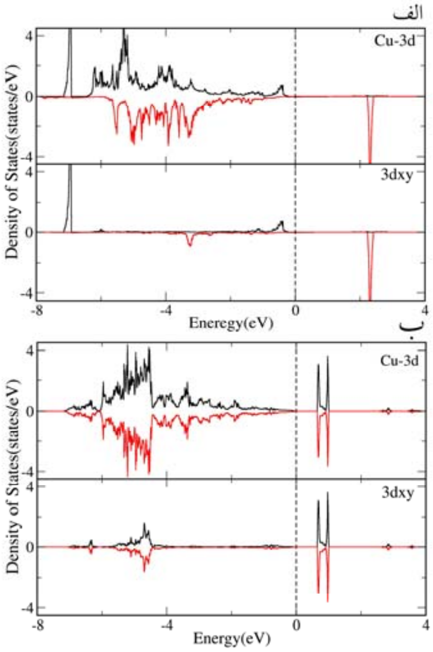
نتایج

تمامی محاسبات بر روی دو ساختار تجربی یکی در دمای پائین۱۰۰K($T<T_c$) و دیگری در دمای بالای ۳۰۰K($T>T_c$) انجام گرفته است. هر دو ساختار دارای تقارن مکعبی *Im-3* هستند. برای تعیین حالت پایه‌ی هر یک از ساختارها چندین پیکربندی مغناطیسی مورد بررسی قرار گرفت: حالت غیرمغناطیسی، به‌علاوه حالت فرومغناطیس و فری‌مغناطیس بین اتم‌های Cu-Fe و حالات پادفرومغناطیس نوع A، C و G بین اتم‌های Fe-Fe. پایدارترین



شکل1 : چگالی حالات کل و جزئی برای ساختار دمای بالا $TbCu_3Fe_4O_{12}$ در پیکربندی فری‌مغناطیس

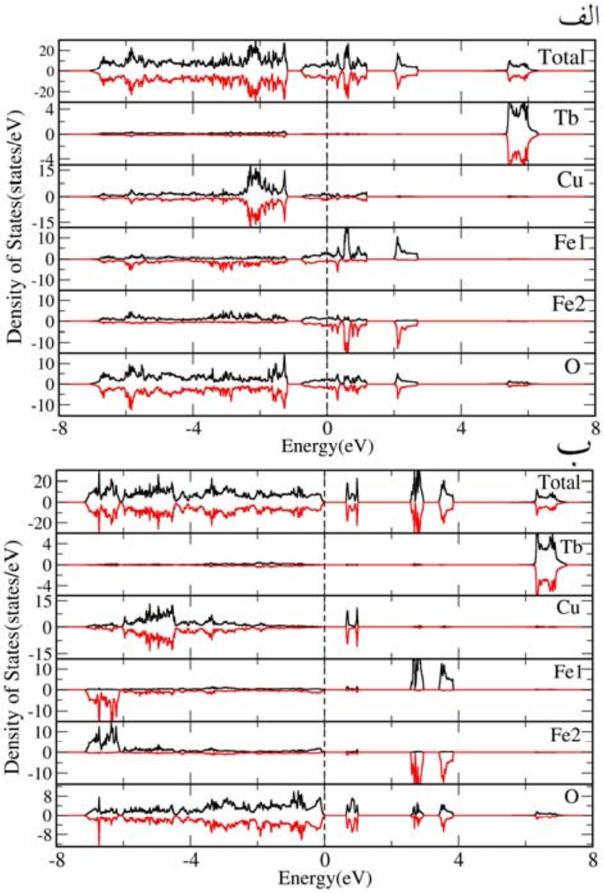
حالت ساختار دمای بالا در هر دو تقریب GGA و GGA+U حالت فری‌مغناطیس می‌باشد. شکل ۱ چگالی حالات کلی و جزئی پیکربندی فری‌مغناطیس در تقریب GGA+U را نمایش می‌دهد. سیستم در این پیکربندی نیم‌فلز است. در کانال اسپینی بالا هیچ چگالی حالتی در انرژی فرمی وجود ندارد، ولی در کانال اسپینی پائین سیستم به صورت فلزی رفتار می‌کند. در کانال اسپینی پائین ترازهای 3d اتم آهن در محدوده انرژی۷- eV تا ۱eV قرار دارند. این رفتار سازگار با حالت یونی $Fe^{3.75+}$ است. به علت برهمکنش پادفرومغناطیس بین اتم‌های Cu و Fe، در کانال اسپینی بالا تقریباً تمامی حالات Cu 3d اشغال شده‌اند. در حالی‌که در کانال اسپینی پائین تعدادی از حالات Cu 3d در محدوده‌ی انرژی ۶- eV تا ۱- eV قرار دارند و بخشی از حالات Cu 3d بالای تراز فرمی قرار دارند. این شکل سازگار با پیکربندی d^9 یون Cu^{2+} است. تحلیل چگالی حالات جزئی نشان می‌دهد که حالات اسپین پائین اشغال نشده دارای مشخصه Cu 3dxy است و بالاترین حالت اسپینی اشغال شده عمدتاً ناشی از سهم اربیتال‌های Cu 3dxy است(شکل۲ الف). در نتیجه اگر یک الکترون از اتم Cu بخواهد به Fe انتقال یابد، باید از بالاترین حالت اشغال شده(3dxy) جدا شود و این اربیتال از انرژی پائین‌تر از انرژی فرمی به حالات بالای انرژی فرمی انتقال می‌یابد. علاوه بر این چنانچه در شکل ۱ نمایش داده شده است یک هیبریداسیون بین اربیتال‌های اتم O 2p و Cu 3d در محدوده انرژی ۷eV- تا eV ۵/۲ وجود دارد .چگالی حالات اتم‌های Fe و O در محدوده‌ی



شکل۲ : چگالی حالات اربیتال Cu 3d و Cu 3dxyدر تقریب GGA+U در پیکربندی الف)فری‌مغناطیس ب) پادفرومغناطیس نوع G برای$TbCu_3Fe_4O_{12}$

انرژی یکسانی هستند که نشان‌دهنده‌ی برهمکنش‌های هیبریدی کووالانسی قوی است. ممان مغناطیسی آهن به اندازه‌ی μ_B۸۶/۳– و اتم مس به اندازه μ_B۶۴/۰ است. که هر دو مقداری کوچکتر از مقادیر مورد انتظاربرای $Fe^{3.75+}$ و برای Cu^{2+} است، که این امر ناشی از هیبریداسیون بین اتم Fe(Cu) با اتم O می‌باشد. حضور یک ممان مغناطیسی کوچک μ_B۰۴/۰– برروی اتم اکسیژن نیز موید این مطلب است.

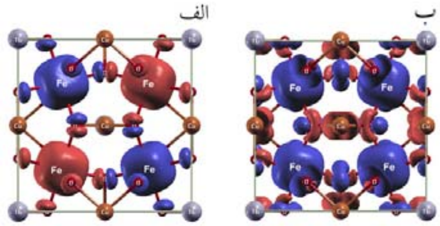
در دمای پائین، درتقریب GGA حالت فری‌مغناطیس به اندازه eV/F.U. ۶۳۴ پایدارتر از حالت پادفرومغناطیس نوع A است. این نتیجه در تضاد با نظم پاد فرومغناطیس مشاهده شده در تجربه می-باشد. با در نظر گرفتن اثرات همبستگی الکترونی(GGA+U) حالت پادفرومغناطیس نوع G به میزان ۴۲۱meV/F.U. پایدارتر از حالت فری‌مغناطیس می‌شود. بنابراین همبستگی الکترونی نقش مهمی را در به دست آوردن حالت پایه‌ی صحیح این سیستم داراست. چنانچه در شکل۳ نشان داده شده است، $TbCu_3Fe_4O_{12}$ در حالت پادفرومغناطیس نوع G در تقریب GGA فلز است که این رفتار در تضاد با رفتار عایق‌گونه مشاهده شده در تجربه می-باشد. حال آنکه در تقریب GGA+U این سیستم یک عایق باگاف



شکل۳ : چگالی حالات کلی و جزئی حالت پادفرومغناطیس نوع G ترکیب $TbCu_3Fe_4O_{12}$در تقریب الف) GGA ب)GGA+U

انرژی ۶۵/۰eV است. با اعمال U، در محاسبات اربیتال‌های 3d اتم Fe و Cu که در پائین انرژی فرمی قرار داشتند به انرژی‌های پائین‌تر انتقال می‌یابد. در حالی که اربیتال‌هایی که بالای انرژی فرمی هستند، با اعمال U به انرژی‌های بالاتر منتقل می‌شوند. در حالت کلی دو مکانیزم موجب به وجود آمدن جایگزیدگی الکترون‌ها می‌گردد: گذار مات، که در آن برهمکنش الکترون–الکترون موجب گذار فلز–عایق می‌شود و گذار اندرسون، که در آن گذار فلز–عایق ناشی از بی‌نظمی‌ها در یک سیستم الکترونی بدون برهمکنش است. بنابراین نتیجه می‌گیریم که $TbCu_3Fe_4O_{12}$ یک عایق مات است که در آن برهمکنش الکترون–الکترون نقش مهمی را در به دست آوردن حالت پایه عایق‌گونه ایفا می‌کند. بنابر نتایج بالا می‌توان گفت $TbCu_3Fe_4O_{12}$ یک گذار فلز–عایق همراه با تغییر حالت مغناطیسی از فری‌مغناطیس به پادفرومغناطیس نشان

می دهد که در آن همبستگی الکترونی برای به دست آوردن ویژگی الکترونی صحیح لازم است. همان‌گونه که می‌توان دید اتم Cu در پیکربندی پادفرومغناطیس نوع G به صورت غیر مغناطیسی است(شکل ۳ب). چگالی حالات جزئی اربیتال‌های Cu 3d در شکل ۲ رسم شده است. شکل ۲ب نشان می‌دهد که در دو کانال اسپینی بالا و پائین اربیتال Cu 3dxy بالاتر از انرژی فرمی قرار و این سازگار با پیکربندی d^8 یون Cu^{3+} است. در مقایسه با یون Cu^{2+} در حالت فری‌مغناطیس می‌توان گفت که اربیتال 3dxy اسپین بالا از انرژی‌های پائین‌تر از انرژی فرمی به انرژی‌های بالاتر از انرژی فرمی انتقال یافته‌اند. به علت برهمکنش پادفرومغناطیس بین اتم‌های Fe دو نوع اتم آهن در سیستم وجود دارد. برای سادگی تنها اتم Fe1 را مورد بررسی قرار می‌دهیم. تمامی ترازهای اسپین پائین Fe1 زیر انرژی فرمی قرار دارند. در حالی که در کانال اسپین بالا تمامی حالات بالای انرژی فرمی هستند(شکل ۳ب). این نشان می‌دهد که پیکربندی اتم Fe به صورت d^5 است. در مقایسه با پیکربندی $d^{4.25}$ در حالت فاز دمای بالا، الکترون‌هایی به اتم Fe شارش می‌یابند. در شکل می‌توان دید که سهمی از ترازهای کانال اسپین پائین Fe به انرژی‌های پائین‌تر انتقال یافته‌اند. نکته‌ی قابل توجه آن است که چگالی حالات اتم‌های Fe و O از نظر انرژی تبهگن‌اند و شکل‌های یکسانی را نمایش می‌دهند، که این نشان-دهنده‌ی برهمکنش‌های هیبریدی کووالانسی قوی بین آنها است. حالت هیبریدی اتم‌ها در پیکربندی فری‌مغناطیس نشان می‌دهد که اتم $Fe^{3.75+}$ باید به صورت پیکربندی الکترونی $d^5L^{0.75}$ به جای $d^{4.25}$ باشد و هم‌چنین یون Cu^{3+} باید به صورت پیکربندی الکترونی d^9L به جای d^8 در نظر گرفته شود. می‌توان گفت، در $TbCu_3Fe_4O_{12}$ انتقال بار یون‌های مس و یون‌های آهن ($3Cu^{2+} + 4Fe^{3.75+} \rightarrow 3Cu^{3+} + 4Fe^{3+}$)باید به صورت $3d^9 + 4(d^5L^{0.75}) \rightarrow 3(d^9L) + 4d^5$ در نظر گرفته شود که از طریق باز توزیع حفره‌های لیگاند از پیوند Fe-O به پیوندهای Cu-O صورت می‌گیرد، که این حالت مشابه اتفاقی است که در $LaCu_3Fe_4O_{12}$ [۹،۸] رخ می‌دهد. ممان مغناطیسی اتم Fe1 برابر با $-۱/۴\mu_B$ است که از مقدار مورد انتظار $۵\mu_B$ برای d^5 به دلیل اثرات هیبریداسیون با اکسیژن کوچک‌تر است. به‌طور کلی می‌توان نتیجه



شکل۴ : اختلاف چگالی بار سه بعدی $TbCu_3Fe_4O_{12}$ در تقریب GGA+U برای دو حالت مغناطیسی الف) پادفرومغناطیس نوع G ب)فری‌مغناطیس

گرفت که انتقال بار اتم Cu و Fe از طریق اربیتال‌های O 2p صورت می‌گیرد و هیبریداسیون نقش مهمی را در این فرآیند بازی می‌کند. شکل ۴ اختلاف چگالی بار اسپینی سه بعدی را در دو حالت فری‌مغناطیس و پادفرومغناطیس نشان می‌دهد. رنگ‌های قرمز و آبی به ترتیب کانال اسپینی بالا و پائین را نشان می‌دهد. همان‌گونه که در شکل می توان دید در حالت پادفرومغناطیس نوع G هیچ چگالی اسپینی بر روی اتم Cu وجود ندارد، در حالی که در حالت فری‌مغناطیس بارهای اضافی در کانال اسپین بالا بر روی اتم Cu را وجود دارد. مقایسه این دو شکل نشان‌دهنده‌ی انتقال بار به اتم Cuدر ساختار دمای بالاست.

نتیجه گیری

با محاسبات ابتدا به ساکن نشان دادیم که همبستگی قوی الکترونی اثر مهمی در تعیین حالت پایه دمای پائین ترکیب $TbCu_3Fe_4O_{12}$ دارد. ما پیش‌بینی می‌کنیم که حالت پایه دمای پائین آنتی-فرومغناطیس از نوعG باشد، که نیازمند بررسی‌های دقیق‌تر در تجربه می‌باشد. انتقال بار بین–جایگاهی‌از اتم Cu به Fe از طریق اتم O صورت می‌گیرد و این انتقال بار به صورت $3d^9 + 4(d^5L^{0.75}) \rightarrow 3(d^9L) + 4d^5$ و همراه با گذار فلز به عایق است.

مرجع‌ها

[1] Z. Zeng, M. Greenblatt, M. A. Subramanian and M. Croft; *Phys. Rev. Lett,* **82**, (1999) 314

[2] S. S. Homes, T. Vogt, S. M. Shapiro, S. Wakimoto and A. P. Ramirez; *Science* **151**, (2001) 323

[3] J. A. Alonso, J. Sanchez-Benitez, A. De Andres, M. J. Martinez-Lope, M. T. Casias and J. L. Martinez ; *Appl. Phys. Lett.* **83**, (2003) 2623

[4] K. Takata, I. Yamada, M. Azuma, M. Takano and Y. Shimakawa; *Phys. Rev. B.* **76**, (2007) 024429

[5] I. Yamada, K. Takata, N. Hayashi, S. Shinohara, M. Azuma, Sh. Mori, Sh. Muranaka, Y. Shimakawa and M. Takano; *Angew. Chem* **120**, (2008) 7140

[6] I. Yamada, H. Etani, K. Tsuchi, Sh. Marukawa, N. Hayashi, T. Kawakami, M. Mizumaki, K. Ohgushi, Y. Kusano, J. Kim, N. Tsuji, R. Takahashi, N. Nishiyama, T. Inoue, T. Irifune and M. Takano: *submitted to J. Am. Chem. Soc.*

[7] https://www.vasp.at/

[8] Y. W. Long, N. Hayashi, T. Saito, M. Azuma, S. Muranaka and Y. Shimakawa; *nature* ***458***, (2009) 60

[9] H. Li, Sh. Lv, Zh. Wang, Y. Xia, Y. Bai, X. Liu and J. Meng; *J. Appl. Phys* **111**, (2012) 103718

مطالعهٔ خواص اپتیکی $Sn_{1-x}Mn_xO_2$ با استفاده از نظریهٔ تابع چگالی

رستمی,منا ؛ قاضی,محمد ابراهیم ؛ ایزدی فرد,مرتضی

دانشکده فیزیک ، دانشگاه شاهرود ، انتهای بلوار هفت تیر ، شاهرود

چکیده

خواص اپتیکی اکسید قلع آلاییده با عنصر مغناطیسی Mn، با سه درصد آلایش: ۶/۲۵٪، ۱۲/۵٪ و ۱۸/۷۵٪ با استفاده از کد محاسباتی WIEN2k مورد بررسی قرار گرفت. نمودارهای بخش موهومی تابع دی‌الکتریک، طیف جذب اپتیکی و ضریب خاموشی نشان می‌دهند که با افزایش غلظت آلایش، تعداد سطوح انرژی ناخالصی نزدیک به سطح فرمی بالاتر می‌رود که موجب کاهش یافتن گاف نواری اپتیکی و همچنین جابه‌جایی قرمز در این نمونه ها می‌شود. با افزایش غلظت Mn، میزان جذب، بازتابندگی و ضریب شکست در نواحی کم انرژی از طیف، افزایش می‌یابد و سپس در انرژی های بالاتر کاهش می‌یابد.

Study of optical properties of $Sn_{1-x}Mn_xO_2$ using Density Functional Theory

Rostami,Mona ; Ghazi,Mohammad Ebrahim ; Izadifard,Morteza

Department of Physics , Shahrood University , Shahrood

Abstract

The optical properties of Mn doped SnO_2 with three concentrations: 6.25%, 12.5% and 18.75% were investigated using WIEN2k code. The Imaginary part of dielectric function, the optical absorption spectrum and extinction coefficient show that with increasing of dopant concentration, the energy levels of impurity near the Fermi level increase, that results in reduction of optical band gap and appearance of red shift. Which the increase of Mn concentration lead to increase in absorption, reflectivity and refractive index in low energy region of spectrum and reduction in high energy regions.

PACS No. (۷۰)

مقدمه

اکسید قلع نیمرسانای نوع n با گاف نواری پهن در حدود ۳/۶eV می‌باشد [۱]. ترکیب SnO_2 به دلیل شفافیت اپتیکی، رسانندگی شبه فلزی عالی و استحکام شیمیایی بالایی که دارا می‌باشد در بسیاری از قطعات الکترونیکی به کار می‌رود [۲]. این ترکیب دارای شفافیت بالا در ناحیهٔ مرئی و دارای بازتابندگی بالا در ناحیهٔ فروسرخ می‌باشد [۱]. خواص اپتیکی این ماده سبب می‌شود که کاندیدای مناسبی برای کاربردهای اپتوالکترونیک نظیر سلول‌های خورشیدی و نمایشگرهای صفحه تخت باشد [۳]. خواص اپتوالکترونیکی نظیر گاف نواری اپتیکی اکسید قلع می تواند با آلایش ناخالصی بهبود یابد [۴]. در این مقاله اثرات آلایش غلظت‌های متفاوت ناخالصی Mn بر خواص اپتیکی ترکیب SnO_2 مورد بررسی قرار گرفته است و رفتار مؤلفه‌های مهم اپتیکی: جذب، بازتابندگی، ضریب شکست و اتلاف انرژی در راستای [۱۰۰]، مورد تحلیل قرار گرفته است.

۱- روش انجام محاسبات

دراین مطالعه از نرم افزار WIEN2k که بر پایهٔ نظریهٔ تابع چگالی استوار است، استفاده شده است [۵]. محاسبات ساختار الکترونی و خواص مغناطیسی با استفاده از پتانسیل تبادلی همبستگی پردو بورک ارنزرهف (PBE)، در تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) انجام گرفته است. در محاسبات، پارامتر $R_{mt} \times K_{max}$ ، برابر با ۷ انتخاب شده است. بردار موج قطع برای بسط پتانسیل و چگالی بار

در ناحیهٔ بین جایگاهی، G_{max} =۱۷ $(a.u.^{-1})$ انتخاب شده است و برای همبستگی فضای k، از شبکه ای با مشخصهٔ نقاط k به صورت (۴×۳×۳) در منطقهٔ اول بریلوئن استفاده شده است. انرژی جداسازی بین حالات مغزه و ظرفیت Ry ۸- انتخاب شده است. SnO_2 دارای ساختار روتایل تتراگونال با گروه فضایی (P42/mnm) می‌باشد. ثابت های شبکه ای تجربی این ترکیب به صورت a=b=۴/۷۳۷ و c=۳/۱۸۶ بر حسب (Å) می‌باشند [۵]. برای انجام محاسبات، ابتدا موقعیت‌های اتمی و سپس ثابت های شبکه ای بهینه شده‌اند و نتایج با پارامترهای شبکه ای بهینه‌شده به دست آمده‌اند. محاسبات برای حالتی است که آلایش Mn منجر به خاصیت نیمرسانایی از نوع p در سیستم‌ها می‌شود [۴].

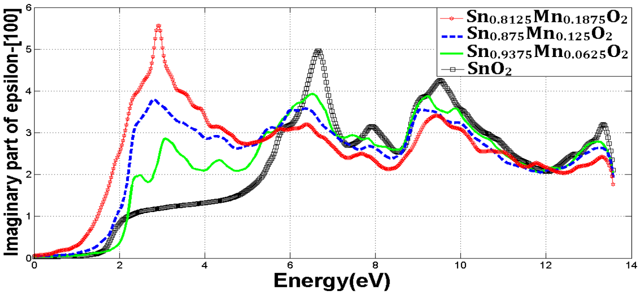
۲- بررسی تابع دی‌الکتریک

تابع دی‌الکتریک، پاسخ بلور به میدان الکترومغناطیس خارجی با انرژی $\hbar\omega$ می‌باشد و به طور شناخته شده به فرم مختلط؛ $\varepsilon(\omega)=\varepsilon_r(\omega)+i\varepsilon_i(\omega)$ معرفی می‌شود [۶]. بخش حقیقی تابع دی‌الکتریک $\varepsilon_r(\omega)$ با استفاده از $\varepsilon_i(\omega)$ از رابطهٔ کرامرز کرونیک زیر به دست می‌آید، p بخش اصلی انتگرال است [۷]:

$$\varepsilon_r(\omega)=1+\frac{2}{\pi}P\int_0^{\infty}\frac{\omega'\varepsilon_i(\omega')}{\omega'^2-\omega^2}d\omega' \quad (۱)$$

در شکل(۱) طیف اپتیکی مربوط به $\varepsilon_i(\omega)$ برای SnO_2 خالص و SnO_2 آلاییده با Mn به ازای غلظت های ۰/۰۶۲۵، ۰/۱۲۵ و ۰/۱۸۷۵، در راستای [۱۰۰] نمایش داده شده است. انرژی وقوع اولین قله در ساختارهای آلاییده با غلظت ۰/۰۶۲۵، ۰/۱۲۵ و ۰/۱۸۷۵ به ترتیب برابر با ۲/۴۸۹۸۴eV، ۲/۸۱۶۳۸eV و ۲/۸۹۸۰۱eV و در ساختار خالص برابر با ۶/۶۵۳۱۹۰eV می‌باشد. در ساختار خالص و ساختارهای آلاییده، اولین قله در محدودهٔ انرژی های بالاتر از ۶/۳۸eV، مربوط به انتقال الکترون از حالت O:۲p به حالت Sn:۵s می‌باشد. قله های بعدی مختص به ساختار خالص و ساختارهای آلاییده، می‌تواند مربوط به انتقال الکترون از حالت O:۲p به حالت Sn:۵p، از حالت O:۲s به حالت Sn:۵s و از حالت Mn:۳d به حالت Sn:۵p باشد. با افزایش غلظت آلایش، مقدار $\varepsilon_i(\omega)$ در اولین قله افزایش می‌یابد. به ازای انرژی های بالاتر در طیف اپتیکی، در مورد ساختارهای آلاییده، با افزایش غلظت آلایش، تعداد نوارهای انرژی مربوط به ناخالصی بیش تر می‌شود که منجر به افزایش سطوح انرژی برای انتقال الکترون از نوار ظرفیت به نوار رسانش می‌شود. با افزایش غلظت آلایش، احتمال آنکه گذارهای بین نواری مربوط به نوارهای ناخالصی باشد، بیش‌تر است، به ویژه آن که گذار اپتیکی الکترون می‌تواند به طور غیر مستقیم نیز انجام گیرد، زیرا حامل های اکثریت (حفره ها) طبق نتایج به دست آمده در این کار، دارای گاف‌نواری غیرمستقیم می‌باشند. بنابراین افزایش سطوح انرژی ناخالصی در نوارهای رسانش و ظرفیت و افزایش گذار اپتیکی غیر مستقیم با افزایش غلظت آلایش، در وقوع این پدیده عامل مؤثر می‌باشند که، قله‌های بعدی مربوط به غلظت‌های مختلف در نمودار $\varepsilon_i(\omega)$ کاهش می‌یابد و جابه‌جایی قرمز در طیف اپتیکی ظاهر می‌گردد و همانطور که در شکل مشاهده می‌شود، گاف‌نواری اپتیکی کاهش می‌یابد [۴]. طبق نتایج به دست آمده در راستای این مطالعه، آلایش Mn در سیستم سبب هیبریدشدگی حالت های O:۲p و Mn:۳d می‌شود. می‌توان نتیجه گرفت که اولین گذار در نمونه‌های آلاییده، از حالت Mn:۳d به حالت Sn:۵s می‌باشد.

در شکل(۲) طیف اپتیکی مربوط به $\varepsilon_r(\omega)$ در راستای [۱۰۰] نمایش داده شده است، مقدار ثابت دی‌الکتریک استاتیک در نمونهٔ خالص و نمونه های آلاییده به ازای غلظت های ۰/۰۶۲۵، ۰/۱۲۵ و ۰/۱۸۷۵ به ترتیب برابر با ۳/۷۴، ۴/۱۵، ۴/۷۴ و ۵/۴۷ می‌باشد.



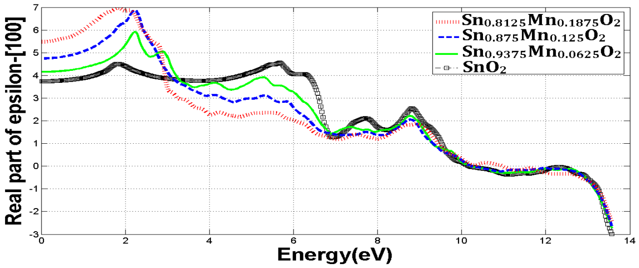
شکل(۱) نمودار بخش موهومی تابع دی الکتریک بر حسب انرژی در ترکیب $Sn_{1-x}Mn_xO_2$.

۳- بررسی تابع جذب

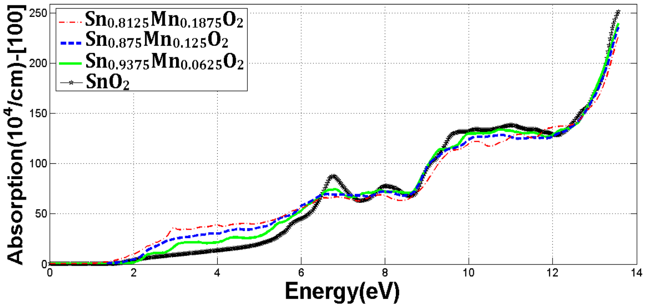
ضریب جذب $I(\omega)$، با استفاده از توابع دی‌الکتریک $\varepsilon_r(\omega)$و $\varepsilon_i(\omega)$، از رابطهٔ زیر به دست می‌آید [۵]:

$$I(\omega)=\sqrt{2}\,\frac{\omega}{c}\left[\sqrt{\varepsilon_r^2(\omega)+\varepsilon_i^2(\omega)}-\varepsilon_r(\omega)\right]^{0.5} \quad (۲)$$

در شکل(۳) نمودار جذب بر حسب انرژی در راستای [۱۰۰] نمایش داده شده است. با افزایش غلظت آلایش، طیف جذب اپتیکی دارای جابه‌جایی قرمز می‌باشد. جابه‌جایی قرمز در طیف جذب اپتیکی مربوط به ساختارهای آلاییده، متناظر با تغییرات گاف‌نواری مستقیم در حامل‌های اکثریت می‌باشد. مطابق شکل، با افزایش غلظت آلایش، گاف نواری اپتیکی کاهش می‌یابد. از انرژی ۰ تا ٦/٤٨eV با افزایش غلظت آلایش میزان جذب افزایش می‌یابد و از انرژی ٦/٤٨eV تا ۱۲eV با افزایش غلظت آلایش میزان جذب کاهش می‌یابد. نتایج به دست آمده، دارای توافق مناسب با نتایج تجربی و نظری گزارش شده می‌باشد [١،٤].



شکل(۲) نمودار بخش حقیقی تابع دی الکتریک بر حسب انرژی در ترکیب $Sn_{1-x}Mn_xO_2$.



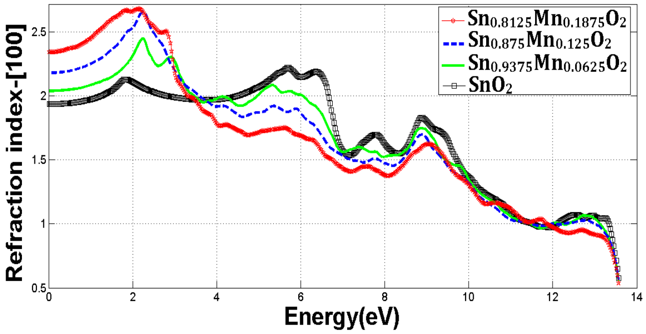
شکل(۳) نمودار طیف جذب اپتیکی در ترکیب $Sn_{1-x}Mn_xO_2$.

٤- بررسی ضریب شکست و ضریب خاموشی

بخش حقیقی شاخص شکست (n)، نشانگر میزان انتشار امواج می‌باشد و بخش موهومی شاخص شکست (k)، پاشندگی امواج الکترومغناطیس را نشان می‌دهد [۷]. روابط ضریب شکست و ضریب خاموشی به صورت زیر می‌باشد [٦] :

$$n=\sqrt{\frac{1}{2}\left(\varepsilon_r+\sqrt{\varepsilon_r^2+\varepsilon_i^2}\right)},k=\sqrt{\frac{1}{2}\left(-\varepsilon_r+\sqrt{\varepsilon_r^2+\varepsilon_i^2}\right)} \quad (۳)$$

نمودار ضریب شکست محاسبه شده در راستای [۱۰۰] در شکل(٤) نمایش داده شده است. نسبت‌های دامنه های امواج بازتابیده و عبوری به دامنهٔ موج فرودی توسط ضریب شکست آن محیط تعیین می‌گردد [٦]. با افزایش غلظت آلایش، میزان ضریب شکست استاتیک افزایش می‌یابد. از انرژی ۱/٥eV تا ۳eV (محدودهٔ تابش امواج مرئی)، با افزایش غلظت آلایش، ضریب شکست ماده بیش تر می‌شود. از انرژی ٤eV تا ۱۰eV با افزایش غلظت آلایش، ضریب شکست ماده کاهش می‌یابد. بیش ترین مقدار ضریب شکست ماده برای غلظت های ۰/۰٦۲٥، ۰/۱۲٥، ۰/۱۸۷٥ در گسترهٔ انرژی ۰ تا ١٤eV به ترتیب در انرژی های ۲/۲٤eV، ۲/۲٤eV و ۲/۱۳eV رخ می‌دهد. نمودار ضریب خاموشی در راستای [۱۰۰] در شکل(٥) نمایش داده شده است. در شکل(٦) مقایسهٔ سه شاخص اپتیکی: بخش موهومی تابع دی‌الکتریک، ضریب خاموشی و جذب برای آلایش ۱۸/۷٥٪ نشان داده شده است. مقایسهٔ منحنی ضریب خاموشی $k(\omega)$ با منحنی جذب $I(\omega)$ نشان دهندهٔ آنست که شاخص اپتیکی $k(\omega)$ معیاری از میزان جذب امواج می‌باشد و قله‌های مربوط به شاخص اپتیکی $k(\omega)$ متناظر با قله‌های مربوط به نمودار طیف جذب می‌باشد. مقایسهٔ منحنی $\varepsilon_i(\omega)$ با منحنی $I(\omega)$ نشان دهندهٔ آنست که شاخص اپتیکی $\varepsilon_i(\omega)$ توصیف کنندهٔ جزئیات انتقال واقعی بین حالت های الکترونی اشغال شده و حالت های الکترونی اشغال نشده می‌باشد [۸].



شکل(٤) نمودار ضریب شکست برحسب انرژی در ترکیب $Sn_{1-x}Mn_xO_2$.

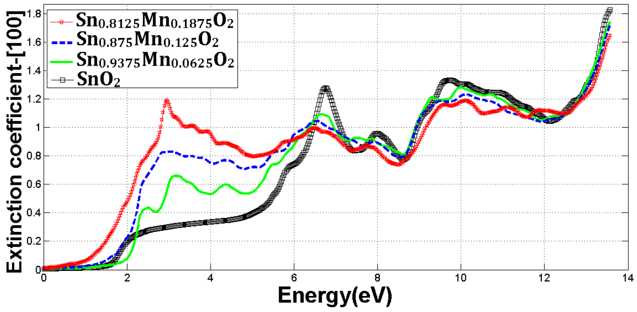
٥- بررسی بازتابندگی

بازتابندگی $R(\omega)$ تحت تابش عمود امواج الکترومغناطیس، به صورت رابطهٔ زیر تعریف می‌شود [۷]:

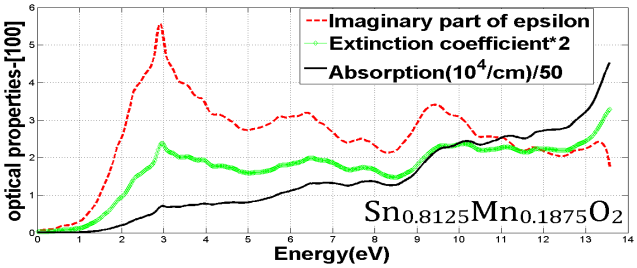
$$R(\omega)=(1-n)^2+k^2/(1+n)^2+k^2 \quad (٤)$$

نمودار بازتابندگی اپتیکی در راستای [۱۰۰]، در شکل(۷) نمایش داده شده است. در محدودهٔ انرژی ۰ تا ٥/۲٦eV با افزایش غلظت آلایش، بازتابندگی افزایش می‌یابد، در محدودهٔ انرژی ٥/۲٦eV تا

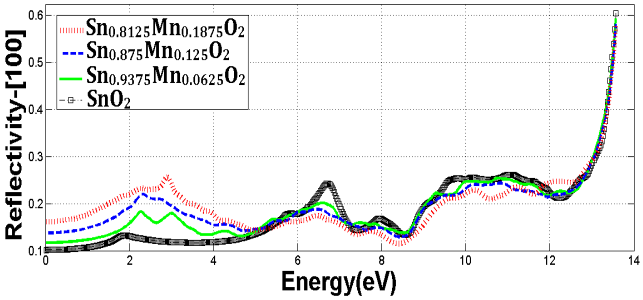
۱۲eV با افزایش غلظت آلایش، بازتابندگی کاهش می یابد و در انرژی ۱۳/٦eV بازتابندگی نمونه‌ها به ٦۰٪ می رسد.



شکل(۵) نمودار ضریب خاموشی برحسب انرژی در ترکیب $Sn_{1-x}Mn_xO_2$.



شکل(٦) مقایسهٔ سه شاخص اپتیکی در ترکیب $Sn_{0.8125}Mn_{0.1875}O_2$.



شکل(۷) نمودار بازتابندگی برحسب انرژی در ترکیب $Sn_{1-x}Mn_xO_2$.

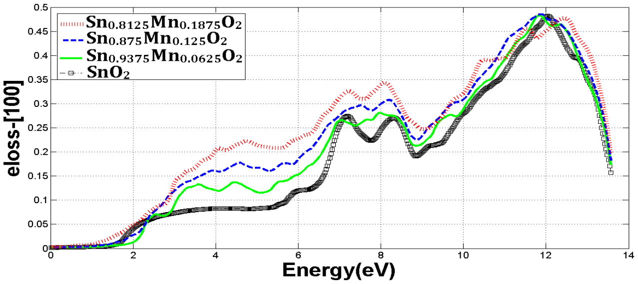
٦- بررسی اتلاف انرژی

منحنی اتلاف انرژی، فاکتور مهمی است که قله‌های مربوط به طیف اتلاف انرژی توصیف کنندهٔ پارامترهای مربوط به پاسخ پلاسما می‌باشد. فرکانسی که در آن $\varepsilon_r(\omega)$ برای ماده از وضعیت $\varepsilon_r(\omega)\succ 0$ به وضعیت $\varepsilon_r(\omega)\prec 0$ تغییر می‌کند، فرکانس پلاسمایی ω_p نامیده می‌شود [۵]. منحنی اتلاف انرژی در راستای [۱۰۰]، در شکل(۸) نمایش داده شده است. مطابق شکل(۸) و با توجه به منحنی $\varepsilon_r(\omega)$ در شکل(۲) ، برای نمونهٔ خالص و نمونه های آلاییده با غلظت‌های ۰/۰٦۲۵، ۰/۱۲۵ و ۰/۱۸۷۵ قله های مربوط به فرکانس پلاسمایی به ترتیب در انرژی‌های ۱۲/۰٤eV، ۱۱/۸۲eV، ۱۱/۸۷eV و ۱۲/٤۲eV رخ می‌دهد. در انرژی های بالاتر از انرژی مربوط به فرکانس پلاسمایی، رفتار فلزی ماده به رفتار دی‌الکتریکی تغییر می‌کند [۵]. مقدار مربوط به تابع اتلاف انرژی از رابطهٔ زیر به دست می‌آید [۷]:

$$L(\omega)=\mathrm{Im}[-1/\varepsilon(\omega)]=\varepsilon_2(\omega)/\left(\varepsilon_1^2(\omega)+\varepsilon_2^2(\omega)\right) \quad (۵)$$

نتیجه گیری

خواص اپتیکی اکسید قلع آلایش یافته با منگنز به ازای غلظت های متفاوت ۰/۰٦۲۵، ۰/۱۲۵ و ۰/۱۸۷۵، با استفاده از نظریهٔ تابع چگالی و با نرم افزار WIEN2k بررسی شد. آلایش Mn در سیستم سبب هیبریدشدگی حالت های O:2p و Mn:3d می‌شود. افزایش غلظت آلایش منجر به افزایش سطوح انرژی نزدیک به سطح فرمی می‌شود و گاف نواری اپتیکی کاهش می‌یابد. افزایش گذارهای غیرمستقیم و افزایش سطوح انرژی با افزایش غلظت آلایش، سبب شیفت قرمز در لبهٔ جذب اپتیکی و همچنین پایین تر آمدن میزان جذب امواج در نواحی مشخص از طیف امواج الکترومغناطیس می‌شود. با سنجش میزان ضریب شکست، جذب، بازتابندگی و اتلاف در نواحی مختلف طیف، می‌توان خواص اپتوالکترونیکی ساختار آلاییده و خالص را مورد ارزیابی قرار داد.



شکل(۸) نمودار اتلاف انرژی برحسب انرژی در ترکیب $Sn_{1-x}Mn_xO_2$.

مرجع ها

[1] Ameer Azam, Arham S. Ahmed, Sami S. Habib, A.H. Naqvi; Journal of Alloys and Compounds 523 (2012) 83– 87.

[2] Yun-Li Zhang,Xiang-MingTao,Ming-QiuTan; Journal of Magnetism and Magnetic Materials 325 (2013) 7–12.

[3] Guanglei Zhang, Guoqiang Qin, Gang Yu, Qianku Hu, Hua Fu, Changtao Shao aThin; Solid Films 520 (2012) 5965–5970.

[4] Yao Lu, Pei-Ji Wang, Chang-Wen Zhang, Xian-Yang Feng, Lei Jiang, Guo-Lian Zhang; Physica B 406 (2011) 3137–3141.

[5] LU Peng-Fei, SHEN Yue, YU Zhong-Yuan, ZHAO Long, LI Qiong-Yao, MA Shi-Jia, HAN Li-Hong, LIU Yu-Min; Commun. Theor. Phys. 57 (2012) 145–150.

[6] *Foundations of Electromagnetic Theory Fourth Edition; John R.Reits, Frederick J. Milford, Robert W. Christy, Addison-Wesley, 1993; chapter 18,19.*

[7] *Electronic Structure and Magneto-Optical Properties of Solids; Victor Antonov, Bruce Harmon, Alexander Yaresko; chapter 1.*

[8] Zuo Chunying, Wen Jing, and Zhong Cheng; Journal of Semiconductors; Vol. 33, No. 7; July 2012.

بررسی رسانندگی گرمایی در نانو نوارهای گرافین دارای نقص تهی جا

ثابت وند، روزبه[۱]؛ مزینانی، سعیده[۲]؛ کمانی، داود[۱]

[۱] دانشکده مهندسی انرژی و فیزیک دانشگاه صنعتی امیرکبیر، خیابان حافظ، تهران

[۲] پژوهشکده نانو فناوری دانشگاه صنعتی امیرکبیر، خیابان ولیعصر، تهران

چکیده

در این کار سعی شده است تا به بررسی رسانندگی گرمایی در نانو نوارهای گرافین دارای نقص تهی جا در شبکه برحسب نوع لبه، درصد نقص و طول نانو نوار پرداخته شود. این بررسی با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی بر روی نمونه هایی به عرض ۳ و طولی متغییر بین ۱۰ تا ۲۰ نانومتر صورت پذیرفته است که محاسبات صورت پذیرفته به کمک روش گرین - کوبو نمایانگر رسانش گرمایی بالا در این نانو ساختارها می باشد. همچنین نتایج بدست آمده نشانگر وابستگی رسانندگی گرمایی نانو نوار گرافینی به نوع لبه، درصد نقص و طول نمونه می باشد.

The Study of Thermal Conductivity in Graphene Nanoribbons with Vacancy Defect

Roozbeh, Sabetvand[1] ; Saeedeh, Mazinani[2] ; Davoud Kamani[1]

[1] Department of Energy Engineering and Physics, Amirkabir University of Technology, Tehran
[2] Amirkabir Nanotechnology Research Institute (ANTRI) , Amirkabir University of Technology , Tehran

Abstract

In this work we study thermal conductivity of graphene nanoribbons in two conditions: with regular lattice and with vacancy defect. By the help of Molecular Dynamic simulation (MD), we simulated nanoribbons with 3 nm width and 10-20 nm lengths. Our results with green-kubo approach show high thermal conductivity for these nano-structures and demonstrate thermal conductivity dependence to kind of graphene edge, defect rate and length of sample.

PACS: 73.22.Pr

مقدمه

گرافین یک ساختار تک لایه از اتم های کربن می باشد که درآن اتم ها در یک شبکه ی لانه زنبوری شش گوشه به وسیله ی پیوند کووالانسی استقرار یافته اند. این ساختار برای اولین بار در سال ۲۰۰۴ توسط پژوهشگران دانشگاه منچستر تولید شد[1] و از آن پس به دلیل قابلیت های الکتریکی، مکانیکی، گرمایی و اپتیکی مناسب مورد توجه بسیاری از پژوهشگران قرار گرفت[2]. از طرفی بدین دلیل که تکنولوژی روز دنیا به سمت طراحی های نانومتریک حرکت می کند، پدیده اتلاف گرمایی در اینگونه طراحی ها یک چالش قابل توجه به شمار می رود[3] که گرافین می تواند به عنوان یک ماده ی امیدبخش این چالش را مرتفع سازد. از همین رو بررسی بیشتر و دقیقتر رسانندگی گرمایی این ساختار منحصربفرد امری لازم و ضروری به نظر می رسد.

با توجه به کارهای قبلی صورت پذیرفته در این زمینه، رسانندگی گرمایی نانو نوار گرافینی ایده آل و بدون نقص بسیار بالاتر از موادی همچون سیلیکون و سایر مواد رایج مورد استفاده

در تکنولوژی روز دنیا می باشد. از طرفی امروزه روش های پرشماری برای تولید گرافین وجود دارد که در این میان می توان به روش هایی مانند ورقه ورقه کردن توده گرافیت[1]، تجزیه ی گرمایی SiC[4]، CVD[5] و ... اشاره کرد. با این وجود از نکات دارای اهمیت در این زمینه، مسئله ی نقص و ناخالصی های موجود در ساختار گرافین های تولیدی می باشد. با توجه به گزارشات ارائه شده ناکاملی هایی از قبیل نقص تهی جا[6] که نوعی نقص نقطه ای به شمار می رود در ساختار نمونه های گرافینی تولید شده دیده می شود، به همین دلیل بررسی تاثیرات این نوع نقص در رسانش گرمایی گرافین مناسب به نظر می رسد. ما نیز در این مقاله این نوع نقص را به صورت کاتوره ای در نانو نوار گرافین مورد بررسی وارد کرده و به مطالعه تاثیرات آن در رسانندگی گرمایی نمونه به صورت تابعی از نوع لبه و طول آن پرداخته ایم.

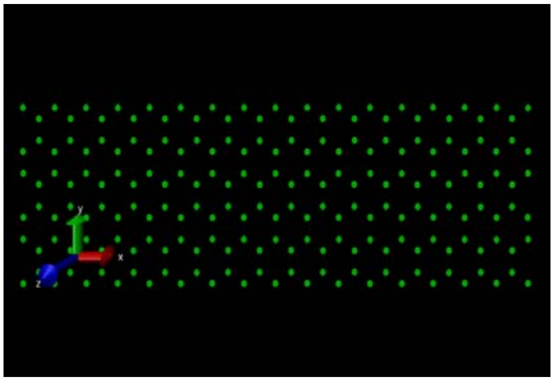
شبیه سازی و روش محاسباتی

در این مقاله نانو نوارهای گرافین با استفاده از بسته ی محاسباتی LAMMPS و روش دینامیک مولکولی غیرتعادلی شبیه سازی شده و سپس نانو ساختارهای تولیدی در دمای ۳۰۰ درجه ی کلوین به حالت تعادل رسیده اند. ما برای توصیف اندرکنش بین اتم های کربن از پتانسیل Tersoff[7]، که یک پتانسیل سه ذره ای می باشد، استفاده کرده و از روش گرین – کوبو برای برآورد رسانندگی گرمایی در نانو نوارهای گرافینی بهره جسته ایم. در تمام شبیه سازی ها از الگوریتم ورله سرعتی برای محاسبه ی عددی معادلات استفاده شده است.

بحث و بررسی

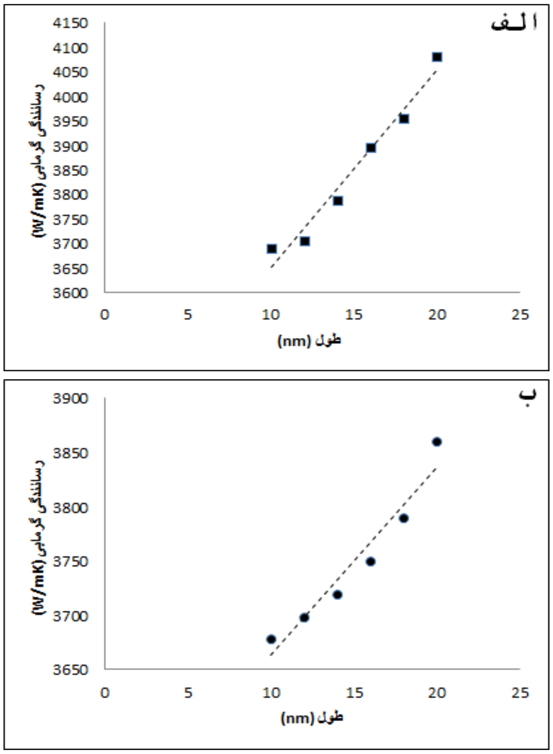
نانو نوار گرافینی ایده آل

در ابتدا با استفاده از بسته ی محاسباتی LAMMPS نمونه گرافینی ایده آل را مطابق با شکل ۱ شبیه سازی کرده و سپس نانوساختار تولیدی را در دمای اتاق به حالت تعادل در می آوریم.



شکل۱ : نانو نوار گرافین ایده آل شبیه سازی شده به کمک بسته ی محاسباتی LAMMPS.

سپس برای محاسبه ی رسانندگی گرمایی در ساختار شبیه سازی شده از روش گرین – کوبو بهره می گیریم که شکل ۲ نشانگر نتایج بدست آمده برای رسانندگی گرمایی در لبه های زیگزاگ و آرمچیر نمونه گرافینی ایده آل بر حسب تابعی از طول نانو نوار می باشد.



شکل۲ : تغییرات رسانندگی گرمایی بر حسب طول نانو نوار در لبه های الف) زیگزاگ ب) آرمچیر گرافین ایده آل.

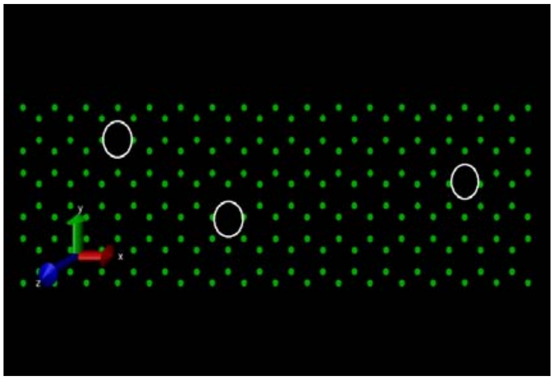
نتایج بدست آمده از شبیه سازی های ما برای رسانندگی گرمایی نانو نوار گرافینی ایده آل و بدون نقص، با نتایج تجربی ای که پیش از این توسط گروههای پژوهشی دیگر ارائه شده تطابقی مناسب داشته و رسانندگی گرمایی نسبتا بالایی (در حدود ۳۶۷۹ تا ۴۰۸۱ وات/متر- کلوین که با توجه به طول نمونه متغییر می باشد) برای این نانوساختارها پیش بینی می نماید[8,9].

این رسانندگی گرمایی بالا در نانو نوار گرافینی ایده آل می تواند به فونون ها نسبت داده شود چرا که در گرافین بر خلاف فلزات، که الکترون ها مسئول شارش گرما می باشند، فونون ها مسئول رسانش گرمایی بوده و در نتیجه این رسانش مناسب می تواند از بالا بودن مقدار مسیر آزاد میانگین فونون ها در گرافین نشأت گرفته باشد.

همانگونه که از نمودارهای شکل شماره ی ۲ مشخص است با افزایش طول نمونه مقدار رسانندگی گرمایی در لبه های زیگزاگ و آرمچیر نانو نوار گرافینی به صورت نمایی افزایش می یابد. از طرفی در این نانو ساختار میزان رسانندگی گرمایی در لبه ی زیگزاگ بیشتر از لبه ی آرمچیر می باشد که این تفاوت در میزان رسانندگی گرمایی در این دو نوع لبه یکی از مواردی می باشد که می تواند در کاربردهای عملی از نانو نوار گرافینی بسیار مهم بشمار رود.

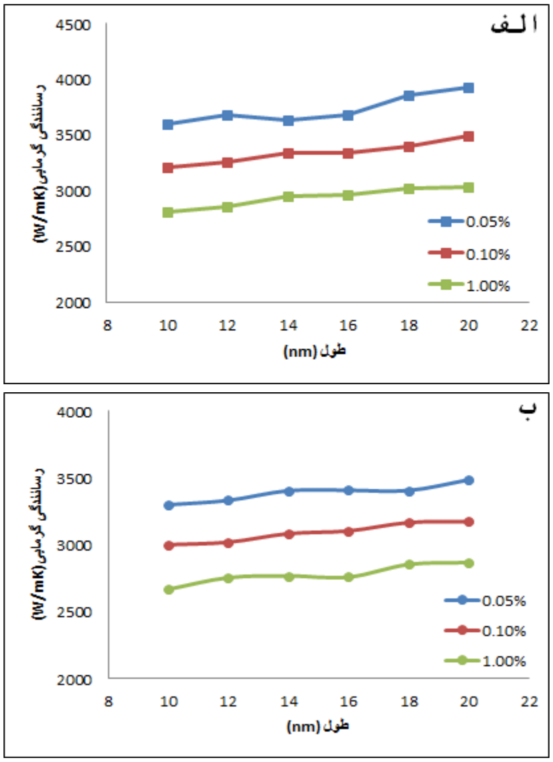
نانو نوار گرافینی دارای نقص تهی جا

در این مرحله از شبیه سازی شروع به افزودن نقص تهی جا در ساختار نانو نوار گرافینی می کنیم. ما این نوع نقص را به صورت کاملا کاتوره ای و به میزان ۰.۰۵%، ۰.۱۰% و ۱.۰۰% از تعداد کل اتم های موجود در شبکه گرافین به نمونه وارد کرده و سپس ساختار شبیه سازی شده را با تعدیل و کمینه سازی نیروهای اعمالی بین اتم های کربن به حالت تعادل رسانده و پایدار نموده ایم. در شکل شماره ۳ نمونه ای از این نانوساختارهای شبیه سازی شده که دارای نقص در شبکه بوده و در دمای اتاق به حال تعادل رسیده اند، نمایش داده شده است. (در این تصویر نقص های موجود در شبکه اتمی به کمک دوایر سفید رنگ مشخص شده اند.)



شکل۳ : نانو نوار گرافینی دارای نقص تهی جا.

مانند مورد قبل، با استفاده از روش گرین - کوبو محاسبات مربوط به رسانش گرمایی در لبه های زیگزاگ و آرمچیر نانو نوار گرافین دارای تهی جا انجام شده و نتایج آن در شکل ۴ نمایش داده شده است.



شکل۴ : تغییرات رسانندگی گرمایی بر حسب طول نانو نوار در لبه های الف) زیگزاگ ب) آرمچیر گرافین دارای تهی جا بصورت تابعی از درصد نقص.

در شکل بالا بستگی رسانندگی گرمایی نانو نوار گرافین به درصد نقص موجود در نمونه شبیه سازی شده به خوبی دیده می

شود به طوری که با افزایش میزان نقص در نمونه میزان رسانندگی گرمایی آن کاهش می یابد که این پدیده کاهش، در ساختارهای گرافین نیز مشاهده شده و توسط گروه پژوهشی دیگری گزارش شده است[10]. بنابرین می توان چنین گفت که حذف اتم های کربن از ساختار نانو نوار گرافینی یک عامل مخرب در رسانش گرمایی این ماده بوده و می توان نتیجه گرفت که این کاهش در میزان رسانندگی گرمایی از پراکندگی فونون ها به وسیله ی نقص های موجود در شبکه و در نتیجه کاهش میزان مسیر آزاد میانگین فونون ها در نانو نوار گرافینی پدید آمده است.

نتیجه گیری

ما با شبیه سازی نانو نوار گرافینی ایده آل و نانو نوار دارای نقص تهی جا به کمک روش دینامیک مولکولی غیرتعادلی به بررسی رسانندگی گرمایی این نانو ساختارهای تک لایه پرداختیم که نتایج نشانگر رسانندگی گرمایی بالا و بسیار مناسب برای آنها بود به گونه ای که رسانندگی گرمایی لبه ی زیگزاگ بیشتر از رسانندگی لبه ی آرمچیر برآورد گردید. از طرفی نتایج بدست آمده وابستگی رسانندگی گرمایی نانو نوار به طول و درصد نقص موجود در ساختار نمونه را مشخص کرده و با چشمپوشی از نوسانات جزیی در داده های بدست آمده می توان چنین نتیجه گرفت که افزایش طول نانو نوار موجب افزایش نمایی رسانش گرمایی شده است. همچنین با افزایش میزان نقص تهی جا در ساختار نمونه، مقدار رسانندگی گرمایی در آن دچار کاهش می گردد که این امر به دلیل پراکندگی فونون ها و در نتیجه کاهش مسیر آزاد میانگین فونون ها در نانو نوار گرافینی می باشد.

مرجع ها

[1] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, and A. A. Firsov; “Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films”; Science **306** (5696), 666 (2004).

[2] D. R. Cooper, B. D. Anjou, N. Ghattamaneni, B. Harack, M. Hilke, A. Horth, N. Majlis,M. Massicotte, L. Vandsburger, E. Whiteway, and V. Yu; “Experimental Review of Graphene”; ISRN Condensed Matter Physics **2012**, 1 (2012).

[3] E. Pop; “Energy Dissipation and Transport in Nanoscale Devices”; Nano Research **3** (3), 147 (2010).

[4] J. Hass, W. A. De Heer, and E. H. Conrad; “The growth and morphology of epitaxial multilayer graphene”; Physics Condensed Matter **20** (32), 1 (2008).

[5] Q. Yu, J. Lian, S. Siriponglert, H. Li, Y. P. Chen, and S.-S. Pei; “Graphene segregated on Ni surfaces and transferred to insulators”; Applied Physics Letters **93** (11), (2008).

[6] J. C. Meyer, A. K. Geim, M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov, T. J. Booth, and S. Roth; “Direct Imaging of Lattice Atoms and Topological Defects in Graphene Membranes”; Nature **446**, 60 (2007).

[7] J. Tersoff; “New empirical approach for the structure and energy of covalent systems”; Physical Review B. **37** (12), 6991 (1988).

[8] A. A. Balandin, S. Ghosh, W. Bao, I. Calizo, D. Teweldebrhan, F. Miao, and C. N. Lau; “Superior thermal conductivity of single-layer graphene”; Nano Letters **8**, 902 (2008).

[9] L. A. Jauregui, Y. Yue, A. N. Sidorov, J. Hu, Q. Yu, G. Lopez, R. Jalilian, D. K. Benjamin, D. A. Delk, W. Wu, Z. Liu, X. Wang, Z. Jiang, X. Ruan, J. Bao, S. S. Pei, and Y. P. Chen; “Thermal transport in graphene nanostructures: Experiments and simulations”; ECS Transactions, **28**(5), 73 (2010).

[10] F. Hao, D. Fang, and Z. Xu; “Mechanical and thermal transport properties of graphene with defects”; Applied Physics Letters **99**, 041901 (2011).

مطالعه‌ی خصوصیات مکانیکی گرافین توسط میدان نیروی والانس وسیلی-ترسف

صادقی نیارکی ، معصومه[۱]؛ قاسمی، سبیکه[۲] ؛ سید طالبی، سیده مژگان[۳]

[۱]دانشکده علوم پایه،دانشگاه تربیت دبیر شهید رجایی، تهران

[۲]دانشکده علوم پایه، دانشگاه تربیت دبیر شهید رجایی،تهران

[۳] دانشکده علوم پایه، دانشگاه شهید چمران، اهواز

چکیده

گرافین یکی از آلوتروپ های دو بعدی کربن می باشد، که ساختار آن شامل ورقه های مسطح با ضخامت یک اتم می باشد که از اتم های کربن(که با یکدیگر پیوند SP^2 دارند) تشکیل شده و به طور فشرده در یک شبکه کریستالی لانه زنبوری جمع شده اند. در این مقاله اثرات موج های اعمال شده روی جملات مختلف انرژی یک مدل میدان نیروی اخیرا معرفی شده(پتانسیل وسیلی- ترسف)مطالعه شده است. مدهای انرژی مختلف روی گرافین موج دار بررسی شده و بستگی انرژی یک صفحه‌ی گرافین موج دار به دامنه و طول موج شرح داده شده است. در ادامه از روش تندترین کاهش ، نقاطی که سیستم در آن وضعیت، مینیمم انرژی را دارد و حالت پایدار سیستم است، یافت می‌شود. از انجام این تحقیق نتایج زیر حاصل شده است:.۱) هرچه دامنه‌ی موج اعمال شده به گرافین بیشتر باشد، انرژی آن بیشتر می‌شود و برعکس. ۲) هرچه طول موج اعمال شده به گرافین بیشتر باشد، انرژی آن کمتر می‌شود و برعکس. ۴) حالت پایدار گرافین(انرژی مینیمم)، حالت تخت آن می‌باشد.

واژه‌های کلیدی: گرافین موجدار شده، شبیه سازی مکانیک مولکولی، میدان نیروی والانس، پتانسیل وسیلی و ترسف

Study of mechanicalproperties of graphene using Vasili-Tersoffvalence force field

Sadeghiniaraki, masome[1]; ghasemi, sabike[2];seyed-talebi,seyedehmozhgan[3]

[1]*faculty of science, University of shahidrajaee teacher training, Tehran,*
[2]*faculty of science, University of shahidrajaee teacher training, Tehran,*
[3]*faculty of science, university of shahidchamran, ahvaz*

Abstract

Graphene is a two-dimensional allotrope of carbon, whose structure is one-atom-tick planar sheets of SP^2 –bonded carbon atoms that are densely packed in a honey comb crystal lattice which is not exactly flat. The effects of induced ripples on different energy contributions of a recently introduced valence force field model(vasili-Tersoff Potential) is studied. Different energy modes are investigated for the rippled graphene. The effects of amplitude and wavelength of the created ripples on different energy modes is studied. The Steepest Descent method is also used to test the minimum energy configurations We found that: i) the larger amplitude results in a larger energy modes, ii) the longer the wavelengths the smaller the energies, and iii) the Stepest Descent method, as one expects, yields a flat graphene as the minimum energy configuration.

PACS No.65,1365,1359-m, 59,1014sm

۱)مقدمه

گرافین[۱]یکی از آلوتروپ‌های دوبعدی کربن می‌باشد، که توسط گایم و نووسلو کشف و بطور تجربی ساخته شد[۱و۲].اندازه‌گیری‌ها نشان می‌دهد که گرافین مقاومت در برابر شکست ۲۰۰ برابر بیش از فولاد را دارد[۳و۴] .هدف از موج‌دار کردن لایه‌ی گرافین، این است که دری برای تحقیق سیستماتیک اثر موج‌ها روی خواص الکتریکی گرافین و مهندسی (بر پایه‌ی کرنش) دستگاه‌های گرافینی باز شود[۵].گرافین یک نانو ماده است در نتیجه با روش‌های کلاسیک نمی‌توان به بررسی آن پرداخت به این دلیلاز روش مکانیک مولکولی[۲] برای انجام محاسبات برای دستگاه‌های N ذره

1-Graphene

2-Molecular Mechanics

ای استفاده می شود که این روش مبتنی بر میدان نیرو[3] می باشد[۶ و۷و۸].

میدان نیروی مدرن استاندارد به صورت رابطه‌ی(۱) نوشته می‌شود.

$$U = \sum_{stretch} U_{AB} + \sum_{bend} U_{ABC} + \sum_{dihedral} U_{ABCD} + \sum_{out-of-plane} U_{ABCD} + \sum_{nonbonded} U_{AB} + \sum_{coulomb} U_{AB} \qquad (1)$$

در این مقاله یک میدان نیروی والانس برای کربن با هیبریداسیون SP^2ارائه می‌شود که از آن می‌توان در شبیه‌سازی گرافین، نانولوله‌ها و فولرین‌ها استفاده کرد[۹]. پتانسیل به صورت زیر است:

$$E = \beta_{r1} r_0^{-2} \sum_{i,j\epsilon i} \left(\delta r_{ij}\right)^2 + \beta_c \sum_{i,j<k\in i} \left(\delta c_{i,jk}\right)^2 + \beta_v r_0^{-2} \sum_{i,j<k<l\in i} \left(\frac{3\vec{v}_{ij}.\vec{v}_{ik} \times \vec{v}_{il}}{r_{ij}r_{ik} + r_{ik}r_{il} + r_{il}r_{ij}}\right)^2 + \beta_{r2} r_0^{-2} \sum_{i,j<k\in i} \delta r_{ij} \delta r_{ik} + \beta_p \sum_{i,j\in i} \left|\vec{\pi}_i \times \vec{\pi}_j\right|^2 + \beta_{rc} r_0^{-1} \sum_{i,j\neq k<l} \delta r_{ij} \delta c_{i,kl} \qquad (2)$$

در رابطه‌ی (۲): $\vec{v}_{ij} = \vec{v}_j - \vec{v}_i$ برداری است که اتم i را به اتم j (همسایه‌ی اتم i) متصل می‌کند که در آن، $\vec{v}_i$ بردار مکان اتم iو $\vec{v}_j$بردار مکان اتم jمی‌باشد. $r_{ij} = \left|\vec{v}_{ij}\right|$ طول پیوند (فاصله‌ی بین اتم‌های همسایه) در هر حالت می‌باشد.

$$\delta r_{ij} = r_{ij} - r_0 \,(3)\, \delta c_{i,jk} = \frac{1}{2} \frac{\vec{v}_{ij}.\vec{v}_{ik}}{r_{ij}r_{ik}} \,(4)$$

$$\overrightarrow{\pi_i} = 3\,\frac{\vec{v}_{ij} \times \vec{v}_{ik} + \vec{v}_{ik} \times \vec{v}_{il} + \vec{v}_{il} \times \vec{v}_{ij}}{r_{ij}r_{ik} + r_{ik}r_{il} + r_{il}r_{ij}} \,(5)$$

در جدول(۱) ضرایب به‌کار رفته در پتانسیل وسیلی و ترسف داده شده‌است[۹]:

جدول۱: ضرایب به کار رفته در پتانسیل وسیلی و ترسف برحسب الکترون ولت

β_{r1}	β_c	β_v	β_{r2}	β_p	β_{rc}
18.52	4.087	1.313	4.004	0.008051	4.581

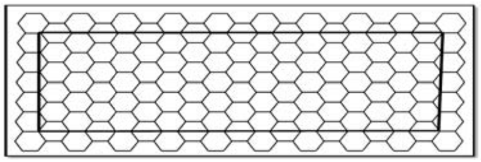
موج‌دار کردن گرافین: یکی از راه‌های موج‌دار کردن گرافین، گرم کردن وسرد کردن[4] آن می‌باشد .موج‌های یک‌بعدی و دوبعدی در ورقه‌های معلق گرافین، با استفاده از کرنشهای طولی ناشی از گرما ایجاد می‌شود.[۱۰].

2)تئوری و مراحل انجام محاسبات:

در مقاله حاضر، ساختار گرافین در حالت‌های مختلف به‌کمک پتانسیل بین اتمی وسیلی – ترسف شبیه‌سازی شده‌است[۹].

مرحله اول: ساختن مدلی برای برهم‌کنش ذره های سیستم با یکدیگر:این مرحله معمولا با انرژی پتانسیل بین ذره‌های اتم‌ها یا مولکول‌های موجود در سیستم بیان می‌شود(رابطه‌ی۲).

مرحله دوم: ساختن مدلی برای برهمکنش ذره‌های سیستم با محیط اطراف: برای اتم‌های کربن درگرافین به‌جای استفاده از شرط مرزی، از اتم‌های مرکزی در محاسبه‌ی انرژی استفاده‌شده‌است و اتم‌های مرزی در محاسبه‌ی انرژی فقط به‌عنوان اتم‌های همسایه برای اتم‌های مرکزی مورد استفاده قرار گرفته‌اند. اتم‌هایی را که سه همسایه داشته باشند و همسایه‌هاشان نیز هرکدام دارای سه همسایه باشند، اتم‌های مرکزی و اتم‌هایی که مرکزی نباشند را اتم‌های مرزی می گوییم(شکل۲).



شکل۱: گرافین تخت ۳۰۰ اتمی- اتم‌های داخل و روی کادر مشکی اتم‌های مرکزی هستند و اتم‌های خارج کادر مشکی اتم‌های مرزی می‌باشند.

مرحله سوم: انتخاب روش شبیه‌سازی و انجام آن:شبیه‌سازی به کاررفته در این مقاله از نوع مکانیک‌مولکولی و زبان برنامه‌نویسی فورترن[5]می‌باشد.

۳)نتایج و بحث

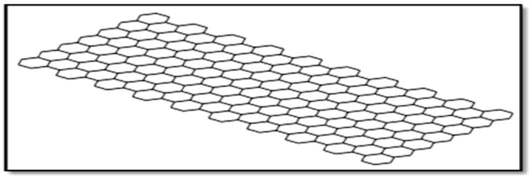
۳-۱) محاسبه‌ی انرژی گرافین تخت

ابتدا انرژی گرافین تخت۳۰۰ اتمی(Z=0) با ۲۰ اتم کربن در ردیف و ۱۵ اتم کربن در ستون (شکل ۱) محاسبه شده است که انرژی آن برابر است با:$E \cong 0$

3-Force Field

۴-Thermal Annealing

۵- Fortran



شکل ۲ : گرافین تخت ۳۰۰ اتمی

۳-۲) محاسبه‌ی انرژی گرافین موج دار با موج یک بعدی:

این بار گرافین ۳۰۰ اتمی (۱۵×۲۰) را موج دار کرده و انرژی آن را با استفاده از کد نوشته شده محاسبه می‌کنیم.

$$Z = A\sin\left(\frac{2\pi x}{\lambda}\right) \quad (6)$$

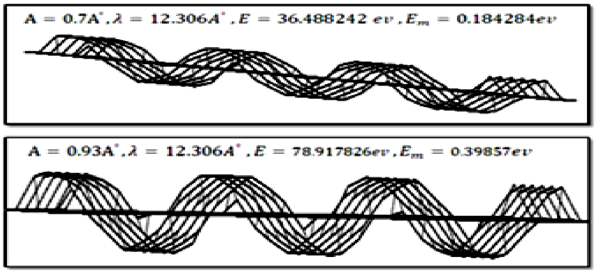
که A و λ متغیرند. A دامنه موج و λ طول موج می باشد که واحد هردو آنگستروم است. و λ می‌تواند به صورت‌های زیرباشد:

$$\lambda = L_x \text{ و } \frac{L_x}{2} \text{ و } \frac{L_x}{3} \text{ و } \ldots \text{ و } \ldots (L_x = 36.92A^\circ)$$

که L_x طول گرافین می‌باشد.

۳-۲-۱) بستگی انرژی گرافین موج دار به دامنه:

گرافین بخش ۳-۲را با دامنه‌های ۰.۹۳ و ۰.۷ آنگستروم و طول موج یکسان ۱۲.۳۰۶ آنگستروم موج‌دار می‌کنیم.در شکل۳، E و E_m به ترتیب انرژی کل وانرژی متوسط بر اتم گرافین می‌باشند.

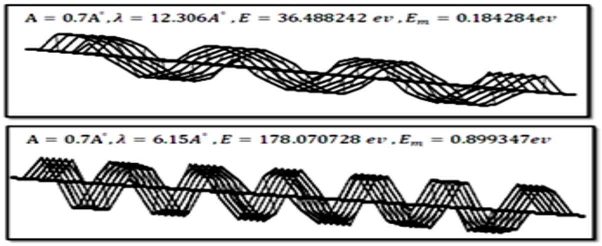


شکل۳ :مقایسه انرژی صفحات گرافینموج دار ۳۰۰ اتمی با طول موج یکسان ودامنه های مختلف (شکل بالا با دامنه ۰.۷ آنگستروم و شکل پایین با دامنه ۰.۹۳آنگستروم)

همانطور که مشاهده می‌کنیم(شکل۳) برای یک طول موج معین، هرچه دامنه بیشتر شود، انرژی نیز بیشتر می شود و برعکس. وهرچه دامنه بیشتر شود: ۱- کشش پیوند بیشتری اتفاق می‌افتد.۲- زوایای بین پیوندها از مقدار تعادلی خود دورتر می‌شوند.۳- اتم-های همسایه در یک صفحه نیستند. ۴- زاویه‌ی بین اوربیتال‌های π اتمهای همسایه بیشتر می‌شود یا همپوشانی بین اوربیتال های π اتمهای همسایه بیشتر می‌شود.

۳-۲-۲) بستگی انرژی گرافین موج دار به طول موج:

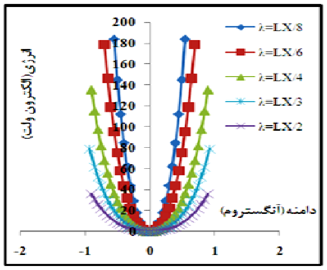
گرافین بخش ۳-۲ را با طول موج‌های ۶.۱۵ و ۱۲.۳۰۶ آنگستروم و دامنه‌ی یکسان ۰.۷ آنگستروم موجدار می‌کنیم.



شکل ۴ : مقایسه انرژی صفحات گرافین موجدار ۳۰۰ اتمی با دامنه یکسان و طول موج های مختلف(شکل بالا با طول موج ۱۲.۳۰۶ آنگستروم وشکل پایین با طول موج ۶.۱۵ آنگستروم)

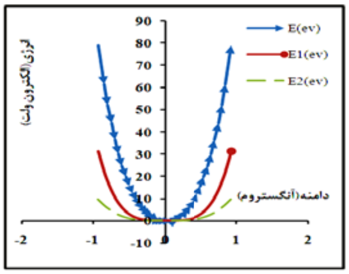
همانطور که مشاهده می کنیم (شکل۴) برای یک دامنه‌ی معین، هرچه طول موج کمتر انرژی بیشتر می‌شود و برعکس.

در زیر نمودار انرژی بر حسب دامنه برای طول موج‌های مختلف رسم شده است:



شکل ۵ : نمودار انرژی گرافین برحسب دامنه برای طول موج های مختلف

۳-۲-۳)نقش جملات اول و دوم پتانسیل وسیلی - ترسف در انرژی گرافین:



شکل ۶ : نمودار انرژی گرافین بر حسب دامنه به ازای یک طول موج مشخص

نمودار بالا(شکل ۶) نشان دهنده‌ی این است که جمله‌ی اول نقش بیشتری در مقدار انرژی دارد. یعنی کشش پیوند نسبت به خمش پیوند نیاز به انرژی زیادی دارد.

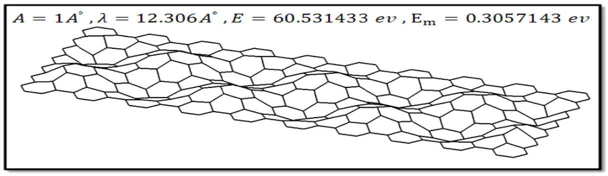
۳-۳) محاسبه‌ی انرژی گرافین موج‌دار با موج دوبعدی:

موج دو بعدی در نظر گرفته شده در رابطه‌ی ۷ را روی گرافین تخت اعمال می‌کنیم:

$$Z = A\sin\left(\frac{2\pi x}{\lambda}\right)\cos\left(\frac{2\pi y}{\lambda}\right) \quad (7)$$

$$z = A\sin\left(\frac{2\pi x}{\lambda}\right),\ \lambda = L_x \text{ و } \frac{L_x}{2} \text{ و } \frac{L_x}{3} \text{ و } \dots\dots \text{ و } (L_x = 36.92\mathring{A}),\ \lambda = 7.6325\mathring{A},\ A = 0.84\mathring{A} \quad (9)$$

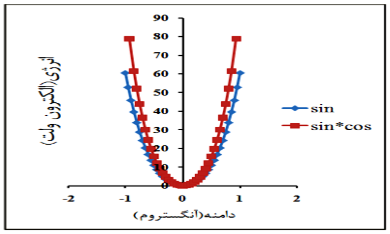
که L_x طول گرافین می‌باشد.



شکل ۷ : گرافین موج دار با موج دوبعدی

تمام نتیجه‌گیری‌هایی که برای موج یک‌بعدی به دست آوردیم، برای موج دوبعدی نیز صدق می‌کند.

۳-۴)مقایسه‌ی نمودار انرژی بر حسب دامنه برای موج‌های یک بعدی و دو بعدی به ازای یک طول موج مشخص:



شکل ۸- مقایسه‌ی نمودار انرژی بر حسب دامنه برای موج‌های یک بعدی و دو بعدی به ازای یک طول موج مشخص

از نمودار شکل ۸ نتیجه می گیریم که موج دو بعدی انرژی بیشتری نسبت به موج یک بعدی دارد. زیرا انرژی زیادی لازم است که موجی در دو راستای مختلف را روی گرافین بیاندازیم.

۳-۵)کمینه سازی انرژی به روش تندترین کاهش:

حالا می‌خواهیم از روش تندترین کاهش[۶]، نقاطی که سیستم در آن وضعیت، مینیمم انرژی را دارد و حالت پایدار سیستم است، پیدا کنیم. در روش تندترین کاهش از رابطه‌ی (۸) استفاده می‌کنیم:

$$\vec{x}_{k+1} = \vec{x}_k - \alpha\vec{\nabla}_k E \quad (8)$$

در رابطه‌ی (۸)، α پارامتر قابل تنظیمی است که میزان تغییرات، با آن تنظیم می‌شود.ما در این روش در هر گام، مختصات جدید اتمی را از رابطه‌ی (۸) به دست آورده و در هر مرحله انرژی سیستم با مختصات جدید را محاسبه می‌کنیم و با انرژی قبلی سیستم مقایسه می‌کنیم. نتیجه‌ی اجرای برنامه را برای یک صفحه گرافین با۲۲۵ اتم (۱۵ سطر و ۱۵ ستون) که در آن موج یک بعدی با معادله زیر ایجاد شده بررسی خواهیم کرد.

نتیجه اینکه بعد از اجرای برنامه انرژی کمینه شده و طبق انتظار ما سیستم تخت شد، یعنی حالت پایدار برای چنین سیستمی حالت تخت می‌باشد.

نتیجه گیری

در این بخش، اهمیت کار و یافته‌های شاخص ارائه می‌شود. از ذکر روش‌های تجربی و تکرار مطالب چکیده در این بخش خودداری شود.

مرجع ها

[1] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, M. I. Katsnelson, I. V. Grigorieva, S. V. Dubonos& A. A. Firsov. Two-Dimensional Gas of Massless Dirac Fermions in Graphene J. Nature 438, 197-200 (2005).
[2] K.S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, A. A. Firsov, J. Science. 306 (2004) 666-669.
[3] RajiHeyrovska (2008). “Atomic Structures of Graphene, Benzene and Methane with Bond Lengths as Sums of the Single, Double and Resonance Bond Radii of Carbon”. arXiv:0804.4086.
[4] Carlsson, J. M. (2007). “Graphene: Buckle or break”. *Nature Materials* 6 (11): 801.
[5] Bao,Wenzhang , Feng Miao , Zhen Chen , Hang Zhang , Wanyong Jany , Chris Dames ,and Chan Minylan.2011.Ripple Texturing of Suspended Graphene Atomic Membranes. *Department of physics and Astronomy* .62.25.-g , 65.40.De , 68.55.-a , 73.63-b.
[6] C. Li and T-W chou. I. J. sd, Stru. 402 487 (2003).
[7] V. N. Popov and L. Henrard. PRB 65, 235413 (2002).
[8] Hinchliffe, Alan.2008. *Molecular Modeling for Beginners*. John Wiley and sonsltd. UK:The University of manchester.
[9] Parebeinos, Vasili, and J.Tersoff. Valence force model for phonons in graphene and carbon nanotubes. *Phys Rev B*79,241409I(2009).
[10] Bao,Wenzhang , Feng Miao , Zhen Chen , Hang Zhang , Wanyong Jany , Chris Dames ,and Chan Minylan.2011.Ripple Texturingof Suspended Graphene Atomic Membranes. *Department of physics and Astronomy* .62.25.-g , 65.40.De , 68.55.-a , 73.63-b.

۶-SteepestDescent

محاسبات دوزیمتری چشمه ید-۱۲۵ با اکتیویته بالا در درمان تومور مغزی بوسیله کد MCNPX

سید مصطفی سلیمی*[۱]،سعید حمیدی[۱]، فلامرز ترک‌زاده[۲]، حسین پوربیگی[۲]

۱. گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه اراک، اراک، ایران

۲. پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، سازمان انرژی اتمی، تهران، ایران

چکیده

رادیوایزوتوپ ید-۱۲۵ به شکل چشمه براکی تراپی مایع در داخل سیستم بالونی GliaSite برای درمان تومورهای مغزی بعد از جراحی استفاده می شود.

دراین روش ، اکتیویته در محدوده چند صد میلی کوری استفاده می شود و محاسبات دوزیمتری برای بیمار و پرسنل بسیار حائز اهمیت است.

در این تحقیق از روش مونت کارلو و کد محاسباتی MCNPX برای شبیه سازی فانتوم نیم تنه VIP و بالون حاوی مایع ید-۱۲۵ بهره گرفته می شود. در ابتدا تخمین دوز کارکنان بوسیله شبیه‌سازی ویال حاوی محلول ید-۱۲۵ رادیواکتیو در فواصل مختلف از فانتوم مورد ارزیابی قرار گرفت و سپس محاسبات دوزیمتری برای تومور و بافت حساس اطراف تومور انجام گرفت.

نتایج نشان می داد که برای اعمال دوز ۶۰Gy بایستی محلول ید-۱۲۵ با اکتیویته ۲۰۰ mCi برای مدت زمان حدود ۸ روز در داخل بالون تعبیه شده در داخل تومور قرار گیرد.

Dosimetry calculation of high activity I-125 source in the treatment of brain tumours using MCNPX code

Salimi. Seyed Mostafa[1]:Hamidi, Saeed[1]:, Torkzadeh, Falamarz[2]: Poorbaygi, Hosein[2]

[1] Department of Physics, University of Arak, Sardasht, Arak, Iran
[2] Nuclear Science and Technology Research Institute, Tehran, Iran

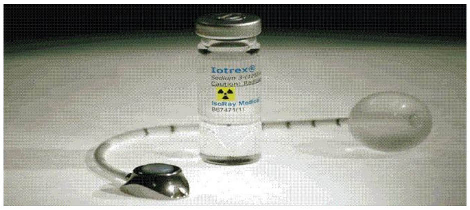
Abstract

I-125 radioisotope in form liquid brachtherapy source in the GliaSite balloon system for the treatment of brain tumors is used after surgery. In this method, several hundred mCi of activity are used and the calculation of dosimetry for patients and staff is very important. In this research, Monte Carlo method and MCNPX code are used for simulation of torso phantom (VIP) and balloon containing I-125 liquid. At first, dose estimation for personnel were evaluated using simulation of vials containing iodine-125 solution at different distances from phantom and then the dosimetry calculations for tumor and the sensitive tissue was performed. Results showed that for delivery a recommended dose of 60 Gy, iodine-125 solutions with activity 200 mCi should be about 8 days for the duration of the balloon is placed inside the tumor.

مقدمه

امروزه استفاده از روش رادیوتراپی که شامل درمان موضعی با چشمه پرتوزا می باشد و معروف به روش براکی تراپی است، برای درمان انواع تومورها بخصوص تومورهای مغزی توسعه روز افزونی پیدا کرده است. در این روش باید چشمه پرتوزا در درون یا مجاور تومور قرار می گیرد و از ایزوتوپ‌های گسیلنده بتا، گاما و ایکس کم انرژی نظیر ^{103}Pd و ^{192}Ir و ^{125}I استفاده می‌شود[1]. ^{125}I دارای نیمه عمر ۵۹/۴ روز می باشد و گسیلنده گاماهی کم انرژی (حدود ۳۰ کیلو الکترون ولت) است و جزء مهمترین

رادیوایزوتوپ‌های درمانی می باشد. یکی از روش‌های درمان تومورهای بدخیم واقع در سر استفاده از براکی تراپی با دستگاه GliaSite است[2].



شکل ۱: کاتتر و بالون Glia Site مورد استفاده در براکی تراپی مغز

این وسیله از قسمت‌های مختلف تشکیل یافته است که عبارتند از پورت تزریق، بالون با قابلیت متورم شدن، کاتتر که بالون و پورت تزریق را به هم متصل می‌کند. در این روش درمانی پس از تعیین موقعیت تومور، قسمتی از حجم تومور توسط جراح مغز و اعصاب برداشته می‌شود. سپس بالون قابل تورم که متصل به کاتتر است در حفره ایجاد شده داخل تومور قرار می‌گیرد. پورت تزریق متصل به بالون، زیر پوست جمجمه قرار گرفته و برای تزریق ید مایع به بالون و خالی کردن مایع از آن استفاده می‌شود.

در این روش درمانی فعالیت ید-۱۲۵ مورد استفاده در محدوده چند صد میلی‌کوری می‌باشد و زمان حضور بالون حاوی ید-۱۲۵ در تومور بسته به اکتیویته و حجم تومور حدود ۴ تا ۷ روز است.

به عنوان مثال انجام این روش درمانی روی تعدادی بیمار این نتیجه را داشت [3]:

برای اکتیویته‌های بین ۹۷ تا ۷۲۴ mCi زمان ماندن دستگاه حاوی محلول برای درمان بیماران برای رسیدن به دز تجویزی از ۴/۱ تا ۶/۳ روز محاسبه شده است.

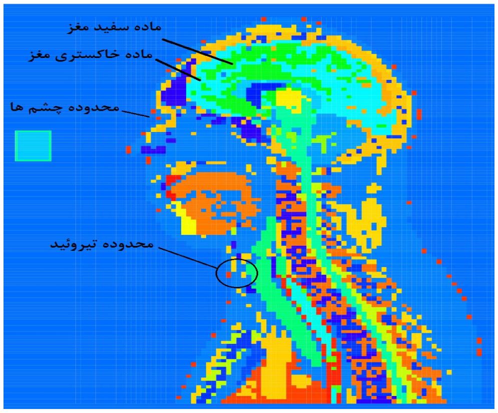
دوز تجویز شده در عمق ۱ سانتیمتر از سطح بالون ۶۰Gy می‌باشد[3]. با تعیین آهنگ دوز دریافتی برای تومور می‌توان مدت زمان قرار گرفتن بالون در سر را برای رسیدن دز تجویز شده به تومور بدست آورد. محلول ید-۱۲۵ در ظروفی به نام ویال نگهداری می‌شود. با تعیین آهنگ دوز دریافتی در فواصل مختلف از ویال حاوی محلول ید-۱۲۵ رادیواکتیو، می‌توان مدت زمان مجاز برای افراد درگیر با این روش درمانی را در فواصل مشخص از ویال، بدست آورد.

مواد و روش‌ها

استفاده از شبیه‌سازی می‌تواند ضریب اطمینان کار با مواد و دستگاه‌های هسته‌ای را افزایش دهد. در آغاز هر طراحی تجربی یک شبیه‌سازی کامپیوتری مفید و قابل توجه می‌باشد. کد محاسباتی MCNPX از جمله کدهای بسیار قوی برای کار روی معادله ترابرد می‌باشد[4]. در کلیه مراحل شبیه‌سازی از کد شبیه‌سازی نیم تنه بدن انسان تحت عنوان فانتوم VIP استفاده شده است[5]. در کدنویسی این فانتوم از دستورات lattice و universe استفاده شده است. در کدنویسی به روش MCNPX، پرتوگیری در دو مرحله مورد بررسی قرار گرفت: پرتوگیری خارجی و دوزیمتری برای تومور و بافت حساس

الف- پرتوگیری خارجی

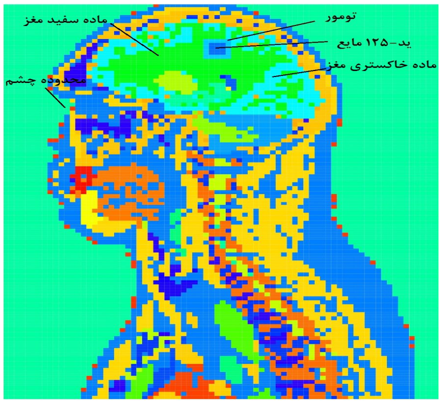
هدف از انجام این قسمت بررسی پرتوگیری افراد در اتاق بیمار قبل از شروع درمان است. که در اینجا محلول ید-۱۲۵ با اکتیویته ۲۰۰mCi در ویال با ابعاد مشخص در نظر گرفته شده است. از آنجایی که گاهی اوقات برای بررسی ویال به آن نگاه می‌کنند و در این حالت کمترین فاصله نسبت به بدن پرسنل وجود دارد و بیشترین مقدار دوز توسط اندام‌های نزدیک به چشمه دریافت می‌شود. تصویر شبیه‌سازی شده در شکل ۲ نشان داده شده است. در این قسمت ویال در فواصل ۲۰cm و ۳۰cm و ۴۰cm و ۵۰cm از بدن قرار گرفته‌اند و دوز دریافتی از آن توسط اندام‌های مختلف بدن که هرکدام به صورت یک سلول تعریف شده‌اند مورد بررسی قرار گرفته است.



شکل ۲: تصویر شبیه‌سازی شده پرتوگیری خارجی

ب- دوزیمتری برای تومور و بافت حساس

هدف از انجام این قسمت بررسی دوز درمانی توسط خود بیمار در طول دوره درمان است و در آن دوز دریافتی تومور و نواحی اطراف تومور مورد بررسی قرار گرفته است(شکل ۳)

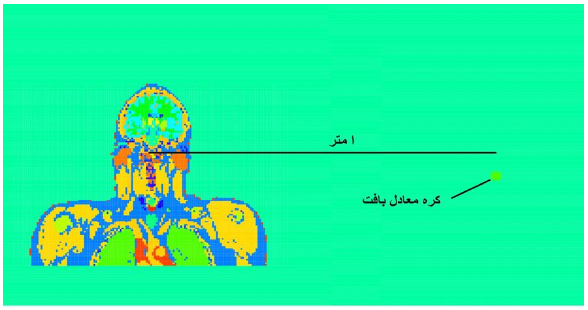


شکل ۳: تصویر شبیه‌سازی شده فانتوم نیم تنه و چشمه تعبیه شده در تومور

در شبیه‌سازی این قسمت، ید-۱۲۵ محلول رادیواکتیو با اکتیویته ۲۰۰mCi به صورت ۲۷ مکعب کنار هم (یک مکعب با ابعاد ۱/۲cm) قرار گرفته و تومور به صورت یک لایه اطراف آن قرار دارد.

ج- بررسی صحت شبیه‌سازی

صحت شبیه سازی بوسیله مقایسه نتایج حاصل از یک آزمایش شبیه‌سازی‌های و مقایسه آن با نتایج مربوط به گروه deGuzman و همکارانش مورد بررسی قرار گرفت [3]. در این شبیه‌سازی، یک کره به شعاع ۲cm از جنس TLD (معادل بافت) در فاصله ۱ متری از بیمار (هنگامی که بالون حاوی ید مایع در تومور قرار دارد) قرار می‌دهیم (شکل ۴).



شکل ۴: کره معادل بافت در فاصله ۱ متری از بیمار

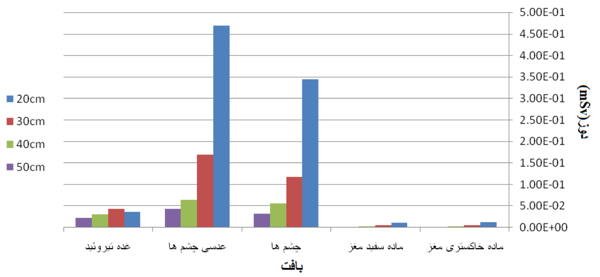
نتیجه‌گیری

الف- پرتوگیری خارجی

در پرتوگیری خارجی محلول ید-۱۲۵ با اکتیویته ۲۰۰mCi در ظرف‌های ویال با ابعاد مشخص در نظر گرفته شده است و در فاصله ۲۰cm، ۳۰cm، ۴۰cm و ۵۰cm از بیمار قرار گرفته است. نتایج حاصل از دوز دریافتی در این شبیه‌سازی در جدول ۱ آمده است و در نمودار ستونی ۱ با هم مقایسه شده‌اند.

جدول۱: نتایج حاصل از دوز دریافتی اندام‌ها در فواصل مختلف

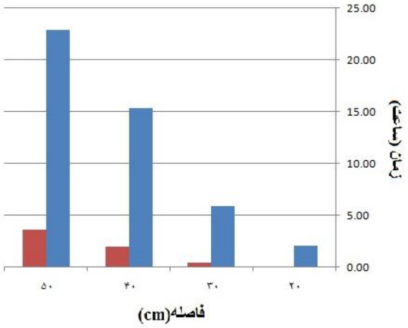
	آهنگ دوز دریافتی برحسب mSv			
اندام	20cm	30cm	40cm	50cm
ماده خاکستری مغز	0.012	5.40E-03	2.97E-03	1.76E-03
ماده سفید مغز	0.011	5.22E-03	2.97E-03	1.90E-03
چشم ها	0.345	0.117	0.056	0.032
عدسی چشم ها	0.470	0.170	0.065	0.044
غده تیروئید	0.037	0.044	0.031	0.022



نمودار ستونی ۱: مقایسه دوز دریافتی در هر ساعت در فواصل مختلف از ویال

با توجه به نتایج بدست آمده از شبیه‌سازی پرتوگیری خارجی از ویال در فواصل مختلف، مشاهده کردیم که در هر فاصله از ویال، چشم‌ها بیشترین دوز را دریافت می‌کنند سپس غده تیروئید و بعد توده مغز.

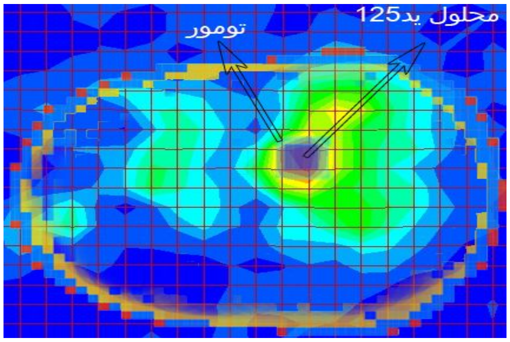
با توجه به اینکه بیشترین دوز توسط چشم‌ها دریافت می‌شود حد مجاز را با توجه به این قسمت بررسی می‌کنیم. از آنجا که بیشترین دوز مجاز در پرتوگیری شغلی در طول یک هفته ۱mSv است[6]، حداکثر زمان مجاز کار با ویال حاوی ید رادیواکتیو در فواصل مختلف را می‌توان برآورد کرد که در نمودار ستونی ۲ آورده شده است.



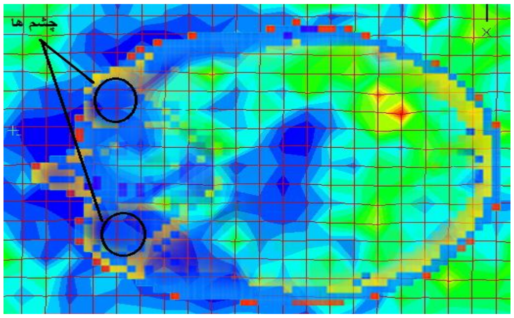
نمودار ستونی۲: حداکثر زمان مجاز کار با ویال حاوی ید رادیواکتیو در فواصل مختلف برحسب ساعت

ب- نتایج دوزیمتری برای تومور و بافت حساس

نمودارهای ایزودوزی بدست آمده توسط شبیه‌سازی در مقاطع مختلف فانتوم VIP در شکل ۵ و ۶ نشان داده شده‌اند.



شکل ۵: نمودار ایزودوزی در مقطعی که تومور واقع شده



شکل ۶: نمودار ایزودوزی در مقطعی که چشم‌ها در آن واقع شده

در جدول ۲ آهنگ دوز دریافتی برای تومور و بافت اطراف به ازای تزریق اکتیویته ۲۰۰ میلی کوری لیست شده است. با انجام محاسبات [6]، مدت زمان بدست آمده برای رسیدن دوز تجویزی به تومور با ید با اکتیویته ۲۰۰ mCi، ۸/۴۴ روز بدست آمده است، که در تطابق خوبی با نتایج بدست آمده است که در مقدمه ذکر گردید.

جدول۲: نتایج شبیه‌سازی پرتوگیری تومور و اندام‌های فانتوم VIP به ازای ۲۰۰mCi

اندام	آهنگ دوز دریافتی (Gy/h)	درصد خطا
ماده خاکستری مغز	5.07E-03	7.00E-04
ماده سفید مغز	9.12E-03	6.00E-04
چشم ها	5.15E-04	0.0407
تومور	0.31	9.00E-04

ج- نتایج ارزیابی صحت محاسبات

همانطور که در بخش ج مواد و روش‌ها مطرح شد با شبیه سازی یک کره به شعاع ۲cm از جنس TLD (معادل بافت) در فاصله ۱ متری از بیمار قرار می‌دهیم. آهنگ دوز دریافتی توسط این کره به ازای اکتیویته ۱mCi مقدار ۰/۰۱۱ µSv/h.mCi با خطای ۸/۳ ٪ از محاسبات شبیه‌سازی بدست آمد. در کار تجربی انجام شده توسط گروه deGuzman و همکارانش مقادیر آهنگ دوز دریافتی در فاصله ۱ متر از بیمار به ازای هر میلی‌کوری بین ۰/۰۰۴۵ µSv/h.mCi تا ۰/۰۹۸ µSv/h.mCi است[3].

همانطور که مشاهده می‌کنیم مقدار بدست آمده از شبیه‌سازی در تطابق با مقادیر تجربی است. بنابراین تا حد زیادی می‌توان به نتایج حاصل از شبیه‌سازی اتکا کرد.

مراجع

[1] U.O. Hafeli, W.K. Roberts, D.S. Meier, J.P. Ciezki, G.J. Pauer, E.J. Lee, M.S. Weinhous." *Dosimetry of a W-188/Re-188 beta line source for endovascular brachytherapy*". Med. Phys. 2000; 27(4): 668-75

[2] S. B. Tatter, E. G. Shaw, A. F. deGuzman, M. L. Rosenblum, T. Mikkelson, A. Olivi, and S. Grossman, "*Brachytherapyin re-resected malignant glioma cavities using the gliasite radiotherapy system—A phase I safety and device perfor-mance study*," in Proceedings of the American Society of Clinical Oncology, ~Lippincott, Williams, and Wilkins,Baltimore, MD, 2000!, Vol. 19, p. 160a.A.

[3] F. deGuzman,W. T. Kearns, E. Shaw, S. Tatter, V. Stieber, C. Yates, H. Amadeo and W. H. Hinson, *"Radiation safety issues with high activities of liquid I-125: Techniques and experience"* , Journal of applied clinical medical physics, spring 2003.

[۴] نرم‌افزار MCNP (Monte Carlo N Particle)

[5] http://mcnp.lanl.gov

[۶] هرمان سمبر، *"آشنایی با فیزیک بهداشت از دیدگاه پرتوشناسی"*، ترجمه محمد ابراهیم ابوکاظمی، هوشنگ سپهری، علیرضا بینش، انتشارات مرکز نشر دانشگاهی، ۱۳۸۹

SM.Salimi@yahoo.com

تحول دینامیکی قرص های برافزایشی پیرامون ستاره‌های نوترونی

صالحی، فاطمه[۱] ؛ فاقعی ، کاظم[۱]

[۱] دانشکده فیزیک دانشگاه دامغان، دامغان

چکیده

در این مقاله، با این فرض که پخش‌شدگی هال مکانیسم مهمی در پلاسمای در حال برافزایش اطراف ستاره‌های نوترونی است و می‌تواند دینامیک قرص‌های برافزایشی را تغییر دهد، به مطالعه تحولات دینامیکی قرص‌های برافزایشی پیرامون ستاره‌های نوترونی در حضور پخش‌شدگی هال می پردازیم. برای حل عددی معادلات حاکم بر سیستم از طریق روش رانگ-کوتا-فلبرگ استفاده نموده ایم که دقت و کارایی بالایی را فراهم می آورد. اندازه گام در این روش تطبیقی است و با توجه به خطای مورد نظر تعیین می‌گردد. نتایج عددی بدست آمده نشان می‌دهد که در نواحی داخلی، میدان مغناطیسی قوی ستاره‌های نوترونی، موجب انحراف و کاهش مشخصه چرخشی قرص از مقدار کپلری می‌گردد. اما با افزایش پخش‌شدگی هال، سرعت زاویه‌ای قرص کاهش بیشتری می‌یابد، این در حالی است که افزایش مقاومت باعث افزایش سرعت قرص برافزایشی در نواحی داخلی خواهد شد.

Dynamics Evolution Of The Accretion Discs Around Neutron Stars

Salehi, Fatemeh[1]; Faghei, Kazem[1]

[1] *Department of Physics, Damghan University, Damghan*

Abstract

In this paper, we assume that the Hall diffusion is an importance mechanism in accreting plasma around neutron stars and can be modified the dynamics of the accretion discs. Thus, we study the dynamics evolution of accretion discs around neutron stars in presence of the Hall diffusion. For numerical solving of system equations, we use Runge-Kutta-Fehlberg method, which provides high accuracy and performance. The step size in this method is adaptive and determine by especified error. We found that the strong magnetic field of Neutron stars departs the rotation profile from the Keplerian value at the inner disc regions. We also found the Hall diffusion reduces rotational velocity of the disc. However, the disc rotates faster for larger resistivity.

مقدمه

گروه خاصی از اجرام نجومی قرص‌های برافزایشی می‌باشند که پیرامون بسیاری از سیستم‌های اخترفیزیکی شبیه دوتایی‌های پرتو x، هسته‌های فعال کهکشانی و اجرام فشرده‌ای چون ستاره‌های نوترونی مشاهده می‌شوند. با وجود تلاش‌های فراوان برای شناخت بهتر ماهیت قرص‌های برافزایشی هنوز مجهولات بسیاری وجود دارد، از جمله دینامیک قرص‌ها که تحت تأثیر عوامل فیزیکی مختلفی قرار دارد. طی سال‌های اخیر، مطالعات بسیاری بر روی برهم‌کنش بین ستاره‌های مغناطیسی و قرص اطراف آن‌ها صورت گرفته است که نشان می‌دهد میدان‌های مغناطیسی نقش مهمی را در سیستم‌های اخترفیزیکی ایفا می‌کنند: برهم‌کنش بین میدان‌های مغناطیسی ستاره و قرص به‌طور قابل توجهی بر تحول اسپینی ستاره تأثیر می‌گذارد هم‌چنین باعث انتقال تکانه زاویه‌ای بین ستاره و قرص می‌گردد[۱]. نتایج بسیاری نیز نشان می‌دهد که میدان‌های مغناطیسی می‌تواند ساختار قرص‌های برافزایشی را تغییر دهد[۲].

پخش‌شدگی هال نیز ازجمله عوامل ناشی از میدان مغناطیسی است. اگر یون‌ها، الکترون‌ها و نوترون‌ها به‌عنوان سیال‌های مجزا در نظر گرفته شوند، هم‌چنین زمانی که الکترون‌ها به وسیله میدان مغناطیسی در سطح قرص انباشته شوند، تأثیرات پخش‌شدگی هال

مورد بحث قرار می‌گیرد. در بعضی سیستم‌های نجومی شبیه کوتوله‌های سفید، ستاره‌های نوترونی و قرص‌های برافزایشی این تأثیرات ممکن است مورد توجه بیشتری قرار گیرند.

در این مقاله، برهم‌کنش بین قرص برافزایشی و ستاره نوترونی در حضور جریان‌های هال بررسی شده است که اهمیت پخش‌شدگی هال بر دینامیک چرخشی قرص‌های برافزایشی اطراف ستاره‌های نوترونی را روشن خواهد ساخت.

معادلات اساسی

به منظور مطالعه قرص‌های برافزایشی نازکِ وشکسان و تقارن محور در حالت پایا، معادلات مغناطوهیدرودینامیک غیرایده‌آل را در مختصات استوانه‌ای بررسی خواهیم کرد. در این حالت معادله پیوستگی به صورت زیر می‌باشد:

$$\frac{\partial}{\partial r}\left(r\rho v_r\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(r\rho v_z\right)=0, \qquad (۱)$$

که ρ چگالی قرص است. از انتگرال عمودی رابطه فوق، آهنگ برافزایش به صورت $\dot{M}=-2\pi r\Sigma v_r$ به دست می‌آید. Σ چگالی سطحی است و در فاصله نیم‌ضخامت قرص (H≪r) به صورت $2\rho H$ تعریف می‌شود.

مؤلفه‌های معادله تکانه به‌طور مجزا به‌صورت زیر بیان می‌شوند:

$$\rho\left(v_r\frac{\partial v_r}{\partial r}-\frac{v_\varphi^2}{r}\right)= -\rho\frac{\partial\Psi}{\partial r}+\frac{1}{4\pi}\left[\left(\frac{\partial B_r}{\partial z}-\frac{\partial B_z}{\partial r}\right)B_z-\frac{1}{r}\frac{\partial\left(rB_\varphi\right)}{\partial r}B_\varphi\right], \qquad (۲)$$

$$\rho\left[v_r\frac{\partial}{\partial r}\left(rv_\varphi\right)+v_z\frac{\partial}{\partial z}\left(rv_\varphi\right)\right]= \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left[\upsilon\rho r^3\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{v_\varphi}{r}\right)\right]+\frac{B_r}{4\pi}\frac{\partial}{\partial r}\left(rB_\varphi\right)+\frac{rB_z}{4\pi}\frac{\partial B_\varphi}{\partial z}, \qquad (۳)$$

$$\frac{\partial p}{\partial z}+\rho\frac{\partial\Psi}{\partial z}+\frac{1}{4\pi r}\left[\frac{\partial\left(rB_\varphi\right)}{\partial z}B_\varphi+\left(\frac{\partial B_r}{\partial z}-\frac{\partial B_z}{\partial r}\right)rB_r\right]=0. \qquad (٤)$$

Ψ، υ و p به ترتیب پتانسیل گرانشی جسم مرکزی، ضریب ویسکوزیته جنبشی و فشار قرص می‌باشند. گرادیان فشار شعاعی در معادله (۲) به علت فرض تقریب قرص نازک، چشم‌پوشی می‌شود. هم‌چنین برای ساده‌تر شدن معادلات فوق فرض می‌کنیم $|B_z|\gg|B_\varphi|$ و $|B_z|\gg|B_r|$، که در نتیجه انتگرال‌گیری عمودی جملات غالب، مؤلفه‌های شعاعی و عمودی معادله تکانه را می‌توان به صورت زیر نوشت[۳]:

$$\left(\Omega_K^{\,2}-\Omega^2\right)rH-\frac{B_zB_r^+}{4\pi\rho}\approx 0, \qquad (۵)$$

$$c_s^{\,2}\approx\frac{1}{2}\Omega_K^{\,2}H^2+\frac{\left(B_\varphi^+\right)^2+\left(B_r^+\right)^2}{8\pi\rho}, \qquad (۶)$$

که $\Omega=v_\varphi/r$ سرعت زاویه‌ای، B_φ^+ و B_r^+ مؤلفه های سمتی و شعاعی میدان مغناطیسی روی سطح قرص هستند. $c_s\left[=\sqrt{p/\rho}\right]$ و $\Omega_K\left[=\sqrt{GM_*/r^3}\right]$ نیز به‌ترتیب سرعت زاویه‌ای کپلری و سرعت صوت گاز می‌باشند.

در بررسی دینامیک قرص‌های برافزایشی، مؤلفه سمتی معادله تکانه نقش مهم‌تری خواهد داشت. بنابراین، در شرایط مطرح شده با در نظر گرفتن جملات غالب، داریم:

$$\frac{\partial}{\partial r}\left(r^3\rho v_r\Omega\right)=\frac{\partial}{\partial r}\left(\upsilon\rho r^3\frac{\partial\Omega}{\partial r}\right)+\frac{r^2B_z}{4\pi}\frac{\partial B_\varphi}{\partial z}, \qquad (۷)$$

که حاصل انتگرال‌گیری عمودی آن با استفاده از هندسه متقارن میدان مغناطیسی و آهنگ برافزایش جرم به صورت زیر به دست خواهد آمد:

$$\frac{d}{dr}\left[\dot{M}\,r^2\Omega+2\pi\upsilon\Sigma r^3\frac{d\Omega}{dr}\right]=-r^2B_zB_\varphi^+. \qquad (۸)$$

از آنجا که حل معادله (۸) بدون داشتن مؤلفه‌های میدان مغناطیسی غیرممکن خواهد بود، برای تعیین آن‌ها به بررسی معادله القا در حضور پخش‌شدگی هال و مقاومت می‌پردازیم:

$$\frac{\partial\vec{B}}{\partial t}=\vec{\nabla}\times\left[\left(\vec{V}\times\vec{B}\right)-\frac{4\pi\eta}{c}\vec{J}-\frac{4\pi\eta_H}{c}\vec{J}\times\hat{B}\right], \qquad (۹)$$

$\vec{V}$ و $\vec{J}$ به ترتیب سرعت و چگالی جریان می‌باشند، پارامترهای η و η_H نیز به‌عنوان ضرایب پخش‌شدگی مقاومت و پخش‌شدگی هال معرفی می‌شوند. اگر مؤلفه‌های شعاعی و سمتی معادله القا به ترتیب به صورت زیر تعریف شوند:

$$-rv_rB_z-\eta r\frac{\partial B_r}{\partial z}+\eta r\frac{\partial B_z}{\partial r} -\eta_HB_\varphi\frac{B_r}{B}-\eta_Hr\frac{\partial B_\varphi}{\partial r}\frac{B_r}{B}-\eta_Hr\frac{\partial B_\varphi}{\partial z}\frac{B_z}{B}=0, \qquad (۱۰)$$

$$\frac{\partial}{\partial z}\left[r^2\Omega B_z+\eta r\frac{\partial B_\varphi}{\partial z}-\eta_H r\frac{\partial B_r}{\partial z}\frac{B_z}{B}\right.$$
$$\left.+\eta_H r\frac{\partial B_z}{\partial r}\frac{B_z}{B}+\eta_H\frac{B_\varphi^{\ 2}}{B}+\eta_H r\frac{\partial B_\varphi}{\partial r}\frac{B_\varphi}{B}\right] \quad (۱۱)$$
$$-r\frac{\partial}{\partial r}\left[v_r B_\varphi-r\Omega B_r-\eta\frac{B_\varphi}{r}-\eta\frac{\partial B_\varphi}{\partial r}\right.$$
$$\left.+\eta_H\frac{\partial B_\varphi}{\partial z}\frac{B_\varphi}{B}+\eta_H\frac{\partial B_r}{\partial z}\frac{B_r}{B}-\eta_H\frac{\partial B_z}{\partial r}\frac{B_r}{B}\right]=0,$$

با در نظرگرفتن جملات غالب، می‌توان دو معادله فوق را به شکل زیر نوشت:

$$\frac{v_r}{\eta}B_z+\frac{\partial B_r}{\partial z}-\frac{\partial B_z}{\partial r}+\frac{\eta_H}{\eta}\frac{\partial B_\varphi}{\partial z}\frac{B_z}{B}=0, \quad (۱۲)$$

$$rB_z\frac{\partial\Omega}{\partial z}+\frac{\partial}{\partial z}\left(\eta\frac{\partial B_\varphi}{\partial z}\right)-\frac{B_z}{B}\frac{\partial}{\partial z}\left(\eta_H\frac{\partial B_r}{\partial z}\right)=0. \quad (۱۳)$$

با انتگرال‌گیری معادله (۱۲) داریم:

$$B_r^{\ +}\approx\beta_R B_z-\frac{\eta_H}{\eta}\frac{B_z}{B}B_\varphi^{\ +}, \quad (۱۴)$$

که $\beta_R=\left[-v_r H\,/\,\eta\le 1\right]$ ثابتی از مرتبه واحد می‌باشد.

زمانی که قرص و میدان مرکزی دارای سرعت‌های متفاوتی باشند، در نتیجه برهم‌کنش بین حرکت پلاسمای قرص و مؤلفه قطبیده میدان مغناطیسی مرکزی منجر به تولید مؤلفه‌ای چنبره‌ای برای میدان مغناطیسی در سطح قرص می‌گردد. با انتگرال‌گیری عمودی معادله (۱۳) می‌توان این مؤلفه میدان را به دست آورد، اما در ابتدا باید $\partial\Omega/\partial z$ را محاسبه کنیم. از آنجا که سرعت زاویه‌ای بین مقدار سرعت قرص میانی و سرعت ستاره تغییر می‌کند این کمیت را می‌توان به صورت $\left|\partial\Omega/\partial z\right|=\varepsilon\left|\Omega_*-\Omega\right|/H$ نوشت، ε فاکتور برشی کاهشی و کوچکتر از واحد است[۳]. در نتیجه معادله (۱۳) به صورت زیر تبدیل می‌شود:

$$\varepsilon r\left|\Omega_*-\Omega\right|HB_z+\eta B_\varphi^{\ +}-\eta_H\frac{B_z}{B}B_r^{\ +}, \quad (۱۵)$$

Ω و Ω_* به ترتیب سرعت‌های زاویه‌ای ستاره نوترونی و پلاسمای ستاره می‌باشند. حال می‌توان مؤلفه چنبره‌ای میدان مغناطیسی ایجاد شده در سطح قرص را به دست آورد:

$$B_\varphi^{\ +}=\varepsilon r\left(\Omega_*-\Omega\right)\frac{H}{\eta}B_z+\frac{\eta_H}{\eta}\frac{B_z}{B}B_r^{\ +}, \quad (۱۶)$$

برای محاسبه رابطه فوق به مؤلفه عمودی میدان مغناطیسی نفوذ کرده در قرص $B_z=-s\mu_* r^{-3}$ نیاز است ، که μ_* تکانه مغناطیسی ستاره نوترونی و s ضریب ثابتی کوچکتر از واحد می باشند. هم‌چنین تعیین دو پارامتر η و η_H ضروری است. اگر فرض کنیم $\left|B_z\right|\sim B$، از حل دو رابطه (۵) و (۶) داریم:

$$c_s^2=\xi\Omega_K^2 Hr \quad (۱۷)$$

ξ فاکتوری بدون بعد است و $1>\xi>0$ [۳]. با توجه به مدل α مقاومت مغناطیسی به صورت $\eta=\eta_0 c_s^{\ 2}/\Omega_K$ تعریف می‌شود که رابطه (۱۸) آن را به شکل ساده‌تری تبدیل خواهد کرد. ضریب هال نیز به صورت $\eta_H=L_H v_A$ تعریف می‌شود که L_H طول هال و v_A معرف سرعت آلفن است[۲]. اکنون با استفاده از اطلاعات فوق وحل دستگاه معادلاتی شامل دو ابطه (۱٤) و (۱٦)، مؤلفه چنبره‌ای میدان در سطح قرص به شکل زیر به دست خواهد آمد:

$$B_\varphi^{\ +}=\left[\Gamma_\varphi\left(\Omega_*-\Omega\right)\Omega_K^{-1}\left(-s\frac{\mu_*}{r^3}\right)+\frac{\Gamma_H}{B}\left(-s\frac{\mu_*}{r^3}\right)^2\right]$$
$$\times\left[1+\left(\frac{\eta_H}{\eta}\right)^2\left(-s\frac{\mu_*}{r^3}\right)^2\right]^{-1}, \quad (۱۸)$$

پارامترهای بدون بعد Γ_φ و Γ_H به‌ترتیب ضرایب پخش‌شدگی اهمی و پخش‌شدگی هال می‌باشند که به صورت $\Gamma_\varphi\left[\equiv\varepsilon/\xi\eta_0\right]$ و $\Gamma_H\left[\equiv\left(\beta_R L_H v_A/\eta_0 Hc_s\right)\right]$ تعریف می‌شوند. اگر $x=r/r_{in}$ باشد،و $\omega(x)\left[\equiv\Omega/\Omega_K(r_{in})\right]$ و $\omega_*(x)\left[\equiv\Omega_*/\Omega_K(r_{in})\right]$ را به‌ترتیب سرعت زاویه‌ای بدون بعد ستاره نوترونی و قرص معرفی کنیم، می‌توان معادله (۸) را در حالت بدون بعد به‌دست آورد:

(۱۹)

$$\frac{d}{dx}\left(x^2\omega+\frac{2}{3}f(x)x^3\frac{d\omega}{dx}\right)=$$
$$\left[\beta_\varphi x^{-5/2}\left(\omega_*-\omega\right)+\beta_H x^{-7}\right]\left[1+\left(\frac{\Gamma_H}{\beta_R}\right)^2\left(-\frac{s}{x^3}\right)^2\right]^{-1},$$

که $f(x)\left[\equiv 3\pi\upsilon\Sigma/\dot{M}\right]$ تابع ویسکوزیته در حالت بدون بعد است، $\beta_\varphi\left[\equiv\Gamma_\varphi s^2\left(r_A/r_{in}\right)^{7/2}\right]$ و $\beta_H\left[\equiv\Gamma_H s^3\left(r_A/r_{in}\right)^{7/2}\right]$ نیز ثابت‌هایی از مرتبه واحد و $r_A\left[=\dot{M}^{-2/7}\mu_*^{4/7}\left(GM_*\right)^{-1/7}\right]$ شعاع

آلفن می‌باشند. در نهایت با قراردادن سرعت زاویه‌ای کپلری در معادله (۲۰) شکلی دیگر از تابع ویسکوزیته به دست می‌آید:

(۲۰)
$$f(x)=f(x_{out})+1-x^{-1/2}\int_{x_{out}}^{x}\left(-\beta_\varphi x^{-5/2}\left(\omega_*-\omega\right)+\beta_H x^{-7}\right)\left(1+\left(\frac{\Gamma_H}{\beta_R}\right)^2\left(-\frac{s}{x^3}\right)^2\right)^{-1}dx.$$

اکنون با استفاده از این تابع ویسکوزیته و شرایط مرزی زیر

$$\omega\left(x_{out}\right)=x^{-1.5};\omega\left(x_{in}\right)=\omega_*;\ f\left(x_{out}\right)=1, \qquad (۲۱)$$

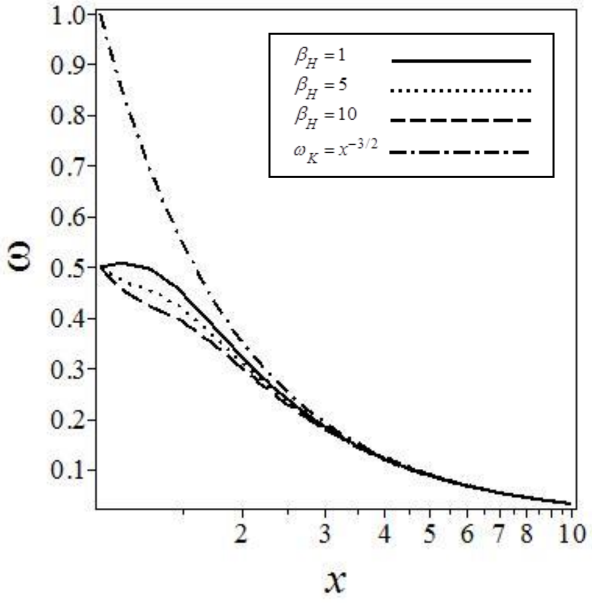
می توان معادله مربوط به سرعت چرخشی را با استفاده از روش رانگ-کوتا-فلبرگ بطور عددی محاسبه نمود.

نتیجه گیری

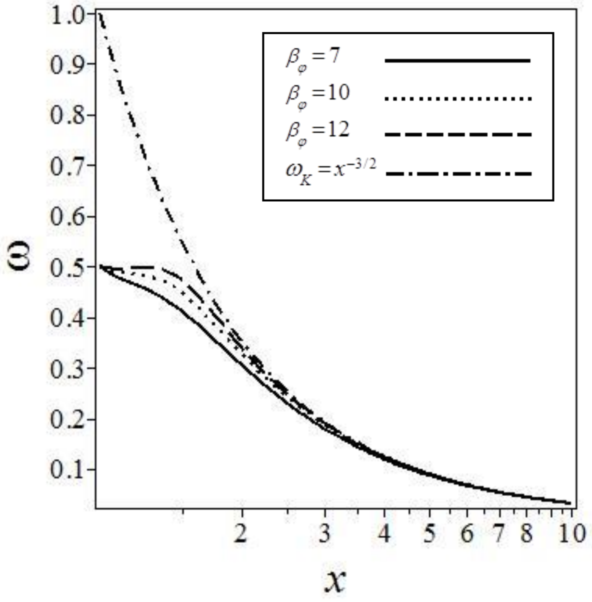
از آنجایی که معادلات دیفرانسیلی غیرخطی است و یافتن یک حل تحلیلی برای آن کار ساده‌ای نیست، به همین‌منظور از روش انتگرالگیری عددی رانگ-کوتا-فلبرگ استفاده می‌کنیم. دقت بالای این روش باعث می‌شود کنترل خطاها آسان گردد که نتیجه آن بهینه‌سازی اندازه گام در مراحل مختلف محاسبات خواهد بود، و این از مزایای روش‌های انطباقی است. اندازه گام در روش رانگ-کوتا-فلبرگ از طریق ترکیب رانگ-کوتای مرتبه ۴ و رانگ-کوتای مرتبه ۵ و با توجه به خطای مطلوب تعیین می‌گردد.

نتایج عددی به‌دست‌آمده نشان می‌دهد که به‌علت کاهش قابل-توجه ویسکوزیته و غلبه فشار مغناطیسی در نواحی داخلی قرص-های برافزایشی، سرعت زاویه‌ای قرص در این ناحیه ازمقدار کپلری منحرف می‌شود. مطابق شکل۱، افزایش پخش‌شدگی هال نیز باعث کاهش سرعت زاویه‌ای و در نتیجه انحراف بیشتر آن از سرعت زاویه‌ای کپلری می‌گردد. درحالی که در نواحی بیرونی مشخصات چرخشی قرص بر نمودار کپلری منطبق خواهد بود.

همان‌طور که در شکل۲ مشاهده می‌شود در حضور پخش شدگی هال، مقاومت نیز نقش مهمی در نفوذ میدان مغناطیسی در قرص وتغییر ساختار آن دارد. افزایش مقاومت کاهش ترمز مغناطیسی را به‌دنبال خواهد داشت و این کاهش نیز سبب انحراف سرعت زاویه‌ای از سرعت زاویه‌ای کپلری می‌گردد. اما با افزایش مقاومت سرعت زاویه‌ای قرص برافزایشی در نواحی داخلی افزایش می‌یابد و قرص سریع‌تر خواهد چرخید.



شکل ۱ : تغییرات شعاعی سرعت زاویه‌ای به ازای ۱۰، ۵ ، ۱ = β_H **و مقادیر ثابت** ۱ = $s=\beta_R=\Gamma_\varphi$ و ۸ = β_φ و ۰٫۵ = ω_*.



شکل ۲ : تغییرات شعاعی سرعت زاویه‌ای به ازای ۱۲، ۱۰ و ۷ = β_H و مقادیر ثابت ۱ = $s=\beta_R=\Gamma_\varphi$ و ۴ = β_H و ۰٫۵ = ω_* .

مرجع‌ها

[۱] P. Ghosh and F. K. Lamb; “Disc Accretion By Magnetic Neuron Stars”; *The Astrophysical Journal* **223**, (1978) 83-87

[۲] M. Shadmehri; “The role of Hall diffusion in the magnetically threaded thin”; *Astrophys Space Sci* **338**, (2012) 151–155

[۳] M. H. Erkut and M. A. Alpar; “On The Rotational Dynamics Of Magnetically Threaded Discs Around Neutron Stars”; *The Astrophysical Journal* **617**, (2004) 461-470

بررسی خواص ساختاری و الکترونی ترکیب GaP در فازهای بلندروی، سینابار و Cmcm با استفاده از روش شبه پتانسیل

صالحی، حمداله؛ امیری، پیمان؛ مخاوات، شیوا؛ ایزدی، زینب

گروه فیزیک، دانشگاه شهید چمران،اهواز

چکیده

در این مقاله ویژگی‌های ساختاری و الکترونی ترکیب GaP در فاز بلندروی و فازهای فشار بالا سینابار و Cmcm مورد بررسی قرار گرفته است. محاسبات با استفاده از بسته‌ی محاسباتی Quantum Espresso/PWSCF که بر پایه‌ی نظریه‌ی تابعی چگالی و تکنیک شبه پتانسیل است، انجام شده است. منحنی‌های انرژی–حجم نشان می‌دهند که فاز سینابار می‌تواند به صورت یک فاز شبه پایدار با کاهش فشار از فاز فشار بالای Cmcm تشکیل می شود. مطالعه‌ی نمودار ساختار نواری بیانگر این است که ترکیب GaP در فاز بلندروی و سینابار نیم‌رسانا و در فاز Cmcm یک فلز است. همچنین نمودار ساختار نواری نیم‌رسانا بودن فاز سینابار و فلز بودن فاز Cmcm را در این ترکیب تأیید می‌کند.

Investigation of structural and electronic properties of GaP in zincblend, cinnabar and Cmcm phases by using psudopotential method

Salehi, Hmadollah; Amiri, Peiman; Mokhavat, Shiva; Izadi, Zeinab

Department of Physics, Shahid Chamran University, Ahwaz

Abstract

In this paper the structural and electronic properties of GaP in the zincblend phase and related high pressure phases, cinnabar and Cmcm, have been investigated. The calculations were performed by using the QUANTUM ESPRESSO/PWSCF package, which is based on the density functional theory, and pseudopotential technique. Energy-Volume curves indicate that cinnabar phase could be formed as a metastable phase by releasing pressure from the high pressure Cmcm phase. The GaP band structure investigations show that this compound in zincblend and cinnabar phases is a semiconductor and in Cmcm phase is a metal.

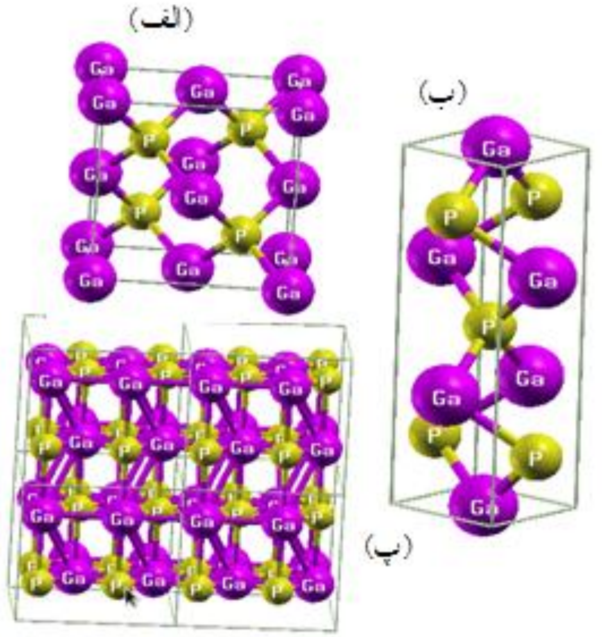
PACS No.70

مقدمه

گالیم فسفید یک ترکیب دوتایی از عنصرهای گالیم (گروه *III*) و فسفر (گروه *V*) است. این ترکیب یک نیم‌رسانا از گروه *III-V* می‌باشد. گالیم فسفید بدلیل داشتن گاف نواری پهن، پایداری گرمایی بالا و کاربرد فراوان در صنعت الکترونیک بسیار مورد مطالعه و بررسی قرار گرفته است [۱و۲]. این ترکیب در دستگاه‌های الکترونوری که در محدوده‌ی طول موج‌های کوتاه ناحیه مرئی عمل می‌کنند، کاربرد دارد[۳]. *GaP* در دمای اتاق و در شرایط محیط در ساختار مکعبی بلندروی با گروه فضایی $F\bar{4}3m$(۲۱۶) متبلور می‌شود[۴]. ساختار بلندروی را می‌توان به صورت دو ساختار *fcc* که نسبت به یکدیگر به اندازه‌ی یک چهارم قطر اصلی جابه‌جا شده‌اند در نظر گرفت. در این ساختار در هر نقطه‌ی پایه دو اتم وجود دارد که مختصات مربوط به هریک از آن‌ها به صورت $(0\ 0\ 0)$ و $(\frac{1}{4}\frac{1}{4}\ \frac{1}{4})$ است. در فشار کمی بالاتر از ۲۰*GPa* فاز فشار پایین بلندروی *GaP* دستخوش یک گذار به فاز فلزی *Cmcm* می‌شود[۵]. فاز هگزاگونال سینابار نیز با کاهش

فشار از فاز فشار بالای *Cmcm* بدست می‌آید و هنگامی که فشار بیشتر کاهش یابد ساختار بلندروی تشکیل می‌شود. چون گذار مستقیم از ساختار بلندروی به ساختار سینابار دیده نشده است، این فاز ناپایدار است. ساختار سینابار (با گروه فضایی $P3_121$) متعلق به سیستم سه‌گوشی است و با دو ثابت شبکه‌ی *a* و *c* و دو پارامتر داخلی u_1 و u_2 توصیف می‌شود. اگر $u_1=u_2=0.5$ با افزایش تقارن در ساختار گروه فضایی $P3_121$ به $P6_422$ تبدیل می‌شود[۶]. ترکیب *GaP* درفاز *Cmcm* دارای ساختار ارتورومبیک *base-centerd* است که در هر سلول واحد دو جفت از اتم‌های *Ga-P* قرار دارند. این فاز واپیچشی از ساختار نمک طعام است. این ساختار با سه ثابت شبکه‌ی مستقل *a*، *b* و *c* و دو پارامتر داخلی y_1 و y_2 توصیف می‌شود[۵].

ساختار بلوری ترکیب *GaP* در هر سه فاز با استفاده از نرم افزار *xcrysden* رسم شده و در شکل ۱ نمایش داده شده است.



شکل ۱: ساختار بلوری ترکیب **GaP** در فازهای الف: بلندروی، ب: سینابار، پ: ***Cmcm***.

روش انجام محاسبات

محاسبات در چارچوب نظریه تابعی چگالی *DFT*[1] و با استفاده از بسته‌ی محاسباتی *PWscf* انجام شده است[۷]. شبه پتانسیل مورد استفاده به روش بار پایسته ساخته شده است و تابعی تبادلی-همبستگی آن از نوع *GGA* می‌باشد. پس از انجام تست‌های همگرایی انرژی قطع بسط تابع موج تخت، ۴۰*Ry* و مش یکنواخت ۷×۷×۷، ۵×۷×۷ و ۷×۷×۷ نقطه در فضای وارون به منظور انتگرال گیری در ناحیه اول بریلوئن انبوهه به ترتیب برای فازهای بلندروی، سینابار و *Cmcm* انتخاب گردید. در شبه-پتانسیل‌های بکار گرفته شده، حالت‌های ۴*s* و ۴*p* اتم گالیم و حالت‌های ۳*s* و ۳*p* اتم فسفر به عنوان حالت‌های ظرفیت در نظر گرفته شده‌اند.

نتایج و بحث

پارامترهای ساختاری

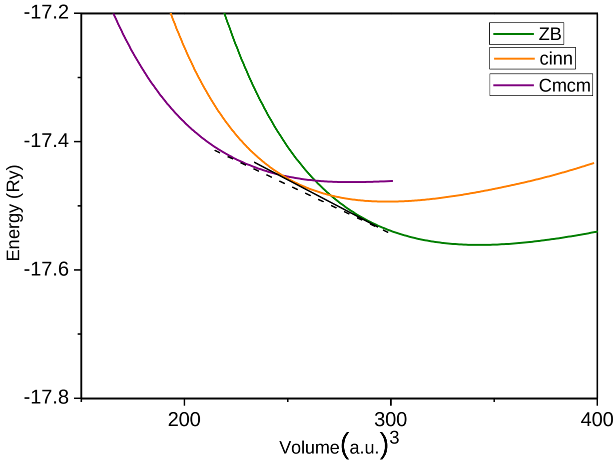
پارامترهای ساختاری بهینه شده برای هر سه فاز بلندروی، سینابار و *Cmcm* در جدول ۱ گزارش و با نتایج دیگران نیز مقایسه شده است. انرژی کل هر سه ساختار به صورت تابعی از حجم محاسبه شده و در شکل ۲ نشان داده شده است. با محاسبه‌ی شیب مشترک بین دو فاز در منحنی‌های انرژی- حجم مربوط به فازهای مختلف می‌توان فشار گذار فازی را بدست آورد (شکل ۲).

جدول ۱: پارامترهای ساختاری سه فاز بلندروی، سینابار و *Cmcm* ترکیب *GaP* و مقایسه با نتایج دیگران.

فازها	*a* (A^o)			*B* (*GPa*)	*B'*
بلندروی					
کارحاضر	۵/۴۵۷	۱/۰۰۰	۱/۰۰۰	۸۸/۱۰۰	۳/۰۹۰
کارنظری[۸]	۵/۵۱۲	۱/۰۰۰	۱/۰۰۰	۷۶/۸۲۳	۴/۲۹۶
کارتجربی[۹]	۵/۴۵۰	۱/۰۰۰	۱/۰۰۰	۹۱/۰۰۰	----
سینابار					
کارحاضر	۳/۸۹۶	۱/۰۰۰	۲/۲۰۳	۹۵/۰۰۰	۳/۵۸۰
کارنظری[1][۶]	۳/۸۴۴	۱/۰۰۰	۲/۲۰۳	----	----
کارتجربی	----	----	----	----	----
Cmcm					
کارحاضر	۵/۵۱۳	۰/۹۶۵	۰/۹۸۷	۱۱۵/۵۰۰	۴/۱۵۰
کارنظری[۲]	۵/۱۴۰	۱/۰۵	۰/۹۷۰	۸۳/۸۴۰	۴/۶۵۰
کارتجربی	----	----	----	----	----

۱: به دلیل عدم کار تجربی و نظری در این فاز ثابت شبکه ترکیب *GaAs* که نزدیک به ترکیب *GaP* است را بهینه کرده‌ایم.

[1] *Density Functional Theory*



شکل ۲: منحنی‌های گذار فازی بلندروی، سینابار و *Cmcm* ترکیب *GaP*.

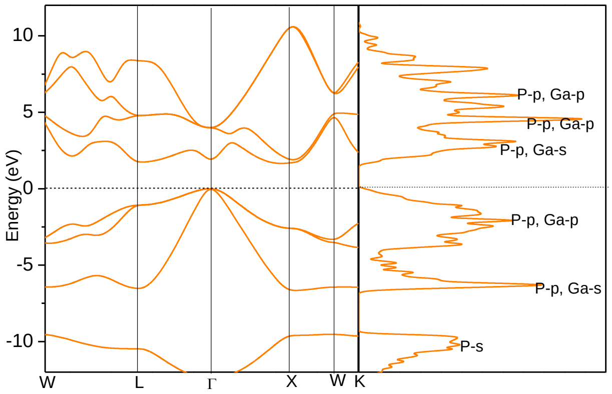
از منحنی‌های انرژی–حجم (شکل ۲) این ترکیب در سه فاز درمی‌یابیم که فشار گذار از فاز بلندروی به فاز *Cmcm*، ۲۰/۹*GPa* و از فاز بلندروی به سینابار ، ۲۴*GPa* است. از آن‌جایی که فشار گذار از بلندروی به *Cmcm* کم‌تر است در ابتدا این فاز (*Cmcm*) با افزایش فشار ترکیب در ساختار بلندروی شکل می‌گیرد. منحنی انرژی بر حسب حجم نشان می‌دهد که ساختار بهینه در فاز *Cmcm* حجم کم‌تری نسبت به فاز سینابار دارد. این بدان معنی است که برای گذار از فاز *Cmcm* به سینابار باید حجم سیستم را افزایش دهیم، این افزایش حجم معادل کاهش فشار (۱۷*GPa*) است. برای گذار مستقیم از فاز بلندروی به سینابار نیاز به افزایش بیشتر فشار در سیستم است و این بیانگر این است که در ابتدا فاز میانی *Cmcm* شکل می‌گیرد و گذار مستقیم از بلندروی به سینابار وجود ندارد و این فاز ناپایدار است.

خواص الکترونی

برای بررسی خواص الکترونی ترکیب *GaP*، ساختار نواری در راستایی با بیشترین تقارن در منطقه‌ی اول بریلوئن رسم شده است. برای تحقیق بیشتر گاف نواری، چگالی حالت‌های کلی نیز نمایش داده شده است. سطح فرمی منطبق بر انرژی صفر است.

فاز بلندروی

ساختار نواری و چگالی حالت‌های کلی (*TDos*) ترکیب *GaP* در فاز بلندروی در شکل ۳ نمایش داده شده است. این شکل وجود یک گاف نواری غیرمستقیم به اندازه‌ی ۱/۶۴۲*eV* را در $\Gamma\rightarrow\Delta_{min}$ را نشان می‌دهد که با مقدار تجربی ۲/۳۵۰*eV* [۹] اختلاف دارد و این اختلاف ناشی از ناتوانی نظریه تابعی چگالی در محاسبه‌ی دقیق جمله‌ی تبادلی همبستگی است. وجود این گاف تأییدی بر خاصیت نیم‌رسانایی ترکیب *GaP* در فاز بلندروی است.

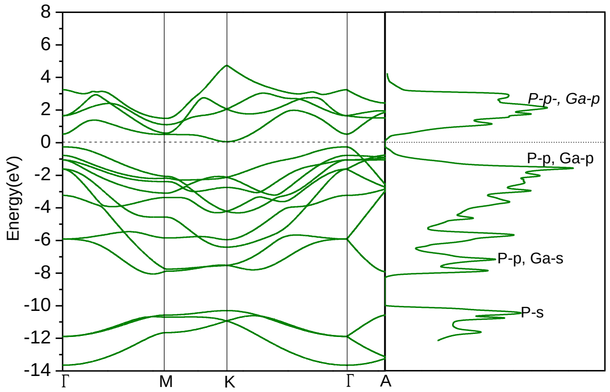


شکل ۳: ساختار نواری (سمت چپ) و چگالی حالت‌های کلی (سمت راست) فاز بلندروی ترکیب ***GaP***.

قسمت عمده‌ی چگالی حالت‌ها در بخش بالایی نوار ظرفیت از حالت‌های *p* اتم فسفر به همراه سهم کوچکی از حالت‌های *p* و *s* اتم گالیم تشکیل شده است. مینیمم نوار ظرفیت به طور عمده از حالت‌های *s* اتم فسفر تشکیل شده است. حالت‌های *s* اتم گالیم و *p* اتم فسفر سهم عمده را در مینیمم نوار رسانش دارند و این منجر به شکل گیری گاف نواری میان این حالت‌ها و حالت‌های *p* اتم‌های گالیم و فسفر می‌شود.

فاز سینابار

نمودار ساختار نواری و *TDos* برای فاز سینابار در شکل ۴ نشان داده شده است. این نمودار یک گاف غیرمستقیم به اندازه‌ی ۰/۵*eV* را بین دو نقطه‌ی *Γ* و *K* نشان می‌دهد.

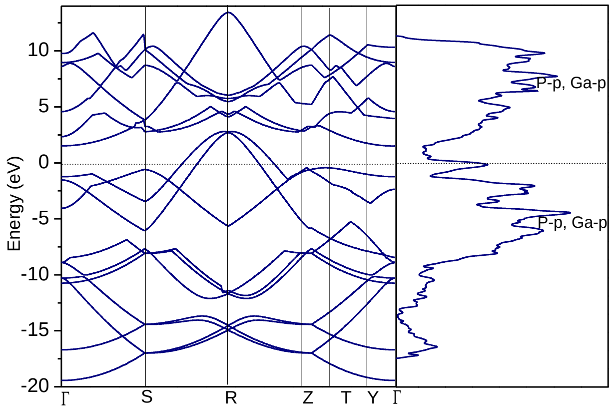


شکل ۴: ساختار نواری (سمت چپ) و چگالی حالت‌های کلی (سمت راست) فاز سینابار ترکیب ***GaP***.

پایین‌ترین پیک در $-۱۰/۴۶eV$ مربوط به حالت‌های s اتم فسفر و بلندترین پیک قابل تشخیص در $۲/۱۳eV$ در نوار رسانش مربوط به اربیتال‌های p اتم‌های گالیم و فسفر است. ماکزیمم نوار ظرفیت و مینیمم نوار رسانش هر دو ترکیبی از حالت‌های p اتم فسفر و گالیم هستند بنابراین گاف نواری بین این حالت‌ها تشکیل می‌شود.

فاز *Cmcm*

در شکل ۵ نمودار ساختار نواری و چگالی حالت‌های کلی برای فاز *Cmcm* رسم شده است. این شکل بیانگر این واقعیت است که فاز ساختاری *Cmcm* فلز است زیرا نوارهای انرژی از سطح فرمی عبور می‌کنند.



شکل ۵: ساختار نواری (سمت چپ) و چگالی حالت‌های کلی (سمت راست) فاز ***Cmcm***.

با توجه به اینکه هیچگونه گزارش قبلی در مورد خواص اپتیکی دو فاز سینابار و *Cmcm* وجود ندارد، این محاسبات می‌تواند موجب غنای دانسته‌های اپتیکی در مورد این ترکیب شود.

نتیجه گیری

محاسبات مربوط به منحنی‌های انرژی- حجم فازهای مختلف بیانگر این است که در ابتدا یک گذار از فاز بلندروی به فاز *Cmcm* (۲۰/۰۹*GPa*) رخ می‌دهد و سپس با کاهش فشار از فاز *Cmcm* (۱۷*GPa*) به فاز سینابار می‌رسیم. برای گذار مستقیم از فاز بلندروی به سینابار نیاز به افزایش بیشتر فشار (۲۴*GPa*) در سیستم است و این بیانگر این است که در ابتدا فاز میانی *Cmcm* شکل می‌گیرد و گذار مستقیم از بلندروی به سینابار وجود ندارد و این فاز ناپایدار است. محاسبات مربوط به ساختار نواری بیانگر خاصیت نیم‌رسانایی ترکیب *GaP* در فازهای بلندروی و سینابار و خاصیت فلزی این ترکیب در فاز *Cmcm* است.

مرجع‌ها

[1] *R. Himadri, et al, " An ab initio study of ground state, electronic and thermodynamical properties of GaP and Ga_2P", J Therm Anal Calorim* ***107*** *(2012) 39–44*

[2] *O. Arbouche, B. Belgoumene, B. Soudini, "First-principle study on structural properties and phase stability of III-phosphide (BP, GaP, AlP and InP)", Computational Materials Science* ***47*** *(2010) 685-692*

[3] *R. Paudyal,"Gallium Phosphide", 2002.*

[4] *L. Sukit, P. Reunchan, A. Janotti and G. Chris, Phs. Rev. B* ***77*** *(2008) 195-209.*

[5] *A. Mujica, et al, " High-pressure phases of group-IV, III-V, and II-VI compounds", Reviews of modern physics* ***75****, 2003.*

[6] *A.Mujica, et al,"Theoretical study of the cinnabar phases in GaAs and GaP", Phys. Rev. B,* ***57****, (1998).*

[7] *Http://www.quantum-espresso.org.*

[8] *M. Yousaf, M. A. Saeed, R. Ahmed, "An improved study of electronic band structure and optical parameters of X-Phosphides (X= B, Al, Ga, In) by modified Becke-Johnson potential" Commun. Theor. Phys.* ***58*** *(2012) 777–784.*

[9] *R. W. G. Wyckoff, Crystal structures, 2nd ed., Krieger, Malabar (1986).*

ویژگی‌های ساختاری و الکترونی فازهای فشار بالای ترکیب HgTe با استفاده از نظریه‌ی تابعی چگالی

صالحی ، حمداله ؛ امیری، پیمان ؛ ایزدی، زینب ؛ مخاوات، شیوا

گروه فیزیک، دانشگاه شهید چمران،اهواز

چکیده

در این مقاله خواص ساختاری و الکترونی ترکیب تلوراید جیوه در فاز بلندروی و فازهای فشار بالای هگزاگونال و ارتورومبیک مورد بررسی و مقایسه قرار می‌گیرد. محاسبات با استفاده از روش شبه‌پتانسیل در چارچوب نظریه‌ی تابعی چگالی و با استفاده از نرم‌افزار کوانتوم اسپرسو صورت گرفته است. منحنی‌های انرژی –حجم نشان می‌دهد که ترکیب HgTe با افزایش فشار ابتدا از فاز ساختاری پایدار (بلندروی) به فاز ساختاری سینابار گذار کرده و سپس با افزایش بیشتر فشار ترکیب به فاز ساختاری Cmcm گذار می‌کند. نتایج ساختار نواری نشان‌دهنده‌ی خاصیت نیم‌رسانایی ترکیب در فاز سینابار و خاصیت فلزی ترکیب در فاز Cmcm است.

Structural and electronic properties of high pressure phases of HgTe: Using Density Functional Theory

Salehi, Hamdollah; Amiri, Peiman; Izadi, Zeinab; Mokhavat,Shiva,

Department of Physics, Shahid Chamran University, Ahwaz

Abstract

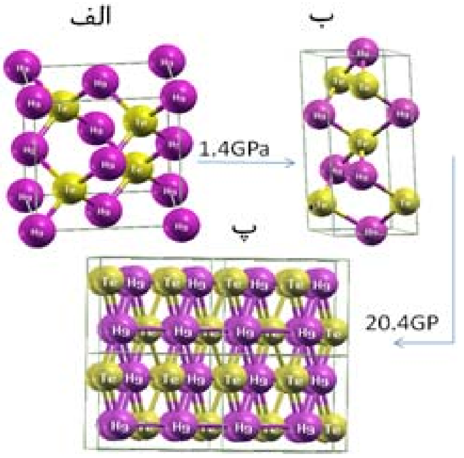
In this paper,the structural and electroic properties of Mercury Telluride (HgTe) in zincblend phase and related *high pressure phases hexagonal and orthorhombic have been studied. The calculations have been performed with pseudopotantial method in density functional theory framework by using Quantum-Espresso package. Energy-Volume curves indicate that the HgTe compound makes transition from stable (ZincBlend) phase to cinnabar phase, as the pressure increased. Further increase in pressure leads to a transition to the Cmcm structural phase. It can be seen from band structure calculation that the cinnabar phase has semiconducting property , whereas the cmcm phase exhibit metallic property.*

PACS No.70

مقدمه

ترکیب تلورایدجیوه یکی از مواد نیم‌رسانای متعلق به گروه IV-II می‌باشد. در سال‌های اخیر این دسته از نیم‌رساناها به دلیل داشتن گاف نواری مستقیم و توانایی گسیل نور در دمای اتاق مورد توجه بسیاری واقع شده‌اند. این ترکیبات در بسیاری از زمینه‌ها، از قبیل ابزارهای لیزر حالت جامد، ابزارهای فوتوولتائیک، سلول‌های خورشیدی، سیستم‌های کنترل از راه دور، فیلم‌های نازک، ترانزیستورها، آشکارسازها، سیستم‌های تصویربرداری و غیره کاربرد فراوان دارند. این ترکیب در فشار معمولی دارای فاز مکعبی مرکزسطحی و ساختار بلندروی می‌باشد. در این فاز ترکیب دارای خاصیت شبه‌فلزی (نیم‌رسانایی با گاف نواری صفر) است [۱-۳]. مطالعات تجربی بر روی تلورایدجیوه به وسیله‌ی پراش پرتو X یک گذار فاز مرتبه اول از ساختار بلندروی به ساختار هگزاگونال سینابار(نیم‌رسانا) را در فشار ۱/۲۵ گیگا پاسکال و سپس به ساختار نمک طعام (فلز) در فشار ۸ گیگاپاسکال نشان می‌دهند[۴].

همچنین دیگر نتایج تجربی ضمن تأیید گذارهای ساختاری نام‌برده، حضور یک فاز ارتورومبیک به دنبال فاز نمک طعام را پیش‌بینی می‌کنند[۵]. فشار گذار تجربی از فاز نمک طعام به فاز اورتورومبیک ۱۱ گیگا پاسکال می‌باشد[۶]. شکل ۱ به صورت شماتیک ترکیب تلورایدجیوه را در سه فاز ساختاری بلندروی، سینابار و ارتورومبیک به همراه فشارهای گذار تجربی معادل نشان می‌دهد.



شکل **۱**: : الف: ساختار بلندروی، ب: ساختار هگزاگونال، پ: ساختار اورتورومبیک Cmcm.

روش انجام محاسبات

محاسبات در چارچوب نظریه‌ی تابعی چگالی و با استفاده از بسته‌ی محاسباتی کوانتوم اسپرسو انجام شده است. در این بسته‌ی محاسباتی معادلات تک‌ذره‌ی کوهن- شم با استفاده از روش شبه‌پتانسیل و بسط تابع موج الکترون‌های ظرفیت بر حسب امواج تخت حل می‌گردد. در محاسبات از شبه‌پتانسیل‌های ساخته شده به روش بار پایسته بر پایه‌ی تقریب شیب تعمیم‌یافته (GGA) استفاده شده است. اربیتال‌های ظرفیت در این ترکیب برای اتم Hg ‏5d و 6s ، و برای اتم Te، 5s و5p می‌باشد. پس از انجام تست‌های همگرایی لازم، مقدار انرژی قطع تابع موج تخت برابر با ۵۰Ry انتخاب گردید. انتگرال‌گیری بر روی ناحیه‌ی اول بریلوئن، با استفاده از مش یکنواخت ۸×۸×۸ ، ۶×۸×۸ و ۸×۸×۸ به ترتیب برای فازهای بلندروی، سینابار و ارتورومبیک انجام گردید.

نتایج

خواص ساختاری

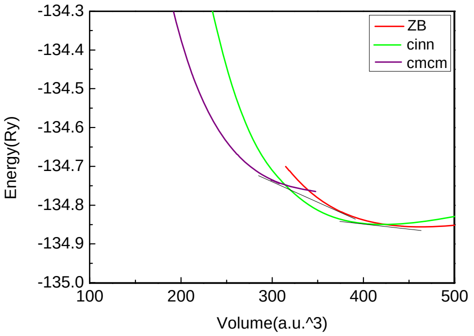
در ساختار بلندروی سلول واحد شامل دو اتم جیوه و تلوریوم می‌باشد که به ترتیب در جایگاه‌های (۰،۰،۰) و (۰/۲۵، ۰/۲۵، ۰/۲۵) قرار دارند. پارامتر شبکه‌ی تجربی برای این ساختار ۶/۴۵۳ آنگستروم می‌باشد. فازهای فشار بالای ترکیب HgTe فازهای سینابار و Cmcm هستند. فاز سینابار که در فشارهای بالا پایدار است را می‌توان به عنوان یک شبکه‌ی هگزاگونال در نظر گرفت. این فاز توسط دو پارامتر شبکه‌ی a وc، و دو پارامتر داخلی u وv تعریف می‌شود. در این ساختار که از تقارن کمتری نسبت به ساختار بلندروی برخوردار است اتم‌های Hg در مکان‌های (u ،۰،۰/۳۳۳) و اتم‌های Te در مکان‌های (v ،۰،۰/۸۳۳) قرار دارند. u وv برای این ترکیب به ترتیب برابر با ۰/۶۴۱ و۰/۵۶۲ می‌باشند[۷و۸].

دیگر فاز فشار بالای مطالعه شده فاز Cmcm است. در این فاز تلورایدجیوه دارای ساختار ارتورومبیک با چهار اتم در سلول واحد است. ساختار ارتورومبیک توسط سه ثابت شبکه‌ی مستقل a، b وc، و دو پارامتر داخلی بدون بعد u وv معرفی می‌شود [۸]. در این فاز اتم‌های Hg در موقعیت‌های (۰،u،۰/۲۵) و اتم‌های Te در موقعیت‌های (۰،v،۰/۲۵) واقع شده‌اند و u وv برای این فاز به ترتیب برابر با ۰/۶۲۴ و ۰/۱۵۲ می‌باشد[۶].

در شکل ۲ منحنی‌های انرژی کل بر حسب حجم برای سه فاز نمایش داده شده است. این منحنی‌ها از برازش معادله حالت مورناگون به انرژی‌های محاسبه شده در حجم‌های مختلف بدست آمده‌اند. با محاسبه‌ی شیب مشترک منحنی‌های دو فاز می‌توان فشار گذار میان آن‌ها را به دست آورد. از منحنی‌های انرژی حجم درمی‌یابیم که فشار گذار از فاز بلندروی به سینابار در حدود ۱/۸گیگا پاسکال و از فاز بلندروی به فاز ارتورومبیک ۲۱ گیگاپاسکال می‌باشد. بنابراین فشار گذار از فاز بلندروی به سینابار کمتر از فشار گذار از فاز بلند روی به ارتورومبیک بوده و ترتیب گذارهای فازی برای این ساختار به صورت زیر می‌باشد:

ZincBlend → Cinnabar → Cmcm

این بدان معناست که برای گذار از فاز بلندروی به فاز سیناباار و سپس به ارتورومبیک بایستی حجم سیستم را کاهش داد، که این کاهش حجم در سیستم معادل با افزایش فشار می‌باشد و این در توافق با ترتیب فاز تجربی می‌باشد[۶].



شکل ۲: منحنی‌های گذار فازی ترکیب تلورایدجیوه در ساختارهای بلندروی، سیناباار و ارتورومبیک.

مقادیر ثابت شبکه، مدول حجمی، مشتق مدول حجمی و پارامترهای داخلی محاسبه شده برای هر سه ساختار در جدول ۱ گزارش و با نتایج دیگران نیز مقایسه شده است.

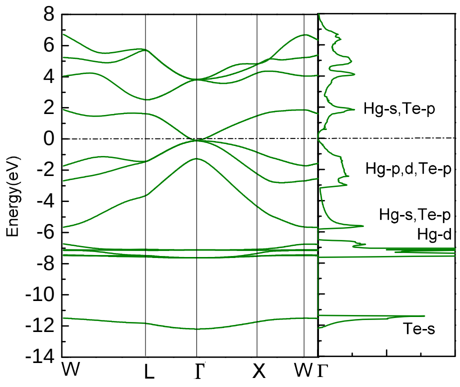
جدول ۱:ویژگی‌های ساختاری سه فاز HgTe در حالت تعادل

فازها	a (A°)			B (GPa)	B'
بلندروی					
کارحاضر	۶/۴۸۰	۱/۰۰۰	۱/۰۰۰	۴۱/۴	۶/۱۲
کارنظری[۷]	۶/۴۸۶	۱/۰۰۰	۱/۰۰۰	۴۸/۴	
کارتجربی[۹]	۶/۴۵۳	۱/۰۰۰	۱/۰۰۰	۴۲/۳	
سیناباار					
کارحاضر	۴/۴۸۲	۱/۰۰۰	۲/۲۳۵	۵۲/۹	۵/۲۲
کارنظری[۷]	۴/۳۸۲	۱/۰۰۰	۲/۲۳۵	۵۷/۷	
کارتجربی[۱۰]	۴/۴۸۳	۱/۰۰۰	۲/۲۸۸		
ارتورومبیک					
کارحاضر	۵/۷۲۰	۱/۰۸	۰/۹۰۲	۱۵۱/۳	۲/۵۲
کارنظری[۷]	۵/۶۱۲	۱/۱۰۳	۰/۹۰۹	۱۲۴	
کارتجربی[۱۱]	۵/۵۶۳	۱/۱۰۵	۰/۹۰۳		

خواص الکترونی

فاز بلندروی:

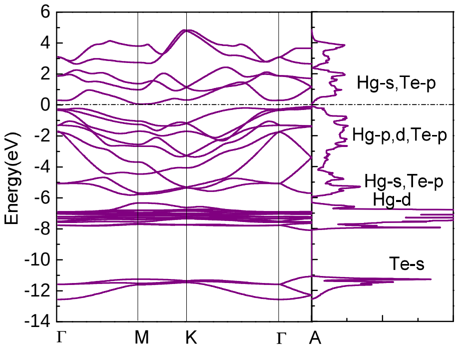
شکل ۳ منحنی انرژی بر حسب بردار موج الکترونی در راستای خطوط تقارنی و منحنی چگالی حالت‌های کلی برای ترکیب را در فاز بلندروی نمایش می‌دهد. حالت‌های درونی نوار ظرفیت عمدتاً ناشی از حالت s اتم تلوریوم و منطبق بر پایین‌ترین نوار در نمودار ساختار نواری می‌باشد. بخش دوم در میانه‌ی نوار ظرفیت حول انرژی ۸- تا ۶- الکترونولت مربوط به حالت 5d جیوه می‌باشد. این بخش متناظر با پنج نوار ظرفیت در شکل بوده که با هم همپوشانی کرده‌اند. همان‌گونه که نمودار ساختار نواری نشان می‌دهد، این نوارها صاف بوده و بنابراین چگالی حالت‌های مربوط به آن‌ها نسبت به بقیه‌ی ترازها بیشتر است. بالای نوار ظرفیت از حالت‌های p اتم تلوریوم به همراه سهمی ناشی از حالت‌های p وd اتم جیوه تشکیل شده است. پایین‌ترین نوار رسانش در نقطه‌ی Γ ترکیبی از حالت‌های s جیوه و p تلوریوم است. در این نقطه مینیمم نوار رسانش و ماکزیمم نوار ظرفیت همدیگر را لمس می‌کنند که این امر منجر به صفر شدن اندازه‌ی گاف نواری می‌شود. این نتیجه بیانگر خصوصیت شبه‌فلزی تلوراید جیوه در این فاز است و با نتایج بدست آمده توسط دیگران سازگار است [۷].



شکل ۳: منحنی ساختار نواری (چپ) به همراه چگالی حالت‌های کلی (راست) برای فاز بلندروی HgTe.

فاز سیناباار:

ساختار نواری و چگالی حالت‌های کلی برای ساختار سیناباار در شکل ۴ رسم شده است.

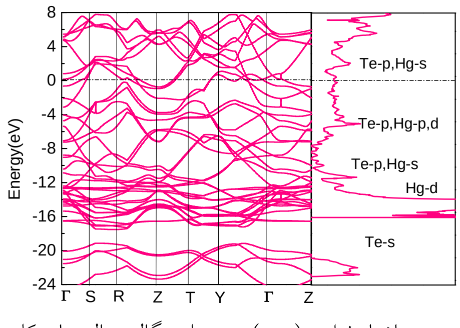


شکل ۴: منحنی ساختار نواری (چپ) به همراه چگالی حالت‌های کلی (راست) برای فاز سینابار HgTe.

پایین‌ترین قسمت نوار ظرفیت در اطراف انرژی ۱۲- الکترون‌ولت ناشی از حالت s اتم‌های تلوریوم است. در میانه‌ی نوار ظرفیت و در اطراف انرژی ۸- تا ۶- الکترون‌ولت بلندترین قله مربوط به حالت‌های d اتم‌های جیوه می‌باشد. بالای نوار ظرفیت از حالت‌های p اتم‌های تلوریوم و حالت‌های p و d اتم‌های جیوه تشکیل شده است در حالی که پایین نوار رسانش ترکیبی از حالت‌های s اتم‌های جیوه و p اتم‌های تلوریوم می‌باشد. در نقطه‌ی Γ یک گاف نواری مستقیم به بزرگی ۰/۱۸ الکترون ولت دیده می‌شود. که این نتیجه بیانگر خاصیت نیم‌رسانایی ترکیب تلورایدجیوه در این فاز می‌باشد.

فاز ارتورومبیک

شکل ۵ ساختار نواری و منحنی چگالی حالت‌های تلوراید جیوه را در فاز اورتورومبیک نشان می‌دهد. در این فاز به دلیل اینکه نوارهای انرژی بالای نوار ظرفیت از سطح فرمی عبور و به سمت انرژی صفر الکترون ولت شیفت پیدا می‌کنند، یک ساختار فلزی مشاهده می‌شود.



شکل ۵: منحنی ساختار نواری (چپ) به همراه چگالی حالت‌های کلی (راست) برای فاز ارتورومبیک HgTe.

نتیجه گیری

با توجه به محاسبات مربوط به نمودار انرژی حجم فازهای مختلف فشار گذار از فاز بلندروی به فاز سینابار برابر با ۱/۸ گیگا پاسکال و فشار گذار از فاز سینابار به Cmcm ۲۱ گیگاپاسکال تخمین زده شد، که بیانگر ناپایداری سیستم در فازهای سینابار و Cmcm است. نتایج ساختار نواری و چگالی حالت‌های کلی بیانگر خاصیت شبه فلزی ترکیب تلورایدجیوه در فاز بلند روی و خاصیت نیم‌رسانایی آن در فاز سینابار است. همچنین نتایج این محاسبه برای ساختار ارتورومبیک یک فاز فلزی را نشان می‌دهد.

مراجع

[1] V.,Dinesh, S.,Shriya, R., khenata; "structural phase transition and elastic properties of mercury chalcogenides";Journal materials chmictry and physics 135,36365e 384, 2012.

[2] S.,Mnasri, S.,Abdi-Ben Nasrallah, N.,Sfina, Bouarissa,N.;"Electronic, lattice vibration and mechanical properties of CdTe, ZnTe, MnTe, MgTe, HgTe and their ternary alloys", Semoconductor Sience and Tecnologhy Vol.24 Number9,2009.

[3] R.,Franco, P.,Mori-Sanchez, J.M.,Recio, ;"Theoretical compressibilities of high-pressure ZnTe polymorphs", Physical Review B 68 ,195208, 2003.

[4] A.,Onodera, M.,Motobayashi, T.,Seike, O.,Fukunage, O.,Backman, CM.,Johannison, T., Uppsala, Sweden, Vol.1, Arkitektkopia,Uppsala, p.321,1982.

[5] V.,Briois,C., Brouder, P., Sainctavit , A.S.,J.P.,Miguel , Itie´ , A.,Polian;Phys.Rev.B56 ,5866, 1997.

[6] M. I. McMahon, N. G. Wright,* D. R. Allan,† and R. J. Nelmes," High-pressure crystal structure of HgTe-IV", VOLUME 53, NUMBER 5, 1995.

[7] H.,Aimin, , Y., Xiaocui, , Y., Ruomeng, , G.,Chunxiai, L.,Riping, , T.,Yongjun; "study of structural stabilities and optical properties of HgTe under high pressure"; Journal of physics and Chemistry of Solids 70,433-438, 2009.

[8] C.,Michel , O., Zakharov, A., Rubio, and L., Marvin Cohen," AB initio calculations of the pressure-induced structural phases transitions for four II-VI compounds", VOLUME 55, NUMBER 19, 1996.

[9] A.Werner,H.D.Hochheimer,K.Stro¨ssner,Phys.Rev.B28, 3330 1983.

[10] N.G. Wright, M.I. McMahon, R.J. Nelmes, A.S. Miguel, Phys. Rev. B 48, 13111, 1993.

[11] M.I. McMahon, N.G. Wright, D.R. Allan, R.J. Nelmes, Phys. Rev. B 53, 2163, 1996.

محاسبه‌ی خواص الکترونی و ساختاری ترکیب سلنید جیوه در فاز سینابار

صالحی، حمدا... ؛ انیس حسینی، فیروزه؛ شیوا، مخاوات

گروه فیزیک، دانشگاه شهید چمران،اهواز

چکیده

در این مقاله خواص ساختاری و الکترونی ترکیب سلنید جیوه از جمله ثابت شبکه بهینه، مدول حجمی و مشتق آن، تراکم پذیری، حجم بهینه، انرژی کل بهینه، چگالی حالت ها، چگالی ابر الکترونی و ساختار نوارهای انرژی این ترکیب در فاز سینابار مورد بررسی قرار می گیرد. محاسبات با استفاده از روش شبه پتانسیل در چارچوب نظریه‌ی تابعی چگالی اختلالی و با استفاده از نرم افزار کوانتوم اسپرسو انجام گرفته است. نتایج به دست آمده با نتایج موجود در مورد ترکیبات مشابه در توافق است.

کلمات کلیدی: پارامترهای ساختاری، خواص الکترونی، سلنید جیوه، فاز سینابار، شبه پتانسیل، کوانتوم اسپرسو.

Calculation of structural and electronic properties of HgSe in cinnabar phase

Salehi, Hamdollah; Anis Hosseini, Firoozeh; Mokhavat, Shiva

Department of Physics, Shahid Chamran University, Ahwaz

Abstract

In this paper structural and electronic properties of mercury selenide such as lattice constant, bulk modulus and its derivative, compressibility, optimized volume optimized , total energy, density of states, charge density and band structure in the cinnabar phase have been studied. The calculations have been performed using pseudopotential method in the framework of perturbated density functional theory by Quantum Espresso package. The obtained results have been agreement with the available results for similar compounds.

Keyword: structural properties, electronic properties, mercury selenide, cinnabar phase, pseudopotential, quantum espresso.

PACS No. 70

مقدمه

سلنید جیوه متعلق به ترکیبات نیم رسانای گروه *II-VI* می با شد[۱]. در فشار معمول دارای ساختار بلندروی و در فشارهای بالاتر به ترتیب به فازهای *cinnabar* (۰/۷۵*GPa*)، *rocksalt* (۱۶*GPa*) و تتراگونال (۲۸*GPa*) گذار می کند[۲]. فاز سینابار این ترکیب متعلق به گروه فضایی(۱۵۲) *P3121* است، که دارای ساختار تریگونال (یا هگزاگونال)، همانند شکل۱می باشد. فاز بلندروی سلنید جیوه به عنوان یک نیم رسانای تبهگن با گاف صفر یا یک نیمه فلز شناخته شده، که تحت فشارهای بالا (۰/۴تا۱/۱۵ گیگا پاسکال) به یک ساختار سینابار نیم رسانا با گاف کوچک گذار می کند[۴-۳]. از سلنید جیوه برای تولید مواد نانو ساختار مصنوعی قابل استفاده در آشکارسازها و تابش کننده های مادون قرمز، لیزرهای قابل تنظیم، کولرهای ترمو الکتریکی، دستگاه های مایکروویو و ... استفاده می شود[۷-۵].

روش محاسبات

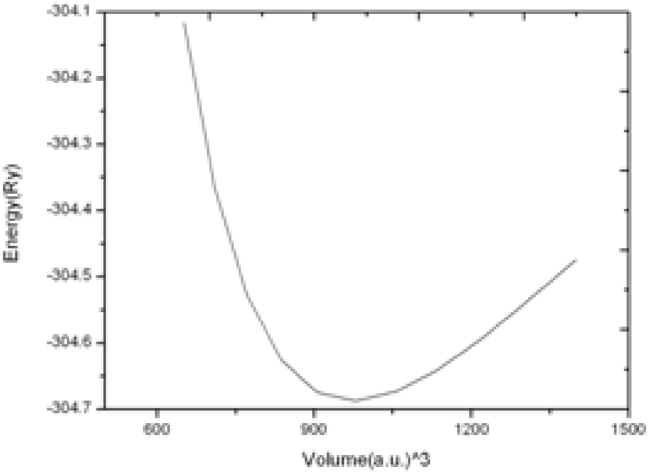
محاسبات با استفاده از روش شبه پتانسیل ابتـدا بـه سـاکن بـر حسب امواج تخت، توسط کد محاسباتی اسپرسو انجام گرفته است [۸]. در محاسبات از شبه پتانسیل های ساخته شـده بـه روش بـار پایسته بر پایه‌ی تقریب چگالی موضعی(*LDA*) استفاده کـرده ایـم. اربیتال‌های ظرفیت برای عنصر جیوه وسلنیم به ترتیـب عبارتنـد از *۶p*، *۶s*، *۵d* و *۴p*، *۴s* . ثابت شبکه های *a* و *c* که در محاسبات از آن ها استفاده کرده ایم به ترتیب برابر با *a.u.* ۷/۸۹ و *a.u.* ۱۸/۱۹ می باشند[۹]. جایگاه های اتمی ترکیب سلنید جیوه در فاز سـینابار بر اساس جایگـاه هـای وایکـوف، بـرای *Hg* شـامل سـه جایگـاه *(u,0,1/3)* و *(0,u,2/3)* و *(-u,-u,0)* و بـرای *Se* نیـز شـامل سـه جایگاه *(v,0,5/6)* و *(0,v,1/6)* و *(-v,-v,1/2)* می باشند که مقدار *u* برای جیوه عبارتست از۰/۶۶۲و مقدار *v* برای سـلنیم۰/۵۴۰ مـی باشد[۳]. انرژی قطع را برای توابع موج پایه ۲۸ ریـدبرگ انتخـاب کرده ایم، و تعداد *k-point* ها برابر با نمونه ای بـا ابعـاد $3\times7\times7$ در منطقهٔ اول بریلوئن مـی باشـند کـه بـه طـور اتوماتیـک توسـط اسپرسو و به روش مونخورست–پک تولید شده اند. همگرایی را بر مبنای انرژی قرار دادیـم کـه بـا تولیـد ۵ چرخـه و بـا دقـت $۱۰^{-۷}$ ریدبرگ به همگرایی رسیدیم.

پارامترهای ساختاری

یکی از پارامترهای ساختاری مهم ثابت شبکه می باشد. این ثابت به صورت تجربی اندازه گیری شده و در دسترس می باشد، با این وجود برای تأیید نظری مسئله مجدداً محاسبه می شود. تغییرات انرژی کل بر حسب حجم از طریق معادله ی حالت مورناگون و به شکل زیر به دست می آید[۱۰]:

$$E(V)=E_0+\frac{B_0V_0}{B'}\left[\frac{V}{V_0}+\frac{(V/V_0)^{1-B'}-B'}{B'-1}\right]$$

که در این رابطه V_0 حجم سلول اولیه، E_0 انرژی حالت پایه در دما و فشار صفر، B_0مدول حجمی و B'مشتق آن است. بـا اسـتفاده از این معادله می توان نمودار انرژی کـل بـر حسـب حجـم را رسـم کرد(شکل ۲)، که حجم مربوط به مینـیمم انـرژی کـل(E_0) همـان حجم بهینه(V_0) می باشد.



شکل ۱: نمودار انرژی کل بر حسب حجم سلول واحد سلنید جیوه با استفاده از تقریب ***LDA*** در فاز سینابار.

پارامترهای ساختاری محاسبه شده بـرای ترکیـب سـلنید جیـوه از جمله ثابت شبکه ، حجم بهینه ، مـدول حجمـی ، مشـتق آن و... برای فاز سینابار و به کمک تقریب چگالی موضـعی در جـدول(۱) آورده شده اند.

جدول ۱: : پارامترهای ساختاری محاسبه شده در کار حاضر

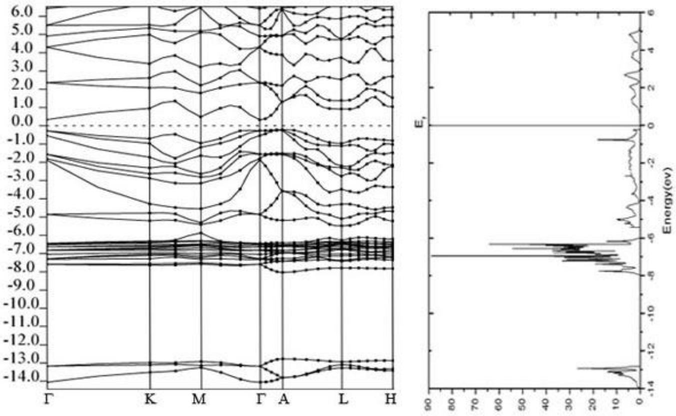
کمیت محاسبه شده	کار حاضر	مقدار تجربی[۹]
a (a.u.)	۷/۸۸	۷/۸۹
درصد خطا نسبت به مقدار تجربی	۰/۱۲	–
c (a.u.)	۱۷/۹۵	۱۸/۱۹
درصد خطا نسبت به مقدار تجربی	۱/۳۲	–
$V\ (a.u.)^3$	۹۷۸/۳	–
B (kbar)	۶۵۴	–
B'	۴/۷۴	–
$K\ (kbar)^{-1}$	$۱,۵۳*۱۰^{-۳}$	–
E(Ry)	-۳۰۴,۶۸۵۳۹	–

چگالی حالت ها و ساختار نواری

نمودار چگالی حالت های کل سلنید جیوه بر حسـب انـرژی در گسترهٔ‌ی ۱۴- تـا ۶ الکتـرون ولـت در شـکل(۳) همزمـان بـا ساختار

نواری این ترکیب رسم شده است. در این نمـودار مقیـاس انـرژی صفر نشان دهنده‌ی مکان تراز فرمی است که با خـط عمـود نشـان داده شده است. در این شکل مقدار گاف غیر مستقیم مشاهده شده

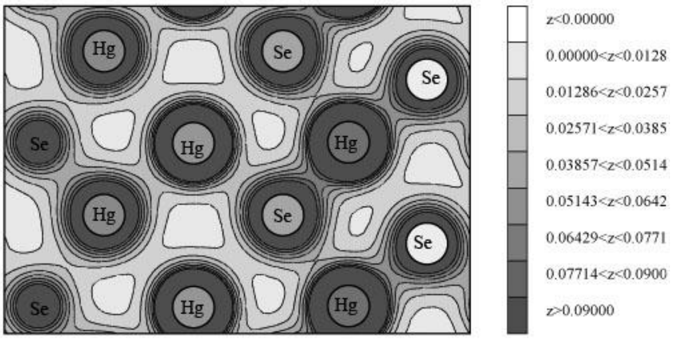
برابر با۰/۵۴۴ الکترون ولت می باشد که نشان دهنده‌ی نیم‌رسانا بودن این فاز می باشد.



شکل ۲: ساختار نواری و چگالی حالت های کل ترکیب سلنید جیوه در فاز سینابار.

چگالی ابرالکترونی

چگالی ابر الکترونی یا چگالی بار نحوه‌ی توزیع باردر اطراف اتم ها را نشان می دهد. تراکم زیاد الکترون بین دو اتم نشان دهنده‌ی قوی بودن پیوند بین آنهاست و تراکم کمتر الکترون بین دو اتم پیوند ضعیف تری را بین آن ها نشان می دهد. چگالی ابر الکترونی در صفحه‌ی(۰۴۴) برای سلنید جیوه در شکل۴رسم شده است. دیده می شود که پیوندهای قوی بین اتم های جیوه و سلنیم وپیوندهای ضعیفی بین اتم های جیوه-جیوه و سلنیم-سلنیم برقرار است.



شکل ۳: توزیع چگالی بار در صفحه (۰۴۴) برای ترکیب سلنیدجیوه در فاز سینابار.

نتیجه گیری

پارامترهای ساختاری، چگالی حالت ها، ساختار نواری و چگالی ابر الکترونی سلنید جیوه در فاز سینابار با استفاده از روش شبه پتانسیل در چارچوب نظریه‌ی تابعی چگالی اختلالی مورد مطالعه قرار گرفته است. نتایج به دست آمده نشان دهنده‌ی نیم‌رسانا بودن این فاز می باشد و سازگاری خوبی با داده های موجود دارد.

مرجع‌ها

[1] K. U. Gawlik, L. Kipp, M. Skibowski, N. Orlowski, R. Manzke, Phys. Rev. lett **78**, 3165 (1997).

[2] S. Adachi, *"Handbook on Physical Properties of Semiconductors"*, vol. **3**, (Kluwer Academic, New York, Boston, 2004).

[۳] A. Mujica, Angel Rubio, R. J. Needs, "High-pressure phases of group IV, III–V, and II–VI compounds", Reviewes of Modern Physics, vol. **75**, 906 (2003).

[4] V. Venkasamy, M. K. Mathe, S. M. Cox, U. Happek, J. L. Stickney, "Optimization Studies of HgSe thin film deposition by electrochemical atomic layer epitaxy", Journal of Electrochemica Acta **51**, 4347 (2006).

[5] M. K. Mathe, S. M. Cox, V. Venkatasamy, U. Happek, J. L. Stickney, "Formation of HgSe thin films using Electrochemical Atomic Layer Epitaxy", Journal of Electrochemical Society **152**(11), 751 (2005).

[6] G. Tianhong, L. Wencong, B. Xinhua, C. Nianyi, "Using support vector regression for the prediction of the band gap and melting point of binary and ternary compound semiconductors", Journal of Solid State Science **8**, 129 (2006).

[7] H. Wissmann, T. Tran-Anh, S. Rogaschewski, M. V. Orten-berg , Journal of Crystal Growth **619**, 201 (1999).

[8] Http://www.quantum-espresso.org.

[9] M. I. McMahon, R. J. Nelmes, H. Liu, S. A. Belmonte, Phys. Rev. Lett. **77**, 1781 (1996).

[10] F. D. Murnaghon, Proceeding of the National Academy of science of the United states of America, **30**, 244 (1944).

محاسبه‌ی ویژگی‌های ساختاری و تراکم پذیری TiO_2 در فاز آناتاس

صالحی، حمدا...؛ ایزدی، زینب

گروه فیزیک، دانشگاه شهید چمران،اهواز

چکیده

در این مقاله ویژگی های ساختاری و تراکم پذیری ترکیب TiO_2 مانند ثابت شبکه ، مدول حجمی و تراکم پذیری مورد بررسی و محاسبه قرار گرفته‌اند. محاسبات با استفاده از روش شبه پتانسیل در چارچوب نظریهٔ تابعی چگالی و با استفاده از بسته محاسباتی کوانتوم اسپرسو صورت گرفته است. مدول بالک محاسبه شده برای این کمیت در این کار ۱۹۰ گیگاپاسکال بوده و این مقدار نشان دهنده‌ی سختی این ترکیب می‌باشد. نتایج نشان می‌دهد که با افزایش فشار پارامترهای شبکه کاهش می‌یابد.

Calculation of structural and compressibility properties TiO_2 in anatase phase

Salehi, Hamdollah; Izadi, Zeinab

Department of Physics, Shahid Chamran University, Ahwaz

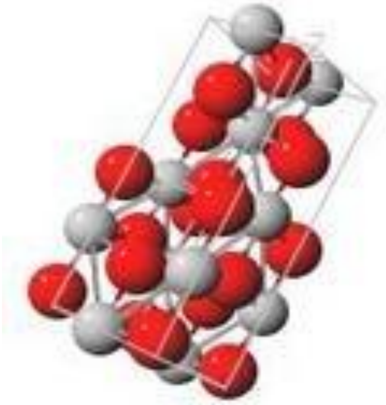
Abstract

In this paper, the structural and compressibility properties of TiO_2 compound such as, lattice constant, bulk mudol and compressibility have been studied. The calculations have been performed by pseudopotantial method in density functional theory framework by using Quantum-Espresso package. The calculated bulk moduls in thise work is 190 GPa and thise shows the hardness of this compound.The results shows that as the pressure increase, the lattice parameters decrease.

PACS No. 70

مقدمه

دی اکسید تیتانیوم دارای سه ساختار رایج بروکیت، آناتاس و روتیل است که هر سه، خواص شیمیایی کمابیش یکسانی داشته ولی خواص بلوری آنها متفاوت است به طوری که پایدارترین شکل این ماده روتیل بوده و سایر حالات در دمای به خصوصی به این حالت تبدیل می‌شوند، همچنین آناتاس بالاترین مصرف تجاری را داشته اما به ندرت به صورت معدنی خالص وجود دارد[۱؛۲]. ترکیبات دی اکسید تیتانیوم به علت داشتن کاربردهای فراوان در صنعت، مورد توجه بسیاری از محققین می باشند این مسئله، به خوبی اهمیت بررسی و محاسبهٔ خواص ساختاری و الکترونی دی اکسید تیتانیوم را آشکار می سازد. دی اکسید تیتانیوم به علت ضریب شکست به عنوان رنگدانه سفید در صنعت استفاده می شود. همچنین می تواند به عنوان جاذب نور فرابنفش در کرم های ضد آفتاب استفاده می شود. دو خاصیت مهم دیگر این ماده که آن را در زندگی بسیار کارآمد و مفید می سازد، خواص فوتوکاتالیستی و خود تمیزکنی آن است به همین دلیل لایه‌ای نازک از این ماده را روی سطح شیشه، کاشی و بعضی ظروف می نشانند تا مانع از کثیف شدن آن شوند. فاز آناتاس متعلق به گروه فضایی $I4_2/amd$ می باشد. سلول واحد آن در شکل۱ نشان داده شده است[۳].



شکل ۱: سلول واحد برای ساختار آناتاس.

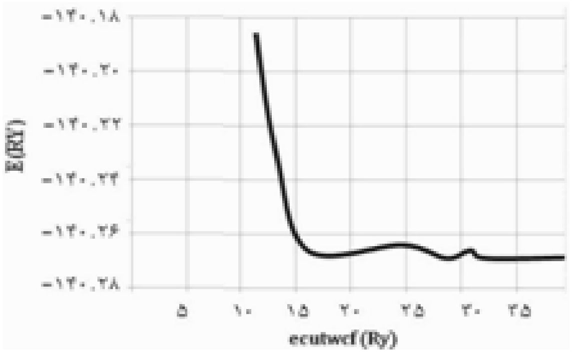
روش محاسبات

محاسبات با استفاده از تقریب شبه پتانسیل در چارچوب نظریه‌ی تابعی چگالی و با استفاده از نرم افزار *Espresso* انجام می گیرد[۴]. این محاسبات با استفاده از تقریب شبه پتانسیل صورت گرفته است که شامل محاسبه‌ی پارامترهای شبکه , انرژی کل تعادلی ترکیب ,مدول حجمی و مشتق آن و کمینه حجم می باشد.برای انجام محاسبات مربوط به TiO_2 از شبه پتانسیل‌های بارپایسته برای اتم‌های تیتانیوم و اکسیژن استفاده نمودیم و همچنین برای اتم تیتانیوم حالت های ۴s و۳d و برای اتم اکسیژن حالت های ۲p را به عنوان حالت های ظرفیت در نظر گرفتیم.

نتایج

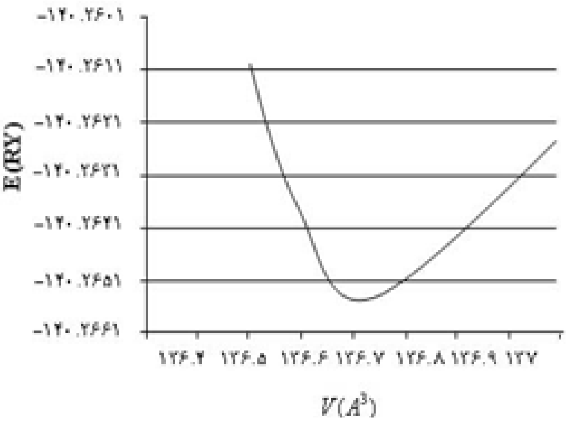
الف: پارامترهای ساختاری

یکی از پارامتر هایی که در شروع کار باید بهینه شود ، انرژی قطع است . در شکل ۲ تغییرات انرژی برحسب انرژی قطع نمایش داده شده است . همان طور که مشاهده می شود، مقدار انرژی قطع بهینه برای بلوردی اکسید تیتانیوم در فاز آناتاس۳۳ ریدبرگ است.



شکل ۲: نمودار تغییرات انرژی بر حسب انرژی قطع برای ساختار آناتاس.

برای یافتن پارامترهای ساختاری بهینه ؛منحنی های شکل ۳ انرژی بر حسب حجم را نمایش می دهند.



شکل ۳: نمودار تغییرات انرژی بر حسب حجم برای ساختار آناتاس.

تغییرات انرژی بر حسب حجم از طریق معادله‌ی حالت مورناگون به دست می آید[۵]. پارامتر شبکه‌ی تعادلی با استفاده از کمینه‌ی منحنی انرژی بر حسب پارامتر شبکه به دست آمد که برای نمونه ، نمودار انرژی بر حسب حجم به ازای انرژی قطع بهینه بدون برهم کنش اسپینی در شکل ۲ آمده است. بنابراین حجم تعادلی ، انرژی تعادلی ، مدول حجمی ، تراکم‌پذیری و پارامترهای شبکه از طریق مینیمم منحنی انرژی بر حسب حجم (شکل ۳) به دست می آیند. مقایسه‌ی نتایج تجربی و نظری دیگران با نتایج کار حاضر در جدول ۱ آورده شده است. همان طور که از این جدول مشاهده می‌شود، نتایج محاسبات انجام شده سازگاری نسبتاً خوبی با نتایج نظری و تجربی را بیان می‌کند و درصد اختلاف بیانگر سازگاری خوب این روش با نتایج به دست آمده توسط دیگران می باشد.

جدول ۱: پارامترهای ساختاری محاسبه شده در این کارو مقایسه با دیگـران برای فاز آناتاس.

کاردیگران			کارحاضر		
تجربی	نظری	نظری	نظری	کارحاضر	
۳/۷۸۴	۳/۸۲۸	۳/۷۳۵	۳/۷۸۶	۳/۷۱۲	$a(A^0)$
---	۱/۱۶	۱/۲۹	۰/۰۵	۱/۹	درصدخطا نسبت به مقدار تجربی
۹/۵۱۵	۹/۷۸۱	۹/۵۳۴	۹/۷۳۷	۹/۴۱۲	$c(A^0)$
---	۲/۷	۰/۱۹	۲/۳	۱/۰۸	درصدخطا نسبت به مقدار تجربی
۲/۵۳۶	۲/۵۵۵	۲/۵۵۲	۲/۵۷۱	۲/۵۵۹	c/a
۱۳۳/۱۲	۱۴۳/۴۱	۱۳۳	۱۳۹/۵۶	۱۲۹/۵۱	$V(Å^3)$
---	۷/۷	۱/۴	۴/۸	۲/۷	درصدخطا نسبت به مقدار تجربی
۱۸۰	۱۷۸	۱۹۹	۱۷۶	۱۹۰	$B(GPa)$
---	۱/۱	۱۰/۵۵	۲/۲	۵/۵	در صد خطا نسبت به مقدار تجربی

مدول حجمی معیاری از سختی بلور یا انرژی لازم برای ایجاد یک تغییر شکل معین در آن است و از رابطهٔ زیر به دست می آید :

(۱)

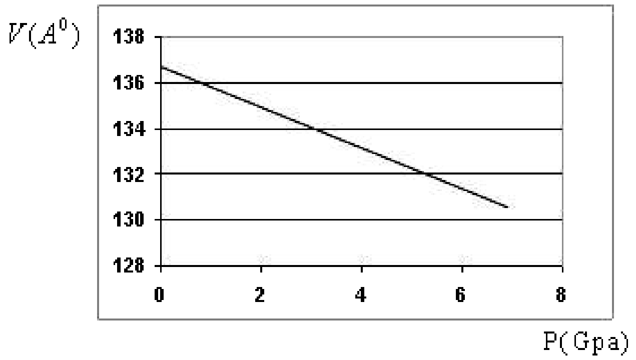
کـه در آن V حجـم بلـور و P فشـار وارد بـر آن اسـت . چـون محاسبات در دمای صفر صورت می گیرد لذا آنتروپی ثابت است . بنابراین $dU = -pdV$ (dU تغییر انرژی ناشی از تغییر حجم dV است) ، پس خواهیم داشت :

(۲)

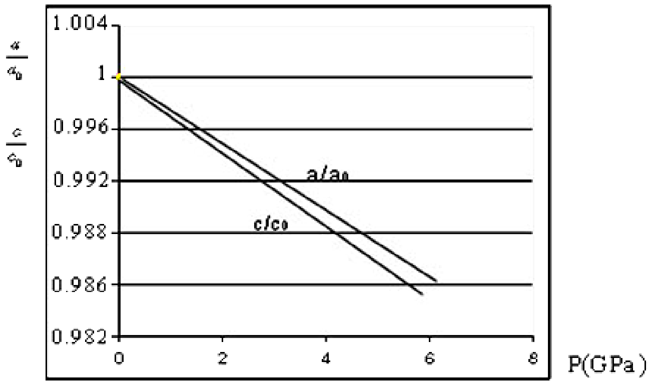
هرچه این کمیت بیشتر باشد ، بلور سـخت تـر و خاصـیت تـراکم پذیری آن کمتر است و انتظار مـی رود کـه اتـم هـا در فاصـلهی دورتری از هم قرار گیرند. با توجه به آن چه در بخـش قبـل گفتـه شد ، مدول حجمی عکس تراکم پذیری تعریف می شـود و مقـدار محاسبه شده برای ایـن کمیـت در کـار حاضـر ۱۹۰ GPa اسـت و همان طور که گفته شد از سختی نسبی ترکیب دی اکسـید تیتـانیوم حکایت دارد.

بررسی تأثیر فشار

برای بررسی اثر تغییرات فشار روی ساختار TiO_2 در فـاز آناتـاس نیز وابستگی حجم به فشار را از معادلهی حالت مورناگون به دست آورده و سپس از معادلهی فوق نسبت به حجم مشتق مـیگیـریم و سپس با توجه به رابطـهی ترمودینـامیکی $dE = -P\ dV$ وابسـتگی حجم به فشار را به دست میآوریم . نمـودار وابسـتگی حجـم بـه فشار برای ترکیب TiO_2 در فـاز آناتـاس نشـان مـی دهـد کـه بـا افزایش فشار حجم سلول واحد کاهش مییابد . همچنین با استفاده از معادلهی حالت مورناگون، میتوان تغییرات پارامترهای شـبکهی تعادلی را بر حسب فشار به دست آورد . نمودار این تغییرات برای پارامترهای a و c بر حسب فشار در شـکل ۴ رسـم شـده اسـت . برای مقایسهٔ بهتر ، منحنی تغییرات a/a_0 و c/c_0 در یـک شـکل رسم شدهاند . همان طور که در این نمـودار مشـاهده مـیشـود بـا افزایش فشار، پارامترهای شبکه نیز کاهش می یابند . این کاهش در هر دو جهت a و c بسیار نزدیک به هم می باشد .



شکل ۴: نمودار تغییرات حجم سلول واحد ترکیب TiO_2 در فاز آناتاس.



شکل ۵: نمودار تغییرات حجم سلول واحد ترکیب TiO_2 در فاز آناتاس.

نمودارهای فوق نشان دهنده آن هستند که با افزایش فشار, حجم سلول واحد و پارامتر شبکه کاهش می یابند که این امر با واقعیت موجود سازگار ی دارد.

تراکم پذیری

همان طور که پیش از این نیز به آن اشاره شد، تراکم پذیری به صورت عکس مدول حجمی تعریف می‌شود و مدول حجمی نمایانگر استحکام بلور است . هر چه مدول حجمی بیشتر باشد، استحکام بلور نیز بیشتر است. در این تحقیق ، مقدار تراکم‌پذیری به دست آمده برای ترکیب دی اکسید تیتانیم در فاز آناتاس برابر $۰/۰۰۵۲GPa^{-1}$ می‌باشد. مقدار مدول حجمی در ترکیب دی اکسید تیتانیوم در فاز آناتاس نشان می دهد که این ترکیب نرم تر از روتیل می باشد برای تغییر شکل انرژی کمتری نسبت به روتیل لازم دارد.

تراکم‌پذیری خطی در راستای محورهای a و c محاسبه شد نتایج تراکم‌پذیری حجمی وخطی در جدول (2) آورده شده است .

جدول ۲: مقادیر تراکم پذیری بلور TiO_2 در فاز آناتاس.

	تقریب شبه پتانسیل
$K_V(Gpa^{-1})$	۰/۰۰۵۲
$K_c(Gpa^{-1})$	۰/۰۰۲۸
$K_a(Gpa^{-1})$	۰/۰۰۲۲

همان گونه که مشاهده می شود تراکم پذیری در راستای c بیشتر از a می باشد و این نتایج به خوبی نشان‌گر ناهمسانگردی ترکیب دی اکسید تیتانیم در فاز آناتاس است.همچنین در مورد نتایج به دست آمده برای تراکم‌پذیری حجمی و خطی ترکیب دی اکسید تیتانیوم در فاز آناتاس ، از آن جا که بر طبق اطلاعات فعلی ما هنوز داده-های تجربی برای این کمیات گزارش نشده‌اند که مقایسه انجام گیرد.

نتیجه گیری

محاسبات با استفاده از روش شبه پتانسیل و نرم افزار کوانتوم اسپرسو در چارچوب نظریه‌ی تابعی چگالی انجام شده است.نتایج حاصل از محاسبات بیانگر این است که پارامترهای ساختاری محاسبه شده نسبت به باقی تقریب ها ، در توافق بهتری در مقایسه با نتایج تجربی می‌باشند. همچنین در نظر گرفتن اثرات جفت شدگی اسپین- مدار ، تغییراتی جزیی در ساختار نواری ، چگالی حالت‌ها و پارامتر شبکه تعادلی این ترکیب ایجاد می‌شود .علاوه براین با افزایش فشار ، حجم سلول واحد اولیه‌ی TiO_2 کاهش می‌یابد.اثر فشار بر روی پارامترهای شبکه‌ی TiO_2 در تمامی جهات بلوری یکسان نمی باشد و بلور دی اکسید تیتانیوم در این فاز ناهمسانگرد است.

مراجع

[1] W.Kohn and R.Mod,Structural and electronic properties of titanium dioxide, Phys.71,1258(1999).

[2] B.Kim,D.Byun and J.Kee, Structural and electronic properties of titanium dioxide,Phys.41,No1,222-226(2002).

[3] R.M.MartinY Density functional theory of electrons in materials physics, 598 SCM, (2004).

[4] http://www.pwscf.org

[۵] صالحی؛ حمدا...؛روش های محاسباتی در فیزیک حالت جامد؛ انتشارات دانشگاه شهید چمران اهواز(1385).

[6] D. T.Cromer and K. Herrington, Optical transitions in solids, Chem. Soc, 77, (1955) 4708.

[7] M.Lazzeri,and et al, Phys.Rev.B63,155409(2001)

اثر ناهمگنی‌های توپولوژیک بر نحوه‌ی قرار گرفتن یک نانوقطره بر روی یک سطح نانوساختار

سیدیزدی، جمیله

گروه فیزیک دانشگاه ولیعصر (عج) رفسنجان

چکیده

بسته به ویژگی‌ها و جزئیات ساختاری یک سطح نانوساختار می‌توان نحوه‌ی قرار گرفتن یک نانوقطره را بر روی سطح تغییر داد. در این پژوهش، سطحی با ناهمگنی‌های توپولوژیک ایجاد شده و نحوه قرار گرفتن یک نانوقطره بر روی آن مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج نشان می‌دهند که تنها محیط فصل مشترک نانوقطره و سطح، در تعیین زاویه‌ی تماس نانوقطره بر روی سطح تأثیر دارد در حالی که ویژگی و جزئیات ساختاری سطح تماس واقع شده در زیر نانوقطره در این خصوص نقشی ندارد.

The Effect of Topological Heterogeneity on the Way that a Nanodrop Sits on a Nanostructured Surface

Seyedyazdi, Jamileh

Department of Physics, Faculty of Science, Vali-e-Asr University of Rafsanjan, Iran.

Abstract

Depends on properties and structural details of a nanostructured surface, one can change the equilibrium situation of having a nanodrop on the surface. In this study we designed a surface with topological heterogeneity and investigate the equilibrium situation of a nanodrop on the surface. Our results show that it is only the drop perimeter that affects the contact angle and not the area beneath the drop.

PACS No. 89

مقدمه

درک دقیق پدیده‌ی ترشوندگی در مقیاس نانو، از اهمیت بخصوصی در علوم مختلف از جمله شیمی، فیزیک، زمین‌شناسی، زیست‌شناسی و مهندسی سطح برخوردار است. معادله‌ی یانگ در ترمودینامیک ماکروسکوپیک، زاویه‌ی تماس را به انرژی آزاد فصل مشترک دو محیط ارتباط می‌دهد (معادله‌ی ۱) که در آن θ زاویه‌ی تماس، γ_{SV} انرژی آزاد فصل مشترک جامد/بخار، γ_{SL} انرژی آزاد فصل مشترک جامد/مایع، γ_{LV} انرژی آزاد فصل مشترک مایع/بخار می‌باشد [۱]

$$\cos\theta = \frac{\gamma_{SV} - \gamma_{SL}}{\gamma_{LV}} \qquad (۱)$$

کاسی و بکستر معادله‌ی یانگ را به سطوح مرکب (ناهمگن) تعمیم دادند و معادله‌ی جدیدی را ارائه کردند که در آن f_i سهم مربوط به هر مؤلفه‌ی سطح می‌باشد. θ_1 و θ_2 زاویه‌های تماس مربوط به هر سطح مجزا می‌باشد [۲].

$$\cos\theta = f_1 \cos\theta_1 + f_2 \cos\theta_2 \qquad (۲)$$

فرض صریح این معادله این است که ناهمگنی در مقیاس‌های کوچک در مقایسه با اندازه‌ی قطره اتفاق می‌افتد و بدین ترتیب در این رابطه یک قطره ماکروسکوپیک در نظر گرفته شده است. ولی در تحقیقات جدید بیشتر به وضعیت-

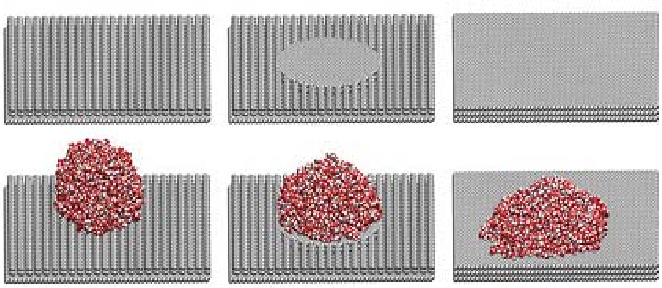
هایی پرداخته می‌شود که اندازه‌ی قطره و ناهمگنی سطحی از مرتبه‌ی یکدیگر باشند. بنابراین اگر معادله‌ی کاسی-بکستر بخواهد در مقیاس نانو با تقریب خوبی صادق باشد، انتظار می‌رود که باید در عوض آن "معادله‌ی موضعی کاسی-بکستر" را به کار برد. در این پژوهش از شبیه‌سازی مولکولی برای آزمودن این تعمیم و در کل بررسی وضعیت نانوقطره بر روی یک سطح نانوساختار استفاده شده است.

جزئیات شبیه‌سازی

شبیه‌سازی انجام شده با استفاده از نرم‌افزار لمپس (LAMMPS) در آنسامبل کانونیک در دمای ۳۰۰ کلوین انجام شده است. علاوه بر برهمکنش‌های بلندبرد الکترواستاتیک، برهمکنش‌های اتمی به صورت لنارد-جونز تا فاصله ١٤ آنگستروم در نظر گرفته شده‌اند و پارامترهای مربوطه در جدول ۱ آمده است. نانوقطره شامل ۲۰۰۰ مولکول آب در نظر گرفته شده است. سطح نانوساختار سطحی شبیه گرافین با سه لایه از اتم‌های یکسان در نظر گرفته شده است و ناهمواری‌های سطح با ایجاد فرورفتگی-هایی در لایه‌های دوم و سوم ایجاد شده است (تصویر سمت چپ شکل ۱). سپس با رشد دادن یک لایه‌ی متفاوت از لحاظ ساختاری در مرکز سطح موجود ناهمگنی مورد نظر ایجاد شده است. این رشد دادن با تغییرات ۵ آنگسترومی در شعاع لایه‌ی مرکزی انجام شده است. در هر مورد نانوقطره را در مرکز سطح قرار داده و زاویه‌ی تماس در حالت تعادل قطره محاسبه شده است. محاسبه‌ی زاویه‌ی تماس هم با استفاده از روش ارائه شده توسط راجتر [۳] انجام شده است. به این ترتیب که بعد از به تعادل رسیدن سیستم، پروفایل به دست آمده‌ی مربوط به نانوقطره، با بهترین برازش دایروی تطبیق داده می‌شود و از روی آن زاویه‌ی تماس محاسبه می‌شود. یک بررسی نوعی از نتایج به دست آمده در شکل ۲ آمده است.

جدول۱: پارامترهای لنارد-جونز استفاده شده در شبیه سازی انجام شده.

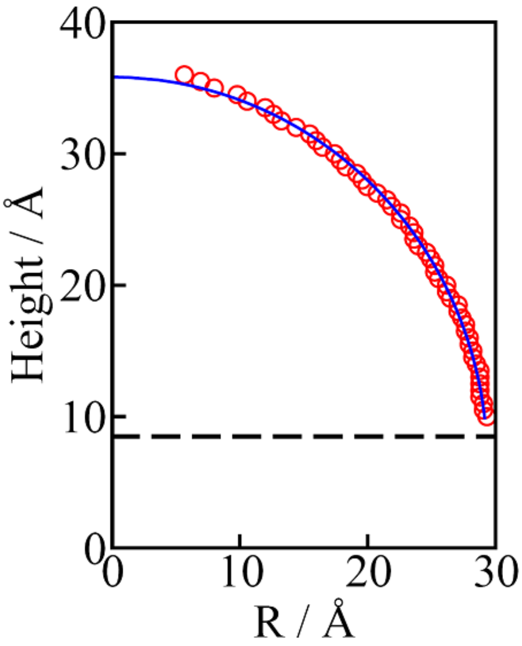
Kcal/mol	ε_{CC} = ۰/۰۹۲	ε_{OO} = ۰/۱۵۵	ε_{CO} = ۰/۱۲۰
σ(Å)	σ_{cc} = ۳/۲۱۴	σ_{cc} = ۳/۲۱۴	σ_{CO} = ۳/۱۹۰



شکل۱ : سطوح نانوساختار متفاوت. شکل سمت چپ، قبل از رشد لایه‌ی مرکزی. شکل وسط، بعد از رشد لایه‌ی مرکزی با شعاع ۳۰ آنگستروم. شکل سمت راست، بعد از رشد لایه‌ی مرکزی با شعاع خیلی زیاد (ردیف بالا). نحوه-ی قرار گرفتن نانوقطره بر روی سطح (ردیف پایین).

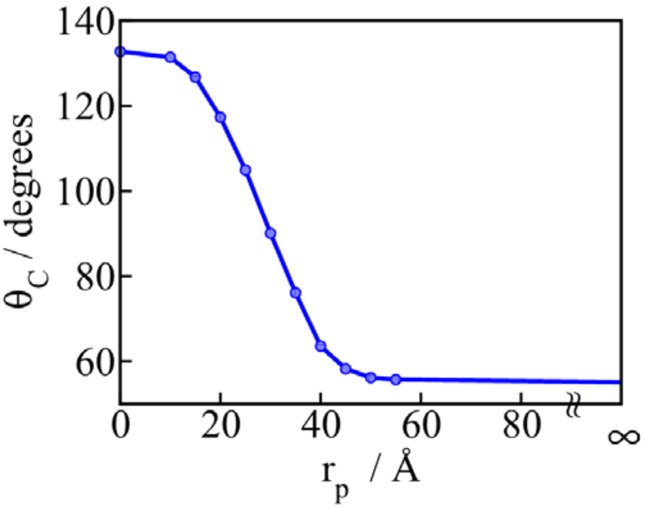
بررسی و تحلیل نتایج

با ایجاد ناهمگنی توپولوژیک که با رشد دادن یک لایه‌ی متفاوت از لحاظ ساختاری، با خاصیت آب‌دوستی، در مرکز سطح اولیه با خاصیت آب‌گریزی، به وجود آمده است، محاسبه‌ی زاویه‌ی تماس انجام شد. اولین نتیجه‌ی کلی این بررسی نشان می‌دهد که زاویه‌ی تماس به وسیله‌ی خواص نانوساختاریِ سطح در نزدیکی محیط فصل مشترک نانوقطره و سطح، کنترل می‌شود و هیچ‌گونه وابستگی به خواص نانوساختاریِ سطح زیر نانوقطره ندارد. این یافته‌ها با نتایج به دست آمده در مورد مربوط به قرار گرفتن نانوقطره بر روی یک سطح نانوساختار با ناهمگنی شیمیایی که تنها از یک لایه از اتم‌ها تشکیل شده است، نیز در توافق است [٤].



شکل۲ : پروفایل نانوقطره، با بهترین برازش دایروی تطبیق داده شده و از روی آن زاویه‌ی تماس محاسبه شده است.

علاوه بر این، بررسی‌ها نشان می‌دهد که با تغییر شعاع لایه‌ی مرکزی، زاویه‌ی تماس تغییر می‌کند. در واقع با افزایش شعاع لایه-ی مرکزی، نانوقطره گذار از آب‌گریزی سطح به آب‌دوستی آن را تجربه می‌کند (شکل۳).

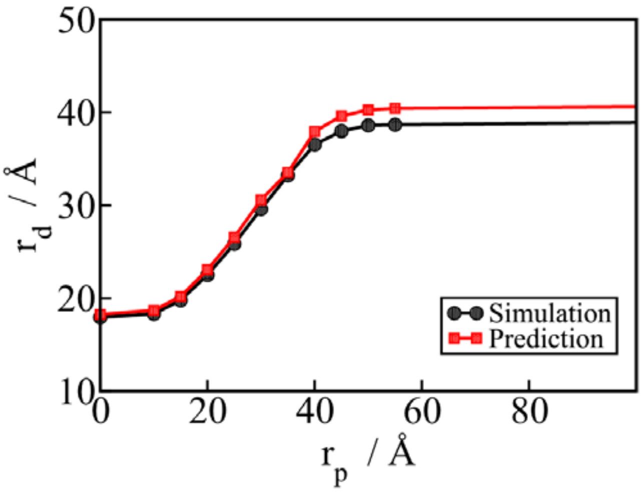


شکل۳ : زاویه‌ی تماس محاسبه شده برای یک نانوقطره‌ی تشکیل شده از ۲۰۰۰ مولکول آب، که از نتایج شبیه‌سازی انجام شده به دست آمده است، بر حسب شعاع لایه‌ی مرکزی.

محاسبه‌ی پیوندهای هیدروژنی در فصل مشترک مایع–جامد در دو حالت حدی انجام شده است و برای مورد کاملاً آب‌دوست ۳٫۱±۰٫۱ و برای مورد کاملاً آب‌گریز ۲٫۶±۰٫۳ پیوند هیدروژنی به ازای هر مولکول آب محاسبه شده است که با نتایج دیگران در توافق

می‌باشد[۵].

در این تحقیق همچنین کروی بودن نانوقطره هم مورد آزمون و بررسی قرار گرفته است. بدین صورت که با فرض کروی بودن، شعاع فصل مشترک دایروی نانوقطره و سطح‌نانوساختار محاسبه شده و با نتایج به دست آمده از شبیه‌سازی مقایسه شده است. این مقایسه در شکل ٤ آمده است و توافق خوب نمودارها نشان دهنده‌ی این است که انحراف نانوقطره از کروی بودن ناچیز می-باشد.



شکل٤ : مقایسه‌ی شعاع محیط فصل مشترک نانوقطره و سطح نانوساختار مربوط به نتایج شبیه‌سازی و محاسبه‌ی انجام شده.

نتیجه گیری

در این تحقیق نحوه‌ی قرار گرفتن یک نانوقطره بر روی یک سطح نانوساختار مورد بررسی قرار گرفت. نتایج حاکی از این است که زاویه‌ی تماس به وسیله‌ی خواص نانوساختاریِ سطح در

نزدیکی محیط فصل مشترک نانوقطره و سطح، کنترل می‌شود و هیچ‌گونه وابستگی به خواص نانوساختاریِ سطح زیر نانوقطره ندارد. همچنین معادله‌ی کاسی–بکستر در مقیاس نانو، باید به صورت معادله‌ی موضعی کاسی–بکستر به کار رود.

سپاسگزاری

از همکاری صمیمانه پروفسور لوزار و پروفسور براتکو در انجام این پروژه تشکر و قدردانی می‌شود.

مرجع‌ها

[1] Young, T. *Philos. Trans. R. Soc. London* **95** (1805) 65−87.
[2] Cassie, A.; Baxter, S., *Trans. Faraday Soc.* **40** (1944) 546-551.
[3] de Ruijter, M. J.; Blake, T. D.; De Coninck, J. *Langmuir* **15** (1999) 7836−7847.
[4] J. Ritchie, J. Seyedyazdi, D. Bratko, A. Luzar, *J. Phys. Chem. C* **116** (2012) 8634.
[5] C. D. Daub, J. Wang, S. Kudesia, D. Bratko, A. Luzar, *Faraday Discuss.* **146** (2010) 67−77.

شبیه سازی احتراق و بهره انرژی بالا در هدف های پوسته ای در همجوشی با باریکه یونی سنگین

شمس علی، مهران ؛ خوشبین فر، سهیل

دانشکده فیزیک، دانشگاه دامغان

چکیده

در این تحقیق با تابش متقارن باریکه یونی سنگین بیسموث-209 بر سطح هدف پوسته ای چند لایه حاوی ترکیب هم مولار سوخت دوتریوم-تریتیوم، شرایط بهینه بهره انرژی هدف مورد مطالعه قرار گرفت. با استفاده از کد شبیه سازی همجوشی محصور شده لختی با باریکه یونی DEIRA v.4، نشان داده شد که هنگام مرحله انفجار درونی، لایه سوخت شتابان سرعت $1/31\times10^{7}$ cm.s^{-1} را تجربه می کند. هدف در زمان 34/04 ns به پایان مرحله انفجار درونی می رسد و مقدار متوسط پارامتر چگالی ناحیه ای سوخت <ρR>، در پایان مرحله انفجار درونی بالغ بر 2/69 g.cm^{-2} می گردد. در این لحظه، لکه داغی با گستردگی 16 سلول لاگرانژی تشکیل می گردد. فرایند احتراق و اشتعال تا لحظه 34/17 ns تداوم می یابد که پس از آن، با انفجار و تلاشی هدف همراه می گردد. استفاده از لایه نازک طلا به ضخامت 12 μm، موجب افزایش راندمان حرارتی سوخت و رشد کسر مصرف سوخت می گردد. لذا، بهره انرژی هدف تک پوسته ای به مقدار 483 می رسد.

Simulation of Heavy Ion Beam Fusion of Shell Targets for Ignition and High Energy Gain

Shams-Ali, Mehran; Khoshbinfar, Soheil

School of Physics, Damghan University

Abstract

In this research, symmetrical illumination of Bi-209 ion of the surface of single multi-layered shell DT target is investigated to examine the optimum condition of highest target gain. By using DEIRA-version 4 code, it has been shown that during implosion phase, fuel layer experience average implosion velocity ~1.31×10^{7} cm.s^{-1}. Implosion phase finished at 34.04 ns. At the stagnation phase, average areal density of fuel arrive to 2.69 g.cm^{-2} which the produced hot-spot region extend up to 16 Lagrangian cells. Ignition and burn propagation continues until 34.17 ns where rapid explosion destroy whole target. The calculated target energy gain of the current design would be G=483. Employment of a thin gold layer, ~ 12 μm thickness, yields much more heating of fuel layer in the course of burn propagation phase and increasing the burn fraction.

PACS No. 52.28.Hm, 52.57.Bc, 52.65.-y, 28.52.Cx

مقدمه

دستیابی به منبع انرژی پایدار و مطمئن جهت بهره برداری در زندگی بشر و پیشبرد فرایند های توسعه و تحقیق علوم و مهندسی امری اجتناب ناپذیر می باشد. برخلاف راکتور های شکافت کنونی، در نوع متناظر که انرژی ناشی از جوش خوردن هسته های سبک آزاد می گردد؛ میزان نسبی آلایندگی محیط زیست و متعاقب آن ایمنی بالاتر در کنترل فرایند کلی، در دهه اخیر با شیبی فزاینده، موجب اقبال گسترده در عرصه جهانی مواجهه شده است. از گزینه های اصلی سوخت، ایزوتوپ های هیدروژن یعنی دوتریوم (D) و تریتیوم (T) هستند که در شرایط برابر به عنوان سوخت نخستین راکتور های گداخت عنوان می گردند:

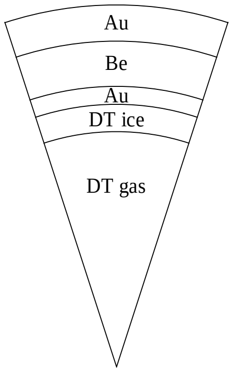
$$D+T \rightarrow a+n+17.6MeV \qquad (1)$$

با توجه به گسترش فناوری در عرصه شتاب دهنده ها، از میان روشهای پیشنهادی، گداخت هسته ای به روش محصورشدگی لختی با کمک راه انداز یونی به موازات رقبای دیگر توسعه یافته است [1]. استفاده از باریکه های یونی سبک و سنگین دارای مزایای عمومی همچون انتقال موثر انرژی و تکانه به حجم هدف، شرایط مطلوب تولید باریکه های کانونی، تَرابُرد مطلوب با نِهشت انرژی موضعی دارا است[2]. با توجه به مزایای اشاره شده باریکه

های یونی، هندسه مرسوم میان باریکه خارجی و هدف لایه ای، روش تابش مستقیم می باشد. سازوکار استاندارد چرخه گداخت هسته ای در پیکربندی باریکه خارجی و هدف به طور خلاصه شامل موارد کلی الف) تابش باریکه پرتوان بر سطح خارجی هدف، ب) گرمایش لایه های سطحی و ایجاد ضربه موج درونی، فشرده سازی لایه سوخت اصلی مخلوط DT، فروریزش لایه های سوخت در مرکز و رسیدن به شرایط آغاز زنجیره گداخت در سوخت(فرایند احتراق مرکزی) و استمرار آن در گستره سوخت اطراف(فرایند اشتعال و انتشار). به دلیل عوامل مهم اتلافی نظیر تابش ترمزی، هدایت گرمایی الکترونی، انبساط پلاسما، دمای خود نگهداری از مقدار ایده آل 4/3 keV به حدود 10 keV افزایش می یابد[3]. به منظور مطالعه جامع کل فرایند از لحظه تابش باریکه فرودی تا انفجار و تلاشی هدف در انتها، می توان فیزیک مسئله را به چند بخش تقسیم نمود. مرحله نخست سازوکار تَرابُرد و نِهشت انرژی باریکه فرودی در پلاسمای داغ هدف، هیدرودینامیک هدف لایه ای، تشکیل ناحیه اِحتراقی و سرایت شرایط تداوم احتراق به سراسر حجم. در شبیه سازی فرایند احتراق و اشتعال هدف کروی لایه ای از کد شبیه سازی DEIRA v.4 استفاده شده است [4]. این کد برای شبیه سازی فرایند همجوشی محصور شده لختی هدف های تابیده شده با باریکه یونی به کار می رود. در این کد 1ـ بعدی سازوکار فرایند های فیزیکی اصلی گنجانده شده است. معادلات هیدرودینامیکی بقای تکانه، انرژی و پیوستگی جرم شامل تک شاره با سه دمای یونی، الکترونی و تابش است. واکنش های گداخت هسته ای DT نیز به اِزای اِغنای شرایط فیزیکی لکه داغ و سوخت سرد محاط با دمای فراتر از 10keV و $g.cm^{-2}$ 0/4- $0/2 \sim \langle r R \rangle_{DT}$ در نظر گرفته می شود. همچنین در فرایند های گرمایشی سهم ذرات آلفا و شار نوترون های سریع تولیدی نیز در اندرکنش با یون های زمینه پلاسمای سوخت لحاظ می گردد. معادلات حالت(EOS) مواد در شرایط پلاسمای داغ به صورت توابع تحلیلی منتج از پایگاه داده ها $P_e(V,T_e)$، $P_i(V,T_i)$، $e_e(V,T_e)$، $e_i(V,T_i)$بیان می شود که در آن P_e, P_i, e_e, e_i به ترتیب مؤلفه الکترونی و یونی فشار، انرژی ویژه الکترونی و یونی برای مواد با عدد اتمی Z هستند[3].

روش کار

امروزه طراحی سوخت در هدف های همجوشی به صورت لایه ای و شامل مواد مختلف در هر لایه جهت ارضای شرایطی بکار گمارده می شود. طراحی عمومی در هدف های باریکه یونی به جز سوخت اصلی شامل سه لایه به ترتیب از بخش بیرونی به سمت درونی هدف محافظ، جاذب و هل دهنده می باشد. وظیفه لایه محافظ که عموماً از مواد با Z بالا تشکیل می گردد جهت مراقبت و جلوگیری از هم گسیختگی سوخت در حین فرایند دینامیکی بکار می رود. لایه جاذب وظیفه افزایش راندمان جذب انرژی و تبدیل آن به تکانه را بر عهده دارد که عموماً از مواد با Z پایین انتخاب می گردد و لایه هل دهنده که به همراه لایه محافظ ناحیه جاذب را در بر می گیرند در افزایش راندمان حرکت انفجار درونی لایه ها و افزایش بهره هیدرودینامیکی هدف نقش بسزایی دارند. در این شبیه سازی از ماده طلا در لایه های با Z بالا و ماده بریلیوم در لایه با Z پایین استفاده شده است[3]. ترکیب سوخت DT حاوی درصد وزنی برابر 50-50 بوده و درونی ترین لایه شامل گاز بسیار رقیق DT است. جهت نیل به سرعت انفجار درونی از مرتبه 10^7 cm/s لایه های هدف، بخش درونی تهی انتخاب می گردد. هدف های همجوشی، هدف های اِنجمادی هستند و دمای هدف پیش از آغاز فرایند حدود 4 K در نظر گرفته می شود که در نتیجه آن آنتروپی اولیه سوخت در شرایط کمینه قرار می گیرد. طراحی استاندارد هدف های همجوشی هسته ای با باریکه یونی تحت قالب HIBALL سند جامعی است که شرایط سوخت، باریکه و طراحی راِکتور گداخت با باریکه ذرات را مستند کرده است [5]. لذا، در اینجا نیز فراهم گشتن طراحی هدف با بهره انرژی فراتر از 100 به عنوان هدف شبیه سازی در نظر گرفته شده است. در طراحی مورد مطالعه در این شبیه سازی مطابق شکل 1، ساختار لایه ای هدف به صورت ترکیب زیر انتخاب گردیده است. ضخامت لایه های مختلف مواد و متعاقب جرم در نظر گرفته شده مطابق جدول 1 می باشد. همواره در طرح لایه های پیشنهادی این گزینه مد نظر است که ترکیب ضخامتی لایه های مختلف با توجه به اثرات هیدرودینامیکی شان در مرحله انفجار درونی، در نهایت منجر به وضعیت بهره انرژی بالاتر گردند.



شکل1: طرحواره ساختار هدف لایه ای حاوی سوخت DT .

در این میان، انتخاب نوع باریکه ذرات، طیف زمانی تابش و همچنین زمان تابش از جایگاه ویژه ای برخوردار است که به همراه طرح پیشنهادی چینش لایه های مختلف منجر به تحقق هدف پیشین می گردد. مشخصات راه انداز یونی شامل ذرات یون سنگین ^{209}Bi با توان باریکه 700TW، انرژی هر ذره 10GeV و زمان تابش 10ns انتخاب گردید.

جدول1: مشخصات هندسی و فیزیک لایه های هدف

لایه	شعاع(mm)	چگالی($g.cm^{-3}$)
گاز DT	0-4/280	$3/2\times10^{-5}$
DT جامد	4/280-4/500	0/225
طلا	4/500-4/512	19/5
بریلیوم	4/512-4/822	1/9
طلا	4/822-4/912	19/5

نتایج شبیه سازی

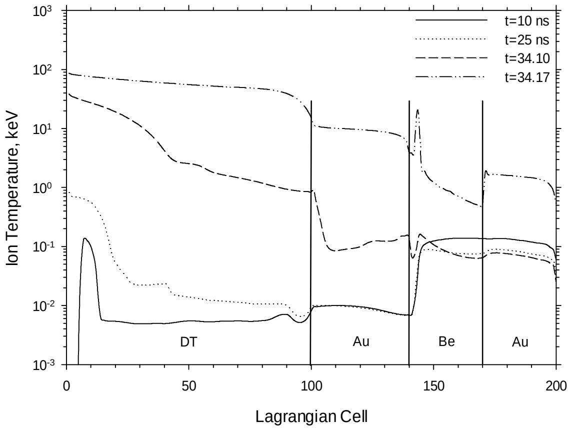
در شبیه سازی صورت گرفته معادلات هیدردینامیکی بر حسب مختصه لاگرانژی بازنویسی و تعقیب می گردد. راستای شعاعی هدف کروی به 200 سلول با ترکیب جدول 2 که در برگیرنده اهمیت تَرابُرد در لایه سوخت می باشد تقسیم بندی گردید. نتایج حاصل از تابش متقارن باریکه یونی سنگین بیسموث-209 بر هدف لایه با جزییات مشروح جدول 1 مطابق شکل های 2 و 3 ارائه می گردد. نکته حائز اهمیت در تحول زمانی فرایند تابش باریکه یونی، ایجاد شرایط فشردگی، افزایش دما در ناحیه مرکزی و به دنبال آن ایجاد لکه داغ مرکزی برای شروع زنجیره فرایند گداخت در مقیاس سراسری سوخت است. لکه داغ مرکزی ناحیه ای با دما بالاتر و چگالی کمتر است. با تداوم موج ضربه متراکم کننده، کمیت چگالی ناحیه ای سوخت $\langle rR\rangle_{DT}$، در حین فرایند انفجار درونی به تدریج افزایش می یابد.

جدول 2: تعداد سلول تَرابُرد در هر لایه ساختار پوسته ای هدف

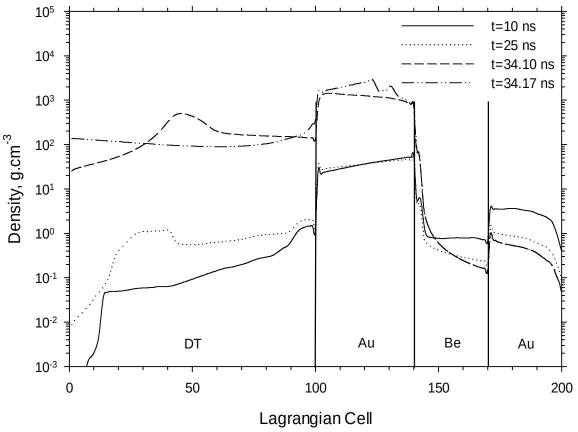
ماده لایه	گاز DT	سوخت DT	طلا	بریلیوم	طلا
تعداد سلول	25	75	40	30	30

با نزدیک شدن به لحظات پایانی مرحله انفجار درونی، حفره درونی ترین لایه (گاز DT) بسته می شود و از این پس ماده شتابان به تدریج با فروریزش در مرکز سوخت و انباشت ماده با تبدیل انرژی جنبشی به انرژی درونی موجب گرمایش ناحیه مرکزی می گردد. به اِزای پارامترهای ورودی شبیه سازی، بیشینه سرعت انفجار درونی سوخت بالغ بر $1/31\times10^{7}\ cm.s^{-1}$ می گردد که با چنین سرعتی، شرایط اِحتراقی در تحریک مستقیم هدف پوسته ای فراهم خواهد شد. با تدوام فرایند انباشت سوخت و در مرحله بحرانی مکث لحظه ای ضربه موج در مرکز کره، می بایست شرایط اِحتراقی فراهم باشد تا مرحله اشتعال شکل گیرد. رصد تغییرات کمیت $\langle rR\rangle_{DT}$ با زمان نشان می دهد که در لحظه زمانی 34/04 ns، مصادف با افزایش دمای ناحیه مرکزی فراتر از 10keV می باشد که در آن ناحیه داغ تا 16 سلول گسترش می یابد. در این لحظه نخستین مقدار بیشینه$g.cm^{-2}$ $\langle rR\rangle_{DT}=2/69$ بالغ می گردد. لحظاتی پس از آن(34/10 ns)، مطابق شکل 2 در کسر کوتاهی از زمان در حدود 130 ps سوخت با اتمام فرایند انفجار کاملاً متلاشی می گردد. لحظه اتمام فرایند اشتعال سوخت سرد محاط، مقارن با ظهور قله دوم در تحول زمانی کمیت $\langle rR\rangle_{DT}$است که ناشی از انباشت سوخت شتابان و مواجهه آن با لایه لَخت طلا می باشد. پیش از انفجار و تلاشی هدف، در لحظه 34/17 ns، با رسیدن موج اشتعالی و ضربه موج حاصل از آن، مطابق شکل 2 و 3، دما و چگالی لایه طلا ناگهان رشد محسوسی را تجربه می کند. با توجه به اینکه فرایند احتراق و اشتعال در سناریوی مدل همفشار دنبال می شود، پایداری فشار در حین فرایند اشتعال و تا اتمام آن در حجم لایه سوخت مشاهده می شود. راندمان هیدرودینامیکی سوخت به اِزای پارامترهای باریکه یونی برابر با $h_H=0/24$محاسبه گردید. لذا، با احتساب بهره هیدرودینامیکی اخیر و محاسبه کسر مصرف سوخت f_b=0/64 در

پایان فرایند اشتعال، بهره انرژی هدف به مقدار G_T= 483 خواهد رسید.



شکل2: تحول زمانی دمای یونی در حجم هدف.



شکل3: تحول زمانی چگالی در حجم هدف.

نتیجه اخیر بر مبنای شبیه سازی بهینه سازی شده تک بعدی ، جهت بهینه سازی طراحی، در حالت ایده آل و بدون در نظر گرفتن ناپایداری هیدرودینامیکی بدست آمده است. در مقایسه با تحقیقات مشابه، از تفاوت های اساسی که در نتیجه نهایی نمایان می گردد می توان به عواملی چون طراحی هدف در مقیاس نیروگاهی، وجود لایه تهی بزرگتر، نقش تقویتی لایه نازک طلا میان سوخت ـ جذب کننده و تابش باریکه با برش زمانی ثابت(تپ جعبه ای) اشاره نمود. مطابق جدول 3، مشاهده می شود که در حالت تک ـ بعدی، به ازای باریکه های یونی یا لیزری، با نتیجه بهره انرژی تحقیق اخیر فاصله زیادی دارند. در مقابل در حالات دوـ بعدی، مقادیر بهره انرژی عموماً کاهش محسوسی داشته و پیرامون 100 توزیع شده است. با احتساب نتیجه بهره انرژی گرما هسته ای بالا، به شدت تابع نوع طراحی بوده که به نوبه خود در مطالعات دوـ بعدی تحت تاثیر ناپایداری هیدروـ دینامیکی قرار می گیرد.

جدول3: مقایسه بهره انرژی در طراحی های متفاوت.

بهره انرژی		نام کد	نوع باریکه	تیم تحقیقاتی
2-D	1-D			
223	-	OK 2	یونی	S. Koseki, *et al.* [6]
133	-	LASNEX	یونی	D.A. Callahan-Miller [7]
-	>200	HYDRO	لیزری	J.W. Bates, et al. [8]

نتیجه گیری

در این تحقیق با تکیه بر شرایط بهینه طراحی سوخت لایه با راه انداز یونی، شرایط مطلوب بهره انرژی بیشینه که قابل طرح در هدف های در مقیاس نیروگاهی است، مورد مطالعه قرار گرفت. لذا، نشان داده شد که با توجه به انتخاب پارامتر های هندسی سوخت از جمله شعاع ناحیه تهی(گاز DT)، ضخامت مناسب لایه طلا در بخش هل دهنده، هدفی بزرگ با شعاع اولیه حدود 5 mm می توان در حالت ایده آل، به سقف بهره انرژی فراتر در مقایسه با هدف های یونی یا لیزری رقیب دست یافت.

مرجع ها

[1] M. Basko, K.J. Lutz, and J. Maruhn; “On possible target design for a heavy ion ignition facility”; Nuclear Inst. and Methods in Physics Research A, **415** (1998) 85-92.

[2] P.A. Seidl, J.J. Barnard, A. Faltens, and A. Friedman; “Research and development toward heavy ion driven inertial fusion energy”; Phys. Rev. ST. AB., **16** (2013) 024701.

[3] S. Atzeni and J. Meyer-ter-Vehn; “*The Physics of Inertial Fusion: BeamPlasma Interaction, Hydrodynamics, Hot Dense Matter: BeamPlasma Interaction, Hydrodynamics, Hot Dense Matter*”; Clarendon Press (2004) 480.

[4] M. Basko, http://www.basko.net

[5] D. Böhne, *et al.*; “HIBALL—A conceptual design study of a heavy-ion driven inertial confinement fusion power plant”; Nuclear Engineering and Design **73**, (1982) 195-200.

[6] S. Koseki, S. Kawata, Y. Hisatomi, T. Kurosaki, D. Barada and A.I. Ogoyski; “Direct drive fuel target optimization in HIF”; IFSA 2011 – Seventh International Conference on Inertial Fusion Sciences and Applications, (2013).

[7] D.A. Callahan-Miller, M. Tabak; “Increasing the coupling efficiency in a heavy ion, inertial confinement fusion target”; Nucl. Fusion, **39** (1999) 1547-1556.

[8] J.W. Bates, A.J. Schmitt, D.E. Fyfe, S.P. Obenschain, S.T. Zalesak; “Simulations of high-gain shock-ignited inertial-confinement-fusion implosions using less than 1 MJ of direct KrF-laser energy”; HEDP, **6** (2010) 128–134.

بررسی ویژگی‌های ترموالکتریکی $BiNCa_3$

شیرخوار، شیما[1]؛ جلالی اسدآبادی، سعید[1]؛ نعمت الهی، جواد[1]؛ رهنمای علی آباد، حسین اصغر[2]؛ احمد، افتخار[3]

[1] گروه فیزیک ، دانشگاه اصفهان ، اصفهان

[2] گروه فیزیک ، دانشگاه حکیم سبزواری ، سبزوار

[3] دانشکده فیزیک ، دانشگاه ملکند ، چاکادرا ، پاکستان

چکیده

ویژگی های الکترونی و ساختاری ترکیب $BiNCa_3$ بر پایه‌ی نظریه تابعی چگالی به روش امواج تخت بهبود یافته بعلاوه اوربیتالهای موضعی (APW+lo) با استفاده از کد محاسباتی WIEN2k مطالعه شده‌اند. در این تحقیق ویژگی های ترابردی وابسته به دما مثل رسانندگی گرمایی، ضریب سیبک و همچنین کمیت بدون بعد بهره وری(ZT) را به‌وسیله نظریه نیمه کلاسیکی بولتزمن با استفاده از کد BoltzTraP محاسبه کرده و تغییرات آنها را برحسب دما مورد بررسی قرار داده ایم. محاسبات ما نشان می‌دهند که این ترکیب در دماهای زیر 500 K دارای رسانندگی گرمایی پایین است. نتایج نشان می‌دهند که این بلور می‌تواند در دماهای پایین به عنوان یک ماده ترموالکتریکی مناسب مورد استفاده قرار گیرد، زیرا برطبق نتایج محاسباتی ما کمیت ZT این ترکیب در دماهای پایین به عدد 1 نزدیک است.

Thermoelectric properties of $BiNCa_3$

Shirkhar, Shima[1] ; Jalali Asadabadi, Saeid[1] ; Nematollahi, Javad[1] ; Rahnamaye Aliabad, Hossein Asghar[2] ; Ahmad, Iftikhar[3]

Department Of Physics, University Of Isfahan, Isfahan[1]
Department Of Physics, Hakim Sabzevary University, Sabzevar [2]
Department Of Physics, University Of Malakand, Chakdara, Dir (L), Pakistan[3]

Abstract

Structural and electronic properties of $BiNCa_3$ compound are calculated based on the density functional theory employing the WIEN2k code using the full-potential augmented plane waves plus local orbital (FP-APW+lo) method. We have calculated temperature-dependent transport properties such as thermal conductivity, seebeck coefficient and dimensionless figure of merit (ZT) by the semi-classical Boltzmann theory using the BoltzTraP code and investigated their variations versus temperature. The compound under question shows low thermal conductivity below 500 K. The results show that this crystal can be used as a suitable thermoelectric material, because according to our computational results the figure of merit of this compound is close to 1 at low temperatures.

مقدمه

مواد ترموالکتریک به علت توانایی آن ها در تبدیل مستقیم گرما به الکتریسیته یا بر عکس مورد توجه قرار گرفته اند [1]. انتظار می‌رود که فناوری ترموالکتریک که در آن گرمای تلف شده به الکتریسیته تبدیل می شود، نقش مهمی را در حل چالش‌های زندگی امروز بازی کند [2]. اثر بخشی مواد ترموالکتریک توسط کمیت بدون بعد بهره وری $ZT = \frac{s^2 \sigma T}{\kappa}$ تعیین می‌شود که در آن S ،σ ،T وκ به ترتیب ضریب سیبک ، رسانندگی الکتریکی، دمای مطلق و رسانندگی گرمایی می‌باشند[2,5]. برای بازیافت انرژی از گرمای تلف شده به موادی احتیاج داریم که مقدار ZT آنها در دمای زیر 500 K مقدار بزرگی باشد، زیرا کارایی تبدیل انرژی در مولدهای ترموالکتریکی با افزایش مقدار ZT افزایش می‌یابد و همچنین بیشتر گرمای تلف‌شده در محیط در دمای زیر 500 K آزاد می‌شود [3]. اخیراً چندین ترکیب با ZT بالا مثل $In_4Se_{3-\delta}$ ، $AgPb_mSbTe_{2+m}$ و Ag_9TlTe_5 به عنوان نسل جدید مواد ترموالکتریک پیشرفته ایجاد شده اند اما این ترکیبات شامل عناصر کمیاب، سنگین وگران قیمت مثل تلوریم، سرب، سلنیم، آنتیموان و تالیم هستند [1,3]. بنابراین ما نیاز به موادی داریم که دارای مقدار ZT بالا باشند که شامل عناصر ارزان و دوستدار محیط زیست هستند [3]. به نظر می‌رسد که ترکیب $BiNCa_3$، به‌دلیل دارا بودن ZT حدود 1 در زیر 500K، مورد مناسبی برای این دسته از مواد باشد. این ترکیب نیم رسانایی با گاف نواری نازک می‌باشد[5]. در این مقاله ما قصد داریم که ویژگی‌های الکتریکی مثل ضریب سیبک s و همچنین ویژگی های گرمایی مثل رسانندگی گرمایی ترکیب $BiNCa_3$ را با استفاده از کد BoltzTraP به‌دست آوریم. این کد از معادله ترابرد بولتزمن و تقریب زمان واهلش استفاده می‌کند تا ویژگی‌های ترابردی را محاسبه کند. این بسته محاسباتی بر مبنای برازش فوریه‌ی نوارهای انرژی کار می‌کند و از اطلاعات ساختار نواری تولید شده توسط کد WIEN2k استفاده می کند [9].

تانسورهای رسانندگی گرمایی و ضریب سیبک به عنوان تابعی از دما و پتانسیل شیمیایی به صورت زیر بیان می‌شوند: [1]

$$\sigma_{\alpha\beta}(T;\mu) = \frac{1}{\Omega}\int \sigma_{\alpha\beta}(\varepsilon)\left[-\frac{\partial f_\mu(T;\varepsilon)}{\partial\varepsilon}\right]d\varepsilon, \quad (1)$$

$$S_{\alpha\beta}(T;\mu) = \frac{1}{eT\Omega\sigma_{\alpha\beta}(T;\mu)}\int \sigma_{\alpha\beta}(\varepsilon)(\varepsilon-\mu) \times\left[-\frac{\partial f_\mu(T;\varepsilon)}{\partial\varepsilon}\right]d\varepsilon, \quad (2)$$

که در آن:

$$\sigma_{\alpha\beta}(\varepsilon) = \frac{e^2}{N}\sum_{i,\boldsymbol{k}} \tau_{i,\boldsymbol{k}} v_\alpha(i,\boldsymbol{k}) v_\beta(i,\boldsymbol{k})\delta(\varepsilon-\varepsilon_{i,\boldsymbol{k}}), \quad (3)$$

جزئیات محاسباتی

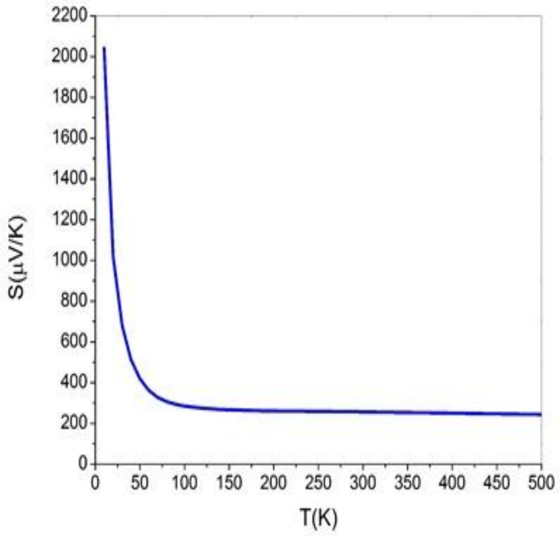
محاسبات ساختار الکترونی $BiNCa_3$ **با روش FP-LAPW در چارچوب نظریه تابعی چگالی و استفاده از کد WIEN2k انجام شده اند. ثابت شبکه با استفاده از روش‌های LDA,GGA– mBJ وEV-GGA محاسبه شده اند. انرژی جداسازی بین حالت‌های والانس و هسته -6Ry در نظر گرفته شده است.** $R_{MT}K_{max}$= 7 و G_{max}=14 $(Ry)^{1/2}$ می‌باشند. گروه فضایی این ترکیب pm-3m و ثابت شبکه آن a = 9.23 Å است [6].

در اینجا ما ویژگی‌های ترابرد وابسته به دما را در چارچوب نظریه نیمه کلاسیکی بولتزمن محاسبه کرده‌ایم. برای محاسبه ساختار الکترونی با استفاده از WIEN2k از 2300 نقطه K استفاده کردیم اما، چون برای انجام محسبات ترابرد به ساختار نواری با دقت بالا نیاز است که به نوبه خود به تعداد نقاط K بسیار بالا احتیاج دارد، تعداد این نقاط را به منظور افزایش دقت محاسبات ترابرد به 60000 افزایش دادیم.

نتایج و بحث

ضریب سیبک S

ضریب سیبک به‌طور تجربی با روش حالت پایدار توسط اندازه‌گیری ولتاژ ترموالکتریکی که از گرادیان دمایی داده شده در یک کوره به‌دست می‌آید، تعیین می‌شود.



شکل 1 : ضریب سیبک بر حسب دما

نمودار ضریب سیبک بر حسب دما در انرژی‌های نزدیک سطح فرمی در شکل (1) نشان داده شده است. مثبت بودن ضریب سیبک در بازه دمایی نشان داده شده مشخص می‌کند که حامل‌های بار غالب در ترابرد، حامل‌های نوع p هستند. بیشینه مقدار ضریب سیبک 200 µV/K در صفر مطلق است، که این مقدار با افزایش دما به شدت کاهش می‌یابد ودر دمای بالاتر از 50 K در حدود 300 µV/K ثابت باقی می‌ماند.

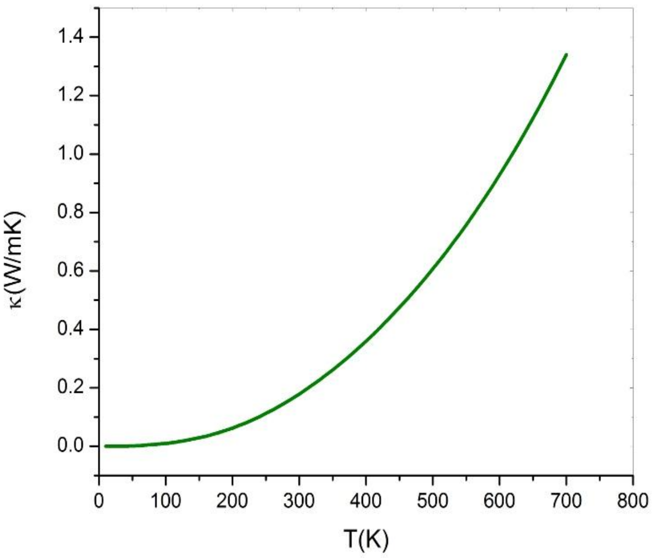
رسانندگی گرمایی (κ)

در شکل 2 رسانندگی گرمایی بر حسب دما رسم شده است. رسانندگی گرمایی کل، مجموع رسانندگی گرمایی شبکه ای و الکترونی است. رسانندگی گرمایی الکترونی از قانون ویدمن–فرانتز تبعیت می‌کند:

$$\frac{k_e \rho}{T} = l_0 \qquad (4)$$

که در آن ρ مقاومت ویژه الکتریکی و l_0 عدد لورنتز می‌باشند [4].

$$l_0 = 2.45 \times 10^{-9}\ \mathrm{W\Omega}k^{-2}$$

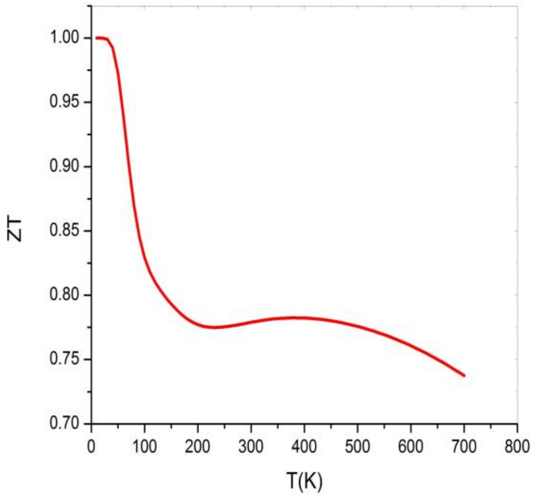


شکل 2. وابستگی دمایی رسانندگی گرمایی محاسبه شده

رسانندگی گرمایی الکترونی کوچک می‌باشد. در نزدیکی‌های دمای اتاق رسانندگی گرمایی پایین می‌باشد و به تدریج با افزایش دما بـر مقدار آن افزوده می‌شود

کمیت بدون بعد بهره وری (ZT)

در شکل 3 کمیت بدون بعد بهره وری (ZT) بر حسب دما رسم شده است. هرچه ZT یک ماده ترموالکتریک به یک نزدیکتر باشد کارایی آن ماده بالاتر است. همانطور که در شکل مشاهده می‌شود در نزدیکی صفر مطلق به دلیل وجود رسانندگی گرمایی پایین و ضریب سیبک بالا مقدار ZT تقریباً برابر 1 می‌شود، یعنی بیشترین بهره وری در این دما وجود دارد.



شکل 3. کمیت بدون بعد بهره وری برحسب دما

در دماهای زیر 500K هم این مقدار بسیار به یک نزدیک است. پس می‌توان $BiNCa_3$ را جز مواد ترموالکتریک تقریباً مناسب به حساب آورد.

نتیجه گیری :

ما ساختار الکترونی $BiNCa_3$ را با استفاده از روش FP-LAPW محاسبه کردیم. این محاسبات در چارچوب نظریه تابعی چگالی با استفاده از کد WIEN2K انجام شده‌اند. برای به‌دست آوردن ویژگی‌های ترابردی وابسته به دما از کد BoltzTraP استفاده کردیم که این کد از نظریه نیمه کلاسیکی بولتزمن پیروی می‌کند. با توجه به نتایج به دست آمده، ترکیب $BiNCa_3$ در دماهای زیر 500K دارای رسانندگی گرمایی پایین و ZT بالایی می‌باشد. از آنجایی که ZT این ترکیب در دماهای پایین به مقدار 1 نزدیک است پس می‌توان نتیجه گرفت که چنین ترکیبی می‌تواند به عنوان یک ماده ترموالکتریکی خوب مورد استفاده قرار گیرد.

مرجع‌ها

[1] Peng Hua, Wang Chun-Lei, Li Ji-Chao, Zhang Rui-Zhi, Wang Hong-Chao, and Sun Yi. “Theoretical investigation of the thermo electric transport properties of BaSi2” *Chin. Phys. B* 20 046103 (2011).

[2] [K. Kurosaki, H. Muta, Y. Endo, A. Charoenphakdee, M. Uno, and S . Yamanaka, "Effect of Nb substitution for V on the thermoelectric properties of Fe2VAl," *Journal of Alloys and Compounds* **486**, 507-510 (2009).

[3] H. Goto, Y.-i. Terazawa, M. Mikami, and T. r. Takeuchi, "The Efects of Element Substitution on Electronic Structure,Electron Transport Properties, and Lattice Thermal Conductivity of Fe2VAl Thermoelectric Material," *The Japan Institute of Metals* **51**, 2139 to 2144 (2010).

[4] R. F. L. C. S. Lue, and M. Y. Song, and K. K. W. a. Y. K. Kuo, "Chemical pressure effect on the transport and electronic band structure of Fe2V1−x Nbx Al," physical review B **78**, 165 (2008).

[5] P.R. Vansant, P.E. Van Camp, V.E. Van Doren , physical review . *B* **57** 7615 (1998).

[6] *M. Bila1, Iftikhar Ahmad, H. A. Rahnamaye Aliabadi, S. Jalali Asadabadi* , J. Nematollahi “Detailed DFT studies of the band profiles and optical properties of anrtipervoskites $SbNCa_3$ and $BiNCa_3$” Submitted

[7] P. Blaha, K. Schwarz, G.K.H. Madsen, D. Kvasnicka and J. Luitz “, WIEN2k, An Augmented Plane Wave + Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties” ISBN (2001)

[8] M adsen, G. K. H.; Singh, D. J. Comput. Phys. Commun 67 175 (2006)

[9] جلالی اسدآبادی، سعید ؛ "تازه های WIEN2k"

مدهای طیف رامان بلور کوارتز: بررسی تحلیلی

طالبیان، احسان ؛ ملک فر، رسول

گروه فیزیک اتمی مولکولی، بخش فیزیک، دانشکده علوم پایه دانشگاه تربیت مدرس ، تهران

چکیده

در این مقاله قصد داریم برای اعمال تغییراتی در مسیر محاسبات با هدف استنتاج جوابی راضی کننده، توجه خود را بر روی مدهای فعال رامان معطوف کنیم. مدهای تحت بررسی در این مقاله در فرکانس های ۱۰۸۳، ۷۹۷، ٤٦٤، ۳٥٤، ۲٦۳، ۲۰٦ و ۱۲۸ که همگی بر حسب cm^{-1} هستند، می باشد. این مدها به دلیل حرکاتشان، تغییرات قطبش پذیری در ساختار ایجاد می کنند که عامل اصلی ایجاد پدیده ی جذب و نشر فوتون در رامان محسوب می شود. مطالعات انجام شده در این پژوهش یک گام در جهت بهبود نتایج قبلی بوده که قبلا گزارش شده اند و می توناند جهت استفاده دقیق تر مورد استفاده قرار بگیرد.

Raman spectra modes of quartz: The analytical study

Talebian, Ehsan; Malekfar. Rasoul

Atomic and Molecular Physics Department, Division of Physics, Faculty of Basic Science, Tarbiat Modares University, Tehran

Abstract

In this paper, we are going to pay more attention to active Raman modes for applying changes in calculations, in order to obtain an acceptable result. The studied modes in this paper are in frequencies of: 1083, 797, 464, 354, 263, 206 and 128 (cm^{-1}). These modes create polarizability changes because of their movement which is the main reason of photon absorption and emission phenomenon in Raman. The investigations in this research are a step towards improving the previous results which reported and they can be used for more accurate.

PACS No. 63

مقدمه

برای شروع بهتر است به نتایج محاسبه شده با روش نظریه تابعی چگالی که با شیوه B3LYP بدست آمده و همچنین در مراجع [۱و۲و۳و٤و٥و٦] ارائه شده توجه کنیم (جدول ۱ [٦]). شایان ذکر است که محاسبات در پایه 6-311+G(2d) با در نظر داشتن یک درجه ی اختلال کوانتومی و همچنین اثرات قطبیت اوربیتال های 2d در اندرکنش مابین اتم های اکسیژن و سیلسیوم انجام شده است.

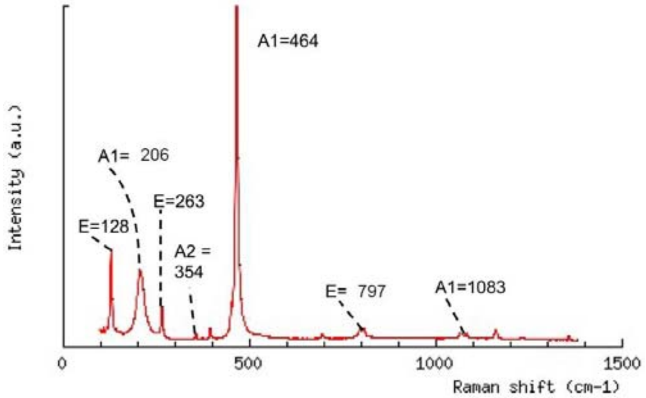
فرآیند محاسبه ی جدید

در روش عمومی این مولکول ها هستند که هدف اعمال الگوریتم های پیچیده قرار می گیرند. باید توجه داشت که نتایج محاسبات در هر شیوه و پایه ای اگر بر روی یک خوشه ی منتخب از شبکه اعمال شود، جهاتی را به عنوان جهات مدهای نرمال بدست می دهد که به دلیل نامحدود نبودن پایانه های پیوندها، در نواحی باز، دچار اختلافی چشمگیر با جهات مدهای حقیقی خواهد بود. همین تغییرات در جهت گیری های حرکات، باعث تحمیل تغییرات نیروی متفاوت در حین ارتعاشات خواهد شد و این به تنهایی عامل مهمی در جابجائی جوابهای حاصله از این محاسبات می گردد. به منظور رفع این انحراف قابل پیش بینی، جهات اصلی در فرکانس های مورد بررسی تاکنون، توسط اعمال

یک شیوه کلاسیکی ساده بر یک قطعه بسیار بزرگ از شبکه بدست آمد که با محاسبه ی خطا و برون یابی، جهات دقیقی از حرکت تمام اتمهای اکسیژن و سیلسیوم حاصل شد. با در دست داشتن این جهات و با توسل به تغییرات به شیوه ی غیر اتوماتیک، دو ساختار مجزا به گونه ای ساخته شد که تفاوت آنها در مکان اتمها نهفته است، یعنی، اتمهای اکسیژن و سلسیوم در راشتای جهاتی که در شبکه ی واقعی نامحدود جابجا می شوند، جهش یافته اند. مقدار این جهش با توجه به طول پیوند و اثرات ناهماهنگی در حدود ۰,۲۵ دامنه ی جابجائی مقرر شده تا از اثرات ناهماهنگی پرهیز شود. باید توجه داشت که مقدار نیروی وارد بر یک ذره با گرادیان انرژی محاسبه شده توسط محاسبات عددی نسبت به تغییرات مکان ذره مورد مطالعه است. حتی نتایج محاسبات برروی خود شبکه ی کوارتز (بطور نامحدود) در صورتیکه در محاسبات از همان جهات اشتباه استفاده شود، جوابهائی به همان میزان اشتباه ارائه می کند.

محاسبات بر روی خوشه ی $H_{16}Si_7O_{22}$

خوشه ی انتخاب شده $H_{16}Si_7O_{22}$ است. هنگامی که اتم مورد مطالعه را اتم اکسیژن قرار دهیم، نتایج محاسبات در این خوشه به صورت ارائه داده شده در جدول ۲ خواهد بود. همانطور که مشاهده می شود، نتایج بدست آمده به قدری به مقادیر تجربی نزدیک است که تقریبا می توان آنها را جوابهائی دقیق فرض کرد. باید خاطر نشان ساخت که میدان نیروی حاصل از این خوشه با وجود اندازه ای نسبتا کوچک، بدست آمده است. شکل ۱ نیز طیف ثبت شده تجربی رامان بلور کوارتز را نشان می دهد.



شکل ۱: طیف رامان بلور کوارتز آلفا در دمای 300^oK.

جدول ۱ : نتایج محاسبات در مورد مدهای فعال طیف رامان

میزان خطا (٪)	فرکانس محاسبه شده cm^{-1}	فرکانس مد بصورت تجربی cm^{-1}	تقارن
٢,٦	١٠٥٤	١٠٨٣	A1
٨,١	٨٦٣	٧٩٧	E
١٨,٧	٥٧٠	٤٦٤	A1
٨,٩	٣٨٦	٣٥٤	A1
١٤,٨	٣٠٧	٢٦٣	E
٢٦,٦	٢٨٤	٢٠٦	A1
٤٣,٨	٢٢٩	١٢٨	E

جدول ۲ : نتایج محاسبات روی خوشه ی $H_{16}Si_7O_{22}$

میزان خطا (٪)	فرکانس محاسبه شده cm^{-1}	فرکانس مد به صورت تجربی cm^{-1}	تقارن
٢,٦	١١٣٦	١٠٨٣	A1
٨,١	٨١٢,٤	٧٩٧	E
١٨,٧	٤٦١,١	٤٦٤	A1
٨,٩	٣٥١,٦	٣٥٤	A1
١٤,٨	٢٦٠,٩	٢٦٣	E
٢٦,٦	٢٠١,٩	٢٠٦	A1
٤٣,٨	١٢٤,٢	١٢٨	E

نتیجه گیری

روشن است که جوابهای بدست آمده با توجه به ابعاد خوشه و همچنین محدودیت های الگوریتم های بکار رفته در آن همخوانی زیادی با نتایج آزمایشگاهی دارند. این مطلب بدان جهت پر اهمیت است که بهترین جوابهائی که تاکنون به شیوه هایی غیر از این شیوه بدست آمده، نشان دهنده ی خطایی بسیار بیشتر از مقدار کنونی برای همین خوشه است. با توجه به اهمیت استراتژیک این گونه محاسبات در دنیای علم فیزیک و شیمی، هر پیشرفتی در این زمینه با استقبال محافل علمی مواجه می گردد. لذا می توان با بررسی بیشتر در پاره ای از موارد می توان به نتیجه گیری های منتشر شده قبلی ایراد وارد نمود و این موضوع گذشته از اهمیت دستیابی به این تقریب های مناسب به تنهایی بسیار مهم است.

مرجع‌ها

[۱] محمد طالبیان و احسان طالبیان؛ «روشی جدید برای محاسبه ی مدهای فعال رامان بلور کوارتز نوع آلفا با استفاده از نظریه تابعی چگالی تحت هامیلتونین B3LYP در پایه ی 6-311+G(2d)»؛ *مقاله نامه کنفرانس اپتیک فوتونیک ایران*، تبریز، ۱۳۹۰، صفحه ۶۰۲ تا ۶۰۵.

[۲] احسان طالبیان، «مطالعه خواص اپتیکی خطی و غیر خطی و ارتعاشات رامان بلور کوارتز و تعیین پارامترهای نوری مربوطه توسط روشFTIR»، *پایان نامه کارشناسی ارشد*، دانشگاه ارومیه، ارومیه، ایران، ۱۳۹۰.

[3] D. Sajan, V. Bena Jothy, TH. Kuruvilla, I. Hubert JOE, NIR–FT Raman, FT–IR and surface-enhanced Raman scattering and DFT based theoretical studies on the adsorption behaviour of (S)-Phenylsuccinic acid on silver nanoparticles, *J. Chem. Sci.*, **122**, No. 4, (2010) 511–519.

[4] J. B. Foresman, A. Frisch, Exploring chemistry with electronic structure methods (2nd edn). Gaussian Incorporated: Pittsburgh, PA (1996).

[5] T. Rasheed and Sh. Ahmad; "Computational studies of vibrational spectra and molecular properties of 6-methyluracil using HF, DFT and MP2 methods"; *Indian J. Phys.* **85**, No. 2 (2011) 239-260.

[6] M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, V. G. Zakrzewski, J. A. Montgomery, R. E. Stratmann, J. C. Burant, S. J. M. Dapprich, Millam, A. D. Daniels, K. N. Kudin, M. C. Strain, O. Farkas, J. Tomasi, V. Barone, M. Cossi, R. Cammi, B. Mennucci, C. Pomelli, C. Adamo, S. Clifford, J. Ochterski, G. A. Petersson, P. Y. Ayala, Q. Cui, K. Monocular, D. K. Malick, A. D. Rabuck, K. Raghavachari, J. B. Foresman, J. Kieslowski, J. V. Ortiz, A. G. Baboul, B. B. Stefano, G. Liu, A. Liashenko, P. Piskorz, I. Komaromi, R. Gomperts, R. L. Martin, D. J. Fox, T. Keith, M. A. Al-Laham, C. Y. Peng, A. Nanayakkara, M. Challacombe, P. M. W. Gill, B. Johnson, W. Chen, M. W. Wong, J. L. Andres, C. Gonzalez, M. Head-Gordon, E. S. Replogle, J. A. Pople, Gaussian 98, Revision A.9. Gaussian Incorporated: Pittsburgh, PA (1998).

[7] L. Guo; "Density functional study of structural and electronic properties of GaP_n ($2 \le n \le 12$) clusters"; *J. Mater. Sci.* **45**, No. 12 (2010) 3381-3387.

خواص رسانندگی پیوند ابررسانای نوع-p/عایق/فرومغناطیس بر پایه گرافن

ولی، رشید[۱]؛ طالبی خوندابی، فاطمه[۱]

دانشکده فیزیک دانشگاه دامغان

چکیده

رسانندگی تونلی یک پیوند ابررسانای نوع-p/ عایق/فرومغناطیس(F/I/p-wave SC) بر پایه گرافن را با استفاده از فرمولبندی BTK و روش ماتریس انتقال مورد بررسی قرار دادیم. دریافتیم که طیف رسانندگی پیوند F/I/p-wave SC یک قله‌ی رسانندگی بایاس صفر را برای مورد ابررسانای موج_ p_x نشان می‌دهد، در حالیکه این طیف یک دره رسانندگی بایاس صفر را برای مورد ابررسانای موج_ p_y نشان می‌دهد. همچنین دریافتیم که رسانندگی پیوند F/I/p-wave SC برای ابررسانای موج_ p_x مستقل از قدرت سد می‌باشد، درحالیکه برای مورد ابررسانای موج_ p_y رسانندگی یک رفتار نوسانی را برحسب قدرت سد نشان می‌دهد. همچنین نتایج بدست آمده نشان می‌دهد که وقتی انرژی تبادلی مقداری نزدیک انرژی فرمی داشته باشد، این پیوند یک جریان کاملاً اسپین قطبیده را بدست می‌دهد.

Conductance properties of graphene based ferromagnet/insulator/p-wave superconductor junction

Vali, Rashid[1]; Talebi khoundabi, Fatemeh[1]

[1] *School of Physics, Damghan University*

Abstract

We investigate the tunneling conductance of a graphene based ferromagnet/insulator/p-wave superconductor (F/I/p-wave SC) junction, using the BTK formalism and transfer matrix method. We find that the conductance spectra of F/I/p-wave SC junction shows a zero bias conductance peak for p_x –wave superconductor case while it shows a zero bias conductance dip for p_y –wave superconductor case. We find also that the conductance of F/I/p-wave SC junction is independent of the barrier strength for p_x –wave superconductor case while it shows an oscillatory behavior as a function of barrier strength for p_y –wave superconductor case. The obtained results show also that this junction gives a completely spin polarized current as exchange energy approaches the Fermi energy.

مقدمه

ساختارهای مزوسکوپیک شامل لایه‌های فرومغناطیس و ابررسانا مورد توجه زیادی قرار گرفته‌اند. این ساختارها همبستگی کوانتومی بین آثار همدوسی در فلز عادی یا فرومغناطیس و همدوسی ذاتی ابررسانایی را که توسط بازتاب آندریو تامین می شود، به نمایش می‌گذارند. بیشتر مطالعات در این زمینه در مورد ساختارهای ابررسانای موج-d/فرومغناطیس و ابررسانای موج-s/فرومغناطیس صورت گرفته است [1-2].

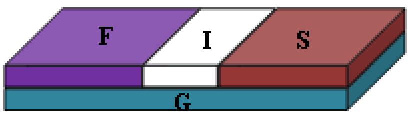
از طرفی ابررسانایی با جفت شدگی نوع p نیز در ابررسانای Sr_2RuO_4 مشاهده شده است و خواص ترابرد اسپین قطبیده در ساختار ابررسانای نوع-p/عایق/فرومغناطیس مورد مطالعه قرار گرفته است [3]. همچنین خواص ترابردی در پیوند ابررسانای نوع-p/عایق/فلز عادی و ابررسانای نوع-p/ فرومغناطیس تشکیل شده روی گرافن مورد مطالعه قرار گرفته است [4-5]. گرافن یک لایه‌ی تک اتمی از گرافیت است [۶] که دارای اهمیت زیادی برای ساخت و طراحی قطعات

الکترونیکی جدید در مقیاس نانو می‌باشد. خاصیت ابررسانایی و خاصیت فرومغناطیس توسط اثر مجاورت در گرافن القا می‌شود. در طبیعت گرافن یک نیمرسانا با گاف انرژی صفر است. گرافنی که بر روی زیرلایه SiO_2 رشد داده شود، گرافن بدون گاف می‌باشد[۷]. اما اگر گرافن بر روی زیرلایه SiC رشد نماید، گرافن گاف دار خواهد بود[۸].

دراین مقاله خواص ترابردی در پیوند ابررسانای نوع-p/عایق/فرومغناطیس تشکیل شده روی گرافن که در آن ناحیه ابررسانا روی گرافن گاف دار و نواحی عایق و فرومغناطیس روی گرافن بدون گاف می باشند را مورد بررسی قرار داده‌ایم. اختلاف اساسی این پیوند با پیوند ابررسانای نوع-p/فرومغناطیس تشکیل شده روی گرافن این است که بازتاب آندریو در آن در ناحیه عایق صورت می‌گیرد و بر این اساس انتظار می‌رود که نتایج متفاوتی بدست آید. همچنین از آنجاییکه الکترونهای تشکیل دهنده زوج کوپر در گرافن ابررسانا، الکترونهای بدون جرم دیراک می‌باشند انتظار می‌رود که پیوند ابررسانای نوع-p/ عایق/فرومغناطیس تشکیل شده روی گرافن خواص رسانندگی متفاوت با پیوند ابررسانای نوع-p/عایق/فرومغناطیس معمولی نشان دهد.

مدل نظری

در شکل (۱) به صورت طرحوار پیوندگاه F/I/S بر پایه‌ی گرافن نشان داده شده است. دراین شکل ناحیه‌ی فرومغناطیس در $x \le -d$، سد عایق در $-d < x < 0$ و ناحیه‌ی ابررسانای در $x > 0$ قرار دارد. فرض می‌کنیم لایه‌ی وسط بسیار نازک می‌باشد و ولتاژ گیت اعمالی به آن به بینهایت میل می‌کند($V_G \to \infty$ و $d \to 0$) بطوریکه قدرت سد $\chi = V_G d / \hbar v_f$ دارای مقدار معینی می‌شود.



شکل ۱: نمایی طرحواراز پیوندگاه F/I/S بر پایه‌ی گرافن

برانگیختگی‌های الکترون و حفره در این ساختار توسط معادله دیراک-بوگولیوبوف د- جنس[9] زیر توصیف می‌شود.

$$\begin{pmatrix} H_0 - U(x) - \eta_\sigma H(x) + \sigma_z m v_f^2 & \Delta(x) \\ \Delta^*(x) & \eta_{\bar{\sigma}} H(x) - \sigma_z m v_f^2 + U(x) - H_0 \end{pmatrix} \psi = E\psi \qquad (۱)$$

که در این رابطه

$$H_0 = -i\hbar v_f (\sigma_x \delta_x \pm \sigma_y \delta_y)$$
$$U(x) = E_f \Theta(-x-d) + (E_f + V_G)\Theta(x+d)\Theta(-x) + E_{fS}\Theta(x)$$
$$H(x) = E_h \Theta(-x-d)$$
$$\Delta(x) = \begin{cases} \Delta_0 \cos\theta_s e^{i\varphi} \sigma_0 \Theta(x) & \text{for } p_x \text{ symmetry} \\ \Delta_0 \sin\theta_s e^{i\varphi} \sigma_0 \Theta(x) & \text{for } p_y \text{ symmetry} \end{cases}$$

که در آن σ_x و σ_y ماتریس‌های پائولی و Θ تابع پله ای هویساید است. فرض بر این است که انرژی فرمی در ناحیه‌ی ابررسانا $E_{fs} = E_f + U_0$ درمقایسه با سایر پارامترهای انرژی خیلی بزرگ است. پتانسیل U(x) در واقع جابه جایی نسبی انرژی فرمی در نواحی فرومغناطیس، سدعایق و ابررسانا است. پارامترهای H_0، $H(x)$ و $\Delta(x)$ به ترتیب هامیلتونی دیراک، انرژی تبادلی و پارامتر نظم ابررسانایی هستند. با حل معادله(۱) توابع موج در ناحیه فرومغناطیس Ψ_f ، سد عایق Ψ_I و ابررسانا Ψ_S به صورت زیر بدست می‌آیند.

$$\Psi_f(x \le -d) = \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\theta_\sigma} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} e^{i\cos\theta_\sigma \frac{(E + E_f + \eta_\sigma E_{exc})}{\hbar v_f} x} e^{iqy}$$
$$+ r_\sigma \begin{pmatrix} 1 \\ -e^{-i\theta_\sigma} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} e^{-i\cos\theta_\sigma \frac{(E + E_f + \eta_\sigma E_{exc})}{\hbar v_f} x} e^{iqy} + r_A \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ e^{-i\theta_A} \end{pmatrix} e^{-i\cos\theta_A \frac{(E - E_f + \eta_{\bar{\sigma}} E_{exc})}{\hbar v_f} x} e^{iqy}$$

$$\Psi_I(-d < x < 0) =$$
$$a \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\theta_I^e} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} e^{i\cos\theta_I^e \frac{(E + E_f - V_G)}{\hbar v_f} x} e^{iqy} + b \begin{pmatrix} 1 \\ -e^{-i\theta_I^e} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} e^{-i\cos\theta_I^e \frac{(E + E_f - V_G)}{\hbar v_f} x} e^{iqy}$$
$$+ c \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ -e^{i\theta_I^h} \end{pmatrix} e^{i\cos\theta_I^h \frac{(E - E_f + V_G)}{\hbar v_f} x} e^{iqy} + g \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ e^{-i\theta_I^h} \end{pmatrix} e^{-i\cos\theta_I^h \frac{(E - E_f + V_G)}{\hbar v_f} x} e^{iqy}$$

$$\Psi_S(x>0)= t\begin{pmatrix} u^{+} \\ A_s^{+}u^{+}e^{i\theta_s^e} \\ v^{+}e^{-i\varphi_+} \\ A_s^{+}v^{+}e^{i\theta_s^e}e^{-i\varphi_+} \end{pmatrix} e^{i\cos\theta_s^e \frac{\sqrt{(E_f+U_0)^2-(mv_f^2)^2}}{\hbar v_f}x} e^{iqy} +n\begin{pmatrix} v^{-} \\ -A_s^{-}v^{-}e^{-i\theta_s^h} \\ u^{-}e^{-i\varphi_-} \\ -A_s^{-}u^{-}e^{-i\theta_s^h}e^{-i\varphi_-} \end{pmatrix} e^{i\cos\theta_s^h \frac{\sqrt{(E_f+U_0)^2-(mv_f^2)^2}}{\hbar v_f}x} e^{iqy}$$

که در آن $u^{\pm}=(1+\sqrt{1-\left|\Delta(\theta^{\pm})/E\right|^2})^{\frac{1}{2}}$ ، $v^{\pm}=(1-\sqrt{1-\left|\Delta(\theta^{\pm})/E\right|^2})^{\frac{1}{2}}$ و $A_s^{\pm}=(E_f+U_0+mv_f^2)\big/\sqrt{(E_f+U_0)^2-(mv_f^2)^2}$ و $\theta^{+}=\theta_s^e$ و $\theta^{-}=\pi-\theta_s^h$ و $e^{i\varphi_{\pm}}=\Delta(\theta^{\pm})\big/\left|\Delta(\theta^{\pm})\right|$ است.

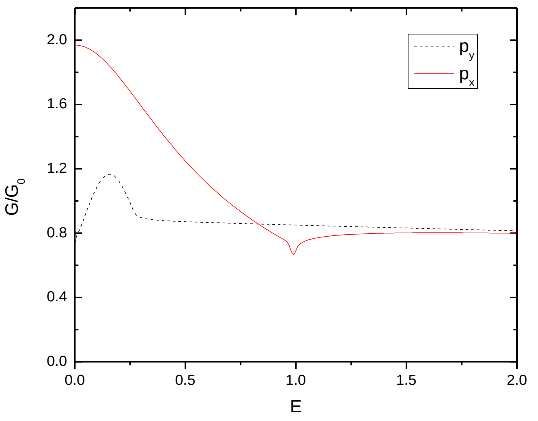
با اعمال شرط پیوستگی توابع موج درمرزها و با استفاده از روش ماتریس انتقال، دامنه بازتاب آندریو و دامنه بازتاب عادی را بدست می‌آوریم و سپس با استفاده از فرمول BTK [10]، رسانندگی را محاسبه می‌کنیم.

$$G(eV)=\frac{1}{2}M\sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow}G_0\int_0^{\theta_{t,\sigma}}d\theta_\sigma\cos\theta_\sigma(1+\frac{\cos\theta_{A,\sigma}}{\cos\theta_\sigma}\left|r_A(eV,\theta_\sigma)\right|^2-\left|r_\sigma(eV,\theta_\sigma)\right|^2)$$

که در آن W پهنای پیوند و $G_0=\frac{2e^2}{h}N_0(eV)$ رسانندگی عادی وابسته به اسپین، $M=1+(\eta_{\sigma(\bar{\sigma})}E_{exc}/E_f+E)$ و $(\eta_\sigma=1,\eta_{\bar{\sigma}}=-1)$ و $N_0(E)=\left|E+E_f+\eta_\sigma E_{exc}\right|W/\pi\hbar v_f$ چگالی حالت ها است.

نتایج عددی و بحث

در شکل(۲) نمودار رسانندگی بر حسب بایاس E به ازای $U_0=1000\Delta_0$، $E_f=50\Delta_0$، $E_{exc}=0.9E_f$، $mv_f^2=990\Delta_0$، $\chi=\pi/4$ و برای پتانسیل جفت شدگی نوع p_x و p_y رسم شده است. همان طور که در شکل مشاهده می‌کنیم، نمودار رسانندگی مربوط به پتانسیل جفت شدگی نوع p_x یک قله را در بایاس صفر نشان می‌دهد و با افزایش بایاس، رسانندگی به صورت نزولی و با یک شیب آهسته کاهش می‌یابد. این رفتار متفاوت از رفتار رسانندگی بر حسب بایاس مشاهده شده در پیوندهای معمولی است که در آن کاهش رسانندگی با افزایش بایاس با شیب تند کاهش می یابد[3]. علت این اختلاف، پدیده تونل زنی کلاین در پیوندهای تشکیل شده روی سطح گرافن است[11]. همچنین از شکل (۲) مشاهده می شود که وقتی پتانسیل جفت شدگی از نوع p_y است، رسانندگی بر حسب بایاس یک دره را در بایاس صفر نشان می‌دهد. از این اختلاف که در پیوند F/I/S، رسانندگی بر حسب بایاس، برای پتانسیل جفت شدگی نوع p_x یک قله را در بایاس صفر نشان می‌دهد ولی برای پتانسیل جفت شدگی نوع p_y یک دره را در بایاس صفر نشان می‌دهد می‌توان برای تشخیص ابررسانای نوع p_x از ابررسانای نوع p_y بهره برد.

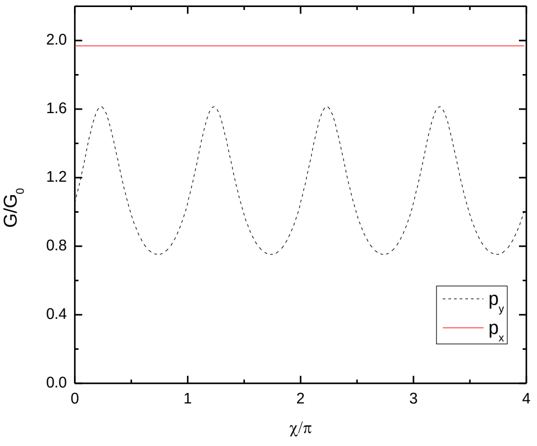


شکل۲: نمودار رسانندگی بر حسب بایاس E به ازای $U_0=1000\Delta_0$، $E_f=50\Delta_0$، $E_{exc}=0.9E_f$، $mv_f^2=990\Delta_0$، $\chi=\pi/4$

شکل(۳) رسانندگی بایاس صفر بر حسب قدرت سد در پیوند F/I/S را به ازای $U_0=1000\Delta_0$، $E_f=50\Delta_0$، $E_{exc}=0.9E_f$، $mv_f^2=500\Delta_0$، $E=0\Delta_0$ و برای پتانسیل جفت شدگی نوع p_x و p_y نشان می دهد.

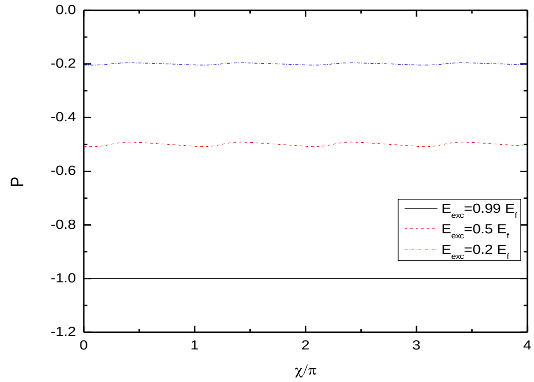
همان طور که در شکل مشاهده می‌کنیم، رسانندگی بایاس صفر برای پتانسیل جفت شدگی نوع p_x مستقل از قدرت سد است و مقداری تقریباً برابر $G/G_0=2$ دارد، ولی برای پتانسیل جفت شدگی نوع p_y ، علی رغم اختلاف زیاد بین انرژی فرمی ناحیه‌ی فرومغناطیس و ابررسانا، رفتاری نوسانی از خود نشان می‌دهد. وابستگی رسانندگی بایاس صفر به قدرت سد برای پتانسیل جفت شدگی نوع p_y و مستقل از قدرت سد بودن برای پتانسیل جفت شدگی نوع p_x در پیوند ابررسانای نوع p /عایق/فرومغناطیس معمولی نیز مشاهده شده است[3]. با وجود این در پیوند معمولی وابستگی رسانندگی به قدرت سد برای پتانسیل جفت شدگی نوع

p_y، میرایی است در حالیکه همانطور که گفته شد این رفتار در پیوند بر پایه گرافن نوسانی است. علت نوسانات مشاهده شده، رابطه پاشندگی خطی فرمیونهای دیراک در گرافن است.



شکل۳ : نمودار رسانندگی بایاس صفر بر حسب قدرت سد به‌ازای
$E=0\Delta_0$ ،$mv_f^2=500\Delta_0$ ،$E_{exc}=0.9E_f$ ،$E_f=50\Delta_0$ ،$U_0=1000\Delta_0$

شکل(۴) قطبیدگی اسپینی بر حسب قدرت سد را برای ابررسانای نوع_ p_y و به ازای $U_0=1000\Delta_0$، $E_f=50\Delta_0$، $E=0\Delta_0$، $mv_f^2=500\Delta_0$ و برای سه مقدار متفاوت E_{exc} نشان می‌دهد.



شکل۴ : قطبیدگی اسپینی بر حسب قدرت سد را برای ابررسانای نوع_ p_y و به ازای $U_0=1000\Delta_0$، $E_f=50\Delta_0$، $E=0\Delta_0$، $mv_f^2=500\Delta_0$

همان طور که در شکل(۴) مشاهده می‌کنیم قطبیدگی بر حسب قدرت سد به میدان تبادلی لایه فرومغناطیس E_{exc} بستگی دارد و وقتی E_{exc} به انرژی فرمی نزدیک می‌شود قدر مطلق قطبیدگی اسپینی افزایش می‌یابد و به یک نزدیک می‌شود. این خاصیت نشان می‌دهد که از این قطعه می‌توان به عنوان فیلتر اسپینی استفاده کرد. به دلیل عدم وجود گزارش تجربی، در حال حاضر مقایسه نتایج نظری بدست آمده با نتایج تجربی امکان پذیر نمی باشد ولی درستی پیش بینی های کار حاضر را می توان با ساختن پیوندی نظیر آنچه در شکل ۱ نشان داده شده است بطور تجربی امتحان نمود. به هر حال نتایج نظری بدست آمده می تواند در جهت طراحی قطعات الکترونیکی بر پایه گرافن مورد استفاده قرار گیرد.

نتیجه گیری

پیوند ابررسانای نوع-p/فلز عادی/فرومغناطیس تشکیل شده روی گرافن را در نظر گرفته و با استفاده از فرمولبندی BTK و معادله دیراک-بوگولیوبوف- د جنس، رسانندگی و قطبیدگی اسپینی را برحسب بایاس اعمالی و قدرت سد بررسی نمودیم.

رسانندگی بر حسب بایاس، برای پتانسیل جفت شدگی نوع p_x یک قله را در بایاس صفر نشان می دهد ولی برای پتانسیل جفت شدگی نوع p_y یک دره را در بایاس صفر نشان می دهد که می‌توان از این رفتار برای تشخیص ابررسانای نوع p_x از ابررسانای نوع p_y بهره برد. همچنین وابستگی نوسانی رسانندگی بایاس صفر به قدرت سد برای پتانسیل جفت شدگی نوع p_y و مستقل از قدرت سد بودن برای پتانسیل جفت شدگی نوع p_x دراین پیوند مشاهده شد. علاوه برآن نتایج بدست آمده نشان می‌دهد به ازای مقادیر $E_{exc}\to E_f$، قطبیدگی اسپینی، مستقل از مقدار قدرت سد، برابر یک است که بیانگر قابلیت استفاده از این قطعه به عنوان فیلتر اسپینی است.

مرجع ها

[1] M.J.M. de Jong, C.W. Beenakker, *Phys. Rev. Lett*. **74**, 1657 (1995).
[2] I. Zutic, O.T. Valls, Phys. Rev. B **61**, 1555 (2000).
[3] L.X. Wei, L.S. Jing, *Sci. China-Phys. Mech. Astron*. **51**, 1029 (2008).
[4] C. Bai, J. Wang, Y.Yang, *Superlattices and microstructures*, **49**, 151 (2011).
[5] L. Wei, C.H. Bao, L.S. Jing, *Sci. . China-Phys. Mech. Astron*. **55**, 649 (2012).
[6] K. S. Novoselov , *et al.Science* **306**, 666 (2004).
[7] K. S. Novoselov , *et al.*, *Nature* **438**, 197 (2005).
[8] V. N. Kotov, *et al.*, *Phys. Rev*. B **78**, 075433 (2008).
[9] C. W. J. Beenakker, *Phys. Rev. Lett*. **97**, 067007 (2006).
[10] G.E. Blonder, M. Tinkham, T.M. Klapwijk, *Phys. Rev*. B **25**, 4515 (1982).
[11]M.I. Katsnelson, K.S. Novoselov, A.K. Geim, *Nat. Phys*. **2**, 620 (2006).

ترابرد اسپینی در پیوند سد نازک ابررسانای فرومغناطیس/عایق/فرومغناطیس بر پایه‌ی گرافن

ولی، رشید[۱]؛ فارسی‌زاده، نغمه[۱]

[۱]دانشکده فیزیک دانشگاه دامغان، دامغان

چکیده

در این مقاله، خواص ترابرد اسپینی یک پیوند سد نازک ابررسانای‌فرومغناطیس/عایق/ فرومغناطیس بر پایه‌ی گرافن را با استفاده از فرمولبندی BTK و روش ماتریس انتقال بررسی نمودیم. نتایج بدست آمده نشان می دهد که رسانندگی و قطبیدگی اسپینی بر حسب قدرت سد یک رفتار نوسانی با پریود π را نشان می دهند. نتایج عددی همچنین نشان می دهد که این پیوند می تواند به عنوان یک قطعه فیلتر اسپینی مورد استفاده قرار گیرد.

Spin transport in graphene-based ferromagnet/insulator/ ferromagnetic superconductor thin barrier junction

Vali, Rashid[1] ;Farsizadeh, Naghmeh[1]

[1] *School of physics, Damghan University, Damghan,*

Abstract

In this paper, we investigate the spin transport properties of a graphene-based ferromagnet/insulator/ferromagnetic superconductor thin barrier junction, using the BTK formalism and transfer matrix method. The obtained results indicate that both the conductance and spin polarization as a function of barrier strength show a π periodic oscillatory behavior. The numerical results show also that this junction can be used as a spin filter device.

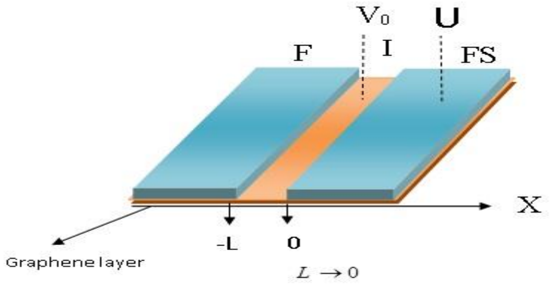
مقدمه

در اواسط دهه‌ی هفتاد میلادی، Fulde, Ferrell و به طور مجزا از این دونفر Larkin و Ovchinnikov فاز جدیدی برای ابررسانایی یافتند [۱،۲]. آن‌ها دریافتند که با قرار دادن یک لایه‌ی بسیار نازک از ابررسانا بر روی لایه‌ی بسیار نازکی از فرومغناطیس، خاصیت ابررسانایی در ماده‌ی فرومغناطیس القا می‌شود و ابررسانای‌فرومغناطیس همگن بدست می‌آید[۳]. این فاز که در آن همزمان خاصیت ابررسانایی و فرومغناطیسی وجود دارد را فاز FFLO می‌نامند. در این فاز برای اینکه ابررسانا خاصیت خود را از دست ندهد باید میدان تبادلی در محک کلاگستون یعنی $E_{ex} < \Delta(T=0)/\sqrt{2}$ صدق نماید. در این رابطه E_{ex} و Δ بترتیب انرژی تبادلی ناحیه‌ی ابررسانای‌فرومغناطیس و پارامتر نظم ابررسانا هستند. در مطالعات جدید بر روی خواص ترابردی مواد، دانشمندان گرافن را که یک تک لایه از اتم‌های کربن با چینش لانه زنبوری است به عنوان یک میزبان خوب برای ادوات الکترونیکی انتخاب کردند. علت این انتخاب، رفتار الکترون‌ها در گرافن است. الکترون‌ها در گرافن رفتاری شبیه به فرمیون‌های نسبیتی دوبعدی و بدون جرم دیراک نشان می‌دهند[۴]. از مجاورت گرافن با لایه‌ی فرومغناطیس و یا ابررسانای‌فرومغناطیس به دلیل اثر مجاورت، به ترتیب گرافن فرومغناطیس و گرافن ابررسانای‌فرومغناطیس بدست می‌آید. همچنین با اعمال ولتاژ گیت به قسمتی از گرافن می‌توان سد پتانسیل در آن قسمت ایجاد کرد که نقش لایه‌ی عایق را ایفا می‌نماید. در سال ۲۰۱۰، Soodchomshom و همکارانش، تحقیقاتی بر روی قطعه‌ی ابررسانای‌فرومغناطیس/فرومغناطیس بر پایه‌ی گرافن انجام دادند. آن‌ها دریافتند که به دلیل وجود دو الکترود مغناطیسی، جدا شدگی زیمان رخ داده و باعث ظهور دو

قله‌ی رسانندگی یکی مربوط به شبه ذرات با اسپین بالا و دیگری مربوط به شبه ذرات با اسپین پائین می‌شود. در این مقاله، پیوند ابررسانای‌فرومغناطیس/عایق/فرومغناطیس تشکیل شده روی گرافن را در نظر می‌گیریم و با حل معادلات دیراک-بوگولیوبوف د-جنس و اعمال شرایط مرزی و با استفاده از فرمولبندی BTK و روش ماتریس انتقال به بررسی ترابرد اسپینی در آن می‌پردازیم.

فرمولبندی

شکل ۱ به طور طرح‌وار پیوند F/I/FS بر پایه‌ی گرافن است. فرض بر این است که در ناحیه‌ی FS گرافن گافدار و در نواحی دیگر بدون گاف است. این ساختار را در حد سد نازک در نظر می‌گیریم. یعنی فرض بر این است که ضخامت لایه‌ی عایق $L \to 0$ و ولتاژ گیت اعمال شده به این ناحیه $V_0 \to +\infty$ می‌باشد بطوریکه قدرت سد $\chi = \frac{V_0 L}{\hbar v_F}$ مقداری متناهی خواهد داشت.



شکل ۱: نمایش پیوند سد نازک F/I/FS بر پایه‌ی گرافن.

برانگیختگی‌های الکترون‌گونه و حفره‌گونه در ساختار فوق توسط معادله‌ی دیراک-بوگولیوبوف د-جنس، زیر توصیف می‌شود.

$$\begin{pmatrix} \hat{H} - E_{ex}^{P(AP)} & \Delta e^{i\varphi} \\ \Delta e^{-i\varphi} & -\hat{H} - E_{ex}^{P(AP)} \end{pmatrix} \psi_{\sigma}^{P(AP)}(x) = E \psi_{\sigma}^{P(AP)}$$

(۱)

که در آن:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} m(x) - E_F(x) & -i\hbar v_F(\partial x - \partial y) \\ -i\hbar v_F(\partial x + \partial y) & -m(x) - E_F(x) \end{pmatrix}$$

اپراتور هامیلتونی الکترون دو بعدی دیراک، E معرف انرژی برانگیختگی شبه ذرات فرودی، m انرژی جرم سکون الکترون دیراک که بیانگر حضور گاف در گرافن، E_F انرژی فرمی و σ معرف حالت اسپینی بالا و پائین بفرم $\sigma_\uparrow = -\sigma_\downarrow = 1$ است. انرژی فرمی در این پیوند بصورت

$$E_F(x) = \begin{cases} E_F & \rightarrow -L < x \\ E_F + V_0 & \rightarrow -L < x < 0 \\ E_F + U & \rightarrow x > 0 \end{cases}$$

تعریف می‌شود، که در آن، U پتانسیل الکترواستاتیک اعمالی به ناحیه‌ی FS است. با حل معادله‌ی (۱) تابع موج مربوط به هر یک از سه ناحیه بصورت زیر بدست می‌آیند. برای ناحیه‌ی فرومغناطیس:

$$\psi_{F\sigma}^{P(AP)}(x < -L, y) = e^{iqy}\left(\begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\theta_\sigma} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} e^{ik_{F\sigma}\cos(\theta_\sigma)x} + r_\sigma \begin{pmatrix} 1 \\ -e^{-i\theta_\sigma} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} e^{iF_\sigma \cos(\theta_\sigma)x} + r_{A\sigma} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ e^{-i\theta_{A\sigma}} \end{pmatrix} e^{-ik'_{F\sigma}\cos(\theta_{A\sigma})x} \right)$$

که در آن r_σ و $r_{A\sigma}$ بترتیب ضریب بازتاب عادی و ضریب بازتاب آندریو هستند. برای ناحیه‌ی عایق:

$$\psi_{I\sigma}^{P(AP)}(-L < x < 0, y) = e^{iqy}\left(a_\sigma \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\theta_{I\sigma}} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} e^{ik_{I\sigma}\cos(\theta_{I\sigma})x} + b_\sigma \begin{pmatrix} 1 \\ -e^{-i\theta_{I\sigma}} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} e^{-ik_{I\sigma}\cos(\theta_{I\sigma})} + c_\sigma \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ e^{-i\theta'_{I\sigma}} \end{pmatrix} e^{-ik'_{I\sigma}\cos(\theta'_{I\sigma})x} + d_\sigma \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ -e^{i\theta'_{I\sigma}} \end{pmatrix} e^{ik'_{I\sigma}\cos(\theta_{I\sigma})x} \right)$$

و برای ناحیه‌ی ابررسانای‌فرومغناطیس:

$$\psi_{FS\sigma}^{P(AP)}(x > 0, y) = e^{iqy}\left(t_\sigma \begin{pmatrix} u_\sigma \\ u_\sigma A_s \\ v_\sigma e^{-i\varphi} \\ v_\sigma e^{-i\varphi} A_s \end{pmatrix} e^{ik_s x} + t'_\sigma \begin{pmatrix} v_\sigma \\ -v_\sigma A_s^* \\ u_\sigma e^{-i\varphi} \\ -u_\sigma A_s^* e^{-i\varphi} \end{pmatrix} e^{-ik_s x} \right)$$

که در آن $A_s = \left(\frac{E_{FS} - m}{\hbar v_F [k_s / \cos(\theta_s)}\right) e^{i\theta_s}$ و:

$$u_{\sigma}^{P(AP)}=\sqrt{\frac{1}{2}(1+\sqrt{\frac{(E+(-)\sigma h_s)^2-\Delta^2}{E+(-)\sigma h_s}})}$$
$$v_{\sigma}^{P(AP)}=\sqrt{\frac{1}{2}(1-\sqrt{\frac{(E+(-)\sigma h_s)^2-\Delta^2}{E+(-)\sigma h_s}})}$$
$$k_{F\sigma}=(E+E_F+\sigma E_m)/\hbar v_F$$
$$k'_{F\sigma}=(E-E_F+\sigma E_m)/\hbar v_F$$
$$k_{I\sigma}=(E+E_F-V_0)/\hbar v_F$$
$$k'_{I\sigma}=(E-E_F+V_0)/\hbar v_F$$
$$k_s=\cos(\theta_s)\sqrt{(E_F+U)^2-m^2}/\hbar v_F$$

در حد پیوند سد نازک، $L\to 0$ و $V_0\to+\alpha$ نتیجه می‌شود که $-k_I L, k'_I L\to\chi$. و نیز $\theta_I,\theta'_I\to 0$ با اعمال بقای مؤلفه‌ی موازی بردار موج q، در فصل مشترک‌ها می‌توان زوایای $\theta_{A\sigma}$ و θ_s را بصورت زیر بر حسب زاویه‌ی فرودی θ بیان کرد:

$$\theta_{A\sigma}=\sin^{-1}([E+\sigma E_m+E_F]\sin(\theta_\sigma)/[E+\sigma E_m-E_F])$$
$$\theta_s=\sin^{-1}([E+\sigma E_m+E_F]\sin(\theta_\sigma)/\sqrt{E_{FS}^2-m^2})$$

در این معادلات، E_m و h_s بترتیب انرژی‌های تبادلی نواحی F و FS هستند. رسانندگی وابسته به اسپین را می‌توان بصورت زیر با استفاده از فرمول‌بندی BTK بیان کرد [۵].

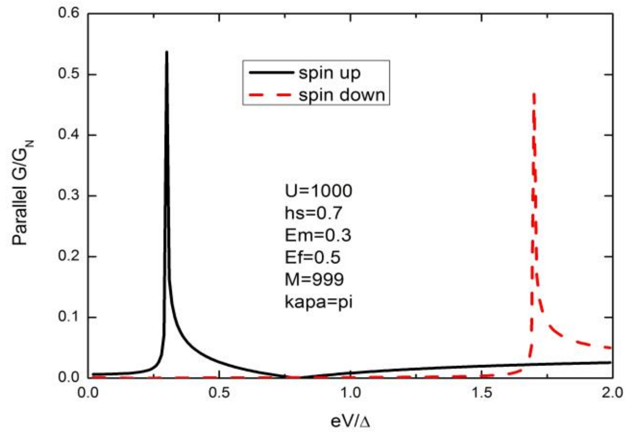
$$G_\sigma=\frac{1}{2}G_N M_\sigma\int_0^{\theta_{t\sigma}}\cos(\theta)(1+\frac{\cos(\theta_{A\sigma})}{\cos(\theta)}|r_{A\sigma}|^2-|r_\sigma|^2)d\theta$$

که $G_N\cong\frac{4e^2}{h}N(E_F)$ و $N(E_F)=(E+E_F)W/\pi\hbar v_F$ و در آن W پهنای لایه‌ی گرافن و $G=G_\downarrow+G_\uparrow$ و $M_\sigma=1+\sigma E_m/(E+E_F)$ است. پس از تعیین $G_\uparrow$ و $G_\downarrow$ قطبیدگی اسپینی را می‌توان بصورت زیر بدست آورد:

$$SP=\frac{G_\uparrow-G_\downarrow}{G_\uparrow+G_\downarrow}.$$

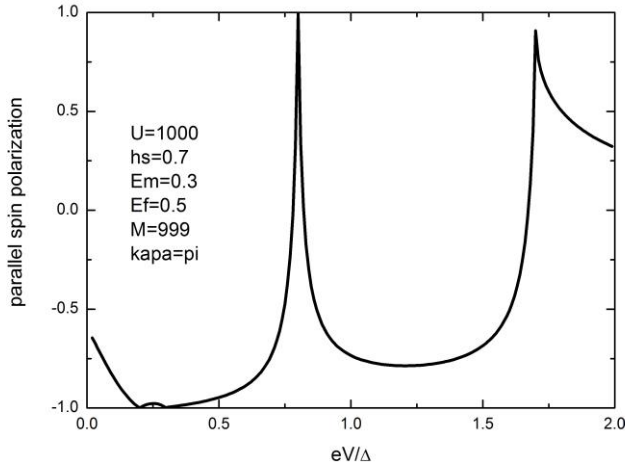
بحث و نتایج عددی

در انجام محاسبات از مقادیر $U=1000\Delta$، $m=999\Delta$، $E_m=0.3\Delta$ و $h_s=0.7\Delta$ استفاده شده است. در شکل ۲ رسانندگی بر حسب بایاس برای شبه ذرات با اسپین بالا و اسپین پائین نشان داده شده است. اثر جداشدگی زیمان که به خاطر وجود لایه‌ی فرومغناطیس در هر دو الکترود F و FS است دو قله رسانندگی را القا می‌کند. این دو قله در شکل ۲ به ترتیب مربوط به شبه ذرات فرودی با اسپین بالا و شبه ذرات فرودی با اسپین پائین هستند. قله‌ی رسانندگی مربوط به شبه ذرات اسپین بالا در بایاس $eV=\Delta-h_s\approx 0.3$، و قله‌ی رسانندگی مربوط به شبه ذرات اسپین پائین در بایاس $eV=\Delta+h_s=1.7$ اتفاق می‌افتد. در بایاس $eV=\Delta-E_m\approx 0.7$ رسانندگی صفر می‌شود، که دلیل آن تبدیل انعکاس آندریو معمولی به انعکاس آندریو آئینه‌ای در این بایاس است.



شکل ۲: نمایش رسانندگی‌های مغناطش موازی بر حسب بایاس اعمالی.

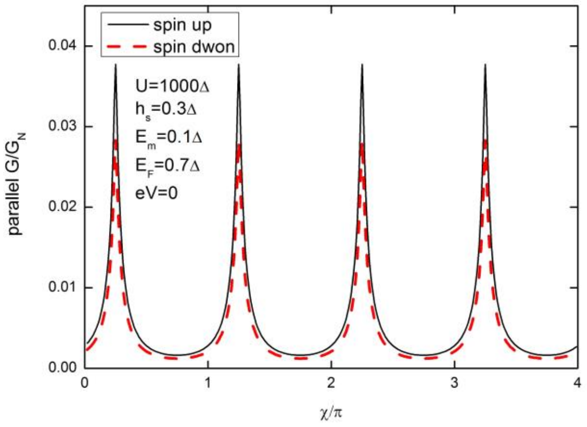
شکل ۳، قطبیدگی اسپینی را بر حسب بایاس اعمالی نشان می‌دهد که در گستره‌ی بین ۱- و ۱ را دارا می‌باشد. در بایاس $eV=\Delta-E_m\approx 0.7$ که در آن تبدیل بازتاب آندریو معمولی به بازتاب آندریو آئینه‌ای رخ می‌دهد قطبیدگی اسپینی دارای قله‌ای به ارتفاع واحد می‌باشد. به هر حال با تنظیم دقیق بایاس اعمالی می‌توان از پیوند فوق به عنوان یک فیلتر اسپینی استفاده نمود.



شکل ۳: قطبیدگی اسپینی مغناطش موازی بر حسب بایاس اعمالی.

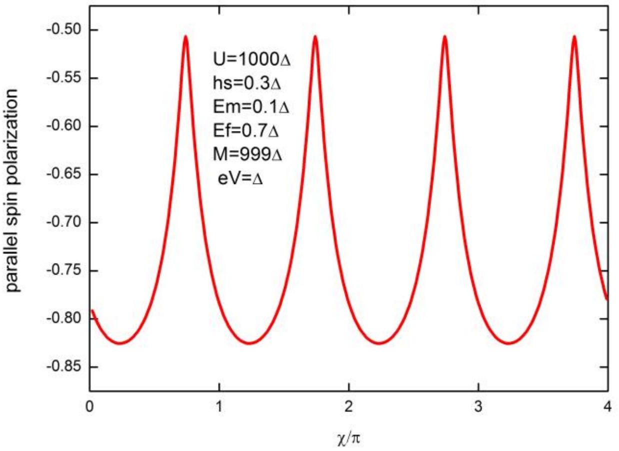
رسانندگی و قطبیدگی اسپینی را علاوه بر بایاس اعمالی، با قدرت سد نیز می‌توان کنترل کرد. شکل ۴، رسانندگی بایاس صفر بر

حسب قدرت سد برای الکترون‌های با اسپین بالا و اسپین پائین را نشان می‌دهد. هم برای اسپین بالا و هم برای اسپین پائین رسانندگی بایاس صفر بر حسب قدرت سد، یک رفتار نوسانی با پریود π را نشان می‌دهد که ان رفتار بر خلاف رفتار میرای مشاهده شده در پیوندهای معمولی می‌باشد. این رفتار نوسانی به دلیل رابطه‌ی پاشندگی خطی مربوط به فرمیون‌های دیراک در سطح گرافن می‌باشند. به دلیل عدم وجود داده های تجربی، در حال حاضر مقایسه نتایج نظری بدست آمده با نتایج تجربی امکان پذیر نمی باشد ولی درستی نتایج نظری بدست آمده را می توان با ساختن پیوندی نظیر آنچه در شکل ۱ نشان داده شده است بطور تجربی امتحان نمود. به هر حال نتایج نظری بدست آمده می تواند در جهت طراحی قطعات الکترونیکی بر پایه گرافن مفید باشد.



شکل ۴: نمایش رسانندگی مغناطش موازی بر حسب قدرت سد.

از شکل ۵ دیده می شود که قطبیدگی اسپینی نیز برحسب قدرت سد یک رفتار نوسانی با پریود π را نشان می‌دهد.



شکل ۵: نمایش قطبیدگی اسپینی مغناطش موازی بر حسب قدرت سد.

نتیجه‌گیری

در این کار، رسانندگی وابسته به اسپین را برای ساختار F/I/FS با استفاده از فرمول‌بندی BTK و روش ماتریس انتقال، مطالعه کردیم. به دلیل وجود انرژی تبادلی در دو الکترود، جدا شدگی زیمان رخ داده و دو قله مربوط به شبه ذرات فرودی با اسپین بالا و شبه ذرات فرودی با اسپین پائین در رسانندگی القا می‌شود. نتایج بدست آمده نشان می‌دهد که رسانندگی و قطبیدگی اسپینی بر حسب قدرت سد یک رفتار نوسانی با پریود π دارند. همچنین نتایج بدست آمده نشان می‌دهد که با تنظیم بایاس اعمالی و قدرت سد می‌توان از پیوند F/I/FS به عنوان یک قطعه‌ی فیلتر اسپینی استفاده نمود.

مرجع‌ها

[1] P. Fulde, A. Ferrell, *Phys. Rev. A* **135** (1964) 550.
[2] A. Larkin, Y. ovchinnikov, Sov. *Phys. JETP* **20** (1965) 762.
[3] F. S. Bergeret, A. F. Volkov, K. B. Efetov, *Phys. Rev. Lett*. **86** (2001) 3140.
[4] A. K. Greim, K. S. Novoselov, *Nature Mater*. **6** (2007) 183.
[5] G. E. Blonder, M. Tinkham, T. M. Klapwijk. *Phys. Rev. B* **25** (2010) 254515