Annual Physics Conference of Iran
10-12 August 2020

انجمن فیزیک ایران

دانشگاه رازی

کنفرانس فیزیک ایران

۱ الی ۴ شهریورماه ۱۳۹۹

Razi University-Kermanshah

دانشگاه رازی- کرمانشاه

کنفرانس به صورت "کنفرونس" برگزار خواهد شد



کمیته علمی

علیرضا آقایی (دانشگاه سیستان و بلوچستان)
توفیق اوسطی (دانشگاه رازی)
مالک باقری هارونی (دانشگاه اصفهان)
یاور تقی‌پور آذر (سازمان انرژی اتمی ایران)
نادر دانش‌فر (دانشگاه رازی)
محسن دهقانی کاظمی (دانشگاه رازی)
سیف‌اله رسولی (دانشگاه تحصیلات تکمیلی در علوم پایه زنجان)
عادل رضایی اقدم (دانشگاه شهیدمدنی آذربایجان)
محمدرضا ریاحی (دانشگاه خواجه‌نصیرالدین طوسی)
فرهاد شهبازی (دانشگاه صنعتی‌اصفهان)
محمد صبائیان (دانشگاه شهیدچمران اهواز)
یاسر عبدی (دانشگاه تهران)
محمد علی‌اکبری (دانشگاه شهیدبهشتی) **دبیر کمیته علمی**
احمد قدسی محمودزاده (دانشگاه فردوسی مشهد)
محمد قربانعلیلو (دانشگاه شهیدبهشتی)
مهدی کارگریان (دانشگاه صنعتی شریف)
امیدرضا کاکویی (سازمان انرژی اتمی ایران)
مهرداد مرادی (دانشگاه کاشان)
حمیدرضا مشفق (دانشگاه تهران)
نعیمه ناصری (دانشگاه صنعتی شریف)

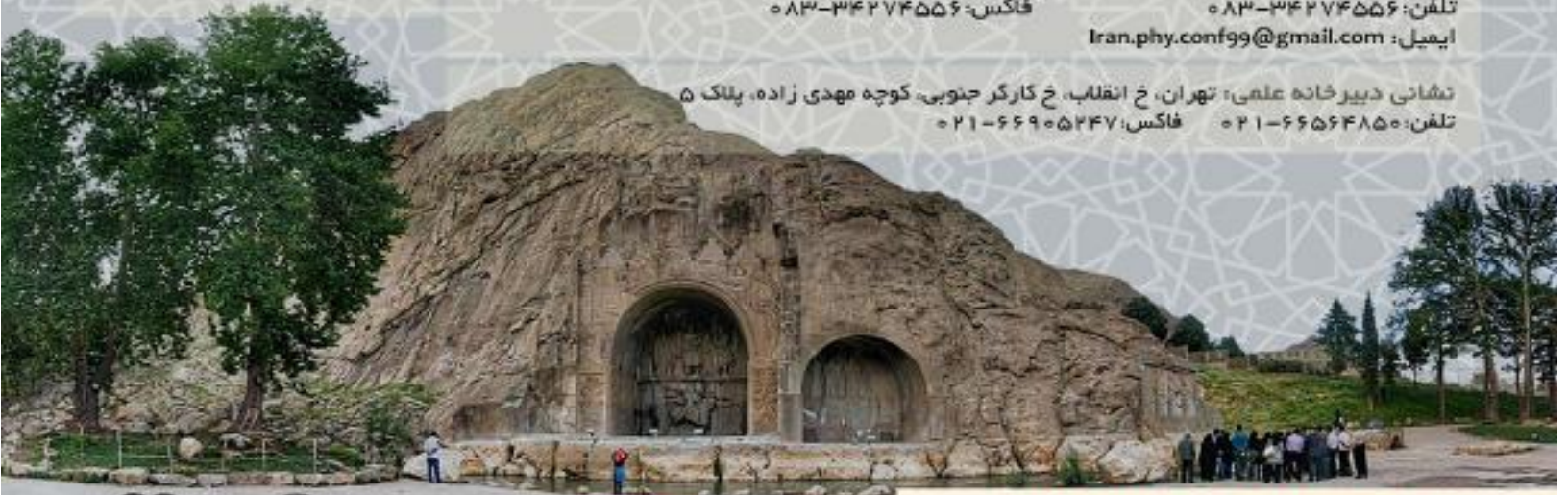
کمیته اجرایی

کیوان امینی
توفیق اوسطی **دبیر کمیته اجرایی**
محسن اویسی موخر
کرم بهاری
حبیب جعفری
نادر دانش‌فر
محسن دهقانی کاظمی
محمد راستی ویس
شاهدخت سهرابی
هادی عبادی
رضا قلی پور
کیومرث منصوری
حمزه موسوی
طیبه ناصری
داریوش نادری

آخرین مهلت دریافت مقاله: ۱۰ خردادماه ۱۳۹۹
آخرین مهلت ثبت نام: ۳۱ تیرماه ۱۳۹۹

نشانی دبیرخانه کنفرانس: کرمانشاه، باغ ابریشم، دانشگاه رازی، دانشکده علوم، گروه فیزیک.
تلفن: ۰۸۳-۳۴۲۷۴۵۵۶ فاکس: ۰۸۳-۳۴۲۷۴۵۵۶
ایمیل: Iran.phy.conf99@gmail.com

نشانی دبیرخانه علمی: تهران، خ انقلاب، خ کارگر جنوبی، کوچه مهدی زاده، پلاک ۵
تلفن: ۰۲۱-۶۶۵۶۴۸۵۰ فاکس: ۰۲۱-۶۶۹۰۵۲۴۷



https://confphys99.razi.ac.ir

: این مقاله به شرط درج در صورت بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

Laser spectroscopy at extreme limits

Hanieh Fattahi

Max Planck Institute for the Science of Light, Germany

To capture a four-dimensional movie of electron dynamics in matter, attosecond resolution in time domain and picometer resolution in space are required. This calls for availability of attosecond pulses with kilo-electronvolt pulse energies, which is beyond the state of the art.

This talk is devoted to modern methods for generating ultrashort pulses to overcome this barrier. Coherent synthesis of few-cycle pulses at different carrier frequencies allows for engineering the electric field of light with an arbitrary shape and generating sub-cycle pulses (light transients). Such pulses hold promise to generate attosecond pulses at higher photon energies, paving way towards capturing four dimensional movie of electron-dynamic in matter. I discuss this exotic concept and demonstrate the first prototype high-energy field synthesiser based on Yb:YAG, thin-disk laser technology.

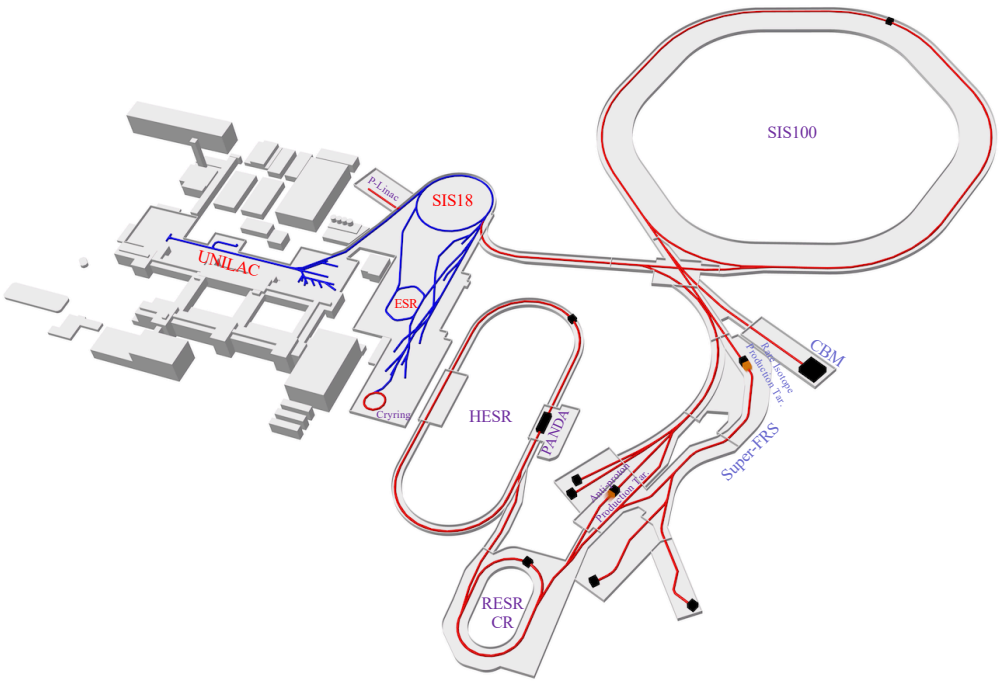
Exploring the extremes with NUSTAR@FAIR

Nasser Kalantar-Nayestanaki
KVI-CART, University of Groningen, Groningen, The Netherlands
For the NUSTAR collaboration[1)]

The upcoming FAIR facility in Darmstadt, Germany (red-color area on the right side of the picture below), will produce intense high-energy beams of exotic nuclei which will be used to explore the properties of new regions of the chart of nuclides of key importance for the investigation of nuclear structure and reactions, and nuclear astrophysics. Several experiments have been planned with the aim of addressing the scientific challenges. These experiments use a variety of techniques to answer the fundamental questions in the field. They are brought together in the NUSTAR (NUclear STructure Astrophysics and Reactions) collaboration which maximizes the synergy amongst the sub-collaborations performing various experiments. With more than 800 scientists from more than 180 institutes located in 38 countries, the collaboration is well advanced and ready with the state-of-the-art instrumentation to start the measurements in the next few years. First measurements with less exotic beams available in the existing facility (blue-color area on the left side of the picture below) are already taking place and are showing promising results.

The physics case and challenges for all the NUSTAR experiments will be briefly discussed in this presentation. Furthermore, the first results of one of the experiments performed in the storage ring of the present facility will be shown in more details.

1) http://www.fair-center.eu/for-users/experiments/nustar.html



گشودن دریچه‌های نشت الکترون در شبکه‌ای از اتم‌های مصنوعی

صادقی، علی

دانشکده فیزیک دانشگاه شهید بهشتی

چکیده

گاز الکترونی دوبعدی فیزیک بنیادی و کاربردهای منحصربه‌فردی از فاز مادهٔ چگال در ابعاد کاهش‌یافته را عرضه می‌کند. به عنوان مثال، اثر کوانتمی هال اولین بار در یک گاز الکترونی دوبعدی، در فصل مشترک اکسید فلز-نیمه‌رسانا مشاهده شد. گاز الکترونی دوبعدی در گرافن که ذاتاً دوبعدی‌است و یا در سطوح هلیوم مایع و عایق‌های توپولوژی هم عینیت می‌یابد. در این میان حالتهای الکترونی سطحی فلزات نجیب، نوع ویژه‌ای از گاز الکترونی دوبعدی را نمایش می‌دهد که در آن می‌توان با آرایش دلخواهی از پراکننده‌های اتمی، الکترون‌های آزادگونهٔ سطح را در راستاهای افقی هم مقید کرد. یکی از نمونه‌های اولیه که هنوز هم قابل توجه است حصار کوانتمی(quantum corral) است که در سال 1993 معرفی شد و در آن الکترونهای سطحی فلز مس در یک حصار دایره‌ای شکل به شعاع هفت نانومتر گیر افتادند. این حصار که با چیدن 42 اتم آهن توسط سوزن میکروسکوپ تونل‌زنی روبشی بر سطح مس ایجاد شده بود یک اتم مصنوعی دوبعدی است که الکترونهای مقید به آن حالتهای کوانتومی جدیدی یافته‌اند. در این سخنرانی نتایج مطالعه بر یک بلور مصنوعی دوبعدی که آرایه‌ای منظم از این حصارهاست ارائه می‌شود. این ساختار یک شبکهٔ لانه‌زنبوری است که در موقعیت حفره‌های یک چارچوب فلز-مولکول آلی ایجاد شده است. طیف‌سنجی فوتون گسیلی با تفکیک زاویه‌ای نشان می‌دهد که وجود تک‌اتمهای فلز در موقعیتهای خاص منجر به گشوده شدن کانالهای ترابرد الکترون بین حفره‌ها می‌شود و سامانه را می‌توان با الگوی الکترونهای تقریباً آزاد با جرم مؤثر کاهش یافته توصیف کرد. با تفسیر مشاهدات تجربی به کمک مدل سازی کامپیوتری و حل معادلهٔ شرودینگر، معلوم شده‌است که سدهای پتانسیل الکترواستاتیک که لایهٔ مولکولی بر صفحهٔ گاز الکترونی دوبعدی ایجاد می‌کند در موقعیت تک‌اتمهای جاداده‌شده به شدت تضعیف شده و دریچه‌هایی برای نشت الکترونها بین حصارهای کوانتمی باز می‌شود. این پژوهش روشی را پیشنهاد می‌دهد که بتوان ساختار الکترونی یک گاز الکترونی دوبعدی را به دلخواه مهندسی کرد.

Engineering of two-dimensional crystals of quantum corals

Sadeghi, Ali

Department of Physics,University Of Shahid Beheshti University,

Abstract

Quantum dots are artificial atoms in the sense that they confine electrons as does a real atom. When such artificial atoms aggregate periodically, an artificial crystal is formed with novel quantum properties suitable for technological applications. Control over the potential barriers existing between neighboring quantum dots is essential to alter their mutual crosstalk. Here we show that precise engineering of the barrier width can be experimentally achieved by a single atom substitution in a haloaromatic compound, which in turn tunes the confinement properties and the degree of quantum dot intercoupling in a two-dimensional electron gas at a metallic substrate surface. Moreover, we study the modification of the substrate's surface electrons by the interaction with a Cu-coordinated metal-organic network and disentangle the scattering potentials and confinement properties. Notably, the electrostatic potential landscape obtained from our ab initio calculations suggests that the molecules are the dominant scattering entities while the coordination metal atoms sandwiched between them act as leaky channels. These metal atom transmission conduits facilitate and enhance the coupling among quantum dots, which are prone to be exploited to engineer the electronic structure of surface electron gases.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد:

http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

پرتوهای کیهانی پر انرژی‌ترین ذرات در جهان

بهمن آبادی، محمود

دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی‌شریف

چکیده

مطالعه بر روی پرتوهای کیهانی از اوایل قرن بیستم میلادی آغاز شده است. با وجود گذشت بیش از ۱۰۰ سال از تولد این علم، هنوز بیش تر موضوعات اصلی آن به عنوان سوال‌های باز مطرح هستند، سوال‌های نظیر این که چشمه‌های پرتوهای کیهانی چیست؟ مکانیزم شتاب گیری آن‌ها چیست؟ انتشار آن‌ها چگونه است؟ و ترکیب جرمی آن‌ها چیست؟

در کنفرانس فیزیک ایران به آخرین یافته‌های این زمینه از اخترفیزیک انرژی‌های بالا پرداخته خواهد شد. همچنین به کارهای انجام شده در رصدخانه البرز اشاره می‌شود.

Cosmic rays, the most energetic particles in the universe

Bahmanabadi, Mahmud

Department of Physics, Sharif University of Technology

Abstract

The study of cosmic rays began in the early twentieth century. More than 100 years after the birth of this science, most of its main issues are still open questions; Questions such as what are the sources of cosmic rays? What is their acceleration mechanism? How are they propagated? And what is their mass composition?

The latest discoveries in the field of high energy astrophysics will be discussed in the Iranian Physics Conference. It also refers to the work done at the Alborz Observatory.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد:

http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

چگالش بوز اینشتین در سیستم‌های کلاسیکی دور از تعادل

گلستانیان، رامین

دانشگاه آکسفورد

چکیده

پدیده‌ی چگالش بوز اینشتین در فیزیک به عنوان یکی از مشخصه‌های دستگاه‌های کوانتومی شناخته شده است. در صحبتم فرمول‌بندی نظری در مورد دستگاه‌های غیرتعادلی مربوط به ماده فعال ارائه خواهم داد. این فرمول بندی گذار فازی در خود دارد که مانستگی به چگالش بوز اینشتین دارد. در ادامه در مورد پیکربندی خاصی صحبت خواهم کرد که در آن بتوان این گذار فاز را مشاهده کرد.

Bose-Einstein Condensation in Classical Non-equilibrium Systems

Ramin, Golestanian

MPI-DS & Oxford

Abstract

Bose-Einstein Condensation (BEC) is widely considered to be one of the hallmarks of quantum mechanics. In my talk, I will build up a theoretical formulation for nonequilibrium active matter systems which exhibits a phase transition with formal similarities to BEC. I will discuss a possible realization of such a system.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد:
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

هولوگرافی و اطلاعات کوانتمی

ابراهیم نجف آبادی، هاجر

دانشکده فیزیک دانشگاه تهران

چکیده

در چارچوب فیزیک نظری اخیرا پیشرفتهایی در زمینه اطلاعات کوانتمی و گرانش کوانتومی صورت گرفته است. بنظر می‌آید که سیاهچاله‌ها در چارچوب هولوگرافی میتوانند پل ارتباطی بین این دو زمینه باشند. در این سمینار ضمن توضیح اجمالی در مورد ساختار هولوگرافی ما به بررسی مفاهیم مرتبط با اطلاعات کوانتومی مانند انتنگلمنت و کامپلکسیتی در چارچوب دوگانی AdS/CFT خواهیم پرداخت و مثالهایی را ذکر خواهیم کرد.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد:
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

پراکنده‌گی به بیان ماتریس تراگشت

لران، فرهنگ

دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی اصفهان

چکیده

محاسبه‌ی ماتریس تراگشت، ره‌یافت شناخته‌شده‌ای برای محاسبه‌ی ماتریس پراکنده‌گی در مکانیک کوانتومی تک بعدی است. ما گسترش این ره‌یافت به مساله‌ی پراکنده‌گی در دو بعد را بررسی می‌کنیم. با تمرکز بر مساله‌ی پراکنده‌گی در گستره‌ی انرژی‌های کم‌تر از هر مقدار دل‌خواه، گروه بی‌شماری از پتانسیل‌ها را شناسایی می‌کنیم که مساله‌ی پراکنده‌گی نظیر آن‌ها حل‌پذیر است. هم‌چنین پتانسیل‌هایی را می‌یابیم که پی‌آیند پراکنده‌گی از آن‌ها یک‌سان است؛ از جمله پتانسیل‌هایی که هم‌چون فضای تهی، پرتوهای کم‌انرژی را پراکنده نمی‌کنند و در چنین انرژی‌هایی ناپیدا اند.

Transfer Matrix Formulation of Scattering Theory

Loran, Farhang

Department of Physics, Esfahan University Of Technology

Abstract

Transfer matrix formulation of scattering is well known in one dimensional quantum mechanics. We generalize this formulation to two dimensional scattering problems. Focusing on scatterings at energies below any given threshold, we identify an infinite class of potentials whose scattering amplitudes can be computed exactly. In particular we find an infinite class of potentials which resemble the vacuum and become invisible at such energies.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد:

http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

پیشرفت‌های اخیر در زمینه روش‌های محاسباتی برای دستگاههای جانشینی نامنظم و اندرکنشی

مرادیان، رستم

گروه فیزیک دانشگاه رازی کرمانشاه

چکیده

ناخالصی تهی جا و دافعه الکترونی می‌توانند منجر به انتقال از فاز رسانای الکتریکی به فاز نارسانا شوند.اولی را انتقال فاز آندرسون و دومی را انتقال فاز مات می‌نامند. روش‌های اخیر آستانه خوبی را این انتقال فازها پیشبینی کرده‌اند. در اینجا یکی از این روش‌ها که توسط ما ابداع شده است را مورد بحث قرار می‌دهیم.

Recent advances of physical quantities calculations methods for disorder and interacting systems.

Moradian, Rostam

Department of Physics, Razi Kermanshah University

Abstract

Impurities, vacancies or electrons repulsion interaction could lead to metal to insulator Anderson and Mott transitions respectively. Calculation techniques recently introduced predict good threshold of these phase transitions. Here we discuses recent techniques for disorder systems.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد:
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

سپیده‌دم اسپینترونیک بر پایه‌ی پادفرومغناطیس‌ها

قیوم‌زاده، علیرضا

مرکز اسپینترونیک کوانتومی، دانشگاه علم و فن‌آوری نروژ، نروژ

چکیده

در سال ۲۰۲۵ مصرف انرژی سامانه‌های فن‌آوری اطلاعات به ۴.۶ تریلیون کیلووات-ساعت خواهد رسید، که معادل ۱۵٪ تولید جهانی انرژی خواهد بود. علاوه‌برآن، در حال حاضر ۲.۵ کوئین‌تیلیون بایت اطلاعات به‌طور روزانه در دنیا تولید می‌شود. این اعداد بهت‌آور به روشنی بیان‌گر نیاز فوری به یک فن‌آوری جدیدِ کم مصرف، فوق سریع و فشرده برای پردازش و نگهداری اطلاعات است. این فن‌آوری نوین جایگزین صنعت متداول الکترونیک و اسپینترونیک امروزی خواهد بود.

در دهه‌ی اخیر پیشرفت‌های نظری و تجربی روی مواد پادفرومغناطیسی سبب برآمدن تحولی بنیادی و نویدبخش در فن‌آوری اسپینترونیک شده است. در این سخنرانی به معرفی و مرور پیشرفت‌های اخیر در شاخه‌ی پژوهشی نوظهور اسپینترونیک برپایه‌ی مواد پادفرومغناطیس خواهم پرداخت.

The Dawn of Antiferromagnetic Spintronics

Qaiumzadeh, Alireza

Center for Quantum Spintronics (QuSpin), Norwegian University of Science and Technology (NTNU), Norway

Abstract

In 2025, the power consumption of IT appliances is expected to reach 4.6 trillion kWh, corresponding to 15% of global power generation. Furthermore, approximately 2.5 quintillion bytes of data are currently created every day. These two staggering numbers clearly show an urgent demand for low-power, ultrafast and dense processing and storage devices other than conventional electronic and spin-based electronic (spintronic) devices.

In the past decade, a promising paradigm shift in the spintronic technology has occurred through advances in theoretical methods and experimental techniques on antiferromagnetic materials. In this talk, I introduce and briefly review recent progress in the emerging field of antiferromagnetic spintronics.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد:

http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

دینامیک سیستم‌های کوانتومی باز از دیدگاه همبستگی

رضاخانی، علی

دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی شریف

چکیده

جداکردنِ یک سیستم کوانتومی از محیط پیرامونش عملاً شدنی نیست. برهم‌کنش با محیط یافتنِ یک معادله‌ی مادر برای دینامیک سیستمِ باز را بسیار سخت می‌کند، معادله‌ی شردینگر دیگر لزوماً به کار نمی‌آید. بیشترِ روش‌های موجود برای یافتنِ یک معادله‌ی دینامیکیِ مادر برای تحول سیستمِ باز تقریبی‌اند و براساسِ بسط جفتیدگیِ ضعیف با محیط هستند. من در آغاز مروری می‌کنم بر چنین روش‌هایی و علی‌الخصوص این‌که چگونه با فرضِ مارکوفی می‌توان معادله‌ی لیندبلاد را استنتاج کرد. سپس یک تصویر برهم‌کنش را معرفی می‌کنم که ما را به یک معادله‌ی مادر دقیقِ لیندبلادگونه می‌رساند، که در آن همبستگی‌های سیستم- محیط دربرگرفته شده است. در ادامه یک بسط همبستگیِ ضعیف معرفی می‌کنم که با آن می‌توان به‌طور سیستماتیک معادله‌های مادرِ تقریبی یافت، که یا از معادله‌های مادرِ تقریبیِ مبتنی بر جفتیدگیِ ضعیف دقیق‌ترند یا دست‌کم به همان قدر دقیق‌اند.

Dynamics of Open Quantum Systems from a Correlation Perspective

Rezakhani, Ali

Department of Physics, Sharif University of Technology

Abstract

Isolating a quantum system from ambient environment is practically impossible. Interaction with the environment makes obtaining an exact master equation for the dynamics of an open system hard; the Schrödinger equation will not apply any more. Most of existing techniques for deriving a dynamical master equation for an open system are approximative and based on weak-coupling expansions. I provide a review of such techniques and discuss, in particular, how the celebrated Lindblad equation is obtained under the Markovian assumption. I then introduce a novel correlation picture which enables us to derive an exact Lindblad-like master equation, with system-environment correlations included. I also introduce a weak-correlation expansion that allows us to perform systematic perturbative approximations. This expansion provides approximate master equations which can feature advantages over existing weak-coupling techniques in the sense that they are more accurate or as accurate as weak-coupling master equations.

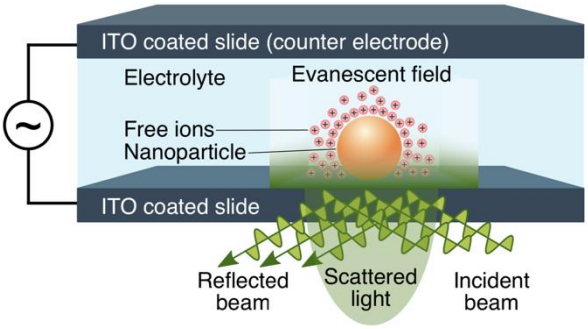
این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد:

http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

Electric-Double-Layer-Modulation Microscopy

Sanli Faez

Nanophotonics, Debye Institute for Nanomaterials Research, Utrecht University, NL
***s.faez@uu.nl**



The electric double layer (EDL) formed around charged nanostructures at the liquid-solid interface determines their electrochemical activity and influences their electrical and optical polarizability. We experimentally demonstrate that restructuring of the EDL at the nanoscale can be detected by dark-field scattering microscopy. We refer to this intensity change in the elastic light scattering as the potentiodynamic optical contrast (PDOC). The temporal response of the PDOC is influenced mostly by the physical adsorption of counter-ions with an optical polarizability that is different from the neutral mixture. We demonstrate this effect by quantifying the temporal relaxation of the PDOC, which is directly related to the charging time of the EDL. Temporal and spatial characterization of the scattering signal demonstrates that the PDOC is proportional to the accumulated charge of polarizable ions at the interface and its time derivative represents the nanoscale ionic current. The material-specificity of the EDL formation is used in our work as a label-free contrast mechanism to image nanostructures and perform spatially resolved cyclic voltammetry at ion current levels of a few attoamperes, corresponding to the exchange of only a few hundred ions. This imaging technique provides important additional information such as spatial resolution, sensitivity to surface heterogeneity, local ion accumulation, and the possibility of studying deposits, possibly down to single biomolecules.

Publication: Kevin Namink, Xuanhui Meng, Marc T. M. Koper, Philipp Kukura, and Sanli Faez, Phys. Rev. Applied **13**, 044065 (2020) https://doi.org/10.1103/PhysRevApplied.13.044065

چشم انداز نجوم رادیویی و فرو سرخ در قرن بیست و یکم

طباطبایی، فاطمه

پژوهشکده نجوم پژوهشگاه دانش‌های بنیادی

چکیده

پس از نخستین آشکارسازی آن در سال ۱۹۳۲ ، تابش رادیویی از اجرام نجومی ، درک ما را درباره جهان دگرگون ساخته است. از کشف زمینه مایکروویو کیهانی گرفته تا سایه سیاه چاله ها و از ماده تاریک گرفته تا مغناطیس کیهانی ، نجوم رادیویی طیف گسترده ای از مباحث اخترفیزیکی را هدف قرار می دهد که از معماهای نجوم امروزی به شمار می روند. ظهور تلسکوپ های رادیویی و مادون قرمز ، قرن ۲۱ را به عصر طلایی اکتشافات کیهانی بدل کرده است. مطالعات نجومی آسمان نامرئی با حساسیت و وضوح بالاتر منجر به اختراعات فناوریی همچون اینترنت بی سیم، جی پی اس، و انواع تصویربرداری پزشکی گردیده و زندگی روزمره بشر را نیز بهبود بخشیده اند. یافتن اجرام نامرئی در کیهان که تنها تابش رادیویی و مادون قرمز دارند نشان دهنده اهمیت فرآیندهای اخترفیزیکی است که قبلاً ناشناخته بوده و یا کم اهمیت محسوب می شدند. در این سخنرانی، برخی از یافته های اخیرمان در زمینه شکل گیری ستارگان و تحول کهکشانها را مرور کرده و به برنامه های پژوهشی با بزرگترین تلسکوپ رادیویی جهان (اسکا) و با رصدخانه های فضایی همچون تلسکوپ مادون قرمز (اسپیکا) خواهم پرداخت

A 21st Century Outlook on Radio and Infrared Astronomy

Tabatabaei, Fateme

Institute For Research In Fundamental sciences

Abstract

After its first detection in 1932, radio signals from astronomical objects have revolutionized our understanding of the Universe. From the discovery of the cosmic microwave background to capturing black hole's shadows and from dark matter to cosmic magnetism, radio astronomy targets a vast range of astrophysical topics counted as big enigmas in modern astronomy. Thanks to the advents of radio and infrared telescopes, we live in a golden century witnessing an increasing number of discoveries hidden to optical observations. The quest of invisible sky with yet better sensitivity and resolution has also influenced human's life, deriving technology inventions such as wireless internet, GPS, and medical imaging. In astronomy, radio and infrared imaging have helped finding objects with no optical counter parts and astrophysical processes which were neglected earlier. I will review some of recent findings made in the field of star formation and galaxy evolution and will further discuss the upcoming projects with the world's largest radio telescope, the Square Kilometer Array (SKA), and space observatories such as the Space Infrared Telescope for Cosmology and Astrophysics (SPICA).

این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد:

http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

معماهای ساده برای توضیح قوانین فیزیک

وفا، کامران

دانشکده فیزیک دانشگاه هاوارد

چکیده

در این سخنرانی پس از مرور کوتاهی از روند فعلی فیزیک نظری و پیچیدگیهایش، سعی خواهم کرد تا نشان دهم که بسیاری از مفاهیم عمیق فیزیک را می‌توان با معماهای ساده ریاضی نمایش داد.

Simple Puzzles and Physical Laws

Vafa, Cumrun

Department of Physics, Harvard University, Cambridge, USA

Abstract

In this talk, after a brief review of the current trends in theoretical physics and its complexities, I try to show that many of the deep concepts in physics can be illustrated by simple mathematical puzzles.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد:
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

رفتار بحرانی یک نظریه محبوس دارای چگالش گلوئونی تحت اثر میدان الکتریکی

لیلا شاه‌کرمی

دانشکده فیزیک دانشگاه دامغان، دامغان

l.shahkarami@du.ac.ir

چکیده

در این مقاله رفتار بحرانی نظریه ابر یانگ-میلز $N=4$ با چگالش گلوئونی غیر صفر تحت اثر یک میدان الکتریکی خارجی ایستا را مورد مطالعه قرار می‌دهیم. با استفاده از دوگانی پیمانه‌ای-گرانشی به دو روش مختلف میدان الکتریکی بحرانی که فقط به ازای مقادیر بزرگتر از آن تولید زوج کوارک-پاد کوارک رخ می‌دهد برای این نظریه‌ی شبه محبوس محاسبه می‌شود. مشاهده می‌شود نتیجه حاصل از دو روش با یکدیگر تطابق کامل دارد.

واژه های کلیدی: *دوگانی پیمانه‌ای-گرانشی، محبوس شدگی، اثر شوئینگر، رفتار بحرانی*

Critical behavior of a confining theory with gluon condensate in electric fields

Shahkarami, Leila[1]

[1] *School of Physics, University of Damghan, Damghan, 41167-36716*

Abstract

In this paper we study the critical behavior of N=4 super Yang-Mills theory with nonzero gluon condensate under an external static electric field. For the quasi-confining theory chosen here, the critical electric field, only above which the quark-antiquark pairs are produced, is calculated. We observe that the results obtained from the two methods coincide perfectly.

***Keywords**: gauge-gravity duality, confinement, Schwinger effect, critical behavior*

مقدمه

اعمال یک میدان الکتریکی در الکترودینامیک کوانتومی (QED) می‌تواند منجر به تولید زوج الکترون-پوزیترون شود. این پدیده برای نخستین بار توسط شوئینگر به صورت تئوری کامل توضیح داده شد و به اثر شوئینگر مشهور است [1]. این اثر به QED محدود نبوده و برای هر نظریه میدان جفت شده با یک میدان پیمانه‌ای $U(1)$ معنادار است و همچنین به نظریات پیمانه‌ای غیر آبلی همانند QCD قابل تعمیم است.

در مطالعه اثر میدان الکتریکی بر روی نظریه میدان مورد نظر هر جا که روش‌های اختلالی قدرت خود را از دست می‌دهند، همانند حد انرژی پایین QCD که محبوس و دارای جفت شدگی قوی است، می‌توان از تناظر AdS/CFT [2] و به طور کلی هولوگرافی استفاده نمود.

در همین راستا، در این مقاله اثر یک میدان الکتریکی خارجی و ثابت بر یک نظریه پیمانه‌ای با چگالش گلوئونی غیر صفر [3] که قبلاً توسط تناظر AdS/CFT محبوس بودن کوارک‌های آن مشخص

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد

http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

شده است را به عنوان نمونه‌ای شبیه به QCD بررسی می‌نماییم. ابتدا با استفاده از روش تحلیل پتانسیل بین کوارک و پاد کوارک و سپس از طریق محاسبه چگالش کوارک اثر میدان الکتریکی خارجی بر حالت این نظریه را مطالعه می‌نماییم. با استفاده از هر دو روش، میدان الکتریکی بحرانی که تنها به ازای مقادیر بیشتر از آن تولید زوج کوارک و پاد کوارک می‌تواند رخ دهد را به دست آورده و تطابق نتایج دو روش را مشاهده می‌نماییم [4,5].

معرفی نظریه $D3+D(-1)$

نظریه مورد بررسی در این مقاله در طرف گرانش، تشکیل شده از شامه‌های $D3$ است که توسط D−اینستنتون‌هایی که روی جهان-حجم شامه $D3$ به طور همگن توزیع شده‌اند، فشرده شده‌اند. این نظریه با یک نظریه ابر یانگ-میلز N=4 با چگالش گلوئونی غیر صفر متناظر است.

این نظریه دارای یک شدت میدان پنج فرمی $F_{(5)}$ و یک میدان اکسیون است که به ترتیب به شامه $D3$ و اینستنتون‌ها جفت شده‌اند. کنش ده بعدی ابر گرانش آن در چارچوب اینشتین به صورت زیر داده می‌شود:

$$S=\frac{1}{\kappa}\int d^{10}x\sqrt{g}\left(R-\frac{1}{2}(\partial\phi)^2+\frac{1}{2}e^{2\phi}(\partial\chi)^2-\frac{1}{6}F_{(5)}^2\right), \quad (۱)$$

که در آن ϕ و χ به ترتیب دیلتون و اکسیون را نشان می‌دهند که با انتخاب $\chi=-e^{-\phi}+\chi_0$ دو جمله مربوط به این دو میدان در کنش بالا یکدیگر را حذف می‌کنند. حل این کنش در چارچوب ریسمان به متریک زیر منجر می‌شود:

$$ds_{10}^2=e^{\frac{\phi}{2}}\left[\frac{r^2}{R^2}(-dt^2+d\vec{x}^2)+\frac{R^2}{r^2}dr^2+R^2d\Omega_5^2\right],$$
$$e^{\phi}=1+\frac{q}{r^4}\ , \quad (۲)$$

که در آن R شعاع فضای AdS و q چگالی اینستنتون‌ها را نشان می‌دهد که با توجه به تناظر AdS/CFT بیانگر مقدار چشم‌داشتی چگالش گلوئونی روی حالت خلأ $(\langle Tr\ F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}\rangle \propto q\neq 0)$ است. دمای این نظریه نیز صفر است.

با استفاده از تناظر AdS/CFT در کارهای گذشته نشان داده شده است که این مدل، شبه محبوس است به این معنا که دارای کوارک‌های محبوس و گلوئون‌های غیر محبوس می‌باشد. در بخش-های بعدی به تحلیل پتانسیل کل مربوط به یک زوج کوارک-پادکوارک در این نظریه تحت تأثیر یک میدان الکتریکی و در ادامه به محاسبه چگالش کوارکی آن می‌پردازیم.

تحلیل پتانسیل نظریه $D3+D(-1)$

به منظور بررسی اثر شوئینگر با استفاده از روش تحلیل پتانسیل، نیاز است انرژی پتانسیل کل یک زوج کوارک و پادکوارک که در مکان‌های ثابت به فاصله x از یکدیگر و تحت اثر میدان الکتریکی E قرار گرفته‌اند را محاسبه نماییم. انرژی کل، مجموع انرژی پتانسیل ناشی از برهم‌کنش یک زوج کوارک-پادکوارک، انرژی استاتیک و انرژی ناشی از برهم‌کنش کوارک‌ها با میدان الکتریکی است.

دو سهم اول از انرژی کل از طریق مقدار چشم‌داشتی حلقه ویلسون مستطیلی به دست می‌آید که یک ضلع آن x و ضلع دیگر دوره زمانی $\mathcal{T}$ است. در هولوگرافی این کمیت با کمینه کردن کنش نمبو-گوتوی ریسمانی به دست می‌آید که دو انتهای آن از محل قرار گرفتن کوارک و پاد کوارک روی مرز آویزان شده‌اند. به منظور متناهی بودن جرم کوارک‌ها یک شامه $D3$ در موقعیت r_0 از توده قرار داده و انتهاهای ریسمان به این شامه ختم می‌شود. با انتخاب $x^0=\tau$ و $x^1=\sigma$ و اعمال $r=r(\sigma)$ کنش نمبو-گوتو به صورت زیر به دست می‌آید:

$$S_{NG}=T_f\int d\tau d\sigma e^{\phi(r)/2}\sqrt{r'(\sigma)^2+r^4/R^4}\ , \quad (۳)$$

که در آن T_f تنش ریسمان است. از طریق محاسبه هامیلتونی که با توجه به استقلال رابطه بالا از مختصه σ یک کمیت پایسته است و سپس اعمال شرایط $r(0)=r_c$ و $r'(0)=0$ در پایین‌ترین نقطه ریسمان، فاصله جدایی کوارک و پاد کوارک و انرژی پتانسیل ناشی از برهم‌کنش کوارک‌ها با هم به ترتیب به شکل زیر به دست می‌آیند:

$$x=\frac{2e^{\phi(1)/2}}{r_0a}\int_1^{1/a}\frac{dy}{y^2\sqrt{y^4e^{\phi(y)}-e^{\phi(1)}}}, \quad (٤)$$

$$V_{q\bar{q}}=2T_f\int_1^{1/a}\frac{dy\ r_0a\ y^2\ e^{\phi(y)}}{\sqrt{y^4e^{\phi(y)}-e^{\phi(1)}}}, \quad (٥)$$

که در این روابط $e^{\phi}=1+\frac{q}{r_0^4a^4y^4}$ و کمیت‌های بدون بعد $y=\frac{r}{r_c}$ و $a=\frac{r_0}{r_c}$ را نیز تعریف کرده‌ایم. اکنون با اضافه کردن انرژی ناشی از برهم‌کنش کوارک‌ها با میدان الکتریکی خارجی، انرژی کل به صورت $V_t=V_{q\bar{q}}-E\,x$ به دست می‌آید که x در (٤) داده شده است.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

- **محاسبه میدان الکتریکی بحرانی E_s**

حال می‌توانیم با استفاده از انرژی پتانسیل کل، میدان الکتریکی بحرانی E_s را پیدا کنیم که برای مقادیر کمتر از آن زوج‌های کوارک-پاد کوارک حتی آنها که جرم ندارند نیز تولید نمی‌شوند. وجود یک چنین میدان بحرانی مشخصه نظریه‌های محبوس است و برای نظریه‌های غیرمحبوس داریم $E_s = 0$. برای پیدا کردن E_s باید ببینیم که به ازای چه مقداری از میدان الکتریکی انرژی پتانسیل کل در حد $x \to \infty$ به یک مقدار ثابت میل می‌کند، به طوری که سد پتانسیلی که کوارک‌ها باید از آن گذر کنند یک سد نامتناهی و غیر قابل نفوذ باشد. برای بررسی این موضوع پتانسیل کل را می‌توان به شکل زیر نوشت:

$$V_t = 2T_f r_0 a \int_1^{1/a} \frac{dy\ y^2}{\sqrt{y^4-1}} + \left(\frac{T_f\, q}{R^2\sqrt{q+r_0^4 a^4}} - E \right) x, \qquad (۶)$$

در حد $x \to \infty$ معادل با $a \to 0$ جمله اول به مقدار ثابت $2T_f r_0$ میل می‌کند که مشتق آن برابر با صفر بوده و مشتق جمله غیر انتگرالی نسبت به x برابر با عبارت داخل پرانتز می‌شود (البته با $a = 0$). پس به منظور اینکه در حد $x \to \infty$ به مقدار ثابت میل کند، یا به عبارتی مشتق آن به صفر میل کند، باید عبارت داخل پرانتز صفر باشد یعنی $E_s = \frac{T_f\sqrt{q}}{R^2}$.

غوطه ور کردن شامه $D7$ در پس زمینه $D3 + D(-1)$

در این قسمت برای معرفی کوارک‌ها در نظریه میدان، یک شامه $D7$ در توده در طرف گرانش غوطه‌ور می‌کنیم. برای محاسبات این بخش متریک ده بعدی را به صورت زیر می‌نویسیم:

$$ds_{10}^2 = e^{\frac{\phi}{2}}\left[\frac{r^2}{R^2}(-dt^2 + d\vec{x}^2) + \frac{R^2}{r^2}(d\rho^2 + d\Omega_3^2 + dw^2 + w^2 d\psi^2)\right], \qquad (۷)$$

که در آن $r^2 = \rho^2 + w^2$. شامه $D7$ را در امتداد راستاهای t ، $\vec{x}$ ، ρ و Ω_3 غوطه‌ور می‌کنیم. همچنین برای توصیف یک میدان الکتریکی ایستای یکنواخت E در راستای محور x نظریه میدان، یک میدان پیمانه‌ای به شکل $A_x(t,\rho) = -Et + h(\rho)$ روی شامه روشن می‌کنیم. به این ترتیب کنش DBI شامه به صورت زیر داده می‌شود:

$$S_{D7} = -\mathcal{N} \int dt d\rho e^{\frac{\phi}{2}} \rho^3 \sqrt{(1+w'^2)e^{\phi} + \left[h'^2 - \left(\frac{R}{r}\right)^4 (1+w'^2)E^2\right]/T_f^2} \qquad (۸)$$

که در به دست آوردن آن با استفاده از تقارن، $\psi = 0$ انتخاب شده و $w(\rho)$ نحوه غوطه‌وری شامه در توده را می‌دهد. حال می‌توان بار بقادار مربوط به $h(\rho)$ را محاسبه کرد که متناظر با جریان الکتریکی در امتداد محور x است و آن را با j نمایش می‌دهیم. به این ترتیب کنشِ تبدیل لژاندر شده که در آن میدان پیمانه‌ای حذف شده است، به شکل زیر به دست می‌آید:

$$S_{D7}^L = -\mathcal{N} \int dt d\rho \left(\frac{R}{r}\right)^2 \sqrt{(1+w'^2)} \sqrt{\left(\frac{q+r^4}{R^4} - \frac{E^2}{T_f^2}\right)(\rho^6 e^{\phi} - j^2 R^2)}. \qquad (۹)$$

به سادگی دیده می‌شود که این کنش به ازای مقادیر مشخص E و q در موقعیت شعاعی r_* که در $r_*^2 = \sqrt{\frac{E^2R^4}{T_f^2} - q}$ صدق می‌کند، صفر می‌شود. در حالتی که $q = 0$ که بیانگر یک نظریه میدان بدون چگالش گلوئونی یا به عبارتی غیر محبوس است، همواره برای هر مقدار غیر صفر از میدان الکتریکی یک r_* حقیقی وجود دارد. ولی در حضور q فقط به ازای $E > E_s = \frac{T_f\sqrt{q}}{R^2}$ یک r_* حقیقی وجود دارد که پرانتز اول در کنش را صفر می‌کند. پس پرانتز اول برای برخی مقادیر شعاعی منفی است و در نتیجه برای اینکه همواره کنش بالا حقیقی باشد، مقدار چگالی جریان باید در حالت کلی غیر صفر باشد. ولی به ازای $E < E_s$ هیچ شعاع تکینگی وجود نداشته و پرانتز اول همواره مثبت است. بنابراین به منظور حقیقی بودن همیشگی کنش، پرانتز دوم نیز باید برای تمام مقادیر مختصه شعاعی r مثبت باشد که این تنها در صورتی ممکن است که برای $E < E_s$ همواره داشته باشیم $j = 0$. با این تفاسیر گویا در $E = E_s$ نوعی گذار فاز نارسانا-رسانا رخ می‌دهد.

- **مشاهده گذار فاز در E_s با استفاده از چگالش کوارک**

مطابق با تناظر AdS/CFT با داشتن تابع $w(\rho)$ که بیانگر نحوه غوطه‌وری شامه $D7$ در توده است می‌توان اطلاعات مهمی راجع به نظریه میدان مرزی به دست آورد. با بسط نزدیک مرز این تابع به صورت $w(\rho) = m_q + \frac{c}{\rho^2} + \cdots$، جرم کوارک m_q و چگالش کوارک c به دست می‌آید. به نظر می‌رسد که می‌توان چگالش کوارک

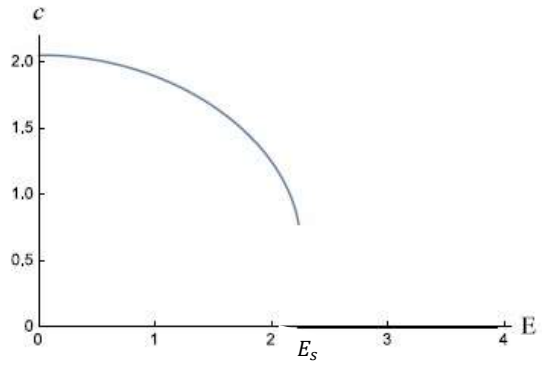
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

را به عنوان یک پارامتر نظم مناسب در نظر گرفت که رفتار آن نشان-دهنده گذار فاز سیستم است. با وردش کنش (۹) به معادله زیر برای $w(\rho)$ می‌رسیم:

$$\frac{d}{d\rho}\left(\frac{w\prime}{\sqrt{1+w\prime^2}}\sqrt{F}\right)-\frac{w\sqrt{1+w\prime^2}}{2r\sqrt{F}}\frac{dF}{dr}=0,$$
$$F(r)=\rho^6 e^{2\phi}\left(1-\frac{E^2R^4}{e^{\phi}r^4T_f^2}\right)\left(1-\frac{j^2R^2}{\rho^6 e^{\phi}}\right). \quad (۱۰)$$

حال با حل این معادله که تنها به صورت عددی ممکن است، می‌توان چگالش کوارک را به دست آورد.

از طریق محاسبه چگالش کوارک برای یک مقدار ثابت q و به ازای مقادیر مختلف میدان الکتریکی می‌توان گذار فاز مطرح شده در بخش قبلی را مورد تحقیق قرار داد. در شکل ۱ چگالش کوارک بر حسب مقدار میدان الکتریکی برای $q=5$ و برای کوارک های با جرم صفر $(m_q=0)$ رسم شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود چگالش کوارک برای کوارک‌های بدون جرم با افزایش میدان الکتریکی کاهش می‌یابد و درست وقتی که میدان الکتریکی به مقدار E_s می‌رسد، به طور ناگهانی به مقدار صفر پرش می‌کند. برای تمام میدان‌های بزرگتر از E_s چگالش کوارک همچنان صفر می‌ماند.



شکل۱ : چگالش کوارک بر حسب میدان الکتریکی برای کوارک‌های بدون جرم و به ازای $q=5$.

صفر بودن چگالش کوارک c برای کوارک‌های بدون جرم، بیانگر وجود تقارن کایرال در نظریه است. بنابراین تقارن کایرال که به علت وجود چگالش گلوئون شکسته شده است، با رسیدن میدان الکتریکی به مقدار E_s به سیستم بازگردانده می‌شود که تأیید کننده وجود یک گذار فاز است.

نتیجه گیری

در مقاله حاضر یک نظریه پیمانه‌ای با چگالش گلوئونی غیر صفر و دارای دوگان گرانشی انتخاب شده است. این نظریه که شبه محبوس یعنی دارای کوارک‌های محبوس و گلوئون‌های غیرمحبوس است را تحت اثر یک میدان الکتریکی خارجی ایستا قرار داده و رفتار بحرانی آن را تحلیل کرده‌ایم. با استفاده از دو روش مختلف، E_s یعنی میدان الکتریکی بحرانی که به ازای مقادیر کوچکتر از آن هیچ گونه تولید زوج کوارک-پاد کوارکی رخ نمی‌دهد و تنها برای $E \geq E_s$ تولید زوج آغاز می‌شود، محاسبه شده است. در روش اول پتانسیل کل کوارک و پاد کوارکی که در یک فاصله ثابت از یکدیگر و در حال برهم‌کنش با یک میدان الکتریکی خارجی هستند با استفاده از کنش ریسمان در طرف گرانش مورد بررسی قرار گرفته است و در روش دوم از حل کنش یک شامه $D7$ کاوش غوطه‌ور در توده استفاده شده است که هم با استفاده از شرط حقیقی بودن کنش و هم با مشاهده رفتار چگالش کوارک بر حسب میدان الکتریکی می‌توان رفتار بحرانی سیستم را بررسی کرد. مقدار به دست آمده در دو روش تطابق کامل با یکدیگر دارد.

مرجع‌ها

[۱] J. S. Schwinger, "*On gauge invariance and vacuum polarization*," *Phys. Rev.* **82** (1951) 664.

[۲] J. M. Maldacena, "*The large N limit of superconformal field theories and gravity*," Adv. Theor. Math. Phys. **2** (1998) 231; *Int. J. Theor. Phys.* **38** (1999) 1113.

[۳] H. Liu and A. A. Tseytlin, "*D3-brane-D-instanton configuration and N=4 super YM theory in constant self-dual background*," *Nucl. Phys.* **553** (1999) 231.

[٤] L. Shahkarami, M. Dehghani, and P. Dehghani, "*Holographic Schwinger effect in a D-instanton background*," *Phys. Rev. D* **97** (2018) 046013.

[٥] L. Shahkarami and F. Charmchi, "*Confining D-instanton background in an external electric field*," *Eur. Phys. J. C* **79** (2019) 343.

تخمین دقیق خواص ساختاری و مغناطیسی نانو کامپوزیت‌های $BiFeO_3$ -$ZnFe_2O_4$ با استفاده از روش‌های یادگیری ماشین

فلاحت نژاد، شهرزاد؛ کرمی، اعظم

دانشکده فیزیک، دانشگاه شهید باهنر، کرمان، ایران

چکیده

در بسیاری از کاربردهای عملی نانوذرات مولتی فروئیک از قبیل طراحی حسگرهای مغناطیسی-الکترونیکی، ذخیره اطلاعات، فوتوکاتالیست‌ها، ادوات اسپین‌ترونیک و فوتوولتاوئیک درک رفتار ساختاری و مغناطیسی آن‌ها بسیار مهم است. ولیکن، روش‌های موجود برای بررسی این خواص زمان‌بر می‌باشد و از دقت بالایی نیز برخوردار نیستند. در این مقاله، الگوریتم‌های اتوماتیک بر اساس روش‌های یادگیری ماشین از قبیل بیز ساده (naive Bayes)، درخت تصمیم (decision tree)، k نزدیکترین همسایه (KNN)، جنگل تصادفی (random forest) و ماشین بردار پشتیبان (SVM) بررسی شده‌اند. به منظور، تخمین ویژگی‌های نانوذرات در روش پیشنهاد شده، ابتدا مقدار ترکیبات فریت به کار رفته در شش نانوکامپوزیت $BiFeO_3$ - $ZnFe_2O_4$ تخمین زده شده و سپس خواص ساختاری و مغناطیسی این نانو مواد مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج به دست آمده نشان دادند که SVM بهترین عملکرد و بالاترین دقت را بین روش‌های بررسی شده دارد.

واژگان کلیدی: مولتی‌فروئیک، یادگیری ماشین، پراش پرتو X، مغناطیس سنج نمونه مرتعش

Accurate estimation of structural and magnetic properties of $BiFeO_3$-$ZnFe_2O_4$ nanocomposites using machine learning techniques

Falahat nejad, Shahrzad; Karami, Azam

Faculty of physics, Shahid Bahonar University, Kerman, Iran

Abstract

In many practical applications of multiferroic nanoparticles such as designing magneto-electric (ME) sensors, information storage, photocatalysts, spintronic and photovoltaic facilities, the fundamental understanding of their magnetic and structural behavior is extremely important. However, existing methods for investigating these properties are time-consuming and inaccurate. In this paper, automatic algorithms based on machine learning methods such as naive Bayes, decision tree, k nearest neighbor (KNN), random forest and support vector machine (SVM) have been investigated. In order to estimate the nanoparticles' properties in the proposed method, at the first the amount of ferrite compounds that have been used in six $BiFeO_3$-$ZnFe_2O_4$ nanocomposites has been estimated. After that, the structural and magnetic properties of these nanocomposites have been investigated. The obtained results demonstrated that SVM has the best performance and maximum accuracy between the investigated methods.

Keywords: Multiferroic, Machine learning, X ray diffraction, Vibrating-sample magnetometer
PACS NO-81-89

مقدمه

مولتی‌فروئیک‌ها موادی هستند که دو یا تعداد بیشتری از پارامترهای ساختار فروئیکی (فرومغناطیس، فروالاستیک و فروالکتریسیته) را به‌طور هم‌زمان نمایش می‌دهند. در بین مواد مولتی‌فروئیک فریت بیسموت $BiFeO_3$ (BFO) به واسطه خواص نوری و رسانایی قابل توجهی که دارد بسیار مورد توجه قرار گرفته است. فریت روی $ZnFe_2O_4$ (ZFO) نیز ماده‌ای نیمه رسانا است با مقاومت الکتریکی بالا که جریان الکتریکی مستقیم را از خود عبور نمی‌دهد [۱].

از این رو، ترکیب این دو ماده با درصدهای مختلف فریت روی و فریت بیسموت به شکل نانوکامپوزیت از خواص منحصر به فرد ساختاری و مغناطیسی برخوردار است و این خواص به میزان فریت روی و فریت بیسموت موجود در آن‌ها بستگی دارد لذا دانستن مقدار فریت روی و فریت بیسموت نانوکامپوزیت بسیار مهم است [۲].

الگوریتم‌های یادگیری ماشین ابزار مناسبی برای تخمین میزان ترکیبات فریت در این نانوکامپوزیت‌ها می‌باشند. در اوایل ۱۹۹۳، استفاده از روش رگرسیون خطی برای مطالعه پیش‌بینی حل‌پذیری C_{60} پیشنهاد شد. همچنین سابقاً از الگوریتم‌های ماشین بردار پشتیبان، درخت تصمیم و

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

گاهی تصادفی برای پیش‌بینی سمی بودن نانومواد و برای پیدا کردن نانوذرات غیرسمی، الگوریتم‌های رگرسیون خطی و شبکه‌های عصبی مصنوعی به منظور گسترش روابط چندساختاری/ تک‌ویژگی بین نانومواد، درخت تصمیم و جنگل تصادفی جهت مطالعه سمی بودن نقاط کوانتومی استفاده شده است [۳]. در این مقاله پنج الگوریتم طبقه‌بند بیز ساده [٤]، درخت تصمیم [٥]، k نزدیکترین همسایه [٦]، جنگل تصادفی [۷] و ماشین بردار پشتیبان [۸] همراه با انتخاب ویژگی به روش آنالیز جز مجاور [۹] به عنوان روش پیشنهادی برای این امر معرفی و به کار گرفته شده‌اند و عملکرد هر یک مورد بحث قرار گرفته است. در ادامه توضیح مختصری در رابطه با یادگیری ماشین و الگوریتم‌های استفاده شده در این مقاله داده شده است:

یادگیری ماشینی سیستمی است که تجربه را به دانش تبدیل می‌کند، یعنی این توانایی را به سیستم می‌دهد که الگوها و قوانین را با سرعتی زیادی شناسایی کند. در واقع در این علم تلاش می‌شود تا با بهره‌گیری از الگوریتم‌ها، یک ماشین به شکلی طراحی شود که بدون آن که صراحتاً برنامه‌ریزی شود یا تک تک اقدامات به آن دیکته گردد، خودش بتواند بیاموزد و عمل کند. در یادگیری ماشینی به جای برنامه‌نویسیِ همه چیز، داده‌ها به یک الگوریتم عمومی داده می‌شوند و این الگوریتم است که بر اساس داده‌هایی که به آن داده شده، منطق خود را می‌سازد. در واقع می‌توان یادگیری ماشینی را مجموعه‌ای از ابزارها برای هوشمندسازی فرآیندها در کاربردهای مختلف قلمداد کرد که در آن با استفاده از محاسبات، سیستمی جهت پردازش داده توسط انسان طراحی می‌شود که می‌تواند با استفاده از اطلاعات به روشی که از قبل آموخته، یادگیری انجام دهد.

یکی از تقسیم‌بندی‌های متداول در یادگیری ماشین، طبقه‌بندی بر اساس نوع داده‌های در اختیار انسان است و طی این طبقه‌بندی یادگیری به سه دسته یادگیری بانظارت، یادگیری بدون نظارت و یادگیری تقویتی تقسیم می‌شود [۱۰]. الگوریتم‌های طبقه‌بندی به کار رفته در مقاله از نوع یادگیری بانظارت هستند که در آن، یک انسان تمام اطلاعات را برچسب‌گذاری می‌کند. یادگیری تحت نظارت را می‌توان به آموزش دانش‌آموزان تحت نظر و هدایت یک معلم تشبیه کرد. در این‌جا، مجموعه‌ای از داده‌ها درست مثل یک معلم عمل می‌کنند و وظیفه تعلیم ماشین یا مدل را بر عهده دارند. زمانی که یادگیری بر روی مدل مربوطه انجام شد، قادر خواهد بود تا پیش‌بینی‌ها و تصمیمات دقیق لازم در مورد داده‌های جدید ورودی به سیستم را ارائه دهد. در واقع، المان‌های اصلی در این روش، نمونه‌های آموزشی هستند که هرکدام معرف یک کلاس می‌باشند. پس از مشخص شدن این نمونه‌ها، مدل مربوطه، طبقه‌بندی داده را بر پایه آن‌ها انجام می‌دهد.

الگوریتم بیز ساده:

قضیه بیز‌ین یک روش از محاسبات احتمالی است و احتمال رخدادی که در آینده رخ خواهد داد وابسته به رخدادی است که قبلا رخ داده است. این تئوری توانایی خود یادگیری در سیستم هوشمند دارد که به‌صورت گسترده استفاده می‌شود. طبقه‌بندی بیز ساده بر پایه قضیه بیز و فرضیه‌های استقلال بین پیش‌بینی کننده‌ها است. به‌طور ساده روش بیز روشی برای طبقه‌بندی پدیده‌ها، بر پایه احتمال وقوع یا عدم وقوع یک پدیده‌است.

الگوریتم درخت تصمیم:

الگوریتم درخت تصمیم مدل‌های طبقه‌بندی را به شکل ساختار درخت می‌سازد. درخت تصمیم ، مجموعه داده را به زیر مجموعه‌های کوچکتر و کوچکتر تجزیه می‌کند و یک درخت تصمیم مرتبط به صورت تدریجی توسعه می‌یابد. نتیجه نهایی یک درخت با گره‌های تصمیم‌گیری و گره‌های برگ است. یک گره تصمیم دارای دو یا چند شاخه است. گره برگ یک طبقه‌بندی یا تصمیم را نشان می‌دهد. بالاترین گره تصمیم‌گیری در یک درخت مطابق با بهترین پیش‌بینی کننده به نام گره ریشه است.

الگوریتم k نزدیکترین همسایه:

روش k نزدیک‌ترین همسایه یک روش یادگیری موردی است و از جمله ساده‌ترین الگوریتم‌های یادگیری ماشین می‌باشد. در این الگوریتم فاصله هر نمونه از k نزدیک‌ترین همسایه‌اش سنجیده شده و طبقه‌بندی نمونه بر اساس رأی اکثریت از همسایه‌هایش انجام می‌شود.

الگوریتم جنگل تصادفی:

جنگل تصادفی همانطور که از نام آن مشهود است، جنگلی را به طور تصادفی می‌سازد. جنگل ساخته شده، در واقع گروهی از درخت‌های تصمیم است. کار ساخت جنگل با استفاده از درخت‌ها اغلب اوقات به روش کیسه‌گذاری انجام می‌شود. ایده اصلی روش کیسه‌گذاری آن است که ترکیبی از مدل‌های یادگیری، نتایج کلی مدل را افزایش می‌دهد. به بیان ساده، جنگل تصادفی چندین درخت تصمیم ساخته و آن‌ها را با یکدیگر ادغام می‌کند تا پیش‌بینی‌های صحیح‌تر و پایدارتری حاصل شوند.

الگوریتم ماشین بردار پشتیبان:

ماشین بردار پشتیبان به طور مستقیم از طریق یک فرآیند بهینه سازی، به ایجاد سطح جداکننده (فراصفحه) بین کلاس‌ها می‌پردازد و بدین طریق داده‌ها را طبقه‌بندی می‌کند. این سطح جداکننده یا مرز بین کلاس‌ها، با استفاده از داده‌های آموزشی محدودی که نزدیک ترین فاصله تا یک فراصفحه را دارند و به بردارهای پشتیبان معروف هستند، مشخص می‌شود.

ماشین‌هاي بردار پشتيبان، در حقيقت طبقه‌بندي‌كننده‌هاي دوكلاسه هستند. در بسياري از كاربردها نياز به روش‌هاي طبقه‌بندي چندكلاسه می باشد. براي تعميم ماشين‌هاي بردارپشتيبان به حالت چندكلاسه، دو روش يكی در مقابل همه و روش يک به يک وجود دارد. در الگوريتم كلاس‌بندی ماشين بردار پشتيبان، در حالتی كه داده‌های آموزشی با يكديگر ادغام شده‌اند از يک كلاس‌بندی كننده غيرخطی استفاده می‌شود كه در آن از طريق يک

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

غیرخطی داده‌های ورودی از فضای اصلی به فضایی با بعد بیشتر منتقل می‌شوند تا در این فضا به صورت خطی قابل جداسازی باشند.

انتخاب ویژگی به روش آنالیز جز مجاور:

انتخاب ویژگی را می‌توان به عنوان فرآیند انتخاب زیرمجموعه‌ای از ویژگی‌ها که حاوی بیشترین اطلاعات در بین داده‌ها هستند به منظور کاهش ابعاد داده و افزایش دقت و سرعت الگوریتم تعریف کرد.

در این مقاله از روش آنالیز جز مجاور جهت انتخاب ویژگی استفاده شده است. در این روش جست‌وجو برای یک زیرمجموعه بهینه از ویژگی‌ها در مرحله ساخت طبقه‌بند انجام می‌شود و به دنبال انتخاب ویژگی‌هایی از طریق یادگیری بردار وزن می‌باشد.

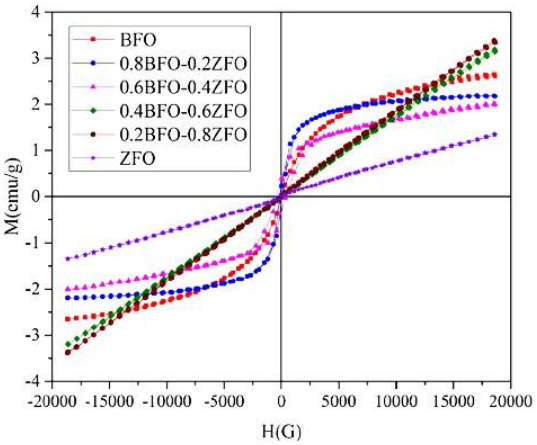
آماده‌سازی نمونه‌ها و مشخصه‌یابی

در این کار ابتدا نانو کامپوزیت‌های $(1-x)BiFeO_3$-$(x)ZnFe_2O_4$ را به روش سل_ژل برای به ازای مقادیر مختلف $x=0,0/2,0/4,0/6,0/8,1$ آماده کرده [۱۱] و سپس برای مشخصه‌یابی خواص ساختاری از آنالیز پراش پرتو X (XRD) و برای مشخصه‌یابی خواص مغناطیسی از مغناطیس سنج نمونه مرتعش (VSM) استفاده شده است. به این طریق تعداد ۱۳۱۸ داده برای طیف VSM و ۱۲۰۰۰ داده برای XRD به ازای شش نمونه مورد بررسی جهت آموزش سیستم با استفاده از الگوریتم‌های یادگیری ماشین و ارزیابی الگوریتم به دست آمد. طیف‌های XRD و VSM نمونه‌ها در شکل ۱ و ۲ نمایش داده شده است.

تخمین میزان فریت بیسموت و فریت روی در نانوکامپوزیت

برای ایجاد الگو یی برای رفتار ساختاری و مغناطیسی نانوکامپوزیت‌های فریت روی و فریت بیسموت در دسترس و تخمین رفتار نمونه‌های با ترکیب مشابه جدید با استفاده از این الگوی از پیش تعیین شده نمونه‌های موجود و کمک الگوریتم‌های یادگیری ماشین از نرم افزار matlab۲۰۱۸b و یک

شکل۱. الگوهایXRD نانوکامپوزیت‌های (x)ZFO – (x-۱)BFO به ازای x=۰-۱

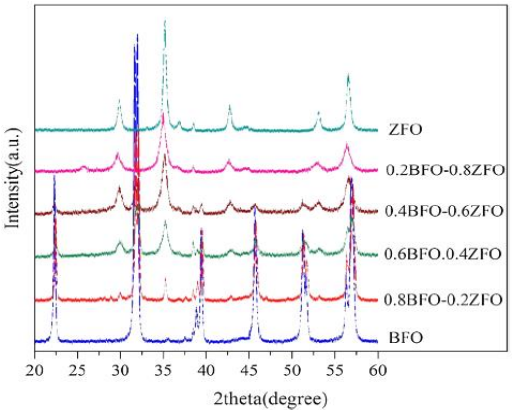


شکل۲. منحنی هیسترسیز نانوکامپوزیت‌های (x)ZFO – (x-۱)BFO به ازای x=۰-۱

سیستم Intel Core i۷-۷۵۰۰U CPU @ ۲/۹GHZ با ۱۲GB حافظه داخلی استفاده شد. بدین منظور از تعداد داده‌های کل شش کلاس به‌ازای شش نمونه مورد بررسی، ۱۰٪ از داده‌های هر کلاس را به طور تصادفی برای آموزش و بقیه به عنوان داده آزمون برای سنجش عملکرد طبقه‌بند در مواجهه با داده‌های جدید در نظر گرفته شده‌اند. سپس برای استخراج بهترین ویژگی‌ها پس از پیش پردازش، آنالیز جز مجاور انجام می‌گیرد و در نهایت توسط الگوریتم‌های طبقه‌بند بیز ساده، درخت تصمیم، k نزدیک‌ترین همسایه، جنگل تصادفی و ماشین بردار پشتیبان طبقه‌بندی انجام می‌گیرد.

برای انجام پیش پردازش در داده‌های XRD از به‌هنجارسازی با مقیاس انحراف استاندارد، جایگذاری داده‌های دورافتاده با مقدار داده غیر دور افتاده بعدی‌اش و هموار سازی داده نو یزی از طریق جابه‌جایی میانگین برای پیش پردازش استفاده شده است و داده‌های VSM با به‌هنجارسازی با مقیاس انحراف استاندارد و تغییر میانگین پیش پردازش شده‌اند.

طبقه‌بندی توسط الگوریتم بیز پس از ده مرتبه اعتبارسنجی انجام گرفته است و در آن از توزیع کرنلی و کرنل گوسی برای XRD و کرنل‌های گوسی و واحد برای VSM استفاده شده است. الگوریتم درخت تصمیم نیز با حداکثر ۳۳ عدد رای برای XRD و حداکثر ۱۰ عدد رای برای VSM پس از ۱۰ بار اعتبارسنجی انجام گرفته است. در این الگوریتم هر رای معادل یک گره شاخه است. الگوریتم k نزدیک‌ترین همسایه با در نظر گرفتن تعداد یازده همسایگی و پس از ده مرتبه اعتبارسنجی برای هر دو داده انجام گرفته است. در این الگوریتم فاصله اقلیدسی هر یک از داده‌های آزمون با تمامی داده‌های آموزش سنجیده شد و یازده عدد از نزدیک‌ترین همسایگی‌ها (کمترین فواصل به دست آمده) در نظر گرفته شدند و بیشترین کلاسی که این همسایگی‌ها داشتند به عنوان کلاس آن داده آزمون انتخاب شد. الگوریتم جنگل تصادفی



: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

دسته درخت تصمیم برای XRD و ۷۸ دسته درخت تصمیم برای VSM انجام گرفت. در الگوریتم ماشین بردار پشتیبان از کرنل گوسی برای هر دو داده استفاده شد و پارامترهای آن شامل رگولاتور و واریانس کرنل گوسی پس از بیست مرتبه اعتبارسنجی برای داده XRD و پانزده مرتبه اعتبارسنجی برای VSM انتخاب شدند.

نتایج و بحث

طبقه‌بندی به وسیله الگوریتم‌های یادگیری ماشین بسیار دقیق‌تر از خود انسان است. در جدول ۱ نتایج طبقه‌بندی توسط الگوریتم‌های نامبرده و آزمایش آن‌ها با داده‌های جدید پس از طبقه‌بندی آورده شده است. همانگونه که در این جدول مشخص است الگوریتم SVM با توجه به آنکه داده‌ها غیر خطی‌اند، ابعاد بالا و تعداد ویژگی‌های کم دارند و چند متغیره‌اند بهترین عملکرد را داراست. پس از طبقه‌بندی داده‌ها میزان ترکیبات فریت به کار رفته در نانوکامپوزیت‌ها به‌دست می‌آیند و با توجه به آن و نتایج پژوهش‌های انجام شده در [۱۱] می‌توان رفتار ساختاری و مغناطیسی نانوکامپوزیت-های BFO- ZFO را بررسی کرد. نتایج حاصل حاکی از آن است که BFO فاز پروسکایت ساده با ساختاری رمبوهدرال و گروه فضایی R^3C دارد و فرومغناطیس ضعیف است. ZFO دارای ساختار اسپینل مکعبی است و پارامغناطیس است. در سایر نانوکامپوزیت‌ها با سایر مقادیر با افزایش مقدار فریت روی پیک‌های مربوط به آن در طیف XRD افزایش یافته و پیک‌های متعلق به فریت بیسموت کاهش می‌یابد. همچنین در نانوکامپوزیت‌های با ۲۰ و ۴۰ درصد مولی فریت روی رفتار فرومغناطیسی ضعیفی دارد و در ۶۰ درصد و بیشتر یک گذار مغناطیسی از فرومغناطیس به پارامغناطیس مشاهده می‌شود.

جدول۱. نتایج حاصل از طبقه‌بندی داده‌های آزمایش آنالیز XRDو VSM شش نانوکامپوزیت BFO-ZFO با الگوریتم‌های یادگیری ماشین

الگوریتم استفاده شده	دقت طبقه-بندی داده XRD	زمان پردازش(S)	دقت طبقه-بندی داده VSM	زمان پردازش(S)
الگوریتم naive Bayes	۸۸/۹۰	۲۳/۳۲	۸۹/۲۰	۹/۹۰
الگوریتم decision tree	۹۷/۹۶	۲۳/۵۳	۹۲/۱۵	۸/۹۹
الگوریتم KNN	۹۸/۴۹	۲۲/۶۲	۹۴/۵۱	۸/۸۷
الگوریتم random forest	۹۹/۰۲	۲۵/۱۱	۹۵/۸۶	۹/۲۱
الگوریتم SVM	۹۹/۳۳	۲۸/۹۸	۹۸/۶۵	۱۱/۶۸

نتیجه‌گیری

در این مقاله، بر روی تعدادی داده XRD و VSM حاصل از نانوکامپوزیت‌های (۱-x)BFO–(x)ZFO به ازای x=۰, ۰/۲, ۰/۴, ۰/۶, ۰/۸, ۱ با الگوریتم‌های مختلف یادگیری ماشین طبقه‌بندی انجام گرفته است. پس از انجام طبقه‌بندی به دست آوردن مقادیر فریت بیسموت و فریت روی برای سایر نانوکامپوزیت‌ها با درصد مولی مشابه نمونه‌های آموزش مقدور خواهد بود. در واقع بدین طریق در هنگام مواجه شدن با داده-هایی با درصد ترکیب فریت مجهول بدون استفاده از روش‌های سنتی و رسم طیف‌ها و مقایسه با طیف‌های دیگر برای داده VSM و یا استفاده از نرم‌افزار X'Pert Highscore Plus برای تجزیه و تحلیل داده‌های XRD می‌توان از روش پیشنهادی در این مقاله به عنوان یک روش جدید استفاده کرده و با صرف زمان بسیار کمتر تشخیص درصد مولی ترکیبات فریت با دقت بیشتر به آسانی امکان‌پذیر خواهد بود و این امر در نتیجه به بررسی بهتر و دقیق‌تر رفتار ساختاری و مغناطیسی این مواد منجر می‌شود.

روش پیشهادی در این مقاله را می‌توان در آینده با جمع‌آوری داده‌های بیشتر به سایر ساختارها و ترکیبات تعمیم داده و به عنوان روشی نوین در تخمین سریع و دقیق ویژگی‌های مختلف مواد به کار رود.

مراجع

[۱] N.G. Yadav, L.S. Chaudhary, P.A. Sakhare, T.D. Dongale, P.S.Patil, A.D. Sheikh, *J. Colloid Interface Sci*. ۵۲۷, ۲۸۹ (۲۰۱۸)

[۲] S. Yang, F. Zhang, X. Xie, H. Sun, L. Zhang, S. Fan, *J. Alloys Compd*. **۷۳۴**, ۲۴۳ (۲۰۱۸)

[۳] M. Wang, T. Wang, P. Cai, X. Chen, *J. Small Methods.* ۲۰۱۹, ۱۹۰۰۰۲۵

[۴] Manning, C. D., P. Raghavan, and M. Schütze. Introduction to Information Retrieval, NY: Cambridge University Press, ۲۰۰۸.

[۵] Breiman, L., J. H. Friedman, R. A. Olshen, and C. J. Stone. Classification and Regression Trees. Boca Raton, FL: Chapman & Hall, ۱۹۸۴.

[۶] Mirkes, Evgeny M.; KNN and Potential Energy: *applet,* University of Leicester, ۲۰۱۱

[۷] Gareth James; Daniela Witten; Trevor Hastie; Robert Tibshirani An Introduction to Statistical Learning. *Springer*. pp. ۳۱۶–۳۲۱(۲۰۱۳).

[۸] Kecman V., T. -M. Huang, and M. Vogt. ۲۵۵–۲۷۴. Berlin: *Springer-Verlag*, ۲۰۰۵.

[۹] Yang, W., K. Wang, W. Zuo, *J. Computers*. ۷ (۲۰۱۲)

[۱۰] F. Oviedo, Z. Ren, S. Sun, C. Settens, Z. Liu, N. Putri, S. Ramasamy, B. DeCost, S.L.p.Tian, G. Romano, A. Gilad, T. Buonassisi, *npj. Computational Materials*. ۵,۶۰۰(۲۰۱۹)

[۱۱] S. Falahatnejad, H. Maleki, *J. Materials Science: Materials in Electronics*. ۲۹, ۲۹ (۲۰۱۸)

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

نقش نیروهای سه جسمی UIX برگذار فاز مایع-گاز در ماده هسته‌ای در چارچوب روش RLOCV

حیدری، سمیرا[۱] ؛ زریونی، سعیده[۱]

[۱] گروه فیزیک، دانشگاه بوعلی سینا، همدان

چکیده

گذار فاز ماده هسته‌ای داغ و ویژگی‌های ترمودینامیکی آن در چارچوب روش وردشی پایین‌ترین مرتبه قید نسبیتی (RLOCV)، با استفاده از پتانسیل دو جسمی لخت AV_{18} و در نظر گرفتن نیروهای سه جسمی یوربانا (UIX) مورد مطالعه قرار می‌گیرد. ویژگی‌های ترمودینامیکی در گستره وسیعی از چگالی برای دماهای مختلف بررسی می شوند. نقش نیروهای سه جسمی در چارچوب روش RLOCV بر روی دمای بحرانی، قابل ملاحظه است و دمای بحرانی به دست آمده با پتانسیل $AV_{18}+UIX$ سازگاری خوبی با نتایج تجربی دارد.

واژه های کلیدی: *هامیلتونین نسبیتی، نیروهای سه جسمی، ماده هسته‌ای داغ.*

The role of UIX three-body forces on the liquid-gas phase transition of nuclear matter in RLOCV framework

Heidari, Samira[1]; Zaryouni, Saeedeh[1]

[1] Department of Physics, Bu-Ali Sina University, Hamedan

Abstract

The liquid-gas phase transition of hot nuclear matter and its thermodynamic properties in the relativistic lowest order constrained variation framework (RLOCV), by using bare two-body potential AV_{18} and by including Urbana-type (UIX) three-body forces has been studied. The thermodynamic properties have been investigated. The role of three-body forces on critical temperature in RLOCV framework is remarkable and the critical temperature obtained by $AV_{18}+UIX$ shows a good agreement with experimental results.

***Keywords**: Relativistic Hamiltonian, Three-body forces, Hot nuclear matter*

PACS No: 21.65, -f ,26.60 ,-c

مقدمه

مطالعه‌ی گذار فاز مایع-گاز، تعیین دمای بحرانی، چگالی بحرانی، دما و ویژگی‌های ترمودینامیکی ماده هسته‌ای داغ و چگال در حوزه‌های فیزیک هسته‌ای و اخترفیزیک در تعیین جرم و شعاع بحرانی ستاره‌های نوترونی، شکافت هسته‌ای، درک برخورد یون های سنگین با انرژی‌های بالا و انفجارهای ابرنواختران و غیره نقش مهمی ایفا می‌کند. در کارهای گذشته، ویژگی‌های نقطه اشباع ماده هسته‌ای سرد، فراوانی پروتون‌ها در ماده پایدار در برابر واپاشی بتا، در چارچوب روش وردشی پایین‌ترین مرتبه قید نسبیتی (RLOCV)، با استفاده از پتانسیل‌های دو جسمی AV_{14}، نسخه نسبیتی آن $\tilde{V}_{14}$ و نیز پتانسیل AV_{18}، با منظور کردن نیروهای سه جسمی از نوع یوربانا (UIX) مورد بررسی قرار گرفت و به نتایج قابل مقایسه‌ای با نتایج تجربی منجر گردید [۱و۲]. به همین دلیل بر آن شدیم، تأثیر نیروهای سه جسمی(TBF) و تصحیحات نسبیتی را بر روی ویژگی‌های ترمودینامیکی ماده هسته‌ای داغ نیز بررسی کنیم، زیرا اثر این نیروها می‌تواند در تعیین دقیق‌تر دمای بحرانی و ویژگی‌های ترمودینامیکی ماده هسته‌ای داغ موثر باشد.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

روش RLOCV یک روش وردشی خودسازگار است که در آن از هامیلتونین نسبیتی استفاده می‌شود و مبتنی بر نظریه بسط خوشه‌ای است. در این روش، هیچ پارامتر آزادی وجود ندارد و تنها قیدی که در آن به کار می‌رود، شرط بهنجارش تابع موج است. روش RLOCV قادر است با پتانسیل‌های دو جسمی متفاوتی مانند رایدِ، AV_{14}، $\tilde{V}_{14}$ و AV_{18} کار کند. برای اعمال نیروهای سه جسمی، ابتدا با متوسط‌گیری روی ذره سوم آن را به صورت یک برهمکنش دوجسمی مؤثر و سازگار با روش LOCV در می‌آوریم.

در این متن ابتدا به توصیف مختصری از روش RLOCV در دمای معین می‌پردازیم سپس نیروهای سه جسمی و در بخش نتایج، نقش نیروهای سه جسمی را بر روی دمای بحرانی و گذار فاز مایع-گاز ماده هسته‌ای داغ مورد مطالعه قرار می‌دهیم در این محاسبات از پتانسیل AV_{18} استفاده می‌کنیم.

روش RLOCV در دمای معین

هامیلتونین نسبیتی در روش RLOCV به شکل زیر نوشته می‌شود [۴]:

$$H_R = \sum_i^N [\sqrt{p_i^2c^2 - m_i^2c^4} - m_ic^2] + \sum_{i<j} [v_{ij} + \delta v(P_{ij})] \quad (۱)$$

که اولین جمله، انرژی جنبشی نسبیتی، v_{ij} پتانسیل دو جسمی و $\delta v(P_{ij})$ برهمکنش خیز نامیده می‌شود. برهمکنش خیز وابسته به تکانه مرکز جرم سیستم دو ذره‌ای است. این جملات در مرجع معرفی‌شده‌اند [۴].

مقدار چشمداشتی انرژی به ازای هر نوکلئون بر اساس نظریه بسط خوشه‌ای به صورت زیر در می‌آید:

$$E = \frac{1}{A}\frac{\langle\Psi|H|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle} \approx E_1 + E_2 + \delta E_R + \delta v \quad (۲)$$

که E_1 انرژی گاز فرمی غیر برهمکنشی، E_2 انرژی خوشه‌های دوتایی، δE_R تصحیح نسبیتی و δv سهم مربوط به برهمکنش خیز هستند و عبارت‌اند از [۳]:

$$E_1 = \frac{\hbar^2}{m\rho\pi^2}\int_0^\infty k^4 n(k)dk \qquad E_2 = \frac{1}{2A}\sum\langle ij|W^T(12)|ij\rangle_a \quad (۳)$$

$$\delta E_{1R} = C_R(-\frac{\nu}{2\pi\rho^2})\int_0^\infty k^6 n(k)dk \quad \delta E_{2R} = \frac{1}{2N}\sum\langle ij|\delta W_R^T(12)|ij\rangle_a \quad (۴)$$

که W^T در مرجع [۳] معرفی شده است و δW_R^T برابر است با:

$$\delta W_R^T(12) = C_R(2[\nabla^2, f_T(r)][\nabla^2, f_T(r)] - [f_T(r),[\nabla^2, f_T(r)]]\nabla^2 - \nabla^2[f_T(r),[\nabla^2, f_T(r)]]) \quad (۵)$$

و ρ چگالی، ν درجه‌ی تبهگنی، $C_R = \frac{\hbar^4}{8m^3c^2}$ و $n(k)$ تابع توزیع نوکلئون‌هاست که در دمای معین بر اساس آمار فرمی-دیراک به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$n(k) = \frac{1}{\exp[\beta(\varepsilon_k - \mu)] + 1} \quad (۶)$$

که $\beta = 1/K_BT$، μ کمیتی شبیه به پتانسیل شیمیایی و ε_k انرژی تک ذرات در دما و چگالی معین است و می‌توان آن را به صورت زیر نوشت [۳و۴]:

$$\varepsilon_k = \frac{\hbar^2k^2}{2m^*} \cong \frac{\hbar^2k^2}{2m} \quad (۷)$$

که در آن m^* جرم مؤثر و یک پارامتر وردشی است. به منظور سادگی در محاسبات با تقریبی خوبی $m^* \cong m$ است. انرژی آزاد هلمهولتز برابر است با:

$$F = E - TS \quad (۸)$$

که T دما و S آنتروپی بر نوکلئون است و برابر است با:

$$S = -\frac{K_B}{A}\sum_k [n(k)ln(n(k)) + (1-n(k))ln(1-n(k))] \quad (۹)$$

نیروهای سه جسمی UIX

همان طور که در بالا ذکر شد در این متن از برهمکنش سه جسمی یوربانا UIX استفاده شده است که به صورت زیر تعریف می‌گردد:

$$V_{123} = V_{123}^{2\pi} + V_{123}^R \quad (۶)$$

که در آن $V_{123}^{2\pi}$ و V_{123}^R به ترتیب سهم‌های مربوط به مبادله دو پایونی و بخش دافعه پدیده شناختی هستند و عبارت‌اند از [۵]:

$$V_{123}^{2\pi} = A\sum_{cyc}(\{X_{12}, X_{23}\}\{\tau_1.\tau_2, \tau_2.\tau_3\} + \frac{1}{4}[X_{12}, X_{23}][\tau_1.\tau_2, \tau_2.\tau_3]) \quad (۷)$$

$$V_{123}^R = U\sum_{cyc} T^2(m_\pi r_{12})T^2(m_\pi r_{23}) \quad (۸)$$

که $A = 0.0316MeV$ و $U = 0.000483MeV$ و $T(mr)$ تابع تانسوری و X_{12} عملگر تعویض یک پایونی است و در مرجع [۵] داده شده‌اند.

نتیجه گیری

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

در آخر با کمینه کردن انرژی خوشه‌ای دو جسمی، یک دسته معادلات اویلر- لاگرانژ به دست می‌آید. با حل این معادلات، ابتدا انرژی و از معادلات (۶و۸ و۹) انرژی آزاد سیستم به دست می‌آید. شکل۱ وابستگی انرژی آزاد به چگالی و دما را با و بدون درنظر گرفتن نیروهای سه جسمی در چارچوب روش‌هایLOCV و نسخه نسبیتی آن (RLOCV) نشان می‌دهد. همان طور که مشاهده می‌شود به دلیل طبیعت جاذبهTBF، این نیروها، انرژی آزاد ماده هسته‌ای را در هر دو روشLOCV و RLOCV، در هر دمایی، در مقایسه با حالتی که فقط برهمکنش دو جسمی به کار می‌رود، سخت‌تر می‌کنند. در حالی که اثرات نسبیتی به دلیل طبیعت دافعه این اثرات، نتیجه عکس دارند. به علاوه نقش TBF در مقایسه با اثرات نسبیتی بسیار چشمگیر است. همانطور که می‌دانیم نیروی هسته‌ای یک نیروی چند جسمی است. بدیهی است با افزایش چگالی، اثرات نیروهای چند جسمی بخصوص نیروهای سه جسمی که ناشی از تبادل دو پایونی است افزایش می یابد. به همین دلیل است که در چگالی های بالا اختلاف میان نتایج حاصل از نیروهای دو جسمی و سه جسمی بر روی انرژی آزاد ماده هسته‌ای مشهودتر است.

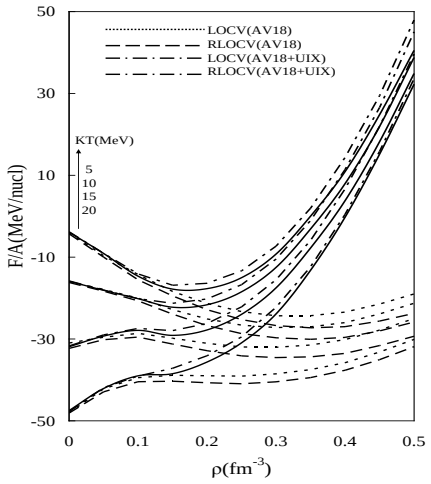
فشار را می‌توان با مشتق‌گیری از انرژی آزاد به صورت زیر به دست آورد:

$$P(\rho,T)=\rho^2\frac{\partial F}{\partial \rho} \qquad (۹)$$

شکل۲ همانند شکل۱ اما برای فشار بر نوکلئون رسم شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود فشار ماده هسته‌ای متقارن یک رفتار واندروالس نوعی را نشان می‌دهد. این رفتار به این نکته اشاره دارد که در سیستم گذار فازمایع-گاز اتفاق می‌افتد. شرط همزیستی هر دو فاز مایع و گاز در سیستم آن است که

$$\mu_{liquid}(\rho,T)=\mu_{gas}(\rho,T) \qquad P_{liquid}(\rho,T)=P_{gas}(\rho,T) \qquad (۱۰)$$

وقتی دما زیاد می‌شود ناپایداری مکانیکی کاهش یافته و در دمای بحرانی کاملاً از بین می‌رود. چگالی و دمای بحرانی این گذار فاز از شرط $P_{liquid}(\rho,T)=P_{gas}(\rho,T)$ به دست می‌آید. در دماهای بالاتر از دمای بحرانی، تنها فاز گاز وجود دارد. مقدار دمای بحرانی ماده هسته‌ای متقارن، با و بدون در نظر گرفتن اثرات سه جسمی، در شکل۳ رسم شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود مقدار نقطه‌ی بحرانی قویاً تحت تأثیر TBF است، ولی اثرات نسبیتی تأثیر قابل توجهی بر نقطه بحرانی ندارند. دمای بحرانی به دست آمده با TBF در دو نسخه نسبیتی RLOCV و غیر نسبیتی LOCV، به ترتیب برابر با $18.2MeV$ و $17.1MeV$ است، در حالی که این کمیت، اگر فقط برهمکنش دو جسمی در نظر گرفته شود، مقادیر $29MeV$ و $28.9MeV$ را داراست. بنابراین برهمکنش $AV_{18}+UIX$ در هر دو نسخه روشLOCV، سازگاری بیشتری را با مقدار تجربی $17\pm1MeV$ در مقایسه با پتانسیل دو جسمی AV_{18} نشان می‌دهد.

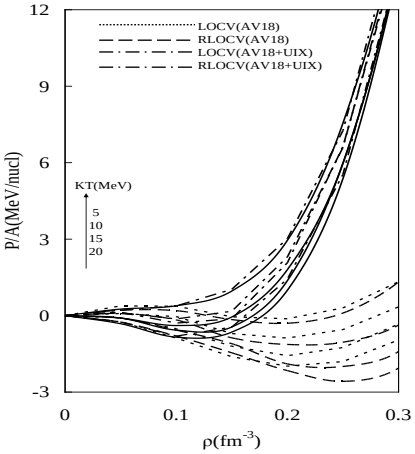


شکل۱: انرژی آزاد بر نوکلئون برای ماده هسته‌ای متقارن برحسب چگالی در دماهای متفاوت به روش‌هایLOCV و RLOCV با و بدون در نظر گرفتن TBF

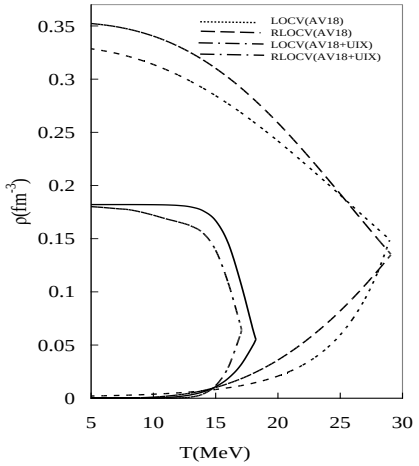
آنتروپی ماده هسته‌ای یک کمیت مهم در تولید ذرات در برخورد یون‌های سنگین و ابرنواختران است. به همین دلیل آنتروپی به صورت تابعی از چگالی در دماهای مختلف در شکل۴ رسم شده است. نتایج مراجع [۶،۷و۸] و همچنین نتایج تجربی [۹] نیز، برای مقایسه داده شده است. نتایج ما، سازگاری خوبی را با پیشگویی های نظری و تجربی نشان می‌دهد.

پتانسیل شیمیایی نیز با استفاده از رابطه $\mu=F+P/\rho$ به صورت تابعی از چگالی در دماهای مختلف در شکل۵ رسم شده است. مشاهده می‌شود که با افزایش دما در هر چگالی ثابت، پتانسیل شیمیایی کاهش می‌یابد. این کاهش در مورد روش RLOCV در مقایسه با LOCV بزرگ‌تر است. همچنین این کاهش در مورد برهمکنش دو جسمی AV_{18} بیش از $AV_{18}+UIX$

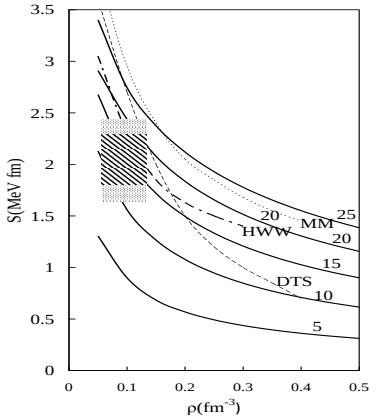
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



شکل۲: فشار بر نوکلئون برای ماده هسته‌ای متقارن بر حسب چگالی در دماهای متفاوت به روش های LOCV و RLOCV با و بدون در نظر گرفتن TBF.

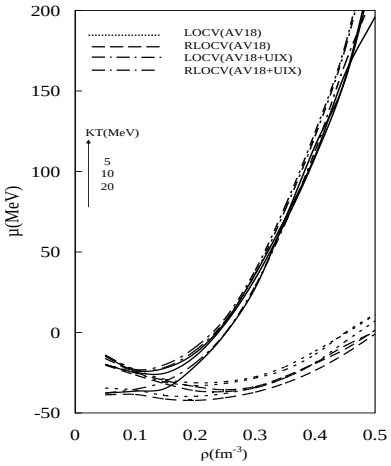


شکل۳: گذار فاز به صورت تابعی از دما در چارچوب روش هایLOCV و RLOCV با و بدون در نظر گرفتن TBF.



شکل۴: آنتروپی به صورت تابعی از چگالی در دماهای مختلف، قسمت-های هاشورخورده نتایج تجربی را نشان می‌دهد.

است. به علاوه نقش TBF بر روی پتانسیل شیمیایی بخصوص در چگالی‌های بالا در مقایسه با اثرات نسبیتی چشمگیر است. همچنین مشاهده می‌شود پتانسیل شیمیایی در هر دما و چگالی ثابتی با منظور کردن اثرات نسبیتی کاهش می‌یابد، در حالی که افزودن اثرات سه جسمی، نتیجه‌ای کاملاً برعکس را پیش‌بینی می‌کند. این را می‌توان به طبیعت متفاوت نیروهای سه جسمی و اثرات نسبیتی مربوط کرد.



شکل۵: پتانسیل شیمیایی به صورت تابعی از چگالی در دماهای مختلف در چارچوب روش‌های LOCV و RLOCV با و بدون در نظر گرفتن TBF .

مرجع‌ها

[۱] S. Heidari, S. Zaryouni, H. R. Moshfegh and S. Goudarzi, "Role of relativistic effects and three-body forces in nuclear matter properties"; *Phys. Rev. C* ***99*** (2019) 024307.

[۲] S. Zaryouni and S. Heidari, "The effect of the three-body force on the β-stable matter in RLOCV framework"; *Nuclear Physics A* ***997*** (2020) 121713.

[۳] S. Zaryouni, M. Hassani, and H. R. Moshfegh, "Thermal properties of nuclear matter in a variational framework with relativistic corrections"; *Phys. Rev. C* ***89*** (2014) 014332.

[۴] S. Zaryouni, H. R. Moshfegh**,** "Relativistic correction to the nuclear and neutron matter energy in the LOCV framework"; *Int. J. Mod. Phys. E* ***14*** (2005) 1.

[۵] S. Goudarzi, H. R. Moshfegh, P. Haensel**,** "The role of three-body forces in nuclear symmetry energy and symmetry free energy"; *Nucl. Phys. A* ***969*** **(**2018) 206**.**

[۶] H. R Moshfegh and M. Modarres,"Thermal properties of asymmetrical nuclear matter with the new charge-dependent Reid potential", *Nucl Phys. A* ***792*** (2007) 201.

[۷] C. Das, R. K. Tripathi and R. Sahu," Hot nuclear matter with a density-dependent interaction"; *Phys. Rev. C* ***45*** (1992) 2217.

[۸] H. Huber, F. Weber and M. K. Weigel," Symmetric and asymmetric nuclear matter in the relativistic approach at finite temperatures"; *Phys. Rev. C* ***57*** (1998) 3484.

[۹] B. V. Jacak et al," Measurement of complex fragments and clues to the entropy production from 42-137-Mev/nucleon Ar+Au"; *Phys. Rev. Lett.* ***51***(1983) 1846.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

سنتز نانوبلورهای هسته/پوسته ZnSe:Cu@ZnS و بررسی اثر ناخالصی مس و زمان تابش مایکروویو بر خواص نوری آن‌ها

ابراهیمی، سعید ؛ سوری، داریوش

گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه ملایر، ملایر

چکیده

در پژوهش حاضر، نانوبلورهای ZnSe آلاییده به مس در حضور مقادیر مختلف مس و همچنین با/بدون ۶ دقیقه تابش مایکروویو با استفاده از یک رویکرد آبی-فوتوشیمیایی ساخته شدند. پس از سنتز ZnSe، محلول استات روی و $Na_2S_2O_3$ به آن افزوده شد. محلول آماده شده تنها به مدت ۹۰ دقیقه در دمای اتاق در معرض تابش UV قرار گرفت و تشکیل ZnS پیرامون هسته ZnSe صورت گرفت. بر اساس طیف سنجی نوری فرابنفش-مرئی نانوبلورهای سنتز شده، به تعیین و تحلیل ضریب شکست (n)، ثابت دی الکتریک (ε) و پذیرفتاری نوری غیر خطی ($\chi^{(3)}$) آن‌ها پرداخته شد. نتایج بیان می‌دارد که این نانوبلورها پتانسیل بالایی جهت کاربردهای اپتیکی و اپتوالکترونیکی داشته و از میان آن‌ها، نمونه ZnSe:Cu(0.75%)@ZnS با تابش مایکروویو به مدت ۶ دقیقه، به دلیل داشتن بالاترین $\chi^{(3)}$، بهترین گزینه برای کاربردهای اپتیکی است. نتایج این پژوهش همچنین تأکید می‌کند که برای این نانوبلورها، پذیرفتاری نوری غیر خطی با گاف انرژی رابطه عکس دارد و با تشکیل پوسته ZnS روی هسته‌های ZnSe، افزایش می‌یابد.

Synthesis of ZnSe:Cu@ZnS Core-Shell nanocrystals and investigation of the effect of copper impurity and microwave irradiation time on their optical properties

Ebrahimi, Saeed; Souri, Dariush

Department of Physics, Faculty of science, Malayer University, Malayer

Abstract

In present research, Cu-doped ZnSe nanocrystals (NCs) at the presence of different Cu contents and also with/without 6 min microwave irradiation were fabricated using an aqueous-photochemical approach. After the synthesis of ZnSe, the solution of zinc acetate and $Na_2S_2O_3$ was added to it. The prepared solution was exposed to UV illumination only for 90 min at room temperature and ZnS formation around ZnSe cores occurred. Upon UV-Vis optical spectroscopy of synthesized NCs, their refractive index (n), dielectric constant (ε) and third order non-linear optical susceptibility ($\chi^{(3)}$) were determined and analyzed. Results imply that these nanocrystals have high potential in optical and optoelectronic applications and among them, ZnSe:Cu(0.75%)@ZnS sample with 6 min microwave irradiation time, because of owing the highest $\chi^{(3)}$, is an optimum candidate in optical applications. Results of this research confirm that for these NCs, nonlinear optical susceptibility is in inverse relation with the energy gap and increase with formation of ZnS around ZnSe cores.

PACS No. 61, 68, 78, 81, 85

مقدمه

به تازگی دستگاه‌های نانوالکترونیک مبتنی بر نیمرساناهای نوین، در حال ظهور بوده و در کاربردهای آتی به اوج خود خواهند رسید. اخیرا تلاش‌های بسیاری در زمینه سنتز نانوبلورهای با عاملیت سطحی عالی، قابلیت تنظیم خواص فوتوفیزیکی و ... صورت گرفته است [۱]. با این حال محدودیت‌های قابل توجهی برای استفاده مؤثر آن‌ها در کاربردهای زیستی، از قبیل سمیت و پایداری در محیط‌های زیستی وجود دارد. از آنجا که سمیت یک نگرانی جدی در کاربردهای زیستی است، سنتز نانوبلورهای عاری از فلزات سنگینی مانند Cd، در طول دهه گذشته حائز اهمیت بوده است [۲و۳]. ZnSe یکی از اولین نیمرساناهای مهم کشف شده متعلق به II-VI و شاید یکی از مهمترین مواد الکترونیکی و اپتوالکترونیکی با کاربردهای برجسته در دستگاه‌های اپتیک غیر

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

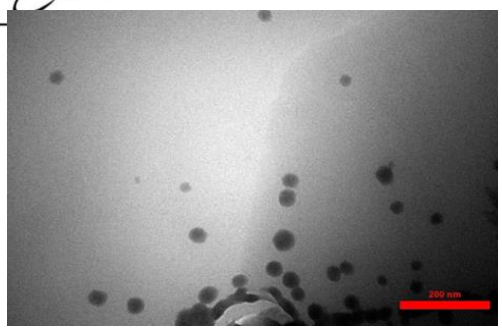
دیودهای نور گسیل (LEDs)، لیزرها، ترانزیستورها و غیره می‌باشد [۴]. گزارشات متعددی مبنی بر بهبود بازده فلوئورسنس و پایداری در برابر فوتو-اکسیداسیون، از طریق پوشش نانوبلورهای ZnSe با یک نیمرسانای با گاف نواری پهن‌تر مانند ZnS (eV ۳/۶) صورت گرفته است. همچنین افزودن ناخالصی مس به ZnSe می‌تواند نورتابی آن را از ناحیه طیفی آبی- بنفش به محدوده مرئی منتقل کند [۵و۶]. در این پژوهش نانوبلورهای ZnSe:Cu و ZnSe:Cu@ZnS با استفاده از یک روش آبی-فوتوشیمیایی ساخته شده و سپس اثر ناخالصی Cu و نیز تابش مایکروویو روی برخی خواص نوری آن‌ها مورد بررسی قرار گرفته است.

بخش تجربی

سنتز نانوبلورهای سلنیدروی از طریق ترکیب منبع یون Se و منبع یون Zn تحت شارش گاز آرگون صورت گرفت. جهت سنتز نانوبلورهای ZnSe:Cu نیز پیش از ترکیب منابع یون Se و Zn، مقادیر ۰/۲، ۱/۵ و ۳ میلی لیتر از محلول سولفات مس ۶ میلی مولار به منبع یون Zn اضافه شد و سپس با منبع یون Se ترکیب گردید. جزئیات سنتز در مرجع [۷] آورده شده است. به منظور رشد نانوبلورهای ZnSe سنتز شده، محلول حاصل به مدت min ۶ تحت تابش مایکروویو قرار گرفت [۸]. در سنتز نانوبلورهای هسته/پوسته، به منظور تهیه منبع یون S و یون Zn، به ترتیب مقادیر g ۰/۱۱۷ از $Na_2S_2O_3$ (سدیم تیوسولفات) و g ۰/۰۳۳ از $Zn(Ac)_2$ (استات روی) هر کدام به طور جداگانه در ml ۷/۵ آب دی یونیزه حل می‌شوند. سپس محلول سدیم تیوسولفات به مدت min ۸۰ در معرض تابش UV قرار گرفته و دو منبع مذکور با یکدیگر ترکیب می‌شوند و ml ۳۰ از ZnSe با و بدون تابش مایکروویو (به طور جداگانه) که در مرحله قبل سنتز شد، به آن افزوده می‌گردد. در مرحله بعد، مقدار مناسبی از TGA (تیوگلیکولیک اسید) خالص به محلول نهایی اضافه شده و pH محلول با افزودن NaOH روی ۹ تنظیم می‌گردد. در نهایت محلول بدست آمده به مدت ۹۰ دقیقه تحت تابش UV قرار می‌گیرد [۳] تا نانوبلورهای هسته/پوسته ZnSe:Cu@ZnS حاصل شوند.

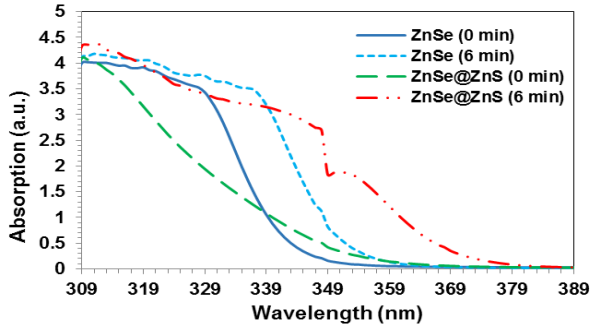
نتایج و بحث

شکل۱ به صورت نوعی تصویر TEM نانوبلورهای ZnSe:Cu(0.75%) با MWIRT=0 min را نشان می‌دهد که بیانگر شکل کروی نانوبلورهای سنتز شده می‌باشد.

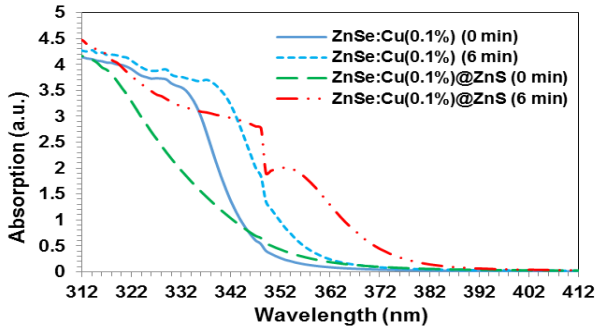


شکل۱: تصویر TEM نانوبلورهای ZnSe:Cu(0.75%) با MWIRT=0 min

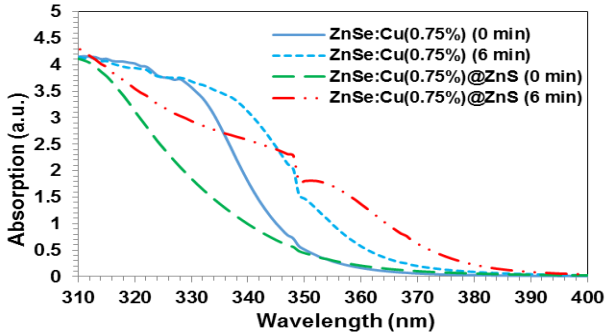
شکل‌های ۲ تا ۵ طیف جذب نانوبلورهای ZnSe:Cu و هسته-پوسته ZnSe:Cu@ZnS را با درصدهای مختلف ناخالصی مس با و بدون تابش مایکروویو نشان می‌دهد. مقادیر بدست آمده گاف انرژی E_g^{DASF}، حاصل از روش مشتق انطباق طیف جذبی[1] [۹]، برای نمونه‌های مورد بررسی در جدول ۱ گردآوری شده است.



شکل۲: نمودارهای طیف جذب نانوبلورهای ZnSe و ZnSe@ZnS با و بدون تابش مایکروویو



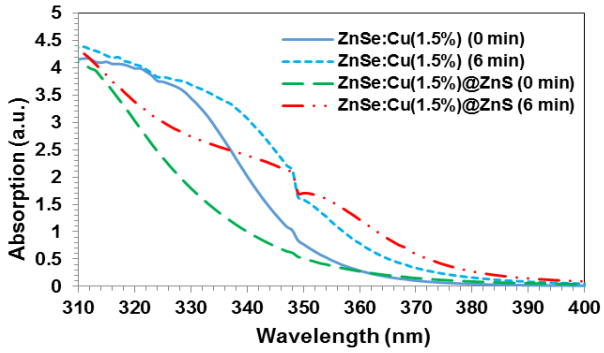
شکل۳: نمودارهای طیف جذب نانوبلورهای ZnSe:Cu(0.1%) و ZnSe:Cu(0.1%)@ZnS با و بدون تابش مایکروویو



[1] Derivation of Absorption Spectrum Fitting (DASF)

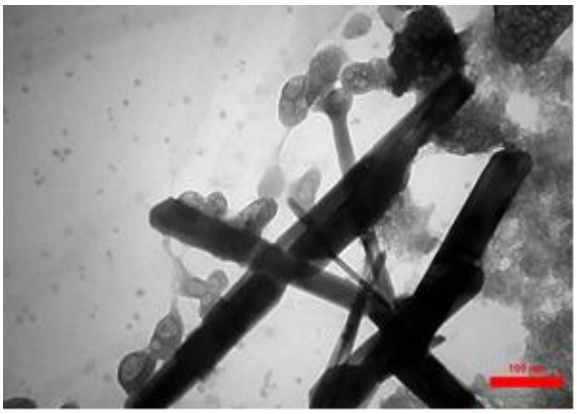
این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد :
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

شکل۴: نمودارهای طیف جذب نانوبلورهای ZnSe:Cu(0.75%) و ZnSe:Cu(0.75%)@ZnS با و بدون تابش مایکروویو



شکل۵: نمودارهای طیف جذب نانوبلورهای ZnSe:Cu(1.5%) و ZnSe:Cu(1.5%)@ZnS با و بدون تابش مایکروویو

از مقادیر جدول۱ مشاهده می‌شود که به طورکلی تابش مایکروویو و نیز تشکیل پوسته ZnS روی هسته‌های ZnSe منجر به کاهش گاف انرژی شده است. افزودن ناخالص مس در نمونه های هسته/پوسته بدون تابش مایکروویو گاف انرژی را افزایش داده و در همه نمونه‌های تحت تابش مایکروویو، به جز نمونه ZnSe:Cu(1.5%)@ZnS، منجر به کاهش گاف انرژی شده است. استثنای اخیر، به دلیل تغییر ساختار نمونه مذکور از نانوبلورهای کروی به نانومیله می‌باشد(شکل۶). مطابق با گزارشات [۱۰]، تغییر مورفولوژی نانوذرات باعث تغییر در گاف انرژی آن‌ها می‌گردد. شکل۶ تصویر TEM این نمونه را نشان می‌دهد.



شکل۶: تصویر TEM نانومیله‌های ZnSe:Cu(1.5%)@ZnS با تابش مایکروویو به مدت ۶ دقیقه

با استفاده از مقادیر گاف انرژی و با بهره‌گیری از رابطه زیر، می‌توان برای نمونه‌ها، ضریب شکست را محاسبه نمود [۱۱].

$$\frac{n^2-1}{n^2+2} = 1-\left(E_g/20\right)^{1/2} \qquad (۱)$$

همچنین نظر به رابطه $\varepsilon = n^2$، می‌توان ثابت دی الکتریک را نیز مطابق آنچه در جدول ۱ ذکر شده است، به دست آورد. مشاهده می‌شود که افزایش ناخالصی مس، به طورکلی سبب افزایش مقادیر n و ε برای همه نانوبلورهای با و بدون پوشش ZnS شده است.

در ادامه با استفاده از نتایج تجربی خواص نوری نظیر E_g^{DASF} و ضریب شکست نمونه‌ها و به کمک برخی روابط [۱۲]، پذیرفتاری نوری غیر خطی ($\chi^{(3)}$) محاسبه شده است. در اپتیک غیر خطی پاسخ سیستم ماده بر حسب بردار قطبش به صورت یک سری توانی از میدان الکتریکی به صورت زیر معرفی می‌گردد:

$$\tilde{P}(t)=\varepsilon_0[\chi^{(1)}\tilde{E}(t)+\chi^{(2)}\tilde{E}^2(t)+\chi^{(3)}\tilde{E}^3(t)+\ldots]=\tilde{P}^{(1)}(t)+\tilde{P}^{(2)}(t)+\tilde{P}^{(3)}(t) \qquad (۲)$$

که در آن کمیت‌های $\chi^{(1)}$، $\chi^{(2)}$ و $\chi^{(3)}$ به ترتیب پذیرفتاری خطی، پذیرفتاری‌های اپتیکی غیر خطی مرتبه دو و مرتبه سه می‌باشند. بنابراین در رابطه ۲ سهم مرتبه سوم در قطبش غیر خطی را می‌توان به صورت رابطه ۳ لحاظ نمود؛

$$\tilde{P}^{(3)}(t)=\varepsilon_0\chi^{(3)}\tilde{E}^3(t) \qquad (۳)$$

به طور کلی می‌توان ضریب شکست (N) را در حضور این نوع از فرایند غیر خطی، به صورت زیر نوشت:

$$N=n_0+n_2I \qquad (۴)$$

که در آن n_0 ضریب شکست خطی (معمول) و n_2 بخش وابسته به شدت پرتو فرودی است[۱۳]:

$$n_2=\frac{3}{2n_0^2\varepsilon_0 c}\chi^{(3)} \qquad (۵)$$

از طرفی توافق خوبی بین مقادیر $\chi^{(3)}$ پیش بینی شده توسط قاعده کلی میلر ($\chi^3 \cong A(\chi^{(1)})^4$) با مقادیر تجربی اندازه‌گیری شده آن وجود دارد[۱۲]. پذیرفتاری نوری خطی در تقریب اول برای شیشه‌های کلکوژناید توسط رابطه ۶ داده می‌شود که در دیگر مواد نیز قابل کاربرد است[۱۲و۱۴]:

$$\chi^{(1)}=\frac{(n_0^2-1)}{4\pi} \qquad (۶)$$

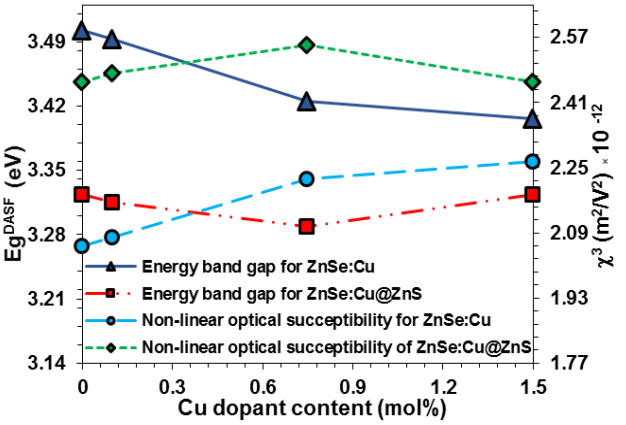
با استفاده از تعمیم قانون میلر رابطه ۷ حاصل می‌شود:

$$\chi^{(3)}=A(\chi^{(1)})^4=\frac{A}{(4\pi)^4}(n_0^2-1)^4 \qquad (۷)$$

به طور کلی مقدار پارامتر A توسط آدایر و همکاران [۱۵] به صورت $۰/۶\times10^{-10} < A(esu) < ۲/۵\times10^{-10}$ گزارش شده است که برای بسیاری از بلورهای اپتیکی استفاده شده است [۷]. توسط وانگ [۱۶] این پارامتر برای ترکیبات سلنیدی، 10^{-10} (esu) A= ۱/۷× معرفی شده است و در کار حاضر، نیز همین مقدار لحاظ گردیده و بر مبنای آن $\chi^{(3)}$ نانوبلورها، تعیین شده است (جدول۱). مطابق مقادیر بدست آمده، رابطه‌ای معکوس بین $\chi^{(3)}$ و E_g برای نانوبلورهای مورد بررسی وجود دارد. به منظور درک بهتر، این امر به صورت نوعی در نمودار شکل۷ نشان داده شده

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

لازم به ذکر است که این نتایج توافق خوبی با مطالعات پیشین [۷] دارد.



شکل ۷: نمودار تغییرات پذیرفتاری نوری غیر خطی ($\chi^{(3)}$) و گاف انرژی نانوبلورهای ZnSe:Cu و هسته-پوسته ZnSe:Cu@ZnS با تغییر درصد مولی ناخالصی مس برای تابش مایکروویو به مدت ۶ دقیقه

جدول ۱ : پارامترهای گاف انرژی، ضریب شکست، ثابت دی الکتریک و پذیرفتاری نوری غیر خطی مرتبه سوم (χ^3) برای نمونه‌های سنتز شده

Sample	MWIRT (min)	E_g^{DASF} (eV)	n	ε	$\chi^{(3)}\times10^{-12}$ ($\frac{m^2}{V^2}$)
ZnSe Pure	۰	۳/۶۱۵	۲/۲۴۹	۵/۰۵۷	۱/۸۴۶
	۶	۳/۵۰۲	۲/۲۷۴	۵/۱۶۹	۲/۰۵۹
ZnSe@ZnS	۰	۳/۵۰۲	۲/۲۷۴	۵/۱۶۹	۲/۰۵۹
	۶	۳/۳۲۴	۲/۳۱۵	۵/۳۵۹	۲/۴۶۱
ZnSe:Cu(0.1%)	۰	۳/۵۷۳	۲/۲۵۸	۵/۰۹۸	۱/۹۲۲
	۶	۳/۴۹۳	۲/۲۷۶	۵/۱۷۹	۲/۰۷۹
ZnSe:Cu(0.1%)@ZnS	۰	۳/۵۲۲	۲/۲۶۹	۵/۱۴۹	۲/۰۲۰
	۶	۳/۳۱۵	۲/۳۱۷	۵/۳۶۹	۲/۴۸۳
ZnSe:Cu(0.75%)	۰	۳/۵۵۳	۲/۲۶۲	۵/۱۱۸	۱/۹۶۱
	۶	۳/۴۲۵	۲/۲۹۱	۵/۲۵۰	۲/۲۲۳
ZnSe:Cu(0.75%)@ZnS	۰	۳/۵۴۲	۲/۲۶۵	۵/۱۲۸	۱/۹۸۰
	۶	۳/۲۸۹	۲/۳۳۳	۵/۳۹۸	۲/۵۵۱
ZnSe:Cu(1.5%)	۰	۳/۴۹۲	۲/۲۷۶	۵/۱۷۹	۲/۰۷۹
	۶	۳/۴۰۶	۲/۲۹۶	۵/۲۶۹	۲/۲۶۵
ZnSe:Cu(1.5%)@ZnS	۰	۳/۵۵۲	۲/۲۶۲	۵/۱۱۸	۱/۹۶۱
	۶	۳/۳۲۴	۲/۳۱۵	۵/۳۵۹	۲/۴۶۱

مطابق جدول ۱، تابش مایکروویو روی همه نمونه‌های مورد بررسی، منجر به افزایش مقادیر n، ε و $\chi^{(3)}$ شده است. همچنین افزایش ناخالصی مس، به استثنای نمونه‌های هسته/پوسته بدون تابش مایکروویو و نیز نمونه ZnSe:Cu(1.5%)@ZnS با ۶ دقیقه تابش مایکروویو، $\chi^{(3)}$ را افزایش داده است. می‌توان دید که پوشش ZnS روی هسته‌های ZnSe، به طورکلی، باعث افزایش مقادیر n، ε و $\chi^{(3)}$ شده است. بنابه مقادیر به دست آمده، نمونه ZnSe:Cu(75%)@ZnS با تابش مایکروویو، به دلیل $\chi^{(3)}$ بالاتر و E_g پایین‌تر بهترین گزینه جهت کاربردهای نوری و اپتوالکترونیکی می‌باشد.

نتیجه‌گیری

تابش مایکروویو و تشکیل پوسته ZnS روی هسته‌های ZnSe به طور کلی منجربه افزایش مقادیر n، ε و $\chi^{(3)}$ برای همه نانوبلورها گردید. ضریب شکست و ثابت دی الکتریک نانوبلورها، با افزایش درصد ناخالصی، عموما روند افزایشی دارند. برای نانوبلورهای سنتز شده، رابطه معکوسی بین گاف انرژی و پذیرفتاری نوری غیر خطی مشاهده گردید.

مرجع‌ها

[۱] N. Priyadharsini, M. Elango, S. Vairam, T. Venkatachalam and M. Thamilselvan; "Effect of temperature and pH on structural, optical and electrical properties of Ni doped ZnSe nanoparticles"; *Optik* **127**, (2016) 7543–7549.

[۲] F. Mirnajafizadeh, D. Ramsey, S. McAlpine, F. Wang, P. Reece and J.A. Stride; "Hydrothermal synthesis of highly luminescent blue-emitting ZnSe(S) quantum dots exhibiting low toxicity"; *Materials Science and Engineering C* ***64***, (2016) 167–172.

[۳] M. Molaei, A.R. Bahador and M. Karimipour; "Green synthesis of ZnSe and core–shell ZnSe@ZnS nancrystals (NCs) using a new, rapid and room temperature photochemical approach"; *Journal of Luminescence* **166**, (2015) 101-105

[۴] Q. Zhang, H.Li and T. Zhai;"ZnSe nanostructures:Synthesis, properties and applications"; *Progress in Materials Science* **83**, (2016) 472–535.

[۵] L. Wang, L. Cao, W. Liu, C. Xia and H. Zhou; "Preparation and characterization of water-soluble ZnSe:Cu/ZnS core/shell quantum dots"; *Applied Surface Science* **280**, (2013) 673– 678.

[۶] M. Liu and L. Li; "Microwave-assisted One-pot Synthesis of Yellow Cu: ZnSe/ZnS Quantum Dots Using Selenium Dioxide Containing Copper Impurity"; *Journal of Optics Applications* **4**, (2015) 1-6.

[۷] S. Ebrahimi, D. Souri and M. Ghabooli; "Third Order Non-linear Optical Susceptibility ($\chi^{(3)}$) and Evaluation of Antibacterial Activity of Cu-Doped ZnSe Nanocrystals Fabricated by Hydro-Microwave Technique"; *Cluster Science* **30**, no. 3 (2019) 1040-7278.

[۸] D. Souri, K. Ahmadian, and A. Khezripour; "Optical Properties of ZnSe Nanocrystals (NCs) Prepared by Microwave Irradiation Method at Different pH and Different Irradiation Times"; *Electronic Materials* **47**, no. 11 (2018) 6759–6766.

[۹] D.Souri and Z.E.Tahan; "A new method for the determination of optical band gap and the nature of optical transitions in semiconductors" ; *Applied Physics B* **119**, no. 2 (2015) 273-279.

[۱۰] O. Amiri, M. Salavati-Niasari, A. Rafiei and M. Farangi; "147% improve efficiency of Dye Synthesized Solar Cells by using CdS QDs and Au Nanorods and Au Nanoparticles"; *The Royal Society of Chemistry* , (2012) 1-8.

[۱۱] V. Dimitrov and S. Sakka; "Electronic oxide polarizability and optical basicity of simple oxides"; *Journal of Applied Physics* **79**, No. 3 (1996) 1736-1740.

[۱۲] H. Ticha and L Tichy; "Semiempirical relation between non-linear susceptibility (refractive index), linear refractive index and optical gap

[۱۳] R. W. Boyd; "*Nonlinear Optics*"; 2th edition, Academic Press. (2003) chapter 1.

[۱۴] M. Molaei, A. R. Khezripour and M. Karimipour; "Synthesis of ZnSe nanocrystals (NCs) using a rapid microwave irradiation method and investigation of the effect of copper (Cu) doping on the optical properties"; *Applied Surface Science* **137**, (2014) 236-240.

[۱۵] R. Adair, L. Chase and S.A. Payne; "Nonlinear refractive index of optical crystals"; *Physical review B* **39**, No. 5 (1989) 3337.

[۱۶] C. Wang; "Empirical Relation between the Linear and the Third-Order Nonlinear Optical Susceptibilities";*Physical Review B* **2**, 2045 (1970).

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

پتانسیل‌های شکل ناوردای ایجادشده توسط یک ابرپتانسیل با تقارن مرکزی

کوهرخی، طه[۱] ؛ محمدی، علی ؛ گرایلو، میترا

[۱]گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه گلستان، گرگان، ایران

چکیده

مطالعه حاضر یک رویکرد تحلیلی وحدت یافته است که در آن برخی از پتانسیلهای شکل ناوردای شناخته شده و همچنین جدید، می توانند توسط یک ابرپتانسیل تولید. از آنجایی که بسیاری از مسائل واقعی در مکانیک کلاسیک و کوانتومی به تقارن مرکزی مرتبط می‌شوند، این نوع از تقارن انتخاب شده است که با یک روش ساده نشان دهد که راهبرد مربوطه چگونه عمل می‌کند. در تقارن مرکزی، پتانسیل گریز از مرکز در نتیجه تکانه‌های زاویه‌ای غیرصفر، در ابعاد اختیاری ظاهر می‌شود. این جمله سبب وحدت پتانسیل‌های شکل ناوردا به یک ابرپتانسیل می‌شود.

واژه‌های کلیدی: *پتانسیل‌های شریک ابرتقارنی، تصویر محدت‌یافته، شکل ناوردا*

Shape Invariant Potentials Produced by a Superpotential with Central Symmetry

Koohrokhi, Taha[1]; Mohammadi, Ali; Gerayloo, Mitra

[1]*Department of Physics, Faculty of Sciences, Golestan University, Gorgan, Iran*

Abstract

The present study is a unified analytical approach in which well-known as well as new shape invariant potentials can be produced by a superpotential. Since many real problems in classical and quantum mechanics are related to the central symmetry, this type of symmetry is chosen to show how the strategy works in a simple way. In the central symmetry, the centrifugal potential is always appeared in arbitrary dimensions due to non-zero angular momenta. This term causes the unification of the shape invariant potentials to a superpotential.

***Keywords**: Supersymmetric partner potentials, Unified Scheme, Shape Invariant*

PACS No. 3

مقدمه

تلاش برای دستیابی به جواب‌های دقیق تحلیلی، همواره از زمان پیدایش مکانیک کوانتومی مورد توجه قرار داشته و به درک بهتر سامانه‌های کوانتومی کمک کرده است. پتانسیل‌های دقیقاً قابل حل، به پتانسیل‌هایی اطلاق می‌شود که همه‌ی ویژه‌مقادیر و ویژه‌توابع آن را به طور صریح بتوان بدست آورد. از جمله روش‌های متداول برای دستیابی به جواب تحلیلی، تبدیل معادله شرودینگر به یک معادله دیفرانسیل فوق هندسی با استفاده از روش نیکیفوروف–اوروواروف، روش تکرار مجانبی و مکانیک کوانتومی ابرتقارنی است [۱–۳]. از بین این روش‌ها، مکانیک کوانتومی ابرتقارنی ابزار قدرتمندی را برای مطالعه رفتار وحدت‌یافته برخی سامانه‌های کوانتومی D–بعدی دقیقاً قابل حل در مختصات کروی فراهم کرده است [۴–۷].

در مکانیک کوانتومی ابرتقارنی نشان داده شده است که معادله شرودینگر تنها برای پتانسیل‌های شکل ناوردا جواب صریح دارد [۸]. پتانسیل‌های شکل ناوردا، پتانسیل‌هایی هستند که نسبت به متغیر اصلی تابعیت یکسان داشته و تفاوتشان تنها در متغیرهای دیگر است. محاسبات انجام‌شده در این مقاله نشان می‌دهد که چند پتانسیل شکل ناوردا در سه بعد با تقارن مرکزی، به یک ابرپتانسیل وحدت می‌یابند.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مکانیک کوانتومی ابرتقارنی برای تقارن مرکزی در سه بعد

در مختصات کروی، یک پتانسیل مرکزی تنها به متغیر شعاعی r بستگی دارد. بنابراین، با جدا کردن متغیرهای زاویه‌ای از تابع موج مانند $\psi_{n\ell m}(r,\theta,\varphi)=R_{n\ell}(r)Y_{\ell m}(\theta,\varphi)$ و تغییر متغیر $R_{n\ell}(r)=r^{-1}u_{n\ell}(r)$، معادله‌ی شعاعی شرودینگر بصورت زیر بدست می‌آید:

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{u''_{\ell}(r)}{u_{\ell}(r)}=V_1(r,\ell) \qquad (1)$$

که زیرنویس"۰" به حالت پایه اشاره دارد و پتانسیل V_1 برابر است با:

$$V_1(r,\ell)=\frac{\hbar^2}{2m}\left\{v(r,\ell)+\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right\} \qquad (2)$$

که در آن:

$$v(r,\ell)=\frac{2m}{\hbar^2}[V(r)-E_{0\ell}] \qquad (3)$$

و $E_{0\ell}$ انرژی حالت پایه پتانسیل $V(r)$ است. این روابط نشان می‌دهند که پتانسیل $V_1(r,\ell)$ انرژی حالت پایه صفر $E_0^{(1)}=0$ دارد که یک شرط لازم برای ابرتقارن ناشکسته محسوب می‌شود. جمله دوم در سمت راست رابطه (۲)، پتانسیل مرکزگریز است که همیشه در مختصات کروی برای تکانه زاویه‌ای غیرصفر ظاهر می‌شود.

در مکانیک کوانتومی ابرتقارنی، با تعریف ابرپتانسیل به صورت مشتق لگاریتمی تابع موج حالت پایه [۸]:

$$W_{1\ell}(r)=-\frac{\hbar}{\sqrt{2m}}\frac{d}{dr}\ln u_{0\ell}(r) \qquad (4)$$

معادله شرودینگر، به عنوان یک معادله دیفرانسیلی درجه دوم به معادله‌ی دیفرانسیل درجه اول تقلیل می‌یابد:

$$W_{1\ell}^2(r)\mp\frac{\hbar}{\sqrt{2m}}W'_{\ell}(r)=V_{1,2}(r,\ell) \qquad (5)$$

که علامت‌های منفی و مثبت به ترتیب به پتانسیل‌های شریک V_1 و V_2 مربوطند. با مقایسه روابط (۲) و (۵) برای پتانسیل V_1، در می‌یابیم که ابرپتانسیل می‌تواند یک شکل کلی به صورت زیر داشته باشد:

$$W_{1\ell}(r)=\frac{\hbar}{\sqrt{2m}}\left\{\omega(r,\ell)-\frac{\ell+1}{r}\right\} \qquad (6)$$

در اینجا $\omega(r,\ell)$ تابعی است که با شرط شکل ناوردایی در موقعیت‌های مختلف تعیین خواهد شد. با جایگزینی این رابطه در رابطه (۵)، پتاسیل‌های شریک برابر می‌شوند با:

$$\begin{cases} V_1(r,\ell)=\frac{\hbar^2}{2m}\{\omega^2(r,\ell)-\omega'(r,\ell) \\ \quad -2\omega(r,\ell)\frac{\ell+1}{r}+\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\} \\ V_2(r,\ell)=\frac{\hbar^2}{2m}\{\omega^2(r,\ell)-\omega'(r,\ell) \\ \quad -2\omega(r,\ell)\frac{\ell+1}{r}+\frac{(\ell+1)(\ell+2)}{r^2}\} \end{cases} \qquad (7)$$

در مکانیک کوانتومی ابرتقارنی، به پتانسیلی شکل ناوردا گفته می‌شود که پتانسیل شریک ابرتقارنی‌اش، وابستگی یکسانی را به متغیر اصلی داشته باشد. بنابراین اگر باقی‌مانده‌ی $R_{1\ell}$ که به صورت زیر تعریف می‌شود، مستقل از r باشد، V_1 و V_2 پتانسیل‌های شکل ناوردا هستند:

$$\begin{aligned} R_{1\ell}&=V_2(r,\ell)-V_1(r,\ell+1) \\ &=\frac{\hbar^2}{2m}\Big\{\omega^2(r,\ell)-\omega^2(r,\ell+1)+\omega'(r,\ell)+ \\ &\omega'(r,\ell+1)+2\omega(r,\ell+1)\frac{\ell+2}{r}- \\ &2\omega(r,\ell)\frac{\ell+1}{r}\Big\} \end{aligned} \qquad (8)$$

اگر وابستگی شعاعی و تکانه زاویه‌ای $\omega(r,\ell)$ مستقل از هم باشند، یعنی $\omega(r,\ell)\equiv f(r)g(\ell)$، و اگر $g(\ell+1)=G(\ell)g(\ell)$ آنگاه باقی‌مانده برابر می‌شود با:

$$\begin{aligned} R_{1\ell}=\frac{\hbar^2}{2m}\Big\{&\omega^2(r,\ell)[1-G^2(\ell)]+\omega'(r,\ell)+ \\ &\omega'(r,\ell)[1+G(\ell)]+2\frac{\omega(r,\ell)}{r}[G(\ell)(\ell+2)]- \\ &(\ell+1)\Big\} \end{aligned} \qquad (9)$$

بنابراین شکل کلی $\omega(r,\ell)$ برای $G(\ell)\neq\pm1$ عبارت است از:

$$\omega(r,\ell)=\left(\frac{B_\ell}{G(\ell)-1}\right)\frac{J(A_\ell+1,B_\ell r)+CY(A_\ell+1,B_\ell r)}{J(A_\ell,B_\ell r)+CY(A_\ell,B_\ell r)} \qquad (10)$$

که در آن J و Y به ترتیب توابع بسل نوع اول و دوم هستند و C یک ثابت دلخواه است. ضرایب A_ℓ و B_ℓ عبارتند از:

$$\begin{cases} A_\ell=\left(\frac{G(\ell)-1}{G(\ell)+1}\right)\frac{2\ell+3}{2} \\ B_\ell=\sqrt{\left(\frac{G(\ell)-1}{G(\ell)+1}\right)\frac{2mR_{1\ell}}{\hbar^2}} \end{cases} \qquad (11)$$

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

حالات خاص

۱) اگر $G(\ell)=\pm 1$

اگر $G(\ell)=1$ آنگاه از رابطه (۹) داریم:

$$R_1=\frac{\hbar^2}{m}\left\{\omega'(r)+\frac{\omega(r)}{r}\right\} \quad (۱۲)$$

با حل این معادله دیفرانسیل درجه اول برای $\omega(r)$ بدست می‌آوریم:

$$\omega(r)=\frac{m}{2\hbar^2}R_1 r+\frac{C}{r} \quad (۱۳)$$

با جایگذاری این نتیجه در رابطه (۵) برای $R_1=2\hbar\omega$، پتانسیل‌های شریک برابر می‌شوند با:

$$\begin{cases} V_1(r,\ell)=\frac{1}{2}\omega^2 r^2+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{C(C+1)+(\ell+1)(\ell-2C)}{r^2}-E_{.\ell} \\ V_2(r,\ell)=\frac{1}{2}\omega^2 r^2+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{C(C+1)+(\ell+2)(\ell+1-2C)}{r^2}-E_{1\ell} \end{cases} \quad (۱۴)$$

بنابراین، مطابق با روابط (۲) و (۳) برای پتانسیل و انرژی حالت پایه و اولین حالت برانگیخته داریم:

$$\begin{cases} v(r)=\frac{1}{2}\omega^2 r^2 \\ E_{.\ell}=\hbar\omega(\ell+3/2-C) \\ E_{1\ell}=\hbar\omega(\ell+5/2-C) \end{cases} \quad (۱۵)$$

که این نتایج با کمیات مربوط به نوسانگر هماهنگ سه بعدی متناظر هستند.

از طرف دیگر برای $G(\ell)=-1$، $\omega(r)$ از رابطه (۹) برابر می‌شود با:

$$\omega(r)=-\frac{m}{2\hbar^2}(2\ell+3)R_{1\ell}r \quad (۱۶)$$

بطور مشابه، با جایگذاری این نتیجه در رابطه (۵)، پتانسیل‌های شریک برای $R_{1\ell}=\frac{\hbar\omega}{2\ell+1}$ برابر می‌شوند با:

$$\begin{cases} V_1(r,\ell)=\frac{1}{2}\omega^2 r^2+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}-E_{.\ell} \\ V_2(r,\ell)=\frac{1}{2}\omega^2 r^2+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{(\ell+1)(\ell+2)}{r^2}-E_{1\ell} \end{cases} \quad (۱۷)$$

که:

$$\begin{cases} v(r)=\frac{1}{2}\omega^2 r^2 \\ E_{.\ell}=-\hbar\omega(\ell+3/2) \\ E_{1\ell}=-\hbar\omega(\ell+5/2) \end{cases} \quad (۱۸)$$

که این نتیجه با پتانسیل نوسانگر هماهنگ سه بعدی، با انرژی منفی متناظر است.

۲) اگر $G(\ell)=\frac{\ell+1}{\ell+2}$

با این شرط، باقی‌مانده برابر می‌شود با:

$$R_{1\ell}=\frac{\hbar^2(2\ell+3)}{2m(\ell+2)}\left\{\frac{\omega^2(r,\ell)}{\ell+2}+\omega'(r,\ell)\right\} \quad (۱۹)$$

$\omega(r,\ell)$ برابر می‌شود با:

$$\omega(r,\ell)=k_{.\ell}(\ell+1)\tanh\{k_{.\ell}(r+C)\} \quad (۲۰)$$

که در آن:

$$k_{.\ell}^2=\frac{2mR_{1\ell}}{\hbar^2(2\ell+3)} \quad (۲۱)$$

در نتیجه، پتانسیل‌های شریک برابر می‌شوند با:

$$\begin{cases} V_1(r,\ell)=\frac{\hbar^2 k_{.\ell}^2}{2m}(\ell+2)(\ell+3)\tanh^2\{k_{.\ell}(r+C)\} \\ \quad -\frac{\hbar^2 k_{.\ell}^2}{m}(\ell+1)(\ell+2)\frac{\tanh(k_{.\ell}(r+C))}{r}+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}-E_{.\ell} \\ V_2(r,\ell)=\frac{\hbar^2 k_{.\ell}^2}{2m}(\ell+2)(\ell+3)\tanh^2\{k_{.\ell}(r+C)\} \\ -\frac{\hbar^2 k_{.\ell}^2}{m}(\ell+1)(\ell+2)\frac{\tanh(k_{.\ell}(r+C))}{r}+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{(\ell+1)(\ell+2)}{r^2}-E_{1\ell} \end{cases} \quad (۲۲)$$

بنابراین، مطابق با روابط (۲) و (۳) برای پتانسیل و انرژی حالت پایه و اولین حالت برانگیخته داریم:

$$\begin{cases} v(r,\ell)=\frac{\hbar^2 k_{.\ell}^2}{2m}(\ell+2)(\ell+3)\tanh^2\{k_{.\ell}(r+C)\} \\ \quad -\frac{\hbar^2 k_{.\ell}^2}{m}(\ell+1)(\ell+2)\frac{\tanh(k_{.\ell}(r+C))}{r} \\ E_{.\ell}=\frac{\hbar^2 k_{.\ell}^2}{2m}(\ell+2) \\ E_{1\ell}=\frac{\hbar^2 k_{.\ell}^2}{2m}(\ell+3) \end{cases} \quad (۲۳)$$

۳) اگر $\omega(r,\ell)$ مستقل از r باشد

اگر $\omega(r,\ell)$ مستقل از r باشد، از رابطه (۹) داریم:

$$R_{1\ell}=\frac{\hbar^2}{2m}\Big\{\omega^2(\ell)-\omega^2(\ell+1)+2\omega(r,\ell+1)\frac{\ell+2}{r}-2\omega(r,\ell)\frac{\ell+1}{r}\Big\} \quad (۲۴)$$

در این حالت، $R_{1\ell}$ تنها زمانی یک ثابت است که قسمت وابسته به مختصه شعاعی آن صفر شود:

$$2\omega(\ell+1)\frac{\ell+2}{r}-2\omega(\ell)\frac{\ell+1}{r}=0 \quad (۲۵)$$

در نتیجه:

$$\omega(\ell+1)=\omega(\ell)\frac{\ell+1}{\ell+2} \quad (۲۶)$$

از رابطه، $\omega(\ell)$ بدست می‌آید:

$$\omega(\ell)=(\ell+2)\sqrt{\frac{2mR_{1\ell}}{\hbar^2}} \quad (۲۷)$$

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

با جایگذاری این نتیجه در رابطه (۵)، پتانسیل کولنی بدست می‌آید:

$$V_1(r,\ell) = -\frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r} + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - E_{0,\ell} \qquad (۲۸)$$

که در آن:

$$\begin{cases} R_{1\ell} = \frac{m}{2\hbar^2}\left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\varepsilon_0 (\ell+1)(\ell+2)}\right)^2 \\ E_{0,\ell} = -\frac{m}{2\hbar^2}\left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\varepsilon_0 (\ell+1)}\right)^2 \end{cases} \qquad (۲۹)$$

نتیجه‌گیری

محاسبات انجام‌شده در این مقاله نشان می‌دهد که یک ابرپتانسیل واحد (رابطه ۶) می‌تواند تعدادی از پتانسیل‌های معروف مانند نوسانگر هماهنگ (رابطه ۱۵) و کولنی (رابطه ۲۸) و همچنین پتانسیل‌های جدید (رابطه ۲۳) را در شرایط مختلف ایجاد کند. اگرچه این محاسبات در مختصات کروی سه بعدی با تقارن مرکزی انجام شده است، اما به راحتی می‌توان آن‌ها را به ابعاد اختیاری D تعمیم داد.

روابط (۱۰) و (۱۱) نشان می‌دهند که اگر ضریب $B_\ell = 0$ باشد، باقی‌مانده $R_{1\ell}$ نیز صفر است و در این صورت ابرتقارن شکسته می‌شود. این بدان معناست که هیچ پتانسیل شریک و در نتیجه سامانه مقیدی نمی‌تواند از ابرپتانسیل (۶) حاصل شود.

در یک محاسبات کامل‌تر، شرط تقارن مرکزی را می‌توان حذف و در یک حالت کلی‌تر، وابستگی زاویه‌ای پتانسیل را نیز لحاظ کرد.

مرجع‌ها

[۱] H. Ciftci, R. L. Hall and N. Saad, Asymptotic Iteration Method for Eigenvalue Problems. Journal of Physics A: Mathematical and General, ۳۶, ۱۱۸۰۷-۱۱۸۱۶ (۲۰۰۳).
[۲] A. F. Nikiforov and V. B. Uvarov, Special Functions of Mathematical Physics. Birkhauser, Basel (۱۹۸۸).
[۳] G. Levai, B. Konya and Z. Papp, J. Math. Phys. ۳۹, ۵۸۱۱ (۱۹۹۸).
[٤] S. H. Dong, Wave Equations in Higher Dimensions, Springer, New York,(۲۰۱۱).
[٥] S. H. Dong, J. Phys. A, Math. Gen. ۳٦, ٤۹۷۷ (۲۰۰۳).
[٦] S. H. Dong and G.H. Sun, Phys. Scr. ۷۰, ۹٤ (۲۰۰٤).
[۷] K. J. Oyewumi, F. O. Akinpelu and A. D. Agboola, Int. J. Theor. Phys. ٤۷, ۱۰۳۹ (۲۰۰۸).
[۸] A. Gangopadhyaya, J. Mallow and C. Rasinariu, Supersymmetric Quantum Mechanics: An Introduction, ۲nd Edition, World Scientific (۲۰۱۷).

هم‌بستگی میان معیارهای آماری در زبان بشر: بررسی موردی ترجمه‌های انجیل

مهری، علی؛ جماعتی، مریم

گروه فیزیک، دانشگاه صنعتی نوشیروانی، بابل، ایران

چکیده

هم‌بستگی‌های بلندبرد آماری از نمودهای پیچیدگی سامانه‌های بس‌ذره‌ای به شمار می‌آیند. قوانین زیف و هیپس، رفتار فرکتالی و محتوای اطلاعاتی (آنتروپی) پیچیدگی زبان بشر به عنوان پیشرفته‌ترین ابزار ارتباطی را آشکار می‌سازند. ما برای آشکار نمودن رابطه‌ی میان نمای زیف، نمای هیپس، بعد فرکتالی و آنتروپی در زبان بشر، برای صد ترجمه از کتاب انجیل آن‌ها را استخراج نمودیم و ضریب هم‌بستگی پیرسون را برای هر جفت ممکن از چهار معیار ذکر شده محاسبه نمودیم. با توجه به هم-بستگی/پادبستگی میان معیارها می‌توان گفت که غنای ذخیره‌ی واژگانی زبان (بزرگ بودن نمای هیپس) توزیع ناهمگن‌تر واژگان در نوشتار (کوچک بودن آنتروپی و بزرگ بودن بعد فرکتالی) را در پی دارد.

Correlation between statistical metrics in human language: A case study of the Bible translation

Mehri, Ali; Jamaati, Maryam

Department of Physics, Babol Noshirvani University of Technology, Babol, Iran

Abstract

Long-range statistical correlations are manifestations of complexity in many-body systems. Zipf's and Heaps' laws, fractality and information content (entropy) reveal the complexity of human language as the most advanced communication system. To identify the relationship between Zipf's exponent, Heaps' exponent, fractal dimension and entropy in human language, we extract them from one hundred translations of the holy Bible and calculate Pearson correlation coefficient for each possible pair of the mentioned statistical criteria. Due to the correlation/anti-correlation between the criteria, it can be concluded that the rich vocabulary of language (high Heaps' exponent) leads to more heterogeneous distribution of words in the text (low entropy and high fractal dimension).

PACS No.: 05, 80, 89

پیش‌گفتار

حدود هفت هزار زبان گفتگوی زنده در سراسر جهان وجود دارد که بنا به روابط تبارشناسی در چندین خانواده زبانی دسته‌بندی شده‌اند [۱و۲]. قوانین دستوری مختلف مانند ترکیب واژگان زبان، آن‌ها را از هم مجزا می‌نماید. به طور کلی برهم کنش‌های بلندبرد در توالی نمادها، محتوای اطلاعاتی آن‌ها را آشکار می‌سازد.

روابط توانی میان اجزای یک سامانه هم‌بستگی بلندبرد میان آن‌ها را آشکار می‌سازد. پژوهش‌ها نشان داده‌اند که شمار زیادی از پدیده‌ها از روابط توانی پیروی می‌کنند [۳]. این روابط به شکل گسترده در بسیاری از حوزه‌های زبانی نیز پدیدار می‌شوند [٤].

به نظر می‌رسد که توزیع‌های مرتبط با زبان تقریبا توانی هستند و همه این توزیع‌ها دم بلندی با بخش بزرگی از انواع نادر را شامل می‌شوند. تجزیه و تحلیل آماری قوانین زبانی، رابطه بلندبرد میان مؤلفه‌های زبان را نشان می‌دهد [۵]. چهار معیار معروف آماری نمای زیف، نمای هیپس، آنتروپی و بعد فرکتالی برای بررسی ویژگی‌های زبانی به کار گرفته می‌شوند. در این پژوهش قصد داریم هم‌بستگی میان این چهار معیار آماری را در صد زبان زنده بشری

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بررسی نماییم. بدین منظور از ترجمه انجیل به صد زبان زنده بشری بهره خواهیم برد [٦].

معیارهای آماری در زبان بشر

- **آنتروپی**

واژه‌ها با الگوی ویژه‌ای در متن پخش می‌شوند تا یک پیام مشخص را منتقل نمایند. چنین توزیعی به هم‌بستگی بلندبرد در میان واژگان یک جمله معنی‌دار منجر می‌شود. آنتروپی می‌تواند به عنوان معیاری از میزان اطلاعات منتقل شده توسط زبان به کار رود [۷]. قدم مهم در محاسبه‌ی آنتروپی تعریف احتمال برای رخدادهای گوناگون در یک سامانه آماری است. در بررسی زبان می‌توان احتمال را به صورت فاصله‌ی نسبی میان رخدادهای متوالی واژه‌ها تعریف کرد: $p_i(w) = d_i(w)/N_t$، که $d_i(w)$ فاصله رخداد متوالی یک کلمه در متن است و N_t طول متن است. آنتروپی بهنجار شده‌ی شنون برای هر واژه در یک متن بر حسب توزیع فضایی آن در متن از رابطه‌ی زیر محاسبه می‌شود:

$$S(w) = \frac{1}{\log(M)} \sum_{i=1}^{M} p_i\,(w) \log[p_i(w)^{-1}] \qquad (1)$$

M شمار رخدادهای واژه‌یw در نوشتار است. میانگین آنتروپی برای هر متن H نیز با تقسیم کردن مجموع آنتروپی واژگان آن بر شمار واژگان لغت‌نامه‌اش (N_v) به دست می‌آید.

- **قانون زیف**

قانون زیف، به عنوان معروف‌ترین قانون زبانی، توزیع توانی میان فراوانی اجزای زبان را توصیف می‌کند [۸]. این قانون تجربی بیان می‌کند که فراوانی یک عبارت با رتبه‌ی آن در جدول فراوانی نسبت عکس دارد. اگر واژه‌ها در زبان با توجه به دفعات تکرارشان به ترتیب نزولی رتبه‌بندی شوند، فرکانس هر کلمه، f، به شکل توانی با رتبه‌اش، r، نسبت عکس دارد.

$$f(r) \propto r^{-\zeta} \qquad (2)$$

ζ نمای زیف و مقدار آن برای متن‌های نوشته شده توسط بشر نزدیک به یک است.

- **قانون هیپس**

در حوزه زبان‌شناسی، قانون هیپس بر نحوه‌ی رشد کلیدواژگان با اندازه نوشتار دلالت دارد و رابطه‌ی آن به شکل زیر است [۹]:

$$N_v \propto N_t^{\beta} \qquad (3)$$

که N_v تعداد کلمات متفاوت در متن را وقتی طول آن برابر N_t است، نشان می‌دهد. β نیز نشان دهنده نمای هیپس است.

- **بعد فرکتالی**

بعد فرکتالی یک شاخص آماری از پیچیدگی است که نشان می‌دهد چگونه جزییات یک الگو با تغییر اندازه‌ی سامانه تغییر می‌نماید [۱۰]. زبان نیز به عنوان یک ساختار پیچیده‌ی فرکتالی به شمار می‌آید. ما از روش جعبه‌شماری برای محاسبه‌ی بعد فرکتالی (D) واژه‌ها بهره می‌بریم [۱۱].

$$\frac{n_l(w)}{N_l} \propto \left(\frac{l}{N_t}\right)^{D} \qquad (4)$$

در این رابطه $n_l(w)$ شمار جعبه‌های با طول l است که واژه‌ی w را در خود دارند. N_l شمار کل جعبه‌های با طول l و N_l طول متن برای بهنجار کردن رابطه به کار رفته‌اند. D برای هر واژه مقادیری میان صفر و یک دارد و میانگین آن برای هر متن با تقسیم کردن مجموع بعد فرکتالی کلیدواژگانش بر شمار کلیدواژگانش (N_v) به دست می‌آید.

- **ضریب همبستگی**

ضریب همبستگی معیاری از نحوه‌ی رابطه‌ی متقابل میان متغیرهای آماری فراهم می‌آورد [۱۲]. ضریب همبستگی پیرسون میان دو متغیر تصادفی X و Y با مقادیر میانگین μ_X و μ_Y به شکل زیر تعریف می‌شود:

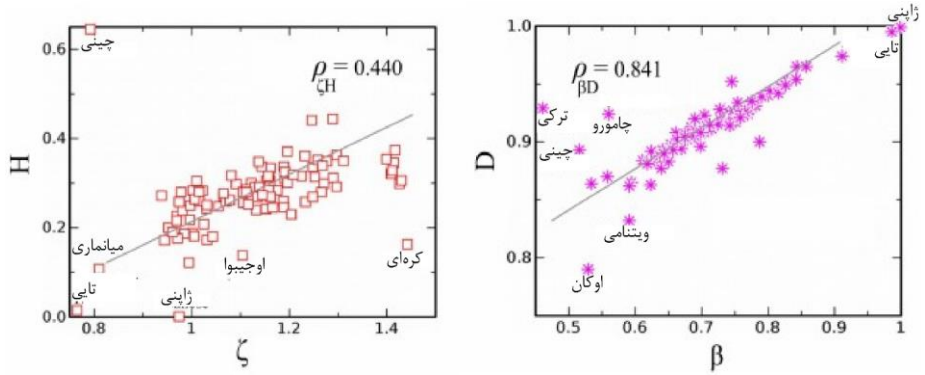
$$\rho_{XY} = \frac{E[(X-\mu_X)(Y-\mu_Y)]}{\sigma_X \sigma_Y} \qquad (5)$$

که σ_X و σ_Y انحراف معیار متغیرهای تصادفی هستند و E بیانگر امید ریاضی است.

استخراج معیارهای آماری از زبان و مقایسه آن‌ها

ما قصد داریم معیارهای آماری ذکر شده را برای صد ترجمه از کتاب انجیل استخراج کرده و هم‌بستگی میان آن‌ها را بررسی کنیم. نمای

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



شکل ۱: رابطه میان (چپ) آنتروپی و نمای زیف و میان (راست) بعد فرکتالی و نمای هیپس استخراج شده از یکصد ترجمه انجیل. هر دو جفت معیار با هم هم‌بستگی مثبت دارند. میزان همبستگی بعد فرکتالی و نمای هیپس بیشتر از هم‌بستگی میان آنتروپی و نمای زیف است.

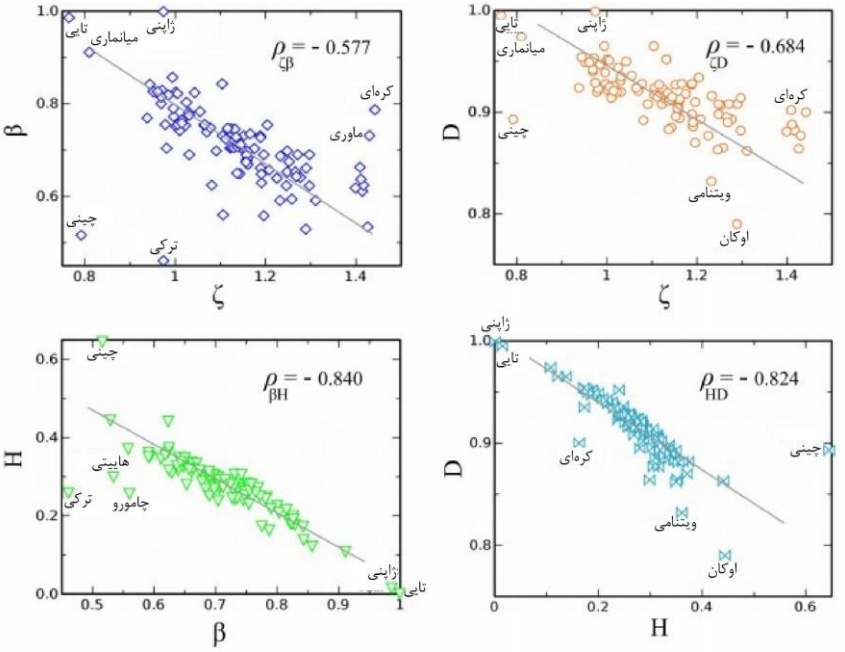
زیف، نمای هیپس و بعد فرکتالی به کمک برازش داده‌ها با تابع توانی به دست می‌آیند. ما در همه‌ی برازش‌ها شرط $R^2 \geq 0.99$ را برای اطمینان از دقت بالای نتایج در نظر می‌گیریم. اگر دو معیار آماری برحسب هم رسم شوند، علامت شیب خط توصیف کننده‌ی نمودار، بیان‌گر مثبت یا منفی بودن هم‌بستگی میان آنهاست.

آنتروپی و نمای زیف در نمودار سمت چپ شکل۱ و بعد فرکتالی و نمای هیپس در نمودار سمت راست آن برحسب هم رسم شده‌اند. همان‌گونه که پیداست این دو جفت معیار آماری با هم هم‌بستگی مثبت دارند. به دیگر سخن با افزایش نمای هیپس بعد فرکتالی و با افزایش نمای زیف آنتروپی افزایش می‌یابد. استفاده از تعداد بیشتری از واژگان دستوری منجر به افزایش نمای زیف می‌شود. این بدان معناست که، زبان‌های با نمای زیف بزرگ‌تر، به عنوان مثال زبان‌های کره‌ای و مائوری، شمار بیشتری واژه‌ی دستوری را در هر جمله به کار می‌برند. از سوی دیگر نمای زیف کوچک در زبان‌های چینی و تایلندی بدین معنی است که آن‌ها از واژگان دستوری کم‌تری برای بیان جمله‌ها بهره می‌برند. غنای واژگان، به عنوان خصیصه‌ی دیگر زبان با قانون هیپس قابل تعیین است. زبان‌هایی که دارای نمای هیپس بزرگ‌تری هستند از کلیدواژه‌های بیشتری برای بیان یک مفهوم مشترک استفاده می‌کنند. بررسی‌ها نشان می‌دهند که زبان‌هایی مانند ژاپنی و تایلندی از شرق آسیا با بالاترین مقدار نمای هیپس دارای ثروتمندترین مجموعه کلیدواژگان هستند. در مقابل، زبان‌های چینی و ترکی از خانواده‌های سینو تبت و آلتائیک، مجموعه واژگان ضعیفی را برای بیان یک مفهوم به کار می‌برند. ضرایب هم‌بستگی به دست آمده، به ویژه مقادیر بالای قدر مطلق آن‌ها، حاکی از ارتباط آماری میان مقادیر ذکر شده است. همبستگی مثبت میان نمای زیف و آنتروپی از این واقعیت سرچشمه می‌گیرد که افزایش بیشتر واژگان دستوری منجر به توزیع یکنواخت‌تر واژگان در نوشتار می‌شود. همچنین هم‌بستگی میان نمای هیپس و بعد فرکتالی بر این واقعیت دلالت می‌کند که غنای واژگان منجر به توزیع ناهمگن واژه‌ها در متن می‌شود. همچنین مشاهده می‌کنیم که شدت هم‌بستگی میان نمای هیپس و بعد فرکتالی بیشتر از همبستگی نمای زیف و آنتروپی است.

برای درک بهتر نحوه‌ی ارتباط این ویژگی‌های آماری با یکدیگر، روابط متقابل بقیه‌ی جفت‌ها که با یکدیگر هم‌بستگی منفی (پادبستگی) دارند، در شکل۲ رسم شده‌اند. نتایج نشان می‌دهند که زبان‌های چینی و اوکان به دلیل توزیع یکدست‌تر کلیدواژگان‌شان، مقدار آنتروپی بالایی دارند. اما زبان‌های ژاپنی و تایلندی با توزیع ناهمگن واژگان، کم‌ترین مقدار آنتروپی را دارند. جالب است که این دو زبان به دلیل توزیع ناهمگن کلیدواژگان‌شان از بالاترین میانگین بعد فرکتال برخوردارند. هم‌بستگی مثبت نمای هیپس و بعد فرکتالی بر رابطه‌ی میان بعد فرکتالی و آنتروپی اثرگذار است. همان‌طور که در ادامه خواهیم دید، توزیع یکنواخت‌تر واژگان منجر به مقدار بالاتر آنتروپی و بعد فرکتالی کوچک‌تر می‌شود. این تقابل آماری در رابطه پادبستگی معنی‌دار آن‌ها مشاهده می‌شود.

رابطه‌ی پادبستگی میان نمای هیپس و نمای زیف، و میان نمای هیپس و آنتروپی از این واقعیت ناشی می‌شود که واژگان غنی‌تر عموماً منجر به فراوانی کمتر برای کلیدواژگان در نوشتار می‌شود. هم‌چنین در نمودار زبان‌هایی هم‌چون ژاپنی، چینی، تایلندی،

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



شکل۲: رابطه‌ی میان کمیت‌های آماری استخراج شده از صد ترجمه‌ی کتاب انجیل. هم‌بستگی میان همه‌ی جفت معیارهای این شکل منفی است. آنتروپی و نمای هیپس بزرگ‌ترین پادبستگی را با یکدیگر دارند. نام برخی زبان‌ها که مقدار کمیت‌های آماری استخراج شده‌ی آن‌ها نامتعارف بوده یا در مرزهای بازه‌ی حاصل قرار دارد، در نمودارها نوشته شده است.

میانماری، کره‌ای و ترکی را مشاهده می‌کنیم که از روال عمومی اغلب زبان‌ها پیروی نمی‌کنند. دلیل این رفتار آماری متفاوت، خاص بودن نقش‌های گرامری آن‌هاست که ریشه در شرایط تاریخی، فرهنگی و جغرافیایی‌شان دارد [۱۳].

نتیجه‌گیری

در این پژوهش هم‌بستگی میان چهار معیار آماری نمای زیف، نمای هیپس، آنتروپی و بعد فرکتالی استخراج شده از صد ترجمه‌ی کتاب انجیل بررسی شد. مشاهده کردیم که جفت‌های (نمای هیپس، بعد فرکتالی) و (نمای زیف، آنتروپی) هم‌بستگی مثبت دارند (شکل۱)، در حالی که دیگر جفت‌ها هم‌بستگی منفی (پادبستگی) دارند (شکل۲). بزرگ‌ترین هم‌بستگی میان بعد فرکتالی و نمای هیپس ($\rho_{\beta D} = 0.841$) دیده می‌شود، که ارتباط تنگاتنگ توزیع ناهمگن واژگان در نوشتار با غنای کلیدواژگان زبان را آشکار می‌سازد. از سوی دیگر بیش‌ترین پادبستگی میان آنتروپی و نمای هیپس ($\rho_{\beta H} = 0.840$) هم تاییدی است بر تاثیر غنای کلیدواژگان زبان بر نحوه‌ی توزیع واژه‌ها در نوشتار. این هم‌بستگی‌ها نحوه‌ی عملکرد معیارهای بررسی شده و ارتباط آماری میان آن‌ها را آشکار می‌سازد.

مرجع‌ها

[1] P.K. Austin, J. Sallabank; The Cambridge Handbook of Endangered Languages; Cambridge University Press, Cambridge, 2011.
[2] D.M. Eberhard, G.F. Simons, C.D. Fennig (eds.); Ethnologue: Languages of the World (22nd ed.); SIL International, Dallas, 2019.
[3] A. Clauset, C.R. Shalizi, M.E.J. Newman; SIAM Review 51 (2009) 661.
[4] R. Sharman; Observational evidence for a statistical model of language, IBM UK SC Report 205 (1989).
[5] M. Kalimeri, et al.; Journal of Quantitative Linguistics 22(2) (2015) 101.
[6] http://christos-c.com/bible/
[7] C.E. Shannon; Bell System Technical Journal 27 (1948) 379.
[8] G. Zipf; Human Behavior and the Principle of Least Effort: An introduction to Human Ecology; Addison-Wesley Press, Cambridge, 1949.
[9] H.S. Heaps; Information Retrieval: Computational and Theoretical Aspects; Academic Press, New York, 1978.
[10] K. Falconer, Fractal Geometry, 2nd ed.; John Wiley & Sons, Chichester, 2003.
[11] A. Mehri, M. Jamaati, H. Mehri, Phys. Lett. A 379 (2015) 1627.
[12] K. Pearson, Philosophical Transactions of the Royal Society A 187 (1896) 253.
[13] R.D. Gray, Q.D. Atkinson, S.J. Greenhill; Philosophical Transactions of the Royal Society B 366(1567) (2011) 1090.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

تصحیح تابشی انرژی کازیمیر برای تئوری ϕ^4 در یک مستطیل

ولوئیان ، مددعلی

دانشکده فیزیک، واحد سمنان، دانشگاه آزاد اسلامی، سمنان، ایران

چکیده

در این مقاله، خلاصه ای از محاسبهٔ انرژی کازیمیر برای میدانِ اسکالرِ محدود شده با شرط مرزیِ دیریکله در یک مستطیل در ۱+۲ بعد ارائه گردیده است. روش بازبهنجارشِ بکارگرفته شده در این محاسبه، روشی است که به صورت خودکار اجازه می دهد تا اثرات ناشی از شرایط مرزی در کانترترم انعکاس یابد. به این معنا که، ما در این روش جهت حذف واگرایی‌های ناشی از پارامترهای برهنهٔ لاگرانژی از کانترترم مربوط به فضای آزاد(بدون شرط مرزی)، استفاده نمی کنیم و بجای آن، کانترترم‌های وابسته به مکان استفاده می شود. همچنین برای حذف واگرایی های ناشی از انرژی خلا نیز از منظم سازی کم کردن جعبه ها استفاده شده است. پاسخ به دست آمده در مرتبه اول تصحیح تابشی برای اولین بار در یک مستطیل صورت پذیرفته و در کلیه حدهای لازم نیز مورد ارزیابی قرار گرفته است و این ارزیابی نشان داده است که کلیه انتظارات لازم و فیزیکی را بنحو درستی برآورده می کند.

واژه های کلیدی: *انرژی کازیمیر، تصحیح تابشی، کانترترم، بازبهنجارش، منظم سازی.*

Radiative Correction to the Casimir Energy for the ϕ^4 Theory in a Rectangle

Valuyan, Madad Ali

Department of Physics, Semnan Branch, Islamic Azad University, Semnan, Iran

Abstract

In this paper, we present the radiative correction to the Casimir energy for massive and massless scalar field confined in a rectangle. This calculation procedure was conducted in two spatial dimensions and for the case of the first-order correction term this procedure is new. The renormalization program that we have used in this work allows all influences from the dominant boundary conditions (e.g. the Dirichlet boundary condition) to be automatically reflected in the counterterms. This permission usually makes the counterterm position-dependent. Along with the renormalization program, a supplementary regularization technique was performed in this work. In this regularization technique, that we have named Box Subtraction Scheme (BSS), two similar configurations were introduced and the zero point energies of these two configurations were subtracted from each other using appropriate limits. Finally, all the necessary limits of the obtained answers for both massive and massless cases are discussed.

***Keywords**: Casimir Energy, Radiative Correction, Counterterm, Renormalization, Regularization*

PACS No. 11.10.-z, 11.10.Gh, 03.70.+k, 42.50.Lc

مقدمه

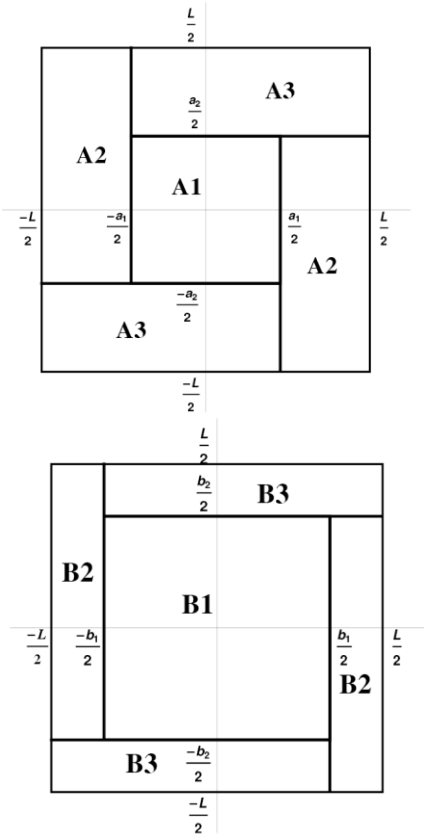
اولین بار توسط برداگ و همکاران ایشان در سال ۱۹۸۵ تصحیحات تابشی انرژی کازیمیر مورد بررسی واقع گردید، و توجه به این مقوله در سالهای بعد نیز ادامه یافته است[۱]؛ معمولاً آن چیزی که در محاسبه تصحیحات تابشی انرژی کازیمیر اهمیت دارد و موجب تاثیرات شگرف در جوابها می‌گردد، نحوه بازبهنجارش پارامترهای برهنه‌ی موجود در لاگرانژی است (به عنوان مثال: جرم میدان و یا ثابت جفت‌شدگی). کانترترم‌ها[۱] وظیفه بازبهنجارشِ

[۱] Counterterm

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

پارامترهای برهنه موجود در لاگرانژی را برعهده دارند و درواقع این کانترترم‌ها هستند که در برنامه بازبهنجارش[۲] واگرایی‌های ناشی از این پارامترها را در خود هضم کرده و پارامترهای فیزیکیِ لاگرانژی را بدست می دهند. در اجرای برنامه بازبهنجارش در بسیاری از مقالات گذشته حتی در مسائلی که میدان کوانتومی در آنها تحت اثر یک شرط مرزی بوده است، از کانترترم‌های فضای آزاد برای بازبهنجارش کمیت‌های برهنه استفاده شده است [۳-۲]. اما نظر دیگری نیز در این زمینه وجود دارد و آن این است که، اگر در مساله‌ای میدانهای کوانتومی تحت اثر یک شرط مرزی قرار دارند، باید برنامه بازبهنجارش مربوط به این میدان‌ها نیز بگونه‌ای اجرا شود که با شرط مرزی اعمال شده، سازگار باشد؛ و در واقع استفاده ازکانترترم مربوط به فضای آزاد در هر مسأله ای بدون توجه به شرط مرزی حاکم بر آن نمی تواند صحیح باشد. حتی ممکن است عدم انتخاب صحیح کانترترم باعث گردد برنامه بازبهنجارش بدرستی عمل نکرده و در نهایت برای تعدادی از کمیتهای فیزیکی (به عنوان مثال انرژی کازیمیر) مقادیر واگرا بدست آید [٤]. برای اولین بار در مقالاتی چون [٥] روش بازبهنجارشی معرفی گردید که در آن شرط مرزی حاکم بر مساله در برنامه بازبهنجارش به صورت سیستماتیک و سازگار ورود یافته و این ورود منجر به بدست آمدن کانترترم‌های وابسته به مکان در برنامه بازبهنجارش شده است. در این مقاله نیز با استفاده از روش بازبهنجارش مذکور، تصحیح تابشی انرژی کازیمیر را برای میدان اسکالر جرمدار تعریف شده در نظریه ϕ^4 در یک مستطیل با شرط مرزی دیریکله ارائه خواهیم کرد و پاسخ بدست آمده نیز با مبانی قابل انتظار فیزیکی کاملاً سازگار است.

جهت حذف واگرایی‌های موجود در فرایند محاسبات انرژی کازیمیر، استفاده از روشهای منظم سازی اجتناب‌ناپذیر است. از آنجائیکه نوع واگرایی های ظاهر شده در مسائلی که در فضای دوبعدی مطرح هستند به صورت لگاریتمی است، این امر به دشواری های فرایند منظم سازی می افزاید. اما در این مقاله، با استفاده از روش منظم سازی کم کردن جعبه ها به خوبی بر این دشواری ها فائق آمده و کلیه محاسبات تصحیح تابشی انرژی کازیمیر با استفاده از روش منظم سازی مذکور انجام پذیرفته است. برای محاسبه انرژی کازیمیر با استفاده از این روش، معمولاً دو ساختار مشابه در نظر گرفته می شود، و اختلاف انرژی های خلا این دو ساختار از هم محاسبه می شوند. به عنوان مثال، برای محاسبه انرژی کازیمیر یک مستطیل با ابعاد $a_1 \times a_2$ ، آنرا در مربع دیگری با ابعاد $L \times L$ محبوس می کنیم. نام این ساختار را به مانند آنچه در شکل (۱) نشان داده شده است، با عنوان ساختار A در نظر گرفته شده است.



شکل۱ : ساختار رسم شده در بالا ساختار A و ساختار رسم شده در پایین ساختار B را نشان می دهد.

ساختار B نیز به مانند ساختار A معرفی می شود. در ساختار B نیز یک مستطیل با مقطع $b_1 \times b_2$ در مربع دیگری با ابعاد $L \times L$ محبوس می‌گردد. حال می توان انرژی کازیمیر را بصورت زیر تعریف کرد:

$$E_{\text{Cas.}} = \lim_{b_1/a, b_2/a \to \infty} \lim_{L/b \to \infty} (E_A - E_B) \qquad (۱)$$

که در آن E_A و E_B انرژی خلا مربوط به دو ساختار A و B است و $a = Max\{a_1, a_2\}$ و $b = Max\{b_1, b_2\}$ می باشد. می توان نشان داد که در حد ذکر شده در معادله (۱)، تقسیم بندی های

[۲] Renormalization Program

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

ایجاد شده در نواحی میانی مستطیل و مربع، در حذف واگرایی‌های ناشی از انرژی خلا نقش موثری ایفا می‌کنند و در نهایت نیز خطوط اضافه نشان داده شده در نواحی مابین دو مستطیل و مربع، سهمی در انرژی کازیمیر مستطیل اصلی(مستطیل با ابعاد $a_1 \times a_2$) نخواهد داشت.

مرتبه صفرم و اول انرژی کازیمیر

با استفاده از لاگرانژی کلاین – گوردون و یافتن میدان کوانتومی از معادله حرکت مرتبط با این لاگرانژی و اعمال شرایط مرزی دیریکله روی سطح مستطیل با مساحت $S = a_1 \times a_2$ و انجام محاسبات مربوطه می توان انرژی خلا را تا مرتبه اول تصحیح تابشی بصورت زیر نوشت:

$$E_{\text{Vac.}} = E^{(0)}_{\text{Vac.}} + E^{(1)}_{\text{Vac.}} = \frac{1}{2}\sum_{n_1,n_2=1}^{\infty} \omega(a_1,a_2) + \frac{-\lambda}{8}\int_S G^2(x^\mu,x^\mu)dS \quad (۲)$$

که در آن $\omega^2(a_1,a_2) = \left(\frac{n_1\pi}{a_1}\right)^2 + \left(\frac{n_2\pi}{a_2}\right)^2 + m^2$ فرکانس‌های مجاز پس از اعمال شرایط مرزی می باشند و تابع $G(x^\mu,x'^\mu)$ نیز تابع گرین می‌باشد. منظور از مختصه $x^\mu = (t,x,y)$ است و پارامتر λ و m نیز به ترتیب نشان دهنده ثابت جفت شدگی در نظریه ϕ^4 و جرم میدان اسکالر است. فرم تابع گرین برای یک میدان اسکالر محدود شده با شرط مرزی دیریکله در یک مستطیل با مقطع $a_1 \times a_2$ به صورت زیر خواهد شد:

$$G_{A1}(x^\mu,x^\mu) = \frac{2}{a_1 a_2} \times \sum_{n_1,n_2=1}^{\infty} \frac{\sin(\frac{n_1\pi}{a_1}(x+\frac{a_1}{2}))^2 \sin(\frac{n_2\pi}{a_2}(y+\frac{a_2}{2}))^2}{\omega(a_1,a_2)} \quad (۳)$$

با استفاده از تعریف ارائه شده از انرژی کازیمیر در معادله (۱) لازم است انرژی خلا برای همه ناحیه های نشان داده شده در شکل (۱) بدست آورده و سپس اختلاف انرژی های خلا دو ساختار A و B از هم محاسبه گردد. انجام این رویه برای جمله اول در سمت راست معادله (۲) منجر به یافتن مرتبه صفرم از تصحیح تابشی انرژی کازیمیر می گردد. با انجام کلیه جزئیات مربوط به این محاسبات که البته در مقاله [٦] نیز گزارش شده است، خواهیم داشت:

$$E^{(0)}_{\text{Cas.}} = \frac{1}{4}[\sum_{n=1}^{\infty} B_1(a_1,a_2) + B_2(a_1) + B_3(a_1,a_2) + \{a_1 \leftrightarrow a_2\}] \quad (٤)$$

که در آن

$$B_1(x,y) = \frac{-1}{\pi}\sum_{j=1}^{\infty}\frac{S_n(x)K_1\big(2yjS_n(x)\big)}{j}$$

$$B_2(x) = \frac{m}{2\pi}\sum_{j=1}^{\infty}\frac{K_1(2mxj)}{j}$$

$$B_3(x,y) = \frac{-y}{8\pi x^2}\sum_{j=1}^{\infty}\frac{(1+2mxj)e^{-2mxj}}{j^3} \quad (٥)$$

و تابع $S_n^2(x) = (n\pi/x)^2 + m^2$ می باشد. پاسخ به دست آمده برای مرتبه صفرم انرژی کازیمیر با آنچه در گذشته برای این مرتبه از انرژی گزارش شده است تطابق کامل دارد [۷]. این تطابق ضمن اینکه موجب تایید روش منظم‌سازی بکاررفته در انجام این محاسبات می‌گردد؛ این نگرانی که تقسیم بندی‌های ایجاد شده در ناحیه‌های میانی در شکل (۱) ممکن است بر انرژی کازیمیر مستطیل اصلی(ناحیه $A1$) تاثیرگذار باشد را بنحو خوبی برطرف می کند.

جمله دوم در سمت راست معادله (۲) بیانگر مرتبه اول($\mathcal{O}(\lambda)$) از انرژی خلا می باشد. این رابطه برای انرژی خلا با در نظر گرفتن کانترترم های وابسته به مکان محاسبه شده است(جهت بررسی جزئیات بیشتر به [۵] مراجعه گردد). برای محاسبه مرتبه اول از تصحیح تابشی انرژی کازیمیر، ابتدا لازم است تابع گرین برای هر یک از ناحیه‌های مشخص شده در شکل (۱) با جایگذاری ابعاد هر مستطیل در عبارت (۳) بدست آید. سپس با جایگذاری تابع گرین مربوط به هرناحیه در معادله (۲) و یافتن انرژی خلا برای هریک از ناحیه ها، با استفاده از تعریف انرژی کازیمیر در معادله (۱) به محاسبه اختلاف انرژی های خلا دو ساختار A و B می پردازیم. تشابه دو ساختار به انضمام منظم‌سازی تابع قطع[۳] باعث می شود تا تعداد زیادی از واگرایی ها در انجام این تفاضل یکدیگر را حذف

[۳] Cut-off Regularization Technique

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

کنند. در نهایت نیز با محاسبه حدهای موجود در رابطه (۱)، تصحیح تابشی انرژی کازیمیر برای یک مستطیل بصورت زیر بدست می آید:

$$
\begin{aligned}
&E^{(1)}_{\text{Cas.}} \\
&= \frac{-\lambda}{32a_1a_2}\Bigg\{\frac{1}{4}\mathcal{B}_2(m;a_1) - \frac{a_1}{8\pi m}\ln(1-e^{-2ma_2}) \\
&+ \frac{1}{4m}\sum_{n=1}^{\infty}\mathcal{B}_1(m;a_1,a_2) - \frac{a_1\ln 2}{2\pi}\mathcal{B}_2(m;a_1) \\
&+ \frac{a_1^2\ln 2}{4\pi^2}\ln(1-e^{-2ma_2}) + \frac{a_1a_2\ln 2}{4\pi^2}\ln(1-e^{-2ma_1}) \\
&- \frac{a_1\ln 2}{2\pi}\sum_{n=1}^{\infty}\mathcal{B}_1(m;a_2,a_1) + \frac{1}{4}\mathcal{B}_2^2(m;a_2) \\
&+ \frac{1}{4}\mathcal{B}_2(m;a_2)\mathcal{B}_2(m;a_1) \\
&- \frac{a_1}{4\pi}\ln(1-e^{-2ma_2})[\mathcal{B}_2(m;a_2)+\mathcal{B}_2(m;a_1)] \\
&+ \frac{1}{2}[\mathcal{B}_2(m;a_2)+\mathcal{B}_2(m;a_1)]\sum_{n=1}^{\infty}\mathcal{B}_1(m;a_1,a_2) \\
&+ \frac{a_1a_2}{16\pi^2}\ln(1-e^{-2ma_1})\ln(1-e^{-2ma_2}) \\
&- \frac{1}{4\pi}[a_1\ln(1-e^{-2ma_2}) + a_2\ln(1-e^{-2ma_1})]\sum_{n=1}^{\infty}\mathcal{B}_1(m;a_1,a_2) \\
&+ \frac{a_2^2}{16\pi^2}\ln^2(1-e^{-2ma_1}) + \frac{1}{4}\Bigg(\sum_{n=1}^{\infty}\mathcal{B}_1(m;a_1,a_2)\Bigg)^2 \\
&+ \frac{1}{4}\Bigg(\sum_{n=1}^{\infty}\mathcal{B}_1(m;a_1,a_2)\Bigg)\Bigg(\sum_{n=1}^{\infty}\mathcal{B}_1(m;a_2,a_1)\Bigg) \\
&+ \frac{1}{2}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\mathcal{B}_1(m;a_1,a_2)}{S_n(a_2)} + \frac{1}{2}\sum_{n=1}^{\infty}\mathcal{B}_1^2(m;a_1,a_2)\Bigg\} + \{a_1 \leftrightarrow a_2\},
\end{aligned}
\tag{٦}
$$

که در آن توابع بکار رفته نیز عبارتند از:

$$\mathcal{B}_2(m;x) = \frac{-x}{\pi}\sum_{j=1}^{\infty}K_0(2mxj),$$

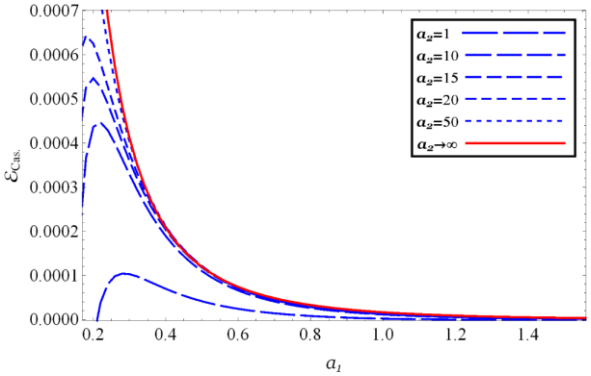
$$\mathcal{B}_1(m;x,y) = \frac{2x}{\pi}\sum_{j=1}^{\infty}K_0\big(2xjS_n(y)\big)$$

که در آن تابع $K_0(\alpha)$ تابع اصلاح شده بسل است. یکی از مهمترین حدهایی که معمولاً در مبحث انرژی کازیمیر مورد توجه ویژه قرار می گیرد، یافتن پاسخ برای میدانهای بدون جرم است. محاسبه حد بدون جرم برای مرتبه اول تصحیح تابشی انرژی کازیمیر با استفاده مستقیم از رابطه (٦) رابطه زیر را بدست می دهد:

$$E^{(1)}_{\text{Cas.}} \cong \frac{-\lambda}{64a_1a_2}\sum_{n=1}^{\infty}\Big[\frac{-a_1}{\pi n}\mathcal{B}_1(0;a_2,a_1) + \mathcal{B}_1^2(0;a_2,a_1) + \frac{2a_2\ln 2}{\pi}\mathcal{B}_1(0;a_2,a_1)\Big] + \{a_1 \leftrightarrow a_2\}.$$

نتیجه گیری

در این مقاله به ارائه محاسبه انرژی کازیمیر برای مرتبه صفر و اول تصحیح تابشی میدان اسکالر محدود شده با شرط مرزی دیریکله در یک مستطیل پرداخته‌ایم. این محاسبات در مرتبه اول تصحیح تابشی برای بار اول ارائه گردیده است. در انجام این محاسبات، از منظم سازی کم‌کردن جعبه ها برای حذف واگراییهای ناشی از انرژی خلا استفاده شده است. برای حذف واگرایی‌های ناشی از پارامترهای برهنه در لاگرانژی نیز از کانترترم‌های وابسته به مکان استفاده شده است. انتظار می رود که پاسخهای بدست آمده در حدی که اندازه یک ضلع از مستطیل نسبت به دیگری بسیار بزرگ باشد، به انرژی کازیمیرِ مربوط به دو خط موازی در دو بعد فضایی برسد. این امر در مقاله اصلی و برای میدانهای جرمدار و بدون جرم مورد بررسی قرار گرفته است. در شکل (۲) سازگاری پاسخ های بدست آمده برای میدانهای جرم دار نشان داده شده است [۷-٦].



شکل۲ : مرتبه اول از تصحیح تابشی انرژی کازیمیر بر واحد سطح برای یک مستطیل برحسب یکی از ابعاد مقطع مستطیل رسم شده است. a_2 ضلع دیگر مستطیل است و این نمودار نشان می دهد که با افزایش اندازه یک ضلع مستطیل پاسخها به چگالی انرژی کازیمیر مربوط به دو خط موازی نزدیک می شود. در این نمودار $\hbar c = 1$ و ثابت جفت شدگی برابر $\lambda = 0.1$ است.

مرجع ها

[1] M. Bordag, D. Robaschik, E. Wieczorek, *Ann. Phys. (N.Y.)* **165** (1985) 192.
[2] M. Bordag, J. Lindig, *Phys. Rev. D* **58** (1998) 045003.
[3] N. Graham, R. Jaffe, H. Weigel, "Casimir effects in renormalizable quantum field theories", *Int. J. Mod. Phys. A* **17** (2002) 846.
[4] S.S. Gousheh, R. Moazzemi, M.A. Valuyan, "Radiative correction to the Dirichlet Casimir energy for $\lambda\phi^4$ theory in two spatial dimensions", *Phys. Lett. B* **681** (2009) 477.
[5] R. Moazzemi, A. Mohammadi, S. S. Gousheh, "A renormalized perturbation theory for problems with non-trivial boundary conditions or backgrounds", *Eur. Phys. J. C* **56** (2008) 585.
[6] M.A. Valuyan, "The Dirichlet Casimir energy for the ϕ^4 theory in a rectangle", *Eur. Phys. J. Plus* **133** (2018) 401.
[7] J. Ambjørn and S. Wolfram, "Properties of the vacuum: I. Mechanical and thermodynamic", *Ann. Phys., NY* **147** (1983) 1.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

تاثیر بازپخت بر روی خواص اپتیکی، ساختاری و الکتروکرومیکی لایه‌ی نازک MoO_3

بیات، سعیده[۱] ؛ محمودی، مریم[۱] ؛ خدابخشی، فردین[۲] ؛ محسنی، مجید[۱] ، کریم زاده، روح الله[۱]

[۱] دانشکده فیزیک، دانشگاه شهیدبهشتی، تهران، ایران

[۲] پژوهشگاه پلیمر و پتروشیمی، تهران، ایران

چکیده

تکنولوژی الکتروکرومیک در دهه‌های اخیر به علت نیاز به کنترل انرژی خورشیدی و همچنین تنظیم و تعدیل مصرف انرژی در ساختمان‌ها، توجه زیادی را به خود جلب کرده است. در این گزارش لایه‌ی نازک الکتروکرومیک تری اکسید مولیبدن (MoO_3) به روش الکتروانباشت لایه‌نشانی شده و خواص ساختاری و الکتروکرومیکی آن تحت تاثیر بازپخت مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج نشان می‌دهد که ساختار لایه‌ی بازپخت شده در دمای ۲۵۰ درجه سانتی‌گراد به مدت ۳ ساعت، از حالت بی‌شکل به ساختار بلوری تبدیل می‌شود. بررسی خواص الکتروکرومیک نمونه به وسیله‌ی اندازه‌گیری عبور اپتیکی در الکترولیت ۰/۵ مولار $LiClO_4$+PC و بدست آوردن ضریب مدولاسیون اپتیکی تا مقدار حداکثر ٪۵۰، بهبود قابل توجه خواص الکتروکرومیک لایه‌ی نازک MoO_3 با اعمال بازپخت را نشان می‌دهد.

واژه‌های کلیدی: *تری اکسید مولیبدن، الکتروکرومیک، مدولاسیون اپتیکی، الکتروانباشت، ساختار بلوری*

Effect of annealing on optical, structural and electrochromic properties of MoO_3 thin film

Bayat, Saeedeh[1] ; Mahmoodi, Maryam[1] ; Khodabakhshi, Fardin[2] ; Mohseni, Majid[1] ; Karimzadeh, Rouhollah[1]

[1]Department of Physics, Shahid Beheshti University, Tehran, Iran

[2]Iran Polymer and Petrochemical Research Institute, Tehran, Iran

Abstract

In recent decades, electrochromic technology has gathered a great deal of attention due to the need of controlling solar energy and to regulate and lower the energy consumption in buildings. In this report, electrochromic thin film of molybdenum trioxide is fabricated using electrodeposition method and its structural and electrochromic properties is investigated under the effect of annealing. The results indicate that the structure of the annealed layer at 250°C for 3 hours changed from amorphous before heating to crystalline after heating. Investigation of the electrochromic properties by measuring the optical transmission of the thin film in 0.5 M $LiClO_4$+PC electrolyte, shows an optical modulation coefficient up to 50% demonstrating remarkable improvement of electrochromic properties of MoO_3 thin films by annealing.

***Keywords**: molybdenum trioxide, electrochromic, optical modulation, electrodeposition, crystal structure*

PACS No. 78

مقدمه

اکسید فلزهای واسطه به دلیل کاربردهای علمی و تخصصی فراوان در زمینه‌های متنوع، به طور گسترده‌ای مورد تحقیق و توسعه قرار گرفته‌اند. این اکسیدها خواص ساختاری، اپتیکی، شیمیایی و الکتروکرومیکی[1] جالب توجهی را از خود نشان می‌دهند. خاصیت الکتروکرومیک، تغییر رنگ برگشت‌پذیری است که برای مواد الکتروکرومیک با اعمال یک میدان الکتریکی خارجی

[1] Electrochromic

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد

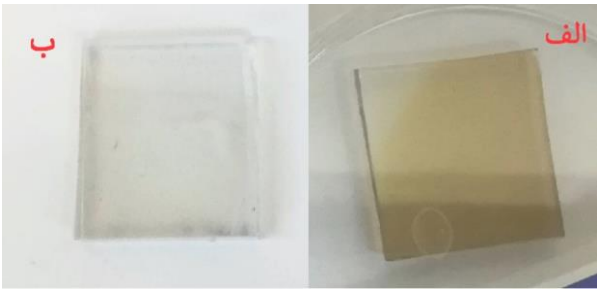
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

و از طریق ورود و خروج تعداد برابری از یون‌ها و الکترون‌ها اتفاق می‌افتد [۱]. در میان مواد الکتروکرومیک، تری‌اکسید مولیبدن به دلیل پاسخ رنگ‌پذیری قابل توجه، جذب نور قوی و یکنواخت در حالت رنگی، در کاربردهای الکتروکرومیک، بسیار مورد استفاده قرار گرفته است. علاوه‌براین، نزدیک بودن پیک جذب اپتیکی آن به ناحیه‌ی حساسیت چشم انسان، این ماده را برای بسیاری از کاربردها از جمله پنجره‌ی هوشمند مناسب کرده است [۲,۳].

برای لایه‌نشانی MoO_3، روش‌های متفاوتی وجود دارد که در این میان، روش‌های الکتروشیمیایی مانند الکترونباشت[۲] از مزیت بالایی برخوردار هستند. این روش به دلیل سهولت و کنترل‌پذیری بر روی ضخامت، ساختار و میزان اکسیداسیون و ناخالصی در دمای اتاق، متناسب و مطابق با استانداردهای صنعتی دستگاه‌های الکترونیکی است [٤]. در این مقاله، لایه‌ی نازک MoO_3 با روش الکترونباشت لایه‌نشانی شده و خواص اپتیکی، ساختاری و الکتروکرومیک آن تحت تاثیر بازپخت، مورد مطالعه قرارگرفته است. نتایج تجربی نشان می‌دهد که بازپخت سبب بهبود این خواص در لایه‌ی نازک MoO_3 می‌شود.

مواد و روش آزمایش

قبل از شروع فرآیند الکترونباشت، زیرلایه‌ی اکسید قلع ناخالص شده با فلورین (FTO)[۳] پوشش داده‌شده بر روی بسترهای شیشه‌ای (اندازه: ۲/۲×۱۰۰×۱۰۰ میلی‌متر، شفافیت: ۸۰٪، مقاومت سطحی: $8\Omega/\ cm^2$) توسط اتانول و آب مقطر شسته شده، سپس در حمام التراسونیک[٤] به مدت ۱۰ دقیقه کاملا تمیز و توسط جریان هوا خشک شده‌اند. برای تهیه‌ی محلول الکترونباشت، ابتدا محلول آبی با انحلال ۱/۹۳۵٦ گرم از نمک سدیم مولیبدیت[۵] ($Na_2MoO_4*2H_2O$) با خلوص ۹۸٪ در ۸۰ میلی‌لیتر آب مقطر با غلظت ۰/۱ مولار تهیه شده و برای تنظیم pH محلول، اسید سولفوریک به آن اضافه شده است. pH محلول، تاثیر قابل توجهی بر روی خواص ساختاری نمونه دارد. نشان داده شده است که در pHهای بالا، جریان عبوری در حین الکترونباشت بسیار پایین است که باعث نرخ رسوب کم و لایه‌نشانی نامطلوب می‌شود [٤]. بدین ترتیب مشاهده شد که برای pHهای بیشتر از مقدار ٤، لایه‌نشانی برای نمونه اتفاق نمی‌افتد، بدین جهت برای تنظیم pH به اندازه ٤، اسیدسولفوریک به محلول اضافه شده است. فرآیند الکترونباشت توسط یک پتانسیوستات[٦] دو الکترونه در دمای اتاق انجام شده است، که پلاتین به عنوان آند و زیرلایه‌ی FTO/ شیشه به عنوان کاتد استفاده شدند. پتانسیل مثلثی اعمالی برای فرآیند الکترونباشت در مقدار ۲/۵ ولت تنظیم شده است (حداقل ولتاژ لازم برای رسوب از این محلول بر روی زیرلایه‌ی FTO/ شیشه). سپس نمونه‌ی MoO_3 در مدت زمان رسوب ۳۰۰ ثانیه تهیه شده که جریان عبوری در حین الکترونباشت برای این نمونه ۷/۳ میلی‌آمپر بوده است. نمونه‌ی تهیه شده در ابتدا به رنگ قهوه‌ای روشن بود که بر اساس آزمایشاتی که انجام داده‌ایم و هچنین گزارشات ارائه شده [۵]، حدس زده می‌شود که قهوه‌ای شدن رنگ لایه به علت اضافه کردن اسید باشد. شفاف نبودن نمونه بعد از الکترونباشت و میزان طیف عبوری کم، باعث عدم پاسخ الکتروکرومیک نمونه می‌شود. در مقاله‌ی حاضر، برای شفاف شدن و افزایش میزان عبور، روش بازپخت انتخاب شده است. بدین منظور، نمونه به مدت ۳ ساعت در دمای ۲۵۰°C توسط هیتر گرمایی و در شرایط محیط آزمایشگاه حرارت داده شده است. شکل (۱) تصاویر ثبت شده برای نمونه را قبل و بعد از بازپخت نشان می‌دهد که تغییر رنگ نمونه به خوبی مشهود است.



شکل (۱): نمونه‌ی لایه نازک MoO_3 الف) قبل از بازپخت و ب) بعد از بازپخت در دمای ۲۵۰°C به مدت ۳ ساعت.

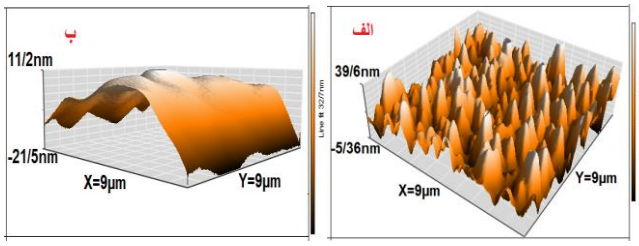
[2] Electrodeposition
[3] Fluorine-doped Tin Oxide
[4] Ultrasonic bath
[5] Sodium Molybdate
[6] Potentiostat

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

نتایج و بحث

ضخامت نمونه از طریق ضخامت‌سنجی فیزیکی[7] اندازه‌گیری شده که ضخامت ثبت شده قبل از حرارت ۱۰±۷۰ نانومتر و بعد از حرارت ضخامت تقریبی ۱۰±۶۰ نانومتر بدست آمده است. فرآیند بازپخت منجر به دی‌هیدراته‌شدن و تراکم لایه و درنتیجه کاهش ضخامت لایه می‌شود. این کاهش ضخامت توسط افراد دیگری نیز گزارش شده است که به دنبال بازپخت در دمای ۲۵۰°C و ۱۸۰°C به ترتیب کاهش ۳۳٪ و ۲۸٪ ضخامت اتفاق افتاده‌است [۶].

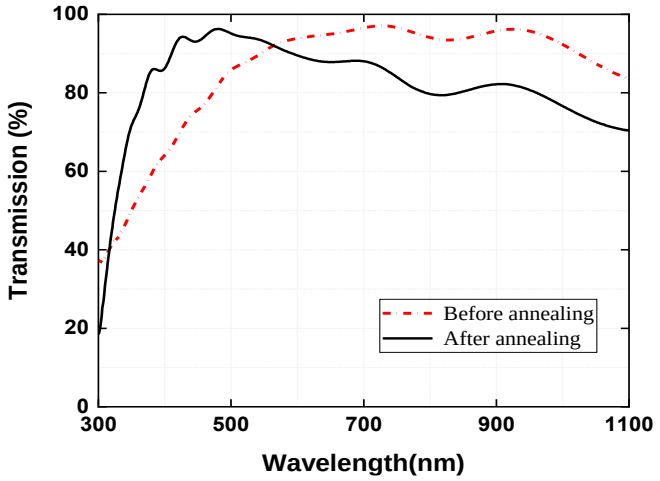
مورفولوژی سطحی نمونه به وسیله‌ی میکروسکوپ نیروی اتمی (AFM) ثبت شده است.



شکل (۲): تصاویر AFM برای نمونه‌ی MoO_3 الف) قبل از بازپخت و ب) بعد از بازپخت در دمای ۲۵۰°C به مدت ۳ ساعت.

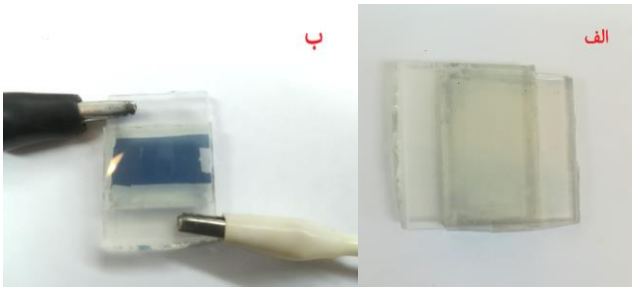
شکل (۲) تصاویر AFM ثبت شده برای نمونه قبل و بعد از بازپخت در دمای ۲۵۰°C را نشان می‌دهد. لایه، قبل از بازپخت دارای سطحی غیریکنواخت با زبری سطح (~۱۲,۳۷nm) و اندازه‌ی ذرات کوچک و در مقیاس نانومتر بود که مطابق با ساختار بی‌شکل است. اما بعد از بازپخت، سطح لایه یکنواخت‌تر شده و زبری سطح آن تا حد چشمگیری (~۵,۶۸nm) کاهش یافته است. همچنین اندازه‌ی ذرات تا مقیاس میکرومتر افزایش پیدا کردند که نمایانگر ایجاد ساختار بلوری است. این افزایش اندازه‌ی ذرات می‌تواند به علت گسترش سطح اجزا باشد که منجر به اتصال ذرات کوچک‌تر به هم و ایجاد ذرات بزرگ‌تر می‌شود [۷].

بررسی پاسخ اپتیکی نمونه به وسیله‌ی طیف‌سنجی فرابنفش-مرئی[8] در محدوده‌ی طول موج ۳۰۰ الی ۱۱۰۰ نانومتر انجام گرفته است. نتایج ارائه شده در شکل (۳) نشان می‌دهد که طیف عبوری نمونه بعد از بازپخت در محدوده‌ی طول موج ۳۱۶-۵۶۴ نانومتر افزایش یافته اما در طول موج‌های بلندتر با کاهش روبه‌رو بوده است. حداکثر میزان عبور بعد ازحرارت برای لایه، مقدار ۹۶٪ در طول موج ۴۸۰nm دیده می‌شود. این افزایش شفافیت ناشی از اکسیداسیون بیشتر و کاهش نقص اکسیژن در حین بازپخت است [۸].



شکل (۳): طیف عبوری نمونه‌ی MoO_3 قبل و بعد از بازپخت در دمای ۲۵۰°C به مدت ۳ ساعت.

برای بررسی خواص الکتروکرومیک نمونه، در ابتدا سلول الکتروکرومیکی آن، از طریق ساندویچ کردن لایه‌ی MoO_3 بین دو لایه‌ی FTO و سپس تزریق الکترولیت $LiClO_4$+PC به مابین فصل مشترک این دو لایه، ساخته شده است. سپس با اعمال ولتاژ خارجی ۲/۵ولت به سلول الکتروکرومیکی ساخته شده، فرآیند رنگ‌پذیری و میزان تغییر طیف عبوری از آن، مورد بررسی قرار گرفته است. رنگ‌پذیری نمونه بعد از اعمال ولتاژ در شکل (٤) نشان داده شده‌است.

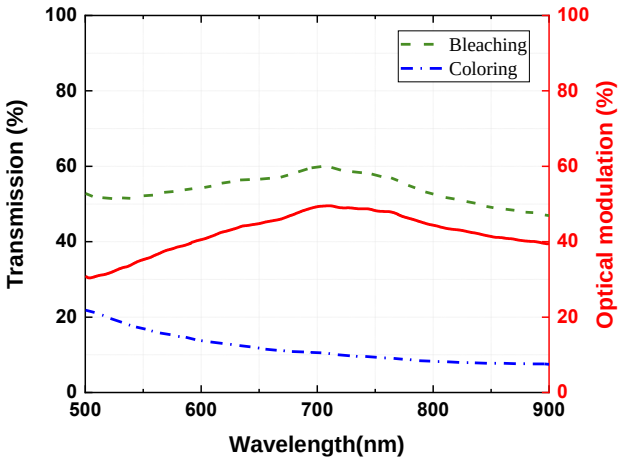


شکل (٤): تغییر رنگ نمونه‌ی MoO_3 الف) قبل و ب) بعد از اعمال ولتاژ.

[7] Dektak
[8] UV-Vis spectroscopy

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مدولاسیون اپتیکی[۹] ($\Delta T\%$) به صورت تفاوت میان میزان طیف عبوری در حالت شفاف (T_b) و در حالت رنگی (T_c)، به صورت ($\Delta T\% = T_b - T_c$) تعریف می‌شود. در شکل (۵) میزان عبور در حالت شفاف (T_b) و میزان عبور در حالت رنگی (T_c) و همچنین مدولاسیون اپتیکی برای نمونه مورد نظر نشان داده شده است.



شکل (٦): میزان طیف عبوری نمونه‌ی MoO_3 در حالت رنگی (coloring) و حالت شفاف (bleaching) و مقدار مدولاسیون اپتیکی نمونه.

نتایج بیان می‌کند که نمونه‌ی تهیه شده، در بازه‌ی ٦۰۰ تا ۸۰۰ نانومتر مدولاسیون اپتیکی‌ای بیشتر از ٤۰٪ را نشان می‌دهد. حداکثر مقدار $\Delta T\%$ به دست آمده برابر با ۵۰٪ در طول موج ۷۱۳ نانومتر است، که این مقدار از مقادیر گزارش شده در تحقیقات دیگر برای لایه‌ی MoO_3 بدون بازپخت بیشتر است [۱,۹,۱۰,۱۱]. بنابراین بازپخت باعث افزایش مدولاسیون اپتیکی می‌شود که مطلوب وسایل الکتروکرومیک است.

نتیجه گیری

در این تحقیق نمونه‌ی لایه نازک MoO_3 با استفاده از روش لایه‌نشانی الکترونباشت ساخته شده و اثر بازپخت بر روی مشخصات ساختاری و خواص اپتیکی و الکتروکرومیکی آن بررسی شده است. نتایج نشان می‌دهد که لایه‌ی بازپخت‌شده در دمای ۲۵۰°C دچار تغییر ساختاری از بی‌شکل به بلوری شده و با شفاف شدن نمونه سبب افزایش طیف عبوری می‌شود. بررسی مدولاسیون اپتیکی نمونه نشان می‌دهد که بازپخت منجر به بهبود خواص الکتروکرومیک می‌شود، زیرا حرارت سبب ایجاد ساختار بلوری و به دنبال آن مجراهای کانال مانندی شده که باعث تسهیل ورود و خروج یون‌ها می‌شود. بدست آوردن رقم قابل توجه بیش از ٤۰٪ برای مدولاسیون اپتیکی بیانگر اهمیت بازپخت و همچنین پیدا کردن بهینه‌ی دما و مدت بازپخت برای افزایش کارایی وسایل الکتروکرومیک است.

منابع

[۱] Anil Kumar, Chandra Shekhar Prajapati, P.P.Sahay, "Results on the microstructural, optical and electrochromic properties of spray-deposited MoO3 thin films by the influence of W doping," *Material Science in Semiconductor Processing*, vol. **104**, p.104668, 2019.

[۲] Lei Zheng, Yang Xu, Dong Jin and Yi Xie, "Novel Metastable Hexagonal MoO3 Nanobelts: Synthesis, Photochromic, and Electrochromic Properties," *Chemistry Of Material*, vol. **21**, pp. 5681-5690, 2009.

[۳] T.Ivanova, K.A.Gesheva, G.Popkirov, M.Ganchev, E.Tzvetkova, "Electrochromic properties of atmospheric CVD MoO3 and MoO3–WO3 films and their application in electrochromic devices," *Materials Science and Engineering B*, vol. **119**, pp. 232-239, 2005.

[۴] David Di Yao, Jian Zhen Ou, Kay Lathem, Serge Zhuiykov, Anthony P.O'Mullane and Kourosh Kalantar-Zadeh, "Electrodeposited α- and β-Phase MoO3 Films and Investigation of Their Gasochromic Properties," *Crystal Growth Design*, vol. **12**, pp. 1865-1870, 2012.

[۵] Nobuyoshi Baba, Shigeyoshi Morisaki and Naoki Nishiyama, "Preparation of Electrochromic MoO3 Thin Films on ITO Glasses by Electrodeposition," *Japanese Journal Of Applied Physics*, vol. **23**, pp. 638-639, 1984.

[۶] Todd M.Mcevoy and Keith J.Stevenson, "Electrochemical Preparation of Molybdenum Trioxide Thin Films: Effect of Sintering on Electrochromic and Electroinsertion Properties," *Langmuir*, vol. **19**, pp. 4316-4326, 2003.

[۷] Shih-Yuan Lin, Chih-Ming Wang, Kuo-Shengkao, Ying-Chung Chen, Chan-Chih Liu, "Electrochromic properties of MoO3 thin films derived by a sol–gel process," *Sol-gel Science Technology*, vol. **53**, pp. 51-58, 2010.

[۸] Kostadinka A.Gesheva and Tatyana Ivanova, "A Low-Temperature Atmospheric Pressure CVD Process for Growing Thin Films of MoO3 and MoO3-WO3 for Electrochromic Device Applications," *Chemical Vapor Deposition*, vol. **12**, pp. 231-238, 2006.

[۹] S.S.Mahajan, S.H.Mujawar, P.S.Shinde, A.I.Inamdar, P.S.Patil, "Concentration Dependent Structural, Optical and Electrochromic Properties of MoO3 Thin Films," *Electrochemical Science*, vol. **3**, pp. 953-960, 2008.

[۱۰] Chao-Sheng Hsu, Chih-Chieh Chan, Hung-Tai. Huang, Chia-Hsiang Peng, Wen-Chia Hsu, "Electrochromic properties of nanocrystalline MoO3 thin films," *Thin Solid Films* , vol. **516**, pp. 4839-4844, 2008.

[۱۱] Haiyan Yu, Yajun Li, Lei Zhao, Guangmin Li, Junwei Li, Hui Rong, Zhifeng Liu, "Novel MoO3-TiO2 composite nanorods films with improved electrochromic performance," *Material Letters*, vol. **169**, pp. 65-68, 2016.

[9] Optical Modulation

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

زیست حسگرهای بلورمایع ترموتروپیک تنظیم پذیر

واحدی، علی ؛ کوهی، محمد

[۱] گروه فیزیک، واحد تبریز، دانشگاه آزاد اسلامی، تبریز، ایران

[۲] مرکز تحقیقات بیوفوتونیک، واحد تبریز، دانشگاه آزاد اسلامی، تبریز، ایران

چکیده

پاسخ زیست حسگر تشدید پلاسمونی بلور مایع به دما برای چهار نوع بلور مایع ترموتروپیک5CB، 5PCH، E7 و E44 شبیه سازی شد. تغییرات آنالیت بیولوژیکی می تواند توسط جابجایی زاویه تشدید پلاسمون سطحی آشکارسازی شود. نتایج نشان می دهند تغییرات دمایی بیشینه حساسیت برای پارامتر نظم S=1 در آرایش موازی اتفاق می افتد. حساسیت زیست حسگرهای مبتنی بر 5CB و5PCH نسبت به E7 و E44 زیاد است.

واژه های کلیدی: *زیست حسگرها، بلور مایعهای ترموتروپیک، تشدید پلاسمون سطحی، گذار فاز.*

Tunable thermotropic liquid crystal biosensors

Vahedi, Ali; Kouhi, Mohammad

Department of Physics, Tabriz Branch, Islamic Azad University, Tabriz, Iran.
Biophotonic Research Center, Tabriz Branch, Islamic Azad University, Tabriz, Iran.

Abstract

The response of liquid crystal surface plasmon resonance biosensor to temperature was studied for four usual 5CB, 5PCH, E7 and E44 nematic liquid crystals by modeling and simulation. The variation of biological agents can be detected by the shift of the surface plasmon resonance angle. The results show that the temperature variation of maximum sensitivity occurs for the S=1 order parameter in the homogeneous alignment. The sensitivity of 5CB and 5PCH based biosensors are greater than E7 and E44 liquid crystals.

***Keywords**: Biosensor; Phase transition; Surface plasmon resonance; Thermotropic liquid crystals*
PACS No. ۸۵،۸۷

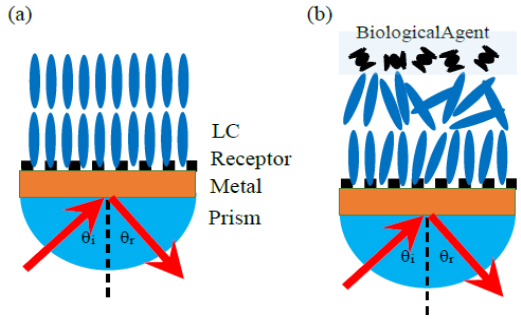
مقدمه

ترکیب بلور مایعها با سیستم های حسگری و آشکارسازی به علت اثرات جالب و تنظیم پذیر نوری؛ الکتریکی و دمایی آنها ست[۲-۱]. تزریق بلور مایع در زیست حسگرها تنوع وسیعی از ویژگیهای الکترو-اپتیکی در نواحی طیف مرئی را داراست که اغلب به جهت گیری مولکولها وابسته است. در سالهای اخیر بلور مایعهای ترموتروپیک درآشکارسازی پلیمرهای شیمیایی، بیو مولکولها و یونهای فلزی بسیار مورد استفاده قرارگرفته اند [٤-۳]. در این حسگرها آرایش مولکولهای بلور مایع و برخی از خواص فیزیکی لایه های نازک توسط عوامل بیرونی تحت تاثیر قرار می گیرند. تا به امروز بعضی میکروسکوپهای نوری مبتنی بر بلور مایع و پلاسمون تشدید سطحی (SPR) برای آشکارسازی و آنالیز مناسب بو د ه اند[٦-٥]. درمنبع [۷] محققین اندرکنشهای پلاسمونی را با یک نور پمپ خارجی توسط توری قابل سویچ ساخته شده با بلور مایع تنظیم کرد ه اند. مقایسه سویچ نوری یا الکتریکی حسگرهای تنظیم پذیر توسط کنترل دمایی می تواند بسیار مفید و سودمند باشد [۸]. در این تحقیق یک زیست حسگر تشدید پلاسمونی مبتنی بر بلورمایع با یک لایه نازک طلا و دی الکتریکهای بلورمایع ترموتروپیک5CB، 5PCH، E7 و E44 پیشنهاد شده است.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مبانی نظری

حسگر زیستی پیشنهادی بلورمایع/طلا در شکل ۱ نشان داده شده است. این ساختار شامل سه لایه متفاوت است. اولین لایه منشوری با ضریب شکست بالا، لایه دوم فیلم نازک فلز طلا و لایه سوم لایه حساس می باشد که شامل بلور مایع وآنالیتهای شیمیایی و بیولوژیکی است.



شکل ۱: طرحواره حسگر زیستی الف- آرایش عمودی مولکولها ب- تغییر آرایش مولکولها در حضور آنالیتهای بیولوژیکی و تغییرات دما

مطابق شکل۱ نور قطبیده لیزر هلیم-نئون از یک وجه منشور می تابد و پدیده بازتابش کلی رخ می دهد. موج تضعیف شده از سطح مشترک طلا و دی الکتریک عبور می کند. بردار موج نور منتشر شده با بردار موج پلاسمون سطحی تزویج می شود و یک میدان الکتریکی بزرگ که به تشدید پلاسمونی معروف است بوجود می آید. منشور (LASF35) با ضریب شکست بالا $n_1 = 2.01493$ می باشد. و ضریب دی الکتریک لایه نازک طلا از مدل درود پیروی می کند.

$$\varepsilon_m = 1 - \frac{\lambda^2 \lambda_c}{\lambda_p{}^2 (\lambda_c + i\lambda)} \qquad (۱)$$

در این معادله $\lambda_p = 0.16826 \mu m$ و $\lambda_c = 8.9342 \mu m$ به ترتیب طول موجهای پلاسما و برخورد فلز طلا را نشان می دهند. با توجه به اینکه بلور مایع از نظر اپتیکی به صورت ناهمسانگرد در نظر گرفته می شود. برای آرایش جزئی که بردار راهنما نسبت به محور zزاویه φ درست می کند و سطح مشترک فلز – دی الکتریک روی محور x قرار دارد تانسور دی الکتریک به صورت زیر ساده تر خواهد شد.

$$\bar{\varepsilon} = \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} & 0 & \varepsilon_{xz} \\ 0 & \varepsilon_{yy} & 0 \\ \varepsilon_{zx} & 0 & \varepsilon_{zz} \end{bmatrix} \qquad (۲)$$

که:

$$\varepsilon_{zz} = \varepsilon_{is} + S\Delta\varepsilon(\cos^2\varphi - \frac{1}{3})$$
$$\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{is} + S\Delta\varepsilon(\sin^2\varphi - \frac{1}{3}) \qquad (۳)$$
$$\varepsilon_{zz} = S\Delta\varepsilon\sin\varphi\cos\varphi$$

در روابط فوق ε_{is} تراوایی الکتریکی در حالت همسانگرد است که $\varepsilon_{is} = (2\varepsilon_{\parallel} - \varepsilon_{\perp})/3$ می باشد، $\varepsilon_{\parallel}$ و $\varepsilon_{\perp}$ ثابتهای دی الکتریک عادی و غیرعادی برای آرایش کامل را نشان می دهند. $\Delta\varepsilon = \varepsilon_{\parallel} - \varepsilon_{\perp}$ مشخص کننده ناهمسانگردی دی الکتریکی و S پارامتر نظم بلور مایع است. خواص دی الکتریکی بلور مایعها به دما و طول موج وابسته است. بنابراین زیست حسگر پیشنهادی نیز به دما، زاویه تابش نور و مشخصات اپتیکی بلور مایع وابسته است. معادله ووکس رابطه بین ضرایب شکست و قطبش پذیری مواد ناهمسانگرد را نشان می دهد[۹].

$$\frac{n_{e,o}^2 - 1}{\langle n^2 \rangle + 2} = \frac{4\pi}{3} N\alpha_{e,o} \qquad (٤)$$

در معادله $n_{e,o}$ ، N و $\alpha_{e,o}$ به ترتیب ضرائب شکست غیر عادی (عادی) تعداد مولکولها در واحد حجم و قطبش پذیری مولکولی را نشان می دهند. و $\langle n^2 \rangle$ با رابطه زیر داده می شود:

$$\langle n^2 \rangle = \frac{n_e^2 + 2n_o^2}{3} \qquad (٥)$$

با ترکیب دو معادله اخیر وابستگی دمایی ضرایب شکست عادی و غیر عادی بدست می آیند:

$$n_e(T) \approx \frac{3\sqrt{2}}{4} + \frac{\sqrt{2}\pi N\langle\alpha\rangle}{1 - \frac{4}{3}\pi N\langle\alpha\rangle} + \frac{\frac{2\sqrt{2}}{3}\pi NS\langle\gamma_e - \gamma_o\rangle}{1 - \frac{4}{3}\pi N\langle\alpha\rangle}$$

$$n_o(T) \approx \frac{3\sqrt{2}}{4} + \frac{\sqrt{2}\pi N\langle\alpha\rangle}{1 - \frac{4}{3}\pi N\langle\alpha\rangle} - \frac{\frac{\sqrt{2}}{3}\pi NS\langle\gamma_e - \gamma_o\rangle}{1 - \frac{4}{3}\pi N\langle\alpha\rangle}$$

که $N < \alpha >$ کوچک است پس دوشکستی یک بلور مایع به صورت زیر نوشته می شود:

$$\Delta n(T) \approx \frac{\sqrt{2}\pi NS\langle\gamma_e - \gamma_o\rangle}{1 - \frac{4}{3}\pi N\langle\alpha\rangle}$$

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

در این کار ضرایب شکست عادی و غیر عادی چهار نوع بلور مایع بکار رفته با استفاده از معادلات فوق و تطابق آن با نتایج تجربی در طول موج ۶۳۳ نانومتر از منبع ۱۰ بدست آمده اند.

ضریب شکست موثر موج ناپایدار تضعیف شده در لایه بلور مایع از طریق معادله ماکسول و موج تخت در محیط تک محوری بدست آورده می شود [۸].

$$n_{eff}=\left[\frac{\varepsilon_{os}\varepsilon_{es}}{\varepsilon_{os}+S\Delta\varepsilon(k.n)^2}\right]^{0.5} \qquad (۷)$$

که $\varepsilon_{os}=\varepsilon_{is}-S\frac{\Delta\varepsilon}{3}$ و $\varepsilon_{es}=\varepsilon_{is}+2S\frac{\Delta\varepsilon}{3}$ می باشند. در این روابط k.n، بردار در جهت بردار انتشار موج شکست و ε_{os} ضریب دی الکتریک عادی و ε_{es} غیر عادی را نشان می دهند. با اعمال شرایط مرزی میدانهای مماسی در لایه N+1 می تواند از طریق مولفه های مماسی لایه N بصورت زیر بدست آیند:

$$\begin{bmatrix}E_{N+1}\\H_{N+1}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}M_{11}&M_{12}\\M_{21}&M_{22}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}E_N\\H_N\end{bmatrix} \qquad (۸)$$

برای ساختارهای مرکب با تعداد N لایه ماتریس انتقال کل حاصلضرب همه ماتریسها می باشد. وبرای نور قطبیده P بصورت زیر تعیین می شود.

$$M=\left(\prod_{k=1}^{N}M_k\right)_{ij}=\begin{bmatrix}M_{11}&M_{12}\\M_{21}&M_{22}\end{bmatrix} \qquad (۹)$$

$$M_k=\begin{bmatrix}\cos\beta_k&-i\sin\beta_k/q_k\\-iq_k\sin\beta_k&\cos\beta_k\end{bmatrix}$$

$$q_k=\left(\frac{\mu_k}{\varepsilon_k}\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$\beta_k=\frac{2\pi n_k}{\lambda}\cos\theta_k(z_k-z_{k-1})=\frac{2\pi d_k}{\lambda}(\varepsilon_k-n_1^{\,2}\sin^2\theta_1)^{\frac{1}{2}}$$

$$\cos\theta_k=\frac{(\varepsilon_k-n_1^{\,2}\sin^2\theta_1)^{\frac{1}{2}}}{\varepsilon_k}$$

که θ_1 و λ زاویه تابش و طول موج نورهستند. ضریب بازتاب نور (r_p) قطبیده TM از رابطه زیر تعیین می شود:

$$R=|r_p|^2$$

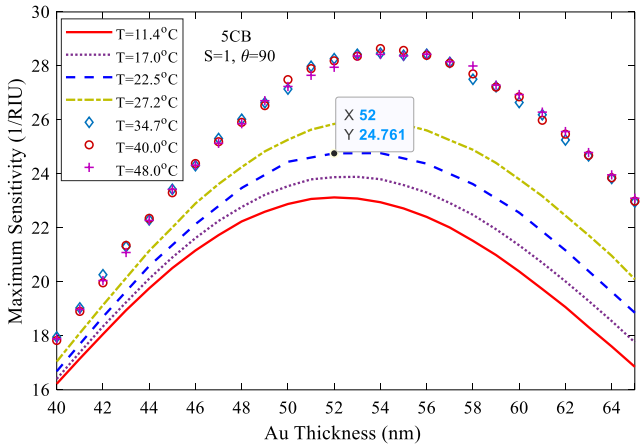
در نهایت پارامتر مهم حساسیت S، به صورت زیر تعریف و محاسبه می شوند.

$$S=\frac{\Delta\theta_{res}}{\Delta(\Delta n_{eff})}\cong\frac{d\theta}{d(\Delta n_{eff})}=\frac{d\theta}{dR}\times\frac{dR}{d(\Delta n_{eff})}$$

که $\Delta\theta_{res}$ جابجایی زاویه تشدید می باشند.

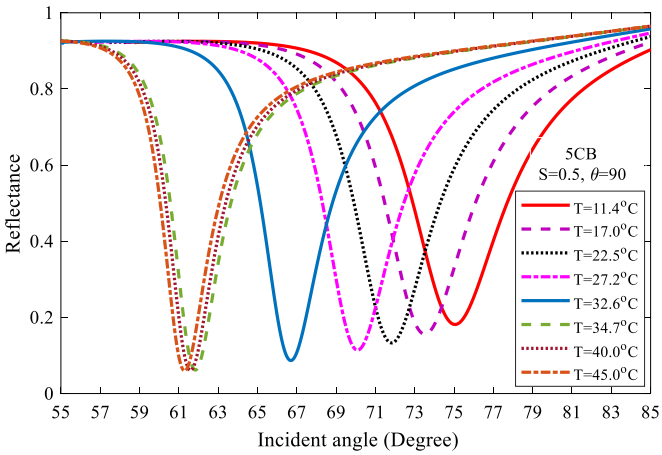
نتیجه گیری

اثر دما بر روی بهینه ضخامت زیست حسگر در شکل ۲ برای نمونه 5CB شبیه سازی شده است. در آرایش موازی مولکولها با فصل مشترک فلز/بلور مایع موازی هستند. بهینه ضخامت طلا در دماهای مختلف تعیین شده است.



شکل ۲: طیف بیشینه حساسیت آرایش موازی (θ_d=90°) و S=1 برای دماهای مختلف

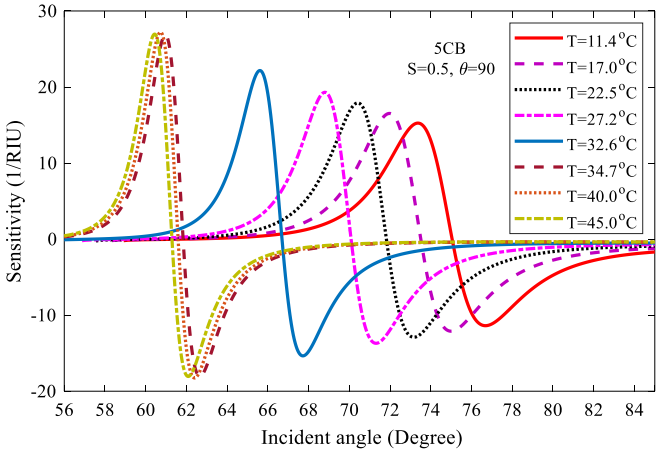
شکل ۳ نمودار بازتابندگی را به ازای دماهای مختلف برای آرایش موازی (θ_d=90°) نشان می دهد. مطابق شکل ۳ زاویه تشدید با افزایش دما به سمت چپ جابجا می شود.



شکل ۳: طیف بازتابندگی آرایش موازی (θ_d=90°) و S=0.5 برای دماهای مختلف

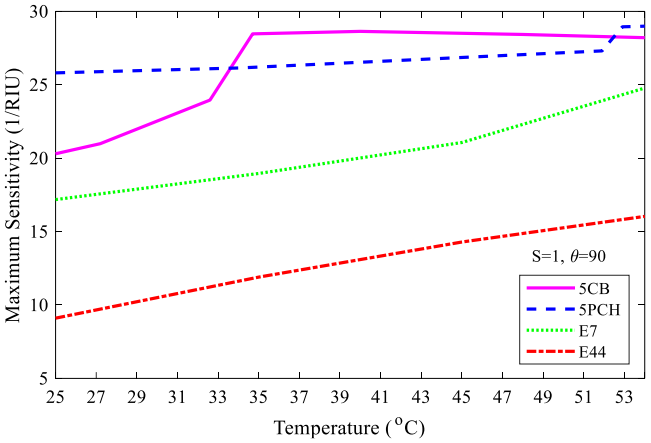
این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد :
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

شکل ٤ نمودار حساسیت به ازای دماهای مختلف را برای آرایش موازی (θ_d=90°) نشان می دهد. مطابق شکل ٤ بیشینه حساسیت با افزایش دما افزایش یافته و به سمت چپ جابجا می شود.



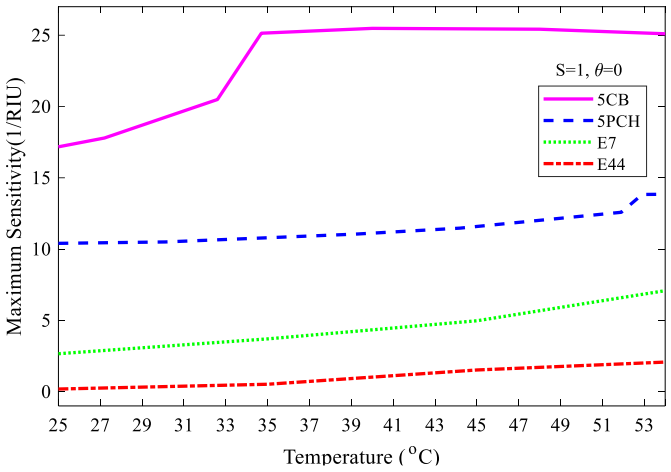
شکل ٤ وابستگی دمایی بیشینه حساسیت برای آرایش موازی (θ_d=90°) برای S=0.5

شکل ٥ وابستگی دمایی بیشینه حساسیت برای آرایش موازی چهار نمونه مختلف را نشان می دهد.



شکل ٥: وابستگی دمایی بیشینه حساسیت آرایش موازی (θ_d=90°) برای S=0.5 چهار نمونه مختلف

شکل ٦ وابستگی دمایی بیشینه حساسیت برای آرایش عمودی چهار نمونه مختلف را نشان می دهد.



شکل ٦: وابستگی دمایی بیشینه حساسیت آرایش عمودی (θ_d=0°) برای S=1 چهار نمونه مختلف

نتایج نشان می دهند که تغییرات دمایی زاویه تشدید در فاز نماتیک بیشتر از فاز همسانگرد است. زاویه تشدید نمونه E44 از سه نمونه دیگر بزرگتر است . برای نمونه های 5CB و 5PCH میزان کاهش زاویه تشدیدنسبت به دما در نزدیکی دمای نماتیک به همسانگرد تیزتر است. تغییرات زاویه تشدید در آرایش عمودی بزرگتر از حالت حالت موازی است.

مرجع‌ها

[۱] P., Popov; et al.; "A liquid crystal biosensor for specific detection of antigens"; *Sensing and bio-sensing research* **8**, (2016) 31-35.

[۲] M., Khan; and S., Y., Park; "Liquid crystal-based glucose biosensor functionalized with mixed PAA and QP4VP brushes"; *Biosensors and Bioelectronics* **68**, (2015) 404-412.

[۳] Han, G.-R. and C.-H. Jang, Detection of heavy-metal ions using liquid crystal droplet patterns modulated by interaction between negatively charged carboxylate and heavy-metal cations. Talanta, 2014. **128**:44-50.

[٤] Deng, S., et al., Liquid Crystal Biosensor Based on Cd 2+ Inducing the Bending of PS-Oligo for the Detection of Cadmium. Health, 2015. **7**(08):986.

[٥] Popov, P., E.K. Mann, and A. Jákli, Accurate optical detection of amphiphiles at liquid-crystal–water interfaces. Physical review applied, 2014. **1**(3):034003.

[٦] Popov, N., et al., Thermotropic Liquid Crystal-Assisted Chemical and Biological Sensors. Materials, 2018. **11**(1):20.

[۷] Mërtiri, A., et al., Mid-infrared photothermal heterodyne spectroscopy in a liquid crystal using a quantum cascade laser. Applied physics letters, 2012. **101**(4):044101.

[۸] Xie, J., et al., Low electric field intensity and thermotropic tuning surface plasmon band shift of gold island film by liquid crystals. The Journal of Physical Chemistry C, 2012. **116**(4):2720-2727.

[9] Li, J. and S.-T. Wu, Self-consistency of Vuks equations for liquid-crystal refractive indices. Journal of applied physics, 2004. **96**(11):6253-6258.

[10] Li, J., Refractive Indices Of Liquid Crystals And Their Applications In Display And Photonic Devices. http://stars.library.ucf.edu/etd/4460, 2005.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مطالعه قطبش پیسه لیزری در عبور از محیط اپتیکی ناهمسانگرد

میرمعینی، سید محمدامین؛ رضوانی جلال، مسعود؛ عبدی کیان، علیرضا

گروه فیزیک و فوتونیک، دانشگاه ملایر، ملایر

چکیده

در این مقاله، پیسه لیزری عبوری از یک محیط اپتیکی ناهمسانگرد که دارای زبری سطحی می باشد مورد مطالعه نظری و محاسباتی قرار می گیرد. به خاطر اینکه محیط های ناهمسانگرد باعث تغییر قطبش نور می شوند انتظار می رود که پیسه لیزری دارای قطبش های نقطه به نقطه مختلف باشد. شبیه سازی عددی پیسه با استفاده از مدل پراشی نشان می دهد که قطبش پیسه در قسمت های مختلف واقعاً متفاوت است به نحوی که در نقاط مختلف پیسه قطبش های خطی، دایروی و انواع قطبش بیضوی قابل یافت می باشد. هر چه افت و خیز سطح بیشتر باشد توزیع قطبش غیر یکنواخت تر است و از طرف دیگر، هر چه زبری کمتر باشد قطبش در همه نقاط پیسه یکسان تر می شود.

واژه های کلیدی: *پیسه لیزری، قطبش نور، زبری سطح.*

Study of Laser Speckle Polarization in Transmission from Anisotropic Optical Medium

Mirmoeini, Seyyed Mohammad Amin; Rezvani Jalal, Masoud; Abdikian, Alireza

Department of Physics and Photonics, Malayer University, Malayer

Abstract

In this paper, laser speckle formed from transmission through an anisotropic optical medium with surface roughness is studied theoretically and computationally. Because anisotropic media lead to polarization change, it is expected that the speckle should have different point-to-point polarizations. Simulation of the speckle with a diffraction model shows that the speckle polarization is, indeed, different such that various kinds of polarization including linear, circular and elliptical can be found in different points. For high levels of surface fluctuation, a more inhomogeneous polarization distribution is developed and for small roughness, on the other hand, the speckle polarizations in all points of the speckle pattern become more the same.

***Keywords**: Laser speckle, Polarization, Surface roughness.*

PACS No. 61.00, 78.20, 78.68

مقدمه

پیسه های لیزری، نواحی تاریک و روشن ریز و درخشانی هستند که در عبور و یا بازتاب لیزر از سطوح ظاهر می شوند و، در حقیقت، ناشی از تداخل های سازنده و ویرانگر تصادفی از پرتوهای لیزری می باشند. پیسه ها نوعی نوفه اپتیکی هستند و می توانند در فرایند هایی همچون هولوگرافی و تداخل سنجی ایجاد اشکال کنند. البته، همانند خیلی از فرایند های اتلافی و نوفه ای دیگر، پیسه ها نیز در اندازه گیری انواع کمیت ها مانند سرعت، ارتعاش، جابه جایی و حتی در روش های نوین تصویر برداری (مانند تصویر برداری تباینی پیسه ای) کاربردهای فراوانی دارند [٤-١].

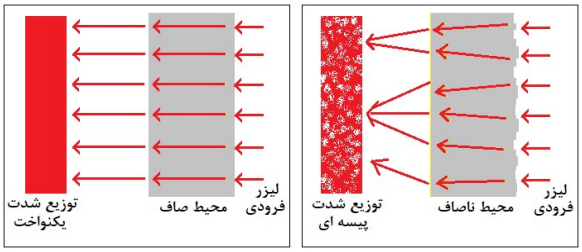
عواملی که به عنوان منشأ تشکیل پیسه معرفی می گردند غالباً شامل پستی بلندی های سطوح و افت و خیز ضریب بازتاب و جذب آنها می باشند. این عوامل باعث ایجاد اختلاف فاز تصادفی در پرتوهای نوری شده و در نهایت منجر به تداخل و ایجاد نقاط

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

روشن و تاریک رندومی می شوند. نکته مهمی که باید دقت کرد آن است که هیچکدام از عوامل فوق باعث تغییر قطبش نور فرودی نمی شوند (البته در فرود قائم) و از این رو، پیسه حاصل هم قطبش با نور فرودی خواهد بود. حال اگر محیط عبور نور ناهمسانگرد باشد آنگاه افت و خیز ضخامت محیط علاوه بر تشکیل پیسه منجر به تغییر قطبش نیز خواهد شد. پس، در عبور لیزر از یک محیط ناهمسانگرد باید شاهد تشکیل پیسه با قطبش های تصادفی باشیم. در مرجع [۵]، نویسندگان مقاله از پیسه ها برای شناسایی بلورهای دوشکستی استفاده کردند. در مقاله حاضر، به قطبش سنجی پیسه لیزری در عبور از محیط های ناهمسانگرد پرداخته می شود.

ملاحظات نظری

وقتی یک دسته پرتو موازی به سطح صافی برسند موازی با هم وارد سطح شده و از طرف دیگر هم موازی خارج می شوند، شکل ۱-چپ. با این وضع هیچ تغییری در توزیع شدت نور اتفاق نمی افتد. حال اگر پرتو های موازی به سطح ناصافی برسند آنگاه در حین عبور از تیغه دچار تغییر فاز (به خاطر مسیرهای اپتیکی متفاوت) می شوند. این پرتوها بعد از خروج از سمت دیگر تیغه پراشیده شده و با هم تداخل می کنند و به خاطر اختلاف فازهای تصادفی که کسب کرده اند باعث به وجود آمدن یک توزیع رندومی شدت (یا همان پیسه) می گردند، شکل ۱-راست.



شکل ۱: (چپ) عبور نور از یک تیغه صاف. (راست) عبور از یک تیغه ناصاف و تشکیل پیسه روی پرده.

این طرح پیسه ای هم قطبش با نور فرودی است زیرا افت و خیز ضخامت باعث ایجاد اختلاف فاز بین پرتوهای مختلف می شود ولی قطبش پرتو را عوض نمی کند. حال اگر یک عامل تغییر دهنده قطبش (مانند ناهمسانگردی) لحاظ گردد آنگاه پرتوها علاوه بر تغییر فاز، دچار تغییر قطبش نیز خواهند شد. در این صورت، پیسه اضافه بر توزیع شدت دارای توزیع قطبش نیز خواهد بود. برای نگاه دقیق به این مسئله موجی-برداری می توان از مفهوم پراش استفاده کرد. طبق فرمول پراش فرانهوفر، اگر میدان در محل عامل پراش (در اینجا تیغه) به صورت $E(x,y)$ باشد آنگاه توزیع میدان در نقاط مختلف پرده به صورت زیر خواهد بود [۶]:

$$E_{Screen}(X,Y) \propto \int_A E(x,y) e^{ik\frac{xX+yY}{D}} dxdy \qquad (۱)$$

که در آن k عدد موج نور فرودی، A سطح تیغه، و D نیز فاصله آن تا پرده می باشد. اگر قطبش نور نیز مدّ نظر قرار گیرد آنگاه رابطه (۱) برای هر دو مؤلفه x و y میدان الکتریکی هم برقرار خواهد بود. حال اگر از یک محیط ناهمسانگرد اپتیکی استفاده شود آنگاه در عبور نور از این محیط اختلاف فازی بین مؤلفه های x و y به وجود می آید. این اختلاف فاز به ضخامت تیغه بستگی دارد. اگر تیغه به صورت یک محیط ناهمسانگرد دو شکستی لحاظ شود طوری که محورهای اپتیکی آن در صفحه تیغه باشند و ضریب شکست در راستای محور x با n_x و ضریب شکست محور y هم با n_y نشان داده شوند آنگاه بعد از طی ضخامت L در تیغه فازهای زیر توسط مؤلفه های میدان کسب خواهند شد:

$$\varphi_x = n_x kL \quad , \quad \varphi_y = n_y kL \qquad (۲)$$

با احتساب این فازها، مؤلفه های میدان الکتریکی نور پراشیده در روی پرده به صورت زیر در می آیند:

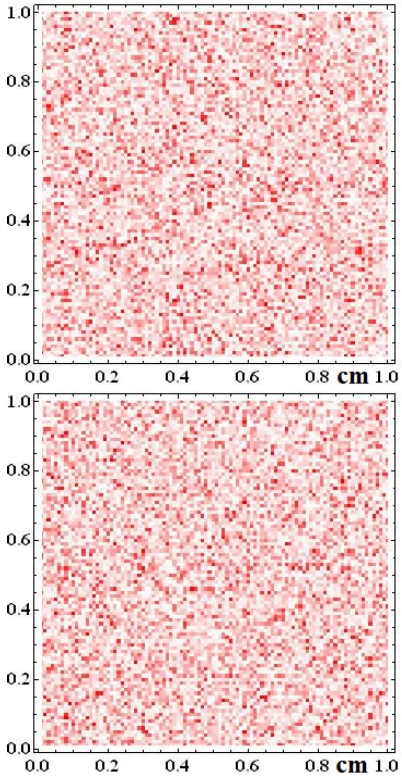
$$E_{Screen,x}(X,Y) \propto \int_A E_x(x,y) e^{\varphi_x} e^{ik\frac{xX+yY}{D}} dxdy$$
$$E_{Screen,y}(X,Y) \propto \int_A E_y(x,y) e^{\varphi_y} e^{ik\frac{xX+yY}{D}} dxdy \qquad (۳)$$

با این روابط به راحتی می توان شدت مربوط به قطبش x و y را روی پرده به دست آورد. انتگرال های پراشی فوق حل تحلیلی ندارند و بسته به اینکه تیغه مفروض چه شکلی داشته باشد و ضخامت آن با چه افت و خیزی تغییر کند باید به صورت عددی حساب شوند. روش کار این گونه است که ابتدا نوری با قطبش معین به یک تیغه (با هندسه معلوم و افت و خیز مشخص) تابیده می شود. سپس، توزیع میدان های پراشی در محل پرده و از آن نیز توزیع شدت نوری با یک کد رایانه ای به دست می آیند.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

محاسبات عددی و بحث در مورد نتایج

برای حل عددی انتگرال های پراشی رابطه (۳) یک برنامه رایانه ای در محیط *Mathematica* توسط نویسندگان مقاله نوشته شد. از بلور دو شکستی $LiIO_3$ با ضریب شکست n_y=۱٫۷۳۶۷ و n_x=۱٫۸۸۳۰ هم به عنوان محیط ناهمسانگرد استفاده گردید [۷]. تیغه ای به ضخامت L=۱ mm از این بلور لحاظ می شود. نوری با طول موج ۶۳۲٫۸ nm و قطبش خطی (که راستای آن با محور x زاویه ۴۵ درجه دارد) به این تیغه تاباند شده و از آن عبور می کند. فرض می شود که این تیغه دارای افت و خیز ضخامت به میزان اختیاری ۰٫۰۱ mm باشد. نقش پیسه برای قطبش x و قطبش y در شکل ۲ محاسبه و ترسیم شده است.

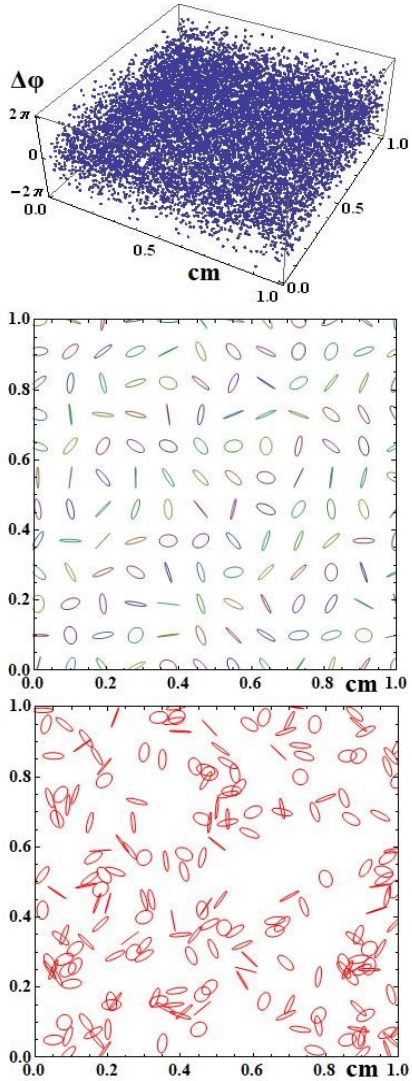


شکل ۲: (بالا) نقش پیسه برای قطبش x، و (پایین) برای قطبش y.

از این طرح ها کاملاً مشخص است که پیسه تشکیل شده در عبور نور از محیط ناهمسانگرد دارای توزیع قطبش است. به عبارت دیگر، نور فرودی که دارای قطبش خطی بود بعد از عبور از تیغه، قطبش های متنوع محلّی به خود گرفته است به گونه ای که نواحی (و حتی نقاط) مختلف پیسه دارای قطبش های مختلف شده اند. در شکل ۳-بالا اختلاف فاز بین مؤلفه x و y میدان الکتریکی پیسه در نقاط مختلف روی پرده ترسیم شده است. از این شکل معلوم است که اختلاف فاز تصادفی در بازه 2π- و 2π بین مؤلفه های x و y میدان الکتریکی به وجود آمده است. همین اختلاف فاز است که قطبش ها را ایجاد می کند. نسبت دامنه های E_x و E_y میدان در محل پرده نیز به راحتی با برنامه مذکور قابل محاسبه است ولی در اینجا به خاطر حجم محدود مقاله از ترسیم آن خودداری شده است. محاسبات نشان می دهد که نسبت E_x/E_y نیز کاملاً تصادفی می باشد. با داشتن توزیع اختلاف فاز و توزیع نسبت دامنه ها به راحتی می توان قطبش های محلی را شناسایی کرد. برای مثال در جاهایی که اختلاف فاز ۰ و یا ۱۸۰ درجه باشد قطبش خطی است و یا در مکان هایی که اختلاف فاز ۹۰ درجه باشد و دامنه ها هم برابر باشند قطبش دایروی ظاهر خواهد شد. برنامه مذکور با داشتن توزیع فازها و دامنه ها به راحتی نوع قطبش و جهت آنرا در هر نقطه مشخص می کند. قطبش پیسه برای چند نقطه انتخابی از پیسه در شکل ۳-وسط آورده شده است. کاملاً واضح است که قطبش های خطی، دایروی و انواع مختلفی از قطبش های بیضوی در پیسه حضور دارند. قطبش تعدادی از روشن ترین نقاط موجود در پیسه نیز در شکل ۳-پایین آورده شده است. البته برای پرهیز از شلوغ شدگی، جهت قطبش ها نشان داده نشده است ولی مسلم است که راستگردی و چپگردی قطبش نیز دارای توزیع تصادفی خواهد بود.

انجام محاسبات برای مقادیر مختلفی از ناهمسانگردی محیط (یعنی اختلاف بین ضرایب شکست n_x و n_y) و نیز ضخامت ها و افت و خیزهای متنوع (که در اینجا آورده نشده اند) همگی مؤید این مطلب هستند که توزیع قطبش ایجاد شده در پیسه ناشی از دو شکستی بودن تیغه است. نتایج بیان می کند که میزان ناهمسانگردی تیغه تاثیر بسزایی در ایجاد قطبش ها متفاوت دارد و هرچه درجه آن کمتر باشد تنوع قطبش های نقطه به نقطه نیز کمتر می شود طوری که برای محیط همسانگرد (یعنی n_x=n_y) دیگر خبری از قطبش های متنوع نخواهد بود. میزان افت و خیز ضخامت تیغه نیز در توزیع قطبش پیسه تاثیرگذار است و هر چه کمتر باشد یکدستی قطبش نیز افزایش پیدا می کند.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



شکل ۳: (بالا) اختلاف فاز مؤلفه x و y میدان الکتریکی پیسه. (وسط) قطبش های متنوع در نقاط منتخبی از شکل ۲. (پایین) قطبش ۲۰۰ عدد از پرنور ترین نقاط موجود در نقش پیسه.

همانطور که در ابتدای این بخش ذکر شد در محاسبات فوق از یک تیغه به ضخامت mm ۱ و افت و خیز mm ۰/۰۱ استفاده شده است. دامنه عرضی تغییرات ضخامت نیز mm ۰/۱ در نظر گرفته شده است. این دامنه تغییرات می تواند معیار خوبی برای اندازه همدوسی عرضی نور در حین خروج از تیغه باشد و می شود گفت که نور خروجی دارای همدوسی عرضی به شعاع mm ۰/۱ است. حال می توان سوالی بدین صورت مطرح کرد که همدوسی عرضی نقش پیسه نسبت به همدوسی نور خروجی از تیغه کاهش می یابد و یا افزایش؟ از آنجا که تغییرات همدوسی عرضی هم از انتشار نور (که باعث افزایش همدوسی می گردد) تاثیر می پذیرد و هم از برهم نهی و تداخل امواج (که باعث کاهش همدوسی می شود)، جواب دادن به این سوال نیازمند مطالعه بیشتری است و در جای دیگری مد نظر قرار خواهد گرفت.

نتیجه گیری

در این مقاله، قطبش پیسه تشکیل شده در عبور نور لیزر از یک تیغه دوشکستی مورد مطالعه نظری و عددی قرار گرفت. نشان داده شد که قسمت های مختلف پیسه دارای قطبش های متنوعی شامل قطبش خطی، دایروی و انواع قطبش بیضوی هستند و، به عبارت دیگر، هر نقطه از پیسه دارای قطبش خاص خود می باشد. چنین توزیع قطبشی می تواند بسیار کاربردی باشد مثلاً با استفاده از مدل های مناسب می توان اطلاعاتی راجع به نوع ناهمسانگردی محیط (اعم از دوشکستی، دورنگی، الکترواپتیکی، مغناطواپتیکی و ...) و نیز میزان پستی و بلندی سطوح به دست آورد. انجام این موارد جزء کارهای در حال بررسی نویسندگان مقاله می باشد.

سپاسگزاری

از دانشگاه ملایر به خاطر حمایت از این کار پژوهشی قدردانی می شود.

مرجع ها

[۱] Lisa M. Richards et al, “Low-cost laser speckle contrast imaging of blood flow using a webcam’, *BIOMEDICAL OPTICS EXPRESS* **4**, No. 10, (2013) 2269-2283.

[۲] E. Kenny et al, “Ocular microtremor measurement using laser-speckle metrology”, *Journal of Biomedical Optics* **18** (1) (2013) 016010.

[۳] W. Wang et al, “Optical vortex metrology based on the core structures of phase singularities in Laguerre Gauss transform of a speckle pattern”, *OPTICS EXPRESS* **14**, No. 22 (2006) 10195.

[٤] W. Wang et al, “Optical vortex metrology for nanometric speckle displacement measurement”, *OPTICS EXPRESS* **14**, No. 1 (2006) 120.

[٥] میرمعینی، سید محمدامین؛ رضوانی جلال، مسعود؛ عبدی کیان، علیرضا، "شناسایی بلورهای اپتیکی دوشکستی با قطبش سنجی پیسه لیزری"، *کنفرانس فیزیک ایران ۱۳۹۸*، دانشگاه تبریز.

[٦] هشت، یوجین؛ زایاک، آلفرد، *نورشناخت*، ترجمه: پروین بیات مختاری، حبیب مجیدی ذوالبنین، مرکز نشر دانشگاهی، چاپ هفتم، ۱۳۸۸.

[۷] رضوانی جلال، مسعود؛ ملک فر، رسول، "رشد آزمایشگاهی بلورهای با خاصیت اپتیکی غیر خطی $Ba(NO_3)_2$ و $LiIO_3$ و کاربرد آنها در طراحی لیزرها و مبدل های فرکانسی رامان"، *پایان نامه کارشناسی ارشد فیزیک*، دانشگاه تربیت مدرس، ۱۳۸٤.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مطالعه عددی معادله دیراک با تقارن اسپینی به روش شبکه‌ای فوریه

آقایی، سهراب[۱]؛ چناقلو، علیرضا[۲]

[۱] دانشکده علوم پایه، دانشگاه فرهنگیان، تهران، ایران

[۲] گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه صنعتی سهند تبریز، ایران

چکیده

در این مقاله معادله دیراک با تقارن اسپینی بررسی می‌شود. با استفاده از روش شبکه‌بندی فوریه، ویژه مقادیر انرژی در حضور پتانسیل Mathieu به صورت عددی محاسبه می‌گردد. سپس نتایج عددی بدست آمده با نتایج تحلیلی مقایسه می‌شوند.

واژه های کلیدی: معادله دیراک، روش شبکه‌ای فوریه، تقارن اسپینی، پتانسیل *Mathieu*

Numerical study of the Dirac equation by spin symmetry using the Fourier grid method

Aghaei, Sohrab[1]; Chenaghlou, Alireza[2]

[1] *Department of Sciences, Farhangian University, Tehran, Iran*

[2] *Department of Physics, Faculty of Sciences, Sahand University of Technology, Tabriz, Iran*

Abstract

In this paper, the Dirac equation is investigated with spin symmetry. The energy eigenvalue is numerically obtained in the presence of the Mathieu potential by using the Fourier grid method. Finally, the numerical results are compared with the analytical result.

***Keywords**: Dirac equation, Fourier grid method, Spin symmetry, Mathieu potential*

PACS No. 2, 3,

مقدمه

برای مطالعه نسبیتی ساختارهای مولکولی و اتمی، روش‌های حل دقیق و شبه دقیق متفاوتی ارائه شده است که می‌توان با استفاده از آنها طیف کامل انرژی یا بخشی از طیف را بدست آورد [۱-۳]. اما بررسی اینگونه ساختارها زمانی که وابستگی زمانی نیز داشته باشد، مانند اندرکنش اتم-لیزر و اندرکنش یون-اتم در بسیاری از موارد به صورت دقیق یا حتی شبه دقیق امکان‌پذیر نیست [٤-٦]. برای بررسی اینگونه مسائل از روش‌های عددی که به روش‌های طیفی مشهور هستند، استفاده می‌شود [۷ و ۸]. از مشهورترین روش‌های عددی می‌توان به روش شبکه‌ای فوریه اشاره کرد که در مرجع [٤] برای حالت مستقل از زمان معادله دیراک بسط داده شده است.

در این مقاله ابتدا معادله دیراک مستقل از زمان در حضور پتانسیل‌های اسکالر و برداری را در نظر گرفته و با فرض تقارن اسپینی، به معادله شرودینگر-گونه می‌رسیم. روش شبکه‌ای فوریه را بر اساس روش ارائه شده در مراجع [۸ و ۹] برای حل معادله شرودینگر توضیح می‌دهیم. سپس با در نظر گرفتن پتانسیل Mathieu، معادله شرودینگر-گونه بدست آمده از معادله دیراک را حل کرده و ویژه مقادیر انرژی را محاسبه می‌کنیم. سپس نتایج بدست آمده را با نتایج حاصل از حل دقیق معادله شرودینگر یک بعدی در حضور پتانسیل Mathieu را مقایسه می‌کنیم [۱۰].

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

معادله دیراک

شکل کلی معادله مستقل از زمان دیراک در حضور پتانسیل‌های اسکالر و برداری به صورت زیر داده می‌شود:

$$\left[c\vec{\alpha}.\vec{P}+\beta\left(mc^{2}+V_{s}(x)\right)+V_{v}(x)\right]\psi(x)=E\psi(x) \quad (1)$$

که در آن c سرعت نور، m جرم ذره نسبیتی، V_s پتانسیل اسکالر، V_v پتانسیل برداری، $\vec{P}=-i\hbar\frac{d}{dx}$ عملگر تکانه و ماتریس‌های $\vec{\alpha}$ و β بر حسب ماتریس‌های پائولی σ به صورت زیر داده می‌شوند:

$$\beta=\begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}, \vec{\alpha}=\begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix}. \quad (2)$$

با تعریف تابع موج چهار مؤلفه‌ای $\psi(x)$ به صورت

$$\psi(x)=\begin{pmatrix} \phi(x) \\ \xi(x) \end{pmatrix}, \quad (3)$$

معادله دیراک در نمایش دیراک-پائولی به صورت زیر تبدیل می‌شود:

$$c\vec{\sigma}.\vec{P}\xi(x)=\left(E-mc^{2}-V_{s}-V_{v}\right)\phi(x), \quad (4)$$

$$c\vec{\sigma}.\vec{P}\phi(x)=\left(E+mc^{2}+V_{s}-V_{v}\right)\xi(x). \quad (5)$$

اگر پتانسیل‌های اسکالر و برداری باهم برابر باشند، یعنی $V_s=V_v$، معادله دیراک به معادله شرودینگر-گونه تبدیل می‌شود و به آن تقارن اسپینی گفته می‌شود که برای اولین بار در فیزیک هسته‌ای و در هسته اتم‌ها مشاهده شده است. منظور از معادله شرودینگر-گونه، معادله شرودینگر بدون وابستگی اسپینی است که جرم و انرژی معادله مربوطه، به طیف انرژی نسبیتی وابسته است [۱۱ و ۱۲]. فرض می کنیم: $V_s=V_v=\frac{V}{2}$، در نتیجه داریم:

$$c\vec{\sigma}.\vec{P}\xi=\left(E-mc^{2}-V\right)\phi, \quad (6)$$

$$\xi=\frac{c\vec{\sigma}.\vec{P}}{E+mc^{2}}\phi. \quad (7)$$

رابطه (۷) را در رابطه (۶) جایگذاری می کنیم و به معادله شرودینگر-گونه زیر می‌رسیم:

$$\left(\frac{P^{2}}{2\tilde{m}}+V\right)\phi=\tilde{E}\phi, \quad (8)$$

که در آن

$$\tilde{E}=E-mc^{2}\ ,2\tilde{m}=\frac{E}{c^{2}}+m. \quad (9)$$

همانگونه که بیان شد و در رابطه (۹) نیز مشخص است، جرم و ویژه مقدار انرژی در معادله شرودینگر مانند، به طیف انرژی نسبیتی وابسته هستند.

روش شبکه‌ای فوریه

ابتدا فضا را در محدوده $\left(-\frac{R}{2},\frac{R}{2}\right)$ شبکه‌بندی کرده و نقاط شبکه به صورت زیر تعریف می‌شوند:

$$x_j=j\Delta x=j\frac{R}{2N},\qquad j=0,\pm1,\pm2,\ldots,\pm(N-1),+N \quad (10)$$

توجه داشته باشید که تعداد نقاط شبکه زوج است و برابر با $N_g=2N$ است [۹]. مقادیر تابع موج $\phi(x)$ در روی نقاط شبکه به صورت $\phi(x_j)=\phi_j$ تعریف شده و تابع موج پیوسته $\phi(x)$ با استفاده از پایه های $g_k(x)$ و برونیابی بین نقاط شبکه بدست می‌آید:

$$\phi(x)\approx\bar{\phi}(x)=\sum_{k=0}^{N_g}a_k g_k(x). \quad (11)$$

ضرایب بسط با در نظر گرفتن مقدار دقیق تابع موج بر روی نقاط شبکه و بسط بر حسب پایه‌ها محاسبه می‌گردند

$$\phi_j=\sum_{k=0}^{N_g-1}a_k g_k. \quad (12)$$

در روش شبکه‌ای فوریه، پایه‌های متعامد برحسب توابع نمایی مختلط به صورت زیر تعریف می‌شوند

$$g_k=e^{i2\pi kx/R},\qquad k=-\frac{N_g}{2},\ldots,0,\ldots,\frac{N_g}{2}-1. \quad (13)$$

با در نظر گرفتن تعامد پایه‌ها، ضرایب بسط به صورت زیر بدست می‌آیند:

$$a_k=\frac{1}{N_g}\sum_{j=1}^{N_g}\phi_j e^{-i2\pi kx_j/R}=\frac{1}{N_g}\sum_{j=1}^{N_g}\phi_j e^{-i2\pi kj/N_g}. \quad (14)$$

مزیت روش فوریه این است که ضرایب بسط a_k مفهوم فیزیکی دارند و می‌توان به عنوان نمایش گسسته تابع موج در فضای تکانه

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

تعبیر کرد. در این صورت نقاط شبکه در فضای تکانه عبارت است از:

$$p_j = -p_{\max} + \frac{2p_{\max}}{N} j. \qquad (15)$$

روش فوریه در واقع به طور طبیعی تقارن بین فضای مکان و فضای تکانه را منعکس می‌کند [۱۳].

برای حل عددی معادله شرودینگر-گونه (۸)، ابتدا باید عملگر هامیلتونی را روی هر یک از نقاط شبکه بدست آوریم. قسمت پتانسیل عملگر هامیلتونی در فضای مکان تعریف شده است و لذا به سادگی می‌توان تأثیر عملگر پتانسیل را روی هر یک از نقاط به صورت $V(x_j)\phi_j = V_j\phi_j$ بدست آورد. برای بدست آوردن تأثیر انرژی جنبشی در هر نقطه بر روی تابع موج داریم:

$$\frac{\vec{P}^2}{2m}\phi_j = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\phi_j \qquad (16)$$

با استفاده از تبدیل فوریه داده شده در رابطه (۱۲) و اندکی محاسبات، برای نقطه j ام عبارت زیر بدست می‌آید [۹]:

$$\frac{\vec{P}^2}{2m}\phi_j = \sum_{j'=-\frac{N_g}{2}+1}^{\frac{N_g}{2}} D_{jj'}\phi_{j'}$$

$$D_{jj'} = \frac{\hbar^2}{2m}\sum_{j'=-\frac{N_g}{2}+1}^{\frac{N_g}{2}} \frac{(-1)^{j'-j}}{2\sin^2\left(\frac{j'-j}{2N}\pi\right)}\phi_{j'} \qquad j \neq j'$$

$$D_{jj} = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{2N^2+1}{6}$$

(17)

و در نهایت با در نظر گرفتن تمام نقاط روی شبکه، به معادله ویژه مقداری زیر می‌رسیم

$$H\phi = \tilde{E}\varphi \qquad (18)$$

که در آن، ϕ ماتریس ستونی $N_g \times 1$ است و هر یک از عناصر آن، مقدار تابع موج روی هر یک از نقاط شبکه است و H یک ماتریس $N_g \times N_g$ است و عناصر آن به صورت زیر داده می‌شود:

$$H_{j'j} = D_{j'j} + V_j\delta_{j'j} \qquad (19)$$

برای بدست آوردن ویژه مقادیر انرژی کافی است تا ویژه مقادیر هامیلتونی (۱۹) را بدست آوریم.

حل معادله شرودینگر-گونه در حضور پتانسیل Mathieu

تابع پتانسیل در معادله شرودینگر-گونه (۸) را به صورت زیر در نظر می‌گیریم [۱۴]:

$$V(x) = a^2\sin^2(bx) - ab(2c+1)\cos(bx) + vb^2, a>0, b>0 \qquad (20)$$

که در آن a,b,c و v پارامترهای حقیقی هستند. جمله آخر در رابطه (۲۰) که می‌تواند به انرژی افزوده شود، فقط عمق چاه پتانسیل را تغییر می‌دهد. پارامتر b مرتبط با دوره تناوب توابع مثلثاتی است و برای سادگی ۱ در نظر گرفته می‌شود. اگر پارامتر c مثبت انتخاب شود دوره تناوب تابع پتانسیل به صورت $x \in (-\pi,\pi)$ داده می‌شود و اگر c منفی باشد به صورت $x \in (0,2\pi)$ انتخاب می‌شود.

برای بدست آوردن ویژه مقادیر انرژی، بازه $(-\pi,\pi)$ را به N_g قسمت تقسیم می کنیم. در نتیجه $\Delta x = \frac{2\pi}{N_g}$ و مکان هر نقطه از شبکه به صورت $x_j = j\Delta x$ بدست می‌آید. پتانسیل داده شده در رابطه (۲۰) را در روی هر یک از نقاط بدست آورده و بر روی قطر اصلی یک ماتریس $N_g \times N_g$ قرار می‌دهیم. سپس با استفاده از رابطه (۱۷) ماتریس $D_{jj'}$ را نیز محاسبه کرده و ماتریس هامیلتونی (۱۹) را بدست می‌آوریم. برای محاسبه ویژه مقادیر، مطابق مرجع [۱۰] پارامترهای ثابت را به صورت $a=2, b=1, v=2$ قرار می‌دهیم. همچنین برای پارامتر c نیز دو مقدار متفاوت ۱ و ۵ انتخاب می‌کنیم که ویژه مقادیر انرژی بدست آمده به ترتیب در جدول‌های ۱ و ۲ برای $N_g = 5$ و برای $c=1$ و $N_g = 10$ در جدول ۳ نمایش داده شده است. همانگونه که مشخص است نتایج بدست آمده از روش شبکه‌ای فوریه، با نتایج تئوری مرجع [۱۰] برای $c=1$ کاملا تطابق دارد. ولی با افزایش مقدار c، خطای روش عددی برای تعداد شبکه های کمتر، افزایش می یابد. با توجه به جدول شماره ۳، مشخص است که با افزایش تعداد شبکه‌ها دقت روش عددی نیز افزایش می‌یابد.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

جدول۱ : مقایسه ویژه مقادیر انرژی بدست آمده از روش شبکه‌ای فوریه و روش تحلیلی مرجع [۱۰] برای حالت $c=1$ و $N_g=5$

n	روش شبکه ای فوریه	روش تحلیلی مرجع [۱۰]
۰	۰/۰۴۷۵۵۴۵۸۸۰۷۸۸۴۳	۰/۰۴۷۵۵۴۵۸۸۱
۱	۱/۹۸۶۲۹۶۹۶۱۰۲۹۶۵۲	۱/۹۸۶۲۹۶۹۶۱۰
۲	۳/۵۶۷۳۶۴۱۹۲۹۲۰۵۲۴	۳/۵۶۷۳۶۴۱۹۲۹
۳	۴/۸۵۷۶۷۵۲۸۹۲۳۴۸۲۳	۴/۸۵۷۶۷۵۲۸۹۲
۴	۵/۲۳۶۳۴۸۹۵۴۴۱۹۳۹۶	–
۵	۷/۲۴۸۲۹۹۳۴۱۵۸۰۷۹۴	–

جدول ۲ : مقایسه ویژه مقادیر انرژی بدست آمده از روش شبکه‌ای فوریه و روش تحلیلی مرجع [۱۰] برای حالت $c=5$ و $N_g=5$

N	روش شبکه ای فوریه	روش تحلیلی مرجع [۱۰]
۰	−۷/۲۵۵۸۴۵۷۰۳۱۱۱۱۳۲	−۷/۲۴۳۲۲۱۵۷۰۳
۱	−۳/۷۲۷۴۶۴۷۶۸۳۸۴۵۱۲	−۳/۸۲۴۹۶۷۹۴۴۴
۲	−۱/۰۰۷۲۶۰۱۳۹۱۹۱۰۲۹	−۰/۶۰۲۱۸۴۶۸۲۹
۳	۳/۳۳۹۷۳۶۷۴۰۸۵۲۸۶۷	۲/۴۱۳۹۹۱۷۰۹۷
۴	۴/۴۸۰۰۷۸۴۰۷۸۶۱۲۹۲	–
۵	۱۰/۰۲۹۲۵۱۳۷۳۲۴۸۵۷۶	–

جدول ۳ : مقایسه ویژه مقادیر انرژی بدست آمده از روش شبکه‌ای فوریه و روش تحلیلی مرجع [۱۰] برای حالت $c=5$ و $N_g=10$

N	روش شبکه ای فوریه	روش تحلیلی مرجع [۱۰]
۰	−۷/۲۴۳۲۲۱۵۷۰۹۸۱۸۱۳	−۷/۲۴۳۲۲۱۵۷۰۳
۱	−۳/۸۲۴۹۶۷۹۲۸۴۰۳۹۰۰	−۳/۸۲۴۹۶۷۹۴۴۴
۲	−۰/۶۰۲۱۸۴۸۵۶۲۴۴۳۱۲	−۰/۶۰۲۱۸۴۶۸۲۹
۳	۲/۴۱۳۹۹۲۸۷۳۷۸۴۲۹۶	۲/۴۱۳۹۹۱۷۰۹۷
۴	۵/۲۰۸۳۸۸۲۵۴۶۱۸۳۸۷	–
۵	۷/۷۶۲۷۵۴۸۸۶۰۲۴۵۰۸	–

نتیجه گیری

معادله دیراک، در حضور پتانسیل‌های اسکالر و برداری بررسی شده و برای حالت تقارن اسپینی به معادله شرودینگر-گونه تبدیل شد. فضای مکان را شبکه‌بندی کرده و مقدار تابع موج را در روی هریک از نقاط شبکه بر حسب توابع متعامد تعریف کردیم و ضرایب بسط را با استفاده از تبدیلات فوریه محاسبه نمودیم. برای بدست آوردن ویژه مقادیر انرژی، هامیلتونی را برای هر یک از نقاط شبکه بدست آورده و به ماتریس هامیلتونی رسیدیم. با در نظر گرفتن پتانسیل Mathieu، هامیلتونی بدست آمده را قطری کرده و ویژه مقادیر انرژی را محاسبه نمودیم. با مقایسه نتایج بدست آمده برای ویژه مقادیر انرژی، با نتایج محاسبات تحلیلی در مرجع [۱۰]، مشاهده شد که هر چقدر تعداد نقاط شبکه زیاد باشد، به مقدار دقیق‌تری برای انرژی خواهیم رسید. همچنین با استفاده از این روش، تعداد حالات‌های برانگیخته بیشتری را به سادگی می‌توان محاسبه نمود.

مرجع‌ها

[۱] A.G. Ushveridze, *Quasi-exactly solvable models in quantum mechanics* (IOP, Bristol,1994).
[۲] C.L. Ho and P. Roy, *J. Phys. A* **39** (2003) 4617.
[۳] S. Aghaei, A. Chenghlou, *Commun. Theor. Phys.* **60** (2013) 296–302.
[۴] E. Ackad, M. Horbatsch, *J. Phys. A: Math. Gen.* **38** (2005) 3157–3171.
[۵] J. W. Braun, Q. Su and R. Grobe, *Phys. Rev.* A **59** (1999) 604
[۶] U. Becker, N. Gr¨un, W. Scheid, and G. Soff, *Phys. Rev. Lett.* **56** (1986) 2016.
[۷] X. Antoine, E. Lorin, *Journal of Computational Physics* **395** (2019) 583–601.
[۸] R. Kosloff, *Grid methods and their application to Schrodinger's equation, edited* by C. Cerjan (Kluwer Academic, Dordrecht, 1993).
[۹] R. Meyer, *J. Chem. Phys.* **52** (1970) 2053.
[۱۰] G.-H. Sun et al., *Physics Letters A* **384** (2020) 126480
[۱۱] F. L. Zhang and J. L. Chen, *J. Math. Phys.* **50** (2009) 032301.
[۱۲] I. Marquette, J. Math. Phys. **52** (2011) 042301.
[۱۳] E. Fattal, R. Baer and R. Kosloff, *Phys. Rev.* E **53** (1996) 1217.
[۱۴] A.V. Turbiner, *Contemp. Math. Phys.* **118** (1988) 467.

بهینه‌سازی ساختار فیلتر باند باریک فلز/دی‌الکتریک در محدوده ۶۴۰ تا ۷۶۰ نانومتر

قشلاقی، مریم؛ داودی، سمیه؛ ملکی، محمدهادی

پژوهشگاه علوم و فنون هسته ای، پژوهشکده فوتونیک و فناوری‌های کوانتومی
mgheshlaghi@aeoi.org.ir
sdavodi@aeoi.org.ir

چکیده

در این مقاله، یک فیلتر باند باریک با ماکزیمم پاسخ نوری در عبور و بازتاب بهینه شد. این ساختار پیشنهادی از یک دی‌الکتریک کاواک فابری پرو غیرمتقارن و یک لایه فیلم فلزی خیلی باریک با $n \sim k$ تشکیل شده است. ابتدا فیلتر بدون لایه فلزی، سپس با لایه فلزی (فلزات متفاوت) و در نهایت با تغییر در تعداد لایه‌های دی-الکتریک طراحی شد. انتخاب کروم به عنوان لایه فلزی به دلیل تقارن بیشتر در طیف بازتاب آن می‌باشد. همچنین با تغییر ضخامت لایه فلزی، بهترین ضخامت برای لایه کروم ۵ نانومتر است. با افزودن تعداد لایه‌های دی‌الکتریک، ماکزیمم عبور افزایش و ماکزیمم بازتاب در طول موج ۷۰۰ نانومتر کاهش یافت.

واژه های کلیدی: *کاواک فابری پرو، فیلتر باند باریک، لایه نشانی.*

Optimization of structure of metal/ dielectric narrow band filter in the range of 640 to 760 nm

Gheshlaghi, Maryam; Davodi, Somaye; Maleki, Mohammad hadi

Photonics and Quantum Technologies Research School, Nuclear Science and Technology Research Institute (NSTRL)
mgheshlaghi@aeoi.org.ir
sdavodi@aeoi.org.ir

Abstract

In this paper, a narrow band filter was optimized with maximum optical response in transmission and reflection. The proposed structure consists of an asymmetrical dielectric Fabry-Perot cavity and a very thin metal film layer with $n \sim k$. First, the filter was designed without a metal layer, then with a metal layer (different metals), and finally with a change in the number of dielectric layers. The choice of chromium as a metal layer is due to the greater symmetry in its reflection spectrum. Also, by changing the thickness of the metal layer, the best thickness for the chromium layer is 5 nm. By increasing the number of dielectric layers, the maximum of transmission increased and the maximum of reflection decreased in wavelength of 700 nm.

***Keywords**: Fabry-Perot cavity, narrow band filter, coating.*
PACS No. 73

مقدمه

فیلترهای باند باریک فیلم نازک کاربردهای بسیار گسترده‌ای در زمینه‌های مختلف از جمله انتشار/تحریک فلورسانس، طیف‌سنجی تصویری، تصویربرداری ویژه، ارتباطات فیبر نوری و غیره دارند. در نورشناسی، تداخل‌سنج فابری ـ پرو یا اتالون، از یک تیغه شفاف با دو سطح بازتابنده یا از دو آینه موازی با بازتابندگی زیاد ساخته می‌شود. طیف عبوری تابعی از طول‌موج است که پیک‌هایی بزرگ از تشدیدهای عبوری اتالون را نشان می‌دهد. این فیلترها با استفاده از فیلم چند لایه‌ای دی‌الکتریک غیرمتقارن و تک لایه فلزی با ضریب شکست $n \sim k$ (مانند Cr، Ni، W) ساخته می‌شوند. ویژگی مهم این فیلترها، ماکزیمم بودن پاسخ نوری عبور و بازتاب، آن است. در نتیجه، خواص نوری این ساختار نه تنها به عنوان فیلتر

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

عبوری بلکه فیلتر بازتابی مورد استفاده است [۱]. در این مقاله نسبت به فیلترهای ساخته شده مشابه، تفاوت در جنس لایه‌های دی‌الکترک و همچنین تغییر در ترتیب لایه‌ها می‌باشد تا شرایط بهینه فراهم گردد.

تئوری

معمولاً تشدیدکننده‌های لیزری به عنوان تشدیدکننده‌های فابری-پرو یا اتالون معرفی می‌شوند. لیزرهای نیمه‌رسانا بخاطر سختی در لایه نشانی سطوح کوچک ته مدارها، گاهی اوقات از هندسه فابری ـ پرو استفاده می‌کنند [۲]. تفاوت در تابع عبور یک اتالون بخاطر تداخل بین بازتابهای زیاد بین دو سطح می‌باشد. تداخل سازنده بخاطر همفاز بودن پرتوهای عبوری اتفاق می افتد، و باعث یک عبور با شدت بالا در اتالون می‌شود. اگر پرتوهای عبوری همفاز نباشند، تداخل ویرانگر اتفاق افتاده باعث عبور حداقلی می‌شود. پرتوهای بازتابی چه همفاز باشند چه نه بستگی به طول موج نور، زاویه‌ای که نور در اتالون حرکت می‌کند، ضخامت اتالون و ضریب شکست ماده بین سطوح بازتابی دارد. پرتوهای بازتابی چه همفاز باشند چه نه، به زاویه‌ای که نور در اتالون حرکت می‌کند (θ)، ضخامت اتالون (l) و ضریب شکست ماده بین سطوح بازتابی (n) و طول‌موج نور (λ)، بستگی دارند. اختلاف فاز بین دو بازتاب موفق برابر است با δ:

$$\delta = \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right) 2nl\cos\theta \qquad (۱)$$

اگر هر دو سطح دارای ضریب بازتاب R باشند، تابع عبور اتالون برابر است با

$$T_e = \frac{(1-R)^2}{1+R^2-2R\cos\delta} = \frac{1}{1+F\left(\sin\frac{\delta}{2}\right)^2} \qquad (۲)$$

جایی که

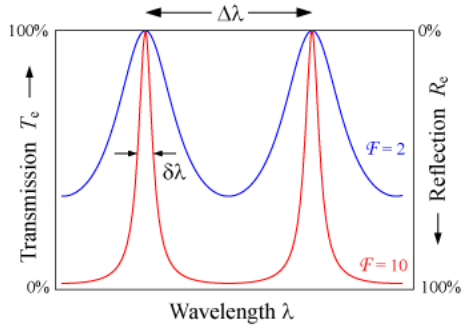
$$F = \frac{4R}{(1-R)^2} \qquad (۳)$$

ضریب ظرافت است. حداکثر عبور $(T_e = 1)$ زمانی اتفاق می افتد که اختلاف راه نوری $(2nl\cos\theta)$ بین هر دو پرتوی عبوری، ضریب صحیحی از طول موج باشد. بدون حضور جذب، بازتابندگی اتالون R_e مکمل عبور است، و داریم: $T_e + R_e = 1$. حداکثر بازتاب برابر است با

$$R_{max} = 1 - \frac{1}{1+F} = \frac{4R}{(1+R)^2} \qquad (۴)$$

و این هنگامی اتفاق می افتد که اختلاف راه نیم مضرب فردی از طول موج باشد. ضریب ظرافت نیز (برای $R > 0.5$) از رابطه زیر تخمین زده می‌شود:

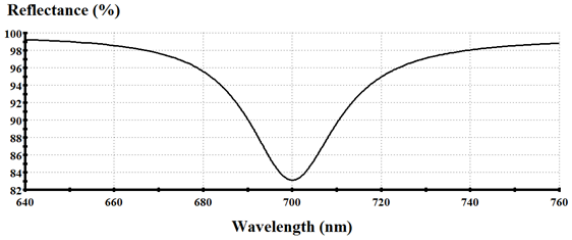
$$\mathcal{F} \approx \frac{\pi\sqrt{F}}{2} = \frac{\pi R^{\frac{1}{2}}}{1-R} \qquad (۵)$$



شکل ۱: عبور اتالون به عنوان تابعی از طول موج. یک اتالون با ظرافت بالا (خط قرمز) قله های واضح تر و حداقل عبور کمتری را نسبت به یک اتالون ظرافت کم (آبی) نشان می دهد [۳].

طراحی و بحث

ساختار ۱۳ لایه‌ای فیلم نازک با دی‌الکتریک‌های TiO_2 (n=2.83) به عنوان ماده با ضریب شکست بالا و MgF_2 (n=1.38) به عنوان ماده با ضریب شکست پایین در طول‌موج مرکزی ۷۰۰ نانومتر، روی زیرلایه شیشه را به صورت $Air/(HL)^2 2L(LH)^4/Glass$ در نظر می‌گیریم. شکل۲ و ۳ به ترتیب نمودارهای پاسخ نوری انعکاسی و عبوری ساختار فوق را نشان می دهد.

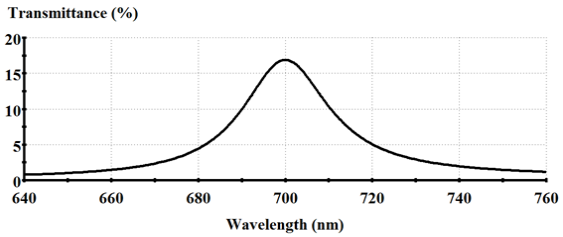


شکل۲: نمودار درصد بازتاب بر حسب طول موج برای ساختار $Air/(HL)^2 2L(LH)^4/Glass$ در محدوده ۶۴۰ تا ۷۶۰ نانومتر

در نمودار شکل۲، ملاحظه شد که درصد بازتاب در ۷۰۰ نانومتر مقدار ٪۸۳/۱۱ می‌باشد که در محدوده طول موج فوق، دارای کمترین مقدار است. شکل۳ نیز نمودار درصد بازتاب را در طول موج ۷۰۰ نانومتر نشان می‌دهد که دارای ماکزیمم ٪ ۱۶/۸۹ است (چون مقادیر ضرایب بازتاب و عبور در مرجع [۱] با یک رقم

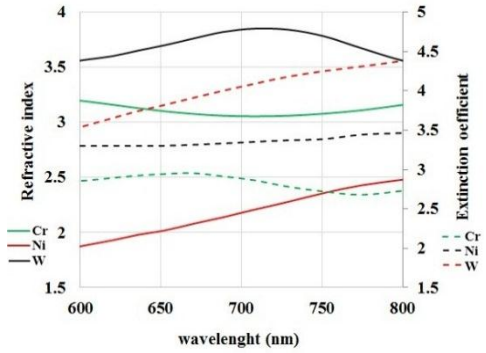
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

اعشار و در مرجع [۲] با سه رقم اعشار ذکر شده است در این مقاله، مقادیر فوق، با دو رقم اعشار گزارش شد).

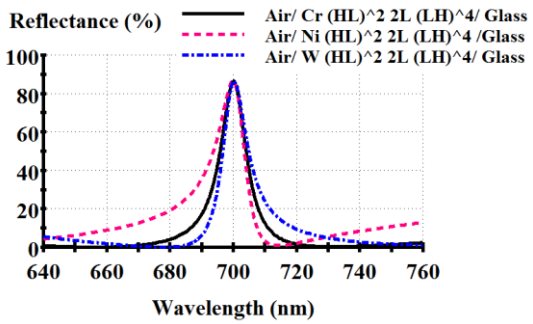


شکل۳: نمودار درصد عبور بر حسب طول موج برای ساختار $Air/\ (HL)^2 2L(LH)^4/Glass$ در محدوده ۶۴۰ تا ۷۶۰ نانومتر.

در این مرحله به ساختار فوق، تک لایه فلزی با شرط $n \sim k$ (مانند Cr، Ni، W) اضافه می‌کنیم. شکل۴ نمودار تغییرات ضریب شکست و ضریب خاموشی و شکل۵ نمودار درصد بازتاب ساختار $Air/Metal\ (HL)^2 2L(LH)^4/Glass$ را برای سه فلز کروم، نیکل و تنگستن نشان می‌دهد.

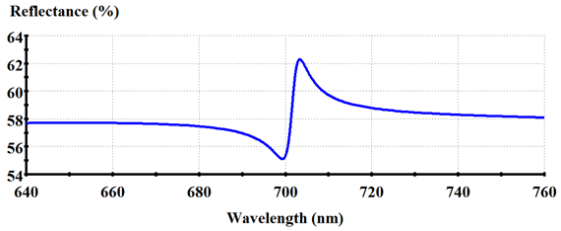


شکل۴: نمودار تغییرات ضریب شکست و ضریب خاموشی سه فلز Cr، Ni، W

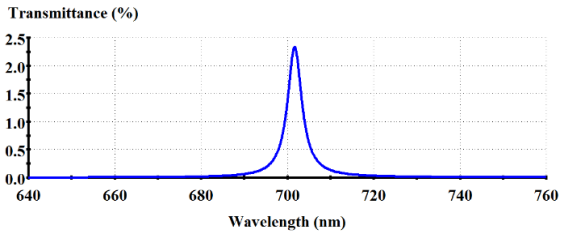


شکل۵: نمودار درصد بازتاب ساختار $Air/Metal\ (HL)^2 2L(LH)^4/Glass$

شکلهای۶ و ۷ نمودار پاسخ نوری ساختار اولیه با اضافه نمودن فلز کروم نشان داده است. ملاحظه شد برای ساختار $Air/$ $Cr\ (HL)^2 2L(LH)^4/Glass$ در طول‌موج ۷۰۰ نانومتر با ضخامت ربع موج لایه‌ها، روند بازتاب به‌صورت غیرگوسی بوده، بطوریکه برای فیلتر باند باریک مورد نظر، مطلوب نیست.

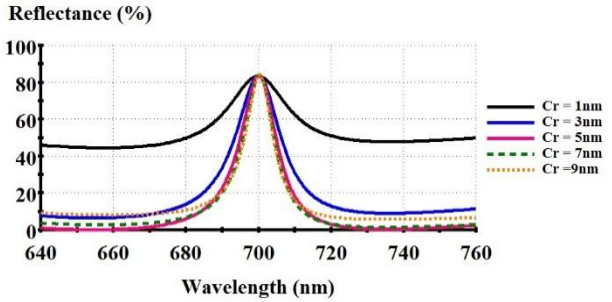


شکل۶: نمودار درصد بازتاب برحسب طول موج در محدوده ۶۴۰ تا ۷۶۰ نانومتر برای ساختار $Air/Cr\ (HL)^2 2L(LH)^4/Glass$



شکل۷: نمودار درصد عبور برحسب طول موج در محدوده ۶۴۰ تا ۷۶۰ نانومتر برای ساختار $Air/Cr\ (HL)^2 2L(LH)^4/Glass$

اکنون در ساختار $Air/Cr\ (HL)^2 2L(LH)^4/Glass$ برای تولید فیلتر باند باریک ضخامت لایه کروم را تغییر می‌دهیم. نمودار شکل۸ پاسخ نوری طیف انعکاسی برای ضخامت‌های ۱، ۳، ۵، ۷ و ۹ نانومتر لایه کروم برای ساختار فوق می‌باشد.

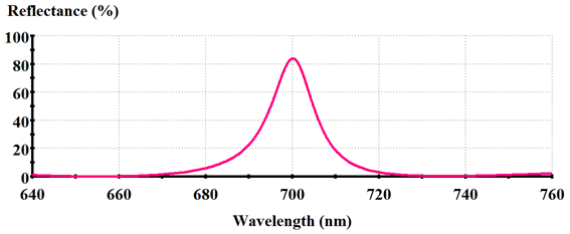


شکل۸: نمودار درصد بازتاب برحسب طول موج در محدوده ۶۴۰ تا ۷۶۰ نانومتر برای ساختار $Air/Cr\ (HL)^2 2L(LH)^4/Glass$ با ضخامتهای فیزیکی مختلف برای فلز کروم.

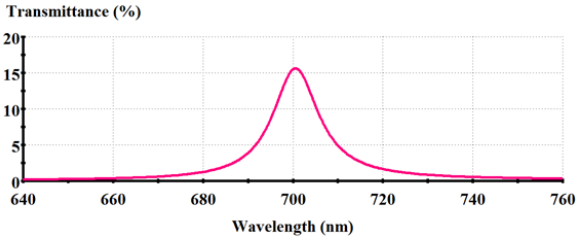
برای وضوح بیشتر نمودار پاسخ نوری بازتاب و عبور ساختار $Air/Cr\ (HL)^2 2L(LH)^4/Glass$ برای لایه کروم با ضخامت فیزیکی ۵ نانومتر به ترتیب در شکل‌های۹ و ۱۰ نشان داده شده

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

است. درصد بازتاب در طول موج ۷۰۰ نانومتر R= ۸۶/۴۳٪ و درصد عبور T= ۱۳/۱۰٪ شد.

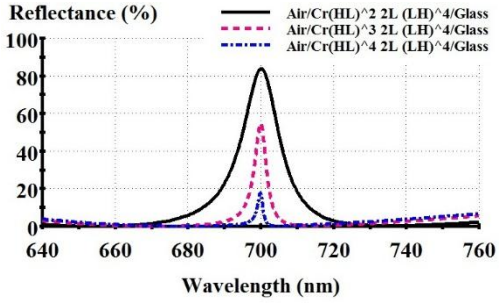


شکل۹: نمودار درصد بازتاب برحسب طول موج در محدوده ۶۴۰ تا ۷۶۰ نانومتر برای ساختار $Air/Cr\ (HL)^2 2L(LH)^4/Glass$، با ضخامت فیزیکی ۵ نانومتر برای فلز کروم.



شکل۱۰: نمودار درصد عبور برحسب طول موج در محدوده ۶۴۰ تا ۷۶۰ نانومتر برای ساختار $Air/Cr\ (HL)^2 2L(LH)^4/Glass$، با ضخامت فیزیکی ۵ نانومتر برای فلز کروم.

در این مرحله با تغییر تعداد لایه‌های دی‌اکتریک در ساختار اولیه، پاسخ نوری عبور و بازتاب برای دو ساختار $Air/Cr\ (HL)^3 2L(LH)^4/Glass$ و $Air/Cr\ (HL)^4 2L(LH)^4/Glass$ بررسی شد.

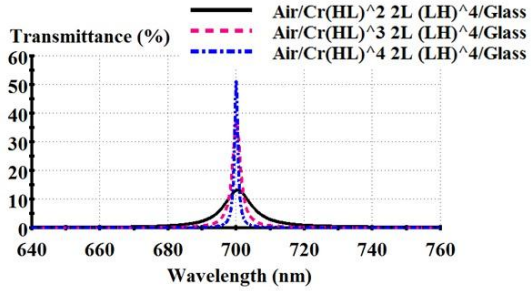


شکل۱۱: نمودار درصد بازتاب برحسب طول موج در محدوده ۶۴۰ تا ۷۶۰ نانومتر برای سه ساختار مختلف با ضخامت فیزیکی ۵ نانومتر برای کروم.

پاسخ نوری بازتاب و عبور برای هر سه ساختار در به شکل‌های ۱۱ و ۱۲ و همچنین مقادیر درصد بازتاب و عبور هر یک در طول موج ۷۰۰ نانومتر در جدول۱ آورده شده است.

جدول۱: درصد بازتاب و عبور ساختار انتخابی با افزایش تعداد لایه‌ها

ساختار فیلتر باند باریک فلز- دی‌الکتریک	R%	T%
$Air/Cr\ (HL)^2 2L(LH)^4/Glass$	۸۶/۴۳	۱۳/۱۰
$Air/Cr\ (HL)^3 2L(LH)^4/Glass$	۵۷/۵۵	۳۷/۱۲
$Air/Cr\ (HL)^4 2L(LH)^4/Glass$	۱۷/۸۶	۵۱/۰۳



شکل۱۲: نمودار درصد بازتاب برحسب طول موج در محدوده ۶۴۰ تا ۷۶۰ نانومتر برای سه ساختار مختلف با ضخامت فیزیکی ۵ نانومتر برای کروم.

نتیجه‌گیری

ابتدا ساختار $Air/\ (HL)^2 2L(LH)^4/Glass$ بررسی شد. با اضافه کردن فلز کروم به ساختار فوق مشاهده شد که نمودار درصد بازتاب نسبت به حالت قبل (بدون اضافه کردن فلز کروم به ساختار) کاملا معکوس شده است و بازتاب نیز مانند عبور در ۷۰۰ نانومتر پیک دارد. همچنین معلوم شد که برای فلز کروم در ساختار $Air/Metal\ (HL)^2 2L(LH)^4/Glass$ نه تنها شرط $n \sim k$ بهتر است بلکه طیف بازتابی آن نسبت به دو فلز تنگستن و نیکل متقارن‌تر است. به‌ازای افزایش ضخامت فیزیکی لایه کروم، پهنای باند کمتر شده و تقریبا ثابت ماند که بهترین حالت، ضخامت ۵ نانومتر برای بازه ۶۴۰ تا ۷۶۰ نانومتر به‌دست آمد. با افزایش تعداد لایه‌های دی‌الکتریک درصد بازتاب کاهش ولی درصد عبور افزایش می‌یابد. همچنین به ازای افزایش لایه‌های دی‌الکتریک، پهنای باند باریکتر شده که مطلوب است.

مرجع‌ها

[1] W. Shen, X. Sun, Y. Zhang, Z. Luo, X. Liu, P. Gu, *"Narrow band filters in both transmission and reflection with metal/dielectric thin films"*, Optics Communications 282: 242–246, 2009.

[2] N. Ismail, C. Calil Kores, D. Geskus, M. Pollnau, "*Fabry-Pérot resonator: spectral line shapes, generic and related Airy distributions, linewidths, finesses, and performance at low or frequency-dependent reflectivity*", Optics Express. 24 (15): 16366–16389, 2016.

[3] R. Attaluri, *"Growth and optimization of quantum dots-in-a-well infrared photodetectors"*, National Science Foundation, Defense Intelligence Agency, Air Force Office of Scientific Research, digitalrepository.unm.edu, 2007.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

اثر میدان الکتریکی بر ظرفیت گرمایی، پذیرفتاری مغناطیسی و چگالی حالت نانونوار زیگزاگی مولبیدن دی‌سلناید

عبدی ،مونا [۱]،آستین چپ ،بندر[۱] ؛ خوئینی، فرهاد[۲]

[۱] دانشکده فیزیک، دانشگاه کردستان،سنندج

[۲] گروه فیزیک، دانشگاه زنجان، زنجان

چکیده

در این پژوهش اثر میدان الکتریکی بر ظرفیت گرمایی، پذیرفتاری مغناطیسی و چگالی حالت‌های نانونوار زیگزاگی مولبیدن دی‌سلناید در مدل تنگ بست با استفاده از رهیافت تابع گرین غیرتعادلی بررسی می‌شود. از طریق تابع گرین غیرتعادلی چگالی حالت‌ها را محاسبه می‌کنیم و با محاسبه چگالی حالت‌ها ظرفیت گرمایی و پذیرفتاری مغناطیسی به دست می‌آیند. نتایج به دست آمده نشان می‌دهد که با افزایش میدان الکتریکی گاف انرژی کاهش پیدا می‌کند. در محدودی دمای پایین ظرفیت گرمایی و پذیرفتاری مغناطیسی با افزایش میدان الکتریکی افزایش پیدا می‌کنند.

واژه های کلیدی: *ظرفیت گرمایی ، پذیرفتاری مغناطیسی، میدان الکتریکی*

Influence of electric field on heat capacity, magnetic susceptibility and density of states of zigzag nanoribbon's $MoSe_2$

Abdi, mona[1]; Astinchap, Bander[1]; Khoeini, Farhad [2]

[1]Department of Physics, University of Kurdistan, Sanandaj
[2]Department of Physics, University of Zanjan, Zanjan

Abstract

In this study, effect of electric field on heat capacity, magnetic susceptibility and density of states of zigzag $MoSe_2$ nanoribbons in the tight-binding model by using non-equilibrium Green function approach is investigated. We calculate the densities of the states through the non-equilibrium green function, and then heat capacity and magnetic acceptability are obtained. Results show that as the electric field increases, the band gap decreases. At low temperatures, the heat capacity and magnetic susceptibility increase with increasing electric field.

Keywords: *Heat capacity, Magnetic susceptibility, Electric field*

PACS No. 72

مقدمه

پس از کشف گرافین به عنوان اولین نانوساختار دوبعدی، خواص و کاربردهای نانوساختارهای دوبعدی بسیار مورد توجه قرار گرفت. از مهم‌ترین عناصر خانواده‌های نانوساختارهای دوبعدی، فلزات واسطه دیکالکوژنه هستند که این مواد به دلیل داشتن خواص فیزیکی جالبی مانند گاف نواری مستقیم و غیر مستقیم، فروالکتریک و چگالی حامل‌های بار بالا مورد توجه هستند [۱]. یکی از مهم‌ترین اعضای این خانواده که تاکنون بسیار مورد مطالعه قرار گرفته است مولبیدن دی‌سولفاید می‌باشد و امروزه کاربردهای فراوانی پیدا کرده است. اما اخیرا نشان داده شده که مولیبدن دی‌سلناید دارای کاربردهای بیشتری نسبت به مولبیدن دی‌سولفاید است به همین دلیل مطالعات بر روی آن رو به افزایش می‌باشد. مولبیدن دی‌سلناید دارای خاصیت فلزی است که از این رو اهمیت بسیار بالای در کاربردهای الکتروشیمیایی و سلول‌های خورشیدی پیدا کرده است[۲] . مولبیدن دی‌سلناید یک نانوساختار دوبعدی است که اتم مولبیدن با پیوند کوالانسی به شش اتم سلنید متصل شده و یک ساختار هگزاگونال را به وجود می‌آورند. مولبیدی دی‌سلناید در حالت توده‌ای دارای گاف نوار غیرمستقیم و

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

در حالت تک‌لایه گاف نوار آن مستقیم است. از آنجایی که لایه‌ها از طریق نیروی وان‌درووالسی روی هم قرار گرفته‌اند می‌توان به این نیرو غلبه کرد و مولیبدن دی‌سلناید تک‌لایه را سنتز کرد. با ساخت مولیبدن دی‌سلناید تک‌لایه باعث کاربرد گسترده‌ی از آن در سیستم‌های الکترومکانیک و حسگرهای نوری شده است. چنگ و همکارانش با استفاده از تابع گرین غیرتعادلی و تئوری تابع چگالی به بررسی خواص الکترونیکی و کنترل گاف نوار مولیبدن دی‌سلناید پرداختند[۳]. لی و همکارانش با استفاده از تئوری تابع چگالی، رسانندگی گرمایی و چگالی حالت را برای مولیبدن دی‌سلناید به دست آوردند و سپس با اتصال ناهمگون به مولیبدن دی‌سولفاید نشان دادند که با اتصال آن به مولیبدن دی‌سولفاید پهنای گاف نوار کاهش میابد و باعث بهبود خواص الکترونیک آن برای استفاده در صنعت می‌شود[٤]. ما در این مقاله می‌خواهیم به بررسی خواص ظرفیت گرمایی و پذیرفتاری مغناطیسی نانونوار زیگزاگی مولیبدن دی‌سلناید با استفاده از مدل تنگ بست بپردازیم. نحوه‌ی تغییرات ظرفیت گرمایی و پذیرفتاری مغناطیسی با اعمال کردن میدان الکتریکی به ازای پهناهای مختلف را بررسی می‌کنیم.

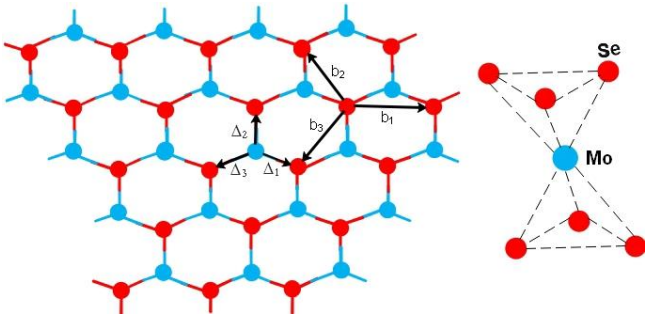
تئوری:

ظرفیت گرمایی و پذیرفتاری مغناطیسی نانونوار زیگزاگی مولیبدن دی‌سلناید را از طریق مدل تنگ‌بست می‌توان توصیف کرد. کامل‌ترین مدلی که برای توصیف ساختار الکترونیکی معرفی شده حالت ۱۱ نواری بوده که شامل اوربیتال‌های p و d برای اتم‌های Se و Mo است[٥]. با انجام دادن یک تبدیل یونیتاری مناسب در پایه اوربیتال p برای اتم‌های سلنید سبب یک ترکیب متقارن و پادمتقارن از اوربیتال p اتم سلنید در دولایه با توجه به تقارن بازتاب افقی می‌شود. بنابرین ما برای توضیح هامیلتونین با توجه به در نظر گرفتن تقارن بازتاب افقی در مدل تنگ‌بست اوربیتال‌های $(d_{z^2}, d_{x^2-y^2}, d_{xy})$ برای اتم مولیبدن و اوربیتال‌های $(\frac{1}{\sqrt{2}}(p_x^t + p_x^b), \frac{1}{\sqrt{2}}(p_y^t + p_y^b), \frac{1}{\sqrt{2}}(p_z^t - p_z^b))$ برای اتم سلنید را در نظر می‌گیریم. که در اینجا t و b اشاره به اتم‌های بالا و پایین اتم سلنید به ترتیب دارند[٦]. هامیلتونین در نمایش تنگ‌بست برحسب عملگرهای خلق و فنا به صورت زیر نوشته می‌شود.

(۱)

$$H = \sum_{i,\mu} \varepsilon_{i,\mu}^{Se} a_{i,\mu}^{\dagger} a_{i,\mu} + \varepsilon_{i,\mu}^{Mo} b_{i,\mu}^{\dagger} b_{i,\mu} + \sum_{\langle i,j\rangle \mu,\nu} t_{ij,\mu\nu}^{MoSe} b_{i,\mu}^{\dagger} a_{j,\nu} + h.c$$
$$+ \sum_{\langle i,j\rangle \mu,\nu} t_{ij,\mu\nu}^{MoMo} b_{i,\mu}^{\dagger} b_{j,\nu} + h.c + \sum_{\langle i,j\rangle \mu,\nu} t_{ij,\mu\nu}^{SeSe} a_{i,\mu}^{\dagger} a_{j,\nu} + h.c$$

که i و j نشان دهنده‌ی شماره اتم‌ها و μ و ν نشان دهنده‌ی اوربیتال‌ها هستند و $a_{i,\mu}(b_{j,\nu})$ عملگرهای فنا برای اتم سلنید (مولیبدن) است. $t_{ij,\mu\nu}^{MoSe}$، $t_{ij,\mu\nu}^{MoMo}$ و $t_{ij,\mu\nu}^{SeSe}$ نشان دهنده ضرایب پرش بر اساس راستاهای نشان داده شده در شکل ۱هستند.



شکل ۱: ساختار زیگزاگی مولیبدن دی‌سلناید و بردارهای همسایگان مرتبه اول ودوم

مقادیر پارمترهای تنگ‌بست مربوط به مولیبدن دی‌سلناید در جدول زیر گرد آوری شده‌اند.

جدول یک : پارامترهای مدل تنگ‌بست مولیبدن دی‌سلناید[۷]

میدان های بلور	E_0	-۱.۱۱٤
	E_2	-۱.٤۸۸
	E_p	-٤.۹۳۱
	E_z	-۷.٥۰۳
M-X	$V_{pd\sigma}$	۳.۷۲۸
	$V_{pd\pi}$	-۱.۲۲۲
X-X	$V_{pp\pi}$	-۰.۲۰٥
	$V_{pp\sigma}$	۱.۲٥٦
M-M	$V_{dd\sigma}$	-۰۸۲۳
	$V_{dd\pi}$	۰.۲۱٥
	$V_{dd\delta}$	۰.۱۹۲

با استفاده از قضیه بلاخ هامیلتونین نانونوار را به صورت زیر می‌نویسیم:

(۲)

$$H = H_{00} + H_{-10} e^{ika} + H_{-10}^{\dagger} e^{-ika}$$

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

که H_{00} ماتریس هامیلتونین سلول 0 و H_{-10} ماتریس هامیلتونین از سلول1- به0 است. k بردار موج الکترون در امتداد نوار، a=3.288 A° ثابت شبکه مولیبدن دی‌سلناید می‌باشد. علاوه بر ساختار نوار، چگالی حالت‌ها یک پارامتر اساسی برای تعیین خواص یک ماده است. بنابراین چگالی حالت را به صورت زیر می‌نویسیم:

$$D(E) = -\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}(Tr(g_s(E))) \qquad (۳)$$

چگالی حالت ها را برحسب تابع گرین محاسبه کردیم، تابع گرین به صورت زیر تعریف می‌شود.

$$g_s = ((E - i0^+)I - H_D - \sum_R(E) - \sum_L(E))^{-1} \qquad (٤)$$

که $\sum_L(E)$ و $\sum_R(E)$ سلف انرژی‌های سمت راست و چپ هستند، H_D هامیلتونین مربوط به دستگاه است. که ما این سلف انرژی‌ها رو از طریق روش [۸] به دست می‌آوریم. با مشخص بودن چگالی حالت ها میتوانیم پذیرفتاری مغناطیسی و ظرفیت گرمایی را به صورت زیر بنویسیم[۹] :

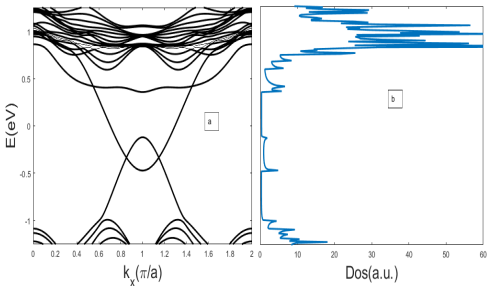
$$\chi(T) = \int_{-\infty}^{+\infty} dE(\frac{-\partial n_f(E)}{\partial E})D(E) \qquad (۷)$$

که $n_f = \frac{1}{1+e^{\beta\varepsilon}}$ تابع توزیع فرمی دیراک و T مشخص کننده دمای تعادلی است. ظرفیت گرمایی برحسب چگالی حالت ها به صورت زیر به دست می‌آیید:

$$C(T) = \int_{-\infty}^{+\infty} dE(\frac{\partial n_f(E)}{\partial T})ED(E) \qquad (۸)$$

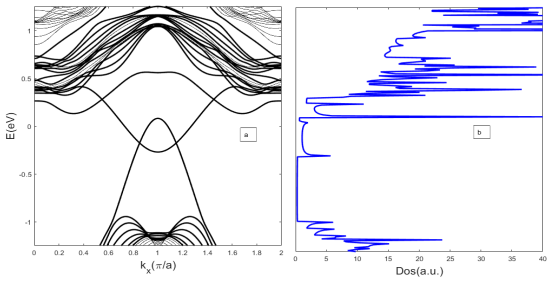
نتایج:

در این بخش نتایج عددی به دست آمده برای ظرفیت گرمایی و پذیرفتاری مغناطیسی برحسب دما و چگالی حالت ها در حضور میدان الکتریکی‌های مختلف نانونوار زیگزاگی مولیبدن دی‌سلناید را بررسی می‌کنیم. در شکل۲ نمودار چگالی حالت ها و نوارها انرژی نانونوار زیگزاگی مولیبدن دی‌سلناید به تعداد ۳۲ اتم در سلول واحد آن نشان داده شده است. در شکل ۲ می‌بینیم که نانونوار زیگزاگی مولیبدن دی‌سلناید تقریبا دارای گاف نوار ۱,۵ الکترون ولت بوده، ونسبتا دارای ویژگی فلزی می‌باشد.

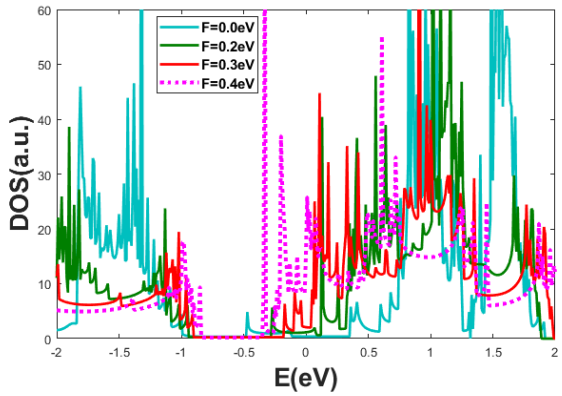


شکل۲: (a, b) نوارهای انرژی و چگالی حالت‌ها نانونوار زیگزاگی مولیبدن دی‌سلناید با ۳۲ اتم در سلول واحد

در شکل ۳ و ٤ نمودار چگالی حالت ها و نوارهای انرژی نانونوار زیگزاگی مولیبدن دی‌سلناید با اعمال کردن میدان الکتریکی نشان داده شده است. که در شکل ۳ مشاهده می‌شود با اعمال میدان الکتریکی باعث کاهش گاف نوار شده است. در شکل ٤ در نمودار چگالی حالت ها می‌بینیم که با بیشتر شدن میدان الکتریکی باعث کاهش پهنای گاف می‌شود.



شکل۳: (a ,b) نوارهای انرژی و چگالی حالت‌ها نانونوار زیگزاگی مولیبدن دی‌سلناید با ۳۲ اتم در سلول واحد با اعمال کردن میدان الکتریکی ۰,۲ eV

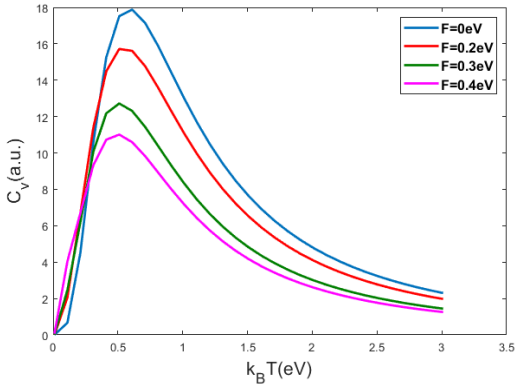


شکل ٤: چگالی حالت نانوار زیگزاگی مولیبدن دی‌سلناید با ۳۲ اتم در سلول واحد به ازای میدان مغناطیسی‌های مختلف(F=0.0,0.2,0.3,0.4 eV)

در شکل ۵ نمودار ظرفیت گرمایی برحسب دما به ازای میدان الکتریکی‌های مختلف برای نانونوار زیگزاگی مولیبدن دی‌سلناید با ۳۲ اتم در سلول واحد آن نشان داده شده است. ابتدا با افزایش دما

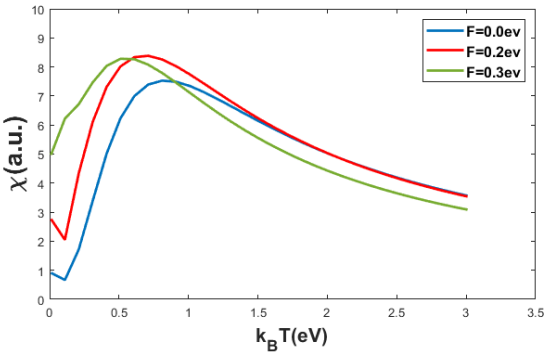
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

ظرفیت گرمایی افزایش پیدا کرده است تا اینکه در دمای $k_BT \approx 0.5eV$ به بیشترین مقدار خود رسیده است. سپس با افزایش بیشتر دما ظرفیت گرمایی به صورت یک تابع نمایی کاهش پیدا می‌کند. در محدوده‌ی دما پایین طبق معادله‌ی دبای انیشتن $C(T) \approx e^{-E_g/T}$ هرچه قدر مقدار گاف کاهش پیدا کند ظرفیت گرمایی افزایش میابد. در شکل ۵ مشاهده می‌شود در محدودی دمای پایین به ازای یک مقدار ثابت دما با افزایش میدان الکتریکی ظرفیت گرمایی افزایش پیدا کرده است که به این دلیل‌ست که افزایش میدان الکتریکی باعث کاهش مقدار گاف انرژی می‌شود. در دمای $k_BT\rangle 0.5eV$ به ازای یک مقدار دمای ثابت با افزایش میدان الکتریکی ظرفیت گرمایی کاهش پیدا کرده است.



شکل۵: نمودار ظرفیت گرمایی نانونوار زیگزاگی مولیبدن دی‌سلناید با تعداد ۳۲ اتم در سلول واحد آن در حضور میدان الکتریکی(F=0.0,0.2,0.3,0.4 eV)

شکل ٦ نمودار پذیرفتار مغناطیسی نانونوار زیگزاگی مولیبدن دی‌سلناید با ۳۲ اتم در سلول واحد آن به ازای میدان الکتریکی‌های مختلف نشان داده شده است. در شکل ۵ ابتدا پذیرفتاری مغناطیسی با افزایش دما افزایش پیدا کرده است. در محدوده‌ی دمای پایین تغییرات پذیرفتاری مغناطیسی از معادله بریلئون پیروی می‌کند به همین دلیل است که پذیرفتار مغناطیسی در حال افزایش است. در دمای‌های $k_BT\rangle 1eV$ پذیرفتاری مغناطیسی با افزایش دما روند کاهشی دارد. بر طبق قانون کوری وایس در محدوده‌ی دمای بالا پذیرفتاری مغناطیسی با عکس دما متناسب است یعنی با افزایش دما پذیرفتاری مغناطیسی کاهش پیدا می‌کند. در محدودی دمای پایین به ازای یک مقدار ثابت دما با افزایش میدان الکتریکی پذیرفتاری مغناطیسی افزایش پیدا کرده است. از آنجایی که پذیرفتاری مغناطیسی از تابع بریلئون پیروی می‌کند، با کاهش گاف انرژی پذیرفتاری مغناطیسی افزایش میابد. و در دماهای بالاتر از $k_BT\rangle 1eV$ به ازای یک مقدار ثابت دما با افزایش میدان الکتریکی پذیرفتاری مغناطیسی کاهش پیدا کرده است.



شکل٦: پذیرفتاری مغناطیسی نانونوار زیگزاگی مولیبدن دی‌سلناید با تعداد ۳۲ اتم در سلول واحد آن در حضور میدان الکتریکی(F=0.0,0.2,0.3 eV)

نتیجه گیری

نتایج به دست آمده نشان می‌دهد که با اعمال کردن میدان الکتریکی به چگالی حالت ها و نوارهای انرژی نانونوار زیگزاگی مولبیدن دی‌سلناید با ۳۲ اتم در سلول واحد آن منجر به کوچک شدن گاف نمودار شده است و با افزایش میدان الکتریکی در محدوده‌ی دمای پایین ظرفیت گرمایی و پذیرفتاری مغناطیسی افزایش پیدا کنند.

مرجع‌ها

[1] Y. Zhang et al, "Direct observation of the transition from indirect todirect bandgap in atomically thin epitaxial MoSe2". Nat Nanotechnol **9**, (2014) 111–115

[2]A. Eftekhari, "The rise of lithium–selenium batteries", Sustain. Energy Fuels **1**, (2017) 14-29

[3] J. Chang et al,"Ballistic performance comparison of monolayer transition metal dichalcogenide MX_2 (M = Mo, W; X = S, Se, Te) metal-oxide-semiconductor field effect transistors", Journal of Applied Physics **115**, (2014) 084506

[4] L. Changhoon et al, "Density functional theory investigation of the electronic structure and thermoelectric properties of layered MoS_2, $MoSe_2$ and their mixed-layer compound", Journal of Solid State Chemistry **211**(2014)113–119

[5] E. Cappelluti et al," Tight-binding model and direct-gap/indirect-gap transition in single-layer and multilayer MoS_2**",** PhysRev.B **88,** (2013)075409

[6] F. Khoeini, Kh. Shakouri, and F. M. Peeters," Peculiar half-metallic state in zigzag nanoribbons of MoS_2: Spin filtering", PhysRevB.**94.** (2016)125412

[7] J. Ángel Silva-Guillén et al," Electronic Band Structure of Transition Metal Dichalcogenides from Ab Initio and Slater–Koster Tight-Binding Model". Appl. Sci.**6**, (2016)284

[8] T. C. Li and Shao-Ping Lu," Quantum conductance of graphene nanoribbons with edge defects", Phys. Rev. B **77**, (2008) 085408

[9]H. Rezania·, M. Yarmohammadi," Effect of Gap Parameter on Electronic Heat Capacityand Magnetic Susceptibility of Graphene in the Presenceof Holstein Phonons", Journal of Superconductivity and Novel Magnetism **31**,(2017) 1293–1299

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

اثر میدان مغناطیسی بزرگ بر رابطه جرم-شعاع ستاره نوترونی

علی محمد علی لویی ؛ حمید رضا مشفق

دانشکده فیزیک- دانشگاه تهران ، انتهای خیابان کارگر شمالی ، تهران ،ایران

چکیده

رابطه جرم شعاع ستاره نوترونی در حضور میدان مغناطیسی قوی در چارچوب روش وردشی با پایین ترین مرتبه قید بدست آمده است. اثر .میدان مغناطیسی را بر ترازهای لاندائوی الکترون های پوسته ستاره نوترونی در نظر گرفته ایم. برای معادله حالت هسته ستاره از روش وردشی با پایین ترین مرتبه قید و برهمکنش بین نوکلئونی AV_{18} به همراه نیروهای سه جسمی بهره برده ایم. نشان داده ایم که وجود میدان های مغناطیسی قوی موجب افزایش شعاع ستاره می شود درحالی که اثر ناچیزی بر جرم بیشینه ستاره دارد.

واژه های کلیدی: *ستاره نوترونی، معادله حالت، میدان مغناطیسی*

Intense Magnetic field effect on mass-radius relation of Neutron stars

Mohammad Ali Louei, Ali; Moshfegh, Hamidreza

Department of Physics, University of Tehran, Tehran, Iran

Abstract

The effect of intense magnetic field on landau levels in neutron star matter is investigated. The equation of state of the neutron star core is extracted from the lowest order constrained variational method by employing two body AV_{18} interaction supplemented by Urbana type three body force. It is shown that the intense magnetic field increases the radii of star while has not considerable effect on maximum mass of neutron stars.

***Keywords**: Neutron Stars, Equation of State, Magnetic Field*

PACS No. 21.30.fe , 21.65.mn

مقدمه

ستاره های نوترونی از متراکم ترین اجرام شناخته شده عالم هستند. ستاره های نوترونی جرمی از مرتبه دو برابر جرم خورشید و شعاعی از مرتبه 10 کیلومتر دارند. ساختار این ستاره ها بیشتر از نوترون ها و اندکی پروتون و الکترون در حال تعادل بتایی است.البته سناریو های دیگری نیز برای ساختار آنها مانند وجود هایپرون ها و ماده کوارکی می توان در نظر گرفت. از این رو این ستاره ها به عنوان آزمایشگاهی طبیعی برای محک زدن نظریه های فیزیک ذرات-هسته ای و گرانش هستند[1]. پژوهش های بسیاری در مورد ستاره های نوترونی و ویژگی های مختلف آن صورت گرفته است. یکی از ویژگی های منحصر به فرد این ستاره ها وجود میدان مغناطیسی بسیار عظیم از مرتبه $B\sim10^{12}G$ است[1] .ابرشارگی و ابررسانایی این ستاره ها پیامد این میدان مغناطیسی عظیم است. در پژوهش پیش رو میخواهیم اثر این میدان مغناطیسی بر ترازهای لاندائو در ماده ستاره نوترونی و به دنبال آن اثر آن را بر شعاع این ستاره ها بررسی کنیم. از آنجا که شعاع ستاره به شدت به معادله حالت پوسته ستاره حساس است اثر میدان معناطیسی را بر معادله حالت پوسته بررسی می کنیم. برای معادله حالت هسته ستاره از روش وردشی با پایین ترین مرتبه قید[1](LOCV) با به کار گیری پتانسیل بین نوکلئون AV_{18} به همراه نیروی سه جسمی در شرایط تعادل مقابل واپاشی بتا زا سود می جوییم[2] :

$$\mu_n = \mu_p + \mu_e \qquad (1)$$

[1] Lowest-Order Constrained Variational

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

که μ پتانسیل شیمیایی است. سر انجام با معادلات TOV[2] رابطه جرم- شعاع را یافته و نتایج را ارائه می دهیم.

ساختار ستاره نوترونی

ساختار ستاره نوترونی را می توان چهار قسمت اصلی تقسیم کرد. چگالی پوسته خارجی از زیر اتمسفر تا $\rho = 4 \times 10^{11} \frac{g}{cm^3}$ ادامه می یابد و ضخامت آن چند صد متر است. این قسمت شامل گاز الکترونی غیر تبهگن و مقداری یون های مثبت و منفی است و بخش اصلی فشار در این قسمت به دلیل همین گاز الکترونی است. چگالی پوسته داخلی با ضخامت تقریبی یک کیلومتر؛ از زیر پوسته خارجی شروع شده و تا $0.5\rho_0$ ادامه می یابد.که $\rho_0 = 2.8 \times 10^{14} \frac{g}{cm^3}$ چگالی اشباع هسته‌ای است.ماده اصلی تشکیل دهنده پوسته داخلی الکترون ها،نوترون ها و هسته اتمی غنی شده از نوترون است[1]. هسته خارجی با چگالی بین $0.5\rho_0$ تا $2\rho_0$ ضخامت چند کیلومتر دارد و ماده تشکیل دهنده این قسمت نوترون ها با چند درصد پروتون،الکترون و احتمالا میون است.این بخش سهم عمده جرم ستاره را در بر دارد. هسته داخلی نیز با ضخامت چندین کیلومتر و چگالی بزرگتر از $2\rho_0$ و چگالی مرکزی حدود $10\rho_0$ است. در این قسمت با افزایش چگالی ممکن است نوکلئون ها به ذرات دیگری مانند هایپرون ها،کائون ها،پایون ها،کوارک ها و غیره تبدیل شوند. در برخی مدل ها برای سادگی کار هسته داخلی خارجی را یکسان میگیرند وبرای پوسته داخلی و خارجی نیز معادله حالت یکسانی درنظر گرفته میشود[1]. در این پژوهش ما نیز از این مدل ساده شده استفاده میکنیم.

معادله حالت هسته ستاره

روش وردشی با پایین ترین مرتبه قید (LOCV) روشی کارآمد و شناخته شده برای بررسی خواص ماده هسته ای است [2]. در این روش تابع موج بس ذره‌ای آزمونی $\psi = \mathcal{F}\varphi$ به عنوان مبنای کار در نظر گرفته می شود،که φ دترمینان اسلیتر توابع موج تک ذره‌ای A نوکلئون بدون برهمکنش است و $\mathcal{F}$ عملگر همبستگی A جسمی است که تقریب جاسترو به صورت حاصلضرب عملگرهای همبستگی دو جسمی f در نظر گرفته می شود. هامیلتونی را به شکل زیر می نویسیم:

$$H_{NR} = \sum_{i=1}^{A} \frac{P_i^2}{2m} + \sum_{i<j} v(ij) + \sum_{i<j<k} v(ijk) \qquad (2)$$

که $v(ij)$ و $v(ijk)$برهمکنش های دو و سه نوکلئونی هستند.می توان انرژی را به صورت بسط خوشه‌ای تا خوشه های دو جسمی نوشت:

$$E[f] = \frac{1}{A}\frac{\langle\Psi|H|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle} = E_1 + E_2 \qquad (3)$$

E_1 سهم خوشه های تک ذره ای یا همان انرژی جنبشی گاز ایده‌آل است. E_2 یک تابعی(functional) بر حسب توابع همبستگی f می باشد. با کمینه کردن E_2.تحت شرط بهنجارش ؛معادلات اویلر لاگرانژ بر حسب توابع همبستگی به دست آیند. با حل این معادلات و برقراری قید بهنجارش توابع همبستگی و به دنبال آن انرژی خوشه های دو جسمی بدست می آید. برای برهمکنش های دو جسمی از پتانسیل شناخته شد AV_{18} و برای نیرو های سه جسمی برهمکنش UIX ، از طریق پتانسیل دو جسمی موثر وارد فرمولبندی می شود. جزییات در مرجع [3] آمده است. سرانجام از آنجایی که ماده هسته‌ای ستاره در مقابل واپاشی بتا زا پایدار است, معادلات، در شرایط پایداری ماده در مقابل واپاشی بتا (رابطه (1)) و همچنین رابطه خنثایی بار الکتریکی ستاره نوشته می شوند. الکترو نها در ماده تعادل بتایی نسبیتی در نظر گرفته می شوند. با این شرایط انرژی تنها بر حسب چگالی باریونی به دست می آید. در انتها معادله حالت ماده ستاره نوترونی یعنی فشار برحسب چگالی را از روابط ترمودینامیکی شناخته شده از رابطه انرژی بدست می آوریم[3].

معادله حالت پوسته و حضور میدان مغناطیسی

حضور میدان مغناطیسی در ستاره های نوترونی با دیدگاه های متفاوتی بررسی شده است[1]. اما از مهمترین آنها می توان به اثر میدان مغناطیسی روی تراز های لاندائو الکترون ها نام برد [4]. ترازهای لاندائو برای ذرات باردار تعریف می شود بنابر این در ستاره نوترونی تنها الکترون ها و پروتون ها در فشار نهایی ناشی از تغییر

[2] Tolman-Oppenheimer-Volkoff

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

تراز های لاندائو دخالت دارند. الکترون ها در ماده ستاره نوترونی نسبیتی هستند. انرژی یک الکترون را با حل معادله نسبیتی دیراک به صورت زیر به دست می آوریم:

$$E_e^2 = P_z^2c^2 + m^2c^4\left(1 + (2\nu + 1 + \sigma)\frac{e\hbar B}{m^2c^3}\right) \quad (4)$$

در رابطه (4)، B بزرگی میدان مغناطیسی، m جرم الکترون، P_z تکانه الکترون در راستای محور z، σ تصویر اسپین روی محور z است. سرانجام ν به تراز های لاندائو معروف است که مقادیر صحیح 0,1,2,.. دارند.

میدان مغناطیسی بحرانی به صورت $B_{cr} = \frac{m^2c^3}{e\hbar}$ تعریف می شود. برای الکترون این میدان بحرانی از مرتبه $10^{14}G$ است. اما در مورد پروتون ها میدان مغناطیسی بحرانی بسیار بزرگ $B\sim10^{18}G$، است. انرژی مربوط به قسمت تراز های لاندائو در مقایسه با انرژی سکون پروتون بسیار ناچیز است و اثر تراز های لاندائو بسیار ناچیز می شود. بنابر این تنها در محاسباتمان الکترون ها را در نظر می گیریم. در هسته ستاره نوترونی کسر الکترون ها بسیار ناچیز است (کمتر از پنج درصد کل ذرات [1,3]) و بیشتر الکترونهای یک ستاره نوترونی در پوسته آن قرار گرفته اند. از این رو به عنوان یک تقریب خوب اثر میدان مغانطیسی بر تراز های لاندائو را در معادله حالت پوسته ستاره نوترونی بررسی می کنیم[4].

تعداد حالت های موجود در فضای تکانه (تعداد الکترون ها در واحد حجم) دربازه ΔP_z برای یک υ خاص به صورت $g_\nu\left(\frac{eB}{h^2C}\right)\Delta P_z$ است.برای زمانی که میدان مغناطیسی صفر است چگالی عددی الکترون ها از رابطه

$$\frac{2}{h^3}\int d^3P = \frac{1}{\pi^2\lambda_e^3}\int\left(\frac{P}{mC}\right)^2 d\left(\frac{p}{m_C}\right) \quad (5)$$

به دست آید که در حضور میدان مغناطیسی با رابطه زیر جایگزین می شود:

$$\sum_\nu \left(\frac{eB}{h^2c}\right) g_\nu \int dP_z = \frac{B^*}{(2\pi)^2\lambda_e^3}\sum_\nu g_\nu \int d\left(\frac{P_z}{mc}\right) \quad (6)$$

در روابط بالا $\lambda_e = \frac{\hbar}{mc}$ طول موج کامپتون است و $B^* = \frac{B}{B_{cr}}$.

پس از انتگرال گیری که حد بالای انتگرال تکانه فرمی است چگالی الکترون ها در دمای صفر

$$n_e = \sum_{\nu=0}^{\nu_m} \frac{2eB}{h^2c} g_\nu P_e^F(\nu) \quad (7)$$

است که بیشینه تکانه فرمی به صورت زیر تعریف می شود:

$$P_e^F(\nu)^2c^2 + m^2c^4(1 + 2\nu B^*) \equiv \mu_e^2 \quad (8)$$

در این رابطه μ_e پتانسیل شیمیایی(انرژی فرمی) الکترون است. روشن است که بیشینه تراز لاندائو ν_m که توسط الکترون ها اشغال می شود تحت شرایط $P_e^F(\nu)^2 \geq 0$ به دست می آید[4]. دو کمیت بدون بعد به صورت $\chi_e(\nu) = \frac{P_e^F(\nu)}{mc}$ و $\gamma_e = \frac{\mu_e}{mc^2}$ تعریف می کنیم سپس رابطه (6) که همان چگالی عددی الکترون ها در حضور میدان مغناطیسی است را در انرژی تک تک الکترون ها که از رابطه (4) به دست آمده ضرب می کنیم و روی νها جمع بسته و انتگرال گیری کنیم. با این محاسبات چگالی انرژی الکترون ها به دست می آید:

$$\varepsilon_e = \frac{2B^*}{(2\pi)^2\lambda_e^3}\sum_{\nu=0}^{\nu_m}\int_0^{\chi_e(\nu)} E_e\, d\left(\frac{P_z}{m_C}\right) \quad (9)$$

در نتیجه:

$$\varepsilon_e = \frac{2B^*}{(2\pi)^2\lambda_e^3}mc^2\sum_{\nu=}^{\nu_m} g_\nu \times (1 + 2\nu B^*)\Psi\left[\frac{\chi_e(\nu)}{(1 + 2\nu B^*)^{\frac{1}{2}}}\right] \quad (10)$$

که

$$\Psi(x) = \frac{1}{2}x\sqrt{1 + x^2} + \frac{1}{2}ln\left(x + \sqrt{1 + x^2}\right) \quad (11)$$

با توجه به چگالی انرژی به دست آمده می توانیم فشار گاز الکترونی که همان معادله حالت است را به طریق زیر حساب کنیم:

$$P_e = n_e^2\frac{d}{dn}\left(\frac{\varepsilon_e}{n_e}\right) = -\varepsilon_e + n_e\mu_e \quad (12)$$

در نتیجه

$$P_e = \frac{2B^*}{(2\pi)^2\lambda_e^3}mc^2\sum_{\nu=}^{\nu_m} g_\nu$$

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

$$\times (1+2\nu B^*)\eta\left[\frac{\chi_e(v)}{(1+2\nu B^*)^{\frac{1}{2}}}\right] \qquad (13)$$

که

$$\eta(x)=\frac{1}{2}x\sqrt{1+x^2}-\frac{1}{2}ln\left(x+\sqrt{1+x^2}\right) \qquad (14)$$

در حالی که اگر میدان مغناطیسی وجود نداشت از رابطه (5) چگالی انرژی و فشار به صورت زیر به دست می آمد:

$$\varepsilon_e=\frac{8\pi}{(2\pi\hbar)^3}\int_0^{P_F}P^2E_e\,dP \qquad (15)$$

$$P_e=\frac{1}{3}\frac{8\pi}{(2\pi\hbar)^3}\int_0^{P_F}\frac{P^2c^2}{E_e}P^2\,dP \qquad (16)$$

که E_e همان انرژی رابطه (4) در حالت میدان صفر است.اما اگر میدان وجود داشته باشد از (13) به جای (16) باید استفاده کنیم.

نتایج

فشار بدست آمده در رابطه (13) را وقتی که میدان مغناطیسی وجود دارد باید با فشار به دست آمده از رابطه میدان صفر جاگذاری کنیم.پس معادله حالت پوسته را داریم. پیشتر گفتیم که معادله حالت هسته را نیز از روش وردشی بدست می آوریم. بنابراین میتوان فشار را در سراسر ستاره بدست آورد. پس از به دست آوردن چگالی انرژی و فشار؛ اکنون می توانیم با حل معادلات TOV به صورت:

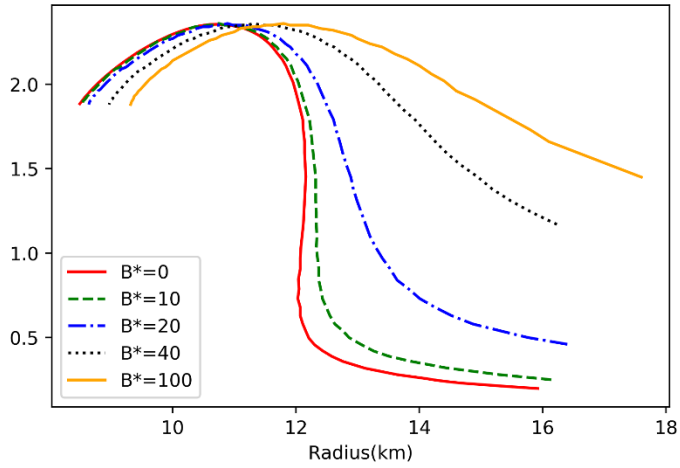
$$\frac{dP(r)}{dr}=-\frac{G\mu M}{r^2}\left(+\frac{P}{\mu c^2}\right)\left(+\frac{4\pi r^3P}{Mc^2}\right)\left(-\frac{GM}{rc^2}\right)^{-1}$$

$$\frac{dM(r)}{dr}=4\pi\mu r^2 \qquad (17)$$

شعاع و جرم ستاره نوترونی را در حضور میدان مغناطیسی قوی حساب کنیم. در رابطه اخیر $\mu=\rho(1+\varepsilon)$ شامل چگالی و انرژی جنبشی کل است. شعاع و جرم ستاره نوترونی را برای پنج حالت، B*=0، B*=10 ، B*=20، B*=40 و یک میدان B*=100 که خیلی محتمل نیست ، به دست آوردیم که نتایج در جدول 1 مشاهده می شود. ستون آخر مربوط به شعاع ستاره نوترونی با جرم $1.4M_\odot$ است. از روی جدول و نتایج به دست آمده می توان دید جرم بیشینه ستاره نوترونی تا رقم دوم اعشار دستخوش تغییرات نشده ولی شعاع ستاره تغییر کرده است. این نتیجه دور از انتظار نیست زیرا جرم بخش عمدهای از جرم ستاره به هسته آن مربوط است اما شعاع ستاره بسیار به معادله حالت پوسته حساس است و وجود میدان مغناطیسی قوی معادله حالت پوسته را تغییر داده است. سرانجام نمودار جرم–شعاع ستاره نوترونی به ازای مقادیر متفاوت میدان مغناطیسی رسم شده است. شکل 1 نتایج بدست آمده برای جرم بیشینه در توافق با نتایج جرم بیشینه ستاره نوترونی برای حالت میدان مغناطیسی صفر است و شعاع نیز در بازه قابل قبولی تغییر کرده است. شعاع های بدست آمده به جز مورد B*=100 (همانطور که اشاره شد برای میدان های احتمالی موجود در ستاره های نوترونی نامحتمل است) با قیود اخیر بر شعاع ستاره های نوترونی توافق خوبی دارد.

جدول 1: شعاع و جرم بیشینه ستاره نوترونی

B*	جرم بیشینه ($M_\odot$)	شعاع (km)	$R_{M=1.4M\odot}$ (km)
0	2.35	10.71	12.16
10	2.35	10.75	12.32
20	2.35	10.90	12.89
40	2.35	11.32	14.95
100	2.35	11.77	17.62



شکل 1:نمودار های جرم بر حسب شعاع ستاره نوترونی

مرجع ها

[1] P. Haensel, A.Y. Potekhin, and D.G. Yakovlev; "Neutron stars 1", Springer, (2007).
[2] H. R. Moshfegh and M. Modarres, *Phys. Rev. C* ***62*** (2000) 44308.
[3] S. Goudarzi and H. R. Moshfegh, *Phys. Rev. C* C **91**, 054320 (2015)
[4] Gao, Z.F., Wang, N., Song, D.L. *et al. Astrophys Space Sci* **334,** 281–292 (2011).

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

خواص اپتیکی بروفن شانه عسلی

محمدزاده، راحله[۱]؛ کتابی، سید احمد[۱]؛ هاشمی فر، سید جواد[۲]

[۱]دانشکده فیزیک، دانشگاه دامغان، دامغان

[۲]دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان

چکیده

در این مقاله خواص اپتیکی بروفن شانه عسلی از جمله سهم حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک در دو راستای X و Z و همچنین ضریب بازتاب آن مورد مطالعه قرار گرفته است. محاسبات با استفاده از نظریه تابعی چگالی و بسته نرم افزاری پتانسیل کامل WIEN2K انجام شده است. تابع دی الکتریک در دو راستای X و Z ناهمسانگرد است. قله جذب در تطابق خوبی با قسمت موهومی تابع دی الکتریک است. در نواحی انرژی پایین در راستای X جذب اتفاق می‌افتد در صورتی که در این نواحی در راستای Z قله جذبی نداریم.

Optical Properties of Honeycomb Borophene

Mohammadzadeh, Raheleh[1]; Ketabi, S. Ahmad[1], S. Javad Hashemifar[2]

[1] School of Physics, Damghan University, Damghan
[2] Department of Physics, Isfahan University of Technology, Isfahan

Abstract

In this paper, the optical properties of honeycomb borophene including the real and imaginary parts of dielectric function in X and Z directions as well as its reflection coefficient have been studied. The calculations have been performed using density functional theory (DFT) and the full potential WIEN2K code. The dielectric function is anisotropic in both X and Z directions. The absorption peak is in good agreement with the imaginary part of the dielectric function. At low energy regions the absorption occurs in the X direction, whereas in these regions there is no absorption peak in Z direction.

PACS No.

مقدمه

مواد دوبعدی به دلیل توانایی بالقوه آنها برای کاربرد در مبدل های الکتریکی و انرژی نسل آینده یکی از فعال ترین زمینه‌های تحقیقاتی نانومواد است [۱ و ۲]. ورقه های دو بعدی گرافن، سیلیسن، فسفرین و بروفن از جمله مواد مورد بررسی می باشند. نام‌گذاری بروفن به صورتی انتخاب شده است که با گرافن سازگاری داشته باشد و نشان دهنده‌ی لایه‌های دو بعدی متشکل از اتم بور است. بروفن دو بعدی که بصورت ساختارهای مثلثی، X_3، β_{12} و شانه عسلی سنتز شده است. این ساختارها بطور کلی از خود رفتار فلزی ناهمسانگرد نشان می‌دهند. بروفن شانه عسلی (HB) بصورت یک لایه دو بعدی با موفقیت روی بسترهای تک بلوری Al(1 1 1) با استفاده از روش اپیتکسی پرتو مولکولی رشد داده شده است و به دلیل خواص ویژه ای که دارد، توجه فوق العاده ای را به خود جلب کرده است [۳]. پیش بینی می‌شود که بروفن HB دارای خواص مکانیکی فوق العاده ای باشد که ممکن است رقیبی برای گرافن گردد. علاوه بر این، بروفن دارای مزیت خاص خود نسبت به گرافن است. به دلیل ساختار به شدت ناهمسانگرد، خواص الکترونی و مغناطیسی بروفن می‌تواند برای

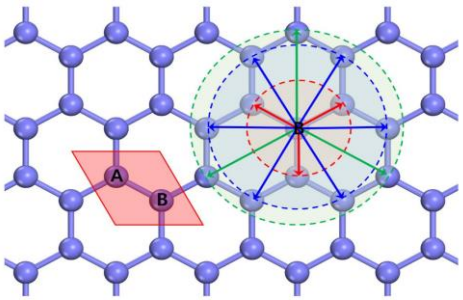
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

کاربرد در قطعات انعطاف پذیر کاندید شود [۴]. چالش اساسی در کاربردهای آینده دستیابی به ترکیب ایده آل از این خصوصیات است. به عنوان مثال ، توسعه پنجره های هوشمند مستلزم به حداقل رساندن جذب و بازتاب فوتون در عین حفظ رسانایی الکتریکی بالا است [۵]. بنابراین، درک کاملی از خواص اپتیکی بروفن برای کاربردهای دستگاه‌های آینده مورد نیاز است. به تازگی یک مدل بستگی قوی برای بروفن شانه عسلی تک لایه ارائه شده است که ممکن است مطالعات عددی آینده در مورد خصوصیات الکترونی و اپتیکی بروفن شانه عسلی در مقیاس بزرگ را تسهیل کند [۶].

روش محاسبه

برای مطالعه و محاسبه خواص اپتیکی بروفن شانه عسلی از نظریه تابعی چگالی و بسته نرم افزاری WIEN2K و تقریب GGA در دو راستای X (درون صفحه ای) و Z (عمود بر صفحه) استفاده کرده ایم. ثابت شبکه را پس از بهینه سازی a = 2.92 Å به دست آوردیم. شعاع کره مافین تین برابر 1.5 au، تعداد kpoint برابر ۱۰۰۰۰ نقطه معادل یک ماتریس 6 × 38 × 38، مقدار معیار همگرایی انرژی 0.0001 Ry، مقدار معیار همگرایی بار e 0.0001 و دقت در محاسبه نیروها 1 mRy/au در نظر گرفته شد.

شکل ساختار بروفن شانه عسلی مورد استفاده در این مقاله در شکل ۱ نشان داده شده است.



شکل ۱ : بخشی از یک ورقه بروفن با ساختار شانه عسلی (HB). متوازی الاضلاع قرمز رنگ سلول اولیه تک لایه HB است. فلش‌های قرمز ، آبی و سبز نشان‌گر نزدیکترین همسایگان اول، دوم و سوم یک اتم مرکزی بورگونه (B) است.

نتایج و بحث

۱ – تابع دی الکتریک

تابع دی الکتریک برای توصیف پاسخ ماده به تابش فوتون (موج الکترومغناطیسی) است. تابع دی الکتریک یک تابع مختلط است که به صورت زیر تعریف می‌شود :

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

که $\varepsilon_1(\omega)$ قسمت حقیقی ومفهوم فیزیکی دارد. در واقع در ناحیه ای که $\varepsilon_1(\omega)$ منفی است امواج منتشر نمی‌شوند و فرایندهای جذب واتلاف وجود دارد. سهم قسمت موهومی تابع دی الکتریک مستقیماً ناشی از گذارهای بین نواری است. قسمت موهومی ثابت دی الکتریک $\varepsilon_2(\omega)$ (انتقال واقعی بین حالتهای الکترونی اشغالی و غیر اشغالی) از رابطه زیر محاسبه می‌شود [۷ و ۸]:

$$Im\varepsilon_{\alpha\beta}^{\{inter\}}(\omega) = \frac{\hbar^2 e^2}{\pi m^2 \omega^2} \sum_n \int d\boldsymbol{k} \langle \psi_{\boldsymbol{k}}^{c_n} | \boldsymbol{P}^{\alpha} | \psi_{\boldsymbol{k}}^{v_n} \rangle \langle \psi_{\boldsymbol{k}}^{v_n} | \boldsymbol{P}^{\beta} | \psi_{\boldsymbol{k}}^{c_n} \rangle \delta\left(E_{\boldsymbol{k}}^{c_n} - E_{\boldsymbol{k}}^{v_n} - \omega\right) \qquad (۲)$$

که در آن جمع روی انتقال‌های درون نواری از حالت‌های ظرفیت اشغال شده $\psi_{\boldsymbol{k}}^{v_n}$ تا حالت‌های رسانش خالی $\psi_{\boldsymbol{k}}^{c_n}$ روی نقاط k منطقه اول بریلوئن انجام می‌گیرد. قسمت حقیقی تابع دی الکتریک را می‌توان از روابط کرامرز-کرونیگ به صورت زیربه‌دست آورد [۷ و ۸] :

$$Re\varepsilon_{\alpha\beta}^{\{inter\}}(\omega) = \delta_{\alpha\beta} + \frac{2}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{\omega' Im\varepsilon_{\alpha\beta}(\omega')}{(\omega')^2 - \omega^2} \qquad (۳)$$

با در نظر گرفتن سهم گذارهای درون نواری قسمت موهومی و حقیقی تابع دی الکتریک به صورت زیر به دست می آیند [۷ و ۸]:

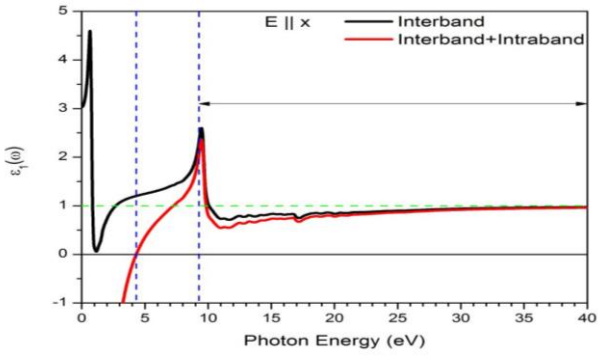
$$Im\varepsilon_{\alpha\beta}^{\{intra\}}(\omega) = \frac{\Gamma\omega_{pl,\alpha\beta}^2}{\omega(\omega^2 + \Gamma^2)} \qquad (۴)$$

$$Re\varepsilon_{\alpha\beta}^{\{intra\}}(\omega) = 1 - \frac{\omega_{pl,\alpha\beta}^2}{\omega(\omega^2 + \Gamma^2)} \qquad (۵)$$

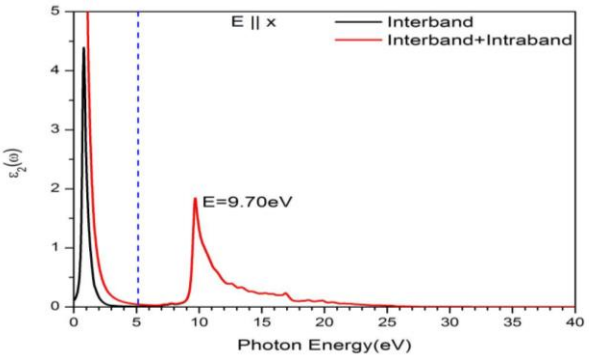
که در آن ω_{pl} فرکانس پلاسما و Γ طول عمر حامل (الکترون یا حفره) است.

قسمت‌های حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک در راستاهای X و Z در شکل‌های ۲ تا ۵ نشان داده شده اند.

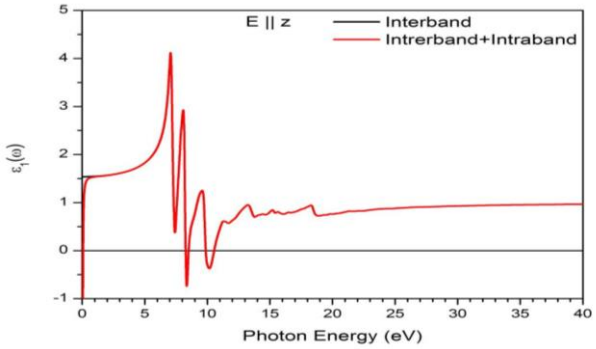
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



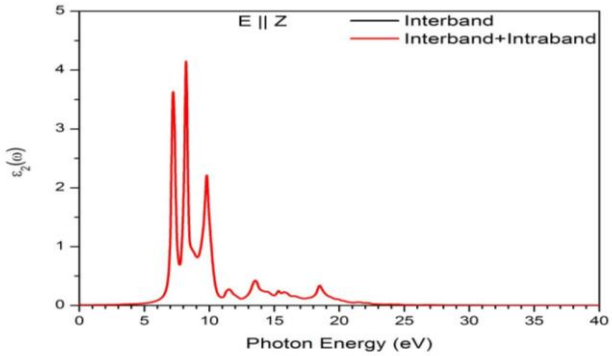
شکل ۲ : قسمت حقیقی تابع دی الکتریک در راستای X



شکل ۳ : قسمت موهومی تابع دی الکتریک در راستای X



شکل ۴ : قسمت حقیقی تابع دی الکتریک در راستای Z



شکل ۵ : قسمت موهومی تابع دی الکتریک در راستای Z

همان گونه که در شکل‌های ۲ تا ۵ مشخص است ناهمسانگردی زیادی در توابع دی الکتریک دیده می‌شود که به دلیل تفات زیاد قطبش پذیری در راستای X و Z است. در شکل ۲ کاملا مشخص است که در نظر گرفتن سهم درون نواری تغییر قابل ملاحظه ای در قسمت حقیقی تابع دی الکتریک ایجاد میکند. به طوری که عدم در نظر گرفتن بخش درون نواری مقدار تابع دی التریک استاتیک متناهی را به دست می‌دهد در صورتی که برای فلزات تابع دی الکتریک استاتیک به سمت بینهایت میل می‌کند. قسمت حقیقی تابع دی الکتریک در انرژی‌های پایین به سمت مقادیر بزرگ منفی میل می‌کند که این رفتار به دلیل وجود حاملهای بار آزاد در سیستم فلزی است. با افزایش انرژی فوتون فرودی مقدار تابع دی الکتریک افزایش می‌یابد و در فرکانس پلاسمونی به صفر می‌رسد. مقدار فرکانس پلاسمونی در راستای X، 4.2eV به‌دست آمده است. پلاسمون‌ها نوسانات افت وخیز در چگالی بار هستند. بسامد پلاسما ω_p عبارت است از بسامد آستانه بین انتشار درون ماده وبازتاب قوی از سطح نمونه. از نظرفیزیکی، ω_p فرکانس نوسان-های دسته جمعی گاز الکترون (پلاسما) است. مشخص است که بعد از قله قسمت حقیقی تابع دی الکتریک در انرژی 9.18 eV این تابع به سرعت افت می‌کند و به سمت واحد میل می‌کند. سهم درون نواری و برون نواری از حدود 20 eV به بعد کاملا بر روی هم منطبق می‌شوند.

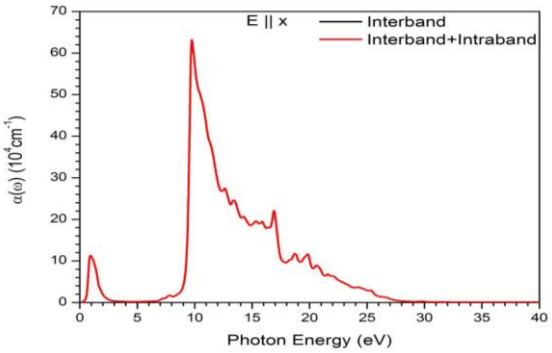
در قسمت موهومی تابع دی الکتریک که درشکل ۳ و ۵ نشان داده شده است، در راستای X به دلیل انتقال‌های درون نواری نوارهای نیمه پر مقدار این تابع بزرگ است و با افزایش انرژی فوتون فرودی به سرعت کاهش می‌یابد و در فرکانس پلاسمونی به صفر می‌رسد. برای نور قطبی در امتداد X، $\varepsilon_2(\omega)$ بسرعت در نزدیکی 8.34eV افزایش می‌یابد و در 9.7 eV به حداکثر می‌رسد. این قله مربوط به انتقالهای بین نواری در ساختار است. برای نور قطبی در امتداد Z، قله $\varepsilon_2(\omega)$ در 7.17 eV از قله‌های دیگر قوی‌تر است. در این راستا سهم درون نواری و برون نواری بر روی هم منطبق است.

همان طور که در شکل ۴ دیده می‌شود، برای راستای Z مقدار انرژی پلاسمونی خیلی کوچک است. چرا که در راستای عمود بر صفحه قطبش پذیری به دلیل وجود خلاء در نظر گرفته شده کم است.

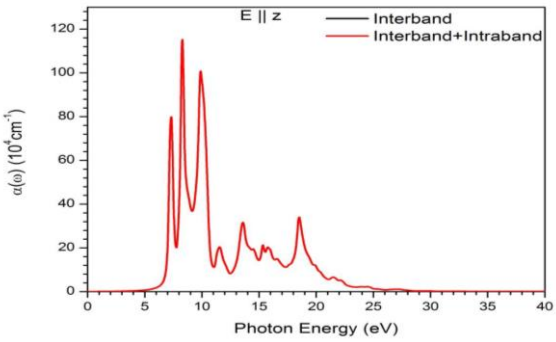
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

ضریب جذب

احتمال جذب فوتون در هر ماده بلوری به طور مستقیم با قسمت موهومی تابع دی الکتریک مختلط $\varepsilon_2(\omega)$ مرتبط است. قله های جذب مطابق با قله های بدست آمده در $\varepsilon_2(\omega)$ است. در یک فرکانس معین، $\varepsilon_2(\omega)$ اگر مثبت باشد منجر به اتلاف جذب می شود و اگر منفی باشد موجب تقویت آن می‌شود. بدیهی است که $\varepsilon_2(\omega)$ به شدت به جهت قطبش بستگی دارد زیرا قطبش در راستاهای مختلف مولفه‌های متفاوت دارد. ضریب جذب بروفن شانه عسلی در دو راستای X و Z در شکل‌های ۶ و ۷ نشان داده شده است.



شکل ۶ : ضریب جذب بروفن شانه عسلی در راستای X



شکل ۷ : ضریب جذب بروفن شانه عسلی در راستای Z

چنانچه از از شکل‌های ۶ و ۷ می‌بینیم ضریب جذب در تطابق خوبی با قسمت موهومی تابع دی الکتریک است و در اینجا نیز در 9.7eV قله جذب داریم. در راستای X دو قله جذب دیگر در حدود 0.75 eV و 16.88 eV مشاهده می‌شود. در راستای Z بروفن شانه عسلی دارای نواحی جذب زیادی بین 7 eV تا 20eV است. همانگونه که مشخص است در این راستا بر خلاف راستای X در نواحی انرژی پایین جذب نداریم. سه پیک اصلی جذب تطابق خوبی با قسمت موهومی تابع دی الکتریک در راستای Z دارد که در شکل ۵ نشان داده شده است.

نتیجه گیری

در این مقاله، خواص اپتیکی بروفن شانه عسلی با استفاده از رهیافت نظریه تابعی چگالی بررسی شده است. تابع دی الکتریک در دو راستای X و Z مطالعه شد و مشخص گردید که این تابع در این دو راستا ناهمسانگرد است. در راستای X قسمت حقیقی تابع دی الکتریک دارای فرکانس پلاسما در انرژی 4.2eV است. در حالی که در راستای Z مقدار انرژی پلاسمونی خیلی کوچک است. قسمت موهومی تابع دی الکتریک دارای قله ای در 9.7 eV است که در حقیقت قله جذب نیز در این نقطه رخ می‌دهد. از حدود 20eV به بعد سهم درون نواری و برون نواری کاملا بر هم منطبق می‌شود. در راستای Z سهم درون نواری و برون نواری بر هم منطبق است. در این راستا بر خلاف راستای X در فرکانس‌های پایین جذب نداریم. سه قله اصلی جذب مطابق با قسمت موهومی تابع دی الکتریک در راستای Z است.

مرجع‌ها

[1] A. C. Ferrari, F. Bonaccorso, V. Fal'Ko, K. S. Novoselov,S. Roche, P. Boggild, S. Borini, F. H. Koppens, V. Palermo and N. Pugno, et al.; "Science and technology roadmap for graphene, related two-dimensional crystals, and hybrid systems"; *Nanoscale* **7** (2015) 4598–4810.
[2] Y. Xu, Z. Gan and S.-C. Zhang; "Enhanced thermoelectric performance and anomalous Seebeck effects in topological insulators"; *Phys. Rev. Lett.* **112** (2014) 226801.
[3] A. J. Mannix, X.-F. Zhou, B. Kiraly, J. D. Wood, D. Alducin,B. D. Myers, X. Liu, B. L. Fisher, U.Santiago, J. R. Guest,M. J. Yacaman, A. Ponce, A. R. Oganov, M. C. Hersam and N. P. Guisinger; "Synthesis of borophenes: Anisotropic, two-dimensional boron polymorphs"; *Science* **350** (2015) 1513–1516.
[4] F. Meng, X. Chen, J. He; "Electronic and Magnetic Properties of Pristine and Hydrogenated Borophene Nanoribbons"; *arXiv* **1601** (2016) 05338.
[5] L. Zhang, Y. Zhou, L. Guo, W. Zhao, A. Barnes, H.-T. Zhang, C. Eaton, Y. Zheng, M. Brahlek, H. F. Haneef, N. J. Podraza, M. H. W. Chan, V. Gopalan, K.M. Rabe and R. Engel-Herbert; "Correlated metals as transparent conductors"; *Nat. Mater.* **15** (2016) 204–210.
[6] L. Zhu, T. Zhang; "Optimized tight binding parameters for single layer honeycomb borophene"; *Solid State Commun.* **282** (2018) 50-54.
[7] C. Ambrosch-Draxl1 and J. O. Sofo; "Linear optical properties of solids within the full-potential linearized augmented planewave method"; *Comput. Phys. Commun.* **175** (2006) 1-14.
[8] M. Shahrokhi, S. Naderi, A. Fathalian; "Ab initio calculations of optical properties of B_2C grapheme sheet"; *Solid State Commun.* **152** (2012) 1012–1017.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

نرخ رشد کنش برای گرانش بورن-اینفلد

بختیاری زاده، حمیدرضا؛ جعفری قدیر

گروه فیزیک، دانشگاه صنعتی سرجان، سیرجان

پژوهشکده ذرات و شتابگرها، پژوهشگاه دانش‌های بنیادی، صندوق پستی ۵۵۳۱-۱۹۳۹۵، تهران

چکیده

حدس "کنش=پیچیدگی" را برای گرانش بورن-اینفلد مورد بررسی قرار داده‌ایم و نرخ رشد کنش را روی ناحیه ویلر-دویت، که اعتقاد بر آن می‌رود که دوگان آهنگ رشد پیچیدگی کوانتومی حالت مرزی هولوگرافی باشد، استخراج کرده‌ایم.

Action growth rate of Born-Infeld gravity

Bakhtiarizadeh, Hamid Reza; Jafari, Ghadir

Department of Physics, Sirjan University of Technology, Sirjan
School of Particles and Accelerators, Institute for Research in Fundamental Sciences (IPM)
P.O. Box 19395-5531, Tehran

Abstract

We investigate the duality conjecture "Complexity=Action" for Born-Infeld gravity model and derive the growth rate of its action within the Wheeler-DeWitt patch, which is believed to be dual to the growth rate of quantum complexity of holographic boundary state.

PACS No. 4

مقدمه

پیشنهاد کنش=پیچیدگی [۱,۲] که پیچیدگی محاسباتی کوانتومی یک حالت مرزی را به کنش روی پوسته روی یک ناحیه حجمی موسوم به ناحیه ویلر-دویت مرتبط می‌سازد چنین است:

$$C(\Sigma)=\frac{I_{WDW}}{\pi\hbar}. \qquad (۱)$$

در اینجا برش زمانی Σ به عنوان محل تقاطع هر سطح کوشی در حجم با مرز مجانبی تعریف می‌شود که در آن C بایستی محاسبه شود. همچنین حدس آن می‌رود که یک کران روی آهنگ رشد این پیچیدگی هولوگرافی به شکل

$$\frac{dC}{dt}\le\frac{2M}{\pi\hbar}, \qquad (۲)$$

که تصور می‌شود دوگان هولوگرافی کران لوید[۱] روی پیچیدگی کوانتومی باشند. همچنین در [۱,۲] مشاهده شده است که در زمان‌های طولانی این کران به شکل

$$\frac{dC}{dt}=\frac{2M}{\pi\hbar}, \qquad (۳)$$

برای یک سیاهچاله پادوسیته که در آن M کل جرم-انرژی فضا-زمان و t یکی از زمان‌های مرزی می باشد، اشباع شده است. در این مقاله جملات مرزی مناسبی را یافته‌ایم که اصل وردشی را خوش‌رفتار می‌کند. خاصیت جالبی که یافته‌ایم این است که جملات مرزی با جملات مرزی استاندارد برای نظریه انشتین-هیلبرت متناسب می‌باشند. بنابراین نتیجه می‌گیریم که رفتار زمان-

[۱] Lloyd's bound

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

طولانی در ضریبی یکسان نسبت به نظریه انشتین-هیلبرت ضرب می‌شود. در انتها نشان داده‌ایم که ضریب مشابهی هنگام مقایسه انرژی در دو نظریه ظاهر می‌شود.

گرانش بورن-اینفلد

کنش بورن اینفلد که ابتدا در [۳] به عنوان تعمیمی از گرانش جرم‌دار جدید در سه بعد معرفی شد، به وسیله کنش زیر توصیف می‌شود:

$$I_{BI}=-\frac{4m^2}{\kappa^2}\int d^dx\sqrt{-\det g}\left[\sqrt{\det(1+\frac{\sigma}{m^2}g^{-1}G)}-\lambda\right] \quad (۴)$$

که در آن $G_{\mu\nu}=R_{\mu\nu}-\frac{1}{2}Rg_{\mu\nu}$ تانسور انشتین، m^2 یک پارامتر مثبت قطعی با بعد کامل و $\sigma=\pm1$ علامت تانسور انشتین را در جمله اول بدست می‌دهد. λ پارامتری است که به ثابت کیهان‌شناسی مرتبط است و κ نیز به ثابت گرانش نیوتنی d-بعدی مرتبط است. بسط این کنش برحسب توان‌های $\frac{1}{m^2}$ که یک بسط مشتقی است، شکل زیر را داراست

$$I_{BI}=-\frac{4m^2}{\kappa^2}\int d^dx\sqrt{-\det g}[(1-\lambda)-\frac{(d-2)\sigma}{4m^2}R \\ -\frac{1}{4m^2}(R_{\alpha\beta}R^{\alpha\beta}-\frac{1}{8}(d^2-6d+12))R^2+\mathrm{O}(R^3)] \quad (۵)$$

بسط این کنش تا مرتبه اول کنش انشتین-هیلبرت را با یک ثابت کیهان‌شناسی موثر $\Lambda_{eff}=2m^2(1-\lambda)/\sigma(d-2)$ بدست می‌دهد. بسط کنش تا جمله دوم در سه بعد کنش گرانش جرم‌دار جدید [۴] که یک گرانش جرم‌دار غیردستیده[۲] در سه بعد است را بازتولید می‌کند. همچنین می‌توان نشان داد که بسط کنش بورن-اینفلد تا مرتبه ۳، بسط نظریه گرانش جرم‌دار جدید تا مرتبه چهارم را بدست می‌دهد [۵].

معادله حرکت برای کنش (۴) برای جواب‌های سیاه‌چاله‌ای پادوسیته-شوارتزشیلد این نظریه که برای آن $R_{\alpha\beta}=-\frac{d-1}{\ell^2}g_{\alpha\beta}$، چنین می‌شود [۷]:

$$[1+\frac{(d-2)(d-1)\sigma}{2\ell^2m^2}]^{\frac{(d-2)}{2}}-\lambda=0 \quad (۶)$$

با حل معادله بالا برحسب ℓ^2 به معادله زیر می‌رسیم:

$$\frac{1}{\ell^2}=\frac{2\sigma m^2(\lambda^{\frac{2}{d-2}}-1)}{(d-2)(d-1)} \quad (۷)$$

این همان شعاع پادوسیته ناشی از مشتقات بالاتر است. بدین ترتیب المان طول برای یک سیاه‌چاله ایستا در این نظریه چنین می‌شود.

$$ds^2=-f(r)dt^2+\frac{1}{f(r)}dr^2+r^2d\Sigma^2_{d-2,\kappa} \quad (۸)$$

که در آن $f(r)=\kappa+\frac{r^2}{\ell^2}-\frac{\omega^{d-3}}{r^{d-3}}$، κ خمش المان طول $(d-2)$-بعدی $d\Sigma^2_{d-2,k}$ می‌باشد که به ترتیب برای هندسه-های رویدادی کروی، صفحه‌ای و هذلولوی برابر است با $\kappa=\{1,0,-1\}$. در نتیجه سیاه‌چاله‌های شوارتزشیلد-پادوسیته جواب‌های این نظریه هستند در صورتی که شعاع پادوسیته مجانبی با معادله (۷) داده شود.

جملات مرزی و پیوندی برای گرانش بورن-اینفلد

برای یافتن معادله حرکت (۶) از انتگرال‌گیری جزء به جزء استفاده کرده‌ایم. مشتق کامل این انتگرال‌گیری به جمله سطحی $\int_{\partial M}\sqrt{-h}n_\alpha J^\alpha$ می‌انجامد، که در آن عبارت J^α بسط نسبتا پیچیده‌ای دارد که با استفاده از معادله حرکت برای پس‌زمینه فضای انشتین شکل ساده زیر را به خود می‌گیرد:

$$J_\alpha=(d-2)\lambda\sigma(\nabla_\beta\delta g_\alpha{}^\beta-\nabla_\alpha\delta g^\beta{}_\beta). \quad (۹)$$

انتگرال سطحی عبارت بالا چیزی جز انتگرال سطحی کنش انشتین هیلبرت تحت وردش با ضریب $(d-2)\lambda\sigma$ نیست. اگر یک مرز فضاگونه یا زمان‌گونه داشته باشیم، با محاسبه انتگرال سطحی و نیز استفاده از شرط مرزی دیریشله می‌توان دید که جمله مرزی مناسب برای کنش بورن-اینفلد روی یک مرز فضاگونه یا زمان‌گونه با عبارت زیر داده می‌شود:

$$S_b=-2(d-2)\lambda\sigma\int_{\partial M}d^{d-1}x\sqrt{|h|}K \\ -2(d-2)\lambda\sigma\int_C d^{d-2}x\sqrt{|q|}\vartheta. \quad (۱۰)$$

[۲] Non-chiral

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

که در آن h_{ab} متریک القا شده روی مرز ∂M و K_{ab} خمش خارجی آن می‌باشد. ϑ نیز زاویه می‌باشد. همچنین برای داشتن یک اصل وردشی خوش‌رفتار می‌بایست جملات زیر را روی یک مرز نورگونه برای کنش بورن-اینفلد داشته باشیم:

$$S_b = -2(d-2)\lambda \int_{\partial M} d^{d-1}x\sqrt{q}[(\Theta+\kappa)] \\ -2(d-2)\lambda\int_C d^{d-2}x\sqrt{q}\ln A. \qquad (۱۱)$$

که در آن Θ_{ab} و κ موجودات هندسی هستند که معرف هندسه خارجی ابرصفحه می‌باشند و با روابط زیر تعریف می‌شوند:

$$\Theta_{ab} = q^c{}_a q^d{}_b \nabla_c \ell_d \\ \kappa = -\ell^a k^b \nabla_a \ell_b \qquad (۱۲)$$

در اینجا $\ell_\alpha = A\nabla_\alpha \phi$ بردار نرمال مرز نورگونه $\phi = const.$، و A ضریب در تعریف این بردار می‌باشد. q^a_b نیز یک تصویر روی سطحی با هم‌بعد[۳] ۲ روی یک مرز نورگونه می‌باشد که با رابطه $q^a_b = q^a_b + \ell^a k_b + \ell_b k^a$ تعریف می‌شود. بردار k_a نیز برداری کمکی است که مرز نورگونه را قطع می‌کند و طبق رابطه $\ell^a k_a = -1$ بهنجار می‌شود.

در انتها کنش خوش‌رفتار کامل در نظریه بورن-اینفلد برای پس‌زمینه شوارتزشیلد-پاددوسیته با رابطه زیر داده می‌شود:

$$I_{BI} = -\frac{4m^2}{\kappa^2}\int d^dx\sqrt{-\det g}\left[\sqrt{\det(1+\frac{\sigma}{m^2}g^{-1}G)}-\lambda\right]+ \\ \frac{(d-2)\lambda\sigma}{\kappa^2}(\int d^{d-1}xK_t + \int d^{d-1}xK_s \\ +\int d^{d-1}xK_n + \int d^{d-2}xa) \qquad (۱۳)$$

که در آن، K_t، K_s و K_n به ترتیب جملات مرزی فضاگونه، زمان‌گونه و نورگونه و a نیز جملات پیوندی می‌باشند.

پیچیدگی هولوگرافی

با یافتن جملات مرزی لازم در نظریه، می‌توانیم کنش روی پوسته را محاسبه کنیم. با استفاده از معادلات (۶) و (۷) و بعد از اندکی عملیات جبری می‌توان مقدار زیر را برای لاگرانژی حجمی روی-پوسته یافت:

$$L = -2\lambda\sigma(d-2)(d-1)\frac{1}{\ell^2}. \qquad (۱۴)$$

اگر این نتیجه را با کنش روی-پوسته در نظریه انشتین-هیلبرت مقایسه کنیم، درمی‌یابیم

$$L = -2\lambda\sigma(d-2)L_{EH}. \qquad (۱۵)$$

این ضریب اضافه نسبت به نظریه انشتین همان ضریبی است که برای جملات مرزی در مقایسه با نظریه انشتین یافته‌ایم. این ویژگی مهم به ما کمک می‌کند تا رابطه زیر را برای پیچیدگی هولوگرافی در نظریه بورن-اینفلد به دست آوریم

$$C_{BI} = -2\lambda\sigma(d-2)C_{EH}. \qquad (۱۶)$$

بر اساس این نتیجه می‌توان دریافت که آهنگ پیچیدگی زمان-طولانی چنین است:

$$\frac{dC_{BI}}{dt} = \lambda\sigma(d-2)\frac{2M}{\pi\hbar}. \qquad (۱۷)$$

با محاسبه انرژی با استفاده از تانسور انرژی-اندازه حرکت می‌توان نشان داد در زمان‌های طولانی رابطه مشابهی را برای آهنگ رشد پیچیدگی بازمی‌یابیم

$$\frac{dC_{BI}}{dt} = \frac{2E}{\pi\hbar}. \qquad (۱۸)$$

این عبارت نشان می‌دهد که نرخ رشد زمان-طولانی دو برابر انرژی در نظریه بورن-اینفلد است.

محاسبات این مقاله با استفاده از بسته "$xAct$" برای نرم‌افزار متمتیکا انجام شده است [۶].

نتیجه‌گیری

در این مقاله پیچیدگی هولوگرافی را برای مدلی از مشتقات بالاتر با تعداد نامتناهی از جملات، هنگامی که برحسب جملات خمش بسط داده شوند، بررسی کرده‌ایم [۷]. برای این نظریه چهار جمله مرزی مناسب برای داشتن یک اصل وردشی خوش-رفتار داریم. نشان داده‌ایم که جملات حجمی و مرزی روی-پوسته در ضریبی مشابه با آنچه در نظریه انشتین وجود دارد ضرب می-شوند. نتایج ما همچنین نشان می‌دهند که آهنگ زمان-طولانی پیچیدگی هولوگرافی همان مقدار دو برابر انرژی سیاه‌چاله

[۳] Codimension

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

پاددوسیته-شوارتزشیلد می‌باشد. این نتیجه عمومیت پیشنهاد پیچیدگی هولوگرافی را تایید می کند که بر مبنای آن یک نظریه مشتق نامتناهی در سمت گرانش با یک نظریه میدان با جفت‌شدگی توفت[۴] کوچک متناسب است.

مرجع‌ها

[1] A. R. Brown, D. A. Roberts, L. Susskind, B. Swingle and Y. Zhao, Phys. Rev. D 93, no. 8, 086006 (2016) doi:10.1103/PhysRevD.93.086006 [arXiv:1512.04993 [hep-th]].
[2] D. Stanford and L. Susskind, Phys. Rev. D 90, no. 12, 126007 (2014) doi:10.1103/PhysRevD.90.126007 [arXiv:1406.2678 [hep-th]].
[3] I. Gullu, T. C. Sisman and B. Tekin, Class. Quant. Grav. 27, 162001 (2010) doi:10.1088/0264-9381/27/16/162001 [arXiv:1003.3935 [hep-th]].
[4] E. A. Bergshoeff, O. Hohm and P. K. Townsend, Phys. Rev. Lett. 102, 201301 (2009) doi:10.1103/PhysRevLett.102.201301 [arXiv:0901.1766 [hep-th]].
[5] A. Sinha, JHEP 1006, 061 (2010) doi:10.1007/JHEP06(2010)061 [arXiv:1003.0683 [hep-th]].
[6] T. Nutma, Comput. Phys. Commun. 185, 1719 (2014) doi:10.1016/j.cpc.2014.02.006 [arXiv:1308.3493 [cs.SC]].10
[7] H. R. Bakhtiarizadeh and G. Jafari, Eur. Phys. J. C 80, no.3, 208 (2020) doi:10.1140/epjc/s10052-020-7766-4 [arXiv:2002.09974 [hep-th]].

[۴] 't Hooft coupling

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

s

اثر جریان بر طبیعت امواج مگنتوهیدرودینامیکی در لوله‌های تاج خورشید

بهاری، کرم[1]

[1] گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه رازی، کرمانشاه

چکیده

امواج مگنتوهیدرودینامیکی رونده را در لوله‌های شار مغناطیسی پیچشی در حضور جریان زمینه پلاسما مطالعه کرده‌ایم. برای این کار ویژه توابع نوسان لوله را بدست آورده‌ایم و مولفه‌های شعاعی و سمتی هریک از نیروهای تنش مغناطیسی و گرادیان فشار اختلالی را بدست آورده‌ایم. با مقایسه نیروهای تنش مغناطیسی و گرادیان فشار می‌توان طبیعت امواج را تعیین کرد. نتایج بدست آمده نشان می‌دهد که برای مدل در نظر گرفته شده در اینجا امواج کینکی با $m = -1$ می‌توانند موج آلفنی خالص یا موج مگنتوهیدرودینامیکی سریع خالص باشند، اما امواج کینکی با $m = 1$ نمی‌توانند یک موج خالص باشند.

واژه های کلیدی: *مگنتوهیدرودینامیک، پلاسما، تاج خورشیدی، نوسانات، امواج، پایداری*

The effect of plasma flow on the nature of magnetohydrodynamic waves in coronal flux tubes

Bahari, Karam[1]

[1] *Physics Department, Faculty of Science, Razi University, Kermanshah, Iran*

Abstract

In this paper we have studied the nature of the magnetohydrodynamic (MHD) kink waves in magnetically twisted flux tubes in the presence of plasma flow. To do this the eigenfunctions of the kink oscillations have been determined using the dispersion relation and the boundary condition of the tube. Then the components of magnetic tension force and gradient of pressure force have been obtained to determine the nature of the waves. The results show that for the model considered here the waves with m=+1 can be a purely Alfvenic or fast MHD wave but the waves with m=-1 cannot be a pure wave.

***Keywords**: Magnetohydrodynamics, Corona; Magnetic Fields, Oscillations*

PACS No. 97

مقدمه

در دهه گذشته مشاهدات زیادی از امواج مگنتوهیدرودینامیکی در جو خورشید به عمل آمده است و مشخص شده است که این امواج به فراوانی در تاج خورشید وجود دارند. همین باعث توسعه تحقیقات نظری برای توضیح و تفسیر خصوصیات مشاهده شده این امواج شده است. یک نکته خاص مورد توجه این است که این امواج کدامیک از امواج مگنتوهیدرودینامیکی آرام، سریع و آلفنی هستند. در ظاهر می‌توان بخش عمده‌ای از امواج مگنتوهیدرودینامیکی را به سادگی دسته‌بندی کرد و به نظر نمی‌آید که دارای خصوصیات ترکیبی از امواج باشند. برای مثال امواج عرضی مشاهده شده در لوله‌های تاج خورشید که با شراره‌های خورشیدی به نوسان درمی‌آیند و توسط اشواندن و همکاران (1999) و ناکاریاکوف و همکاران (1999) مشاهده شدند به امواج کینکی سریع تعبیر شده‌اند.

جریان پلاسما هم جهت با میدان مغناطیسی جو خورشید مشاهده شده است. (به مشاهدات گزارش شده توسط برکه و همکاران 1997، زیکر و همکاران 1998، وینبارگر و همکاران 2001، اکاموتو و همکاران 2007 و آفمن و وانگ 2008 مراجعه شود.) سرعت جریان‌های مشاهده شده معمولا کمتر از یک دهم سرعت آلفن است. جریان سریع از مرتبه سرعت آلفن خیلی کم

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مشاهده شده است و مربوط به پدیده‌های پرانرژی مانند شراره‌ها و پرتاب جرم تاجی است (اینس و همکاران 2003). بنابر جریان-های مشاهده شده در تاج خورشید بررسی اثر جریان بر خصوصیات امواج می‌تواند مورد علاقه محققان باشد. مثلا اهمیت جریان در لرزه‌شناسی امواج ایستاده در لوله‌های تاج خورشد توسط رادرمن (2011) بررسی شده است. امواج کینکی رونده در لوله‌های پیچشی تاج خورشید در حضور جریان پلاسمای تراکم ناپذیر توسط بهاری (2018) مطالعه شده است. هردوی جریان و پیچش مغناطیسی تقارن موجود در نمودارهای پاشندگی را کاهش می‌دهند. همچنین اثر پیچش مغناطیسی بر میرایی فضایی امواج کینک به جهت انتشار، عدد موج سمتی و جهت جریان پلاسما بستگی دارد.

گوسنس و همکاران (2009) طبیعت امواج کینک را برای اولین بار در لوله‌های تاج خورشید مطالعه کردند. آنها فرکانس نوسان، آهنگ میرایی و ویژه توابع نوسان امواج کینکی را برای پلاسمای تراکم ناپذیر، پلاسمای تراکم پذیر و پلاسمای شامل تابش مگنتوهیدرودینامیکی بررسی کردند و نتیجه گیری کردند صفت سریع صفت مناسبی برای این امواج نیست و بهتر است آنها را امواج آلفنی در نظر بگیریم. بهاری و خالوندی (2018) اثر پیچش مغناطیسی را بر طبیعت امواج کینکی در یک پلاسمای بدون فشار بررسی کردند. آنها نشان دادند که بازای مقدار خاصی از پارامتر پیچش مغناطیسی موج کینکی در تمام ناحیه داخلی لوله می‌تواند یک موج آلفنی خالص باشد. در اینجا می‌خواهیم اثر همزمان جریان پلاسما و پیچش مغناطیسی را بر طبیعت امواج کینکی در لوله‌های تاج خورشید بررسی کنیم و این کار را با مطالعه نسبت نیروهای بازگرداننده وارد بر پلاسما انجام می‌دهیم. در بخش بعدی مدل لوله را معرفی می‌کنیم و جواب معادلات حرکت را بدست می‌آوریم سپس روابطی تحلیلی برای نیروهای بازگرداننده وارد بر پلاسما بدست می‌آوریم و در بخش آخر با محاسبات عددی نسبت نیروها را تحت شرایط مختلف لوله محاسبه می‌کنیم.

مدل لوله و معادلات حرکت

لوله شار مغناطیسی تاج خورشید را به صورت یک لوله استوانه-ای با سطح مقطع دایره‌ای مدل‌سازی می‌کنیم. برای مطالعه لوله دستگاه مختصات استوانه‌ای با مختصات r ، φ و z را انتخاب می‌کنیم به گونه‌ای که محور z منطبق بر محور لوله باشد. فرض می‌کنیم که لوله شامل یک ناحیه داخلی (هسته) به شعاع R، ناحیه پوسته به شعاع R_1 و ناحیه خارج لوله (محیط پیرامونی) است. فرض می‌کنیم که چگالی پلاسما در داخل لوله، پوسته و ناحیه خارج لوله به ترتیب برابر ρ_i، ρ_0 و ρ_e است. میدان مغناطیسی در هسته و پوسته را میدان پیچشی با پیچش یکنواخت و به صورت $\boldsymbol{B}_b=(0,Ar,B_0)$ در نظر می‌گیریم که در آن A یک ثابت است و به آن پارامتر پیچش می‌گوییم و B_0 نیز میدان مغناطیسی طولی و ثابت است. میدان مغناطیسی را در بیرون لوله یک میدان طولی خالص و به صورت $\boldsymbol{B}_b=(0,0,B_e)$ در نظر می‌گیریم که در آن B_e یک ثابت است. در اینجا اندیس‌های i، 0، e و b به ترتیب نشان دهنده کمیت‌های مربوط به ناحیه های هسته، پوسته، محیط پیرامونی و کمیت‌های زمینه پلاسما هستند.

یک جریان زمینه $\boldsymbol{U}$ را در لوله در نظر می‌گیریم و از آنجا که در محیط تاج خورشید دینامیک پلاسما با تقریب پلاسمای سرد تعیین می‌شود و حرکت پلاسما در جهت خطوط میدان مغناطیسی است باید مولفه‌های جریان در هر ناحیه به گونه‌ای باشد که جریان زمینه در جهت خطوط میدان مغناطیسی باشد. این مدل قبلا توسط بهاری (2018) مطالعه شده است با این تفاوت که در آنجا یک لایه ناهمگنی برای تغییرات چگالی و جریان زمینه در $r=R$ در نظر گرفته شده است که باعث میرایی امواج می‌شود اما در اینجا این لایه ناهمگنی را در نظر نمی‌گیریم در نتیجه امواجی که در این مقاله مطالعه می‌کنیم میرا نخوهند بود. معادله تعادل لوله ایجاب می‌کند که در راستای شعاعی نیروهای گرادیان فشار مغناطیسی، گرادیان فشار حرارتی و تنش مغناطیسی با هم در تعادل باشند. با توجه با اینکه امواج مگنتوهیدرودینامیکی کینکی را در لوله‌های باریک (که در آن طول موج خیلی بیشتر از شعاع لوله است) را می‌توان تراکم ناپذیر در نظرگرفت جهت سادگی حل مساله محیط

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

لوله را تراکم ناپذیر درنظرمی‌گیریم. معادلات حاکم بر نوسانات مگنتوهیدرودینامیکی در سیال تراکم‌ناپذیر به صورت زیر است

$$\frac{D\rho}{Dt} = -\nabla\cdot(\rho \boldsymbol{V}) \qquad (1)$$

$$\rho\frac{D\boldsymbol{V}}{Dt} = -\nabla P_{th} + \frac{1}{\mu}(\nabla\times\boldsymbol{B})\times\boldsymbol{B} \qquad (2)$$

$$\frac{\partial\boldsymbol{B}}{\partial t} = \nabla\times(\boldsymbol{V}\times\boldsymbol{B}) \qquad (3)$$

$$\nabla\cdot\boldsymbol{V} = 0 \qquad (4)$$

هریک از کمیت‌های روابط (1) تا (4) مجموع کمیت‌های تعادلی و اختلالی هستند به گونه‌ای که $\rho = \rho_b + \rho_1$ ، $\boldsymbol{V} = \boldsymbol{U} + \boldsymbol{v}$، $P_{th} = P_{thb} + P_{th1}$ ، $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{B}_b + \boldsymbol{b}$ و $\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \boldsymbol{U}\cdot\nabla$.

جواب معادلات بالا برای مدل معرفی شده در اینجا برای امواج کینک رونده که در آن وابستگی امواج را به زمان t، زاویه سمتی φ و مختصه طولی z از طریق اعداد موج سمتی و طولی m و k و فرکانس نوسان ω به صورت $\exp(kz + m\varphi - \omega t)$ در نظر می‌گیریم توسط بهاری (2018) بدست آمده است. جواب معادلات حرکت و معادله پاشندگی امواج کینکی در بهاری (2018) بدست آمده است در این مقاله با استفاده از معادله پاشندگی و شرایط مرزی ویژه توابع نوسان را بدست می آوریم و با استفاده از آن نیروهای بازگرداننده را مطالعه می کنیم.

مطالعه طبیعت نیروها با محاسبه نیروهای بازگرداننده

در این بخش برای مطالعه نیروهای بازگرداننده وارد بر پلاسمای نوسان کننده معادله (1) را با جرئیات بررسی می‌کنیم. در تشابه با بهاری و خالوندی (2017) نیروهای **گرادیان فشار و تنش مغناطیسی را به صورت زیر تعریف می‌کنیم**

$$\boldsymbol{F} = -\nabla P_T + \hat{l_t}\frac{dP_m}{ds} \qquad (5)$$

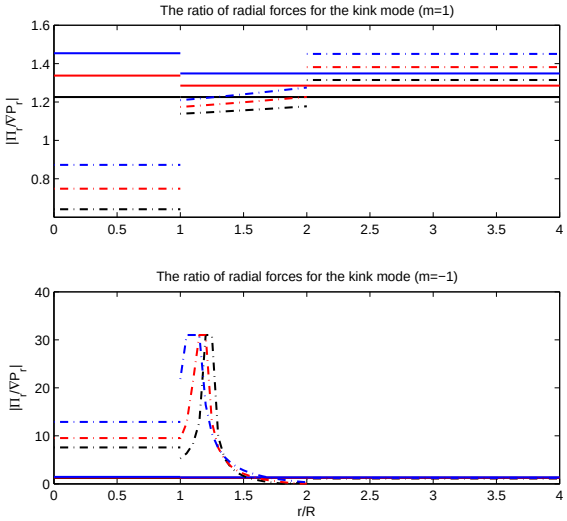
$$\boldsymbol{\Pi} = \frac{1}{\mu}\{(\boldsymbol{B}_b\cdot\nabla)\boldsymbol{b} + (\boldsymbol{b}\cdot\nabla)\boldsymbol{B}_b\} - \hat{l_t}\frac{dP_m}{ds} \qquad (6)$$

در محاسباتی که دراین بخش انجام داده‌ایم پارامتر پیچش (بی بعد شده) را برحسب واحد R/B_0 بیان می‌کنیم و $V_i = B_0/\sqrt{\mu\rho_i}$ را بعنوان واحد سرعت زمینه پلاسما در نظر می‌گیریم. در تمام نمودارهایی که در این بخش آمده است نسبت مو لفه‌های نیروها را بازای مقادیر مختلف پارمتر پیچش و مولفه طولی جریان پلاسما رسم کرده‌ایم. در این شکل‌ها نمودارهای خط پر برای پیچش صفر و نمودارهای خط-نقطه برای پارامتر پیچش 0.008 است، همچنین رنگهای سیاه، قرمز و آبی نمودارها به ترتیب مربوط به جریان زمینه داخل لوله با مولفه طولی برابر با 0.0، 0.1 و 0.2 می‌باشد. در تمام این نمودارها عدد موج طولی را به صورت $kR = \pi/100$ در نظر گرفته‌ایم.

نسبت مولفه شعاعی تنش مغناطیسی به گرادیان فشار برای امواج کینکی با عدد موج سمتی $m = +1$ و $m = -1$ وبرای مقادیر مختلف پیچش و جریان زمینه پلاسما برحسب فاصله شعاعی از محور لوله در شکل 1 رسم شده است. برای تحلیل نتایج نشان داده شده در این شکل ابتدا حالتی را که جریان زمینه پلاسما صفر است یعنی نمودارهای مشکی را در نظر می‌گیریم. قسمت بالایی شکل نشان می‌دهد که برای یک لوله با میدان مغناطیسی طولی یعنی $A = 0$ نسبت نیروهای شعاعی هم برای موج با عدد موج $m = +1$ و هم برای موج با عدد موج $m = -1$ در همه جای لوله یکنواخت و کمی بیشتر از 1.2 است. با افزایش پارامتر پیچش برای موج با $m = +1$ نسبت نیروی تنش مغناطیسی به نیروی گرادیان فشار در داخل لوله کاهش ولی در بیرون لوله افزایش می‌یابد. به عبارت دیگر نسبت نیروها در داخل لوله کمتر از مقدار آن در بیرون لوله می‌شود که با نتیجه بدست آمده توسط بهاری و خالوندی (2017) همخوانی دارد. برای موج $m = -1$ در حضور پیچش نسبت نیروها در داخل لوله بیشتر از مقدار آن در بیرون لوله می‌شود که بازهم با بهاری و خالوندی (2017) همخوانی دارد. اما در ناحیه پوسته برای موج $m = +1$ نسبت نیروها با فاصله شعاعی تغییر زیادی نمی‌کند ولی برای موج با $m = -1$ نسبت نیروها با فاصله شعاعی به شدت تغییر می‌کند. با افزایش جریان زمینه هم برای $m = +1$ و هم برای $m = -1$ نسبت نیروهای شعاعی در تمام ناحیه‌ها و بازای تمام پیچش‌ها افزایش می‌یابد. بنابراین وجود هریک از پارامترهای پیچش مغناطیسی و جریان زمینه یا هردوی آنها ممکن است باعث شود که نسبت نیروهای شعاعی در داخل لوله خیلی کوچکتر از یک یا

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

خیلی بزرگتر از یک شود که در این صورت طبیعت موج به ترتیب یک موج مگنتوهیدرودینامیک سریع یا آلفنی خالص خواهد بود و در صورتی که نسبت نیروها از مرتبه یک باشد موج یک موج خالص نخواهد بود. در بیرون لوله همواره نسبت نیروها از مرتبه یک است.



شکل 1 : نسبت مولفه‌های شعاعی نیروهای تنش مغناطیسی به گرادیان فشار برحسب فاصله شعاعی از مرکز لوله، قسمت بالای شکل برای موج کینک با $m=+1$ و قسمت پایین شکل برای موج کینک با $m=-1$ است. نمودارهای خطپر برای پیچش صفر و نمودارهای خط-نقطه برای پیچش $A=0.008$ و همچنین رنگهای سیاه، قرمز و آبی نمودارها به ترتیب مربوط به جریان زمینه طولی در داخل لوله برابر با 0.0، 0.1 و 0.2 است. در این محاسبات واحد سرعت زمینه پلاسما را در نظرگرفته‌ایم. سایر پارامترهای لوله به صورت $\rho_e=\rho_0=0.1\rho_i$، $U_{ze}=U_{z0}=0.5U_{zi}$، $kR=\pi/100$ و $R_1=2R$ است.

نتیجه گیری

یک لوله شار مغناطیسی را به صورت لوله‌ای استوانه‌ای در محیط تراکم ناپذیر در نظر گرفته‌ایم. لوله شامل هسته، پوسته و ناحیه خارجی است. در هسته و پوسته میدان مغناطیسی به صورت پیچشی است اما در ناحیه بیرون میدان فقط شامل مولفه طولی است. در هر سه ناحیه جریان زمینه پلاسما را در جهت میدان مغناطیسی در نظر گرفته‌ایم و اثر جریان و میدان مغناطیسی پیچشی را بر نسبت نیروهای بازگرداننده بررسی کرده‌ایم. نتایج بدست آمده را می‌توان به صورت زیر خلاصه کرد: الف) نتیجه به دست آمده برای نسبت نیروها برای حالتی که جریان زمینه صفر است، در ناحیه‌های هسته و بیرون لوله با نتایجی که قبلا بدست آمده‌است همخوانی دارد اما در ناحیه پوسته تغییرات نسبت نیروها برحسب فاصله از محور لوله خیلی متفاوت از دو ناحیه دیگر است. بنابراین می‌توان گفت که نسبت نیروهای بازگرداننده امواج کینکی به مدل درنظرگرفته‌شده برای لوله بستگی دارد. ب) در حضور میدان مغناطیسی پیچشی جریان زمینه اثرات متفاوتی بر نسبت نیروهای شعاعی و سمتی می‌گذارد به گونه‌ای که برای امواج با $m = -1$ با افزایش جریان زمینه هم نسبت نیروهای شعاعی و هم نسبت نیروهای سمتی افزایش می‌یابد اما برای امواج با $m = +1$ با افزایش جریان زمینه نسبت نیروهای شعاعی افزایش و نسبت نیروهای سمتی کاهش می‌یابد. ج) در حضور میدان مغناطیسی پیچشی و جریان زمینه بازای نسبت‌های چگالی بخصوص نسبت نیروها صفر یا خیلی بزرگتر از یک می‌شود. برای امواج کینک با $m = -1$ نیروی گرادیان فشار در مقایسه با تنش مغناطیسی قابل صرفنظر است و می‌توان آن را یک موج آلفنی خالص در نظرگرفت، اما برای اواج با $m = +1$ اگر از نظر مقایسه مولفه-های سمتی نیروها یک موج آلفنی خالص باشد از نظر مقایسه مولفه شعاعی نیروها یک موج مگنتوهیدرودینامیکی سریع است و برعکس، اگر از نظر مقایسه مولفه‌های سمتی نیروها یک موج مگنتوهیدرودینامیکی سریع باشد از نظر مقایسه مولفه شعاعی نیروها یک موج آلفنی خالص است.

مرجع‌ها

M.J., Aschwanden, L., Fletcher, C.J., Schrijver, and D., Alexander, *Astrophys. J.*, 520, 880 (1999)
K., Bahari, *Astrophys. J.*, 864, 2 (2018)
K., Bahari, M.R., Khalvandi, *Solar Phys.*, 292, 192 (2017)
P., Brekke, O., Kjeldseth-Moe, and R.A., Harrison, *Solar Phys.*, 175, 511 (1997)
M., Goossens1, J., Terradas1, J., Andries, I. Arregui, and J.L., Ballester, *Astron. Astrophys.*, 175, 511 (2009)
V.M., Nakariakov, L., Ofman, E.E., DeLuca, B.R., Roberts, and J.M., Davila, *Science*, 285, 862 (1999)
L., Ofman, and and T.J., Wang, *Astron. Astrophys.*, 482, L9 (2008)
T.J., Okamoto, et al. *Science*, 318, 1557 (2007)
A.R., Winebarger, E.E., DeLuca, and L., Golub, *Astrophys. J.*, 553, L81 (2001)
J.B., Zirker, O., Engvold, and S.F., Martin, *Nature*, 396, 440 (1998)

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بررسی انتشار باریکه‌های فرش شعاعی از میان جو متلاطم آزمایشگاهی

باقری، محمد[۱]؛ رسولی،سیف‌اله[۱]

[۱]دانشکده فیزیک، دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان، بلوار استاد یوسف ثبوتی، زنجان

چکیده

مناسب‌ترین گزینه برای انتقال اطلاعات در فضای آزاد، استفاده از لیزر است. اما تلاطم جو مانع از انتقال صحیح اطلاعات با استفاده از لیزر در فضای آزاد می‌شود. در سال‌های اخیر باریکه‌هایی معرفی شده‌اند که به دلیل پیچیدگی در توزیع شدت و فاز، دارای خاصیت خودترمیمی هستند. انتظار می‌رود جبهه موج این باریکه‌ها در اثر انتشار از محیط متلاطم دچار تغییرات کم‌تری نسبت به باریکه‌های معمولی شود. در این مقاله باریکه فرش شعاعی و لاگر گاوسی (جبهه موج آن پیچیدگی کمتری نسبت به باریکه فرش شعاعی دارد) از محیط تلاطمی آزمایشگاهی همرفتی عبور داده شده‌اند. محیط تلاطمی همرفتی با استفاده از یک عدد گرمکن مسطح ایجاد می‌شود. پارامتر C_n^2 برای هرکدام از باریکه‌های عبوری در دماهای مختلف اندازه‌گیری شده است. همانطور که نشان خواهیم داد باریکه فرش شعاعی نسبت به باریکه لاگر گاوسی در عبور از محیط متلاطم مقاومت بیشتری نشان می‌دهد.

واژه های کلیدی: *تلاطم جو، دامنه، فاز، جبهه موج، باریکه فرش شعاعی، باریکه لاگر گاوسی.*

Propagation of radial carpet beams through a convective air turbulence

Bagheri, Mohammad[1]; Rasouli, Saifollah [1]

1 Department of Physics, Institute for Advanced Studies in Basic Sciences (IASBS), Zanjan

Abstract

The best option for transferring information in free space is the use of lasers. In recent years, beams have been introduced that have self-healing properties due to their complexity in intensity and phase distribution. The wave front of these beams is expected to have fewer changes than conventional beams due to propagation from the turbulent atmosphere. In this article, the radial carpet beam and the Laguerre-Gaussian beam are passed through the turbulent atmosphere. The C_n^2 parameter for each of these beams is measured at different temperatures. As we will see, the radial carpet beam is more resistant than the Laguerre-Gaussian beam in passing turbulent atmospheres.

***Keywords**: Atmospheric Turbulence, Amplitude, Phase, Wavefront, Radial Carpet Beam, Laguerre-Gaussian Beam.*

PACS No. 42

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد

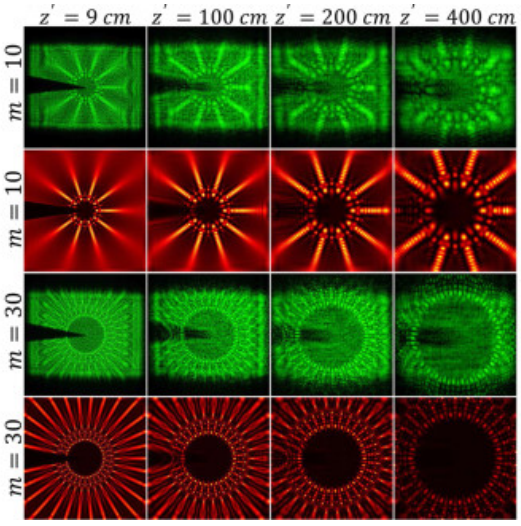
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مقدمه

جو سیالی با رفتار تلاطمی است. جو زمین شامل گازهای مختلف است که بر اساس مشخصاتی از قبیل دما، ترکیبات شیمیایی و چگالی گازها به لایه‌های مختلفی تقسیم می‌شود [۱]. ضخامت این لایه‌ها در طول و عرض‌های جغرافیایی مختلف، متفاوت است. با دور شدن از سطح زمین، چگالی جو کاهش یافته، طوری‌که نصف گازهای موجود در جو زمین زیر ارتفاع ٦,٥km از سطح دریا قرار دارند. همچنین ۹۰ درصد گازها زیر ارتفاع ١٦ کیلومتری هستند. با افزایش ارتفاع از سطح زمین، فشار به طور نمایی کاهش می‌یابد. افت‌وخیز دما، فشار یا حرکت باد منشأ تلاطم در جو هستند. این عوامل باعث تغییرات تصادفی در ضریب شکست جو شده که از این ویژگی به‌عنوان تلاطم اپتیکی یاد می‌شود. توزیع تصادفی مکانی و زمانی در ضریب شکست باعث ایجاد تغییراتی در باریکه‌ی نور عبوری از جو می‌شود [۲]. این تغییرات علت ایجاد افت‌وخیزهای زمانی شدت و فاز جبهه‌ی موج باریکه‌ی نور هستند. افت‌وخیزهای تصادفی دامنه و فاز جبهه‌ی موج، عواملی هستند که از استفاده لیزر به عنوان انتقال دهنده اطلاعات در فضای آزاد جلوگیری می‌کنند.

با توجه به اینکه استفاده از باریکه لیزر برای انتقال اطلاعات در فضای آزاد نسبت به فیبر مقرون به صرفه‌تر است می‌توان از باریکه فرش شعاعی که یک باریکه‌ی غیرپراشی است، استفاده کرد. از ویژگی‌های باریکه‌های غیرپراشی خاصیت خود ترمیمی آن‌هاست. به این معنی که اگر جبهه‌ی موج بر اثر انتشار در جو متلاطم دچار انحرافات کوچک موضعی شود این باریکه‌ها دوباره سطح جبهه‌ی موج خود را ترمیم می‌کنند.

تولید و بررسی ویژگی‌های این نوع باریکه‌های غیرپراشی توسط رسولی و همکاران انجام شده است. همانطور که در شکل ۱ مشاهده می‌شود، قسمتی از باریکه توسط یک مانع سد شده است. با انتشار باریکه مشاهده می‌شود که در فواصل مختلف، باریکه در حال شارش انرژی به ناحیه حذف شده و بازسازی دوباره شکل کلی ساختار شدت عرضی خود است [۳].



شکل ۱: خود ترمیم‌گری باریکه‌ی فرش تالبوت در فاصله‌های مختلف [۳].

مبانی نظری

ثابت ساختار ضریب شکست

یکی از پارامترهای تلاطمی جو، ثابت ساختار ضریب شکست جو است که مقدارش بر حسب تابعی از افت‌وخیزهای آن بیان می‌شود. این کمیت نشانگر قدرت تلاطم جو است. ثابت ساختار ضریب شکست با C_n^2 نمایش داده می‌شود. افزایش تلاطم، همراه با بزرگ‌تر شدن ثابت C_n^2 است. ثابت ساختار ضریب شکست برای مسیر افقی ثابت با رابطه‌ی زیر توصیف می‌شود [٤].

$$C_n^2 = \frac{\sigma_\alpha^2 D^{1/3}}{2.91 L} \qquad (1)$$

که در آن σ_α^2 واردش زاویه‌ی فرود، D قطر دهانه‌ی ورودی دستگاه گیرنده و L طول مسیر انتشار هستند.

مقدار ثابت ساختار ضریب شکست، تابع زمان و مکان و شرایط جوی است. در نزدیکی سطح زمین مقدار این کمیت از $10^{-11} m^{-2/3}$ تا $10^{-15} m^{-2/3}$ تغییر می‌کند. مقادیر بزرگ ثابت ساختار، $10^{-13} m^{-2/3}$ یا بیشتر، نشان‌دهنده‌ی یک تلاطم قوی بوده و به طور معمول در طول یک روز آفتابی با آسمانی صاف اندازه‌گیری می‌شود. مقادیر پایین ثابت ساختار، $10^{-16} m^{-2/3}$ یا کمتر، نشان‌دهنده‌ی تلاطم ضعیف بوده و به طور معمول در طول یک روز ابری و بادی به دست آمده است. همچنین در طول ساعات متفاوت روز، مقدار آن تغییر می‌کند. علاوه بر آن در فصول سال

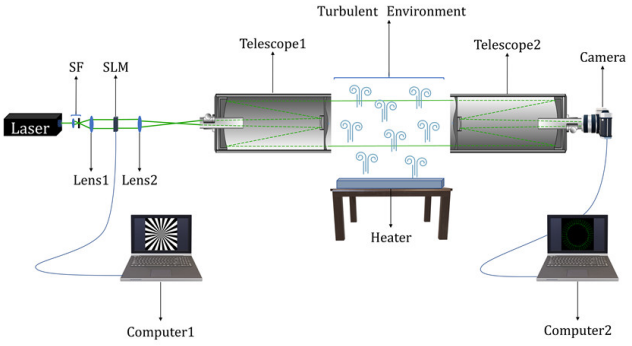
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

نیز ثابت ساختار مقادیر مختلف به خود می‌گیرد. در عکس‌برداری‌های هوایی و ماهواره‌ای، اطلاع از نحوه‌ی تغییرات ثابت ساختار در طول شبانه‌روز از اهمیت بالایی برخوردار است. همچنین برای استفاده از یک سامانه‌ی اپتیک تطبیقی بهینه باید اطلاعات شبانه‌روزی شدت تلاطم و چگونگی تغییرات آن در دسترس باشد.

در این مقاله باریکه فرش شعاعی و لاگر گاوسی از محیط متلاطم آزمایشگاهی عبور داده شده‌اند. پارامتر C_n^2 برای هرکدام از این باریکه‌ها در دماهای مختلف اندازه‌گیری شده است. همانطور که نشان خواهیم داد باریکه فرش شعاعی نسبت به باریکه لاگر گاوسی در عبور از هوای متلاطم مقاومت بیشتری نشان می‌دهد.

مبانی تجربی

چیدمان مورد استفاده برای بررسی انتشار باریکه فرش شعاعی و لاگر گوسی در محیط متلاطم آزمایشگاهی در شکل ۲ آمده است.



شکل۲: شمایی از چیدمان آزمایشگاهی مورد استفاده.

لیزر مورد استفاده در این پروژه دارای طول موج ۵۳۲nm است. باریکه لیزر توسط پالایه فضایی تمیز شده و سپس به وسیله عدسی با فاصله کانونی ۲۰cm موازی می‌شود. نور موازی شده توسط مدولاتور فضایی نور (SLM) تغییر فاز پیدا می‌کند. برای تولید باریکه فرش شعاعی روی مدولاتر فضایی طرح توری شعاعی تحریر می‌شود. که دارای دوره تناوب در راستای سمتی است. این توری توسط نرم افزار MATLAB و با تابع عبور

$$t(\theta)=\frac{1}{2}[1+\cos(m\theta)] \qquad (2)$$

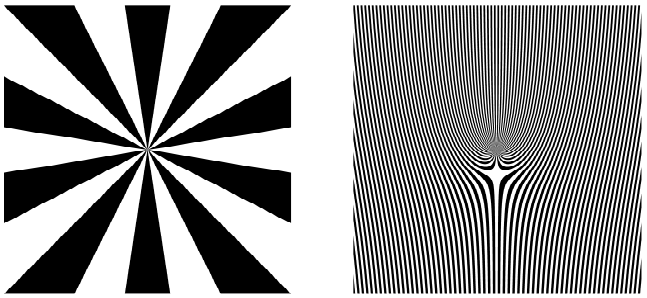
ساخته می‌شود. در معادله بالا m تعداد انشعاب‌های توری است.

برای تولید باریکه لاگر گاوسی از تابع عبور

$$t(r,\theta)=\frac{1}{2}[1+\cos(\frac{2\pi x}{d}+L\theta)] \qquad (3)$$

استفاده می‌شود. که در آن d گام توری، θ مختصه زاویه سمتی و L عددی صحیح است که نشان دهنده تعداد انشعابات خطوط توری است. مقدار L در این مقاله، ۳۶ است (شکل۳).

الف) ب)



شکل۳ : نمونه‌ای از توری چنگالی (الف) و توری شعاعی (ب) طراحی شده با نرم افزار MATLAB.

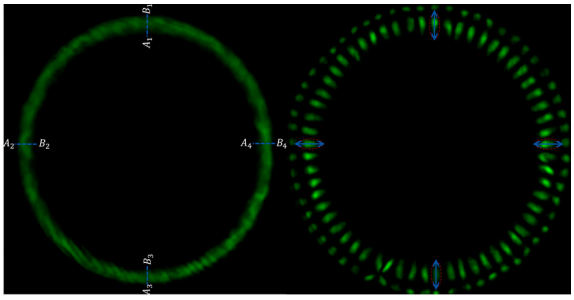
در چیدمان شکل ۲ از دو تلسکوپ کاسگرین-اشمیت استفاده شده است. لازم است قطر باریکه حین عبور از محیط متلاطم ثابت باشد، برای این منظور نور خروجی از تلسکوپ ۱ موازی شده است. بنابراین قبل از تلسکوپ ۱، از یک عدسی با فاصله کانونی ۷۵mm استفاده شده است.

محیط متلاطم آزمایشگاهی در این چیدمان توسط یک گرمکن دست‌ساز به ابعاد $50cm\times100cm$ که به یک دماسنج مجهز است، ایجاد می‌شود. گرمای ایجاد شده به وسیله گرمکن توسط درایور آن قابل تنظیم است.

با عبور نور از محیط متلاطم، دامنه و فاز جبهه موج دچار افت و خیزهای تصادفی می‌شود. در نتیجه امتداد انتشار در نقاط مختلف نور ورودی، وابسته به میزان تلاطم، تغییر جهت پیدا می‌کنند. به این پدیده افت و خیز زاویه ورود گفته می‌شود. تحول شکل عرضی نور عبوری بعد از محیط متلاطم (به طول ۱,۵m) توسط تلسکوپ ۲ روی صفحه حساس دوربین Nikon D۷۲۰۰ با سرعت ۶۰frame/sec رصد و ضبط می‌شوند. تصاویر ثبت شده با استفاده از نرم افزار MATLAB مورد تجزیه و تحلیل قرار می‌گیرند.

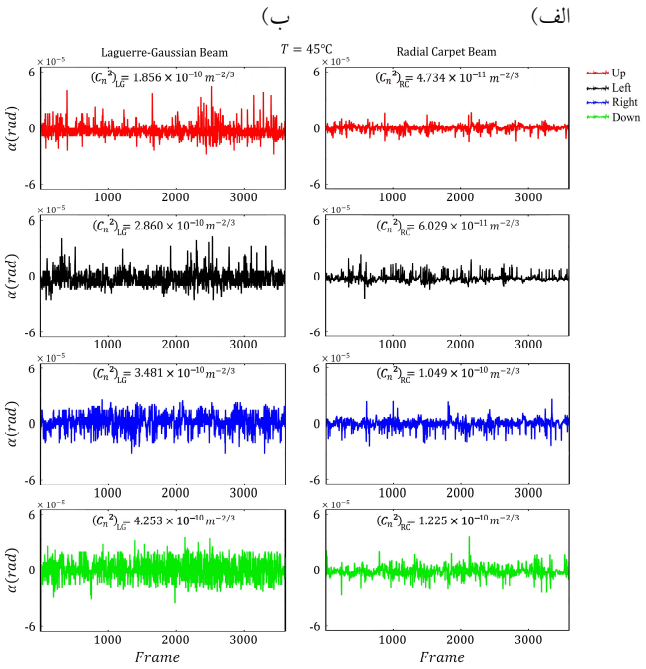
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

برای بررسی افت‌وخیرهای زاویه ورود دو باریکه همانند شکل٤، افت‌وخیرهای چهار لکه در قسمت‌های بالا، چپ، راست و پایین باریکه‌ها که به ترتیب در ارتفاع‌های ٦٠، ٥٠، ٥٠ و ٤٠ سانتی‌متر نسبت به گرمکن قرار دارند، در راستای شعاع بررسی می‌شوند.



شکل٤: جابه‌جایی چهار قسمت باریکه‌ها (بالا، چپ، راست و پایین) در راستای شعاع.

در باریکه‌ی فرش شعاعی جابه‌جایی مرکز لکه‌ها در راستای شعاع و در باریکه‌ی لاگر گاوسی جابه‌جایی بیشینه شدت باریکه در راستای شعاع بررسی شده است. نمودارهای مربوط به نوسانات زاویه ورود در شکل ٥ آمده است.



شکل٥: مقایسه نوسانات زاویه ورود باریکه فرش شعاعی (الف) و لاگر گاوسی (ب) در عبور از محیط متلاطم آزمایشگاهی. دمای دستگاه گرمکن در این حالت ٤٥ درجه سانتی گراد است. C_n^2 مربوط به هر ناحیه در بالای نمودارها آورده شده است.

در هر نمودار ٣٦٠٠ تصویر پی‌درپی مورد بررسی قرار گرفته است. در دمای ٤٥ درجه سانتی گراد C_n^2 اندازه‌گیری شده توسط باریکه فرش شعاعی به طور میانگین معادل یک چهارم C_n^2 اندازه‌گیری شده توسط باریکه لاگر گاوسی است. این اندازه‌گیری نشان می‌دهد که در شرایط دمایی یکسان، باریکه فرش شعاعی حین عبور از جو متلاطم، مقاومت بیشتری در برابر تغییرات تلاطم نسبت به باریکه لاگر گاوسی دارد.

نتیجه‌گیری

در این کار، انتشار باریکه‌ی فرش شعاعی از میان محیط متلاطم آزمایشگاهی انجام شد. سپس افت‌وخیرهای زاویه ورود این باریکه در دمای ٤٥ درجه سانتی‌گراد گرمکن دست‌ساز، با افت‌وخیرهای زاویه ورود باریکه لاگر گاوسی اندازه‌گیری گردید. C_n^2 بدست آمده از چهار نقطه بالا، چپ، راست و پایین باریکه‌ها، نشان دهنده مقاومت بیشتر باریکه‌ی فرش شعاعی در عبور از جو متلاطم است. این ویژگی باریکه‌ی فرش شعاعی که یک باریکه غیرپراشی است، ناشی از خاصیت خود ترمیمی آن است و آنرا کاندید مناسبی برای ارتباطات نوری از میان جو متلاطم می‌کند.

تشکر و قدردانی

این پژوهش با حمایت مالی صندوق حمایت از پژوهشگران و فناوران کشور در قالب طرح شماره ۹۸۰۰۳۳۲۵ انجام شده است.

مرجع‌ها

[1] F. Lutgens and E. Tarbuck, The Atmosphere: An Introduction to Meteorology, *Pren-tice Hall*, 1-300, 2001.

[2] E. E. Silbaugh, M. C. Roggemann and B. M. Walsh, Characterization of atmospheric turbulence phase statics using wave-front slope measurements, *J. Opt. Soc. Am. A*, 12, 2453-2460, 1996.

[3] S. Rasouli, A M. Khazaei and D. Hebri, Radial carpet beams: A class of nondiffracting, accelerating, and self-healing beams, *PHYSICAL REVIEW A 97*, 033844, 2018.

[4] F. Roddier, "The Effects of Atmospheric Turbulence in Optical Astronomy," Progress in Optics, Vol. 19, 99. 281 –376(1981).

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

توابع توزیع پارتونی هسته‌ای در تقریب NNLO و در رهیافت GM-VFN scheme

خان‌پور، حمزه[۲،۱]؛ آتشبار تهرانی، شاهین[۲]؛ سلیمانی‌نیا، مریم[۲]

[۱] گروه فیزیک، دانشگاه علم فناوری مازندران، صندوق پستی ۴۸۵۱۸۷۸۱۹۵، بهشهر، مازندران

[۲] پژوهشکده ذرات و شتابگرها، پژوهشگاه دانش‌های بنیادی (IPM)، ، صندوق پستی ۱۹۳۹۵۵۵۳۱، تهران

چکیده

فرایند پراکندگی ناکشسان ژرف لپتون-هسته، ابزاری موثری را برای مطالعه توزیع تکانه کوارک‌ها در داخل نوکلئون و هسته فراهم می‌آورد. در این مقاله، ما تابع توزیع پارتونی هسته‌ای جدیدی را در تقریبNLO و NNLO در QCD اختلالی بدست آورده‌ایم. این آنالیز بر اساس داده‌های تجربی باریکه‌ی لپتون-باردار و نوترینو بر هدف‌های هسته‌ای استوار است. از تابع توزیع پارتونی جدید گروه پدیده‌شناسی CT18 به عنوان تابع توزیع پروتون آزاد استفاده شده است. عدم قطعیت توابع توزیع پارتونی با کمک روش استاندارد Hessian بدست آمده است. نتایج این کار با داده‌های تجربی و نتایج گروه‌های تجربی موجود مقایسه شده و سازگاری بسیار خوبی بدست آمده است.

Parton distribution functions of nuclei at NNLO approximation in GM-VFN scheme

Khanpour, Hamzeh[1,2]; Atashbar Tehrani, Shahin[2]; Soleymaninia, Maryam[2]

[1] Department of Physics, University of Science and Technology of Mazandaran, P.O.Box 48518-78195, Behshahr, Iran
[2] School of Particles and Accelerators, Institute for Research in Fundamental Sciences (IPM), P.O.Box 19395-5531, Tehran, Iran

Abstract

The lepton-nuclei deep inelastic scattering (DIS) process provides an effective tool for studying the distribution of quark momentum within the nucleon and nucleus. In this paper, we present new sets of nuclear parton distribution functions (nuclear PDFs) at next-to-leading order (NLO) and next-to- next-to-leading order (NNLO) accuracy in perturbative QCD. This analysis is based on the nuclear DIS data with charged-lepton () and neutrino () beams on nuclear targets. CT18 set of proton baseline PDFs is used to extract our nuclear PDFs. The uncertainties are obtained using the standard Hessian approach. The results of this work are compared with the analyzed data and other nuclear PDFs sets.

PACS No. (۱۳)

مقدمه

پراکندگی ناکشسان ژرف لپتون‌های باردار و نوترینو با هدف‌های هسته‌ای، نقش بسیار مهمی را برای مطالعه در مورد توزیع نوکلئون‌ها و کوارک‌ها در هسته ایفا می کند. در این نوع فرآیندها، در نظر گرفتن تصحیحات هسته‌ای برای تعیین توابع ساختار ضروری می باشد. فرایند ناکشسان ژرف توسط پراکندگی لپتون باردار از هسته‌ها متفاوت با نوکلئون‌های آزاد می‌باشد که به پدیده EMC معروف است و نشان‌دهنده آن است که توزیع تکانه پارتون‌ها در داخل هسته متفاوت با پارتون‌ها در داخل نوکلئون می‌باشد.

توابع توزیع پارتون آزاد و هسته‌ای

هدف اصلی ما در این مقاله، بدست آوردن توابع توزیع هسته‌ای است که نقش بسیار مهمی در مطالعات برخوردهای پروتون-سرب و سرب-سرب در برخورددهنده هادرونی بزرگ LHC دارد. این توابع توزیع هسته‌ای در هر دو تقریب دیاگرام فاینمن استخراج شده‌اند. برای تعیین توابع توزیع‌هسته‌ای، از توزیع پارتونی پروتون

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

آزاد گروه CT18 استفاده کرده‌ایم [۱]. با در دست داشتن توزیع پارتونی آزاد پروتون، تابع وزن توابع پارتونی نوکلئون مقید را می‌توان بدست آورد. شکل این تابع وزن به صورت زیر تعریف می‌گردد [۸-۲]،

$$W_i(x,A) = 1 + (1-\frac{1}{A^\alpha})\frac{a_i+b_ix+c_ix^2+d_ix^3}{(1-x)^{\beta i}} \qquad (۱)$$

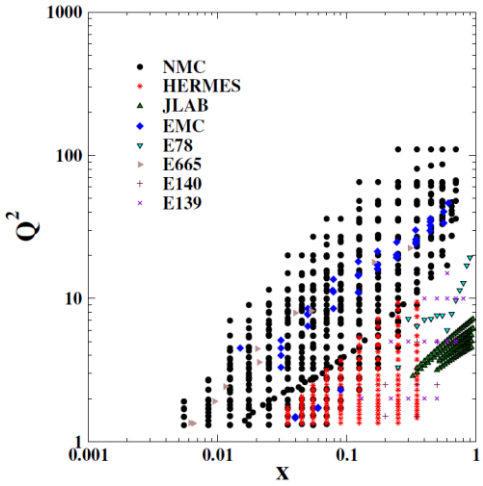
که در رابطه بالا A عدد اتمی هسته مورد نظر و $\alpha = \frac{1}{3}$ می‌باشد. با توجه به تعریف تابع وزن، می‌توان توابع پارتونی هسته‌ای را به صورت زیر توصیف نمود،

$$\begin{aligned}
u_v^A &= W_{u_v}(x,A)\frac{Zu_v^{CT18}+Nd_v^{CT18}}{A}\\
d_v^A &= W_{d_v}(x,A)\frac{Nu_v^{CT18}+Zd_v^{CT18}}{A}\\
\bar{u}^A &= W_{\bar{q}}(x,A)\frac{Z\bar{u}^{CT18}+N\bar{d}^{CT18}}{A}\\
\bar{d}^A &= W_{\bar{q}}(x,A)\frac{Z\bar{d}^{CT18}+N\bar{u}^{CT18}}{A}\\
s^A &= W_{\bar{q}}(x,A)s^{CT18}\\
g^A &= W_g(x,A)g^{CT18}
\end{aligned} \qquad (۲)$$

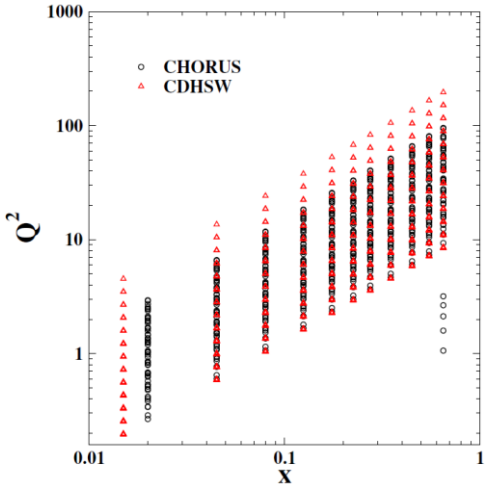
این توابع توزیع در مقیاس اولیه‌ی $Q_0^2 = 1.3\ GeV^2$ تعریف شده اند. از رهیافت GM-VFNS برای در نظر گرفتن سهم کوارک‌های سنگین استفاده شده است. در این رهیافت، اثرات جرمی کوارک‌های سنگین در آستانه‌ی $Q^2 = m_H^2$ در تحول ثابت جفت‌شدگی قوی α_s و در محاسبات ضرایب ویلسون در نظر گرفته می‌شود. در نتیجه، تطبیق مدل با داده‌های تجربی دقیق‌تر صورت می‌پذیرد [۱].

داده‌های تجربی

در این بخش داده‌های تجربی مورد استفاده در این آنالیز شرح داده خواهد شد و برش‌های انجام شده بر روی داده‌ها نیز مورد بحث قرار می‌گیرد. در این آنالیز ما از همه‌ی داده‌های تجربی فرآیند پراکندگی ناکشسان ژرف لپتون باردار با هدف هسته‌ای آزمایش‌های EMC، NMC، BCDMS، SLAC، E139, E87, E49, HERMES و E665 استفاده کرده‌ایم [۲۵-۹].



شکل ۱: محدوده سینماتیکی داده‌های تجربی پراکندگی سخت لپتون باردار-هسته مورد استفاده در این آنالیز.



شکل **۲**: محدوده سینماتیکی داده‌های تجربی پراکندگی سخت نوترینو-هسته و پادنوترینو-هسته [27،26] مورد استفاده در این آنالیز.

اندازه‌گیری‌ها در این آزمایش عموماً به صورت نسبت توابع ساختار دو هسته

$$R(x,Q^2,A_1,A_2) = \frac{F_2(x,Q^2,A_2)}{F_1(x,Q^2,A_1)} \qquad (۳)$$

گزارش شده‌اند که در آن A_1 و A_2 اعداد جرم اتمی دو هسته متفاوت هستند. علاوه بر این، ما از داده‌های سطح مقطع پراکندگی نوترینو-هسته و پادنوترینو-هسته آزمایش‌های CHORUS [۲۶] و CDHSW [۲۷] نیز بهره برده‌ایم. بر روی تمامی داده‌های تجربی برش $Q^2 \geq Q_{min}^2 = 1.3\ GeV^2$ اعمال شده است. در شکل‌های (۱) و (۲)، محدوده سینماتیکی (Q^2, x) داده‌های تجربی پراکندگی سخت لپتون باردار-هسته، نوترینو-هسته و پادنوترینو-هسته که در این آنالیز مورد استفاده قرار گرفته است،

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

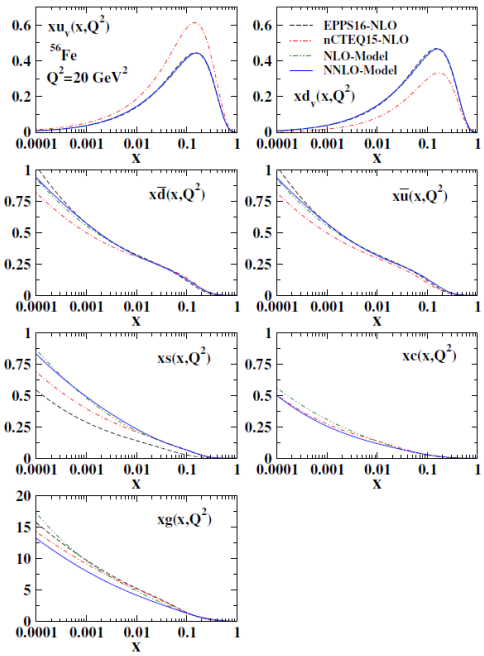
نشان داده شده است. پس از اعمال برش، ٤٧١٤ داده تجربی باقی مانده که در آنالیز مورد استفاده قرار گرفته است. جهت انجام آنالیز و تعیین پارامترهای تابع توزیع (معادله‌ی ۱ و ۲) از برنامه Minuit که در سرن (CERN) توسعه یافته است، بهره گرفتیم. مقدار $\frac{\chi^2}{d.o.f}$ برای آنالیزهای NLO و NNLO انجام شده به ترتیب ۱/۲٦ و ۱/۲٤ می‌باشد. نتایج عددی حاصل از برازش انجام شده در این آنالیز در جدول (۱) بیان شده است.

پارامتر	NLO	NNLO
a_v	ضمیمه مرجع [۵]	ضمیمه مرجع [۵]
b_v	۰.٦٦۰۷	۰.٤۷۸۱٤
c_v	-۲.٦۸۱۲	-۲.۱۹۳۳
d_v	۲.۲۷۵۵	۱.۹۷۸۳۹
β_v	۰.۸۱۰۷	۰.۸۱۰۷
$a_{\bar{q}}$	-۰.۲۸٦۲۷	-۰.۲۷۱۸۰
$b_{\bar{q}}$	۵.٤۸۲۵	۵.۷۹۰۰۱
$c_{\bar{q}}$	-۲٤.۵۰٦۵	-۲۵.۸٤۷٤۳
$d_{\bar{q}}$	۳۲.۹۸۸۸	۳۷.۰۹۸٦۱
$\beta_{\bar{q}}$	۱.۰	۱.۰
a_g	ضمیمه مرجع [۵]	ضمیمه مرجع [۵]
b_g	۱.۹۸۰۷۵	٤.٤۰۲۷۹
c_g	۰.۹٦٤٦	-۲.٤۱۸۱۹
d_g	۰.۰	۰.۰
β_g	۱.۰	۱.۰

جدول **۱**: نتایج برازش توابع توزیع پارتونی، معادلات (۱) و (۲) با داده‌های تجربی

نتایج

در این بخش نتایج آنالیز انجام شده ارائه می‌گردد. در ابتدا توابع توزیع هسته‌ای بدست آمده از این آنالیز را در مقایسه با گروه‌های پدیده‌شناسی موجود نشان خواهیم داد. در ادامه، تابع ساختار نظری بدست آمده از این آنالیز با داده‌های تجربی مقایسه می‌گردد. در شکل (۳)، توابع توزیع پارتونی هسته‌ای xu_v ،xd_v ،xs ،xc و $x\bar{d}$ ،$x\bar{u}$ ،xg مستخرج از این آنالیز در تقریب NLO و NNLO برای هسته آهن و در انرژی $Q^2 = 20\ GeV^2$ نشان داده شده است. برای مقایسه، نتایج گروه‌های پدیده‌شناسی EPPS16 [28] و nCTEQ15 [29] نیز نمایش داده شده‌اند. همانطور که مشاهده می‌گردد نتایج ما سازگاری بسیار خوبی با نتایج گروه EPPS16 دارد. در مقایسه با گروه nCTEQ15، تفاوت‌هایی برای توابع توزیع پارتونی هسته‌ای xu_v ،xd_v ،xs نیز مشاهده می‌گردد. دلیل این تفاوت مشاهده شده این است که در مدل nCTEQ15، تابع توزیع هسته‌ای بر اساس تابع توزیع گروه CTEQ پایه‌گذاری شده که پارامترهای تابع توزیع وابسته به A و Z می‌باشند. در حالی که در مدل EPPS16 و مطالعه‌ی انجام شده در این مقاله، از تابع توزیع اولیه به شکل معادله (۲) استفاده شد.

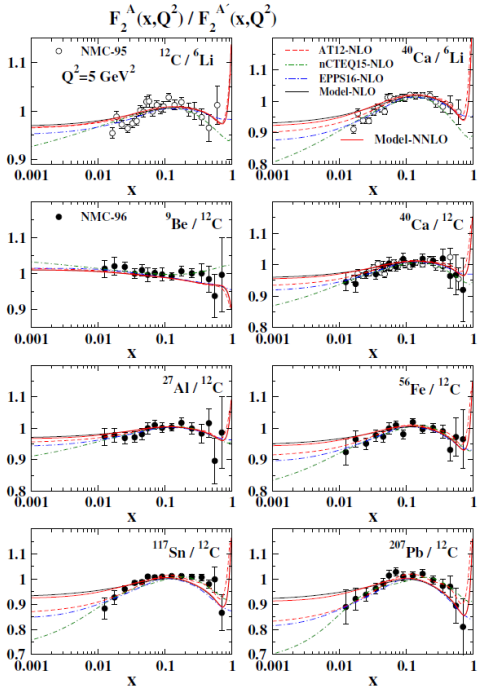


شکل **۳**: توابع توزیع پارتونی هسته‌های مستخرج از این آنالیز در مقایسه با گروه‌های پدیده‌شناسی EPPS16 [28] و nCTEQ15 [29].

مقادیر بدست آمده برای $\frac{\chi^2}{d.o.f}$، نشان از سازگاری بسیار خوب داده‌های آزمایشگاهی و مدل تئوری بدست آمده از این آنالیز است. علاوه بر این ما دریافتیم که کیفیت برازش انجام شده در تقریب‌های NLO و NNLO تقریبا مشابه یکدیگر است. در شکل (٤)، مقایسه مقادیر بدست آمده از نسبت توابع ساختار هسته‌ای با داده‌های تجربی گروه NMC برای هسته‌های مختلف نشان داده شده است. برای مقایسه، نتایج گروه‌های پدیده‌شناسی EPPS16 [۲۸] و nCTEQ15 [۲۹] نیز نمایش داده شده‌اند.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

همانطوری که مشاهده می‌گردد، سازگاری قابل قبولی بین داده‌ها و مدل تئوری بدست آمده است.



شکل ۴: مقایسه مقادیر بدست آمده از نسبت توابع ساختار هسته‌ای با داده‌های تجربی گروه NMC.

خلاصه و نتیجه‌گیری

توابع توزیع هسته‌ای نقش بسیار مهمی را در مطالعات برخوردهای سخت هادرونی با هدف‌های هسته‌ای در فیزیک انرژی‌های بالا ایفا می‌کنند. در این مقاله، این توابع تا تقریب NNLO و برای گستره‌ی وسیعی از هسته‌ها (از $A = 2$ تا $A = 208$) تعیین شده‌اند و برای استخراج آنها از داده‌های لپتون باردار و نوترینو با هدف‌های هسته‌ای استفاده شده است. برای تابع توزیع پروتون آزاد، ما از جدیدترین تابع توزیع گروه CT18 استفاده کرده‌ایم. نتایج بدست آمده سازگاری بسیار خوبی را با داده‌های تجربی و مدل‌های پدیده‌شناسی موجود نشان می‌دهد. نتایج این آنالیز می‌تواند با اضافه کردن داده‌های برخورد یون‌های سنگین پروتون–سرب (*p-pb*) و سرب–سرب (*pb-pb*) که در برخوردهنده‌ی LHC اندازه‌گیری می‌شود، بهبود یابد. این داده‌ها می‌توانند قید خوبی بر روی توابع توزیع پارتونی، مخصوصا تابع توزیع گلئون، در مقادیر کوچک x ایجاد کند.

منابع

[۱] T. J. Hou et al., Progress in the CTEQ-TEA NNLO global QCD analysis, arXiv:1908.11394 [hep-ph].
[۲] M. Hirai, S. Kumano and M. Miyama, *Phys. Rev. D* ***64*** *(2001) 034003.*
[۳] M. Hirai, S. Kumano and T.-H. Nagai, *Phys. Rev. C* ***70*** *(2004) 044905.*
[۴] M. Hirai, S. Kumano and T.-H. Nagai, *Phys. Rev. C* ***76*** *(2007) 065207*
[۵] S. Atashbar Tehrani, *Phys. Rev. C* ***86*** *(2012) 064301.*
[۶] H. Khanpour and S. Atashbar Tehrani, *Phys. Rev. D* ***93*** *(2016) no.1, 014026.*
[۷] J. Sheibani, A. Mirjalili and S. Atashbar Tehrani, *Phys. Rev. C* ***98*** *(2018) no.4, 045211.*
[۸] J. Sheibani, A. Mirjalili and S. Atashbar Tehrani, *Int. J. Theor. Phys.* ***59*** *(2020) no.5, 1553-1571.*
[۹] M. Arneodo et al. [European Muon Collaboration*], Nucl. Phys. B* ***333*** *(1990) 1.*
[۱۰] P. Amaudruz et al. [New Muon Collaboration], *Nucl. Phys. B* ***441*** *(1995) 3.*
[۱۱] M. Arneodo et al. [New Muon Collaboration], *Nucl. Phys. B* ***441*** *(1995) 12.*
[۱۲] J. Gomez et al., *Phys. Rev. D* ***49*** *(1994) 4348.*
[۱۳] J. Ashman et al. [European Muon Collaboration], *Phys. Lett. B* ***202*** *(1988) 603.*
[۱۴] M. R. Adams et al. [E665 Collaboration], *Z. Phys. C* ***67*** *(1995) 403.*
[۱۵] J. Seely et al., *Phys. Rev. Lett.* ***103*** *(2009) 202301*
[۱۶] G. Bari et al. [BCDMS Collaboration], *Phys. Lett. B* ***163*** *(1985) 282.*
[۱۷] K. Ackersta_ et al. [HERMES Collaboration], *Phys. Lett. B* ***475*** *(2000) 386 Erratum: [Phys. Lett. B* ***567*** *(2003) 339].*
[۱۸] A. Bodek et al., *Phys. Rev. Lett.* ***51*** *(1983) 534.*
[۱۹] A. Bodek et al., *Phys. Rev. Lett.* ***50*** *(1983) 1431.*
[۲۰] S. Dasu et al., *Phys. Rev. Lett.* ***60*** *(1988) 2591.*
[۲۱] A. C. Benvenuti et al. [BCDMS Collaboration], *Phys. Lett. B* ***189*** *(1987) 483.*
[۲۲] J. Ashman et al. [European Muon Collaboration], *Z. Phys. C* ***57*** *(1993) 211.*
[۲۳] M. R. Adams et al. [E665 Collaboration], *Phys. Rev. Lett.* ***68*** *(1992) 3266.*
[۲۴] M. Arneodo et al. [New Muon Collaboration], *Nucl. Phys. B* ***481*** *(1996) 3.*
[۲۵] M. Arneodo et al. [New Muon Collaboration], *Nucl. Phys. B* ***481*** *(1996) 23.*
[۲۶] G. Onengut et al. [CHORUS Collaboration], *Phys. Lett. B* ***632*** *(2006) 65.*
[۲۷] J. P. Berge et al., *Z. Phys. C* ***49****, 187.*
[۲۸] K.J.Eskola, P. Paakkinen, H.Paukkunen, C.A. Salgado, *Eur. Phys. J. C* ***77*** *(3), (2017)163.*
[۲۹] KovaU´ Cr´ık, K., Kusina, A., JeU´ Czo, T., Clark, D.B., Keppel, C., Lyonnet, F., Morf´ın, J.G., Olness, F.I.,Owens, J.F., Schienbein, I., Yu, J.Y. *Phys. Rev. D* ***93*** *(8), (2016) 085037.*

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

اثر لایه میانی Fe_2TiO_5 بر عملکرد فوتوآند هماتیت در تجزیه فوتوالکتروشیمیایی آب

فرهوش، شیما[۱]؛ افتخاری نیا، بهروز[۲]؛ ناصری، نعیمه[۱]

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

[۲] پژوهشکده فیزیک ، پژوهشگاه دانش های بنیادی، تهران

چکیده

ویژگی های ذاتی هماتیت یا اکسید آهن، از جمله فراوانی، پایداری، قیمت ارزان و همچنین گاف انرژی مناسب، آن را به یکی از شناخته شده ترین فوتوآندهای مورد استفاده در تجزیه فوتوالکتروشیمیایی آب به منظور تولید هیدروژن خورشیدی مبدل کرده است. با این حال، رسانندگی ضعیف هماتیت و محدود بودن طول نفوذ حفره در آن موجب تضعیف شدید عملکرد فوتوالکتروشیمیایی آن شده است که باید با انجام اصلاحات مختلفی بهبود یابد. در این پژوهش نانومیله های هماتیت آلاییده با تیتانیوم به روش هیدروترمال سنتز شده که بر روی آن لایه نازکی از Fe_2TiO_5 و همچنین الکتروکاتالیست $FeOOH$ قرار گرفته است. عملکرد فوتوالکتروشیمیایی این نمونه نسبت به فوتوآند هماتیت خالص افزایش چشمگیری داشته است، به طوری که چگالی جریان الکتریکی به مقدار $1/63\ mA/cm^2$ در ولتاژ $1/5\ V\ vs.\ RHE$ رسیده است.

واژه های کلیدی: *نانومیله های هماتیت، Fe_2TiO_5، الکتروکاتالیست $FeOOH$، تجزیه فوتوالکتروشیمیایی آب، هیدروژن خورشیدی*

The Effect of F_2TiO_5 Interlayer on the Performance of Hematite Photoanode in Photoelectrochemical Water Splitting

Farhoosh, Shima[1]; Eftekharinia, Behrooz[2]; Naseri, Naimeh[1]

[1] *Department of Physics, Sharif University of Technology, Tehran*
[2] *School of Physics, Institute for Research in Fundamental Science (IPM), Tehran*

Abstract

The inherent properties of hematite or iron oxide, including abundance, stability, low cost, and suitable band gap, make it one of the most well-known photoanodes used in the photoelectrochemical water splitting to produce solar hydrogen. However, poor electrical conductivity and limited hole diffusion length in hematite, have severely impaired its photoelectrochemical performance, which must be improved by various modifications. In this study, Ti-doped hematite nanorods were synthesized by a simple hydrothermal method, with a thin layer of Fe_2TiO_5 and FeOOH electrocatalyst. The photoelectrochemical performance of this sample has increased significantly compared to pure hematite photoanode so that its photocurrent density has reached $1.63\ mA/cm^2$ at 1.5 V vs. RHE.

***Keywords**: Hematite nanorods, Fe2TiO5, FeOOH electrocatalyst, PEC water splitting, solar hydrogen*

PACS No. 81

مقدمه

به دنبال افزایش آلودگی هوا ناشی از احتراق سوختهای فسیلی و همچنین کاهش ذخایر موجود در منابع تجدیدناپذیر آنها، امروزه جوامع بشری به دنبال پیدا کردن راهی برای جایگزینی سوختهای فسیلی با منابع تجدیدپذیر انرژی هستند. در این بین، هیدروژن با چگالی واحد جرم ۳ برابری نسبت به گازوییل می تواند جایگزین

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مناسبی به ویژه در بخش حمل و نقل باشد[۱]. تولید هیدروژن به روش تجزیه فوتوالکتروشیمیایی آب به عنوان یکی از رویکردهای نویدبخش برای ایجاد سوختی پاک و تجدیدپذیر شناخته شده است[۲]. فوتوآند مورد استفاده در این روش، باید برخی از الزامات مهم مانند گاف انرژی مناسب، موقعیت نوار رسانش و ظرفیت مناسب، جذب بالای نور مرئی، پایداریی شیمیایی و قیمت ارزان داشته باشد[۳] که این ویژگیها در هماتیت سبب شده است تا این ماده به عنوان یکی از بهترین کاندیدهای انتخاب فوتوآند در تجزیه فوتوالکتروشیمیایی آب بسیار مورد مطالعه قرار گرفته است.

با این حال، اشکالاتی از جمله رسانندگی الکتریکی ضعیف هماتیت و همچنین طول نفوذ محدود حفره در آن مانع عملکرد فوتوالکتروشیمیایی مناسب آن شده است[۴]. از این رو، رویکردهای مختلفی مانند کنترل مورفولوژی، آلایش ناخالصی، استفاده از الکتروکاتالیستها و انواع اصلاحات سطحی در جهت بهبود عملکرد هماتیت و افزایش بهره وری در تولید هیدروژن انجام شده است.

در این پژوهش، نانومیله های هماتیت به روشی ساده و ارزان ساخته و بعد از ایجاد اصلاحاتی از جمله آلایش با تیتانیوم، استفاده از الکتروکاتالیست FeOOH و لایه نازک سطحی Fe_2TiO_5 مورد مطالعه سیستماتیک قرار گرفته اند.

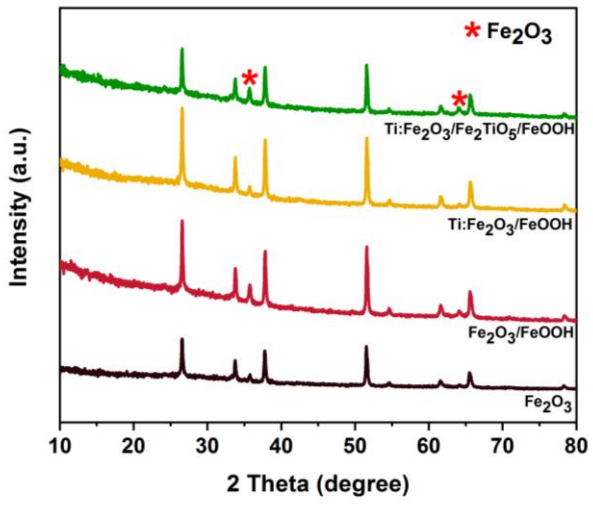
ساخت نانومیله های هماتیت

مطابق با گزارشهای منتشر شده[۵]، نانومیله های هماتیت به روش هیدروترمال بر روی زیرلایه FTO سنتز شده اند. به طور خلاصه، یک قطعه FTO تمیز شده را به صورت عمودی در اتوکلاو حاوی ۲۰ میلی لیتر محلول ۰/۱۵ مولار $FeCl_3.6H_2O$ و ۱ مولار $NaNO_3$ قرار داده و در مرحله اول به مدت ۵۰ دقیقه و در مرحله دوم به مدت ۴ ساعت در آون با دمای ۹۵ °C قرار می-دهیم. برای سنتز نانومیله های هماتیت آلاییده با Ti، در مرحله دوم مقدار ۵ درصد مولی $TiCl_4$ به محلول اضافه کرده و به مدت ۱۳ ساعت اتوکلاو داخل آون قرار می گیرد. بعد از آن، نمونه در کوره با دمای ۵۵۰ °C به مدت ۳ ساعت پخت می شود.

برای سنتز لایه Fe_2TiO_5، نمونه را قبل از پخت در محلول آبی ۰/۰۴ مولار $TiCl_4$ در دمای ۷۰ °C به مدت ۱ ساعت قرار می دهیم. سنتز الکتروکاتالیست FeOOH نیز بعد از پخت به صورت هیدروترمال در دمای ۹۵ °C به مدت ۲۰ دقیقه و در همان محلول اولیه انجام می شود.

نتایج

شکل ۱ طیف پراش اشعه ایکس مربوط به سه نمونه از نانومیله های هماتیت سنتز شده را نشان می دهد. در هر سه نمونه مکان پیک اصلی هماتیت مربوط به دسته صفحات [110] در مکان ۳۵/۷° مشاهده می شود. پیک های دیگر موجود در طیف مربوط به زیرلایه هستند. آلایش هماتیت با تیتانیوم هیچگونه جابه-جایی در مکان پیک ایجاد نکرده است که این نشان از کم بودن غلظت آن دارد. از آنجایی که مکان پیک مربوط به الکتروکاتالیست FeOOH بسیار نزدیک به مکان پیک هماتیت است، تفکیک آن از هماتیت در این طیف میسر نیست. همچنین به دلیل ساختار غیر کریستالی لایه Fe_2TiO_5، پیک مربوط به این ماده در طیف پراش اشعه ایکس مشاهده نشده است.

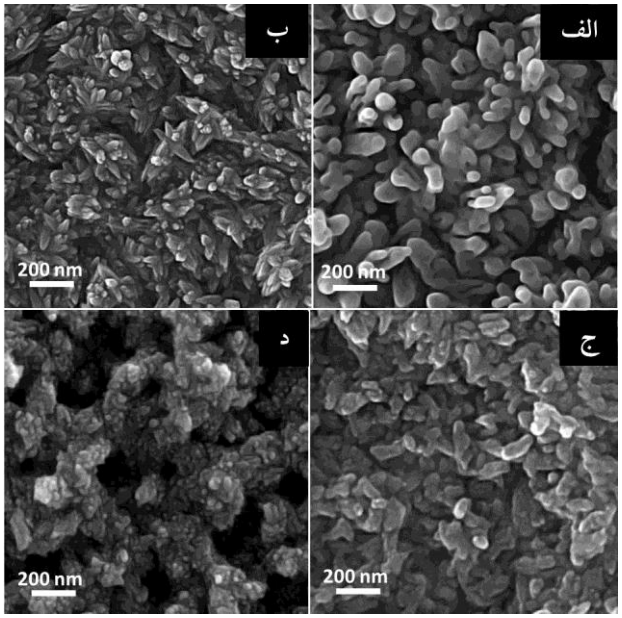


شکل ۱ : طیف پراش اشعه ایکس (XRD) مربوط به نمونه های سنتز شده

شکل ۲ تصاویر FE-SEM از نمونه های سنتز شده را نشان می دهد. در شکل الف که مربوط به نانوساختارهای هماتیت خالص است، مشاهده می شود نانومیله هایی با قطر متوسط nm

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

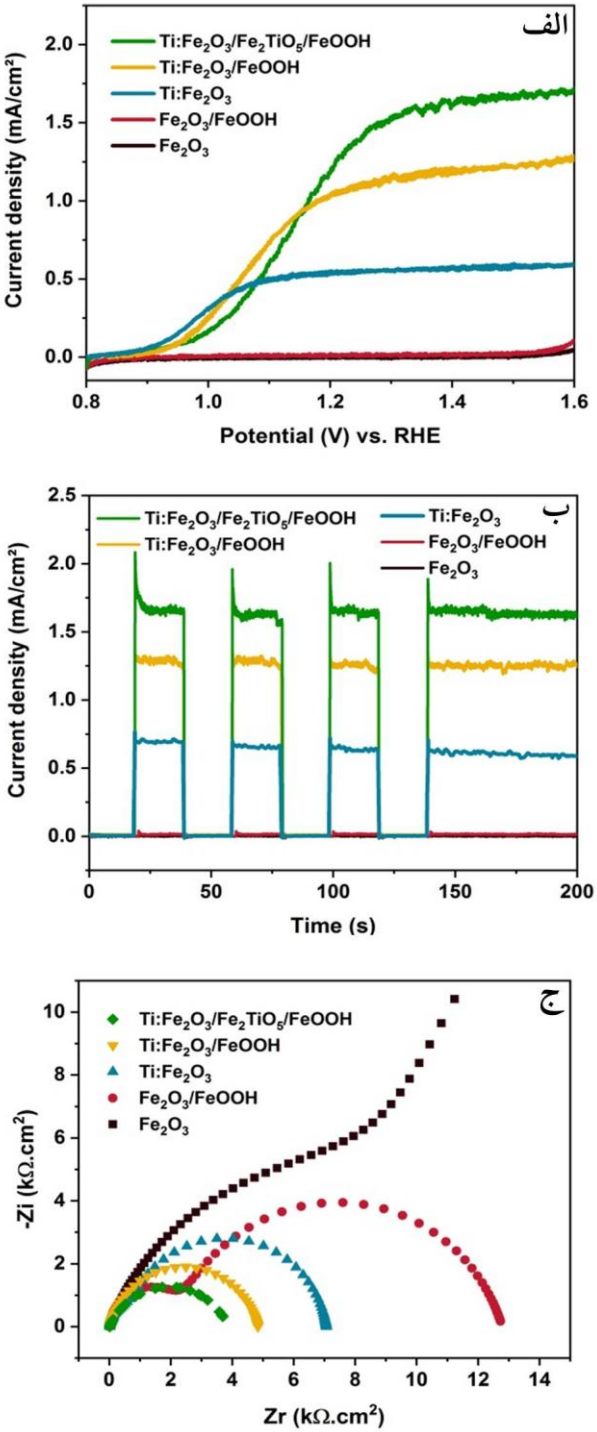
۵۰ به صورت یکنواخت روی سطح رشد کرده اند. شکل ب نانومیله های هماتیت همراه با الکتروکاتالیست FeOOH را نشان می دهد که مشاهده می شود قطر نانومیله ها کاهش یافته و لایه FeOOH به صورت نانوشاخه هایی بر روی سطح نانومیله های هماتیت رشد کرده اند. در شکل ج که مربوط به نانوساختارهای هماتیت آلاییده با Ti به همراه لایه FeOOH است، قطر نانومیله ها کاهش یافته و به هم فشرده شده اند. در شکل د که مربوط به نانوساختارهای هماتیت آلاییده با Ti به همراه لایه FeOOH و Fe_2TiO_5 است، لایه FeOOH که به صورت شاخک های نقطه ای روی سطح است، نسبت به تصویر ج وضوح بهتری دارند که این می تواند به دلیل وجود لایه میانی Fe_2TiO_5 باشد.



شکل۲ : تصاویر FE-SEM الف) Fe_2O_3 ب) Fe_2O_3/FeOOH ج) $Ti:Fe_2O_3$/FeOOH د) $Ti:Fe_2O_3/Fe_2TiO_5$/FeOOH

به منظور بررسی عملکرد فوتوالکتروشیمیایی فوتوآند سنتز شده در تجزیه فوتوالکتروشیمیایی آب از یک سلول سه الکترودی شامل Ag/AgCl به عنوان الکترود مرجع، پلاتین به عنوان الکترود مقابل، فوتوآند هماتیت به عنوان الکترود کار و محلول آبی ۱ مولار KOH به عنوان الکترولیت استفاده شده است.

شکل۳ اندازه گیریهای فوتوالکتروشیمیایی مربوط به نمونه-های سنتز شده را نشان می دهد. در شکل الف که نمودار چگالی جریان الکتریکی تحت روبش خطی پتانسیل (LSV) و در حالت تابش نور است، مشاهده می شود چگالی جریان الکتریکی در



شکل۳ : اندازه گیریهای فوتوالکتروشیمیایی برای فوتوآندهای سنتز شده. الف) نمودار چگالی جریان الکتریکی تحت روبش خطی پتانسیل (LSV) ب) نمودار چگالی جریان الکتریکی بر حسب زمان تحت تابش منقطع نور ج) منحنی نایکوئیست حاصل از اندازه گیری امپدانس الکتروشیمیایی (EIS).

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

نانوراده‌ای هماتیت خالص و همچنین هماتیت همراه با الکتروکاتالیست FeOOH بسیار ناچیز است که این رسانندگی الکتریکی ضعیف هماتیت را تایید می کند. به منظور افزایش رسانندگی الکتریکی، از آلایش Ti استفاده شده است که مشاهده می شود این آلایش اثر قابل توجهی در بهبود رسانندگی آن و در نتیجه افزایش چگالی جریان الکتریکی داشته است.

شکل۳ ب نمودار چگالی جریان الکتریکی بر حسب زمان را در حالت قطع و وصل پی در پی تابش نور و در ولتاژ ثابت ۱/۵ V نشان می دهد. مطابق با شکل۳ الف، چگالی جریان الکتریکی با افزودن ناخالصی Ti افزایش یافته است و برای نمونه $Ti:Fe_2O_3$ به مقدار mA/cm^2 ۰/۶۰ رسیده است. اضافه کردن الکتروکاتالیست FeOOH به این نمونه می تواند به انتقال بهتر حفره و درنتیجه افزایش سینتیک OER کمک کند و موجب افزایش چگالی جریان تا مقدار mA/cm^2 ۱/۲۳ شود. با توجه به ساختار نوار انرژی هماتیت و Fe_2TiO_5، قرار گرفتن لایه نازکی از آن بین نانوراده‌ای هماتیت و الکتروکاتالیست FeOOH، می تواند به هدایت مؤثر الکترونها به سمت هماتیت و زیرلایه FTO و همچنین هدایت حفره به سمت FeOOH و سپس الکترولیت کمک کند[۶]. این جدایش بهتر حامل های بار موجب کاهش بازترکیب آنها می شود به طوری چگالی جریان الکتریکی در این نمونه ۳۲٪ افزایش یافته و به مقدار mA/cm^2 ۱/۶۳ رسیده است

شکل۳ ج منحنی های نایکوئیست حاصل از اندازه گیری امپدانس الکتروشیمیایی (EIS) در ولتاژ ثابت ۱/۵ V و تحت تابش نور را نشان می دهد. در نمونه های آلاییده نشده، منحنی شامل دو نیم دایره با قطر کوچک و بزرگ است که قطر نیم دایره کوچکتر معیاری از مقاومت الکتریکی در بالک ماده، و قطر نیم دایره بزرگتر معیاری از مقاومت الکتریکی انتقال بار در سطح مشترک ماده با الکترولیت است[۵]. منحنی های نایکوئیست اثر آلایش Ti بر رسانندگی الکتریکی هماتیت را تایید کرده، به طوری که قطر نیم دایره کوچک با اضافه کردن Ti بسیار کاهش یافته و در شکل قابل تفکیک نیست. همچنین مشاهده می شود که با اضافه کردن الکتروکاتالیست FeOOH و لایه Fe_2TiO_5 قطر نیم دایره بزرگتر نیز کاهش یافته و بنابراین می توان گفت جدایش و انتقال حامل های بار بهبود یافته است.

نتیجه گیری

این پژوهش با هدف اصلاح عملکرد فوتوالکتروشیمیایی هماتیت در تجزیه آب انجام شده است که طی آن از آلایش Ti به منظور افزایش رسانندگی الکتریکی، و از الکتروکاتالیست FeOOH و لایه نازک Fe_2TiO_5 در جهت هدایت بهتر حامل های بار استفاده شده است. بالاترین چگالی جریان الکتریکی به دست آمده mA/cm^2 ۱/۶۳ مربوط به نانوراده‌ای هماتیت آلاییده با Ti همراه با FeOOH و Fe_2TiO_5 بوده است. همچنین در این نمونه مقاومت الکتریکی ماده به کمترین میزان خود رسیده است.

سپاسگزاری

از حمایت های مالی معاونت پژوهشی دانشگاه صنعتی شریف در گرنت با شماره G950212 و همچنین پژوهشگاه نیرو تشکر و قدردانی می شود.

مرجع‌ها

[۱] N. Chouhan, R. S. Liu and J. Zhang; "Photochemical water splitting: Materials and applications"; CRC Press. (2017)

[۲] P. Sharma, J. W. Jang and J. S. Lee; "Key Strategies to Advance the Photoelectrochemical Water Splitting Performance of α-Fe_2O_3 Photoanode"; *ChemCatChem* **11**, (2019) 157-179.

[۳] A. G. Tamirat et al; "Using hematite for photoelectrochemical water splitting: a review of current progress and challenges"; *Nanoscale Horiz.***1**, (2016) 243-267.

[۴] L. Xi and K. M. Lange; "Surface Modification of Hematite Photoanodes for Improvement of Photoelectrochemical Performance"; *Catalyst* **8**, (2018) 497.

[۵] T. Y. Yang et al; "An iron oxide photoanode with hierarchical nanostructure for efficient water oxidation"; *J. Mater. Chem. A* **2**, (2014) 2297-2305.

[۶] D. Monllor-Satoca et al; "What do you do, titanium? Insight into the role of titanium oxide as a water oxidation promoter in hematite-based photoanodes"; *Energy Environ. Sci.* **8**, (2015) 3242-3254.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بررسی پارامترهای بهینه افروزش ضربه ای با باریکه یون سنگین

پورحسینی، صدیقه ؛ قاسمی زاد، عباس

گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه گیلان

چکیده

افروزش ضربه ای ایده ای نوین برای همجوشی محصورشدگی لختی راه اندازی مستقیم می باشد که مراحل تراکم و تشکیل لکه داغ آن بصورت جداگانه صورت می گیرند. ابتدا هدف در سرعت پائین متراکم شده، سپس موجی همگرا درزمان ایستائی فرستاده می شود که به تشکیل لکه داغ کمک کرده و منجر به افروزش لکه داغ می گردد. این افروزش علاوه بر اینکه منجر به افروزش سوخت در انرژی لیزر کل پائین تر می شود، نیاز به پالس های لیزری پرشدت نیز ندارد. بدلیل نهشت انرژی موضعی تر یونها نسبت به پالس های لیزر و در پی آن افزایش آهنگ برهمکنش ذرات در محیط چگال، در این مقاله ما شرایط افروزش ضربه ای را با در نظر گرفتن راه انداز یون سنگین دنبال می کنیم. همچنین، با استفاده از کد شبیه سازی DEIRA-4 پارامترهای بهینه افروزش ضربه ای را تعیین می کنیم. نتایج شبیه سازی ما نشان می دهد که در هدف بهینه شده، نسبت به شرایط افروزش مرکزی مرسوم، بهره هدف حدود ۱۶/۵ ٪ افزایش و انرژی ورودی کل حدود ۱۰ ٪ کاهش می یابد.

واژه های کلیدی: *افروزش ضربه ای، راه انداز یون سنگین، بهره هدف.*

Investigation of Shock Ignition Optimum Parameters by Heavy Ion Beam

Pourhosseini, Seddigheh; Ghasemizad, Abbas

Department of Physics, Faculty of Science, University of Guilan

Abstract

Shock ignition is regarded as a new scheme to direct-drive inertial confinement fusion where the stages of compression and hot spot formation are partly separated. The target is first compressed at a low velocity, then converging shock is launched on the target at stagnation time, which contributes to hot spot formation and ignites hot spot. This ignition scheme not only can ignite the fuel at the low energy laser, but also doesn't require any ultra-intense laser pulses. Since the ions energy deposition is more local than that of laser pulses and consequently the particles reaction rate increase in dense medium, in this paper, we investigate the shock ignition performance by considering a heavy ion beam driver. Also, using DEIRA-4 simulation code, we have estimated the shock ignition optimum parameters. Our simulation results show that in optimized target, the target gain increases by about 16.5% and the total input energy decreases by about 10% compared with conventional central ignition.

***Keywords**: Shock Ignition, Heavy Ion Driver, Target Gain.*

PACS No. *28.52.Cx, 52.25.Os, 52.65.Kj*

مقدمه

ایده افروزش جرقه مرکزی یکی از روشهای همجوشی محصورشدگی لختی به روش راه اندازی مستقیم می باشد. همگام با تحقیقات جدید در زمینه همجوشی محصور شدگی لختی، توجه خاصی به طرحهای همجوشی لختی دیگر با آستانه انرژی افروزشی پائین تر، انفجار درونی پایدارتر با یک بهره انرژی بالاتر در انرژیهای راه انداز کمتر در مقایسه با افروزش جرقه ای مرکزی شده است [۱]. در طرحهای افروزشی پیشرفته، مراحل تراکم و

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد

http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

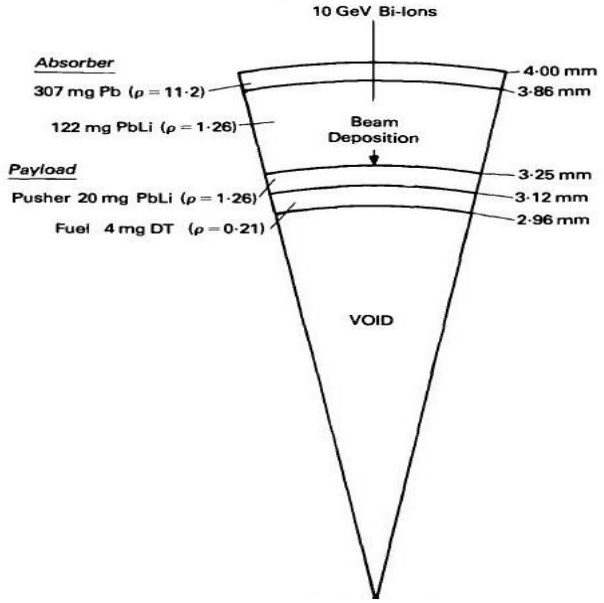
گرمایش لکه داغ، طی فرآیندهای جداگانه صورت می گیرد. ابتدا، انفجار درونی، سوخت را در سرعت پائین تر فشرده می کند، سپس لکه داغ توسط سازوکار جداگانه ای در سوخت پیش فشرده تولید می گردد. یکی از این روشها، سازوکار افروزش سریع می باشد که بر مبنای آن لکه داغ در سوخت پیش فشرده توسط یک باریکه چند پتاواتی و پرشدت ($I \sim 10^{20}$ W cm^{-2}) تولید می گردد [۲]. راهکار دیگر که اساس کار این مقاله به شمار می رود، روش افروزش ضربه ای است که در آن لکه داغ توسط موج ضربه همگرا در مرکز سوختی که دچار انفجار درونی شده، تولید می گردد. موج ضربه افروزشگر، توسط پالس لیزر پرشدت (با توان در گستره ۲۰۰ تا ۱۰۰۰تراوات و طول پالس چند صد پیکو ثانیه) راه اندازی می شود، که در انتهای پالس تراکم روانه می گردد [۳]. گفتنی است اگرچه هر دو سازوکار اشاره شده نسبت به طرح افروزش مرکزی مرسوم می توانند منجر به افروزش سوخت در انرژی لیزر کل پائین تر و تولید بهره بالاتر گردند، با این وجود، عدم نیازمندی به پالس های لیزری پرشدت ($I \sim 10^{16}$ W cm^{-2}) و طراحی ساده تر هدف از جمله مزایای روش افروزش ضربه ای نسبت به افروزش سریع به شمار می رود.

افروزش ضربه ای

ایده افروزش ضربه ای توسط بتی و همکارانش در سال ۲۰۰۷ پیشنهاد شد [٤]. مطابق با این ایده، مرحله تراکم توسط یک پالس لیزر وابسته به زمان راه اندازی می شود که منجر به انفجار درونی لایه در سرعت ۳۰۰ km/s – ۲۰۰ (کوچکتر از مقادیر نوعی که در افروزش مرکزی استاندارد استفاده می شود) می گردد. اگرچه این انفجار درونی می تواند سوختی چگال با یک لکه داغ مرکزی تولید کند، با این حال شرایط ایجاد شده برای دستیابی به افروزش کافی نیست. در انتهای انفجار درونی، هدف توسط یک پالس لیزر کوتاهتر و پرقدرت تر، با شدتی بیش از ۱۰ برابر بزرگتر از پالس تراکم، تحت تابش قرار می گیرد. جذب این پالس، طی تولید فشار کندگی (۳۰۰–۲۰۰Mbar) منجر به راه اندازی موج ضربه همگرای قوی می شود که این موج ضربه می تواند باعث افزایش فشار ٤–۳ برابری فشار مرکزی گردد. برخورد بین این ضربه با ضربه بازگشتی از مرکز سوختی که دچار انفجار درونی شده، گرمایش اضافی و تراکم لکه داغ مورد نیاز برای افروزش هدف را در پی خواهد داشت [٥]. شایان ذکر است که این مجموعه سوخت غیر تک فشار، دو پیامد مثبت به همراه دارد. اول اینکه منجر به آستانه انرژی افروزشی پائین تری نسبت به حالت تک فشار مرسوم می گردد. از طرفی، افروزش غیر تک فشار، دستیابی به بهره بالاتر (بزرگتر از ۱۰۰) در انرژی های متوسط لیزر (کوچکتر از MJ ۱) را امکانپذیر می سازد [٦]. در سالهای اخیر اغلب مطالعات انجام شده در حوزه افروزش ضربه ای، با استفاده از راه اندازهای لیزری انجام شده است. با این حال، از آنجائی که نهشت انرژی موضعی تر یونها نسبت به پالس های لیزر منجر به انتقال تکانه بیشتر به سوخت و در پی آن افزایش آهنگ برهمکنش ذرات در محیط چگال هدف می شود [۷]، در این مقاله شرایط افروزش ضربه ای را با در نظر گرفتن راه انداز یون سنگین دنبال خواهیم کرد.

طراحی هدف و ارزیابی های عددی

در این مقاله که از باریکه یونی سنگین بیسموت ۲۰۹ استفاده می شود، هدف شامل دولایه جاذب بیرونی (کوبه و جاذب)، که باریکه در آن متوقف می شود، و لایه های درونی (هل دهنده و سوخت DT برودتی)، که سوختن گرماهسته ای پس از فرآیندهای تراکم و افروزش در آن صورت می گیرد، می باشد. در شکل ۱ نمائی از این هدف نشان داده شده است.



شکل ۱: نمائی از هدف در نظر گرفته شده برای همجوشی یون سنگین در افروزش ضربه ای [۸].

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

لایه بیرونی، باریکه یون سنگین را جذب و انرژی اش را به انرژی جنبشی هل دهنده که به سمت مرکز هدف در حرکت است، تبدیل می کند. حفره کروی با گاز DT پر شده است [۹،۸]. در این مقاله از کد شبیه سازی یک بعدی DEIRA-4 برای بررسی افروزش ضربه ای استفاده کرده ایم. این کد، قابلیت شبیه سازی هدف های صفحه ای، استوانه ای و کروی را دارد که با باریکه یونی بصورت متقارن مورد تابش قرار می گیرد [۱۰]. هدف اصلی ما در این مقاله، نشان دادن برتری شرایط افروزش ضربه ای نسبت به افروزش مرکزی مرسوم است. از این نقطه نظر، با استفاده از طراحی هدف مذکور در شکل ۱ و فرض کروی بودن هندسه سوخت، در ابتدا به محاسبه بیشینه بهره انرژی افروزش مرکزی پرداختیم. افروزش مرکزی و انتشار سوخت از مهمترین جنبه های طراحی هدف با بهره بالا تلقی می گردد. مشکل اینجاست که درونی ترین بخش سوخت باید به آنتروپی بالاتر از مابقی سوخت برسد که این امر می تواند توسط حداقل دو موج ضربه صورت پذیرد. یک راه ساده برای تولید آنها استفاده از پالس توان دو مرحله ای می باشد. ضربه اول توسط پیش پالس توان پائین و دومی توسط پالس اصلی توان بالا ایجاد می شود. بهینه پارامترهای افروزش مرکزی از قبیل انرژی ورودی کل(E_{in})، دمای الکترونی و یونی(T_e,T_i)، پارامترمحصور شدگی(ρR)، بازدهی هیدرودینامیکی، نسبت انرژی جنبشی کل به انرژی ورودی، (η)، کسر مصرف سوخت(f_b) و بهره انرژی هدف، نسبت انرژی آزاد شده در همجوشی به انرژی دریافتی از راه انداز، (G) را با استفاده از کد شبیه سازی و باریکه یونی محاسبه و نتایج را در جدول ۱ ارائه نمودیم. اینجا بیشینه بهره انرژی به ازای یک پیش پالس ٦ TW (۱۵ ns) و پالس اصلی ٦۰۰ TW (۱۰ ns) بدست آمده است.

جدول ۱: پارامترهای بهینه هدف در افروزش مرکزی

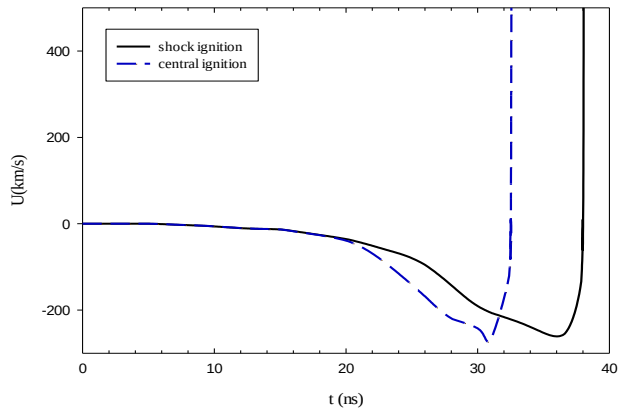
E_{in}(MJ)	٦/۱	ρR_{DT}(g/cm^2)	۱/٤٦٥
η	۰/۰۷	ρR_{pusher}(g/cm^2)	۰/۹٥٤۷
T_e(keV)	٦٥/۲	T_i(keV)	۲۸۸
f_b	۰/۷۲	G	۱۰۳

حال از این هدف برای افروزش ضربه ای استفاده می کنیم. در این ایده، فرآیندهای تراکم و افروزش طی مراحل جداگانه ای صورت می گیرد که در هر مرحله باید پارامترهای مناسب باریکه (توان و زمان) تعیین شوند. در این مقاله برآنیم که شرایط افروزش ضربه ای بهینه را برای هدف فوق با تعیین بیشینه بهره انرژی بررسی نمائیم. محاسبات ما نشان می دهد که به منظور برخورداری از شرایط بهینه، برای پیش گرمایش سوخت استفاده از پالس اولیه با توان ٥ TW و و طول پالس ۱٥ nsو برای فشرده نمودن هدف، پالس دوم با توان ۳٥۰ TW و طول پالس ۹ ns مورد نیاز می باشد تابتواند هدف را با سرعت انفجار درونی کمتر بواسطه مصرف انرژی کمتر، فشرده کند. سرانجام پالسی با توان ۱۰٤۰ TW و طول پالس ۲/٥ ns باعث افروزش هدف می گردد. لازم به ذکر است که تعداد زیادی شبیه سازی برای هدف افروزش ضربه ای مذکور، به منظور دستیابی به شرایط بهینه انجام شده و مقادیر تخمین زده شده فوق بیشینه بهره انرژی و مصرف کمتر انرژی را نتیجه داده اند. درجدول ۲ بهینه پارامترهای افروزش ضربه ای ارائه شده است.

جدول ۲: پارامترهای بهینه هدف در افروزش ضربه ای

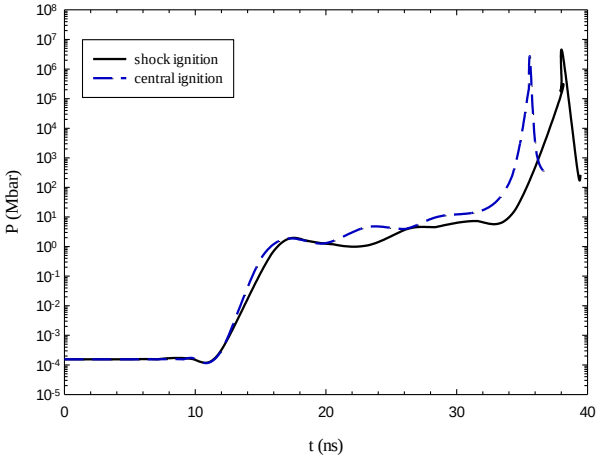
E_{in}(MJ)	٥/٥	ρR_{DT}(g/cm^2)	۱/٥۸۸
η	۰/۰۸	ρR_{pusher}(g/cm^2)	۱/۰۱۱
T_e(keV)	٦۸/٤	T_i(keV)	۳۲۱
f_b	۰/۷۳	G	۱۲۰

به منظور بررسی علت افزایش کمیت بهره در رهیافت ضربه ای نسبت به مرکزی در ادامه به بررسی پارامترهای هیدرودینامیکی هدف به هنگام تحول افروزش میپردازیم. با استفاده از نتایج شبیه سازی، مقایسه ای از نمودارهای تحول زمانی سرعت انفجار درونی و فشار لایه سوختی در افروزشهای ضربه ای و مرکزی انجام شده که در شکل ۲ و ۳ بترتیب نشان داده شده است.



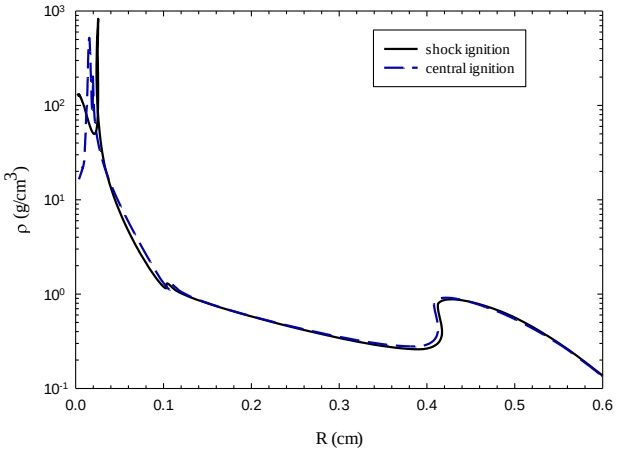
شکل ۲: تحول زمانی سرعت انفجار درونی در افروزش ضربه ای و مرکزی.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



شکل ۳: تحول زمانی فشار در افروزش ضربه ای و مرکزی.

همانگونه که از شکل های ۲ و ۳ مشاهده می کنیم در زمانهای کمتر از ns ۱۵(محدوده زمانی پیش پالس) منحنی های فشار و سرعت انفجار درونی در هر دو افروزش بر یکدیگر منطبق بوده و در زمانهای بعد، سرعت انفجار درونی افروزش ضربه ای کمتر از افروزش مرکزی می باشد که این امر بیانگر کاهش هرچه بیشتر ناپایداری و به دنبال آن بهبود عملکرد هدف در افروزش مذکور می باشد. از طرفی در انتهای انفجار درونی (بعد از ns ۳۲)، بیشینه فشار در حالت افروزش ضربه ای حدودا ۱/٤برابر بیشینه فشار در افروزش مرکزی می باشد. در شکل ٤ نمودار تغییرات چگالی بر حسب شعاع در زمان بیشینه فشار (زمان مناسب تشکیل لکه داغ و افروزش) برای افروزشهای مذکور رسم و مقایسه شده است.



شکل ٤: نمودار چگالی در زمان افروزش در افروزش ضربه ای و مرکزی.

همانگونه که مشاهده می کنیم بیشینه چگالی که در افروزش ضربه ای به آن می رسیم تقریبا ۱/۳ برابر بیشینه چگالی در افروزش مرکزی می باشد. با توجه به اینکه تراکم بالا از شرایط وقوع فرآیند همجوشی می باشد، نمودار فوق بیانگر مزیت افروزش ضربه ای خواهد بود.

نتیجه گیری

در این مقاله افروزش ضربه ای بعنوان یکی از ایده های نوین در راه اندازهای با انرژی پائین مورد بررسی و شبیه سازی عددی قرار گرفته است. از اینرو با استفاده از کد شبیه سازی DEIRA-4 و با در نظر گرفتن چینش مناسب هدف در هندسه کروی به تخمین عددی برخی پارامترهای فیزیکی این نوع افروزش پرداخته شد. نتایج بررسی های ما نشان داد از آنجائیکه در انتهای انفجار درونی تابش افروزشگر منجر به تراکم بیشتر هدف می گردد، از اینرو، سرعت انفجار درونی افروزش ضربه ای کمتر از افروزش مرکزی خواهد شد. در پی این رخداد تراکم و فشار افروزش ضربه ای نسبت به افروزش مرکزی مقادیر بیشتری را به خود اختصاص می دهد. مطابق با محاسبات ما، فشار و تراکم بیشینه در افروزش ضربه ای، به ترتیب حدود ٤۳ و ۳۲ درصد بالاتر از مقادیر بیشینه متناظر در افروزش مرکزی خواهد شد. بطور کل نتایج بدست آمده نشاندهنده این است که افروزش ضربه ای منجر به افزایش بهره هدف و در نتیجه بهبود شرایط افروزش و اشتعال می شود.

مرجع‌ها

[۱] M. Tabak et al; “Alternative ignition schemes in inertial confinement fusion”; *Nucl. Fusion* **54**, 054001 (2014).
[۲] M. Tabak et al; “Ignition and high gain with ultrapowerful lasers”; *Phys. Plasmas* **1**, 1625 (1994).
[۳] S. Atzeni et al; “Shock ignition of thermonuclear fuel: principles and modelling”; *Nucl. Fusion* **54**, 054008 (2014).
[٤] R. Betti et al; “Shock ignition of thermonuclear fuel with high areal density”; *Physical Review Letter* **98**, 155001 (2007).
[٥] S. Atzeni et al; “Shock ignition: a brief overview and progress in the design of robust targets”; *Plasma Physics. Control Fusion* **57**, 014022 (2015).
[٦] A. J. Schmitt et al; “Shock ignition target design for inertial fusion energy”; *Physics of Plasmas* **17**, 042701 (2010).
[۷] M. Roth; “Review on the current status and prospects of fast ignition in fusion targets driven by intense, laser generated proton beams”; *Plasma Physics. Control Fusion* **51**, 014004 (2009).
[۸] M. M. .Basko; “Simple spherical D-T targets for heavy-ion beam fusion”; *Laser and Particle Beams* **11**, (1993).
[۹] N. Metzler and J. Meyer-Ter-Vehn; “Target study for heavy ion beam fusion”; *Laser and Particle Beams* **2**, 27 (1984).
[۱۰] M. M. Basko; “High gain DT targets for heavy ion beam fusion”; *Nucl. Fusion* **32**, 1515 (1992).

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مطالعه مدهای واپاشی در ایزوتوپ های فوق سنگین با استفاده از مدل هارتری-فاک-بوگولیوبوف

سیدی ، سید امین

دانشگاه پیام نور، دانشکده علوم، گروه فیزیک، تهران، ایران

چکیده

در این تحقیق با استفاده از مدل میکروسکوپیک هارتری-فاک-بوگولیوبوف تلاش شده است تا رقابت بین مدهای واپاشی آلفازا و شکافت خود به خودی ایزوتوپ های Z=120 مورد بررسی قرار بگیرد. با استفاده از این مدل، انرژی های بستگی هسته های دختر حاصل از واپاشی و هسته مادر مورد محاسبه قرار گرفته است. مقادیر انرژی واپاشی با استفاده از این انرژی های بستگی در محاسبه نیمه عمر های واپاشی بکارگیری شده است. نیمه عمرهای آلفازا و شکافت خودبخودی با استفاده از روابط نیمه تجربی محاسبه شده اند. نتایج این محاسبات نشان می‌دهد که ایزوتوپ های ۱۲۰[۲۹۰،۲۹۲،۲۹۴] دارای شش زنجیره آلفازا هستند که طی فرایند شکافت خودبخودی این زنجیره متوقف می شود. همچنین نشان داده شده است که ایزوتوپ های ۱۲۰[۲۹۶] دارای ۵ زنجیره آلفازا ، ایزوتوپ ۱۲۰[۲۹۸] دارای ۴ زنجیره آلفازا، ایزوتوپ ۱۲۰[۳۰۰] دارای ۳ زنجیره آلفازا و ایزوتوپ های ۱۲۰[۳۰۲،۳۰۴] دارای ۲ زنجیره آلفا زا می باشند. با توجه به اینکه این ایزوتوپ ها هنوز در آزمایشگاه سنتز نشده اند امیدواریم نتایج حاضر در تحقیقات تجربی مفید واقع شود.

واژه های کلیدی: ***واپاشی آلفازا، شکافت خودبخودی، مدل هارتری- فاک- بوگولیوبوف.***

Study of Different Decay Modes in Superheavy Nuclei Using the Hartree-Fock-Bogoliubov model

Seyyedi, Seyyed Amin

Sciences Faculty, Physics group, Payame Noor University, P. O. Box 19395-4697, Tehran, Iran

Abstract

In this study, using the Hartree-Fock-Bogoliubov model, an attempt has been made to examine the competition between alpha decay and spontaneous fission of Z = 120 isotopes. Using this model, the binding energies of the daughter nuclei and the parent nucleus are calculated. Alpha decay half-lives and spontaneous fission have been calculated using semi-experimental relationships. The results of these calculations show that the ^{290,292,294}120 isotopes have six alpha-decay chain that terminate by the spontaneous fission process. It has also been shown that ^{296}120 isotopes have 5 alpha-decay chain, ^{298}120 isotopes have 4 alpha-decay chain, ^{300}120 isotopes have 3 alpha-decay chain and ^{302,304}120 isotopes have 2 alpha-decay chain. Given that these isotopes have not yet been synthesized in the laboratory, we hope that these results will be helpful for experimentalist.

***Keywords**: Alpha decay, Spontaneous fission, Hartree-Fock-Bogoliubov model.*

PACS No.: 21.10.Dr , 21.10.Tg, 21.60.Jz

مقدمه

در سال های اخیر علاقه فزاینده‌ای برای مطالعه عناصر فوق سنگین ناشناخته و زنجیره واپاشی های آنها ایجاد شده است [1-5]. توسعه جدول هسته های پایدار در قسمت هسته های فوق سنگین و شناخت عمیق تر ساختارهای هسته ای از جمله اهداف این تحقیقات بوده است. تاکنون هسته های فوق سنگین در ناحیه Z<119 به صورت آزمایشگاهی سنتز شده اند و تلاش های مختلفی برای سنتز هسته های نوترکیب جدید در این ناحیه در جریان است. واپاشی آلفازا و شکافت خود به خودی دو مد واپاشی غالب در بین هسته های فوق سنگین هستند. رقابت بین

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد

http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

این دو مد واپاشی، اطلاعات مهمی از پایداری این هسته‌ها و همچنین عددهای جادویی به دست می دهد. معمولا این هسته ها ماحصل واپاشی از دیگر عناصر نیستند و شناسایی ویژگی های مختلف ساختاری و دینامیکی آنها همچنان در جریان است. تحقیقات نظری در پیش‌بینی ایزوتوپ های جدید پایدار و محاسبه نیمه عمر های مرتبط با آنها برای انتخاب ابزارهای مناسب آزمایشگاهی و انتخاب مد مناسب واکنش بسیار ضروری است. از اینرو تحقیقات نظری جامعی در این زمینه صورت گرفته است[6-8]. با این وجود ابهاماتی در این حوزه وجود دارد. چرا که زنجیره واپاشی آلفازای هسته های فوق سنگین قبل از اینکه به نواحی پایدار جدول هسته‌ای برسند با فرآیند شکافت خود به خودی متوقف می شوند. همچنین انرژی واپاشی به عوامل ساختاری گوناگونی مثل پارامتر تغییر شکل ذاتی و نیروهای موثر نوکلئون-نوکلئون وابسته است. از سوی دیگر نتایج مطالعات نظری برای زمان نیمه عمرهای واپاشی به مدل انتخاب شده بستگی دارد. اخیراً مدل هارتری-فاک با تصحیح تقریب بوگولیوبوف در محاسبه انرژی بستگی و نیمه عمرهای واپاشی هسته های مختلف مورد توجه مضاعف قرار گرفته است [9,10]. بنابراین در این تحقیق با استفاده از این مدل تلاش شده است تا زنجیره واپاشی های آلفازای ایزوتوپ های Z=120 مورد بررسی قرار گیرد. امیدواریم نتایج این تحقیق در جستجوی تجربی این هسته های فوق سنگین مفید فایده باشد.

چارچوب مبانی نظری تحقیق

نظریه ساختارهای هسته ای در یک چارچوب میکروسکوپیک جامع می تواند خواص هسته ای پایه، برانگیختگی های هسته ای و واکنش های هسته ای را توصیف کند. یک چارچوب مناسب برای توصیف این سیستم های چند جسمی نظریه هارتری-فاک است. این نظریه استفاده از تقریب میدان میانگین را مجاز می کند. این روش یک چهارچوب خود نگهدار دارد که تقریب های هارتری فوک معمول را تعمیم می دهد. در این روش، هامیلتونی دو جسمی یک سیستم چند فرمیونی بر حسب مجموعه ای از اپراتورهای تولید و نابودی $C,C^{\dagger}$ نوشته می شود:

$$H=\sum_{n_1,n_2} e_{n_1n_2}C^{\dagger}_{n_1}C_{n_2} + \frac{1}{4}\sum_{n_1n_2n_3n_4}\bar{v}_{n_1n_2n_3n_4}C^{\dagger}_{n_1}C^{\dagger}_{n_1}C_{n_4}C_{n_3} \quad (1)$$

در این رابطه $\bar{v}_{n_1n_2n_3n_4}=\langle n_1n_2|V|n_3n_4-n_4n_3\rangle$ عناصر ماتریسی اندرکنش دو جسمی پادمتقارن شده می باشند. اپراتور $\alpha_k,\alpha^{\dagger}_k$ اپراتور تولید و نابودی شبه ذره هستند که با تبدیل بوگولیوبوف به اپراتور های متناظر ذره واقعی مرتبط می شوند:

$$\alpha_k=\sum_n (U^*_{nk}C_n+V^*_{nk}C^{\dagger}_n) \quad (2)$$

$$\alpha^{\dagger}_k=\sum_n \left(\mathrm{V}_{nk}C_n+\mathrm{U}_{nk}C^{\dagger}_n\right) \quad (3)$$

مقدار چشمداشتی هامیلتونین رابطه ۱ به صورت تابع انرژی زیر نمایش داده شده است:

$$E[\rho,k]=\frac{\langle\varphi|H|\varphi\rangle}{\langle\varphi|\varphi\rangle}=Tr\left[(\rho+\frac{1}{2}\Gamma)\rho\right]-\frac{1}{2}Tr[\Delta k^*] \quad (4)$$

$$\Gamma_{n_1n_3}=\sum_{n_2n_4}\bar{v}_{n_1n_2n_3n_4}\rho_{n_4n_2} \quad (5)$$

$$\Delta_{n_1n_2}=\frac{1}{2}\sum_{n_3n_4}\bar{v}_{n_1n_2n_3n_4}\kappa_{n_3n_4} \quad (6)$$

با استفاده از روش وردشی و مینیمم کردن انرژی فوق می توان به ویژه مقادیر انرژی دست پیدا کرد. در محاسبات حاضر، از کد فرترن HFBTHO v2.00d [10] استفاده شده است. برای انجام محاسبات، از تابع حالت پایه تک ذره به صورت تابع نوسانگر هارمونیک تبدیل یافته استفاده شده است. هامیلتونین هارتری-فاک بر اساس چگالی های انرژی اسکریم تعمیم یافته نوشته شده است. از بین توابع مختلف اسکریم موجود با توجه به اینکه تابع SKP از موفقیت هایی در توصیف خواص حالت پایه هسته های فوق سنگین برخوردار بوده است به عنوان تابع نیروی موثر استفاده شده است. در این کار برای حالت پایه نوسانگر هارمونیک تعداد پوسته های نوسانگر برابر ۲۰ انتخاب شده است. دمای هسته ها در این محاسبات لحاظ نشده است. با توجه به

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

اینکه تلاش ها در نواحی Z=120 جدول هسته ای برای درک ساختارهای هسته ای و جستجوی ایزوتوپ های پایدار در جریان است این ایزوتوپ ها با 290<A<304 انتخاب شده است. برای این هسته های تحت بررسی تغییر شکل ذاتی چارقطبی اعمال شده است. در این تحقیق برای محاسبه نیمه عمر از رابطه نیمه تجربی زیر استفاده شده است:

$$log_{10}(T_{\frac{1}{2}}) = (aZ + b)Q + cZ + D + h_{log}(7)$$

در رابطه فوق Z برابر عدد اتمی هسته مادر و مقادیر ثابت های a، c،b و d به ترتیب عبارتند از: 1.66175, 8.5166,−0.20228 33.9069. کمیت hlog برای هسته های زوج-زوج در نظر گرفته شده در این تحقیق برابر صفر در نظر گرفته شده است. این رابطه به رابطه VSS مشهور است. همچنین در این تحقیق از روابط UDL، SLB،mB1،semFIS2 نیز استفاده شده است. از آنجایی که این روابط بر اساس نتایج داده های تجربی استخراج شدند مقایسه نتایج نظری بدست آمده با این روابط می تواند در تخمین میزان دقت محاسبات حاضر مفید باشد. جزئیات بیشتر در مرجع [11] آمده است. برای محاسبه نیمه عمر شکافت خودبخودی از روابط پیشنهادی مرجع [12] استفاده شده است.

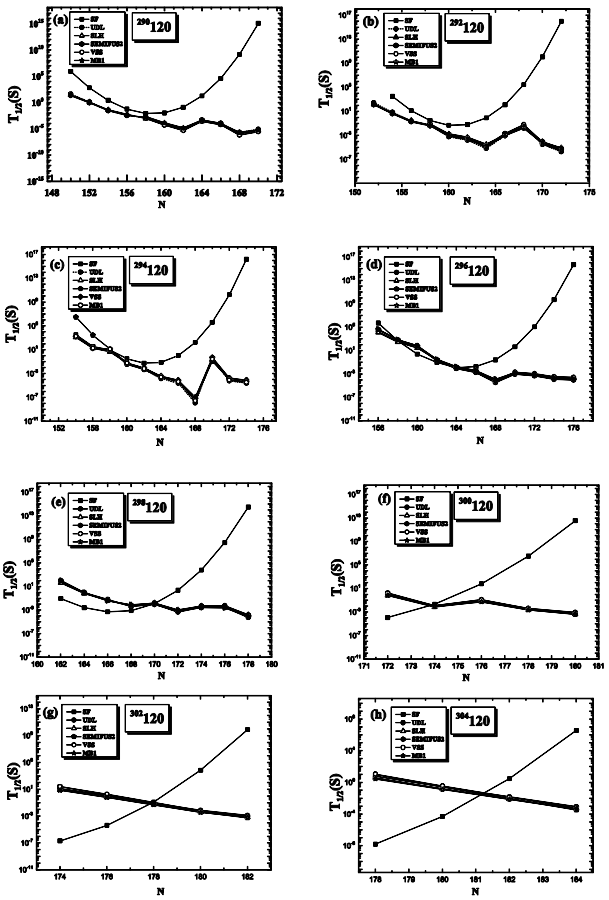
نتایج و بحث

نیمه عمرهای محاسبه شده با استفاده از روش هارتری- فاک با تصحیح بوگولیوبوف برای ۹ ایزوتوپ Z=120 بین A=290 الی A=304 در شکل های ۱(a)-(h) نشان داده شده اند. در این شکل ها زنجیره واپاشی آلفازای این ایزوتوپ ها در کنار نیمه عمر شکافت خودبخودی آنها نشان داده شده است. مربع های پر نشاندهنده نیمه عمرهای شکافت خودبخودی است. نیمه عمرهای آلفازا با استفاده از مدل های نیمه تجربی مورد محاسبه قرار گرفته است. شکل ۱-a نشان می دهد که برای عنصر^{۲۹۰}۱۲۰ دختر هسته های ^{۲۸۸}۱۱۸و^{۲۸۶}۱۱۶و^{۲۸۴}۱۱۴و^{۲۸۲}۱۱۲و^{۲۸۰}۱۱۰و^{۲۷۸}۱۰۸ نیمه عمر آلفازای کوچکتر از نیمه عمر واپاشی شکافت خودبخودی متناظر را دارند و می توانند از فرایند شکافت خودبخودی فرار کنند. اما عنصر ^{۲۷۴}۱۰۶ نیمه عمر آلفازای آن بسیار نزدیک به نیمه عمر شکافت خودبخودی است. هر پنج مدل بکار رفته در محاسبه نیمه عمر آلفا روند مشابهی را نشان می دهند. اما عنصر های ^{۲۸۲}۱۱۶و^{۲۷۸}۱۱۴ در این روند نسبت به هسته های مجاورشان از پایداری بیشتری برخوردار هستند. عدد نوترونی متناظر با این ایزوتوپ ها برابر ۱۶۶و۱۶۴ است. این نمودار زنجیره ۶α را برای این عنصر نشان می دهد. شکل ۱-b نیز مانند شکل قبل نشاندهنده زنجیره آلفازای محاسبه شده ^{292}120 با استفاده از مقادیر انرژی واپاشی آلفا بدست آمده از روش توصیف شده است که نمودار نیمه عمرهای شکافت خودبخودی برای این ایزوتوپ ها به نمایش در آمده است. در این نمودار زنجیره ۶α را برای ^{292}120 نشان می دهد. در مورد هسته ^{۲۶۴}۱۰۸ نیمه عمر واپاشی آلفازا با مقدار متناظر نیمه عمرهای شکافت خودبخودی بسیار به یکدیگر نزدیک هستند. ایزوتوپ های ^{۲۸۰}۱۱۶و^{۲۸۴}۱۱۸ با عددهای نوترونی ۱۶۶و۱۶۴ نیمه عمرهای آلفای بزرگتر از هسته های مجاورشان را نشان می دهند. هسته مادر ^{۲۹۴}۱۲۰ به همراه زنجیره واپاشی آن در شکل ۱-c نشان داده شده است. روند پیش بینی شده برای نیمه عمرهای آلفازا برای همه مدل های بکارگیری شده مشابه است. برای این ایزوتوپ نیز زنجیره ۶α پیش بینی می شود. در مورد ایزوتوپ های ^{۲۷۰}۱۰۸و^{۲۶۶}۱۰۶ رقابت بین دو مد مورد بررسی بسیار نزدیک است. ایزوتوپ های ^{۲۸۶}۱۱۶و^{۲۸۴}۱۱۴ از نیمه عمرهای بالاتری نسبت به هسته های مجاورشان برخوردار هستند. عدد نوترونی این دو ایزوتوپ۱۷۰ است. هسته مادر ^{۲۹۶}۱۲۰ و زنجیره واپاشی آن در شکل ۱-d نشان داده شده است. زنجیره ۵α برای این هسته پیش بینی می شود. در مورد هسته ^{۲۷۶}۱۱۰و^{۲۷۲}۱۰۸ نیمه عمرهای الفا و شکافت خودبخودی بسیار به یکدیگر نزدیک هستند. ایزوتوپ ^{۲۷۴}۱۱۴ با عدد نوترونی ۱۷۰ نسبت به هسته های مجاورش از پایداری بیشتری برخوردار است. نیمه عمرهای ایزوتوپ ^{۲۹۸}۱۲۰ در شکل ۱-e نشان داده شده است. برای این هسته مادر نیز زنجیره ۴α پیش بینی شده است. اما هسته ^{۲۸۲}۱۱۲ در زنجیره واپاشی نیمه عمر بسیار نزدیک به مد شکافت خودبخودی را نشان می دهد. ^{۲۹۰}۱۱۶و^{۲۹۴}۱۱۸ با اعداد نوترونی ۱۷۴و۱۷۶ از پایداری بیشتری نسبت به همسایگانش در زنجیره واپاشی برخوردار است. شکل ۱-f زنجیره واپاشی عنصر ^{۳۰۰}۱۲۰

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

را در مقایسه با نیمه عمرهای شکافت خودبخودی نشان میدهد. برای این هسته مادر نیز زنجیره ۳α پیش بینی شده است. در بین زنجیره واپاشی این عنصر ایزوتوپ $^{۲۸۸}۱۱۴$ دارای نیمه عمرهای بسیار نزدیک به شکافت خودبخودی است. در مورد ایزوتوپ $^{۲۹۲}۱۱۶$ با عدد نوترونی ۱۷۶بروی نمودار نیمه عمرهای آلفازا یک ماکزیممی دیده می شود. شکل ۱-h وg همانند نمودار فوق برای عنصرها$^{۳۰۲}۱۲۰$و$^{۳۰۴}۱۲۰$ بترتیب ترسیم شده است. برای این دو هسته زنجیره ۲α پیش بینی شده است.

در تحقیق حاضر، با مطالعه رفتار زنجیره واپاشی هسته های Z=120 و مقایسه آنها با نیمه عمرهای شکافت خودبخودی پیش بینی شده است که هسته های $^{۲۷۸}۱۱۴$و$^{۲۸۴}۱۱۴$و$^{۲۷۴}۱۱۴$ و $^{۲۸۲}۱۱۶$و$^{۲۸۰}۱۱۶$و$^{۲۹۰}۱۱۶$و$^{۲۹۲}۱۱۶$ و$^{۲۸۴}۱۱۸$و$^{۲۹۴}۱۱۸$و$^{۲۹۲}۱۲۰$ از پایداری بیشتری نسبت به ایزوتوپ های مجاورشان برخوردارند. عدد نوترونی متناظر این ایزوتوپ ها ۱۶۴و۱۶۶و۱۷۰و۱۷۴و۱۸۲ می باشد. این اعداد نوترونی و پروتونی متناظر، رفتار مجیک گونه از خود نشان می دهند که در توافق با اعداد پیش بینی شده در سایر تحقیقات می باشد.



شکل شماره۱. مقایسه بین نیمه عمرهای واپاشی آلفازا با فرایند شکافت خودبخودی در ایزوتوپ های Z=120.

نتیجه گیری

در این تحقیق با استفاده از مدل میکروسکوپیک هارتری- فاک- بوگولیوبوف و فرمول های نیمه تجربی محاسبه نیمه عمر واپاشی آلفازا و شکافت خودبخودبخودی به بررسی ایزوتوپ های فوق سنگین با عدد اتمی ۱۲۰ پرداخته ایم. در این تحقیق رقابت بین مدهای واپاشی آلفازا و شکافت خودبخودی مورد بررسی قرار گرفت. . نتایج این محاسبات نشان می‌دهد که ایزوتوپ های$^{۲۹۰،۲۹۲،۲۹۴}۱۲۰$ دارای شش زنجیره آلفازا هستند که طی فرایند شکافت خودبخودی این زنجیره متوقف می شود. همچنین نشان شده است که ایزوتوپ های $^{۲۹۶}۱۲۰$ دارای ۵ زنجیره آلفازا ، ایزوتوپ $^{۲۹۸}۱۲۰$ دارای ۴ زنجیره آلفازا، ایزوتوپ $^{۳۰۰}۱۲۰$ دارای ۳ زنجیره آلفازا و ایزوتوپ های $^{۳۰۲،۳۰۴}۱۲۰$ دارای ۲ زنجیره آلفا زا می باشند. همچنین پیش بینی شده است که ایزوتوپ های $^{۲۷۸،۲۸۴،۲۷۴}۱۱۴$، $^{۲۸۲،۲۸۰،۲۹۰،۲۹۲}۱۱۶$، $^{۲۸۴،۲۹۴}۱۱۸$ و $^{۲۹۲}۱۲۰$ پایدارتر از ایزوتوپ های مجاورشان هستند. عدد نوترونی و پروتونی این ایزوتوپ ها خواص جادویی یا شبه جادویی از خودشان نشان می دهند. در این طیف مورد بررسی ایزوتوپ های پیش بینی شده دارای نیمه عمربه قدر کافی طولانی هستند تا بتوان آنها را در آزمایشگاه مورد سنتز قرار داد.

مرجع ها

[1] Y. T. Oganessian et al., *Phys. Rev. C* **62** (2000) 041604.
[2] Y. T. Oganessian, *Radiochim. Acta* **99**, (2011) 429.
[3] N. Ashok, A. Joseph, *Nucl. Phys. A* **977**, (2018) 101.
[5] X. J. Bao, *J. Phys. G: Nucl. Part. Phys* **42**, (2015) 085101.
[6] Y. El. Bassem, M. Oulne, *Nucl. Phys. A* **957**, (2017) 22.
[7] O. N. Ghodsi, M. Hassanzad, *Nucl. Phys. A* **987**, (2019) 369–381.
[8] S. S. Hosseini, H. Hassanabadi, S. Zarrinkamar, *Nucl. Phys. A* **970**, (2018) 259.
[9] M.V. Stoitsov, J. Dobaczewski, W. Nazarewicz, P. Ring, *Comp. Phys. Commun*, **167** (2005) 43.
[10] M. V. Stoitsov *et al*., *Comp. Phys. Commun*, **184** (2013) 1592.
[11] V. E . Viola, G.T. Seaborg, J. Inorg. *Nucl. Chem* **28** (1966) 697.
[12] C. Qi, F. R. Xu, R. J. Liotta, R. Wyss, *Phys. Rev. Lett*. **103** (2009) 072501.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

شبیه سازی و بهینه سازی OLED تک رنگ قرمز

عباسی، فاطمه[۱]؛ قرشی، سید محمدباقر[۱*]؛ کریم زاده، المیرا[۲]

[۱] دانشکده لیزر و فوتونیک دانشکده فیزیک دانشگاه کاشان، کاشان

[۲] گروه مهندسی مواد، دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان

چکیده

در این تحقیق، تأثیر ضخامت لایه انتقال دهنده الکترون و گسیلنده نور (Alq_3)، لایه انتقال دهنده حفر (NPB)، لایه تزریق کننده حفره (MoO_3) و لایه آند (ITO) بر روی بازدهی نور خروجی دیود نورگسیل آلی (OLED) با استفاده از روش تفاضل محدود حوزه زمان (FDTD) شبیه سازی شد تا ضخامت بهینه برای تبدیل OLED به یک OLED قرمز-تک رنگ تعیین شود. پس از بهینه سازی، قله انتشار در ۵۳۰ نانومتر با نیم پهنای طیفی (FWHM)، ۱۵۰ نانومتر ظاهر شد. پس از آن تاثیر حضور نانو ذرات نقره در اندازه‌ها و موقعیت‌های مختلف در این ساختار مورد بررسی قرار گرفت تا پیک نشر به طول‌موج‌های طولانی‌تر منتقل شده و FWHM آن کاهش یابد. نتایج شبیه سازی نشان داد با استفاده از نانوذرات نقره با اندازه شعاع ۲۵ نانومتر در میانه ی لایه ITO، FWHM را به ۲۹ نانومتر و قله انتشار به ۵۹۰ نانومتر تغییر داده است.

واژه‌های کلیدی: *FDTD، OLED، نور تکفام قرمز، نانوذرات نقره*

Optical Simulation and Optimization of monochromatic-red OLED

Abbasi, Fatemeh[1]; Ghorashi, Seyed Mohammad Bagher [1,*]; Karimzadeh, Elmira[2]

[1] Department of Laser and Photonics Faculty of Physics University of Kashan, Kashan
[2] Department of Materials Engineering, Isfahan University of Technology, Isfahan

Abstract

In this research, the effect of the thickness of emitting layer (Alq_3), electron transport layer (Alq_3), hole transport layer (NPB), hole injection layer (MoO_3) and Anode (ITO) layers on OLED light extraction efficiency (LEE) was simulated using finite difference time domain (FDTD) method to determine the optimum thickness to convert conventional OLED into monochromatic-red one. After optimizing, the emission peak was appeared at 530 nm with the full width at half maximum (FWHM) of 150 nm. This OLED structure was considered as a reference while the impact of metal nanoparticles Ag was investigated at different sizes and positions to shift the emission peak to longer wavelengths and decrease the FWHM. The simulation results showed that the FWHM decreased from 150nm to 29nm and the emission peak shifted from 530nm to 590nm using 25 nm Ag nanoparticles across ITO in OLED structure.

Keywords: *FDTD; OLED; monochromatic-red light; Ag nanoparticles.*

PACS NO

مقدمه

دیودهای نور گسیل آلی (OLED) به دلیل کاربردهای گسترده در روشنایی ها و نمایشگرها مورد توجه بسیار زیادی قرار گرفته اند. همچنین در سال های اخیر به دلیل مزیت هایی از جمله هزینه تولید اندک، مصرف انرژی پایین، سازگاری با محیط زیست و . . . تحقیقات بی شماری بر روی آن‌ها انجام شده است. این تحقیقات شامل افزایش راندمان کوانتومی داخلی مواد آلی ، جابجایی طول موج انتشار به مناطق آبی و قرمز، همچنین بهبود راندمان خروجی دستگاه با استفاده از لنزها و نانوساختارهای مناسب هستند [۱].

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مطالعات اخیر نشان داده‌اند که وجود نانوذرات فلزی در ساختار OLED، به طور قابل توجهی بازده نور خروجی را افزایش می‌دهد که به دلیل تأثیر رزونانس پلاسمون سطحی موضعی نانوذرات فلزی است. این پدیده هنگامی اتفاق می‌افتد که طول موج نشری با طول موج تشدید پلاسمونی با یکدیگر جفت شوند، که به طور مؤثر با تغییر ترکیب، شکل، اندازه و محیط اطراف نانوذرات تحت تأثیر قرار می‌گیرد. تشدید پلاسمون سطحی می بایستی با انتخاب مناسب فاصله‌ی میان نانوذرات فلزی و لایه نشر تنظیم گردد. علاوه بر این، پراکندگی نور حاصل از نانوذرات فلزی می‌تواند به استخراج فوتون‌های به دام افتاده در ساختار OLED کمک کند، که منجر به بهبود راندمان نور خروجی می‌شود [۲].

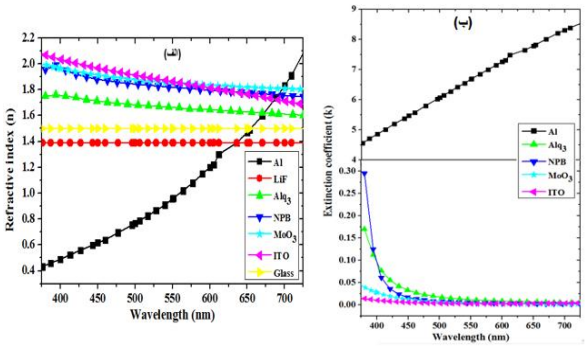
هدف از این مقاله، شبیه‌سازی و بررسی ساختار OLED تک رنگ قرمز با استفاده از روش FDTD است. به منظور دستیابی به این هدف، ابتدا ضخامت لایه‌های OLED شامل ($Al/LiF/Alq_3/NPB/MoO_3/ITO$) بهینه شده و به عنوان ساختار OLED مرجع در نظر گرفته شد. سپس اثر نانوذرات فلزی نقره در *اندازه‌ها و موقعیت‌های مختلف* از لایه گسیلنده نور در OLED مرجع مورد بررسی قرار گرفت.

روش شبیه سازی

یکی از قدرتمندترین تکنیک‌های تحلیل عددی مورد استفاده برای حل معادله ماکسول روش FDTD است که بر اساس الگوریتم ایی برای حل مسائل پیچیده الکترومغناطیسی اعمال می‌شود. در این الگوریتم، حل گسسته‌ی معادلات ماکسول بر مبنای تقارن مرکزی مشتقات زمانی و مکانی معادلات کرل است . این روش جایگزین روش های مدل سازی میکروسکوپیک می باشد زیرا رفتار یک ساختار با ابعادی در مقیاس طول موج نور فرودی یا کوچک تر از آن متفاوت بوده و نمی توان آن را با روش هایی مانند اپتیک پرتو[1] مورد بررسی قرار داد. شبیه سازی OLED ها بر مبنای این روش اغلب مبتنی بر بررسی نرخ فروافت تابشی گسیل کننده است. راندمان نور خارجی (LEE[2]) در OLED به عنوان کسری از توان اپتیکی ایجاد شده در لایه فعال OLED که به خارج از ساختار در محدوده زاویه های دلخواه گسیل می کند، اطلاق می شود یعنی:

$$LEE = \frac{\gamma_{rad}}{\gamma_{rad} + \gamma_{loss}} \qquad ۱$$

که در آن γ_{rad} نرخ فروافت تابشی و γ_{loss} نرخ فروافت اتلافی است که در گستره ی اهداف شبیه سازی با روش FDTD قرار گرفته و قابل محاسبه است. در ابتدا یک سلول سه بعدی برای شبیه سازی راندمان نور خارجی OLED طراحی شد. ضریب شکست (n) و ضریب خاموشی(k)[3] لایه‌ها براساس شکل ۱ در نظر گرفته شد.



شکل ۱: الف) ضریب شکست و ب) ضریب خاموشی لایه‌های OLED

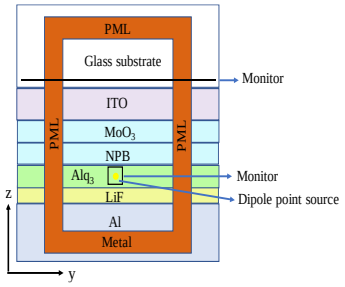
مکانیسم معمول تولید نور در OLED بازترکیب الکترون‌های تزریق شده و حفره‌های موجود در لایه انتشار دهنده از طریق ایجاد فوتون است. در این مطالعه، فرض بر این است که فوتون‌ها در لایه انتشار– Alq_3– توسط منبع دوقطبی نقطه‌ای الکترومغناطیسی که در مرکز لایه Alq_3 قرار گرفته تشکیل شده‌اند. در واقع، فرآیندهای بازترکیب و پارامتر مؤثر بر روی آن، در نظر گرفته نشده و خارج از اهداف این کار بوده است.

[1] Ray Optics

[2] Light Extraction Efficiency
[3] Extinction Coefficient

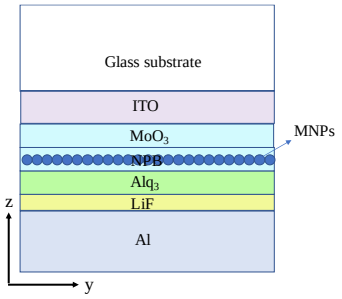
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

همان گونه که در شکل ۲ مشاهده می‌شود، شرایط مرزی در نظر گرفته شده برای این ساختار شرایط مرزی لایه کاملاً جاذب (PML)[۴] و فلزی (Metal) است و دو مانیتور یکی حول نقطه منبع دو قطبی و دیگری در حالت افقی نزدیک به لایه ITO در زیرلایه شیشه ای قرار گرفته است (شکل ۲).



شکل ۲: طرح منطقه ناحیه شبیه سازی

در مرحله اول ضخامت همه لایه‌ها (به غیر از لایه‌های LiF و Al) به منظور تعیین ساختاری تک رنگ در ناحیه طول موج‌های بلند، بهینه و به عنوان OLED مرجع در نظر گرفته شد. در مرحله بعد برای ایجاد اثر تشدید پلاسمون سطحی بررسی آن بر بازده نور خارجی، نانوذرات فلزی نقره روی لایه‌های مختلف قرار داده شدند (شکل ۳). فرض بر این بود که نانوذرات فلزی کره‌هایی با شعاع ۱۰ تا ۲۵ نانومتر هستند، در حالی که هیچ فاصله ای بین آنها وجود ندارد.



شکل ۳: ساختار OLED با نانوذرات بصورت شماتیک

نتایج

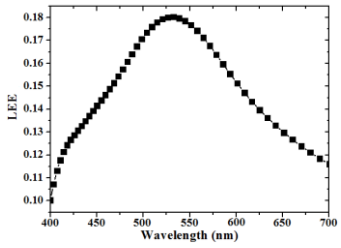
بهینه سازی ساختار OLED

در ساختار OLED طراحی شده، یک شیشه به عنوان زیرلایه، ITO به عنوان آند، MoO_3 به عنوان لایه تزریق کننده حفره، NPB به عنوان لایه انتقال دهنده حفره، Alq_3 به عنوان لایه انتقال دهنده الکترون و گسیلنده نور، LiF و Al به عنوان کاتد در نظر گرفته شد. برای دستیابی به خصوصیات مورد نظر (ساختار OLED تک رنگ و قرمز)، اثر تغییر ضخامت لایه‌های Alq_3، NPB، MoO_3 و ITO بر عملکرد OLED مورد بررسی قرار گرفت. محدوده‌ی ضخامت‌های بررسی شده برای هر لایه در جدول ۱ آورده شده است [۳ و ۴].

جدول ۱: دامنه ضخامت لایه های OLED

مواد	Alq_3	NPB	MoO_3	ITO
ضخامت‌ها (نانومتر)	۳۰-۱۵۰	۱۰-۱۲۰	۵-۸۰	۱۰۰-۱۸۰

ضخامت بهینه برای لایه های Al، Alq_3، NPB، MoO_3 و ITO به ترتیب ۱۸۰، ۱۴۵، ۵۵، ۷۰ و ۱۰۰ نانومتر محاسبه شد و این ساختار به عنوان ساختار مرجع در نظر گرفته شد. برای ساختار OLED مرجع، قله انتشار در ۵۳۰ نانومتر با FWHM، ۱۵۰ نانومتر نمایان شد (شکل ۴).



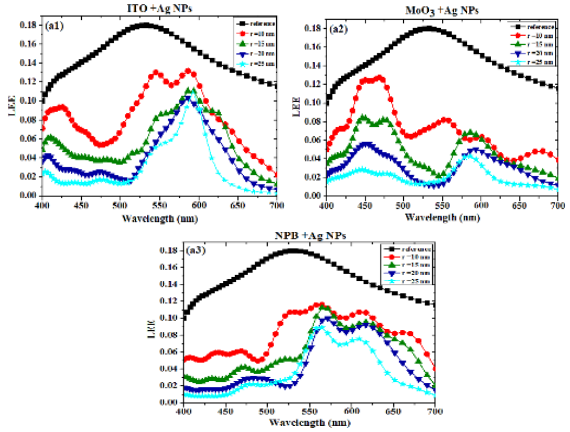
شکل ۴: طیف بازدهی نور خروجی برای ساختار مرجع OLED.

اثر نانوذرات فلزی نقره و بازدهی نور خروجی OLED

نتایج شبیه سازی بازده نور خروجی OLED شامل نانوذرات فلزی نقره با محدوده شعاع از ۱۰ تا ۲۵ نانومتر و فاصله های مختلف از لایه فعال در شکل ۵ نشان داده شده است.

[4] Perfectly Matched Layer (PML)

این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد :
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

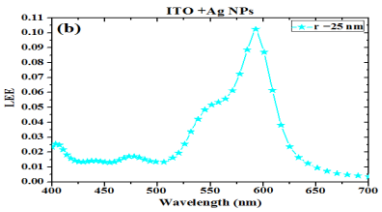


شکل ۵: طیف بازدهی نور خروجی برای نانوذرات نقره در اندازه شعاع مختلف از ۱۰ تا ۲۵ نانومتر در میان لایه‌های الف) ITO، ب) MoO_3 و ج) NPB.

مطابق شکل ۵، موقعیت و تعداد طول‌موج انتشار برای نانوذرات فلزی نقره در فاصله های متفاوت، مشابه یکدیگر نیستند. در این ساختار دو فرآیند الف) افزایش انتشار خود به خودی به دلیل جفت شدگی بین تشدید پلاسمون سطحی و فوتون‌ها در لایه ب) کاهش فوتون و جذب نور توسط نانوذرات فلزی نقره اتفاق می افتد که در تقابل با یکدیگر هستند [۵].

در همه نمونه ها پیک های نشری متعددی مشاهده می شود که ناشی از فاصله نانوذرات فلزی از یکدیگر است. اگر این فاصله زیاد باشد، پیک های نشری زنجیره نانوذرات فلزی مشابه یک نانوذره فلزی واحد مشابه شان هستند. در غیر این صورت پیک نشری زنجبره نانوذرات فلزی تغییر کرده و با پیک نشری یک نانوذره فلزی مشابه‌اش نخواهد بود. هم چنین، نوسانات موقعیت‌های قله-های انتشار را نیز می‌توان به تغییر شاخص ضریب شکست محیط اطراف نانوذرات فلزی نسبت داد. بنابراین، با توجه به هدف اصلی این مطالعه، ساختار زیر به عنوان ساختار نهایی برگزیده شد:

-Al/LiF/Alq_3/NPB/MoO_3/ITO +Ag (25 nm)/glass



شکل ۶: طیف بازدهی نور خروجی از ساختارOLED بهینه مبتنی بر نانوذرات نقره با شعاع ۲۵ نانومتر.

همانطور که در شکل ۶ مشاهده می‌شود، طول موج انتشار این ساختار به طول موج های طولانی‌تر از ساختار مرجع OLED منتقل شده و از ۵۳۰ به ۵۹۰ نانومتر تغییر یافته است. همچنین پهنای طیفی از ۱۵۰ به ۲۹ نانومتر کاهش یافته است.

نتیجه گیری

در این تحقیق، بازده نور خروجی برای طراحی ساختار OLED تک رنگ قرمز با روش FDTD بررسی شد. تاثیر ضخامت‌های مختلف لایه های Alq_3، NBP، MoO_3 و ITO بهینه سازی شد و به عنوان ساختار مرجع در نظر گرفته شد. پس از تعیین ساختار مرجع حضور نانوذرات نقره در فاصله های مختلف از لایه فعال و شعاع های گوناگون در ساختار OLED مرجع مورد بررسی قرار گرفت و نشان داده شد حضور این نانوذرات در اندازه شعاع ۲۰ که در میانه ی لایه ITO قرار گرفته‌اند دارای پیک نشری در محدوده طول موج های قرمز و تکفام است.

منابع

[۱] P. Chen, Z. Xiong, X. Wu, M. Shao, Y. Meng, Z. H. Xiong, C. Gao, *"Nearly 100% efficiency enhancement of CH3NH3PbBr3 perovskite light emitting diodes by utilizing plasmonic Au nanoparticles"*, J. Phys. Chem. Lett., **8** (2017) 3961–3969.

[۲] X. Zhang, B. Xu, W. Wang, S. Liu, Y. Zheng, S. Chen, K. Wang, X.W. Sun,*"Plasmonic perovskite light-emitting diodes based on the Ag-CsPbBr3 system"*, J. ACS Appl. Mater. Interfaces, **9** (2017) 4926–4931.

[۳] T.H. Yeh, C.C. Lee, C.J. Shih, G. Kumar, S. Biring, S.W. Liu," *"Vacuum-deposited MoO3/Ag/WO3multilayered electrode for highly efficient transparent and inverted organic light-emitting diodes"*, J. Org. Electron., **59** (2018)

[۴] A. Demchuk, I. Bolesta, O. Kushnir, I. Kolych, *"The Computational Studies of Plasmon Interaction"*, Nanoscale Res. Lett., **12** (2017) 273.266–271.

[۵] S. Khadir, M. Chakaroun, A. Belkhir, A. Fischer, O. Lamrous, A.Boudrioua, *"Localized surface plasmon enhanced emission of organic light emitting diode coupled to DBR-cathode microcavity by using silver nanoclusters"*, J. Opt. Express, **23** (2015) 23647-236.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مطالعه اثر آلاییدگی منیزیم بر روی گاف انرژی میکروگل‌های متشکل از نانوصفحات اکسید نیکل

ذبیحیان امیری ، زهرا [۱]؛ هاشمی کرویی ، سیده فائزه [۱]؛ میلانی مقدم ، حسین[۱]

[۱] گروه فیزیک حالت جامد ، دانشکده علوم پایه، دانشگاه مازندران، بابلسر

چکیده

در این تحقیق میکرو گل‌های متشکل از نانوصفحات اکسید نیکل خالص و آلاییده با منیزیم به روش هیدروترمال در دمای کلسینه ۴۰۰ درجه سانتی‌گراد تهیه شدند. تأثیر ناخالصی منیزیم با غلظت‌های مختلف بر روی خواص اپتیکی نانوساختار مورد بررسی قرار گرفت. جهت ارزیابی خواص اپتیکی، ساختاری و ریخت‌شناسی، به ترتیب از طیف–سنجی فرابنفش–مرئی (UV-Vis) ، پراش پرتو ایکس(XRD) و میکروسکوپ الکترونی روبشی اثر میدانی (FESEM) استفاده گردید. تغییرات گاف انرژی اپتیکی از منحنی تاؤک به دست آمد. نتایج به دست آمده نشان دادند که نمونه‌های سنتز شده دارای بلورینگی خوبی هستند و با افزایش آلاییدگی منیزیم در اکسید نیکل، میزان جذب در طیف مرئی کاهش ولی در طیف فرابنفش افزایش می‌یابد. همچنین گاف انرژی اپتیکی اکسید نیکل خالص با آلاییدگی منیزیم تا ۱۳ درصد وزنی به اندازه حدود ۱/۵۵ برابر کاهش یافته است.

A Study on the effect of Mg dopant on the energy band gap in NiO microflowers including nanosheets

Zabihian Amiri, Zahra[1]; Hashemi Karouei, Seyedeh Faezeh[1]; Milani Moghaddam, Hossain [1]

[1] *Department of Solid State Physics, Faculty of Basic Sciences, University of Mazandaran, Babolsar*

Abstract

In this study, pure and magnesium doped nickel oxide microflower including nanosheets prepared by hydrothermal method at calcination temperaure of 400 ℃. The effect of different concentrations of Mg doping was evaluated on optical characterizations of nanostructure. To evaluate optical, structure properties and morphology, Ultraviolet–Visible spectroscopy (UV-Vis), X-Ray Diffraction (XRD) and Field Emission Scanning Electron Microscope (FESEM) were used, respectively. Changes of optical energy gap was obtained with Tauc curve. The obtained results showed that the synthesized samples have good crystallinity and as magnesium doping in nickel oxide increases, the absorption rate in the visible spectrum decreases but increases in the ultraviolet range. Also, the optical energy gap of pure nickel oxide with magnesium doping has been reduced by up to 13 wt.% by about 1.55 times.

PACS No. 81

مقدمه

در دهه اخیر از بین اکسیدهای فلزی عناصر واسطه، اکسید نیکل به شکل کپه‌ای و نانوساختار توجه زیادی را به دلیل گستره وسیعی از کاربردها از جمله ابرخازن‌ها [۱]، باتریهای یون لیتیوم [۲] و کاربردهای فوتوکاتالیستی [۳] به خود جلب کرده است. اکسید-نیکل یک نیمه‌رسانای نوع p با گاف نواری پهن در حدود ۳/۸ الکترون ولت می‌باشد. ویژگی الکتریکی، اپتیکی و نیز مقاومت شیمیایی بالا منجر به استفاده گسترده این ماده به عنوان حسگر گازی، و سلول‌های خورشیدی شده است [۵، ۴]. ثابت شده است می‌توان با تغییر اندازه ذرات، ریخت‌شناسی و آلاییدگی تغییراتی در خصوصیات اپتیکی نانوساختارها ایجاد کرد [۷، ۶].

روش‌های متعددی برای سنتز اکسید نیکل وجود دارد از جمله: هیدروترمال، سل- ژل [۸]. از میان این روش‌ها هیدروترمال به

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

دلیل ساده بودن در روش سنتز، کارآمدی در سنتز نانوساختارها با اندازه و ریخت‌شناسی متفاوت بسیار حائز اهمیت است.

در این تحقیق میکرو گل¬های متشکل از نانوصفحات اکسید نیکل آلاییده با منیزیم به روش هیدروترمال در دمای هیدروترمال ۱۸۰ درجه سانتی‌گراد به مدت ۶ ساعت و دمای کلسینه ۴۰۰ درجه سانتی‌گراد تهیه شدند. آنالیزهای XRD، FESEM، UV-Vis جهت مشخصه‌یابی و بررسی خواص اپتیکی انجام گرفت. اثر آلاییدگی منیزیم در اکسید نیکل روی جذب اپتیکی و گاف انرژی اپتیکی مطالعه شد.

بخش تجربی

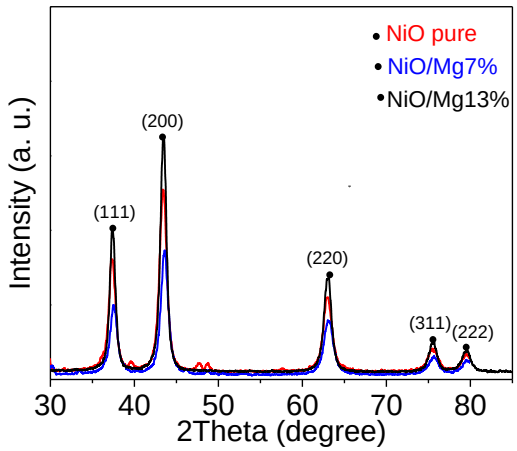
نیترات نیکل ۶ آبه ($Ni(NO_3)_2{\cdot}6H_2O$) ۱/۵ میلی‌مول، ۰/۱ گرم پلی‌وینیل پیرولیدون (PVP) در ۵۰ سی‌سی آب دیونیزه تحت چرخش سریع حل کردیم. بعد از ۱۵ دقیقه مقداری مناسب محلول آمونیاک (NH_4OH) به محلول قبلی قطره قطره اضافه شد تا اینکه pH به ۱۱ برسد. این محلول به مدت ۳۰ دقیقه تحت چرخش سریع قرار گرفت. سپس محلول به ظرف اتوکلاو ۱۰۰ سی‌سی منتقل شد و در دمای ۱۸۰ درجه سانتی‌گراد به مدت ۶ ساعت در کوره گذاشته شد. رسوب بدست آمده را بعد از سرد شدن اتوکلاو تا دمای اتاق، بوسیله سانتریفیوژ جدا کرده و چندین مرتبه با آب دیونیزه و اتانول شستشو داده و سپس ماده حاصل به مدت ۱۲ ساعت در دمای ۶۰ درجه سانتی‌گراد در آون، خشک گردید. در پایان ماده حاصل به مدت ۲ ساعت در دمای ۴۰۰ درجه سانتی‌گراد کلسینه شد. به منظور تهیه نانوساختار NiO آلاییده با Mg، در ابتدای سنتز قبل از اضافه کردن آمونیاک، نیترات منیزیم به محلول اضافه گردید.

بحث و نتایج

شکل (۱) نمودار XRD (گرفته شده در آزمایشگاه تحقیقاتی تابان) نمونه‌های سنتز شده با در فاز مکعبی می‌باشد. قله‌های مشخص شده با نتایج حاصل از (*JCPDS file No. 78-0643*) کاملاً تطابق دارد. قله‌های تیز و باریک نشان دهنده شکل‌گیری ساختار بلورینگی خوب می‌باشد. همچنین شایان ذکر است که هیچ قله‌ای مربوط به اکسید منیزیم در این طیف‌ها یافت نشده‌است که می‌تواند به دلیل غلظت کم منیزیم (کمتر از ۷ و ۱۳ درصد) باشد.همچنین یون‌های منیزیم در موقعیت مکانی مختلف درون اکسید قرار می‌گیرند و ساختار مکعبی اکسید نیکل را تغییر نداده‌اند .

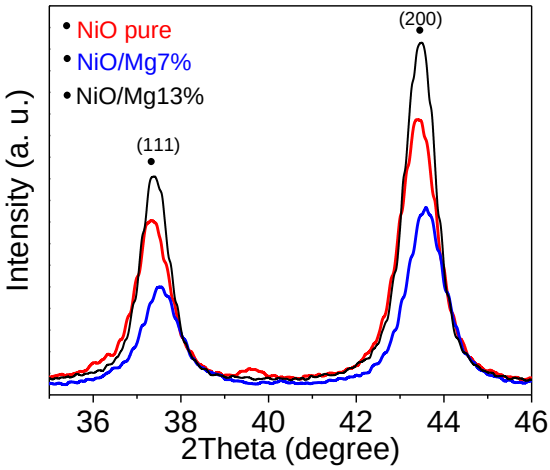
اندازه نانوبلورک‌ها با استفاده از رابطه دبای-شرر [۹] $D_{hkl} = \frac{0/9\,\lambda}{\beta_{hkl}\cos\theta_{hkl}}$ در حدود ۲۸/۲۲، ۱۸/۱۱، و ۱۱/۸۸ نانومتر به ترتیب برای اکسید نیکل خالص و آلاییده با ۷ و ۱۳ درصد وزنی منیزیم بدست آمده است. در این رابطه D_{hkl} قطر نانوبلورک، λ طول موج پرتو X $(\mathrm{Cu-K_\alpha}, \lambda = 1/5406\ \text{Å})$، β_{hkl} پهنا در نصف ارتفاع ماکزیمم بر حسب رادیان برای دسته صفحات hkl و θ_{hkl} زاویه‌ی براگ است. همانگونه که ملاحظه می‌شود با افزایش درصد وزنی Mg اندازه نانوبلورک‌ها کاهش می‌یابد. در شکل (۱) هیچ قله‌ای از Mg وجود ندارد و فقط قله‌های مربوط به اکسید نیکل دیده می‌شود.

شکل (۲) طیف پراش نمونه‌های سنتز شده می‌باشد که در بازه زاویه‌ای کوچکتر مورد ارزیابی قرار گرفته است. آلایش به وسیله منیزیم و افزایش غلظت آن باعث جابجایی جزیی قله‌های پراش به سمت زوایای پراش بزرگتر شده که علت آن را می‌توان بزرگتر بودن شعاع یونی مؤثر Mg^{2+} (۰/۷۲ آنگستروم) نسبت به Ni^{2+} (۰/۷۰ آنگستروم) که در نقاط شبکه بلوری اکسید نیکل جایگزین شده بیان نمود.



شکل۱: طیف پراش پرتو X نمونه اکسید نیکل خالص و آلاییده با ۷ و ۱۳ درصد وزنی منیزیم

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



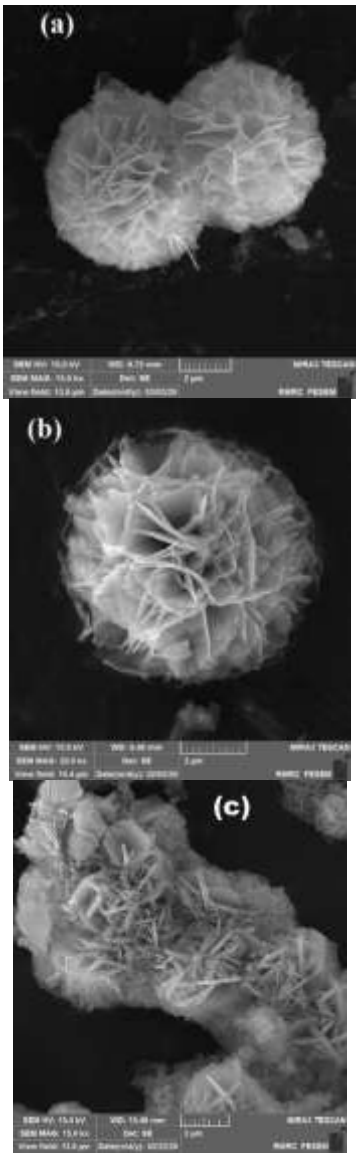
شکل۲: همان شکل (۱) در بازه زاویه‌ای کمتر

شکل (۳) تصاویر FESEM (گرفته شده در مرکز پژوهش متالوژی رازی) می‌باشد. شکل‌گیری میکروگل‌های متشکل از نانوصفحات اکسید نیکل قابل ملاحظه است. طبق شکل تغییر ساختار با افزایش درصد وزنی Mg ایجاد می‌شود. مطابق شکل(۳c) با افزایش درصد وزنی Mg تا حدود ۱۳٪ میکروگل‌ها به صورت در هم رفته نمایان شده و مرز میان میکروگل‌ها به طور مشخص قابل ملاحظه نمی‌باشد.

طیف جذب UV-Vis (گرفته شده در آزمایشگاه الکترونیک مولکولی دانشگاه مازندران؛ مدل T80+) در شکل (۴) نشان داده شده است. همانگونه که مشاهده می‌شود با افزایش درصد وزنی Mg در اکسید نیکل، در محدوده طیف مرئی کاهش و در محدوده طیف فرابنفش تقریباً افزایش می‌یابد. اندازه ساختار و میزان تخلخل می‌تواند در شدت جذب مؤثر باشد. گاف انرژی اپتیکی مستقیم با استفاده از رابطه تاؤک [۱۰] به دست آمده است:

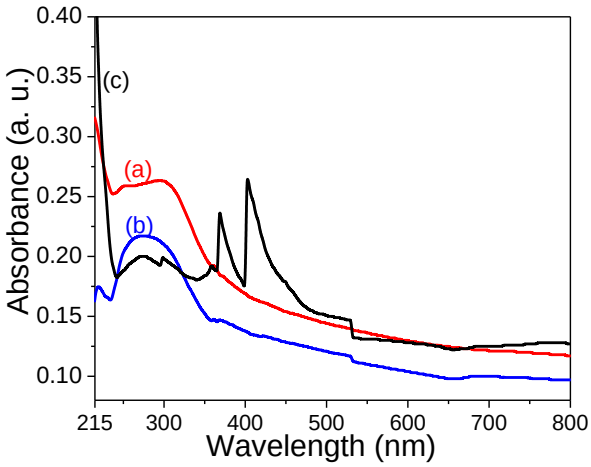
$$ahv = A\left(hv - E_g\right)^{1/2} \qquad (۱)$$

که α ضریب جذب اپتیکی (طبق روابط مرجع [۱۱] محاسبه شده است)، hν انرژی فوتون، E_g گاف اپتیکی مستقیم و A ضریب ثابت می‌باشد. نمودار $(\alpha h\nu)^2$ بر حسب $h\nu$ در شکل (۵) رسم شده است. گاف اپتیکی محاسبه شده در حدود ۳/۴، ۲/۳ و ۲/۲ الکترون ولت به ترتیب برای اکسید نیکل خالص و آلاییده شده با ۷٪ و ۱۳٪ وزنی منیزیم تخمین زده شده است که این میزان کاهش می‌تواند ناشی از افزایش میزان تخلخل ساختار با افزایش منیزیم باشد. با افزایش درصد وزنی منیزیم اندازه نانوبلورک‌ها کاهش یافته که می‌تواند منجر به افزایش سطح موثر و نیز افزایش تخلخل ساختار شود [۱۲]. مقدار گاف انرژی اپتیکی در مرجع [۱۳] برای نانوفیبر اکسید نیکل، ۳/۸۷ الکترون ولت و در مرجع [۱۴] برای فیلم اکسید نیکل، ۳/۴۲ الکترون ولت گزارش شده است.



شکل ۳: تصاویرFESEM اکسید نیکل (a) خالص، (b) با ۷٪ وزنی ناخالصی Mg ، (c) با ۱۳٪ وزنی ناخالصی Mg

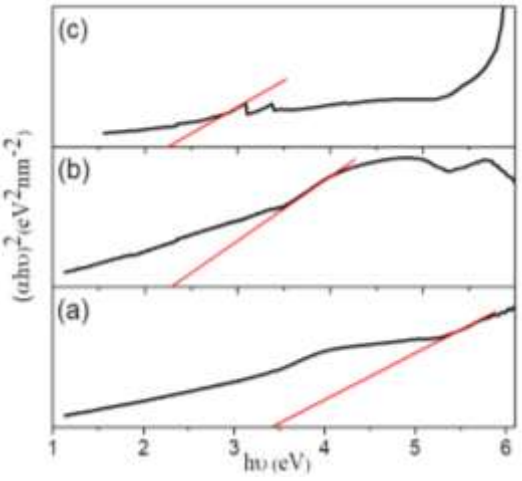
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



شکل۴: نمودار طیف جذب ساختار اکسید نیکل (a) خالص، (b) با ۷٪ وزنی ناخالصی Mg و (c) با ۱۳٪ وزنی ناخالصی Mg

نتیجه گیری

در این تحقیق میکروگل‌های متشکل از نانوصفحات اکسید نیکل آلاییده شده با Mg به روش هیدروترمال سنتز شده است. با افزایش درصد وزنی Mg قطر نانوبلورک‌ها کاهش یافته و طیف جذب UV-Vis در اثر آلاییدگی به طور قابل توجهی تغییر می-کند. گاف انرژی اپتیکی اکسید نیکل با افزایش آلاییدگی منیزیم، کاهش یافته و مقدار آن برای نمونه اکسید نیکل با ۱۳ درصد وزنی منیزیم نسبت به اکسید نیکل خالص به مقدار ۱/۵۵ کاهش پیدا کرده است که می‌تواند به دلیل افزایش تخلخل در ساختار باشد.



شکل۵: نمودار گاف انرژی اپتیکی مستقیم ساختار اکسید نیکل (a) خالص، (b) با ۷٪ وزنی ناخالصی Mg و (c) با ۱۳٪ وزنی ناخالصی Mg

مرجع‌ها

[۱] F. I. Dar, Kevin R. Moonoosawmy and M. Es-Souni; "Morphology and property control of NiO nanostructures for supercapacitor applications"; *Nanoscale Research Letters* **8** (2013) 363 (1-7).

[۲] L. Yuan, Z. P. Guo, K. Konstantinov, P. Munroe and H. K. Liua; "Spherical Clusters of NiO Nanoshafts for Lithium-Ion Battery Anodes"; *Electrochemical and Solid-State Letters* **9** (2006) A524-A528.

[۳] F. Motahari, M.R. Mozdianfard, F. Soofivand and M. Salavati-Niasari; "NiO nanostructures: synthesis, characterization and photocatalyst application in dye wastewater treatment"; *RSC Advances* **4** (2014) 27654-27660.

[۴] I. Hotovy, J. Huran, P. Siciliano, S. Capone, L. Spiess and V. Rehacek; "Enhancement of H2 sensing properties of NiO-based thin films with a Pt surface modification"; *Sensors and Actuators B* **103** (2004) 300–311.

[۵] Chang Cai, Kang Zhou, Haiyan Guo, Yue Pei, Ziyang Hu, Jing Zhang, Yuejin Zhu; "Enhanced hole extraction by NiO nanoparticles in carbon-based perovskite solar cells"; *Electrochimica Acta* **312** (2019) 100-108.

[۶] J. Al Boukhari, L. Zeidan, A. Khalaf and R. Awad; "Synthesis, characterization, optical and magnetic properties of pure and Mn, Fe and Zn doped NiO nanoparticles"; *Chemical Physics* **516** (2019) 116-124.

[۷] S. Sankar, S.K. Sharma, N. An, H. Lee, D.Y. Kim, Y.B. Im, Y.D. Cho, R.S. Ganesh, S. Ponnusamy, P. Raji and L.P. Purohit; "Photocatalytic properties of Mn doped NiO spherical nanoparticles synthesized from sol-gel method, *Optik-International Journal for Light and Electron Optics* **127** (2016) 10727-10734.

[۸] M. S. Alnarabiji, O. Tantawi, A. Ramli, N. A. M. Zabidi and B. Abdullah; "Comprehensive review of structured binary Ni-NiO catalyst: Synthesis, characterization and applications"; *Renewable and Sustainable Energy Reviews* 114 (2019) 109326 (1-19).

[۹] Y. Waseda, E. Matsubara and K. Shinoda; "X-Ray Diffraction Crystallography"; *1st edition Springer-Verlag, Berlin Heidelberg*, (2011) 123-127.

[10] S. Adachi; "*Optical Properties of Crystalline and Amorphous semiconductors: Materials and Fundamental Principles*"; 1st edition Springer, New York, (1999).

[۱۱] S. Nasirian and H. Milani Moghaddam; "Extended Cauchy Model for Tunable Refractive Index of Titania Nanoparticles at Visible Region"; *Journal of Dispersion Science and Technology* **35** (2014) 1174-1180.

[12] A. Gaber, M. A. Abdel- Rahim, A. Y. Abdel- Latief and M. A. Abdel-Salam; "Influence of calcination temperature on the structure and porosity of nanocrystalline SnO_2 synthesized by a conventional precipitation method"; *International journal of electrochemical science* **9** (2014) 81-95.

[۱3] R. Ramachandran, K. Ramachandran, G. G. Philip, R. Ramachandran, H. A. Therese and G. G. kumar; "Design and development of Co_3O_4/NiO composite nanofibers for the application of highly sensitive and selective non-enzymatic glucose sensors"; *RSC Advances* **5** (2015) 76538-76547.

[۱4] B. Saha, K. Sarkar, A. Bera, K. Deb and R. Thapa; "Schottky diode behaviour with excellent photoresponse in NiO/FTO heterostructure"; *Applied Surface Science* **418** (2017) 328-334.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

گذار فاز آمیخته از ماده ی هسته ای هایپرونی به ماده ی کوارکی غیر حبس شده تحت آخرین قیدهای حاکم بر ستاره ی نوترونی

شهرباف مطلق ، محبوبه[۱،۲] ؛ بلاشکه، دیوید[۲] ؛ مشفق، حمیدرضا[۱]

[۱] دانشکده فیزیک دانشگاه تهران ، انتهای خیابان کارگر شمالی ، تهران

[۲] گروه فیزیک نظری، دانشگاه وروسلاو، لهستان

چکیده

راه حل معمای هایپرونی با استفاده از یک گذار فاز ماکسول مرتبه ی اول به ماده ی کوارکی با ابرسانایی رنگ مورد مطالعه ی دوباره قرار گرفته است و با استفاده از یک روش درونیابی که گذار فاز آمیخته را توصیف می کند، پیش بینی وجود ستاره های هیبریدی با مغزی کوارک-هایپرونی تأیید شده است. معادله حالت فاز هادرونی با استفاده از روش وردشی با پایین ترین مرتبه ی قید و معادله حالت فاز کوارکی با روش ناموضعی نامبو-جونا-لازینیو به دست آمده است. ستاره های هیبریدی پیش بینی شده قیدهای جرم-شعاع بدست آمده از مشاهدات برای ستاره های نوترونی را برآورده می کنند.

واژه های کلیدی: *ماده ی هسته ای، هایپرون، کوارک، ستاره ی نوترونی.*

Mixed phase transition from hypernuclear matter to deconfined quark matter fulfilling mass-radius constraints of neutron stars

Shahrbaf Motlagh, Mahboubeh[1,2]; Blaschke, David[2] ; Moshfegh, Hamid Reza[1]

[1] Department of Physics, University of Tehran, Tehran
[2] Institute for Theoretical Physics, University of Wroclaw, Wroclaw, Poland

Abstract

A recent solution of the hyperon puzzle by a Maxwell first-order phase transition to color superconducting quark matter is revisited. By using an interpolation method which describes a mixed phase transition, the existence of hybrid stars with a quark-hyperon core has been confirmed. The equation of state of hadronic phase has been obtained within the lowest order constrained variational (LOCV) method while the nonlocal Nambu-Jona-Lasinio model has been employed for the quark phase. The predicted hybrid stars fulfill the constraints on the mass-radius relation for neutron stars obtained from recent observations.
***Keywords**: nuclear matter, hyperon, quark, neutron star.*

PACS No. 26 – 97 - 98

مقدمه

ستاره‌های نوترونی یکی از بهترین آزمایشگاه‌های طبیعی برای مطالعه ی ماده‌ی دارای برهمکنش قوی در چگالی های بسیار بالا و دمای صفر هستند[1,2]. درون هسته‌ی ستاره‌ی نوترونی، چگالی ماده می‌تواند تا حدود $1\ fm^{-3}$افزایش یابد. با افزایش چگالی (پتانسیل شیمیایی) به بیش از چگالی هسته ای ($0.16\ fm^{-3}$)، پس از ماده‌ی هسته ای معمولی، ابتدا ماده هسته ای هایپرونی می‌تواند تولید شود و سپس در چگالی‌های بالاتر، ماده‌ی کوارکی غیرحبس شده امکان بروز می‌یابد و در نتیجه یک ستاره‌ی نوترونی پرجرم می‌تواند یک ستاره‌ی هیبریدی با مرکز کوارک-هایپرونی باشد[3]. مطالعات نشان می‌دهند که حضور هایپرون‌ها در ماده باعث نرم شدن معادله حالت می‌شود و در نتیجه جرم بیشینه ی ستاره‌ی نوترونی حد مشاهده شده برای پالسارهای پرجرم را برآورده نمی‌کند[4]. یک راه حل این معمای هایپرونی استفاده از یک گذار فاز مرتبه اول به ماده‌ی کوارکی است که پیش از این با استفاده از روش ماکسول مورد استفاده قرار گرفته است[5]. معادله حالت

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

ماده ی هایپرونی با استفاده از روش وردشی با پایین‌ترین مرتبه ی قید به دست آمده است[6,7,4] در حالی که برای معادله حالت ماده‌ی کوارکی روش ناموضعی نامبو–جونا–لازینیو به کار گرفته شده است[8,9]. ما در این پژوهش محاسبات قبلی را با استفاده از یک روش درونیابی برای ساخت گذار فاز آمیخته طوری بهبود می‌بخشیم که هم نتایج گذار فیزیکی‌تر باشند، هم راه حلی برای مشکل بازجبس‌شدگی بدست بیاید و هم قیدهای جرم–شعاع مشاهده شده برای ستاره‌های نوترونی برآورده شود.

روش LOCV

این روش در طی سال‌ها برای محاسبه ی خواص حجمی ماده‌ی هسته ای [10] و خواص ستاره‌های نوترونی به کار گرفته شده است [11] . مانند هر روش وردشی دیگر برای محاسبه از هامیلتونی سیستم شروع می‌کنیم که به صورت زیر نوشته می شود

$$H = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + \sum_{i\neq j} v(ij) \qquad (۱)$$

که جمله ی اول نشان دهنده‌ی انرژی جنبشی ذرات و جمله‌ی دوم نشان دهنده‌ی پتانسیل دو–جسمی ذرات سیستم است. ما در این پژوهش از پتانسیل AV18 به همراه پتانسیل سه–جسمی اوربانا برای برهمکنش نوکلئون–نوکلئون استفاده می‌کنیم [11,12]. برای برهمکنش هایپرون–نوکلئون و هایپرون–هایپرون نیز یک پتانسیل مرکزی استفاده می‌شود [13,14]. تابع موج آزمایشی برای محاسبه‌ی مقدار چشمداشتی هامیلتونی به صورت زیر در نظر گرفته می‌شود

$$\Psi(1\dots A) = F(1\dots A)\Phi(1\dots A) \qquad (۲)$$

که در آن Φ تابع موج غیر همبسته ی سیستم ذرات است و F تابع همبستگی سیستم است که به فرم جسترو نوشته می‌شود. بنابراین انرژی سیستم بس–ذره‌ای به صورت زیر نوشته می‌شود

$$E = \langle H\rangle = \frac{1}{N}\frac{\langle\Psi|H|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle} = E_1 + E_{MB} \cong E_1 + E_2 \qquad (۳)$$

در این روش وردشی تنها قیدی که در مسئله وجود دارد استفاده از شرط بهنجارش برای توابع موج است

$$\chi = \frac{1}{N}\sum_{ij}\langle ij|F_p^2 - F^2|ij - ji\rangle = 0 \qquad (۴)$$

$$\langle\Psi|\Psi\rangle = 1 - \chi \qquad (۵)$$

با کمینه کردن انرژی سیستم نسبت به توابع همبستگی دسته معادلات اویلر–لاگرانژ به دست می‌آیند که با حل آن‌ها هم توابع همبستگی و هم انرژی سیستم حاصل می‌شود.

روش nlNJL

این روش یک بسط کواریانت ناموضعی از روش معمول NJL است که در آن برخلاف روش معمول، میدان‌های کوارکی با رئوس غیر وابسته به مکان و وابسته به تکانه با هم برهمکنش می کنند و از این طریق مشکل معرفی بازآرایی‌های پیچیده و شاخص قطع‌های تیز از بین می‌رود [15]. با توجه به اینکه در این پژوهش معادله حالت کوارکی که از پیش بدست آمده است مورد استفاده قرار گرفته، به جزئیات محاسبه‌ی آن پرداخته نمی‌شود. مقدار دقیق شاخص جفت شدگی مزون‌های برداری (η) که به عنوان ورودی در این روش استفاده می‌شود، به طور دقیق شناخته شده نیستند به همین دلیل مقادیر مختلف ثابت و یا وابسته به چگالی در محدوده‌ی مجاز می‌توان برای آن در نظر گرفت.

گذار فاز آمیخته از ماده‌ی هایپرونی به ماده‌ی کوارکی

ازآنجاییکه معادله حالت های مربوط به ماده ی هادرونی و ماده‌ی کوارکی در اطراف محدوده‌ی گذار به طور دقیق مشخص نیستند، پیشنهاد شده است که برای گذار از فاز هادرونی به فاز کوارکی از روش درونیابی استفاده شود [16]. به این ترتیب در محدوده ی گذار، یک فاز آمیخته از ماده ی هادرونی و ماده‌ی کوارکی خواهیم داشت که در مقایسه با گذار فاز ماکسول فیزیکی‌تر و قابل اطمینان‌تر است. ماده‌ی هادرونی و ماده‌ی کوارکی به وسیله‌ی معادله حالت‌هایی تعریف می‌شوند که فشار را بر حسب پتانسیل شیمیایی در دمای صفر که متناظر با ماده‌ی ستاره‌ی نوترونی است به ما می‌دهند. با فرض اینکه $P_H(\mu)$ و $P_Q(\mu)$ به ترتیب فشار ماده‌ی هادرونی و فشار ماده‌ی کوارکی باشند، می‌توان فشار بحرانی ماده‌ی هادرونی را از رابطه‌ی زیر بدست آورد

$$P_H(\mu) = P_Q(\mu) = P_c \qquad (۶)$$

$$P_M(\mu) = \alpha_2(\mu-\mu_c)^2 + \alpha_1(\mu-\mu_c) + (1+\Delta p)P_c \qquad (۷)$$

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

در رابطه ی بالا، Δp یک شاخص آزاد است که فشار فاز آمیخته را با توجه به مثبت یا منفی بودنش، افزایش یا کاهش می دهد.

$$P_M(\mu_c) = P_c + \Delta p = P_M \, , \Delta p = \Delta \, P/P_c \qquad (۸)$$

با در نظرگرفتن رابطه ی (۷) که در آن فشار فاز آمیخته به صورت یک تابع صعودی از توان دو با پتانسیل شیمیایی افزایش می‌یابد، و و با این فرض که منحنی معادله حالت فاز آمیخته باید در نقطه ی μ_{cH} بر منحنی معادله حالت فاز هادرونی و در نقطه ی μ_{cQ} بر منحنی معادله حالت فاز کوارکی منطبق شود، معادلات پیوستگی زیر حاصل می شود

$$P_H(\mu_{cH}) = P_M(\mu_{cH}) \qquad (۹)$$

$$P_Q(\mu_{cQ}) = P_M(\mu_{cQ}) \qquad (۱۰)$$

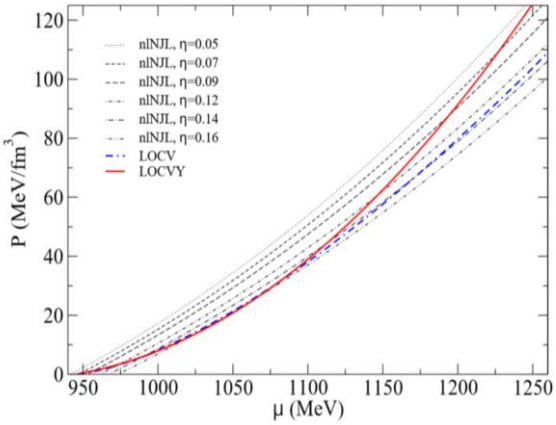
$$\partial/\partial\mu \, (P_H(\mu_{cH})) = \partial/\partial\mu(P_M(\mu_{cH})) \qquad (۱۱)$$

$$\partial/\partial\mu(P_Q(\mu_{cQ})) = \partial/\partial\mu(P_M(\mu_{cQ})) \qquad (۱۲)$$

از طرفی می دانیم که $n(\mu) = dP(\mu)/d\mu$ است، بنابراین با حل عددی معادلات پیوستگی برای فشار و چگالی ها، مقادیر بحرانی پتانسیل شیمیایی μ_{cH} و μ_{cQ} و همچنین مقادیر α_2 و α_2 محاسبه می شوند که به این ترتیب معادله حالت فاز آمیخته بدست می آید.

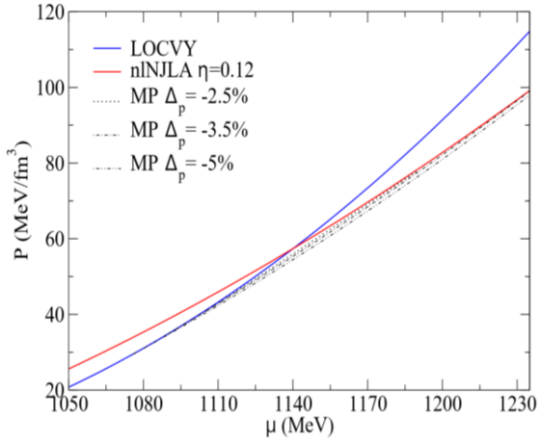
محاسبات انجام شده

شکل ۱ نمودار فشار بر حسب پتانسیل شیمیایی را برای فاز هادرونی و فاز کوارکی به ازای مقادیر مختلف η نشان می دهد. مطابق شکل، این منحنی ها در دو نقطه یکدیگر را قطع کرده اند. از تقاطع در پتانسیل شیمیایی های بالاتر به پدیده ی باز حبس شدگی یاد می شود که اتفاقی غیرفیزیکی است.



شکل۱ : منحنی فشار بر حسب پتانسیل شیمیایی برای فازهای هادرونی (با هایپرون و بدون هایپرون) و فاز کوارکی.

ما انتظار نداریم در پتانسیل شیمیایی های بالا دوباره فاز هادرونی غالب شود. در مقاله ی پیشین با استفاده از این منحنی ها و اولین نقاط قطع، یک گذار فاز مرتبه ی اول به روش ماکسول محاسبه شده بود که چون پتانسیل شیمیایی متناظر با این گذار بسیار کم است و در نتیجه در چگالی های خیلی پایین رخ داده است، اجازه ی تشکیل هایپرون ها را پیش از گذار نمی دهد. برای حل این مشکل و مشکل باز حبس شدگی در چگالی های بالاتر ما با انتخاب مقدار η=0.12، محاسبات مربوط به گذار فاز آمیخته را به روش عددی انجام می دهیم. با توجه به اینکه برای بدست آوردن فاز آمیخته به فشار و پتانسیل شیمیایی بحرانی که گذار فاز ماکسول در آن رخ می دهد، نیاز داریم، در اینجا از گذار چگالی پایین که از نگاه نظری با فیزیک مسئله سازگاری ندارد، چشم پوشی می‌کنیم و به سراغ گذار در چگالی بالا می رویم. با توجه به اینکه در چگالی بالا دوباره فاز هایپرونی غالب شده است و فشار آن بیشتر از فشار فاز کوارکی است، از $\Delta p<0$ استفاده می‌کنیم که یک مدل پیشنهادی جدید است. نتیجه ی محاسبات که فشار ماده ی آمیخته را به صورت تابعی از پتانسیل شیمیایی نشان می دهد، در شکل ۲ رسم شده است. با فرض رخ دادن گذار فاز آمیخته در اطراف پتانسیل شیمیایی بحرانی مربوط به گذار فاز ماکسول، معادله حالتی بدست می آید که با پیش بینی حضور تشکیل فاز آمیخته ای از ماده ی هسته ای معمولی، ماده ی هسته ای هایپرونی و ماده ی کوارکی غیر حبس شده در محدوده ی گذار نتایج را فیزیکی تر و واقعی تر می کند.



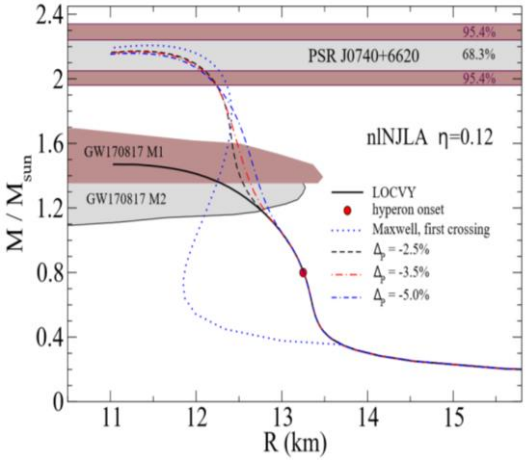
شکل ۲. گذار فاز آمیخته از ماده ی هایپرونی به ماده ی کوارکی که به ازای مقادیر مختلف از شاخص Δp رسم شده اند.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

از سوی دیگر شکل ۲ نشان می دهد که معادله حالت بدست آمده همانطور که انتظار داریم در چگالی های پایین بر معادله حالت فاز هادرونی منطبق است و در چگالی های بالا بر معادله حالت فاز کوارکی منطبق می شود.

برای معادله حالت بدست آمده برای ستاره ی هیبریدی مورد نظر با حل معادلات TOV رابطه ی جرم-شعاع ستاره بدست می‌آید [17,18] که در شکل ۳ رسم شده است.

همانطور که در شکل می بینیم، با به کارگیری این روش آستانه ی بروز کوارک های غیر حبس شده بعد از آستانه ی بروز هایپرون ها قرار می گیرد. بنابراین ستاره ی هیبریدی پیش بینی شده است که دارای یک مرکز کوارکی است که با یک لایه از ماده ی آمیخته به ماده ی هایپرونی و ماده ی هسته ای متصل می شود. بعلاوه، این ستاره ها همانطور که شکل نشان می دهد، جرم بیشینه ی بدست آمده برای ستاره های هیبریدی، حد پایین جرمی مشاهده شده برای پالسار PSR J0740 + 6620 را که برابر با $2.14_{-0.09}^{+0.10} M_{\odot}$ است [19]، برآورده می کند. از طرفی شیب منحنی جرم-شعاع نیز نسبت به آنچه با استفاده از گذار فاز ماکسول بدست آمده بود، اصلاح شده است.



شکل ۳. رابطه ی جرم-شعاع برای ستاره های هیبریدی بدست آمده از گذار فاز آمیخته

نتیجه گیری

ما در این پژوهش با استفاده از یک روش درونیابی، گذار فاز آمیخته ای از فاز هادرونی به فاز کوارکی ساخته ایم. این گذار فاز نه تنها برای اولین بار مدلی را ارائه می دهد که مشکل باز حبس شدگی را در چگالی های بالا حل می کند، بلکه ستاره ی هیبریدی ای را پیش بینی می کند که دارای یک مرکز کوارکی است و حل معمای هایپرونی نیز در آن تحقق پیدا کرده است.

مرجع‌ها

[۱] P. Haensel, A. Y. Potekhin and D. G. Yakovlev, *Astrophys. Space Sci*. Libr. **326**, 1 (2007).
[۲] J. M. Lattimer, *Ann. Rev. Nucl. Part. Sci.* **62,** 485 (2012).
[۳] H. Chen, M. Baldo, G. F. Burgio and H.-J. Schulze, *Phys. Rev. D* **86**, 045006 (2012).
[۴] M. Shahrbaf and H. R. Moshfegh, *Annals Phys*. **402**, 66 (2019).
[۵] M. Shahrbaf, D. Blaschke, A. Grunfeld and H. Moshfegh, *Phys. Rev. C* **101**, no.2, 025807 (2020).
[۶]J. C. Owen, R. F. Bishop and J. M. Irvine, *Nucl. Phys. A* **277**, 45 (1977).
[۷] M. Shahrbaf, H. R. Moshfegh and M. Modarres, *Phys. Rev. C* **100**, no. 4, 044314 (2019).
[۸] D. Gomez Dumm, D. B. Blaschke, A. G. Grunfeld and N. N. Scoccola, *Phys. Rev. D* **73**, 114019 (2006).
[۹] D. B. Blaschke, D. Gomez Dumm, A. G. Grunfeld, T. Kl¨ahn and N. N. Scoccola, *Phys. Rev. C* **75**, 065804 (2007).
[۱۰] M. Modarres and H. R. Moshfegh, *Phys. Rev. C* **62**, 044308 (2000).
[۱۱] S. Goudarzi and H. R. Moshfegh, Phys. Rev. C 91 (2015) no.5, 054320, Erratum: [*Phys. Rev. C* **96** (2017) no.4, 049902].
[۱۲] R. B. Wiringa, V. G. J. Stoks and R. Schiavilla, *Phys. Rev. C* **51**, 38 (1995).
[۱۳] E. Hiyama, Y. Yamamoto, T. A. Rijken and T. Motoba, *Phys. Rev. C* **74**, 054312 (2006).
[۱۴] E. Hiyama, M. Kamimura, T. Motoba, T. Yamada and Y. Yamamoto, *Phys. Rev. C* **66**, 024007 (2002).
[۱۵] G. A. Contrera, A. G. Grunfeld and D. Blaschke, *Eur. Phys. J. A* **52**, no. 8, 231 (2016).
[۱۶] K. Masuda, T. Hatsuda and T. Takatsuka, PTEP 2013 no.7, 073D01 (2013). M. Asakawa and T. Hat suda, *Phys. Rev. D* **55**, 4488(1997).
[۱۷] R. C. Tolman, *Phys. Rev*. **55**, 364 (1939).
[۱۸] J. R. Oppenheimer and G. M. Volkoff, *Phys. Rev*. **55**, 374 (1939).
[۱۹] H. T. Cromartie et al., *Nat. Astron*. **4**, 72 (2019).

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مطالعه عددی جداسازی قطرات در کانال‌های میکروسیالی Y شکل

قهرمانی ، سمیه ؛ کدیور ، عرفان

دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی شیراز ، بلوار مدرس، شیراز

چکیده

در این مطالعه، تاثیر عوامل مختلف بر به‌دام‌اندازی و مرتب‌سازی یک قطره تغییر شکل‌پذیر در ریزکانال‌های Y شکل را به روش عددی مورد بررسی قرار می‌دهیم. شبکه ریزسیال مورد مطالعه، از یک کانال مادر که به دو کانال دختر با زاویه تقاطعی مشخص تقسیم‌بندی شده‌است، تشکیل می‌شود. بااستفاده از روش المان مرزی(BEM)، معادله‌ی استوکس را در یک کانال ریزسیال دوبعدی، به روش عددی حل می‌کنیم. محاسبات عددی نشان می‌دهد که عواملی چون اندازه سلول، وشکسانی، تنش‌سطحی، زاویه تقاطع و عدد مویینگی می‌تواند بر مرتب‌سازی قطره‌ها، تاثیرگذار باشد.

واژه های کلیدی: *ریزسیال‌شناسی؛ مرتب‌سازی؛ روش المان مرزی.*

Numerical study of droplets separation in Y-shaped microfluidic channel

Ghahremani, Somayeh; Kadivar, Erfan

Department of Physics, Shiraz University of Technology, Shiraz,

Abstract

In this work, we numerically investigate the effect of various factors on Trapping and sorting a deformable droplet in a Y-junction microchannel. The studied microfluidic channel consists of a mother channel divides into two daughter channel with a certain bifurcation angle. We employ boundary element method (BEM) to numerically solve the two-dimensional Stokes equation. Our numerical results indicate that the droplet sorting depends on the droplet size, viscosity, surface tension, bifurcation angle and capillary number.

***Keywords**: Microfluidic; Sorting; Boundary Element Method*

PACS No. 47

مقدمه

ریزسیال‌شناسی[۱]، علمی است که با تولید وکنترل دقیق سیالاتی سروکار دارد که به لحاظ هندسی در مقیاس میکرومتر قرار دارند. ریزسیال‌شناسی، یک موضوع بین رشته‌ای است که در علوم مهندسی، فیزیک، شیمی، بیوشیمی، فناوری نانو و زیست فناوری، با هدف طراحی سامانه‌های گوناگون به‌کار گرفته می‌شود. توانایی هدایت و مرتب‌سازی سلول‌ها در کانال‌های ریزسیالی، یک مساله اساسی در علم ریزسیالات است[۱]. بیشتر فناوری‌هایی که برای مرتب‌سازی و ایزوله‌کردن سلول‌ها استفاده می‌شوند، شامل میکروکانال‌های متقاطع(مانند اتصالات Y شکل یا T شکل) هستند. عواملی چون میزان وشکسانی[۲]، کشش سطحی[۳]، اندازه سلول‌ها، مقاومت هیدرودینامیکی کانال‌ها و زاویه تقاطع می‌تواند در مرتب‌سازی سلول‌ها و هدایت آن‌ها به یکی از کانال‌ها، تاثیر به‌سزایی داشته‌باشد. این ویژگی‌ها به همراه نیاز به حجم نمونه کم، این فناوری را برای تشخیص سلول‌های سرطانی و بیماری‌های خونی مفید می‌سازد[۲]. در اوایل سال ۲۰۰۵، پیترسون و همکارانش، با موفقیت از یک میدان صوتی ایستاده توده ای[٤]، برای جداکردن قطرات لیپیدی از خون استفاده کردند[۳]. سال ۲۰۰۹، یاپ وهمکارانش، با ایجاد یک میدان دمایی نامتقارن وکاهش مقاومت جریان در یکی از کانال‌های سیستم، مرتب‌سازی انجام دادند[٤]. کدیور و همکاران نیز در سال ۲۰۱۳، اثر نسبت وشکسانی‌های قطره و فاز پیوسته را، بر رفتار مرتب‌سازی در یک حلقه ریزسیالی نامتقارن، بررسی کردند و سه رژیم مختلف هیدرودینامیکی را که بر اساس فاصله بین قطرات متوالی در کانال ورودی و اندازه قطرات تعیین می‌شوند، پیدا کردند[۵]. هایمل و همکاران در سال ۲۰۱۹، به منظور به دام‌اندازی و مرتب‌سازی سلول‌های مختلف، مانند سلول‌های خونی وسلول‌های سرطانی در

۱ Microfluidic

۲ Viscosity

۳ Surface tension

٤ Bulk standing acoustic field

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد

http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

کانال‌های ریزسیالی، اثر اندازه سلول، ویسکوالاستیسیته سیتوپلاسمی[۱]، تنش غشایی[۲] و آهنگ شارش و زاویه تقاطع را بر فرآیند مرتب‌سازی، بررسی کردند[۲].

عوامل متعددی بر فرآیند مرتب‌سازی قطرات در کانال‌های ریزسیالی تاثیرگذار است. یکی از این عوامل، میزان فاصله قطره از خط مرکزی کانال(Y_0) است که اگر این مقدار پایین‌تر یا بالاتر از مقدار بحرانی Y_{crit} باشد، هدایت قطره‌ها به کانال‌های دختر را تحت تاثیر خود قرار می‌دهد. هدف ما، در این تحقیق، بررسی اثرات اندازه سلول، وشکسانی، تنش‌سطحی ، زاویه تقاطع و عدد مویینگی[۳]، بر میزان فاصله جداسازی بحرانی قطره و در نتیجه به دام انداختن آن در کانال مورد نظر می‌باشد.

مدل فیزیکی

در این مطالعه، مهاجرت یک تک قطره‌ی تغییرشکل‌پذیر، در یک میکروکانال Yشکل متقارن، با زاویه تقاطع‌های مختلف، مورد بررسی قرار می‌گیرد. هندسه‌ی مدل ارایه‌شده، در شکل۱ نشان داده‌شده‌است. کانال ورودی(مادر)، در راستای محور x و کانال‌های خروجی(دختر)، در زاویه θ نسبت به‌هم قرار دارند. پهنای کانال-های خروجی، با هم برابر و نصف کانال ورودی است. فرض می کنیم که سیستم از دو فاز سیال زمینه و قطره تشکیل شده است که سیال زمینه یا همان فاز پیوسته با اندیس ۱ و فاز قطره با اندیس ۲ نشان داده می‌شود. ارتفاع کانال H، عرض کانال مادر W و شعاع قطره تغییرشکل داده نشده R_d، فرض شده‌است. حرکت مایع از معادلات خطی جریان استوکس پیروی می‌کند. با صرف نظر کردن از نیروهای گرانشی، جریان درون و بیرون قطره از معادلات پیوستگی[٦]:

$$\vec{\nabla}\cdot V_i = 0 \quad on\ \Omega_i \ \text{with i} \in \{1,2\} \qquad (۱)$$

و معادله استوکس [٦] پیروی می‌کند:

$$-\vec{\nabla}P_i + \mu_i \nabla^2 V_i = 0 \quad \text{on } \Omega_i \ \text{with i} \in \{1,2\} \qquad (۲)$$

۱ Cytoplasmic viscoelasticity

۲ Cortical tension

۳ Capillary number

که در آن $\nabla = (\partial_x, \partial_y)$، عملگر لاپلاس در دو بعد، $p(x,y)$ فشار و μ وشکسانی و $\mathbf{V}$ سرعت است. شرایط مرزی حاکم بر این مسئله عبارت است از:

۱- مولفه‌ی عمودی سرعت در فصل مشترک قطره وسیال زمینه Γ_{cd}، پیوستگی دارد.

۲- مولفه عمودی تنش سطح در فصل مشترک دو سیال، ناپیوسته است.

این ناپیوستگی با رابطه زیر توصیف می شود:

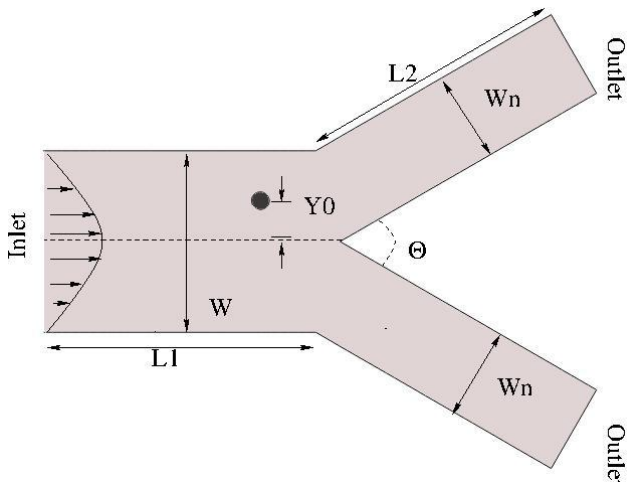
$$\gamma kn = \sigma_1 \cdot n - \sigma_2 \cdot n \qquad \text{on } \Gamma_{cd} \qquad (۳)$$

که σ تانسور تنش سطح و $\mathbf{n}$ بردار یکه عمود بر فصل مشترک دو سیال، $\mathbf{k}$ میانگین انحنای آن، و γ تنش بین سطحی فصل مشترک مایع–مایع است. با استفاده از روش المان مرزی [۷]، سرعت فاز پیوسته، در هر نقطه بر روی فصل مشترک فاز قطره و فاز پیوسته، با حل معادله انتگرال خودسازگار زیر محاسبه شود[٦]:

(٤)

$$V_i(x_0) = v_{0i}(x_0) - \frac{1}{4\pi\mu_1}\int_{\Gamma_{cd}} G_{ij}^p(x,x_0)\gamma Kn_j dl + \frac{1-\lambda}{4\pi}\int_{\Gamma_{cd}} V_j(x) T_{jik}^p n_k(x) dl,$$

که در آن جمع‌زنی روی اندیس‌های تکراری صورت می‌پذیرد. هم‌چنین در این رابطه، $\lambda = \frac{\mu_2}{\mu_1}$ نسبت وشکسانی‌ها و $r = (x,y)$ و $r_0 = (x_0, y_0)$ به ترتیب نقاط میدان و تکینگی هستند.



شکل۱: هندسه کلی کانال ریزسیال. همانگونه که در شکل مشاهده می‌شود مرکز قطره در فاصله Y_0 از خط مرکزی کانال قرار دارد.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

G_{ij}^{p} و T_{ijk}^{p} نیز، به ترتیب توابع گرین دوره‌ای سرعت و تانسور تنش دوره ای، می‌باشند[٦]. برای حل معادله انتگرالی (٤) لازم است که تمامی مرزهای ثابت و متحرک را به وسیله المان‌های مرزی یک بعدی، شبکه‌بندی کنیم. مرز مشترک دو سیال با استفاده از روش چندجمله‌ای درجه سه دوره‌ای و مرزهای ثابت مثل دیواره‌ها، ورودی‌ها و خروجی‌های کانال با المان خط مستقیم شبکه‌بندی شده است. ضمنا قبل از حل معادله، لازم است کلیه متغیرهای فیزیکی بکار رفته شده را بدون بعد سازیم. در این راستا از عدد بدون بعد مویینگی $C_a = \frac{\mu_c v_0}{\gamma}$ استفاده می‌کنیم.

معادله انتگرالی استوکس به روش کالکشن گسسته‌سازی شده و انتگرال‌ها به روش گاوس لژاندر مربعی با ۱۲ نقطه حل شده‌اند. برای حل انتگرال‌ها، کدها با استفاده از زبان برنامه‌نویسی C++ نوشته شده و تحت سیستم عامل لینوکس به اجرا گذاشته شده‌است. پس از محاسبه سرعت در هر نقطه، مختصات جدید آن نقطه به‌دست‌آمده و سپس مجددا فاصله بین نقاط سایزبندی شده اند.

نتایج

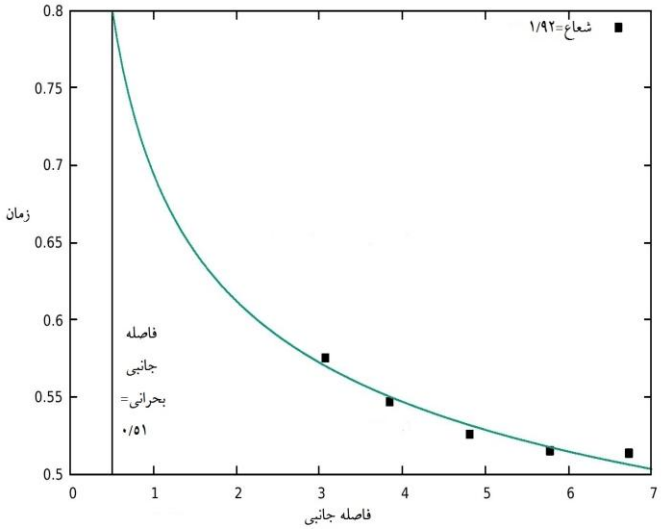
در این مطالعه، تاثیر عوامل مختلف بر هدایت ومرتب‌سازی یک قطره تغییر شکل‌پذیر در ریزکانال‌های Y شکل، به روش عددی مورد بررسی قرار می‌گیرد. در مهاجرت تک قطره به کانال‌های دختر، دو حالت ممکن است پیش بیاید: یا قطره در نوک تقاطع گیرکند، یا به کانال دختر بالایی یا پایینی مهاجرت کند. احتمال وقوع هر یک از این حالت‌ها، با میزان فاصله بحرانی قطره ارتباط دارد. اگر فاصله قطره تا خط مرکزی کانال، کمتر از مقدار بحرانی باشد، حالت اول پیش می‌آید و قطره در تقاطع گیر می‌کند.($Y\langle Y_{crit}$) واگر این فاصله بیشتر از مقدار بحرانی باشد، حالت دوم پیش می‌آید و قطره به یکی از کانال‌های دختر هدایت می‌شود($Y\rangle Y_{crit}$). بر اساس این واقعیت که زمان ورود قطره به کانال دختر، با گیر افتادن در نوک تقاطع، بسیار زیاد می‌شود، می‌توان میزان فاصله بحرانی Y_{crit} را محاسبه کرد. بنابراین برای محاسبه فاصله بحرانی Y_{crit} ، از مجانب عمودی نمودار فاصله اولیه برحسب زمان استفاده کردیم. شکل٤ محاسبه فاصله بحرانی Y_{crit}، برای مهاجرت تک قطره در میکروکانالی با زاویه تقاطع ٦٠ را نشان می‌دهد. با افزایش قطر سلول، این مجانب به سمت راست منتقل می‌شود و میزان Y_{cr} افزایش می‌یابد، که این احتمالا به دلیل افزایش برهم‌کنش یک قطره بزرگ‌تر با محیط اطرافش است. برای هر اندازه سلول در نظرگرفته‌شده، فاصله بحرانی Y_{crit} با افزایش زاویه تقاطع کاهش می‌یابد تا در زاویه ۱۲۰ درجه به یک مقدار کمینه می‌رسد. در زاویه‌های بزرگتر از ۱۲۰، رفتاری متفاوت دیده می‌شود و این‌بار با افزایش زاویه، فاصله بحرانی Y_{crit} افزایش می‌یابد. شکل ٥ تاثیر تغییر اندازه سلول و زاویه تقاطع را بر میزان فاصله بحرانی نشان می‌دهد. شکل٦ تاثیر میزان عدد مویینگی و تنش سطح هر قطره را بر مقدار فاصله بحرانی‌اش نشان می‌دهد. هرچه قطره نرم‌تر و تغییرشکل‌پذیرتر باشد، در واقع به این معنی که عدد مویینگی بالاتری داشته‌باشد، انحراف بیشتری از خطوط جریان را تجربه می‌کند و فاصله بحرانی Y_{crit} بیشتری دارد. این فاصله بحرانی تحت تاثیر زاویه نیز قرار می‌گیرد و قطره چه صلب یا چه نرم باشد، در زاویه ۱۲۰ درجه به یک مقدار کمینه موضعی می‌رسد. شکل٧ تاثیر وشکسانی‌های مختلف را بر فاصله بحرانی قطره نشان می‌دهد و با توجه به نمودار می‌توان نتیجه گرفت، هرچه وشکسانی کمتر باشد، فاصله بحرانی بیشتر کاهش می‌یابد و کمتر است. نتایج نشان می‌دهد که قطره تمایل دارد در کانال با مقاومت کمتر جریان یابد و عوامل مختلفی میتواند بر مقاومت سیال هر شاخه و درنتیجه مسیر انتخابی قطره تاثیرگذار باشد. نتایج این مطالعه با نتایج مطالعه کدیور برروی مسیر قطرات در ریزکانال‌های مسطح Tشکل [٨] نیز سازگاری کامل دارد.

نتیجه‌گیری

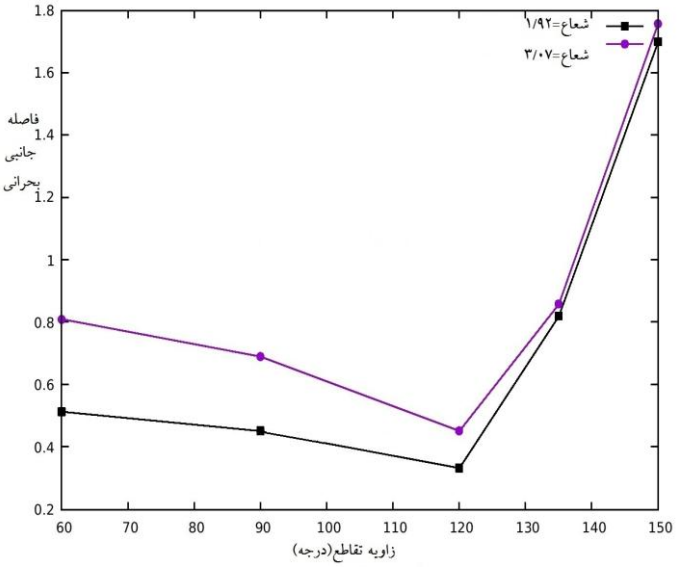
در این مطالعه، تاثیرپذیری میزان فاصله بحرانی قطره به عواملی مانند اندازه سلول، وشکسانی، عددمویینگی، کشش‌سطحی و زاویه تقاطع مورد بررسی قرار گرفت. درک چگونگی وابستگی فاصله بحرانی به این متغیرهای فیزیکی، زمینه‌ساز ارایه مدلی برای هدایت و مرتب‌سازی قطرات به کانال موردنظر را فراهم می‌نماید. نتایج عددی نشان می‌دهد، هرچه اندازه سلول، وشکسانی و عدد مویینگی بزرگتر باشد، فاصله بحرانی نیز افزایش می‌یابد، اما در کانالی با زاویه تقاطع ۱۲۰ درجه این فاصله به یک مقدار کمینه

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

موضعی می‌رسد. پس می‌توان نتیجه گرفت، میکروکانالی با زاویه تقاطعی ۱۲۰ درجه، می‌تواند به خوبی قطرات را در کانال‌های دختر هدایت و مرتب‌سازی کند و از گیر کردن آن‌ها در نوک تقاطع جلوگیری کند.



شکل٤: محاسبه فاصله جانبی بحرانی برای قطره با شعاع ۱/۹۲ در میکروکانال با زاویه تقاطع ٦٠

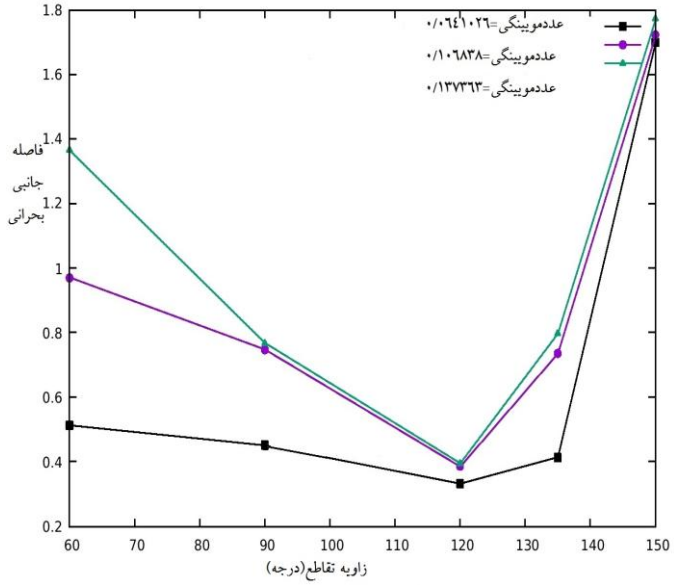


شکل٥: بررسی تاثیر تغییر اندازه سلول و زاویه تقاطع را بر میزان فاصله بحرانی

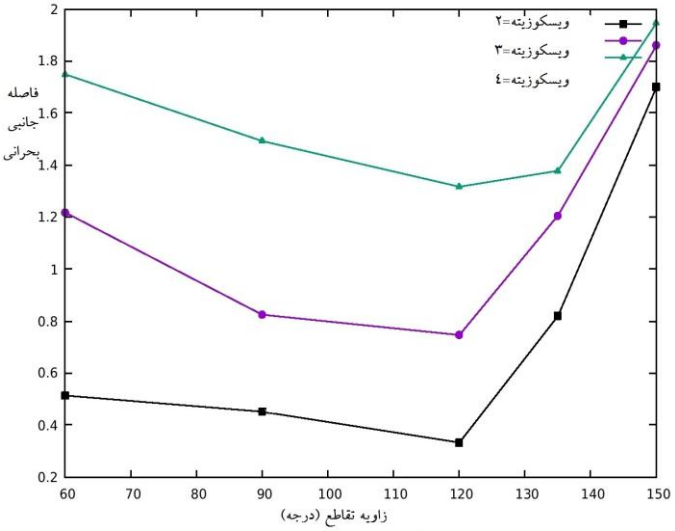
مرجع‌ها

[1] Xi H.D; Zheng H; Guo W; Ganan-Calvo A.M; Ai Y; Tsao CH.W; Zhou J; Li W; Haung Y; Nguyen N.T; Tan S.H; "Active droplet sorting in microfluidics: a review," *Lab chip* ,**17**, (2017) 751-771

[2] Hymel S.J; Lan H; Fujioka H; Khismatullin D.B; "Cell trapping in Y-junction microchannels: A numerical study of the bifurcation angle effect in inertial microfluidics," *Phys. Fluids*, , (2019) 082003 **31**



شکل٦ : بررسی تاثیر عددهای مویینگی مختلف برای هر قطره برفاصله بحرانی



شکل۷ : بررسی تاثیر وشکسانی‌های مختلف بر میزان فاصله بحرانی

[3] Petersson F; Nilsson A; Holm C; Jonsson H; Laurell T; "Continuous separation of lipid particles from erythrocytes by means of laminar flow and acoustic standing wave forces," *Lab Chip*, **5**, (2005) 20-22

[4] Yap Y.-F; Tan S.-H; Nguyen N.-T; S. Murshed S.M; Wong T.-N; Yobas L; "Thermally mediated control of liquid microdroplets at a bifurcation," *J. Phys. D: Appl. Phys*, **42**, (2009) 065503 (8pp)

[5] Kadivar E; Herminghaus.S; Brinkmann.M; "Droplet sorting in a loop of flat microfluidic channels," *Condens. Matter*, **25**, (2013) 285102 (11pp)

[6] Kadivar E;"Quasistaticpackingsofdropletsinflatmicrofluidicchannels," *PhysicaA*, **443**, (2016) 486–494

[7] C.Pozrikids, "*A Practical Guide to Boundary Element Method*" ; USA, Florida, CRC Press (2002)

[8] Kadivar E; "Droplet trajectories in a flat microfluidic network," *European Journal of mechanics B/Fluids*, **57**, (2016) 75-81

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

رفتار آلیاژهای حافظه‌پذیر فرومغناطیس $Ni_{47}Mn_{40}Sn_{13}$ در اثر آلایش کادمیوم در جایگاه قلع

قاضی‌نژاد، زهراسادات؛ کاملی، پرویز؛ قطبی ورزنه، علی؛ نوروزی ایناللو، میثم؛ عبدالحسینی سارسری، اسماعیل

دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی اصفهان ، اصفهان

چکیده

آلیاژهای حافظه‌پذیر فرومغناطیس $Ni_{47}Mn_{40}Sn_{13-x}Cd_x$ (x=0, 0.75, 1, 1.25) به روش آلیاژسازی مکانیکی ساخته شدند و تحت عملیات حرارتی به مدت ۱۶ ساعت در دمای ۱۲۲۳ درجه کلوین قرار گرفتند. جهت بررسی ویژگی‌های مغناطیسی و الکتریکی این آلیاژها، اندازه‌گیری‌هایی از جمله پذیرفتاری مغناطیسی و مقاومت الکتریکی انجام شد. دماهای گذار از هر دو اندازه‌گیری به‌دست آمد؛ نتایج به‌دست آمده از دو روش تطابق خوبی را نشان داد. پسماند گرمایی موجود در این مواد در هردو اندازه‌گیری مشاهده شد. آلایش کادمیوم در جایگاه قلع سبب افزایش دمای گذار مارتنزیتی می‌شود که از نقطه نظر کاربردی مناسب است.

Behavior of $Ni_{47}Mn_{40}Sn_{13}$ ferromagnetic shape memory alloys by substituting with Cd in the Sn site

Ghazinezhad, Zahrasadat; Kameli, Parviz; Ghotbi Varzaneh, Ali; Norouzi Inallu, Meysam; Abdolhosseini Sarsari, Ismaeil;

Department of Physics, Isfahan University of Technology, Isfahan

Abstract

A series of $Ni_{47}Mn_{40}Sn_{13-x}Cd_x$ (x = 0, 0.75, 1, 1.25) ferromagnetic shape memory alloys were prepared by mechanical alloying and then subjected to heat treatment for 16 h in 1223 K. magnetic susceptibility and resistivity were applied to investigate the magnetic and electrical properties of composites. Transition temperatures obtained from two methods were well in agreement. Both measurements verified thermal hysteresis in the alloys. Substitution of Cd in the Sn site enhanced the structural transition temperature to the higher values that is more favorable for practical applications.

مقدمه

امروزه به دلیل ورود بیش از حد گازهای گلخانه‌ای به جو زمین با پدیده‌ی گرمایش جهانی مواجه هستیم که سبب افزایش میانگین دمای کره‌ی زمین شده‌است. برخی از این گازهای گلخانه‌ای ناشی از فرآیندهای مرتبط با سردسازی است. دست‌یابی به یک روش سردسازی تمیز از مهم‌ترین کارها، جهت جلوگیری از تغییرات آب و هوایی به شمار می‌رود. بدین منظور سردسازی مغناطیسی که بر مبنای اثر مغناطوگرمایی کار می‌کند مورد توجه محققان زیادی قرار گرفته است. سردسازی مغناطیسی یک روش سردسازی با بازده‌ی بالا و عاری از اثرات

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مخرب زیست محیطی است. با وجود این‌که تا کنون ساخت یخچال‌های مغناطیسی بر پایه‌ی گادولینیوم تحقق یافته‌است اما به دلیل گران بودن و در دسترس نبودن عنصر گادولینیوم، این یخچال‌ها تجاری نشده‌اند [1]. آلیاژهای حافظه‌پذیر هویسلر[1] دسته‌ای از مواد هستند که در آن‌ها اثر مغناطوگرمایی دیده می‌شود. ارزان بودن و در دسترس بودن این مواد زمینه را برای مطالعه‌ی بیشتر آن‌ها فراهم کرده است [2]. به‌طور کلی این آلیاژها به دو دسته‌ی تمام هویسلر با فرمول عمومی X_2YZ و نیم‌هویسلر با فرمول XYZ دسته بندی می‌شوند. X و Y از عناصر فلزی واسطه و Z از گروه ۳، ۴ و ۵ اصلی جدول تناوبی انتخاب می‌شود [3].

آلیاژهای حافظه‌پذیر هویسلر دارای گذار مارتنزیتی (ساختاری) و مغناطیسی هستند. در حوالی گذار مارتنزیتی تغییرات آنتروپی قابل توجهی دیده می‌شود. در این بین آلیاژهای هویسلر بر پایه‌ی Ni-Mn با کاهش دما، گذار فاز مارتنزیتی از یک فاز با تقارن بالا (فاز آستنیت) به یک فاز با تقارن پایین (فاز مارتنزیت) را در محدوده‌ی گذار مارتنزیتی از خود نشان می‌دهند. حال اگر در جهت افزایش دما حرکت کنیم گذار مارتنزیتی معکوس رخ می‌دهد [4]. گذار ساختاری با پسماند گرمایی همراه است که از ویژگی‌های اصلی این نوع گذار به شمار می‌رود.

ویژگی‌های ساختاری و مغناطیسی آلیاژهای هویسلر به شدت به ترکیبات آن وابسته هستند به طوری‌که با یک جانشانی جزئی در هر یک از عناصر اصلی آلیاژ با دیگر عناصر جدول تناوبی، این ویژگی‌ها دست‌خوش تغییرات زیادی می‌شوند. در این پژوهش اثر جانشانی عنصر کادمیوم در جایگاه قلع در آلیاژ حافظه‌پذیر هویسلر $Ni_{47}Mn_{40}Sn_{13-x}Cd_x$ (x = 0, 0.75, 1 1.25) مورد بررسی قرار گرفته است.

آزمایش

آلیاژهای هویسلر $Ni_{47}Mn_{40}Sn_{13-x}Cd_x$ (x=0, 0.75, 1 1.25) به روش آلیاژسازی مکانیکی ساخته شدند که جزئیات آن در مقاله‌ای دیگر گزارش شده است [5]. پس از اطمینان از تشکیل فاز نهایی، نمونه‌هاپس از آسیاب کاری به مدت ۳۰ ساعت، در دمای ۱۲۲۳ درجه کلوین به مدت زمان ۱۶ ساعت بازپخت شدند و در انتها تحت عملیات سردسازی سریع قرار گرفتند.

برای بررسی ویژگی‌های مغناطیسی نمونه‌ها پذیرفتاری مغناطیسی با استفاده از دستگاه پذیرفتاری سنج AC ساخت شرکت Lake Shore مدل ۷۰۰۰ واقع در دانشکده‌ی فیزیک دانشگاه صنعتی اصفهان اندازه‌گیری شد. همچنین برای بررسی ویژگی‌های الکتریکی، مقاومت ویژه‌ی الکتریکی اندازه‌گیری شد. جهت اندازه‌گیری مقاومت الکتریکی از دستگاه یجچال مدار بسته، ساخت شرکت Layboled موجود در آزمایشگاه ماده چگال تجربی دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی اصفهان استفاده شد.

نتایج و بحث

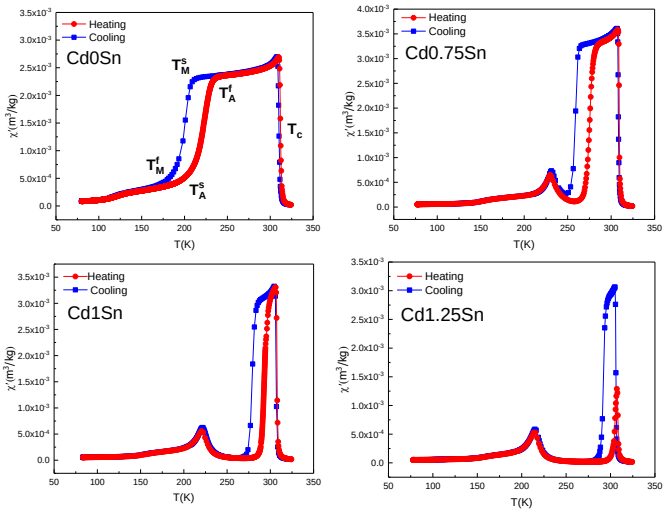
الف) اندازه‌گیری پذیرفتاری مغناطیسی

برای مطالعه‌ی اثر جانشانی کادمیوم به جای قلع، پذیرفتاری مغناطیسی متناوب نمونه‌ها در دو مسیر سرمایش و گرمایش اندازه‌گیری شد. شکل ۱ وابستگی دمایی قسمت حقیقی پذیرفتاری مغناطیسی را نشان می‌دهد. همان‌طور که مشاهده می‌شود با افزایش آلایش کادمیوم در جایگاه قلع دمای گذار ساختاری افزایش می‌یابد اما دمای گذار مغناطیسی در فاز آستنیت تغییرات قابل ملاحظه‌ای نمی‌کند. گذار مغناطیسی غالباً تحت تأثیر برهم‌کنش نیکل و اتم‌های منگنزی که در جایگاه اصلی خود قرار گرفته‌اند، است که با آلایش کادمیوم در جایگاه قلع، تغییر قابل توجهی در برهمکنش‌های نیکل-منگنز اتفاق نمی‌افتد. لازم به ذکر است که نمونه در دماهای بالا در فاز پارامغناطیس آستنیت قرار دارد. در حوالی دمای کوری (T_c) برهم‌کنش مغناطیسی از حالت پارامغناطیس به فرومغناطیس

[1]– Ferromagnetic Shape Memory Alloys

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

تغییر می‌کند و با ادامه‌ی روند سرمایش فاز آستنیت طی گذار ساختاری به فاز مارتنزیت می‌رود [۶]. اگر نمونه را گرم کنیم گذار معکوس صورت می‌گیرد. دمای شروع و پایان گذار فاز از آستنیت به مارتنزیت و بالعکس در مسیرهای سرمایش و گرمایش به ترتیب با $T_M^S, T_M^F, T_A^S, T_A^F$ در شکل ۱ برای نمونه‌ی بدون آلایش نشان داده شده و نتایج حاصل در جدول ۱ آمده است.



شکل ۱ : قسمت حقیقی پذیرفتاری مغناطیسی بر حسب دما نمونه‌های

$Ni_{47}Mn_{40}Sn_{13-x}Cd_x\ (x = 0, 0.75, 1, 1.25)$

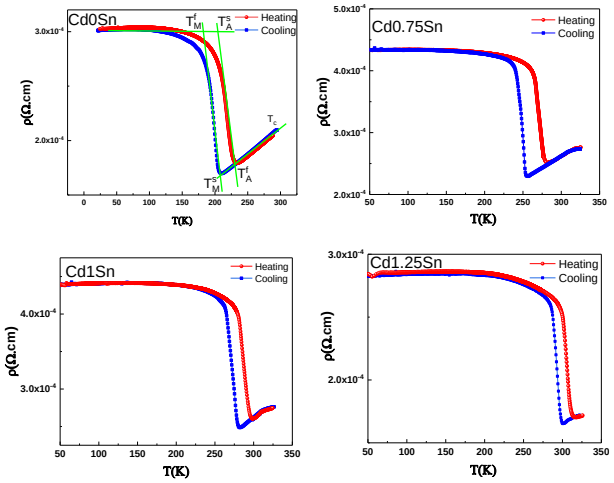
جدول ۱ : دماهای گذار حاصل از اندازه‌گیری پذیرفتاری مغناطیسی نمونه‌های

$Ni_{47}Mn_{40}Sn_{13-x}Cd_x\ (x = 0, 0.75, 1, 1.25)$

Composition	T_M^S(K)	T_M^f(K)	T_A^S(K)	T_A^f(K)	T_C(K)
$Ni_{47}Mn_{40}Sn_{13}$	210	186	202	235	312
$Ni_{47}Mn_{40}Sn_{12.25}Cd_{0.75}$	267	250	267	282	309
$Ni_{47}Mn_{40}Sn_{12}$ Cd1	287	271	285	304	308
$Ni_{47}Mn_{40}Sn_{11.75}Cd_{1.25}$	298	286	300	307	306

ب) اندازه‌گیری مقاومت ویژه‌ی الکتریکی

از دیگر روش‌های بررسی گذار مارتنزیتی و مشخص کردن دمای گذار، اندازه‌گیری مقاومت الکتریکی است. شکل ۲ مقاومت ویژه‌ی الکتریکی نمونه‌ها را نشان می‌دهد. پسماند حرارتی موجود در پذیرفتاری مغناطیسی نمونه‌ها در اندازه‌گیری مقاومت ویژه‌ی الکتریکی نمونه‌ها نیز دیده می‌شود. این پسماند ویژگی ذاتی گذارهای مرتبه اول به شمار می‌رود. با کاهش دما نمونه از فاز آستنیت به فاز مارتنزیت با مقاومت الکتریکی بیشتر وارد می‌شود. در راستای توجیه این پدیده می‌توان به افزایش برهم‌کنش الکترون فونون موجود در فاز مارتنزیت اشاره کرد. این رفتار نشان دهنده‌ی تغییر چگالی حالات در محدوده‌ی تراز فرمی با وقوع گذار است [7]. با رسم مماس‌های مجانبی بر منحنی‌های مقاومت، دماهای شروع و پایان گذار فاز آستنیتی و مارتنزیتی به دست آمد [8]. مقادیر حاصل شده به ترتیب با نمادهای $T_M^S, T_M^F, T_A^S, T_A^F$ در جدول ۲ ذکر شده است. مقاومت نمونه‌ها در حوالی دمای اتاق (۳۰۰ کلوین) با افزایش دما همراه با شیبی ملایم افزایش می‌یابد که بیان کننده‌ی رفتاری فلزگونه می‌باشد. همچنین تغییر شیبی که در دماهای بالای ۳۱۰ کلوین برخی نمونه‌ها مشاهده می‌شود نشان دهنده‌ی گذار کوری فاز آستنیت است.



شکل ۲ : مقاومت ویژه‌ی الکتریکی برحسب دما نمونه‌های

$Ni_{47}Mn_{40}Sn_{13-x}Cd_x (x=0, 0.75, 1, 1.25)$

جدول ۲ : دماهای گذار حاصل از اندازه‌گیری مقاومت ویژه‌ی الکتریکی نمونه‌های

$Ni_{47}Mn_{40}Sn_{13-x}Cd_x (x=0, 0.75, 1, 1.25)$

Composition	T_M^S(K)	T_M^f(K)	T_A^S(K)	T_A^f(K)	T_C(K)
$Ni_{47}Mn_{40}Sn_{13}$	206	185	202	229	320
$Ni_{47}Mn_{40}Sn_{12.25}Cd_{0.75}$	254	241	263	279	309
$Ni_{47}Mn_{40}Sn_{12}$ Cd_1	280	263	277	296	309
$Ni_{47}Mn_{40}Sn_{11.75}Cd_{1.25}$	298	285	298	311	307

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مقادیر به‌دست آمده از اندازه‌گیری‌های پذیرفتاری و مقاومت الکتریکی به یک‌دیگر نزدیک هستند. برخی تفاوت‌هایی که در دماهای گذار در دو روش اندازه‌گیری دیده می‌شود می‌تواند مربوط به اتصالات الکتریکی و مقاومت گرمایی ترموکوپل باشد. همچنین محل قرار گیری ترموکوپل نیز می‌تواند در این اختلاف موثر باشد. البته در کنار عوامل ذکر شده این نکته هم حائز اهمیت است که کسری از فاز آستنیت باید به فاز مارتنزیت گذار کند تا تغییر در ویژگی‌های الکتریکی مشهود باشد به همین دلیل همان‌طور که در مطالعات دیگران نیز مشاهده شده است بعضاً دمای گذار به‌دست آمده از مقاومت الکتریکی مقداری کمتر از دمای گذار به‌دست آمده از اندازه‌گیری‌های مغناطیسی است.

افزایش دمای گذار مارتنزیتی و مغناطیسی با تغییرات پارامتر شبکه (حجم سلول واحد) و همچنین تغییرات تعداد الکترون‌های ظرفیت بر واحد اتم (e/a) بررسی و توجیه می‌شوند. در این مطالعه کاهش پارامتر شبکه در اثر آلایش کادمیوم و همچنین افزایش نسبت e/a هر دو پارامتری هستند که در راستای هم سبب افزایش دمای گذار ساختاری شده‌اند. البته محاسبات ابتدا به ساکن ما روی دیگر آلیاژهای هویسلر نشان می‌دهد که تغییرات حجم سلول واحد و به‌طبع آن تغییر فاصله‌ی بین اتم‌ها عامل غالب‌تری برای تغییر در دمای گذار ساختاری است.

نتیجه‌گیری

نمونه‌های $Ni_{47}Mn_{40}Sn_{13-x}Cd_x$ (x=0, 0.75, 1, 1.25) به روش آلیاژسازی مکانیکی ساخته شدند و بعد از آسیابکاری تحت عملیات حرارتی قرار گرفتند. برای بررسی ویژگی‌های این آلیاژها اندازه‌گیری‌های پذیرفتاری مغناطیسی و مقاومت ویژه‌ی الکتریکی انجام شد. دماهای گذار از دو روش اندازه‌گیری به‌دست آمد که در تطابق خوبی با یک‌دیگر هستند و دلیل تفاوت‌های ناچیز آن‌ها بیان شد. همچنین دیده شد که دماهای گذار ساختاری و مغناطیسی با افزایش آلایش کادمیوم به سمت دماهای نزدیک به دمای اتاق جابه‌جا شدند. این اتفاق به کاهش پارامتر شبکه و افزایش نسبت تعداد الکترون‌های ظرفیت بر واحد اتم (e/a) ارتباط داده شد. افزایش دما ی گذار و وقوع آن در محدوده‌ی دمای اتاق از نقطه نظر کاربرد این آلیاژها در صنعت سردسازی مغناطیسی دستاوردی مطلوب به حساب می‌آید و این آلیاژها را به کاندیداهای مناسبی جهت استفاده در یخچال‌های مغناطیسی تبدیل می‌کند. زیرا علاوه بر داشتن دمای گذار مناسب در حوالی دمای اتاق، این مواد هزینه‌ی پایین ساخت و مواد اولیه ارزان قیمت دارند که از پارامترهای مهم در تجاری شدن یک محصول به حساب می‌آید.

مراجع

1. Liu, J., et al., *Giant magnetocaloric effect driven by structural transitions.* Nature materials, 2012. **11**(7): p. 620-626.
2. Pathak, A.K., *Exploration of New Multifunctional Magnetic Materials Based on a Variety of Heusler Alloys and Rare-Earth Compounds.* 2011.
3. Graf, T., C. Felser, and S.S. Parkin, *Simple rules for the understanding of Heusler compounds.* Progress in solid state chemistry, 2011. **39**(1): p. 1-50.
4. Dun-Hui, W., et al., *Martensitic transformation and related magnetic effects in Ni—Mn-based ferromagnetic shape memory alloys.* Chinese Physics B, 2013. **22**(7): p. 077506.
5. Varzaneh, A.G., et al., *Effect of Cu substitution on magnetocaloric and critical behavior in Ni47Mn40Sn13− xCux alloys.* Journal of Alloys and Compounds, 2017. **708**: p. 34-42.
6. Chernenko, V.A., et al., *Magnetic and magnetocaloric properties of martensitic Ni2Mn1. 4Sn0. 6 Heusler alloy.* Journal of magnetism and magnetic materials, 2012. **324**(21): p. 3519-3523.
7. Lobo, D., et al., *Magnetic interactions in the martensitic phase of Mn rich Ni-Mn-In shape memory alloys.* Journal of Applied Physics, 2013. **114**(17): p. 173910.
8. Aguilar-Ortiz, C.O., et al., *Influence of Fe doping and magnetic field on martensitic transition in Ni–Mn–Sn melt-spun ribbons.* Acta Materialia, 2016. **107**: p. 9-16.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

طراحی و شبیه سازی یک آشکارساز زیستی فراماده تراهرتز برای محلول آب و گلوگز

عسکری ، مهدی[۱] ؛ شکرگزار، فاطمه[۲] ؛ پاکارزاده، حسن[۲]

[۱] گروه فیزیک ، دانشگاه سلمان فارسی ، کازرون

[۲] دانشکده فیزیک ، دانشگاه صنعتی شیراز ، شیراز

چکیده

به دلیل عدم تاثیر مخرب تابش تراهرتز بر روی بافتها و سلول های زیستی، این ناحیه بسامدی برای آشکارسازی مولکول‌های زیستی بسیار مناسب است. در این مقاله به کمک یک ساختار فراماده جدید، زیست آشکارسازی را پیشنهاد داده ایم که در ناحیه بسامدی تراهرتز عمکرد آشکارسازی بسیار خوبی دارد. هر سلول واحد این آشکارساز شامل یک استوانه فلزی است که در مرکز دو میله متقاطع از همان جنس قرار گرفته است که همگی بر روی یک زیر لایه دی الکتریک قرار دارند. برای بررسی تغییرات بسامد نمونه (آب و گلوکز) از نمودار عبور استفاده می‌کنیم. محاسبات و شبیه سازی ها نشانگر آن است که آشکارساز پیشنهاد شده دارای حساسیت و شاخص بهبود بالایی است.

واژه های کلیدی: *تراهرتز، آشکارساز زیستی، فراماده، شاخص بهبود، حساسیت، عبور.*

Design and simulation of a THz metamaterial biosensor for the water and glucose solution

Askari, Mehdi[1]; Shokrgozar, Fateme[2]; Pakarzadeh, Hassan[2]

[1] Department of Physics, Salman Farsi University, Kazerun
[2] Department of Physics, Shiraz University of Technology, Shiraz

Abstract

Due to the absence of a destructive effect of terahertz radiation on biological tissues and cells, this frequency range is highly appropriate for sensing biomolecules. In this paper, using a novel metamaterial structure, we have proposed a biosensor with a good performance in terahertz frequency range. Each unit cell of the sensor includes a metallic cylinder, which is located at the center of two intersecting bars of the same material, all deposited on a dielectric substrate. We apply transmission diagram to study resonance frequency shifts of samples (water and glucose). Our calculations and simulations show that the proposed sensor exhibits a high sensitivity and figure of merit.

PACS No. 40

مقدمه

در طیف امواج الکترومغناطیسی، به طور تقریبی، به محدوده بسامدی بین $0/1THz$ تا $10THz$، ناحیه تراهرتز گفته می شود. از آن جا که طیف ارتعاشی بسیاری از مولکول‌های بزرگ مانند پروتئین‌ها و سلول‌های سرطانی در این بخش از طیف قرار گرفته، استفاده از این ناحیه در طراحی آشکارسازهای زیستی بسیار مورد استقبال است [۱].

نتایج گذشته نشان می‌دهد که آشکارسازهای فراماده با انواع کاربردهای زیستی، حساسیت بیشتری نسبت به سایر آشکارسازها دارند [۲]. فراماواد، موادی ترکیبی و مشبک با سلول های واحد زیر طول موج‌اند که می‌توانند دارای خواص نامتعارف الکترومغناطیسی باشند. این مواد در طبیعت وجود ندارند، بطور مصنوعی ساخته می‌شوند و می‌توانند به گونه‌ای طراحی گردند که به کمک آن بتوانیم نوع برهمکنش موج الکترومغناطیسی با ماده را در اختیار

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

خود درآوریم و در نتیجه رفتار و مسیر موج را کنترل نماییم. ماهیت رفتاری این مواد، هم به ترکیب مواد بکار رفته در آن‌ها، و هم به هندسه ساختار آن‌ها بستگی دارد [۳,٤]. آشکارساز وسیله ای است که با تولید سیگنال متناسب با غلظت یک آنالیت در واکنش، واکنشهای بیولوژیکی یا شیمیایی را اندازه گیری می‌کند. در بین دیگر ویژگی‌های آشکارسازها از جمله گزینش‌گرایی، محدوده تشخیص، ثبات، طول عمر، زمان پاسخ و زیست سازگاری به بررسی حساسیت و شاخص مزیت یک آشکارساز می‌پردازیم[۵,٦] . در این مقاله، به کمک روش های شبیه سازی، زیست آشکارسازی را طراحی کرده ایم که در ناحیه تراهرتز دارای حساسیت و شاخص بهبود نسبتا بالایی در مقایسه با سایر کارهای گزارش شده تاکنون است. همچنین تاثیر هندسه ساختار بر عملکرد آن را به تفصیل مورد مطالعه قرار داده ایم.

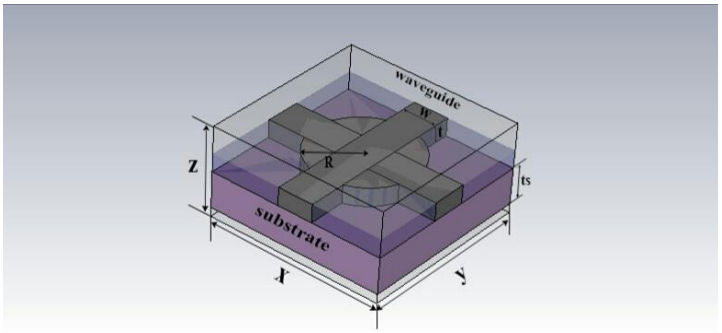
مبانی نظری و شبیه سازی

شکل ۱ یک سلول واحد ساختار آشکارساز طراحی شده را نشان می دهد. هر سلول واحد از دو میله فلزی متقاطع و متعامد از جنس نقره، هر کدام به پهنای $w = 40nm$ و به طول $x = y = 200nm$ تشکیل شده است، که در مرکز این میله ها استوانه ای فلزی از همان جنس به شعاع $R = 60nm$ قرار گرفته است. ضخامت تمامی این قطعات فلزی برابر $t = 20nm$ بوده و بر روی یک زیرلایه دی الکتریک به ضخامت $t_s = 40nm$ قرار گرفته اند. ساختار در راستای x و y دوره ای بوده و در راستای z تک لایه است.

در انجام شبیه سازی ها، با بکارگیری نرم افزار تجاری CST STUDIO SUITE، از روش المان محدود استفاده نموده ایم. برای قطعات فلزی از مدل الکترون آزاد درود به رابطه‌ی

$$\varepsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^{\,2}}{1 + i\gamma\omega} \qquad (1)$$

استفاده کرده ایم که در این رابطه ω_p بسامد پلاسمایی و γ بسامد برخورد است. در شبیه سازی ها مقدار بسامد پلاسمایی و برخورد را به ترتیب برابر $\omega_p = 1/4\times10^{16}\,rad/s$ و $\gamma = 3/2\times10^{13}\,1/s$ در نظر گرفته ایم. همچنین زیر لایه دی الکتریک را از جنس شیشه با گذردهی الکتریکی $\varepsilon = 2/25$ در نظر گرفته ایم.



شکل۱ : طرح یک نمونه آشکارساز زیستی تراهرتز. آشکارساز درون یک موجبر به ضخامت z از جنس خلا قرار دارد، زیرلایه‌ای از جنس شیشه با ضخامت ts ، درون آشکارساز با نقره (دو میله بطور عمودی و افقی با پهنای w، استوانه وسطی به شعاع R و ضخامت t) و ماده نمونه (گلوگز و آب) در اطراف تشکیل‌شده است.

سلول واحد را درون یک موجبر با سطح مقطع $x = 200nm \times y = 200nm$ قرار داده، یک موج الکترومغناطیسی قطبیده تخت را بصورت عمود بر ساختار (در امتداد محور z) به آن می تابانیم که راستای قطبش می تواند محور x و یا محور y باشد. ساختار در محدوده بسامدی مورد مطالعه دارای رفتاری تشدیدی است که بصورت دره ای در طیف عبور و یا قله ای در طیف بازتاب، حول یک بسامد مشخص، ظاهر می شود (شکل ۲). بنابراین، ساختار می تواند به عنوان یک آشکارساز مبتنی بر ضریب شکست مورد استفاده قرار گیرد. برای مطالعه قابلیت ساختار طراحی شده برای کاربردهای آشکارسازی، یک بار محیط اطراف قطعات فلزی را با آب، به ضریب شکست $n = 1/332$، و بار دیگر با محلول ۲۰ درصد گلوکز، به ضریب شکست $n = 1/372$، پر می کنیم و هر بار بسامد تشدید را اندازه می گیریم (شکل ۳). هنگام استفاده از آب، بسامد تشدید برابر $1/742THz$ (معادل $172/2\mu m$) ، و هنگام استفاده از محلول ۲۰ درصد گلوکز، بسامد تشدید برابر $1/735THz$ (معادل $172/9\mu m$) به دست می آید. وجود تشدید در ساختار به علت نوسان‌های پلاسمون‌های سطحی جایگزیده بر روی سطح قطعات فلزی روی می‌دهد که اندازه این فرکانس تشدید به ضریب

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

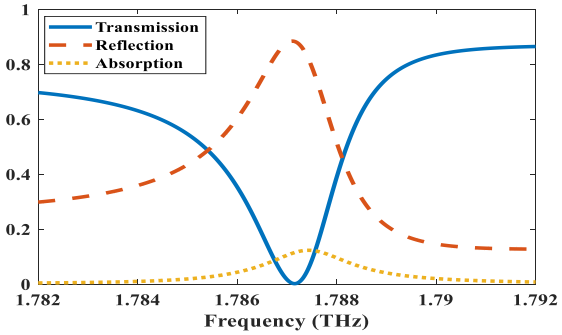
شکست محیط دی الکتریک هم مرز با قطعات فلزی بستگی دارد [۷] . بوضوح پیداست که با تغییر ماده و در نتیجه تغییر ضریب شکست محیط پیرامون قطعات فلزی، بسامد تشدید به مقدار نسبتا قابل توجهی تغییر یافته، طیف تشدیدی کاملا مجزایی در هر حالت مشاهده می شود. برای سنجش قابلیت آشکارسازی آشکارسازهای مبتنی بر ضریب شکست کمیتی به نام *حساسیت* (sensitivity)، به صورت آهنگ تغییر در طول موج (بسامد) تشدید به ازای واحد تغییر در ضریب شکست محیط اطراف تعریف می شود و برحسب $\mu m / RIU$ و یا THz / RIU تعریف می‌شود:

$$sens = \frac{\Delta\lambda}{\Delta n} \qquad (۲)$$

با توجه به اندازه های بسامد های تشدید و ضریب شکست های آب و محلول گلوکز ۲۰ درصد، حساسیت آشکارساز در این حالت برابر با $17/5\ \mu m / RIU$ (معادل $175 GHz / RIU$) به دست می آید. پارامتر مهم دیگر در مورد آشکارسازها، که بیشتر برای مقایسه قابلیت های آشکارسازی آشکارسازهای طراحی شده برای محدوده های بسامدی مختلف بکار می رود، شاخص مزیت (figure of merit) است که به صورت نسبت اندازه حساسیت به پهنای کامل در نصف کمینه تعریف می شود:

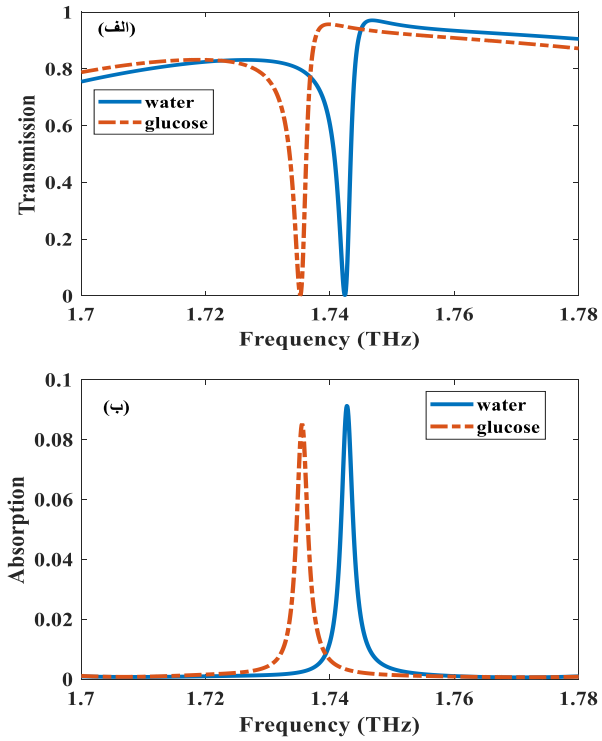
$$FOM = \frac{sens}{FWHM} \qquad (۳)$$

اندازه این کمیت در این حالت برابر $109/37\ 1/RIU$ به دست می آید که مقدار نسبتا بالایی برای آشکارسازهای معرفی شده تاکنون است.



شکل ۲: نمودار عبور، بازتاب و جذب برای حالتی که هوا بین قطعات فلزی قرار گرفته است. در این حالت تشدیدی حول بسامد $1/787 THz$ مشاهده می شود که به صورت دره ای در طیف عبور، و قله ای در طیف بازتاب و جذب آشکار شده است.

در ادامه، تلاش ما این است که با تغییر ابعاد هندسی قسمت های مختلف آشکارساز طراحی شده، علاوه بر مطالعه تاثیر ابعاد و هندسه بر عملکرد آشکارسازی ساختار، بالاترین مقادیر حساسیت و شاخص بهبود را به دست آوریم. نتایج این محاسبات در جدول های ۱ تا ٤ نمایش داده شده اند. در این جدول ها λ_1 طول موج تشدید هنگام استفاده از آب، و λ_2 طول موج تشدید هنگام استفاده از محلول ۲۰ درصد گلوکز است.



شکل۳: نمودار طیف عبور (الف)، و جذب (ب)، در دو حالت. هنگام استفاده از آب بسامد تشدید برابر با $1/742 THz$ و هنگام استفاده از محلول ۲۰ درصد گلوکز، بسامد تشدید برابر $1/735 THz$ به دست می آید.

ابتدا با تغییر ضخامت لایه های فلزی شروع می کنیم. بدون تغییر سایر ابعاد ساختار، ذکر شده در ابتدای این بخش، به ازای چهار ضخامت مختلف $10nm$، $20nm$، $30nm$، و $40nm$، طول موج های تشدید را در دو حالت آب و محلول ۲۰ درصد گلوکز اندازه گیری کرده و به کمک نمودارهای طیف عبور، حساسیت و شاخص بهبود را محاسبه می کنیم. نتایج محاسبات در جدول ۱ نشان داده شده اند. با افزایش ضخامت قطعات، حساسیت و

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

شاخص مزیت آشکارساز افزایش می یابد. این نتیجه از آن جهت که با افزایش ضخامت، سطح تماس آشکارساز با نمونه مورد نظر برای آشکارسازی افزایش یافته و به نوبه خود منجر به افزایش حساسیت آشکارساز می شود قابل پیش بینی بود. در مرحله بعد با در نظر گرفتن مقدار بهینه $40nm$ برای ضخامت قطعات فلزی، و ثابت نگه داشتن سایر پارامترها، پهنای نوارهای فلزی را تغییر داده و مراحل قبل را برای محاسبه حساسیت و شاخص بهبود تکرار می کنیم. نتایج در جدول ۲ ارائه شده اند. جدول های ۳ و ٤ به ترتیب نتایج محاسبات مشابهی را برای شعاع استوانه مرکزی و ضخامت زیرلایه دی الکتریک نشان می دهند. با مقایسه نتایج تمام محاسبات نمایش داده در تمام جدول ها، مشخص می‌گردد که بیشترین مقدار شاخص بهبود آشکارساز برابر $176/991\ RIU$ است که تقریبا به ازای همان ابعاد هندسی معرفی شده در ابتدای مقاله به دست می آید. تنها تفاوت در ضخامت لایه های فلزی است که در این‌حالت برابر ٤٠ نانومتر در نظر گرفته شده است.

جدول۱ : تغییرات ضخامت لایه های فلزی در آشکارساز.

t (nm)	$\lambda_1(\mu m)$	$\lambda_2(\mu m)$	Sensitivity (μm/RIU)	FWHM (μm)	FOM (1/RIU)
۱۰	۱۷۱,٦	۱۷۲,۰	۱۰,۰	۰,۰۹٦	۱۰٤,٦
۲۰	۱۷۲,۲	۱۷۲,۹	۱۷,٥	۰,۱٦۰	۱۰۹,٤
۳۰	۱۷۲,۹	۱۷۳,۸	۲۲,٥	۰,۱۷۳	۱۳۰,۱
٤۰	۱۷۳,۹	۱۷٤,۹	۳۰,۰	۰,۱٦۹	۱۷۷,۰

جدول۲ : تغییرات عرض نوار افقی.

w(μm)	$\lambda_1(\mu m)$	$\lambda_2(\mu m)$	Sensitivity (μm /RIU)	FWHM (μm)	FOM (1/RIU)
۲۰	۱۷۲,٤	۱۷۳,۰	۱٥,۰	۰,۷۷۸	۱۹,۲۸
۳۰	۱۷۲,۰	۱۷۲,۷	۱۷,٥	۰,٤۳۰	٤۰,٦۹
٤۰	۱۷۲,۲	۱۷۲,۹	۱۷,٥	۰,۱٦۰	۱۰۹,۳۷
٥۰	۱۷۲,۲	۱۷۳,٤	۱۷,٥	۰,۲۹٤	٥۹,٥۲
٦۰	۱۷۲,۷	۱۷۳,۷	۲٥,٥	۰,۳۸۹	٦٤,۷٦
۸۰	۱۷۱,۳	۱۷۱,۸	۲٥,٥	٤,۷۰۰	۲,٥٦

جدول۳ : تغییرات شعاع استوانه.

R(μm)	$\lambda_1(\mu m)$	$\lambda_2(\mu m)$	Sensitivity (μm /RIU)	FWHM (μm)	FOM (1/RIU)
۳۰	۱۷۷,۲	۱۷۸,۰	۲۰,۰	۱,٦۷۳	۱۷۳,٥۸
٤۰	۱۷٦,۸	۱۷۷,٦	۲۰,۰	۱,۳۷۱	۱٤٥,۸۷
٥۰	۱۷٥,٤	۱۷٦,۲	۲۰,۰	۰,٦٥۰	۳۰,۷٦
٦۰	۱۷۲,۲	۱۷۲,۹	۱۷,٥	۰,۱٦۰	۱۰۹,۳۷

جدول٤ : تغییرات ضخامت زیرلایه.

$t_s\ (\mu m)$	$\lambda_1(\mu m)$	$\lambda_2(\mu m)$	Sensitivity (μm /RIU)	FWHM (μm)	FOM (1/RIU)
۳۰	۱۷۳,۹	۱۷٤,۱	۱,۰	۹,۷۹	۰,۰۱
٤۰	۱۷۲,۲	۱۷۲,۹	۱۷,٥	۰,۱٦	۱۰۹,۳۷
٦۰	۱۷٦,٤	۱۷۷,۰	۱٥,۰	۱,۰٤	۱٤,٤۲

نتیجه گیری

در این مقاله، به کمک یک ساختار فراماده جدید، طرح ساخت زیست آشکارسازی را پیشنهاد داده‌ایم که در محدوده های بسامدی تراهرتز عمل می نماید و دارای حساسیت و شاخص بهبود نسبتا بالایی است. بالاترین اندازه شاخص بهبود این آشکارساز برابر $176/991\ RIU$ ۱۷۷,۰ است که در میان بالاترین مقادیر گزارش شده برای آشکارسازهای معرفی شده در این محدوده بسامدی است. اگر چه در این مقاله، تنها کاربرد برای آشکارسازی محلول ۲۰ درصد گلوکز مورد مطالعه قرار گرفت، ولی این آشکارساز پتانسیل بکارگیری جهت آشکارسازی دسته وسیعی از سلول ها و مولکول های زیستی، از جمله سلول های سرطانی، غلظت هموگلوبین خون، تعیین گروه خونی و ... را دارد.

مرجع‌ها

[۱] Nagel, M. and Kurz, H; "THz biosensing devices: fundamentals and technology"; *Journal of Physics: Condensed Matter* **18**, no. 18 (2006): S601. I. S.

[۲] Keshavarz, A. and Vafapour, Z; "Water-based terahertz metamaterial for skin cancer detection application"; *IEEE Sensors Journal* **19**, no. 4 (2018): 1519-1524.

[۳] Tao, C., Suyan, L., and Hui, S; "Metamaterials application in sensing"; *Sensors* **12**, no. 3 (2012): 2742-2765.

[٤] Zheludev, N. I.; "Obtaining optical properties on demand"; *Science* **348**, (2015): 973.

[٥] Hong, Zh. , Yang, Ch., Hu, D., Li, D., Hui, X. , Zhang, F., Chen, M. , and Mu, X.; "Terahertz biosensing based on bi-layer metamaterial absorbers toward ultra-high sensitivity and simple fabrication. "; *Applied Physics Letters* **115**, no. 14 (2019): 143507.

[٦] Lee, S.H, Choe, J.H, Kim, C., Bae, S., Kim, J.S., Park, Q.H., and Seo, M.; "Graphene assisted terahertz metamaterials for sensitive bio-sensing."; *Sensors and Actuators B: Chemical* **310** (2020): 127841.

[۷] Saleh, B.E. and Teich, M.C., "*Fundamentals of photonics.* "; 2th edition, john Wiley & sons. (2019).

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

یک جاذب کامل پلاسمونیکی دولایه به عنوان یک زیست آشکارساز

عسکری ،مهدی

بخش فیزیک، دانشگاه سلمان فارسی کازرون، کازرون

چکیده

در این مقاله ساختار پلاسمونیکی جدیدی را معرفی می کنیم که در محدوده فرکانسی فروسرخ نزدیک به عنوان یک جاذب کامل عمل کرده، و می تواند به عنوان یک زیست آشکارساز با حساسیت و شاخص بهبود بالا عمل کند. حساسیت این آشکارساز برابر ۱۱۰۰nm / RIU و شاخص بهبود آن برابر ۴۰/۷۴ ۱/ RIU است. همچنین، به عنوان نمونه ای از کاربردهای این آشکارساز، به مطالعه کاربرد آن برای آشکارسازی غلظت محلول هموگلوبین می‌پردازیم.

واژه های کلیدی: *زیست آشکارساز، فروسرخ نزدیک، جذب کننده کامل، پلاسمونیک.*

A double layered plasmonic perfect absorber as a biosensor

Askari, Mehdi

Department of Physics, Salman Farsi University of Kazerun, Kazerun

Abstract

Abstract

In this paper, we introduce a novel plasmonic structure, which acts as a perfect absorber in the near infrared frequency range, and can operate as a biosensor with a high sensitivity and figure of merit. The sensitivity and the figure of merit of the sensor turn out to be, respectively, 1100 *nm / RIU and* 40.74 *1/ RIU . As an example of the diverse applications of this sensor, we also study its application for detection of hemoglobin solutions concentration.*

***Keywords**: Biosensor, near infrared, perfect absorber, plasmonics.*

PACS No.41,42

مقدمه

نوسان‌های تشدیدی پلاسمون‌های سطحی جایگزیده در ابزارهای پلاسمونیکی، شدیدا به شکل و هندسه ساختار، و همچنین به ویژگی های دی الکتریکی محیط پیرامون آن بستگی دارند [۱]. بنابراین تغییر خصوصیات دی‌الکتریک محیط پیرامون ابزار (تغییر در ضریب شکست) منجر به تغییر در فرکانس تشدید ساختار می شود. از این ویژگی می‌توان در طراحی آشکارسازهایی، معروف به آشکارسازهای مبتنی بر ضریب شکست، استفاده کرد[۲و۳]. بر همین اساس، تاکنون آشکارسازهای مبتنی بر ضریب شکست پلاسمونیکی متنوعی، برای اهداف مختلف معرفی گردیده‌اند[٤و٥]. یکی از مشکلات اصلی در بکارگیری ابزارهای پلاسمونیکی فلزی افت است، که اجتناب ناپذیر بوده و عملکرد آن‌ها را تحت شعاع قرار می‌دهد. اگرچه تاکنون تلاش‌های زیادی، از طریق بهینه سازی هندسه ساختار و یا استفاده از مواد دارای بهره، برای کاهش اف صورت گرفته است[٦]، ولی دسته‌ی دیگری از ساختارهای پلاسمونیکی نیز وجود دارند که در آن‌ها افزایش میزان جذب مطلوب ما است. در این گروه از ساختارها، در یک محدوده باریک یا پهن، جذب کامل ایجاد می‌شود[۷].

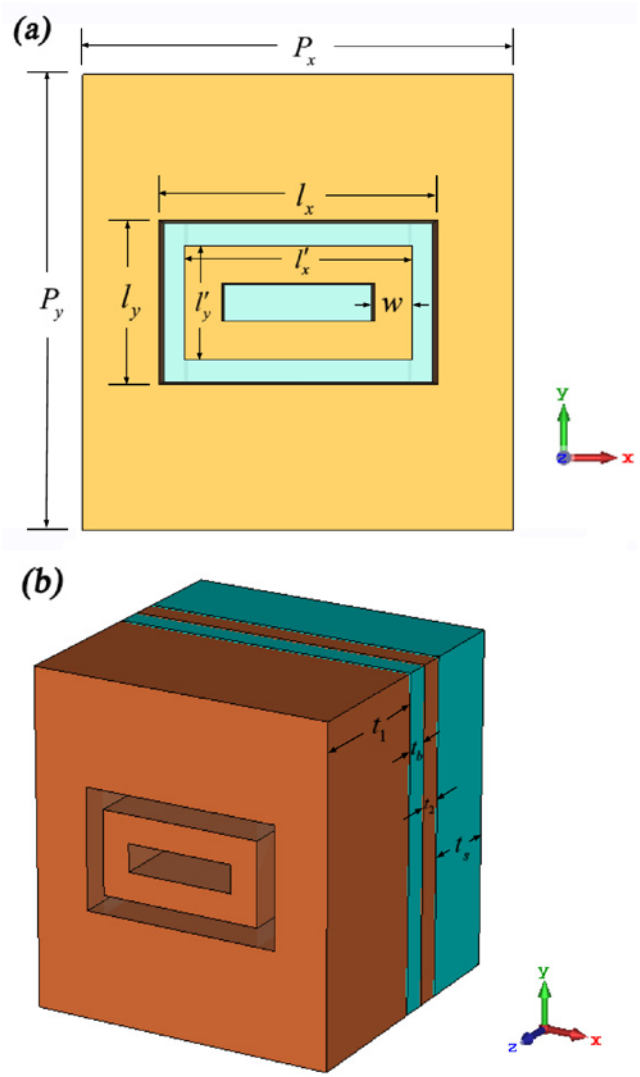
در مقاله حاضر با استفاده یک ساختار پلاسمونیکی جدید، طرحی برای ایجاد جذب کامل در یک محدوده فرکانسی باریک در ناحیه فرکانسی فروسرخ نزدیک ارائه می‌کنیم که می‌تواند برای کاربردهای آشکارسازی مورد استفاده قرار گیرد.

معرفی ساختار، شبیه سازی و بحث

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد

http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

شکل ۱ یک سلول واحد ساختار پیشنهادی را نشان می دهد. هر سلول واحد از دو لایه تشکیل شده است. لایه اول شامل یک حلقه مستطیلی فلزی از جنس نقره است که بطور متقارن درون یک حفره مکعبی، که خود نیز بطور متقارن از مرکز یک مکعب فلزی بزرگتر برداشته شده است، قرار گرفته است. لایه دوم، که بر روی یک زیرلایه دی‌الکتریک قرار گرفته، تنها از یک تیغه فلزی نسبتا نازک و یکنواخت تشکیل شده، و به همراه لایه اول، در دو طرف یک لایه بافر نازک قرار می‌گیرد. ساختار در راستای محورهای x و y دوره ای بوده و در راستای z تک لایه است.



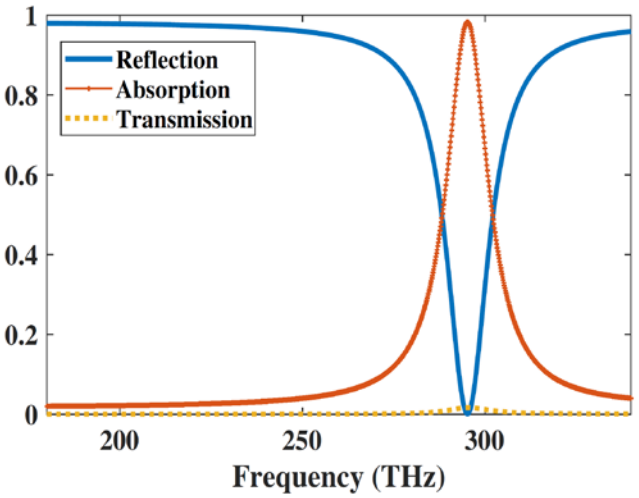
شکل۱: یک سلول واحد ساختار آشکارساز پیشنهادی. در این ساختار $l_x = ۲۳۰nm$، $l_y = ۱۳۰nm$، $l'_x = ۱۸۰nm$، $l'_y = ۹۰nm$، $t_۱ = ۱۷۰nm$، $w = ۳۰nm$، $t_۲ = t_b = ۳۰nm$، $t_s = ۱۰۰nm$، $P_x = ۳۴۰nm$ و $P_y = ۳۶۰nm$.

برای انجام شبیه سازی از نرم افزار تجاری CST استفاده می‌کنیم. برای انجام این‌کار از یک موج الکترومغناطیسی قطبیده تخت، با قطبش در راستای محور x، که در راستای محور z انتشار یافته و عمود بر سطح لایه اول، بر ساختار آن تابیده می‌شود استفاده می کنیم. برای قطعات فلزی مدل درود با رابطه‌ی

$$\varepsilon(\omega) = ۱ - \frac{\omega_p^{۲}}{\omega^{۲} + i\gamma\omega} \qquad (۱)$$

را بکار می‌گیریم، که در این رابطه $\omega_p = ۱/۴\times۱۰^{۱۶}\ rad/s$ فرکانس پلاسمایی، و $\gamma = ۹/۶\times۱۰^{۱۳}۱/s$ ثابت افت است[۷]. در مرحله اول با در نظر گرفتن هوا به عنوان محیط اطراف آشکارساز، طیف های بازتاب، عبور، و جذب را به دست می‌آوریم (شکل ۲). همانگونه که از شکل پیداست رفتاری تشدیدی در $۲۸۳/۴THz$ مشاهده می‌شود که به صورت دره‌ای در طیف بازتاب و قله‌ای در طیف جذب ظاهر می‌شود. در فرکانس تشدید، ضریب جذب ۹۸/۲۳ درصد است که باعث می‌شود ساختار یک جذب کننده‌ی تشدیدی کامل باشد. علت فیزیکی جاذب کامل بودن ساختار در این فرکانس را می‌توان به شرح زیر بیان کرد؛ در فرکانس تشدید، امواج الکترومغناطیسی توسط پلاسمون‌های سطحی جایگزیده ایجاد شده بر روی سطوح داخلی شکاف‌های لایه‌ی اول، از این لایه عبور کرده و وارد فضای بین آن و لایه یکنواخت دوم می‌شوند. پس از آن، توسط لایه دوم بازتابیده شده و با سازوکاری شبیه به جسم سیاه نظری، در فضای بین دو لایه گیر می‌افتند. بدین ترتیب، این بخش از امواج نه در طیف عبور ظاهر می‌شوند و نه در طیف بازتاب، که این به معنای جذب کامل آن‌ها توسط ساختار است. علت عبور ناچیز نشان داده شده در شکل ۲، ضخامت کم در نظر گرفته شده برای لایه دوم است. اگر ضخامت این لایه را از مرتبه ۱۰۰ نانومتر و بیشتر در نظر می‌گرفتیم عبور کمتر و جذب بیشتری ایجاد می‌شد. اندازه‌ی فرکانس تشدید پلاسمون‌های سطحی جایگزیده ایجاد شده روی مرز یک رسانا و یک ماده دی‌الکتریک به ضریب شکست ماده‌ی دی‌الکتریک وابسته است [۹]. از این رو با تغییر محیط دی‌الکتریک و به تبع آن تغییر ضریب شکست محیط اطراف فلز، فرکانس تشدید نیز تغییر می‌کند.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



شکل ۲: نمودار طیف بازتاب، عبور و جذب، برای زمانی که هوا در محیط پیرامون آشکارساز قرار دارد. در محدوده‌ای باریک در اطراف بسامد تشدید $۲۸۳/۴ THz$، ضریب جذب مقداری نزدیک به یک دارد که نشانگر آن است که ساختار یک جذب کننده کامل تشدیدی است.

جدول۱ : طول موج تشدید به ازای ضریب شکست های مختلف. RW نشانگر طول‌موج تشدید، SRW نشانگر تغییر در طول‌موج تشدید، FWHM نشانگر پهنای کامل در نصف کمینه، S نشانگر حساسیت، و FOM نشانگر شاخص بهبود است.

n	RW (nm)	SRW (nm)	FWHM (nm)	S (nm/RIU)	FOM
۱	۱۰۰۷	–	۲۷/۴	–	–
۱/۰۱	۱۰۱۸	۱۱	۲۷	۱۱۰۰	۴۰/۷۴
۱/۰۲	۱۰۲۸	۱۰	۲۸	۱۰۰۰	۳۵/۷۱
۱/۰۳	۱۰۳۷	۹	۲۹	۹۰۰	۳۱/۰۳
۱/۰۴	۱۰۴۶	۹	۲۹	۹۰۰	۳۱/۰۳
۱/۰۵	۱۰۵۵	۹	۲۹	۹۰۰	۳۱/۰۳

حال ضریب شکست محیط پیرامون آشکارساز را از ۱ تا ۱/۰۵، در پله‌های ۰/۰۱، تغییر داده و با رسم طیف جذب در هر حالت، تغییرات در فرکانس تشدید را بررسی می‌کنیم(شکل ۳). همان‌گونه که مشاهده می‌شود، فرکانس تشدید، انتقال قرمزی را، به سمت فرکانس‌های پایین‌تر، تجربه می‌کند. از این ویژگی به همراه کالیبره-کردن مناسب، می‌توان برای طراحی آشکارسازی که ضریب شکست محیط اطراف، و در نتیجه ماهیت آن محیط را از روی فرکانس تشدید تعیین می‌کند، استفاده کرد. دو کمیت مهم و تعیین کننده درباره چنین آشکارسازهایی وجود دارند که معمولا هنگام معرفی یک آشکارساز جدید محاسبه می‌شوند. از آن دو کمیت، یکی حساسیت است، که به صورت میزان تغییر در فرکانس (طول-موج) تشدید به ازای واحد تغییر در ضریب شکست محیط اطراف تعریف می‌شود، و دیگری شاخص بهبود است که به صورت نسبت اندازه حساسیت به اندازه پهنای کامل در نصف کمینه تعریف می‌شود. در جدول ۱ به ازای هر مقدار ضریب شکست، طول‌موج تشدید، پهنای کامل در نصف بیشینه، حساسیت، و شاخص بهبود محاسبه شده را نشان داده‌ایم. پیداست که بیشترین مقدار حساسیت برابر $۱۱۰۰ nm/RIU$، و بیشترین مقدار شاخص بهبود برابر ۴۰/۷۴ محاسبه شده است.

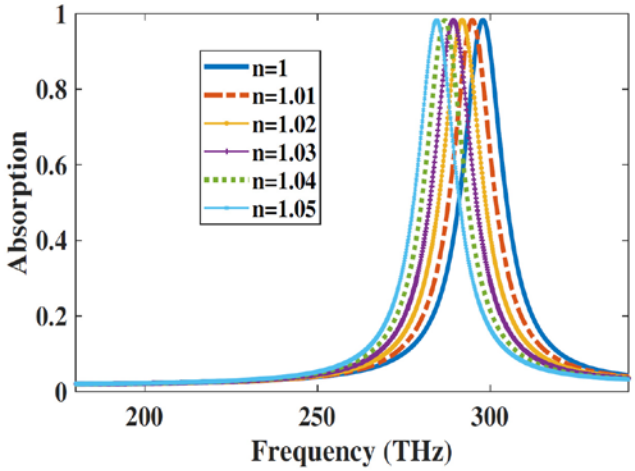
حال به بررسی کاربرد این آشکارساز در آشکارسازی غلظت محلول هموگلوبین می‌پردازیم. برای این‌کار، چهار غلظت متفاوت این محلول برابر $۶۵ g/l$، $۸۷ g/l$، $۱۷۳ g/l$، و $۲۶۰ g/l$ را در نظر می‌گیریم. ضرایب شکست برای این محلول‌ها را می‌توان توسط رابطه *سلمایر*[۱] مشخص کرد[۱۰]:

$$n^2(\lambda) = 1 + \frac{a_1\lambda^2}{\lambda^2 - b_1} + \frac{a_2\lambda^2}{\lambda^2 - b_2} \qquad (۳)$$

که در این رابطه λ طول موج، و a_1، a_2، b_1 و b_2 ثابت‌هایی هستند که به‌صورت تجربی تعیین می‌شوند. برای محلول‌های هموگلوبین با غلظت‌های ذکر شده، این ثابت‌ها با مقادیر مشخص شده در جدول ۲ داده می‌شوند[۱۱]. شکل ٤، طیف جذب هنگامی‌که محلول‌ها با غلظت‌های مختلف در مجاورت آشکارساز قرار می‌گیرند را نشان می‌دهد. همان‌گونه که پیداست، فرکانس‌های تشدید برای غلظت‌های مختلف کاملا قابل تفکیک‌اند، که این نشان از قابلیت آشکارساز برای آشکارسازی غلظت‌های مختلف محلول هموگلوبین دارد.

[۱] Sellmeier formula

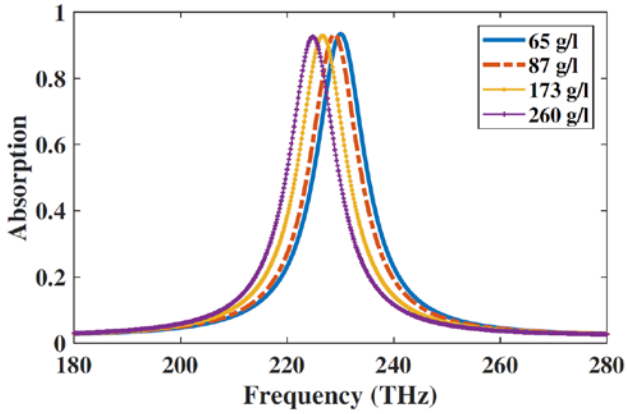
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



شکل ۳: نحوه تغییرات بسامد تشدید با تغییر ضریب شکست محیط پیرامون آشکارساز. همانگونه که مشاهده می‌شود، با تغییر ضریب شکست محیط، بسامد تشدید کم می‌شود.

جدول ۲: ضرایب رابطه‌ی *سلماير* برای ضریب شکست محلول‌های هموگلوبین با غلظت‌های مختلف.

HB (g/l)	a_1	a_2	$b_1\ (nm^2)$	$b_2 \times 10^7\ (nm^2)$
٦٥	۰/۷۹۰۹۹	۶۸۵/۰۸۲۳۷	۸۳۶۶/۴۵۲۳۹	۴۰۲۴/۳۵
۸۷	۰/۸۰۸۳۵	۴۵۰/۲۴۱۱۹	۹۹۸۳/۶۹۷۴۹	۲۸۴۲/۸۳
۱۷۳	۰/۸۴۵۰۷	۴۰۲/۸۹۸۷۳	۱۱۰۶۵/۳۲۱۱۷	۲۵۴۰/۷۲
۲٦۰	۰/۸۸۸۷۱	۱۹۰/۹۵۳۱۹	۱۰۱۸۷/۱۷۱۶۷	۱۰۳۹/۹۸



شکل ٤: طیف جذب وقتی محلول‌های هموگلوبین با غلظت‌های مختلف در اطراف آشکارساز قرار می‌گیرند. فرکانس‌های جذب برای غلظت‌های مختلف محلول کاملا قابل تفکیک اند.

نتیجه گیری

در این مقاله زیست آشکارسازی پلاسمونیکی را معرفی نمودیم که در محدوده فرکانسی فروسرخ نزدیک دارای حساسیت و شاخص بهبود نسبتا بالایی است. ساختار آشکارساز از دولایه فلزی تشکیل شده و در محدوده فرکانسی باریکی، دارای جذب تشدیدی کاملی است. اساس عملکرد این آشکارساز بر این واقعیت استوار است که با تغییر ضریب شکست محیط اطراف ساختار، فرکانس تشدید نیز تغییر می‌کند. از این رو می‌توان آن‌را در زمره آشکارسازهای مبتنی بر ضریب شکست قرار داد. همچنین کاربرد آشکارساز را برای تعیین غلظت محلول هموگلوبین بررسی کردیم. مشاهده گردید که با تغییر غلظت محلول هموگلوبین، فرکانس تشدید به شکلی قابل تفکیک تغییر می‌یابد، که این نشانگر پتانسیل بالای زیست‌آشکارساز طراحی شده برای تشخیص غلظت محلول‌های هموگلوبین است.

مرجع‌ها

[۱] Stewart et. al.; “Nanostructured plasmonic sensors”; *Chem. Rev.* **108**. No. 2 (2008) 494-521.
[۲] E. Hutter and J. H. Fendler; “Exploitation of localized surface plasmon resonance”; *Adv. Mater.* **16**, No. 19 (2004) 1685-1706.
[۳] Ghosh et. al.; “Solvent and ligand effects on the localized surface plasmon resonance (lspr) of gold colloids ”; *J. Phys. Chem. B.* **108**, No. 37 (2004) 13963-13971.
[٤] M. R. Rakhshani; “Optical refractive index sensor with two plasmonic double-square resonators for simultaneous sensing of human blood groups”; *Photon. Nanostructures: Fundam. Appl.* **30** (2020) 100768.
[٥] A. Farmani; “Three-dimensional FDTD analysis of a nanostructured plasmonic sensor in the near-infrared range”; *J. Opt. Soc. Am. B* **36**, No. 2 (2019) 401-407.
[٦] Askari et. al., “A low loss semi H-shaped negative refractive index metamaterial at 4.725 THz”; *Photonics Nanostructures: Fundam. Appl.* **30** (2018) 78-83.
[۷] Landy et. al., “Perfect metamaterial absorber”; *Phys. Rev. Lett.* **100** (2008) 207402.
[۸] Tassin et. al., “A comparison of graphene, superconductors and metals as conductors for metamaterials and plasmonics”; *Nat. Photon.* **6**, (2012) 259.
[۹] B. E. A. Saleh, M. C. Teich, “Fundamentals of Photonics, 3d eddition”; John Wiely Co. (2019).
[۱۰] J. Singh, “*Optical properties of condensed matter and applications*”; John Wiely Co. (2006).
[۱۱] E. N. Lazareva and V. V. Tuchin, “Measurement of refractive index of hemoglobin in the visible/NIR spectral range”; *J. Biomed. Opt.* **23** (2018) 035004.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مقایسه نمودار جرم-شعاع قرص‌های پیرادوتایی در حضور بادهای تبخیر نوری با داده‌های رصدی

قریشی، سیده معصومه[۱و۲] شادمهری، محسن[۱] علیپور، نجمه[۱]

[۱] گروه فیزیک، دانشگاه گلستان،گرگان

[۲] مرکز تحقیقات نجوم و اخترفیزیک مراغه، مراغه

چکیده

گمان می‌رود که خواص قرص‌های پیش‌سیاره‌ای (PPDها) بشدت تحت تأثیر مکانیسم‌هایی تهی‌سازی ماده هستند؛ همچون بادهای تبخیر نوری ناشی از تابش ستاره مرکزی و یا منابع خارجی. اگرچه تمرکز بیشتر کارهای پیشین روی نقش بادها بر روی PPDهایی حول یک ستاره منفرد بوده، ما می‌خواهیم تحول شعاع و جرم قرص‌های پیرادوتایی را در حضور بادهای تبخیر نوری ناشی از تابش فرابنفش دور منابع خارجی مورد بررسی قرار دهیم. ما دریافتیم که اتلاف جرم توسط باد تبخیر نوری مانع از رشد شعاع قرص خواهد شد و شعاع قرص با گذشت زمان بشدت کاهش می‌یابد. مقایسه نتایج ما با قرص‌های پیرادوتایی رصد شده حاکی از آن است که حضور بادهایی با شدت‌های متوسط در این قرص‌ها محتمل‌تر است و محدوده مناسب برای پارامتر وشکسانی می‌تواند بین یک صدم تا یک دهم باشد.

واژه های کلیدی: *قرص‌های پیش‌سیاره‌ای، قرص پیرادوتایی، گشتاور دوتایی، باد تبخیر نوری.*

A Comparison of Mass-Radius Profiles of Circumbinary Discs Including Photoevaporative Winds with Observational Data

Ghoreyshi, Sayyedeh Masoumeh [1,2], Shadmehri, Mohsen[1] Alipour, Najmeh[1]

[1] Department of Physics, Faculty of Sciences, Golestan University, Gorgan

[2] Research Institute for Astronomy and Astrophysics of Maragha (RIAAM), Maragha

Abstract

The characteristics of protoplanetary discs (PPDs) are believed to be severely constrained by material-depleting mechanisms, such as photoevaporative winds due to the host star radiation or external radiation sources. Although most previous studies focused on exploring the role of the winds in the exposed PPDs with a single star, we shall investigate the evolution of the radius and the mass of circumbinary PPDs with the photoevaporative winds induced by the external far-ultraviolet radiation field. We find that the growth of disc size is prevented owing to the efficient mass removal by the photoevaporative winds and the disc radius rapidly decreases as time proceeds. A comparison of our results with the observed circumbinary discs indicates that the existence of moderate winds is more likely in circumbinary discs and the appropriate range for the viscosity parameter may be from 0.01 to 0.1.

***Keywords**: Protoplanetary Disc, Circumbinary Disc, Binary Torque, Photoevaporative Wind*

PACS No. 98

مقدمه

بررسی‌ها نشان داده که بیشتر ستاره‌هایی با جرمی نزدیک به خورشید در سیستم‌های دوتایی (و یا حتی چندتایی) شکل می‌گیرند. قرص‌های حول سیستم‌های دوتایی که قرص‌های پیرادوتایی نام دارند، می‌توانند مکان‌های مناسبی برای شکل‌گیری سیارات باشند. رصدهای اخیر مأموریت کپلر، حضور این سیارات را در این قرص‌های پیرادوتایی همچون Kepler-34 و Kepler-35 تأیید کرده است [۱]. قرص‌های پیرادوتایی بعلت گشتاور کشندی ناشی از ستاره دوتایی، دارای ساختار متفاوتی نسبت به قرص‌های

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

حول تک ستاره‌ها هستند. این گشتاور سبب شده تا ناحیه درونی قرص از ماده پاکسازی شده و برافزایش جرم بر مرکز سیستم کاهش پیدا کند و قرص برای مدت زمان طولانی‌تری ماده داشته باشد [۲]. در نتیجه عمر قرص افزایش یافته و انتظار می‌رود که از مقدار نوعی 10 Myr که از طریق رصدها تعیین شده، تجاوز کند. از این‌رو، مکانیسم‌های پراکنده‌سازی ماده همچون باد تبخیر نوری می‌تواند در این نوع از قرص‌ها از اهمیت بالاتری برخوردار باشد [۳]. در این کار قصد داریم تا تحول یک قرص پیرادوتایی را در حضور بادهای تبخیر نوری با منشأ بیرونی مورد بحث قرار دهیم.

معادلات اساسی

برای یک سیستم دوتایی با ستاره‌هایی به جرم‌های M_p و M_s و یک جدایی a_b که صفحه مداری دوتایی، هم‌صفحه با صفحه قرص می‌باشد، معادله تحول چگالی سطحی قرص پیرادوتایی بصورت زیر بیان می‌شود

$$\frac{\partial \Sigma}{\partial t}=\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left[3r^{1/2}\frac{\partial}{\partial r}(\nu\Sigma r^{1/2})-\frac{2\Lambda\Sigma}{\Omega}\right]-\dot{\Sigma}_w \qquad (۱)$$

که در آن سرعت زاویه‌ای $\Omega=(GM_c/r^3)^{1/2}$ بوده و $M_c=M_p+M_s$ مجموع جرم جسم‌های مرکزی می‌باشد. وشکسانی از رابطه $\nu=\alpha c_s^{\,2}/\Omega$ پیروی می‌کند، که در آن سرعت صوت با رابطه $c_s=(k_BT/\mu)^{1/2}$ به دما وابسته می‌شود. همچنین فرض می‌کنیم که دما از رابطه $T=300\mathrm{K}(r/1\mathrm{au})^{-1/2}$ پیروی می‌کند و $\mu=2.1m_H$ است. گشتاور کشندی دوتایی Λ نیز برابر خواهد بود با

$$\Lambda=\mathrm{sgn}(r-a_b)\frac{fq^2GM_c}{2r}\left(\frac{a_b}{\Delta_p}\right)^4 \qquad (۲)$$

که نسبت جرم ستاره همدم به جرم ستاره اصلی را با $q(=M_s/M_p\le 1)$ نشان می‌دهیم. همچنین $f\le 1$ ضریب گشتاور دوتایی بوده و $\Delta_p=\max(H,r-a_b)$ است. توجه داشته باشید زمانی که آهنگ تزریق تکانه زاویه‌ای ویژه توسط دوتایی صفر شود، معادله بالا تحول یک قرص حول تک ستاره را نتیجه می‌دهد. آهنگ اتلاف جرم توسط باد $\dot{\Sigma}_w$ نیز از رابطه زیر بدست می‌آید

$$\dot{\Sigma}_w=\frac{Cn_d\sqrt{k_BT_{ph}\mu}}{4\pi}\left(\frac{r_g}{r}\right)^{3/2}\left(1+\frac{r_g}{r}\right)\exp(-\frac{r_g}{2r}) \qquad (۳)$$

در این رابطه، C ثابتی از مرتبه واحد بوده و n_d که چگالی عددی گاز در مرز بیرونی قرص است، می‌تواند در محدوده $10^3-10^8\,\mathrm{cm}^{-3}$ باشد. شعاع بحرانی r_g بصورت فاصله‌ای تعریف می‌شود که در آنجا سرعت صوت قابل مقایسه با سرعت فرار باشد و T_{ph} دمای گاز در این شعاع بحرانی است. برای حل معادله (۱)، از روش تفاضل متناهی ضمنی[1] با یک شبکه فضایی لگاریتمی با ۲۵۸ سلول استفاده می‌کنیم. مرز درونی r_{in} یک قرص پیرادوتایی وابسته به a_b است. با فرض آنکه مرز درونی پنج برابر جدایی بین ستاره‌های مرکزی باشد، برای یک سیستم دوتایی با جدایی $a_b=0.2\,\mathrm{au}$، $r_{in}=1.0\,\mathrm{au}$ خواهد بود. مرز بیرونی را نیز 20000 au انتخاب می‌کنیم تا مطمئن شویم که پاسخ‌های ما مستقل از مرز بیرونی قرص است. توزیع چگالی اولیه قرص را در بازه بین مرز درونی و شعاع اولیه قرص r_{d0} بصورت $\Sigma(r,0)=\frac{M_{d0}\exp(-r/r_{d0})}{2\pi\left[\exp(-r_{in}/r_{d0})-\mathrm{e}^{-1}\right]r_{d0}r}$ و در دیگر نواحی برابر با صفر در نظر می‌گیریم. همچنین فرض می‌کنیم که جرم اولیه قرص برابر با $M_{d0}=0.1M_c$ و شعاع اولیه آن $r_{d0}=30\,\mathrm{au}$ باشد. برای شرایط مرزی نیز فرض می‌کنیم که $\Sigma(r_{in},t)=0$ و $(\frac{\partial F_J}{\partial \ell})_{r_{out}}=0$ هستند که $F_J=3\pi\nu\Sigma\ell$ شار تکانه زاویه‌ای وشکسان و $\ell=r^2\Omega$ تکاه زاویه‌ای ویژه است.

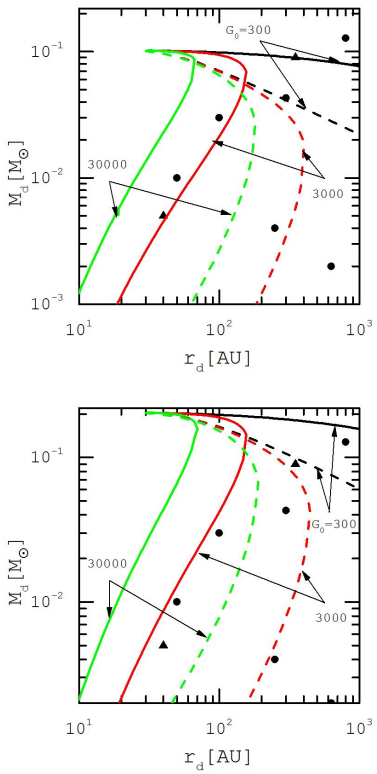
برای پارامترهای ورودی مربوط به سیستم دوتایی، فرض می‌کنیم که پارامترهای پایه برای نسبت جرم دوتایی و ضریب گشتاور دوتایی بترتیب برابر با $q=1.0$ و $f=1.0$ بوده، مگر آنکه خلاف آن بیان گردد. زمانی که سطح شار تابش فرابنفش دور برابر با $G_0=3000$ باشد که بیانگر بادی با شدت متوسط است، مقادیر $r_g=157\,\mathrm{au}$، $T_{ph}=1440\,\mathrm{K}$ و $n_d=10^6\,\mathrm{cm}^{-3}$ را خواهیم داشت و برای بادهایی با شدت‌های بیشتر و یا کمتر، این مقادیر متفاوت خواهند بود [٤]. در اینجا فرض می‌کنیم که شعاع قرص برابر با فاصله شعاعی است که نود و نه درصد جرم قرص در آن محبوس شده است. در شکل‌های زیر، داده‌های رصدی موجود در جدول

[1] Implicit Finite-Difference

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

(۱) را بصورت نقاطی دایره‌ای و مثلثی شکل، بترتیب مربوط به سیستم‌هایی با جرم‌هایی برابر با یک و دو برابر جرم خورشید نشان داده‌ایم.

در شکل (۱)، به بررسی اثر شدت باد روی نمودار جرم-شعاع یک قرص پیرادوتایی می‌پردازیم. توجه داشته باشید که بادهایی با شدت‌های بالاتر دارای G_0 بالاتری خواهند بود. نمودار بالایی و پایینی این شکل بترتیب مربوط به قرص‌هایی با جرم‌هایی برابر با یک و دو جرم خورشیدی است. با کاهش شدت باد، قرص شعاع بالاتری خواهد داشت و می‌تواند تا چندین هزار au گسترش پیدا کند. ولی حضور بادهای ضعیف سبب می‌شود تا روند کاهشی جرم قرص چشمگیر نباشد. بادهای بسیار شدید نیز شعاع‌های بسیار کوچکی را برای پارامترهای وشکسانی بالاتر ایجاد می‌کند که در توافق خوبی با رصدها نخواهد داشت. ولی می‌توانیم ببینیم که



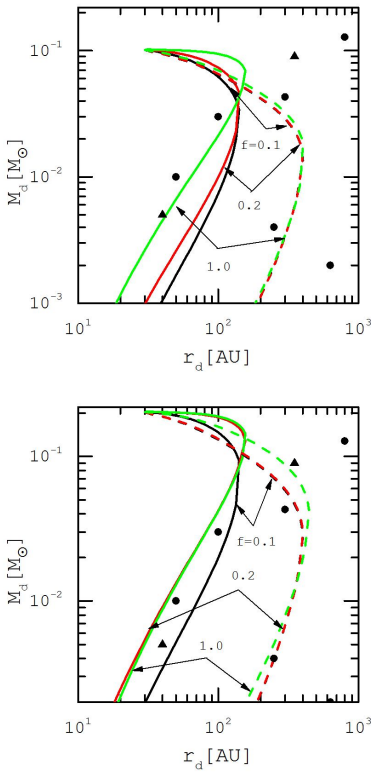
شکل۱ : اثر G_0 روی نمودار جرم-شعاع قرص پیرادوتایی برای $\alpha = 0.01$ (منحنی‌های خط پر) و $\alpha = 0.1$ (منحنی‌های نقطه چین) به ازای $q = f = 1.0$. نمودار بالا برای قرصی با M_c=1.0 $M_\odot$ و نمودار پایین برای قرصی با M_c=2.0 $M_\odot$ می‌باشد.

جدول۱ : داده‌های رصدی مربوط به جرم و شعاع قرص‌های پیرادوتایی

نام قرص	r_d [au]	M_d [$M_\odot$]
AK Sco	٤٠	۰/۰۰۵
DQ Tau	٥٠	۰/۰۱
FS Tau A	٦٣٠	۰/۰۰۲
GG Tau A	٨٠٠	۰/۱۲۸
HH 30	٢٥٠	۰/۰۰٤
L1165-SMM1	١٠٠	۰/۰۳
L1551 NE	٣٠٠	۰/۰٤۳
V4046 Sgr	٣٥٠	۰/۰۹

نتایج ما برای بادهایی با شدت متوسط توافق بهتری با داده‌های رصدی دارد.

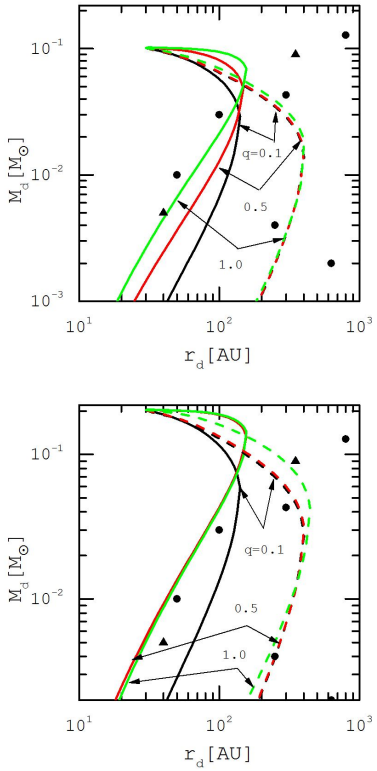
در شکل (۲)، به بررسی اثر ضریب گشتاور دوتایی روی نمودار



شکل۲ : اثر f روی نمودار جرم-شعاع قرص پیرادوتایی برای $\alpha = 0.01$ (منحنی‌های خط پر) و $\alpha = 0.1$ (منحنی‌های نقطه چین) به ازای $q = 1.0$ و G_0=3000. نمودار بالا برای قرصی با M_c=1.0 $M_\odot$ و نمودار پایین برای قرصی با M_c=2.0 $M_\odot$ می‌باشد.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

جرم–شعاع یک قرص پیرادوتایی برای بادهایی با شدت متوسط می‌پردازیم. تغییر مقدار f از یک صدم تا یک در یک قرص می‌تواند منجر به شعاع بالاتری شود، ولی تغییرات موجود در نمودار جرم–شعاع بخصوص برای پارامترهای وشکسانی کوچکتر، قابل صرفنظر کردن است. زمانی که جرم ستاره‌های مرکزی دو برابر جرم خورشید باشد، این تغییرات حتی کمتر خواهد بود.



شکل۳ : اثر q روی نمودار جرم–شعاع قرص پیرادوتایی برای $\alpha = 0.01$ (منحنی‌های خط پر) و $\alpha = 0.1$ (منحنی‌های نقطه چین) به ازای $f = 1.0$ و G_0=3000. نمودار بالا برای قرصی با M_c=1.0 $M_\odot$ و نمودار پایین برای قرصی با M_c=2.0 $M_\odot$ می‌باشد.

اثرات مربوط به پارامتر نسبت جرم دوتایی q را در شکل (۳) مورد بررسی قرار داده‌ایم. در این شکل، بادی با شدت متوسط در نظر گرفتیم و فرض می‌کنیم که ضریب گشتاور دوتایی برابر با یک می‌باشد. اثرات ناشی از تغییرات نسبت جرم دوتایی مشابه پارامتر ضریب گشتاور دوتایی است. کمینه مقدار شعاع با تغییرات نسبت جرم دوتایی، در حدود 10 au است، اما شعاع قرص در محدوده وشکسانی انتخاب شده می‌تواند تا 400 au گسترش یابد.

نتیجه گیری

در این کار به مطالعه قرص‌های پیرادوتایی در حضور باد تبخیر نوری ناشی از ستاره‌های اطراف قرص پرداختیم و تحول نمودار جرم–شعاع قرص را مورد بررسی قرار دادیم. دریافتیم که شعاع قرص‌های پیرادوتایی در غیاب باد تبخیر نوری و یا در حضور بادهای ضعیف، بسیار بیشتر از قرص‌های رصد شده خواهد بود. از سوی دیگر ، روند کاهشی جرم قرص‌های پیرادوتایی در حضور بادهای ضعیف، بسیار کند بوده و نمی‌تواند سازگار با داده‌های رصدی باشد. اما حضور بادهای با شدت متوسط سبب می‌شود که بیشینه شعاع قرص‌های پیرادوتایی از مرتبه چند صد au باشد که می‌تواند سازگاری بسیار بهتری با رصدها داشته باشد. همچنین به بررسی اثر پارامترهای مربوط به گشتاور دوتایی روی نمودارهای جرم–شعاع پرداختیم؛ کمیت‌هایی همچون جرم کل دوتایی، نسبت جرم دوتایی و ضریب گشتاور دوتایی. جرم کل دوتایی نمی‌تواند روی محدوده شعاع قرص‌های دوتایی اثرات قابل توجهی داشته باشد. نتایج ما نشان داد که برای محدوده انتخابی نسبت جرم دوتایی و ضریب گشتاور دوتایی، شعاع قرص در محدوده بین 10-400 au می‌باشد. در حد پایین پارامتر وشکسانی (مثلا برای $\alpha = 0.01$)، تغییرات موجود در نسبت جرم دوتایی و همینطور ضریب گشتاور دوتایی قابل صرفنظر کردن بوده و نمودارهای جرم–شعاع برای مقادیر متفاوت این پارامترهای دوتایی، تقریبا بر هم منطبق می‌باشند.

مرجع‌ها

[۱] W. F. Welsh, et al.; "*Transiting circumbinary planets Kepler-34 b and Kepler-35 b*"; *Nature* **481**, (2012) 475-479.

[۲] D. Vartanyan, J. A. Garmilla, and R. R. Rafikov; "*Tatooine Nurseries: Structure and Evolution of Circumbinary Protoplanetary Disks*"; *ApJ* **816**, (2016) 94.

[۳] R. Alexander; "*The Dispersal of Protoplanetary Disks around Binary Stars*"; *ApJ* **757**, (2012) 29.

[٤] F. C. Adams, et al.; "*Photoevaporation of Circumstellar Disks Due to External Far-Ultraviolet Radiation in Stellar Aggregates*"; *ApJ* **611**, (2004) 360-379

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

پراش باریکه‌ی گوسی از توری شعاعی دامنه‌ای سینوسی

راضیه عزیزخانی، داود حبری و سیف‌اله رسولی

دانشکده فیزیک، دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه، زنجان

چکیده

اخیرا در دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان، جواب‌های جدیدی برای معادله موج پیش‌بینی و خانواده‌ی جدید باریکه‌ها که "باریکه‌های ترکیبی بسل-گونه مرتبه نیمه‌صحیح" نامیده می‌شوند معرفی شده است که شامل باریکه‌های فرش شعاعی نیز می‌شوند. باریکه‌های فرش تالبوت یا باریکه‌های فرش شعاعی در پراش نور تخت از روزنه‌هایی با ساختار شعاعی ایجاد می‌شوند. در این مقاله به دو روش نظری و شبیه‌سازی انتشار، پراش میدان نزدیک و دور باریکه‌ی گوسی از توری شعاعی دامنه‌ای با نمایه سینوسی در مختصات قطبی بررسی می‌شود. نشان داده می‌شود که در پراش میدان دور، شدت بیشینه اصلی روی محور نوری نمایان می‌شود. ما این پدیده را جریان معکوس انرژی نوری در مقطع عرضی می‌نامیم.

واژه‌های کلیدی: پراش، توری‌های شعاعی، باریکه گوسی

Diffraction of a Gaussian beam from an amplitude sinusoidal radial grating

Razie Azizkhani, Davud Hebri, and Saifollah Rasouli

Institute for Advanced Studies in Basic Sciences (IASBS), Zanjan, Iran

Abstract

Recently, a new solution for wave equation predicted and a new family of beams called "Combined half-integer Bessel-like beams" has been introduced that they also include Radial Carpet Beams**.** Radial carpet beams are created in the diffraction of a plan wave from an apertures with radial structure. In this paper, with theoretical work and simulation, near- and far-field diffractions of a Gaussian beam from an amplitude sinusoidal radial grating in the polar coordinates are investigated. It is shown that, under propagation at the far field a main maximum intensity appears on the optical axis. We call this phenomenon as reverse-flow of light energy at the transverse plane.

Keywords: diffraction, radial gratings, Gaussian beam

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مقدمه

توزیع دامنه نور پراشیده از یک روزنه دلخواه در میدان دور برابر با تبدیل فوریه تابع عبور روزنه است بنحوی که توزیع زاویه‌ای طرح پراش میدان دور، از دید ناظر روی روزنه، شکل ناوردایی به خود می‌گیرد اما توزیع دامنه نور پراشیده در میدان نزدیک به شدت وابسته به طول مسیر است. به این ترتیب، طرح پراش نور از توری‌های متداول که دارای خطوط موازی هم هستند در میدان دور، ساختار ثابتی بخود می‌گیرد که معادل طیف فضایی یا تبدیل فوریه دوبعدی ساختار توری است. برای نوع خاصی از توری‌ها طرح پراش در کل فضا شامل میدان نزدیک و میدان دور شکل ناوردایی دارد. این توری‌ها ساختار دوره‌ای در راستای سمتی در دستگاه قطبی دارند و به توری‌های شعاعی معروف‌اند. در پراش نور تخت از این توری‌ها، طرح‌های پراش شکل ناوردایی در انتشار دارند که به باریکه‌های فرش شعاعی موسومند [۲-۱].

در این مقاله به دو روش نظری و شبیه‌سازی انتشار پراش باریکه‌ی گوسی از توری شعاعی دامنه‌ای با نمایه سینوسی در مختصات قطبی بررسی می‌شود. نشان داده می‌شود که در پراش میدان دور شدت بیشینه اصلی روی محور نوری نمایان می‌شود که برای تعداد پره‌های بیش از هفت دارای شکل گوسی باریکهٔ فرودی بازیافت می‌شود.

انتشار باریکهٔ گوسی

دامنهٔ مختلط یک باریکه گوسی را در $z = 0$ یا کمر باریکه می‌توان به شکل زیر نوشت:

$$\psi_G(r,0) = exp\left[-\left(\frac{r}{W_0}\right)^2\right], \qquad (۱)$$

که در آن W_0 شعاع باریکه در کمر باریکه$(z = 0)$ است. دامنهٔ مختلط این باریکهٔ گوسی در یک z دلخواه به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$\psi_G(r,z) = \frac{W_0}{W(z)} e^{-\left(\frac{r}{W(z)}\right)^2} e^{i\left(kz+\frac{kr^2}{2R(z)}-\varsigma(z)\right)} \qquad (۲)$$

که در آن

$$W(z) = W_0\sqrt{1+\left(\frac{z}{z_0}\right)^2}, \qquad (۳)$$

$$R(z) = z\left[1+\left(\frac{z}{z_0}\right)^2\right], \qquad (۴)$$

$$\varsigma(z) = tan^{-1}\left(\frac{z}{z_0}\right), \qquad (۵)$$

که در آنها $z_0 = \frac{\pi W_0^2}{\lambda}$ طول رایلی، λ طول موج باریکه نوری و $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ عدد موج است. در اینجا انتشار باریکهٔ گوسی در ناحیهٔ دور $(z \gg z_0)$ را بررسی می‌کنیم. در این ناحیه متغیرهای تعریف شده با روابط ۳-۵ به صورت زیر تقریب زده می‌شوند: $W(z) \approx W_0\frac{z}{z_0}$ ، $R(z) \approx z$ و $\varsigma(z) \approx \frac{\pi}{2}$. با اعمال این تقریب‌ها، معادلهٔ ۲ برای ناحیهٔ دور به صورت زیر در می‌آید:

$$\psi_G(z \gg z_0) = C' e^{-\mathcal{R}'^2}, \qquad (۶)$$

که در آن

$$\mathcal{R}' = \frac{\pi W_0}{\lambda z} r = \frac{z_0}{z}\left(\frac{r}{W_0}\right), \qquad (۷)$$

که یک پارامتر حقیقی بدون بعد است و

$$C' = \frac{z_0}{iz} e^{ik(z+r^2/2z)} = \frac{z_0}{iz} e^{i\left(kz+\frac{z}{z_0}\mathcal{R}'^2\right)}. \qquad (۸)$$

پراش باریکه‌ی گوسی از ساختارهای شعاعی

اکنون پراش میدان نزدیک و دور باریکه‌ی گوسی از ساختارهای شعاعی بررسی می‌کنیم. فرض کنیم یک باریکهٔ گوسی با دامنهٔ مختلط $\psi_G(r,0)$ به یک ساختار شعاعی با تابع عبور:

$$t(\theta) = t_0 + \sum_{n=1}^{+\infty} t_n \cos(n\theta), \qquad (۹)$$

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

تابیده می‌شود. دامنه مختلط باریکهٔ پراشیده در فاصلهٔ z بعد از ساختار به صورت زیر نوشته می‌شود[۴].

$$\psi(r,\theta,z) = Ce^{-\mathcal{R}^2} \times \qquad (۱۰)$$

$$\left\{t_0 + \frac{e^{\mathcal{R}^2/2}}{\mathcal{R}}\sum_{n=1}^{\infty}(-i)^n \Gamma_n t_n M_{\frac{n}{2},\frac{1}{2}}(\mathcal{R}^2)\cos(n\theta)\right\}$$

که در آن M تابع ویتاکر را نشان می‌دهد و $\mathcal{R}$ یک پارامتر مختلط بدون بعد است که به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\mathcal{R} = \frac{z_0/z}{\sqrt{1-i(z_0/z)}}\left(\frac{r}{W_0}\right) \qquad (۱۱)$$

و ضریب C به صورت زیر است:

$$C = \frac{exp[ik(z+r^2/2z)]}{1+i(z/z_0)} \qquad (۱۲)$$

و همچنین

$$\Gamma_n = \frac{\Gamma\left(\frac{n+2}{2}\right)}{\Gamma(n+1)} \qquad (۱۳)$$

که درآن Γ تابع گاما را نشان می‌دهد برای ناحیهٔ میدان دور پارامترهای $\mathcal{R}$ و C به پارامترهای $\mathcal{R}'$ و C' تعریف شده با رابطه‌های ۷ و ۸ ساده می‌شوند. بنابراین با جایگزین کردن $\mathcal{R}'$ و C' به جای $\mathcal{R}$ و C در رابطهٔ ۱۰، این رابطه برای ناحیهٔ دور نیز برقرار است.

نتایج تحلیلی

در این‌کار پراش باریکه گوسی از توری شعاعی دامنه‌ای سینوسی را بررسی می‌کنیم. تابع عبور توری شعاعی دامنه-ای سینوسی به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$t(\theta) = \frac{1}{2}[1+\cos(m\theta)], \qquad (۱۵)$$

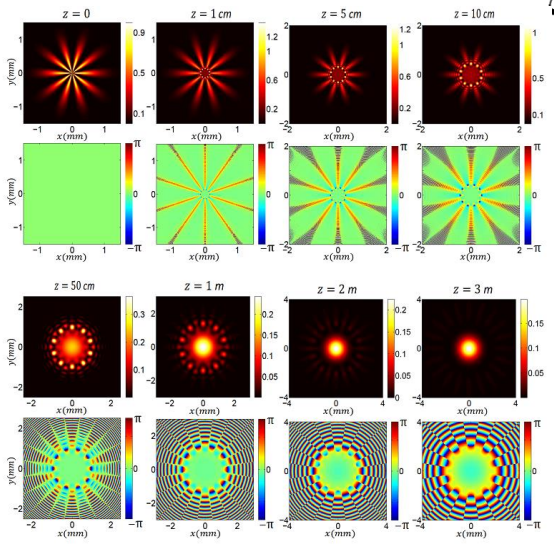
که در آن m تعداد پره‌های توری را مشخص می‌کند. با مقایسه‌ی روابط ۱۵ و ۹ نتیجه می‌گیریم که $t_0 = \frac{1}{2}$ و $t_{n=m} = \frac{1}{2}$ و بقیه ضرایب صفرند. با جایگذاری این ضرایب در رابطه‌ی ۱۰ دامنه‌ی مختلط نور پراشیده بدست می‌آید:

$$\psi(r,\theta,z) = \tfrac{1}{2}Ce^{-\mathcal{R}^2} \times \qquad (۱۶)$$

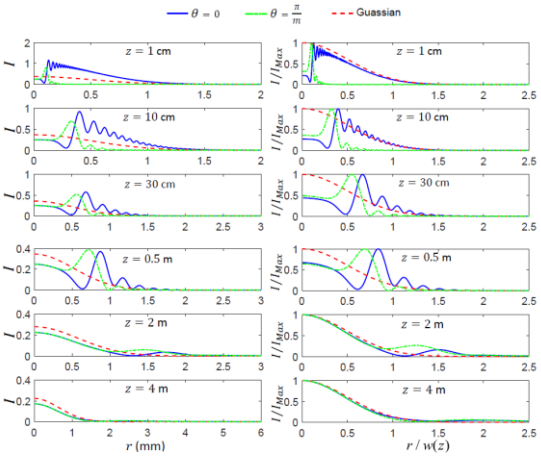
$$\left\{1 + \frac{e^{\mathcal{R}^2/2}}{\mathcal{R}}(-i)^m \Gamma_m M_{\frac{m}{2},\frac{1}{2}}(\mathcal{R}^2)\cos(m\theta)\right\}.$$

شکل ۱ الگوهای پراش یک باریکه‌ی گوسی از ساختارهای شعاعی دامنه‌ای سینوسی در فواصل مختلف انتشار را نشان می‌دهند. در پراش میدان نزدیک، ناحیه مرکزی روشن است که با خروج از ناحیه مرکزی شدت افزایش می‌یابد. در فاصله $z = 10cm$ بیشترین انرژی اپتیکی مربوط به لکه-های روشن کناری است. در فاصله $z = 50cm$ شدت ناحیه مرکزی و لکه‌های کناری برابر می‌شود و در فواصل دورتر بیشینه شدت در ناحیه مرکزی نمایان می‌شود. شکل ۲ نمایه شدت در صفحه عرضی در فواصل انتشار مختلف را نشان می‌دهند. مشاهده می شود در اثر انتشار در پراش میدان دور، شدت بیشینه اصلی روی محور نوری نمایان می‌شود. ما این پدیده را جریان معکوس انرژی نوری در مقطع عرضی می‌نامیم. حال به بررسی پراش میدان دور می‌پردازیم. شکل۳ الگوهای پراش میدان دور از چند ساختار شعاعی دامنه‌ای سینوسی با تعداد پره‌های مختلف را نشان می‌دهد. در اینجا الگوهای شدت بر حسب کمیت بدون بعد $\mathcal{R}'$ رسم شده است. شکل ۴ نمایه شدت در صفحه عرضی را برای الگوهای شکل ۳ نشان می‌دهد. همانطور که دیده می‌شود، با افزایش تعداد پره‌ها الگوی پراش به شکل گوسی در می‌آید. این پدیده با مقایسهٔ رابطه-های ۶ و ۱۶ قابل درک است. برای مقادیر بیشتر از ۷ برای m مقدار Γ_m به صفر نزدیک می‌شود و جمله دوم در رابطهٔ ۱۶ نقش کم‌رنگ‌تری می‌یابد.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



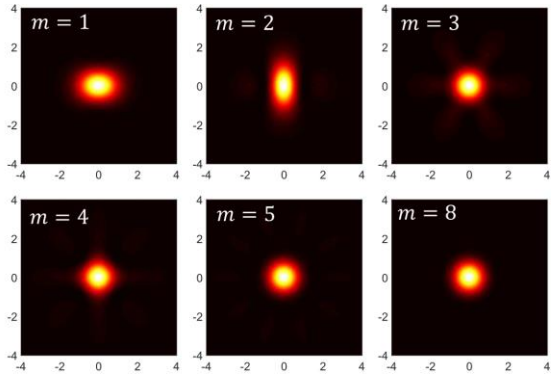
شکل ۱: الگوهای پراش یک باریکه گوسی با $w_0 = 1mm$ از توری شعاعی دامنه‌ای سینوسی با تعداد پره $m = 10$ در فواصل مختلف انتشار. ردیف اول و سوم الگوهای شدت و ردیف دوم و چهارم الگوهای فاز متناظر را نشان می‌دهد.



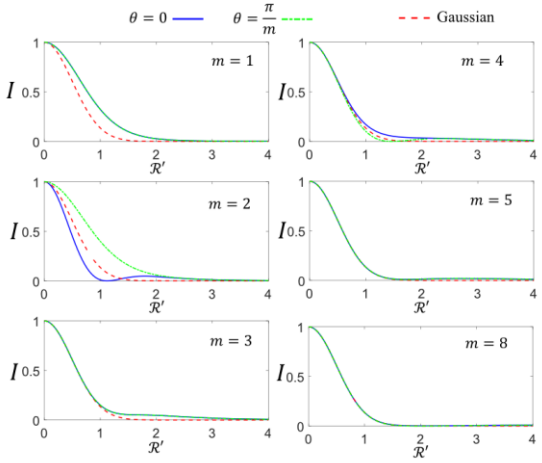
شکل ۲: نمایه شدت در صفحه عرضی در فواصل انتشار مختلف برای طرح های شکل ۱

نتیجه گیری

با بررسی نمایه شدت در صفحه عرضی در فواصل انتشار مختلف، مشاهده می‌شود که در اثر انتشار در پراش میدان دور، شدت بیشینه اصلی روی محور نوری نمایان می‌شود که این پدیده بیان‌گر جریان معکوس انرژی در مقطع عرضی است.



شکل ۳: الگوهای پراش میدان دور یک باریکه گوسی از توری شعاعی دامنه‌ای سینوسی با تعداد پره مختلف.



شکل ۴: نمایه شدت در صفحه عرضی برای طرح های شکل ۳.

مراجع

[1] S. Rasouli, A. M. Khazaei, and D. Hebri, "*Talbot carpet at the transverse plane produced in the diffraction of plane wave from amplitude radial gratings,"* J. Opt. Soc. Am. A Vol. **35**, pp. 55–64, 2018.

[2] S. Rasouli, A. M. Khazaei, and D. Hebri, *"Radial carpet beams: A class of nondiffracting, accelerating, and self-healing beams,"* Physical Review A **97**, 003844 (14 pages), 2018.

[3] D. Hebri, S. Rasouli, and M. Yeganeh, *"Intensity-based measuring of the topological charge alteration by the diffraction of vortex beams from amplitude sinusoidal radial gratings,"* J. Opt. Soc. Am. B Vol. **35**, pp. 724-730, 2018.

[4] R. Azizkhani, D. Hebri, S. Rasouli, *"diffraction of a Gaussain beam from 2D structures separable in the polar coordinates"* ICOP & ICPET.**26** :149-152, 2020.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

فرآیند واسنجی سیستم در آزمایش SURA

مصطفوی الحسینی، مریم[۱]؛ سبوحی، محمد[۱]؛ علیزاده، علی[۱]؛ رستگارزاده، گوهر[۱]

[۱] دانشکده فیزیک، دانشگاه سمنان، سمنان

چکیده

آرایه رادیویی دانشگاه سمنان، با هدف آشکارسازی پرتوهای کیهانی با انرژی بسیار بالا و ویژگیهای آنها با استفاده از تحلیل سیگنال رادیویی راه اندازی شده است. این آرایه به طور پیوسته و خودکار در حال ذخیره داده های مربوط به نامزد های احتمالی پرتو کیهانی است. از مزایای آشکار سازی رادیویی، امکان اندازه گیری مستقل و دقیق انرژی ذره اولیه می باشد. این کار نیازمند واسنجی دقیق تجهیزات مورد استفاده در کل آزمایش به منظور بازسازی مشخصه های پالس های رادیویی رسیده به آرایه و در نتیجه آن تعیین پارامتر های مهم بهمن گسترده هوایی از جمله انرژی اولیه ذرات اولیه می باشد. در این مطالعه، بخشی از فرآیند واسنجی مربوط به بخش های الکترونیکی آزمایش و همچنین شبیه سازی عملکرد آنتن های مورد استفاده در این مرحله مورد بررسی قرار گرفته است.

واژه های کلیدی: آرایه رادیویی دانشگاه سمنان (SURA) ، پرتو های کیهانی ، آشکارسازی رادیویی، واسنجی

System Calibration Process in SURA Experiment

Mostafavi Alhosseini, Maryam[1]; Sabouhi, Mohammad[1]; Alizadeh, Ali[1]; Rastegarzadeh, Gohar[1]

[1] Department of Physics, University of Semnan, Semnan

Abstract

Semnan University Radio Array (SURA) is a radio array with the ultimate goal of detecting Ultra high energy cosmic rays and their properties using radio signal analyses. The array works in a self-trigger mode at the moment and stores possible cosmic ray candidates automatically. One of the advantages of radio detection techniques is the possibility of independent and precise measurement of the primary particle energy scale. This requires fine calibration of the devices used in the entire experiment in order to reconstruct the properties of the incident radio signals upon the array and measure important characteristics of extensive air showers including the primary particle. In this study, part of the calibration process related to the electronics and the expected performance of the current antennas based on their simulations are investigated.

***Keywords**: Semnan University Radio Array (SURA), Cosmic Rays, Radio Detection, Calibration*

PACS No. 90.95

مقدمه

پرتوهای کیهانی با انرژی بسیار بالا در برخورد با جو زمین، با ذرات موجود در جو اندرکنش انجام داده و بهمن های گسترده هوایی را به وجود می آورند. برای بررسی این پدیده، متناسب با انرژی ذره اولیه از اندازه گیری مستقیم و غیر مستقیم استفاده می شود. آشکارسازی در انرژی های بالاتر از $10^{14}eV$ با روش اندازه گیری غیر مستقیم انجام می شود که بر اساس ذرات ثانویه حاصل از اندرکنش ذره اولیه است. این اندرکنش باعث تولید انواع مختلفی از تابش ها همچون چرنکوف و فلورسانس هم می گردد [۱]. میدان مغناطیسی زمین به عنوان اصلی ترین منبع، منجر به انتشار رادیویی پرتو های کیهانی می گردد که در سال ۱۹۶۰ مطرح و در دهه بعد به اثبات رسید [۲] و [۳].

آرایه رادیویی دانشگاه سمنان (SURA)

در حال حاضر سایت آرایه رادیویی دانشگاه سمنان شامل پنج آنتن رادیـویـی (٤ آنتن لوگ پریودیک و یـک آنتن دایپل) اسـت که در

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

پشت بام دانشکده فیزیک دانشگاه سمنان مستقر شده اند [٤].
سیگنال های دریافتی توسط این آنتن ها توسط کابل کواکسیال با کیفیت بالا به منظور تحلیل به گیرنده مرکزی موجود در مرکز آرایه منتقل می شوند. گیرنده مرکزی داده ها را از حالت آنالوگ به دیجیتال تبدیل کرده و در نتیجه تحلیل داده های ثبت شده توسط برنامه ای که توسط تیم SURA توسعه داده شده است، فقط داده هایی که نامزدهای ممکن برای پرتو کیهانی هستند ذخیره شده و قابل بررسی در رایانه آزمایشگاه می باشد. به منظور تقویت سیگنال رادیویی و جلوگیری از تاثیرات ناشی از حضور سیگنال های ناخواسته، هر آنتن به یک تقویت کننده با نویز کم و یک فیلتر عبور دهنده میان گذر مجهز شده است. شماتیک حال حاضر آزمایش SURA و اطلاعات فنی واحد های مورد استفاده در آزمایش به طول مفصل در [٤] مورد بررسی قرار گرفته است.

روش واسنجی[1]

دو روش اصلی برای واسنجی وجود دارد:
الف) روش End to end : در این روش از یک منبع خارجی برای کالیبره کردن سیستم استفاده می شود که این منبع می تواند نجومی یا یک آنتن کالیبره شده باشد. روش کار به این صورت است که توان دریافتی کلی الکترونیک با توان منتقل شده از منبع خارجی مقایسه می شود و در نهایت عملکرد سیستم الکترونیکی به صورت یکباره مورد بررسی قرار می گیرد. این روش در آزمایش های بزرگ مورد استفاده قرار گرفته است اما متاسفانه هزینه بالا و قطعات ویژه مورد نیاز ، امکان انجام این روش توسط تیم SURA را بسیار مشکل نمود.
ب) کالیبراسیون مرحله ای: نحوه کار در این روش به این صورت است که تک تک اجزاء تشکیل دهنده سیستم در آزمایش تا حد امکان کالیبره شده و در نهایت، تاثیر کل الکترونیک مورد استفاده بر روی سیگنال های دریافتی، مورد بررسی قرار می گیرد.

با توجه به قطعات مورد استفاده در آرایش فعلی SURA، این بخش ها عبارتند از: ۱- کابل ها ۲- تقویت کننده سیگنال[2]۳- فیلتر میان گذر[3]٤- مبدل آنالوگ به دیجیتال[4] و ٥) آنتن ها.
در این فرآیند، به منظور تولید پالس رادیویی از یک تولید کننده سیگنال مصنوعی با قابلیت تولید امواج سینوسی از ۱ میکرو هرتز تا ٦٠ مگاهرتز با دامنه متغیر بین ۰ تا ۱۰۰۰ میلی ولت استفاده شده است. همچنین از یک اسیلسکوپ با نرخ نمونه برداری 2GSa/s با بیشینه فرکانس ۳۰۰ مگاهرتز و وضوح عمودی ۸ بیت برای دریافت و ذخیره سیگنال های تولید شده، استفاده شده است.

آزمایشات انجام شده و نتایج به دست آمده

۱-کابل

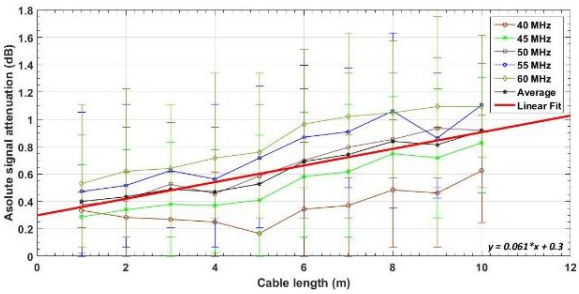
ایستگاه های رادیویی در یک آرایه می توانند به صورت بی سیم یا با سیم با مرکز داده گیری و ذخیره اطلاعات در ارتباط باشند. تقریباً تمام آزمایشهای رادیویی فعلی، نمونه اولیه خود را در مجموعه ای که با استفاده از کابل های کواکسیال به مرکز داده متصل شده بود آغاز کرده و با گسترش آزمایش، از پیکربندی بی سیم استفاده کرده اند. در طرح فعلی آزمایش SURA از حالت سیم کشی استفاده شده و طبق برنامه ریزی در مرحله بعد، با گسترش آرایه و افزایش فواصل، ارتباط بین خوشه های آرایه به صورت بی سیم خواهد بود. در طرح فعلی آزمایش ، حداکثر فاصله هر ایستگاه رادیویی از واحد گیرنده مرکزی که در آن سیگنال های رادیویی از چهار آنتن لوگ پریودیک دریافت و آنالیز می شود ، ۳۰ متر است. این فاصله با دقت اندازه گیری شده تا از طول کابل های یکسان برای همه ایستگاه های رادیویی اطمینان حاصل شود. به منظور حفظ داده های رادیویی در هنگام انتقال، از کابل کواکسیال RG-213 استفاده کردیم. این کابل دارای میزان ضریب تضعیف اسمی حدود 2 dB در ۷۰ مگاهرتز در ۳۰ متر است. ما تصمیم گرفتیم برای بالا بردن دقت کار، این ضریب را برای آزمایش SURA بطور دقیق اندازه گیری کنیم. در

[1] Calibration
[2] Low Noise Amplifier (LNA)
[3] Band Pass Filter
[4] Analog to Digital Converter

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

این آزمایش از طول های مختلف کابل از ۱ تا ۱۰ متر استفاده شده است. پالس های رادیویی تولید شده نیز در محدوده فرکانس ٤٠ تا ٦٠ مگاهرتز با فاصله ۵ مگاهرتز ایجاد شده اند. در نهایت برای سیگنال های رادیویی با دامنه ۵ میلی ولت تا ۲ ولت، ضریب افت کابل برای هر فرکانس و طول اندازه گیری شد. در شکل ۱، نمودار رابطه میان طول کابل و میزان تضعیف سیگنال تولید شده برای فرکانس های مختلف حاصل از نتایج این آزمایش نشان داده شده است.

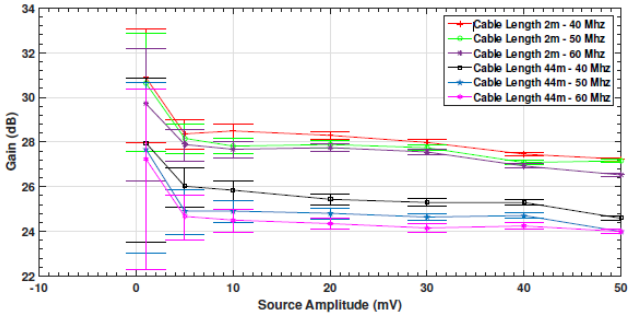
با توجه به طیف خطی فرکانسی پالس های رادیویی پرتو های کیهانی در بازه فرکانسی مورد مطالعه، از یک تابع خطی برای محاسبه میزان تضعیف میانگین در شکل۱ استفاده شده است. معادله حاصل از برازش نمودارهای رسم شده در شکل ۱ نشان می دهد میزان افت سیگنال در ۳۰ متر برای کابل های استفاده شده در آزمایش برابر با 1.83 ± 0.2 dB خواهد بود.



شکل۱ : رابطه میان تضعیف سیگنال های رادیویی و طول کابل مورد استفاده در آزمایش SURA برای فرکانس های مختلف.

۲- تقویت کننده سیگنال

به علت ماهیت سیگنال های رادیویی پرتو های کیهانی که از نظر زمان و دامنه بسیار کوچک هستند، شکار این نوع از انتشار یک چالش دشوار به حساب می آید. به منظور حذف ویژگی های سیگنال های رادیویی در مسیر انتقال از آنتن رادیویی به گیرنده مرکزی از یک تقویت کننده سیگنال بهره برده ایم. این قطعه بطور مستقیم به آنتن متصل شده و با توجه به مشخصات درج شده توسط شرکت سازنده آن، دارای یک ضریب افزایش اسمی ثابت بین 24.17 تا $25.15 \pm 0/03\,dB$ به ازای ولتاژ ۱۲ تا ۱۵ ولت در فرکانس کمتر از ۱۰۰ مگا هرتز می باشد. به منظور اندازه گیری این ضریب، از شرایط ذکر شده برای دو طول متفاوت کابل یعنی ۲ و ٤٤ متر استفاده کردیم. همانگونه که در شکل ۲ مشاهده می شود، برای پالس های رادیویی کم دامنه که موارد مطالعه در آزمایش SURA نیز به شمار می روند، شاهد تقویت قابل ملاحظه ای هستیم. مقدار ضریب تقویت این دستگاه نیز برای طول ٤٤ متر برابر با $25 \pm 1\,dB$ اندازه گیری شده است.



شکل۲ : رابطه میان دامنه سیگنال های رادیویی شده و ضریب تقویت آن توسط واحد تقویت کننده برای دو طول سیم متفاوت ۲ و ٤٤ متر.

۳- فیلتر میان گذر

به منظور از بین بردن انتشار های رادیویی خارج از محدوده مورد مطالعه در آزمایش SURA، به هر آنتن یک فیلتر میان گذر نیز متصل شده است. وظیفه این قطعه حذف فرکانس های خارج از محدوده ٤٤ تا ۷۹ مگاهرتز می باشد. که این محدوده برای آزمایش SURA ایده آل محسوب می شود. عملکرد این واحد در دست بررسی می باشد.

٤- مبدل آنالوگ به دیجیتال

فرآیند تبدیل پالس رادیویی آنالوگ به دیجیتال توسط یک واحد مبدل آنالوگ به دیجیتال که دارای ٤ کانال ١٤ بیتی می باشد انجام می شود. این بخش دارای سرعت نمونه برداری 160 MSPS است که داده های نمونه برداری را همراه با زمان رویداد ذخیره می کند و برای تحلیل به بخش آرایه دریچه ی برنامه پذیر میدانی[5]منتقل می نماید. مراحل کالیبره کردن این واحد در حال انجام می باشد.

[5] Field Programmable Gate Array

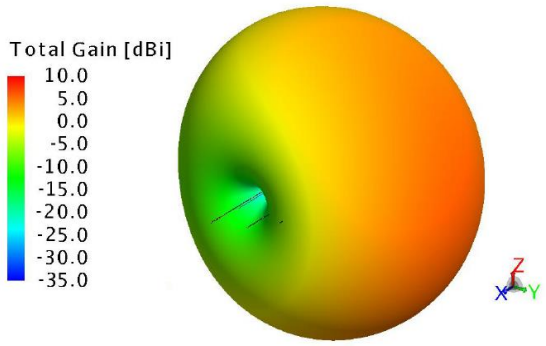
این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد :
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

۵- آنتن

در طرح فعلی آزمایش SURA، از ٤ آنتن لوگ پریودیک بهره برده ایم که به طور اختصاصی برای آزمایشگاه SURA طراحی شده اند. این آنتن ها در محدوده 40 تا 80 MHz حساس هستند. با توجه به اینکه در حال حاضر امکان کالیبراسیون میدانی آنتن ها برای ما مقدور نمی باشد، کالیبراسیون آنتن بر اساس شبیه سازی های رایانه ای انجام شده است.

در نتیجه شبیه سازی های انجام شده امکان بررسی عملکرد مورد انتظار آنتن در فرکانس های مختلف وجود دارد. یکی از مهم ترین پارامترهای یک آنتن رادیویی ، الگوی تابشی در فرکانس های مختلف می باشد. در حال حاضر امکان محاسبه الگوی تابشی آنتن مورد استفاده در آزمایشگاه SURA به طور دقیق و با دقت کم تر از ۱ درجه وجود دارد.

این امر سبب می شود تا بتوان با بهره گیری از مقادیر شبیه سازی شده برای ضریب تقویت آنتن در زوایای سمتی و سرسویی خاص، و با بهره گیری از برنامه توسعه داده شده توسط تیم SURA برای تعیین جهت پالس رسیده به آنتن رادیویی، شدت پالس رادیویی رسیده به آنتن را مورد محاسبه قرار داد و با توجه به مقادیر آن، به بررسی ویژگی های بهمن گسترده هوایی پرداخت. شکل ۳ شبیه سازی سه بعدی الگوی تابشی آنتن رادیویی SURA در فرکانس ٤۰ مگاهرتز را نشان می دهد.



شکل ۳: الگوی تابشی سه بعدی آنتن رادیویی SURA در فرکانس ٤۰ مگاهرتز که به وسیله شبیه سازی رایانه ای ترسیم شده است.

نتیجه گیری

در این پژوهش فرآیند کلی کالیبره کردن آرایه رادیوی دانشگاه سمنان مورد بررسی قرار گرفت. همچنین نتایج حاصل از اقدامات انجام شده برای کالیبره کردن بخشی از الکترونیک مورد استفاده نیز ارائه گردید. میزان تضعیف پالس های رادیویی در کابل های مورد استفاده مطابق با نتایج مورد انتظار بوده و مقدار تضعیف به طور مشخص محاسبه گردید. همچنین ضریب تقویت سیگنال های رادیوی نیز برای فرکانس های مختلف و دو طول سیم متفاوت محاسبه گردید. بخشی از مراحل کالیبره کردن آزمایش SURA هم اکنون در حال انجام است. در نهایت با شبیه سازی دقیق آنتن رادیویی مورد استفاده و با بهره گیری از برنامه توسعه داده شده توسط تیم SURA برای تعیین جهت پالس های رسیده به آرایه، امکان بررسی مشخصات سیگنال های رسیده به آنتن رادیویی به وجود آمده است.

مرجع ها

[۱] Kampert, K., Unger M.: Measurements of the cosmic ray composition with air shower experiments. **Astropart.Phys**. 35,Issue10 ,660(2012)

[۲] Jelley, J. V., et al.: Radio pulses from extensive cosmic-ray air showers. Nature 205 ,Issue 4969, 327(۱۹٦٥)

[۳] Wilson, J.G. , Wouthuysen S.A.: **Progress in Elementary Particles and Cosmic Ray Physics**. Amesterdam(Netherland): North-Holland Publishing Company. 10, 325 (1971)

[٤] Rastegarzadeh, G., and M. Sabouhi. "SURA: Semnan University Radio Array." **Experimental Astronomy** 49.1 (2020): 21-41.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بررسی یک مدل تعمیم یافته گرانشی در چارچوب کیهان شناسی با جمله گاوس-بونه به صورت یک جمله خطی در کنش

قلعه ، امیر

دانشکده فیزیک دانشگاه تفرش، تفرش

چکیده

با استفاده از جمله گاوس- بونه یک مدل تعمیم یافته گرانشی پیشنهاد می شود. ویژگی مدل این است که جمله گاوس-بونه به صورت خطی در کنش وجود دارد. جواب های مدل در حالت پس زمینه و همراه با اختلال مورد بررسی قرار گرفته است.

واژه های کلیدی: *ثابت کیهان شناسی، گرانش تعمیم یافته، جمله گاوس-بونه.*

Study of a modified gravity model in the cosmological context with the Gauss-Bonnet term as the linear term in the action

Ghalee, Amir

Department of Physics, University of Tafresh, Tafresh,

Abstract

By using the Gauss-Bonnet term, we have proposed a modified gravity model. The Gauss-Bonnet term appears as a linear term in the action. Background solutions and metric perturbations have been investigated.

***Keywords**: Cosmological constant, Modified gravity, The Gauss-Bonnet term.*

PACS No.4,13,98

مقدمه

مدل استاندارد کیهان شناسی همراه با جمله ثابت کیها نشناسی، که به مدل ΛCDM معروف است، توصیف خوبی از دینامیک کیهان بعد از دوره تورمی ارائه می کند[1].

دو موضوع باعث می‌شود تلاش‌ها برای ارائه مدل جایگزین ادامه داشته باشد. موضوع اول مسأله قدیمی ثابت کیهان شناسی است [2]و موضوع دوم ناسازگاری بین اندازه‌گیری پارامتر هابل در دره اخیر کیهان شناسی می باشد[3].

در این مقاله-کنفرانس سعی می‌کنیم یک مدل جایگزین برای ΛCDM ارائه دهیم که در آن بدون معرفی ثابت کیهان شناسی به توجیه انبساط شتابدار کیهان بپردازیم. همچنین نتایج این مدل بر ای اختلال اسکالر و امواج گرانشی مورد مطالعه قرار می گیرد.

معرفی مدل و معادلات اصلی

مدل بر مبنای اضافه کردن جمله گاوس-بونه به کنش اینشتین –هیلبرت است. جمله گاوس-بونه یک جمله مشتق کامل است و به صورت زیر است

$$R^2_{GB} \equiv R^2 - 4R^{\alpha\beta}R_{\alpha\beta} + R^{\alpha\beta\gamma\eta}R_{\alpha\beta\gamma\eta} \quad (۱)$$

که در آن R اسکالر ریچی، $R_{\alpha\beta}$ تانسور ریچی و $R^{\alpha\beta\gamma\eta}$ تانسور ریمان است.

جمله گاوس-بونه به تازگی مورد توجه محققین قرار گرفته است[4-5]. پیشنهاد ما برای استفاده از این جمله متفاوت است ومدل پیشنهادی به صورت زیراست [6]

$$S = \int d^4x\sqrt{-g}\left[\frac{M_P^2 R}{2} + \Theta(X)R^2_{GB}\right] \quad (۲)$$

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد

http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

که در آن M_P جرم پلانک و

$$\Theta(X) \equiv f(X) - B\frac{\varphi}{M} \quad (۳)$$

و B یک ثابت بدون بعد است و $X \equiv \frac{-\partial_\mu \varphi \partial^\mu \varphi}{2M^4}$ که M یک ثابت جرمی است و نشانگر مقیاس انرژی می باشد.

به علت ویژگی‌های جمله گاوس-بونه، مدل پیشنهادی تحت انتقال میدان اسکالر به صورت $\varphi \to \varphi + c$ ناوردا است.

متریک مورد استفاده، متریک فریدمان-رابتسون-واکر تخت است که به صورت زیر است

$$ds^2 = -dt^2 + a(t)^2 dx^i dx^j \delta_{ij}$$

که در آن $a = a(t)$ ضریب مقیاس است و پارامتر هابل را به صورت $H = \frac{\dot{a}}{a}$ تعریف می کند.

با وردش نسبت به متریک به معادله زیر می رسیم

$$R_{\mu\nu} - \frac{1}{2}g_{\mu\nu}R = \frac{1}{M_P^2}[4R\nabla_\mu\nabla_\nu\Theta - 4Rg_{\mu\nu}\nabla^2\Theta$$
$$-8R_\nu^\rho\nabla_\rho\nabla_\mu\Theta - 8R_\mu^\rho\nabla_\rho\nabla_\nu\Theta +$$
$$8R_{\mu\nu}\nabla^2\Theta + 8g_{\mu\nu}R^{\alpha\beta}\nabla_\alpha\nabla_\beta\Theta$$
$$+8R_\mu^{\rho\sigma}{}_\nu\nabla_\rho\nabla_\sigma\Theta] + \frac{f_X}{M_{P^2}M^4}R_{GB}^2\nabla_\mu\varphi\nabla_\nu\varphi$$

(۴)

باتوجه به نوع متریک انتخاب شده و تعریف جمله گاوس-بونه، معادله زیر را از مولفه زمانی معدله (٤) بدست می‌آید

$$H^2 = \frac{16H^4}{M_P^2}\left[(1+\frac{\dot{H}}{H^2}) - \frac{\ddot{\varphi}}{H\dot{\varphi}}\right]Xf_X + \frac{8BH^3\dot{\varphi}}{MM_P^2} \quad (۵)$$

معادله حرکت برای میدان اسکالر از وردش کنش نسبت به میدان اسکالر بدست می‌آید که به صورت زیر خواهد شد

$$(3H\dot{\varphi} + \ddot{\varphi})f_X + 2\ddot{\varphi}Xf_{XX} + \dot{\varphi}f_X\frac{\dot{R}_{GB}^2}{R_{GB}^2} = -BM^3 \quad (۶)$$

بررسی معادلات در حالت پس زمینه

ابتدا یک قضیه را بیان و ا اثبات می‌کنیم و اهمیت فیزیکی آنرا شرح خواهیم داد.

قضیه: برای مدل پیشنهادی یک جواب به صورت

$$\ddot{\varphi} = 0,\ \dot{H} = 0,\ 3H_c\dot{\varphi}_c f_X(X_c) = -BM^3, \quad (۷)$$

وجود دارد .این جوب یک جواب پایدار است و تحت اختلال کوچک تغییر نمی کند. برای این جواب داریم

$$\dot{\varphi} = \frac{3MM_P^2}{16BH_c}. \quad (۸)$$

که نشان می‌دهد ارتباطی بین $\dot{\varphi}$ و به فرم تابع $f(X)$ وجود ندارد.

از نظر فیزیکی جواب با پارامتر ثابت هابل معادل ثابت کیهان شناسی است و این نکته که جواب بیان شده پایدار است ما را امیدوار می‌کند تحت برهم کنش های موجود در جهان، این حالت حفظ شود و وابسته نبودن به فرم تابع باعث می‌شود آزادی زیادی در انتخاب تابع داشته باشیم.

اثبات وجود جواب گفته شده بسیار راحت است و کافی است در معادلات (٥)و (٦) قرار دهیم.

برای اثبات پایدار بودن جواب، ابتدا متغییرهای بدون بعد زیر را معرفی می کنیم

$$x \equiv \frac{\dot{\varphi}}{M^2}, y \equiv \frac{H}{M}, z \equiv y', \quad (۹)$$

معادلات (٥) .و (٦) را می توان به صورت زیر بازنویسی کرد

$$\begin{cases} x' = g_1 \\ y' = g_2 \\ z' = g_3 \end{cases}, \quad (۱۰)$$

. که علامت پریم مشتق نسبت به $\tau = Mt$ است و

$$g_1 = xy + \frac{zx}{y} + \frac{B}{f_X} - \frac{M_P^2}{M^2}\frac{1}{8xyf_X},\ g_2 = z, \quad (۱۱)$$

و

$$g_3 = -(\frac{B}{xf_X} + 3y + \frac{g_1(x,y,z)}{x})(z+y^2)$$
$$+(xg_1(x,y,z)\frac{f_X X}{f_X} + \frac{2z}{y})(z+y^2) - 2yz. \quad (۱۲)$$

دستگاه معادلات (۱۱) یک دستگاه خود گردان است و نقاط ثابت آن از قرار دادن دستگاه (۱۱) برابر صفر بدست می آید. این نقاط ثابت به صورت زیر بدست می آیند

$$(3y_c = -\frac{B}{x_C f_X}, Bx_C y_c = \frac{3}{16}\frac{M_P^2}{M^2} \quad (۱۳)$$

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

که همان جواب (۷) است برحسب متغییرهای بدون بعد.

برای بررسی پایداری، اختلالات کوچک حول متغییرها را با δ نمایش می دهیم. از دستگاه (۱۰) معادلات اختلال بصورت زیر بدست می آیند

$$\begin{pmatrix}\delta x'\\ \delta y'\\ \delta z'\end{pmatrix}=\begin{pmatrix} y_c(-1+q) & -x_c & \frac{x_c}{y_c}\\ 0 & 0 & 1\\ \frac{\partial g_3}{\partial x}|_{x=x_c,y=y_c,z=z_c} & -2+\frac{x_c q}{2} & -5y_c-qy_c\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\delta x\\ \delta y\\ \delta z\end{pmatrix}, \quad (14)$$

که $q\equiv\frac{2Xf_{XX}}{f_X}|_{X=X_c}$.

برای بررسی پایداری باید ویژه مقادیر ماتریس را بدست آورد. در نقطه ای که با روابط (۱۳) مشخص می شود، ویژه مقادیر λ در رابطه زیر صدق می کنند.

$$\lambda^3+6y_c\lambda^2+\lambda[7y_c^2+2-q(1-y_c^2)]+ \\ 2y_c(1-y_c^2)+qy_c[(q-3)-(q+3)y_c^2]=0 \quad (15)$$

تا وقتی فرم $f(X)$ ه مشخص نشود ، معادله بالا را نمی توان به صورت تحلیلی بررسی کرد. برای مثال اگر فرم تابع را به صورت توزیع گاوسی زیر در نظر بگیریم

$$f(X)=exp[-n(X-X_*)^2]-\epsilon X^{0.75} \quad (16)$$

جدول زیر را می توان برای ویژه مقادیر ارائه کرد

(۱۷)

$$\lambda_1\approx -4.77, \lambda_2\approx -0.61-1.66I, \lambda_3\approx -0.61+1.66I.$$

که نشان می دهد نقطه مورد نظر پایدار است.

بررسی معادلات اختلال متریک

برای بررسی معادلات اختلال متریکی باید به چند نکته دقت کرد. نکته اول این است که مدل ارائه شده برای توصیف دینامیک کیهان در دوره اخیر است. در حال حاضر چگالی انرژی نسبت داده شده به ثابت کیهان شناسی در حدود $10^{-3}eV^4$ است. بنابراین بررسی ما در مورد پدید های کوانتمی یا کوانتیزه کرده اختلا ل ها نیست. نکته دوم اینکه جواب پایدار بدست آمده در بخش قبل حالت دوسیته را نشان می داد. در حالت دوسیته اختلال ها از افق خارج شده و هرگز به داخل برنمی گردند. بنابراین چیزی به نام تشکیل ساختار بر اثر این نوع اختلال ها نخواهیم داشت.

موضوعی که در این بخش به آن می پردازیم این است که آیا می توان تمایزی بین مدل پیشنهادی و ثابت کیهان شناختی پیدا کرد یا خیر. خواهیم دید که با داشتن جواب بدست آمده از بخش قبل، فرم معادلات اختلالی ساده می شود.

پیمانه همرو را به صورت زیر برای اختلال اسکالر معرفی می کنیم

$$ds^2=-(1+2\Phi(t,x))dt^2+2a(t)\partial_i J(x,t)dtdx^i \\ +a(t)^2(1+2\zeta(t,x))dx^i dx^j\delta_{ij} \quad (18)$$

با استفاده از معادله (٤) و (۷) و استفاده از تبدیل فوریه برای کمیت های اختلالی به صورت

$$Q=\int Q(t,x)e^{-I\mathbf{k}.\mathbf{x}}d^3x \quad (19)$$

برای مولفه $(0,i)$خواهیم داشت

$$\tilde{H}_c\Phi=\tilde{\zeta}, \quad (20)$$

که

$$\tilde{\zeta}=\zeta+\frac{\Phi}{2}, \tilde{H}_c=3H_c. \quad (21)$$

برای مولفه $(0,0)$ خواهیم داشت

$$\frac{k^2\Phi}{a^2}-7aH_c\frac{k^2J}{a^2}+\frac{5a}{2}\frac{k^2\dot{J}}{a^2}+\frac{3}{2}\dot{\zeta}-\frac{3H_c}{2}\zeta \quad (22)$$
$$-H_c\dot{\Phi}+3H_c^2\Phi=-96\frac{H_c^4X^2}{M_P^2}f_{XX}\Phi,$$

و در نهایت برای مولفه (i,i) خواهیم داشت

$$12H_c^2\Phi+21H_c\dot{\Phi}+\frac{2k^2}{a^2}\zeta-2\ddot{\zeta}-6H_c\dot{\zeta} \quad (23)$$
$$-\frac{14k^2}{a^2}H_caJ+\ddot{\Phi}-\frac{7k^2}{a^2}a\dot{J}=0.$$

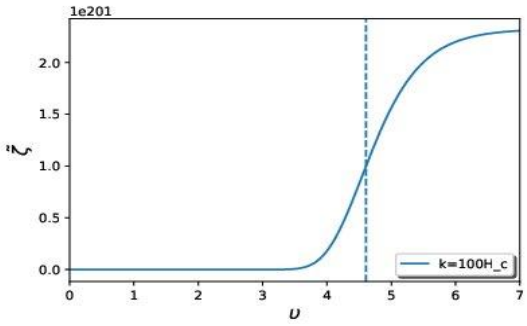
با ترکیب معادلات (۲۱)، (۲۲)،(۲۳) می توان به معادله زیر برای $\tilde{\zeta}$ رسید

$$\dddot{\tilde{\zeta}}+\frac{50}{3}H_c\ddot{\tilde{\zeta}}+(\frac{40H_c^2}{3M_P^2}f_{XX}X_c^2+\frac{2k^2}{a^2H_c^2}-\frac{43}{3})H_c^2\dot{\tilde{\zeta}}+$$
$$(3584\frac{H_c^2}{M_P^2}f_{XX}X_c^2+\frac{14k^2}{H_c^2a^2}-2)H_c^3\tilde{\zeta}-\frac{76k^2}{3a^2}H_c^2\tilde{\zeta}=0 \quad (24)$$

معادله درجه چهار نشان می دهد که درجات آزادی بیشتری در مدل پیشنهادی نسبت به مدل اینشتین وجود دارد. این نکته البته عجیب و غبرمنتظره نیست. معادله بدست آمده را می توان با استفاده از کامپیوتر بررسی کرد. برای اینکار لازم است که فرم تابع مشخص باشد. برای فرم تابع رابطه (۱٦)، یک نمونه از حل در

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

شکل ۱ داده شده است. نکته مهم این است که می توان این مدل را از مدل ثابت کیهان شناسی تمایز داد.



شکل۱ :.یک نمونه از حل معادله (۲٤). معادت برحسب زمان بدون بعد $\upsilon = H_c t - 1$ حل شده اند. شرایط اولیه به صورت $\xi(0) = \frac{d\xi(0)}{d\upsilon} = 0.01, \frac{d^2\xi(0)}{d\upsilon^2} = \frac{d^3\xi(0)}{d\upsilon^3} = 0.$ است.

برای اختلال تانسوری متریک از

$$ds^2 = -dt^2 + a^2[\delta_{ij} + \gamma_{ij}(x,t)]dx^i dx^j, \quad (۲۵)$$

استفاده می کنیم و با استفاده از

$$\gamma_{ij}(x,t) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{s=+,\times} e^s_{i,j} \gamma e^{i\mathbf{k}.\mathbf{x}}, \quad (۲۶)$$

و معادله (٤) خواهیم داشت

$$\ddot{\gamma} + 3H_c\dot{\gamma} - 2\frac{k^2}{a^2}\gamma = 0 \quad (۲۷)$$

که جواب زیر را دارد

$$\gamma = ue^{-\frac{3}{2}H_c(t-t_0)}, \quad (۲۸)$$

و u در معادله زیر صدق می کند

$$\ddot{u} - \frac{9H_c^2}{4}\left(\frac{8k^2}{9a^2H_c^2} + 1\right)u = 0. \quad (۲۹)$$

شکل معادله (۲۷) نشان از یک ناپایداری در انتشار امواج گرانشی دارد. اما در تفسیر این رابطه باید دقت کرد. همانطور که گفته شد، مدل ارائه شده مربوط به دوره اخیر کیهان شناسی است. و عمل کوانتش را روی اختلال ها انجام نمی دهیم. نکته دوم اینکه برای طول موج های بزرگ $\frac{k}{a} \to 0$ ناپایداری از بین می رود. به عبارت دیگر برای چشمه های با فاصله دور از آشکار سازها، تغییری در آشکار سازی امواج بوجود نمی آید. در واقع نتیجه (۲۷) را باید به این صورت تفسیر کرد که دامنه موج گرانشی آشکار شده، با دامنه موج گرانشی تابش شده متفاوت است . بنابراین می توان این پیش بینی را به عنوان عامل رد یا قبول این مدل قرار داد.

نتیجه گیری

در این مقاله-کنفرانس کوشش شد گزارشی در مورد تلاش برای دست یافتن به یک مدل تغییریافته برای گرانش ارائه گردد . در مدل ارئه شده از جمله گاوس-بونه استفاده شد. سازو کاری ارائه شد که بوسیله آن پیش بینی مدل در حالت پس زمینه با حالت ثابت کیهان شناسی یکسان بود اما می توان از اختلالات متریک برای شناسایی مدل نسبت به مدل ΛCDM استفاده کرد.

مرجع ها

[1]S. Weinberg``,*Cosmology*``,Oxford University Press,(2008).
[2] S. Weinberg, *Rev. Mod. Phys*. **61**, 1 (1989).
[3] J. L. Bernal, L. Verde, A. G. Riess, *JCAP*, **10,** 019 (2016).
[4] D. Glavan, C. Lin, *Phys. Rev. Lett*. **124**, 081301 (2020).
[5] H. Mohseni Sadjadi , [arxiv: **2005.10024**].
[6]A. Ghalee, [arxiv: **1807.08620**].

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

درهم‌تنیدگی حالت‌های همدوس الکترون‌ها در مواد ناهمسانگرد دیراک دوبعدی در حضور میدان مغناطیسی یکنواخت

انبارکی، اعظم[۱]؛ معتمدی نسب، امین[۲]

۱- گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز

۲- دپارتمان فیزیک، دانشکده فنی و حرفه‌ای سروش، دانشگاه فنی و حرفه‌ای استان اصفهان، اصفهان، ایران

چکیده

حالت‌های همدوس الکترون‌ها در مواد دیراک دو بعدی ناهمسانگرد در حضور میدان مغناطیسی عمود بر لایه را می توان با استفاده از عملگر نابودی بدست آورد. در این مقاله درهم‌تنیدگی این حالت‌ها را مطالعه می‌کنیم. بدین منظور، پس از معرفی پایه‌های راست هنجار، حالت‌های دوکیوبیتی تعریف خواهند شد؛ سپس با استفاده از تابع تلاقی، درهم-تنیدگی محاسبه خواهد شد. نتایج نشان می‌دهند که این حالت‌ها، همچون حالت‌های همدوس مواد دوبعدی همسانگرد، درهم‌تنیده هستند و درهم‌تنیدگی با افزایش پارامترهای همدوسی پس از یک افت و خیز، به سمت صفر میل می‌کند.

واژه های کلیدی: حالت‌های همدوس، مواد ناهمسانگرد، درهم تنیدگی.

Entanglement of Coherent states of electrons in anisotropic 2D Dirac materials in uniform magnetic field

Anbarki, Azam[1]; Motamedinasab, Amin[2]

[1]*Department of Physics, Faculty of Science, Shahid Chamran University of Ahvaz, Ahvaz*

[2]*Department of Physics, Faculty of Sorush, Isfahan branch, Technical and Vocational University (TVU), Isfahan, Iran*

Abstract

Using annihilating operator, two dimensional coherent states of electrons in anisotropic 2D Dirac materials in perpendicular magnetic field can be obtained. In this paper, we investigate the entanglement of such states. To this end, after introducing the new Ortho-Normal bases, two qubit states will be defined; Then, using concurrence the entanglement will be calculated. The results show that these states similar to the coherent states of magnetized isotropic 2D Dirac materials are entangled, too. Also, after a fluctuation, the entanglement goes to zero by increasing the coherence parameters.

Keywords: *Coherent states, Anisotropic materials, Entanglement.*

PACS NO. 02, 03

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد

http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مقدمه

مواد همسانگرد به موادی گفته میشود که خواص آن از جمله مدول الاستیسیته و ضریب پوآسون و ضریب هدایت حرارتی و ... مستقل از جهت است و مواد ناهمسانگرد موادی هستند که خواص آنها در جهات مختلف متغیر است و برای تحلیل این مواد باید خواص را در جهات مختلف تعریف کرد. علم مواد بعد از کشف گرافین دچار تحول بسیار بزرگی شده است. گرافین در دسته مواد به نام مواد دوبعدی جای می‌گیرد که در حد انرژی‌های پایین، رفتار حامل‌های بار این مواد، شبیه به فرمیون‌های مافوق نسبیتی است. بنابراین برای یافتن توابع موج در این مواد، به‌جای حل معادلهٔ شرودینگر باید معادلهٔ دیراک در نظر گرفته شود. در حالت همسانگرد، فعالیت‌های مختلفی برای این مواد در حضور میدان‌های مغناطیسی و الکتریکی صورت پذیرفته است[۱-٤] و امروزه علاقه‌مندی فراوانی برای یافتن تاثیر ناهمسانگردی بر روی خصوصیات این مواد وجود دارد. برخی از محققین پس از معرفی و بررسی حالت‌های همدوس گرافین همسانگرد در حضور میدان مغناطیسی [۳]، به معرفی و بررسی حالت های همدوس مواد غیر همسانگرد نیز پرداخته‌اند [۵]. پیش از این، خصوصیات غیرکلاسیکی حالت‌های همدوس گرافین و برهم‌نهی آن‌ها مورد بحث و بررسی قرار گرفته‌اند [٦]، در این مقاله درهم تنیدگی حالت‌های همدوس الکترون‌ها در مواد ناهمسانگرد دوبعدی دیراک را مورد بررسی قرار می‌دهیم. لذا پیکربندی مقاله به این صورت است که در بخش دوم، حالت‌های همدوس الکترون‌ها در این مواد و در بخش سوم درهم-تنیدگی آن‌ها را مورد مطالعه قرار می‌دهیم. بخش آخر نیز به بحث و نتیجه‌گیری اختصاص دارد.

حالت‌های همدوس مواد ناهمسانگرد دیراک دوبعدی

برای محاسبهٔ حالت‌های همدوس الکترون‌ها در مواد ناهمسانگرد دوبعدی در میدان مغناطیسی، می‌توان دو عملگر نابودی به‌صورت زیر تعریف کرد [۵]:

$$\hat{\mathrm{A}}=\begin{pmatrix}\sqrt{\frac{(\hat{N}+2)}{\hat{N}+1}}\cos\gamma\, A^- & \sin\gamma\sqrt{\frac{1}{N+1}}(A^-)^2\\ -\sin\gamma\sqrt{N+1} & \cos\gamma\, A^-\end{pmatrix},$$

$$\hat{\mathrm{B}}=\begin{pmatrix}\cos\eta\, B^- & \frac{\sin\eta}{\sqrt{N+1}}B^-A^-\\ -\sin\eta\frac{1}{\sqrt{N+1}}A^+B^- & \cos\eta\, B^-\end{pmatrix} \qquad (۱)$$

که در آن :

$$A^{\pm}=\frac{\pm i}{\omega_B\hbar}\left[\xi^{1/2}\left(p_x-\frac{eB_0}{2c}y\right)\pm\frac{i}{\xi^{1/2}}\left(p_y-\frac{eB_0}{2c}x\right)\right] \qquad (۲)$$

B_0 میدان مغناطیسی، $\eta,\gamma\in[0,2\pi]$ ، $\omega_B=2eB_0/c\hbar$ بسامد سیکلوترونی و N عملگر تعداد است و همچنین $\xi=v_x/v_y$ (v_x و v_y سرعت الکترون در جهت‌های x و y) با توجه به مقدار سرعت الکترون در جهت‌های مختلف، به جهت ناهمسانگردی مرتبط است؛ ضمناً تأثیر عملگرهای نابودی (۱) بر روی حالت‌های عددی به‌صورت زیر می‌باشد:

$$A^-\left|\Psi_{m,n}\right\rangle=\frac{\exp(\mathrm{i}\delta)}{\sqrt{2^{\delta_{1n}}}}\sqrt{n}\left|\Psi_{m,n-1}\right\rangle$$
$$B^-\left|\Psi_{m,n}\right\rangle=\sqrt{m}\omega_{mn}\left|\Psi_{m-1,n}\right\rangle \qquad (۳)$$

که در آن $\omega_{mn}=\cos(\eta)+\mathrm{i}\sin(\eta)(1-\delta_{0n})$ است.

از طرفی حالت‌های همدوس دوبعدی $\Psi_{\alpha,\beta}(\mathrm{x},\mathrm{y})$ به‌عنوان ویژه‌حالت‌های عملگرهای نابودی A^- و B^- به‌صورت زیر تعریف می‌شوند که:

$$A^-\left|\Psi_{\alpha,\beta}\right\rangle=\alpha\left|\Psi_{\alpha,\beta}\right\rangle$$
$$B^-\left|\Psi_{\alpha,\beta}\right\rangle=\beta\left|\Psi_{\alpha,\beta}\right\rangle \qquad (٤)$$

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

با حل معادلات ویژه‌مقداری (٤) و با استفاده از عملگرهای نابودی معادلهٔ (۱)، حالت‌های همدوس این سیستم به‌صورت زیر بدست می‌آیند [۵]:

$$\left|\Psi_{\alpha,\beta}\right\rangle=\frac{\exp(-\left|\beta\right|^2/2)}{\sqrt{2\exp(\left|\alpha\right|^2-1)}}\left[\sum_{m=0}^{\infty}\frac{\beta^m}{\sqrt{m!}}\left|\Psi_{m,0}\right\rangle+\sum_{n=1}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty}\frac{\sqrt{2}\alpha^n}{\sqrt{n!}}\frac{\beta^m}{\sqrt{m!}}\left|\Psi_{m,n}\right\rangle\right] \quad (۵)$$

که در آن :

$$\left|\Psi_{m.n}\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}\psi_{m,n-1}(x,y)\\ i\psi_{m,n}(x,y)\end{pmatrix},\ \left|\Psi_{m.0}\right\rangle=\begin{pmatrix}0\\ i\psi_{m,n}(x,y)\end{pmatrix} \quad (٦)$$

همچنین α و β پارامترهای همدوسی هستند و:

$$\left\langle\Psi_{m,n}\middle|\Psi_{m',n'}\right\rangle=\delta_{mm'}\delta_{nn'} \quad (۷)$$

درهم‌تنیدگی حالت‌های ابرهمدوس چندفوتونی

برای محاسبهٔ درهم‌تنیدگی حالت‌های (۵) از تابع تلاقی استفاده می‌کنیم. برای حالت خالص دوکیوبیتی زیر:

$$\left|\psi^{AB}\right\rangle=a\left|0^A,0^B\right\rangle+b\left|0^A,1^B\right\rangle+c\left|1^A,0^B\right\rangle+d\left|1^A,1^B\right\rangle \quad (۸)$$

تابع تلاقی به‌صورت زیر بدست می‌آید [۷]:

$$C\left(\psi^{AB}\right)\equiv 2\left|ad-bc\right| \quad (۹)$$

رابطهٔ (۵) را می توان به‌صورت زیر بازنویسی کرد:

$$\left|\Psi_{\alpha,\beta}\right\rangle=G\left[\sum_{n=1}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}\frac{\beta^m}{\sqrt{m!}}\psi_{n,m-1}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}+\left(i\sum_{n=1}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}\frac{\beta^m}{\sqrt{m!}}\psi_{n,m}+i\sum_{m=0}^{\infty}\frac{\beta^m}{\sqrt{m!}}\psi_{m,0}\right)\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}\right] \quad (۱۰)$$

که در آن $G=\dfrac{\exp(-\left|\beta\right|^2/2)}{\sqrt{2\exp(\left|\alpha\right|^2-1)}}$ است. پایه‌های راست هنجار زیر سیستم های بوزونی و فرمیونی به‌صورت زیر تعریف می‌شوند [۸]:

$$\left|0\right\rangle_f=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix},\quad \left|1\right\rangle_f=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$$

$$\left|0\right\rangle_b=H\sum_{n=1}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}\frac{\beta^m}{\sqrt{m!}}\psi_{n,m-1}$$

$$\left|1\right\rangle_b=F\left(\sum_{n=1}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}\frac{\beta^m}{\sqrt{m!}}\psi_{n,m}+\sum_{m=0}^{\infty}\frac{\beta^m}{\sqrt{m!}}\psi_{m,0}-p\sum_{n=1}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}\frac{\beta^m}{\sqrt{m!}}\psi_{n,m-1}\right) \quad (۱۱)$$

که در آن F، H و p به‌صورت زیر تعریف می‌شوند:

$$H=\frac{\exp(-\left|\beta\right|^2/2)}{\sqrt{\exp(\left|\alpha\right|^2-1)}}$$

$$p=H^2\alpha\left(\sum_{n=1}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty}\frac{\left|\alpha\right|^{2n}}{n!m!}\frac{\left|\beta\right|^{2m}}{\sqrt{n+1}}+e^{\left|\beta\right|^2}\right) \quad (۱۲)$$

$$F=\frac{1}{\sqrt{e^{\left|\beta\right|^2}+\frac{1}{H^2}-\left(\frac{p}{H}\right)^2}}$$

و ${}_b\langle 0|1\rangle_b=0$.

با استفاده از معادلات (۱۱) و (۱۲)، معادلهٔ حالت (۱۰) را به‌صورت زیر بازنویسی می‌کنیم:

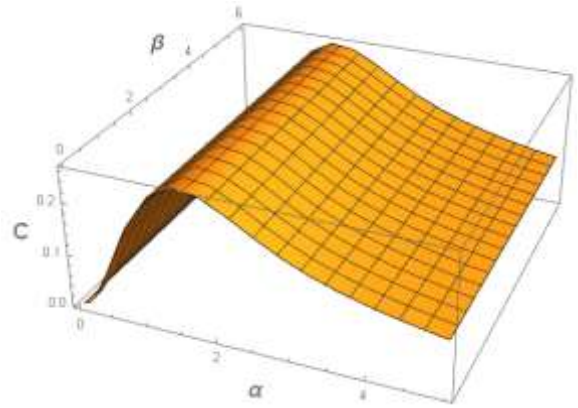
$$\left|\Psi_{\alpha,\beta}\right\rangle=G\left[\frac{1}{H}\left|0\right\rangle_f\left|0\right\rangle_b+\frac{p}{H}\left|1\right\rangle_f\left|0\right\rangle_b+\frac{1}{F}\left|1\right\rangle_f\left|1\right\rangle_b\right] \quad (۱۳)$$

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

با استفاده از معادلهٔ (۹)، تابع تلاقی رابطه (۵) به‌صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$C = 2\left|G^2 / FH\right| \qquad (١٤)$$

در شکل (۱) درهم‌تنیدگی حالت‌های همدوس الکترون‌ها در مواد ناهمسانگرد دیراک دوبعدی در حضور میدان مغناطیسی برحسب پارامترهای همدوسی α و β رسم شده است.



شکل (۱) تابع تلاقی حالت‌های همدوس الکترون‌ها در مواد ناهمسانگرد دو بعدی در حضور میدان مغناطیسی

همانطور که در شکل (۱) مشاهده می شود درهم‌تنیدگی برای مقادیر مختلف β متقارن است اما با افزایش α ابتدا درهم-تنیدگی به بیشنهٔ خود میل کرده و پس از آن، درهم‌تنیدگی به سمت صفر میل می‌کند.

بحث و نتیجه‌گیری

در این مقاله، در مواد دیراک دوبعدی ناهمسانگرد، درهم‌تنیدگی حالت‌های همدوس الکترون‌ها را محاسبه کرده‌ایم. درهم‌تنیدگی این حالت‌ها می‌تواند به همبستگی بین اسپین الکترون‌های این مواد و مختصه‌های فضایی تعبیر گردد. نتایج نشان می‌دهد که با افزایش پارامترهمدوسی، درهم‌تنیدگی پس از یک افت و خیز به سمت صفر میل می‌کند. همچنین لازم به ذکر است که نتایج این مطالعه، با نتایج مربوط به سیستمی ناهمسانگرد [٦] در یک بعد همخوانی دارد. به عبارت دیگر ناهمسانگردی، تاثیری بر روند درهم‌تنیدگی حالت‌های همدوس سیستم ندارد.

مراجع

[۱] B. Midya1, D. J. Fernandez, Dirac electron in graphene under supersymmetry generated magnetic fields, *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* **47** (2014) 285302.

[۲] L. A. Wu, M. Murphy, M. Guidry, SO (8) fermion dynamical symmetry and strongly correlated quantum Hall states in monolayer graphene, *Physical Review B* **95** (2017) 115117.

[۳] E. D´ıaz-Bautista, D. J. Fern´andez, Graphene coherent states, *The European Physical Journal Plus* **132** (2017) 499.

[٤] D. Nath, P. Roy, Dirac oscillator in perpendicular magnetic and transverse electric fields, Annals of *Physics*351 (2014) 13–21

[٥] Erik Díaz-Bautista et al, Coherent states in magnetized anisotropic 2D Dirac materials, *Journal of Physics A: Mathematical and* **53** (2020) 105301

[٦] A. Motamedinasab, A. Anbaraki, Superposed graphene coherent states, *Chinese Journal of Physics* **65** (2020) 139–145

[7] W.K. Wootters, Entanglement of formation and concurrence, *Quantum Information and Computation* **1** (2001) 27-44.

[8] Wang. X, Bipartite entangled non-orthogonal states, *Journal of Physics A: Mathematical and General* **35** (2002) 165-173.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بررسی توزیع درهم‌تنیدگی در حالت‌های گربه شبه بل

اشرف‌پور، مهرزاد[۱]؛ کوهزر، عباس[۲] ؛ قلمبر دزفولی، عبدالمحمد[۳]

[۱و۲و۳] گروه فیزیک، دانشگاه شهید چمران، اهواز

چکیده

در این کار، ابتدا حالت‌های گربه شبه بل را تعریف کرده و حالت متحول شده بر اثر برهم‌نهی این حالت‌ها با محیط را در نظر گرفته، که تشکیل سامانه‌ای سه جزیی کیوبیتی می‌دهد. برای بررسی توزیع درهم‌تنیدگی در این سامانه سه کیوبیتی، از سنجهٔ ۳-تنگل و ۳-پی استفاده می‌شود. با رسم نمودارهای حاصل از اعمال سنجه های ۳-تنگل و ۳-پی برای حالتهای گفته شده ، و مقایسه آنها، صدق کردن نابرابری مونوگامی و مفهوم آن مورد بحث قرار می‌گیرد.

واژه های کلیدی: *درهم‌تنیدگی، .حالت‌های گربهٔ شبه بل، سنجهٔ ۳-تنگل، سنجهٔ ۳-پی، نابرابری مونوگامی*

Investigation of distributed entanglement in quasi-bell cat states

Ashrafpour, Mehrzad[1]; Kouhzar, Abbas[2] ; Ghalambor Dezfuli, Abdolmohammad[3]

[1,2,3] Department of Physics, Shahid Chamran University, Ahvaz

Abstract

In this work, we defined the quasi-bell cat states and consider the evolved state resulted from interacting of these states with the environment, which constitutes a qubit tripartite system. Using three-tangle and three- π as a measures of entanglement, we study the distributed of entanglement in this qubit tripartite system. We draw appropriate plots for entanglement changes of introduced states using the three-tangle and three-π measures. By comparing them, the validity of monogamy inequality and its concept is discussed.

***Keywords**: entanglement, quasi-bell cat states, three-tangle measure, three- π measure, monogamy inequality.*
PACSNo.2

مقدمه

مفهوم مکانیک کوانتومی در سامانه‌های چندتایی، منجر به حالت‌های خاصی می‌شود که حالت‌های درهم‌تنیده نامیده می‌شوند[۱]. درهم‌تنیدگی یک ویژگی کلیدی مکانیک کوانتومی می‌باشد که دنیای کوانتومی را از معادل کلاسیکی آن متمایز می‌کند[۲]. بنابراین کمی کردن این ویژگی مهم مکانیک کوانتومی از اهمیت بسیاری برخوردار است. سنجه‌های مختلفی مانند تلاقی، درهم‌تنیدگی تشکیل، سنجه هندسی و منفیت به منظور اندازه‌گیری میزان درهم‌تنیدگی معرفی شده‌اند. این سنجه‌ها میزان درهم‌تنیدگی میان دو جزء از یک سامانه را نشان می‌دهند. لازم به ذکر است که سنجش درهم‌تنیدگی در سامانه‌های چند جزئی، یعنی سامانه‌هایی که دارای بیش از دو جزء باشند، به دلیل پیچیدگی آن هنوز یک چالش می‌باشد[۳]. یکی از خصوصیات همبستگی‌های کلاسیکی این است که می‌توانند آزادانه به اشتراک گذاشته شوند. جزء اول می‌تواند بیشینه همبستگی کلاسیکی را به صورت همزمان با جزء دوم و سوم به اشتراک بگذارد. ولی این موضوع برای درهم‌تنیدگی کوانتومی و یا به طور کلی، همبستگی‌های غیر موضعی، صادق نیست. محدودیت‌های موجود در قابلیت به اشتراک‌گذاری این نوع از همبستگی‌های غیر کلاسیکی به عنوان محدودیت‌های مونوگامی شناخته می‌شوند، که در واقع نشان‌دهندهٔ محدودیت موجود در توزیع درهم‌تنیدگی بین اجزاء سامانه می‌باشد[٤]. این محدودیت‌ها کاربردهای فراوانی در زمینه‌های مختلف از جمله در امنیت رمزنگاری کوانتومی[۵] و فیزیک سیاه‌چاله‌ها[٦] دارد. در این کار تمرکز خود را بر یک سامانهٔ سه کیوبیتی معطوف می‌کنیم که حاصل اعمال یک عملگر تقسیم‌کنندهٔ پرتو بر یک حالت گربهٔ شبه بل می‌باشد، که در واقع از نگاه تجربی و آزمایشگاهی می‌تواند به صورت برهم‌نهی محیط با پرتوی ورودی و جذب فوتون و در نتیجه میرایی دامنه در نظر گرفته‌شود[۷]. در ادامه با در نظر گرفتن حالت متحول شده، طریقهٔ توزیع درهم‌تنیدگی بین سه مد(سه جزء) را با استفاده از سنجهٔ ۳-پی[۸]، بررسی و تجزیه و تحلیل خواهیم کرد.

حالت‌های گربه شبه بل و حالت گربهٔ متحول شده تحت تاثیر محیط

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

حالت‌های گربه، ترکیبی خطی از دو حالت ماکروسکوپیک قابل تشخیص می‌باشند. حالت‌های تشکیل دهندهٔ برهم‌نهی می‌توانند کلاسیکی و یا کوانتومی باشند ولی ماکروسکوپیک بودن آن‌ها الزامی می‌باشد. حالت‌های گربه در اپتیک کوانتومی به صورت برهم‌نهی دو حالت همدوس با فاز مخالف تعریف می‌شوند، به گونه‌ای که اگر دو حالت همدوس با فاز مخالف با هم جمع شوند حالت گربهٔ زوج، و اگر از هم کم شوند حالت گربهٔ فرد خواهیم داشت[7]،

$$|\pm\rangle = N_{\pm}(|\alpha\rangle \pm |-\alpha\rangle)$$

که در آن از حالت‌های همدوس گلاوبر استفاده شده است، چرا که این حالت‌ها، نزدیکترین حالت‌های کوانتومی به کلاسیکی و ماکروسکوپیکترین حالت‌های کوانتومی می‌باشند

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle \qquad (۱)$$

از طرفی حالت‌های بل استاندارد به صورت برهم‌نهی‌های متوازنی از حالت‌های متعامد ساخته می‌شوند، که اگر آن‌ها را بر اساس برهم‌نهی‌های شامل حالت‌های نامتعامد تعریف کنیم به حالت‌های شبه بل می‌رسیم.حال با توجه به توضیحات ارائه شده می‌توانیم چهار حالت گربهٔ شبه بل را به صورت زیر تعریف کنیم،

$$|\alpha, \pm\alpha; m\rangle = N_m^{-\frac{1}{2}}(|\alpha, \pm\alpha\rangle + e^{im\pi}|-\alpha, \mp\alpha\rangle) \qquad (۲)$$

که در آن عامل بهنجارش به صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$N_m = (2 + 2e^{-4|\alpha|^2} \mathrm{Cos}(m\pi)) \ (m = 0,1) \qquad (۳)$$

برهمکنش محیط بر این حالت(ساز و کار جذب فوتون) را به صورت عملگری در نظر می‌گیریم که بر مد دوم آن اثر می‌کند، که عملگر یکانی تحول دینامیکی کل سامانه به صورت است،

$$U = I \otimes \beta(\theta) \qquad (٤)$$

که در آن یک عملگر همانی در یک عملگر تقسیم پرتو، که توصیف کننده برهم‌کنش بین زیرسامانهٔ B و محیط E می‌باشد، ضرب شده است. در این‌جا حالت اولیهٔ محیط به صورت حالت پوچ(کت پوچ) در نظر گرفته شده است ، درواقع حالت مربوط به محیط از یکی از درگاه‌های تقسیم‌کنندهٔ پرتو، و حالت گربهٔ شبه بل از درگاه دیگر عبور کرده و بر اثر عملگر مربوطه با هم تداخل می‌کنند. عملگر تقسیم‌کنندهٔ پرتو به این شکل تعریف می‌شود:

$$\beta(\theta) = \exp[\frac{\theta}{2}(\alpha_B^- \alpha_E^+ - \alpha_B^+ \alpha_E^-)] \qquad (۵)$$

که در آن $L = (B, E)$ (α_L^+ و α_L^-) عملگرهای پله‌ای نوسانگر هماهنگ معمول هستند که روی مدهای فوک زیرسامانه‌های B و E عمل می‌کنند. برای ضرایب بازتاب و انتقال داریم،

$$t = \mathrm{Cos}\frac{\theta}{2}, \qquad r = \mathrm{Sin}\frac{\theta}{2} \qquad (٦)$$

قابلیت انتقال تقسیم‌کنندهٔ پرتو، رفتار واهمدوسی حالت‌های انتقال‌یافته را توصیف می‌کند. بعد از اعمال عملگر معرفی شده بر روی حالت‌های گربهٔ شبه بل ورودی، حالت تحول یافته بر اثر ساز و کار جذب فوتون توسط محیط به صورت زیر خواهد شد:

$$|Q\rangle_{ABE} = \frac{1}{\sqrt{N_m}}(|\alpha, \pm\alpha t; \pm\alpha r\rangle + e^{im\pi}|-\alpha, \mp\alpha t; \mp\alpha r\rangle) \qquad (۷)$$

و در نتیجه ماتریس چگالی مربوط به کل سامانهٔ سه کیوبیتی متشکل از دو مد پرتوی ورودی و یک مد محیط به صورت زیر خواهد بود:

$$\rho_{ABE} = |Q\rangle_{ABE} \langle Q| \qquad (۸)$$

اکنون که ماتریس چگالی کل سامانه را در اختیار داریم می‌توانیم به راحتی با رد گیری روی هر یک از اجزاء سامانه، چگالی مربوط به زیرسامانهٔ متشکل از دو جزء دیگر را به دست آوریم و از آنجا به کمک سنجه‌های دو جزئی مانند تلاقی و منفیت، میزان درهم‌تنیدگی موجود در هر زیرسامانه را به دست آوریم.

سنجه ۳-پی و ۳-تنگل

برای یک حالت سه کیوبیتی خالص ρ_{ABC} نابرابری مونوگامی بر حسب تلاقی به صورت زیر تعریف می‌شود،

$$C_{AB}^2 + C_{AC}^2 \leq C_{A(BC)}^2 \qquad (۹)$$

که در قسمت سمت چپ تلاقی ماتریس‌های چگالی کاهش‌یافته می‌باشند و عبارت سمت راست اینگونه تعریف می‌شود،

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

$$C_{A(BC)} = 2\sqrt{\det \rho_A} \qquad (۱۰)$$

که در آن داریم

$$\rho_A = Tr_{BC}(|\phi\rangle_{ABC}\langle\phi|) \qquad (۱۱)$$

حال با توجه به نابرابری مونوگامی بر حسب سنجهٔ تلاقی، می‌توانیم ۳-تنگل را به صورت زیر تعریف کنیم[۹]،

$$\tau_{ABC} = C^2_{A(BC)} - C^2_{AB} - C^2_{AC} \qquad (۱۲)$$

که ثابت می‌شود که شرایط سنجه بودن را دارا می‌باشد و به منظور تشخیص درهم‌تنیدگی سه سویه برای حالت مورد نظر به کار می‌رود. می‌توان نشان داد که نابرابری مونوگامی برای سنجهٔ منفیت[۱۰] نیز به صورت سه نابرابری زیر می‌باشد[۸]،

$$N^2_{AB} + N^2_{AC} \le N^2_{A(BC)} \;\; ; \; N^2_{BA} + N^2_{BC} \le N^2_{B(AC)}$$
$$N^2_{CA} + N^2_{CB} \le N^2_{C(AB)} \qquad (۱۳)$$

حال به کمک این نابرابری‌ها می‌توانیم نسبت به هر جزء، یک برابری مشابه ۳-تنگل ولی این بار بر حسب منفیت بنویسیم، که برای جزء Aداریم،

$$\pi_A = N^2_{A(BC)} - N^2_{AB} - N^2_{AC} \qquad (۱۴)$$

اما در اینجا بر خلاف ۳-تنگل، به صورت کلی داریم $\pi_A \neq \pi_B \neq \pi_C$. این عدم برابری نشان‌دهندهٔ این است که ماندهٔ درهم‌تنیدگی مرتبط با زیرسامانه‌های مختلف تحت جابجایی کیوبیت‌ها تغییرپذیر است. برای رفع این مشکل، میانگین سه رابطه که مشابه با رابطه (۱۲) برای دو جزء دیگر هم نوشته میشود، را بصورت زیر در نظر گرفته،

$$\pi_{ABC} = \frac{1}{3}(\pi_A + \pi_B + \pi_C) \qquad (۱۵)$$

و از آنجایی که رابطهٔ حاصل شده نسبت به سه جزء ناوردا بوده و همینطور می‌توان ثابت کرد که شرایط سنجه بودن را دارا می‌باشد، آن را سنجهٔ ۳-پی می‌نامیم.

محاسبهٔ توزیع درهم‌تنیدگی در حالت گربهٔ تحول‌یافته بر حسب ۳-پی

ابتدا ماتریس‌های چگالی کاهش یافته مورد نیاز را با استفاده از ماتریس چگالی حالت تحول یافته به دست آورده و سپس منفیت را برای آنها محاسبه کرده و با استفاده از روابط(۱۲) و (۱۳) سنجه ۳-پی محاسبه می‌شود. نتایج مربوط به منفیت و ۳-پی بعد از محاسبات طولانی به صورت زیر حاصل میشوند،

$$N(\rho_{A(BE)}) = \frac{1-p^2}{1+p^2}$$

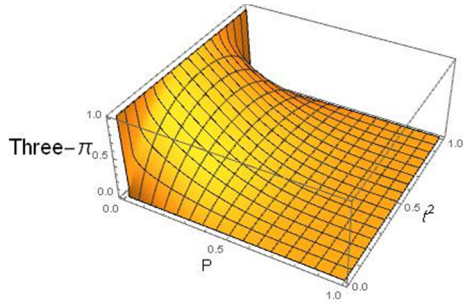
$$N(\rho_{B(AE)}) = 2\sqrt{\frac{(-1+p^{2t^2})(-1+p^{2+2t^2})}{N_m^2}}$$

$$N(\rho_{E(AB)}) = 2\sqrt{\frac{1+p^4-p^{2-2t^2}-p^{2+2t^2}}{N_m^2}} \qquad (۱۶)$$

که در آن $p = \langle -\alpha | \alpha \rangle = e^{-2|\alpha|^2}$ است.

مقایسه ۳-پی با ۳-تنگل برای حالت متقارن(m=0)

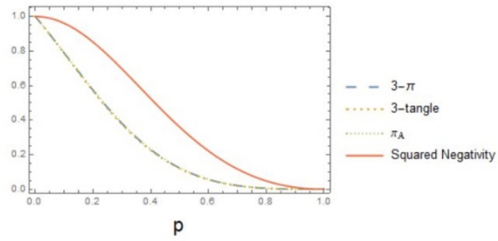
در شکل (۱) تغییرات ۳-پی برای حالت‌های گربهٔ شبه بل متقارن بر حسب p و t^2 رسم شده است.



شکل (۱): نمودار ۳-پی بر حسب p و t^2 برای حالت‌های گربهٔ شبه بل متقارن.

مشاهده می‌شود که برای تمام مقادیر p و t^2 مثبت می‌باشد، یعنی در این‌جا خاصیت مونوگامی صادق است. طبق نمودار سنجه ۳-پی با افزایش p کاهش یافته تا به مقدار ثابتی برسد. همچنین با توجه به این نمودار، بیشینهٔ نابرابری‌های مونوگامی بر حسب سنجه ۳-پی در $t^2 = 0.5$ ظاهر می‌شود. در شکل(۲) نمودارهای ۳-پی، ۳-تنگل ، π_A و مربع منفیت($N^2_{A(BE)}$) بر حسب p برای مقادیر $t = r = 1/\sqrt{2}$ ، ازاء m=0 رسم شده است. همچنین دیده می‌شود نمودارها ۳-پی ، ۳-تنگل و π_A کاملاً برهم منطبق هستند.

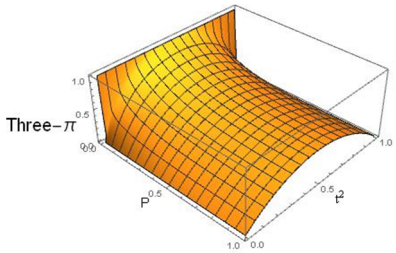
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



شکل(۲): نمودار ۳-پی، ۳-تنگل ، π_A و مربع منفیت($N^2{}_{A(BE)}$)برحسب p برای حالت‌های گربهٔ شبه‌بل برای $t = r = 1/\sqrt{2}$ ، به‌ازاء m=0.

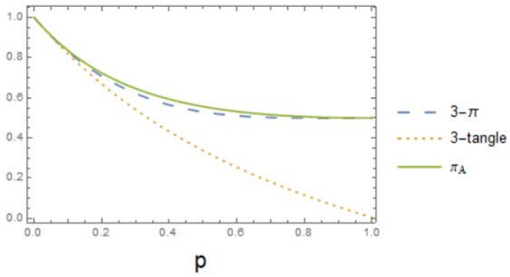
مقایسه ۳-پی با ۳-تنگل برای حالت پادمتقارن(m=1)

در شکل (۳) تغییرات ۳-پی را برای حالت‌های گربهٔ شبه بل پادمتقارن بر حسب p و t^2 رسم شده است.



شکل(۳): نمودار ۳-پی بر حسب p و t^2برای حالت‌های گربهٔ شبه بل پادمتقارن.

در این نمودار نیز مشاهده می‌شود که تابع ۳-پی منفی نشده و در نتیجه خاصیت مونوگامی صدق می‌کند. همچنین با توجه به این نمودار، بیشینهٔ نابرابری‌های مونوگامی بر حسب سنجه ۳-پی در $t^2 = 0.5$ و همسایگی‌های آن ظاهر می‌شود. در شکل (٤) نمودارهای ۳-پی، ۳-تنگل و π_A بر حسب p برای مقادیر $t = r = 1/\sqrt{2}$ به ازاء m=1 رسم شده است. با افزایش p مقدار ۳-تنگل کاهش پیدا می‌کند تا به صفر برسد و برای ۳-پی و π_A کاهش پیدا می‌کند اما صفر نمیشود. در تمامی نمودارها دیده می‌شود ۳-پی، ۳-تنگل و π_A برخلاف حالت قبل (m=0) برهم منطبق نیستند.



شکل(۴): نمودار ۳-پی، ۳-تنگل و π_A برحسب p برای حالت‌های گربهٔ شبه بل برای مقادیر $t = r = 1/\sqrt{2}$ به ازاء m=1 .

نتیجه‌گیری

در این کار تلاش شد با اعمال سنجهٔ ۳-پی برای حالتهای گربه شبه بل متقارن و پادمتقارن، چگونگی توزیع درهمتنیدگی بین اجزا سامانه سه کیوبیتی حاصله، و صدق کردن نابرابری مونوگامی، بررسی شود. همانطور که نتایج محاسبات و نمودارهای رسم شده نشان میدهند رابطه سنجهٔ ۳-پی در هیچکدام از حالتهای مورد بررسی (حالتهای متقارن و پادمتقارن) منفی نیست، بنابراین خاصیت مونوگامی برای آنها صدق میکند. همچنین در اینکار تلاش کردیم که مقایسه ای هم بین سنجه ۳-پی و ۳-تنگل برای حالتهای متقارن و پادمتقارن انجام شود. همانطور که در شکلهای (۲) و (٤) دیده میشود، سنجه ۳-پی توزیع همبستگیهای کوانتومی بین اجزاء سامانه‌های متقارن و پاد متقارن را بهتر نشان میدهد. به گونه ای که برای یک p معین میزان درهمتنیدگی سامانهٔ سه جزیی مورد بررسی در این کار را بیشتر نشان میدهد، در صورتی که سنجهٔ ۳-تنگل در همان نقطه میزان درهمتنیدگی بین اجزاء سامانه را کمتر نشان میدهد، هرچند برای این مورد خاص تفاوت‌ها جزئی بود ولی می‌تواند برای حالت‌های دیگر تفاوت‌های بارزتری را نشان دهد.

مرجع‌ها

[1] S. Kanmani; "Entangled states: Classical versus Quantum"; arXiv: quant-ph/0907 (2009).
[2] K. Brada, A. Chafik, H. Eleuch, and Y. Hassouni; "Entanglement of Two-Qubit Nonorthogonal States"; Int. J. Mod. Phys. B **23**, 2012-2024 (2009).
[3] Xiu-Xia Hu and Guo-Jin Hu; "Spin Squeezing for Superpositions of Dicke States"; Int. J. Theor. Phys. **53**, 586-591 (2014).
[4] Alexander Streltsov, Gerardo Adesso, Marco Piani, and Dagmar Brub; "Are General Quantum Correlations Monogamous?"; Phys. Rev. Lett. **109**, 050503 (2012).
[5] M. Pawlowski; "Security proof for cryptographic protocols based only on the monogamy of Bell's inequality violations"; Phys. Rev. A **82**, 032313 (2010).
[6] Seth Lloyd and John Preskill; "Unitarity of black hole evaporation in projection models"; JHEP08,**126** (2014).
[7] M. Daoud, R. A. Laamara and R. Essaber; "Quantum correlations dynamics of quasi-Bell cat states"; International Journal of Quantum Information, **11(06)**, 1350057 (2013).
[8] Y. C. Ou and H. Fan; "Monogamy Inequality in terms of Negativity for Three-Qubit States"; Phys. Rev. A **75(6)**, 062308 (2007).
[9] Valerie Coffman, Joydip Kundu, and William K. Wootters, "Distributed
Entanglement"; Phys. Rev. A **61**, 052306 (2000).
[10] K. Zyczkowski, P. Horodecki, A. Sanpera, M. Lewenstein, "Volume of the set of separable states"; Phys. Rev. **58**, 883–892. (1998).

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

افزایش تحویل داروی ضدسرطانی به روش نورگرمایی در نانوکامپوزیت MoS_2/C

هوشیار، محبوبه؛ ابارشی، افسانه

دانشکده فیزیک،دانشگاه شهید بهشتی، اوین، تهران

چکیده

در این تحقیق، نانو کامپوزیت MoS_2 و کربن (MoS_2/C) به روش گرماآبی سنتز و خواص نورگرمایی، زیست سازگاری و میزان بارگذاری دارو درآن مورد مطالعه قرار گرفت. خواص فیزیکی و نورگرمایی نمونه‌ها شامل: ویژگی‌های ساختاری ، اپتیکی و نورگرمایی بررسی شد. مشخصه‌یابی این نمونه توسط دستگاه‌های XRD، Raman،UV-Vis انجام پذیرفت. داده‌های حاصل از XRD و طیف رامان نشان دادند که نانو ذرات کربن به خوبی در بین نانو ورقه‌های MoS_2 قرار گرفته‌اند و نیز نتایج نورگرمایی نمونه‌ها نشان داد که نانوکامپوزیت MoS_2/C خاصیت نورگرمایی بسیار بالایی از خود نشان می‌دهد. پس از بارگذاری داروی ضدسرطانی در MoS_2/C، آزمایش MTT اثر ضدسرطانی این دارو را در نابودی سلول سرطانی را تحت تابش لیزر ۸۰۸ نانومتر تأیید کرد.

واژه های کلیدی: *نانو کامپوزیت MoS_2/C، نورگرمایی، داروی دکستروبیسین*

Increase of anticancer drug delivery by photothermal method with nanocomposite MoS_2/C

M. Houshiar*, A. Abareshi

Department of Physics, Shahid Beheshti University, Evin, Tehran

Abstract

In this work, Mos2/C nanocomposite has been synthesized by hydrothermal method and its physical, photothermal, biocompatible and loading rate properties has been studied. Physical and phtothermal properties including: structural, optical and photothermal characteristics were investigated. The characterization of samples were performed using XRD, UV-Vis and Raman spectroscopy instruments. XRD and Raman spectroscopy data showed that carbon nanoparticles have been well coorporated in between MoS_2 nanoflakes and the result of photothermal of samples also showed that MoS2/C nonocomposites show very high photothermal properties. After loading anticancer drug in MoS_2/C, MTT experiment was performed which showed that the anticancer effect of this drug with 808 nm laser irradiation is effective

***Keywords**: MoS_2/C nanocomposite, Photothermal, Dextrorobici*
PACS No. 68

مقدمه

مواد نورگرما عبارتند از موادی که می‌توانند نور را در ناحیه نزدیک مادون قرمز جذب و سپس آنرا به گرما تبدیل کنند. این مواد اغلب در زمینه درمان سرطان به روش نورگرمایی بکار برده می-شوند تا بتوانند بدون آسیب رساندن به سلول‌های سالم اطراف، سلول سرطانی را نابود کنند [۳-۱]. مولیبدن دی سولفید (MoS_2) از جمله موادی است که چنین ویژگی‌ای را دارا میباشد. همچنین این ماده از پایدارترین فلزات واسطه دی‌کلکوژنید با ساختار لایه‌ای می‌باشد که در حالت توده‌ای نیمرسانایی با گاف نواری غیرمستقیم حدود ۱.۲ الکترون ولت است. اما وقتی این ماده به صورت لایه‌لایه درآید، در حالت تک لایه به یک ماده با گاف نواری مستقیم ۱.۹ الکترون ولت تبدیل می‌شود. تحقیقات نشان داده است

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

که MoS_2 ویژگی‌های جالبی از قبیل: میزان جذب بالا در ناحیه نزدیک مادون قرمز و نسبت سطح به حجم بالایی را از خود نشان می‌دهد که سبب شده است تا به عنوان یک کاندید مناسب در درمان به روش نورگرمایی و نیز به عنوان یک بستر مناسب جهت تحویل دارو به‌کار رود [۷-۴].

مواد با پایه کربن به دلیل ویژگی‌هایی از جمله میزان جذب بالا در ناحیه نزدیک مادون قرمز، زیست‌سازگاری بسیار خوب در بدن، عدم سمیت، رسانایی گرمایی بالا و پایداری شیمیایی سبب شده است تا به طور گسترده در زمینه پزشکی بویژه در درمان به روش نورگرمایی مورد استفاده قرار گیرند [۱۰-۸].

در این تحقیق، نانوکامپوزیت MoS_2 با کربن (MoS_2/C) به‌روش گرمابی سنتز و ویژگی‌های ساختاری، اپتیکی و نورگرمایی آن مورد بررسی قرار گرفت. سپس، آزمایش نورگرمایی برای این ماده با غلظت‌های مختلف انجام شد و مشاهده شد که این نانوکامپوزیت ویژگی‌های نورگرمایی بسیار خوبی از خود نشان می‌دهد و نیز درنهایت، داروی دکستروبیسین داخل این نانوکامپوزیت بارگذاری شد و خواص زیست سازگاری آن مورد مطالعه قرار گرفت.

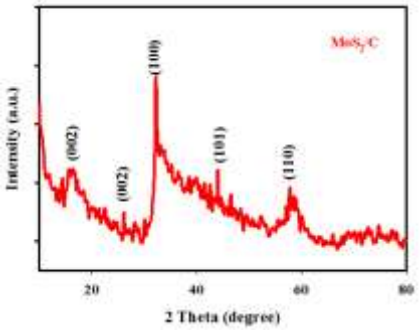
بخش تجربی

برای تهیه نانوکامپوزیت MoS_2/C، ابتدا 0.5 g پلی‌اتیلن گلیکول و 0.1766 g آمونیوم مولیبدیت تراهیدرات در 20 cc آب دوبار تقطیر حل شد. سپس 10 cc محلول ۲ mMol تیواستامید به محلول بالا اضافه گردید تا محلول شفافی حاصل شود. سپس 0.088 g پودر گلوکز به محلول بالا اضافه گردید و به مدت ۳۰ دقیقه تحت آلتراسونیک قرار داده شد. پس از آن، محلول آبی هیدروکلریک اسید 12 mol به آرامی به محلول بالا اضافه شد تا PH محلول به عدد ۱ برسد. در نهایت محلول بدست آمده را داخل اتوکلاو استیل ریخته و به مدت ۱۸ ساعت در دمای ^{o}C ۱۸۰ قرار داده شد. ماده بدست آمده چندین بار با آب دوبار تقطیر سانتریفیوژ شده و برای مدت ۴۸ ساعت فریزدرایر گردید.

بحث و نتیجه گیری

مشخصه های ساختاری

شکل ۱ طیف XRD نانوکامپوزیت MoS_2/C را نشان می‌دهد. همانطور که در این شکل مشاهده می‌شود قله های پراش در زوایای ۱۴.۱، ۳۳.۳، ۳۹.۳، ۴۹.۲ و ۵۹.۳ منطبق بر بازتاب از صفحات کریستالی (۰۰۲)، (۱۰۰)، (۱۰۳)، (۱۰۵) و (۱۱۰) می‌باشد که مربوط به نمونه MoS_2 می‌باشد [۱۱] ولی دو قله پراش متفاوت در زوایای ۲۶/۲۲ و ۴۴/۳۶ مربوط به صفحات (۰۰۲) و (۱۰۱) کربن گرافیت می‌باشد [۱۲]. از این رو اتم‌های کربن در بین نانوورقه‌های MoS_2 قرار گرفته‌اند. ثابت شبکه 6.25 Å و اندازه بلوری 28.80 nm با استفاده از اندیس‌های میلر و رابطه دبای شرر محاسبه شد.

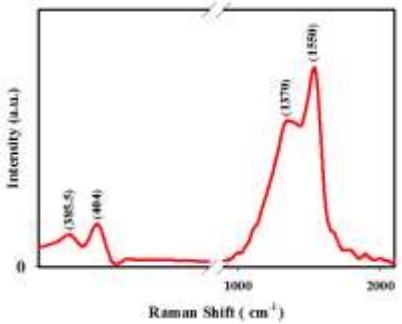


شکل۱. طیف XRD نانوکامپوزیت MoS_2/C .

شکل ۲ طیف رامان نمونه نانوکامپوزیت MoS_2/C را نشان می‌دهد. دو قله در عدد موج‌های $385.5\ cm^{-1}$ و $404\ cm^{-1}$ ساختار لایه‌ای هگزاگونال را مشخص می‌کند که پیک در اطراف cm^{-1} ۳۸۵.۵ به دلیل مد E^1_{2g} است که ارتعاش اتم‌های Mo و S را در صفحه مشخص می‌کند و پیک در اطراف cm^{-1} ۴۰۴ به دلیل ارتعاشات خارج از صفحه اتم‌های S (مد A_{1g}) می‌باشد و تفاوت فرکانسی بین این دو مد حاکی از ضخامت نانو ورقه‌های MoS_2 است [۱۳و۱۱] که در اینجا تفاوت فرکانسی بین این دو مد تقریبا $^{-}$۱۸.۵cm است و این نشان می‌دهد که ضخامت نانو ورقه‌های MoS_2 در حدود ۲-۳ لایه می‌باشد. همچنین دو پیک پهن در عددموج حدود $1370\ cm^{-1}$ و $1550\ cm^{-1}$ حضور اتم کربن آمورف را آشکار می‌کند [۱۲] که مؤید وجود اتم‌های کربن بر روی صفحات MoS_2 می‌باشد.

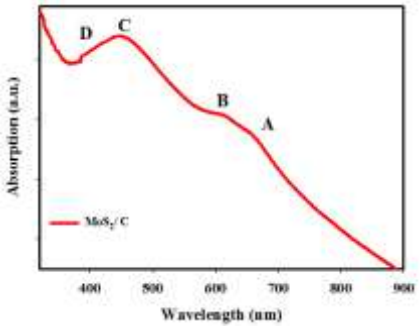
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

تکنیک UV–Vis برای مشخصه‌یابی نوری نانوکامپوزیت MoS_2/C بکار گرفته شده است. مشاهده می‌شود که پیک‌های A و B در بازه طول‌موجی ۶۰۰ تا ۷۰۰ نانومتر به دلیل گذار اکسیتونی در نقطه k، از منطقه بریلوئن MoS_2 لایه‌ای می‌باشد



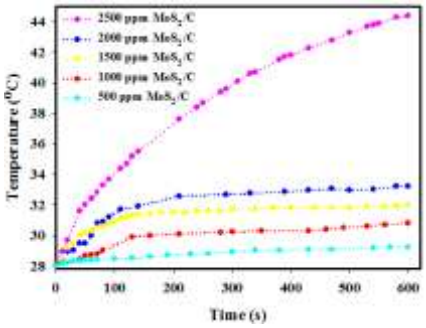
شکل۲. طیف رامان نمونه کامپوزیت MoS_2/C.

در حالیکه پیک جذبی پهن در ناحیه ۳۵۰ تا ۴۵۰ نانومتر (نقاط C و D) به دلیل گذار اکسیتونی در نواحی با چگالی حالت بالا در ناحیه بریلوئن ایجاد می‌گردد. مطالعات Wang و همکارانش نشان داد که موقعیت پیک A ضخامت لایه را مشخص می‌کند که موقعیت این پیک در این نمونه حدود 675 nm می‌باشد که معادل با انرژی 1.87 ev است. این مطلب نشان می‌دهد که نانو ورقه-های MoS_2 کمتر از ۴ لایه می‌باشند [۱۳] که توافق خوبی را با نتایج طیف رامان نشان می دهد.



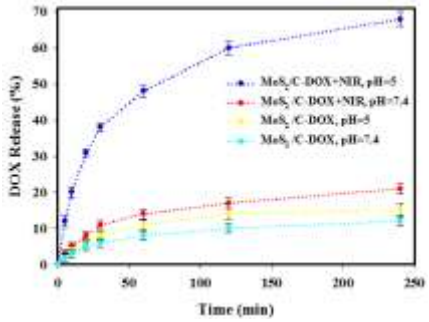
شکل۳. طیف UV–Vis از نمونه MoS_2/C.

برای بررسی اثر نورگرمایی نمونه، با غلظت‌های مختلف از نانوکامپوزیت MoS_2/C، تحت تاثیر یک لیزر پیوسته با طول موج 808 nm نانومتر و چگالی توان 1 W/cm^2 به مدت ۱۰ دقیقه قرار داده شد (شکل ۴). در این شکل، مشاهده می‌شود که MoS_2/C با غلظت 2500 ppm گرمای بیشتری نسبت به غلظت‌های پایین‌تر تولید می‌کند به طوریکه پس از مدت ۱۰ دقیقه دمای نانوکامپوزیت از 28 °C به 45 °C می‌رسد. از آنجا که سلول‌های سرطانی بسیار به دما حساس هستند بنابراین این کامپوزیت می‌تواند کاندید بسیار مناسبی در زمینه درمان سرطان به روش نورگرمایی باشد [۱۱و۱۳].



شکل۴. نمودار نورگرمایی محلول‌های نانوکامپوزیت MoS_2/C.

از آنجا که نانوکامپوزیت مساحت سطحی بالایی دارد بنابراین میتواند ظرفیت جذب بالایی را از خود نشان دهد. پس از افزودن دارو به این نانوکامپوزیت مشاهده شد که میزان داروی دکستروبیسین بارگذاری شده در این نانوکامپوزیت حدود ۲۱٪ می‌باشد. سپس میزان داروی آزاد شده از این نانو کامپوزیت در pHهای ۵ و۷.۵ مورد بررسی قرار گرفت و مشاهده شد که بدون تابش لیزر به ترتیب ۲۱٪ و ۱۲٪ از دارو در pHهای ۵ و۷.۵ آزاد شدند (شکل ۵). در حالیکه در حضور تابش لیزر حدود ۶۸٪ از این دارو در pH=۵ آزاد شد.



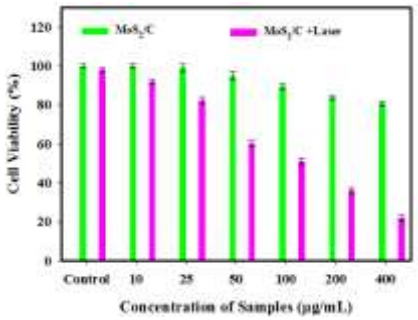
شکل ۵. میزان آزادسازی دارو درMoS_2/C با و بدون حضور تابش لیزر.

جهت بررسی سمیت سلول، آنالیز MTT به کار برده می‌شود تا زیست‌سازگاری سلول Hela با نانوکامپوزیت مورد بررسی قرار گیرد. همان‌طور که شکل ۶ نشان می‌دهد این نانوکامپوزیت سمیت ناچیزی را بدون تابش لیزر از خود نشان می‌دهد و زیست

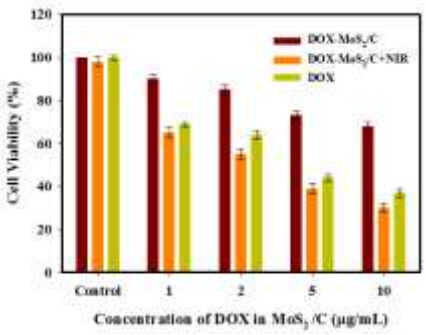
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

سازگاری نمونه در غلظت ۴۰۰ppm بالای ۸۰٪ باقی می‌ماند ولی در حضور تابش لیزر، زیست‌سازگاری سلول Hela با افزایش غلظت کاهش می‌یابد. بنابراین اثر سمیت سبب شده است که در حضور تابش لیزر، حدود ۷۹٪ از سلول Hela توسط این نانوکامپوزیت کشته شوند. بنابراین این نانوکامپوزیت می‌تواند به عنوان یک عامل نورگرمای خوب در زمینه درمان سرطان مورد استفاده قرار گیرد.

سپس تأثیر داروی دکستروبیسین بر روی این نانوکامپوزیت مورد بررسی قرار گرفت (شکل ۷). مشاهده شود که با افزایش غلظت دارو و تابش لیزر میزان زیست سازگاری سلول کاهش می یابد.



شکل ۶. تأثیر غلظت نانوکامپوزیت MoS_2/C بر زیست سازگاری سلول Hela.



شکل ۷. تأثیر غلظت داروی دکستروبیسین بارگذاری شده در MoS_2/C بر زیست سازگاری سلول Hela.

نتیجه گیری

در این تحقیق، نانوکامپوزیت MoS_2/C به روش گرمابی سنتز شد، سپس ویژگی‌های ساختاری، اپتیکی، نورگرمایی و زیست سازگاری نمونه‌ها مورد بررسی قرار گرفت. نتایج XRD، طیف رامان نشان دادند که نانو ذرات کربن به خوبی در بین نانو ورقه‌های MoS_2 قرار گرفته‌اند و نیز نتایج نورگرمایی نشان داد که نانوکامپوزیت خاصیت نورگرمایی بسیار خوبی از خود نشان می‌دهد. بنابراین این کامپوزیت می‌تواند کاندید بسیار مناسبی جهت درمان سرطان به روش نورگرمایی باشد. پس از بارگذاری دارو در MoS_2/C، آزمایش MTT اثر ضدسرطانی در نابودی سلول سرطانی را نحت تابش لیزر ۸۰۸ نانومتر تأیید کرد. همچنین میزان آزادسازی دارو به میزان pH محلول و نیز تابش لیزر بستگی دارد. همچنین میزان زیست سازگاری سلول Hela به مواردی از جمله: غلظت نانوکامپوزیت، غلظت دارو و تابش لیزر بستگی دارد. بنابراین برای اولین بار اظهار میشود که نانوکامپوزیت MoS_2/C میتواند به عنوان یک عامل نورگرما در درمان سرطان استفاده شود.

مراجع

[1]. X. Song, Q. Chen, Z. Liu, Nano Res. 8 (2015) 340–354.
[2]. J. Yu, W. Yin, X. Zheng, G. Tian,X. Zhang, T. Bao, X. Dong, Z. Wang, Z. Gu, X. Ma1, Y. Zhao, J. Theranostics, 5 (2015) 931-945.
[3]. Z. Zha, J. Wang, E. Qu, S. Zhang, Y. Jin, S. Wang, Z. Dai, *Sci. Rep.* 3 (2013) 2360-2368.
[4]. S. S. Chou, B. Kaehr, J. Kim, B. M. Foley, M. De, P. E. Hopkins, J. Huang, C. J. Brinker, V. P. Dravid, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl*. 52 (2013) 4160–4164.
[5]. J. Zhou, Z. Lu, X. Zhu, X. Wang, Y. Liao, Z. Ma, F. Li, Biomaterials, 34 (2013) 9584-9592.
[6]. X. Yi, K. Yang, C. Liang, X. Zhong, P. Ning, G. Song, D. Wang, C. Ge, C. Chen, Z. Chai,Z. Liu, *Adv. Funct. Mater*.25 (2015) 4689-4699.
[7]. A. Molina-Sanchez, K. Hummer, L. Wirtz, *Surf. Sci. Reports*. 70 (2015) 554-586.
[8]. X. Tu, Y. Ma, Y. Cao, J. Huang, M. Zhang, Z. Zhang, J. Mater. Chem. B. 2 (2014) 2184-2192.
[9]. D. J. Lim, M. Sim, L. Oh, K. Lim, H.Park, Arch. Pharm. Res.(2013), 37(1), 43-52.
[10]. L. Gu, A. R. Koymen, S. K. Mohanty, Sci. Rep. 4 (2014) 1-10.
[11]. L. Q. Fan, G. J. Liu, C. Y. Zhang, J. H. Wu, Y. L. Wei, *Int. J. Hydrog. Energy*. 40 (2015) 10150-10157.
[12]. J. Wang, C. Luo,T. Gao, A. Langrock, A. C. Mignerey, C. Wang, small, 11 (2015) 473-481.
[13]. A. Abareshi, M. Arshadi Pirlar, M. Houshiar, *Mater. Res. Express* 6 (2019) 105050.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

دوربری حالت درهم‌تنیده‌ای از دو کیوبیت ابررسانا

سلیمیان، سهیلا؛ توسلی، محمد کاظم؛ صحتی، نیره

گروه اپتیک و لیزر،دانشکده فیزیک،دانشگاه یزد

چکیده

در این مقاله با طراحی یک پروتکل، حالت نامعلوم درهم‌تنیده‌ای از دو کیوبیت ابررسانا بین دو نقطه دور از هم دوربری می‌شود. برای دوربری کوانتومی از حالت GHZ (گرینبرگر-هورن-زیلینگر) به عنوان کانال مورد نیاز استفاده می‌شود. پس از تولید این کانال و با درنظر گرفتن برهم‌کنش‌های مناسب بین کیوبیت‌های ابررسانا با یکدیگر و با تشدیدگرهای ابررسانا، حالت درهم‌تنیده مورد نظر از آزمایشگاه آلیس پس از عبور از درگاه‌های کوانتومی مناسب اعمال شده توسط باب دوربری می‌شود. توجه کنیم که میزان جفت‌شدگی کیوبیت‌های ابررسانا با یکدیگر و نیز با تشدیدگرهای ابررسانا با اعمال میدان‌های مغناطیسی خارجی تنظیم می‌شود.

واژه های کلیدی: *دوربری کوانتومی، حالت GHZ، حالت درهم‌تنیده، کیوبیت ابررسانا، تشدیدگر ابررسانا، درگاه کوانتومی*

Teleportation of the entangled state of two superconducting qubits

Salimian, Soheila;Tavassoly, Mohammad Kazem; Sehati,Nayere

Laser and Optics Group, Faculty of Physics, Yazd University

Abstract

In this paper via designing a protocol, an unknown entangled state of two superconducting qubits is teleported between two far points. In this scheme, the GHZ (Greenberger–Horne–Zeilinger) state is used as the necessary channel. After the generation of this channel and by considering proper interactions between superconducting qubits with each other and with LC resonators, the desired entangled state is teleported from Alice's to Bob's lab, after implementation of proper quantum gates by Bob. It should be noted that coupling of superconducting qubits with each other and with LC resonators are tunable by applying external magnetic fields.

***Keywords**: Quantum teleportation, GHZ state, Entangled state, Superconducting qubit, LC resonator, Quantum gate.*

PACS No.32

مقدمه

دوربری کوانتومی از پروتکل‌های مهم در نظریه اطلاعات کوانتومی و ارتباطات کوانتومی به شمار می‌رود[۱]. در این فرایند حالت (با ضرایب) نامعین اتم فرستنده بدون انتقال فیزیکی اطلاعات، توسط کانال‌های کوانتومی و کلاسیکی به یک اتم گیرنده منتقل می‌شود. در دوربری کوانتومی که اولین بار توسط بنت و همکاران [۲] ارائه شد، کانال کوانتومی درهم‌تنیده نقش اصلی را ایفا می‌کند. تاکنون پروتکل‌های مختلف دوربری با درنظر گرفتن روش‌های مختلف و در سامانه‌های متنوعی مورد بررسی قرار گرفته است [۳، ٤]. این موضوع در حیطه تجربی نیز مورد توجه قرار گرفته و به آن پرداخته شده است [۵]. در این رابطه دوربری با مدارهای ابررسانا نیز بسیار مورد توجه است [٦]. از طرفی با توجه به این که در ارتباطات کوانتومی گاهی به سامانه‌هایی با چند کیوبیت نیاز است، ما در این مقاله حالت نامعلوم درهم‌تنیده از دو کیوبیت ابررسانا را دوربری می‌کنیم.

تولید حالت GHZ به عنوان کانال درهم‌تنیده

برای انجام فرآیند دوربری کوانتومی، دسترسی به یک کانال درهم‌تنیده ضروری است. بر این مبنا، هدف ما در این بخش تولید یک کانال درهم‌تنیده GHZ از کیوبیت‌های ابررسانا است که بتوانیم با استفاده از آن دوربری حالت درهم‌تنیده مورد نظرمان را

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

انجام دهیم. حالت‌های پایه و برانگیخته کیوبیت‌های ابررسانا به ترتیب با کت‌های حالت $|0\rangle$ و $|1\rangle$ نشان داده می‌شود. ابتدا فرض می‌کنیم سه کیوبیت ابررسانا در حالت پایه آماده‌سازی شده‌اند، $|\psi(0)\rangle_{3,4,5}=|0,0,0\rangle_{3,4,5}$، در اثر اعمال یک درگاه هادامارد بر روی کیوبیت ۳، حالت‌های این کیوبیت به صورت زیر تغییر می‌کند:

$$|0\rangle_3 \to \frac{|0\rangle_3+|1\rangle_3}{\sqrt{2}}, |1\rangle_3 \to \frac{|0\rangle_3-|1\rangle_3}{\sqrt{2}} \quad (۱)$$

بنابراین، با توجه به تغییر $|0\rangle_3$ حالت $|\psi(0)\rangle_{3,4,5}$ به شکل زیر درمی‌آید:

$$|\psi\rangle_{3,4,5}=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|0,0,0\rangle+|1,0,0\rangle\right)_{3,4,5} \quad (۲)$$

سپس این حالت با اعمال یک درگاه CNOT برای تغییر حالت کیوبیت ٤ با کیوبیت کنترل ۳به شکل زیر تبدیل می‌شود (در اثر اعمال این درگاه: $|1,0\rangle_{3,4}\to|1,1\rangle_{3,4}$، $|1,1\rangle_{3,4}\to|1,0\rangle_{3,4}$ و حالت‌های $|0,0\rangle_{3,4}$و$|0,1\rangle_{3,4}$ تغییری نمی‌کنند):

$$|\psi\rangle_{3,4,5}=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|0,0,0\rangle+|1,1,0\rangle\right)_{3,4,5} \quad (۳)$$

در نهایت، با اعمال یک درگاه CNOT برای تغییر حالت کیوبیت ٥ با کیوبیت کنترل ٤ (بنابراین $|1,0\rangle_{4,5}\to|1,1\rangle_{4,5}$، $|1,1\rangle_{4,5}\to|1,0\rangle_{4,5}$ و حالت‌های $|0,1\rangle_{4,5}$ و $|0,0\rangle_{4,5}$ تغییری نمی‌کنند.)، حالت نهایی GHZ برای سه کیوبیت ابررسانا به شکل زیر در می‌آید:

$$|GHZ\rangle_{3,4,5}=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|0,0,0\rangle+|1,1,1\rangle\right)_{3,4,5} \quad (٤)$$

حال که با اعمال دروازه‌های مناسب بر روی حالت کیوبیت‌های ابررسانا، حالت GHZ مورد نظر تولید شد، از این کانال برای انجام فرآیند دوربری کوانتومی استفاده می‌کنیم.

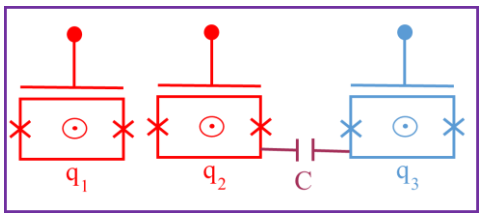
مدل دوربری کوانتومی

در این بخش به معرفی روش به کار گرفته شده برای دوربری یک حالت درهم‌تنیده کوانتومی می‌پردازیم. فرض کنید آلیس می‌خواهد یک حالت نامعلوم درهم‌تنیده از کیوبیت‌های ۱ و ۲ به صورت زیر

$$|\psi(0)\rangle_{1,2}=\alpha|0,0\rangle_{1,2}+\beta|1,1\rangle_{1,2} \quad (٥)$$

را به باب دوربری کند (ضرایب نامعلوم α و βاز شرط بهنجارش $|\alpha|^2+|\beta|^2=1$ پیروی می‌کنند). کیوبیت‌های۱، ۲ و ۳ در آزمایشگاه آلیس و کیوبیت‌های ٤ و٥ در آزمایشگاه باب قرار دارند. با در نظر گرفتن معادلات (٤) و (٥)، حالت اولیه کلی کیوبیت‌های ابررسانا برابر است با:

$$|\psi(0)\rangle_{1,2,3,4,5}=\frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha|0,0,1,1,1\rangle+\alpha|0,0,0,0,0\rangle+\beta|1,1,1,1,1\rangle+\beta|1,1,0,0,0\rangle) \quad (٦)$$



شکل ۱: طرحواره برهم‌کنش بین کیوبیت‌های ابررسانای ۲ و ۳ که با یک خازن با ظرفیت c به هم متصل شده‌اند در آزمایشگاه آلیس.

برای انجام فرآیند دوربری، همان طور که در شکل ۱ مشاهده می‌شود، برهم‌کنش بین کیوبیت‌های ابررسانای ۲ و۳ را در آزمایشگاه آلیس درنظر می‌گیریم. هامیلتونی کیوبیت‌های ابررسانای ۲ و ۳را به صورت زیر بیان می‌کنیم [۷]:

$$\frac{H}{\hbar}=\sum_{j=2}^{3}\frac{\omega_j}{2}\sigma_j^z+g\left(\sigma_2^+ +\sigma_2^-\right)\left(\sigma_3^+ +\sigma_3^-\right) \quad (۷)$$

ω_jبسامد گذار j –امین کیوبیت ابررسانا که $j=2,3$ ، σ_j^z و $\sigma_j^{\pm}$ به ترتیب عملگر نردبانی و عملگر پائولی j –امین کیوبیت ابررسانا هستند. هم‌چنین در رابطه (۷)، gثابت جفت‌شدگی کیوبیت‌های ابررسانای ۲ و ۳ است. بسامد کیوبیت‌های ابررسانای ۲ و ۳ با اعمال میدان خارجی به شکل $\omega_j=\omega_{0j}+\varepsilon_j\sin(\nu_j t)$ مدوله می‌شود [۸]، که ω_{0j} میانگین بسامد اعمال شده، ε_j و ν_j به ترتیب دامنه و بسامد j –امین میدان مغناطیسی خارجی هستند. در ادامه، دو عملگر یکانی به شکل زیر تعریف می‌شوند [۸]:

$$U_1=\exp\left[-i\sum_{j=2}^{3}\frac{\omega_{0j}}{2}\sigma_j^z t\right],\quad U_2=\exp\left[i\sum_{j=2}^{3}\sigma_j^z\frac{\alpha_j}{2}\cos(\nu_j t)\right], \quad (۸)$$

که $\alpha_j=\varepsilon_j/\nu_j$ است. هامیلتونی در تصویر برهم‌کنش، با اثر دادن دو عملگر یکانی معرفی شده در رابطه (۸) بر روی هامیلتونی (۷) به شکل زیر به دست می‌آید:

$$H_I=U^{\dagger}HU=g\sigma_2^+\sigma_3^-\exp[i\alpha_3\cos(\nu_3 t)-i\Delta t]+H.C. \quad (۹)$$

که در رابطه (۹)، از جانشینی‌های $U=U_1\times U_2$ و $\Delta=\omega_{03}-\omega_{02}$ استفاده شده است. با در نظر گرفتن شرط $\Delta=\nu_2+\nu_3$ و هم‌چنین با استفاده ازبسط ژاکوبی $\exp[i\alpha\cos(\nu t)]=\sum_{m=-\infty}^{\infty}i^m J_m(\alpha)\exp[im\nu t]$

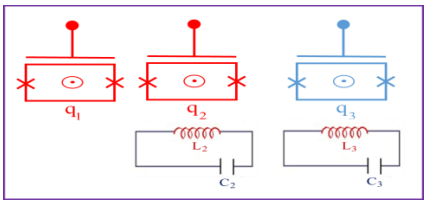
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

که $J_m(\alpha)$ توابع بسل مرتبه m نوع اول هستند [۹]، هامیلتونی موثر به شکل زیر به دست می‌آید:

$$H_{eff} = g_{eff}\left(\sigma_2^+\sigma_3^- + \sigma_2^-\sigma_3^+\right) \qquad (۱۰)$$

که در آن ثابت جفت‌شدگی موثر به صورت $g_{eff} = gJ_1(\alpha_3)J_0(\alpha_2)$ تعریف شده است. از رابطه (۱۰) پیداست که ثابت جفت‌شدگی با تغییر بسامد و دامنه میدان‌های مغناطیسی اعمال شده به کیوبیت‌های ابررسانا قابل کنترل است. با در نظر گرفتن حالت اولیه سامانه در رابطه (٦) و حل معادله شرودینگر وابسته به زمان متناظر با توجه به هامیلتونی (۱۰)، حالت کل سامانه در لحظه‌ی $g_{eff}t = \frac{\pi}{4}$ به حالت زیر تحول می‌یابد:

$$\begin{aligned}\left|\psi'\right\rangle_{1,2,3,4,5} &= \{\frac{\alpha}{\sqrt{2}}|0,0,1\rangle + \frac{\beta}{2}|1,1,1\rangle - \frac{i\beta}{2}|1,0,0\rangle\}_{1,2,3}\otimes|1,1\rangle_{4,5} \\ &+\{\frac{\beta}{\sqrt{2}}|1,1,0\rangle + \frac{\alpha}{2}|0,0,0\rangle - \frac{i\alpha}{2}|0,1,1\rangle\}_{1,2,3}\otimes|0,0\rangle_{4,5}\end{aligned} \qquad (۱۱)$$



شکل ۲: طرح‌واره برهم‌کنش کیوبیت‌های ابررسانای ۲ و ۳ با تشدیدگرهای LC در آزمایشگاه آلیس.

اکنون، برای از بین بردن بخش‌هایی از حالت کلی بالا که مزاحم دوربری کوانتومی هستند، همان طور که در شکل ۲ مشاهده می‌کنید، برهم‌کنشی بین هر کدام از کیوبیت‌های ابررسانای ۲ و ۳ با یک تشدیدگر LC را در نظر می‌گیریم. هامیلتونی برهم‌کنش کیوبیت‌های ابررسانا با تشدیدگرها به شکل زیر بیان می‌شود [۱۰]:

$$H_{qr} = \sum_{j=2}^{3} g_{jqr}\left(\sigma_j^+ + \sigma_j^-\right)\left(a_j + a_j^\dagger\right) \qquad (۱۲)$$

که g_{jqr} ثابت جفت‌شدگی بین j –امین کیوبیت ابررسانا و تشدیدگر LC است. a_j ($a_j^\dagger$)عملگر نابودی (آفرینش) j –امین تشدیدگر LC و $\sigma_j^\pm$ عملگر نردبانی j –امین کیوبیت ابررسانا است. حال هامیلتونی (۱۲) در تصویر برهم‌کنش با اثر دادن عملگر یکانی‌ای که به صورت زیر تعریف می‌شود،

$$U_1^{'} = \exp\sum_{j=2}^{3}[-i(\frac{\omega_{0j}}{2}\sigma_j^z - \omega_{rj}a_j^\dagger a_j)t], \qquad (۱۳)$$

حاصل می‌شود، که در آن ω_{0j} و ω_{rj} به ترتیب گاف کیوبیت ابررسانا و بسامد تشدیدگر LC هستند و σ_j^z عملگر پائولی j–امین کیوبیت ابررسانا است. ثابت جفت‌شدگی کیوبیت و تشدیدگر ابررسانا، با اعمال میدان مغناطیسی خارجی بر روی کیوبیت‌های ابررسانا قابل کنترل است. عملگر یکانی‌ای که تاثیر میدان خارجی بر روی سامانه را نشان می‌دهد به شکل زیر است:

$$U_2^{'} = \exp\left[\sum_{j=2}^{3} i\sigma_j^z\frac{\alpha_j^{'}}{2}\cos(\nu_j^{'}t)\right], \qquad (۱٤)$$

که $\nu_j^{'}$ بسامد میدان خارجی اعمال شده بر روی j–امین کیوبیت ابررسانا و $\alpha_j^{'}$ نسبت دامنه به بسامد j–امین میدان مغناطیسی است.

در ادامه، با اثر دادن عملگرهای یکانی طبق روابط (۱۳) و (۱٤) بر روی هامیلتونی برهم‌کنش کیوبیت‌ها و تشدیدگرهای ابررسانا، معرفی شده در رابطه (۱۲) و استفاده از بسط ژاکوبی معرفی شده در مقاله و در نظر گرفتن شرایط زیر:

$$\nu_2^{'} = \omega_{02} + \omega_{r2}, \qquad \nu_3^{'} = \omega_{03} + \omega_{r3}, \qquad (۱۵)$$

هامیلتونی موثر به شکل زیر به دست می‌آید:

$$H_{qr}^{eff} = \sum_{j=2}^{3}\eta_j^{eff}\left(a_j^+\sigma_j^+ + a_j\sigma_j^-\right) \qquad (۱٦)$$

که ثابت‌های جفت‌شدگی موثر به شکل زیر تعریف شده‌اند:

$$\eta_2^{eff} = g_{2qr}J_1(\alpha_2), \qquad \eta_3^{eff} = g_{3qr}J_1(\alpha_3), \qquad (۱۷)$$

سپس، با فرض این که تشدیدگرهای ابررسانا در حالت خلاء هستند و با در نظر گرفتن حالت کلی سامانه طبق رابطه (۱۱) و هامیلتونی موثر سامانه در رابطه (۱٦)، با حل معادله وابسته به زمان شرودینگر، به تحول زمانی حالت سامانه دست می‌یابیم. به ویژه، حالت سامانه در لحظه‌ی خاص $\tau = \frac{\pi}{2\eta^{eff}}$ (که $\eta_2^{eff} = \eta_3^{eff} = \eta^{eff}$) به شکل زیر خواهد شد:

$$\begin{aligned}\left|\psi(\tau = \frac{\pi}{2\eta^{eff}})\right\rangle &= -\frac{i\beta}{\sqrt{2}}|1,1,1\rangle_{1,2,3}\otimes|0,0\rangle_{4,5}\otimes|0,1\rangle_{r2,r3} \\ &-\frac{i\alpha}{\sqrt{2}}|0,1,1\rangle\}_{1,2,3}\otimes|1,1\rangle_{4,5}\otimes|1,0\rangle_{r2,r3} \\ &+[\frac{\beta}{2}|1,1,1\rangle_{1,2,3}\otimes|1,1\rangle_{4,5} - \frac{i\alpha}{2}|0,1,1\rangle\}_{1,2,3}\otimes|0,0\rangle_{4,5}]\otimes|0,0\rangle_{r2,r3} \\ &-[\frac{i\beta}{2}|1,1,1\rangle_{1,2,3}\otimes|1,1\rangle_{4,5} + \frac{\alpha}{2}|0,1,1\rangle\}_{1,2,3}\otimes|0,0\rangle_{4,5}]\otimes|1,1\rangle_{r2,r3}.\end{aligned} \qquad (۱۸)$$

به وضوح دیده می‌شود که اگر آلیس در آزمایشگاه خود حالت تشدیدگرهای LC را $|1,1\rangle_{r2,r3}$ یا $|0,0\rangle_{r2,r3}$ اندازه‌گیری کند، آن‌گاه حالت‌های سامانه به ترتیب، برابر می‌شوند با:

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

$$\left|\psi'_{1,1}(\tau=\frac{\pi}{2\eta^{eff}})\right\rangle=\frac{-i\beta}{\sqrt{2}}|1,1,1\rangle_{1,2,3}\otimes|1,1\rangle_{4,5} \quad (۱۹)$$
$$-\frac{\alpha}{\sqrt{2}}|0,1,1\rangle_{1,2,3}\otimes|0,0\rangle_{4,5}$$

$$\left|\psi'_{0,0}(\tau=\frac{\pi}{2\eta^{eff}})\right\rangle=\frac{\beta}{\sqrt{2}}|1,1,1\rangle_{1,2,3}\otimes|1,1\rangle_{4,5} \quad (۲۰)$$
$$-\frac{i\alpha}{\sqrt{2}}|0,1,1\rangle_{1,2,3}\otimes|0,0\rangle_{4,5}.$$

در ادامه یک درگاه هادامارد بر روی کیوبیت ابررسانای ۱ اعمال می‌کنیم و بنابراین حالت‌های بهنجارشده‌ی سامانه، (۱۹) و (۲۰) به ترتیب به شکل زیر به دست می‌آیند:

$$\left|\psi''_{1,1}(\tau=\frac{\pi}{2\eta^{eff}})\right\rangle=-\left(\frac{\alpha}{\sqrt{2}}|0,0\rangle_{4,5}+\frac{i\beta}{\sqrt{2}}|1,1\rangle_{4,5}\right)\otimes|0,1,1\rangle_{1,2,3} \quad (۲۱)$$
$$+\left(-\frac{\alpha}{\sqrt{2}}|0,0\rangle_{4,5}+\frac{i\beta}{\sqrt{2}}|1,1\rangle_{4,5}\right)\otimes|1,1,1\rangle_{1,2,3}$$

$$\left|\psi''_{0,0}(\tau=\frac{\pi}{2\eta^{eff}})\right\rangle=\left(\frac{-i\alpha}{\sqrt{2}}|0,0\rangle_{4,5}+\frac{\beta}{\sqrt{2}}|1,1\rangle_{4,5}\right)\otimes|0,1,1\rangle_{1,2,3} \quad (۲۲)$$
$$-\left(\frac{i\alpha}{\sqrt{2}}|0,0\rangle_{4,5}+\frac{\beta}{\sqrt{2}}|1,1\rangle_{4,5}\right)\otimes|1,1,1\rangle_{1,2,3}$$

در نهایت آلیس روی کیوبیت‌های ۱، ۲ و۳ اندازه‌گیری انجام می‌دهد. نتیجه اندازه‌گیری یکی از دو حالت $|1,1,1\rangle$ یا $|0,1,1\rangle$ خواهد بود. سپس، آلیس نتیجه اندازه‌گیری را با روش‌های کلاسیکی به باب اطلاع می‌دهد. نتیجه اندازه‌گیری آلیس هرچه باشد، باب در ابتدا، بر روی کیوبیت ابررسانای ٤ یا ٥ درگاه فاز را اعمال می‌کند. اگر نتیجه اندازه گیری آلیس $|1,1,1\rangle$ باشد، آن‌گاه حالت کیوبیت‌های ابررسانای ٤ و٥ همان حالت درهم‌تنیده کیوبیت ابررسانای ۱ و ۲ آزمایشگاه آلیس خواهد بود. اما اگر نتیجه اندازه‌گیری آلیس $|0,1,1\rangle$ بود، آن‌گاه باب باید یک درگاه σ_z بر روی کیوبیت ابررسانای ٤ و یک درگاه واحد I روی کیوبیت ابررسانای ٥ اعمال کند تا حالت کیوبیت‌های ابررسانای ٤ و ٥، همان حالت مورد نظر برای دوربری یعنی رابطه (٥) باشد. بنابراین به شرط این که آلیس در آزمایشگاه خود حالت تشدیدگرهای LC را $|1,1\rangle_{r2,r3}$ یا $|0,0\rangle_{r2,r3}$ اندازه‌گیری کند، با مقایسه حالت درهم‌تنیده مورد نظر برای فرآیند دوربری در آزمایشگاه آلیس و حالت نهایی درهم‌تنیده که به آزمایشگاه باب دوربری شده است، مشاهده می‌شود که حالت دوربری شده به آزمایشگاه باب همان حالت آزمایشگاه آلیس است. بنابراین دوربری با بیشینه وفاداری انجام شده است. نهایتا تاکید می‌کنیم که فرآیند دوربری حالت درهم‌تنیده کیوبیت‌های ابررسانا بدون اندازه‌گیری حالت‌های بل انجام شد.

نتیجه‌گیری: در این مقاله یک پروتکل دوربری براساس مدارهای ابررسانا ارائه شد. در ابتدا حالت GHZ از سه کیوبیت ابررسانا تولید و سپس از این حالت به عنوان کانال برای هدف دوربری حالت درهم‌تنیده‌ی دیگری از دو کیوبیت ابررسانا استفاده گردید. در ادامه با کنترل برهم‌کنش بین دو کیوبیت ابررسانا در آزمایشگاه آلیس از طریق اعمال یک میدان مغناطیسی خارجی، برای رسیدن به دوربری، حالت‌های اضافی و مزاحم در حالت کلی به دست آمده را با برهمکنش با تشدیدگرهای LC بطور مناسبی حذف کردیم. نهایتا با اعمال درگاه‌های فاز، پاولی σ_z و واحد روی کیوبیت‌ها فرایند دوربری کامل گردید. بنابراین، بدون نیاز به اندازه‌گیری حالت‌های بل در طرح ارائه شده، حالت نامعلوم درهم‌تنیده از دو کیوبیت ابررسانا در آزمایشگاه آلیس به آزمایشگاه باب دوربری شد (یادآور می‌شویم که پروتکل ارائه شده توسط بنت و نیز برخی از پروتکل‌هایی که حتی اخیرا معرفی می‌شوند، شامل فرآیند اندازه‌گیری یکی از حالت‌های بل هستند که به لحاظ عملی مشکلات خاص خود را دارند).

مرجع‌ها

[1]S. Pirandola, J. Eisert, C. Weedbrook, A. Furusawa, and S. L. Braunstein; *Nat. photonics* **9** 641 (2015).
[2]C. H. Bennett, G. Brassard, C. Crepeau, R. Jozsa, A. Peres, and W. K. Wootters; *Phys.Rev. Lett.***70**1895 (1993).
[3]N. Sehati, and M. K. Tavassoly, *Quantum Inf. Process.* **16**, 193 (2017).
[4] N. Sehati, M. K. Tavassoly, and M. Ghasemi;*Eur. Phys. J. Plus***134** 552 (2019).
[5]S. Takeda, T. Mizuta, M. Fuwa, P. Van Loock, and A. Furusawa; *Nature* **500** 315 (2013).
[6] W. Pfaff, B. J. Hensen, H. Bernien, S. B. van Dam, M. S. Blok, T. H. Taminiau, Tiggelman,M.J., Schouten, R.N., Markham, M., Twitchen, D.J. andR. Hanson; *Science* **345** 532 (2014).
[7] J. K. Xie, S. L. Ma, Z. P. Yang, Z. Li, and F. L. Li; *Phys. Lett. A***382** 2626 (2018).
[8] X. Li, Y. Ma, J. Han, T. Chen, Y. Xu, W. Cai, H. Wang, Y. P. Song, Z. Y. Xue, Z. Q. Yin, andL. Sun; *Phys. Rev. Appl.* **10** 054009 (2018).
[9]D. L. Colton, R. Kress, and R. Kress;"Inverse acoustic and electromagnetic scattering theory".Berlin: Springer 32 (1998).
[10]P. B. Li, S. Y. Gao, and F. L. Li;".*Phys. Rev. A***86** 012318 (2012).

مطالعه عنصری ریزگردهای ریزشی شهر یزد با استفاده از بیناب‌نگاری فروشکست القایی لیزری (LIBS)

صدیقی، نفیسه[۱] ؛ حداد، محمد علی[۱و۲]

[۱] دانشکده فیزیک دانشگاه یزد، صفائیه، بلوار دانشگاه یزد، صندوق پستی: ۸۹۱۹۵-۷۴۱

[۲] گروه پژوهشی فوتونیک، آزمایشگاه تحقیقاتی بیناب‌نگاری لیزری، دانشگاه یزد، صفائیه، بلوار دانشگاه، یزد، صندوق پستی:۸۹۱۹۵-۷۴۱

چکیده

امروزه ریزگردها و طوفان‌های گرد و غبار به یک معضل جدی در بسیاری از مناطق جهان به‌ویژه نواحی خشک و نیمه خشک تبدیل شده است. اولین گام برای کنترل و مدیریت آثار مخرب ریزگردها شناسایی و تحلیل دقیق آن‌ها است. بدین منظور روش‌های گوناگون آنالیز عنصری برای شناسایی و مطالعه این دسته از مواد بکار گرفته می‌شود. در این پژوهش از روش بیناب‌نگاری فروشکست لیزری (LIBS) به منظور تشخیص عناصر موجود در گرد وغبارهای ریزشی شهر یزد استفاده شد، تحلیل و بررسی بیناب‌های نمونه‌ها نشان داد که عناصر موجود در ۵ نمونه یکسان هستند. نتایج حاصل از این تحقیق نشان می‌دهد که عمده عناصر تشکیل دهنده کلسیم، آهن، منیزیوم، آلومینیوم و همچنین عناصری با فراوانی کمتر مانند سیلیسیم، پتاسیم، سدیم، استرانسیوم، منگنز، تیتانیوم و کربن در ریزگردهای شهر یزد مشاهده شده‌اند.

واژه های کلیدی: *ریزگرد، طوفان های گردوغبار ، فروشکست القایی لیزری.*

Elemental analysis of air-full dust of Yazd city by Laser-Induced Breakdown Spectroscopy (LIBS)

Sedighi, Nafise[1]; Haddad, Mohammad Ali[1,2]

[1] Department of Physics, Yazd University, Yazd, Iran, PO Box 89195-741,
[2] Department of Physics, Photonic Research Group, Laser Spectroscopy Research Laboratory, Yazd University, Yazd, Iran PO Box 89195-741

Abstract

Today, the dust and the environmental pollutions caused by dust storms are known as a serious environmental hazard, particularly in arid and semi-arid civilian regions in the world. Controlling and decreasing the deleterious or undesirable effects of dust can be achieved by accurately identifying and elemental analysis of dust samples. For this goal, various elemental analysis methods are used to identify and study dust materials. In this study, we report the elemental analysis of falling dust of the World Heritage city of Yazd by using the laser-induced breakdown spectroscopy (LIBS) technique. The analyses, indicate that calcium, iron, magnesium, aluminum, and other elements with less abundance such as silicon, potassium, sodium, strontium, manganese, titanium, and carbon are the main elemental features of dust samples in Yazd.

***Keywords**: Dust, Dust Storm, Laser-Induced Breakdown Spectroscopy.*

مقدمه

ریزگردها و طوفان‌های گرد و غبار رخدادهای طبیعی هستند که در مناطق خشک و نیمه‌خشک به دلیل فرسایش زمین، تغییرات آب و هوایی، بیابان‌زایی و وزش بادهای شدید سطحی با غلظت قابل ملاحظه‌ای رخ می‌دهند. گرد و غبارهای بیابانی اغلب شامل مواد سمی، ترکیبات آلی سرطان‌زا و عناصر سنگین هستند که باعث اختلال در عملکرد دستگاه تنفسی و همچنین ایجاد تاثیرات مخرب بر سلامت موجودات زنده و محیط زیست می‌شوند به

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

همین علت پدیده گردوغبار به یک معضل جدی در بسیاری از مناطق جهان تبدیل شده است[۱].

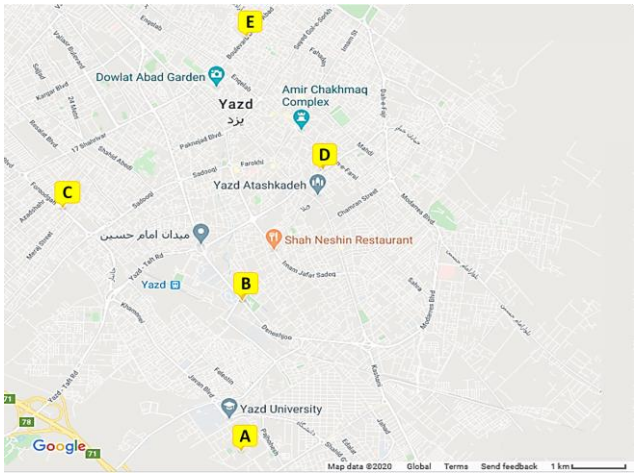
شهر یزد با وسعتی برابر ۲۳۹۷ کیلومتر مربع و در مختصات جغرافیایی " ۳ ' ۲۳ ° ٥٤ شرقی و " ٥٠ ' ٥٣ °۳۱ شمالی واقع در کویر مرکزی ایران با جمعیتی بالغ بر ۵۵۰۰۰۰ نفر و دارا بودن بیش از ۳٤۰۰ واحد صنعتی و معدنی فعال یکی از مهمترین شهرهای صنعتی در ایران محسوب می‌شود. بدلیل کمبود بارش سالیانه، خشکی منطقه و قرارگیری در مسیر بادهای با سرعت بالا شهر یزد در معرض گردوغبار محلی واقع شده است، به طوریکه در برخی از روزهای سال غلظت گردوغبار چندین برابر شده و تا مقدار ۱۱۵ میکروگرم بر مترمکعب و بیش از حد استاندارد افزایش می‌یابد. با توجه به تحقیقات انجام شده بر گرد و غبارهای شهر یزد، اغلب این ذرات قطر آیرودینامیکی کمتر از ۱۰ میکرون دارند که شدیدا بر سلامت، دید، اکوسیستم و کیفیت آب و هوا تاثیر می‌گذارند. این دسته از ذرات بدلیل اندازه کوچکشان می‌توانند به طور عمیق به مجاری ریه نفوذ کرده و منجر به بروز بیماری‌های قلبی وسکته، سرطان ریه و اختلالات تنفسی شوند. رسوب این ذرات بر آب و خاک باعث اسیدی شدن آب‌ها شده و تعادل مواد مغذی خاک و تنوع زیستی را از بین می‌برد. همچنین این ذرات می‌توانند در بلند مدت به مجسمه‌ها و ابنیه تاریخی صدمه وارد کنند. علاوه بر اندازه کوچک و عناصر تشکیل دهنده این ذرات، نوع ساختار و ترکیب آنها به‌گونه‌ای است که ممکن است عناصر سمی با نشست بر روی سطح ذرات، وارد بافت‌های بدن شده و سلامت فرد را به خطر بیاندازند[۲].

همان‌طور که بیان شد مطالعه و شناخت ماهیت ریزگردها بسیار حائز اهمیت است و موجب کنترل پیامدهای حاصل از وقوع این رویدادها می‌شود. در این راستا روش‌های گوناگونی برای مطالعه عنصری مواد و ساختارهای فیزیکی و شیمیایی ریزگردهای محیطی مورد استفاده قرار می‌گیرند که در این میان بکارگیری روش‌های بیناب‌نگاری لیزری بسیار پرکاربرد و دقیق هستند[۳].

این پژوهش با هدف شناسایی و تعیین عناصر موجود در ریزگردهای ریزشی شهر یزد با استفاده از روش بیناب‌نگاری فروشکست القایی لیزری انجام شده است.

نمونه‌ها و روش آزمایشگاهی:

برای انجام این پژوهش ۵ ناحیه از شهر یزد با توجه به تراکم اماکن مسکونی، بافت تاریخی و خیابان‌های پرترافیک انتخاب و به مدت یک ماه در شرایط یکسان، ریزگردهای ریزشی این مناطق جمع آوری و پس از کد گذاری به آزمایشگاه منتقل شد موقعیت شهری محل‌های نمونه برداری در شکل (۱) آمده است. به منظور حذف ترکیبات زائد از یک صافی آزمایشگاهی شماره ۱۰۰ استفاده شد و با استفاده از دستگاه قرص ساز از هر نمونه یک قرص به قطر ۱ سانتی‌متر و ضخامت ۱ میلی‌متر تهیه گردید.



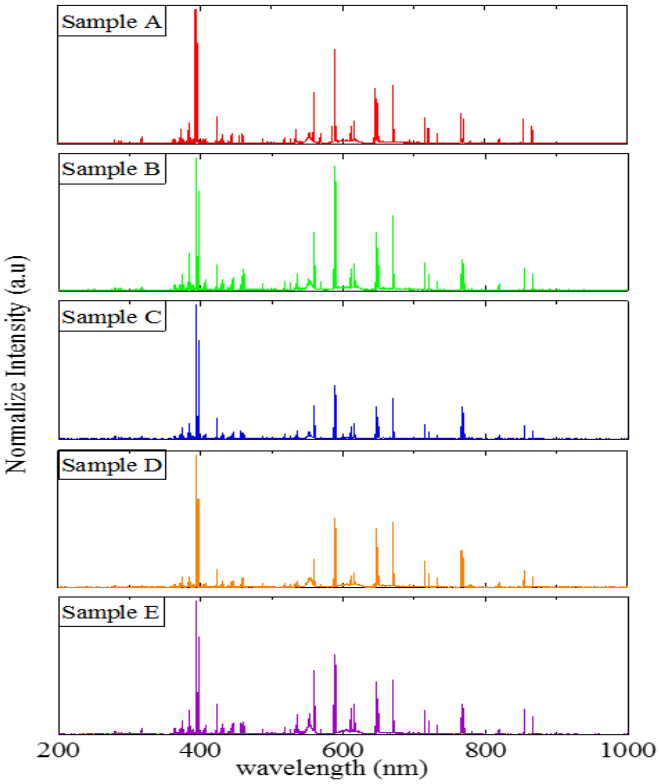
شکل ۱: موقعیت مکان‌های نمونه‌های جمع آوری ریزگردهای ریزشی در شهر مورد مطالعه شهر یزد (A: صفائیه، B: آبشاهی، C: آزادشهر، D: اکبرآباد، E: جنت آباد)

بیناب‌نگار فروشکست القایی لیزری یکی از روش‌های بیناب‌نگاری است که بر پایه لیزر استوار است. در این روش از پالس لیزر برای برانگیخته کردن مواد استفاده می‌شود در صورتی که چگالی توان پالس لیزر از مقدار آستانه شکست سطح نمونه بیشتر باشد، پلاسمای القایی در نقطه مورد نظر ایجاد می‌شود[۳]. مزایایی همچون غیر تماسی بودن، سرعت بالا، غیر مخرب بودن و همچنین کم بودن مقدار ماده‌ی مورد آزمایش (در حد نانوگرم) سبب شده که این روش در زمینه‌های مختلف کاربرد داشته باشد و مورد توجه همگان قرار گیرد[٤].

در این پژوهش برای انجام بیناب نگاری فرو شکست القایی لیزری از سیستم LIBSSCAN100 ساخت شرکت Applied Photonic استفاده شد. این سیستم مجهز به لیزر Nd:YAG در

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

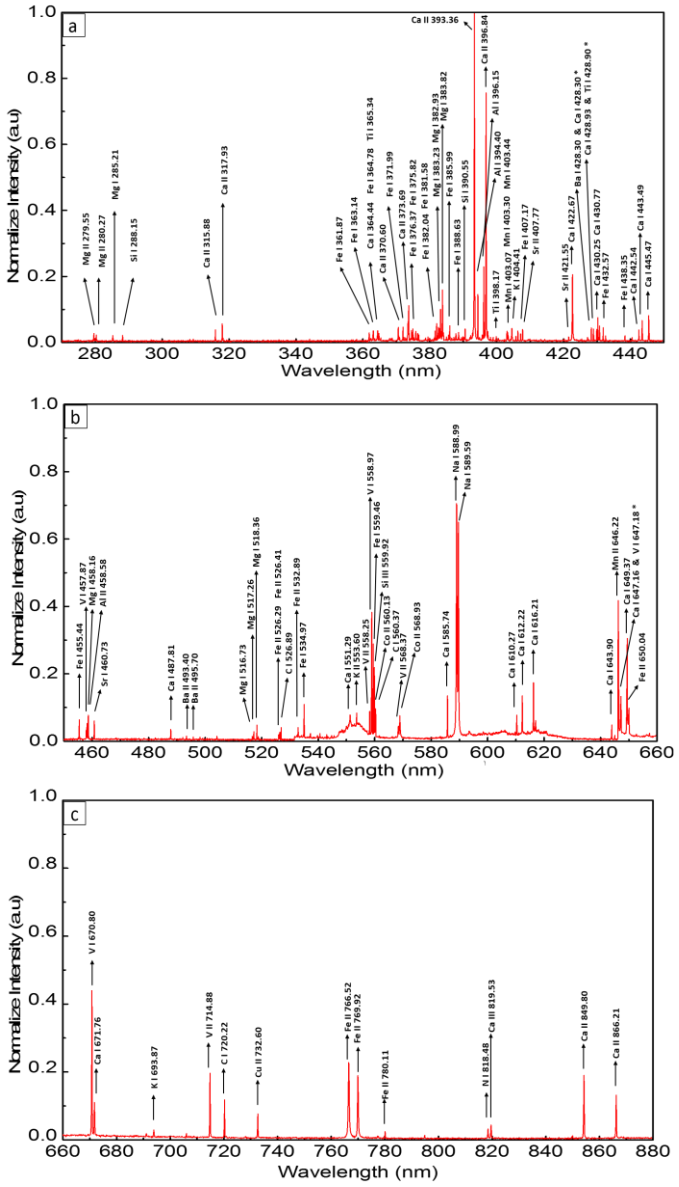
طول موج ۱۰٦٤ نانومتر و انرژی خروجی ۱۰۰ mJ با پهنای تپ ۲±۷ نانوثانیه و نرخ تکرار متغیر ۱ تا ۲۰ هرتز است. پرتو خروجی لیزر توسط یک عدسی بر روی نمونه کانونی شده، تا شدت نسبی مورد نیاز تولید پلاسما ($1/4GW/cm^2$) فراهم شود. نشر پلاسمای تولید شده از نمونه توسط فیبرهای اپتیکی جمع‌آوری و به آشکارساز فرستاده می‌شود. آشکارساز این سیستم از ۸ اسپکترومتر که به همدیگر سری شده تشکیل شده است که قابلیت ثبت بینابی با دقت ۰/۰٤ نانومتر در ناحیه بینابی ۲۰۰ الی ۱۲۰۰ نانومتر را داراست.



شکل۲ : بینابی فروشکست القایی لیزری ۵ نمونه گردوغبار ریزشی شهر یزد

برای هر نمونه ده مرحله آزمایش تکرار شد و پس از میانگین گیری، شدت قله‌های مشاهده شده نرمال شد و در نهایت بینابی مربوط به هر نمونه ترسیم شد. بینابی نشری فروشکست القایی لیزری ۵ نمونه گردوغبار شهر یزد در شکل (۲) آمده است. در این پژوهش مقایسه خطوط بینابی مشاهد شده در بینابی نمونه‌های مورد بررسی نشان می‌دهد که محل بینابی خطوط متناظر در طول موج‌های یکسان (با دقت صدم نانومتر) قرار می‌گیرند و این حاکی از آن است که بیشتر عناصر تشکیل دهنده نمونه‌ها یکسان هستند و تنها شدت برخی قله‌ها در بینابی‌ها متفاوت است که می‌تواند ناشی از تفاوت در غلظت عناصر موجود در نمونه‌ها باشد. به عنوان تحلیل و ارایه نتایج بینابی فروشکست القایی لیزری مربوط به نمونه A در شکل(۳) در بازه‌های طول موجی مختلف نشان داده شده است.

تمامی عناصر و طول موج خطوط مشاهده شده در بینابی فروشکست القایی لیزری مربوط به هر عنصر در جدول (۱) آمده است.



شکل۳ : بینابی ثبت شده LIBS نمونه A در بازه‌ی طول موجی (۲۷۰- nm) a(٤٥٠ -٦٦٠ nm)، b(٤٥٠ -٦٦٠ nm) و c(٦٦٠- ۸۸۰ nm).

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

جدول۱ : نام عناصر و طول موج قله‌های مشاهده شده مربوط به بیناب LIBS نمونه A.

نام عنصر	طول موج قله‌های مشاهده شده (nm)
C I	720.22, 526.89
Na I	588.99, 589.59
Mg I	285.21, 382.93, 516.73, 517.26, 518.36
Mg II	279.55, 280.27
Al I	394.40, 396.15,
Si I	288.15, 390.55
Si III	559.92
K I	404.41, 693.87
Ca I	364.44, 422.67,428.30, 430.25, 430.77, 442.54, 443.49, 445.47, 487.81, 487.81, 610.27, 612.22, 616.21, 643.90, 646.25, 649.37, 671.76
Ca II	315.88, 317.93, 370.60, 373.69, 393.36, 396.84, 849.80, 866.21
Ti I	365.34, 398.17
V I	647.18, 670.80
V II	568.37
Mn I	403.07, 403.30, 403.44
Fe I	361.87, 363.14, 364.78, 371.99, 375.82, 376.37, 381.58, 382.04, 407.17, 432.57, 438.35, 780.11, 534.97, 559.46
Co II	560.13, 568.93
Sr I	460.73
Sr II	407.77, 421.55
Ba II	493.40, 495.70
Pb I	405.78

تحلیل و بررسی بیناب فروشکست القایی لیزری با استفاده از بانک داده‌های بینابی[۵] نشان می‌دهد که عناصر کلسیم (Ca)، آلومینیوم (Al)، آهن (Fe)، پتاسیم (K)، سیلیسیم (Si)، منیزم (Mg)، کربن(Ca)، استرانسیم(Sr)، تیتانیم(Ti)، سدیم(Na)، کبالت(Co)، سرب (Pb) و وانادیوم(V) در نمونه‌های ریزگردهای ریزشی شهر یزد یافت شده‌اند. همچنین قابل ذکر است که در حین ثبت بیناب مربوط به نمونه‌ها، بیناب عناصر موجود در هوا حذف شده است.

بحث و نتیجه گیری

در این پژوهش بیناب‌های LIBS حاصل از ۵ نمونه ریزگردهای ریزشی شهر یزد بررسی شد و نشان داده شد که اغلب عناصر موجود در نمونه‌ها یکسان هستند. بیشتر قله‌های مشاهده شده در بیناب‌ها فروشکست القایی لیزری مربوط به عناصر کلسیم و آهن می‌باشند. همچنین قله‌های پر شدت ثبت شده مربوط به عناصر کلسیم، آلومینیوم، سدیم، وانادیم و منگنز هستند.

همان‌طور که مشاهده می‌شود قله های مربوط به عناصر سمی و فلزات سنگین همچون وانادیم، کبالت و سرب در بیناب نمونه‌ها شدت کمی دارند و این نشان دهنده آن است که به صورت کیفی غلظت این عناصر در مقایسه با عناصر دیگر به میزان کمتری یافت شده است. تحلیل دقیق کمی عناصر مشاهده شده در بررسی‌های بیناب‌های نشری ضبط شده، نیازمند بررسی‌ها و کسب اطمینان علمی بیشتری است که در مقالات آتی نتایج آن گزارش خواهد شد.

با استفاده از روش بیناب نگاری فروشکست القایی لیزری در این پژوهش نشان داده است که بکارگیری آن بدلیل دقت اندازه‌گیری و شناسایی عنصری در مقایسه با روش‌های دیگر تحلیل عنصری مواد و آلودگی‌های محیطی از جمله بیناب‌نگاری تفکیک انرژی پرتو ایکس منجر به بدست آوردن نتایج معتبری خواهد شد[٦]. همچنین قابل ذکر است که مطالعه ساختاری، توزیع اندازه و مورفولوژی نمونه های مورد بررسی در مرجع [٦] آورده شده است.

سپاسگزاری

از مسئولین محترم پژوهشکده علوم و فناوری اپتیک و لیزر دانشگاه صنعتی مالک اشتر و همکاری صمیمانه سرکار خانم دکتر همتی که ما را در انجام این پژوهش یاری نموده اند، سپاسگزاری می‌شود.

مرجع‌ها

[1] X. Liuand Y. He, "Quantitative determination of Cd in soil using laser-induced breakdown spectroscopy in air and ar conditions," *Molecules*, vol. 23, no. 10, pp. 2492, 2018.

[2] T. Sandstrom and B. Forsberg, "Desert dust: An unrecognized source of dangerous air pollution?," *Epidemiology*, vol. 19, no. 6, pp. 808–809, 2008.

[3] I. Rauschenbach, V. Lazic, S. G. Pavlov, H. W. Hübers, and E. K. Jessberger, "Laser induced breakdown spectroscopy on soils and rocks: Influence of the sample temperature, moisture and roughness," *Spectrochim. Acta - Part B At. Spectrosc.*, vol. 63, no. 10, pp. 1205–1215, 2008.

[4] A. Reyhani, S. Z. Mortazavi, P. Parvin, and Z. Mahmoudi, "Simultaneous laser induced breakdown spectroscopy and Pd-assisted methane decomposition at different pressures," *Spectrochim. Acta - Part B At. Spectrosc.*, vol. 74–75, pp. 124–130, 2012.

[5] "NIST: Atomic Spectra Database Lines Form." https://physics.nist.gov/PhysRefData/ASD/lines_form.html (accessed May 28, 2020).

[6] ن. صدیقی، م. حداد، ح. مطهری، "مشخصه‌یابی ریزگردهای ریزشی شهر یزد با استفاده از پراش اشعه ایکس (XRD): تحلیل عنصری و کانی شناسی ریزگردها"، *انجمن اپتیک و فوتونیک ایران*، صفحه ۷۸۴-۷۸۱، سال ۱۳۹۸.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

تاثیر عامل‌دار کردن لبه های نانونوار فسفرین زیگزاگی روی خواص الکترونیکی آن

بهزادی ، فهیمه[۱] ؛ جمال زاده خیرآبادی، شریعه[۲]

[۱] گروه فیزیک دانشگاه فسا، میدان بهمن‌بیگی ، فسا

[۲] گروه مهندسی برق، واحد شیراز ، دانشگاه آزاد اسلامی ، شیراز

چکیده

در این مقاله، تاثیر عامل‌دار کردن لبه‌های نانونوار فسفرین زیگزاگی بر خواص الکترونیکی آن بررسی گردید. با توجه به نوع عنصر (H و O) و چیدمان آن روی لبه چهار ساختار تشکیل گردید. بین آنها دو ساختار، نیمه‌رسانا با گاف انرژی غیرمستقیم می‌باشد. یکی از ساختارها از هر دوطرف نانونوار با H عامل‌دار شده است (A_1) و دیگری نیمه سمت چپ در دو طرف با O و در سمت راست هر دو طرف با H عامل‌دار شده است (A_4) به ترتیب دارای مقایر گاف انرژی ۱/۶۵ eV و ۰/۱۳eV است. اما دو ساختار دیگر رسانا هستند که در یکی هر دو طرف لبه ها با O عامل‌دار شده است (A_2) و در دیگری یک طرف با H و طرف دیگر با O عامل‌دار شده است (A_3). در بازه ولتاژ۰ تا ۲ V جریان بسیار کمی از دوساختار A_1 و A_4 نسبت به دو ساختار دیگر می‌گذرد که به دلیل وجود گاف انرژی است. برای این دوساختار در ابتدا جریان صفر و بعد از ولتاژ خاصی که به ترتیب برابر با ۱/۶ V و ۱ V است، جریان شروع به افزایش می‌کند. صفر بودن جریان در ولتاژ کم این قابلیت را بوجود می‌آورد که بتوان قطعات الکترونیکی کم مصرف در این محدوده ولتاژ ساخت. پدیده جالب دیگر بوجود آمدن مقاومت منفی در برخی پتانسیل‌ها برای نمونه‌های A_2 ، A_3 و A_4است، که در حیطه صرفه‌جویی انرژی بسیار کاربرد دارد.

واژه های کلیدی: *نانونوار فسفرین، زیگزاگ، خواص الکترونیکی، مقاومت منفی.*

The effect of the functionalization of edges of the zigzag nanoribbon phosphorene on its electronic properties

Behzadi, Fahimeh[1]; Jamalzadeh Kheirabadi, Sharieh[2]

[1] Department of Physics, University of Fasa, Fasa
[2] Department of Electrical Engineering, Shiraz Branch, Islamic Azad University, Shiraz, Iran.

Abstract

In this paper, the effect of the functionalization of the zigzag phosphorene nanoribbon edges on its electronic properties is investigated. According to the type of the materials (H and O) and their arrangements on the edges, four structures are formed. Among them, two structures are semiconductors with indirect band gap. One of them have been functionalized with H on both edges of the nanoribbon (A_1) and in the other one, both edges of the left side are functionalized with O and both edges of the right side are functionalized with H (A_4) with values 1.65 eV and 0.13 eV, respectively. But two other structures are metals which one is functionalized with O in both edges (A_2) and the other is functionalized with H in one edge and O in other edge (A_3). In the range of voltage 0 to 2 V, there is a little current passed through the A_1 and A_4 in comparison to the other structures due to their band gaps. For these two structures, the current is zero up to special voltages 1.6 V and 1 V, and after that the current increases. The zero value of current makes the capability to fabricate low consumption electronic devices in this range of voltages. The other interesting phenomenon is the existence of the negative resistance for some potential for A_2, A_3 and A_4 samples where it can be applicable in energy consuming.

Keywords: *phosphorene nanoribbon, functionalization, electronic properties, density functional theory.*

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

PACS No.

مقدمه

فسفرین یا تک لایه فسفر سیاه یکی از موضوعات جالب در سالهای اخیر است که تحقیقات گسترده‌ای روی آن انجام شده است. این ماده دارای ساختار لانه زنبوری سه بعدی چین خورده است که اتمها با نیروی واندروالس کنار یکدیگر قرار گرفته اند. فسفرین کاربردهای بسیاری در سلولهای خورشیدی [۱]، باطری‌ها [۲]، حسگرها [۳]، تبدیل و ذخیره انرژی [٤] و ... دارد. این ماده خواص ویژه‌ای مانند آزادی حرکت بار تا $V^{-1}s^{-1}$ ۱۰۰۰ و نرخ بالای نسبت روشن و خاموش شدن تا 10^5، در ترانزیستورها در دمای اتاق دارد [۵]. یکی از روش‌های ساخت نانونوار فسفرین، روش بالا به پایین است که در سال ۲۰۱۹، واتس و همکارانش [٦] با این روش طی یک فرایند دومرحله‌ای نانونوار با پهناهای متفاوت ساختند. با توجه به جهت برش از ساختار کریستالی فسفرین دو حالت نانونوار دسته صندلی و زیگزاگی حاصل می‌شود. یکی از عوامل مهم که در خواص الکترونیکی نانونوار فسفرین تاثیر می-گذارد عامل دار کردن لبه‌های نانونوار است. گو و همکارانش [۷] در تحقیقات خود به این نتیجه رسیدند که نانونوار فسفرین زیگزاگی اولیه (عامل دار نشده) فلز است درحالیکه نانونوار فسفرین زیگزاگی عامل‌دار شده، نیمه رسانا است. پنگ و همکارانش [۸] اثر عامل‌دار کردن لبه با عناصر مختلف روی خواص الکترونیکی نانونوار فسفرین را بررسی کردند و متوجه شدند که نانونوار دسته صندلی، نیمه‌رسانا باقی می‌ماند ولی نانونوار زیگزاگی بسته به نوع عنصر، نیمه‌رسانا یا رسانا می‌شود.

در این مقاله، تاثیر عامل‌دار کردن نانونوار فسفرین زیگزاگی با اتم‌های هیدروژن و اکسیژن روی خواص الکترونیکی آن مورد بررسی قرار می‌گیرد.

روش محاسباتی

محاسبات با توجه به نظریه تابعی چگالی کوانتومی با بسته محاسباتی سایستا [۹] انجام شده است. برای حل معادله کوهن-شم از تابع همبستگی تبادلی که توسط پردو-بورک-ارنزرهوف (PBE) [۱۰] با تقریب شیب کلی (GGA)، استفاده شده است. تابع موج برای تمام اتمها بر پایه قطبش دوگانه زتا (DZP) بسط داده شده است. انرژی قطع ۷۵ هارتری، دمای الکترون‌ها ۳۰۰ K فرض شده است. برای محاسبات خودسازگار حد مجاز محاسبات عددی 10^{-4} هارتری فرض شده است. ساختارها بگونه‌ای بهینه شده‌اند که نیروی وارد بر هر اتم کمتر از eV/Å ۰/۰۱ باشد. تعداد نقاط نمونه گیری k در فضای بریلوین ۲۱×۱×۱ درنظر گرفته شده است. جهت ساخت نوار در راستاهای x و y حداقل Å ۱۲ لایه خلاء، لحاظ شده است. جریان با مدول ترنسایستا، با توجه به فرمول لاندر [۱۱] محاسبه شده است:

$$I(V_b)=\frac{e}{h}\int T(E,V_b)[f_L(E,V_b)-f_R(E,V_b)]dE$$

که در آن e بار الکترون، h ثابت پلانک، V_b ولتاژ بایاس، $T(E,V_b)$ احتمال عبور الکترون از دستگاه، $f_L(E,V_b)$ و $f_R(E,V_b)$ تابع توزیع فرمی-دیراک به ترتیب برای الکترودهای چپ و راست است.

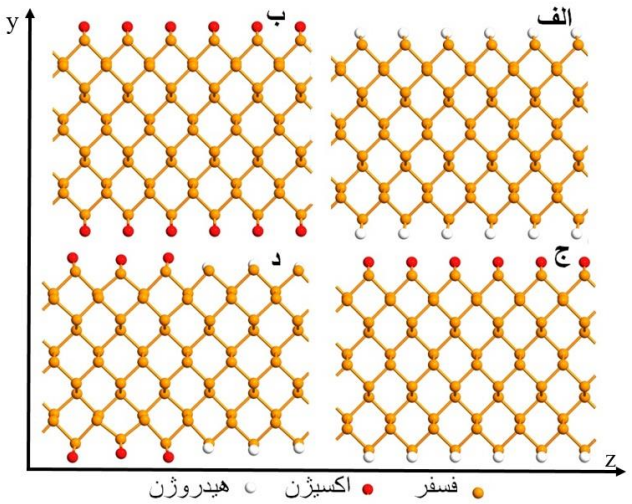
نتایج

در این پژوهش، نانونوار فسفرین با لبه زیگزاگی مورد بررسی قرارگرفته‌است. این ساختار با اتم‌های O و H به گونه ای عامل‌دار شده‌است که چهار ساختار مختلف مطابق شکل ۱ را تشکیل داده است. شکل ۱الف (ب) ساختاری را نشان می‌دهد که از هر دو طرف لبه‌ها با هیدروژن (اکسیژن) عامل‌دار شده است و با A_1 (A_2) نامگذاری شده‌است. ساختاری که یک لبه آن با هیدروژن و لبه دیگر با اکسیژن عامل‌دار شده است (شکل ۱ج)، A_3 نامیده شده است و ساختار آخر (شکل ۱د) که دو طرف لبه‌ها سمت چپ ساختار با اکسیژن و دو طرف لبه‌ها سمت راست با هیدروژن عامل‌دار شده‌است با A_4 برچسب‌گذاری شده‌است. همانطور که در شکل ۱ دیده می‌شود، شش ردیف اتم فسفرین به صورت رشته زیگزاگی قرار دارد، که در راستای محور z تکرار می‌شود.

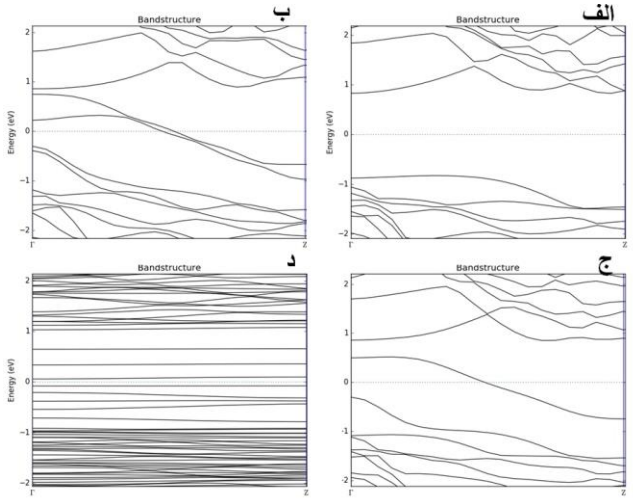
جهت بررسی خواص الکترونیکی ساختارها، نمودار نوار انرژی آنها محاسبه و در شکل ۲، رسم شده‌است. با توجه به شکل، ساختار A_1 یک نیمه رسانا با گاف انرژی غیرمستقیم است و مقدار

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

آن ۱/۶۵ eV می‌باشد. ساختارهای A_2 و A_3 رسانا و ساختار A_4 یک نیمه رسانای ضعیف با گاف انرژی غیرمستقیم ۰/۱۳ eV است.



شکل ۱: ساختار اتمی نانونوار فسفرین برای الف) A_1، ب) A_2، ج) A_3، د) A_4.

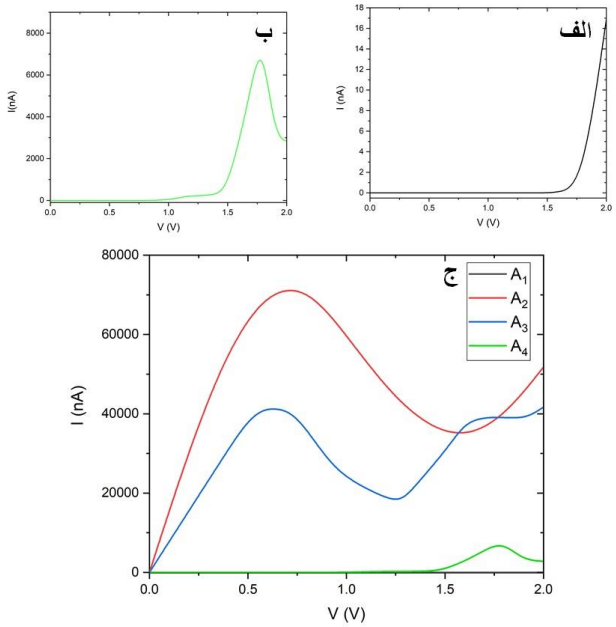


شکل ۲: الف) نوارهای انرژی نانونوار فسفرین زیگزاگی برای ساختارهای الف) A_1، ب) A_2، ج) A_3، د) A_4.

برای بررسی اثر ولتاژ بر جریان ساختارها، ابتدا دو الکترود به طول ۶/۲ Å به دو طرف ساختار اتصال داده شد و نمودار جریان برحسب ولتاژ، بین ولتاژهای ۰ تا ۲ V رسم گردید. همانگونه که در شکل۳ الف دیده می‌شود، برای ساختار A_1، جریان تا حدود ۱/۶ V صفر است و سپس با افزایش ولتاژ جریان افزایش می یابد.

البته همانطور که در شکل ۳ ج دیده می‌شود این جریان در مقایسه با جریانهای دیگر بسیار کم است و در ولتاژ ۲ V دارای مقدار ۱۶/۹ nA است. دلیل کم بودن جریان، وجود گاف انرژی نسبتا بزرگ است. این مطلب که جریان تا ولتاژ خاصی صفر است در نانوالکترونیک بسیار کاربرد دارد و می‌تواند به عنوان سوییچ مورد استفاده قرار گیرد. همچنین، می‌توان قطعه‌ای ساخت که در ولتاژ کم، توان مصرفی کمی دارد و در مصرف انرژی صرفه‌جویی می‌شود. شکل ۲ ب نشان می‌دهد، که جریان تا حدود ۱ V صفر است و سپس افزایش می‌یابد تا به مقدار ماکزیمم خود ۶۷۰۰ nA در حدود ۱/۸ V می‌رسد. سپس جریان کاهش می‌یابد که در این قسمت ساختار رفتار مقاومت منفی از خود نشان می‌دهد. ساختارهایی که رفتار مقاوت منفی از خود نشان می دهند در حیطه صرفه جویی انرژی بسیار کاربرد دارند. چون سیستم در ناحیه مقاوت منفی مصرف انرژی ندارد و در واقع به سیستم انرژی می‌دهد. درواقع نمونه A_4 انتخاب مناسبی برای ساخت قطعات الکترونیکی کم مصرف است زیرا هم در ولتاژ کم جریان صفر دارد و هم در ناحیه‌ای که جریان غیرصفر است مقاومت منفی وجود دارد. همانگونه که در شکل ۳ ج دیده می‌شود بیشترین پیک جریان مربوط به A_2 است که دوطرف نانونوار با اکسیژن عامل‌دار شده است و نشان دهنده نقش مهم اکسیژن در افزایش رسانندگی ساختار در ۰/۷ V است. برای بررسی دقیق‌تر دلیل بالاتر بودن جریان نمونه A_2 از جریان نمونه A_1، نوار انرژی دونمونه را با یکدیگر مقایسه می‌کنیم. در شکل ۲ ب دیده می‌شود که دو نوار انرژی، خط انرژی فرمی را قطع می کند در حالی‌که در شکل ۲ ج تنها یک نوار انرژی، خط انرژی فرمی را قطع می کند.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



شکل۳ : نمودار جریان برحسب ولتاژ برای الف) ساختار A_1، ب) ساختار A_2، ج) تمام ساختارها.

نتیجه گیری

در این تحقیق، تاثیر عامل‌دار کردن لبه‌های نانونوار فسفرین زیگزاگی بر خواص الکترونیکی آن بررسی گردید. چهار نوع ساختار با توجه به نوع عنصر و چیدمان آن روی لبه‌های آن معرفی گردید. دو ساختار A_1 و A_4 نیمه‌رسانا با گاف غیرمستقیم هستند و مقادیر گاف انرژی آنها به ترتیب ۱/۶۵ eV و ۰/۱۳ eV محاسبه گردید. اما دو ساختار دیگر رسانا هستند. در بازه ولتاژ۰ تا ۲ V جریان بسیار کمی از این دوساختار نسبت به دو ساختار دیگر می-گذرد که به دلیل وجود گاف انرژی است. برای این دوساختار در ابتدا جریان صفر و بعد از ولتاژ خاصی که برای دو ساختار A_1 و A_4 به ترتیب برابر با ۱/۶ V و ۱ V است جریان افزایش می‌یابد، که این توانایی را ایجاد می‌کند که بتوان قطعه‌ای ساخت که در ولتاژ کم، توان مصرفی کمی داشته باشد. مساله جالب دیگر بوجود آمدن مقاومت منفی در برخی پتانسیل‌ها است که در حیطه صرفه-جویی انرژی بسیار کاربرد دارد. بطور کلی از بین نمونه‌های مورد بررسی، نمونه A_4 انتخاب خوبی برای ساخت قطعات الکترونیکی کم مصرف است زیرا هم در ولتاژ کم در محدوده خاصی جریان صفر دارد و هم در دارای مقاومت منفی در برخی ولتاژها است.

مرجع‌ها

[۱] J. Dai, X. C. Zeng; " Bilayer Phosphorene: Effect of Stacking Order on Bandgap and Its Potential Applications in Thin-Film Solar Cells"; *The Journal of Physical Chemistry Letters* **5** (2014) 1289–1293.
[۲] H. H. Haseeb, Y. Li, S. Ayub, Q. Fang, L. Yu, K. Xu, F. Ma; "Defective Phosphorene as a Promising Anchoring Material for Lithium-Sulfur Batteries"; *The Journal of Physical Chemistry C* **124-5** (2020) 2739-2746.
[۳] N. Suvansinpan, F. Hussain, G. Zhang, H. C. Cheng, Y. Cai, Y.-W. Zhang; "Substitutionally doped phosphorene: electronic properties and gas sensing"; *Nanotechnology* **27** (2016) 065708.
[٤] J. Pang, A. Bachmatiuk, Y. Yin, B. Trzebicka, L. Zhao, L. Fu, R. G. Mendes, T. Gemming, Z. Liu and M. H. Rummeli; "Applications of phosphorene and Black Phosphorus in Energy Conversion and Storage devices"; *Adv. Energy Mater.***8** (2018) 1702093**.**
[٥] Q. Wu, L. Shen, M. Yang, Y. Q. Cai, Z. G. Huang, Y. P. Feng; "Electronic and transport properties of phosphorene nanoribbons"; *Phys. Rev. B: Condens. Matter Mater. Phys.* **92** (2015) 035436.
[٦] M. C. Watts, L. Picco, F.S. Russell-Pavier, *et al.*; "Production of phosphorene nanoribbons"; *Nature* **568** (2019) 216–220.
[٧] H. Guo, N. Lu, J. Dai, X. Wu and X. C. Zeng; "Phosphorene nanoribbons, nanotubes and van der Waals multilayers"; *J. Phys. Chem. C* **118** (2014) 14051–1405.
[٨] X. Peng and Q. Wei; "Edge effects on the electronic properties of phosphorene nanoribbons"; *J. Appl. Phys.***116** (2014) 144301.
[٩] J. M. Soler, E. Artacho, J. D. Gale, A. García, J. Junquera, P. Ordejón, D. Sánchez-Portal; "The SIESTA method forab initioorder-Nmaterials simulation"; *J. Phys.: Condensed Matter* **14** (2002) 2745–2779.
[۱۰] J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof; "Generalized gradient approximation made simple"; *Phys. Rev. Lett*. **77** (1996) 3865–3868.
[۱۱] S. Datta; "*Quantum Transport*"; Cambridge University Press, Cambridge University Press (2005).

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

استفاده از رادیونوکلئید ^{99m}Tc برای نشاندارسازی سم عقرب سیاه ایرانی

لیلا ولی پور یکانی[۱]، سید پژمان شیرمردی[۲]، فرشید باباپور مفرد[۱] مصطفی عرفانی[۲]، عباس زارع میرک آبادی[۳]

[۱]گروه مهندسی پرتوپزشکی، واحد علوم و تحقیقات، دانشگاه آزاد اسلامی، تهران، ایران

[۲] پژوهشگاه کاربرد پرتوها، پژوهشگاه علوم و فنون هسته ای، سازمان انرژی اتمی تهران، تهران، ایران

[۳]موسسه سرم سازی رازی، کرج

چکیده

مقدمه: *استفاده از ردیابهای رادیواکتیو در تحقیقات برای سم عقرب ، به منظور دنبال کردن پروسه توزیع بیولوژیکی سم عقرب بسیار کم گزارش شده است. اگرچه این روش نتایج عالی را برای مطالعات در توزیع بافتی و بیولوژیکی سم فراهم می آورد. در نتیجه جهت توسعه روشهای تولید آنتی سم قوی در استفاده کلینیکی درمان عقرب گزیدگی بسیار کمک کننده خواهد بود. در این تحقیق نشاندارسازی و ارزیابی توزیع بیولوژیکی سم عقرب سیاه توضیح داده شده است.*

مواد و روشها: *بخش سمی سم عقرب سیاه با ^{99m}Tc با روش مستقیم نشاندارسازی شد. مطالعات توزیع بیولوژیکی بعد از تزریق ترکیب نشاندار به موشهای سالم انجام شد.*

نتایج: *فرکشن سمی با موفقیت با ^{99m}Tc نشاندارسازی شد و بالاترین بهره **نشاندارسازی بیش** از ۹۱ ٪ بدست آمد. در مطالعات توزیع بیولوژیکی، تمرکز اکتیویته در ارگانها به این موضوع اشاره داشت که سایت ممکن متابولیسم سم، کبد می تواند باشد و کلیه‌ها ارگان اصلی دفع می باشند.*

نتیجه گیری: *نتیجه مطالعات ما نشان میدهد که نشاندارسازی سم عقرب با تکنسیوم می تواند یک ابزار مفید برای بررسی توزیع بیولوژیکی سم جهت استفاده کلینیکی باشد.*

واژه های کلیدی: *: عقرب سیاه، نشاندارسازی، ^{99m}Tc ، توزیع بیولوژیکی*

Using radionuclide ^{99m}Tc to labeling the Iranian black scorpion venom

Leila Valipour Yekany[1], Seyed Pezhman Shirmardi[2], Farshid Babapour Mofrad[1], Mostafa Erfani[2], Abbas Zare Mirekabadi[3]

[1]*Department of Medical Radiation Engineering, Sience and Research Branch, Islamic Azad University, Tehran, Iran*
[2]*Nuclear Science Research School, Nuclear Siences and Technology Research Institue, Tehran, Iran*
[3]*Razi Vaccine and Serum Research Institute, Karaj, Iran*

Abstract

Introduction: The use of radiotracers in research for scorpion venom to follow the biological distribution process of venom has been rarely reported although this method allows excellent results for studies in tissue and biological distribution of venom. As a result, it will be helpful to develop methods of producing potent anti-venom for the clinical use. In this study labeling and biological evaluation of Iranian black scorpion venom are described.
Methods: Toxic fraction of Androctonus crassicauda scorpion venom was labeled with ^{99m}Tc by direct method. Animal biodistribution studies performed after injection of labeled compound into normal rats.
Result: Toxic fractionation was successfully labeled with ^{99m}Tc, and labeling yield of > 91% was obtained. In biodistribution studies, concentration of activity in organs indicates that the possible site for metabolism of venom is liver, and kidneys are main organs of excretion in rats.
Conclusion: The results of the study indicated that scorpion venom labeling with ^{99m}Tc can be a useful tool for the biodistribution studies of the venom for clinical use.

***Keywords**: **Keyword:** Androctonus crassicauda, Radiolabeling, ^{99m}Tc , Chromatography*
PACS No. 28

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مقدمه

عقرب گزیدگی از جمله مهمترین مسائل بهداشتی و پزشکی در دنیاست. این مورد خصوصا در کشورهای توسعه نیافته نواحی گرمسیری و نیمه گرمسیری دارای اهمیت بیشتری می‌باشد و هر ساله جان هزاران نفر را با خطر مرگ مواجه می کند (۱). در ایران نیز عقرب گزیدگی از جمله مهمترین مسائل بهداشتی و پزشکی می‌باشد. طبق گزارشها، سالانه۴۰ تا ۵۰ هزار عقرب گزیدگی در ایران اتفاق می‌افتد (۲ و ۳). با توجه به اهمیت عقرب گزیدگی و خطرات ناشی از آن برای انسان، مطالعات در مورد سم عقرب از دیرباز مورد توجه محققین بوده است. انواع عقربها در ایران شامل بوتیده و اسکرپیونیده بوده و در ۱۶ جنس و ۲۵ گونه طبقه بندی می‌شوند (۴).

عقرب سیاه یکی از خطرناکترین عقربهای دنیا به حساب می‌آید که زیستگاه آن مناطق خشک و گرمسیری می‌باشد و در ایران گسترش زیادی دارد. این نوع عقرب جز خانواده بوتیده می‌باشد و دارای سم نوروتوکسیک است. در صورتی که این عقرب انسان را نیش بزند اکثر اعضای حیاتی بدن را درگیر کرده و منجر به مرگ خواهد شد (۵).

محتوا و سمیت زهر عقرب‌ها از یک گونه به گونه دیگر فرق دارد (۶). عقربهای یک گونه نیز از نظر میزان پروتئین و سمیت زهر با هم فرق دارند (۷). تفاوتی که بین توالی اسیدآمینه‌های هر زهر وجود دارد موجب تفاوت عمل و ایمنولوژیک زهر می‌شود (۸).

اطلاعات کمی در مورد مکانیسم ، عملکرد و توزیع بیولوژیکی سم انواع عقرب در انسان و حیوانات وجود دارد. در واقع جهت بهبود درمان عقرب گزیدگی انواع گونه های عقرب، ما نیاز به دانش عملکرد بیولوژیکی اختصاصی سم انواع عقربها داریم. همچنین، مطالعات توزیع بافتی جهت اهداف کلینیکی خیلی مهم می‌باشد. اگرچه تظاهرات بالینی سم عقرب سیاه ایرانی در آزمایش های تجربی بررسی شده است (۵ و ۹)، اما توزیع بیولوژیکی سم این گونه عقرب ایرانی با استفاده از مواد رادیواکتیو برای اهداف کلینیکی تاکنون در دنیا گزارش نشده است. یک رویکرد عالی برای دیدن توزیع بیولوژیکی از یک ماده ناشناخته مثل سم عقرب در ارگانهای مختلف، نشاندارسازی آن با مواد رادیونوکلوئید می‌باشد.

تا کنون نشاندارسازی سم جانوران با مواد رادیونوکلئید، بسیار کم گزارش شده است ولی تحقیقات انجام گرفته نتایج عالی را درتوزیع بافتی، فارماکوکینتیک وباند شدن یونی کانالها نشان داده‌اند. در نتیجه برای محققان امکان تولید آنتی سم قوی و درمان بسیاری از بیماریها به خصوص انواع مختلف سرطانها فراهم شده است.

^{99m}Tc رادیونوکلئید پیشگام در تحقیقات پزشکی هسته ای به دلیل خصوصیات هسته ای ایده‌آلش می‌باشد. این خصوصیات ایده‌آل عبارتند از: نیمه عمر 6 ساعت، انرژی گامای 140 keV ، دسترسی آسان به آن از طریق ژنراتور $^{99}Mo/^{99m}Tc$ و ثبات خوب شیمیایی نشاندارسازی (۱۰).

در این مطالعه ^{99m}Tc با بخش سمی سم عقرب سیاه ایرانی نشاندارسازی شد و توزیع بیولوژیکی، توزیع بافتی و ارگان های هدف ترکیب نشاندار مورد ارزیابی قرار گرفت.

مواد و روشها

تمام مواد شیمیایی از کمپانی های سیگما و فلوکا خریداری شدند. HPLC مدل (JASCO 880-PU(Japan و TLC مدل (AR 2000(North America Bioscan می‌باشند

فرکشنهای سمی سم عقرب آندروکتونوس کراسیکودا به حالت لیوفیلیزه از موسسه تحقیقات واکسن و سرم سازی رازی کرج تهیه گردید. سدیم پرتکنتات ($Na^{99m}TcO_4$) از ژنراتور تجاری $^{99}Mo/Tc^{99m}$ بدست آمد (بخش رادیوایزوتوپ ، AEOI).

الف: نشاندارسازی فراکسیون سمی با Tc^{99} و آنالیز رادیوشیمیایی فراکسیون سمی با Tc^{99m} به روش مستقیم نشاندارسازی شد. در این روش از کلرید قلع به عنوان عوامل کاهنده استفاده شد (۱۱ و ۱۲). مطالعات مقدماتی برای تشکیل شرایط بهینه انجام شد تا بالاترین بازدهی از نشاندارسازی فراکسیون سمی بدست آید.

عملکرد رادیوشیمی فراکسیون سمی توسط RP-HPLC در ستون C18 و TLC با کاغذ واتمن شماره یک و فاز سیال MFK و سالین تعیین شد.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

ب: مطالعات توزیع بیولوژیکی

جهت مطالعات توزیع بیولوژیکی، از موش های نر با وزن ۲۰۰-۲۵۰ گرم استفاده گردید به این موشها حدود 11.1 MBq (300μCi) از ترکیب سمی نشاندار از طریق رگ دمی تزریق گردید. در نهایت موشها در زمانهای ۱۵ دقیقه ، ۴۵ دقیقه و ۴ ساعت پس از تزریق ترکیب نشاندار قربانی شدند سپس اندامهای مختلف بدن موشها جدا شده و وزن اندامها بلافاصله (به صورت تازه) اندازه گیری شد و سپس رادیواکتیویته اندامها به صورت جداگانه با استفاده از آشکارساز NaI(Tl) شمارش شد.

میزان فعالیت تجمع یافته در هر اندام با عامل ID/g% بیان می‌شود. این عامل بیانگر این حقیقت است که چه درصدی از فعالیت کل در هر گرم از عضو مورد نظر تجمع یافته است.

$$ID/g\ \% = \frac{\frac{\text{Organ Count - B.G}}{\text{Total Count - B.G}}}{W} \times ۱۰۰$$

که در آن:

Organ Count : شمارش آشکارساز از عضو مربوطه

Total Count : شماره آشکارساز از نمونه شاهد

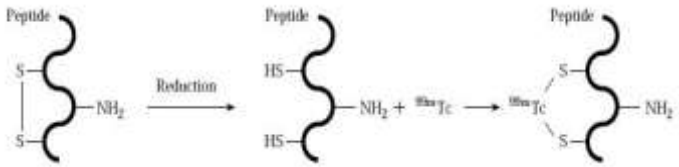
W : وزن عضو مربوط بر حسب گرم

B.G : شمارش آشکارساز از تابش زمینه

نتایج حاصل در نمودارهای شکل شماره (۲) نشان داده شده است.

نتایج و بحث

همانطور که گفته شد یک روش جالب برای دیدن توزیع بیولوژیکی و تمرکز ارگانی یک ماده مثل سم عقرب، نشاندارسازی آن با مواد رادیونوکلئید می باشد. تکنسیوم رادیونوکلئید پیشگام در تحقیقات پزشکی هسته ای می باشد. سه روش عمده اصلی جهت نشاندارسازی ^{99m}Tc وجود دارد: روش مستقیم، روش chelate و روش غیرمستقیم (۱۳ و ۱۴). به خاطر باندهای دی سولفیدی که در پروتئنها و قطعات وجود دارد معمولا از روش مستقیم جهت نشاندارسازی استفاده می شود. در این روش نشاندارسازی از ماده کاهنده جهت تبدیل تعدادی از پیوندهای دی سولفید به تیولهای آزاد استفاده می شود که در اتصال آنها به تکنسیوم کارآمد می‌باشد.



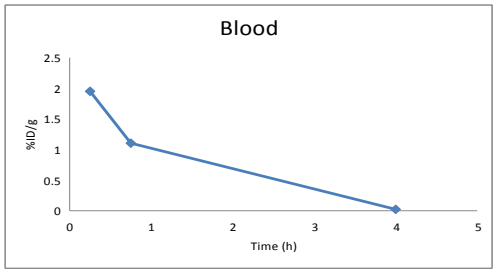
شک۱: تصویر شماتیک از فرآیند نشاندارسازی مستقیم پپتید با ^{99m}Tc

در این تحقیق ما از $SnCl_2$ به عنوان عامل کاهنده استفاده کردیم. روش نشاندارسازی مؤثر بود. بهره نشاندارسازی پس از تصفیه بوسیله ستون سفادکس G-25 بیش از ۹۱ ٪ بدست آمد.

خلوص رادیوشیمیایی بخش سمی نشاندار شده با استفاده از روشهای RTLC و RP-HPLC بیش از ۹۹ ٪ بدست آمد.

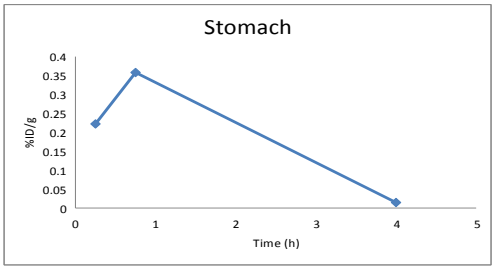
طبق نمودارهای شکل (۳) ، نتایج توزیع بیولوژیکی ترکیب نشاندار در موشها نشان دهنده پاکسازی ملایم ترکیب نشاندار از سیستم گردش خون بود (شکل ۲- a). جذب معده (شکل ۲- b) و تیروئید (شکل ۲- c) کم بود که نشان دهنده کیفیت خوب ترکیب نشاندار است. زیرا دو ارگان عمده هدف بعد از تزریق $^{99m}TcO_4^-$ در بدن تیروئید و معده هستند. جذب فعال $^{99m}TcO_4^-$ توسط این دو عضو می تواند به عنوان یک شاخص فیزیولوژیکی از خلوص آماده سازی رادیوشیمیایی استفاده شود.

بر اساس نتایج تمرکز اکتیویته در دو اندام کبد (شکل۲- d) و کلیه (شکل۲- e) می توان نتیجه گیری کرد که سایت ممکن برای متابولیسم سم، کبد است و کلیه ها ارگان اصلی دفع در رتها می باشند. وجود اکتیویته مغز (شکل۲ - f) در ۱۵ دقیقه بعد از تزریق نشان دهنده این موضوع است که ترکیب نشاندار می تواند از سد مغزی عبور کند.

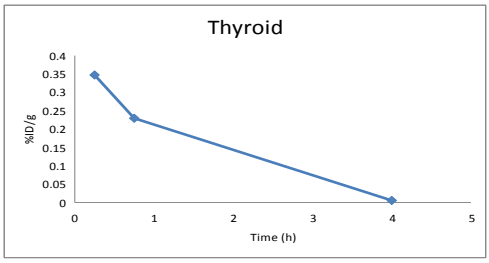


(شکل ۲- a)

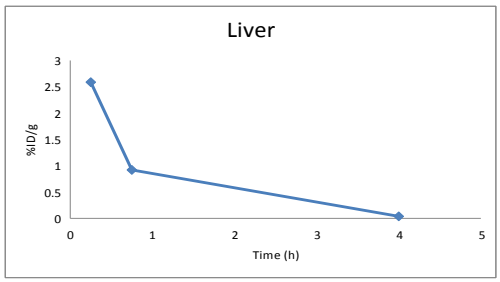
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



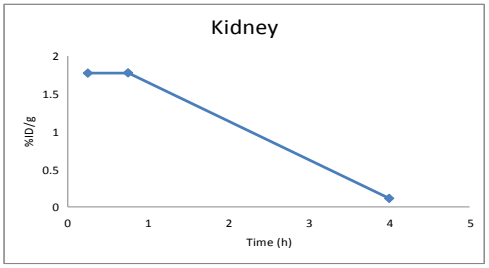
(شکل ۲- b)



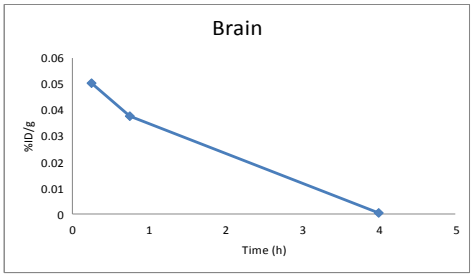
(شکل۲- c)



(شکل ۲- d)



(شکل ۲- e)



(شکل۲- f)

شکل۲ : نمودارهای مختلف شکل (۲) نشان دهنده توزیع بیولوژیکی ترکیب نشاندار سم با ^{99m}Tc در زمانهای مختلف ۱۵ دقیقه و ۴۵ دقیقه و ۴ ساعت (محور افقی نمودارها زمان بر اساس ساعت و محور عمودی ٪ID/g)

نتیجه گیری

نتایج این تحقیق نشان می دهد کـه نشاندارسـازی سـم عقـرب بـا ^{99m}Tc ابزار مفیدی برای مطالعات توزیع بیولـوژیکی سـم داخـل بدن است و شامل یک روش عالی برای نظارت بـر فرآینـد توزیـع بافتی سم جهت مقاصد کلینیکی می باشد.

سپاسگزاری

از همکاران گروه رادیوداروهای پژوهشکده کاربرد پرتوها تشکر و قدردانی می شود.

مرجع‌ها

[1] Farzanpay, R., *Knowing scorpions.* Tehran: University Publication, 1987.

[2] Kassiri, H., et al., *Epidemiological survey on scorpion sting envenomation in South-West, Iran.* Zahedan J Res Med Sci, 2012. **14**(8): p. 80-83.

[3] Dehghani, R. and B. Fathi, *Scorpion sting in Iran: a review.* Toxicon, 2012. **60**(5): p. 919-933.

[4] Shahbazzadeh, D., et al., *Epidemiological and clinical survey of scorpionism in Khuzestan province*. 2003, Iran.

[5] Radmanesh, M., *Androctonus crassicauda sting and its clinical study in Iran.* The Journal of tropical medicine and hygiene, 1990. **93**(5): p. 323-326.

[6] Borges, A., et al., *Diversity of long-chain toxins in Tityus zulianus and Tityus discrepans venoms (Scorpiones, Buthidae): molecular, immunological, and mass spectral analyses.* Comparative Biochemistry and Physiology Part C: Toxicology & Pharmacology, 2006. **142**(3-4): p. 240-252.

[7] Kalapothakis, E. and C. Chávez-Olórtegui, *Venom variability among several Tityus serrulatus specimens.* Toxicon, 1997. **35**(10): p. 1523-1529.

[8] Gwee, M., et al., *Studies on Venoms from the Black Scorpion Hetero-Metrus Longimanus and Some Other Scorpion Species.* Journal of Toxicology: Toxin Reviews, 1996. **15**(1): p. 37-57.

[9] Dehghani, R., T. Khamehchian, and M.A. Asadi, *Surveying the effect of Androctonus crassicauda venom on clinical manifestations in rats.* KAUMS Journal (FEYZ), 2006. **10**(2): p. 17-20.

[10] Banerjee, S., M.R.A. Pillai, and N. Ramamoorthy. *Evolution of Tc-99m in diagnostic radiopharmaceuticals*. in *Seminars in nuclear medicine*. 2001. Elsevier

[11] Pauwels, E., et al., *The labeling of proteins and LDL with 99mTc: a new direct method employing KBH4 and stannous chloride.* Nuclear medicine and biology, 1993. **20**(7): p. 825-833.

[12] Pujatti, P.B., C.J.R. Simal, and R.G.d. Santos, *Preparation of crotalus venom radiolabeled with technetium-99m as a tool for biodistribution study.* Brazilian Archives of Biology and Technology, 2005. **48**(SPE2): p. 9-12.

[13] Liu, S., D.S. Edwards, and J.A. Barrett, *99mTc labeling of highly potent small peptides.* Bioconjugate chemistry, 1997. **8**(5): p. 621-636.

[14] Gandomkar, M., et al., *Direct labelling of octreotide with99mTc: effect of different concentration of reducing agents and amount of sodium pertechnetate on radiolabelling efficiency.* Applied radiation and isotopes, 2003. **58**(3): p. 361-364.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

تحرک فونون‌های اپتیکی سطحی در گرافن

انصاری پور، قاسم ؛ الجادری، احمد

گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه بوعلی سینا، همدان

چکیده

گرافن بر روی بستر Al_2O_3 (آلومینیوم اکسید یا آلومینا) دارای دو شاخهٔ فونون سطحی قطبی است. شاخهٔ اول ω_{so1} دارای انرژی کمتری نسبت به شاخهٔ دوم ω_{so2} بوده و تحرک حامل‌ها متأثر از این دو شاخهٔ فونونی می باشد. در این پژوهش اثر پراکندگی فونون‌ها و فاصلهٔ ون در والس بین گرافن و بستر دی الکتریک قطبی بر روی تحرک حامل‌ها را بررسی می کنیم. همچنین تحرک حامل‌ها بر حسب چگالی آنها برای چند فاصلهٔ متفاوت بین گرافن و بستر دی الکتریک Al_2O_3 را محاسبه و رسم کرده‌ایم.

واژه های کلیدی: *. گرافن ، فونون قطبی سطحی، پراکندگی اپتیکی، تحرک*

Mobility of Surface Optical Phonons in Graphene

Ansaripour, Ghassem; Aljadiri, Ahmad

Department of Physics, Faculty of Science, Bu-Ali Sina University, Hamedan

Abstract

Graphene on Al_2O_3 substrate has two surface polar phonon branches which the first branch ω_{so1} has lower energy than that of the second ω_{so2} . In this research we investigate the effect of phonons scattering and the Van der Waal's distance between graphene and the polar dielectric substrate on the mobility of carriers. Also the mobility of carriers versus their density for several different distances between graphene and the Al_2O_3 substrate is calculated and plotted.

***Keywords**: Graphene, Surface polar phonon, Optic scattering, Mobility*

PACS No. 68

مقدمه

خواص ارتعاشی گرافن، نشان می‌دهد که پراکندگی فونون با برهم کنش جفت الکترون – فونون شکل می‌گیرد ودر بالاترین شاخهٔ فونون اپتیکی منجر به وقوع دو ناهنجاری کوهن می‌شود، بنابراین خواص فونون‌ها در گرافن مورد توجه محققان قرار گرفته است.

گرافن مادهٔ غیر قطبی است، بنابراین در حال حاضر نمونه‌های گرافن موجود از بسترهای قطبی مانند دی اکسید هافنیم (HfO_2)[1]، آلومینیوم اکسید- آلومینا – (Al_2O_3)[2]، و غیره برای مطالعات بنیادی و کاربردهای فناورانه استفاده می‌شوند. چنین بسترهای قطبی در نزدیکی رابط گرافن – بستر که به صورت یک منبع پراکندگی مهم برای حامل‌های بار امکان وجود فونون‌های نوری

[1] Hafnium dioxide.
[2] Aluminum Oxide.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

قطبی را در گرافن فراهم می‌کنند. بدین ترتیب مطالعهٔ اثرات جفت شدگی الکترون–فونون سطحی اپتیکی با استفاده از بسترهای قطبی که قبلاً اشاره کردیم برای درک کامل در تغییر خواص الکترونیکی در گرافن مهم است. بنابراین جفت شدگی الکترون – فونون نوری سطحی بر خواص ترابری تاثیر می‌گذارد که به دانشمندان اجازه می‌دهد تا برای بسیاری از مطالعات تجربی مختلف در گرافن نظریه‌پردازی کنند[41،42].

فرمول بندی نظری

ترابرد بیشتر الکترون‌ها بدون تاثیر پراکندگی ناشی از ناخالصی شیمیایی یا نقص بلوری انجام می شود. در حقیقت علت دیگر تحرک بالا مربوط به الکترون‌های استثنایی خود گرافن است. این الکترون‌ها با جرم موثر صفر حرکت می‌کنند. زمان واهلش حامل ها به صورت زیر داده می شود [40،41].

$$\frac{1}{\tau_k} = \frac{2\pi}{\hbar}\sum_q |M_{k,k+q}|^2 \left[1-\cos(\theta_k-\theta_{k+q})\right]\times \{N_q\delta(E_k-E_{k+q}+\hbar\omega_q)+(N_q+1)\times \delta(E_k-E_{k+q}-\hbar\omega_q)\} \quad (1)$$

که در آن N_q عدد اشغال فونونی بوز– انیشتین، θ_k زاویهٔ جهت دار بردار $\vec{k}$ ، و

$$|M_{k,k+q}|^2 = \frac{1+ss'\cos(\theta_k-\theta_{k+q})}{2}\frac{4\pi^2e^2F_v^2}{NAq}\times e^{-2qd} \quad (2)$$

d فاصلهٔ وان در والس بین لایه‌های قطبی و گرافن تک لایه و q بردار موج پراکندگی است. $\sum_q$ در معادلهٔ (1) با انتگرال $\frac{1}{N}\sum_q = \frac{A}{4\pi^2}\int qdqd\theta$ جایگزین می‌شود. که در آن $A=\frac{\sqrt{3}a_0^2}{2}$ مساحت یاختهٔ بسیط دو اتم و N تعداد نقاط فضای k است. توجه داشته باشیم که این فاصله با نوع بستر متفاوت است.

میدان الکتریکی ناشی از فونون‌های سطحی قطبی در گرافن و نانولوله‌های کربنی برجسته است و به دلیل وجود ابعاد عمودی بسیار کوچک با فاصلهٔ ون دروالس[3] داده می‌شود. ترابرد حامل ها متأثر از پراکندگی فونون‌های سطحی قطبی تحت شرایط بایاس پایین و بالا در گرافن و نانولوله‌های کربنی بر روی بسترهای قطبی می باشد. تحرک حامل‌ها ناشی از پراکندگی فونون‌های قطبی سطحی در حالت حدی به صورت زیر داده می شود [60]

$$\mu_{spp,\nu} = \sqrt{\frac{\beta}{\hbar\omega_\nu}}\frac{\hbar v_F}{e^2}\frac{ev_F}{F_\nu^2}\frac{\exp(k_0z_0)}{N_{spp,\nu}\sqrt{n}}$$

که در این رابطه ν تعداد شاخه های پراکندگی، $F_\nu^2 = \frac{\hbar\omega_{so,\nu}}{2\pi}\left(\frac{1}{\varepsilon_\infty+1}-\frac{1}{\varepsilon_0+1}\right)$ پارامتر جفت شدگی حامل – فونون سطحی قطبی، ε_0 و ε_∞ به ترتیب ضریب دی الکتریک بسامد پایین و بالا، $k_0=\sqrt{\left(\frac{2\hbar\omega_{so,\nu}}{v_F}\right)^2+\alpha n}$ ،z_0 فاصلهٔ بین گرافن و بستر دی الکتریک، $N_{spp,\nu}=\frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega_{spp,\nu}}{K_BT}\right)-1}$ عدد اشغال بوز–آینشتن برای فونون‌های سطحی قطبی و $\hbar\omega_{spp,\nu}$ انرژی فونون‌های سطحی قطبی است.

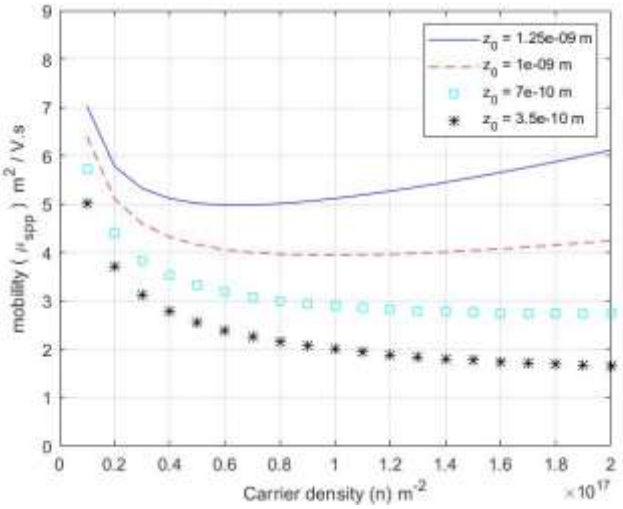
نتایج وبحث

در شکل1 نمودار تغییرات تحرک حامل‌ها ناشی از پراکندگی فونون‌های سطحی قطبی بر حسب چگالی حامل ها n از cm^{-2} 1×10^{12} تا 18×10^{12} cm^{-2} برای چهار فاصلهٔ متفاوت 3/5، 7، 10، 12/5 آنگستروم در دمای اتاق (300K) برای شاخهٔ فونونی اول ω_{so1} محاسبه و رسم کرده‌ایم. شکل2 شبیه شکل 1، اما برای شاخهٔ فونونی دوم ω_{so2} رسم شده است.

حال اثر دماهای بالاتر از دمای اتاق را بر شاخهٔ اول ω_{so1} بررسی می‌کنیم. شکل های 3 و4 مانند شکل 1 اما به ترتیب برای دماهای 500K و 700K محاسبه و رسم شده اند[60،61].

[3] Van der Waals's distance.

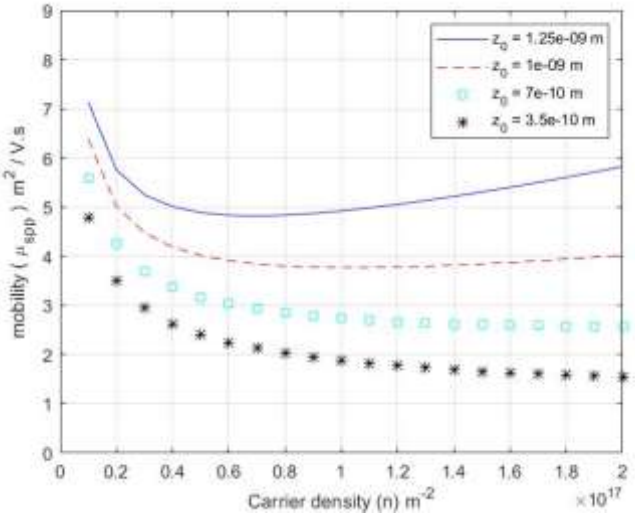
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



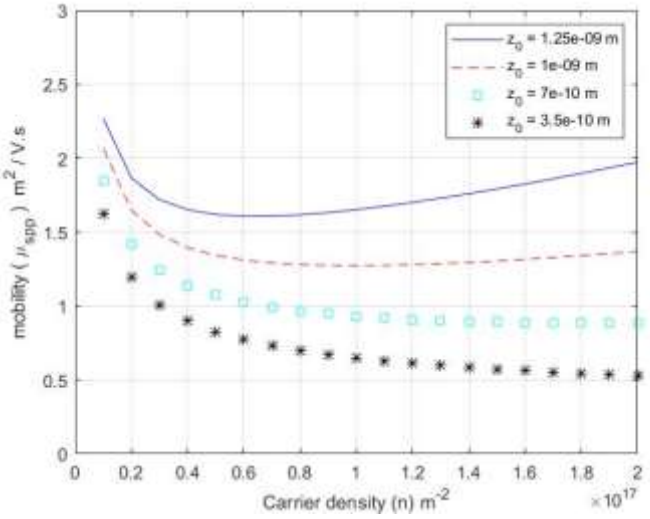
شکل1 : نمودار تغیرات تحرک حامل‌های بار سطحی قطبی μ_{spp} بر حسب چگالی حامل‌ها برای شاخهٔ اول ω_{so1} در دمای 300K با چهار فاصلهٔ متفاوت 3/5، 7، 10، 12/5 آنگستروم بین گرافن و Al_2O_3.

در شکل های1 تا 4 مشاهده می‌شود که با افزایش چگالی حامل‌ها از 1×10^{12} cm^{-2} تا $6/5 \times 10^{12}$ cm^{-2} برای فاصلهٔ کم 3/5 و 7 آنگستروم، تحرک کاهش پیدا کرده و از مقدار 7×10^{12} cm^{-2} به بالا برای دو فاصلهٔ 10 و 12/5 آنگستروم، تحرک افزایش پیدا می‌کند. این وضعیت به این دلیل رخ می‌دهد که شاخهٔ اول فونون‌های قطبی سطحی، دارای انرژی کمی هستند و همچنین فاصلهٔ زیاد بین گرافن و بستر منجر به وقوع پراکندگی کشسان شده ودر نتیجه انرژی حامل‌ها تغییر نمی کند. اما در حالت فاصلهٔ کم بین بستر و گرافن مقدار تحرک با افزایش چگالی حامل‌ها کاهش می‌یابد و در این حالت حامل‌ها پراکندگی غیرکشسان را تجربه می‌کنند و مقدار تحرک با افزایش چگالی حامل‌ها کاهش می یابد.

از مقایسهٔ شکل های 1و2 که در شرایط یکسان اما برای دو شاخهٔ فونون های قطبی سطحی متفاوت رسم شده اند می توان مشاهده کرد که به لحاظ بالاتر بودن انرژی شاخهٔ دوم نسبت به شاخهٔ اول تحرک حامل ها برای تمام فواصل وان در والس در شکل 2 کمتر از شکل 1است.

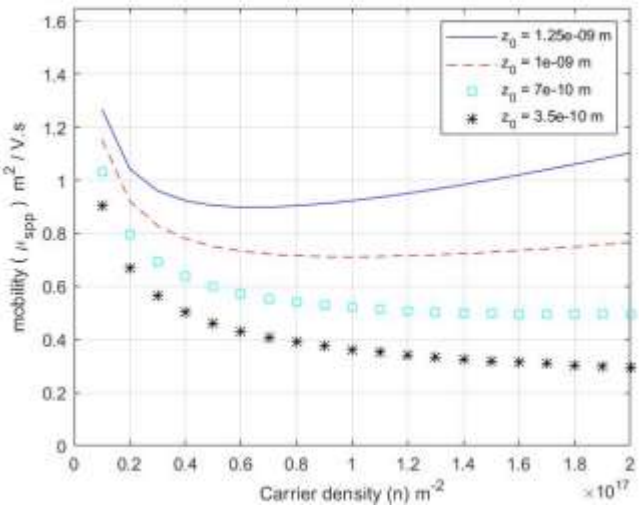


شکل2 : نمودار تغیرات تحرک حامل‌های بار سطحی قطبی μ_{spp} بر حسب چگالی حامل‌ها برای شاخهٔ دوم ω_{so1} در دمای 300K با چهار فاصلهٔ متفاوت 3/5، 7، 10، 12/5 آنگستروم بین گرافن و Al_2O_3.



شکل3 : نمودار تغیرات تحرک حامل‌های بار سطحی قطبی μ_{spp} بر حسب چگالی حامل‌ها برای شاخهٔ اول ω_{so1} در دمای 500K با چهار فاصلهٔ متفاوت: 3/5، 7، 10، 12/5 آنگستروم بین گرافن و Al_2O_3.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



شکل4 : نمودار تغیرات تحرک حامل‌های بار سطحی قطبی μ_{spp} بر حسب چگالی حامل‌ها برای شاخهٔ اول ω_{so1} در دمای 700K با چهار فاصلهٔ متفاوت: 3/5، 7، 10، 12/5 آنگستروم بین گرافن و Al_2O_3.

نتیجه گیری

در این پژوهش اثر پراکندگی فونون اکوستیکی بر حامل ها در گستره دمایی 0-700 کلوین مطالعه شد. نتایج نشان می دهد که در دماهای پایین، تحرک حامل ها افزایش و با افزایش دما که منجر به افزایش پراکندگی فونون اکوستیکی می شود، تحرک کم می شود.

همچنین تحرک حامل ها در اثر پراکندگی فونون قطبی سطحی بررسی شد. ملاحظه کردیم که فاصلهٔ وان در والس نقش مهمی برای افزایش تحرک حامل‌ها دارد هر چه فاصله بیشتر شود تحرک افزایش می‌یابد. با افزایش چگالی حامل‌ها در شرایط دماهای بالا، استفاده از گیت گرافنی بر روی بستر Al_2O_3 با فاصله‌های وان‌در والس بیشتر از 12/5 آنگستروم برای کنترل جریان مناسب‌تر است.

مرجع‌ها

[1] M. S. A. Bhuyan, M. Nizam Uddin, M. M. Islam, F. A. Bipasha, S. S. Hossain, “Synthesis of graphene”; *International Nano Letters*, **6** (2016) 65-83.
[2] F. Liu, C. Wang, X. Sui, M. A. Riaz, L. Wei, Y. Chen, “Synthesis of graphene materials by electrochemical exfoliation: Recent progress and future potential”; *Carbon Energy-Wiley* (2019) 173-200.
[3] R. Kumar, S. Sahoo, E. Joanni, R. K. Sing, W. K. Tan, K. K. Kar, A. Matsuda, “Recent progress in the synthesis of graphene and derived materials for next generation electrodes of high performance lithium ion batteries”; *Combustion Science* (2019) 100786.
[4] انصاری پور، قاسم؛ بهرامی مقدس، محمد؛ "اثر ناخالصی باردار بر رسانش الکتریکی در گرافیت دوبعدی"؛ *مجلهٔ پژوهش سیستم های بس ذره ای*، دوره **9** شمارهٔ 2، تابستان 1398، صفحه 23 تا 30.
[5] V. Perebeinos, P. Avouris, “Inelastic scattering and current saturation in graphene”; *Physical Review B* **81** (2010) 195442.
[6] M. Mahdouani, "Investigation of the electron-surface phonon interaction effects in graphene on a substrate made of polar materials"; *Elsevier Science* (2017).
[7] T. J. Watson, “Current Saturation and Surface Polar Phonon Scattering in Graphene”; *IBM Research Division* (2009).

نقش دمای هسته مادر در مشخصه‌های واپاشی آلفازا: معرفی فرم دمایی جدید برای شعاع مؤثر هسته‌ها

کاملان؛ فهیمه[۱]، قرائی، رضا[۲]؛ قلعه، نیما[۳]

[۱]گروه فیزیک دانشگاه پیام‌نور مرکز مشهد

[۲]گروه فیزیک دانشگاه حکیم سبزواری

[۳]گروه فیزیک دانشگاه فردوسی مشهد

چکیده

با بهره‌گیری از مدل پتانسیل مجاورت Zhang2013 به مطالعه سیستماتیک نقش اثرات دمایی هسته مادر بر روی فرایند واپاشی آلفازای ۲۲۶ عنصر مختلف با محدوده‌ی عدداتمی Z_p=84-91 پرداخته‌ایم. در این پژوهش، فرم دمایی جدیدی برای شعاع مؤثر R_i هسته‌های برهم‌کنشی ارائه شده است که از طریق اعمال آن در مدل Zhang2013 می‌توان به پیش‌بینی‌های قابل قبولی برای نتایج تجربی نیمه عمر در محدوده واپاشی‌های آلفازای انتخابی دست یافت. علاوه براین، اعتبار فرم دمایی پیشنهادی را در بازتولید خواص لایه‌ای هسته‌ها مورد ارزیابی قرار داده‌ایم.

واژه‌های کلیدی: واپاشی‌های آلفازا، دیدگاه پتانسیل مجاورت، اثرات دمای هسته مادر

Influence of parent nucleus temperature on alpha decay characteristics: a new temperature-dependent formalism for the effective nuclear radius

Kamelan, Fahime[1]; Gharaei, Reza[2]; Ghal-Eh, Nima[3]

[1] Department of Physics, Payam-e Noor University of Mashhad
[2] Department of Physics, Hakim Sabzevari University
[3] Department of Physics, Ferdowsi University of Mashhad

Abstract

Within the framework of the proximity potential Zhang 2013, the role of parent nucleus temperature on the alpha decay characteristics has been systematically investigated for 226 alpha decays with Z_p=84-91. In this study, a new temperature-dependent formalism for the effective nuclear radius R_i has been proposed to incorporate in Zhang 2013 potential model. Additionally, we have tested the validity of the presently proposed formalism in reproducing the shell closure effects of the nuclei involved in the alpha decay process.

***Keywords**: Alpha decay; Proximity potential approach; Parent nucleus temperature;*
PACS No. 24

مقدمه

بیش از یک قرن است که محققان اساس واپاشی‌های آلفازا را مبتنی بر پدیده تونل‌زنی کوانتومی در سد پتانسیل می‌دانند که به‌واسطه تقابل نیروهای هسته‌ای قوی و کولنی در سیستم "آلفا-هسته دختر" شکل می‌گیرد [۱]. از آن پس مطالعات نظری و تجربی مختلفی در زمینه شناخت هرچه بیشتر فرایند واپاشی آلفازا صورت گرفته است که نتیجه آن‌ها، معرفی رویکردهای نظری معتددی برای تفسیر این فرایند می‌باشد. نظریه‌های نوین توانستند نیمه‌عمرهای واپاشی آلفازا را در گستره وسیعی از هسته‌های پرتوزای سنگین و نیمه-سنگین با دقت مطلوبی باز تولید نمایند. با این حال، دستیابی به پیش‌بینی‌های هر چه دقیق‌تر از این کمیت، همواره از موضوعات چالش‌برانگیز و جذاب برای محققان فیزیک هسته‌ای در طول دهه‌های اخیر بوده است.

نظریه واپاشی آلفازا مبتنی بر یک رخداد فیزیکی مهم به نام پدیده تونل زنی کوانتومی است که برای فرمولبندی آن، می‌توان از رویکردهای نظری نظیر تقریب WKB بهره گرفت. براساس این تقریب، اطلاع از شکل صحیح پتانسیل برهم‌کنشی میان ذره آلفا و هسته دختر نقش تعیین‌کننده‌ای در دستیابی به مقادیر دقیق احتمال نفوذ در سد و در نتیجه نیمه عمر واپاشی آلفازا خواهد داشت. با توجه به اهمیت پتانسیل برهم‌کنشی در طی فرایند تونل‌زنی ذره آلفا، در چند دهه اخیر مدل‌های نظری مختلفی برای محاسبه این پتانسیل پیشنهاد شده‌اند که از جمله

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

آنها می‌توان به "دیدگاه پتانسیل مجاورت" [۲] اشاره کرد. این مدل که مبتنی بر ویژگی‌های هیدرواستاتیکی هسته‌ها و همچنین نظریه نیروهای مجاورت می‌باشد، رویکردی ساده و در عین حال کاربردی را برای تعیین قدرت پتانسیل هسته‌ای میان دو هسته ارائه می‌دهد. وجود فاکتورهای قابل تنظیم مانند پارامتر شعاعی R، پارامتر ضخامت سطح b، و تابع جهانی $\Phi(s)$ در فرمولبندی این مدل، سبب معرفی نسخه‌های متعددی از آن شده است [۳]. از دیگر قابلیت‌های فرمولبندی مجاورت، امکان بررسی نقش اثرات فیزیکی مختلف بر روی دینامیک فرایندهایی نظیر گسیل ذره آلفا از هسته مادر می‌باشد. از جمله مهمترین اثرات بررسی شده می‌توان به نقش دمای هسته مادر در پتانسیل برهم‌کنشی و در نتیجه نیمه عمر واپاشی اشاره کرد که در سال‌های اخیر بسیار مورد توجه قرار گرفته است [۵,٤]. محققان تاکنون فرم‌های اصلاح شده‌ای از پارامترهای شعاع R و ضریب کشش سطحی γ را بر پایه اثرات دمایی هسته مادر معرفی کرده‌اند، به‌عنوان نمونه $R(T)=R(T=0)(1+0.0007T^2)$. هرچند چنین فرم‌های دمایی بیشتر بر پایه خواص ساختاری هسته‌های منزوی و در خارج از فضای برهم‌کنشی بدست آمده‌اند. تحت این شرایط، ضروری به‌نظر می‌رسد که بواسطه انجام یک مطالعه سیستماتیک برروی تعداد قابل توجهی از عناصر سنگین و فوق-سنگین گسیلنده ذره آلفا، و درنظرگرفتن اثرات برهم‌کنشی سیستم "هسته دختر-ذره آلفا"، به تحقیق در مورد نقش اثرات دمایی هسته مادر و تعیین یک فرم اصلاح شده وابسته به دما برای شعاع R(T) بپردازیم. برای دستیابی به این هدف، پتانسیل برهم-کنشی براساس یکی از آخرین نسخه‌های فرمالیزم مجاورت یعنی مدل "Zhang2013" محاسبه شده است که در سال ۲۰۱۳ توسط Zhang و همکارانش برای مطالعه واپاشی‌های آلفازا معرفی شده است [٦]. خاطر نشان می‌شود که نتایج تحقیقات این گروه نشان می‌دهد که مدل مذکور قادر به ارائه پیش‌بینی‌های قابل قبولی برای نیمه عمر واپاشی-های آلفازا می‌باشد. در مطالعه حاضر، در تلاش هستیم تا اثر فرم دمایی جدید شعاع را برروی نیمه‌عمرهای حاصل از مدل Zhang2013 برای تعداد ۲۲٦ واپاشی آلفازا در محدوده $61 \le Z_p \le 99$ مورد سنجش قرار داده و نیز از طریق آن به مطالعه خواص لایه‌ای هسته‌ها بپردازیم.

روش محاسبات

پتانسیل برهم‌کنشی میان ذره آلفا و هسته دختر در طول فرایند واپاشی شامل سه بخش پتانسیل کولنی $V_C(R)$، هسته‌ای $V_N(R)$ و گریز از مرکز $V_l(R)$ است:

$$V_T(R) = V_N(R) + V_C(R) + \frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{l(l+1)}{R^2}, \qquad (۱)$$

که در جمله آخر $\mu = \frac{m_\alpha m_d}{m_\alpha + m_d}$ جرم کاهش‌یافته سیستم ذره آلفا-هسته دختر می‌باشد، m_α و m_d نیز به ترتیب جرم‌های ذره آلفا و هسته دختر در واحد جرم اتمی می‌باشند. همچنین در این رابطه l نشان دهنده اندازه حرکت زاویه‌ای حمل شده توسط ذره آلفا است. با فرض داشتن توزیع بار یکنواخت برای هر یک از هسته‌های برهم‌کنشی، پتانسیل کولنی را می‌توان به شکل زیر محاسبه کرد،

$$V_C(R) = Z_1 Z_2 e^2 \begin{cases} \frac{1}{R} & (R > R_c), \\ \frac{1}{2R_c}\left[3 - (\frac{R}{R_c})^2\right] & (R < R_c), \end{cases} \qquad (۲)$$

که در آن $R_c = R_1 + R_2$ و مقادیر شعاع ذره آلفا و هسته دختر بصورت $R_i = 1.28A_i^{1/3} - 0.76 + 0.8A_i^{-1/3}$ تعریف می‌گردند. همانگونه که ذکر شد در تحقیق حاضر برای محاسبه قدرت پتانسیل هسته‌ای در طول برهم‌کنش ذره آلفا و هسته دختر از مدل مجاورت و نسخه Zhang2013 استفاده می‌نماییم. در این مدل پتانسیل هسته‌ای به صورت زیر تعریف می‌گردد،

$$V_N(R) = 4\pi\gamma b\bar{R}\Phi(s) \qquad (۳)$$

که در آن پارامترهای $\gamma b\bar{R}$ به شکل و هندسه سیستم برهم‌کنشی وابسته هستند و $\phi(s)$ یک تابع جهانی است که در مرجع [٦] فرم جدیدی از آن به صورت،

$$\Phi(s) = \frac{-7.65}{1+e^{\frac{s+1.02}{0.89}}} \qquad (٤)$$

معرفی شده است. از طرفی در این فرمولبندی، γ ضریب انرژی سطحی است که به‌واسطه رابطه (٤) مرجع [٦] قابل تعریف می‌باشد و برای پارامتر ضخامت سطح b نیز در محاسبات پتانسیل هسته‌ای نیز می‌توان مقدار $b \approx 1$ fm را در نظر گرفت [٦]. خاطر نشان می‌شود که $\bar{R}$ در رابطه (۳) به شکل زیر قابل تعریف است،

$$\bar{R} = \frac{R_1 R_2}{R_1 + R_2} \qquad (۵)$$

که در این بخش، برای محاسبه شعاع‌های ذره آلفا و هسته دختر از رابطه معرفی شده R_i بهره گرفته‌ایم.

معرفی فرم وابسته به دمای شعاع مؤثر $R_i(T)$

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

در این تحقیق، برای اعمال اثرات دمایی هسته مادر از طریق شعاع هسته‌های برهم‌کنشی، فرم اصلاح شده‌ای از پارامتر R_i را به صورت زیر معرفی می‌نماییم،

$$R_i(T) = R_i(T=0)f(T). \qquad (۶)$$

همانطور که مشاهده می‌شود وابستگی دمایی به صورت یک تابع دلخواه f(T) در فرم مستقل از دمای شعاع ضرب شده است. به لحاظ نظری، اعمال اثرات دمایی از این طریق را به‌راحتی می‌توان با الهام گرفتن از فرم‌های وابسته به دمای پیشین نظیر،

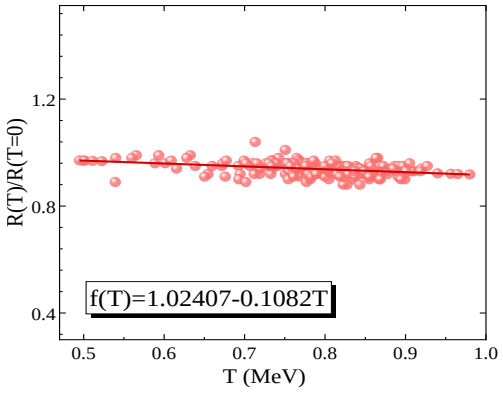
$$R_i(T) = R_i(T=0)(1+0.0007T^2) \qquad (۷)$$

درک کرد. در ادامه باید متذکر شد که برای تعیین مقادیر تابع f به ازای دمای T هر یک از ۲۲۶ هسته مادر انتخابی، از کمینه‌سازی اختلاف میان مقادیر تئوری و تجربی نیمه عمر در چارچوب مدل Zhang2013 بهره گرفته‌ایم. علاوه بر این، مقادیر دما را نیز می‌توان با استفاده از رابطه زیر بدست آورد،

$$E_p^* = E_{kin} + Q = \frac{1}{9}A_pT^2 - T, \qquad (۸)$$

که در آن، E_p^* به انرژی برانگیختگی هسته مادر با عدد جرمی A_p اشاره دارد. همچنین E_{kin} انرژی ذره آلفا گسیل شده می‌باشد که به راحتی و از طریق قوانین پایستگی قابل محاسبه خواهد بود. در شکل (۱)، رفتار مقادیر حاصل برای نسبت $R_i(T)/R_i(T=0)$ به صورت تابعی از دمای T برای مجموعه واپاشی‌های انتخابی رسم شده‌اند. همانگونه که مشاهده می‌شود مقادیر حاصل با افزایش دما از یک رفتار خطی نزولی پیروی می‌کنند که به صورت زیر قابل پارامترسازی خواهد بود،

$$\frac{R(T)}{R(T=0)} = f(T) = 1.02407 - 0.1082T \qquad (۹)$$



شکل ۱: تغییرات مقادیر حاصل از R(T)/R(T=0) به صورت تابعی از دمای T هسته مادر در واپاشی‌های آلفازای انتخابی به منظور یافتن f(T).

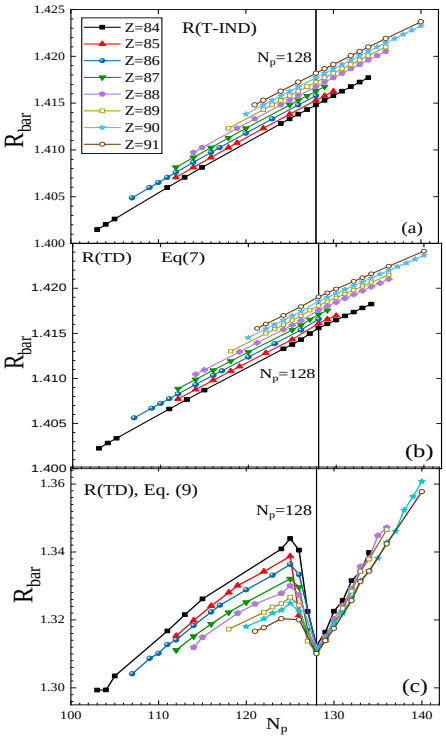
تحت این شرایط، با تکیه بر همخوانی داده‌های تئوری و تجربی نیمه عمر واپاشی‌های آلفازا، فرم اصلاح شده ذیل را برای رفتار دمایی شعاع هسته‌ها پیشنهاد می‌دهیم،

$$R_i(T) = R_i(T=0)(1.02407 - 0.1082T) \qquad (۱۰)$$

حال برای بررسی میزان اعتبار این رابطه، در شکل (۲)، رفتار مقادیر $\bar{R}$ را با و بدون احتساب اثرات دمایی به صورت تابعی از عدد نوترونی N_p هسته‌های مادر برای ایزوتوپ‌های با اعداد اتمی در محدوده‌ی $Z_p = 84-91$ رسم نموده‌ایم. خاطر نشان می‌شود که در بخش اثرات دمایی، برای محاسبه $\bar{R}(T)$، از رابطه زیر بهره گرفته‌ایم،

$$\bar{R}(T) = \frac{R_1(T)R_2(T)}{R_1(T)+R_2(T)} = \bar{R}(T=0)f(T) \qquad (۱۱)$$

برای درک بیشتر، تابع $f(T)$ را با استفاده از هر دو فرم دمایی غیر خطی (درجه دوم) و خطی، روابط (۷) و (۱۰)، محاسبه کرده و نتایج آن را در شکل ۲ نمایش داده‌ایم. با مقایسه همزمان این سه بخش، به‌راحتی می‌توان دریافت که اعمال اثرات دمایی تنها براساس رابطه پیشنهادی (۱۰) منجر به پیش‌بینی صحیح خاصیت لایه‌ای هسته‌ها در عدد جادویی N_d=126 می‌شود. در واقع حالت‌های مستقل از دما (بخش الف) و وابسته به دمای حاصل از فرم پیشنهادی (۷) (بخش ب) وجود این ویژگی مهم را در N_d=126 پیش‌بینی نمی‌کنند.



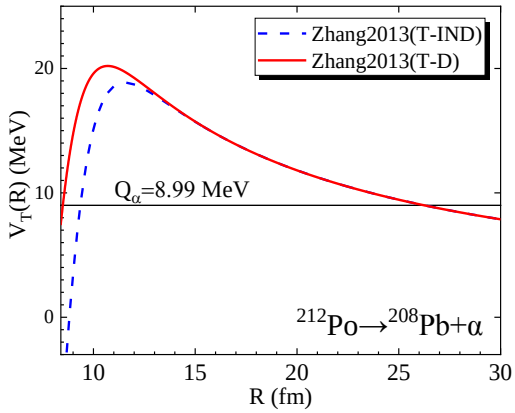
شکل ۲: نمودار مقایسه تغییرات $\bar{R}$ بر حسب N_P برای ایزوتوپ‌های Z=84 تا Z=91 براساس فرم‌های مستقل و وابسته به دمای شعاع.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

تأثیر اعمال اثرات دمایی برروی پتانسیل برهم‌کنشی

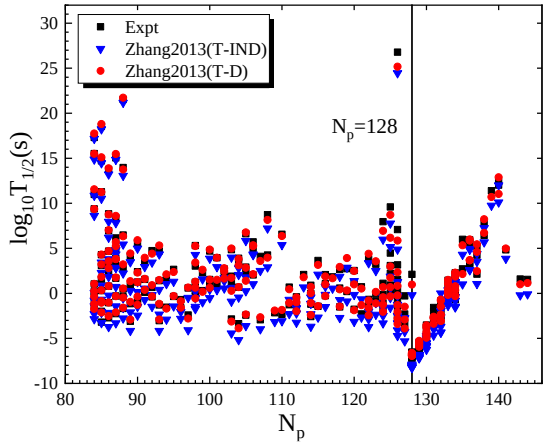
همانگونه که در بخش قبل نیز بدان اشاره شد، پتانسیل برهم‌کنشی میان هسته دختر و ذره آلفا، نقش تعیین کننده‌ای در محاسبات نیمه‌عمر بر پایه تقریب WKB دارد. بنابراین، در این مرحله قصد داریم به بررسی اثرات دمای هسته مادر از طریق فرم پیشنهادی رابطه (۱۰) بر روی نتایج پتانسیل حاصل از مدل Zhang 2013 بپردازیم. برای این منظور، در شکل (۳) رفتار شعاعی پتانسیل برهم‌کنشی کل را با و بدون احتساب اثرات دمایی، برای واپاشی یک هسته دلخواه مانند ^{212}Po رسم نموده‌ایم. با مقایسه نتایج حاصل از فرم مستقل از دما (T-IND) و وابسته به دمای (TD) مدل Zhang 2013، درمی‌یابیم که اعمال اثرات دمایی از طریق فرم پیشنهادی (۱۰) باعث کاهش ارتفاع و ضخامت سد کولنی و در نتیجه افزایش احتمال نفوذ ذره آلفا در سد می‌گردد. تحت این شرایط انتظار خواهیم داشت مقادیر نیمه عمر $T_{1/2}$ حاصل از این مدل پتانسیل نیز متأثر از اعمال اثرات دمایی شوند. برای درک این موضوع، مقادیر تئوری $T_{1/2}$ را از طریق رابطه (۱۲) و در قالب دو مدل پتانسیل Zhang 2013 (T-IND) و Zhang 2013(TD) برای تمامی واپاشی‌های آلفای انتخابی محاسبه نموده‌ایم.

$$T_{1/2} = \frac{h\ln 2}{2E_v P_0 P} \qquad (۱۲۱۲)$$



شکل ۳: مقایسه پتانسیل کل هسته با و بدون اعمال اثر دمایی برای آلفازایی $^{212}_{84}Po \rightarrow {}^{208}_{82}Pb + \alpha$

لازم به ذکر است که جزئیات مربوط به معرفی و نحوه محاسبه پارامترهای موجود در این رابطه بطور کامل در مرجع [٦] شرح داده شده‌اند. در شکل (٤)، مقادیر لگاریتم نیمه‌عمرهای محاسبه شده با داده‌های متناظر تجربی‌شان مقایسه شده‌اند. همانگونه که مشاهده می‌شود، اعمال اثرات دمایی بطور محسوسی باعث بهبود توافق میان داده‌های تئوری و تجربی نیمه‌عمر می‌شود، بطوریکه میزان انحراف استاندارد از داده‌های تجربی پس از اعمال این اثرات فیزیکی از حد σ = ۱/۲۵۸ در مدل Zhang 2013(T-IND) به σ = ۰/٤٤۱ در مدل Zhang 2013(TD) کاهش می‌یابد.



شکل ٤: مقایسه نیمه‌عمر حاصل از مدل Zhang2013 با و بدون اعمال اثرات وابستگی دمایی با مقادیر تجربی متناظر.

نتیجه‌گیری

با هدف تحلیل اثرات دمایی هسته مادر، فرایند واپاشی آلفازای ۲۲٦ هسته مختلف در محدوده $61 \le Z_p \le 99$ را در چارچوب مدل Zhang 2013 و برپایه تقریب WKB مورد ارزیابی قرار دادیم. نتایج بدست آمده، فرم اصلاح شده‌ای را برای پارامتر $R_i(T)$ معرفی می‌کند که مطابق رابطه (۱۰) نحوه وابستگی آن به دمای T هسته مادر بصورت خطی است. از نقطه نظر فیزیکی، وجود آثار لایه‌ای در عدد جادویی N_d=126 به نوعی مؤید اعتبار این فرم دمایی می‌باشد. علاوه بر این، نشان دادیم که اعمال فرم دمایی پیشنهادی در فرمولبندی مدل Zhang 2013، موجب افزایش دقت این مدل در پیش‌بینی داده‌های تجربی نیمه عمر برای محدوده جرمی موردمطالعه می‌گردد.

مرجع‌ها

[1] G. Z. Gamow, Phys. 51, 204 (1928).
[2] J. Blocki *et al.*, Ann. Phys. (N.Y.) 105, 427 (1977).
[3] I. Dutt, R. K. Puri, Phys. Rev. C 81, 064609 (2010).
[4] R. Gharaei, V. Zanganeh, Nucl. Phys. A 952, 28 (2016).
[5] A. Daei-Ataollah *et al.*, Phys. Rev. C 97, 054621 (2018).
[6] G. L. Zhang *et al.*, Eur. Phys. J. A **49**, 10 (2013).

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

اندازه‌گیری نانوفوتونیکی دمای محیط جلبک کلرلا با استفاده از نانوذرات تبدیل‌افزایشی فرکانس

حبیبی ، مهسا[۱] ؛ حیدری ، اسماعیل[۱*]

[۱] دانشکده فیزیک ، دانشگاه خوارزمی ، تهران

*Email: e.heydari@khu.ac.ir

چکیده

دما یکی از مهم‌ترین متغیرهایی است که عموما" در انواع فرآیندهای زیستی و صنعتی، کنترل و اندازه‌گیری می‌شود. از این رو نیاز به روش‌های اندازه‌گیری دقیق‌تر، پیوسته و آنی در زمینه‌های صنعتی و پزشکی احساس می‌شود. یکی از فناوری‌های جدید دماسنجی که مورد توجه زیادی قرار گرفته است، اندازه‌گیری نانوفوتونیکی دما بر اساس تابش فوتولومینسانس نانوتابشگرهای لانتانیدی است که امکان دماسنجی از راه دور و به صورت غیرتماسی را ایجاد می‌کند. از ویژگی‌های قابل توجه این نانوتابشگرها می‌توان به پایداری تابشی بالا، امکان تحریک چند فوتونی و طیف تابشی باریک اشاره کرد. در این پژوهش اندازه‌گیری نانوفوتونیکی دمای محیط جلبک از راه دور با استفاده از نانوتابشگرهای لانتانیدی مورد بررسی قرار می‌گیرد. جلبک استفاده شده در این پژوهش از نوع کلرلا است که کشت آن به دلیل کاربردهایی همچون تامین سوخت تجدیدپذیر، مکمل‌های غذایی و کاهش آلاینده‌ها مورد توجه صنایع مختلف است. در رشد و تکثیر این میکروجلبک‌ها دما پارامتر مهمی است و از این رو اندازه‌گیری و کنترل پیوسته و آنی آن دارای اهمیت است. برای اندازه‌گیری دمای محیط جلبک از نانوذرات تبدیل افزایشی $NaYF_4:Yb^{+3}$, Er^{+3} *در ماتریس پلی‌استایرن استفاده می‌شود تا به صورت فیلم نانوکامپوزیتی درآیند. با افزایش دمای محیط جلبک طیف تابشی فیلم نانوکامپوزیتی مورد بررسی قرار می‌گیرد و نشان داده می‌شود که این نانوتابشگرها امکان اندازه‌گیری پیوسته و آنی فراهم را می‌آورند.*

واژه های کلیدی: *جلبک کلرلا، دما، فوتولومینسانس، لانتانید، نانوذرات تبدیل‌افزایشی، نانوکامپوزیت*

Nanophotonic Temperature Measurements in an Algae Medium Using Upconversion Nanoparticles

Habibi, Mahsa[1]; Heydari, Esmaeil[1]

[1] *Faculty of Physics, Kharazmi University, Tehran*

Abstract

Temperature is one of the most important variables that is usually monitored and measured in many biological and industrial processes. Therefore there is a demand for more accurate, continuous and real-time technologies in different industrial and medical fields. One of the new technologies that has gained considerabale attention is nanophotonic thermometry based on photoluminescence of lanthanide nanoemitters that is a noncontact method. These nanoemitters have remarkable features such as high photostability, multiphoton excitation and narrow emission profile. In this study the remote nanophotonic temperature sensing of algae medium using lanthanide nanoemitters is investigated. The microalgae used in this study is Chlorella which its cultivation is noteworthy for different industries because of providing reproducible fuel, nutritional supplements and reducing pollutants. Temperature is a key parameter in growth and reproduction of these microalgae and hence continuous and real-time measurements and monitor of this parameter is important. Upconversion nanoparticles used for the temperature sensing of algae medium is $NaYF_4:Yb^{+3}$, Er^{+3} *that is doped in polystyrene matrix for fabrication of nanocomposite film. By increasing the temperature of algae medium, the spectrum emission of nanocomposite film is investigated and it is demonstrated that these nanoemitters are suitable for continuous and real-time measurements.*

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد

http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

***Keywords**: Chlorella Algae, Lanthanide, Nanocomposite, Photoluminescence, Temperature, Upconversion Nanoparticles*

PACS No.78, 87

مقدمه

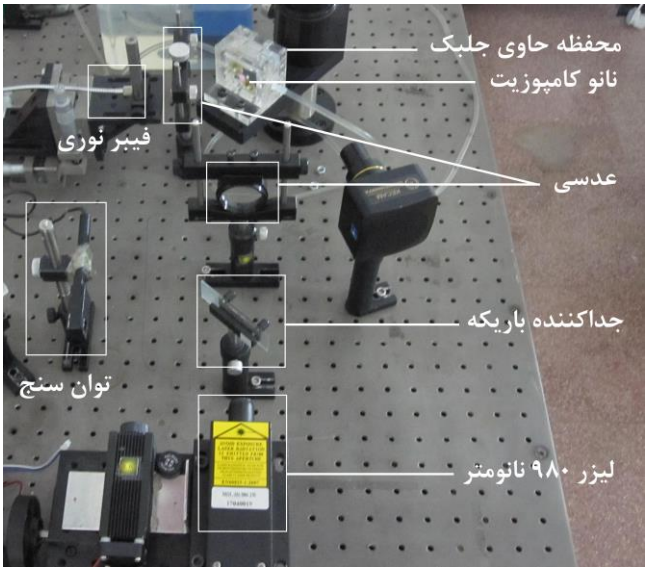
دما نقش مهمی در بسیاری از فرآیندهای شیمیایی و زیستی ایفا می‌کند. همچنین کنترل دما در بسیاری از بخش‌های صنعت و پزشکی موضوع مهمی است. به همین دلیل نیاز به روش های دماسنجی که دقیق،پیوسته و آنی هستند و معایب روش‌های رایج را ندارند در زمینه‌های مختلف پژوهشی، پزشکی و صنعتی احساس می‌شود. به عنوان مثال سیم کشی الکتریکی در روش‌های تماسی احتمال به وجود آمدن اختلالات الکترومغناطیسی و جرقه را افزایش می‌دهد.[۱] معایب روش‌های تماسی منجر به پیدایش روش‌های غیرتماسی در دماسنجی شده است. اخیرا پیشرفت‌های زیادی در زمینه اندازه‌گیری نانوفوتونیکی دما براساس نانوذرات تبدیل افزایشی فرکانس حاصل شده است که یک روش غیرتماسی است.[۲] بیشتر مواد، تابش تبدیل‌کاهشی دارند، به این معنی که در آن‌ها پدیده استوکس اتفاق می‌افتد. در پدیده استوکس انرژی نور تابش‌شده کمتر از انرژی نور تحریک‌کننده است. به این اختلاف انرژی، جابه‌جایی استوکس می‌گویند. اما پدیده‌ی ضداستوکس در موارد کمی از جمله جذب خودبه‌خودی دوفوتونی، تولید هارمونیک دوم و تبدیل‌افزایشی فرکانس اتفاق می‌افتد. در تبدیل افزایشی فرکانس در اثر تحریک با دو یا چند فوتون کم‌انرژی، یک فوتون پرانرژی تابش می‌شود. فوتون تابش شده فرکانس بیشتر و طول موج کمتری نسبت به فوتون‌های تحریک‌کننده دارد. مکانیزم-های تبدیل‌افزایشی فرکانس عبارتند از: تبدیل‌افزایشی انتقال انرژی، جذب تراز برانگیخته، افت بین ترازی، تبدیل‌افزایشی جمعی، و بهمن فوتونی.[۳] زمانی که نانوذرات تبدیل‌افزایشی با نور مادون-قرمز نزدیک برانگیخته شوند، نوری تابش می‌کنند که در ناحیه طیفی مادون‌قرمز، مرئی و فرابنفش قرار دارد.[٤] نانوذرات تبدیل-افزایشی فرکانس به دلیل داشتن ویژگی‌هایی همچون جابه‌جایی ضداستوکس زیاد، عمر فلورسانس طولانی، چندین بیشینه تابشی باریک و تابش زمینه صفر بسیار موردتوجه واقع شده اند.[۵] نانوذرات تبدیل‌افزایشی فرکانس از سه بخش تشکیل شده اند؛ یون فعال کننده، یون حساس کننده و ماده میزبان. فوتون‌های تحریک-کننده ابتدا جذب یون حساس‌کننده می‌شوند. طی مکانیزم‌های تبدیل‌افزایشی، انرژی فوتون‌های تحریک کننده به یون فعال‌کننده منتقل می‌شود و تابش تبدیل افزایشی از ترازهای برانگیخته‌ی یون فعال‌کننده اتفاق می‌افتد. برای اینکه یون فعال‌کننده و یون حساس-کننده در فاصله مناسبی از یکدیگر قرار داشته باشند، در ماتریس میزبان قرار می‌گیرند.

روش‌های آزمایشی

در این پژوهش دمای محیط جلبک با استفاده از نانوذرات تبدیل‌افزایشی به صورت نانوفوتونیکی اندازه‌گیری می‌شود. جلبک مورداستفاده در این مطالعه، جلبک کلرلا است. از ویژگی‌های جالب این جلبک می‌توان به مصرف دی‌اکسیدکربن و تولید اکسیژن اشاره کرد. علاوه بر این در سال‌های اخیر توجه ویژه‌ای به این جلبک برای تولید سوخت‌های زیست سازگار شده است. این نوع سوخت از منابع سوختی تجدیدپذیر است و کم‌ترین آلودگی را به همراه دارد. همچنین در تصفیه فاضلاب هم از آن‌ها استفاده می‌شود. از دیگر ویژگی‌های این جلبک وجود پروتئین، ویتامین، کربوهیدرات و مواد مغذی در آن است. همین موضوع باعث تولید مکمل‌های غذایی و محصولات مراقبت از پوست، از این جلبک شده است. در یک بازه دمایی خاص رشد و تکثیر این نوع جلبک به بیشترین میزان خود می‌رسد. بنابراین اندازه‌گیری و کنترل دما موضوع بسیار مهمی برای صنایعی است که از این جلبک استفاده می‌کنند. نانوذرات تبدیل‌افزایشی که در این پژوهش مورد استفاده قرار گرفته اند از ماده میزبان سدیم ایتریم فلوراید ساخته شده اند که به یون‌های سه ظرفیتی ایتربیوم و اربیوم آلاییده شده است. ($NaYF_4:Yb^{+3}, Er^{+3}$) غلظت این نانوذرات تبدیل‌افزایشی ۵ میلی‌گرم بر میلی‌لیتر است که با روش هیدروترمال تهیه شده

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

اند.[٦] یون‌های ایتربیوم و اربیوم یون‌های لانتانید سه ظرفیتی هستند که به ترتیب نقش حساس‌کننده و فعال‌کننده را دارند. برای تشکیل فیلم نازک ۰/۵ میلی‌لیتر از این نانوذرات با ۲۴۳ میلی‌گرم پلی‌استایرن با هم مخلوط شدند. سپس این مخلوط درون آون با دمای ۵۰ درجه سانتی‌گراد به مدت یک ساعت و نیم قرار گرفت تا فرآیند پلیمریزاسیون انجام شود. پس از آن، ماده موردنظر به شکل یک فیلم با ابعاد ۱ سانتی‌متر × ۱ سانتی‌متر و ضخامت ۱ میلی‌متر درآمد. فیلم ساخته‌شده درون یک محفظه حاوی جلبک کلرلا قرار گرفت. محفظه موردنظر درای قابلیت کنترل دما و کنترل جریان بود. برای کنترل دما از دماسنج مدل DS18B20 استفاده شد که دارای رزولوشن ۰/۰٦ درجه سانتی‌گراد و و دقت ۰/۵ درجه سانتی‌گراد است. از پمپ مدل DB-6618 برای ایجاد جریان استفاده شد و شارسنج مدل YF-S401 به منظور اندازه‌گیری جریان، مورد استفاده قرار گرفت. تصویر چیدمان اپتیکی اندازه گیری طیف تابشی نانوذرات تبدیل‌افزایشی در شکل ۱ نشان داده شده است. نانوذرات تبدیل‌افزایشی در ماتریس پلی‌استایرن توسط لیزر پیوسته ۹۸۰ نانومتر MDL-III تحریک می‌شدند. از جداکننده باریکه و توان‌سنج به منظور اندازه‌گیری پیوسته توان لیزر استفاده شد تا برای انجام آزمایش، توان نور لیزر ثابت شده و به

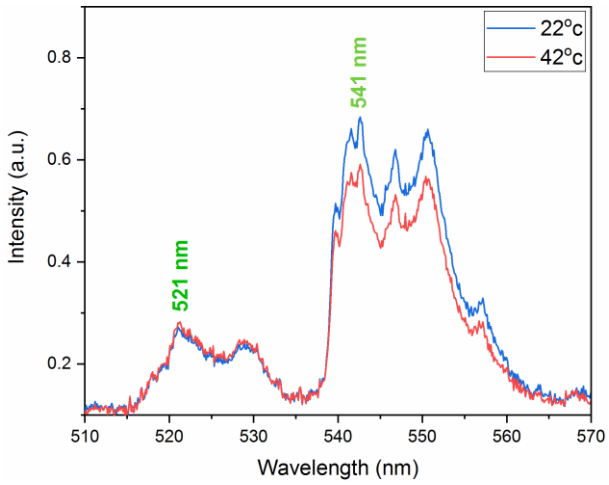


شکل ۱ : چیدمان اپتیکی اندازه‌گیری دمای جلبک کلرلا با استفاده از طیف‌سنجی نانوذرات تبدیل‌افزایشی. این چیدمان شامل لیزر ۹۸۰ نانومتر، جداکننده باریکه، عدسی‌ها و طیف‌سنج است. فیبر نوری به طیف‌سنج متصل است. فیلم ساخته‌شده از نانوذرات تبدیل‌افزایشی داخل محفظه حاوی جلبک قرار گرفته است.

حالت پایدار رسیده باشد. لیزر استفاده شده در این آزمایش پس از مدت ٤٠ دقیقه به حالت پایدار می‌رسید. از عدسی اول برای همگرا کردن نور لیزر روی فیلم و از عدسی دوم برای همگرا کردن تابش فلورسانس روی فیبر نوری استفاده شد. فاصله کانونی عدسی اول ۱۰ سانتی‌متر و فاصله کانونی عدسی دوم ۳ سانتی‌متر است. تابش فلورسانس روی فیبر طیف‌سنج CSS100 متمرکز شده و به این ترتیب طیف تابشی نانوذرات با افزایش دما اندازه-گیری می‌شد. طیف تابشی این نانوذرات در اثر تحریک با نور لیزر مادون‌قرمز، در محدوده‌ی نور مرئی دارای چهار بیشینه‌ی تابشی است. اولین بیشینه در ناحیه‌ی آبی با طول موج ٤٠٨ نانومتر، دومین و سومین بیشنه در ناحیه‌ی سبز با طول موج ٥٢١ و ٥٤١ نانومتر و بیشینه چهارم در ناحیه‌ی قرمز با طول موج ٦٥٣ نانومتر قرار دارند. همانطور که در شکل۲ مشاهده می‌کنید، بیشینه‌های تابشی در ناحیه‌ی طیفی سبز برای این پژوهش مورد استفاده قرار گرفتند.

روش‌های محاسباتی

در شکل۲ مشاهده می‌کنید که با افزایش دما از ۲۲ تا ٤٢ درجه سانتی‌گراد شدت طیف تابشی که به طور پیوسته اندازه‌گیری می‌شد در طول موج ٥٤١ نانومتر به میزان ۱۲ درصد کاهش می‌یابد. جریان میانگین در محیط جلبک٤٣/٢١ میلی‌لیتر در دقیقه اندازه-گیری شد.



شکل۲ : طیف تابشی نانوذرات تبدیل‌افزایشی در ماتریس پلی‌استایرن در دمای ۲۲ و ٤٢ درجه سانتی‌گراد در ناحیه نور مرئی. بیشینه‌های تابشی در ناحیه طیفی سبز در طول موج ٥٢١ و ٥٤١ نانومتر وجود دارند.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

از نسبت دو طول موج ۵۲۱ و ۵٤۱ نانومتر برای رسم نمودار دما استفاده می‌شود. به این روش تکنیک نسبت‌سنجی گفته می‌شود. طبق رابطه (۱) لگاریتم نسبت شدت دو طول موج ۵۲۱ و ۵٤۱ نانومتر با دما رابطه‌ی عکس دارد.[۱]

$$I_{521} / I_{541} = A \exp(-\Delta E_{21} / KT) \qquad (۱)$$

در رابطه (۱)، A یک ثابت است و ΔE_{21} گاف انرژی بین ترازهای برانگیخته در یون‌های لانتانید است. K ثابت بولتزمن و T دما برحسب کلوین است. در تکنیک نسبت‌سنجی دما برحسب نسبت شدت‌ها رسم می‌شود. مشاهده می‌شود که این تابع کار، رفتار خطی با شیب ۰/۹- از خود نشان می‌دهد. با استفاده از نمودار کالیبراسیون برای بازه دمایی ۲۲ تا ٤۲ درجه سانتی‌گراد با حساسیت ۰/۹ می‌توان اندازه‌گیری‌های پیوسته دما انجام داد.

نتیجه گیری

در این پژوهش دما با استفاده از فیلم نانوذرات تبدیل‌افزایشی سدیم ایتریم فلوراید با یون حساس‌کننده ایتربیوم و یون فعال‌کننده اربیوم در ماتریس پلی‌استایرن به صورت غیرتماسی و از راه دور اندازه‌گیری شد. بدین منظور دمای نانوذرات تبدیل‌افزایشی در مجاورت با جلبک کلرلا از ۲۲ تا ٤۲ درجه سانتی‌گراد افزایش یافت. طیف تابش فوتولومینسانس نانوذرات $NaYF_4:Yb^{+3}, Er^{+3}$ بررسی شد و این نتیجه به دست آمد که تابش فوتولومینسانس این نانوذرات با افزایش دما، کاهش می‌یابد. در نتیجه نشان داده شد که با به دست آوردن تابع کار در محیط جلبک کلرلا امکان اندازه‌گیری غیرتماسی، پیوسته و آنی دما ایجاد می‌شود.

سپاسگزاری

با تشکر از بنیاد ملی نخبگان برای تامین مالی این کار در غالب جایزه دکتر کاظمی آشتیانی.

مرجع‌ها

[1] L. H. Fischer, G. S. Harms, and O. S. Wolfbeis; "Upconverting nanoparticles for nanoscale thermometry"; *Angew. Chemie - Int. Ed.* **50**, no. 20 (2011) 4546–4551.

[2] F. Vetrone *et al.*; "Temperature sensing using fluorescent nanothermometers"; *ACS Nano* **4**, no. 6 (2010) 3254–3258.

[3] X. Liu, C. H. Yan, and J. A. Capobianco; "*Photon upconversion nanomaterials*"; **44**, no. 6, Springer (2015) 4.

[4] S. Zhou *et al.*; "Upconversion luminescence of NaYF4: Yb3+, Er 3+ for temperature sensing"; *Opt. Commun.* **291** (2013) 138–142, 2013.

[5] A. Sedlmeier, D. E. Achatz, L. H. Fischer, H. H. Gorris, and O. S. Wolfbeis; "Photon upconverting nanoparticles for luminescent sensing of temperature"; *Nanoscale* **4**, no. 22, (2012) 7090–7096.

[6] F. Kaboli, N. Ghazyani, M. Riahi, H. Zare-Behtash, M. H. Majles Ara, and E. Heydari; "Upconverting Nanoengineered Surfaces: Maskless Photolithography for Security Applications"; *ACS Appl. Nano Mater.* **2**, no. 6, (2019) 3590–3596.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بررسی ساختار نواری و خواص اپتیکی $InAs_xSb_{1-x}(x = 0.25, 0.5)$ تحت کشش غیرهیدرواستاتیک شبکه

نامجو ، شیرین[۲،۱]؛ پیتر ، پوشنیگ[۲]

[۱]گروه فیزیک دانشگاه لرستان ،خرم آباد

[۲] مؤسسه فیزیک ، دانشگاه گراتس،گراتس، اتریش

چکیده

با بکارگیری بسط غیرهیدرواستاتیک شبکه، ساختار نواری و خواص اپتیکی $InAs_xSb_{1-x}(x = 0.25, 0.5)$ *با استفاده از نظریه تابعی چگالی و بکارگیری بسته محاسباتی WIEN2K مورد بررسی قرار گرفته است. برای مطالعه ساختار نواری و خواص اپتیکی تحت کشش غیرهیدرواستاتیک،* ثابت‌های شبکه در صفحه ab بسط داده شده‌اند و ثابت شبکه در امتداد محور c با بکارگیری تابع تبادلی همبستگی GGA (Wu- Cohen) بهینه شده‌است. با توجه به نتایج به‌دست آمده، بسط شبکه به میزان جزئی منجر به گذار به سمت نیم رساناهای توپولوژی می‌شود و حین این گذار ثابت دی‌الکتریک به آرامی افزایش می‌یابد و ساختارهای اصلی در بخش موهومی تابع دی‌الکتریک به سمت انرژی‌های پایین‌تر پیش می‌روند .

واژه های کلیدی: *نیم رساناهای توپولوژی-تقریب فاز تصادفی-وارونگی نواری*

Band structure and optical properties of $InAs_xSb_{1-x}(x = 0.25, 0.5)$ under nonhydrostatic lattice expansion

Namjoo, Shirin[1,2]; Peter, Puschnig[2]

[1] Department of Physics, Lorestan University, Khorramabad
[2] Institute of Physics, Univsersity of Graz, , Graz,Austria

Abstract

Applying nonhydrostatic lattice expansion, the electronic band structure and optical properties of $InAs_xSb_{1-x}(x = 0.25, 0.5)$ *have been investigated using density functional theory by employing the WIEN2k package. In order to study the electronic band structure and optical properties under nonhydrostatic lattice expansion, the crystal structures in the ab plane is expanded and the c axis is relaxed using the GGA functional according to Wu and Cohen. According to our results, slight lattice expansions cause a transition to topological semiconductor and during this transition the static dielectric constant increases smoothly and the main structures in imaginary part of dielectric function shift toward lower energies.*

***Keywords**: Topological semiconductors, Random phase approximation, Band inversion*

PACS No. 71, 77, 78

مقدمه

نیم رساناها با پهنای گاف کم کاربردهای فراوانی در صنعت دارند که از آن جمله می‌توان به کاربرد در ابزارهای اپتوالکترونیک فروسرخ مانند لیزرها و آشکارسازهای نوری اشاره کرد. در دسته ترکیب های نیم رسانا با پهنای گاف کم، انرژی آستانه مورد نیاز برای حرکت الکترون‌ها از حالت‌های اشغال شده در نوار ظرفیت به حالت‌های خالی در نوار رسانش بسیار کم است و همین امر سبب بروز ویژگی های یکتایی در این دسته از ترکیب ها می‌شود. از جمله

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

این ویژگی‌ها می‌توان به حساسیت زیاد آن ها در مقابل اثر های خارجی مانند فشار و یا میدان مغناطیسی اشاره کرد. ترکیب‌های InAs وInSb و آلیاژهای سه‌تایی آن‌ها دارای کوچکترین پهنای گاف در میان ترکیب های نیم رسانای III-V هستند. مطالعات پیشین انجام شده توسط نامجو و همکاران نشان می‌دهد که از میان این ترکیب‌ها، $InAs_{0.5}Sb_{0.5}$ و $InAs_{0.25}Sb_{0.75}$ دارای کوچکترین پهنای گاف به‌ترتیب به اندازه ۰/۰۵ و ۰/۰۸ الکترون ولت هستند[۱]، بنابراین می‌توان با اعمال بسط غیرهیدرواستاتیک شبکه به میزان جزئی در ساختار نواری این ترکیب ها تغییرات اساسی ایجاد کرد. از جمله این تغییرات می‌توان به ایجاد وارونگی نواری و تبدیل کردن این ترکیب‌ها به نیم‌رساناهای توپولوژی اشاره کرد. از آن‌جا که جستجو و بررسی ویژگی‌های مواد توپولوژی در دهه گذشته به عنوان یک موضوع جدید، بسیار جذاب و مدرن در فیزیک ماده چگال ظهور پیدا کرده است و همچنین با توجه به کاربردهای فوق العاده زیادی که نیم‌رساناهای توپولوژی می‌توانند داشته باشند [۲]،گذار به سمت این نوع از ترکیب‌ها و همچنین بررسی ویژگی‌های آن‌ها می‌تواند از اهمیت بسیار زیادی برخوردار باشد. در این مطالعه بر پایه مطالعه پیشین [۱]، ساختار نواری و خواص اپتیکی $InAs_{0.5}Sb_{0.5}$و $InAs_{0.25}Sb_{0.75}$ با اعمال بسط غیرهیدرواستاتیک و حین گذار از نیم‌رساناهای معمولی به سمت نیم‌رساناهای توپولوژی مورد بررسی قرار می‌گیرد.

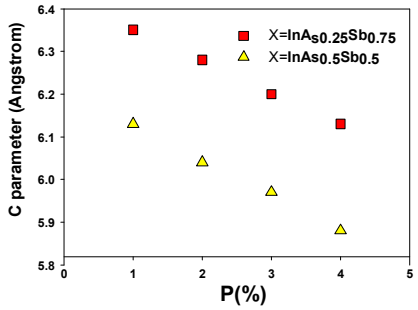
روش و جرئیات محاسبات ساختاری و ساختار نواری

محاسبات با استفاده از کد کامپیوتری WIEN2K [۳] و بر پایه نظریه تابعی چگالی و روش امواج تخت بهساخته خطی با پتانسیل کامل انجام شده است. پارامتر Rk_{max} (R، شعاع کوچکترین کره مافین–تین و K_{max}، بردار موج قطع برای بسط تابع موج بر حسب امواج تخت در ناحیه بین جایگاهی است) برابر ۸ و بردار موج قطع برای بسط پتانسیل و چگالی بار در ناحیه بین جایگاهی G_{max} =۱۲ انتخاب شد. محاسبه‌ها در حضور برهمکنش اسپین– مدار انجام شده است. انتگرال فضای فاز برای محاسبه ویژگی های ساختاری با استفاده از ۱۰۰۰ نقطه k در منطقه نخست بریلوئن انجام شده است.

برای بررسی ویژگی های ساختاری، تابعی تبادلی همبستگی (Wu-GGA Cohen) [٤] به‌کارگرفته‌شده است. از آنجا که برای محاسبه ویژگی‌های اپتیکی و همچنین ساختارنواری به تعداد نقطه‌های k بیشتری نیازمندیم، بنابراین ۷۰۰۰ نقطه k به منظور مطالعه ویژگی-های اپتیکی و ساختارنواری در نظرگرفته شده است. برای مطالعه ساختارنواری و ویژگی‌های اپتیکی از پتانسیل تبادلی همبستگی mBJLDA [٥] استفاده شده است.

نتایج

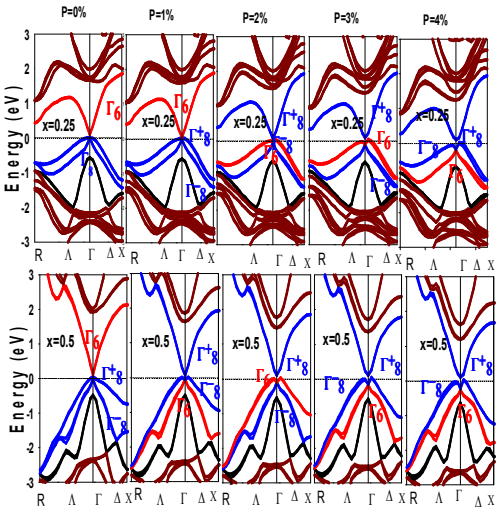
InAs و InSb نیم‌رساناهایی با ساختار سولفید روی هستند. آلیاژهای $InAs_xSb_{1-x}$، در حقیقت آلیاژهای شبه دوتایی هستند که در آن‌ها اتم‌های As و Sb روی زیرشبکه As/Sb قرار گرفته‌اند. در این مطالعه تنها آلیاژهای منظم در کوچکترین ابریاخته ممکن در نظر گرفته شده اند. کوچکترین ساختار منظم برای $InAs_{0.25}Sb_{0.75}$ یک یاخته مکعبی ساده و برای $InAs_{0.5}Sb_{0.5}$ یک یاخته چهارگوشی است. برای اعمال بسط غیر هیدرواستاتیک در این ترکیب ها، پارامترهای شبکه در صفحه ab بسط داده‌شده‌اند و پارامتر شبکه در امتداد محور c ثابت نگه‌داشته شده است. تحت بسط غیر-هیدرواستاتیک شبکه ، تقارن چهارگوشی در $InAs_{0.5}Sb_{0.5}$ حفظ می‌شود درحالیکه تقارن مکعبی در $InAs_{0.25}Sb_{0.75}$ شکسته می‌شود و به تقارن چهارگوشی تبدیل می‌شود. پارامترهای شبکه تعادلی c به‌دست‌آمده با استفاده از پتانسیل GGA (Wu-Cohen) در شکل ۱ نشان‌داده شده‌اند.



شکل۱ : پارامتر c بدست آمده بر حسب بسط غیرهیدرواستاتیک شبکه از ۱ تا ٤ درصد.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

همان‌گونه که در این شکل مشاهده می‌شود، پارامتر بهینه‌شده c، با افزایش بسط غیرهیدرواستاتیک شبکه کاهش می‌یابد. منشا این رفتار می‌تواند به اثر پویسون [٦] مرتبط شود. مطابق این اثر، اگر ماده در جهتی خاص کشیده شود، در آن‌صورت به طور طبیعی تمایل به فشرده‌شدن در جهتی عمود بر جهت کشیده‌شدن دارد. در گام بعد ساختار نواری ترکیب $InAs_xSb_{1-x}(x=0.25, 0.5)$ در حالت عادی و همچنین تحت بسط غیر هیدرواستاتیک شبکه محاسبه شده است و نتایج در شکل ۲ آورده شده است. همان‌گونه که در این شکل نشان داده شده است این ترکیب‌ها در حالت عادی نیم‌رساناهایی با پهنای گاف کم و نظم نواری عادی هستند. در $InAs_{0.25}Sb_{0.75}$ با ساختار مکعبی، نوار رسانش بالایی تبهگن دوگانه است (نوار قرمز رنگ). این نوارهای انرژی در مرکز ناحیه نخست بریلوئن دارای تقارن گروه نقطای Γ_6 هستند. همچنین نوارهای ظرفیت بالایی نوارهای تبهگن چهار تایی هستند که در مرکز ناحیه نخست بریلوئن دارای تقارن گروه نقطه‌ای Γ_8 هستند. ترتیب نواری عادی در این ترکیب (از انرژی بالا به سمت انرژی پایین) به‌ترتیب به صورت Γ_6، Γ_8 است. تحت کشش غیرهیدرواستاتیک، با از بین رفتن تقارن مکعبی ، تبهگنی چهارگانه Γ_8 از بین می‌رود و نوار تبهگن چهارگانه به نوارهایی با تبهگنی دوگانه که در مرکز ناحیه نخست بریلوئن دارای تقارن گروه نقطه‌ای Γ_8^+ و Γ_8^- هستند، شکافته می‌شود. در این حالت مشاهده می‌شود که تحت بسط غیرهیدرواستاتیک شبکه در بازه بین ٪ ۲~۱٪ حالت Γ_6 پایین کشیده می‌شود و بین حالت‌های Γ_8^+ و Γ_8^- می‌گیرد و یک وارونگی نواری شکل می‌گیرد و این ترکیب به یک نیم‌رسانای توپولوژی با نظم نواری وارون تبدیل می‌شود. این امر بخوبی در شکل ۲ نشان داده شده است. در $InAs_{0.5}Sb_{0.5}$ به دلیل وجود تقارن چهارگوشی، دو نوار ظرفیت بالایی نوارهای تبهگن دو تایی هستند که در مرکز ناحیه نخست بریلوئن دارای تقارن گروه نقطه‌ای Γ_8^+ و Γ_8^- (نوارهای آبی رنگ ظرفیت بالایی) هستند. ترتیب نواری عادی در این ترکیب (از انرژی بالا به سمت انرژی پایین) به‌ترتیب به صورت Γ_6، Γ_8^+ و Γ_8^- است. تحت کشش شبکه در بازه بین ٪ ۱~ ٪۰، نوار حالت Γ_6 پایین کشیده می‌شود و $InAs_{0.5}Sb_{0.5}$ با نظم نواری عادی به نیم‌رسانای توپولوژی با نظم نواری وارون تبدیل می‌شود. با اعمال درصدهای بیشتر بسط غیرهیدرواستاتیک، ترتیب نواری وارون در این ترکیب‌ها حفظ می‌شود در حالیکه گاف نواری رفته رفته بیشتر می‌شود. این روند در شکل ۲ نشان داده شده است. در ادامه بر پایه نتایج بدست آمده از مطالعه ساختار نواری به بررسی خواص اپتیکی $InAs_{0.25}Sb_{0.75}$ و $InAs_{0.5}Sb_{0.5}$ می‌پردازیم.

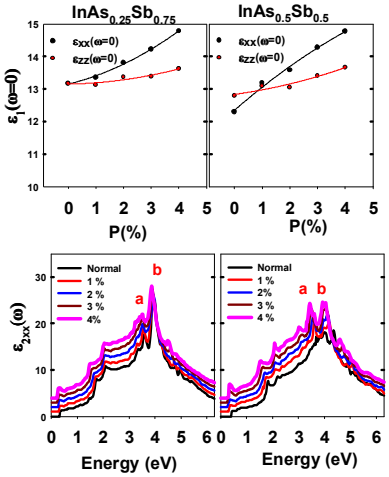


شکل۲ : ساختار نواری $InAs_xSb_{1-x}(x=0.25, 0.5)$ در حالت عادی و تحت کشش شبکه بین ۱ تا ٤ درصد.

برای محاسبه تابع دی‌الکتریک باید سهم گذارهای درون‌نواری و بین‌نواری محاسبه‌شوند. دو سهم عمده برای تابع دی‌الکتریک وجود دارد. در دمای صفر کلوین، سهم ناشی از گذارهای درون‌نواری فقط برای فلز ها قابل‌توجه است. گذارهای بین نواری به دوسهم گذار-های مستقیم و همچنین غیرمستقیم تقسیم می‌شود. در اینجا از گذار-های غیرمستقیم که شامل پراکندگی فونونی است چشم پوشی می-کنیم. برای محاسبه سهم بین نواری ناشی از انتقال‌های مستقیم الکترونی می‌بایست یک جمع بندی روی تمام انتقال‌های ممکن از حالت‌های پر شده، به حالت های پر نشده را محاسبه کرد، که برای این کار در مطالعه حاضر از تقریب فاز تصادفی استفاده شده است. تابع دی‌الکتریک یک تانسور متقارن با ٦ عنصر مستقل است که بسته به تقارن موجود در بلور این تعداد کمتر نیز خواهند شد. برای ساختارها با تقارن مکعبی، تنها یک عنصر مستقل $Im\varepsilon_{xx}$، وجود دارد در حالی که برای ترکیب‌هایی با ساختار چهارگوشی دو مولفه مستقل وجود دارد. $InAs_{0.5}Sb_{0.5}$ در حالت عادی و تحت کشش

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

غیرهیدرواستاتیک دارای تقارن چهارگوشی است همچنین در $InAs_{0.25}Sb_{0.75}$ تحت کشش غیرهیدرواستاتیک، تقارن مکعبی به تقارن تتراگونال تبدیل می‌شود بنابراین برای هر دو ترکیب تحت کشش شبکه دو عنصر مستقل $\mathrm{Im}\,\varepsilon_{zz}$ و $\mathrm{Im}\varepsilon_{xx}$ وجود دارد که در اینجا به علت شباهت زیاد بین این عناصر فقط نتایج حاصل از محاسبه $\mathrm{Im}\varepsilon_{xx}$ آورده شده است. ثابت دی‌الکتریک استاتیک و بخش موهومی تابع دی‌الکتریک تحت بسط غیرهیدرواستاتیک شبکه در شکل ۳ نشان داده شده است.



شکل۳ : (بالا) مؤلفه‌های ثابت دی‌الکتریک $InAs_{0.25}Sb_{0.75}$ و $InAs_{0.5}Sb_{0.5}$ در حالت عادی و تحت بسط غیرهیدرواستاتیک از ۱ تا ٤ درصد ، نقاط مشخص کننده مؤلفه‌های ثابت دی‌الکتریک به ترتیب با استفاده از توابع چند جمله‌ای مرتبه دوم $\varepsilon_{xx}(P)(\varepsilon_{zz}(P)) = 13.15(13.15) + 0.2(0.016)P + 0.05(0.025)P^2$ و $\varepsilon_{xx}(P)(\varepsilon_{zz}(P)) = 12.35(12.84) + 0.74(0.11)P - 0.034(0.022)P^2$ برازش داده شده‌اند. (پایین) بخش موهومی تابع دی‌الکتریک(به‌منظور جلوگیری از همپوشانی، تمام طیف ها نسبت به یکدیگر به اندازه یک واحد در راستای قائم شیفت داده شده‌اند).

همان‌گونه که شکل فوق نشان می‌دهد، ثابت دی‌الکتریک با افزایش بسط غیرهیدرواستاتیک بطور یکنواخت افزایش می‌یابد. نقاط مشخص کننده ثابت دی‌الکتریک با استفاده از توابع چند جمله‌ای مرتبه دوم برازش داده شده اند. همان‌گونه که شکل فوق نشان می‌دهد، با افزایش بسط غیرهیدرواستاتیک شبکه، پیک‌های اصلی در قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک که در شکل ۳ با حروف a و b نشان داده شده‌اند به سمت انرژی‌های پایین‌تر میل می‌کنند و این امر منجر به افزایش ثابت دی‌الکتریک می‌شود. از آن‌جا که با افزایش بسط شبکه گذار از نیم‌رساناهای معمولی به سمت نیم‌رساناهای توپولوژی رخ می‌دهد، بنابراین می‌توان نتیجه گرفت که با گذار از نیم‌رسانای معمولی به سمت نیم‌رساناهای توپولوژی ساختارهای اصلی در بخش موهومی تابع دی‌الکتریک به سمت انرژی‌های پایین‌تر میل می‌کنند و مولفه‌های ثابت دی‌الکتریک افزایش می‌یابند.

نتیجه گیری

در این مطالعه خواص ساختاری، ساختار نواری و ویژگی‌های اپتیکی برای $InAs_{0.5}Sb_{0.5}$ و $InAs_{0.25}Sb_{0.75}$ تحت کشش غیر-هیدرواستاتیک شبکه مورد بررسی قرار گرفته است. محاسبات حاکی از آن است که تحت بسط غیرهیدرواستاتیک شبکه بین ۰تا۱ درصد (۱ تا ۲ درصد)، $InAs_{0.5}Sb_{0.5}$ ($InAs_{0.25}Sb_{0.75}$) با نظم نواری عادی به نیم‌رسانای توپولوژی با ترتیب نواری وارون تبدیل می‌شود. همچنین نتایج بدست آمده از بررسی خواص اپتیکی این ترکیب‌ها با بکارگیری تقریب فاز تصادفی نشان می‌دهد با افزایش بسط شبکه و انتقال از نیم‌رسانای معمول به سمت نیم‌رسانای توپولوژی، ساختارهای اصلی در بخش موهومی تابع دی‌الکتریک به سمت انرژی‌های پایین‌تر میل می‌کنند. از آن جا که عایق‌های توپولوژی در طراحی ابزارهای اپتوالکترونیک مختلفی می‌توانند مفید باشند، مطالعه صورت گرفته در این پژوهش می‌تواند مبنای کارهای تجربی‌ای که در آینده در راستای بررسی ویژگی‌های اپتیکی این ترکیب‌ها انجام می‌شود، قرار گیرد.

مرجع‌ها

[۱] S. Namjoo et al., " *Optical study of narrow band gap $InAs_xSb_{1-x}$ (x=0, 0.25, 0.5, 0.75, 1)"*, Physical Review B **91**, (2015) 205205.

[۲] M. Z. Hasan, and C. L. Kane, "*Colloquium: Topological insulators"*, Reviews of Modern Physics **82**, (2010) 3045.

[۳] P. Blaha etal., *"WIEN2k, An Augmented Plane Wave Plus Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties,"* **2th** Edition, Vienna University of Technology, Vienna, (2001).

[۴] Z. Wu, and R. E. Cohen, "More accurate generalized gradient approximation for solids", Physical Review B 73, (2006) 235116.

[۵] F. Tran, and P. Blaha, *"Accurate Band Gaps of semiconductors and Insulators with a Semilocal Exchange-Correlation Potential "*, Physical Review Letters **102**, (2009) 226401.

[۶] G. N. Greaves et al., *"Poisson's ratio and modern materials"* Nat Mater **10**, (2011) 823-837.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

ساخت هیدروترمال و بررسی میکروساختاری فریت‌های چندفروئی $Bi_{1-x}Ce_xFe_{1-x}Zr_xO_3$

آدینه، زهرا [۱،*]؛ قلی‌زاده، احمد [۱]

[۱] دانشکده فیزیک، دانشگاه دامغان، دامغان

چکیده

در این مقاله، فریت‌های چندفروئی $Bi_{1-x}Ce_xFe_{1-x}Zr_xO_3$ $(x = 0.00, 0.03, 0.06)$ به روش هیدروترمال تهیه شده‌اند. ویژگی‌های ساختاری و مورفولوژی نمونه‌ها به‌وسیله پراش پرتو ایکس (XRD)، میکروسکوپ الکترونی روبشی، طیف‌سنجی تبدیل فوریه فروسرخ (FTIR) و طیف‌سنجی پاشندگی انرژی (EDS) پرتو ایکس در دمای اتاق بررسی شدند. بررسی الگوهای XRD، تحلیل FTIR و EDS نشان می دهند که فریت‌های $Bi_{1-x}Ce_xFe_{1-x}Zr_xO_3$ با موفقیت سنتز شدند.

واژه های کلیدی: فریت بیسموت؛ روش هیدروترمال؛ گذار ساختاری.

Hydrothermal synthesis and microstructure investigation of $Bi_{1-x}Ce_xFe_{1-x}Zr_xO_3$ multiferroic ferrites

Adineh, Zahra[1,*]; Gholizadeh, Ahmad[1]

[1] *Department of Physics, Damghan University, Damghan*

Abstract

In this paper, $Bi_{1-x}Ce_xFe_{1-x}Zr_xO_3$ (x = 0.00, 0.03, 0.06) multiferroic ferrites were prepared by hydrothermal method. The samples were structurally and morphologically investigated by X-ray diffraction (XRD), scanning electron microscopy, Fourier-transform infrared (FT-IR) spectroscopy and energy-dispersive X-ray spectroscopy (EDS) at room temperature. The XRD patterns, and FT-IR and EDS analysis reveal that the $Bi_{1-x}Ce_xFe_{1-x}Zr_xO_3$ ferrites with hexagonal-shaped grains were successfully synthesized.

***Keywords**: Bismuth ferrite; Hydrothermal method; Structural transition*

PACS No. (61)

مقدمه

فریت پروسکایت ($BiFeO_3$ (BFO تنها ماده‌ای است که در دمای اتاق به طور همزمان ویژگی چندفروئی همچون فروالکتریک و فرومغناطیس از خود نشان می‌دهد و بر این اساس کاندیدای جالبی برای استفاده در صنعت و تکنولوژی همچون استفاده در ذخیره‌سازی داده‌ها و اسپینترونیک [۱-۲] می‌باشد. فریت بیسموت دارای سازوکار فروالکتریسیته و پادفرومغناطیس نوع G است که به ترتیب از اعوجاج تک‌جفت الکترون $6s^2$ در یون Bi^{+3} و نظم اسپینی موضعی Fe^{+3} نشأت گرفته است. با این حال مشکلات اساسی نظیر تشکیل فازهای ناخالصی، جریان نشتی بالا و قطبش مانده پایین کاربردهای این ماده را با مشکل مواجه کرده است.

برای غلبه بر این مشکلات آلایش‌هایی در جایگاه‌های Bi و Fe انجام شده است که روش مؤثری برای تضعیف جریان نشتی و افزایش مغناطش فریت بیسموت است. برای مثال ساتی و همکارانش [۳]، در سال ۲۰۱۷ پژوهشی در زمینه جانشینی یون Zr^{+4} به جای Fe^{+3} برای بهبود ویژگی چندفروئی $Bi_{0.9}Dy_{0.1}Fe_{1-}$

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

$_xZr_xO_3$ تهیه شده به روش واکنش حالت جامد و با فاز مایع سریع انجام دادند که در آن‌ها اندازه‌های ذرات و گاف نواری نوری کاهش یافته و همچنین رفتار فرومغناطیس ضعیفی در آن‌ها مشاهده شده بود. در سال ۲۰۱۶ نیز دای و همکارانش [۴]، با جانشینی Ce^{+3} به جای Bi^{+3} در $Bi_{1-x}Ce_xFeO_3$ و به ازای مقادیر متفاوت آن مشاهده کردند که با افزایش مقادیر یون سریم اندازه ذره و تشکیل فازهای ناخالصی کاهش یافته بود. بنابراین در این قبیل آلایش‌ها مشاهده می‌شود که اندازه ذره کاهش یافته و با کاهش این اندازه به کمتر از $62nm$ مغناطش نیز افزایش یافته است [۵]. در این پژوهش تاثیر افزودن همزمان دو جانشانی Ce و Zr به‌ترتیب در جایگاه‌های Bi و Fe بر ویژگی‌های میکروساختاری $BiFeO_3$ بررسی شده است.

روش آزمایش

برای ساخت فریت پروسکایت بیسموت در روش هیدروترمال از نیترات بیسموت $Bi(NO_3)_3{\cdot}5H2O(0.005\ mol)$ و نیترات آهن $Fe(NO_3)_3{\cdot}9H2O\ (0.005\ mol)$ و باز هیدروکسید پتاسیم (KOH) به مقدار $42\ gr$ و در ساخت $Bi_{0.97}Ce_{0.03}Fe_{0.97}Zr_{0.03}O_3(BC3FZ3O)$ و $Bi_{0.94}Ce_{0.06}Fe_{0.94}Zr_{0.06}O_3(BC6FZ6O)$ به ترتیب برای ۰٫۰۰۰۱۵ و ۰٫۰۰۰۳ مول جانشانی همزمان Ce و Zr استفاده شده است.

در ساخت BFO محلول به دست آمده از نیترات بیسموت و نیترات آهن را با یکدیگر ترکیب کرده و KOH را به این ترکیب به صورت قطره‌ای اضافه نموده و توسط همزن مغناطیسی آن را هم می‌زنیم تا حل شود. سپس آن را داخل اتوکلاو ریخته و به مدت ۶ ساعت در دمای $180\ ^{\circ}C$ داخل آون قرار می‌دهیم. پس از آن ماده موردنظر را با آب دو بار یونیزه شده شستشو داده و صاف کرده و به مدت ۳ ساعت نمونه را برای خشک شدن داخل آون در دمای $110\ ^{\circ}C$ قرار می‌دهیم. در ساخت $BC3FZ3O$ و $BC6FZ6O$ محلول به دست آمده از ترکیب نیترات بیسموت، نیترات آهن، نیترات سریم و نیترات زیرکونیوم را با یکدیگر ترکیب کرده و KOH را به آن‌ها به صورت قطره‌ای اضافه می‌کنیم و با همزن مغناطیسی آن را هم می‌زنیم تا حل شود سپس محلول به دست آمده را داخل اتوکلاو ریخته و به مدت ۶ ساعت در دمای $185\ ^{\circ}C$ داخل آون قرار می‌دهیم. همچون ساخت فریت پروسکایت ترکیب موردنظر را با آب دو بار یونیزه شده شستشو داده و صاف کرده و برای خشک شدن آن مواد مورد نظر را نیز به مدت ۳ ساعت داخل آون در دمای بسیار بیشتر از دمای خشک شدن فریت پروسکایت بیسموت یعنی $185\ ^{\circ}C$ قرار می‌دهیم. الگوهای پراش پرتو ایکس (XRD) نمونه‌ها با استفاده از پراش-سنج $PAnalytical\ (Philips)$ مدل $X'Pert\ Pro\ PW\ 3040/60$ مجهز به منبع $Cu\text{-}K\alpha$ با تابش به طول‌موج ۱٫۵۴۳۸ Å و فیلتر نیکل در گستره‌ی زاویه $2\theta = 20\text{–}80^{\circ}$ و در دمای اتاق ثبت شد. تصاویر مربوط به ویژگی‌های سطحی و آنالیز عنصری نمونه‌های مورد مطالعه با استفاده از دستگاه میکروسکوپ الکترونی روبشی (SEM) شرکت $TESCAN$ واقع در آزمایشگاه علوم پزشکی مشهد تهیه شدند.

بحث و نتایج

شکل ۱ الگوهای XRD مربوط به (الف) BFO (ب) $BC3FZ3O$ (پ) $BC6FZ6O$ است. همانطوری که از روی شکل مشاهده می‌شود با افزایش جانشانی همزمان Ce و Zr، شدت نسبی قله‌های (۰۱۸) و (۳۰۰) نسبت به قله (۲۱۴) در زاویه حوالی 56° و همچنین شدت نسبی قله (۰۰۶) نسبت به قله (۲۰۲) در زاویه حوالی 39° در حال کاهش هستند. شدت نسبی قله (۱۰۴) نسبت به قله (۱۱۰) در زاویه حوالی 32° با افزایش جانشانی همزمان Ce و Zr درحال کاهش است. الگوهای XRD همچنین کاهش شدت نسبی قله (۰۱۲) در زاویه حوالی 22° و افزایش شدت نسبی قله (۰۲۴) در زاویه حوالی 46° نشان می‌دهند که این تغییرات حاکی از تاثیر جانشانی‌ها بر ساختار نمونه‌ها است.

پارامترهای شبکه‌ای یاخته یکه نمونه‌ها به روش برازش الگوهای XRD با استفاده از نرم‌افزار $Fullprof$ بدست آمده است (جدول ۲ را ببینید). پارامترهای شبکه‌ای که با استفاده از نرم افزار $Fullprof$ بدست می‌آیند اشاره به محورهای شش‌گوشی دارد در حالی که نمونه دارای ساختار لوزی‌رخ با گروه فضایی $R3c$ است. پارامترهای شبکه و ابعاد

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

یاخته لوزی‌رخ را می‌توان با استفاده از ابعاد یاخته شش‌گوشی محاسبه کرد:

$$a_r = \frac{1}{3}\sqrt{3a_H^2 + c^2} \quad , \quad \sin\frac{\alpha}{2} = \frac{3}{2\sqrt{3+(c/a_H)^2}} \quad (۱)$$

$$V_r = \frac{1}{3}V_H \quad و$$

مقادیر پارمترهای شبکه شش‌گوشی و لوزی‌رخ به دست آمده از برازش الگوهای *XRD* برای تمامی نمونه‌ها در جدول ۱ آورده شده است. کاهش مقادیر پارمتر شبکه لوزی‌رخ a_R و افزایش مقدار α_R نشان می‌دهد که یک گذار فاز ساختاری به مکعبی رخ می‌دهد. مقدار $\alpha_R = ۶۰^{o}$ معادل با یک ساختار مکعبی کامل است. مقادیر اندازه بلورک‌های $D_{۱۲}$ و $D_{۲۴}$ محاسبه شده از مکان ونیم‌پهنای قله‌های مشاهده شده در زوایای حوالی ^{o} ۲۲ و ^{o} ۴۶ با استفاده از رابطه شرر یک کاهش را با با افزایش جانشانی همزمان *Ce* و *Zr* نشان می‌دهد.

در نظر گرفتن هر دو عامل اعوجاج و عامل اکتاهدرال برای بررسی پایداری فاز ساختاری پروسکایت ضروری است. عامل اکتاهدرال با فرمول زیر بیان می‌شود:

$$\mu = r_B / r_X \quad (۲)$$

اگر عامل اکتاهدرال خیلی کوچک باشد ممکن است باعث ناپایداری پروسکایت شود. برای پروسکایت‌ها $۰٫۴۴ < \mu < ۰٫۹۰$ است. عامل انحراف گلداشمیت برابراست با:

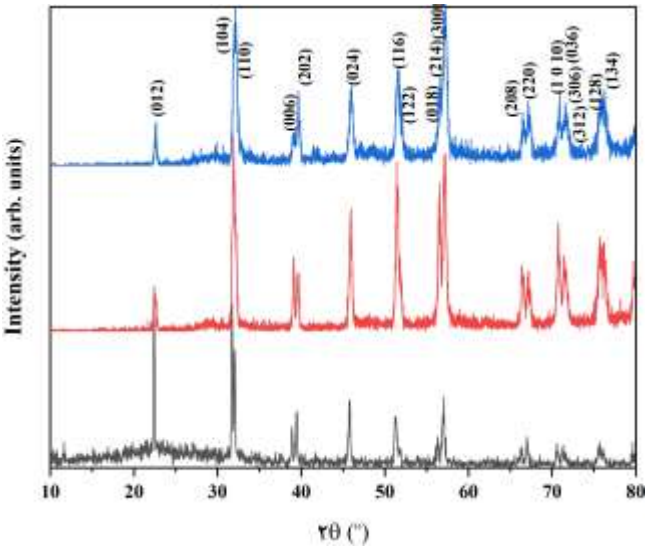
$$t = (r_A + r_X)/\sqrt{2}(r_B + r_X) \quad (۳)$$

r_A و r_B به ترتیب شعاع یونی کاتیون‌های A و B و r_X شعاع یونی آنیون X است که در اینجا $X = O$ است. برای پروسکایت‌های مکعبی در شرایط ایده‌ال عامل انحراف در گستره‌ی $t <$ ۱ و $۰٫۹ < t$ و برای فازهای راست‌گوشه و لوزی‌رخ و غیره در گستره‌ی $۰٫۹ > t > ۰٫۷۱$ است که در تطابق با نتایجمان است.

در جدول ۱ نیز ساختار و پارامترهای شبکه و همچنین تعیین اندازه متوسط بلورک با استفاده از روش شرر برای نمونه‌های *BFO*، *BC3FZ3O* و *BC6FZ6O* آورده شده‌اند. انتظار می‌رود با افزایش جانشانی همزمان *Ce* و *Zr*، از آنجایی که پیوند *Zr–O* قوی‌تر از پیوند *Fe–O* است جانشینی درصدی از یون غیرمغناطیسی Zr^{+4} با شعاع یونی بزرگتر به جای Fe^{+3} با شعاع یونی کمتر به کاهش غلظت جای خالی اکسیژن منجر می‌شود که کاهش رشد و اندازه بلورک را نتیجه می‌دهد [۶].

تصاویر *SEM* دو نمونه *BFO* و *BC6FZ6O* را در مقیاس ۵۰۰ نانومتر در شکل ۲ آوزده شده است که به‌وشوح حضور ذراتی شش‌گوشی-گونه را در *BFO* نشان می‌دهد.

شکل ۳، طیف سنجی پراکندگی انرژی پرتو ایکس *(EDS)* نمونه‌ها را نشان می‌دهد. همانطوری که جدول داخل شکل نشان می‌هد مقادیر عناصر موجود در نمونه‌ها با مقادیر عنصرسنجی آن‌ها طبق فرمول تطابق خوبی دارند.

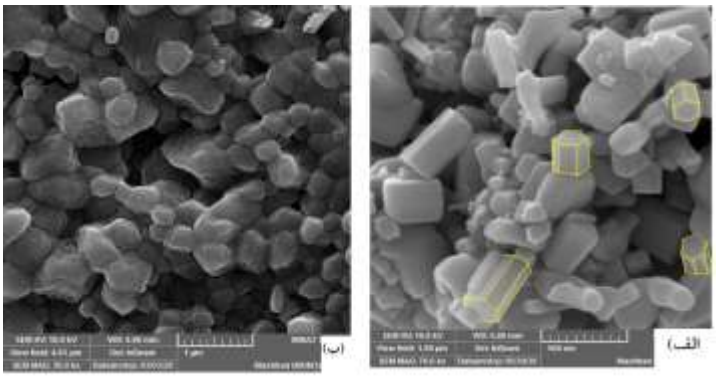


شکل ۱ الگوی *XRD* (الف) *BFO* (ب) *BC3FZ3O* (پ) *BC6FZ6O*.

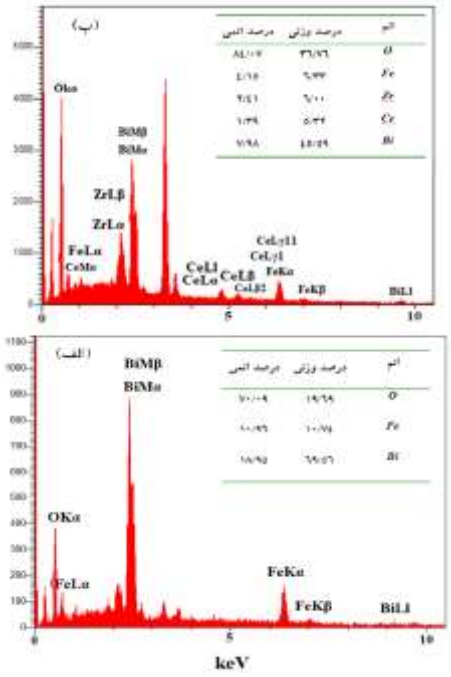
جدول ۱ مقادیر پارمترهای شبکه شش‌گوشی و لوزی‌رخ، اندازه بلورک و دو عامل اعوجاج و عامل اکتاهدرال نمونه‌های مورد مطالعه که ساختار لوزی رخ (با گروه فضایی *R3c*) دارند.

نمونه	*BFO*	*BC3FZ3O*	*BC6FZ6O*
$a_H = b_H$ (Å)	۵٫۵۸۴۹	۵٫۵۶۹۱	۵٫۵۶۹۱
c_H (Å)	۱۳٫۸۷۹۱	۱۳٫۸۳۸۴	۱۳٫۸۲۵۲
a_R (Å)	۵٫۶۳۹۴	۵٫۶۲۲۸	۵٫۶۱۸۵
α_R (°)	۵۹٫۳۶۰	۵۹٫۳۶۹	۵۹٫۳۹۱
$V_R = V_H/3$ (Å^3)	۱۲۴٫۹۷۱	۱۲۳٫۹۰۱	۱۲۳٫۶۷۶
$D_{۱۲}$ *(nm)*	۵۷٫۸	۳۴٫۱	۳۴٫۱
$D_{۲۴}$ *(nm)*	۴۲٫۲	۳۱٫۵	۳۱٫۵
μ (بدون واحد)	۰٫۴۶۰۷	۰٫۴۶۲۳	۰٫۴۶۳۹
t (بدون واحد)	۰٫۸۶۸۱	۰٫۸۶۷۳	۰٫۸۶۶۶

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

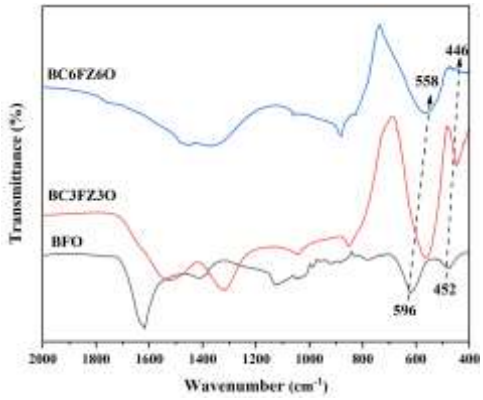


شکل ۲ تصاویر *SEM* (الف) *BFO* (ب)*BC6FZ6O*



شکل ۳ طیف *EDS* به همراه درصد وزنی و درصد اتمی عناصر در نمونه‌های (الف) *BFO* (ب) *BC6FZ6O*.

در شکل ۲ طیف *FT-IR* مربوط به تمامی نمونه‌ها در گستره‌ی cm^{-1} ۲۰۰۰-۴۰۰ نشان داده شده است که با مرجع [۷] مطابقت دارد. قله جذب قوی در اطراف cm^{-1} ۵۹۶ مربوط به ارتعاشات کششی ذاتی اکسیژن-فلز در جایگاه هشت‌وجهی و قله جذبی ضعیف‌تر در حوالی عدد موج cm^{-1} ۴۵۲ متناظر با ارتعاشات خمشی نامتقارن آهن-اکسیژن که از ویژگی‌های هشت‌وجهی گروه FeO_6 در ساختار پروسکایت است وجود دارند. حضور این بسامدهای جذبی در تطابق با نتایج بدست آمده از بررسی‌های ساختاری، تشکیل ساختار فریت پروسکایت را تایید می‌کند. به‌هرحال جابجایی قله‌های جذبی حوالی ۴۵۲ و cm^{-1} ۵۹۶ مربوط به ارتعاشات اکسیژن-فلز در جایگاه هشت‌وجهی به‌سمت قله‌های جذبی کوچکتر ۴۴۶ و cm^{-1} ۵۵۸ به‌خاطر جانشانی یون سنگین‌تر Zr با یون‌های سبک‌تر Fe است.



شکل ۴ طیف *FT-IR* نمونه‌ها.

نتیجه‌گیری

در این پژوهش، ساخت موفق فریت‌های چندفروئی $Bi_{1-x}Ce_xFe_{1-x}Zr_xO_3$ به روش هیدروترمال گزارش شده است. نتایج اندازه‌گیری‌های *XRD*، *SEM*، *EDS* و *FT-IR* نشان می‌دهد که جانشانی همزمان *Ce* و *Zr* تاثیر زیادی روی ویژگی‌های ساختاری و مورفولوژی دارند.

مرجع‌ها

[۱] Zhu, Jingbin, et al. "*Epitaxial integration of tetragonal $BiFeO_3$ with silicon for nonvolatile memory applications*." *Journal of Crystal Growth* 459 (2017): 178-184.

[۲] Tu, Chi-Shun, et al. "*Tailoring microstructure and photovoltaic effect in multiferroic Nd-substituted $BiFeO_3$ ceramics by processing atmosphere modification*." *Journal of the European Ceramic Society* 38.4 (2018): 1389-1398.

[۳] Sati, Prakash Chandra, et al. "*Effect of Zr substitution on structural, magnetic, and optical properties of $Bi_{0.9}Dy_{0.1}Fe_{1-x}Zr_xO_3$ multiferroic ceramics prepared by rapid liquid phase sintering method*." *Ceramics International* 43.6 (2017): 4904-4909.

[۴] Dai, Haiyang, et al. "*Studies on the structural, electrical and magnetic properties of Ce-doped $BiFeO_3$ ceramics*." *Journal of Alloys and Compounds* 672 (2016): 182-189.

[۵] Naeimi, A. S., et al. "*Enhancment of ferromagnetism in Ba and Er co-doped $BiFeO_3$ nanoparticles*." *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 393 (2015): 502-507.

[۶] Esmaili, Leyla, and Ahmad Gholizadeh. "*The effect of Nd and Zr co-substitution on structural, magnetic and photocatalytic properties of $Bi_{1-x}Nd_xFe_{1-x}Zr_xO_3$ nanoparticles*." *Materials Science in Semiconductor Processing* 118 (2020): 105179.

[۷] Biasotto, G., et al. "*Microwave-hydrothermal synthesis of perovskite bismuth ferrite nanoparticles*." *Materials Research Bulletin* 46.12 (2011): 2543-2547.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

اثر تابش گاما بر جذب نوری پلیمر پلی‌متیل متاآکریلات

نودهی، مجید[۱]؛ بیگ‌زاده، امیرمحمد[۲]؛ رشیدیان وزیری، محمدرضا[۲*]؛ کریمی، رضا[۱]؛ سلیمی میدانشاهی، سحر[۴]

[۱] دانشگاه صنعتی امیرکبیر، دانشکده مهندسی انرژی و فیزیک، گروه فیزیک

[۲] پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، پژوهشکده کاربرد پرتوها

[۳] پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، پژوهشکده فوتونیک و فن‌آوری‌های کوانتومی

[۴] گروه فیزیک، دانشکده فیزیک شیمی، دانشگاه الزهرا، تهران

چکیده

پلی‌متیل متا آکریلات یکی از پلیمرهای پرکاربرد در کاربردهای مختلف بوده و بررسی اثر پرتوهای یون‌ساز بر خواص اپتوالکترونیکی آن از اهمیت بالایی برخوردار است. تابش‌های گاما از جمله تشعشعاتی هستند که می‌توانند اثرات مخربی را بر روی مواد مختلف برجای بگذارند. در این کار پژوهشی ضریب جذب نوری نمونه‌های پلی‌متیل متا آکریلات پرتودیده در دزهای مختلف تابش گاما با استفاده از روش تجربی در طول‌موج مرئی ۴۳۲ نانومتر با استفاده از منبع نور لیزر هلیوم-کادمیوم اندازه‌گیری شد. میزان ضریب خاموشی نیز برای نمونه‌ها از روی مقادیر ضریب جذب خطی به دست آمد. نتایج نشان داد که ضریب جذب‌خطی این ماده با افزایش دز با روند غیرخطی افزایش می‌یابد.

کلمات کلیدی: *خواص نوری، پرتوهای یونساز، پلی‌متیل متاآکریلات ، تابش گاما، ضریب جذب*

Impact of gamma radiation on optical adsorption of Poly methyl methacrylate polymer

Nodehi, Majid[1]; Beigzadeh, Amirmohammad[2]; Rashidian Vaziri, Mohammad Reza[3]; Karimi, Reza[1]; Salimi Meidanshahi, Sahar[1]

[1] Department of Energy Engineering and Physics, Amirkabir University of Technology, Tehran

[2] Radiation Application Research School, Nuclear Science and Technology Research Institute, Tehran

[3] Photonics and Quantum Technologies Research School, Nuclear Science and Technology Research Institute, Tehran

[4] Department of Physics, Alzahra University, Tehran, Iran

Abstract

Poly methyl methacrylate is one of the most widely used polymers in various applications and the study of the effect of ionizing radiation on its optoelectronic properties is very important. Gamma radiation is a radiation that can have destructive effects on various materials. In this research work, the optical adsorption coefficient of Poly methyl methacrylate samples irradiated in different doses of gamma radiation was measured using experimental method at the visible wavelength of 432 nm using a Helium-cadmium laser source. The extinction coefficient was also obtained for the samples from the values of the linear absorption coefficient. The results showed that the linear absorption coefficient of this material nonlinearly increases with increasing the absorbed dose.

PACS No. 87.50.Gi, 42.65.−k, 42.70.Jk, 42.70.Hj

۱. مقدمه

تحقیقات در مورد تأثیر تشعشعات فضایی بر روی اجزای نوری از مدت‌ها قبل برای مقاصد نظامی مطرح بوده است. امروزه فن‌آوری‌های پیشرفته فوتونیکی برای مخابرات فضائی و سنجش نوری بکار گرفته می‌شوند که حضور تابش‌های یون‌ساز پرانرژی در این محیط‌ها می‌تواند صحت عملکرد آن‌ها را تحت تأثیر خویش قرار دهد. تحقیقات نشان داده است که هر ابزار الکترونیکی یا نوری ممکن است پس از قرار گرفتن در معرض تابش هسته‌ای آسیب ببیند [۱]. هنگامی‌که ماهواره‌ای در مدار قرار می‌گیرد، پس از اثر تشعشعات فضایی بر روی تجهیزات، تعمیر آن‌ها تقریباً غیرممکن می‌شود و لذا باید پیش از طراحی و ساخت آن‌ها اثر تشعشعات فضایی مختلف بر روی آن‌ها و خواص نوریشان مورد بررسی قرار گیرد. امروزه از پلیمرها به‌شکلی گسترده برای ساخت تجهیزات

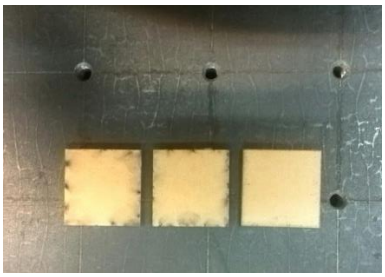
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد

http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

نوری استفاده می‌شود. پلیمرها در ساخت سوئیچ‌های نوری، فیبرهای نوری و سایر قطعات نوری مورد استفاده واقع می‌شوند. برای سهولت در امر ارتباطات، فیبرهای نوری جایگاه ویژه‌ای در سامانه‌های مخابراتی و نیز در علوم فضائی ارسال اطلاعات از فضا به پایگاه‌های زمینی برعهده دارند. پلیمرهایی نظیر پلی‌متیل متاآکریلات، بخش عمده اجزای یک فیبر نوری را تشکیل می‌دهند. اثر تابش رادیواکتیو در فضا می‌تواند بر روی فیبرهای نوری تأثیر مخربی ایجاد کند. پیش از این، تحقیقاتی پیرامون اثر تابش‌های یون‌ساز و غیریونساز بر روی مواد پلیمری انجام شده است [۴-۲]. در این مطالعه به بررسی اثر تابش گاما بر روی تغییرات ضریب جذب خطی پلیمر پلی‌متیل متاآکریلات پرداخته شده و نحوه تغییر ضریب جذب خطی در اثر جذب دزهای مختلف تابش گاما مورد بررسی قرار گرفته است.

۲. روش کار

ابتدا برش‌های مربعی به ابعاد ۲۰×۲۰ میلی‌متری به ضخامت ۲ میلی‌متر از ورقه اصلی پلی‌متیل متاآکریلات با نام تجاری Prato GB/T7 134-2008 تهیه شد. این نمونه‌ها پس از جداسازی برچسب، با استفاده از محلول آب و الکل در دستگاه آلتراسونیک تمیز شدند.

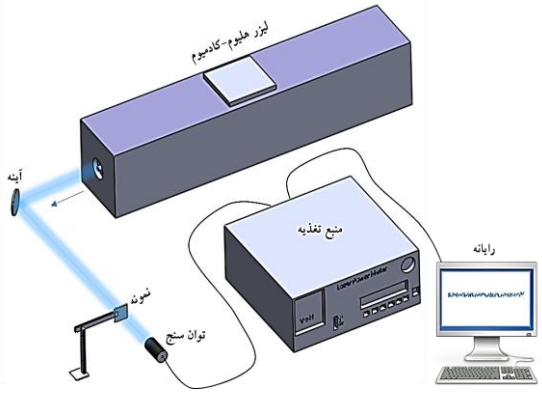


شکل ۱: نمونه‌های برش داده شده

در شکل ۱ نمونه‌های پلی‌متیل متاآکریلات پس از برش از ورقه اصلی نشان داده شده‌اند. تمامی نمونه‌ها از یک ورقه بزرگ پلی‌متیل متا آکریلات تهیه شدند تا اطمینان از یکسان بودن خواص فیزیکی آن‌ها حاصل آید. این نمونه‌ها به‌صورت ۲ عددی در ۵ پاکت از جنس کاغذ بسته‌بندی شدند تا بتوان هر کدام از این بسته‌ها را تحت دز یکسان پرتودهی کرد. این پنج بسته پلی‌متیل متا آکریلات به ابعاد ۲۰×۲۰×۲ میلی‌مترمکعب، با استفاده چشمه کبالت-۶۰ با آهنگ دز ۱,۶۵ گری بر ثانیه پرتودهی شدند. کبالت-۶۰ یکی از ایزوتوپ‌های رادیواکتیو مصنوعی کبالت با نیمه‌عمر ۵,۲۷۱۳ سال است که به‌صورت مصنوعی در راکتورهای هسته‌ای با بمباران نوترونی کبالت-۵۹ بدست می‌آید. این چشمه از خود دو پرتوی گاما با انرژی‌های ۱,۱۷ و ۱,۳۳ مگاالکترون ولت ساطع می‌کند. برای پرتودهی از سیستم پرتودهی آزمایشگاهی گاماسل GC-220 استفاده شد [۵]. این دستگاه قادر به ارائه دزهای بالایی از تابش گاما به انواع مختلفی از مواد است. نمونه‌ها پس از برش و تمیز شدن به اتاق مخصوص که دستگاه در آنجا قرار داشت انتقال داده شدند. در محل پرتودهی، استوانه حاوی نمونه‌ها در میان میله‌های کبالت ۶۰ به‌صورت یکنواخت از تمام وجوه پرتودهی شدند. میزان دز جذب شده در نمونه‌ها به ترتیب ۰، ۵، ۱۰، ۱۵، ۲۵، ۵۰ کیلوگری بوده است. در نهایت نمونه‌ها پس از پرتودهی برای اندازه‌گیری ضریب جذب خطی در چیدمان نشان داده شده در شکل ۲ قرار داده شدند. ضریب جذب خطی نمونه‌ها با اندازه‌گیری توان خروجی از یک نمونه بر میزان توان بدون حضور نمونه اندازه‌گیری می‌شود. ضریب جذب خطی در توان فرودی کم، مطابق با رابطه بیر- لامبرت و از طریق معادله ۱ به دست می‌آید[۶].

$$\alpha = -\frac{1}{L} ln \frac{I_0}{I} \qquad (۱)$$

که I و I_0 به ترتیب توان خروجی ثبت شده در آشکارساز با و بدون حضور نمونه در مسیر نور ورودی، و L ضخامت نمونه است. $ln \frac{I_0}{I}$ برابر با مقدار جذب نمونه است که با A نشان داده می‌شود و میزان تراگسیل نیز از رابطه $\frac{I_0}{I}$ قابل اندازه‌گیری است.



شکل ۲: طرحی از چیدمان مورد استفاده برای اندازه‌گیری ضریب جذب خطی

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

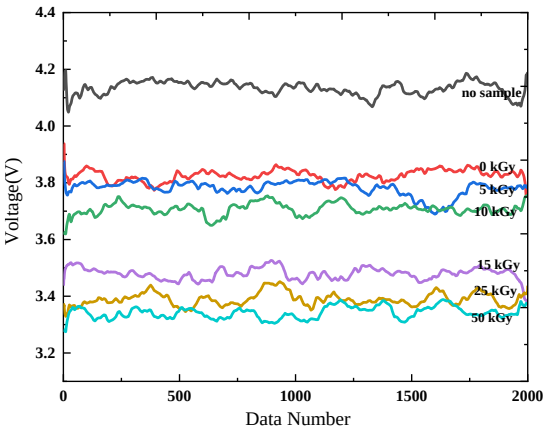
در چیدمان نشان داده شده در شکل ۲، ابتدا باریکه لیزر هلیوم-کادمیوم با طول‌موج ۴۳۲ نانومتر با استفاده از آینه در راستای مورد نیاز هدایت می‌شود. پس از هدایت، باریکه از نمونه عبور کرده و سپس به توان‌سنج می‌رسد. شدت ثبت شده در این حالت در توان‌سنج معادل با I است. در حالت دوم هیچ نمونه‌ای در مسیر باریکه لیزر قرار داده نمی‌شود و نور لیزر به طور مستقیم به توان‌سنج می‌رسد، در این حالت شدت ثبت شده در معادل با میزان I_0 است. از روی داده‌های استخراج شده از معادله ۱ می‌توان ضریب خاموشی (k) ماده را نیز تعیین نمود، ضریب خاموشی می‌تواند مقدار انرژی از دست رفته در نتیجه تعامل بین نور و بار متوسط را تعیین کند و با رابطه ۲ قابل محاسبه است[۷].

$$k = \frac{\alpha\lambda}{4\pi} \qquad (۲)$$

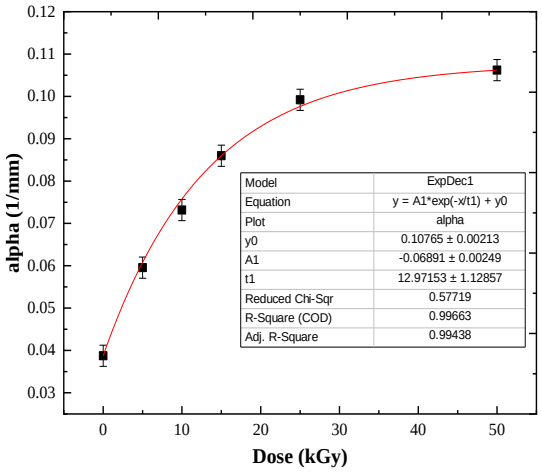
که در آن α ضریب جذب خطی ماده و λ طول‌موج نوری عبوری از ماده است.

۳. نتایج

در شکل ۳ تغییرات ولتاژ ثبت شده برای نمونه‌های پرتودیده در دزهای مختلف نشان داده شده است. در این اندازه‌گیری ۲۰۰۰ داده برای هر نمونه ثبت شده است که در برآورد نهایی میزان تغییرات ضریب جذب خطی از آن‌ها استفاده خواهد شد. برای اندازه‌گیری میزان ضریب جذب خطی از الگوریتم نوشته‌شده در محیط متلب استفاده شده است.



شکل ۳: تغییرات ولتاژ ثبت شده در توان‌سنج به ازای نمونه‌های پرتودیده با تابش گاما در دزهای مختلف

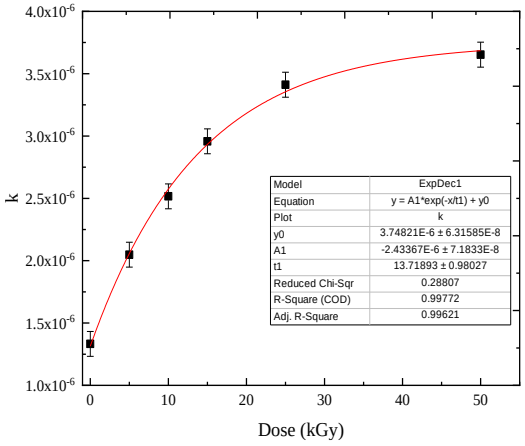


شکل ۴: نمودار تغییرات ضریب جذب خطی نمونه‌های پرتودیده در دزهای مختلف

نمودار شکل ۴ نشان می‌دهد که با افزایش میزان دز جذبی ناشی از پرتوهای گاما در ماده جاذب پلی‌متیل متاآکریلات، میزان ضریب جذب نوری آن‌ها به شکلی غیرخطی افزایش می‌یابد و این افزایش غیرخطی جذب در دزهای ۵ الی ۱۵ کیلوگری ابتدا شیب بیشتری داشته و پس از آن شیب کمتر می‌شود. تغییرات ظاهری همه پلیمرها با تابش گاما با چشم غیرمسلح نیز قابل شناسایی بود که این پدیده به نام تغییر رنگ ناشی از تابش شناخته شده است [۸]. این پدیده به ماهیت پلیمر و تا حد زیادی به شرایط تابش بستگی دارد (۱،۲). پس از تابش، برخی از مواد در معرض تغییر رنگ قابل بازگشت و یا دائمی قرار می‌گیرند. به طور کلی، تغییر رنگ مواد پلیمری ممکن است ناشی از تغییر در ساختار زنجیره‌های ماکرومولکولی و یا تغییر درساختار رنگ‌دانه‌های موجود آن‌ها باشد [۹و۱۰]. آرایش زنجیره‌های پلیمری در پلی‌متیل متاآکریلات در حالت کلی به‌صورت آمورف است. پس از پرتودهی، اتصالات عرضی ایجاد شده باعث بازآرایی زنجیره‌های پلیمری در این ماده شده و میزان بلورینگی افزایش می‌یابد [۱۱]. همان‌طور که در پلی‌اتیلن با افزایش میزان دز میزان بلورینگی افزایش پیدا می‌کند [۱۲و۱۳] و زنجیره‌ها در این حالت طوری به‌صورت نواحی منظم در کنار هم قرار می‌گیرند که از عبور نور از داخل ماده جلوگیری می‌کنند. این درحالی است‌که پیش از پرتودهی، به دلیل ساختار

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

آمورف بیشتر، نور با جذب کمتر مواجه بوده و فرصت عبور از ماده را پیدا می‌کند.



شکل ۵: ضریب خاموشی به ازای دز جذبی در نمونه‌ها

۴. بحث و نتیجه‌گیری

در این مطالعه تغییرات ضریب جذب نوری پلیمر بسیار پرکاربرد پلی‌متیل متاآکریلات اندازه‌گیری شده است. این نوع از پلیمر در بسیار از کاربردهای اپتیکی، بویژه در ساخت فیبرهای نوری به کار گرفته می‌شوند که کاربرد گسترده‌ای در صنعت فضایی برای ارسال اطلاعات دارند. این نوع تجهیزات، زمانی که در مدار قرار دادند و یا در فضا در حال حرکت هستند به‌صورت دائم تحت تأثیر تشعشعات کیهانی قرار می‌گیرند و لذا آگاهی از اینکه پرتو چه تغییراتی را در خواص نوری آن‌ها ایجاد می‌کند بسیار مهم است. اندازه‌گیری تغییرات ضریب جذب خطی نمونه‌های پلی‌متیل متا آکریلات تابش دیده در دزهای ۵ تا ۵۰ کیلوگری با اشعه گاما نشان داد که مقدار ضریب جذب غیرخطی با افزایش دز سپارش شده به آن‌ها افزایش می‌یابد و این روند به‌صورت غیرخطی است. در دزهای ۵ الی ۲۰ کیلوگری، تغییرات ضریب جذب به شکلی غیرخطی و با شیب زیاد بوده و پس از آن تا دز ۵۰ کیلوگری، تغییرات غیرخطی ضریب جذب با شیب کمتری افزایش می‌یابد. مقدار ضرایب خاموشی برای نمونه‌های پرتودیده، با استفاده از مقادیر به دست آمده ضریب جذب خطی اندازه‌گیری شد. با توجه به نتایج تحقیقات صورت پذیرفته، با اعمال دزتابشی، در بیشتر پلیمرها تغییرات ساختاری ایجاد می‌شود که این تغییرات منجر به تغییرشکل رنگی آن‌ها شده و جذب بیشتر نور مرئی در آن‌ها را به همراه دارد. این تغییرات به پیوندهای ماکرومولکولی موجود در ماده بر می‌گردد که اعمال دز منجر به پیوند این زنجیره‌ها به یکدیگر و ایجاد ساختار غیرآمورف پلیمری می‌شود. درنهایت می‌توان بیان نمود که ابزارهای الکترونیکی و اپتیکی، به‌ویژه فیبرهای نوری، که در ساختار آن‌ها از ماده پلی‌متیل متا آکریلات استفاده می‌شود تحت تابش گاما خواص نوریشان تغییر می‌کند. لذا باید تمهیداتی در مورد این مسئله در طراحی ابزارهای الکترواپتیکی فضایی با استفاده از این نوع پلیمر اندیشیده شود.

مراجع :

[1] Holmes-Siedle, Andrew, and Len Adams. "*Handbook of radiation effects*." (1993).

[2] Shams-el-Din, M. A., et al. "Determination of the refractive index depth profile of an UV-laser generated waveguide in a planar polymer chip." *Applied surface science* 236.1-4 (2004): 31-41.

[3] Biersack, J. P., and R. Kallweit. "Ion beam induced changes of the refractive index of PMMA." *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms* 46.1-4 (1990): 309-312.

[4] Hong, Wan, et al. "Optical property modification of PMMA by ion-beam implantation." *Applied surface science* 169 (2001): 428-432.

[5] https://www.nrc.gov

[6] Swinehart, D. F. "The beer-lambert law." *Journal of chemical education* 39.7 (1962): 333.

[7] Hussein, Ahmed Shaker, Mohammed Hadi Shinen, and Mohammed Sami Abdali. "Study the Effect of Thickness on Optical Properties of Polymer PMMA Thin Films Preparated by Spin Coating Method." *Journal of University of Babylon for Pure and Applied Sciences* 27.4 (2019): 169-177.

[8] Zaki, M. F. "Gamma-induced modification on optical band gap of CR-39 SSNTD." *Journal of Physics D: Applied Physics* 41.17 (2008): 175404.

[9] Mousa, A. M., and N. H. Taher. "Color changes in irradiated plastics and their application to γ-radiation dosimetry." 1985 *5th International Symposium on Electrets* (ISE 5). IEEE, 1985.

[10] Clough, R. L., et al. "Color formation in irradiated polymers." *Radiation Physics and Chemistry* 48.5 (1996): 583-594.

[11] Suarez, Joao Carlos Miguez, et al. "Influence of γ-irradiation on poly (methyl methacrylate)." *Journal of applied polymer science* 85.4 (2002): 886-895.

[12] Soltani, Z., et al. "Mechanical and thermal properties and morphological studies of 10 MeV electron beam irradiated LDPE/hydroxyapatite nano-composite." *Radiation Physics and Chemistry* 83 (2013): 79-85.

[13] El-Sayed, S. M. "Electron beam and gamma irradiation effects on amorphous chalcogenide SbSe2. 5 films." *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms* 225.4 (2004): 535-543.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

آنتروپی درهم‌تنیدگی حالت پایه در مدل ابرتقارنی فرمیونی

اقبالی‌فام ، فقیهه[1]

[1]دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی ارومیه ، ارومیه

چکیده

در این مقاله، آنتروپی درهم‌تنیدگی برای فر میون‌های شدیدا همبسته در حالت پایه‌ی هامیلتونی ابرتقارنی مطالعه شده است. ***سپس از آنتروپی درهم‌تنیدگی در مسئله مطالعه یکریختی گراف‌ها در یک جفت گراف غیریکریخت استفاده شده است تا آنها را از یکدیگر متمایز کند. نتایج نشان می‌دهد که آنتروپی درهم‌تنیدگی مربوط به هامیلتونی تک ذره قادر به تشخیص دو گراف غیر یکریخت نیست ولی آنتروپی درهم‌تنیدگی مربوط به هامیلتونی دو ذره توانایی آشکار کردن جفت غیریکریخت را دارد.***

واژه های کلیدی: *آنتروپی درهم‌تنیدگی، مدل ابرتقارنی فرمیونی،مساله‌ی یکریختی گراف‌ها*

Entanglement entropy in the ground state of fermionic supersymmetric model

Eghbalifam, Faghiheh[1]

[1] *Faculty of Physics, Urmia University of Technology, Urmia,*

Abstract

In this paper, the entanglement entropy is studied for strongly correlated spinless fermions in the ground state of a supersymmetric Hamiltonian. Then the entanglement entropy has been used in the studying graph isomorphism problem on one non-isomorphic pair of graphs to distinguish them from each other. The results show that the entanglement entropy of the single particle Hamiltonian is not able to detect two non-isomorphic graphs but the entanglement entropy of two particle Hamiltonian has the ability to detect non-isomorphic pairs.

***Keywords**: Entanglement Entropy, Fermionic Supersymmetric Model, Graph isomorphism problem*

PACS No. 3

مقدمه

آنتروپی درهم‌تنیدگی یکی از ابزارهای تعیین میزان درهم‌تنیدگی کوانتومی میان دو بخش متمم از یک شبکه است. آنتروپی درهم-تنیدگی به صورت آنتروپی فون نویمن ماتریس چگالی کاهش یافته از سیستم مرکب داده می‌شود[۱].

در این پژوهش آنتروپی درهم‌تنیدگی برای یکی از مدل های فرمیونی به نام مدل ابرتقارنی فرمیونی مطالعه می‌شود. مدل ابرتقارنی فرمیونی برای فرمیون‌های شبکه نخستین بار در [۲] معرفی شد و سپس در تحقیقات گسترده ای ادامه یافت و نتایج چشمگیری دارد. نتایج آن در گستره ی زیادی از پدیده ها شامل نظریه‌ی میدان ابرهمدیس، مرتبه‌ی توپولوژیکی و فاز مایع کوانتومی رخسار-کیولتون گونه بررسی شده است.

در این مدل، فرمیون‌ها نه تنها طبق اصل طرد پاولی نمی‌توانند در یک سایت قرار بگیرند، بلکه اجازه ندارند در سایت‌های مجاور قرار بگیرند.

تحقیقات روی این مدل همچنان ادامه داشته و در [۳] نویسندگان مثالی از این مدل را با نام مدل Nicolai ارائه دادند. همچنین در

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

[٤] نویسندگان تبهگنی حالت پایه‌ی مدل Nicolai را از منظر شکست تقارن مورد بررسی قرار دادند.

در این مقاله با درنظر گرفتن هامیلتونی مدل ابرتقارنی فرمیونی، روش محاسبه‌ی آنتروپی درهم‌تنیدگی برای گراف دلخواه شرح داده می‌شود. سپس از آنتروپی درهم‌تنیدگی در تشخیص گراف‌های غیریکریخت استفاده می‌شود. مثال گراف‌های غیریکریخت در این مقاله دو گراف منظم-فاصله‌ی کیوبیک و هافمن است که با آنتروپی درهم‌تنیدگی مربوط به قسمت تک‌ذره از هامیلتونی از هم تشخیص داده نمی‌شوند ولی با آنتروپی درهم‌تنیدگی مربوط به قسمت دوذره از هم تشخیص داده می‌شوند.

مدل ابرتقارنی فرمیونی

هامیلتونی این مدل با رابطه‌ی زیر معرفی می‌شود

$$H=\sum_i \sum_{j\in N(i)} P_i c_i^\dagger c_j P_j + \sum_i P_i \qquad (۱)$$

که i اندیس سایت گراف است و $N(i)$ مجموعه‌ی رئوسی است که با راس i ام همسایه هستند. عملگر تصویر P_i با رابطه‌ی زیر تعریف می‌شود [۲]

$$P_i=\prod_{j\in N(i)} (1-c_j^\dagger c_j) \qquad (۲)$$

عملگر تصویر در صورتی که حتی فقط یکی از همسایه‌های سایت iام اشغال شده باشد، صفر است. دو مولد ابرتقارنی $Q^\dagger$ و Q به شکل زیر تعریف می‌شوند

$$Q^\dagger=\sum_{i=1}^{N} c_i^\dagger P_i \qquad Q=\sum_{i=1}^{N} c_i P_i \qquad (۳)$$

با تعریف بالا، هامیلتونی برحسب $Q^\dagger$ و Q به شکل زیر بازنویسی می‌شود

$$H=Q^\dagger Q+QQ^\dagger \qquad (٤)$$

روابط جابجایی و پادجابجایی زیر برقرار هستند

$$[F,Q^\dagger]=Q^\dagger,\quad [F,Q]=-Q,\quad [F,H]=0,$$
$$[Q,H]=0,\quad [Q^\dagger,H]=0,\quad \{Q^\dagger,Q\}=H \qquad (۵)$$

که F عملگر تعداد فرمیونی است. جابجایی هامیلتونی با عملگر تعداد نشان می‌دهد که ویژه‌بردارهای هامیلتونی تعداد ثابتی فرمیون دارند. فرض کنید $|E\rangle$ ویژه‌بردار هامیلتونی با ویژه‌مقدار E باشد، یعنی $H|E\rangle=E|E\rangle$. سپس از جابجایی هامیلتونی با عملگر Q داریم $HQ|E\rangle=QH|E\rangle=EQ|E\rangle$. بنابراین $Q|E\rangle$ ویژه-بردار هامیلتونی با همان ویژه‌مقدار E است. عملگر $Q^\dagger$ و Q پوچ-توان هستند یعنی $Q^2=(Q^\dagger)^2=0$ و از این رو $\{Q,Q\}=\{Q^\dagger,Q^\dagger\}=0$. همچنین اگر $Q|E\rangle=0$ و $Q^\dagger|E\rangle=0$، در این صورت $H|E\rangle=0$.

عملگرهای $Q^\dagger$ و Q در نمایش ماتریسی به شکل زیر هستند

$$Q\doteq\begin{pmatrix} 0 & Q_1 & 0 & \dots & 0 & 0\\ 0 & 0 & Q_2 & \dots & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & Q_3 & \dots & 0\\ \vdots & \dots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & Q_N\\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$Q^\dagger\doteq\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0\\ Q_1^\dagger & 0 & 0 & \dots & 0 & 0\\ 0 & Q_2^\dagger & 0 & 0 & \dots & 0\\ 0 & 0 & Q_3^\dagger & 0 & \dots & 0\\ \vdots & \dots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ 0 & 0 & \dots & 0 & Q_N^\dagger & 0 \end{pmatrix} \qquad (٦)$$

بنابراین هامیلتونی در فرم ماتریسی به شکل زیر است

$$H\doteq\begin{pmatrix} Q_1Q_1^\dagger & 0 & 0 & \dots & 0 & 0\\ 0 & Q_2Q_2^\dagger+Q_1^\dagger Q_1 & 0 & \dots & 0 & 0\\ 0 & 0 & Q_3Q_3^\dagger+Q_2^\dagger Q_2 & \dots & 0 & 0\\ \vdots & \vdots & \dots & \ddots & \vdots & \vdots\\ 0 & 0 & \dots & 0 & Q_NQ_N^\dagger+Q_{N-1}^\dagger Q_{N-1} & 0\\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & Q_N^\dagger Q_N \end{pmatrix}$$

روش محاسبه‌ی آنتروپی درهم‌تنیدگی در مدل ابرتقارنی

به منظور محاسبه‌ی آنتروپی درهم‌تنیدگی در مدل ابرتقارنی، باید تعداد ثابتی فرمیون در حالت پایه‌ی هامیلتونی در نظر گرفت. بنابراین ویژه بردار حالت پایه با N_p فرمیون به شکل زیر است

$$|\psi_k\rangle=\frac{1}{N_p!\,\|\eta_k\|}\sum_{\alpha_1,\alpha_2,\dots,\alpha_{N_p}} \eta_k^{\alpha_1\alpha_2\dots\alpha_{N_p}} c_{\alpha_1}^\dagger c_{\alpha_2}^\dagger \dots c_{\alpha_{N_p}}^\dagger |0\rangle \qquad (۷)$$

که η_kها ضرایب بسط می‌باشند.

ماتریس همبستگی طبق تعریف برابر است با [۵و٦]

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

$$C_{ij}=\begin{pmatrix} < c_i c_j^\dagger > & < c_i c_j > \\ < c_i^\dagger c_j^\dagger > & < c_i^\dagger c_j > \end{pmatrix} \quad (۸)$$

به‌طوری‌که بلوک‌های $< c_i c_j >$ و $< c_i^\dagger c_j^\dagger >$ برابر با صفر است وبلوک $< c_i c_j^\dagger >$ برابر با $I- < c_i^\dagger c_j >$ است. پس فقط کافیست بلوک $< c_i^\dagger c_j >$ را محاسبه کنیم.

$$\left\langle c_i^\dagger c_j \right\rangle = Tr(c_i^\dagger c_j \rho) = \frac{1}{Tr(\rho)} \sum_k \langle \psi_k | c_i^\dagger c_j | \psi_k \rangle \quad (۹)$$

$$\langle \psi_k | c_i^\dagger c_j | \psi_k \rangle =$$

$$= \frac{1}{(N_p!)^2 \| \eta_k \|^2} \sum_{\alpha_1 \alpha_2 \ldots \alpha_{N_p} \beta_1 \beta_2 \ldots \beta_{N_p}} \eta_k^{* \beta_1 \beta_2 \ldots \beta_{N_p}} \eta_k^{\alpha_1 \alpha_2 \ldots \alpha_{N_p}} \langle 0 | c_{\beta_{N_p}} \ldots c_{\beta_2} c_{\beta_1} c_i c_j^\dagger c_{\alpha_1}^\dagger c_{\alpha_2}^\dagger \ldots c_{\alpha_{N_p}}^\dagger | 0 \rangle$$

$$= \frac{1}{(N_p!)^2 \| \eta_k \|^2} (N_p (N_p!) \sum_{\alpha_1 \alpha_2 \ldots \alpha_{N_p-1}} \eta_k^{* \alpha_1 \alpha_2 \ldots \alpha_{N_p-1} i} \eta_k^{\alpha_1 \alpha_2 \ldots \alpha_{N_p-1} j}) =$$

$$= \frac{N_p}{N_p! \| \eta_k \|^2} \sum_{\alpha_1 \alpha_2 \ldots \alpha_{N_p-1}} \eta_k^{* \alpha_1 \alpha_2 \ldots \alpha_{N_p-1} i} \eta_k^{\alpha_1 \alpha_2 \ldots \alpha_{N_p-1} j} \quad (۱۰)$$

بنابراین

$$C_{ij} = Tr(c_i^\dagger c_j \rho) =$$

$$\frac{1}{Tr(\rho)} \sum_k \frac{N_p}{N_p! \| \eta_k \|^2} \sum_{\alpha_1 \alpha_2 \ldots \alpha_{N_p-1}} \eta_k^{* \alpha_1 \alpha_2 \ldots \alpha_{N_p-1} i} \eta_k^{\alpha_1 \alpha_2 \ldots \alpha_{N_p-1} j} \quad (۱۱)$$

برای محاسبه‌ی میزان درهم‌تنیدگی بین دو قسمت B و متممش $\bar{B}$ از یک گراف، ماتریس همبستگی برابر می‌شود با

$$\Gamma = P_B C P_B \quad (۱۲)$$

که P_B عملگر تصویر به زیرفضای $\mathcal{B}$ است. سپس آنتروپی درهم-تنیدگی خواهد بود

$$S_B = -\sum_i (\lambda_i \log \lambda_i + (1-\lambda_i)\log(1-\lambda_i)) \quad (۱۳)$$

که λ_iها ویژه‌مقادیر ماتریس همبستگی Γ هستند.

مطالعه‌ی مساله‌ی یکریختی از طریق هامیلتونی ابرتقارنی

دو گراف منظم فاصله:

برای تمام گراف‌های منظم با درجه‌ی رئوس κ، هامیلتونی تک ذره-ای مدل ابرتقارنی بر حسب ماتریس همسایگی گراف به شکل زیر نوشته می‌شود

$$H_{single} = A + (N-\kappa) I \quad (۱۴)$$

شکل ۱ دو گراف منظم فاصله کیوبیک و هافمن را نشان می‌دهد. این دو گراف ۱۶ راس و ۳۲ یال دارند. ابتدا آنتروپی درهم‌تنیدگی برای هامیلتونی تک ذره را بدست می‌آوریم.

اگر ماتریس همسایگی این دو گراف غیریکریخت را با A_1 و A_2 نشان دهیم، هامیلتونی تک ذره‌ی این دو گراف برابر است با

$$H_{single}(1) = A_1 + (N-\kappa) I$$
$$H_{single}(2) = A_2 + (N-\kappa) I \quad (۱۵)$$

ویژه‌مقادیر این دو هامیلتونی با هم یکسان و عبارتست از

$$x = \left\{ \underset{4}{16}, \underset{6}{14}, \underset{4}{12}, 10, 8 \right\} .$$

ویژه‌بردار مربوط به ویژه‌مقدار $x_5 = 8$، را با $|\psi_5\rangle$ و $|\psi'_5\rangle$ نشان می‌دهیم. بنابراین ماتریس چگالی برای دو گراف برابر با $\rho_{(1)} = |\psi_5\rangle\langle\psi_5|$ و $\rho_{(2)} = |\psi'_5\rangle\langle\psi'_5|$ است. همان‌گونه که قبلا نشان داده شد، در مورد تک ذره داریم $C_{ij} = Tr(c_i^\dagger c_j \rho) = \rho_{ij}$ و بنابراین ماتریس همبستگی برابر با $\Gamma = P_B \rho P_B$ است. مقدار آنتروپی برای هر دوی این گراف‌ها برابر با $S_B = 0.5623$ بدست می‌آید و بنابراین آنتروپی مربوط به هامیلتونی تک ذره قادر به تشخیص دو گراف نیست.

کمترین ویژه‌مقدار هامیلتونی دوذره‌ی گراف کیوبیک، $x = 3.1716$ با تبهگنی چهار است. ویژه‌بردارهای مربوط به این ویژه‌مقدار کمینه را با $|\psi_1\rangle, \ldots |\psi_4\rangle$ نشان می‌دهیم. کمترین ویژه-مقدار هامیلتونی دوذره‌ای گراف هافمن $x = 3.2132$ با تبهگنی یک است. ویژه‌بردار مربوط به این ویژه‌مقدار کمینه را با $|\psi'_1\rangle$ نشان می‌دهیم. بنابراین ماتریس‌های چگالی دو گراف عبارتند از

$$\rho_1 = \frac{1}{4} \sum_{k=1}^{4} |\psi_k\rangle\langle\psi_k|$$
$$\rho_2 = |\psi'_1\rangle\langle\psi'_1| \quad (۱۶)$$

بنابراین

$$Tr(c_i^\dagger c_j |\psi_k\rangle\langle\psi_k|) = \frac{2}{2\| \eta_k \|^2} \sum_\alpha \eta_k^{*\alpha i} \eta_k^{\alpha j} \quad (۱۷)$$

پس برای ماتریس همبستگی برای دو گراف، داریم

$$C_{ij}(1) = Tr(c_i^\dagger c_j \rho_1) = \frac{1}{4} \sum_{k=1}^{4} \frac{2}{2\| \eta_k \|^2} \sum_\alpha \eta_k^{*\alpha i} \eta_k^{\alpha j} \quad (۱۸)$$

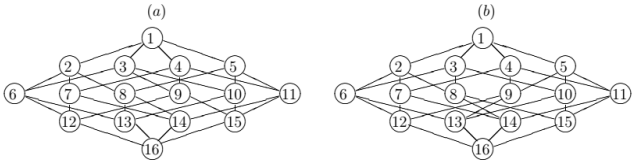
$$C_{ij}(2) = Tr(c_i^\dagger c_j \rho_2) = \frac{2}{2\| \eta'_1 \|^2} \sum_\alpha \eta_1^{*\alpha i} \eta_1^{\alpha j} \quad (۱۹)$$

با انتخاب عملگر تصویر به زیرمجموعه‌ی B به شکل $P_B(i,i) = 1, \quad i = 2,3,\ldots,5$، برای آنتروپی های دو گراف غیریکریخت کیوبیک(۱) و هافمن(۲) داریم

$$S_B(1) = 1.4032, S_B(2) = 1.2227$$

پس آنتروپی مربوط به هامیلتونی دوذره‌ای قادر است دو گراف غیریکریخت را از هم تشخیص دهد.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



شکل ۱ : گراف منظم فاصله‌ی کیوبیک (شکل (a)) و گراف منظم فاصله‌ی هافمن (شکل (b)).

نتیجه گیری

نحوه‌ی محاسبه‌ی آنتروپی درهم‌تنیدگی، برای هامیلتونی مدل ابرتقارنی توضیح داده شد و سپس با معرفی دو گراف غیریکریخت به نام‌های گراف کیوبیک و گراف هافمن، نشان داده شد که این آنتروپی با در نظر گرفتن قسمت تک ذره‌ی هامیلتونی ابرتقارنی، قابلیت تشخیص این گراف‌های غیریکریخت را ندارد. ولی با در نظر گرفتن قسمت دوذره‌ای هامیلتونی ابرتقارنی، برای آنتروپی درهم-تنیدگی دو گراف غیرایزومورف داده شده مقادیر متقاوتی بدست می‌آید و گراف‌ها از هم تشخیص داده می‌شوند.

مرجع‌ها

[۱] C. H. Bennett, H. J. Bernstein, S. Popescu and B. Schumacher. *Phys. Rev. A.* **53** (1996) 2046-2052.

[۲] P. Fendley, K. Schoutens and J. de Boer, Phys. Rev. Lett. 90 120402 (2003).

[۳] R. La, K. Schoutens and S. Shadrin, J. Phys. A: Math. Theor. 52 02LT01 (2019).

[٤] H. katsura, H. Moriya and Y. Nakayama, J. Phys. A: Math. Theor. Accepted manuscript (2020).

[٥] H. Shapourian, K. Shiozaki and S. Ryu, *Phys. Rev. B*, **95**, (2017) 165101.

[٦] V. Eisler and Z. Zimboras, *New J. Phys.* **17**, (2015), 053048.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

طراحی، شبیه سازی و امکان سنجی ساخت آینه های لیزری تمام دی الکتریک با آستانه آسیب بالا در طول موج ۱۰/۶ میکرون

نصیری ، زهرا[۱] ؛ فلاح، حمیدرضا[۱و۲] ؛ حاجی محمودزاده، مرتضی[۱و۲] ؛ مهدی، مردیها[۱]

[۱]دانشکده فیزیک دانشگاه اصفهان ، خیابان هزارجریب ، اصفهان

[۲]گروه پژوهشی اپتیک کوانتومی، دانشگاه اصفهان ، اصفهان

چکیده

بازتابنده‌های دی‌الکتریک چند لایه کاربردهای زیادی دارند که می‌توان به آینه‌های لیزری با ضریب بازتاب بالا در یک طول موج خاص اشاره‌کرد. سامانه‌های لیزری پرقدرت به آینه‌هایی با آستانه آسیب بالا نیاز دارند. عوامل متفاوتی در میزان آستانه آسیب لیزری این نوع از آینه‌ها تاثیر گذارند که عبارتند از توزیع میدان الکتریکی در لایه‌ها، نوع مواد مورد استفاده در ساخت، نوع بستره، تمیز بودن بستره و عاری بودن از هرگونه خراش و ترک ، شرایط لایه‌نشانی و بسیاری عوامل دیگر.

در این مقاله سعی شده‌است ابتدا آینه‌هایی که از لحاظ طیف بازتابی مناسب بوده و همچنین از لحاظ نظری دارای آستانه آسیب لیزری بالایی هستند، شبیه‌سازی شوند که با تغییر ماده بستره، تعداد جفت لایه‌ها و ضخامت لایه‌ها بهترین طراحی ممکن را ارائه می‌دهیم و در نهایت با اندازه‌گیری آستانه آسیب لیزری آینه‌های ساخته شده با استفاده از لیزر پیوسته CO_2، آینه‌ها جهت کاربرد در لیزرهای پرتوان صنعتی انتخاب می‌شوند.

طبق نتایج شبیه‌سازی، لایه نشانی و اندازه‌گیری آستانه آسیب لیزری نمونه‌های ساخته‌شده، آینه تمام دی الکتریک با بستره ZnSe دارای بیشترین آستانه آسیب لیزری است.

واژه‌های کلیدی: *آینه لیزری، لیزر پرتوان، آستانه آسیب پذیری لیزری، لایه نشانی، میدان الکتریکی .*

Design, simulation and feasibility study of all-dielectric laser mirrors with high laser induced damage threshold at 10.6 micron

Nasiri, Zahra[1]; Fallah, Hamidreza[1,2] ; Hajimahmoodzadeh, Morteza [1,2] ; Mardiha, Mehdi[1]

[1] Department of Physics, University of Isfahan, Isfahan
[2]Quantum Optics Group, University of Isfahan, Isfahan

Abstract

Multilayer dielectric reflectors are widely used in applications that can be attributed to the manufacture of high reflectance laser mirrors at a specific wavelength. High damage threshold mirrors are necessary in high power laser systems. Different factors influence the rate of laser damage of these types of mirrors, such as the distribution of the electric field in the film, the type of material used in the manufacture, the type of substrate, the cleanliness of substrate and the absence of any scratch and cracks, deposition factors and many other factor factors.

In this research, we first have tried to simulate mirrors that are suitable for the reflectance spectra and also theoretically have high laser damage threshold by changing the substrate material, the number of pairs of layers and the thickness of the layers, provide the best possible design. Finally by measuring the thresholds of laser damage of mirrors have been made with continuous CO2 lasers, mirrors are selected for use in high power industrial lasers.

According to the simulation results, coating and the measurement of the laser induced damage threshold of the constructed samples, all-dielectric mirror with ZnSe substrate has the highest laser induced damage threshold.

***Keywords**:Laser mirrors, High power laser, Laser induced damage threshold, Deposition, Electric field*

PACS 30.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد

http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مقدمه

از گذشته تاکنون مقاومت پوشش های دی الکتریک با بازتاب بالا در برابر تابش لیزرهای پرتوان مورد بررسی بوده است. توان سیستم‌های لیزری در حال توسعه دائم در حال افزایش است، بنابراین آستانه‌ی آسیب لیزری پوشش‌های دی الکتریک اهمیت بیشتری پیدا می کند.

آستانه آسیب پذیری لیزر عبارت است از بیشترین تابش چگالی انرژی لیزری که در آن احتمال آسیب پوشش یا قطعه‌ی اپتیکی صفر باشد[۱]. این کمیت برای لیزرهای پیوسته به صورت W/cm^2و برای لیزرهای پالسی به صورتj/cm^2 گزارش می‌شود.

در عمل آستانه آسیب ماده تحت تابش لیزر در شرایط ویژه آزمایشگاهی می‌تواند تحت تأثیر یک یا چند سازوکار باشد. آسیب در ماده که دراثر پرتودهی رخ می‌دهد متناسب با طول موج لیزر، انرژی و شکل فضایی و زمانی تپ لیزر است. همچنین باید دانست که درابعاد میکرومتر ویژگی نمونه‌های مواد مختلف ممکن است کمی متفاوت باشد و این ویژگی‌ها ممکن است آستانه آسیب لیزری اندازه گیری شده را تحت تاثیر قرار دهند.

اولین سازوکار که آسیب های ناشی از لیزر را ایجاد می‌کند، فرآیند حرارتی است که از جذب انرژی لیزر در مواد ناشی می‌شود. هنگامی که یک پرتو نور به ماده‌ای می‌تابد مقداری از انرژی به شکل گرما جذب آن می‌شود. چنین برهم‌کنشی به اندازه نسبی پرتو و نمونه تحت آزمایش، شرایط محیطی، ویژگی‌های حرارتی، مکانیکی و نوری مواد بستگی دارد[۱]. سازوکار دوم، فرآیند شکست دی‌الکتریک است و زمانی رخ می‌دهد که چگالی میدان الکتریکی به اندازه کافی بالا باشد تا اکترون‌ها از شبکه جدا شوند[۱,۲].

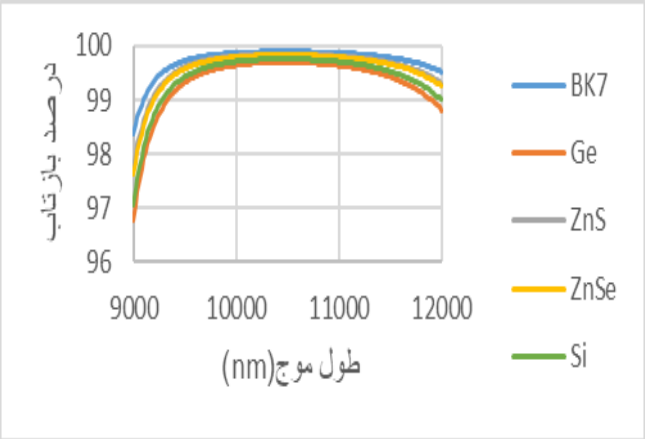
یکی دیگر ازپارامترهای بسیار مهمی که باید در طراحی‌ها لحاظ شود، توزیع میدان الکتریکی درلایه‌های نازک است. پژوهش‌های زیادی به صورت نظری و عملی، برای به دست آوردن رابطه بین آسیب القایی لیزری و شدت توزیع میدان الکتریکی در چند لایه-ای‌های نازک انجام شده است و مشاهده‌شده است که مرز بین لایه نازک با ضریب شکست بالا و پایین همواره ضعیف ترین نقطه است. تلاش‌های بسیاری برای کاهش شدت میدان‌الکتریکی صورت گرفته است به‌طوری‌که قله میدان الکتریکی در ماده‌ای با ضریب‌شکست پایین‌تر قرار گیرد و هم‌چنین قله‌ی میدان الکتریکی در مرز لایه‌ها نباشد[۳]. هدف از این مقاله ساخت آینه‌های لیزری تمام دی‌الکتریک با آستانه آسیب بالا طول موج ۱۰۶۰۰نانومتراست.

طراحی و شبیه‌سازی

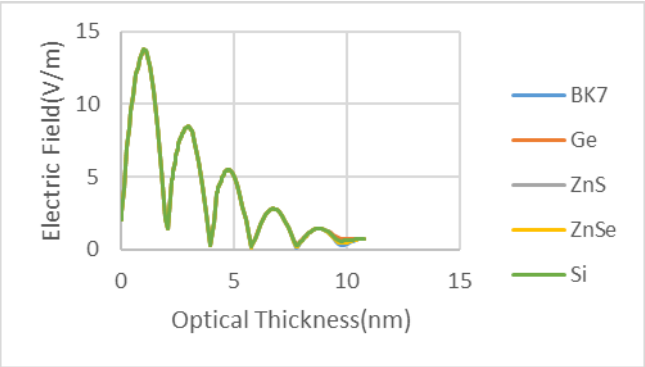
گام اول در این بخش انتخاب مواد مناسب به عنوان بستره و لایه-های پوشش نوری، برای رسیدن به اهداف مورد نظر است. گام بعدی ترتیب قرار گرفتن لایه‌های نازک، تعداد لایه‌ها، تعیین ضخامت آن‌ها و بررسی توزیع میدان الکتریکی می‌باشد. بر اساس گزارش‌ها مواد مناسب برای ساخت قطعه‌های نوری در این طول موج عبارت‌اند از ZnSe، ZnS، Ge وSi [٤,٥]. برای شبیه‌سازی و ساخت آینه لیزری از ZnSe, ZnS, Ge ,Si, BK7 به عنوان بستره و در طراحی پوشش از Ge به عنوان ماده با ضریب شکست بالا و از ZnS به عنوان ماده با ضریب شکست پایین استفاده کردیم زیرا هرچه اختلاف ضریب شکست لایه‌های متناوب بیشتر باشد میزان بازتاب افزایش می‌یابد[٦].

در ابتدا ضخامت لایه‌ها چارک موج بوده است که در این طراحی میزان بازتاب و توزیع میدان الکتریکی خیلی مناسب نبوده است. یکی از روش‌های بهینه‌سازی توزیع میدان الکتریکی تغیر ضخامت لایه‌ها به غیر چارک موج است. پس از تغییر ضخامت لایه‌ها به غیر چارک موج نمودار بازتاب و توزیع میدان الکتریکی به ترتیب در شکل‌های ۱و۲ قابل مشاهده‌است:

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



شکل ۱: نمودار بینابی بازتابی طرح‌های شبیه‌سازی شده



شکل ۲: نمودار توزیع میدان الکتریکی طرح‌های شبیه‌سازی شده

لایه‌نشانی آینه‌های لیزری طراحی شده

قبل از فرایند لایه نشانی شست و شوی بسترها با آب و ماده شوینده‌ی OP120 انجام شده‌است. در فرایند لایه نشانی از دستگاه لایه نشانی ساخت شرکت BALZER و روش ضخامت سنجی بلور کوارتز ارتعاشی استفاده شده‌است. یکی از مراحل مقدماتی که قبل از انباشت لایه‌ها انجام می‌شود تخلیه تابان است، برای انجام این مرحله پس از اینکه خلأ محفظه به حدود 10^{-5}میلی‌بار رسید ولتاژی حدود ٦ کیلووات از طریق منبع تغذیه اعمال می‌شود و باعث یونیزه شدن گازهای درون محفظه می‌شود. محیط پلاسمایی که در اثر تخلیه تشکیل می‌شود، یون‌های مثبت و منفی مورد نیاز سطح بسترها را تأمین می‌کند و سطح بستره از نظر بارالکتریکی خنثی می‌شود. به همین علت ذرات میکرومتری گردوغبار که به علت بارالکتریکی ساکن به سطح بستره چسبیده بودند، جدا می‌شوند.

فرایند لایه نشانی به صورت همزمان روی بسترهای مختلف انجام می‌شود. به علت پایین بودن میزان چسبندگی Ge به بسترها، از یک لایه بافر از جنس Y_2O_3 استفاده می‌کنیم که میان لایه اول و بستره قرار می‌گیرد. دمای بستره و فشار محفظه هنگام لایه نشانی به ترتیب ۱۷۵ درجه سانتی گراد و 2E-5 میلی بار می‌باشد. لایه‌ها از لایه شماره یک تا لایه آخر بر روی بستره ها با ضخامت و شرایطی که در جدول ۱ قرار دارد، لایه نشانی می‌شوند. پس از لایه نشانی طیف بازتابی نمونه‌ها توسط دستگاه طیف سنجی FTIR شرکت شیمادزو گرفته شده است که نمودار بینابی بازتابی نمونه‌ها درشکل ۳ قابل مشاهده است. همانطور که مشاهده می‌شود بینابی بازتابی نمونه‌ها مناسب بوده و میزان بازتاب آن‌ها در طول موج ۱۰٦۰۰ نانومتر بیشتر از ۹۹ درصد می‌باشد.

اندازه‌گیری آستانه آسیب لیزری

مهم‌ترین پارامتر برای اندازه‌گیری آستانه آسیب لیزری لیزرهای پیوسته به دست آوردن میزان چگالی انرژی یا توان در نقطه آسیب است. برای اندازه گیری چگالی انرژی، داشتن یک لیزر با مشخصات بهینه ضروری است. چگالی توان برای یک پرتو گاوسی به قطر b و توان p از فرمول زیر محاسبه می‌شود:

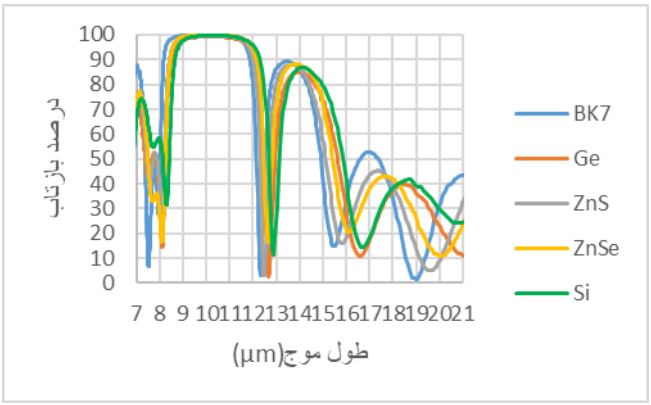
$$P_D = 4p/\pi b^2 \quad (۱)$$

برای انجام این آزمون از یک لیزرپیوسته CO_2 گازی ۸۰ وات استفاده شده است که طول موج آن ۱۰٦۰۰ نانومتر است. طرحواره چیدمان استاندارد آزمون اندازه‌گیری آستانه آسیب لیزری در شکل ٤ آورده شده است. روش اندازه گیری های آستانه آسیب بر اساس استاندارد ISO11254-1 2000 صورت گرفته است. میزان چگالی توان لیزر را برای آینه‌ها با بستره مختلف محاسبه می‌کنیم که در جدول ۲ قابل مشاهده است.

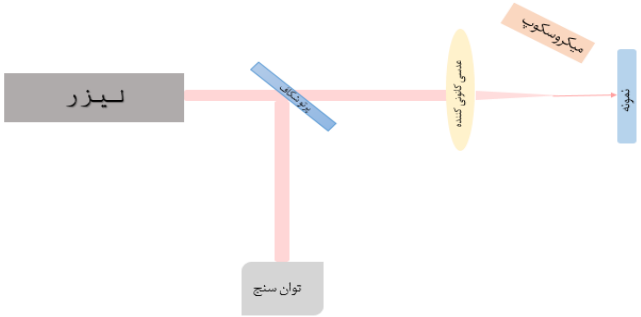
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

جدول ۱: شرایط لایه نشانی و ضخامت لایه‌های آینه لیزری تمام دی‌الکتریک

شماره لایه	ماده	ضخامت ماده طراحی شده(nm)	میانگین نرخ لایه نشانی A^0/S
۱	Y_2O_3	۱۰	۵
۲	Ge	٦١٦/٢٨	۵
۳	ZnS	١٢٠٤/٥٥	۹
٤	Ge	٦١٦/٢٨	۵
۵	ZnS	١٢٠٤/٥٥	۹
٦	Ge	٦١٦/٢٨	۵
۷	ZnS	١٢٠٤/٥٥	۹
۸	Ge	٣٠٨/١٤	۵
۹	ZnS	١٨٠٦/٨٢	۹
۱۰	Ge	٣٠٨/١٤	۵
۱۱	ZnS	١٨٠٦/٨٢	۹
۱۲	Ge	٤٦٢/٢١	۵



شکل ۳: نتایج حاصل از طیف سنجی آینه‌ها با بسترهای متفاوت



شکل ٤: طرح‌واره چیدمان آزمون اندازه‌گیری آستانه آسیب لیزری

جدول۲ : چگالی توان لیزر آینه‌های لیزری تمام دی‌الکتریک

نمونه	چگالی (w/cm^2)
Bk7	٢٢٠٤,٧٧
Ge	٢٢٢٩,٣٠
ZnS	١٧٧٤,٠٠
ZnSe	٤٤٨٩,٦٢
Si	٣٩٨٠,٢٥

نتیجه گیری

مشاهده کردیم که با روش بهینه‌سازی ذکرشده و درنظرگرفتن توزیع میدان الکتریکی می‌توان برای بسترهای مختلف در طول موج‌های متفاوت طراحی مناسبی ارائه داد و با رعایت نکات لایه نشانی می‌توان آینه‌ای تهیه کرد که از لحاظ طیفی و آستانه آسیب لیزری ایده‌آل باشد. با توجه به داده‌های جدول ۲ مناسب‌ترین بستره برای ساخت آینه‌های لیزری تمام دی‌الکتریک با آستانه آسیب بالا در طول موج ١٠٦٠٠ نانومتر، بستره ZnSe می‌باشد.

مرجع ها

[۱] R. M. Wood, *Laser-induced damage of optical materials* (CRC Press, 2003).

[۲] D. Ristau, *Laser-induced damage in optical materials* (CRC Press, 2014).

[۳] M. Chorel, T. Lanternier, É. Lavastre, N. Bonod, B. Bousquet, and J. Néauport, "Robust optimization of the laser induced damage threshold of dielectric mirrors for high power lasers," Optics express **26**, 11764-11774 (2018).

[٤] M. J. Riedl, *Optical design fundamentals for infrared systems* (SPIE press, 2001), Vol. 48.

[٥] S. Venkatachalam, D. Mangalaraj, S. K. Narayandass, K. Kim, and J. Yi, "Structure, optical and electrical properties of ZnSe thin films," Physica B: Condensed Matter **358**, 27-35 (2005).

[٦] H. A. Macleod, *Thin-film optical filters* (CRC press, 2010).

این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد :
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مطالعه خواص نوری و تحلیل پهن‌شدگی قله‌های پراش پرتو ایکس در نانوبلورهای هم‌آلاییده‌ی ZnSe:Cu-Mn

صرفه‌جو، مرضیه؛ سوری، داریوش؛ خضری پور، علیرضا

دانشکده علوم پایه، گروه فیزیک، دانشگاه ملایر، ملایر

چکیده

دراین پژوهش، نانوبلورهای نیمرسانای ZnSe و ZnSe:Cu(0.1%)-Mn بااستفاده از روش آبی سنتز شده‌اند. دراین روش، برای تهیه منبع یون سلنیوم، سدیم بوروهیدرید($NaBH_4$)و پودر سلنیوم در آب دیونیزه حل شدند؛این محلول به منبع یون روی در حضور تیوگلیکولیک اسید(TGA: به عنوان عامل پوششی مانع از کلوخه‌ای شدن ذرات)و محلول سدیم هیدروکسید(NaOH: به عنوان تنظیم کننده pH) تزریق شد. با در نظر گرفتن ملاحظات ساختاری و نوری نانوذرات سنتزشده که در گزارشات پیشین ارائه شده‌است، برای بررسی تاثیر یون‌های فلزات واسطه به عنوان ناخالصی، منگنز و سولفات مس به ترتیب به عنوان منابع یون‌های منگنز و مس استفاده شدند. با تحلیل پهن شدگی قله‌های پراش پرتوایکس به روش‌های شرر و ویلیامسون- هال، مشخصه‌هایی مانند چگالی دررفتگی(δ)، کرنش شبکه(ε) و اندازه نانوبلورها(D) ارزیابی شدند. نتایج XRD و طیف سنجی فرابنفش - مرئی، تشکیل فاز نانو این نانوذرات را با اندازه‌ای در بازه‌ی ۰/۸۱ تا ۱/۸۷ نانومتر تایید نمود. گاف انرژی نمونه‌ها به روش دقیق مشتق انطباق طیف جذبی بدست آمده است که نشان دهنده ماهیت نیمرسانایی نمونه‌ها می‌باشد.

Study of optical properties and XRD peaks broadening analysis in co-doped ZnSe:Cu-Mn nanocrystals (NCs)

Sarfehjou, Marziyeh; Souri, Dariush; Khezripour, Alireza

Faculty of Science, Department of Physics, Malayer University, Malayer

Abstract

In this study, ZnSe and ZnSe:Cu(0.1%)-Mn semiconducting nanocrystals (NCs) were synthesized by aqueous method. In this method, to prepare selenium ions source, sodium borohydride ($NaBH_4$) and selenium powder were dissolved in deionized water; this solution was injected to Zn ion source at the presence of tioglycolic acid (TGA: as capping agent to prevent agglomeration of the particles) and solution of sodium hydroxide (NaOH: as the pH-regulator).By considering the structural and optical characterization carried out in the previous reports, to investigate the influence of transition metal (TM) ions as impurities, Mn and $CuSO_4$ were used as sources of manganese and copper ions, respectively. Characteristics such as dislocation density (δ), lattice strain (ε) and size of nanocrystals (D) were evaluated by analysis of XRD peaks broadening upon the Scherrer and Williamson-Hall methods. X-ray diffraction characterization and UV-Visible spectroscopy confirm the formation of their nano-phase with the particles size in the range of 0.81-1.87 nm. . Energy band gap of the samples has been determined exactly by precise derivation of absorption spectrum fitting method (DASF), which shows the semiconducting nature of samples.

PACS No. 78, 81

مقدمه

نانوذرات نیمرسانا در حال حاضر در بسیاری از آزمایشگاه‌های جهان مورد بررسی قرار می‌گیرند.از میان این نانوذرات، عناصر گروه‌های II-VI، III-V و IV-VI بسیار مورد توجه پژوهشگران واقع شده‌اند و گزارش‌های زیادی در معرفی خواص نوری، ساختاری و کاربردهای ترکیبات این عناصر منتشر شده است [۵-۱]. از طرفی، ترکیبات مختلف روی، به دلیل عدم سمیت و قابلیت استفاده در محیط‌های زنده، مورد توجه بوده و بارها به روش‌های مختلف در مقیاس نانومتری ساخته شده‌اند. سلنیدروی به عنوان یک ماده نیمرسانا، مزایای نوری فراوانی داشته و دارای گاف انرژی پهن و مستقیم ۲/۷۲ الکترون‌ولت در حالت توده‌ای می‌باشد [۶] . تعیین اندازه نانو ذرات و ویژگی‌های شبکه‌ای آن‌ها در تعیین ماهیت نیمرسانایی یک ماده و خواص نوری آن نقش مهمی دارد که برای اندازه‌گیری آن‌ها، روش‌های مختلفی ارایه شده است. در این کار، از روش آبی برای تولید نانوذرات سلنیدروی خالص و هم‌آلاییده به یون‌های ناخالصی مس و منگنز استفاده شده است و سپس تاثیر ناخالصی منگنز روی خواص نوری، ویژگی‌های ساختاری و عملکرد این نانوذرات بررسی شده است. رشد بیشتر نانوبلورها می تواند با تابش مایکروویو صورت پذیرد که در کار حاضر صرفا نمونه‌های بدون تابش تحلیل شده‌اند.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مطالعه دینامیک ملکولیِ سیالِ لنارد-جونز در میدان گرادیان دما

ساکتِ بلگوری، آیناز[۱]؛ آذینِ پاشاکی، ام‌سلمه[۱]؛ رسولی، سیدنادر[۱و۲]

۱گروه فیزیک، دانشکده‌ی علوم، دانشگاه گیلان، صندوق پستی ۱۹۱٤-٤۱۳۳۵، رشت، ایران

۲ پژوهشکده‌ی فیزیک، پژوهشگاه دانش‌های بنیادی (IPM)، صندوق پستی ۵۵۳۱-۱۹۳۹۵، تهران، ایران

چکیده

گرادیان دما در یک مخلوط گاز یا مایع می‌تواند باعث ایجاد شار جرمی شود، و در نهایت یک گرادیان از چگالی ماده ایجاد کند. با وجود مطالعاتِ نظری و تجربیِ بسیار، منشأ میکروسکوپیکی این پدیده – که اثر سُرِه نامیده می‌شود – هنوز مشخص نیست. اما اگر بتوان با استفاده از روش‌های دینامیک ملکولی، شرایط غیرتعادلیِ ناشی از گرادیان دما را به درستی شبیه‌سازی کرد، می‌توان امیدوار بود که دریچه‌ای برای درک رفتار واقعی ملکول‌ها در این شرایط گشوده شود. ما، برای ایجاد گرادیان دما، از دو دماپای نوز-هُوورِ در دو دمای مختلف در دو طرف یک جعبه شامل N ذره سیال آرگون استفاده می‌کنیم. سپس یک تک ملکول را در بستری از ملکول‌های یکسانِ حلال قرار می دهیم، و اثر وجود گرادیان دما بر پخش ملکولِ مهمان را بررسی می‌کنیم.

***واژه‌های کلیدی**: شبیه سازی دینامیک ملکولی، ضریب سُرِه، گرادیان دما*

Molecular Dynamics Study of Lennard-Jones Fluid in the Presence of a Temperature Gradient

Saket Balgouri, Aynaz[1]; Azin Pashaki, OmSalmeh[1]; Rasuli, S Nader[1,2]

[1]Department of Physics, University of Guilan, P.O. Box 41335-1914, Rasht, Iran

[2]School of Physics, Institute for Research in Fundamental Sciences (IPM), P.O.Box 19395-5531, Tehran, Iran

Abstract

A temperature gradient across a fluid mixture leads to a net flux of mass which eventually builds up a concentration gradient. Despite many theoretical and experimental studies, the microscopic origin of this phenomenon, also named as “Soret effect”, is still missing. However, using the molecular dynamics approach to simulate the non-equilibrium conditions caused by the temperature gradient, we hope to find some means to understand the molecular origin of the phenomenon correctly. We use a pair of Nosé-Hoover thermostats at different temperatures, each on either side of the simulation box, filled with N argon atoms. A one guest particle is then added to this bath and used to study how the strong temperature gradient in the host solution, modifies its diffusive motion.

***Keywords**: Molecular dynamics simulation, Soret coefficient, Temperature gradient*

PACS No.

مقدمه

اثر سُرِه پدیده‌ای است که به علّت حضور گرادیان دما در یک مخلوط سیال اتفاق می‌افتد. گرادیان دما موجب ایجاد شارشی از ماده می‌شود؛ درنتیجه – پس از رسیدن به حالتِ پایا – گرادیانی از چگالیِ ماده در مخلوط به وجود می‌آید. این پدیده برای اولین‌بار در سال ۱۸۵٦ توسط لودویگ [1]، در مخلوط‌های مایع مطالعه شد؛ بعدتر شارل سُرِه (Soret) با بررسی گسترده‌ی مسئله، مخصوصا برای الکترولیت‌های آبی، عملا این اثر را به نام خود در تاریخ علم ثبت کرد [1]. علی‌رغم این، و بعد از حدودِ ۱٦۰ سال، هنوز این پدیده در موارد متعددی شبیهِ یک معمای علمی رفتار می‌کند! یعنی ذراتِ مختلف، تحتِ گرادیان دما، رفتارهایِ کاملا متفاوتی را نشان می‌دهند؛ و ما نمی‌توانیم آنها را تحتِ یک تصویر کلی درک کنیم! یکی از دلایلِ این مشکل عدم توسعه‌ی مکانیک آماری غیرتعادلی، در مقایسه با مکانیک آماری تعادلی است. دلیل دیگر، درک ناکافی ما از رفتار مایع‌ها – مخصوصا رفتار ملکولیِ آب – می‌باشد. برای مثال، در شبیه‌سازی‌های دینامیک ملکولی هنوز مدلی که بتواند تمام رفتارهای فیزیکی آب (ضریب انبساط گرمایی، ضریب دی‌الکتریک، دمای انجماد، و ...) را به درستی و در تمام بازه‌ی دمایی نشان دهد، پیدا نشده است[۲]؛ یعنی در هنگام بررسی/شبیه‌سازی هریک از این پدیده‌ها نمی‌دانیم از کدام اثرها/خصوصیات می‌توان صرف‌نظر کرد،

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

و از کدام نمی‌توان [۲]. اثرسُره کارکردهای آزمایش‌گاهی و صنعتی مختلفی دارد. برایِ مثال، دست‌کاریِ ماکروملکول‌های زیستی مانند DNA و ویروس HIV در میکرو/نانوکانال‌ها [۳]؛ جداسازی پلیمرها [٤]؛ دگرگونی و تغییرات فضایی ترکیبات در مخازنِ نفت‌خام [٥]؛ همگن‌سازی ساختارهای نیمه‌رسانای مذاب [٤] و غیره. حتی برای حلِ برخی از مشکلات نظری فرضیه تکامل، دانشمندان پیش‌نهاد کرده‌اند که حضور گرادیان دما و PH در کف اقیانوس‌های اولیه، باعثِ ایجاد برخی تغییرات در ملکول‌های DNA شده است [٦]. اما هیچ‌کدام از این موارد، ابهام‌های نظری موجود برای درک یک *پدیده‌ی غیرتعادلی* را رفع نمی‌کنند.

درعینِ حال، و برغم ابهام در درکِ سازوکار ملکولی اثرِ سُره، فرمول‌بندی عمومیِ آن در ترمودینامیکِ غیرتعادلی به خوبی نوشته می‌شود. اگر $\overrightarrow{J_C}$ جریان ماده‌ی محلول، C چگالی آن، و T دمای محیط باشند [۷]:

$$\overrightarrow{J_C} = -D\vec{\nabla}C - DS_T C(1 - v\,C)\vec{\nabla}T \qquad (۱)$$

که D ضریب پخش، و S_T متغیری با بُعدِ عکسِ دما است، که ضریبِ سُره (Soret) نامیده می‌شود؛ v نیز حجمی است که یک مول از ماده‌ی محلول در حلال به خود اختصاص می‌دهد؛ به بیان دیگر $x = v\,C$ کسرِ حجمی ماده‌ی حل‌شده می‌باشد. در حد چگالیِ‌کم، یعنی $v\,C \ll 1$، سهمِ ناشی از گرادیان دما در $\overrightarrow{J_C}$ به $-DS_T C\vec{\nabla}T$ ساده می‌شود. حال به‌سادگی دیده می‌شود که اگر ذرات از ناحیه‌ی سرد به سمت گرم حرکت کنند (یعنی $\overrightarrow{J_C}$ هم‌جهتِ $\vec{\nabla}T$ باشد)، S_T منفی و اگر از گرم به سرد حرکت کنند ($\overrightarrow{J_C}$ عکسِ جهتِ $\vec{\nabla}T$ باشد) S_T مثبت خواهد بود.

اثر سُره در محلول‌های دوتایی

شاید بخاطر کاستن از پیچیده‌گی‌های نظری متعددی که در هنگام بررسی اثر سُره وجود دارند، علاقه به بررسی آن در محلول‌های دوتایی (binary fluids) از مدت‌ها پیش وجود داشته است. دلیل این مطلب کاسته‌شدن تعداد متغیرهای حاکم برمسئله، و سادگیِ تحلیل آن می‌باشد. یکی از مثال‌های مشهور از چنین پژوهش‌هایی محلول‌های دوتایی از دو ماده با *خصوصیات شیمیاییِ شبیه به هم* اما *جرم‌های متفاوت* هستند [۸]. در سال ۲۰۰۱، کوهلر و همکارش از دانشگاه بیرویث (Bayreuth) محلولِ دوتاییِ بَنزِن و سایکلوهگزان (Cyclohexane) را در معرض گرادیان دما قرار دادند [۸]. سپس بدون اینکه در ترکیب شیمیایی هیچ‌کدام از دو ماده‌ی تشکیل دهنده‌ی محلول تغییری ایجاد کنند، اتم‌های هیدروژنِ موجود در حلقه‌ی بَنزِنی را با دوتریم ($^2_1\mathrm{D}$) تعویض کردند. حاصل این‌کار ماده‌ای با همان خصوصیات شمیایی (اربیتال‌های بیرونی) اما جرم‌ها، و ممان اینرسی‌های متفاوت بود. سپس، کوهلر و همکارش به اندازه‌گیری ضریبِ سُره‌ی اتم‌های بنزن، پرداخته و برای حدِ بسیار رقیق (یک ملکولِ بنزن در دریایی از سایکلوهگزان) ضریبِ سره را برحسبِ جرم و ممان اینرسی به دست آوردند. نتیجه‌ی مهمِ این پژوهش آن بود، که ضریبِ سُره به صورتِ خطی با جرم و ممان اینرسی اتمِ مهمان (در اینجا بنزن) تغییر می‌کند [۸]:

$$S_T = S_{0T} + a_M \delta M + b_I \delta I. \qquad (۲)$$

بعد از این گزارشِ تجربی کارهای متعددی برای درکِ چرایی این رفتار خطی انجام شد؛ از شبیه‌سازی‌های دینامیکِ ملکولی [۱۱-۹] تا محاسباتی برمبنای رفتارِ کوانتومی ماده [٥]. اما، تاجایی که ما می‌دانیم هنوز هیچ تصویر قطعی که نشان دهد چطور جرم و ممان اینرسی ذرات اثر خود را در حرکت براونی (یعنی پخش) و درنتیجه حرکتِ سُره‌ی آنها نشان می‌دهند، پیدا نشده‌است. به‌همین علّت، تلاش برای درکِ فیزیک پنهان در معادله‌ی (۲) همچنان ادامه دارد.

شبیه‌سازی یک محلول دوتایی

با نگارش کامل یک کد به زبان C++، ما به شبیه‌سازی ساده‌ترین حالتِ قابل تصور، یعنی یک اتمِ محلول در دریایی از اتم‌های حلال پرداختیم. تمام ذرات موجود در شبیه‌سازی، به لحاظ الکتریکی خنثی بوده و تنها برهم‌کنش میان آن‌ها برهم‌کنشِ لنارد-جونز می‌باشد. جعبه‌ای با شرایط مرزیِ دوره‌ای (از هر سه جهت) را درنظر گرفته‌ایم، که در مرکز آن یک حمامِ سرد، و در دو سمتِ راست و چپِ آن یک حمام گرم وجود دارد (شکل۱). یک ذره‌ی مهمان در این بستر در نظر می‌گیریم، این ذره تحت برهم‌کنش لنارد-جونز با ذرات بستر برهم‌کنش دارد و در ابتدا جرمی یکسان با ذره آرگون دارد. الگوریتمِ شبیه‌سازی، ورلت است، و با دماپای نوز-هوور (Nose-Hoover thermostat) دمای دو حمامِ گرمایی را تثبیت کرده‌ایم. ما از متغیرهای کاهیده استفاده می‌کنیم

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

($\sigma = 1;\ \varepsilon = 1;\ M_{Ar} = 1;\ K_B = 1$)که ε و σ، متغیرهای برهم‌کنش لنارد–جونزِ آرگون–آرگون می‌باشند:

$$U(r) = 4\varepsilon\{(\sigma/r)^{12} - (\sigma/r)^{6}\}. \quad (۳)$$

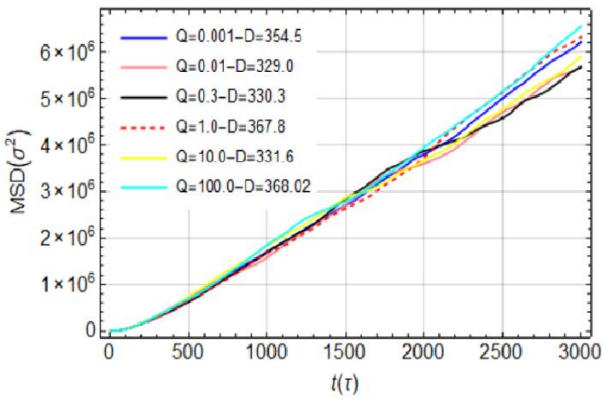
با این انتخاب واحدها، زمانِ واحد $\tau = 2.16ps$ و دمای اتاق $T = 300\ K = 2.50\ \frac{\varepsilon}{K_B}$ خواهند بود. جعبه‌ی شبیه‌سازی مکعبی $30\sigma \times 30\sigma \times 30\sigma$ است که $N = 80$ ذره را درون خود جای داده‌است؛ گامِ زمانیِ شبیه‌سازی نیز $\Delta t = 0.001\ \tau = 2.15\ fs$ می‌باشد. همچنین، دمای حمامِ سرد $T_- = 60\ K = 0.50\ \frac{\varepsilon}{K_B}$، و دمای حمامِ گرم $T_+ = 180\ K = 1.50\ \frac{\varepsilon}{K_B}$ تنظیم می‌شوند. در نتیجه دمای متوسط کلِ جعبه $\overline{T} = 120\ K = 1.0\ \frac{\varepsilon}{K_B}$ خواهد بود.

ابتدا به واسنجی (i.e. calibration) دو دماپا می‌پردازیم. می‌توان به هر دماپای نوز–هوور شبیه به یک محیط غلیظ و یک‌پارچه نگاه کرد، که حرکت هریک از ذراتِ شبیه‌سازی شده را با نیروی $\delta\vec{f} = -\zeta\,\vec{p}$ تحت تاثیر قرار می‌دهد؛ $\vec{p}$ تکانه‌ی ذره‌ی مربوطه، و ζ یک ضریبِ اصطکاکِ ترمودینامیکی می‌باشند [۱۲]. در این‌صورت متغیرِ Q به‌صورتِ جرمِ موثر این محیط فهمیده می‌شود. انتخاب مقدار مناسب برای Q پرسشی متعارف برای تنظیم این دماپا می‌باشد. به عنوان نمونه، جدول۱ مقادیر مختلف متغیرهای فیزیکی برای انتخاب‌های مختلفِ Q برای مجموعه ای در دمای اتاق با ۱۲۰ ذره تحت دماپای نوز–هوور را نشان می‌دهد. مشخصا، مقدار ظرفیتِ گرماییِ سیستم، C_v، به‌شدت وابسته به انتخاب Q است، و برای به دست‌آوردنِ مقدارِصحیح $C_v = \frac{K_B T^2}{N<\Delta T^2>} = 1.5012\,\frac{K_B}{M_{Ar}}$، انتخاب $Q = 0.35(k\varepsilon\,\tau^2/mol)$ بهترین انتخاب ممکن به‌نظر می‌رسد [۱۳]. با تغییر تعداد ذرات و دمای اعمال شده، مقدارQ نیز باید تغییر کند، که نوسانات دمایی مجموعه، ظرفیت‌گرماییِ مورد نظر را تولید

Q $(\frac{K\varepsilon}{mol}\tau^2)$	$<T>$ $(\frac{\varepsilon}{K_B})$	$<P>$ $10^{-3}\times(\frac{\varepsilon}{\sigma^3})$	C_v $(\frac{K_B}{M_{Ar}})$	C_v در صد خطا
۰/۱	۲/۴۹	۲/۳۸	۰/۳۵	۱۱۵%
۰/۳۵	۲/۵۰	۲/۳۸	۱/۴۶	۰/۰۳%
۱۰/۰	۲/۴۹	۲/۳۷	۱/۹۳	۴۲%

جدول۱: بهینه‌سازی دماپا برای شبیه‌سازی هم‌دما. انتخاب Q=۰/۳۵ بهترین تطابق را با داده‌های تجربی به دست می‌دهد.

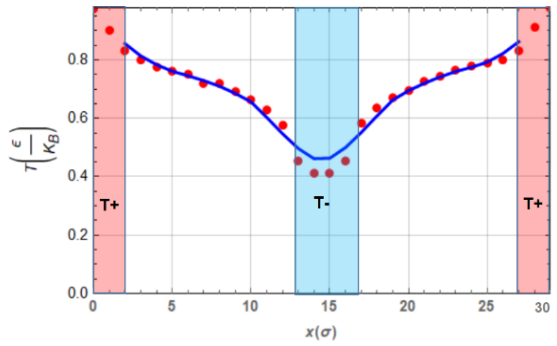
کند. هرچند انتخاب Q تاثیری بر رفتار دینامیکیِ ذرات موجود در حمام گرما نمی‌گذارد. شکل۲ ضریبِ پخش یک اتم آرگون را برحسبِ مقادیر مختلفِ Q در حالت هم‌دما نشان می‌دهد. همان گونه که مشاهده می‌شود، تغییر مقدار Q، تغییری در ضریبِ پخش ایجاد نمی‌کند.



شکل۲: شیبِ نمودار $\langle r^2\rangle_C = \langle r^2\rangle - \langle r\rangle^2$ برحسبِ t، مقدار ضریب‌پخشِ $D=\langle r^2\rangle_C/6t$ را به‌دست می‌دهد. D در یکایِ σ^2/τ محاسبه شده، و با تغییر Q تغییر معناداری نمی‌کند.

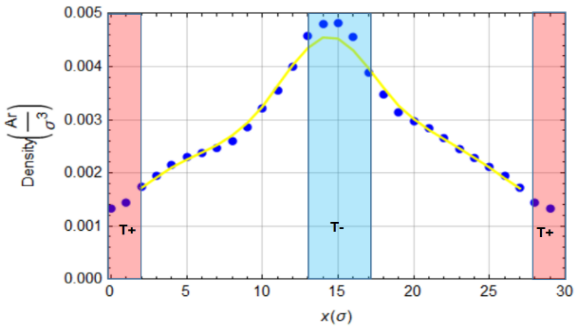
محلولِ دوتایی در حضور گرادیان دما

اعمالِ دو دمای متفاوت، به دو دماپای موجود، گرادیان دمای شدیدی در سیالِ آرگون ایجاد می‌کند (شکل۱). از آنجائی‌که چگالیِ فعلیِ گاز آرگون پایین است ($N/V \approx 0.0029\ Ar/\sigma^3$) گاز به راحتی متراکم می‌شود ($\frac{\partial \log(\rho)}{\partial T|_P} = -T^{-1}$). شکل۳ چگالیِ اتم‌های حلالِ آرگون را برحسبِ مکان نشان می‌دهد؛ می‌توان دید که رفتار چگالی برحسبِ مکان، شبیه به عکس رفتار دما در شکل ۱ می‌باشد. حتی نسبت مقدار بیشینه و کمینه‌ی چگالی $4.5/1.2 \approx 3.75$ نزدیک به نسبت مقدار بیشینه و کمینه‌ی دما $T_+/T_- \approx 2.25$



شکل ۱: دمای اندازه‌گیری‌شده برحسبِ مکان

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



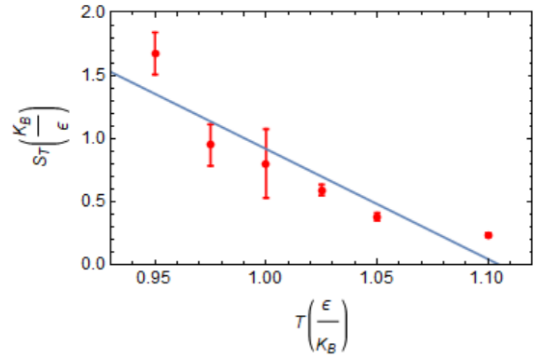
شکل۳: چگالی ذرات آرگون (حلال) در حضور گرادیان دما

می‌باشد؛ که با اغماض، بر هم‌فشار بودنِ محیط دلالت می‌کند. در چنین حالتی، چگالی ذره‌ی مهمان، حتی اگر دقیقا هم جرم ذراتِ گازِ حلال انتخاب شود، یکسان نخواهد بود؛ و ضریب سُرِه‌ی غیر صفر به دست خواهد داد.

ما ضریبِ سره‌ی ذره‌ی مهمان را برای سه جرم متفاوت اندازه گیری کردیم. برمبنای رابطه‌ی ۱، و در حدِ چگالیِ پایینِ ذره‌ی مهمان $\nu C \ll 1$، می‌توانیم جریان ذره‌ی مهمان را در حالت پایا برابر با صفر قرار دهیم: $\overrightarrow{J_C} = 0$. در این‌صورت ضریبِ سُرِه به صورتِ $S_T = -\partial \log C / \partial T$ به‌دست می‌آید. جدول ۲، متوسط مقدار S_T به دست‌آمده برای نسبت‌های مختلفِ جرمِ ذره‌ی مهمان به اتم آرگون، M_g/M_{Ar} را نشان می‌دهد. هر کدام از نتایج زیر متوسطِ ۸ اجرای تکرار شده با شرایط اولیه ی متفاوت است. منظور از شرایط اولیه، مکان‌ها و سرعت‌های اولیه‌ی ذرات است که هر بار به صورت تصادفی- با در نظر گرفتن دمای مجموعه-تولید می شوند. می‌توان رابطه‌ی خطی میانِ ضریب سره ذره‌ی مهمان و نسبت جرمی آن را دید. با افزایش جرم ذره مهمان، ضریب سره آن کاهش می‌یابد. بدیهی است که، برای محک‌زدنِ رابطه‌ی خطی که کوهلر و همکارش مشاهده کرده‌اند، به بیش از سه نقطه (سه مقدارِ M_g/M_{Ar}) نیاز داریم.

جدول۲: تغییرات S_T برحسب M_g/M_{Ar} با تقریب خوبی خطی است. متوسط گیری بر روی ۸ اجرا، هر اجرا معادل با 3.5×10^7 گام زمانی یعنی ۷۵ نانوثانیه.

M_g/M_{Ar}	$S_T\left(\frac{K_B}{\epsilon}\right)$ ذره مهمان	$<\Delta S_T^2>$
۰٫۵	+۱٫۳۲	۰٫۱۶۰۹
۱٫۰	+۰٫۸۰	۰٫۲۷۳۳
۱٫۵	+۰٫۳۳	۰٫۰۲۵۰



شکل٤: ضریب سره ذره مهمان برحسب تغییرات دمای متوسط مجموعه.

همچنین در شکل٤ می‌توان دید که با افزایش دمای متوسط مجموعه ضریب سره ذره مهمان کاهش می‌یابد.

نتیجه‌گیری

ما مجموعه‌ای از ذرات آرگون تحتِ گرادیان دما را شبیه‌سازی نمودیم. ضریب سره‌ی یک ذره‌ی مهمان که تنها برهم‌کنش‌اش با مجموعه‌ی شبیه‌سازی شده از طریق برهم‌کنش لنارد-جونز است را تحت تغییر جرم ذره نسبت به ذرات آرگون و همچنین تغییر دمای متوسط مجموعه بررسی نمودیم. با توجه به جدول۲ و شکل٤ می توان دید که با افزایش جرمِ ذره‌ی مهمان، ضریب سره آن کاهش می‌یابد و همچنین افزایش دمایِ متوسطِ مجموعه نیز باعث کاهش این ضریب می‌شود. این نتایج با نتایجِ به دست آمده در[۵] و[۹] همخوانی دارد. با افزایش تعداد و زمان اجرا و همچنین استفاده از تعداد ذراتِ بسترِ بیشتر، می‌توان به نتایج دقیق‌تری دست یافت. علاوه‌براین، در نظرگرفتنِ برهم‌کنش‌های متفاوت بین ذره مهمان و ذرات بستر می‌تواند در بررسی رفتار ذره‌ی مهمان مفید باشد.

مرجع‌ها

[۱] M.A. Rahman & M.Z. Saghir, *International Journal of Heat and Mass Transfer* **73**, p693 (2014).
[۲] A.V.Onufriev & S.Izadi, *Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science* **8**(2), e1347 (2018).
[۳] Z.Chao et.al., *Journal of Nanoparticle Research* **16**(10), (2014); Z.Chao et.al., Bulletin of the *Amer Phys Soc* **58**(18) (2015).
[۴] M. Eslamian, *Frontiers in Heat and Mass Transfer* **2**, 043001 (2011).
[۵] S. Hartmann, W. Köhler, and K. I.Morozov, *Soft Matter* **109**, 065901 (2012).
[۶] D. Braun & A. Libchaber, *Physical Biology* **1**(1) (2004).
[۷] S.R. De Groot & P. Mazur, *Non-equilibrium thermodynamics* (2013).
[۸] C. Debuschewitz & W. Köhler, Phys Rev Let **87**(5), 055901 (2001).
[۹] M.Zhang, and F.Müller-Plathe, *J. Chem. Phys*. **123**(12), 124502 (2005).
[۱۰] P.A. Artola, B. Rousseau, *Molecular Physics*, **111**, 00268976, (2013).
[۱۱] F. Römer, *et al. Phys Rev Let*, **108**, 105901 (2012).
[۱۲] W.G. Hoover, *Phys Rev A*, **31**, 1695-1697 (1985).
[۱۳] J. Hickman, Y. Mishin, PRB **94**, 184311 (2016).

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بررسی انتشار نور در فیبر نوری با پوشش نانو الماس با استفاده از نرم افزار FDTD

ریحانی کلور ,زهرا[۱]؛ندافان ,مرضیه[۱]؛ ضمیر انوری ،جاوید[۱]؛احمدیان ,ازاده [۲]؛نجفی عرب ,ساره[۱]

۱دانشگاه تربیت دبیر شهید رجایی، دانشکده علوم پایه، گروه فیزیک

۲دانشگاه تربیت مدرس، دانشکده علوم پایه، گروه فیزیک

چکیده

*در این مقاله پراکندگی نور توسط یک میکروکانالی که هسته ی یک فیبر تک مدی را قطع کرده و توسط برنامه ی دو بعدی **FDTD** و با دامنه ی زمانی محدود شبیه سازی شده، مورد بررسی قرار گرفته است.در اینجا به عنوان یک روش ساده از معادلات ماکسول برای حل مسائل استفاده شده است. از طرفی برای بهره وری بیشتر فضای سه بعدی (**3D**) به فضای دو بعدی (**2D**) ساده سازی شده است. در این شبیه سازی از موج پیوسته و موج پالسی برای بدست آوردن یک رشته پراکندگی استفاده شده است. ازطرفی قابلیت حساسیت ضریب شکست بازتابی و تغییر در محدوده این ضریب شکست ها برای بررسی جزییات فرآیندهای فیزیکی آن مورد استفاده قرار گرفته است.*

واژه های کلیدی: *فیبر نوری،میکروکانال،نرم افزار **FDTD**،ضریب شکست.*

Investigation of light emission in optical fiber with nano diamond coating using FDTD software

Reyhani Culor,Zahra1؛ Nadafan,Marzieh۱؛ ZamirAnvari,Javid1 ؛ Ahmadian,Azadeh ۲؛ Najafi Arab,Sareh1؛

[1] Department of Physi*Physics *Department, Faculty of Sciences, Shahid Rajaee Teacher Training University

۲Physics Department, Faculty of Sciences, Tarbiat Modares University

Abstract

In this paper, light scattering is investigated by a microchannel that cuts through the core of a single-mode fiber and is simulated by a two-dimensional FDTD program with a finite time domain. Here as a simple method of the Maxwell equations is used to solve the problems. On the other hand, it is simplified to more efficiently use 3D space to 2D space. In this simulation, the continuous wave and pulse wave are used to obtain a scattering sequence. Furthermore, the sensitivity of the refractive index to the sensitivity of the refractive index and the variation in the range of these refractive indexes are used to examine the details of the physical mechanism.

Keywords*: *Fiber optic, microchannel, FDTD software, refractive index,

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مقدمه

فیبر نوری یکی از محیط های انتقال داده با سرعت بالا است که از پالس های نوربرای انتقال داده بهره می گیرد. امروزه از فیبر نوری در موارد متفاوتی نظیر شبکه های تلفن شهری و بین شهری و شبکه های کامپیوتری و اینترنت استفاده بعمل می آید [۱]. یکی از روش هایی که برای بررسی کردن میدان عبوری از فیبر نوری می توان از آن استفاده کرد قرار دادن یک میکرو کانال درون آن است. در برخی از مواقع لازم است دستگاهی درون فیبر قرار گیرد که نباید تحت تاثیر میدان باشد یا حداقل میدان روی آن اثر کند. در این مقاله سعی شده که بهترین مکان و مشخصات میکروکانال را با این هدف بیابیم [۲].

شبیه سازی در فیبر نوری

فیبر های نوری و موجبرهای نوری شامل یک هسته، جایی که نوری در آن محدود شده، و روکش، لایه ی اطراف هسته هستند. ضریب شکست هسته n_1 از ضریب شکست روکش n_2 بیشتر است. بنابراین پرتوی نوری که به سمت انتهای فیبر هدایت شده از طریق بازتاب کلی درون هسته محدود می شود. شرایط بازتاب کلی که در سطح بین هسته – روکش صورت می گیرد طبق رابطه زیر می باشد.

$$n_1 \sin(\frac{\pi}{2}\varphi) \geq n_2 \qquad (۱)$$

تفاوت ضریب شکست هسته و روکش تقریبا بصورت $\sqrt{n_1^2 - n_2^2}$ است. که طبق رابطه ی زیر به $\theta_{\max}$ ارتباط دارد:

$$\theta \leq \sin^{-1}\sqrt{n_1^2 - n_2^2} = \theta_{\max} \qquad (۲)$$

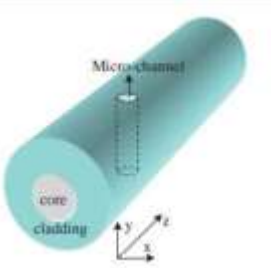
$\theta_{\max}$ طبق رابطه ی بالا تقریبا می تواند از رابطه ی زیر بدست آید:

$$\theta_{\max} \approx \sqrt{n_1^2 - n_2^2} \qquad (۳)$$

که $\theta_{\max}$ نشان دهنده ی حدکثر زاویه ی پذیرش نور توسط فیبر می باشد.

مراحل پیاده سازی میکروکانال در فیبر نوری

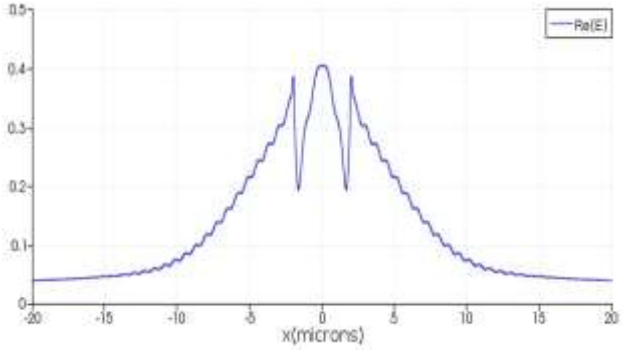
فیبر نوری را با حداقل طول ۲۰۰ μm در نظر می گیریم؛ میکرو کانالی را با قطر ٤μ m بصورت عمود بر فیبر در نظر می گیریم که ضریب شکست آن را از ۱ تا ۱/٤ تغییر می دهیم و در هر مرحله ۰/۲ به مقدار قبلی اضافه می کنیم [۳]. این محاسبات برای کامپیوتر های معمولی بسیار سنگین است به همین دلیل فضای سه بعدی را به فضای دو بعدی تبدیل می کنیم. ابتدا ضریب شکست موثر را در راستای Yو سپس ضریب شکست هسته را در راستای X مورد بررسی قرار می دهیم [٤]. در این شبیه سازی قطر هسته ۸ μm و تفاوت ضریب شکست هسته و رویه به اندازه ی ۰/۰۰۳ است یعنی ضریب شکست هسته ۲/٤۲۳ و ضریب شکست رویه ۲/٤۲ است. در اینجا موجبر تنها مد های پایینتر را پشتیبانی می کند. زیرا محاسبات ضریب شکست برای آن ساده تر از بقیه است. برای بدست آوردن داده های مربوط به پرا کندگی انتقال و شبیه سازی آنها توسط FDTD و در زمان اجرا تبدیل فوریه به صورت مجزا برای تمام نقاط صفحه ی خروجی مورد محاسبه قرار می گیرد. بردار پوینتینگ به صورت ۰/۵Real(E×H) محاسبه می شود، و این کار باعث می شود تا چگالی پراکندگی در انتقال قدرت مفیدتر باشد. پالس القایی ما در اینجا از نوع گاوسی است که طول موج مرکزی آن ۱۵۵۰nm و پهنای آن تا ۲۰۰fs است که متناظر با طیفی به ضخامت۴۰ nm است [۵]. برای بدست آوردن و بررسی کردن میدان یک مانیتور درون میکرو کانال قرار گرفته که میدان درون فیبر و میکرو کانال را بررسی میکند.



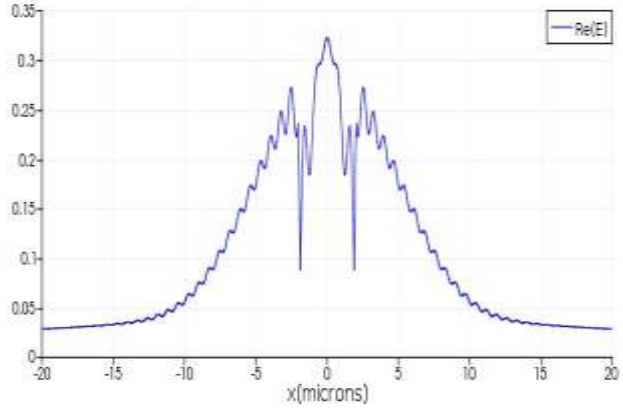
شماتیک۱:ساختار سه بعدی فیبر و میکروکانال

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

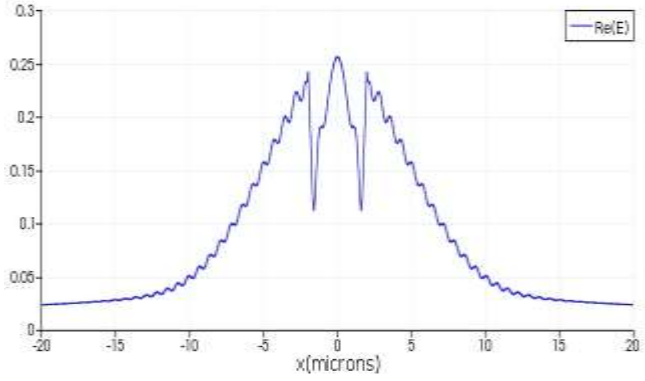
در اینجا قطر میکرو کانال $4m\mu$ در نظر گرفته شده است و شکل های میدان E_y گذرنده از میکرو کانال در شکل ۱و۲ آمده است.



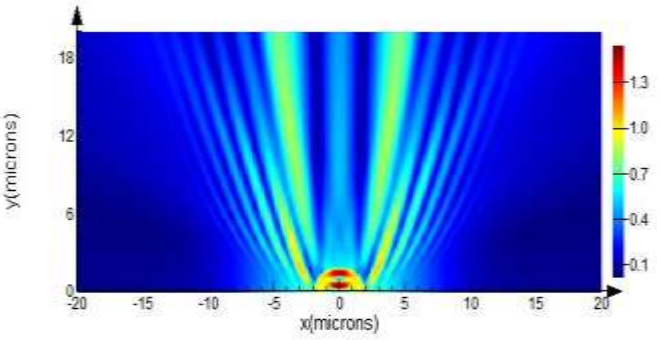
شکل ۱(الف): نمودار خطی میدان الکتریکی میکروکانال ضریب شکست ۱



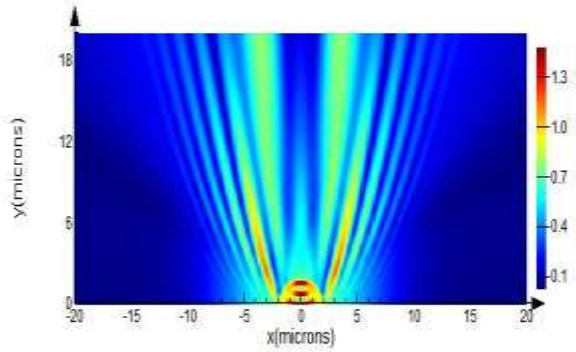
شکل ۱(ب): نمودار خطی میدان الکتریکی میکرو کانال ضریب شکست ۱/۲



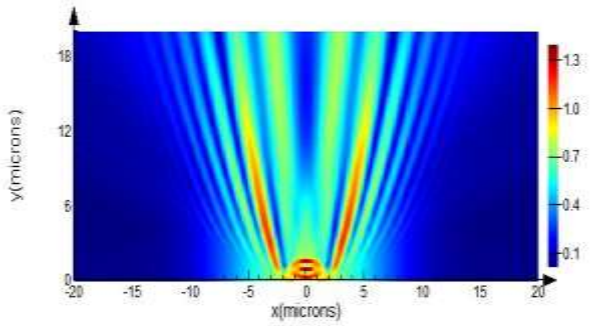
شکل ۱(ج): نمودار خطی میدان الکتریکی میکروکانال با ضریب شکست ۱/٤



شکل ۲(الف): پروفایل میدان الکتریکی در میکروکانال با ضریب شکست ۱



شکل ۲(ب): پروفایل میدان الکتریکی در میکروکانال با ضریب شکست ۱/۲



شکل ۲(الف): پروفایل میدان الکتریکی در میکروکانال با ضریب شکست ۱/٤

همانطور که از نمودارهای و پروفایل های میدان مشهود است می توان نتیجه گرفت که:

۱) با افزایش ضریب شکست پوشش فیبر، تغییرات شدیدتری در میزان میدان الکتریکی عبوری از فیبر مشاهده می شود.

۲) هرچه ضریب شکست میکرو کانال بیشتر باشد شکستگی نور بهتر رخ میدهد و موجی با میدان قویتری از آن خارج شده که در واقع افزایش ضریب

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

شکست خود عاملی برای تشدید و تقویت میدان است.

۳) همانطور که در شکل های میدان قابل مشاهده است می توان برای قرار دادن دستگاه هایی که نیاز است درون فیبر باشد ولی تحت تاثیر هیچ میدانی نباشد با استفاده از شبیه سازی بهترین نقطه را انتخاب کنیم و دقیقا سعی شود که دستگاه در آن نقطه قرار گیرد. با توجه به نمودار های خطی می توان دریافت که هرچه ضریب شکست افزایش میابد محیط مناسب تری درون فیبر برای قرار دادن این دستگاه ها ایجاد می شود.

نتیجه گیری

تغییرات ضریب شکست پوشش درونی فیبر نوری بطور مستقیم در تغییرات میدان الکتریکی عبوری از یک فیبر نوری تاثیرگذار است. اگرچه می توان نقاطی را در درون فیبر نوری یافت که با تغییرات ضریب شکست پوشش درونی فیبر نوری، هیچ تغییراتی در میدان الکتریکی این نقاط مشاهده نمی شود. از این نقاط برای اهداف کاربردی در ساخت فیبرهای نوری استفاده می شود.

مرجع‌ها

[1] Stratton, J. A. 1941. Electromagnetic Theory. New York: McGraw-Hill.

[2] Born, M., and E. Wolf. 1970. Principles of Optics. Oxford: Pergamon Press.

[3] Tao Wei, Yukun Han, Hai-Lung Tsai, Hai Xiao, Miniaturized fiber inline Fabry–Perot interferometer fabricated with a femtosecond laser, Opt. Lett.

[4] C. Mou, K. Zhou, E. Davies, L. Zhang, I. Bennion, Fiber laser incorporating an intracavity microchannel for refractive index and temperature sensing, Photon. Technol. Lett. 21 (2009) 1559–1561.

[5] J. Qiu, W. Hong, D.N. Wang, D. Gao, Y. Wang, Y. Li, Transmission properties of the single mode fiber with a cross-sectional micro-channel investigated using time-domain finite difference (FDTD) method, Opt. Fiber Technol. 17 (2011) 580–585.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

تعیین انرژی سیستم های نسبیتی با حل تحلیلی معادله دیراک

تعظیمی ، نرگس ؛ نظری ، مصطفی؛ منعم زاده، مجید

دانشکده فیزیک دانشگاه کاشان، بلوار قطب راوندی ، کاشان

چکیده

معادله دیراک مهمترین معادله در مکانیک کوانتوم نسبیتی می باشد. این معادله شامل پتانسیل‌های اسکالرجاذب $S(r)$ و برداری دافعه $V(r)$ می‌باشد. در این مقاله به حل تحلیلی معادله دیراک با استفاده از روش آنساز میپردازیم بدین منظور پتانسیل تعمیم یافته کرنل که مجموع دو پتانسیل نوسانگر هماهنگ و پتانسیل کرنل اصلی می‌باشد را برای مزونهای متشکل از کوارک های سبک مورد استفاده قرار می دهیم و ویژه مقادیر انرژی و ویژه توابع آن را بدست می‌آوریم.

IDENTIFICATION OF THE ENERGY OF RELATIVISTIC SYSTEMS BY ANALYTICAL SOLUTION OF DIRAC EQUATION

Tazimi,Narges ; Nazari,Mostafa; Monemzade, Majid

Department of physics,University of Kashan,Kashan

Abstract

Dirac equation is the most important equation in relativistic quantum mechanics. It includes the attractive scalar potential S(r) and repulsive vector potential V(r). In this article, we solve the Dirac equation analytically through Ansatz method. For this purpose, we use the generalized Cornell potential (which is the sum of the harmonic oscillator potential and the leading Cornell potential) for mesons consisting of light quarks, and we obtain the energy eigenvalues and eigen-functions.

PACS No. ۱۳

مقدمه

معادله دیراک نقش مهمی در بررسی رفتار ذرات زیر اتمی شامل فرمیونها ، کوارک‌ها و بوزن‌ها ایفا می‌کند. درسالهای اخیر معادله دیراک برای بسیاری از پتانسیل‌ها و به روشهای گوناگونی مانند روش NU [1]، روش تقارن اسپینی و شبه اسپینی[2,3] و استفاده از پتانسیلهای اختلالی حل شده است. از جمله این پتانسیل ها می توان به پتانسیل یوکاوا ، پتانسیل هارتمن[4] ، پتانسیل کولمبی و غیره اشاره نمود. باید توجه داشت که معادله دیراک فقط برای پتانسیلهای معدودی بطور دقیق قابل حل است و برای سایر پتانسیل‌ها باید از روش‌های تقریبی استفاده نمود. پتانسیل کرنل که شامل یک پتانسیل کولمبی[5] بعلاوه یک پتانسیل خطی[6] می‌شود نقش مهمی در فیزیک ذرات از جمله در مدل سازی حالت‌های مقید کوارک و آنتی کوارک دارد..[7]

ما در این تحقیق معادله دیراک را برای پتانسیل کرنل تعمیم یافته که مجموع دو پتانسیل کرنل اصلی و یک پتانسیل نوسانگر هماهنگ می‌باشد[8] حل نموده و طیف انرژی آن را بدست می‌آوریم .پتانسیل کرنل تعمیم یافته مطابق با آنچه شواهد آزمایشگاهی آن را تایید می کند به صورت زیر است:

$$\cup(x) = ax^2 + bx - \frac{c}{x}$$

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

دراین رابطه پتانسیل $-\frac{c}{x}$ پتانسیل کولنی ناشی از برهمکنش بین کوارک و پادکوارک در فواصل کوچک بوده و منشاء آن بار رنگ می باشد.جمله خطی دوم ناشی ازمحصور شدگی کوارک و آنتی کوارک و جمله سوم همانند پتانسیل نوسانگر می باشد.

حل تحلیلی معادله دیراک برای پتانسیل کرنل تعمیم یافته

با در نظر گرفتن کوارک با جرم m معادله دیراک در حضور پتانسیل اسکالر $S(r)$ و برداری $V(r)$ بصورت زیر است:

$$[\alpha\cdot p+\beta(m+S(r))]\psi(r)=[E-V(r)]\psi(r) \quad (1)$$

با در نظر گرفتن $\hbar$ =c=1 و با نمایش دیراک –پائولی ماتریس‌های α وβ بصورت زیر می‌باشد:

$$\boldsymbol{\alpha}=\begin{pmatrix}0 & \boldsymbol{\sigma}\\ \boldsymbol{\sigma} & 0\end{pmatrix} \qquad \beta=\begin{bmatrix}I & 0\\ 0 & -I\end{bmatrix}$$

این دو ماتریس بصورت ماتریسهای 4×4 تعریف می‌شوند.

با استفاده از مختصات کروی و رابطه $\boldsymbol{p}\to-i\boldsymbol{\nabla}$ ، تابع موج به فرم زیر تعریف می‌شود:

$$\psi(r)=\begin{pmatrix}\varphi(r)\\ \chi(r)\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}u(r)Y^{l}_{jm(\theta,\varphi)}\\ iv(r)Y^{l\sim}_{jm(\theta,\varphi)}\end{pmatrix} \qquad (۲)$$

$u(r)$ و$v(r)$ بخش‌های شعاعی و $Y^{l}_{jm(\theta,\varphi)}$ و $Y^{l\sim}_{jm(\theta,\varphi)}$ بخش فضایی تابع موج می‌باشد از آنجا که در مختصات کروی بخش فضایی برای پتانسیل مورد استفاده دارای تقارن است، فقط بخش شعاعی مورد استفاده قرارمی گیرد.

با قرار دادن رابطه ۲ در رابطه ۱ دو معادله جفت شده زیر برای بخش شعاعی بدست می‌آید:

$$\left(\frac{d}{dr}+\frac{k}{r}\right)u(r)=[M+E_{nk}-\Delta(r)]v(r) \qquad (۳)$$

$$\left(\frac{d}{dr}-\frac{k}{r}\right)v(r)=[M-E_{nk}+\sum(r)]u(r) \qquad (۴)$$

که:

$$\sum(r)=V(r)+S(r) \quad ,\Delta(r)=V(r)-S(r)$$

در این رابطه E_{nk} ویژه مقدار انرژی برای اعداد کوانتومی مربوطه می‌باشد. رابطهٔ عدد کوانتومیk با عدد کوانتومی تکانه زاویه‌ای کل j بصورت زیر است:

$$k=\begin{cases}-\left(j+\frac{1}{2}\right)=-(l+1) & j=l+\frac{1}{2}\\ \left(j+\frac{1}{2}\right)=l & j=l-\frac{1}{2}\end{cases}$$

با استفاده از مشتق دوم و با مساوی قرار دادن پتانسیلهای اسکالر و برداری معادلات ۳ و ۴ به معادله شرودینگرگونه زیر تقلیل می‌یابند:

(۵)

$$\left[\frac{d^2}{dr^2}-\frac{k(k+1)}{r^2}+(M+E)(E-M-V(r))\right]u(r)=0$$

پتانسیل تعمیم‌یافته کرنل بصورت زیر تعریف می‌شود:

$$V(r)=ar^2+br-{}^{c}/_{r} \qquad (٦)$$

که a و b و c ضرایب مثبت هستند.

این پتانسیل کاملاً مشخصات نیروی قوی را توصیف می‌کند. حاصل مجموع دو جمله دوم و سوم بنام پتانسیل کرنل شناخته می‌شود.

جمله اول هم بیانگر پتانسیل نوسانگر هماهنگ مربوط به جرمm_i می‌باشد که با فرکانسω نوسان می‌کند. ثابت α متناسب با جرم m_i و مجذور ω^2 می‌باشد. پتانسیل نوسانگر هماهنگ نقش مهمی در ویژگی‌های کوارکونیم ایفا می‌کند.

با جایگذاری رابطه ۶ در رابطه ۵ خواهیم داشت:

$$\left[\frac{d^2}{dr^2}+2\varepsilon_{\circ}\left(\varepsilon_1-ar^2-br+{}^{c}/_{r}-\frac{k(k+1)}{2\epsilon_0 r^2}\right)\right]u(r)=0$$

$$\begin{cases}\varepsilon_{\circ}=(E_{nk}+m_i)\\ \varepsilon_1=(E_{nk}-m_i)\end{cases}$$

(۷)

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

با استفاده از روش آنساز برای $u(r)$ خواهیم داشت:

(۸)

$$U_m(r) = h_m(r)exp[P(r)]$$
$$h_m(r) = 1 \qquad if \quad m = 0$$
$$h_{\ m}(r) = \pi_{j=1}^{m}(r - \sigma_i^m) \quad if\ m = 1,2,3,\dots$$

(۹)

$$p(r) = -\frac{1}{2}\alpha r^2 + \beta r + \delta \ln r$$

در روش آسانتر تابع موج بصورت حاصلضرب دو تابع خطی و نمایی نوشته می‌شود که تابع نمایی برحسب یک تابع شعاعی با ضرایب α وβ وδ بود که این ضرایب باید بدست آیند.

با قراردادن رابطه ۸ در رابطه ۷ و استفاده از رابطه ۹ خواهیم داشت:

(۱۰)

$$u_m{}''(r) = \frac{d^2}{dr^2}u_m(r) = [p''(r) + (p'(r))^2 + \frac{h_m'''(r) + 2h_m'(r)p'(r)}{h_m(r)}]$$

با برابر قراردادن ضرایب جمله‌های با توان‌های مساوی r برای حالت $m = 0$ روابط ذیل بدست می‌آید:

$$\begin{cases} \alpha = -\sqrt{2\varepsilon_\circ a} \\ \beta = \frac{b}{2a}\sqrt{2\varepsilon_\circ a} \\ \delta = -c\ /\ b\sqrt{(2\varepsilon_0 a)} \end{cases} \qquad (۱۱)$$

و

$$\delta = -k\ ,k+1$$

با تعریف $E = \varepsilon^2 - m^2$ ، برای انرژی خواهیم داشت:

(۱۲)

$$\mathrm{E} = \frac{b^2\varepsilon}{2a} + \frac{b^2 m}{2a} + \sqrt{2am} + \frac{\varepsilon\sqrt{2am}}{2m} + \left(2(k+1)\left(\sqrt{2am}\right)\right) + \left(k+1\left(\frac{\varepsilon}{m}\right)\left(\sqrt{2am}\right)\right)$$

تعیین جرم مزون های متشکل ازکوارک سبک :

با استفاده از رابطه زیر جرم مزون ها را تعیین می کنیم:

$$M = m_q + m_{\bar{q}} + E_{10}$$

که انرزی را از رابطه ۱۲ جایگذاری می کنیم. تابع موج را برای حالت پایه به فرم زیر تعیین می کنیم:

$$U_\circ(r) = N_\circ r^\delta\, exp[P(r)] = N_\circ r^\delta\left[\sqrt{a(E+m)}\left(\frac{r^2}{2} + \frac{br}{2a}\right)\right]$$

$$if\ m = 1 \Longrightarrow U_m(r) = (r - \sigma_1)\exp[P(r)]\ \text{و}\ h_m = (r - \sigma_1)$$

$$\frac{d^2}{dr^2} = U^{''}{}_1(r) = \left(-\alpha - \frac{\delta}{r^2}\right) + (-\alpha r + \beta + \frac{\delta}{r})^2 + \frac{2(-\alpha r + \beta + \frac{\delta}{r})}{r - \sigma_1^1}$$

با برابر قرار دادن ضرائب بدست می آوریم:

$$\alpha = -\sqrt{2a\varepsilon_0}$$
$$\beta = \frac{(b - 4a\sigma_1)\sqrt{2a\varepsilon_0}}{4a}$$
$$\sigma_1 = \frac{\frac{\delta}{\delta}}{C(E+M)+\delta\beta}$$
$$\mathrm{E} = 2\beta c\varepsilon_0 + \delta(\beta^2 + \alpha) + \frac{c\varepsilon_0}{2}(\frac{\beta}{\delta} + \frac{c\varepsilon_0}{2\delta} + {}^{\alpha}/_{2}$$

با استفاده از پارامترهای α وβ و δ و قراردادن مقادیر آنها بر حسب ضرایب a و b و c وk انرژی محاسبه می‌شود در نهایت تابع موج را به شکل زیر بدست می آوریم:

$$U_1(r) = N_1(r_1 - \sigma_1)r^\delta \exp[-{}^{1}/_{2}\,\alpha r^2 + \beta r]$$

که $\mathbf{N_1}$ ضریب بهنجارش است. در جدول زیر نتایج جرم را برای بعضی مزونهای سبک نشان داده ایم و با دیگر منابع مقایسه کرده ایم.

نتیجه گیری

ما در این تحقیق با حل **تحلیلی** معادله دیراک با استفاده از روش آنساز پرداخته ایم و ویژه مقادیر انرژی و ویژه توابع مربوطه را در حالت پایه بدست آوردیم. نتایج برای حالت پایه برای مزونهای سبک و نیمه سنگین در جدول ۱ آورده شده است که این نتایج در توافق خوبی با دیگر منابع قرار دارد .می‌توان با بعضی تقریبهای مفید روابط را ساده‌تر نمود. با بررسی و ادامهٔ تحقیقات در این

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

حوزه می‌توان جنبه‌های مجهول مکانیک کوانتوم را برای ذرات زیر اتمی بویژه نیروی قوی بدست آورد.

جدول ۱. جرمهای محاسبه شده برای مزونهای سبک و نیمه سنگین در حالت پایه $(a = 1.3\ Gev^2, b = 5.025 Gev, \delta = 1)$

مزون ها	ساختار کوارکی	مقادیر تجربی برای جرم مزون ها(Mev)	مقادیر نظری برای جرم مزون ها(Mev)
π^0	$\frac{(u\bar{u}-d\bar{d})}{\sqrt{2}}$	۱۳۴/۶	۱۳۸/۴
$\pi^{\pm}$	$u\bar{d}, d\bar{u}$	۱۳۹/۶	۱۴۲/۳
φ	$s\bar{s}$	۱۰۲۰	۱۰۲۳
η	$\frac{u\bar{u}+d\bar{d}-2s\bar{s})}{\sqrt{6}}$	۵۴۸/۸	۵۴۲/۳
$D_s^{\pm}$	$c\bar{s}, s\bar{c}$	۱۹۷۱	۱۹۴۳
$K^{\pm}$	$u\bar{s}, s\bar{u}$	۴۹۳/۷	۵۰۱
$D^{\pm}$	$c\bar{d}, d\bar{c}$	۱۸۶۹	۱۸۱۷
K^0	$d\bar{s}$	۴۹۷/۷	۵۱۱
$\rho^{\pm}$	$u\bar{d}, d\bar{u}$	۷۷۰	۷۹۲
D^0	$c\bar{u}$	۱۸۶۵	۱۸۱۸

مراجع:

[1] A. Arde, R. Sever, and C. Tezcan, Cent. Eur.J.Phys. **8**, 843 (2010)
[2] L .Ya .Golzman and D.O.Rlska,Phys. Rep**. C 268** (1996) 263.
[3] L Ya.Golzman,A Papp,WPlessas,K Varga and R F Wagenbrunn,Phys. Rev. **C 57** (1998) 3406.
[4] Chang. Yuan Chen, Phys. Lett. **A 339** (2005) 283.
[5] Rajabi A. A. (2005). Exact analytical solution of the Schrodinger equation for an n-identical body – force system. Few-Body systems , 37 . 197-213.
[6] Rajabi A. A. (2006). Bound state for hypercentral singular and exponential potentials. Commun. Theor . Phys, 45. 669-674.
[7] Shojaei M R , Rajabi A A. (2007) . Hypercentral constituent quark model and hyperfine dependence potential .Iranian Jour of Phys. Research,7.9-12.
[8] Shojaei M R, Rajabi A A. (2009) . Three-body force model of non-hypercentral harmonics and anharmonics Potential in three-dimensional Potentials . Mod . Phys. Lett.,A23.3411-3417 .

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مطالعهٔ پراکندگی اکوستیکی و اپتیکی حامل ها در گرافن

انصاری پور، قاسم ؛ الجادری، احمد

گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه بوعلی سینا، همدان

چکیده

در حالی که پراکندگی کشسان، تحرک میدان پایین را تعیین می‌کند، سرعت اشباع به پراکندگی غیرکشسان توسط فونون‌های قطبی سطحی بسترهای قطبی یا فونون‌های اپتیکی گرافن ذاتی، مربوط می‌شود. در این پژوهش با استفاده از معادلهٔ بولتزمن و با لحاظ فونون اکوستیکی و فونون اپتیکی سطحی، آثار پراکندگی ناخالصی کولنی و پراکندگی فونون قطبی سطحی در گرافن مورد بررسی قرار گرفته و تحرک حامل ها محاسبه و رسم شده است.

واژه های کلیدی: *. گرافن ، فونون قطبی سطحی، پراکندگی اکوستیکی و اپتیکی*

Study of Acoustic and Optic Scattering of Carriers in Graphene

Ansaripour, Ghassem; Aljadiri, Ahmad

Department of Physics, Faculty of Science, Bu-Ali Sina University, Hamedan

Abstract

While elastic scattering determines low field mobility, the saturation velocity is related to inelastic scattering by surface polar phonon of polar substrates or intrinsic graphene optical phonons. In this study, using the Boltzmann equation and with viewpoint acoustic phonon and surface optical phonon, the effects of Coulomb impurity and surface polar phonon scattering, have been investigated, also the mobility of the carriers are calculated and plotted.

***Keywords**: Graphene, Surface polar phonon, Acoustic and optic scattering*

PACS No. 68

مقدمه

گرافیت، ماده‌ای است که از چند لایه ساخته شده و هر کدام یک شبکه دو بعدی لانهٔ زنبوری را تشکیل می‌دهند و هر یک از این لایه‌ها گرافن نامیده می‌شود. جالب است که شکل دو بعدی گرافن به تازگی به دست آمده و به سرعت توجه زیادی را به خود جلب کرده است. در گرافن الکترونها از رابطهٔ پاشندگی خطی تبعیت می‌کنند و شبیه ذرات نسبیتی بدون جرم رفتار می‌کنند. این امر به مشاهدهٔ خواص الکترونی بسیار عجیب در این اولین مادهٔ دو بعدی منجر می شود. گرافن بهترین دگرشکل[1] قابل مطالعهٔ کربن از لحاظ نظری می‌باشد! گرافن، صفحه‌ای مسطح دو بعدی، از شش گوشه‌هایی با اتم‌های کربن تشکیل شده است [1-3]. چنین لایهٔ دو بعدی نه تنها پیوسته است بلکه یک بلور با کیفیت بالا است به طوری که حامل‌های بار می‌توانند بدون پراکندگی، مسافت حدود هزار فاصله بین اتمی را بپیمایند. به عبارتی تحرک حامل‌ها بالاست. چنین ساختار بلوری دو بعدی با حذف ملایم بُعد سوم به دست آمده و شدیداً پایدار است.

[1] Allotrope

فرمول بندی نظری

تحرک میدان پایین μ با استفاده از نظریهٔ ترابرد بولتزمن به صورت زیر داده می شود[4،5]:

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

$$\sigma = en\mu = \frac{e^2 v_F^2 D_n \tau(k)}{2} \qquad (1)$$

که در آن σ رسانندگی، $D_n = \frac{2E_F}{\pi\hbar^2 v_F^2}$ چگالی حالت، $E_F = \hbar v_F \sqrt{\pi n}$ انرژی فرمی و $\tau(k)$ زمان واهلش به صورت زیر داده می شود [5،6].

$$\frac{1}{\tau_k} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_q |M_{k,k+q}|^2 [1 - \cos(\theta_k - \theta_{k+q})] \times \{N_q \delta(E_k - E_{k+q} + \hbar\omega_q) + (N_q + 1)\delta(E_k - E_{k+q} - \hbar\omega_q)\} \qquad (2)$$

در اینجا N_q عدد اشغال بوز-آینشتن، θ_k زاویهٔ بردار $\vec{k}$ و

$$|M_{k,k+q}|^2 = \frac{1 + ss' \cos(\theta_k - \theta_{k+q})}{2} \frac{4\pi^2 e^2 F_v^2}{NAq} e^{-2qd} \qquad (3).$$

$\frac{1}{N}\sum_q$ در معادلهٔ (2) با $\frac{A}{4\pi^2}\int q dq d\theta$ جایگزین می شود. q بردار موج پراکندگی، $A = \frac{\sqrt{3}a_0^2}{2}$ مساحت یاختهٔ بسیط دو اتم است و N تعداد نقاط فضای k است.

تحرک میدان پایین حامل های بار متناظر با پراکندگی فونون‌های صوتی μ_{ac} در حد دماهای بالا با رابطهٔ زیر داده می‌شود[5،7]:

$$\mu_{ac} = \frac{e\rho_m \hbar v_F^2 v_{ph}^2}{\pi D_{ac}^2} \frac{1}{nK_B T} \qquad (4)$$

هم چنین تحرک حامل‌های بار متناظر با پراکندگی فونون‌های اپتیکی به صورت:

$$\mu_{op} = \frac{e\rho_m v_F^2 \hbar\omega_{op}}{2\pi\hbar D_{op}} \frac{1}{nN_{op}} \qquad (5)$$

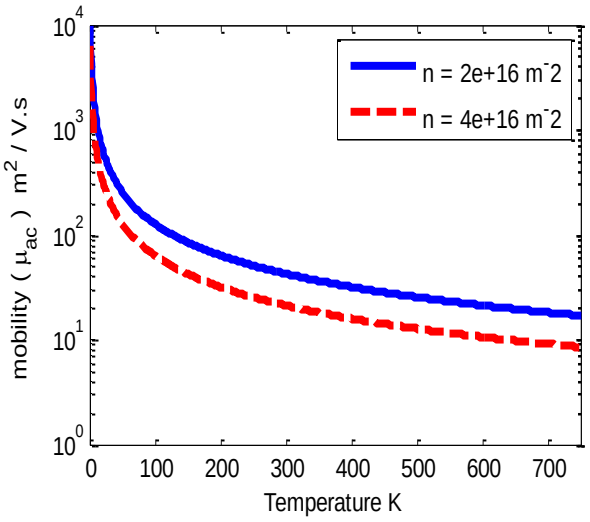
است که در آن $D_{op} = 2D_\Gamma$ ثابت جفت شدگی الکترون-فونون، N_{op} عدد اشغال بوز-آینشتن و $\hbar\omega_{op}$ انرژی فونون‌های اپتیکی است.

نتایج وبحث

نمودار تغیرات تحرک حامل‌های پراکنده شده توسط فونون‌های اکوستیکی μ_{ac} بر حسب دما و چگالی حامل‌ها برای دو حالت متفاوت چگالی حامل‌های بالا و چگالی حامل‌های پایین در دماهای مختلف در شکل 1 نشان داده شده است. فونون‌های صوتی باعث پراکندگی حامل‌ها در لایهٔ گرافن می‌شوند، پراکندگی حاصل بر حسب دما، کشسان یا غیرکشسان می‌باشد. هر دو حالت پراکندگی مورد بررسی و تحلیل قرار گرفته است.

در شکل 1 تحرک حامل‌های پراکنده شده توسط فونون‌های صوتی بر حسب دما برای چگالی‌های مختلف به ترتیب از بالا به پایین برابر 4×10^{12} cm^{-2} و n=2 در لایهٔ گرافن را نشان می‌دهد[7]. ملاحظه می‌کنیم که تحرک در دماهای پایین، بالا و در دماهای بالا کم است اما تحرک برای چگالی های کمتر، بیشتر است و بر عکس. توضیح این که، در دماهای پایین و چگالی کم فونون‌های با انرژی کم تولید می‌شوند که باعث پراکندگی کشسان می‌شوند که در این حالت حامل‌ها انرژی از دست نمی‌دهند و تحرک به مقادیری از مرتبهٔ 10^4 m^2/V.s تا 10 m^2/V.s کاهش می‌یابد.

اما در دماهای بالا با افزایش چگالی حامل‌ها، فونون‌های با انرژی بالا تولید می‌شوند که باعث پراکندگی غیرکشسان می‌شوند و در نتیجه حامل‌ها مقدار زیادی از انرژی خود از دست می‌دهند و تحرک به مقادیری از مرتبهٔ 10^3 m^2/V.s تا کمتر از 10 m^2/V.s کاهش می‌یابد.

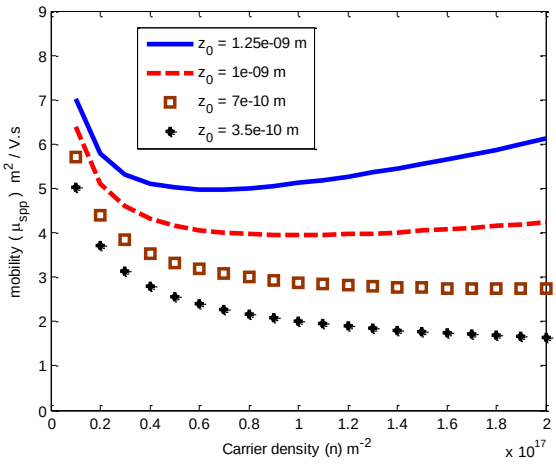


شکل 1 : نمودار تغیرات تحرک حامل‌های بار صوتی μ_{ac} بر حسب دما در دو حالت چگالی پایین، خط رنگ آبی برای چگالی 2×10^{12} cm^{-2} و خط قرمز خط چین برای چگالی 4×10^{12} cm^{-2} است.

در شکل 2 مشاهده می‌شود که با افزایش چگالی حامل‌ها از 1×10^{12} cm^{-2} تا $6/5 \times 10^{12}$ cm^{-2} برای فاصلهٔ کم 3/5 و 7 آنگستروم، تحرک کاهش پیدا کرده و از مقدار 7×10^{12} cm^{-2} به بالا برای دو فاصلهٔ 10 و 12/5 آنگستروم، تحرک افزایش پیدا می‌کند. این وضعیت به این دلیل رخ می‌دهد که شاخهٔ اول

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

فونون‌های قطبی سطحی، دارای انرژی کمی هستند و همچنین فاصلهٔ زیاد بین گرافن و بستر منجر به وقوع پراکندگی کشسان شده ودر نتیجه انرژی حامل‌ها تغییر نمی کند. اما در حالت فاصلهٔ کم بین بستر و گرافن مقدار تحرک با افزایش چگالی حامل‌ها کاهش می‌یابد و در این حالت حامل‌ها پراکندگی غیرکشسان را تجربه می‌کنند و مقدار تحرک با افزایش چگالی حامل‌ها کاهش می یابد.



شکل2 : نمودار تغیرات تحرک حامل‌های بار سطحی قطبی μ_{spp} بر حسب چگالی حامل‌ها برای شاخهٔ اول ω_{so1} در دمای 300K با چهار فاصلهٔ متفاوت: 3/5، 7، 10، 12/5 آنگستروم بین گرافن و Al_2O_3.

نتیجه گیری

در این پژوهش اثر پراکندگی فونون اکوستیکی بر حامل ها در گستره دمایی 0-700 کلوین مطالعه شد. نتایج نشان می دهد که در دماهای پایین، تحرک حامل ها افزایش و با افزایش دما که منجر به افزایش پراکندگی فونون اکوستیکی می شود، تحرک کم می شود. همچنین تحرک حامل ها در اثر پراکندگی فونون قطبی سطحی بررسی شد. ملاحظه کردیم که فاصلهٔ وان در والس نقش مهمی برای افزایش تحرک حامل‌ها دارد هر چه فاصله بیشتر شود تحرک افزایش می‌یابد. با افزایش چگالی حامل‌ها در شرایط دماهای بالا، استفاده از گیت گرافنی بر روی بستر Al_2O_3 با فاصله‌های وان‌در والس بیشتر از 12/5 آنگستروم برای کنترل جریان مناسب‌تر است..

مرجع‌ها

[1] M. S. A. Bhuyan, M. Nizam Uddin, M. M. Islam, F. A. Bipasha, S. S. Hossain, “Synthesis of graphene”; *International Nano Letters*, **6** (2016) 65-83.

[2] F. Liu, C. Wang, X. Sui, M. A. Riaz, L. Wei, Y. Chen, “Synthesis of graphene materials by electrochemical exfoliation: Recent progress and future potential”; *Carbon Energy-Wiley* (2019) 173-200.

[3] R. Kumar, S. Sahoo, E. Joanni, R. K. Sing, W. K. Tan, K. K. Kar, A. Matsuda, “Recent progress in the synthesis of graphene and derived materials for next generation electrodes of high performance lithium ion batteries”; *Combustion Science* (2019) 100786.

[4] انصاری پور، قاسم؛ بهرامی مقدس، محمد؛ "اثر ناخالصی باردار بر رسانش الکتریکی در گرافیت دوبعدی"؛ *مجلهٔ پژوهش سیستم های بس ذره ای*، دوره **9** شمارهٔ 2، تابستان 1398، صفحه 23 تا 30.

[5] V. Perebeinos, P. Avouris, “Inelastic scattering and current saturation in graphene”; *Physical Review B* **81** (2010) 195442.

[6] M. Mahdouani, "Investigation of the electron-surface phonon interaction effects in graphene on a substrate made of polar materials"; *Elsevier Science* (2017).

[7] T. J. Watson, “Current Saturation and Surface Polar Phonon Scattering in Graphene”; *IBM Research Division* (2009).

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مطالعه و طراحی نانو سوئیچ‌های تمام نوری ۲×۲ بر پایه موجبرهای نانو پلاسمونیکی فلز- دی‌الکتریک- فلز

قره داشلی، محمدیوسف؛ قادی، امین؛ میرزانژاد، سعید

دانشکده فیزیک دانشگاه مازندران، بابلسر

چکیده

این مقاله در مورد مطالعه و طراحی نانو سوئیچ‌های تمام نوری ۲×۲ بر پایه موجبرهای نانو پلاسمونیکی فلز- دی الکتریک- فلز است. یک سوئیچ تمام نوری جدید بر پایه موجبر نانو پلاسمونیک فلز- دی الکتریک- فلز طراحی و بصورت عددی مطالعه شده است. تغییرات طیف عبور سیستم نوری را با شبیه سازی عددی و روش FDTD و با تغییر پارامترهای ساختار بررسی کردیم. نتایج ما ممکن است کاربردهای بالقوه ای برای سوئیچینگ نوری در مقیاس نانو، نانوسنسورها، ادوات نوری در مدارهای مجتمع تمام نوری داشته باشند.

واژه های کلیدی: *تشدید فانو، پلاسمون پلاریتون های سطحی، سوئیچ نوری، تشدیدگر، موجبر فلز- عایق- فلز*

Study and desininig of 2×2 all-optical nano-switches based on nano-plasmonic Metal-Isolator-Metal (MIM) waveguide

Gharehdashly, MohammadYusuf; Ghadi, Amin; Mirzanejhad, Saeed

Department of Physics, University of Mazandaran, Babolsar

Abstract

This article is about the study and design of 2×2 all-optical nano-switches based on nano-plasmonic MIM waveguides. A new all-optical switch based on the nano-plasmonic MIM waveguide is designed numerically. We studied variation of system of light transmission spectrum under changing the structure parameters by numerical simulation FDTD method. Our results may have potential applications for nanoscale optical switching, nanosensors, and optical devices in all-optical integrated circuits.

***Keywords**: Fano resonance, Surface plasmon polaritons, Optical switch, Resonator, Metal-insulator-metal waveguide*

PACS No.

مقدمه

سوئیچ اپتیکی یک سیگنال نوری را مجاز می‌کند تا سیگنال نوری دیگر را کنترل نماید و یکی از مباحث بنیادی در مدار مجتمع تمام نوری است و در ارتباطات فیبرنوری، برای دستیابی به داده‌ها، بکار می‌رود [1]. پلاسمون پلاریتون‌های سطحی SPP[1] به دلیل توانایی آنها برای غلبه بر حد پراش نور، امیدوار کننده ترین نامزدها برای تحقق مدارهای مجتمع تمام نوری به حساب می‌آیند [2].به طور خاص، موجبرهای عایق فلزی مبتنی بر SPP ها دارای محدوده میدان زیر موج عمیق و افت خم پایین هستند و بنابراین، در مدارهای مجتمع تمام نوری کاربردهای مهمی دارند [3]. رزونانس فانو به عنوان یک اثر تداخل بین یک حالت موضعی و یک باند پیوسته در سیستم های کوانتومی یا کلاسیک ظاهر می‌شود و یک پروفایل خط تیز و نامتقارن معمولی را نشان می‌دهد، و این ویژگی خاص آن برنامه هایی را در سنسورها و سوئیچ‌ها نوید

[1] Surface plasmon polaritons

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

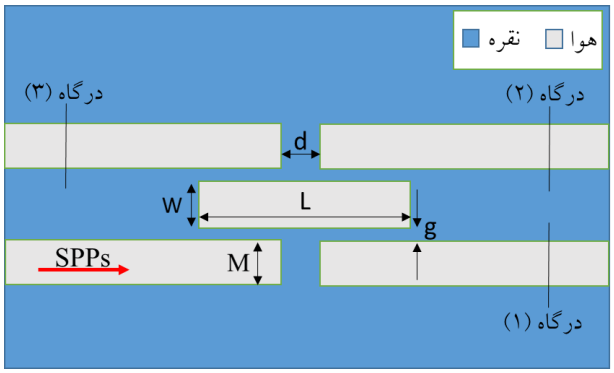
می‌دهد. بنابراین، ترکیب رزونانس فانو با ساختارهای پلاسمونی MIM امکان دستیابی به مؤلفه های نوری کاربردی فراصوت برای استفاده در مدار مجتمع تمام نوری را ایجاد می‌کند [4]. در اینجا، سوئیچینگ نوری با استفاده از رزونانس فانو در یک سیستم پلاسمونی جمع و جور، که از دو موجبر شیاردار MIM همراه با یک کاواک کوپل شده در بین آنها تشکیل شده است، مورد بررسی قرار می‌گیرد. خصوصیات انتقال ساختار با روش عددی تحلیل شده است. در این مقاله یک سوئیچ کاملا نوری ۲×۲ جدید بر پایه موجبرهای نانو پلاسمونیکی فلز- دی الکتریک- فلز طراحی و بصورت عددی نشان داده شده است.

روش و محاسبات

نانوسوئیچ تمام نوری ۲×۲ بر پایه موجبرهای نانوپلاسمونیک طراحی و بصورت عددی با روش FDTD و با استفاده از نرم افزار لومریکال شبیه سازی می‌شود. تغییرات طیف فرکانسی نانوسوئیچ با پارامترهای ساختار نشان داده خواهد شد که باعث می‌شود تا از آن در مدارات مجتمع اپتیکی استفاده شود.

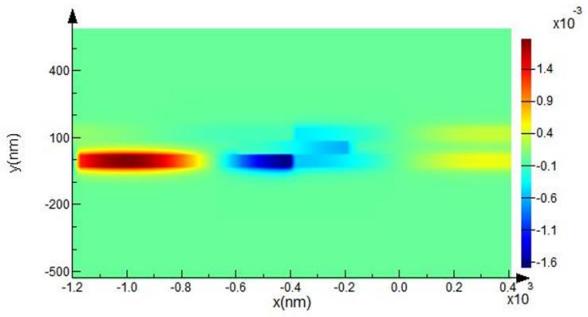
در شکل(۱) هندسه سیستم نوری نمایش داده شده است، در این شکل L و W بترتیب طول و عرض کاواک هستند. d نشان دهنده‌ی پهنای شیار موجبر است. g فاصله بین موجبرها و کاواک را نشان می‌دهد. M عرض موجبر را نشان می‌دهد. موج ورودی به سیستم نوری برای تحریک پلاسمون های سطحی مورد استفاده قرارگرفته است. از آنجا که پهنای موجبر بسیار کمتر از طول موج نور ورودی است، فقط یک مد انتشاری با پلاریزاسیون TM می تواند در سیستم وجود داشته باشد. ثابت دی الکتریک وابسته به فرکانس نقره با مدل درود: $\varepsilon_m=\varepsilon_\infty-\omega_p^2/\left(\omega^2+i\omega\gamma\right)$ و با پارامترهای $\varepsilon_\infty=3.7$ ، $\omega_p=9.1\,eV$ ، $\gamma=0.018\,eV$ مدل شده است که ε_∞ ثابت دی الکتریک در فرکانس بی نهایت، γ فرکانس برخورد الکترون و ω_p فرکانس پلاسمای حجمی است [4].

کاواک نشان داده شده در شکل (۱) که در بین دو موجبر شیاردار قرار دارد و به آنها کوپل می‌شود بعنوان تشدیدگر عمل می‌کند.



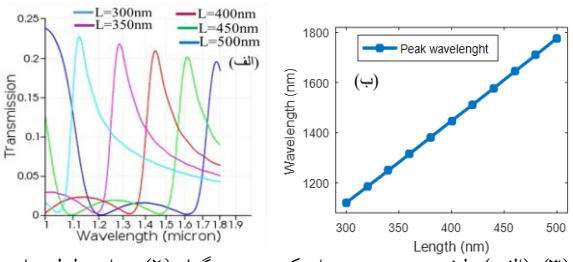
شکل (۱): طرح سیستم نوری شامل دو موجبر شیاردار MIM با یک کاواک کوپل شده از وسط و نمادهای پارامتر هندسی.

پروفایل میدان مغناطیسی برای این سیستم اپتیکی نیز بصورت شکل زیر است.



شکل (۲): پروفایل میدان مغناطیسی دو موجبر شیاردار با کاواک کوپل شده به آنها

شکل‌های (۳)، (۴) و (۵) طیف‌های عبور سیستم اپتیکی و وابستگی طول موج تشدید به طول کاواک کوپل شده به موجبرهای شیاردار را بترتیب برای درگاه‌های (۱)،(۲)و(۳) نشان می‌دهد.



شکل(۳): (الف) طیف عبور سیستم اپتیکی در درگاه (۲) برای طول‌های مختلف کاواک کوپل شده. (ب) وابستگی طول موج تشدید به طول کاواک.

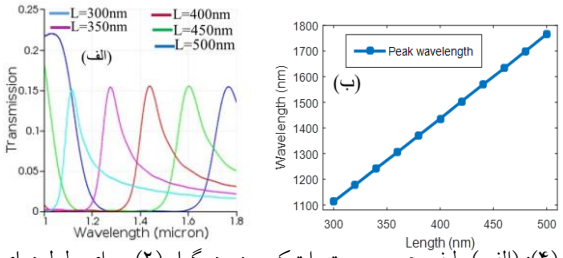
در شبیه‌سازی این سوئیچ‌ها پارامترهای داخل جدول۱ بعنوان پارامتر ثابت در نظرگرفته شده است.

جدول۱ : پارامترهای ثابت ساختار

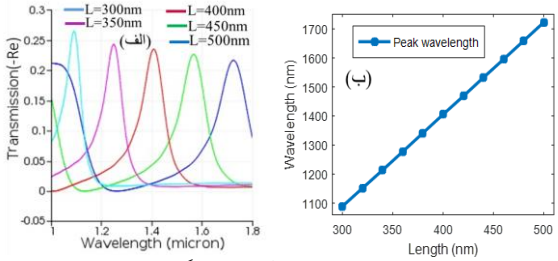
L(nm)	W(nm)	M(nm)	g(nm)	d(nm)
۴۰۰	۵۰	۵۰	۱۰	۲۰

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

همانطور که در شکل (۳-ب) میبینیم، مثلا به ازای تغییر طول کاواک از ۳۰۰ نانومتر تا ۳۲۰ نانومتر، قله طیف عبور سیستم اپتیکی از ۱۱۲۰ نانومتر تا ۱۱۸۵ نانومتر شیفت پیدا کرده است. بطور کلی با افزایش طول کاواک کوپل شده به موجبر شیاردار، طول موج پیک‌های منحنی سیستم اپتیکی روند افزایشی داشته است. این نتایج از شبیه سازی نشان می‌دهد که این سیستم اپتیکی قابلیت تنظیم با تغییر طول کاواک را دارد.

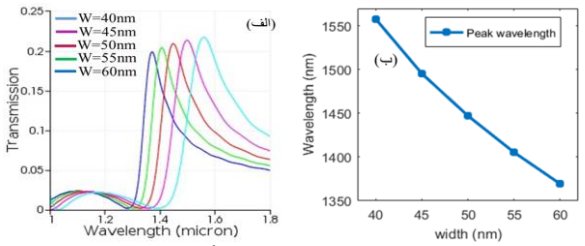


شکل(۴): (الف) طیف عبور سیستم اپتیکی در درگاه (۲) برای طول‌های مختلف کاواک کوپل شده. (ب) وابستگی طول موج تشدید به طول کاواک.

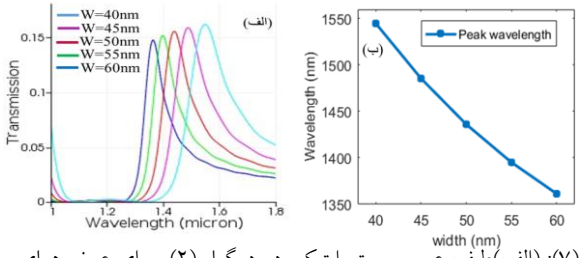


شکل(۵): (الف) طیف عبور سیستم اپتیکی در درگاه (۳) برای طول‌های مختلف کاواک کوپل شده. (ب)وابستگی طول موج تشدید به طول کاواک.

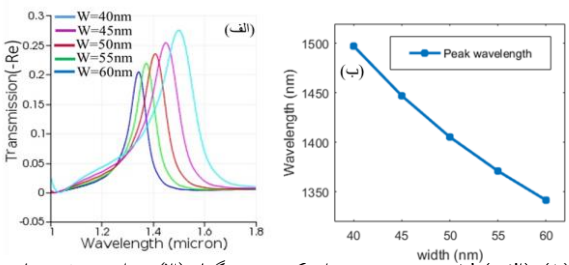
شکل‌های (۶)، (۷) و (۸) نیز طیف‌های عبور سیستم اپتیکی و وابستگی طول موج تشدید به عرض کاواک کوپل شده به موجبرهای شیاردار را بترتیب برای درگاه‌های (۱)،(۲)و(۳) نشان می‌دهد که با افزایش عرض کاواک طول موج پیک‌های منحنی سیستم اپتیکی روند کاهشی داشته است.



شکل(۶): (الف)طیف عبور سیستم اپتیکی در درگاه (۱) برای عرض‌های مختلف کاواک کوپل شده. (ب)وابستگی طول موج تشدید به عرض کاواک

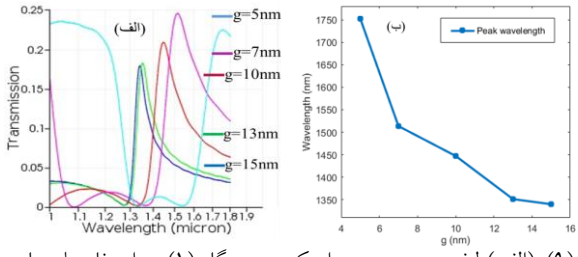


شکل(۷): (الف)طیف عبور سیستم اپتیکی در درگاه (۲) برای عرض‌های مختلف کاواک کوپل شده. (ب)وابستگی طول موج تشدید به عرض کاواک



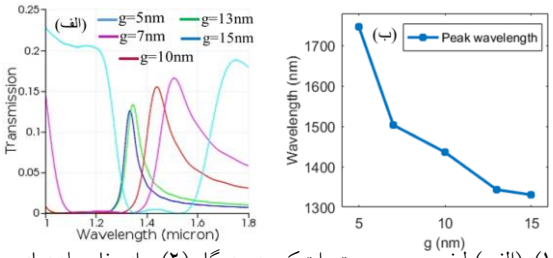
شکل(۸): (الف)طیف عبور سیستم اپتیکی در درگاه (۳) برای عرض‌های مختلف کاواک کوپل شده. (ب)وابستگی طول موج تشدید به عرض کاواک

با تغییرات پارامتر g، طیف عبور سیستم اپتیکی با شدت زیادی تغییرمی‌کند که میزان کوپلینگ بین کاواک و موجبر شیاردار توسط آن تنظیم می‌شود. تغییرات طیف عبور به ازای gهای مختلف در شکل‌های(۹)، (۱۰) و (۱۱) بترتیب برای درگاه‌های (۱)، (۲) و (۳) نمایش داده شده است. با افزایش فاصله بین موجبر و کاواک، کاواک و موجبر با شدت کمتری به هم کوپل می‌شود و طول موج منحنی ها نیز به طول موج های پایین‌تر کاهش می‌یابد.

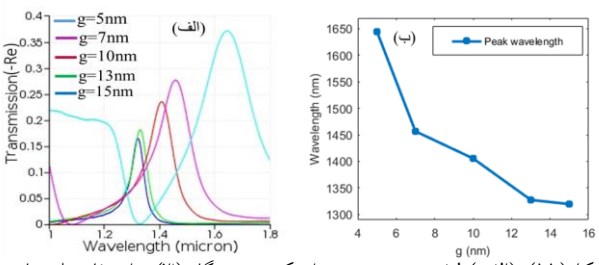


شکل(۹): (الف)طیف عبور سیستم اپتیکی در درگاه (۱) برای فاصله‌های مختلف بین موجبر و کاواک کوپل شده. (ب)وابستگی طول موج تشدید به فاصله بین موجبر و کاواک

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

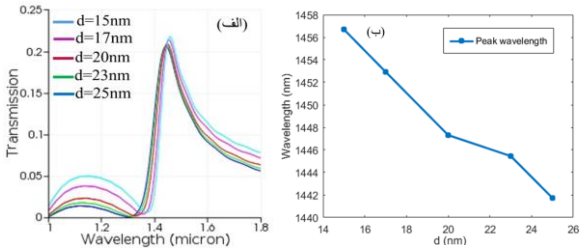


شکل(۱۰): (الف)طیف عبور سیستم اپتیکی در درگاه (۲) برای فاصله‌های مختلف بین موجبر و کاواک کوپل شده. (ب) وابستگی طول موج تشدید به فاصله بین موجبر و کاواک

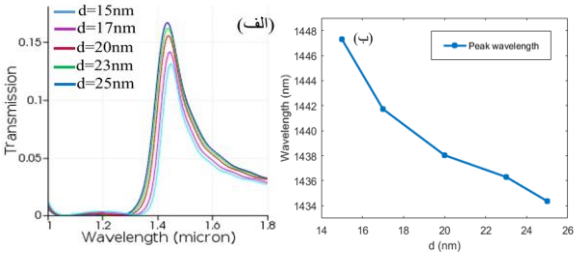


شکل(۱۱): (الف)طیف عبور سیستم اپتیکی در درگاه (۳) برای فاصله‌های مختلف بین موجبر و کاواک کوپل شده. (ب)وابستگی طول موج تشدید به فاصله بین موجبر و کاواک

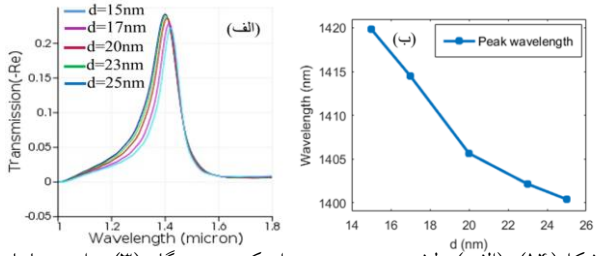
تغییرات طیف عبور به ازای dهای مختلف در شکل‌های(۱۲)، (۱۳) و (۱۴) نیز بترتیب برای درگاه‌های (۱)، (۲) و (۳) نمایش داده شده است که با زیاد شدن پهنای شیار موجبر، طول موج منحنی‌های نمودار کاهش می‌یابد.



شکل(۱۲): (الف) طیف عبور سیستم اپتیکی در درگاه (۱) برای پهناهای مختلف شیار موجبر. (ب)وابستگی طول موج تشدید به پهنای شیار موجبر



شکل(۱۳): (الف) طیف عبور سیستم اپتیکی در درگاه (۲) برای پهناهای مختلف شیار موجبر. (ب)وابستگی طول موج تشدید به پهنای شیار موجبر



شکل(۱۴): (الف) طیف عبور سیستم اپتیکی در درگاه (۳) برای پهناهای مختلف شیار موجبر. (ب)وابستگی طول موج تشدید به پهنای شیار موجبر

نتیجه گیری

در این پژوهش سیستم نوری پیشنهادی شامل دو موجبر شیاردار و یک کاواک کوپل شده به آنها طراحی و شبیه سازی شد و با بکارگیری و ترکیب تشدید فانو با موجبر MIM، تغییرات طیف عبور سیستم نوری را با تغییر دادن پارامترهای ساختار بررسی کردیم که به عبارتی عمل سوئیچینگ نوری (شیفت طول موج) انجام گرفت. تاثیر تنظیم سیگنال نوری توسط سیگنال نوری دیگر در این سیستم نوری با شبیه سازی عددی و روش FDTD با استفاده از نرم افزار لومریکال مورد بررسی قرارگرفت. این سوئیچ کاربردهای بالقوه ای در مقیاس نانو، پردازش سیگنال‌های اپتیکی، ارتباطات اپتیکی و مدارهای مجتمع تمام نوری دارد.

مرجع‌ها

[1] X.-S. Lin, J.-H. Yan, L.-J. Wu, and S. Lan, "High transmission contrast for single resonator based all-optical diodes with pump-assisting," *Opt. Express*, vol. 16, no. 25, pp. 20949-20954, 2008.

[2] W. L. Barnes, A. Dereux, and T. W. Ebbesen, "Surface plasmon subwavelength optics," *nature*, vol. 424, no. 6950, pp. 824-830, 2003.

[3] T. Xu, Y.-K. Wu, X. Luo, and L. J. Guo, "Plasmonic nanoresonators for high-resolution colour filtering and spectral imaging," *Nature communications*, vol. 1, no. 1, pp. 1-5, 2010.

[4] Z. Chen, X. Song, G. Duan, L. Wang, and L. Yu, "Multiple Fano resonances control in MIM side-coupled cavities systems," *IEEE Photonics Journal*, vol. 7, no. 3, pp. 1-10, 2015.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

اثر ناخالصی قلع بر روی خواص ساختاری و اپتیکی لایه فعال سلول خورشیدی پروسکایت

$CH_3NH_3Sn_{0.25}Pb_{0.75}I_3$

ملکان ، امید ؛ باقری محققی ، محمد مهدی؛ عادلی فرد ، مهدی

دانشکده فیزیک دانشگاه دامغان

چکیده

در این تحقیق، روش سنتز لایه های سلول آلی-معدنی پروسکایت با پیش ماده های یدید سرب(PbI_2) با ناخالصی۲۵٪ یدید قلع(SnI_2) و متیل آمونیوم یدید (CH_3NH_3I) ، خواص ساختاری، ویژگی های سطحی لایه ها و خواص اپتیکی بررسی شده است. ابتدا، محلول یدید سرب به همراه ناخالصی یدید قلع با حلال دی متیل فرمامید خشک(DMF) و محلول متیل آمونیوم یدید (CH_3NH_3I) با حلال ایزوپروپانول آماده شد و بعد از آماده سازی لایه ی یدید سرب و یدید قلع به روش اسپین کوتینگ با سرعت ۶۰۰۰ rpm و زمان ۵ s بر روی بستر دی اکسید تیتانیوم (TiO_2) لایه نشانی شد. در مرحله ی بعد با استفاده از روش غوطه وری، لایه ی متیل آمونیوم یدید لایه نشانی شده تا بلورهای پروسکایت ($CH_3NH_3Sn_{0.25}Pb_{0.75}I_3$) تشکیل شوند. یکی از مهمترین ویژگی های این پژوهش این است که تمام مراحل سنتز لایه ها در شرایط محیطی عادی انجام شده و در هر مرحله از آزمایش، از تمام لایه ها آنالیز ساختاری پراش پرتو ایکس (XRD) تهیه شده و تشکیل ساختار عادی نمونه ها تایید می شود. تصاویر میکروسکوپ الکترونی گرفته شده از لایه ی پروسکایت تشکیل ساختار عادی پروسکایت با نانو ساختار نانو را تایید می کند.

Effect of tin impurities on structural and optical properties of perovskite solar cell active layer $CH_3NH_3Sn_{0.25}Pb_{0.75}I_3$

Malekan, Omid[1]; Bagheri mohagheghi[1]; Adeli fard, Mehdi[1]

[1] Department of Physics, University of Damghan, Damghan

Abstract

In this study, synthesis of perovskite organic-inorganic cell layers with lead iodide (PbI_2) precursors 25% impurity of tin iodide (SnI_2) and methyl ammonium iodide (CH_3NH_3I), structural properties, surface properties and optical properties Been investigated. The lead iodide solution with tin iodide impurity with dry dimethylformamide (DMF) and methyl ammonium iodide (CH_3NH_3I) solution with isopropanol solvent were prepared. Then, after preparation of the lead iodide layer and the tin iodide layer, spin coating with 6000 rpm and 5 s time was applied to the bulk titanium dioxide(TiO_2) substrate. Next, by immersion, the methyl ammonium iodide layer is labeled to form perovskite ($CH_3NH_3Sn_{0.25}Pb_{0.75}I_3$) crystals. One of the most important features of this study is that all layers of synthesis are performed under normal environmental conditions and at each stage of the experiment, X-ray diffraction (XRD) structural analysis of all layers is performed to confirm the normal structure of the samples. Scanning electron microscopy images of the perovskite layer confirm the formation of the normal perovskite structure and are composed of nanoscale crystals at some points

مقدمه

آلودگی محیط زیست و بحران جهانی انرژی عواملی هستند که بشر را وادار به ا صلاحات بیشتر در زمینه ی تولید منابع انرژی می کند. تو سعه منابع تجدید پذیر انرژی می تواند جایگزین منا سب با شد. بدون شک در میان منابع انرژی طبیعی، تابش خورشید سهم بسیار بزرگی را اشـغال می کند بر خلاف منابع سـنتی انرژی مانند زغال سـنگ و سـوخت های دیگر خورشـید منبع انرژی ثابت و قابل اطمینان است.

در سلول های خور شیدی بر پایه ی سیلیکون و دیگر ترکیبات از نیمرسـاناهای غیر آلی بازده ی بالایی ۳۰٪ را فراهم می کنند اما کاربرد های گسـترده ی آن ها با محدودیت هایی از قبیل پرهزینه بودن همراه اسـت. سیسـتمهای فتوولتائیک(PV) بر پایه ی تبدیل انرژی خورشیدی به الکتریکی، پیچیده هستند و بسیاری از ترکیبات و فناوری های جدید از سـلول های خورشـیدی به وجود می آیند

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد

http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بنابراین توسعه ی فناوری های جدید و کارآمد علاقه ی صنعت و پیشرفت آن است[۲-۱].

سلول های خورشیدی لایه نازک در مقایسه با سلول های عادی سلیکونی خیلی کم هزینه تر هستند و هزینه ی کم یکی از پارامتر های اولیه و مهم در فرآیند تولید است به علاوه تولید سلول های قدیمی بر پایه ی لایه نازک سلیکون(Si) و ترکیبات نیمه رسانای غیر آلی نیاز مند خلاء و دمای بالا است و این باعث بالا رفتن هزینه ها تولید می شود[۳].

سلول های خورشیدی آلی، فناوری جدید در تولید هستند سلول های خورشیدی با مواد جاذب آلی-معدنی پروسکایت به خاطر ویژگی های منحصر به فرد از قبیل بازده بالا، امکان سنتز لایه ها با روش های مبتنی بر محلول در دمای پایین، هزینه پایین، انعطاف پذیری بالا و طول پخش بالای الکترون و حفره در نسل جدید از سلول های خورشیدی توجه پژوهشگران و دانشمندان را به خود جلب کرده اند. به همین منظور بررسی ویژگی های ساختاری، روش های سنتز لایه ی فعال این نوع از سلول های خورشیدی و افزودن ناخالصی به ترکیب ماده ی پروسکایت می تواند از اهمیت ویژه ای برخوردار باشد[۵-۴].

مواد مورد نیاز

شیشه ی لایه نشانی شده با اکسید رسانای فلزی(FTO)، TiO_2 برای لایه ی بلاک، پودر PbI_2 (Sigma-Aldrich, powder)، پودر(CH_3NH_3I)، پودر SnI_2 و حلال های دی متیل فرمامید(DMF) (sun lab group) و ایزوپروپانول (Merck sun lab group) spiro OMeTAD،Company) و آنالیز ساختاری لایه ها توسط دستگاه XRD (**D8 Advance** **Bruker** system with Ni filter using Cu Kα ($\lambda = ۰/۱۵۴۰۶\ nm$)) و میکروسکوپ الکترونی گسیل میدانی (FE-SEM) (TESCAN company, model: $MIRA_3$) صورت گرفته است.

روش ساخت سلول خورشیدی

بستر شیشه ی لایه نشانی شده با اکسید رسانای آلاییده با فلورین (FTO) به عنوان زیر لایه مورد استفاده قرار گرفت. سپس هر یک از زیر لایه ها در اندازه های مناسب برش داده شده و لایه ی FTO به روش شیمیایی (پودر روی و HCl) با توجه به طراحی مورد نیاز برداشته شده و شبکه بندی شد. این عمل به خاطر جدا سازی دو الکترود سلول انجام می شود. در مرحله ی بعد هر یک از زیر لایه ها به طور کامل و طی چند مرحله با آب دیونیزه، اتانول، استون و ایزو پروپانول تحت اولتراسونیک شسته شد تا تاثیر آلودگی روی زیر لایه ها به طور کامل از بین برود. در مرحله ی بعد پوشش تیتانیوم دی اکسید بلاک به عنوان لایه ی سد کننده ی حفره روی لایه ی FTO با روش چرخشی با سرعت ۴۰۰۰ دور بر دقیقه، به مدت ۳۰ ثانیه لایه نشانی شد. این لایه، مانع از بازگشت الکترون و باز ترکیب الکترون-حفره می شود. در ساخت این لایه، از تیتانیوم ایزوپروکسید به عنوان پیش ماده ی TiO_2، محلول دو مولار HCl و اتانول استفاده شد. سپس زیر لایه به مدت ۳۰ دقیقه در دمای ۱۰۰ درجه سانتی گراد خشک و سپس به مدت یک ساعت، تحت دمای ۵۰۰ درجه سانتی گراد پخت شد. در این پژوهش، برای لایه نشانی ($CH_3NH_3PbI_3$) بر روی لایه ی بلاک تیتانیوم دی اکساید از دو روش چرخشی و غوطه وری استفاده شده است.

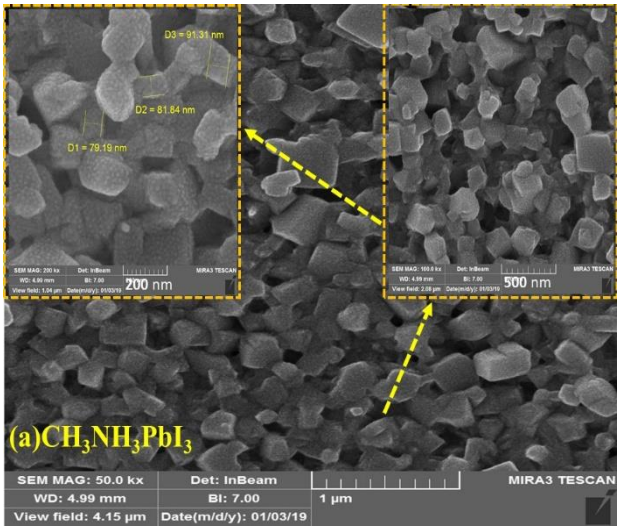
در مرحله اول محلولی از یدید سرب(PbI_2) به تنهایی و با ۲۵٪ ناخالصی یدید قلع ($Pb_{./۷۵}I_2 + Sn_{./۲۵}I_2$) با حلال DMF را به روش انباشت چرخشی در سرعت ۶۰۰۰ rpm و زمان ۵ s لایه نشانی شده. لایه ی تشکیل شده در دمای ۷۰ درجه ی سلسیوس به مدت ۳۰ دقیقه خشک شد.

در مرحله دوم از ۱۰ mg پودر متیل آمونیوم یدید در ۱ ml حلال ایزوپروپانول استفاده شد تا به روش غوطه وری ، لایه متیل آمونیوم یدید لایه نشانی شود. سپس، بعد از لایه نشانی متیل آمونیوم یدید، لایه را در حلال ایزوپروپانول شستشو داده و با استفاده از اسپین کوتینگ و در سرعت ۶۰۰۰ rpm و زمان ۵ s قرار می دهیم تا لایه یکنواخت تشکیل شود. همانطور که در شکل (۱) مشخص است لایه ها شکل یکنواخت و مناسب دارند.

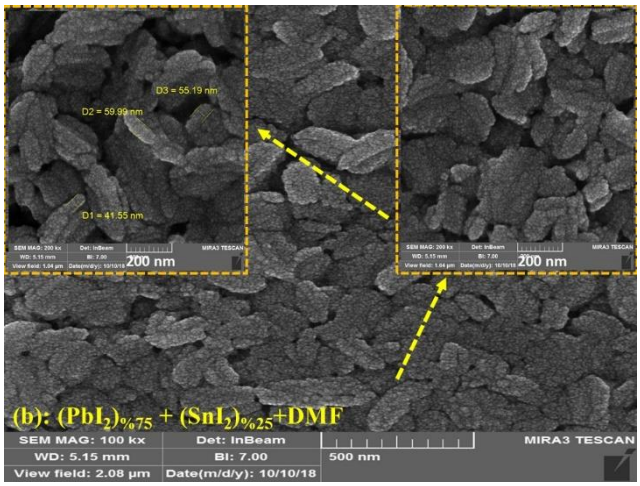
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مشخصه یابی

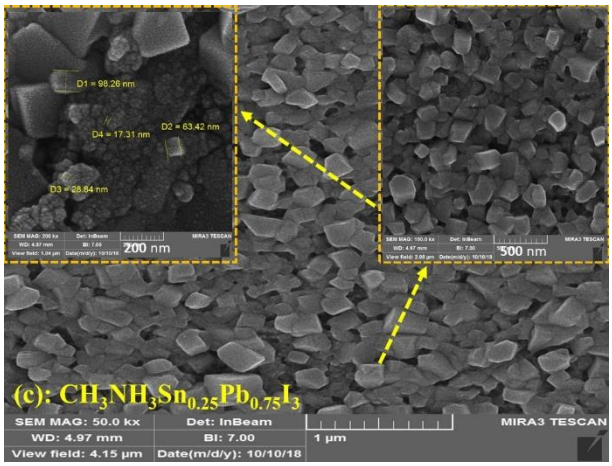
در هر مرحله از آزمایش، از هر لایه ، آنالیز پراش پرتو ایکس XRD گرفته شده است و از روی آنالیز مشخص است که ساختار لایه ها تشکیل شده است. شکل(۲) نتایج به دست آمده از آنالیز XRD برای لایه های پوشش داده شده را نشان می دهد. قله های پروسکایت مربوط به صفحات بلوری(۱۱۰) حدود ۲θ=۱۴ درجه، (۲۲۰) حدود ۲۸ $= 2\theta$ ، (۲۲۴) در حدود ۴۱ درجه و (۳۱۴) حدود ۴۳ درجه در پراش پرتو ایکس قابل تشخیص است و شکل گیری فاز را تایید می کند[۶]. با این حال قله های مربوط به PbI_2و MAI در نمونه ها دیده می شود که نشان دهنده ی عدم تکمیل واکنش تشکیل پروسکایت می باشد. لازم به ذکر است که تحقیقات اخیر نشان می دهد که وجود مقدار کمی PbI_2 باقیمانده (واکنش نداده) در ساختار پروسکایت می تواند نقش مثبتی در عملکرد سلول های استاندارد تک هالوژن و یا چند هالوژن داشته باشد. با استفاده از تصاویر میکروسکوپ الکترونی کیفیت سطحی لایه ها بررسی شد. همانطور که در تصاویر مشخص است لایه ی یدید سرب(PbI_2) ساختار منظم و شانه ای دارد و توده های مشاهده شده در تصویر به احتمال زیاد نشان دهنده ی تیتانیوم دی اکسید(TiO_2) می باشند. بعد از لایه نشانی یدید سرب روی بستر تیتانیوم دی اکسید(TiO_2) لایه ی متیل آمونیوم یدید به روش غوطه وری لایه نشانی شده و همانطور که در تصویر میکروسکوپ الکترونی(SEM) مشخص است بلور های پروسکایت به خوبی تشکیل شده اند و حالت یکنواخت و تقارن خود را به دست آورده اند. در برخی از نقاط که بلور ها تشکیل نشده اند می تواند ناشی از وجود نقاط خالی در لایه ی یدید سرب باشد[۷].



شکل (۱-a): تصویر میکروسکوپ الکترونی روبشی از سطح لایه فعال پروسکایت متیل آمونیوم سرب دیدید



شکل (۱-b): تصویر میکروسکوپ الکترونی روبشی از سطح سرب یدید با ۲۵٪



شکل (۱-c): تصویر میکروسکوپ الکترونی روبشی از سطح متیل آمونیوم سرب یدید با ۲۵٪ ناخالصی یدید قلع

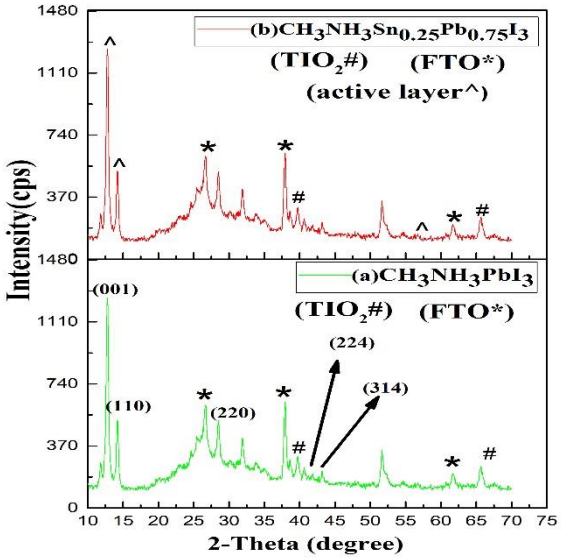
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

نتیجه گیری

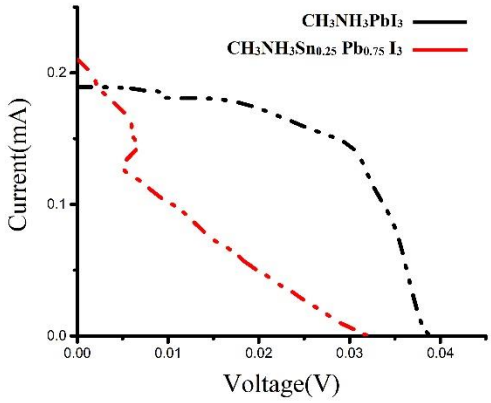
در این مقاله لایه ی جاذب پرو سکایت با پیش ماده ی یدید سرب در یک مرحله و در مرحله ی بعد افزودن ناخالصی ۲۵٪ یدید قلع به پیش ماده یدید سرب انجام شده و ساختار لایه پرو سکایت و خواص ساختاری و اپتیکی آن بررسی شد. در ضمن تمام مراحل لایه نشانی در مجاورت "محیط آزاد" انجام شده و از گلاو باکس استفاده نشده تا از نظر فرایند ساده و کاهش هزینه برای مصارف تجاری مفید باشد. در هر مرحله از آزمایش، از تمام لایه ها ، آنالیز ساختاری پراش پرتو ایکس (XRD) تهیه شد و تشکیل ساختار بلوری نمونه ها مطالعه شد. تصاویر میکروسکوپ الکترونی روبشی(SEM) گرفته شده از سطوح تشکیل ساختار عادی و حالت بلوری را تایید می کنند با مشاهده سطح لایه ها مشخص است با تغییر پیش ماده سطح پروسکایت حالت عادی خود را حفظ کرده و همچنان پتانسیل استفاده از آن در سلول های پروسکایت وجود دارد و می توان نتیجه گیری کرد با تغییر پیش ماده ی یدید سرب به ساختار مناسبی دست یافت تا به سمت موادی غیر سمی و با هزینه کمتر پیش رفت. با توجه به آنالیز نمودار جریان ولتاژ برای هر دو نمونه پارامتر های اپتیکی در جدول زیر آورده شده است در حالت کلی می توان نتیجه گیری کرد افزودن ناخالصی به پیش ماده ی یدید سرب می تواند بر عملکرد سلول تاثیر گذار باشد و این گامی رو به جلو برای استفاده از مواد غیر سمی می باشد.

Perovskite layer	I_{SC} (mA)	I_{mp} (mA)	V_{mp} (V)	V_{OC} (V)	FF	Eff (%)
$CH_3NH_3PbI_3$	0.35	0.22	0.11	0.180	38.5	2.4
$CH_3NH_3Sn_{0.25}Pb_{0.75}I_3$	0.032	0.012	0.092	0.21	0.16	5

جدول(۱): مشخصات اپتیکی سلول خورشیدی



شکل(۲): پراش پرتو ایکس(XRD) لایه های سلول.



شکل(۳): نمودار جریان – ولتاژ برای سلول خورشیدی

مرجع‌ها

[1] Kojima, A., Teshima, K., Shirai, Y. & Miyasaka, T. Organometal Halide Perovskites as Visible-Light Sensitizers for Photovoltaic Cells.Journal of the American Chemical Society 131, 6050–6051, https://doi.org/10.1021/ja809598r (2009).

[2] Highly efficient and stable inverted perovskite solar cell employing PEDOT:GO composite layer as a hole transport layer." Jae Choul Yu, Ji A Hong, Eui Dae Jung, Da Bin Kim, Soo-Min Baek, Sukbin Lee, Shinuk Cho, Sung Soo Park, Kyoung Jin Choi & Myoung Hoon Song " SCIENTIfIC REPOrts | *(2018) 8:1070* | DOI:10.1038/s41598-018-19612-7

[3]. Weber, D. CH3NH3PbX3, a Pb(II)-System with Cubic Perovskite Structure. Z. Naturforsch., B: J. Chem. Sci. 33, 1443–1445 (1978).

[4]. Kojima, A., Teshima, K., Shirai, Y. & Miyasaka, T. Organometal Halide Perovskites as Visible-Light Sensitizers for Photovoltaic Cells. J. Am. Chem. Soc. 131, 6050 (2009).

[5]. Kojima, A., Teshima, K., Shirai, Y. & Miyasaka, T. Organometal Halide

[6]. Etgar, L. et al. Mesoscopic $CH_3NH_3PbI_3/TiO_2$ Heterojunction Solar Cells. J. Am. Chem. Soc. 134, 17396–17399, doi:10.1021/ja307789s (2012).

[7]. Saparov, B. & Mitzi, D. B. Organic-Inorganic Perovskites: Structural Versatility for Functional Materials Design. Chem. Rev. 116, 4558–4596 (2016)

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

اثر نانوذرات هیدروکسید نیکل در جداسازی فلزات سنگین از آب آلوده آزمایشگاهی و واقعی

باقری، فتح‌اله؛ موسیوند، صبا*

گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه لرستان، خرم‌آباد، لرستان، ایران

**Corresponding author E-mail:Mosivand.S@lu.ac.ir*

چکیده

حذف آلاینده‌های فلزی کادمیوم و کبالت از آب آلوده آزمایشگاهی و آب واقعی با استفاده از نانوذرات هیدروکسید نیکل و تحت اعمال ولتاژهای مختلف به روش الکترواکسایش ورقه نیکل بررسی شد. نتایج جذب اتمی نشان داد که ۲۶/۷۷ درصد کادمیوم و ۱۱/۰۶ درصد کبالت از آب آلوده در ولتاژ ۲۶ ولت و نیز ۲/۲۵ درصد کادمیوم و ۱۳/۰۱ درصد کبالت در ولتاژ ۲۱/۵ ولت از آب آلوده زدوده شد. بررسی رسوب حاصل به وسیله XRD و EDX در تایید نتایج AAS، وجود عناصر کبالت و کادمیوم را در نمونه رسوب حاصل نشان داد. سپس با استفاده از ولتاژ ۲۶ ولت جداسازی عناصر کبالت و کادمیوم از آب آلوده واقعی رودخانه‌های خرم‌رود، سیمره و کشکان مورد بررسی قرار گرفت. طبق نتایج AAS مشخص شد که می‌توان حدود ۱۰۰ درصد کادمیوم موجود در آب رودخانه‌های کشکان و سیمره و ۹۹/۰۲ درصد کادمیوم و ۸۵/۸ درصد کبالت موجود در آب رودخانه خرم‌رود را زدود.

واژه‌های کلیدی: *نانوذرات هیدروکسید نیکل، الکتروکریستالیزاسیون، آب آلوده، کادمیوم، کبالت.*

The effect of nickel hydroxide nanoparticles in heavy metals removal from laboratory and real waste water

Bagheri, Fathollah; Mosivand, Saba*

[1]*Department of Physics, Faculty of Basic Science, Lorestan University, Khorram-Abad, Lorestan, Iran*

**Corresponding author E-mail: Mosivand.S@lu.ac.ir*

Abstract

The removal of cobalt and cadmium from laboratory and real polluted water has been investigated using nickel hydroxide nanoparticles prepared by electrooxidation of nickel sheet by applying different voltages. The results of atomic absorption (AAS) analysis showed that it is possible to remove 26.77% of cadmium and 11.06% of cobalt by applying 26 V and 2.25% of cadmium and 13.01% of cobalt by applying 21.5 V from laboratory polluted water. The prepared sludge were characterized using XRD and EDX analysis. The results approved the AAS results and showed the presence of cobalt and cadmium in the sludge samples. In order to remove cobalt and cadmium from Khorramrood, Kashkan and Seimareh rivers wastewater the voltage of 26 V were applied. The AAS results showed that it is possible to remove 100% of cadmium from Seimareh and Kashkan rivers and 99.02% of cadmium and 85.8% of cobalt from Khorramrood river.

PACS No.61

Keywords: Nanoparticles of nickel hydroxide, Electro- crystallization, Wastewater, Cadmium, Cobalt.

مقدمه

فناوری نانو یکی از مهم‌ترین حوزه‌های پیشرفت فناوری بشر را به خود اختصاص داده است و شاهد حضور آن در زمینه‌هایی چون نساجی، صنعت خودرو، علم پزشکی، بخش نظامی، محیط زیست و غیره هستیم. با توجه به کاربرد آن در تولید، انتقال، مصرف و ذخیره‌سازی انرژی و غیره، نیاز به روش‌هایی که امکان تولید نانوذرات و نانوساختارها را با ویژگی و خواص مدنظر تسریع بخشد، بیش از پیش احساس می‌شود. تحقیقات انجام شده نشان می‌دهد که نانو مواد در چرخه حیات و اکوسیستم، پایین‌ترین سطح سمیّت را برای موجودات زنده داشته و زیست‌سازگارند. از بین روش‌های مختلف موجود برای ساخت نانوساختارهای هیدروکسید فلزی، روش الکتروکریستالیزاسیون مبتنی بر فرایند

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

الکترواکسیداسیون یک روش مناسب به شمار می‌رود که از جمله مزایای آن در مقایسه با سایر روش‌ها می‌توان به انعطاف‌پذیری بالا در شرایط متعارفی، تمیزی سازوکار، سرعت بالای ساخت و کنترل مناسب اندازه ذرات با تنظیم عوامل مؤثر بر سیستم آزمایشگاهی اشاره کرد. از دیگر ویژگی‌های این روش می‌توان به محدود نبودن آن در مقیاس آزمایشگاهی و به‌کارگیری در تولید انبوه محصولات در مقیاس بزرگتر اشاره نمود که آن را به روشی مناسب و مقرون به صرفه برای تولیدات صنعتی تبدیل می‌نماید. از این‌رو دست‌اندرکاران و محققان علوم نانو در تلاش هستند تا با استفاده از این فناوری باعث ایجاد تغییرات شگرف در استفاده از منابع طبیعی، انرژی و آب شده و منجر به کاهش پساب و آلودگی شوند. زیرا امروزه آلودگی فلزات سنگین یکی از مهم‌ترین مشکلات محیط زیست در بسیاری از جوامع به شمار می‌رود. آلودگی‌های موجود در پساب‌های صنعتی با ورود به چرخه محیط زیست باعث آلوده شدن چرخه محیط زیست و به تبع آن آسیب زدن به سلامت موجودات زنده و انسان می‌گردد. انتظار می‌رود که فناوری نانو نیاز بشر را به مواد کمیاب کمتر کرده و با کاستن آلاینده‌ها، محیط زیستی سالم‌تر را فراهم کند. در چند دهه گذشته، به دلیل جذابیت، کاربرد و اهمیت نانوذرات، تاکنون پژوهش‌گران زیادی تحقیقات خود را در این زمینه متمرکز نموده‌اند [۱-۳].

پژوهش حاضر به حذف آلاینده‌های فلزی کبالت و کادمیوم موجود در آب آلوده با کمک نانوساختارهای هیدروکسید نیکل تهیه شده به روش الکتروکریستالیزاسیون می‌پردازد.

روش‌های تجربی

در این مطالعه، از دو ورقه نیکل به‌عنوان الکترودهای آند و کاتد استفاده شد. آب آلوده به عنوان محلول الکترولیت عمل می‌کند که از طریق حل کردن مقادیر معین از پودرهای نیترات کادمیوم با فرمول شیمیایی $Cd(NO_3)_2.4H_2O$، سولفات کبالت با فرمول شیمیایی $CoSO_4.7H_2O$ و پودر سولفات سدیم با فرمول شیمیایی Na_2SO_4 (به‌منظور رسانش محلول الکترولیت) در ۲۰۰ میلی‌لیتر آب مقطر تهیه شد. محلول الکترولیت دارای غلظت ۱۰۰ppm از هردو عنصر کبالت و کادمیوم و نیز غلظت ۱۰۰ میلی‌مولار سولفات سدیم می‌باشد. پس از اعمال اختلاف پتانسیل‌های مختلف از ۸ ولت تا ۲۶ ولت بین صفحات آند و کاتد، نانوساختارهای هیدروکسید نیکل با اکسید شدن آند و کاهش آب در سطح کاتد، تولید می‌شوند و عناصر کبالت و کادمیوم موجود در محلول الکترولیت را به خود جذب کرده و در ته سلول الکتروشیمیایی ته‌نشین می‌شوند. در ابتدای آزمایش محلول به رنگ صورتی روشن مشاهده گردید. پس از اینکه ولتاژهای ۸ ولت، ۱۲٫۵ ولت، ۱۷ ولت، ۲۱٫۵ ولت و ۲۶ ولت هر یک به مدت ۳۰ دقیقه به سیستم الکتروشیمیایی اعمال شد، رسوب سبزرنگی در محلول تشکیل گردید. در نهایت جریان الکتریکی قطع و الکترودها به آرامی از درون محلول الکترولیت بیرون کشیده شدند. سپس روی ظرف واکنش با استفاده از فویل آلومینیومی پوشانده شد تا تبخیر سطحی باعث ایجاد خطا در میزان غلظت‌های کبالت و کادمیوم نگردد. پس از گذشت مدت زمان چهار روز از ته‌نشین شدن رسوب، آب روی آن با دقت جدا شد تا غلظت هر کدام از عناصر کبالت و کادمیوم موجود در آن اندازه‌گیری شود.

در قسمت دیگری از پژوهش حاضر، آب رودخانه‌های سیمره، کشکان و خرم رود در استان لرستان از نظر وجود و میزان آلاینده‌های کبالت و کادمیوم با استفاده از دستگاه جذب اتمی مورد بررسی قرار گرفت. پس از حصول اطمینان از وجود عناصر کبالت و کادمیوم در آب این رودخانه‌ها، بار دیگر سلول الکترواکسیداسیون محتوی آب آلوده این رودخانه‌ها به عنوان الکترولیت به کار گرفته شد. پس از انجام آزمایشات غلظت آلاینده‌ها با دستگاه جذب اتمی مورد بررسی قرار گرفت.

غلظت عناصر کبالت و کادمیوم با کمک دستگاه جذب اتمی (AAS) مدل A240FS مشخص شد. رسوب حاصل نیز پس از خشک شدن در دمای اتاق توسط دستگاه‌های پراش اشعه ایکس XRD مدل X' Pert pro و آنالیز SEM/EDX مدل MIRA3-LMU مورد تجزیه و تحلیل قرار گرفت.

نتایج و بحث

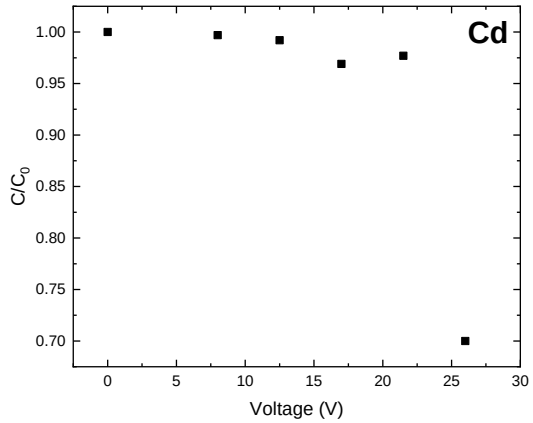
نتایج AAS

شکل‌های ۱ و ۲ به ترتیب نسبت C/C_0 را نسبت به ولتاژ اعمال شده به سلول حاوی کادمیوم و کبالت نشان می‌دهند که در

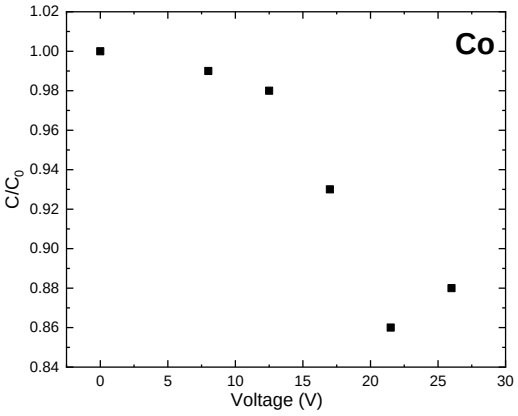
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

آن C_0 غلظت آلاینده‌ها در آب قبل از انجام آزمایش و C غلظت آلاینده‌ها در آب بعد از انجام آزمایش می‌باشد. نتایج حاصل از این بررسی نشان می‌دهد که ۲۶٫۷۷ درصد کادمیوم و ۱۱٫۰۶ درصد کبالت از آب آلوده تحت ولتاژ ۲۶ ولت و ۲٫۲۵ درصد کادمیوم و ۱۳٫۰۱ درصد کبالت تحت ولتاژ ۲۱٫۵ ولت زدوده شده است. با توجه به نمودارها مشخص است که با افزایش ولتاژ غلظت عناصر کبالت و کادمیوم در آب آلوده کاهش یافته است. چون با افزایش ولتاژ سرعت انجام واکنش‌ها بیشتر می‌شود لذا رسوب بیشتری تولید می‌شود که می‌تواند آلاینده‌های بیشتری را جذب کند. از طرفی همان‌طور که در شکل ۲ مشاهده می‌شود، غلظت کبالت در ولتاژ ۲۶ ولت به علت پدیده واجذب مجدداً افزایش یافته است. یعنی تحت ولتاژ بالا مقداری از آلاینده کبالت از سطح نانوذرات جدا شده و دوباره به آب برمی‌گردد و همین امر موجب بالا رفتن غلظت آلاینده در آب می‌شود. بر این مبنا، دو ولتاژ ۲۶ و ۲۱٫۵ ولت به‌عنوان ولتاژهای مناسب برای حذف آلاینده‌های رودخانه-های کشکان، خرم‌رود و سیمره در استان لرستان انتخاب شدند.

نتایج جذب اتمی نشان داد بیشترین میزان حذف که مربوط به کادمیوم موجود در آب رودخانه‌های کشکان و سیمره می‌باشد، حدوداً ۱۰۰ درصد است. طبق نتایج جذب اتمی آب هر دوی این رودخانه‌ها عاری از عنصر کبالت می‌باشد، اما در آب رودخانه خرم‌رود هر دو عنصر کبالت و کادمیوم موجود می‌باشد. با اعمال ولتاژ ۲۶ ولت ۹۹٫۰۲ درصد کادمیوم و ۸۵٫۸ درصد کبالت از آب رودخانه خرم‌رود زدوده شد که این نشان‌دهنده موفقیت‌آمیز بودن روش الکتروکریستالیزاسیون در فرآیند حذف آلاینده‌ها از آب آلوده می‌باشد. با توجه به نتایج دریافتیم که در آب آلوده رودخانه‌های سیمره، کشکان و خرم‌رود نسبت به آب آلوده آزمایشگاهی، حذف میزان بیشتری از آلاینده‌ها صورت گرفته است که دلیل این امر به علت اختلاف در pH آب‌ها می‌باشد. میزان pH آب رودخانه‌های سیمره، کشکان و خرم‌رود به ترتیب برابر است با ۷٫۵۳، ۷٫۹۹ و ۷٫۹۱ و pH آب آلوده آزمایشگاهی ۵/۷۲ می‌باشد. بنابراین دلیل کاهش جذب در آب آلوده آزمایشگاهی، پایین بوده pH آن در مقایسه با آب رودخانه‌ها است. هرچه pH آب کمتر باشد حذف کبالت و کادمیوم نیز کمتر است [٤و٥].



شکل ۱: غلظت کادمیوم موجود در آب بر حسب ولتاژ.



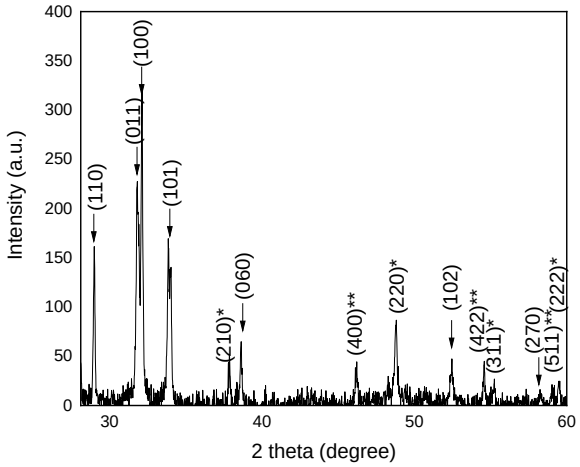
شکل ۲: غلظت کبالت موجود در آب بر حسب ولتاژ.

نتایج XRD و EDX

ماهیت ساختاری رسوب حاصل با استفاده از دستگاه پراش اشعه ایکس مورد بررسی قرار گرفت. بررسی‌های جذب اتمی نشان داد بهترین ولتاژهایی که در آن بیشترین جذب صورت گرفته است، ولتاژهای ۲۶ ولت برای کادمیوم و ۲۱٫۵ ولت برای کبالت می‌باشد و از آن‌جایی که میزان حذف کبالت در ولتاژ ۲۱٫۵ ولت اختلاف زیادی با ولتاژ ۲۶ ولت ندارد، لذا رسوب مربوط به ولتاژ ۲۶ ولت مورد بررسی ساختاری قرار گرفت. الگوی XRD مربوط به این رسوب در شکل ۳ رسم شده است. این الگو با الگوی کارت‌های مرجع به شماره‌های (۰۰-۰۰۱-۱۰٤۷)، (۰۰-۰۳۹-۱۲۲۱)، (۰۰-۰۲۷-۰۹۵٦)، (۰۰-۰۲۷-۰۳٤۰)، (۰۰-۰٤۰-۱۱۷۹) و (۰۰-۰۰۲-۱۰۷۹) مقایسه شد. طبق این بررسی در ساختار این رسوب علاوه بر نانوساختارهای هیدروکسید نیکل و اکسید هیدروکسید نیکل، نانوساختارهای کبالت اکسید با فرمول شیمیایی Co_3O_4 و کادمیوم اکسید با فرمول CdO_2 نیز وجود دارد. وجود

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

ساختارهای متشکل از کبالت و کادمیوم نشان می‌دهد که نانوذرات هیدروکسید نیکل به خوبی موفق شدند که آلاینده‌ها را تا حدودی از آب جداسازی کنند. پیک‌های مربوط به ساختارهای متشکل از نیکل با علامت پیکان اندیس‌گذاری شده‌اند. پیک‌هایی که با علامت یک ستاره (*) مشخص شده‌اند مربوط به ساختار کادمیوم اکسید و پیک‌ها مشخص شده با علامت دو ستاره (**) مربوط به ساختار کبالت اکسید می‌باشند.

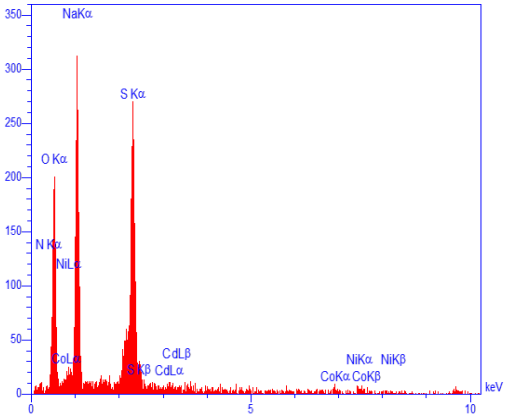


شکل ۳: الگوی یک نمونه‌ی نوعی از رسوب حاصل از اعمال ولتاژ ۲۶ ولت بعد از حذف کبالت و کادمیوم.

رسوب مربوط به نمونه تهیه شده تحت ولتاژ ۲۶ ولت پس از حذف کبالت و کادمیوم با استفاده از آنالیز EDX مورد ارزیابی قرار گرفت (شکل ٤). نتایج این آنالیز وجود عناصر Ni (نیکل)، Co (کبالت)، Cd (کادمیوم)، Na (سدیم)، N (نیتروژن)، O (اکسیژن) و S (گوگرد) را در رسوب حاصل نشان داد. نیکل، هیدروژن و اکسیژن مربوط به نانوساختارهای هیدروکسید نیکل و اکسید هیدروکسید نیکل می‌باشند. وجود کبالت و کادمیوم در رسوب نیز نشان‌دهنده جذب این عناصر به وسیله نانوذرات هیدروکسید است و نیتروژن نیز به علت استفاده از نیترات کادمیوم در محلول الکترولیت در ساختار رسوب مشاهده شد. سایر عناصر موجود نیز مربوط به سولفات سدیم است که به منظور ایجاد رسانایی در محلول الکترولیت مورد استفاده قرار گرفت.

نتیجه‌گیری

در این پژوهش به‌وسیله نانوذرات هیدروکسید نیکل حاصل از الکترواکسایش نیکل با اعمال ولتاژهای مختلف از ۸ تا ۲۶ ولت در زمان ۳۰ دقیقه عناصر کبالت و کادمیوم موجود در آب آلوده حذف شد. نتایج AAS نشان داد که ۲۶٫۷۷ کادمیوم و ۱۱٫۰۶ درصد کبالت در ولتاژ ۲۶ ولت و نیز ۲٫۲۵ درصد کادمیوم و ۱۳٫۰۱ درصد کبالت در ولتاژ ۲۱٫۵ ولت از آب آلوده آزمایشگاهی زدوده شد. سپس حذف آلاینده‌ها از آب رودخانه‌های کشکان، سیمره و خرم‌رود نیز در شرایط بهینه به دست آمده از بررسی‌های آب آلوده آزمایشگاهی مورد ارزیابی قرار گرفت. نتایج این بررسی نشان داد که روش الکترواکسیداسیون موفق به حذف حدود ۱۰۰درصد کادمیوم موجود در آب رودخانه‌های کشکان و سیمره و نیز حذف ۹۹٫۰۲ درصد کادمیوم و ۸۵٫۸ درصد کبالت موجود در آب رودخانه خرم‌رود می‌شود. آنالیز رسوب حاصل از فرآیند حذف آلاینده‌ها گواه جداسازی این عناصر از آب آلوده می‌باشد.



شکل ٤: طیف EDX رسوب تهیه شده در ولتاژ ۲۶ ولت.

مراجع

[۱] I. Kazeminezhad and S. Mosivand; "Elimination of copper and nickel from wastewater by electrooxidation method"; *Journal of Magnetism and Magnetic Materials;* **422** (2017) 84-92.

[۲] S. Mosivand and I. Kazeminezhad and Sh. Pirifathabad; "Easy, fast, and efficient removal of heavy metals from laboratory and real waste water using electrocrystalized iron nanostructures"; *Microchemical journal*, **146** (2019) 534-543.

[۳] S. Mosivand, Lorena M. A. Monzon, I. Kazeminezhad, A. Kumar, J. Michael D. Coey; "Pulsed electrochemical and electroless techniques for efficient removal of Sb and Pb from water"; *Environ. Sci.: Water Res. Technol.*, **4,** (2018), 2179-2190.

[۴] Sh. Pirifathabad; S. Mosivand and I. Kazeminezhad; "Synthesis and Characterization of Electro-Crystallized Alumina Nanoparticles and Investigation of Their Application in Removal of Cobalt and Cadmium from Seimareh and Karoon Rivers in Iran"; *Journal of Electronic Materials*, **47(12)**, (2018) 7034-7052.

[۵] S.Z. Shahanshahi; S. Mosivand, "Electro-crystallized SnO_2 nanoparticles for river-water heavy-metal ion pollutant removal process"; *Applied Physics A*, **125(9)**, (2019) 652.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

روش تجزیه آدومیان برای حل معادلات (شبه)اسکالر در فضای AdS_4 و جواب‌های مرزی دوگان در نظریه‌های میدان چرن- سایمون- ماده

محمد نقدی

گروه فیزیک ، دانشکده علوم پایه ، دانشگاه ایلام ، ایلام

چکیده

برای یک معادله اسکالر در فضای آنتی دوسیته اقلیدسی ٤- بعدی، ناشی از تقلیل ابرگرانش ۱۱- بعدی روی $AdS_4 \times CP^3 \ltimes S^1/Z_k$ همراه با شار، در زمینه پادغشاءهای M2 ، که برای تقریب کاوشی معتبر است و مدهای (شبه)اسکالر با جرم‌های مختلف را در بردارد، برای چند مد خاص $m^2 = 4, 0, -9/4$ ، از روش-های تقریبی و بویژه روش تجزیه آدومیان، برای یافتن جواب‌های جالب توجه فیزیکی معادلات دیفرانسیل جزئی غیرخطی مرتبه دوم مربوطه، در مراتب بالای اختلال و بصورت بسط سری مناسب برای تحلیل‌های نزدیک مرز نظریه میدان ۳- بعدی دوگان، بهره‌برداری می‌نماییم؛ و البته، برای آن منظور از رفتار نزدیک مرز یک جواب خاص و نیز جوابی کلی، متناسب برای شرط مرزی دیریکله با تمرکز بر مدهای هنجارش پذیر، بعنوان داده‌های اولیه استفاده می‌شود. به سبب اینکه جواب-های حجمی تمام ابرتقارن‌ها و پاریته را نیز می‌شکنند، با تبدیل بین سه نمایش بنیادی $SO(8)$ برای گراویتینو، (شبه)اسکالرها و عملگرهای $SU(4) \times U(1)$- تکتایه دوگان جدید مختلفی را در نظریه میدان چرن- سایمون- ماده مرزی از نوع ساخته شده توسط آهارونی- برگمن- جفریز و مالداسنا، مرکب از یک اسکالر، فرمیون و میدان‌های پیمانه‌ای $SU(N)$ می‌سازیم و پس با تغییرشکل کنش‌ها و حل معادلات مربوطه با آنها، جواب‌های $SO(4)$ ناوردای جدیدی، که اغلب از نوع اینستنتون-های (کوچک) روی یک سه-کره با شعاع در بینهایت هستند، را بدست می‌آوریم. در نهایت، دوگانی حالت- عملگر را نیز در قالب تناظر AdS_4/CFT_3 ، برای تمام جواب‌های مرزی و حجمی که ارائه نموده‌ایم، تایید می‌نماییم.

Adomian Method to Solve (pseudo)Scalar Equations in AdS_4 Space and Dual Boundary Solutions in Chern-Simon-Matter Theories

Naghdi, Mohammad

Department of Physics, Faculty of Basic Sciences, University of Ilam, Ilam

Abstract

For a scalar equation in 4-dimensional Euclidean Anti-de Sitter space, coming from a reduction of 11-dimensional supergravity over $AdS_4 \times CP^3 \ltimes S^1/Z_k$ with flux in anti-M2-branes background, which is valid in probe approximation and includes (pseudo)scalars with various masses, we apply special approximate methods and in particular the Adomian decomposition method, to find physically interesting solutions for the associated second-order nonlinear partial differential equations for the modes of $m^2 = 4, 0, -9/4$, in higher-orders of perturbation and as series expansions appropriate for near the boundary analyzes of dual 3-dimensional field theories; and of course, to do that, we make use of near the boundary behavior of a special and a general solution, with Dirichlet boundary condition and focusing on normalizable modes, as initial data. On the other hand, because the bulk solutions break all supersymmetries and parity as well, by swapping the three fundamental representations of $SO(8)$ for gravitino, we build $SU(4) \times U(1)$-singlet (pseudo)scalars and dual operators in Aharony-Bergman-Jafferis-Maldacena (ABJM)-like Chern-Simon-matter theories, composed of a scalar, fermion and $SU(N)$ gauge fields; and then, by deforming the corresponding actions with the operators and solving the resulting equations, we get new $SO(4)$ invariant solutions, which often are of the (small) instanton type on a three-sphere with radius at infinity. Finally, we confirm the state-operator duality in context of AdS_4/CFT_3 correspondence for all the boundary and bulk solutions that we have presented.

PACS No. 10, 11, 12, 2

مقدمه

دوگانی یا تناظر بین نظریه‌های گرانشی (حجمی) در فضای آنتی-دوسیته و نظریه‌های میدان پیمانه‌ای (مرزی) در یک بعد پایین‌تر، موفقیت‌های شایانی در توصیف پدیده‌های مختلف فیزیک از ذرات بنیادی تا ماده چگال و کیهانشناسی به ارمغان آورده است؛ از این نظر که با مطالعه پدیده‌های در یک طرف دوگانی- اغلب طرف گرانشی

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد

http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

که ساده‌تر است- می‌توان برای پدیده‌های در طرف دیگر، پیش‌بینی-هایی ارائه نمود. در این میان موجودات جالب توجه فیزیکی مانند تک‌قطبی، دیوار قلمرو و بویژه اینستنتون‌ها- بعنوان جواب‌های معادلات حرکت اقلیدسی با کنش‌های متناهی و غیرصفر- بعلت مشخصه‌های غیراختلالی، تونل‌زنی بین خلاءهای مختلف (برای نمونه در کیهانشناسی‌های جهان اولیه که اسکالرهای منتجه می‌توانند نقش اینفلیتون را بازی کنند)، تصحیحات غیراختلالی به کنش‌ها و سنجش ساختاری تناظر $\mathrm{AdS_{d+1}/CFT_d}$ نیز اهمیت دارند.

ما نیز در مطالعات اخیر- برای نمونه [1] و [2] را ببینید- از تقلیل ابرگرانش ۱۱- بعدی روی فضای $AdS_4\times S^7/Z_k$ ، معادلات اسکالری در حجم فضای آنتی‌دوسیته ٤- بعدی اقلیدسی ($\mathrm{E}AdS_4$) را بدست آوردیم؛ و بویژه در آنها جواب‌های اینستنتونی را یافتیم. در اینجا [3] نیز، ما از روش تجزیه آدومیان (ADM) [4] که یک روش نیمه- تحلیلی شناخته شده برای حل معادلات دیفرانسیل غیرخطی است، محتملا برای اولین‌بار در فضای $\mathrm{E}AdS_4$ و در قالب این تناظر استفاده می‌نماییم. در واقع، با شار ۷- فرم قدرت- میدان زیر:

$$G_7 = R^7\, f_1\, \mathcal{E}_4\wedge J\wedge e_7 + R^5\ *_4\, df_2\wedge J^2 + R^7\, f_3\, J^3\wedge e_7, \qquad (۱)$$

که در آن $R=2R_{Ads}$ شعاع انحنای فضای آنتی‌دوسیته، $\mathcal{E}_4$ فرم حجمی واحد، J فرم کیلر روی CP^3 ، e_7 ویلبین هفتم فضای داخلی و $f_1,\ f_2=f,\ f_3$ توابع اسکالر در حجم هستند، از حل معادلات مربوطه، معادله اسکالر زیر را بدست می‌آوریم:

$$\square_4 f - m^2\, f + \delta\, f^2 - \lambda\, f^3 + F = 0, \qquad (۲)$$

که در آن $m^2=(1\pm 3\,C_1+288\,C_2^2)$ ، $\delta=144\,C_2$ ، $\lambda=24$ و $F=2(C_2\pm 3\,C_2\,C_1+96\,C_2^3)$ است، با C_1 و C_2 بعنوان ثابت-های حقیقی و $R_{Ads}=1$ ؛ و اینکه علامت بالایی $\pm$ در جملات شامل C_1 نشانگر زمینه اصلی پس از چرخش ویک و علامت پایینی برای حالت skew-whiffed (SW) می‌باشد. جالب این است که این معادله در زمینه SW ، همگن و (شبه)اسکالرها نیز با جرم‌های مربعی مثبت $m^2=-2\,(1-3\,C_1)$ ، هیگز-گونه می‌شوند؛ و در نتیجه پتانسیل مربوطه شکست خودبخود تقارن (SSB) را مجاز می‌دارد [3].

یک روش کلی حل معادله حجمی برای مدهای جرم‌دار:

با لاپلاسین $\square_4 f=\frac{u^2}{R_{Ads}^2}\left(\partial_i\partial_i+\partial_u\partial_u-\frac{2}{u}\partial_u\right)f$ و مختصات پوانکاره $ds^2_{EAdS_4}=\frac{R^2_{Ads}}{u^2}(du^2+dx^2+dy^2+dz^2)$ ، طبق دیدگاه گروه- لی (*Lie-group approach*) برای حل معادله (۲) پس از SSB ، باتوجه به اینکه مولد گروه $X=u\,\partial_u+r\,\partial_r$ است که متناظر با یک گسترش یکنواخت مختصات است و ناورداها $I_1=u\,r^{-1}$ و $I_2=f$ هستند، با درنظرگرفتن $I_2=\mathcal{F}(I_1)$ که به معنای $f(u,r)=\mathcal{F}(\xi),\ \ \xi=u/r$ است، معادله‌ای غیرخطی برحسب متغیر ξ برای تابع $\mathcal{F}(\xi)$ حاصل می‌شود [3] که جواب‌های قسمت خطی آن برحسب توابع فوق هندسی (گاوس) و جواب اختلالی کلی آن نیز برحسب توابع گاوس تعمیم‌یافته خواهد بود. در نهایت، یک جواب ساده شده آن نزدیک مرز ($u=0$) در مرتبه اول اختلال، با این توجه که $f^{(n)}=\sum_{n=0}^{n} f_n$ (همچنین توجه شود که $\vec{u}=(x,y,z)$ ، $r=|\vec{u}|$ و قسمت‌های زاویه‌ای لاپلاسین را برای سادگی کنار می‌گذاریم) عبارتست از:

$$f^{(1)}(u,r)=\left[\hat{C}_{\Delta_+}+\check{C}_{\Delta_+}\ln(\frac{r}{u})\right]\left(\frac{u}{r}\right)^{\Delta_+}\approx\hat{\beta}\,u^{\Delta_+}, \qquad (۳)$$

که تنها قسمت هنجارش‌پذیر، متناسب با شرایط مرزی دیریکله، را نگه داشته‌ایم، $\hat{C}_{\Delta_+}$ و $\check{C}_{\Delta_+}$ ثابت‌های متناسب با هم هستند و Δ_+ ریشه بزرگتر معادله $m^2R^2_{AdS}=\Delta(\Delta-3)$ در AdS_4 است.

فرایند کلی حل معادله حجمی با روش تجزیه آدومیان:

چون هدف در اینجا داشتن یک جواب نزدیک مرز است و معادله (۲) نیز از مرتبه دوم است، با نوشتن $f_0(0,r)=f(0,r)+u\,f_u(0,r)$ بعنوان جواب اولیه، در اینجا از شرط یا داده اولیه

$$f(0,r)=f(r)\,u^{\Delta_+} \qquad (٤)$$

در ADM استفاده می‌کنیم. از طرفی دیگر، برای قسمت خطی معادله (۲) بصورت $\square_4 f_0-m^2\,f_0=0$ ، از جواب دقیق

$$f_0(u,\vec{u})=\bar{C}_{\Delta_+}\left(\frac{u}{u^2+(\vec{u}-\vec{u}_0)^2}\right)^{\Delta_+}, \qquad (۵)$$

که در آن $\vec{u}_0=(b_1,b_2,b_3)$ ، $\bar{C}_{\Delta_+}=\frac{\Gamma(\Delta_+)}{\pi^{3/2}\,\Gamma(\nu)}$ و b_j ها بعنوان مدول‌های جواب که مشخص‌کننده مکان اینستنتون روی مرز هستند، استفاده می‌نماییم. سپس، برای انجام فرآیند تکرار در ADM و بدست آوردن جواب‌های اختلالی در مراتب بالاتر، می‌نویسیم:

$$\square_4 f_{n+1}-m^2\,f_{n+1}=\sum_{n=0}^{\infty}A_n\,, \qquad (٦)$$

که در آن چندجمله ای‌های آدومیان A_n [3] برای معادله (۲)، با کنار گذاشتن جمله ناهمگن F که صرفا یک ثابت غیردینامیکی را به جواب اضافه می‌کند، بدون و با جمله δ ، بترتیب می‌شوند:

$$A_0=\lambda\,f_0^3,\ \ A_1=3\,\lambda\,f_0^2\,f_1,\dots\,, \qquad (۷)$$

$$A_0=\lambda\,f_0^3-\delta\,f_0^2,\quad A_1=3\,\lambda\,f_0^2\,f_1-2\,\delta\,f_0^2\,f_1,\dots\,. \qquad (۸)$$

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

جوابی برای معادله با $m^2=4$ با ADM : معادله مربوط به چنین مدی از نسخه SW (۲) با $C_1=1$ ، بصورت $\square_4 f-4f+12\sqrt{3}f^2-24f^3=0$ است که با استفاده از شرط اولیه (٤) با $\Delta_+=4$ و چندجمله‌ای‌های آدومیان (۸)، یک جواب نزدیک مرز آن در مرتبه دوم فرآیند تکرار در (٦) می‌شود:

$$f^{(2)}(u,r)=3\,f(r)u^4+O(u^6); \qquad (۹)$$

و البته می‌توان از (۵) نیز تابع $f(r)=\bar{C}_4/r^8$ را در آن قرار داد.

جوابی برای معادله با $m^2=0$ با ADM : چنین مدی را می‌توان با $C_1=1$ و $C_2=1/12$ در نسخه SW (۲) بصورت $\square_4 f+12\,f^2-24\,f^3=2/9$ محقق کرد که با شرط اولیه از (۵) با $\Delta_+=3$ ، یک جواب مرتبه اول آن نزدیک مرز می‌شود [3]:

$$f^{(1)}(u,r)\approx\bar{C}_3[1-2\ln(u)]\left(\frac{u}{r^2}\right)^3. \qquad (۱۰)$$

جوابی برای معادله با $m^2=-9/4$ با ADM : چنین مد فریدمن- برایتن لونر (BF)ی را نیز می‌توان در نسخه SW (۲) با $C_1=13/12$ و $C_2=0$ محقق کرد[۱] که در نتیجه، معادله همگن $\square_4 f+\frac{9}{4}f-24\,f^3=0$ حاصل می‌شود. سپس با داده اولیه (٤) با $\Delta_+=3/2$ ، که با حد نزدیک مرز (۵) با $f(r)=\bar{C}_{3/2}/r^3$ همخوان است، جواب در مرتبه سوم اختلال بصورت زیر می‌شود:

$$f^{(3)}(u,r)=\bar{C}_{3/2}\left[1+\frac{\ln(u)}{4}+\frac{\ln(u)^2}{16}+\frac{\ln(u)^3}{64}\right]\left(\frac{u}{r^2}\right)^{3/2}+O(u^{7/2})\approx f(r)\,u^{\frac{3}{2}}, \qquad (۱۱)$$

که درجات بالاتر لگاریتم در آن برای مراتب بالاتر بسط هستند.

مرتبط کردن جواب‌های AdS_4 حجمی به CFT_3 مرزی: به سبب ساختار جواب آزمایشی (۱) و در زمینه غشاءهای SW M2- ، (شبه)اسکالرهای حجمی که از خمش غشاءهای ام حول جهات ترکیبی فضای داخلی $CP^3\propto S^1/Z_k$ می‌آیند، تمام ابرتقارن و پاریته را می‌شکنند؛ و لذا برای یافتن جواب‌های دوگان مرزی، نمایش‌های $SO(8)$ برای گراویتینو (8_s ، 8_c ، 8_v) را مبادله می‌نماییم بطوریکه می‌توانیم (شبه)اسکالرها و عملگرهای تکتایه $SU(4)\times U(1)$ (بعنوان ایزومتری فضای داخلی) مطلوب را در $35_s=1_{-4}\oplus 6_{-2}\oplus 1_0\oplus 1_4\oplus 6_{-2}$ و میدان پیمانه‌ای را در $28=6_{-2}\oplus 1_0\oplus 15_0\oplus 6_2$ بیابیم. بعلاوه، بعلت شکست پاریته و ایده (پاد)غشاءهای M2 کسری [5] - که در نتیجه خمش غشاءهای M5 حول سه جهت فضای داخلی و سه جهت فضای خارجی در زمینه پادغشاءهای M2 هستند- تنها یک بخش مانند $SU(N)$ از گروه پیمانه ای ضربی ABJM باقی می‌ماند. از طرفی دیگر، با توجه به رفتار جواب نزدیک مرز بصورت $f(u\to 0,\vec{u})\approx\alpha(\vec{u})\,u^{\Delta-}+\beta(\vec{u})\,u^{\Delta+}$ ، برای کوانتش (شبه)اسکالرها با شرط مرزی دیریکله ($\delta\alpha=0$) که برای هر جرم مربعی بکار می‌رود- هرچند که موهومی نبودن بعد عملگرها و پایداری جواب‌ها نیاز دارد که جرم‌ها بالای قید BF [6] باشند- α و β بترتیب بعنوان چشمه و مقدارچشمداشتی خلاء تابع تک- نقطه ای عملگر Δ_+ عمل می‌کنند؛ و لذا تناظر [7] :

$$\sigma\equiv\langle\mathcal{O}_{\Delta_+}\rangle_\alpha=-\frac{\delta W[\alpha]}{\delta\alpha}=\frac{1}{3}\beta \qquad (۱۲)$$

را بکار می‌بریم که در آن $W[\alpha]$ تابعی مولد همبسته‌های همبند عملگر $\mathcal{O}_{\Delta_+}$ در نظریه میدان مرزی است. در واقع در این فرمالیسم، عملگرهای تغییرشکل با ابعاد برهنه $\Delta_+=4,3,3/2$ برای هر سه مد حجمی، نقشی معادل همان تابعی (انتگرال $\mathcal{W}^{(i)}$ در (١٤)) را بازی می‌کنند که با تغییر کنش مرزی با آنها و حل معادلات حاصل، جواب-هایی را می‌یابیم و تناظر حالت- عملگر را نیز تصدیق می‌نماییم.

لاگرانژین ۳- بعدی مرزی: کنش چرن- سایمون (CS)- ماده از نوع ABJM، با اسکالر $Y=\varphi=h(r)\,\mathrm{I}_N$ و فرمیون ψ را انتگرال

$$\mathcal{L}^{(i)}=\mathcal{L}_{CS}+\hat{\mathcal{L}}_{CS}-tr(i\bar{\psi}\gamma^k D_k\psi)-tr(D_kY^\dagger D^kY)-\mathcal{W}^{(i)} \qquad (۱۳)$$

در نظر می‌گیریم که در آن $D_k\Phi=\partial_k\Phi+iA_k\Phi-i\Phi\hat{A}_k$ ، $F_{ij}=\partial_iA_j-\partial_jA_i+i[A_i,A_j]$ و لاگرانژین CS نوعی بصورت

$$\mathcal{L}^+_{CS}=\frac{ik}{4\pi}\varepsilon^{ijk}\,tr\left(A_i^+\partial_jA_k^++\frac{2i}{3}A_i^+A_j^+A_k^+\right) \qquad (١٤)$$

است؛ با این توجه که با تعریف $A_i^\pm\equiv(A_i\pm\hat{A}_i)$ ، به علت خنثی بودن (شبه)اسکالرها ، $A_i^-=0$ را قرار می‌دهیم.

جوابی دوگان برای مد جرم‌دار حجمی: برای (شبه)اسکالر $m^2=+4$ ، با عملگر بصورت $\mathcal{O}_4^{(c)}=tr(\psi\bar{\psi})\,\varepsilon^{ij}\,F_{ij}^+$ ، بعنوان تغییرشکل در (۱۳)، با کنار گذاشتن بخش اسکالر و توجه به (۱۲)، از حل معادله حاصل از ترکیب معادله میدان فرمیونی و پیمانه‌ای، جواب

$$\psi=\tilde{a}\frac{(a+i(x-x_0)^k\gamma_k)}{[a^2+(x-x_0)_k(x-x_0)^k]^\varsigma}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} \qquad (١٥)$$

را برای معادله فرمیونی با $\varsigma=1$ و $\tilde{a}=\sqrt{\frac{-3ika}{8\pi}}$ و جواب

$$F_{ij}^+=\frac{3}{2}\frac{\varepsilon_{ij}}{[a^2+(x-x_0)_k(x-x_0)^k]} \qquad (١٦)$$

[۱] در واقع اگر $(1-3\,C_1)\equiv\xi\,\mathcal{R}_4$، سپس با ثابت جفت‌شدگی غیرمینیمال $\xi=3/16$ و $\mathcal{R}_4=-12$ ، $C_1=13/12$ در $EAdS_4$ محقق می‌شود.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

را برای معادله پیمانه‌ای بدست می‌آوریم [3]. در نتیجه، می‌بینیم که

$$\langle \mathcal{O}_4^{(c)} \rangle_{\tilde{\alpha}} = \frac{9k}{8\pi}\left(\frac{a}{a^2+(\vec{u}-\vec{u}_0)^2}\right)^2 \qquad (۱۷)$$

با جواب حجمی (۳) با $\Delta_+ = 4$ ، $\check{C}_4 = 0$ و $\hat{C}_4 = 9k/8\pi = \hat{\beta}$ و البته در حد $a \to 0$ و $r \to \infty$ منطبق است؛ و در واقع این جواب، اینستنتونی (کوچک) واقع در مبداء $(\vec{u}_0 = 0)$ یک سه-کره با شعاع $r = |\vec{u} - \vec{u}_0|$ در بینهایت (S^3_∞) را نشان می‌دهد.

جوابی دوگان برای مد بی‌جرم حجمی: برای (شبه)اسکالر $m^2 = 0$ ، با عملگر بصورت $\mathcal{O}_3^{(d)} = tr(\varphi\bar{\varphi})\,\varepsilon^{ij}F_{ij}^+$ ، بدون فرمیون در (۱۳) و با تنها یک لاگرانژین CS $(\mathcal{L}_{CS}^+)$ و $Y = Y^\dagger$ ، برای معادله میدان اسکالر و پیمانه‌ای جواب‌های زیر را بدست می‌آوریم:

$$\partial_k \partial^k h(r) = 0 \Rightarrow h(r) = a_3 + \frac{a_4}{r}, \qquad (۱۸)$$

$$A(r) = \frac{a_1 + 4a_2 r}{4r^4} \Rightarrow F^+ = \frac{a_1}{r^4}, \qquad (۱۹)$$

که در آن $a_1, a_2, \ldots$ ثابت‌های مرزی هستند و برای میدان پیمانه‌ای، جواب آزمایشی $A_\mu^+ = \omega_{\mu\nu}\, x^\nu A(r)$ را بکار برده‌ایم همراه با

$$\omega_{\mu\nu} = \begin{cases} 1 & : \ \nu > \mu, \\ 0 & : \ \nu = \mu, \ \ \mu,\nu \neq i,j, \end{cases} \qquad (۲۰)$$

که در آن $A(r)$ تابع اسکالری روی مرز و μ, ν نیز اندیس‌های مرزی هستند که در نتیجه، $\varepsilon^{ij}F_{ij}^+ = -12A(r) - 4\,rA'(r)$ را داریم همراه با این شرط که $F^+(r \to \infty) \to 0$. در نتیجه، با $a_3 = 0$ ، تناظر $\langle \mathcal{O}_3^{(d)} \rangle_\alpha \sim 1/r^6$ و لذا تطابق با جواب حجمی (۱۰) را داریم. اما اگر $Y = h(r)\, I_N$ و $Y^\dagger = a_5\, I_N$ باشد، می‌توان جواب بخش پیمانه ای را بصورت زیر نوشت:

$$A(r) = \frac{a_6}{r^n} + \frac{a_7}{r^3} \Rightarrow \varepsilon^{ij}F_{ij} \equiv F = \frac{4\,a_6}{r^n}(n-3), \qquad (۲۱)$$

که در آن n عددی حقیقی است؛ و برای قسمت اسکالر نیز می‌توان (۱۸) با $a_3 = 0$ **و** $a_4 = n$ **را داشت**. در نتیجه، با $n = 4$ و $n = 1$ ، بترتیب تناظر با جواب‌های حجمی (۱۰) و (۳) با $\Delta_+ = 3$ ، $\check{C}_3 = 0$ و $\hat{C}_3 = a_6$ را داریم.

جوابی دوگان برای مد تاکیونی حجمی: برای (شبه)اسکالر حجمی $m^2 = -9/4$ با $\Delta_+ = 3/2$ ، می‌توان عملگرهای $\mathcal{O}_{3/2}^{(a-d)} = tr(\varphi\psi), tr(\bar{\varphi}\bar{\psi}), tr(\bar{\varphi}\psi), tr(\varphi\bar{\psi})$ را بکار برد که می‌توانند برای ساختن دوگان به نظریه‌های واسیلیف نوع- AB نیز بکار روند [8]. بویژه، با عملگرهای $\mathcal{O}_{3/2}^{(p)} = \left(tr(\psi\bar{\psi})\varepsilon^{kij}\varepsilon_{ij}\,A_k^+\right)^{\frac{1}{2}}$ و $\mathcal{O}_{3/2}^{(q)} = tr(\psi\bar{\psi})^{1/4}\,\varepsilon^{kij}\varepsilon_{ij}\,A_k^+$ ، بدون اسکالرها در (۱۳)، از ترکیب معادلات فرمیونی و پیمانه‌ای حاصل داریم:

$$(n)i\bar{\psi}\gamma^k\partial_k\psi + \frac{ik}{4\pi}\,\varepsilon^{kij}A_k^+F_{ij}^+ + 2\,\bar{\psi}\gamma^k\psi\,A_k^+ = 0, \qquad (۲۲)$$

با $n = 1,4$ بترتیب برای $\mathcal{O}_{3/2}^{(p)}, \mathcal{O}_{3/2}^{(q)}$. اکنون با جواب آزمایشی $A_k^+ = \varepsilon_{kij}\,\varepsilon^{ij}A^+(r)$ ، قسمت پیمانه‌ای با جواب (۱۶) با $F_{ij}^+ \to A^+(r)$ و $\varepsilon_{ij} \to \bar{n}$ و قسمت فرمیونی با جواب (۱۵) با $\varsigma = 3/2$ ، بترتیب با $\bar{n} = 1,2$ ، اقناع می‌شوند. درنتیجه،

$$\langle \mathcal{O}_{3/2}^{(p),(q)} \rangle_\alpha = \frac{a_8}{[a^2+(\vec{u}-\vec{u}_0)^2]^{3/2}} \qquad (۲۳)$$

بترتیب با $a_8 = (\sqrt{18a})\tilde{a}, (18\bar{n}a)\sqrt{\tilde{a}}$ را داریم؛ و لذا می‌بینیم که دوباره تناظر حالت- عملگر با جواب حجمی (۱۱)، برای مد هنجارش پذیر و شرط مرزی دیریکله و البته در حد $a \to 0$ و $r \to \infty$ (اینستنتون کوچک) برقرار است. همچنین، مقدار متناهی کنش مربوطه از (۱۳) برپایه جواب‌های بدست آمده، با این توجه که سهم قسمت CS صفر می‌شود و با کمک معادله (۲۲) می‌شود:

$$S_{(3/2)}^{modi.} = \frac{3\pi^2\bar{n}}{2n}\frac{\tilde{a}^2}{a^2}, \qquad (۲٤)$$

که مقداری متناهی‌است و سرشت اینستنتون جواب را تایید می‌کند.

نتیجه‌گیری

با بهره‌برداری از روش تجزیه آدومیان برای حل معادلات دیفرانسیل غیرخطی مرتبه دوم جزئی برای (شبه)اسکالرها در فضای AdS_4 ، محتملا برای اولین بار، جواب‌های اختلالی بصورت بسط سری را با شروع از یک داده یا جواب اولیه، متناظر با شرط مرزی دیریکله، بدست آوردیم. سپس، با ارائه عملگرهای متناظر و تغییر کنش‌های مرزی CFT_3 اقلیدسی مربوطه با آنها، جواب‌های اینستنتونی جدیدی را یافتیم و تناظر حالت- عملگر $\mathrm{AdS}_4/\mathrm{CFT}_3$ را نیز تایید نمودیم.

مرجع‌ها

[1] M. Naghdi, *Fortschr. Phys.* **67**, 1800044 (2018), [arXiv: 1708.02530 [hep-th]].
[2] M. Naghdi, [arXiv: 2002.06547 [hep-th]].
[3] M. Naghdi, [arXiv: 2005.00358 [hep-th]].
[4] G. Adomian, "*Solving frontier problems of physics: The decomposition method*", Springer, **1st** Edition (1994).
[5] O. Aharony, O. Bergman, D. L. Jafferis, *JHEP* **0811**, 043 (2008), [arXiv: 0807.4924 [hep-th]].
[6] P. Breitenlohner and D. Z. Freedman, *Phys. Lett. B* **115**, 197 (1982).
[7] I. R. Klebanov and E. Witten, *Nucl. Phys. B* **556**, 89 (1999), [arXiv:hep-th/9905104].
[8] S. Giombi, I. R. Klebanov and Z. M. Tan, *Universe* **4**, 18 (2018), [arXiv: 1608.07611 [hep-th]].

تقریب کاوشی (شبه)اسکالرهای جرم‌دار و تاکیونی در فضای آنتی‌دوسیته و جواب‌های دوگان در نظریه‌های میدان فرمیونی و بوزونی عادی و بحرانی ۳- بعدی

محمد نقدی

گروه فیزیک ، دانشکده علوم پایه ، دانشگاه ایلام ، ایلام

چکیده

در این نوشتار، در نتیجه برشی سازگار از ابرگرانش ۱۱- بعدی روی $AdS_4 \times S^7/Z_k$ ، با فضای داخلی بصورت یک دسته فیبری $U(1)$ روی CP^3 ، معادله اسکالر غیرخطی مرتبه دوم جزئی‌ای را در فضای (خارجی) AdS_4 اقلیدسی بدست می‌آوریم که (شبه)اسکالرهای در آن را می‌توان ناشی از پیچیدن غشاءهای M روی جهت‌های ترکیبی فضای داخلی، در زمینه پادغشاءهای $M2$ در نظر گرفت بگونه‌ای که تمام ابرتقارن‌ها و پاریته شکسته می‌شوند. مدهای جرم‌دار، از جمله $m^2 = +4$ ، هیگز-گونه هستند و پتانسیل مربوطه شکست خودبخود تقارن را مجاز می‌دارد. علاوه بر مد اخیر، جواب‌های اختلالی به معادله حرکت در حد کاوشی (با چشمپوشی از پس کنش) برای مد تاکیونی $m^2 = -2$ نیز ارائه می‌شوند؛ و سپس با توجه به رفتار آنها نزدیک مرز و اینکه تکتایه $SU(4) \times U(1)$ - بعنوان گروه تقارن-R نظریه مرزی دوگان- نیز هستند، جواب‌های دوگان را در بخش تکتایه مدل‌های برداری چرن- سایمون- ماده (در واقع مدل‌های فرمیونی و بوزونی عادی و بحرانی جرم‌دار و بی‌جرم) $U(N)$ و $O(N)$ در ۳- بعد، بدست می‌آوریم. در واقع، مدل فرمیونی بحرانی شامل یک عملگر (شبه اسکالر) بعد-٤ تکتایه ($tr(\psi\bar{\psi})^2$) است و همچنین تغییر دو- ردی از عملگر بعد-۲ مدل فرمیونی عادی (که به نوبه خود دوگان برای مد حجمی تاکیونی با شرایط مرزی دیریکله است) نیز آن عملگر را بدست می‌دهد که البته، جواب‌های اینستنتونی حاصل با دو جواب حجمی متفاوت متناظر هستند. همچنین، با تغییر دو- ردی از یک عملگر (اسکالر) بعد-۲ تکتایه ($tr(y\bar{y})^2$) مدل بوزونی بحرانی و از جواب مربوطه‌اش، چنین تناظر حالت- عملگری نیز تایید می‌شود. در این میان، یک عملگر بعد- ٤ تکتایه جدیدتر ($tr(\psi\bar{\psi})\, F^+$) و جواب‌های آنرا نیز معرفی می‌نماییم. در نهایت، به ارتباط ساختارهای ارائه شده در اینجا با نظریه‌های اسپین بالاتر واسیلیف در حجم (HS_4) نیز اشاره و بویژه دوگانی بوز- فرمی ($\varphi \leftrightarrow \psi$) بین جواب مدل بوزونی عادی و مدل فرمیونی بحرانی تایید می‌شود.

Probe Approximation of Two Massive and Tachyonic (pseudo)Scalars in AdS_4 and Dual Solutions in Regular and Critical 3D Fermion and Boson Models

Naghdi, Mohammad

Department of Physics, Faculty of Basic Sciences, University of Ilam, Ilam

Abstract

From a consistent truncation of 11-dimensional supergravity over $AdS_4 \times S^7/Z_k$, when the internal space is taken as an $U(1)$ bundle on CP^3, a second-order nonlinear partial differential equation is obtained in Euclidean AdS_4 (external) space. The resulting (pseudo)scalar could be considered as arising from wrapping M-branes around the mixed internal directions in the background of anti-M2-branes, and as a result, all supersymmeties and parity break. The massive modes, including $m^2 = +4$, are Higgs-like and their associated potential allows spontaneous symmetry breaking. In addition to the latter mode, we present perturbative solutions to the equation in probe approximation (ignoring backreaction) also for the tachyonic mode $m^2 = -2$; and then, with respect to the behavior of the solutions near the boundary and that they are $SU(4) \times U(1)$-singlet, where the latter group is also the R-symmetry of the boundary theory, we get dual solutions in singlet sectors of 3-dimensional Chern-Simon-matter field theories (indeed in massless and massive regular and critical boson and fermion models). In fact, the critical fermion model includes a singlet dimension-4 (pseudoscalar) operator ($tr(\psi\bar{\psi})^2$), and also a double-trace deformation of the dimension-2 operator of the regular fermion model (that in turn stands as dual for the bulk tachyonic mode with Dirichlet boundary condition) gives that operator, and of course, the resultant instantons correspond to two different bulk solutions. As well as, with a double-trace deformation of the singlet dimension-2 (scalar) operator ($tr(y\bar{y})^2$) in the critical boson model and its associated solution, such a state-operator correspondence is confirmed. Meanwhile, we introduce a newer singlet dimension-4 operator ($tr(\psi\bar{\psi})\, F^+$) and its solutions. Also, we deal with the connections among the setups here and the Vasiliev's Higher-Spin theories in the bulk (HS_4) briefly; and, in particular, we confirm Bose-Fermi duality ($\varphi \leftrightarrow \psi$) between a solution of the regular boson model and the critical fermion model.

PACS No. 10, 11, 12

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد

http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مقدمه

در ادامه جستجوی یافتن موجودات غیراختلالی و بویژه اینستنتون‌ها در تناظر AdS_4/CFT_3 - برای نمونه [1] و [2] را ببینید- در اینجا نیز نمونه‌های از این جواب‌های جایگزیده و با اهمیت فیزیکی را ارائه می‌نماییم که از حل یک معادله اسکالر در فضای AdS_4 اقلیدسی حجمی، بویژه برای مد خاص $m^2R_{AdS}^2=+4$ که برای آن معادله حرکت حاصل ساده‌تر می‌شود، می‌آیند و با تحلیل‌های نزدیک مرز، سعی می‌کنیم جواب‌های اینستنتونی دوگان در نظریه‌های میدان ۳- بعدی چرن- سایمون- ماده را بیابیم و ارتباط آنها با جواب دیگر حجمی، که (شبه)اسکالر جفت شده همدیس $m^2R_{AdS}^2=-2$ است، را نیز مورد بررسی قرار دهیم.

معادله اسکالر حجمی: با توجه به جواب آزمایشی بکاررفته در [3] برای ٤- فرم قدرت- میدان G_4 در ابرگرانش ۱۱- بعدی روی $AdS_4\times CP^3\ltimes S^1/Z_k$ ، از حل معادلات و اتحادهای مربوطه، معادله دیفرانسیل جزئی غیرخطی زیر در AdS_4 حاصل می‌شود:

$$\Box_4 f - m^2 f \pm \delta f^2 - \lambda f^3 \pm F = 0, \qquad (۱)$$

که در آن $m^2=(1\pm 3\,C_3+288\,C_2^2)$ ، $\delta=144\,C_2$ ، $\lambda=24$ و $F=2(C_2\pm 3\,C_2\,C_3+96\,C_2^3)$ است با $c_j=C_j/R$ و C_j ها بعنوان ثابت‌های حقیقی، $R=2R_{AdS}$ شعاع انحنای AdS حجمی است (با $R_{AdS}=1$ از این پس) و علامت بالایی در عبارت‌هایی شبیه $\pm$ در جملات شامل C_3 برای زمینه اصلی ویک- چرخیده (WR) و علامت پایینی، برای حالت skew-whiffed (SW) است؛ درحالیکه علامت مثبت پشت جملات شامل C_2 بدان معناست که خلاء واقعی در طرف راست خلاء کاذب (یعنی برای مقدار مثبتی از f) محقق می‌شود و بالعکس آن برای علامت منها.

نکته جالب این است که معادله (۱) به شرطی همگن ($F=0\Rightarrow \delta^2=108\,m^2$) می‌شود که:

$$m^2=-2(1\pm 3\,C_3)\equiv -2\,\bar{m}^2; \qquad (۲)$$

و در نتیجه می‌بینیم که برای $C_3=1$ (که زمینه اصلی مدل ABJM است)، $m^2=+4$ را داریم؛ و نیز تایید می‌نماییم که (شبه)اسکالر در اینجا هیگز-گونه است چراکه با $f_2\to -(1/4)f\pm c_2$ که از اتحاد بیانکی ($dG_4=0$ با $G_4/(2R_{AdS})^4=(3/8)f_1\,\mathcal{E}_4-2\,df\wedge J\wedge J+e_7+8\,f_2\,J^2$ ، که در آن J فرم کیلر روی CP^3 و e_7 برای ویلبین هفتم فضای داخلی است) می‌آید و $\bar{m}^2$ ها برای جرم مربعی f_2 هستند که معادله‌اش جفت‌شدگی $\bar{\lambda}=384$ را دارد، $\pm c_2$ در واقع خلاءهای همگن هستند با $c_2=\sqrt{-\bar{m}^2/\bar{\lambda}}$ که f بعنوان افت‌وخیز حول آنها عمل می‌کند؛ درعین حال، تنها برای نسخه SW و $C_3\geq 1/3$ مدهای مجاز فیزیکی داریم چون برای حالت‌های WR، δ موهومی می‌شود.

جواب‌های معادله اسکالر حجمی با $m^2=+4$: ساده‌ترین راه برای تحقق چنین مدی با $C_3=1$ و $C_2=0$ در نسخه WR از (۱) است که آنرا قبلا مطالعه نمودیم- [1] را ببینید. اما بعنوان موردی جالب، برای نسخه SW از (۱) با $C_3=1$ و $C_2=\sqrt{3}/12$ داریم:

$$\Box_4 f - 4\,f + 12\sqrt{3}\,f^2 - 24\,f^3 = 0; \qquad (۳)$$

و می‌توان از جواب خطی آن (به اصطلاح جواب ویتن [4])

$$f_0(u,\vec{u}) = \frac{8}{\pi^2}\left[\frac{u}{u^2+(\vec{u}-\vec{u}_0)^2}\right]^4$$
$$\Rightarrow f_0(u\to 0,r) = \frac{8}{\pi^2}\left(\frac{u}{r^2}\right)^4 \approx f(r)\,u^4, \qquad (٤)$$

با $\vec{u}=(x,y,z)$ و $r=|\vec{u}|$ ، برای حل اختلالی استفاده نمود و جوابی را مثلا تا مرتبه- دوم اختلال بصورت $f^{(2)}(u,r)=3\,f(r)\,u^4+O(u^6)$ بدست آورد، یا جواب‌های تقریبی دیگر که در اینجا مجال بحث‌شان نیست [5].

روند حل دیگر معادله (۳)، تقلیل خود- همانند (*self-similar reduction*) است که در آن با $u\to S\,u$ و $r\to S\,r$ و در نتیجه $f(u,r)\leftarrow \mathcal{F}(\xi)$ و $\xi=r\,u^{-1}$ ، معادله تبدیل می‌شود به [3]:

$$\left[(\xi^2+1)\frac{d^2}{d\xi^2}+\frac{(2+4\,\xi^2)}{\xi}\frac{d}{d\xi}-m^2\right]\mathcal{F}(\xi) \qquad (۵)$$
$$+6\sqrt{3}\,m\,\mathcal{F}(\xi)^2-24\,\mathcal{F}(\xi)^3=0,$$

که جوابی (هنجارش پذیر) از آن بصورت زیر است:

$$f^{(1)}(u,r)=\left[\hat{C}_{\Delta_+}+\check{C}_{\Delta_+}\ln\left(\frac{r}{u}\right)\right]\left(\frac{u}{r}\right)^{\Delta_+}, \qquad (٦)$$

که در آن $\hat{C}_{\Delta_+}$ و $\check{C}_{\Delta_+}$ ثابت‌های حقیقی و Δ_+ ریشه بزرگتر $m^2=\Delta(\Delta-3)$ است؛ و رفتار کلی جواب نزدیک مرز را بصورت $f^{(1)}(u,r)\approx \hat{\alpha}\,u^{\Delta_-}+\hat{\beta}\,u^{\Delta_+}$ می‌نویسیم که هنگام پرداختن به جواب‌های مرزی مناسب است.

جوابی به معادله اسکالر حجمی با $m^2=-2$: به ضرورت وجود جواب‌های حجمی مربوط به این مد برای تحلیل‌های مرزی، جوابی در این مورد را نیز در حد کاوشی ارائه می‌نماییم. علاوه بر تحقق چنین مدی با $C_3=1$ و $C_2=0$ در نسخه SW از (۱) که قبلا مطالعه نمودیم [1]، بعنوان موردی خاص، $C_3=13/12$ و $C_2=1/(24\sqrt{2})$ رادرنظر می‌گیریم که با تعریف $(1-3\,C_3)\equiv$

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

$\mathcal{R}_4\,\xi\,\mathcal{R}_4$ و ثابت جفت شدگی غیرمی‌نیمال $\xi = 3/16$ و $\mathcal{R}_4 = -12$ برای $EAdS_4$ محقق می‌شود، معادله مربوطه از (۱) می‌شود:

$$\square_4 f + 2\,f + 3\sqrt{2}\,f^2 - 24\,f^3 = 13/(72\sqrt{2}), \qquad (۷)$$

که با کنارگذاشتن قسمت ناهمگن آن که صرفا یک ثابت غیردینامیکی را به جواب نهایی اضافه می‌کند، با $f = (u/R_{Ads})\,g$، داریم:

$$(\partial_i\partial_i + \partial_u\partial_u)\,g_{i+1} = \sum_{i=0}^{\infty} A_i, \qquad (۸)$$

که در آن $A_0 = -(\delta/u)g_0^2 + 24\,g_0^3$ ، $A_1 = -(2\delta/u)g_0\,g_1 + 72\,g_0^2\,g_1$ و به همین ترتیب؛ و یک جواب دقیق قسمت خطی آن (با b_0 ثابت دلخواه و a_0 اندازه اینستنتون) می‌شود:

$$g_0(u,r) = \frac{b_0\,u}{[(u+a_0)^2 + r^2]}, \qquad (۹)$$

که با رفتار نزدیک مرز ($u = 0$) آن بصورت

$$\bar{g}_0(u,r) = \frac{b_0}{(a_0^2+r^2)}\left[1 - \frac{2\,a_0}{(a_0^2+r^2)}\,u\right], \qquad (۱۰)$$

بعنوان داده اولیه برای معادله تکرار (۸)، جواب زیر را در مرتبه- دوم بسط اختلالی بدست می‌آوریم:

$$f^{(2)}(u,r) = \bar{f}_0(u,r) - \frac{3\,b_0^2}{(a_0^2+r^2)^2} \times \left[\frac{b_0}{a_0} - \sqrt{2}\,(1-\ln(u))\right] u^2 + O(u^3), \qquad (۱۱)$$

که در آن $\bar{f}_0(u,r) = \bar{g}_0(u,r)\,u$ ؛ و هنگام بحث جواب طرف میدانی و تناظر جواب مرزی با حجمی به این نیز برمی‌گردیم.

تقارن‌های جواب‌های حجمی و دوگان مرزی: در واقع مدهای (شبه)اسکالر حجمی را می‌توان حاصل از پیچش غشاءهای M حول جهت‌های ترکیبی فضای داخلی در زمینه پادغشاءهای M2 در نظر گرفت که تمام ابرتقارن $\mathcal{N} = 8 \to 0$ و همچنین ناوردایی پاریته و مقیاس را نیز می‌شکند و لذا جواب‌های $SO(4)$ - ناوردای اقلیدسی (چون گروه همدیس لورنتزی بصورت $SO(4,1) \leftarrow SO(3,1)$ می-شکند) را داریم، اگرچه ایزومتری فضای داخلی $(SU(4)\times U(1))$ حفظ می‌شود و در نتیجه جواب‌های متناظر در بخش تکتایه نظریه-های میدان پیمانه ای $O(N)$ و $U(N)$ ۳- بعدی مرزی با این خواص تقارنی را خواهیم داشت. در واقع، اگر مدل ABJM با میدان‌های دو-بنیادی و گروه پیمانه‌ای $SU(N)_k \times SU(N)_{-k}$ ، با k بعنوان تراز چرن، را مبنا قرار دهیم، به سبب شکست پاریته می‌توان تنها یک قسمت گروه پیمانه‌ای را در نظر گرفت و برای تحقق شکست ابرتقارن نیز با تبادل بین سه نمایش $SO(8) \to SU(4)\times U(1)$ که بصورت $8_s = 1_{-2} \oplus 1_2 \oplus 6_0$ ، $8_c = 4_{-1} \oplus 4_1$ و $8_v = 4_{-1} \oplus 4_1$ هستند، هرکدام از عملگرهای مرکب از اسکالر (y)، فرمیون (ψ) و میدان پیمانه‌ای (A_i^+) مرزی را می‌توان بصورت تکتایه‌های در 20_0 $\oplus$ $6_{-2} \oplus 6_2 \oplus 1_{-4} \oplus 1_0 \oplus 1_4 = 35_s$ و $28 \to 6_{-2} \oplus 1_0 \oplus 6_2 \oplus 15_0$ در نظر گرفت.

نظریه‌ها و جواب‌های مرزی دوگان: بعنوان یک دوگان مرزی برای مد شبه‌اسکالر جرم‌دار حجمی، مدل فرمیونی بحرانی (CF) بصورت زیر را در نظر می‌گیریم:

$$S_{CF} = S_{CS}^{+} + \int d^3\vec{u}\,[tr(\bar{\psi}\,\gamma^i\partial_i\psi) + m_f\,tr(\psi\bar{\psi}) + \frac{\tilde{g}_4}{2}\,tr(\psi\bar{\psi})^2\,], \qquad (۱۲)$$

با لاگرانژین چرن- سایمون (CS) میدان پیمانه ای بصورت زیر:

$$\mathcal{L}_{CS}^{+} = \frac{ik}{4\pi}\varepsilon^{kij}\;tr\left(A_i^+\partial_j A_k^+ + \frac{2i}{3}A_i^+A_j^+A_k^+\right). \qquad (۱۳)$$

درنتیجه، یک جواب بی جرم برای (۱۲) می‌شود:

$$\psi \equiv \hat{\psi} = \sqrt{\frac{3\,\tilde{a}^\dagger}{-\tilde{g}_4}}\frac{1}{[\tilde{a}^\dagger - i(x-x_0)_k\gamma^{k\dagger}]}\,\chi, \qquad (۱۴)$$

که $\vec{\gamma} = (\sigma_2, \sigma_1, \sigma_3)$ ماتریس‌های گامای اقلیدسی با $\sigma_i^\dagger = \sigma_i$ و χ یک اسپینور ثابت بدون بعد با $\chi^\dagger\chi = 1$ است. با محاسبه کنش (۱۲) برپایه جواب اخیر نیز داریم:

$$\tilde{S}_{CF} = \frac{3}{2}\,\tilde{g}_4\int tr(\hat{\psi}\bar{\hat{\psi}})^2 d^3\vec{u} \Rightarrow\; \tilde{S}_{CF}^{c} = \frac{\tilde{a}}{\tilde{g}_4}\frac{27\,\pi^2}{2}, \qquad (۱۵)$$

که مقداری متناهی است و ماهیت اینستنتونی جواب را مشخص می کند، $\tilde{a} \geq 0$ اندازه اینستنتون و $\vec{u}_0$ (یا x_0 ها) نیز مکان آن را مشخص می‌کنند. از طرفی دیگر، بعنوان تست اولیه‌ای از تناظر حالت- عملگر با جواب حجمی (٦) برای $\Delta_+ = 4$ و جواب مرزی (١٤)، داریم:

$$\langle\hat{O}_4\rangle_{\tilde{a}} \sim tr(\hat{\psi}\bar{\hat{\psi}})^2 \sim \hat{\beta} \sim \frac{1}{(r^2)^2}, \qquad (۱۶)$$

که با $\hat{C}_4 = (3\tilde{a}/(-\tilde{g}_4))^2$ ، $\check{C}_4 = 0$ ، برای سه-کره با شعاع r در بینهایت(S_∞^3)، تناظری دقیق است. همچنین، می‌توان مدل فرمیونی عادی (RF) را در نظر گرفت که جمله آخر در کنش (۱۲) را شامل نمی‌شود و با جواب- برای جوابی مشابه، [6] را ببینید-

$$\psi = \tilde{b}\;\frac{[\tilde{a} + i(\vec{u}-\vec{u}_0).\vec{\gamma}]}{[\tilde{a}^2 + (\vec{u}-\vec{u}_0)^2]^{3/2}}\,\chi, \qquad (۱۷)$$

یک تغییر شکل دو- ردی از عملگر مربوطه آن، $\langle\mathcal{O}_2^-\rangle \sim tr(\psi\bar{\psi})$ ، بعنوان یک عملگر تک- ردی بعد-٤ برای شرط مرزی دیریکله عمل می‌کند و در نتیجه:

$$\langle\mathcal{O}_4\rangle_\alpha \sim tr(\psi\bar{\psi})^2 \sim \beta^2 \sim \frac{1}{(r^2)^4}, \qquad (۱۸)$$

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

که با جواب نزدیک مرز (٤)، با $\tilde{a}=0$ و $\tilde{b}^4=8/\pi^2$ منطبق می‌شود؛ یا می‌توان اینستنتون را در $u=\tilde{a}$ درنظرگرفت تا انطباق کاملی با جواب اصلی در (٤) را داشته باشیم با توجه به رفتار کلی $f(u,r)\to\alpha\,u^{4-}+\beta\,u^{4+}$ برای جواب‌های حجمی نزدیک مرز.

بعلاوه، با پیشنهاد عملگر جدید مرزی $\mathcal{O}_4^{(c)}=tr(\psi\bar{\psi})\varepsilon^{ij}F_{ij}^{+}$ [5] ، جواب‌های زیر را خواهیم داشت:

$$\psi=\frac{i}{2}\sqrt[3]{\frac{4}{5}}\frac{(\vec{u}-\vec{u}_0).\vec{\gamma}}{[(\vec{u}-\vec{u}_0)^2]^{3/2}}\,\chi,\quad F^{+}=\frac{\tilde{a}_1}{r^4}, \tag{١٩}$$

که دوباره تناظری به مانند (١٨) را تصدیق می‌کند.

یک جواب جالب توجه دیگر برای مد تاکیونی حجمی، جواب اینستنتونی در نظریه یانگ- میلز خالص $SU(2)$ ، با شرط $\mathcal{F}_{ij}\to 0\Leftarrow r\to\infty$ ، بصورت زیر است:

$$\begin{aligned}\mathcal{A}_i&\cong\eta_{ij}\,\frac{(x-x_0)^j}{a^2+(x-x_0)^2}\\ \Rightarrow\mathcal{F}_{ij}&\cong\eta_{ij}\left[\frac{a}{a^2+(\vec{u}-\vec{u}_0)^2}\right]^2,\end{aligned} \tag{٢٠}$$

با η_{ij} بعنوان تانسورهای توفت (با خواصی مشابه تانسور لوی-چویتا)؛ و در نتیجه تناظر $tr(\mathcal{F})\sim\langle\mathcal{O}_2\rangle_\alpha\sim\beta$ با جواب حجمی (١١) بطور تقریبی برقرار است. بویژه با $\mathcal{A}_i=\eta_{ij}\,\partial^j\varphi/\varphi$ معادلات پیمانه‌ای به معادله اسکالر بی‌جرم $\nabla^2\varphi+\lambda_4\,\varphi^3=0$ تقلیل می‌یابند که در واقع معادله حاصل از کنش بوزونی بحرانی (CB) زیر است:

$$\begin{aligned}S_{CB}=S_{CS}^{+}+\int d^3\vec{u}\,\Big[&\frac{1}{2}(\partial_i\varphi)^2+\frac{1}{2}m_b^2\,\varphi^2\\&-\frac{\lambda_4}{4}(\varphi^2)^2\Big],\end{aligned} \tag{٢١}$$

که جواب جرم‌دار آزاد آن و مقدار متناهی کنش مربوطه، عبارتند از:

$$\varphi_c(r)=\frac{3}{\sqrt{m_b\,\lambda_4}}\frac{e^{-m_b\,r}}{r},\qquad \tilde{S}_{mCB}^{c.}=\frac{6\pi}{\lambda_4}, \tag{٢٢}$$

که مشابه جواب در [7] است. همچنین قابل گفتن است که دوگانی بوز- فرمی [8] ($\psi\sim\mathcal{A}$) بین مدل‌های RF و CB با بترتیب جواب‌های (١٧) و (٢٠)، نیز بصورت زیر تایید می‌شود:

$$tr(\psi\bar{\psi})\sim tr(\mathcal{A}\wedge\mathcal{A})\sim\frac{a^2}{[a^2+(\vec{u}-\vec{u}_0)^2]^2}, \tag{٢٣}$$

با $a=\tilde{a}=\tilde{b}$. بعلاوه، مدل بوزونی عادی (RB) که کنش آن همان (٢١) است بجز جمله آخر آن که در این مورد $-(\lambda_6/6)\,(\varphi^2)^3$ است و معمولا بعنوان مدل $O(N)$ برداری سه- بحرانی(tri-critical) درنظرگرفته می‌شود، جواب اینستنتونی

$$\varphi=\left(\frac{3}{\lambda_6}\right)^{1/4}\left[\frac{a}{a^2+(\vec{u}-\vec{u}_0)^2}\right]^{1/2}, \tag{٢٤}$$

را دارد که با $y=\varphi I_N$ (که I_N ماتریس واحد $N\times N$ است)، $\langle\mathcal{O}_1^{+}\rangle_\beta\sim tr(y\bar{y})\sim\alpha$ با جواب تاکیونی حجمی (١١) بطور تقریبی و از نظر ساختاری منطبق می‌شود- و نیز مقدار چشمداشتی تغییر سه- ردی عملگر اسکالر اخیر با رفتار مرزی همان جواب حجمی با شرایط مرزی نیومن یا ترکیبی متناسب است. همچنین، جواب (٢٤) مدل RB ، دوگانی بوز- فرمی دقیقی ($\varphi\leftrightarrow\hat{\psi}$) را با جواب (١٤) مدل CF ، با $\tilde{a}=a$ و $-\tilde{g}_4=-g_6=\lambda_6$ تایید می‌نماید.

برای بحث‌های بیشتر درباره این جواب‌ها، تفسیرهای فیزیکی و ارتباط آنها به نظریه‌های اسپین بالاتر واسیلیف و تغییر شکل‌های فیزیکی دیگر مدل ABJM ، [3] و مراجع در آن را ببینید. بویژه، لازم گفتن است که نظریه‌های واسیلیف نوع A و B (برای اسکالرها و شبه اسکالرهای حجمی بترتیب با شرایط مرزی نیومن و دیریکله) اغلب بعنوان دوگان به بترتیب نظریه‌های بوزونی و فرمیونی عادی و تغییر-شکل‌های دو- ردی آنها دوگان به مدل‌های بحرانی‌شان، از نوعی که در اینجا داریم، در نظرگرفته می‌شوند.

نتیجه‌گیری

با ارائه جواب‌های اختلالی برای یک معادله غیرخطی مرتبه- دوم جزئی، که در واقع از تقلیلی کالوزا-کلاین از ابرگرانش ١١- بعدی می‌آید و در حد کاوشی معتبر است، برای دو مد (شبه)اسکالر جفت شده به گرانش در فضای آنتی دوسیته، مطابق قواعد تناظر AdS_4/CFT_3 در فضای اقلیدسی، جواب‌های دوگان اینستنتونی جالب توجه جدیدی را در نظریه‌های چرن- سایمون- ماده مرزی، که در واقع مدل‌های بوزونی و فرمیونی بحرانی هستند، یافتیم و بعلاوه دوگانی بوز- فرمی را در سطح جواب‌ها و تناظر تایید نمودیم.

مرجع‌ها

[1] M. Naghdi, *Eur. Phys. J. Plus* **133**, 307 (2018), [arXiv: 1703.02765 [hep-th]].
[2] M. Naghdi, *Fortschr. Phys.* **67**, 1800044 (2018), [arXiv: 1708.02530 [hep-th]].
[3] M. Naghdi, [arXiv: 2002.06547 [hep-th]].
[4] E. Witten, *Adv. Theor. Math. Phys*. **2**, 253 (1998), [arXiv:hep-th/9802150].
[5] M. Naghdi, [arXiv: 2005.00358 [hep-th]].
[6] K. G. Akdeniz and A. Smailagic, *Nuovo Cim. A* **51**, 345 (1979).
[7] J. Zinn-Justin, *Les Houches Sum. Sch*. **39** (1982).
[8] O. Aharony, S. Jain and Sh. Minwalla, *JHEP* **1812**, 058 (2018), [arXiv: 1808.03317 [hep-th]].

نرم‌افزار پردازش ردهای سونش شده در آشکارسازهای ردپای هسته‌ای

شاکری جویباری ، بنین[1]

[1]سازمان انرژی اتمی ایران ، پژوهشگاه علوم و فنون هسته ای ، پژوهشکده فیزیک و شتابگرها

چکیده

در این مقاله ، یک نرم‌افزار پردازش ردپای هسته‌ای (نرم افزار NTD) تحت زبان برنامه نویسی Microsoft Visual Studio 2008 C# تهیه و تدوین شده است. این نرم‌افزار عکس ردهای سونش شده در آشکارسازهای ردپای هسته‌ای را پردازش کرده و سپس با استفاده از داده‌های پردازش شده، می‌توان اطلاعاتی مانند تعداد ذرات، قطر ذرات و در صورت وجود منحنی کالیبراسیون نوع ذرات و انرژی آن را تعیین کرد. پردازش تصاویر ردهای ذرات در آشکارسازهای ردپای هسته‌ای در این نرم‌افزار شامل تبدیل مقیاس خاکستری تصویر RGB ، ارزیابی هیستوگرام ، فیلترینگ و حذف نویز ، شمارش ردها ، تصحیح ردهای همپوشانی شده می‌باشد. از آنجا که شکل و هندسه ردهای سونش شده اطلاعات ضروری و مهمی در مورد نوع و انرژی ذرات برخوردی به آشکارسازهای ردپای هسته‌ای را ارائه می‌دهد، الگوریتم ها در هر مرحله از پردازش تصویر به گونه‌ای انتخاب شد که کمترین آسیب را به تصویر و هندسه ردها ایجاد می‌کند. خروجی نرم افزار کاربر پسند NTD شامل تشخیص رد ذرات اصلی از زمینه (تابش های کیهانی) ، اندازه گیری ویژگی های هندسی ردهای سونش شده (به عنوان مثال قطرردپا)، تعداد ذرات، تمییز دادن هرردپا در ناحیه همپوشانی شده و شمارش آنها و همچنین تعیین انرژی آنها می باشد.

واژه های کلیدی: نرم افزار ردپای هسته ای، آشکارسازهای ردپای هسته ای، الگوریتم

Nuclear Detection software in Ion-Etched Solid State Track detector

Shakeri Jooybari, Banin[1]

[1] Physics & Accelerators Research School, Nuclear Science and Technology Research Institute (NSTRI), P O Box 14395-836, Tehran, Iran

Abstract

In this paper, a nuclear track detection code (developed NTD software version1) was developed by C# language Microsoft Visual Studio 2008. This software processed a digital image captured from the etched ion irradiated nuclear track detector surface and then calculated many features of the characteristics of incident ion on nuclear track detector surface. The image processing of track images was including gray scale converting of RGB image, histogram evaluation, noise and small abject filtering, track counting, overlapped track counting steps. Since the shape and geometry of tracks reveal the essential information about incident ion on nuclear track detector, in each step an algorithm was selected in a way that the least damage to the track patterns and its geometry was occurred. Outputs of user friendly NTD software included proper track recognition from the background, the geometrical properties measurement of etch-pits (e.g. track diameter) discrimination of each track from the overlapped area and track density measurement.

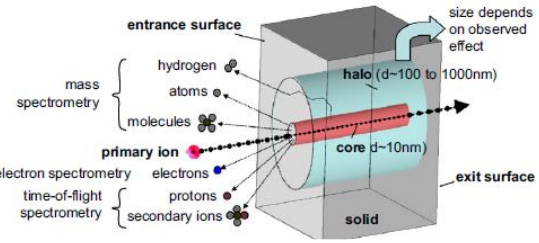
***Keywords**: NTD software, nuclear track detector, Algorithm,*
PACS No. 20

مقدمه

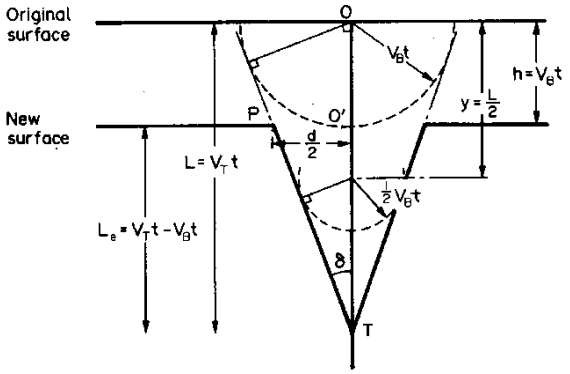
تعداد زیادی از مواد شامل پلاستیک‌ها، شیشه‌ها و مواد معدنی می‌توانند ردِّ ذرات باردار عبوری در ماده را ثبت کنند. بنابراین از این مواد می‌توان به عنوان آشکارسازهای ذرات هسته‌ای[1] استفاده کرد. در اثر عبور ذرات باردار از ماده آشکارسازی، ناحیه‌ی تخریبی و ردّی در ماده‌ی آشکارسازی تشکیل می‌شود که اصلاحا به آن رد نهان (شکل ۱) گفته می‌شود. با قرار دادن آشکارساز تحت تابش در یک ماده شیمیایی مناسب، مسیر تخریبی ردها نهان با سرعت (V_T)، بیشتری نسبت به ماده آشکارسازی (V_B) خورده می‌شوند، در نتیجه در آشکارساز سونش شده حفراتی با قطر در حدود میکرومتر تشکیل می‌شود که با میکروسکوپ اپتیکی قابل رویت خواهند شد. شکل ۲، هندسه رد سونش شده برای حالتی که ذره به صورت عمود به سطح آشکارساز تابیده باشد را نشان می‌دهد.

[1] Solid State Nuclear Track Detector

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



شکل ۱ : ردپای نهان تشکیل شده در آشکارساز ردپای هسته‌ای



شکل ۲ : شکل گیری ردپا در هنگام سونش برای ذرات تابیده شده به صورت عمود بر سطح آشکارساز [۱]

تحت شرایط تابش عمد ذرات به سطح آشکارساز، رد سونش شده دارای هندسه مخروطی شکل با قطر دهانه که از معادله زیر داده می شود، خواهد بود.

$$D = 2V_B t\sqrt{\frac{V_T - V_B}{V_T + V_B}} \qquad (۲)$$

که در آن t، مدت زمان سونش می‌باشد. کمیت‌های مهمی که می-توان از ردهای سونش شده محاسبه کرد عبارتند از: سرعت سونش ماده آشکارسازی V_B ، سرعت سونش ردها V_T، قطر ردها، برد ذرات (R) ،چگالی ذرات فرودی و غیره . این پارامترها در نهایت به کمیت‌های فیزیکی مهمی از ذرات باردار فرودی، مانند نوع و انرژی یون، زاویه فرودی و همچنین دز جذبی در آشکارساز ارتباط داده شده که می توان این کمیت‌ها محاسبه کرد [۱،۲]. از این رو اندازه‌گیری دقیق پارامترهای ردهای سونش شده در آشکارساز ردپای هسته‌ای موضوع مهم و حائز اهمیت در این حوزه محسوب می‌شود. چندین روش برای شمارش و اندازه‌گیری ردهای سونش شده در آشکارسازهای ردپای هسته‌ای وجود دارد. معمول و مستقیم‌ترین روش شمارش و اندازه‌گیری قطر ردها، مشاهده سطح آشکارساز و شمارش و اندازه‌گیری قطر ردها با ابزار چشم، دست و استفاده از خط کش سپس محاسبه پارامترهایی مانند نرخ سونش توده، ردها و غیره می‌باشد. سیستم‌های عکس برداری از سطح شامل میکروسکوپ اپتیکی، سیستم آنالیز عکس ENEA-INMRI [۳-۵]، روش فوتومتری [۶] یا بازتاب داخلی کلی نور[1](TIR) [۷] از ردها می‌باشد. همه این روش های با محدودیت‌هایی مانند زمان بر بودن، گرانقیمت بودن دستگاه یا محدودیت در شمارش ردها با چگالی بالای هستند. اخیراً برای اندازه‌گیری پارامتر ردها نرم افزارهایی طراحی شده که با پردازش تصاویر گرفته شده توسط میکروسکوپ اپتیکی از سطح آشکارساز رد یونی سونش شده، پارامترهای ردها را محاسبه می‌کند [۸]. کارکردن با این نرم‌افزارها برای کاربران دشوار است و همچنین بسیاری از داده‌های با اهمیت در ردهای هسته‌ای با این نرم افزارها محاسبه نمی‌شود. در این کار تحقیقاتی، نرم افزار کاربر پسند[2] آشکارسازها ردپای هسته‌ای (NTD Software) با سرعت اجرای بالا که با زبان برنامه نویسی C# نوشته شده، برای پردازش تصویر ردهای سونش شده در آشکارسازهای ردپای هسته‌ای تهیه و تدوین گردید.

مواد و روش ها:

آشکارساز مورد استفاده در این کار تحقیقاتی، آشکارساز CR-39 تهیه شده در شرکت ایتالیایی (from Intercast Europe SpA via Natta 10/a 43100 Parma) با ضخامت متوسط ۷۰۰ میکرومتر می‌باشد. نمونه‌های مورد مطالعه در ابعادی در حدود $1\times1 cm^2$ بریده شده و به طور عمود تحت تابش ذرات آلفا و پروتون در خلا قرار گرفتند. تابش‌های آلفا، با آلفای گسیلی از چشمه ^{241}Am با انرژی ۵/۴۹ MeV انجام شد. همچنین از پروتون‌ها با انرژی ۱/۵ MeV حاصل از شتابدهنده‌ی سه مگاالکترون ولتی در واندوگراف مرکز تهران استفاده شد. نمونه‌ها در محفظه پیکسی تحت پرتودهی قرار گرفتند. نمونه‌های بمباران شده با ذرات باردار آلفا و پروتون در محلول NaOH، N ۶/۲۵

[1]The obstructed total internal reflection of light

[2] User friend

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

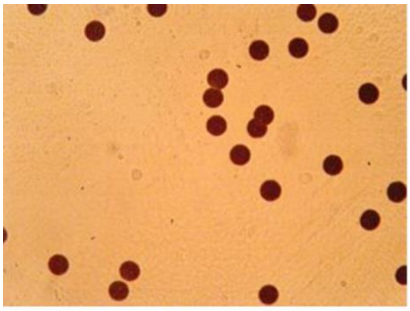
در دمای ثابت $70^{\circ}C$ سونش شده‌اند. ردهای سونش شده زیر میکروسکوپ نوری با بزرگنمایی ۶۳ مشاهده شدند. تصاویر مربوط به ردهای سونش شده به همراه لام کالیبره شده توسط دوربین که به کامپیوتر با برنامه نصبی اسکوپ[1] متصل شده، گرفته می‌شود. داده‌های آزمایشگاهی شامل دو گروه از آشکارسازهای CR-39 می‌باشند با شرایط: ۱-پرتودهی عمودی با ذرات آلفا، ۲-پرتودهی عمودی آشکارساز با مخلوطی از ذرات آلفا و پروتون می‌باشند. از سطح هر گروه از نمونه‌ها، ۳۰ مکان در زیر میکروسکوپ به طور آماری انتخاب شده و تصویر برداری صورت گرفته است. با استفاده از نرم افزار NTD نوشته و تدوین شده در این کار، پردازش عکس‌ها انجام شد.

الگوریتم های پردازش تصویر ردها در نرم افزار NTD:

برای پردازش عکس‌های ردهای سونش شده، ابتدا تصاویر رنگی RGB ثبت شده از ردها (شکل ۳)، با استفاده از روش متوسط گیری به عکس‌های خاکستری تبدیل می‌شود. برای تمیز دادن ردهای از زمینه، هیستوگرام تصویر یعنی توزیع مقادیر خاکستری در داده‌های پیکسلی تصویر رسم شد. برای تصویر با کنتراست پایین، برابرسازی هستوگرام به منظور تشخیص بهتر ردها از زمینه نیز نیز صورت می‌گیرد [۹].برای حذف نویز، صاف کردن و ارتقاء کیفیت لبه‌ها از روش‌های فیلترینگ میانه و دوسوئی[2] [۱۰] استفاده شده است. پنجره‌ی فیلترینگ انتخابی در روش میانه، با ابعاد ۳×۳ پیکسل است. همچنین پارامترهای گاوسی انتخاب شده در فیلترینگ دو سوئی برابر با $\sigma_s = 0.5$ و $\sigma_r = 1$ می‌باشند. با استفاده از روش منطق فازی و الگوریتم جدیدی که برای تعیین لبه‌ها و پیدا کردن ردهای همپوشانی شده در این کار تحقیقاتی ارائه شد، تعیین لبه رده، حذف نویزها، جداکردن و تشخیص ردها همپوشانی شده، شمارش ردها، اندازه‌گیری قطر ردها و تعیین مکان هر رد در عکس انجام شد. خروجی‌های نهایی این نرم‌افزار شامل محاسبه‌ی چگالی، جداسازی ردهای همپوشانی شده و شمارش ردهای همپوشانی شده و همچنین حذف نویزهای زمینه و اشیاء کوچک، اندازه‌گیری شعاع ردها، و تعیین موقعیت مکانی هر رد در تصویر می‌باشد. در صورت وجود منحنی کالیبراسیون برای ذرات مختلف، این نرم افزار می‌تواند ذرات در محیط مخلوط تابش دهی را جداسازی و انرژی ذرات فرودی را تعیین کند.

نتایج

پردازش تصاویر ردهای آلفای سونش شده و جداسازی ردهای همپوشانی شده: تصویر مورد بررسی با استفاده از نرم افزار NTD، نمونه‌ی CR-39 است که به طور عمود با چشمه آلفای (^{241}Am) پرتودهی شده و سپس تحت سونش قرار گرفت. نمونه‌ای از تصاویر اولیه گرفته شده از سطح این نمونه به همراه رد ذرات آلفا (نقاط تیره) در شکل ۳ نشان داده شده‌است. این تصویر با استفاده از نرم افزار NTD مورد پردازش قرار گرفت. پنل نرم افزار NTD به همراه تصویر نهایی پردازش شده از تصویر اولیه شکل ۳ و ردهای آلفا، درشکل ٤ ارائه شده است.



شکل ۳ : تصویر اولیه میکروسکوپ اپتیکی از سطح آشکار ساز CR-39 که با ذرات آلفا پرتودهی شده و سپس سونش شده

داده‌های خروجی این نرم‌افزار برای تصویر پردازش شده ۳، شامل چگالی ردها، قطر ردها و تعداد ردهای همپوشانی شده در تصویر است.

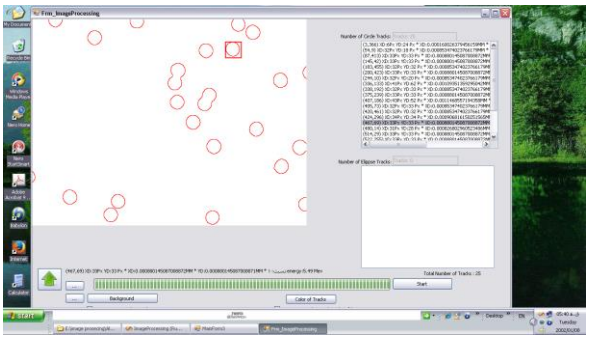
جداسازی ذرات پروتون و آلفا در محیط مخلوط تابشی: به منظور تائید اعتبار و آنالیز آماری ردهای هسته‌ای توسط نرم افزار NTD، یک نمونه که به طور مخلوط تحت تابش آلفا و پروتون قرار گرفتند را مورد بررسی قرار می‌دهیم. نمونه‌ها در ماده سونش به مدت ٦ ساعت تحت سونش قرار گرفتند. از سطح نمونه سونش شده تصویر برداری شد و سپس تصاویر توسط نرم افزار NTD مورد پردازش قرار گرفتند. پنل خروجی تصویر پردازش شده توسط نرم افزار NTD که حاوی ذرات آلفا و پروتون هستند، در

[1] Scope image software

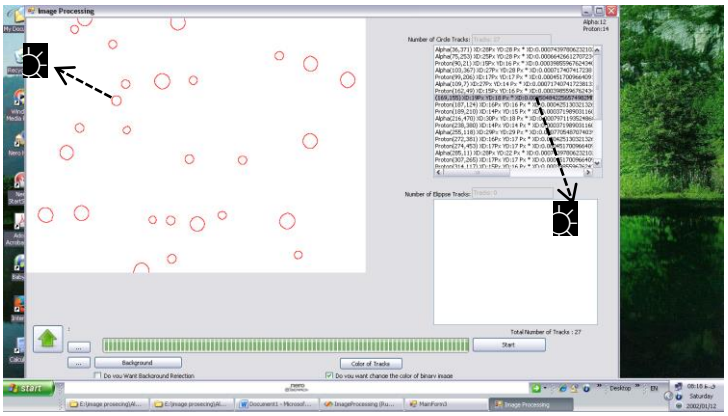
[2] Median and Bilateral filtering

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

شکل ۵ نشان داده شده‌است. پردازش‌ها در مدت زمانی چند ثانیه توسط این نرم‌افزار انجام شده و اطلاعات مربوط به هر رد در سمت راست پنل ارائه شده است. در سمت راست و بالای پنل-های خروجی این نرم‌افزار، تعداد پروتون‌ها و آلفای شمارش شده در تصویر نشان داده می‌شود. در لیست داده‌های نیز عنوان هر ذره به همراه موقعیت مکانی رد سونش شده آن در تصویر، قطر ردها و انرژی هر ذره داده می‌شود. با کلیک روی هر داده در لیست داده‌ها می توان هر رد را در تصویر مشخص کرد و اطلاعات مربوط به آن ردِّ کلیک شده در زیر تصویر پردازش شده ارائه خواهد شد (اطلاعاتی مانند قطر رد و مکان آن در تصویر). در تصویر پردازش شده مربوط به تابش‌دهی مخلوط آلفا (ردهای با قطر بزرگ) و پروتون (ردهای با قطر کوچک) (شکل ۵)، تعداد ذرات شمارش شده کل برابر ۲۷ می‌باشد. که ۱۲ عدد پروتون (۱/۵ MeV) و ۱۴ عدد آلفا (۵/۴۹ MeV) شناسایی شده‌اند.



شکل ٤: پنل خروجی نرم افزار NTD پس از پردازش نهایی تصویر ردها و مشخص کردن لبه‌ها



شکل ۵ : پنل تصویر نهایی پردازش شده توسط نرم افزار NTD

با دقت بیشتر در تصویر اولیه و تصویر پردازش شده مشاهده می-کنیم که یکی از ردها (که در شکل با ☼ مشخص شد)، دارای قطری متفاوت با پروتون‌های با انرژی ۱/۵MeV و ذرات آلفای با انرژی ۵/۴۹ MeV می‌باشد. در واقع این ذره ممکن است مربوط به پروتون و یا ذرات دیگری (تابش کیهانی) باشد که فعلاً در داده-ی کتابخانه‌ای اطلاعات مربوط به آن ذخیره نشده‌است.

نتیجه‌گیری

در این کار تحقیقاتی نرم‌افزار پردازش تصویر برای پردازش تصاویر ردهای سونش شده در آشکار ساز ردپای هسته‌ای تهیه و تدوین شد. با استفاده از این نرم‌افزار و اعمال الگوریتم‌های پردازش مناسب برای ردهای سونش شده، تصاویر ردها پردازش و آنالیز می‌شود. تعداد ذرات برخوردی به آشکارساز، ابعاد و هندسه ردها، نوع ذره برخوردی و همچنین انرژی ذرات فرودی را می توان با استفاده از این نرم افزار تعیین کرد. همچنین دقت اندازه-گیری قطر ردها در همه‌ی نمونه‌ها، یک پیکسل می‌باشد. در ضمن برای جداسازی ذرات آلفا و پروتون در ناحیه مخلوط تابش‌دهی و همچنین تعیین انرژی ذرات برخوردی با آشکارساز می‌توان از منحنی کالیبره‌ای که قبلا در آزمایشگاه به طور مستقل برای ذرات آلفا و پروتون در انرژی های مختلف در زمان سونش معین تهیه شده بود، استفاده کرد.

مرجع ها:

[1] Durrani, S. and R. Bull, *Solid State Nuclear Track Detection: Principles, Methods and Applications, 1987*, Pergamon Press, Oxford.

[2] Khan, H., et al., *Some gross features of the interaction of semirelativistic O 16 and C 12 ions with Au 197 targets.* Physical Review C, 1983. **28**(4): p. 1630.

[3] De Felice, P., et al. *THE NOVEL TRACK RECORDING APPARATUS FROM SSNTD FOR RADON MEASUREMENT*. in *Paper presented at the First East European Radon Symposium–FERAS*. 2012.

[4] Grove, A.S., *Physics and technology of semiconductor devices*. 1967: Wiley.

[5] De Groot, S., et al., *Alpha-, beta-and gamma-ray spectroscopy, vol. 2North-Holland*, 1968, Amsterdam.

[6] Monnin, M., *Methods of automatic scanning of SSNTDs.* Nuclear Instruments and Methods, 1980. **173**(1): p. 63-72.

[7] Popov, P. and D. Pressyanov, *Track density assessment by obstructed total internal reflection of a laser beam.* Radiation measurements, 1997. **27**(1): p. 27-30.

[8] Nejad, H.C., et al., *A semi-automated hybrid algorithm for accurate detection and counting of chemically etched tracks.* Radiation Effects and Defects in Solids, 2013. **168**(11-12): p. 988-1003.

[9] Gonzalez, R. C.; and Woods, R. E. Digital Image Processing, Third Edition, 2008.

[10] Zhang, S.; and Karim, M.A. IEEE Signal Process. Lett. 2002, 9, 360-363.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد

http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

تعیین میزان منیزیم دریافتی حاصل از نوشیدن چای با استفاده از آنالیز به روش فعالسازی نوترونی

شاکری جویباری ، بنین[1] ؛ رضایی، حامد[2]؛ قدس، حسین[1]

[1] سازمان انرژی اتمی ایران، پژوهشگاه علوم و فنون هسته ای ، پژوهشکده فیزیک و شتابگرها

[2] سازمان انرژی اتمی ایران، دفتر پادمان هسته ای ملی

چکیده

منیزیم یک ماده مهم معدنی است که در واکنشهای بسیاری در بدن انسان نقش داشته و کمبود آن باعث عوارض مهمی می گردد. یکی از منابع احتمالی منیزیم، نوشیدنی هایی مانند چای است که به طور روزانه توسط افراد مصرف می شود. هدف از این کار پژوهشی، اندازه گیری غلظت منیزیم موجود در پنج نوع برگ چای خشک (از ارقام پرمصرف چای در ایران) و همچنین میزان منیزیم دریافتی افراد پس از نوشیدن دم کرده هر کدام از این چای ها است. برای انجام این بررسی برگ چای خشک و تفاله چای بعد از دم کشیدن آنالیز شدند. غلظت منیزیم در نمونه ها با استفاده از آنالیز به روش فعالسازی نوترونی ابزاری (به دلیل غیر مخرب بودن، دقت بالا و حساسیت زیاد این روش) تعیین شد. میزان غلظت منیزیم در برگ خشک پنج نوع چای، از مرتبه 10^3 ppm به دست آمد. همچنین با مقایسه نتایج آنالیز برگ خشک چای و تفاله آن میزان استخراج منیزیم در دم کشیده چای، مورد ارزیابی قرار گرفت. نتایج آنالیز نشان می دهد میزان استخراج منیزیم در دم کشیده چای از مرتبه 10^2ppm است.

واژه های کلیدی: *منیزیم، آنالیز به روش فعالسازی نوترونی، برگ خشک چای*

Determination of Magnesium Concentration in Black Tea leaves and Tea Infusion Residue by Instrumental Neutron Activation analysis

Shakeri Jooybari, Banin[1,*], Rezaei, Hamed[2], Ghods, Hossein[1]

[1]Physics & Accelerators Research School, Nuclear Science and Technology Research Institute (NSTRI), P O Box 14395-836, Tehran, Iran

[2]Atomic Energy Organization of Iran, P.O. Box 14155-4494, Tehran, Islamic Republic of Iran

Abstract

Magnesium is an important mineral that is involved in many reactions in the human body and its deficiency causes important complications. One of the sources of magnesium is beverages such as black tea, which are consumed daily by people. The aim of this study is determine the concentration of magnesium content in five types of black tea leaves (One of the most widely consumed tea in Iran) and The extraction efficiencies of the Magnesium in tea infusion was evaluated by comparing Magnesium concentrations of the tea leaves before and tea waste. Concentrations of Magnesium were determined by Instrumental Neutron Activation analysis (Due to the nondestructive, multi-element analytical capability and high sensitivity and high accuracy). The concentration of magnesium in the black tea leaves of five types of tea was obtained about10^3 ppm . The amount of extraction of Magnesium in tea infusion was evaluated about 10^2 ppm.

***Keywords**: Magnesium, Instrumental Neutron Activation analysis, Black Tea leaves*

PACS No. 2080

مقدمه

منیزیم در بیش از ۳۰۰ واکنش آنزیمی در بدن انسان نقش مکمل دارد. این واکنش های آنزیمی در ساخت پروتئین ها، انقباض عضلات، عملکرد صحیح سیستم عصبی، کنترل قند خون، کنترل فشارخون و تولید انرژی سلولی کاربرد دارند. وجود منیزیم برای تنفس سلولی ضروریست. منیزیم همچنین برای ساخت استخوانها و حفظ سلامت آنها و نقل و انتقال یونهای پتاسیم و کلسیم به داخل و خارج سلول مورد نیاز است [1-4]. اخیرا

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد

http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مطالعات زیادی صورت گرفته که نقش قوی و اساسی منیزیم را در پیشگیری از بیماری های قلبی عروقی تأیید می کند [5،6] ، نقشی که مدت هاست و به طور واضح و روشن بیان شده است. کارشناسان تغذیه می‌گویند میزان منیزیم مورد نیاز هر فرد باید حداقل 450-500 میلی‌گرم در روز یا حدود 4000 ppm باشد [7] . از این رو دانش در مورد میزان منیزیم دریافتی ناشی از مواد غذایی که به طور روزانه توسط هر فرد مورد استفاده قرار می‌گیرد، امری ضروری است. یکی از نوشیدنی‌هایی پرمصرف در ایران، داروهای گیاهی و چای سیاه است. در این کار پژوهشی میزان منیزیم دریافتی ناشی از نوشیدن چای سیاه (انواع پرمصرف چای در ایران) با استفاده از روش آنالیز فعالسازی نوترونی ابزاری (INAA) مورد بررسی قرار گرفت [8]. آنالیز به روش فعالسازی نوترونی یک روش تحلیل عنصری کمی و کیفی بسیار دقیق و توانمند، برای تعیین همزمان 30-25 عنصر ماتریسی با دقت ppm-ppb در نمونه های مختلف به شمار می رود.

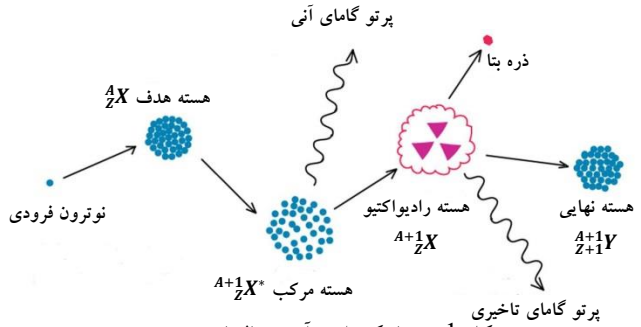
در کار پژوهشی که توسط Ewelina Chajduk [9] انجام شد، غلظت 23 عنصر در نمونه‌های چای با روش آنالیز فعالسازی نوترونی اندازه‌گیری شد، غلظت منیزیم در سه نوع چای مختلف، 1920 ppm، 2040و 2110 اندازه گیری شد. همچنین در کار تحقیقاتی که توسط Daniela Haidu و همکاران انجام شد [10]، غلظت عناصر مختلف در گیاهان دارویی با روش آنالیز فعالسازی نوترونی تعیین گردید، بر اساس این تحقیق، غلظت منیزیم در چند نوع گیاه دارویی مختلف بین 1700 ppm تا 7000 می باشد.

در این تحقیق از پنج نوع چای سیاه در ایران، که به صورت چای نوع 1، 2، 3، 4 و 5 شماره گذاری شده [از انواع چای نورجعفری، چای لاهیجان (فله‌ای)، چای شهرزاد، چای گلستان و چای احمد(سیلان)] به عنوان ارقام پر مصرف چای در ایران استفاده شد. میزان منیزیم استخراج شده در دم کشیده چای، با مقایسه غلظت منیزیم در چای خشک و تفاله آن مورد ارزیابی قرار گرفت.

مواد و روش ها

تهیه مواد و آماده سازی نمونه: نمونه‌های چای سیاه از بازار تهیه گردید. ابتدا چای خشک به صورت پودر ریز درآورده شد. در مرحله دوم 5 گرم چای با 500 میلی لیتر آب جوش (دمای 96 درجه سانتیگراد) به مدت 10 دقیقه در حرارت بخار کتری (دمای 96 درجه سانتیگراد) دم کشید. سپس تفاله آن جدا و پس از خشک کردن، پودر گردید. نمونه‌ها پس از پودر شدن به مدت 24 ساعت در دمای 85 درجه سانتیگراد در گرمکن خشک گردیدند.

تعیین غلظت منیزیم با آنالیز به روش فعالسازی نوترونی ابزاری: آنالیز به روش فعالسازی نوترونی (NAA) به عنوان یک روش قدرتمند برای آنالیز نمونه‌ها وتعیین کیفی و کمی عناصر موجود در نمونه بکار می‌رود. براساس روش فعالسازی نوترونی (NAA) می توان بیش از 74 عنصر را آنالیز کرد. اساس این روش بر پایه تبدیل عناصر مختلف موجود در نمونه به ایزوتوپ‌های رادیو اکتیو در اثر تابش‌دهی با نوترون است. اگر انرژی نوترون بسیار کم باشد (یعنی نوترون‌های حرارتی)، واکنش (n,γ) مهمترین واکنش می‌باشد. در آنالیز به روش فعالسازی نوترونی با استفاده از باریکه نوترون‌های کند شده راکتور، واکنش (n,γ) مهمترین واکنش می‌باشد. در اثر تابش‌دهی ایزوتوپ‌های پایدار که اکثر عناصر تشکیل دهنده نمونه‌های معدنی، مواد زیست شناسی و ... را شامل می‌شوند، در اثر نوترون‌گیری به مواد رادیو اکتیو تبدیل می‌شوند (شکل 1).



شکل 1 : شماتیکی از فرآیند فعالسازی نوترونی

این عناصر رادیواکتیو متناسب با مشخصه‌ی نیمه عمرشان که از ثانیه تا سال متغییر است شروع به واپاشی پرتو گاما (γ) با انرژی مشخص می‌کنند. برای تشخیص منبع این پرتوهای گاما بلافاصله طیف آنها بوسیله آشکارسازهای نیمه-هادی مانند

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

آشکارساز HPGe ثبت می‌شود. از آنجایی که هر رادیو نوکلئید پرتو گاما با انرژی مشخصی ساطع می‌کند بنابراین پرتوهای گامای منتشر شده مشخصه ایزوتوپ‌های تشکیل دهنده و در نتیجه بیانگر عناصر موجود در نمونه می‌باشند. برای آنالیز منیزیم در این کار تحقیقاتی، نوع واکنش و مشخصه‌های رادیونوکلئید تولید شده تحت تابش نوترون، در جدول 1 ارائه شده است.

جدول1 : مشخصات رادیونوکلئید تولید شده از Mg-26 تحت تابش نوترون حرارتی

ایزوتوپ	Mg-27
نیمه عمر	9.46 دقیقه
انرژی (keV)	843.76, 1014.43
احتمال واپاشی گاما (%)	71.40, 28.60
مد تولید	Mg-26(n,γ)

در این تحقیق از آنالیز فعالسازی نوترونی ابزاری با روش مقایسه ای [11] برای تعیین غلظت منیزیم در نمونه‌های چای استفاده شده است که این روش به طور مختصر در ذیل شرح داده می‌شود. در روش مقایسه‌ای، نمونه مجهول و یک استاندارد مناسب آن به طور همزمان تحت تابش نوترون راکتور قرار می‌گیرند. سپس نمونه‌های استاندارد و مجهول اکتیو شده، در مکان‌های هندسی یکسان از سطح آشکارساز HPGe تحت شمارش قرار می‌گیرند و طیف نمونه‌ها با نرم افزارهای مناسب مانند *Gamma Vision* ثبت می‌گردد. با استفاده از طیف‌های ثبت شده و اندازه گیری سطح زیر پیک انرژی رادیونوکلئید مورد نظر، می‌توان غلظت عناصر مورد نظر را تعیین کرد. معادله زیر برای محاسبه‌ی جرم عنصر نمونه مجهول نسبت به نمونه استاندارد به‌کار می‌رود:

$$\frac{A_{sam}}{A_{std}} = \frac{m_{sam}\left(e^{-\lambda T_d}\right)_{sam}}{m_{std}\left(e^{-\lambda T_d}\right)_{std}} \quad (1)$$

که در آن A_{sam} و A_{std} به ترتیب اکتیویته‌ی نمونه‌های مجهول و استاندارد هستند، m جرم عنصر، $\lambda = \frac{\ln(2)}{T_{1/2}}$ ثابت واپاشی هسته رادیونوکلئید مربوطه و T_d زمان واپاشی (یا زمان خنک سازی) است. مدت زمان پرتودهی و شمارش برای نمونه‌های مجهول و استاندارد یکسان انتخاب می‌شوند و بدین وسیله فقط فاکتور زمان خنک‌سازی باقی می‌ماند. بنابراین رابطه‌ی فوق به‌صورت زیر بازنویسی می‌شود:

$$C_{sam} = C_{std} \cdot \frac{w_{std}}{w_{sam}} \cdot \frac{e^{-\lambda t_{d(std)}}}{e^{-\lambda t_{d(sam)}}} \cdot \frac{N^{sam}}{N^{std}} \quad (2)$$

که در آن C مربوط به غلظت نمونه های معلوم و مجهول ، W مربوط به وزن نمونه‌های معلوم و مجهول و N سطح زیر پیک خالص انرژی گامای *Mg-27* می‌باشد. برای تعیین غلظت منیزیم با این روش، طیف‌های ثبت شده نمونه مجهول و استاندارد با استفاده از نرم افزار *Span* آنالیز شدند.

نمونه استاندارد مورد استفاده در این تحقیق، نمونه مرجع گیاهی *IAEA-V-10* می‌باشد. به منظور ارزیابی صحت و دقت اندازه گیری‌ها، آنالیز نمونه کنترل کیفی *IAEA-V-10* به عنوان نمونه مجهول با استفاده از یک نمونه دیگر از همان ماده مرجع به عنوان استاندارد صورت گرفته است. منابع اصلی خطا در معادله (2)، ناشی خطای غلظت عنصر گواهی شده در نمونه استاندارد، مساحت سطح زیر پیک اندازه‌گیری شده و خطای ناشی از توزین نمونه است. هر چند خطای ناشی زمان خنک سازی، و همچنین ثابت واپاشی نیز در این معادله وجود خواهد داشت که معمولا سهم آنها بسیار ناچیز است که می توان از آن صرفنظر کرد. معادله مورد استفاده برای محاسبه خطا غلظت (معادله 2)، از رابطه زیر به دست می آید:

$$\delta C_{sam} = \sqrt{\left(\frac{\partial C_{sam}}{\partial N^{sam}}\,\delta N^{sam}\right)^2 + \left(\frac{\partial C_{sam}}{\partial N^{std}}\,\delta N^{std}\right)^2 + \cdots + \left(\frac{\partial C_{sam}}{\partial C_{std}}\,\delta C_{std}\right)^2} \quad (3)$$

پرتودهی، شمارش و آنالیز نمونه‌ها: در این آزمایش از باریکه نوترونی یکی از کانال‌های پرتودهی رآکتور تحقیقاتی تهران استفاده شد. قدرت راکتور، 4.5 MW بوده و شار نوترون حرارتی در این کانال در حدود $10^{12} n.cm^{-2}.s^{-1}$ می باشد. مدت زمان پرتودهی نمونه‌ها برای آنالیز منیزیم موجود در نمونه‌ها، با توجه به اینکه رادیونوکلئید تولید شده دارای نیمه عمری از مرتبه دقیقه است، 30 ثانیه بوده است. بعد از زمان خنک‌سازی در حدود 10 الی 15 دقیقه، نمونه‌ها مجهول و استاندارد به مدت 300 ثانیه با آشکارساز HPGe تحت شمارش قرار گرفته و طیف آنها با استفاده از نرم افزار Gamma Vision [12] ثبت گردید. سپس طیف‌ها با استفاده از نرم افزار Span [13]، آنالیز شده و غلظت منیزیم تعیین گردید.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

نتایج

غلظت منیزیم برای نمونه‌های چای و نمونه‌های تفاله چای بعد از دم کردن چای، با استفاده آنالیز به روش فعالسازی نوترونی تعیین گردید. نتایج حاصل در جدول 2 ارائه شده است. همچنین برای مقایسه میزان استخراج منیزیم در دم کشیده چای، تفاضل بین غلظت منیزیم در برگ خشک چای هر یک از نمونه‌ها و تفاله آن محاسبه گردید، نتایج حاصل در جدول 3 ارائه شده اند.

جدول2 : نتیجه آنالیز عنصری منیزیم نمونه‌های چای

نوع چای	میانگین غلظت منیزیم در برگ خشک چای برای دو نمونه (ppm)	میانگین غلظت منیزیم در دو نمونه تفاله چای پس از دم کشیدن (ppm)
1	3050 ± 9.0 ٪	2830 ± 9.1 ٪
2	3480 ± 9.4 ٪	3210 ± 9.6 ٪
3	2620 ± 6.8 ٪	2440 ± 8.9 ٪
4	2750 ± 8.7 ٪	2160 ± 9.7 ٪
5	2690 ± 7.5 ٪	1990 ± 8.7 ٪

جدول 3 : میزان منیزیم استخراج شده در دم کشیده چای

نوع چای	میزان غلظت منیزیم در دم کشیده چای(ppm)
1	220
2	270
3	180
4	590
5	700

نتیجه‌گیری

در این کار تحقیقاتی میزان منیزیم موجود در پنج نوع از ارقام پرمصرف چای سیاه در ایران با استفاده از روش آنالیز فعالسازی نوترونی ابزاری تعیین شد. برای تعیین میزان استخراج منیزیم در دم کشیده چای، غلظت منیزیم در نمونه‌های برگ خشک چای و همچنین تفاله چای پس ار دم کشیدن چای اندازه گیری شد. نتایج غلظت منیزیم اندازه گیری شده در پنج نوع چای نشان می دهد میزان این عنصر در برگ‌های خشک چای نوع 1 و نوع 2 در مقایسه با چای‌های دیگر بیشتر است (غلظت منیزیم در چای نوع 1، 3050 ppm و چای نوع 2، 3480 ppm اندازه گیری شد) . با مقایسه غظت منیزیم در برگ خشک چای‌ها و همچنین تفاله آن، میزان استخراج منیزیم در انواع چای مورد بررسی در این کار تحقیقاتی را می توان ارزیابی کرد. نتایج این ارزیابی نشان می‌دهد میزان منیزیم استخراج شده در دم کشیده چای، در بازه 180 ppm تا 700 ppm قرار دارد. با این ارزیابی می‌توان به این نتیجه رسید که نوشیدن پنج موع چای سیاه ایرانی، به طور متوسط 4.5٪ تا 18٪ نیاز روزانه افراد به منیزیم را تامین می‌کند (با توجه به اینکه مقدار متوسط مورد نیاز روزانه هر فرد حدود 4000 ppm است). البته این میزان جذب به دفعات و میزان استفاده شده افراد از چای نیز بستگی دارد. همانطور که در جدول (3) به وضوح دیده می شود، میزان استخراج منیزیم در دو نوع 4 و 5 بیشتر از بقیه انواع چای مورد مطالعه در این کار پژوهشی می‌باشد که این تفاوت می‌تواند به دلیل ترکیب عنصری و ملکولی و همچنین افزودنی‌های موجود در این دو نوع نمونه چای باشد که باعث شده حلالیت پذیری منیزیم حین دم کشیدن در این دو نوع چای بیشتراز بقیه چای ها باشد.

مرجع‌ها

[1] Elin, Ronald J. "Magnesium metabolism in health and disease." Disease-a-month 34.4 (1988): 166-218.

[2] De Baaij, Jeroen HF, Joost GJ Hoenderop, and René JM Bindels. "Magnesium in man: implications for health and disease." *Physiological reviews* 95.1 (2015): 1-46.

[3] Volpe, Stella Lucia. "Magnesium in disease prevention and overall health." Advances in nutrition 4.3 (2013): 378S-383S.

[4]https://ods.od.nih.gov/factsheets/Magnesium-Consumer/#:~:text=Magnesium%20is%20a%20nutrient%20that,protein%2C%20bone%2C%20and%20DNA.

[5] Del Gobbo, Liana C., et al. "Circulating and dietary magnesium and risk of cardiovascular disease: a systematic review and meta-analysis of prospective studies." The American journal of clinical nutrition 98.1 (2013): 160-173.

[6] S.E. Chiuve, Q. Sun, G.C. Curhan, et al. Dietary and plasma magnesium and risk of coronary heart disease among women J Am Heart Assoc, 2 (2013), p. e000114

[7] Altura, B. M., and B. T. Altura. "Atherosclerosis and magnesium." Calcium and magnesium in drinking-water: public health significance (2009): 77-83.

[8] Guinn, V.P. and Wagner, C.D., 1960. Instrumental neutron activation analysis. Analytical chemistry, 32(3), pp.317-323.

[9] Haidu, Daniela, et al. "Elemental characterization of Romanian crop medicinal plants by neutron activation analysis." *Journal of analytical methods in chemistry* 2017 (2017).

[10]Chajduk, Ewelina. "Elemental analysis of black and green tea leaves by instrumental neutron activation analysis." *Chemia Analityczna* 54.5 (2009): 841.

[11] Hamidatou, Lylia, et al. "Concepts, instrumentation and techniques of neutron activation analysis." Imaging and Radioanalytical Techniques in Interdisciplinary Research—Fundamentals and Cutting Edge Applications, InTech, Rijeka (2013): 141-178.

[12] ORTEC, EGG. "GammaVision-32: Gamma-Ray Spectrum Analysis and MCA Emulator." Software User's Manual 5 (1999).

[13] Liyu, Wang. "IAE/SPAN V5. 1 Multipurpose Gamma-Ray Sprectrum Analysis Software." China Institute of Atomic Energy, Beijing (1995).

این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد :
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

شبیه سازی حسگر فیبری حلقوی و بررسی تاثیر پارامترهای مختلف بر توان خروجی حسگر

شمسی، یاسر[۱] ؛ ندافان، مرضیه [۱]؛ ضمیر انوری، جاوید[۱]؛ کاظمی زاده، فاطمه[۲]

[۱]دانشکده فیزیک دانشگاه تربیت دبیر شهید رجایی، لویزان، تهران

[۲] گروه فیزیک دانشگاه تربیت مدرس

چکیده

در این مقاله از لحاظ تئوری یک حسگر فیبری حلقوی براساس لیزر فیبری حلقوی شبیه سازی شده است.این کار بر اساس حل معادلات لیزر فیبری حلقوی آلائیده به یون اربیوم انجام شده است. وقتی که کاواک لیزر باگاز پر می شود میزان افت کاواک ودر نتیجه توان خروجی تغییر می کند. با استفاده از این تغییرات و با کالیبره کردن آن می توان غلظت گاز ورودی را اندازه گرفت. تاثیر توان ورودی، طول فیبر، بازتاب پذیری و غلظت گاز بر حساسیت حسگر بررسی شده است.

واژه های کلیدی:*حسگر، فیبر، توان خروجی*

Simulation of cavity fiber sensor and study the effect of different parameters on the output power of sensor

Shamsi , Yaser [1]; Nadafan , Marzieh [1] ; Zamir Anvari, Javid[1] ; Kazemi zadeh,Fatemeh [2]

[1] Faculty of Physics Shahid Rajaii Teacher Traning University,Lavizan,Tehran,
[2] Department of Physics,Tarbiat Modares University,

Abstract

In this paper, theoretically, a ring fiber sensor has been simulated based on ring fiber laser. This has been done based on solving the equations of ring fiber laser doped with erbium ion. When the cavity of laser is filled with gas, the rate of cavity drop down and thus the output power changes. Using these changes and calibrating it, the concentration of the input gas can be measured. Also, it was investigated the effect of input power, fiber length, reflectivity and gas concentration on the sensor sensitivity.

Keywords*; sensor, fiber, output power*

مقدمه

در سال های اخیر حسگر های فیبر نوری به دلیل حساسیت بالا وقابلیت اندازه گیری نمونه در ابعاد دلخواه بسیار مورد توجه قرار گرفته اند. از کاربردهای حسگر های فیبر نوری می توان به استفاده از آنها در تست گاز، تحلیل های پزشکی وشیمیایی تکنولوژی مولکولی، زیست محیطی و دریایی، ارزیابی محصولات صنعتی اشاره کرد [۳-۱]. در این میان حسگر های فیبری حلقوی به خاطر حساسیت بالا، وزن ناچیز، ابعاد کوچک، ساخت آسان، ایمن بودن در محیط قابل اشتعال، و ایمن بودن در مقابل تداخل امواج الکترومغناطیس مورد توجه قرار گرفته است. این گونه از حسگر ها علاوه بر فشرده سازی وکاهش حجم به دلیل اتلاف ناشی از خمش سبب حذف مد های بالاتر می شود[۴]. در این مقاله توان خروجی در غلظت های متفاوت استیلن، بازتاب پذیری های مختلف فیبر، و طول های مختلف برای حسگرفیبری حلقوی بررسی شده است.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

معادلات وتئوری

برای محاسبه توان خروجی حسگر فیبری حلقوی از یک معادله تحلیلی استفاده شده است که قبلا برای لیزرهای فیبری حلقوی آلائیده به یون اربیوم به دست آمده بود که معادله به صورت زیر است[۵].

$$P^{out} = P^{in}G.V_1(1-R) \qquad (۱)$$

P^{out}توان خروجی و V_1اتلاف مولفه های غیر فعال فیبرمانند فیلتر، اتصال دهنده ها و تلفات در ورودی وخروجی فیبر است. جذب گاز از قانون بیر لامبرت پیروی می کند[۶].

$$I_T(\omega) = I_0(\omega)e^{[-\gamma\alpha(\omega)CL_a]} \qquad (۲)$$

وجود گاز طبق این قانون باعث جذب مضاعف موج ورودی می شود. ما در این مقاله برای در نظر گرفتن اثر جذب گاز، آن را به صورت یک جمله اصلاحی افت در معادلات وارد کرده ایم. جمله اصلاحی تحت عنوان α به V_1 اضافه شده است تا شبیه سازی انجام شده بتواند مقادیر تجربی را پیش بینی کند. جمله اصلاحی به صورت $\alpha = -۰/۳۷۵\times V_t$است و V_t از رابطه ی (۳) به دست می آید که ACغلظت استیلن است. پس از اضافه کردن جمله اصلاحی V_1 از رابطه (۴) بدست می آید.

$$V_t = ۱ - e^{-۲۰۰AC} \qquad (۳)$$

$$V_1 = ۰/۳۷۶+\alpha \qquad (۴)$$

پس از اضافه کردن جمله اصلاحی شبیه سازی انجام شده با مدل تجربی تطابق بسیار خوبی دارد [۶].P^{in}توان ورودی فیبر حلقوی می باشد که از رابطه زیر به دست می آید:

$$P^{in} = \frac{1}{\lambda_L(G-1)}.\left\{\lambda_P.P_P\left(1-\left(\frac{G}{G_{max}}\right)^{\delta}\right) - \lambda_L.p_L^{sat}\left(\alpha_L.L + ln(G)\right)\right\} \qquad (۵)$$

Gبهره است واز رابطه ی $G = \frac{1}{R.V}$قابل محاسبه است که Rدرصد بازتاب پذیری وVاتلاف داخل کاواک است که به صورت حلقه در آمده است ومقدار آن۰/۳۰۵ می باشد.

λ_L طول موج لیزر و مقدار آن ۱۵۳۳نانومتر، λ_P طول موج دمش را نشان می دهد و مقدار آن ۹۸۰نانومتر می باشد.P_P توان دمش پمپ ومقدار آن ۵۲میلی وات است.P_L^{sat}توان اشباع لیزر ومقدار آن۰/۵۲ میلی وات است و α_L ضریب جذب موج لیزرو مقدارآن $۰/۶۱۱m^{-۱}$ است.

Lطول فیبر فعال می باشد و.G_{max} بیشترین بهره ممکن می باشد که از رابطه زیر قابل محاسبه است:

$$G_{max} = e^{\left(\left(\frac{\alpha_p}{\delta}-\alpha_L\right).L\right)} \qquad (۶)$$

α_P ضریب موج دمش ومقدار ان $۰/۴۲m^{-۱}$ است و δ نسبت توان اشباع برای طول موج لیزر و طول موج دمش است که از رابطه زیر به دست می آید:

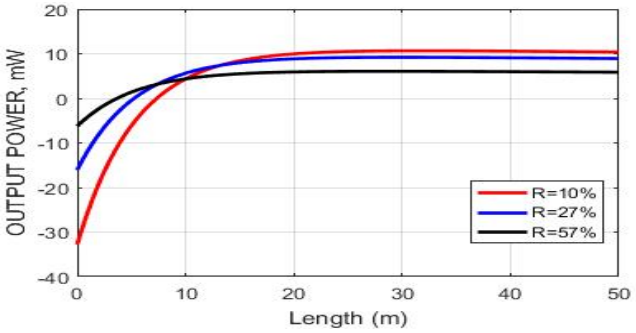
$$\delta = \frac{(\lambda_L.P_L^{sat})}{(\lambda_p.p_p^{sat})} \qquad (۷)$$

p_p^{sat} توان اشباع دمش می باشد که مقدار آن۰/۴۲ میلی وات است.

برای یک حسگر پارامتر های کیفی مختلفی تعریف می شود که ملاک ارزیابی قرار می گیرد. از مهم ترین این پارامتر ها می توان به حساسیت حسگر اشاره نمود که بهتر است که حساسیت تا حد امکان بالاباشد.

نتایج شبیه سازی

جهت انجام شبیه سازی از نرم افزار MATLAB استفاده شده است. نمودار توان خروجی بر حسب طول فیبر برای بازتاب پذیری های مختلف در شکل ۱نشان داده شده است.در این نمودار غلظت استلین را صفر در نظر گرفته ایم.می خواهیم تخمینی از طول بهینه ومیزان اشباع داشته باشیم.



شکل۱-نمودار توان خروجی برحسب طول فیبر

با افزایش طول طبق رابطه (۵) توان ورودی افزایش می یابد ودر نتیجه با افزایش توان ورودی طبق رابطه (۱)، توان خروجی هم افزایش می یابد. با افزایش طول به دلیل امکان جذب بیشتر توان دمش، توان خروجی بیشتری حاصل می شود این افزایش تا رسیدن به طول بهینه ادامه دارد، ولی با گذشت از آن توان خروجی کاهش

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

می یابد. علت کاهش توان خروجی به ازای طول های بیشتر از طول بهینه، بالارفتن توان آستانه در طول های بالا است.

از نمودار شکل ۱ به خوبی مشاهده می شود که برای بازتاب پذیر ۱۰درصد نمودار باشیب بیشتری به بیشینه توان خروجی می رسد وتوان خروجی برای بازتاب پذیری ۱۰درصد بیشتر از سایر بازتاب پذیری ها می باشد.برای بازتاب پذیری ۵۷درصد توان خروجی با شیب ملایم تری به مقدار ثابتی می رسد.

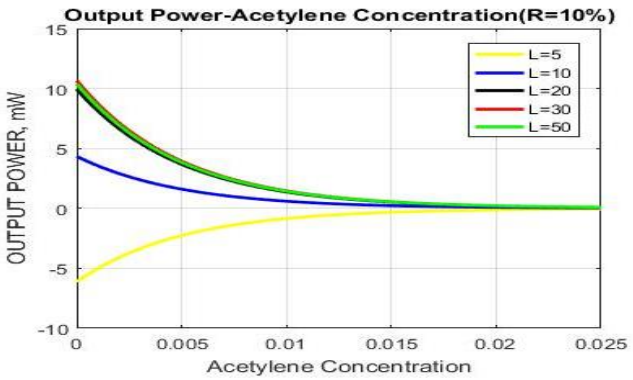
تقریبا تا طول فیبر ۱۲/۵متر توان خروجی برای بازتاب پذیری ۲۷درصد بیشتر از توان خروجی مربوط به بازتاب پذیری ۱۰درصد می باشد وبرای طول فیبر بالاتر از ۱۵متر بازتاب پذیری ۱۰درصد دارای توان خروجی بیشتری است.

برای فیبر با طول بیشتر از ۲۰متر توان خروجی به مقدار ثابتی می رسد وبرای طول فیبر بیشتر از ۲۰متر برای درصد های مختلف بازتاب پذیری افزایشی در توان خروجی مشاهده نمی شود.درنتیجه بیشترین توان خروجی مربوط به طول فیبر ۲۰متر وبازتاب پذیری ۱۰درصد وبیشتر از طول فیبر ۲۰متر اشباع می شود وتوان خروجی بیشتری نداریم.

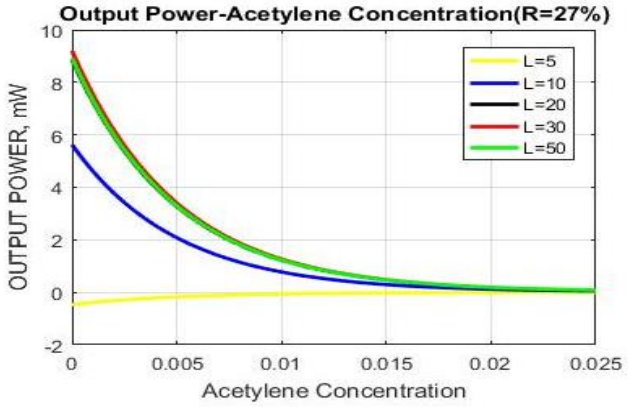
نمودار توان خروجی بر حسب غلظت استیلن برای طول ها وبازتاب پذیری های مختلف در شکل ۲نشان داده شده است.می خواهیم میزان حساسیت را با وجود گاز استیلن اندازه بگیریم.پارامتر حساسیت از رابطه زیر به دست می اید.[۶]

$$s = \frac{\Delta p_{out}}{\Delta_{AC}} \qquad (۸)$$

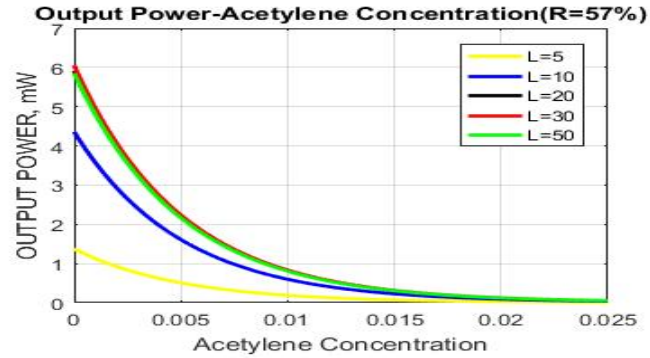
Sمیزان حساسیت حسگر، Δp_{out}تغییرات توان خروجی و Δ_{AC}تغییرات غلظت استیلن را نشان می دهد.



(a)



(b)



(c)

شکل ۲-نمودار توان خروجی بر حسب غلظت استیلن برای باز تاب پذیری معین وطول فیبر متفاوت

در شکل ۲ قسمت a برای بازتاب پذیری ده درصد وطول فیبر ۵متر با افزایش درصد غلظت استیلن توان خروجی افزایش می یابد. برای طول فیبر ۲۰تا۵۰متر با تغییر بسیار کمی که برای درصد غلظت استلین داشته ایم توان خروجی به مقدار قابل ملاحظه ای کاهش یافته است. علاوه بر این برای طول فیبر ۲۰تا۵۰ متر سه نمودار روی هم قرار دارند ورفتار یکسانی از خود نشان می دهند.درصورتی که طول فیبر ۱۰متر باشد با افزایش غلظت از صفر به ۰/۰۰۵ppmتغییرات توان خروجی لیزر ۲/۵میلی وات می باشد وبا افزایش طول فیبر به ۲۰متر تغییرات توان خروجی لیزر ۶میلی وات افزایش می یابد که نشان دهنده بهبود حسگری می باشد.

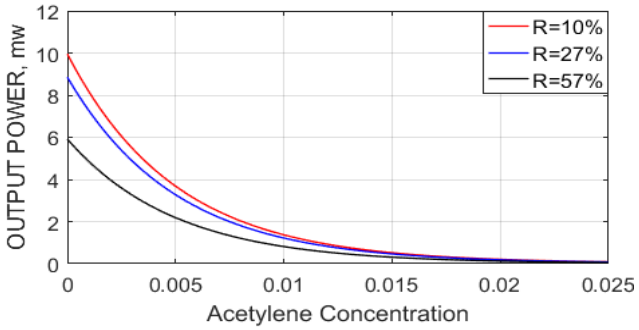
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

در شکل ۲ قسمت bبرای بازتاب پذیری ۲۷درصد تغییرات توان خروجی با افزایش غلظت استیلن برای طول فیبر ۵متر تقریبا صفر است.

در شکل ۲و قسمت cبرای بازتاب پذیری ۵۷درصد وبرای طول فیبر ۵متر با افزایش درصد غلظت استیلن کاهش توان خروجی مشاهده می شود.

از شکل ۲ به خوبی دریافت می شود که بیشترین حساسیت حسگر مربوط به طول فیبر ۲۰متر وبازتاب پذیری ۱۰درصد است.

نمودار تغییرات توان خروجی بر حسب تابعی از غلظت استیلن برای درصد های مختلف بازتاب پذیری در شکل ۳نشان داده شده است.



شکل ۳-نمودار تغییرات توان خروجی بر حسب غلظت استیلن برای طول فیبر ۲۰متر

از شکل ۳می توان دریافت که حسگر طراحی شده از حساسیت بالایی بر خوردار است، زیرا تغییرات مربوط به غلظت های پایین استیلن قابل اندازه گیری است. توان خروجی به طور غیر خطی با غلظت استیلن کاهش می یابد وهنگامی که غلظت استیلن بالاتر از 2درصد است توان خروجی بسیار کم است وتقریبا عملکرد حسگر صفر است. درمدل تجربی هنگامی که کاواک با استیلن با غلظت ۲/۵درصد پر می شود ،جذب زیاد است که این امر موجب متوقف شدن عملیات نرمال نوسانگر می شود وتوان خروجی برابر با صفر خواهد شد[۶]. علاوه بر این به ازای غلظت های بیشتری از استیلن نسبت به مدل شبیه سازی شده توان خروجی به صفر می رسد.نتایج بدست آمده در مدل تجربی و مدل شبیه سازی شده مورد قبول است. بنابر این می توان با این روش شبیه سازی در مورد تاثیر غلظت سایر گازها بر حساسیت حسگر نیز بررسی انجام داد.

همینطور از شکل ۳ می توان دریافت هرچه درصد بازتاب پذیری بیشتر باشد توان خروجی کاهش بیشتری می یابد و برای غلظت استیلن با درصد های متفاوت بیشترین توان خروجی مربوط به بازتاب پذیری ده درصد است.

نتیجه گیری

در این مقاله یک حسگر فیبری حلقوی شبیه سازی شد.با تغییر طول فیبر، بازتاب پذیری وغلظت کاز استیلن حساسیت سنسور تغییر می کرد.با افزایش طول فیبر تا ۲۰ متر حساسیت حسگر افزایش می یابذ و از طول ۲۰متر بیشتر تغییری در حساسیت حسگر مشاهده نمی شود. بیشترین حساسیت حسگر مربوط به طول فیبر ۲۰ متر وبازتاب پذیری ۱۰درصد است.

مراجع

[۱] ز. تقی پور، ز. سعیدیان، م. ا. زیبایی، ع. احمد لو، ح. لطفی؛"ساخت حسگر باریک شدهu–شکل با استفاده از لیزر CO_2به منظور اندازه گیری تغییرات ضریب شکست"؛ *سومین کنفرانس مهندسی فوتونیک ایران*، ۱۹-۲۱بهمن ۱۳۸۹، ۳۸۱-۳۸۴

[۲] ا. شفیعی، م. ابن علی، ع. ا. ابن علی؛"حسگر ضریب شکست با نانو ساختارتشدید پلاسمون سطحی مبتنی بر فیبر نوری نوعD"؛ *فصلنامه صنایع الکترونیک*، (۳)۷، ۱۳۹۵، ۴۷-۴۳.

[3] X. Yang, L. Duan, H. Zhang,Y. Lu, G. Wang, J. Yao;"Highly sensitive dual -wavelength fiber ring laser for the low concentration gas detection"; *Sensor. Actuat. B-Chem.* 296, 2019, 126637.

[۴] ا. لایقی، م. جمشیدی سرشت، ح. ا. خاشعی، ح. لطفی؛ "طراحی وساخت سنسور فشار فیبر نوری مبتنی برفابری پرو دیافراگمی"؛ *بیست ویکمین کنفرانس اپتیک وفوتونیک ایران وهفتمین کنفرانس مهندسی وفوتونیک ایران*، ۲۳تا۲۵دی ماه ۱۳۹۳، ۱۴۲۹-۱۴۳۲.

[5] T. Pfeiffer, H. Schmuck, H. Bülow;" Output Power Characteristics of Erbium-Doped Fiber Ring Lasers"; *IEE Photon. Technol.* 4(8), 1992, 847-849.

[6] Z. Q. Zhao, Y. Lu, L.C. Duan, M.T. Wang, H.W Zhang, j. Q. Yao;" Fiber ring laser sensor based on hollow -core photonic crystal fiber"; *Opt. Commun.* 4, 2015, 1-5.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بررسی شتاب الکترون به‌وسیله یک موج پلاسمایی در حضور کانال یونی و میدان مغناطیسی مایل خارجی

فرحی، فرزانه[۱]؛ دکتر آقامیر، مجتبی فرزین[۱]

[۱]دانشکده فیزیک دانشگاه تهران ، انتهای خیابان کارگر شمالی ، تهران

چکیده

در این مقاله شتاب الکترون با استفاده از یک پالس لیزر انتشار یابنده از میان محیط پلاسمایی و در حضور میدان‌های مغناطیسی خارجی و نیز ویگلر پیچشی مورد بررسی قرار گرفته است. برای بدست آوردن مسیر و انرژی الکترون از یک کد تک ذره نسبیتی استفاده شده است و با حل چند معادله دیفرانسیل جفت‌شده غیرخطی با روش رانگ-کوتای مرتبه‌ی چهارم، به نتایج عددی رسیده‌ایم. نتایج عددی نشان می‌دهند که در حضور ویگلر همراه با کاهش شدت پالس لیزر انرژی الکترون، افزایش می‌یابد. این ایده، یعنی به کار بستن ویگلر مغناطیسی طراحی شتاب‌دهنده‌های لیزری با توان بالا و شدت پایین لیزر را به طور ارزشمندی بهینه خواهد ساخت. بررسی بیشتر نیز نشان می‌دهد که انرژی الکترون با افزایش میدان مغناطیسی ویگلر در مسافت‌های کوتاه افزایش می‌یابد که این موضوع می‌تواند در طراحی شتاب‌دهنده‌ها با ابعاد کوچک‌تر استفاده شود.

واژه های کلیدی: *شتاب الکترون، پالس لیزر، محیط پلاسمایی، میدان مغناطیسی مایل خارجی، ویگلر مغناطیسی پیچشی*

Evaluation of electron acceleration by a plasma wave in presence of an external magnetic field and ion channel

Farahi, Farzane[1]; Dr. Aghamir, Mojtaba Farzin[1]

[1] Department of Physics, University of Tehran, Tehran, Iran

Abstract

In this article, an electron acceleration scheme using a laser pulse propagating through the plasma environment in the presence of a helical wiggler and an external applied magnetic field has been investigated. To study the trajectory and energy of the injected electron, a relativistic code was used to solve a set of coupled nonlinear differential equations. The numerical results indicate that the decrease in laser pulse intensity and the presence of wiggler field lead to an increase in electron energy. Therefore, the combined use of wiggler and external applied magnetic field can be considered in electron accelerators using powerful laser pulses. Furthermore, the analysis indicates that within short distances, the rise in electron energy is noticeable with an increase in wiggler magnetic field amplitude.

Keywords: *electron accelerator-laser pulse- plasma environment- external magnetic field- helical magnetic field*

PACS No. 52

مقدمه

لیزر الکترون آزاد[۱] یک چشمه‌ی نور قابل تنظیم با کارایی بسیار زیاد است و عملاً روی هر طول موجی تنظیم می‌شود، در توان‌های بالا کار می‌کند و نور همدوس تولید می‌کند اما لیزرهای کوانتومی فقط در طول موج‌هایی که خاص گذارهای انرژی مواد فعال آن‌هاست، می‌توانند نور تولید کنند[1] . برخلاف لیزرهای متداول که نوعاً فقط تا چند درصد انرژی دریافتی را به نور تبدیل می‌کنند، کارایی بالقوه لیزرهای الکترون آزاد به ۶۵ درصد و کارایی عملی آن‌ها به ۴۵ درصد می‌رسد.

در لیزرهای الکترون آزاد نیز، مثل لیزرهای معمولی، نور همدوس توسط الکترون‌ها گسیل می‌شود اما در این مورد الکترون‌ها به جای آن‌که به اتم‌های ماده‌ی فعال لیزر مقید باشند، به شکل باریکه‌ای در خلأ حرکت می‌کنند، چون الکترون‌ها آزادند، طول موجی که گسیل می‌کنند به گذار مجاز میان دو تراز انرژی

[۱] Free Electron Laser(FEL)

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد

http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

یک ماده‌ی خاص محدود نمی‌شود[۲]. هدف از ارائه‌ی این پژوهش این است که با استفاده از محیط پلاسما در شتاب‌دهنده‌ی لیزرهای الکترون آزاد بتوان به توان‌های بیشتر و طول موج‌های کمتر در باریکه‌ی خروجی دست یافت، هم‌چنین در این پژوهش تلاش شده است که با استفاده از دو میدان مغناطیسی مایل خارجی و میدان مغناطیسی ویگلر پیچشی و هم‌چنین حضور کانال یونی درون پلاسما بتوان انرژی و همدوسی باریکه خروجی را افزایش داد[۳].نوآوری به کار برده شده در این مقاله در مقایسه با نمونه های مشابه قبلی،در این است که: در مقالات پیشین شتاب الکترون در خلا بررسی و اندازه گیری شده است[۴]، اما در این پژوهش شتاب الکترون درون پلاسما که با چهارچوب آزمایشگاهی[۵] منطبق و قابل اندازه گیری است مورد تحقیق قرار گرفته است.

شتاب‌دهنده الکترونی بر پایه موج پلاسما مغناطیده در حضور میدان مغناطیسی مایل خارجی

باریکه‌ی الکترونی نسبیتی (بار e- ، جرم در حال سکون m ،ضریب نسبیتی γ و انرژی $mc.\gamma$) که با سرعت $c\beta V=$ از میان میدان موج پلاسمایی حرکت می‌کند، که پتانسیل برداری موج پلاسمایی را به صورت زیر در نظر می‌گیریم[۴]

$$\vec{A}=\vec{A}_{0}\exp\left(-\frac{\left(t-\frac{(z-z0)}{v_g}\right)^2}{\tau^2}\right)\left(\cos(\omega t-kz)\,\hat{x}+\sin(\omega t-kz)\,\hat{y}\right) \qquad (۱)$$

$$\vec{a}_x=\vec{a}_0\exp\left(-\frac{\left(t-\frac{(z-z0)}{v_g}\right)^2}{\tau^2}\right)\cos(\omega t-kz)\,\hat{x} \qquad (۲)$$

$$\vec{a}_y=\vec{a}_0\exp\left(-\frac{\left(t-\frac{(z-z0)}{v_g}\right)^2}{\tau^2}\right)\sin(\omega t-kz)\,\hat{y} \qquad (۳)$$

میدان مغناطیسی مایل راهنما را به صورت زیر در نظر گرفته‌ایم[۶]:

$$\vec{B}=\vec{B}_0(-\sin\theta\,\hat{x}+\cos\theta\,\hat{y}) \qquad (۴)$$

سرعت گروه $v_g=c(1-\omega_p^2/\omega^2)$ و عدد موج

$k=(\omega/c)(1-\omega_p^2/\omega^2)^{1/2}$ و فرکانس طبیعی پلاسما $\omega_p^2=4\pi n_0 e^2/m$ است.

میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی مربوط به پتانسیل برداری:

$$\vec{E}=-\frac{\partial\vec{A}}{\partial t}\ \text{و}\ \vec{B}=\nabla\times\vec{A} \qquad (۵)$$

برای بررسی حرکت این باریکه از معادله نسبیتی لورنتس استفاده می‌شود:

$$\frac{d\vec{p}}{dt}=-e\vec{E}-e(\vec{v}\times\vec{B}) \qquad (۶)$$

$$\frac{d\gamma}{dt}=-\frac{e}{m_0c^2}\vec{E}0\vec{v} \qquad (۷)$$

چهار معادله دیفرانسیل به‌دست‌آمده، معادله ی مسیر حرکت و تغییرات انرژی الکترون را هنگام حرکت داخل پلاسما و در حضور میدان مغناطیسی مایل خارجی به ما می‌دهد، در ادامه به حل این چهار معادله ی دیفرانسیل به روش عددی و به دست آوردن نتایج تغییرات انرژی و مسیر الکترون باتوجه به شرایط اولیه و پارامترهای آزمایشگاهی می‌پردازیم.

تحلیل کمیت‌های آزمایشگاهی

یکی از مسائل مهم در این تحقیق این است که کمیت‌های استفاده شده در این شبیه‌سازی و معادلاتی که به کار گرفته شده‌اند، چه مقدار آزمایشگاهی در دنیای واقعی دارند، به همین دلیل در این بخش مقدار واقعی کمیت‌های آزمایشگاهی که در این تحقیق و در شبیه‌سازی‌ها استفاده شده است را آورده‌ایم[۵].

جدول ۱ کمیت‌های آزمایشگاهی مورد استفاده در شبیه‌سازی‌ها

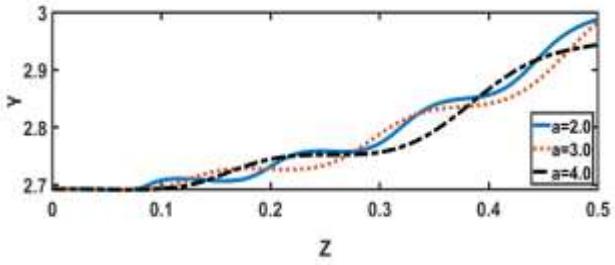
شدت پالس لیزر	$I\ (\frac{W}{cm^2})$	10^{18}–10^{19}
شدت میدان مغناطیسی خارجی	B (G)	۱۷۰۰–۱۰۰۰
طول موج لیزر	$\lambda(\mu m)$	۱/۰۵۶

نتایج حاصل از حل معادلات به روش عددی

در شکل ۱ نمودار انرژی الکترون برحسب پارامتر نرمالایز شده مسافت به ازای مقادیر مختلف شدت پالس لیزر رسم شده است. شدت پالس لیزر در ابتدا در مسافت‌های کم، تأثیر زیادی در افزایش انرژی الکترون ندارد و هر سه شدت پالس با دامنه‌ی انرژی یکسانی هستند اما بعد از مسافت $Z > ۰/۰۷$ انرژی الکترون شروع به افزایش می‌کند، از شکل ۱ مشخص است که هرچه شدت پالس لیزر بیشتر باشد، انرژی الکترون نوسانات

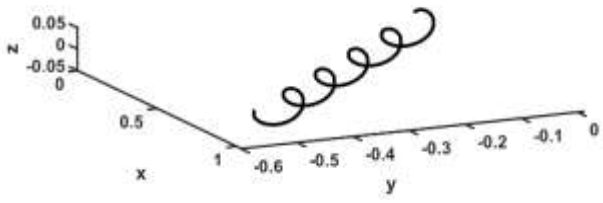
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

کم‌تری را شامل می‌شود. شدت پالس لیزر $a = 4$ بیشترین دامنه‌ی نوسانات انرژی را دارد. در شکل ۱ هرچه شدت پالس لیزر بیشتر باشد دامنه‌ی نوسانات انرژی الکترون بیشتر می‌شود.



شکل ۱ انرژی الکترون برحسب z برای پارامترهای
$p_{z_0}=\frac{2}{5}$.a=2.3.4.b=$\frac{0}{1}$.k=$\frac{0}{999}$.θ=$\frac{\pi}{3}$

شکل ۲ مسیر سه بعدی حرکت الکترون را داخل پلاسما و درحضور میدان مغناطیسی مایل خارجی نشان می‌دهد، الکترون مسیری مارپیچی و رو به جلو، با شعاع لارمور یکسان را می‌پیماید که حول محور $\sqrt{x^2+y^2+z^2}$ حرکت می‌کند، ثابت بودن شعاع لارمور حرکت الکترون، نشان‌دهنده‌ی این است که شدت میدان مغناطیسی مایل خارجی روی شعاع حرکت الکترون تأثیری ندارد. الکترون با حرکت درون پلاسما و در حضور میدان مغناطیسی مایل خارجی حرکتی مارپیچی با شعاع ثابت در خلاف جهت عقربه‌های ساعت خواهد داشت.



شکل ۲ نمودار سه بعدی مسیر حرکت الکترون

بررسی شتاب الکترون به‌وسیله یک موج پلاسمایی در حضور کانال یونی و میدان مغناطیسی مایل خارجی

در بررسی حاضر فرض می‌کنیم الکترون تحت تأثیر موج پلاسمای بارفضایی و یک میدان مغناطیسی مایل خارجی قرار گرفته است. معادلات حرکت الکترون به صورت زیر است[۷]:

$$\frac{d\vec{p}}{dt}=-e\vec{E}+e\nabla\vec{\varphi}-e(\vec{v}\times\vec{B}) \qquad (۸)$$

$$\frac{d\gamma}{dt}=-\frac{e}{m_0c^2}(\vec{E}-\nabla\vec{\varphi})\cdot\vec{v} \qquad (۹)$$

که در این روابط $e-$ بار الکترون، m_0 جرم الکترون،c سرعت‌نور و $\vec{B}$ میدان مغناطیسی خارجی و $\vec{\varphi}=\vec{\varphi}_0(1-\frac{(x^2+y^2)}{r_0^2})$ پتانسیل مربوط به کانال یونی است.

هم‌چنین پتانسیل برداری موج پلاسمایی به صورت زیر است[۴]:

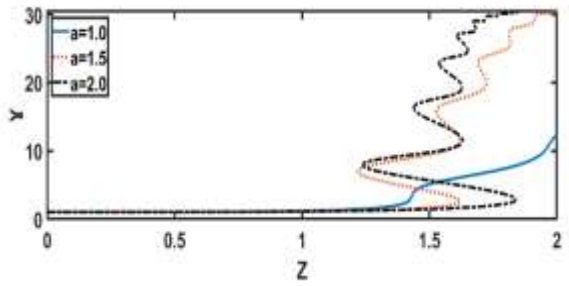
$$\vec{A}=\vec{A}_0\left(\cos(\omega t-kz)\,\hat{x}+\sin(\omega t-kz)\,\hat{y}\right)\exp\left(-\frac{\left(t-\frac{z-z_0}{v_g}\right)^2}{\tau^2}\right) \qquad (۱۰)$$

میدان مغناطیسی مایل خارجی اعمالی پلاسما به صورت مقابل تعریف می‌شود[۶]:

$$\vec{B}=\vec{B}_0(-\sin\theta\,\hat{x}+\cos\theta\hat{y}) \qquad (۱۱)$$

بررسی نتایج شبیه‌سازی به روش عددی

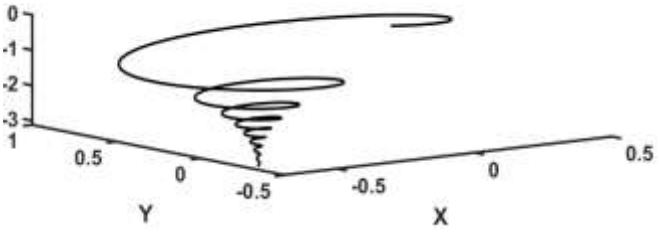
شکل ۳ نمودار انرژی الکترون برحسب مسافت به ازای مقادیر مختلف شدت پالس لیزر رسم شده است. در مسافت کوتاه کمترین تغییرات انرژی را خواهیم داشت و انرژی مربوط به هر سه پالس تقریباً یکسان و ثابت است اما در فواصل طولانی‌تر انرژی الکترون شروع به افزایش می‌کند هم‌چنین با افزایش شدت پالس لیزر نمودار انرژی الکترون دارای شیب بیشتری می‌شود و دامنه‌ی نوسانات آن زیاد می‌شود بنابراین هرچقدر شدت پالس لیزر بیشتر باشد، افزایش انرژی بیشتری را در الکترون خواهیم داشت در این شکل شدت لیزر $a = 1/0$، کم‌ترین افزایش انرژی را دارد در حالی که شدت لیزر $a = 2/0$ ، بیشترین افزایش انرژی را دارد. نکته‌ی جالب دیگری که از این شکل می‌توان دریافت این است که نوسانات دو شدت پالس لیزر $a = 2/0$ و $a = 1/5$ تقریباً مانند هم است و اما لیزری که تفاوت شدت بیشتری را نسبت به دو شدت قبلی دارد انرژی بیشتری را به الکترون منتقل می‌کند و هرچه مسافت بیشتر می‌شود تفاوت نوسانات این دو نمودار از هم بیشتر می‌شود.



: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

شکل ۳ نمودار انرژی الکترون برحسب پارامترهای p_{z_0}=1.b=0/01.k=0/ 999.a=1.1/5.2

شکل ۴ مسیر سه بعدی حرکت الکترون را در حضور کانال یونی نشان می‌دهد که الکترون مسیری مارپیچی با شعاع‌های متفاوت را طی می‌کند به طوری که هرچه الکترون جلوتر می‌رود شعاع حرکت الکترون بزرگ تر می‌شود که نشان‌دهنده‌ی این نکته است که حضور کانال یونی در این شرایط سبب می شود که شعاع لارمور الکترون هنگام حرکت به سمت جلو افزایش یابد، این موضوع یکی از معایب استفاده از کانال‌یونی است زیرا در شتاب‌دهنده‌ها تلاش بر این است که مسیر حرکت الکترون متمرکزتر شود تا علاوه بر این که الکترون از مسیر حرکت خود و از داخل شتابدهنده منحرف نشود بلکه باعث افزایش همدوسی نور لیزر خروجی شود اما همان‌طور که از این شکل پیدا است حضور کانال یونی در این شرایط سبب افزایش شعاع حرکت الکترون شده است که باعث منحرف شدن الکترون از مسیر حرکت داخل شتاب‌دهنده و کاهش همدوسی نور لیزر خروجی خواهد شد.



شکل ۴ مسیر سه بعدی حرکت الکترون در حضور کانال یونی

نتیجه گیری

هرچه شدت پالس لیزر بیشتر باشد دامنه‌ی نوسانات انرژی الکترون بیشتر می‌شود ، می‌توان نتیجه گرفت که در شرایطی که الکترون داخل یک پلاسمای مغناطیده حرکت می‌کند و میدان مغناطیسی مایل خارجی به آن اعمال شده است، هرچه شدت پالس لیزر بیشتر باشد و دامنه‌ی میدان مغناطیسی مایل خارجی کم‌تر باشد، الکترون سریع‌تر و در مسافت‌های کم‌تری به انرژی مطلوب می‌رسد. نکته‌ی جالب دیگر این است که تغییرات شدت میدان مغناطیسی مایل خارجی روی محور مسیر حرکت الکترون تأثیر دارد. حضور کانال یونی باعث می‌شود که الکترون در مسافت‌های کمتری به انرژی‌های بالاتری برسد و این بدین معناست که با حضور کانال یونی می‌توانیم الکترون را زودتر به انرژی های بالاتر و مطلوب‌تر برسانیم.

مرجع‌ها

[۱] Ghotra, H.S. and N. Kant, *Electron injection for direct acceleration to multi-GeV energy by a Gaussian laser field under the influence of axial magnetic field*. ***Physics of Plasmas, ۲۰۱۶. ۲۳(۵): p. .۰۵۳۱۱۵***

[۲] ۲Kim, S., *Magnetic Field Analysis of Helical Undulators*. ***۲۰۱۲, Argonne National Lab.(ANL), Argonne, IL (United States).***

[۳] Luo, W., et al., *Ultrashort-pulse MeV positron beam generation from intense Compton-scattering γ-ray source driven by laser wakefield acceleration.* ***Laser and Particle Beams, :(۱)۳۱. ۲۰۱۳p. .۹۴-۸۹***

[۴] Singh, K., *Electron acceleration by a chirped short intense laser pulse in vacuum.* ***Applied Physics Letters, ۲۰۰۵. ۸۷(۲۵): p. .۲۵۴۱۰۲***

[۵] Malka, G., E. Lefebvre, and J. Miquel, *Experimental observation of electrons accelerated in vacuum to relativistic energies by a high-intensity laser*. ***Physical review letters, ۱۹۹۷. ۷۸(۱۷): p. .۳۳۱۴***

[۶] Gupta, D. and C.-M. Ryu, *Electron acceleration by a circularly polarized laser pulse in the presence of an obliquely incident magnetic field in vacuum* .***Physics of plasmas, ۲۰۰۵. ۱۲(۵): p. .۰۵۳۱۰۳***

[۷] Kumar, N. and V. Tripathi, *Effect of betatron resonance on plasma wave acceleration of electrons in an ion channel*, ***in EPL (Europhysics Letters). ۲۰۰۶. p. .۲۶۰***

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بررسی سیستم های مزونی در نقاط کوانتومی

کریمی، پیمان ؛ برون، غلامرضا

گروه فیزیک، دانشگاه رازی، کرمانشاه

چکیده

در این مقاله ما پتانسیل $V(r) = ar^2 - b/r$ را به عنوان پتانسیل موثر حبس برای نقاط کوانتومی کروی معرفی کرده و با حل معادله شرودینگر با روش تقریبی جرم موثر و در نظر گرفتن شرایط مرزی مناسب انرژی حالت پایه،تابع موج و چگالی احتمال کوارک c در چارمونیوم و هم چنین الکترون و حفره محبوس در یک نقطه کروی کوانتومی را بدست آورده ایم. از آنجایی که پتانسیل مورد نظررا به صورت پارامتری برگزیده ایم که قابلیت انعطاف پذیری بالایی دارد، نقاط کروی متشکل از $q\bar{q}$ را با نقاط کروی متشکل از الکترون–حفره مقایسه کرده و با یک مطالعه پدیدار شناختی و مقایسه نتایج تئوری با داده های آزمایشگاهی به این نتیجه رسیده ایم که حبس کوانتومی مزون ها در نقاط کروی باعث تغییر طیف انرژی کوارک های تشکیل دهنده آنها می شود.

واژه های کلیدی: *نقاط کوانتومی کروی، مزون سنگین، محبوسیت کوانتومی، مدل پتانسیل موثر*

Investigate of mesonic system in Quantum Dots

Karimi, Peyman ; Boroun, G. R

Physics department, Razi University, Kermanshah

Abstract

In this paper, we introduce the potential $V(r) = ar^2 - b/r$ as the effective potential of imprisonment for spherical quantum dots and solve the Schrodinger equation by effective mass approximate method and considering the appropriate boundary conditionals we have obtained the base energy state, Wave function and density function probability of quark c in Charmonium as well as electrons and hole enclosed in a spherical quantum Dot. Since we have chosen the desired potential as a parameter that has high flexibility,we compare the spherical points consisting of $q\bar{q}$ with the spherical points consisting of the electron-hole and compare it with a phenomenological study and compare the theoretical results with the laboratory data.We conclude that the quantum confinement of the mesons in the spherical Dot changes the energy spectrum of the quarks that make them up.

Keywords*:Spherical quantum Dots, Heavy mesons, Quantum Confinement, effective Potential Model*

مقدمه

نقاط کوانتومی ساختارهای بدون بعدی هستند که با اعمال محدودیت و محبوسیت کوانتومی در هر سه بعد یک نیمه رسانا ایجاد می شوند. زمینه اصلی پدیده های جذاب و ارزشمند ساختار های کوانتومی، محبوسیت کوانتومی است. تحقیقات در مورد منشا و اثر حبس در نقاط کوانتومی به یکی از اساسی ترین زمینه های مقدماتی در علوم مدرن تبدیل شده است. برای بررسی این پدیده روش تقریبی جرم مؤثر از نظر دقت، قابلیت اطمینان و کارایی این روش در طول دو دهه گذشته سابقه خوبی را حفظ کرده است. در تقریب جرم مؤثر، حبس ذره منفرد توسط معادله شرودینگر ارائه می شود:

$$H\psi = E\psi \qquad (1)$$

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

هامیلتونی ذره منفرد با جرم موثر به دام افتاده در یک نقطه کروی کوانتومی توسط رابطه زیر بیان شده است:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*}\nabla^2 + V(r) \qquad (۲)$$

برای دستیابی به پتانسیل های محدود، اساساً دو نوع رویکرد اصلی وجود دارد: الف) استفاده از اصول اولیه ب) استفاده از فرم پارامتری. با توجه به مزیت انعطاف پذیری بیشتر، در مطالعات اخیر مشاهده شده است که مورد ب نسبت به الف بهتر است. در چندین محاسبه تحقیقاتی پتانسیل $V(r) = ar^2 - b/r + cr$، که مربوط به مطالعه حالت های مقید کوارک ها در سیستم مزونیک $(q\bar{q})$ می باشد بعنوان پتانسیل حبس گزارش شده است[۱]. از آنجایی که محاسبات قرار است در نقاط کوانتومی صورت پذیرد بنابراین جمله خطی را که برای توصیف پتانسیل برهم کنش در فواصل زیاد است از این پتانسیل خارج می نماییم.

نقاط کروی متشکل از جفت کوارک- پادکوارک$(q\bar{q})$

پتانسیل زیر به عنوان پتانسیل مؤثر برای کوارک ها محبوس شده در نظر گرفته شده است:

$$V(r) = ar^2 - \frac{b}{r} \qquad a > 0 \text{ و } b > 0 \qquad (۳)$$

با توجه به معادله شرودینگر تعمیم یافته سیستم های چند ذره ای:

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m^*}\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{L^2(\theta,\phi)}{\hbar^2 r^2}\right] + V(r) - E\right\}\psi(r,\theta,\phi) = 0 \qquad (٤)$$

ویژه تابع $\psi(r,\theta,\phi) = R_{nl}(r)Y_l^m(\theta,\phi)$ از قسمت شعاعی $R_{nl}(r)$و هارمونیک های کروی تشکیل شده است. تابع شعاعی باید به خوبی $R_{nl}(\infty) \to 0$ را برآورده کند، که به نوبه خود منجر می شود به $R_{nl}(r) = N_{nl}\frac{\psi_{nl}(r)}{r}$ که شامل ثابت بهنجارش N_{nl} است. با انجام یک ساده سازی ریاضی، معادله سه بعدی شرودینگر برای پتانسیل کروی متقارن $V(r)$ را می توان به معادله یک بعدی تبدیل کرد که فقط بخش شعاعی را شامل می شود:

$$\frac{d^2\psi_{nl}(r)}{dr^2} + \left[\sum_{nl} - Ar^2 + \frac{B}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]\psi_{nl}(r) = 0 \qquad (۵)$$

$$\sum_{nl} = \frac{2m^*}{\hbar^2}E \quad , \quad A = \frac{2m^*}{\hbar^2}a \quad , \quad B = \frac{2m^*}{\hbar^2}b \qquad (٦)$$

فرض زیر به عنوان تابع موج آزمایشی در نظر گرفته شده است:

$$\psi_{nl}(r) = f_n(r)g_l(r) = r^{l+1}Exp[-\alpha r^2 - \beta r]f_n(r) \qquad (۷)$$

$$f_n(r) = \begin{Bmatrix} 1 & , & n = 0 \\ \prod_{i=1}^{n}\left(r - \alpha_i^{(n)}\right) & , & n = 1,2,3,\ldots \end{Bmatrix}$$

در جایگزینی معادله (۷) در معادله (۵) به دست می آید:

$$r\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}f_n(r)\right) + [-4\alpha r^2 - 2\beta r + 2(l+1)]\left(\frac{\partial}{\partial r}f_n(r)\right) + [(4\alpha^2 - A)r^3 + 4\alpha\beta r^2 + \{-2\alpha(2l+3) + \beta^2 + \sum\}r + \{B - 2\beta(l+1)\}]f_n(r) = 0 \qquad (۸)$$

با مقایسه با معادله زیر :

$$\left(\sum_{i=0}^{k+2}\mu_{k+2,i}\,x^{k+2-i}\right)y'' + \left(\sum_{i=0}^{k+1}v_{k+1,i}x^{k+1-i}\right)y' - \left(\sum_{i=0}^{k}\tau_{k,i}x^{k-i}\right)y = 0 \qquad (۹)$$

و شرط لازم برای داشتن راه حل چند جمله ای از درجه n [۲]:

$$\tau_{k,0} = n(n-1)\mu_{k+2,0} + nv_{k+1,0} \quad , \quad k = 0,1,2,3,\ldots$$

ضرایب موجود در معادله (۸) بدست می آید که به شرح زیر است:

$$-2\alpha(2l+3) + \beta^2 + \sum_{nl} = 4n\alpha \qquad (۱۰)$$

برای مورد $n = 0$ ، ضرایب دیگر به صورت زیر خواهد بود:

$$\alpha = \frac{\sqrt{A}}{2} \quad , \quad \beta = 0 \quad , \quad B = 0 \qquad (۱۱)$$

با روابط (٦) و (۱۱)، مقادیر ویژه انرژی حالت پایه و ویژه تابع شعاعی برای کوارک با جرم مؤثر m_q^* به ترتیب عبارتند از:

$$E_{0l}^q = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2m_q^*}}\sqrt{a}(2l+3) \qquad (۱۲)$$

$$R_{0l}^q(r) = N_{0l}\frac{\psi_{0l}(r)}{r}\frac{1}{r}N_{0l}r^{l+1}Exp\left[\sqrt{\frac{2m_q^*}{\hbar^2}}\frac{\sqrt{a}}{2}r^2\right] \qquad (۱۳)$$

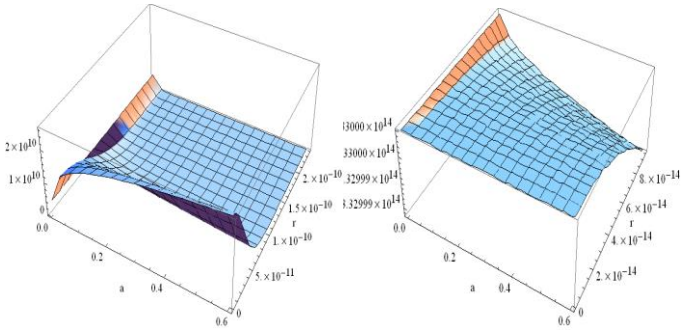
به منظور تعیین فضای پارامترa، ابتدا شرط مرزی که پیوستگی پتانسیل جفت شده کوارک را درون یک نقطه کوانتومی کروی غیرقابل نفوذ شعاع R قرار می دهد در نظر می گیریم، یعنی احتمال

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

یافتن ذره فراتر از R صفر است یا $\int_0^R |R_{0l}^q(r)|^2\, dr = 1$. ماهیت تابع موج و شرایط مرزی گنجانیده شده نیازمند آن است که هم تابع موج و هم چگالی احتمال در $r = R$ و فراتر از آن برای یک نقطه کوانتومی کروی شعاع R، از بین بروند که به نوبه خود نیاز دارد که $a = \infty$ شود که منجر به یک نتیجه بی معنی فیزیکی به صورت $E_q^{0l} = \infty$ خواهد شد. بنابراین، به جای اینکه چگالی احتمال دقیقاً در $r = R$ صفر باشد، محدوده کمی را برای نفوذ باقی می گذاریم و احتمال کل را $\int_0^R |R_{0l}(r)|^2 dr = x = 0.999$ در نظر می گیریم. پس چگالی احتمال بصورت زیر بدست می آید:

$$|R_{0l}^q(r)|^2 = \frac{x\left|r^l Exp\left[-\sqrt{\frac{2m_q^*\sqrt{a}}{\hbar^2\ 2}}r^2\right]\right|^2}{\int_0^R \left|r^l Exp\left[-\sqrt{\frac{2m_q^*\sqrt{a}}{\hbar^2\ 2}}r^2\right]\right|^2 dr} \qquad (۱۴)$$

در شکل۱تابع احتمال برای کوارک c در چارمونیوم با شعاع $R = 3\times10^{-10}m$ (چپ) و باشعاع $R = 3\times10^{-15}m$(راست)به عنوان تابعی از پارامتر a و موقعیت r رسم شده است.



شکل۱: چگالی احتمال شعاعی یک کوارک c در چارمونیوم محبوس در یک نقطه کوانتومی کروی با شعاع های متفاوت($m_c^* = 1550\ MeV/c^2$)

از آنجایی که داده های تجربی در مورد نقاط کوانتومی متشکل از $q\bar{q}$ در دسترس نیست در این نقاط نمی توان در حال حاضر دامنه ای برای پارامتر a بدست آورد اما با توجه به اینکه مجموعه غنی از داده های تجربی در مورد نقاط کروی متشکل از جفت الکترون–حفره در اختیار هست و این دو سیستم بسیار به هم شبیه هستند[۳] ادامه مقاله را با فرض اینکه بتوان یک حالت پایدار از مزون ها را در مدت زمان کوتاهی در مقیاس نانو داشت با تعمیم و مقایسه سیستم های $q\bar{q}$ با جفت الکترون–حفره ادامه می دهیم تا قوام و صحت نتایج و روابط بدست آمده بررسی گردد.

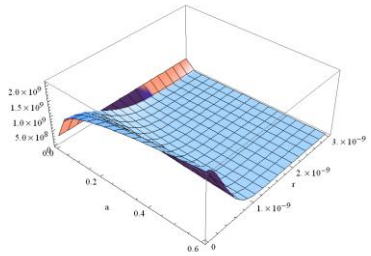
نقاط کروی متشکل از جفت الکترون– حفره

مقادیر ویژه انرژی و چگالی احتمال برای الکترون براساس روش جرم تقریبی موثر به صورت زیر بدست می آید:

$$E_{0l}^e = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2m_e^*}}\sqrt{a}(l+3) \qquad (۱۵)$$

$$|R_{0l}^e(r)|^2 = \frac{x\left|r^l Exp\left[-\sqrt{\frac{2m_e^*\sqrt{a}}{\hbar^2\ 2}}r^2\right]\right|^2}{\int_0^R \left|r^l Exp\left[-\sqrt{\frac{2m_e^*\sqrt{a}}{\hbar^2\ 2}}r^2\right]\right|^2 dr} \qquad (۱۶)$$

در شکل۲ چگالی احتمال برای یک الکترون با جرم موثر $m_e^* = 0.13m_e$ از شعاع $R = 3nm$ به عنوان تابعی از پارامتر a و موقعیت r نشان داده شده است که بسیار شبیه نمودار های رسم شده برای کوارک c در نقطه کوانتومی با شعاع $R = 3\times10^{-10}m$ است. با سنگین تر شدن ذره، تابع احتمال ذره محبوس در نقطه کوانتومی کوچکتر و در نواحی مرکزی($r \to 0$)افزایش می یابد.

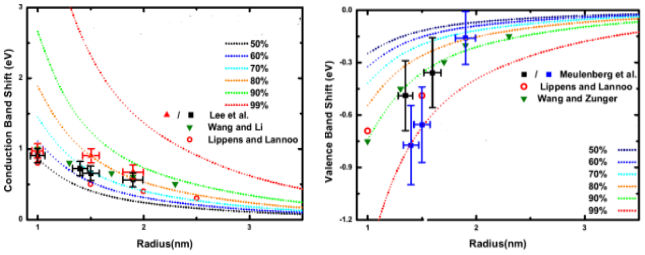


شکل۲: چگالی احتمال شعاعی یک الکترون در یک نقطه کوانتومی $R = 3nm$

برای نمودار شکل۱(سمت چپ) و شکل ۲ یک مقدار ثابت $\frac{x}{R}$ در $a = 0$ برای $|R_{0l}(r)|^2_{r=R}$ در سراسر فضای درون نقطه کوانتومی مشاهده می شود و برای سایر مقادیر غیر صفر a، $|R_{0l}(r)|^2_{r=R}$ یک مقدار بیشینه N_{0l} را در $r = 0$ می گیرد و به سمت سطح روی نقطه کوانتومی، کاهش می یابد. حال اگر روی تغییر چگالی احتمال با توجه به a متمرکز شویم، در ناحیه مرکزی نقطه کوانتومی با افزایش a، $\left|R\ (a\ ,r)\right|^2$ نیز افزایش می یابد، ولی هر چقدر r زیاد شود $\left|R\ (a\ ,r)\right|^2$ کاهش می یابد. علاوه بر این در $r = R$ در $a = 0$ مقدار $\left|R\ (a\ ,r)\right|^2$ حداکثر مقدار ممکن $\frac{x}{R}$ را دارد و با افزایش a کاهش می یابد. بنابراین می توان گفت مقادیر بزرگتر a نشان دهنده احتمال بیشتر برای یافتن الکترون در ناحیه مرکزی است و بر همین اساس برای داشتن الکترون در خارج از منطقه مرکزی، a نیاز به کاهش یافتن دارد. با این اوصاف می توان

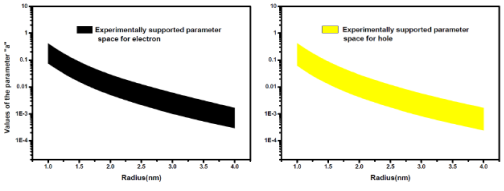
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

با توجه به مطالعه پدیدار شناختی که انجام شد از این تخمین استفاده نمود که چگالی احتمال در $r = R$ ، ۵۰٪، ۶۰٪، ۷۰٪، ۸۰٪، ۹۰٪ و ۹۹٪ از مقدار اولیه اش کمترمی شود؛ یعنی مقادیر $\frac{0.5x}{R}$ ، $\frac{0.4x}{R}$ ، $\frac{0.3x}{R}$ ، $\frac{0.2x}{R}$ ، $\frac{0.1x}{R}$ و $\frac{0.01x}{R}$ را می گیرد. معادله(۱۵)و معادله متناظر با حفره تغییر انرژی در حداقل باند رسانش و حداکثر باند ظرفیت را به دلیل محبوسیت کوانتومی نسبت به مقادیر انرژی حالت توده فراهم می کند. با استفاده از این ٦ تخمین ذکر شده و مقادیر a که برای شعاع های مختلف برای تغییر چگالی، بدست خواهد آمد، تغییرهای مربوطه برای جفت الکترون–حفره محبوس در نقطه کوانتومی به همراه چند مورد از داده های آزمایشگاهی و نظری دیگر در شکل۳ به عنوان تابعی از شعاع آنها (R) نشان داده شده است.



شکل۳: تغییر انرژی حداقل باند رسانش(چپ)و حداکثر باندظرفیت(راست)[۳]

با توجه به نقاط رسم شده در شکل ۳ بیشتر نتایج تجربی و نظری برای تغییر انرژی باند رسانش، بین دو منحنی ۶۰٪ و ۹۰٪ و برای تغییر انرژی باند ظرفیت بین دو منحنی ۸۰٪ و ۹۹٪ است. بنابراین می توان محدوده قابل قبول برای فضای پارامتر a را در نموداری مانند شکل٤ برای الکترون(باند رسانش) و حفره(باند ظرفیت) رسم نمود.



شکل٤: دامنه قابل قبول **برای** a توزیع الکترون و حفره بر حسب شعاع[۳].

جمع بندی و نتیجه گیری

نتیجه گیری نهایی ما بر اساس مشاهدات این است که فرض پتانسیل $V(r) = ar^2 - b/r$ می تواند به عنوان پتانسیل موثر با حبس کوانتومی برای چارمونیوم در نظر گرفته شود و قادر به توضیح تغییر طیف انرژی مزون های محبوس شده در نقاط کروی کوانتومی بدلیل وجود اثرات حبس می باشد. هر چند که ما با توجه به محدودیت ها و عدم دستیابی به اطلاعات تجربی در مورد مزون های محبوس در نقاط کوانتومی، فقط برای اثبات درستی نتایج بدست آمده و کارایی روش مطالعه پدیدارشناختی برای دستیابی به دامنه قابل قبول برای پارامترهای موجود بصورت کیفی، از نقاط کروی متشکل از زوج الکترون–حفره بهره بردیم و نشان دادیم که حبس کوانتومی باعث تغییر طیف انرژی می گردد اما باید توجه نمود که برای دستیابی به نتایج دقیق تر برای چارمونیوم محبوس در نقطه کوانتومی، تفاوت های کوارکونیوم و زوج الکترون–حفره را هم در نظر بگیریم. کوارکونیوم ها متشکل از کوارک و پادکوارک متناظر خودشان بوده و با برهم کنش قوی متصل می شوند و دارای اندازه فیزیکی با قطر تقریبا یک فمتومتر هستند و مانند همه مزونها ناپایدار بوده و در برهم کنش های قوی و ضعیف و هم چنین الکترومغناطیسی نیز شرکت می کنند. اما حالت های مقید الکترون–حفره از یک الکترون در لایه رسانش و یک حفره الکترونی در لایه ظرفیت تشکیل شده اند و این دو با نیروی الکترواستاتیک کولنی جذب می شوند. الکترون–حفره یک شبه ذره خنثی است که در عایق ها، نیمه رساناها و برخی مایعات وجود دارد و می تواند بدون اینکه بارخالصی داشته باشد انرژی حمل کند. بنابراین با توجه به تفاوت های موجود در نوع برهم کنش ذرات تشکیل دهنده و هم چنین ابعاد فیزیکی، قطعا تفاوت هایی بین نتایج نقاط کوانتومی متشکل از کوارکونیوم و نقاط کوانتومی متشکل از الکترون–حفره وجود دارد اما بازهم پیش بینی می شود که می توان روش به کار رفته برای الکترون–حفره را برای کوارکونیوم انجام داد؛ البته این کار زمانی امکان پذیر خواهد بود که اطلاعات تجربی در مورد کوارکونیوم محبوس در نقاط کوانتومی در اختیار باشد.

مرجع ها

[1] N. Akbar, B. Masud, and S. Noor, Eur. Phys. J. A **47**, 124(1-9) (2011).

[2] H. Ciftci, R. L. Hall, N. Saad and E. Dogu, J. Phys. A: Math. Theor. **43**, 415206(1-14) (2010).

[3] P. Borah, D. Siboh, P. K. Kalita1, J. K. Sarma and N. M. Nath, "Quantum Confinement Induced Shift in Energy Band Edges and Band Gap of Spherical Quantum Dot'' , arXiv:1705.10343v2 (2017).

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مقایسه دوز جذب شده رادیودارو لوتشیم-۱۷۷ و رادیوم -۲۲۳ در تسکین درد متاستاز استخوان

صدرممتاز ، علیرضا ؛ تجدد، مریم[۲]

گروه فیزیک دانشکده علوم پایه، دانشگاه گیلان،رشت [۱]

چکیده

دزیمتری بافت های درگیر از جمله مراحل بسیار مهم و اساسی در پروتکل درمانی است .رادیوداروهای با جذب استخوانی از جمله روش هایی است که در محاسبه دز بافت های درگیر متاستاز استخوان بسیار حائز اهمیت است. *هدف از این پژوهش مقایسه توزیع دز شعاعی و دز دیفرانسیلی و دز تجمعی رادیو داروی لوتشیم-۱۷۷ و رادیوم-۲۲۳ در بافت های درگیر متاستاز است. با کمک برنامه* MCNPX *فانتومی برای مدل استخوان پا طراحی شد و مقادیر دز رادیوم و لوتشیوم محاسبه شد.نتایج نشان داد که رادیوداروی رادیوم که رادیونوکلئیدی آلفازا با برد کم در بافت است نسبت به رادیوداروی لوتشیم که بتازا است تاثیر بسیار ناچیزی بر مغز استخوان و بافت نرم باقی می گذارد و بالاترین دز جذبی را در استخوان قشری که محل چشمه است باقی می گذارد.اما رفتار این دو رادیودارو در تابش های گاما ،متفاوت است.رادیوم به دلیل مقادیر بالاتر انرژی گاما بیشترین دز جذبی در مغز استخوان و بافت نرم را ایجاد میکند.*

واژه های کلیدی: متاستاز استخوان،دز ،دز جذبی،لوتشیم،رادیوم،رادیودارو ، MCNPX

Comparison of Lu-177 & Ra-223 absorbed dose for treatment of bone metastases

Sadremomtaz , alireza[1]; tajadod , maryam[2]

[1] Physics Department, Faculty of Science, University of Guilan , Rasht, Iran

Abstract

At the treatment of cancer with radiotherapy, determination of involved tissues dose is one of the most steps in the treatment protocol. Radium and lutetium are the important radiopharmaceuticals for the treatment of bone metastases in breast and prostate cancer .The aim of this work is comparison of absorbed dose for Lu-177 and Ra-223 in the bone marrow and soft tissue at the involved tissues bone metastases. By the use of MCNPX computer code a model for bone phantom was designed and dose values for Ra-223 that is an Alpha emitter & Lu-177 that is beta emitter were calculated. The alpha component of the Ra-223 have a few effect on bone marrow and soft tissue than beta component of the lu-177 and it leaves the highest absorbed dose in bone where the source is located. but the behavior of the two radiopharmaceuticals in the gamma irradiation is different. Ra-223 produces the highest absorbed dose in bone marrow and soft tissue due to higher amounts of gamma energy.

Keywords: Bone metastases, Radio pharmaceaticals , MCNPX, ,absorb dose ,lutetium ,radium

مقدمه

زمانی که فردی دچار سرطان می شود در غالب موارد تا زمانی که گستردگی سلول های سرطانی به استخوان نرسیده است مراحل درمان آن تقریبا به راحتی انجام می گیرد. زمانی که گستردگی سلول ها در داخل بافت استخوانی نفوذ کند به ناچار سیر درمان پیچیده شده و در این مرحله به طرح درمان ویژه ای نیاز است که بدین منظور دزیمتری بافت های درگیر از جمله مراحل بسیار اساسی برای پروتکل درمانی است.

استخوان شایع ترین محل متاستاز در بیماران مبتلا به سرطان است. تعداد زیادی از متاستازهای استخوانی بی علامت اند و اغلب به طور اتفاقی در بررسی های اولیه یا پیگیری ها کشف می شوند. درموارد علامت‌دار، درد شایع ترین علامت است.[۱و۳]

رادیوداروهای با جذب استخوانی از جمله روش هایی است که در محاسبه دز بافت های درگیر متاستاز استخوان بسیار حائز اهمیت است.[۲]رادیوداروهای قابل استفاده برای تسکین درد متاستازهای استخوانی عبارت اند از: فسفر(۳۲) ، استرانسیوم (۸۹)، ساماریوم(۱۵۳) ،رنیوم (۱۸۶) ، رنیوم(۱۸۸) ، لوتشیم(۱۷۷) و رادیوم(۲۲۳).

لوتشیم-۱۷۷ یک لانتانید تابش کننده بتا است که در سال ۱۹۰۷ کشف شد. دارای ۶/۷ روز نیمه عمرفیزیکی و ۱روز

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

نیمه عمر بیولوژیکی و ٤٩٧ کیلوالکترون ولت انرژی بتا است.[٥] از ویژگی های مهم لوتشیم این است که بتا منفی کمی دارد و این باعث می شود زمانی که ضایعات اسکلتی جمع می شوند سرکوب مغز استخوان در کمترین حالت ممکن باشد.(جدول ١)[٧]

رادیوم-٢٢٣-دی کلرید، که در گذشته به عنوان آلفارادین شناخته می شد با نام تجاری Xofigo تنها گسیلنده آلفا است که در سال ٢٠١٣ تاییدیه FDA را برای درمان علائم متاستاتیک سرطان پروستات دریافت کرد. این رادیوایزوتوپ دارای نیمه عمرفیزیکی ١١/٦ روز و نیمه عمر بیولوژیکی چند ساعت است. این رادیونوکلئید از طریق ژنراتور Ac-Ra تولید می شود. نیمه عمر طولانی رادیوم-٢٢٣ برای جذب استخوانی بسیار مفید است، چون اجازه می دهد مقدار بیشتری از رادیونوکلئید در سطوح استخوانی جذب شود.[٢١] مقدار دز جذبی توسط هر اندام بسیار مهم و حائز اهمیت است. اندام هدف باید دز بیشینه داشته باشد و اندام های دیگر کمترین مقدار ممکن دز داشته باشند.[٧]. بدین منظور در این کار پژوهشی، دز جذب شده توسط اندام مبتلا به متاستاز استخوان با استفاده از یک مدل فانتوم استخوان و شبیه سازی مونت کارلو ارزیابی و مورد بررسی قرار گرفت.

جدول ١.ویژگی های رادیونوکلئید ١٧٧Lu و ٢٢٣Ra [٨,٩,١٠]

RADIONUCLIDE	Ra-٢٢٣	Lu-١٧٧
HALF TIME	١١/٦ d	٦/٧ d
MAXIMUM BETA ENERGY	-	٤٩٨ KeV
MAXIMUM ALPHA ENERGY	٥٧٧٠ KeV	-
MAXIMUM GAMMA ENERGY	٢٥٣ KeV	٢٠٨ KeV

روش کار

در دزیمتری بافت های درگیر متاستاز استخوان از شبیه سازی مونت کارلو استفاده می شود. در برنامه ی مربوط به طیف بتا و گاما لوتشیم برهمکنش های فوتوالکتریک واثر فوتوالکترون ها ،الکترون اوژه و پرتوهای ایکس درنظر گرفته شد.

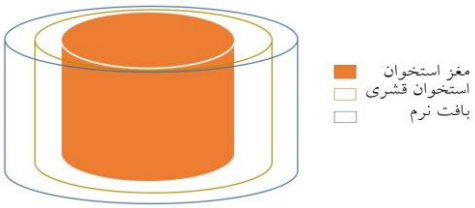
در این شبیه سازی برای داشتن توزیع دقیق تر دز در اندام های تحتانی از وکسل ها استفاده شد. این وکسل ها می توانند به صورت استوانه ای، کروی و مکعبی باشند. با استفاده از مدل طراحی شده، ابتدا توزیع شعاعی دز جذبی و دز تجمعی حاصل از پرتوهای گاما و بتا برای لوتشیم-١٧٧ محاسبه شد و سپس برای پرتوهای آلفا و گاما رادیوم-٢٢٣ مورد بررسی قرار گرفت.

در این مدل، فانتوم استخوان ران پا به صورت ٣ استوانه تو در تو در فضای کد مونت کارلو mcnp شبیه سازی شد.[١٦]

این هندسه شامل استوانه ای به طول ٢ سانتی متر و شعاع ٤ سانتی متر به عنوان بافت نرم ماهیچه در راستای z است که یک استوانه با شعاع ١/٣ سانتی متری به عنوان استخوان قشری و استوانه با شعاع ٠/٦ سانتی متری به عنوان مغز استخوان به صورت تو در تو در درون آن قرار دارند.محیط به صورت یک کره به شعاع ١٠ سانتی متری در مبدا مختصات تعریف شده است.[٩]

استخوان قشری[1] در استخوان ران پا محل تولید کلسیم است که اغلب تومور های استخوانی همچون متاستاز در این قسمت به وجود می آید. به همین دلیل این بافت به عنوان محل چشمه در نظر گرفته شد. توزیع چشمه بصورت یکنواخت در نظر گرفته شد.در این پژوهش با کمک مدل طراحی شده، توزیع شعاعی دز جذبی، توزیع دز سه بعدی در شکل گرافیک ٢ بعدی برای پرتوهای گاما و بتا لوتشیم و همچنین برای پرتوهای آلفا و گاما رادیوم که هرکدام برد متفاوتی در بدن انسان دارند محاسبه شد و سپس به مقایسه تجمع دز در هر بافت برای دو رادیودارو لوتشیم و رادیوم در فانتوم مرد پرداخته شد.

شکل ١-سطح مقطع فانتوم ران پا شبیه سازی شده در mcnpx



نتایج و بحث

برای بررسی میزان دز ذخیره شده از گاماهای چشمه لازم است اشعه ایکس ساطع شده نیز در برنامه درنظر گرفته شود. پس از نوشتن فایل ورودی مربوط به طیف بتا وگاما لوتشیم وطیف آلفا و

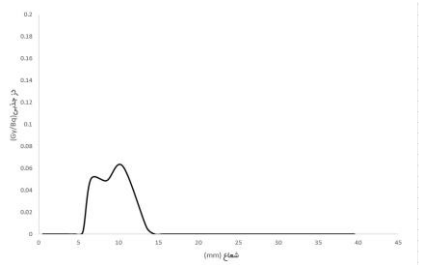
[1] cortical bone

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

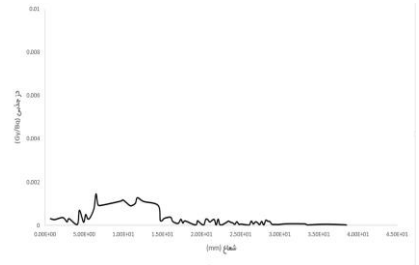
گاما رادیوم، برنامه با دستور f8* اجرا شد و بعد از بدست آوردن انرژی بر واحد حجم با توجه به چگالی هر بافت با کمک روش MIRD، دز ذخیره شده از طیف گاما و بتا Lu-177 و آلفا و گاما Ra-223 بدست آورده شد.

شکل ۲-الف توزیع شعاعی دز جذبی برای طیف بتا لوتشیم را نشان می دهد. با توجه به نمودار مشاهده می کنیم که به دلیل مقادیر انرژی طیف بتا لوتشیم و برد کوتاه اش در مقایسه با بقیه رادیوداروهای استخوان خواه بتازا، بیشترین جذب در استخوان قشری که چشمه در آن قرار دارد صورت گرفته است.

شکل ۲-ب توزیع شعاعی دز جذبی برای طیف گاما را نشان می دهد. مشاهده می شود که دز جذبی حاصل از فوتون به دلیل بالا بودن انرژی گاما ساطع شده از لوتشیم قابل توجه است زیرا لوتشیم در مقایسه با بقیه رادیونوکلئید های بتازا دارای انرژی گاما بیشتری است و هرچه انرژی گاما بیشتر، قدرت نفوذ بیشتری دارد و سبب ایجاد عوارض جانبی بیشتر در نواحی اطراف بافت هدف می شود.

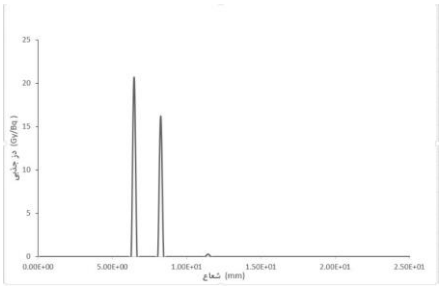


شکل ۲- الف .نمودار دزجذبی بتا لوتشیم برحسب شعاع



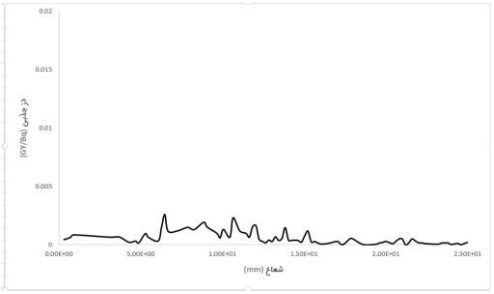
شکل ۲-ب .نمودار دز جذبی گاما لوتشیم بر حسب شعاع

در شکل ۳-الف نمودار دز آلفا در سه شعاع مختلف رسم شده است. همانطور که در شکل مشخص است درصد بالایی از دز در استخوان قشری یعنی جایی که چشمه در آن وجود دارد جذب شده است چون آلفای رادیوم دارای برد کوتاهی است و این قابل پیش بینی است که درصد بالایی از دز فقط در ارگان هدف جذب شود ولی در مغز استخوان هیچ جذبی صورت نگرفته و در بافت نرم درصد بسیار ناچیزی جذب صورت گرفته است.



شکل ۳-الف نمودار دزجذبی آلفا رادیوم بر حسب شعاع

نمودار طیف گاما رادیوم در شکل ۳-ب آورده شده است. همانطور که در شکل مشخص است میزان دز جذب شده در استخوان قشری که حاوی چشمه است نسبت به ارگان های دیگر بیشتر است. اما در مغز استخوان به نسبت رادیوداروی لوتشیم دز بیشتری جذب شده است که از مشکلات رادیوداروی رادیوم است که سبب ایجاد عوارض جانبی بیشتر در نواحی اطراف بافت هدف می شود.

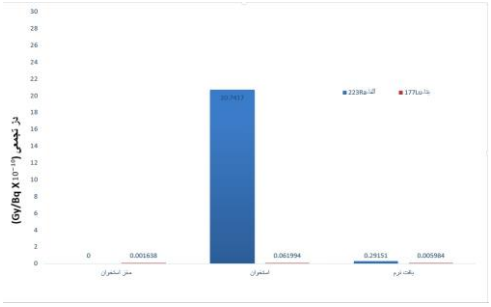


شکل ۲-ب نمودار دز جذبی گاما رادیوم بر حسب شعاع

برای مقایسه بهتر نتایج دزیمتری لوتشیم و رادیوم و دریافت میزان تجمع دز در هر بافت برای فانتوم مرد نمودار دز تجمعی برای گاما و آلفا و بتا رسم شد.

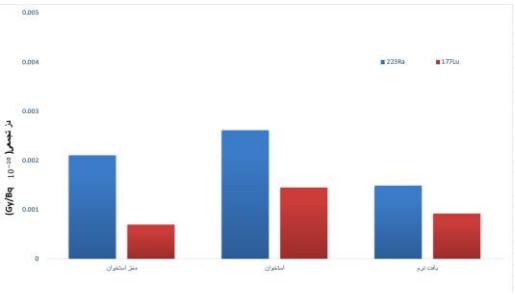
با توجه به شکل ٤-الف و با مقایسه تجمع دز ذرات آلفا و بتا در سه بافت: مغز استخوان و استخوان قشری و بافت نرم می توان به راحتی به این نتیجه رسید که در مقایسه میزان تجمع دز، ذرات بتا حاصل از لوتشیم با ذرات آلفا حاصل از رادیوم، رادیونوکلئید رادیوم نسبت به لوتشیم بر مغز استخوان تاثیر بسیار کمتری را گذاشته است اما همین رادیونوکلئید به دلیل انرژی بالای ذرات آلفا اش مقدار قابل ملاحظه ای دز را در استخوان قشری که محل قرار گرفتن چشمه است باقی گذاشته است.اما کمترین تاثیرگذاری بر بافت نرم مربوط به رادیوداروی لوتشیم است.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



شکل ٤–الف نمودار دز تجمعی ذرات بتا و آلفا

با توجه به شکل ٤–ب و مقایسه میزان تجمع دز گاما برای دو رادیوداروی لوتشیم و رادیوم می توان به این نتیجه رسید که با توجه به اینکه رادیوم دارای انرژی گاما بالاتری است در مقایسه با لوتشیم میزان تجمع بالاتری در ۳ بافت مورد نظر دارد و اصلا برای بافت های بزرگ مناسب نیست چون میزان تجمع دز گاما در آن بالا می رود.



شکل ٤–ب نمودار دز تجمعی ذرات گاما

نتیجه گیری

همه ی رادیوداروهای مورد استفاده در درمان دارای فواید و مضرات بسیار است. در سالهای اخیر رادیوداروی لوتشیم-۱۷۷ و رادیوم-۲۲۳ در سراسر جهان مورد آزمایش های گوناگونی قرار گرفته است و به دلیل اثرات کمتر ذرات بتا و آلفا بسیار مورد پذیرش پزشکان قرار گرفته است.

دزیمتری یک موضوع مهم است که از آن اطلاعاتی از میزان دریافت دز در هر ناحیه از بدن بدست می آید. در این تحقیق با استفاده از کد MCNPX و با شبیه سازی قطعه ای از استخوان ران پا، نمودارهای مربوط به دز جذبی بتا و گاما را درنواحی مختلف فانتوم بدست آوردیم.

با مقایسه دو رادیوداروی لوتشیم و رادیوم می توان به این نتیجه رسید که رادیوم نسبت به لوتشیم به دلیل برد کوتاه ذرات آلفا، بهترین گزینه برای درمان و یا تسکین درد متاستاز استخوان است و کمترین آسیب را به سلول های خونی می رساند زیرا بعد از تخریب لایه ای که متاستاز در آنجا به وجود اماده، سلول های خونی مغز استخوان این قابلیت را دارند که با خونسازی، لایه از بین رفته را دوباره احیا کنند به همین دلیل از نظر پزشکان رادیودارویی که کمترین تاثیر را بر مغز استخوان بگذارد، کمترین آسیب را به سلول های خونی می زند و برای درمان متاستاز استخوان کاربردی تر و بهینه تر است.

اما بزرگترین مشکل آن انرژی بالای ذرات گاما است که این محدودیت را برای آن ایجاد می کند که فقط در ارگان ها و بافت های کوچک مورد استفاده قرار گیرد.

مرجع ها

1. Coleman RE. Clinical features of metastatic bone disease and risk of skeletal morbidity. Clin Cancer Res 2006;12(20 Pt 2):6243s-6249s.
2. Theriault RL, Theriault RL. Biology of bone metastases. Cancer Control 2012;19(2):92-101.
3. Peiman Haddad M.D. Afsaneh Maddah Safaei .Armaghan Fard Esfahani .A review of bone metastasis and its treatments,whit a special emphasis on local and systemic radiotherapy, Tehran University Medical Journal , January 2014; Vol. 71, No. 10: 617-624
4. Robinson RG, Preston DF, Schiefelbein M, Baxter KG. Strontium 89 therapy for the palliation of pain due to osseous metastases. JAMA 1995;274(5):420-4.
5. Mehrosadat Alavi, Shapour Omidvari, Alireza Mehdizadeh, Amir R. Jalilian, Ali Bahrami-Samani, Metastatic Bone Pain Palliation using 177Lu-Ethylenediaminetetramethylene Phosphonic Acid. World Journal of Nuclear Medicine/Vol 14/Issue 2/May 2015
6. Deligny, C.L., Gelsema, W.J., Tji, T.G., Huigen, Y.M., Vink, H.A., 1990. Bone seeking radiopharmaceuticals. Nucl. Med. Biol. 17, 161-79
7. Hassan Yousefnia, Samaneh Zolghadri and Saeed Shanehsazzadeh, Estimated Human absorbed dose of 177Lu-BPAMD based on mice data: Comparison with 177Lu-EDTMP, Applied Radiation and Isotopes, http://dx.doi.org/10.1016/j.apradiso.2015.06.033
8. A.S. Shinto, D. Shibu, K.K. Kamaleshwaran, T. Das, S. Chakraborty, S. Banerjee, P. Thirumalaisamy, P. Das, G. Veersekar, 177LuEDTMP for treatment of bone pain in patients with disseminated skeletal metastases, J. Nucl. Med. Tech., 42 (2014) 55-61.
9.Bolch, W.E., Jokisch, D., Zankl, M., Eckerman, K.F., Fell, T., Manger, R., Endo, A., Hunt, J., Kim, K.P. and Petoussi-Henss, N., 2016. ICRP publication 133: The ICRP computational framework for internal dose assessment for reference adults: specific absorbed fractions. *Annals of the ICRP*, *45*(2), pp.5-73.
10.Looker, A.C., Beck, T.J. and Orwoll, E.S., 2001. Does body size account for gender differences in femur bone density and geometry?. *Journal of bone and mineral research*, *16*(7), pp.1291-1299.
11.Ranjbar, H., Bahrami-Samani, A., Beiki, D. and Ghannadi-Maragheh, M., 2017. Development of 153Sm/177Lu-EDTMP as a possible therapeutic complex. *Iranian Journal of Nuclear Medicine*, *25*(1), pp.11-16.
12. Bagheri, R., et al(2015). "Dosimetric study of radium-223 chloride and 153 Sm-EDTMP for treatment of bone metastases using MCNPX code and available experimental data." *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry* 303.3: 1991-1998
13. Velho, P.I., Qazi, F., Hassan, S., Carducci, M.A., Denmeade, S.R., Markowski, M.C., Thorek, D.L., DeWeese, T.L., Song, D.Y., Tran, P.T. and Eisenberger, M.A., 2019. Efficacy of radium-223 in bone-metastatic castration-resistant prostate cancer with and without homologous repair gene defects. *European urology*, *76*(2), pp.170-176

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بهینه‌سازی ساختار فیلتر بلور فوتونی تک بعدی

داودی، سمیه؛ قشلاقی، مریم

پژوهشگاه علوم و فنون هسته ای، پژوهشکده فوتونیک و فناوری‌های کوانتومی

چکیده

در این مقاله، ساختار یک بلور فوتونی تک بعدی به عنوان فیلتر نوری با استفاده از روش ماتریس انتقال بهینه شد. ساختار نُه لایه‌ای متناوب با مواد $Si(H)$ و $SiO_2(L)$، در سه حالت مورد مطالعه قرار گرفت. تأثیر تغییر ضخامت لایه Si، زاویه برخورد و تعداد تناوب، بر طیف بازتابی برای ساختار بلور فوتونی تک‌بعدی بررسی شد. معلوم گردید که پهنای باند طیف بازتابی در ساختار $0.5L\ (H/L)^P H\ 0.5L$ به ازای تناوب $P=3$، بیشتر است و همچنین طیف بازتابی در طول‌موج‌های کمتر از ۲۰۰۰ نانومتر، دارای نوسانات کمتری می‌باشد. از طرفی با افزایش ضخامت لایه H، پهنای باند طیف بازتابی بزرگتر شده و به سمت طول‌موج‌های بزرگتر شیفت پیدا می‌کند. در نهایت با افزایش زاویه تابش نور فرودی، پهنای باند طیف بازتابی امواج TM، کاهش می‌یابد درصورتیکه برای امواج TE، تغییرات قابل‌توجهی مشاهده نمی‌شود.

واژه های کلیدی: *فیلتر نوری، کریستال فوتونی تک بعدی، روش ماتریس انتقال، ساختار چندلایه‌ای.*

Optimization of one- dimensional photonic crystal filter

Davodi, Somaye; Gheshlaghi, Maryam

Photonics and Quantum Technologies Research School, Nuclear Science and Technology Research Institute (NSTRL)
sdavodi@aeoi.org.ir
mgheshlaghi@aeoi.org.ir

Abstract

In this paper, a single dimensional photonic crystal was optimized as an optical filter by the transfer matrix method. The nine layers structure of $SiO_2(L)$ and $Si(H)$ was studied in three modes. The effect of changing thickness of the Si layer, the incident angle and the number of periods were investigated on the one-dimensional photonic crystal structures. It was specified that in the structure of $0.5L\ (H/L)^P H\ 0.5L$ for the period of $P=3$, the bandwidth of the reflection spectrum is greater and also the reflection spectrum has low fluctuations in wavelengths of less than 2000 nm. On the other hand, as the H-layer thickness increases, the bandwidth of the reflection spectrum becomes larger and shifts to larger wavelengths. Finally, with the increase in the angle of incident light irradiation, the bandwidth of the reflection spectrum of the TM waves decreases, while for the TE waves, there is no significant change.

***Keywords**: optical filter, single dimensional photonic crystals, the transfer matrix method, multilayer structure.*
PACS No. 73

مقدمه

بلورهای فوتونی ساختارهایی تکرارشونده و منظم از دی-الکتریک‌های با ضریب شکست بزرگ و کوچک هستند. امواج الکترومغناطیسی بسته به طول‌موجشان می‌توانند از درون بلورهای فوتونی عبور کنند یا منعکس شوند. بنابراین این بلورها می‌توانند طول‌موج‌های خاص را مسدود کرده و طول‌موج‌های دیگر را از خود عبور دهند. بلورهای فوتونی به دلیل آنکه امکان کنترل نحوه انتشار نور را فراهم می‌آورند، می‌توانند کاربردهای متفاوتی از جمله موجبرهای نوری، کاواک‌ها و تارهای نوری، سوئیچ‌ها و گیت‌های نوری، فیلترهای نوری، لیزرهای بلور فوتونی و غیره داشته باشند. در برخی از سیستم‌های نوری از جمله سیستم ترموفوتوولتائیک، از بلورهای یک بعدی فوتونی به عنوان فیلتر نوری انتخابی استفاده

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

می‌شود [۳-۱]. بلورهای فوتونی مورد نظر، با ساختارهای $(L/H)^4L$ و $0.5L(H/L)^40.5H$ با $H(Si)$ و $L(SiO_2)$ ساخته شده است [۴]. در این مقاله با استفاده از نرم‌افزار لایه‌نشانی مکلئود، سه ساختار $L(H/L)^4$، $0.5L\ (H/L)^4$ و $0.5L\ (H/L)^3H0.5L$ بلورهای فوتونی انتخابی بررسی شد، همچنین ساختار کلی $0.5L\ (H/L)^pH0.5L$ در نظر گرفته شد و با تغییر تناوب p و تغییر ضخامت لایه H، بهینه و با ساختارهای قبلی مقایسه شد، در نهایت تاثیر تغییر زاویه تابش نور فرودی برای امواج TM و TE، نیز بررسی گردید.

تئوری

تغییرات امواج الکترومغناطیسی با فرکانس مشخص، هنگام عبور از لایه‌ها، از طریق ماتریس انتقال، مشخص می‌شود. با فرض اینکه لایه‌ها عمود بر محور z باشند (شکل۱) و موج الکتریکی (با عدد موج k) از سمت چپ به راست حرکت کند، میدان الکتریکی یا مغناطیسی به صورت:

$$\psi(x,z,\omega)=\psi(z)e^{i(\omega t-kx)} \qquad (۱)$$

است که در آن $\psi(x,z,\omega)=E(z)=H(z)$ و $k=n\frac{\omega}{c}\sin\theta$ می‌باشد.

در فاصله L (ضخامت لایه) در جهت مثبت محور z داریم:

$$\begin{pmatrix}E(z+L)\\H(z+L)\end{pmatrix}=M\begin{pmatrix}E(z)\\H(z)\end{pmatrix} \qquad (۲)$$

و [۵، ۶]،

$$M=\begin{pmatrix}\cos kL & iz_c\sin kL\\ \frac{i}{z_c}\sin kL & \cos kL\end{pmatrix} \qquad (۳)$$

برای N لایه خواهیم داشت:

$$M=M_1M_2\ldots..M_N \qquad (۴)$$

ضرایب عبور و بازتاب:

$$r=\frac{M_{21}}{M_{11}}\ ,t=\frac{1}{M_{11}} \qquad (۵)$$

هستند. ضرایب عبور برای دو قطبش مختلف موج فرودی، با معادلات ۶ و ۷ تعریف می‌شوند [۷]. برای قطبش موازی (S):

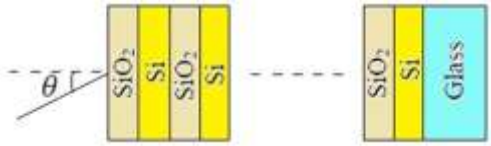
$$T=|t|^2\frac{Re[n\cos\theta]}{Re[n_0\cos\theta_0]} \qquad (۶)$$

برای قطبش عمود (P):

$$T=|t|^2\frac{Re[n\cos\theta^*]}{Re[n_0\cos\theta_0{}^*]} \qquad (۷)$$

همچنین برای ضریب انعکاس داریم:

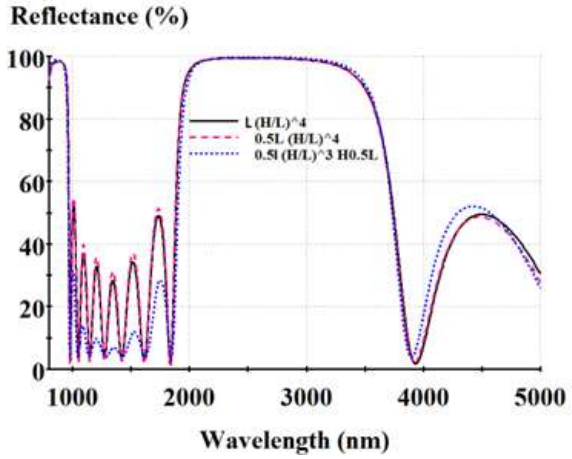
$$R=|r|^2 \qquad (۸)$$



شکل۱: ترتیب لایه‌ها برای فیلتر نوری بلورفوتونی تک‌بعدی.

طراحی و بحث

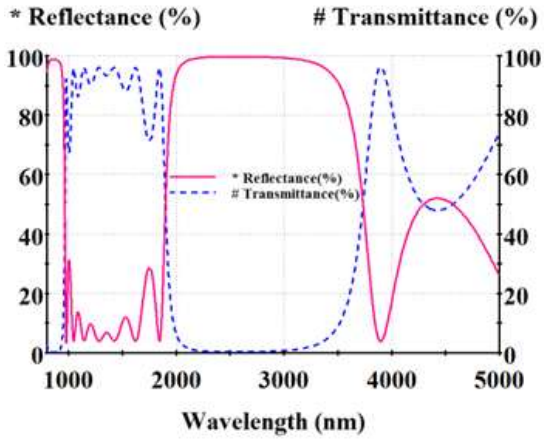
سه ساختار برای طراحی بلور فوتونی تک‌بعدی، روی زیرلایه شیشه پیشنهاد می‌دهیم. ساختار اول که همان ساختار اصلی بلور فوتونی تک بعدی به صورت $L(H/L)^4$ نُه لایه‌ای است و مواد با ضریب شکست بالا Si (n=3.4) و پایین SiO_2 (n=1.4) و طول‌موج مرکزی ۲۵۰۰ نانومتر می‌باشد. ساختار دوم با اصلاح ساختار اول، به‌صورت $0.5L\ (H/L)^4$ طراحی شد. سپس ساختار سوم با اصلاح ساختار دوم، به‌صورت $0.5L\ (H/L)^3H0.5L$ طراحی گردید. نمودار شکل۲، طیف بازتابی سه ساختار فوق را نشان می‌دهد.



شکل۲: نمودار درصد بازتاب نور برحسب طول‌موج در محدوده ۸۰۰ تا ۵۰۰۰ نانومتر برای سه ساختار پیشنهادی بلور فوتونی تک‌بعدی.

ملاحظه شد که ساختار سوم در طول‌موج‌های کمتر از ۲۰۰۰ نانومتر، دارای نوسانات کم است. در این ساختار، لایه‌های Si و SiO_2، به‌ترتیب دارای ضخامت فیزیکی ۷۲۶/۲۴ و ۱۷۴۸/۸ نانومتر می‌باشند. نمودار شکل۳، درصد بازتاب و عبور نور را برای ساختار سوم نشان می‌دهد.

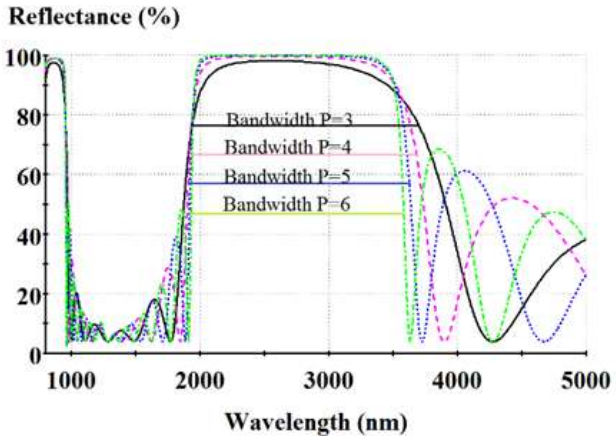
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



شکل۳: نمودار درصد بازتاب و عبور نور برحسب طول‌موج در محدوده ۸۰۰ تا ۵۰۰۰ نانومتر برای ساختار سوم.

تاثیر تعداد تناوب بر درصد نور بازتابی

پارامترهای مهم در فیلتر نوری یک بلور فوتونی تک‌بعدی، تعداد تناوب، ضخامت لایه‌ها و زاویه تابش نور فرودی هستند. شکل۴، درصد بازتاب برای ساختار سوم $0.5L\ (H/L)^pH0.5L$ با تعداد تناوب مختلف p را نشان می‌دهد.



شکل۴: نمودار تعداد تناوب درصد بازتاب برحسب طول‌موج در محدوده ۸۰۰ تا ۵۰۰۰ نانومتر برای ساختار سوم.

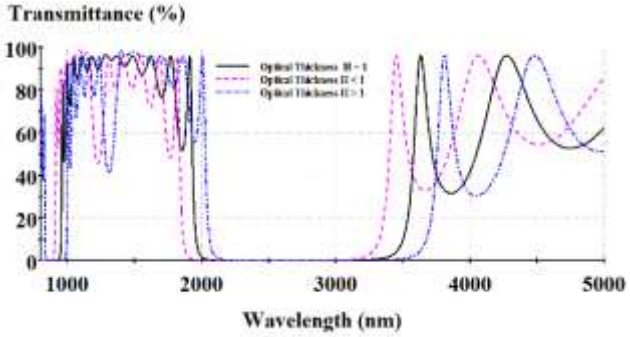
جدول۱: تغییرات پهنای باند بازتاب کامل با تغییر تناوب برای ساختار سوم.

Periods	λ_1(nm)	λ_2(nm)	$\Delta\lambda=\lambda_2-\lambda_1$(nm)
P=3	3894.12	1864.70	2029.42
P=4	3729.41	1894.12	1835.29
P=5	3629.41	1911.76	1717.65
P=6	3570.59	1923.53	1647.06

با توجه به شکل۴ و جدول۱، به ازای تناوب P=۳ برای ساختار سوم، ملاحظه شد که پهنای باند در حدود ۲۰۲۹/۴۲ نانومتر و میانگین درصد بازتاب نور برای نوسانات در طول‌موج‌های کوتاه‌تر از ۲۰۰۰ نانومتر، کمتر از ۱۸٪ می‌باشد، اما با افزایش تناوب، پهنای باند کوتاه‌تر و ماکزیمم بازتاب، بیشتر می‌شود.

تاثیر ضخامت لایه H بر درصد نور عبوری

در این بخش برای ساختار سوم، با توجه به شکل۵ و جدول۲، اثر ضخامت را برای لایه H در سه حالت درنظر گرفتیم. اگر ضخامت لایه H همان ربع‌موج باشد (H ضخامت اپتیکی $= 1$) پهنای باند ۱۶۳۳/۱۱ نانومتر است. با کم کردن ضخامت لایه H، پهنای باند کمتر شده و به سمت طول‌موج‌های کوتاه‌تر انتقال می‌یابد. از طرفی به‌ازای افزایش ضخامت لایه H، پهنای باند بزرگتر شده و به سمت طول‌موج‌های بزرگتر شیفت پیدا می‌کند.



شکل۵: نمودار تاثیر ضخامت لایه H بر درصد عبور نور برحسب طول‌موج در محدوده ۸۰۰ تا ۵۰۰۰ نانومتر برای ساختار سوم.

جدول۲: تغییرات پهنای باند بازتاب کامل با تغییر ضخامت برای ساختار سوم.

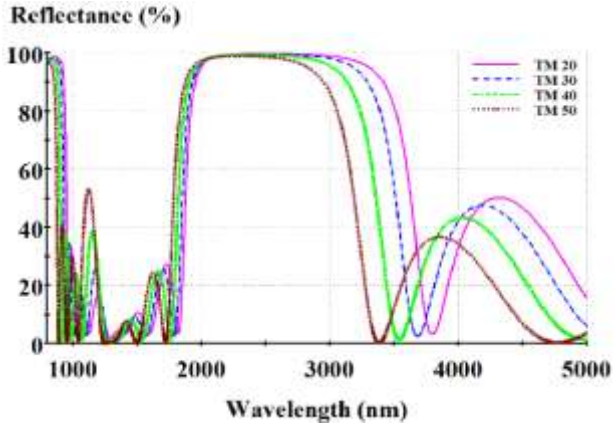
Optical thickness H layers	λ_1(nm)	λ_2(nm)	$\Delta\lambda=\lambda_2-\lambda_1$(nm)
< 1	1834.84	3383.06	1548.22
= 1	1931.86	3564.97	1633.11
> 1	2028.87	3730.70	1701.83

تاثیر زاویه تابش بر درصد نور بازتابی

نمودار شکل۶، تاثیر تغییر زاویه تابش فرودی برای امواج TM را نشان می‌دهد. با توجه به نتایج جدول۳ ملاحظه می‌گردد که با افزایش زاویه فرودی، پهنای باند کاسته می‌شود. از طرفی با افزایش زاویه تابش نور فرودی برای امواج TM، کاهش پهنای باند برای طول‌موج‌های بلندتر (محدوده ۳۰۰۰ تا ۴۰۰۰ نانومتر) بیشتر از طول-موج‌های کوتاه‌تر (محدوده تا ۲۰۰۰ نانومتر) بوده است. همچنین با

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

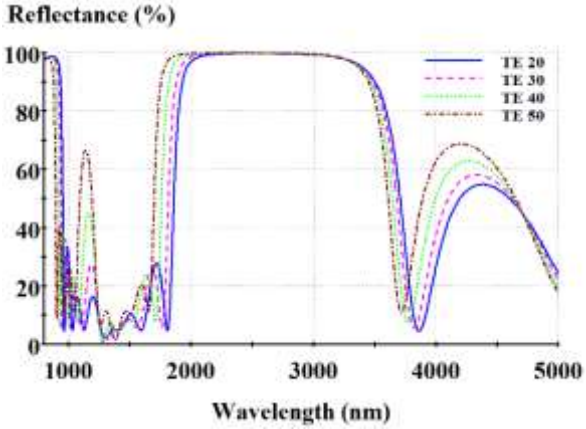
افزایش زاویه تابش نور فرودی، در طول‌موج‌های کوتاه‌تر از ۲۰۰۰ نانومتر، نوسانات بیشتر شده و میانگین آنها حتی به ۵۰ درصد بازتاب هم می‌رسد.



شکل۶: نمودار تاثیر زاویه تابش نور فرودی بر درصد عبور نور مد TM برحسب طول‌موج در محدوده ۸۰۰ تا ۵۰۰۰ نانومتر برای ساختار سوم.

جدول۳: تغییرات پهنای باند بازتاب کامل با تغییر زاویه تابش نور فرودی مد TM برای ساختار سوم.

Angle TM	λ_1(nm)	λ_2(nm)	$\Delta\lambda=\lambda_2-\lambda_1$(nm)
Θ= 20°	1812.77	3790.64	2177.87
Θ= 30°	1782.97	3659.57	1876.60
Θ= 40°	1742.23	3522.55	1775.32
Θ= 50°	1705.53	3367.66	1662.13



شکل۷: نمودار تاثیر زاویه تابش نور فرودی بر درصد عبور نور مد TE برحسب طول‌موج در محدوده ۸۰۰ تا ۵۰۰۰ نانومتر برای ساختار سوم.

نمودار شکل۷، تاثیر تغییر زاویه تابش فرودی را برای امواج TE نشان می‌دهد. با توجه به نتایج جدول۴ ملاحظه می‌شود که تغییرات پهنای باند برای بازتاب امواج TE، نامحسوس بوده است.

جدول۴: تغییرات پهنای باند بازتاب کامل با تغییر زاویه تابش نور فرودی مد TE برای ساختار سوم.

Angle TE	λ_1(nm)	λ_2(nm)	$\Delta\lambda=\lambda_2-\lambda_1$(nm)
Θ= 20°	1798.81	3856.4	2057.59
Θ= 30°	1753.86	3816.41	2062.55
Θ= 40°	1708.92	3761.47	2052.55
Θ= 50°	1658.99	3701.54	2042.55

نتیجه‌گیری

از سه ساختار بلورهای فوتونی انتخابی $0.5L\ (H/L)^4$، $L(H/L)^4$ و $0.5L\ (H/L)^3H0.5L$ که مورد بررسی قرار گرفت پهنای باند نور بازتابی در ساختار سوم بیشتر است و در طول‌موج‌های کمتر از ۲۰۰۰ نانومتر بازتاب نور دارای نوسانات کمتر می‌باشد. پهنای باند طیف بازتابی برای ساختار $0.5L\ (H/L)^pH0.5L$ با افزایش p از ۳ به ۶، تا ۱۸/۸ درصد کاهش یافته ولی درصد بازتاب کامل، افزایش می‌یابد. همچنین با افزایش ضخامت لایه Si(H)، پهنای باند طیف بازتابی حدود ۱۰ درصد بزرگتر شده و به سمت طول‌موج‌های بالاتر شیفت پیدا می‌کند. با توجه به بررسی تاثیر زاویه تابش نور فرودی برای امواج TM و TE، به این نتیجه رسیدیم که با افزایش زاویه تابش نور فرودی از ۲۰ به ۵۰ درجه، پهنای باند بازتاب کامل امواج TM تا حدود ۲۰ درصد کمتر شده و همچنین باند فوق به سمت طول‌موج‌های پایین‌تر انتقال می‌یابد. این نتیجه برای امواج TE هم با کمتر از یک درصد (حدود ۰/۷ درصد) نیز ملاحظه شد.

مرجع‌ها

[1] S. G. Babiker, Y. Shuai, M. O. Sid-Ahmed, M. XIE, "*One –Dimensional Si/SiO₂ Photonic Crystals Filter for Thermophotovoltaic Applications*", WSEAS Transactions on Applied and Theoretical Mechanics, V. 9, pp. 97-103, 2014.

[2] L. P. Wang & Z. M. Zhang, "*Wavelength selective and diffuse emitter enhanced by magnetic polaritons for thermophotovoltaics*", Applied Physics Letters, V. 100, 063902, 2012.

[3] F. K. Mbakop, N. Djongyang & D. Raïdandi, "*One–dimensional TiO₂/SiO₂ photonic crystal filter for thermophotovoltaic applications*", Journal of the European Optical Society-Rapid Publications, pp. 12-23, 2016.

[4] I. Celanovic, F. O'Sullivan, M. Ilak, J. Kassakian, & D. Perreault, "*Design and optimization of one-dimensional photonic crystals for thermophotovoltaic applications*", V. 29, N. 8, P.P. 863-865, 2004.

[5] R. Aylo, H. Li, G. Nehmetallah, and P. P. Banerjee, "*Application of the Transfer Matrix Method to Reflection Gratings in Positive and Negative Index Materials*", Proc. of SPIE, V. 8497, 84970C1-9, 2012.

[6] Leandro N. Acquaroli, "*Matrix method for thin film optics*", physics. Optics, arXiv: 1809.07708v1, 2018.

[7] S. J. Byrnes, "*Multilayer optical calculations*", arXiv: 1603.02720v4 [physics.comp-ph], 2019.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بررسی لایه نازک اکسید تنگستن در ساختار الکتروکرومیک

قبادی ، حسین[۱]؛ خدابخشی ، فردین[۲] ؛ کریم زاده ، روح الله[۱]؛ بیات ، سعیده[۱]

[۱] دانشکده فیزیک، دانشگاه شهید بهشتی، تهران، ایران

[۲] پژوهشگاه پلیمر و پتروشیمی ایران، تهران، ایران

چکیده

در این پژوهش لایه نازک اکسید تنگستن به منظور کاربری در سلول الکتروکرومیک مورد بررسی قرار گرفته است. لایه نشانی به روش کند و پاش انجام شده و مشخصات لایه بوسیله آنالیز پراش پرتو ایکس و میکروسکوپ الکترونی گسیل میدانی بررسی شده است. برای ساخت سلول الکتروکرومیک از الکترولیت لیتیمی استفاده شده است. چیدمان الکترواپتیکی نیز برای محاسبه تغییرات اپتیکی و بازدهی رنگی استفاده شده است. محدوده طیفی مورد بررسی بین۵۰۰ تا ۹۰۰ نانومتر می‌باشد. بیشترین مقدار تغییرات اپتیکی ۳۹ درصد و در طول موج ۹۰۰ نانومتر بوده است. در این طول موج، بازدهی رنگی حدود $107\ cm^2/C$ اندازه گیری شده است. این نتایج، مطلوب یک ساختار الکتروکرومیک بوده و می‌تواند در کاربری های مختلفی مورد استفاده قرار گیرد.

واژگان کلیدی : اکسیدتنگستن ، تغییرات اپتیکی ، بازدهی رنگی

Investigation of Tungsten Oxide Film in Electrochromic Structure

Ghobadi, Hossein[1] ; Khodabakhshi, Fardin[2] ; Karimzadeh, Rouhollah[1] ; Bayat, Saeedeh[1]

[1] *Department of Physics, Shahid Beheshti University, Tehran, Iran*

[2] *Iran Polymer and Petrochemical Research Institute, Tehran, Iran*

Abstract

In this study, a thin layer of tungsten oxide is investigated for using in an electrochromic cell. The layer deposition is done by sputtering technique and X-ray diffraction analysis and field emission electron microscopy is used to characterize the deposited layer. Lithium electrolyte is used to make the electrochromic cell. Electro-optical arrangement has also been used to measure the optical changes and coloration efficiency. The transmitted spectrum is investigated from the wavelength of 500 nm to 900 nm. The maximum optical change was about 39% at wavelength of 900 nm. At this wavelength, the measured coloration efficiency was about 107 cm^2 / C. These results are desirable for an electrochromic structure and can be used in different applications.

Keywords*: Tungsten Oxide, Optical changes, Coloration efficiency*

PACS No. 78

مقدمه

در سالهای اخیر توجه ویژه ای به کاربرد های مواد الکتروکرومیک شده است. مواد الکتروکرومیک بواسطه اعمال میدان خارجی تغییر رنگ می‌دهند. چند نمونه از ادوات الکتروکرومیک عبارتند از:

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

۱- پنجره های الکتروکرومیک [1]

۲- ابرخازن ها و باتری های الکتروکرومیک[2, 3]

۳- آیینه الکتروکرومیک[4]

٤- پوشش های چشمی الکتروکرومیک[5]

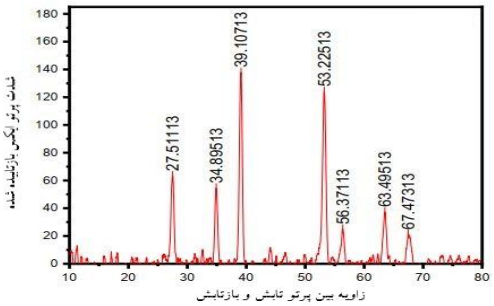
از جمله مواد الکتروکرومیک که عملکرد مناسبی از خود نشان داده است اکسید تنگستن می‌باشد [6]. در این پژوهش به بررسی عملکرد لایه اکسید تنگستن در سلول الکتروکرومیک پرداخته خواهد شد. این ساختار به منظور کاربری در پنجره‌های الکتروکرومیک مورد نظر می باشد. اجزای اصلی یک سلول الکتروکرومیک شامل شیشه های رسانا، الکترولیت رسانای یونی و لایه الکتروکرومیک می باشد. با اعمال میدان الکتریکی به این ساختار، یون‌های موجود در الکترولیت به سمت لایه الکتروکرومیک هدایت شده و در نهایت با نفوذ در این لایه موجب تغییر طیف جذب لایه می‌شوند. برای تعیین کیفیت سلول، تغییرات اپتیکی و بازدهی رنگی بررسی شده است. بازدهی رنگی متناسب با تغییرات اپتیکی و بار انباشته شده در لایه الکتروکرومیک بوده و بصورت زیر بیان می‌شود[7] :

$$CE = \frac{\log(T_b/T_c)}{Q/A} \qquad (1)$$

T_b عبور در حالت شفاف، T_c عبور در حالت رنگی، Q بار انباشته شده و A مساحت سطح سلول می‌باشد.

مواد و روش آزمایش

در این بررسی، لایه های رسانا از جنس اکسید قلع آلاییده با فلوئور انتخاب شده که مقاومت سطحی آن 15 Ω/sq می‌باشد. برای ساخت الکترولیت، ۱,۰٦ گرم نمک لیتیم پرکلرات در ۲۰ سی سی پروپیلن کربنات حل شده است. در ادامه ٤ گرم پلیمر پلی متیل متاکریلات در حلال ترکیبی شامل ۱۰ سی سی دی کلرومتان و ۱۳ سی سی تتراهیدروفوران حل شده است. محلول پلیمری به محلول اولیه اضافه شده و با قرار دادن محلول جدید بر روی همزن در دمای ٤۰ درجه سانتیگراد و به مدت ٦ ساعت، الکترولیت ژله ای بدست آمده است. برای تهیه لایه نازک اکسید تنگستن از روش کند و پاش استفاده شده است. ابتدا زیر لایه های شیشه ای با محلول آب و صابون شستشو داده شده و سپس با اتانول و آب دیونیزه ، هر کدام به مدت ده دقیقه در حمام التراسونیک قرار داده شده است. نمونه ها در دمای ۸۰ درجه سانتیگراد خشک شده است. با تنظیم دستگاه کند و پاش در توان ۵۰ وات به مدت ۹۵ دقیقه، لایه نازکی از اکسید تنگستن نشانده شده است. فشار اولیه دستگاه 2×10^{-4} mbar بود و حین لایه نشانی به 2.5×10^{-2} mbar رسیده است. ضخامت لایه بوسیله ضخامت سنجی فیزیکی در حدود ۱۰۰ نانومتر اندازه گیری شده است. بوسیله آنالیز پراش پرتو ایکس حالت بلوری لایه مورد بررسی قرار گرفته است (شکل ۱).

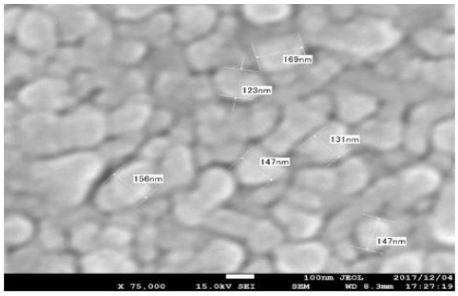


شکل 1 : طیف پراش پرتو ایکس بدست آمده از لایه اکسید تنگستن

ریخت شناسی سطحی لایه با استفاده از میکروسکوپ الکترونی گسیل میدانی مورد بررسی قرار گرفته است. همانطور که در شکل۲ مشاهده می شود، لایه مورد نظر دارای سطحی یکنواخت و بدون تخلخل می‌باشد. تصویر با بزرگنمایی ۷۵۰۰۰ گرفته شده و دانه هایی بین ۱۰۰ تا ۱۷۰ نانومتر را نشان می‌دهد. وجود تخلخل کمک می‌کند که

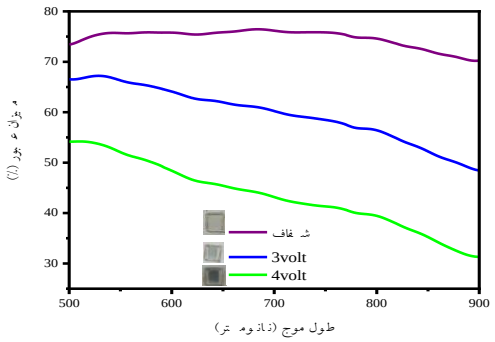
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

سطح جذب بیشتری برای یونها وجود داشته باشد و در نتیجه پاسخ الکتروکرومیک بهتر شود.



شکل ۲ : تصویر بدست آمده از میکروسکوپ الکترونی

در ادامه سلول ساخته شده و مشخصات الکترواپتیکی آن اندازه گیری می شود. برای بستن سلول از چسب دو طرفه (tesa4965) با ضخامت ۲۰۰ میکرومتر استفاده شده است. حین بستن سلول محلی را برای تزریق الکترولیت قرار داده و بعد از اتمام کار، کل سلول درزگیری شده است. منبع نور مورد استفاده در این بررسی، لامپ جیوه است. نور را بر روی سلول الکتروکرومیک کانونی کرده و مشخصات عبور نور، قبل و بعد از اعمال میدان الکتریکی بررسی شده است. شکل۳ طیف عبور در حالت شفاف و همچنین با اعمال پتانسیل های ۳ ولت و ٤ ولت را نشان می دهد. با توجه به طیف منبع نور، بازه اندازه‌گیری بین ۵۰۰ تا ۹۰۰ نانومتر است.



شکل ۳ :طیف عبور سلول الکتروکرومیک برای حالت های شفاف ، ولتاژ ۳ ولت و ٤ ولت

بیشترین تغییر اپتیکی ۳۹ درصد بوده که در طول موج ۹۰۰ نانومتر و با اعمال ٤ ولت بدست آمده است. بازده رنگی به ازای هر طول موجی قابل محاسبه است. در این کار، بازده رنگی در طول موج ۹۰۰ نانومتر اندازه گیری شده است. برای محاسبه بازدهی رنگی، جریان الکتریکی سلول همزمان با ثبت اطلاعات طیفی اندازه گیری شده است. این اندازه گیری برای ولتاژ ٤ ولت انجام شده و با انتگرال گیری از منحنی جریان نسبت به زمان، بار انباشته شده بدست آمده است. میزان عبور در حالت شفاف برای طول موج ۹۰۰ نانومتر ۷۰ درصد است که با اعمال ولتاژ ٤ ولت به ۳۰ درصد کاهش می یابد. میزان بازدهی رنگی با توجه به سطح مقطع سلول ($1.3\ cm^2$) و بار محاسبه شده در لایه بر مبنای داده های جریان الکتریکی (4.3mC) بدست می آید. نتایج در جدول ۱ ارایه شده است. با مقایسه نتایج بدست آمده با نتایج ارایه شده در تاریخچه، مشاهده می شود که بازدهی رنگی نسبتا خوبی دارد [8].

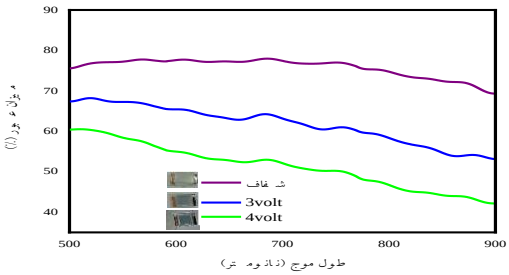
جدول ۱: نتایج الکترواپتیکی در ولتاژ ٤ ولت و طول موج ۹۰۰ نانومتر

T_b	T_c	Q(mC)	$A(cm^2)$	$CE(cm^2/C)$
۷۰٪	۳۱٪	٤,۳	۱,۳	۱۰۷

استفاده از الکترولیت ژله ای عموما به منظور بالا بردن پایداری شیمیایی سلول و جلوگیری از نشت الکترولیت می‌باشد. در این کار، الکترولیت ژله ای نیز در ساخت سلول استفاده شده است. برای این منظور، هر نوع توسعه بر روی الکترولیت باید به شیوه‌ای انجام گیرد که عملکرد الکتروکرومیکی سلول دچار افت و تنزل قابل توجه نشود. برای ساخت الکترولیت ژله ای، مقدار ٤ گرم از پلی متیل متاکریلات به محلول الکترولیت اضافه شده است. برای مقایسه، الکترولیتی با همان مولاریته قبلی ولی بدون اضافه کردن پلیمر تهیه و سلول دیگری با استفاده از آن ساخته

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

شده است. با اندازه گیری اپتیکی از این سلول مشاهده شد که ژله ای کردن الکترولیت اثر منفی بر تغییرات اپتیکی نداشته است (جدول ۲). حداکثرتغییر اپتیکی به میزان ۲۸ درصد و برای طول موج ۹۰۰ نانومتر مشاهده شده است (شکل ٤).



شکل ٤:طیف عبور سلول بدون به کارگیری پلیمر در تهیه الکترولیت

جدول ۲ مقایسه نتایج اپتیکی بدست آمده از سلول، مبتنی بر الکترولیت ژله ای و الکترولیت مایع با اعمال ولتاژ ٤ ولت

نوع الکترولیت	$\%T_b$	$\%T_c$	$\%\Delta T$	ضخامت لایه الکتروکرومیک nm	ضخامت لایه الکترولیت µm	طول موج مورد بررسی nm
ژله ای	۷۰	۳۱	۳۹	100	200	900
مایع	۷۰	٤۲	۲۸	100	200	900

نتیجه گیری

در این پژوهش به بررسی لایه نازک اکسید تنگستن در یک سلول الکتروکرومیک پرداخته شده است. برای این منظور لایه نازکی به ضخامت ۱۰۰ نانومتر ساخته شد است. طیف پراش پرتو ایکس نشان داد که لایه تهیه شده آمورف است. ریخت شناسی سطحی این لایه نیز، بر عدم تخلخل سطح دلالت داشته و دانه هایی در ابعاد ۱۰۰ تا ۱۷۰ نانومتر را نشان می‌دهد. تغییرات اپتیکی سلول الکتروکرومیک در ولتاژهای ۳ ولت و ٤ ولت اندازه گیری شده است. مشاهده شده است که با افزایش ولتاژ و همچنین افزایش طول موج میزان تغییرات اپتیکی بیشتر شده است، بطوریکه بیشترین تغییر اپتیکی در طول موج ۹۰۰ نانومتر بدست آمده است. میزان بازدهی رنگی با استفاده از مقدار بار انباشته شده محاسبه شده است که مقدار آن $107\ cm^2/C$ بدست آمده است. همچنین استفاده از الکترولیت ژله‌ای تاثیر نامطلوبی نداشته است که می تواند باعث کاربرد بهتر آن شود.

مراجع

[1] C. G.Granqvist, "Electrochromics for smart windows: Oxide-based thin films and devices," *Thin Solid Films,* vol. 564, pp. 1-38, 2014.

[2] M. P. Tae Gwang Yun, "All-Transparent Stretchable Electrochromic Supercapacitor Wearable Patch Device," *ACS Nano,* vol. 13, no. 3, pp. 3141-3150, 2019.

[3] R. H. Xueting Chang, "Sunlight-charged electrochromic battery based on hybrid film of tungsten oxide and polyaniline," *Applied Surface Science,* vol. 441, pp. 105-112, 2018.

[4] S. M. Han Na Kim, "Electrochromic mirror using viologen-anchored nanoparticles," *Materials Research Bulletin,* vol. 82, pp. 16-21, 2016.

[5] C. T. M. a. X. C. Ma, "Smart sunglasses based on electrochromic polymers," *Polym. Eng. Sci,* vol. 48, p. 2224–2228, 2008.

[6] Y. W. Yang Wang, "Switchable Materials for Smart Windows," *Annual Review ,* vol. 7, pp. 283-304, 2016.

[7] J. W. W. G. D. Ma, Electrochromic Materials and Devices: Fundamentals and Nanostructuring Approaches, Wiley Online Library, 2018.

[8] M. W. J. M. Y. C. Y. D. Wei Wu, "Electrochromic Metal Oxides: Recent Progress and Prospect," *Advanced Electronic Materials,* vol. 4, no. 8, 2018.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

محاسبه ویژه مقدارهای انرژی و تابع موج معادله شرودینگر برای تابع پتانسیل هالتن با در نظر گرفتن تقریبی بهتر برای پتانسیل گریز از مرکز

یزدان‌کیش، عنایت‌اله[1]

[1]دانشکده نفت و گاز، دانشگاه یاسوج، گچساران،۷۵۸۱۳-۵۶۰۰، ایران

چکیده

همه اطلاعات مورد نیاز در باره یک سیستم کوانتومی را می‌توان از ویژه توابع آن به دست آورد. و به همین دلیل به دست آوردن توابع موج پتانسیل‌های مختلف مورد علاقه فیزیکدانان بوده است. برهمین اساس در این مقاله به دست آوردن ویژه توابع پتانسیل هالتن مد نظر قرار گرفت، با توجه به اینکه روش نیکیفورو-اوارو یک روش گام به گام در حل معادله دیفرانسیل درجه دوم می باشد و در دو دهه اخیر مورد توجه بسیاری از نویسندگان قرار گرفته مورد انتخاب قرار گرفت. بنابراین ابتدا روش نیکیفرو-اوارو به صورت خیلی خلاصه ارائه شده، سپس با استفاده از این روش معادله شرودینگر برای پتانسیل هالتن حل شده است. با توجه به این امر که معادله شرودینگر برای پتانسیل هالتن به صورت دقیق برای هر lای به روش تحلیلی قابل حل نیست، بنابراین از یک تقریب بهبود یافته برای پتانسیل گریز از مرکز استفاده شد، سپس ویژه مقادیر انرژی و ویژه توابع به صورت تحلیلی به دست آورده شدند.

واژه‌های کلیدی: پتانسیل هالتن، روش نیکیفرو-اوارو، حل تحلیلی معادله شرودینگر

Calculation of the Wave Functions and Eigenvalues of Energy of the Schrodinger Equation with Hulthen Potential and an Improved Approximation of Centrifugal Term

Yazdankish, Enayatolah[1]

[1]Faculty of Gas and Petroleum, Yasouj University, Gachsaran, 75813-56001, Iran

Abstract

All information about a quantum system can be obtained by the wave functions of the Schrodinger equation. Therefore solving of the Schrodinger equation in quantum mechanics for various potential has great interest and consequently in this research solving of the Schrodinger equation with Hulthen potential is considered by an improved approximation for the centrifugal term and Nikiforov-Uvarov approach. So, the Nikiforov-Uvarov method is introduced briefly. Then, with use of this method, we solve the Schrodinger equation with the Hulthen potential is solved analytically. Due to the fact that, the Schrodinger equation cannot solved with the Hulthen potential exactly for any l, therefor an improved approximation is used for the centrifugal term. Then the Schrodinger equation is solved and obtained its energy eigenvalues and its wave functions analytically.

Keywords: Hulthen potential, Nikiforov-Uvarov method, solution of Schrodinger equation

مقدمه

تمام اطلاعات مورد نیاز در مورد یک سیستم کوانتومی را می‌توان از تابع موج مربوطه به دست آورد. برای به دست آوردن تابع موج، ناچارا باید معادله شرودینگر را حل کرد. حل تحلیلی معادله شرودینگر تنها برای تعدادی از پتانسیل ها امکان پذیر است. تلاش برای حل معادله شرودینگر باعث شده تا محققین روش‌های

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مختلفی را به کار گیرند. یکی از این روش‌ها، روشی است که توسط نیکیفرو–اوارو در سال ۱۹۸۸ ارائه شد[۱, ۲]. این روش مبتنی بر حل یک معادله دیفرانسیل مرتبه دوم فوق هندسی می‌باشد. این روش نیز قادر به حل معادله شرودینگر برای هر پتانسیلی نمی‌باشد. از این رو ناچارا به حل تقریبی معادله شرودینگر پرداخته‌اند [۳, ٤]. یکی از این پتانسیل‌ها پتانسیل هالتن است. این پتانسیل که کاربردهای زیادی در فیزیک هسته ای دارد پتانسیلی شعاعی است [٥, ٦] و بنابراین با روش جداسازی متغیرها حل قسمت زاویه ای معادله مشخص است و تنها قسمت شعاعی معادله شرودینگر باید حل شود. به ازای $l=0$، حل دقیق این پتانسیل با استفاده از روش نیکیفرو–اوارو به دست آمده [۷]، ولی در حالت $l\neq 0$ معادله شرودینگر برای این پتانسیل به صورت تقریبی صورت گرفته، در واقع مقدار تقریبی برای جمله گریز از مرکز در معادله شرودینگر جایگزین شده است. در این تحقیق با بکار گرفتن تقریبی بهتر معادله شرودینگر با پتانسیل هالتن حل شده است.

روش نیکیفرو–اوارو

این روش به طور خلاصه در اینجا معرفی شده (در واقع روابط مورد نیاز ارائه شده) و جزئیات در مرجع [۱] آورده شده است. این روش مبتنی بر حل معادله دیفرانسیل درجه دوم زیر است.

$$\psi''(s)+\left(\frac{\tilde{\tau}(s)}{\sigma(s)}\right)\psi'(s)+\left(\frac{\tilde{\sigma}(s)}{\sigma^2(s)}\right)\psi(s)=0 \qquad (1)$$

در اینجا $\sigma(s)$ و $\tilde{\sigma}(s)$ چند جمله‌ای از درجه حداکثر دو می‌باشند و $\tilde{\tau}(s)$ چند جمله ای از درجه حداکثر یک می‌باشد. با جایگزینی زیر معادله را حل می‌کنیم.

$$\psi(s)=\phi(s)y(s) \qquad (2)$$

بنابراین معادله (1) به معادله زیر تبدیل می شود.

$$\sigma(s)y''(s)+\tau(s)y'(s)+\lambda y(s)=0 \qquad (3)$$

که در اینجا

$$\phi'(s)/\phi(s)=\pi(s)/\sigma(s) \qquad (4)$$

$$\tau(s)=\tilde{\tau}(s)+2\pi(s) \qquad (5)$$

و با در نظر گرفتن معادلات (۲) و (٤) رابطه زیر به دست می‌آید.

$$\pi(s)=\frac{\sigma'(s)-\tilde{\tau}(s)}{2} \pm\sqrt{\left(\frac{\sigma'(s)-\tilde{\tau}(s)}{2}\right)^2-\tilde{\sigma}(s)+k\sigma(s)} \qquad (6)$$

در معادله (۳) تابع $y(s)$ یک چند جمله ای است که بر حسب نمایش رودریگز به صورت زیر بیان می شوند.

$$y_n(s)=\frac{B_n}{\rho(s)}\frac{d^n}{ds^n}[\sigma^n(s)\rho(s)] \qquad (7)$$

در اینجا B_n ثابت بهنجارش است و تابع وزنی $\rho(s)$ از رابطه زیر به دست می آید.

$$\left(\sigma(s)\rho(s)\right)'=\tau(s)\rho(s) \qquad (8)$$

تابع $\pi(s)$ یک چند جمله ای از درجه حداکثر یک می باشد. بنابراین تابع زیر رادیکال (رابطه(٦)) باید توان دوم یک چند جمله ای باشد، که شرط تعیین کننده k می باشد و از آن طریق

$$\lambda=k+\pi' \qquad (9)$$

معین می گردد. در این روش برای به دست آوردن ویژه مقادیر انرژی از رابطه زیر استفاده می‌شود.

$$\lambda=-n\tau'-\frac{n(n-1)}{2}\sigma'', \quad (n=0,1,2,\dots) \qquad (10)$$

حل معادله شرودینگر با پتانسیل هالتن

پتانسیل هالتن به شکل زیر است.

$$V(r)=\frac{-K\delta}{e^{\delta r}-1} \qquad (11)$$

که در این رابطه K و δ به ترتیب نمایشگر شدت و محدوده یا برد پتانسیل می‌باشد. پتانسیل هالتن در حد $r\ll\frac{1}{\delta}$ دارای رفتار جاذب همانند پتانسیل کولنی می‌باشد. برای حل معادله شرودینگر با پتانسیل هالتن باید به بسط تقریبی جمله گریز از مرکز تکیه کرد. قسمت شعاعی معادله شرودینگر با پتانسیل هالتن در مختصات کروی به فرم زیر است.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

$$\frac{d^2}{dr^2}R(r)+\frac{2}{r}\frac{d}{dr}R(r) + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E+\frac{K\delta e^{-\delta r}}{1-e^{-\delta r}}-\frac{\hbar^2}{2m}l(l+1)\frac{1}{r^2}\right)R(r)=0 \quad (12)$$

با تغییر متغیر $R(r)=u(r)/r$ این معادله به فرم زیر در می‌آید.

$$\frac{d^2}{dr^2}u(r)+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E+\frac{K\delta e^{-\delta r}}{1-e^{-\delta r}}\right)u(r) - l(l+1)\frac{1}{r^2}u(r)=0 \quad (13)$$

این معادله با تقریب $1/r^2 \approx \delta^2 e^{-\delta r}/(1-e^{-\delta r})^2$ حل شده است [۷]. اکنون در این تحقیق با تقریب زیر که تقریب بهتری است [۸]، معادله شرودینگر حل شده است.

$$\frac{1}{r^2}\simeq \delta^2\left[\frac{1}{12}+\frac{1}{e^{\delta r}-1}+\frac{1}{(e^{\delta r}-1)^2}\right] \quad (14)$$

با جایگذاری این تقریب در معادله شرودینگر و استفاده از تغییر متغیر $z=e^{-\delta r}$ و انجام ساده سازی های لازم معادله شرودینگر به صورت زیر در می‌آید.

$$\frac{d^2}{dz^2}\psi(r)+\frac{1-z}{z(1-z)}\frac{d}{dz}\psi(r)+\frac{1}{z^2(1-z)^2}\times [-(\alpha+\beta)z^2+(2\alpha+\beta-\gamma)z-\alpha]\psi(z)=0 \quad (15)$$

در اینجا

$$\gamma=l(l+1), \qquad \beta=\frac{2mK}{\hbar^2\delta} \quad (16)$$
$$\alpha=-\frac{2mE}{\hbar^2\delta^2}+\frac{1}{12}l(l+1)=-\frac{2mE}{\hbar^2\delta^2}+\frac{1}{12}\gamma$$

با مقایسه رابطه (۱۵) با معادله (۱)، چند جمله‌ای‌های زیر مشخص می‌شوند.

$$\tilde{\tau}(z)=1-z$$
$$\sigma(z)=z(1-z) \quad (17)$$
$$\sigma(z)=-(\alpha+\beta)z^2+(2\alpha+\beta-\gamma)z-\alpha$$

با جایگذاری رابطه (۱۷) در رابطه (۶) خواهیم داشت:

(۱۸)

$$\pi(z)=-\frac{z}{2}\pm\frac{1}{2}\times \sqrt{[1+4(\alpha+\beta-k)]z^2-4(2\alpha+\beta-\gamma-k)z+4\alpha}$$

با توجه به اینکه $\pi(z)$ چند جمله ای از درجه حداکثر یک می‌باشد، با استفاده از این شرط مقدار k به دست می‌آید.

$$k_{\pm}=\beta-\gamma\pm\sqrt{\alpha(1+4\gamma)} \quad (19)$$

با این مقادیری که برای k به دست آمده مقادیر $\pi(z)$ به صورت زیر خواهد بود.

$$\pi(z)=-\frac{z}{2}\pm\frac{1}{2}\begin{cases}[(2\sqrt{\alpha}-\sqrt{1+4\gamma})z-2\sqrt{\alpha}]\\ [(2\sqrt{\alpha}+\sqrt{1+4\gamma})z-2\sqrt{\alpha}]\end{cases} \quad (20)$$

بر اساس روش نیکیفرو-اوارو تنها یکی از این چهار مقدار به دست آمده دارای معنی فیزیکی است که مشتق معادله (۵) دارای مقداری منفی شود [۱]. و در نتیجه:

$$\pi(z)=-\frac{z}{2}-\frac{1}{2}[(2\sqrt{\alpha}+\sqrt{1+4\gamma})z-2\sqrt{\alpha}] \quad (21)$$

با استفاده از روابط (۹) و (۱۰) ویژه مقدارهای انرژی از رابطه زیر به دست خواهند آمد.

$$\lambda=\beta\gamma-\frac{1}{2}\left(1+2\sqrt{\alpha}\right)\left(1+\sqrt{1+4\gamma}\right) =n[1+2\sqrt{\alpha}+n+\sqrt{1+4\gamma}],\ \ n=0,1,2,\ldots \quad (22)$$

با جایگذاری مقادیر پارامترهای α، β و γ که قبلا در رابطه (۱۶) مشخص گردیده‌اند، ویژه مقدارهای انرژی مطابق ذیل به دست خواهند آمد.

$$E=-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{mK/\hbar^2\delta}{n+l+1}-\frac{(n+l+1)}{2}\right]^2 +\frac{1}{12}\frac{\hbar^2\delta^2}{2m}l(l+1) \quad (23)$$

این ویژه مقادیر انرژی است که از این تحقیق به دست آمده است. تفاوت این ویژه مقدارهای انرژی با مقداری که با تقریب دیگری که در ابتدا مطرح شد، در واقع همان جمله دوم در رابطه انرژی

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

یعنی $\hbar^2\delta^2 l(l+1)/24m$ است، که تفاوتی آشکار و واضح است. در جدول (۱) نتایج معادله (۲۳) با مقادیر به دست آمده از روش عددی با هم مقایسه شده‌اند.در این جدول از واحد اتمی(au) استفاده شده است. ($\hbar = m = e = 1$) همچنین مقدار K برابر یک در نظر گرفته شده است. شجاعی و همکارانش [۹] با در نظر گرفتن پتانسیل یوکاوا و روش نیکیفروف–اوارو و همچنین مدل کلاستر برای کربن ۱۲ ویژه حالت های انرژی را تا حد خوبی به دست آوردند، با توجه به اینکه پتانسیل هالتن در حد rهای کوچک به پتانسیل یوکاوا تبدیل می شودانتظار می رود که ویژه حالتهای کربن ۱۲ با این پتانسییل به دست آید. اگر مقدار K طوری در نظر گرفته شود که انرژی حالت پایه را برآورده سازد آنگاه حالت های $l=1$ و $l=2$ به ترتیب خواهد بود $E_{l=1}=67.68\ MeV$ و $E_{l=2}=66.96\ MeV$ که با مقادیر تجربی 79.45 و 78.81 قابل مقایسه است (در اینجا $K=82.2$ ، $\delta=0.01$ و $m_p=1832m_e$).اکنون برای به دست آوردن تابع موج روابط (۲)، (۷) و (۸) را در نظر می‌گیریم.

$$y(z)= B_n z^{-2\sqrt{\alpha}}(1-z)^{-(2l+1)}\frac{d^n}{dz^n}\left(z^{n+2\sqrt{\alpha}}(1-z)^{n+2l+1}\right) \quad (24)$$

و بنابراین تابع موج برابر خواهد بود با:

$$\psi(z)=N_{nl}z^{\sqrt{\alpha}}(1-z)^{l+1}P_n^{(2\sqrt{\alpha},2l+1)}(1-2z) \quad (25)$$

در اینجا N_{nl} ثابت بهنجارش است و تابع $P_n^{(2\sqrt{\alpha},2l+1)}(1-2z)$ چند جمله‌ای ژاکوبی است.

نتیجه گیری

در این تحقیق قسمت شعاعی معادله شرودینگر با پتانسیل مرکزی هالتن مد نظر قرار گرفت با اعمال یک تقریب بهبود یافته برای پتانسیل گریز از مرکز، معادله شرودینگر به صورت تحلیلی حل شد و ویژه مقادیر انرژی و توابع موج به دست آمدند. انرژی حالت پایه همچنان که انتظار می‌رفت با تقریب قبلی منطبق است. انرژی حالت‌های با تکانه زاویه ای مخالف صفر با مقدار قبلی متفاوت است و برای تکانه زاویه‌ای بزرگیر اختلاف بیشتر است.

تراز	مقدار δ	نتایج این تحقیق در واحد اتمی	نتایج عددی[۱۰]
2p	0.025	0.1127611	0.1127605
	0.05	0.1010442	0.1010425
	0.10	0.0791769	0.0791794
3p	0.025	0.0437072	0.0437069
	0.05	0.0331623	0.0331645
	0.10	0.0159825	0.0160537
3d	0.025	0.0436044	0.0436063
	0.05	0.0327508	0.0327532
	0.10	0.0143364	0.0144842

جدول (۱) مقایسه نتایج به دست آمده از این تحقیق با نتایج عددی

مرجع‌ها

[۱] A. F. Nikiforov and V. B. Uvarov, *Special functions of mathematical physics*. Springer, 1988.

[۲] C. Berkdemir, "Application of the Nikiforov-Uvarov method in quantum mechanics," *Theoretical Concepts of Quantum Mechanics,* p. 225, 2012.

[۳] C. Berkdemir and J. Han, "Any l-state solutions of the Morse potential through the Pekeris approximation and Nikiforov–Uvarov method," *Chemical physics letters,* vol. **409**, no. 4-6, pp. 203-207, 2005.

[٤] B. Ita, H. Louis, T. Magu, and N. Nzeata-Ibe, "Bound State Solutions of the Schrödinger's Equation with Manning-Rosen Plus a Class of Yukawa Potential Using Pekeris-like Approximation of the Coulomb Term and Parametric Nikiforov-Uvarov," *World Scientific News,* vol. **70**, no. 2, pp. 312-319, 2017.

[٥] M. Onyeaju, J. Idiodi, A. Ikot, M. Solaimani, and H. Hassanabadi, "Linear and nonlinear optical properties in spherical quantum dots: generalized Hulthén potential," *Few-Body Systems,* vol. **57**, no. 9, pp. 793-805, 2016.

[٦] S. Meyur and S. Debnath, "Solution of the Schrödinger equation with Hulthén plus Manning-Rosen potential," *Latin-American Journal of Physics Education,* vol. **3**, no. 2, p. 18, 2009.

[۷] S.-H. Dong and J. Garcia-Ravelo, "Exact solutions of the s-wave Schrödinger equation with Manning–Rosen potential," *Physica Scripta,* vol. **75**, no. 3, p. 307, 2007.

[۸] S. M. Ikhdair, "On the bound-state solutions of the Manning–Rosen potential including an improved approximation to the orbital centrifugal term," *Physica Scripta,* vol. **83**, no. 1, p. 015010, 2011.

[۹] Shojaei, Mohammad Reza, and Nafiseh Roshan Bakht. "Calculation of energy spectrum of 12 C isotope with modified Yukawa potential by cluster models." *Pramana* 87.4 (2016): 54.

[۱۰] Varshni, Y. P. "Eigenenergies and oscillator strengths for the Hulthén potential." *Physical Review A* 41.9, 4682, 1990.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

محاسبه تابع ساختار غیر یکتای هسته با استفاده از فاکتور هسته ای

سمیه، حیدری[۱]؛ بیتا، رضایی[۲]؛جایانتا، کومار سارما[۳]؛ غلامرضا، برون[٤]

[۱و۲و٤] دانشکده علوم دانشگاه رازی، کرمانشاه

[۳] دانشکده فیزیک، دانشگاه تزپور، آسام، هند

چکیده

در این مقاله اثر محیط هسته بر تابع ساختار غیریکتا را برای چند هسته نوعی سبک و سنگین بررسی می کنیم، سپس فاکتور هسته ای را محاسبه کرده و با استفاده از جواب های معادله تحول DGLAP به محاسبه تابع ساختار غیریکتای هسته در مرتبه LO و NLO می پردازیم. در ادامه، تغییرات تابع ساختار را برحسب x و Q^2 محاسبه می کنیم.

واژه های کلیدی: ***تابع ساختار غیر یکتا، فاکتور هسته ای، اثر سایه افکنی، معادلات تحول DGLAP***

Computing the nuclear non-singlet structure function via the nuclear factor

Heidari, Somayeh[1]; Rezaei, Bita[2]; Kumar Sarma, Jayanta[3]; Boroun, Gholamreza[4]

[1,2,4] Department of Physics, Razi University, Kermanshah
[3] Department of Physics, Tezpur University, Assam, India

Abstract

In this paper we investigate the nuclear environment effect on the non-singlet structure function for some typical light and heavy nuclei, then with calculating the nuclear factor and using the solutions of DGLAP evolution equation, we obtain the nuclear non-singlet structure function at LO and NLO analysis. In the following, we compute the variation of structure function versus x and Q^2.

***Keywords**: Non-singlet structure function, nuclear factor, shadowing effect, DGLAP evolution equation.*

مقدمه

بررسی و اندازه گیری ساختار درونی هادرون ها به وسیله توابع ساختار صورت می گیرد. توابع ساختار اطلاعاتی در مورد توابع توزیع پارتونی و اینکه هر پارتون چه کسری از تکانه پروتون را حمل می کند، فراهم می آورد. همچنین در حالت قطبیده، اطلاعاتی درباره نحوه توزیع اسپین هادرون هدف به‌دست می‌دهد. تابع ساختار هسته، چگونگی توزیع بار در داخل هسته را نشان می‌دهد و نقش مهمی در مطالعه آزمایش های برخورد دهنده انرژی بالا دارد، همچنین کمیت مهمی برای فهمیدن ساختار داخلی هادرون هاست.

تابع ساختار به بسیاری از فرایندهای انرژی بالا مانند دامنه پراکندگی، سطح مقطع کل در پراکندگی ناکشسان ژرف، توزیع های پارتونی، ثابت جفت شدگی رونده و... مربوط می شود.

در پراکندگی ناکشسان ژرف، به دلیل برقراری برهم کنش ضعیف الکترومغناطیسی، فوتون مجازی تبادلی بدون برهم زدن شدید محیط هسته می‌تواند مقدار زیادی تکانه به کوارک داخل نوکلئون

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

انتقال دهد. مقدار تجربی بدست آمده از این پراکندگی اطلاعات زیادی در مورد تابع ساختار نوکلئون آزاد و مقید به دست می‌دهد. اثرات ناشی از محیط هسته، ساختار داخلی نوکلئون‌ها و نیز توابع توزیع کوارکی داخل نوکلئون‌های مقید را نسبت به نوکلئون‌های آزاد متفاوت می‌سازد.

تابع ساختار غیریکتا معیاری از تعداد کوارک‌های ظرفیت در هسته هدف می‌باشد. کاهش دسترسی کاوشگر به برخی از نوکلئون‌های مقید، منجر به کاهش تعداد موثر کوارک‌های ظرفیت می شود که اشاره به سایه افکنی کوارک‌های ظرفیت دارد. از سایه افکنی هسته‌ای استنباط می شود که نوکلئون‌های مقید درون هسته کاملا مستقل نیستند. در این مقاله هدف ما محاسبه تابع ساختار غیریکتا برای هسته‌های سبک و سنگین با استفاده از فاکتور هسته‌ای می باشد.

روش رگه

با توجه به رشد تابع ساختار در ناحیه x کوچک در DIS، رفتار رگه برای تابع ساختار به صورت $F_2^{NS}(x,Q^2)=cx^{-\lambda}$ در نظر گرفته می شود که پارامتر λ وابسته به Q^2 است و در هر مقدار ثابت Q^2، مستقل از x می‌باشد. با استفاده از داده‌های تجربی گروه NMC [۱] رفتار رگه را برای تابع ساختار غیریکتا در بازه $1GeV^2$ تا $16GeV^2$ به دست آورده ایم (شکل ۱). تغییرات خطی با $\mathrm{Ln}(Q^2)$ به صورت رابطه نمایی زیر در نظر گرفته می شود

$$F_2^{NS}(x,Q^2)=cx^{-aLn(\frac{Q^2}{\lambda^2})} \qquad (۱)$$

با مشتق گیری نسبت به Q^2 خواهیم داشت:

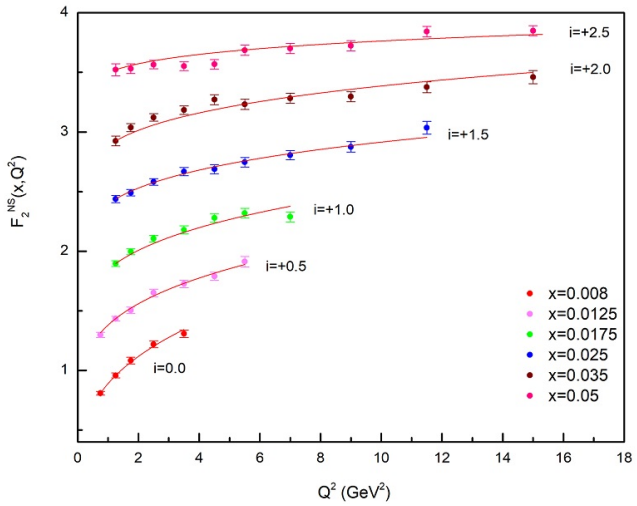
$$Q^2\frac{\partial F_2^{NS}(x,Q^2)}{\partial Q^2}=-aLnxF_2^{NS}(x,Q^2) \qquad (۲)$$

که جواب آن به صورت زیر است:

$$F_2^{NS}(x,Q^2)=F_2^{NS}(x,Q_0^2)\exp(-aLnxLn(\frac{Q^2}{Q_0^2})) \qquad (۳)$$

در این رابطه، پارامتر نمای a هنوز تعیین نشده است و محاسبه تابع ساختار، مستلزم تعیین این پارامتر می باشد.

با جایگذاری مقدار اولیه از داده های آزمایشگاهی NMC و برازش معادله فوق با این داده ها در محدوده $x < ۰.۰۵$ و $Q^2 < ۲۰GeV^2$ مقدار میانگین برای پارامتر نمای a را ۰.۰۵۶۵ بدست می آوریم که با پارامتر متناظر برای توابع ساختار F_2 و xF_3 سازگار است [۲و۳].



شکل ۱. داده های آزمایشگاهی مربوط به تابع ساختار غیریکتا اندازه گیری شده توسط گروه NMC. برای نمایش بهتر نقاط به اندازه i+ جابه جا شده اند و خطوط نشان دهنده برازش با معادله (۳) می باشد.

جواب های معادله تحول DGLAP

معادله تحول DGLAP برای تابع ساختار غیر یکتا در مرتبه LO به صورت

$$\frac{\partial F_2^{NS}(x,t)}{\partial t}-\Theta^{(0)}(t)[\frac{2}{3}(3+4Ln(1-x))F_2^{NS}(x,t)$$
$$+\frac{4}{3}\int_x^1\frac{dz}{1-z}((1+z^2)F_2^{NS}(\frac{x}{z},t)-2F_2^{NS}(x,t))]=0 \qquad (٤)$$

داده می شود و در مرتبه NLO به شکل

$$\frac{\partial F_2^{NS}(x,t)}{\partial t}-\Theta^{(1)}(t)[\frac{2}{3}(3+4Ln(1-x))F_2^{NS}(x,t)+$$
$$\frac{4}{3}\int_x^1\frac{dz}{1-z}((1+z^2)F_2^{NS}(\frac{x}{z},t)-2F_2^{NS}(x,t))]-(\Theta^{(1)}(t))^2$$
$$\times[(x-1)F_2^{NS}(x,t)\int_0^1 h(z)dz+\int_x^1 h(z)F_2^{NS}(\frac{x}{z},t)dz]=0 \qquad (٥)$$

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

است [٤] و در آن پارامتر $t = Ln(\frac{Q^2}{\Lambda^2})$ و Λ پارامتر قطع QCD است. تابع h(z) در روابط فوق به صورت زیر می باشد

$$h(z) = C_F^2[P_F(z) - P_A(z)] + \frac{1}{2}C_F C_A[P_G(z) + P_A(z)] + C_F T_R N_f P_{N_f}(z)].$$

ثابت جفت شدگی رونده در مراتب LO و NLO عبارت است از

$$\Theta^{(0)}(t) = \frac{2}{\beta_0 t} \quad \text{و} \quad \Theta^{(1)}(t) = \frac{2}{\beta_0 t}[1 - \frac{\beta_1 Ln(t)}{\beta_0^2 t}]$$

با توابع $\beta_0 = \frac{1}{3}(33 - 2N_f)$ و $\beta_1 = 102 - \frac{38}{3}N_f$

و ثوابت $N_f = ۳$ و $T_R = ۱/۲$، بقیه ثوابت در [٥] داده شده است.

پس از اعمال رفتار رگه برای تابع ساختار و حل معادلات در دو مرتبه، جواب نهایی به صورت زیر برای مرتبه LO

$$F_2^{NS}(x,t) = F_2^{NS}(x_0,t_0)\exp(\int_{t_0}^{t}\Theta^{(0)}(t)L(x_0,t)dt)(\frac{x}{x_0})^{-at} \quad (٦)$$

و

$$F_2^{NS}(x,t) = F_2^{NS}(x_0,t_0)\times \exp(\int_{t_0}^{t}[\Theta^{(1)}(t)L(x_0,t) + (\Theta^{(1)}(t))^2 M(x_0,t)]dt)(\frac{x}{x_0})^{-at} \quad (٧)$$

برای مرتبه NLO حاصل می شود، که توابع به کار رفته در آن به شکل زیر می باشد

$$L(x,t) = \frac{2}{3}[3 + 4Ln(1-x)] + \frac{4}{3}x\int_x^1 \frac{dz}{1-z}[(1+z^2)z^{at} - 2]$$

و $M(x,t) = (x-1)\int_0^1 h(z)dz + \int_x^1 h(z)z^{at}dz$.

محاسبه فاکتور هسته ای

برای به دست آوردن تابع ساختار غیر یکتای نوکلئون مقید در هسته لازم است که فاکتورتصحیح هسته را که نسبت تابع ساختار غیر یکتای هسته به نوکلئون است را محاسبه نماییم

$$R(x,t) = \frac{F_2^{NS-A}(x,Q^2)}{F_2^{NS}(x,Q^2)} \quad . \quad (٨)$$

این فاکتور به اثرات هسته ای بر تابع ساختار نوکلئون آزاد اشاره می کند. با در نظر گرفتن توزیع کوارک های ظرفیت u و d برای هسته و نوکلئون و بیان توزیع کوارک های ظرفیت در هسته بر حسب تابع وزن و در نهایت استفاده از روابط پارامتری گروه HKN [٦] و MRST [٧] به ترتیب برای توزیع نوکلئون مقید در هسته و نوکلئون آزاد، رابطه زیر را به دست آوردیم

$$R(x,t) = \frac{1}{A}\frac{(4Zw_{uv} + Nw_{dv})u_v + (4Nw_{uv} + Zw_{dv})d_v}{4u_v + d_v} \quad (٩)$$

با در نظر گرفتن این فاکتور و جواب‌های به دست آمده از حل معادله DGLAP روابط زیر را برای تابع ساختار هسته در مرتبه LO

$$F_2^{NS-A}(x,t) = R(x,t)F_2^{NS}(x_0,t_0)\times \exp(\int_{t_0}^{t}\Theta^{(0)}(t)L(x_0,t)dt)(\frac{x}{x_0})^{-at} \quad (١٠)$$

و

$$F_2^{NS-A}(x,t) = R(x,t)F_2^{NS}(x_0,t_0)\times \exp(\int_{t_0}^{t}[\Theta^{(1)}(t)L(x_0,t) + (\Theta^{(1)}(t))^2 M(x_0,t)]dt)(\frac{x}{x_0})^{-at} \quad (١١)$$

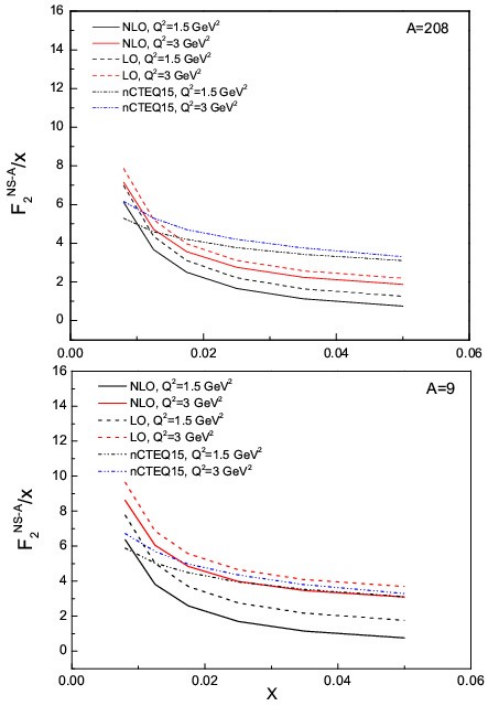
در مرتبه NLO داریم.

نتایج و بررسی شکل ها

تغییرات تابع ساختار غیر یکتای هسته برای دو هسته نوعی سبک (A= ۹) و سنگین (A= ۲۰۸) بر حسب x در دو مرتبه LO و NLO در شکل ۲ نشان داده شده است. برای مشاهده بهتر اثرات هسته ای، نتایج برای نوکلئون آزاد نیز نشان داده شده است. در توافق با تمام پیش بینی های تئوری، تابع ساختار به سمت مقایر کوچک x رشد می کند، وابستگی به A نیز مشهود است. تابع ساختار هسته سنگین کوچکتر از هسته سبک است و تاثیر محیط هسته بر تابع ساختار نوکلئون قابل توجه است. این تصحیحات برای هسته سبک حدود ١٦-١٧ درصد وبرای هسته سنگین ٢٠ درصد است، لذا نوکلئون مقید در هسته سنگین تصحیحات بیشتری نسبت به هسته سبک دارد.

در شکل ۳ تحول Q^2 تابع ساختار غیریکتای هسته های مذکور در دو مرتبه LO و NLO را در مقادیر مختلف x به دست آورده‌ایم. مشاهده می کنیم که در مقادیر بالاتر Q^2 وابستگی به Q^2 ضعیف بوده و تابع ساختار تقریبا مستقل از این پارامتر می باشد که اشاره به مقیاس بندی بیورکن در این ناحیه دارد. منحنی در مرتبه NLO به علت تصحیحات مراتب بالاتر زیر منحنی LO قرار می گیرد.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



شکل۲. تحول تابع ساختار غیریکتا برحسب x برای دو هسته سبک و سنگین.

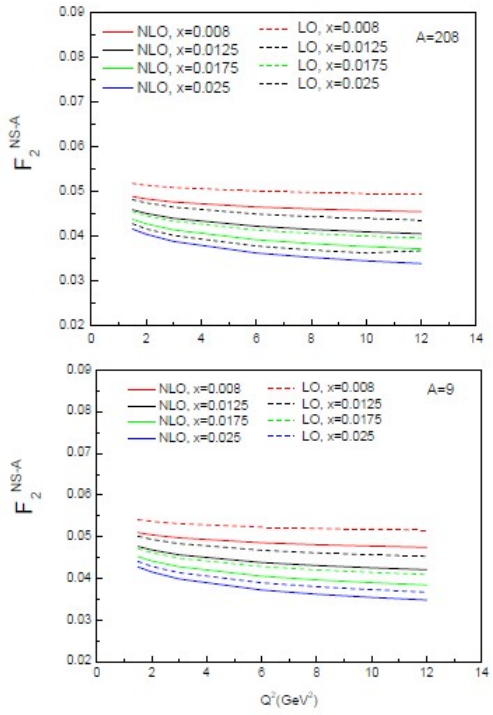
نتیجه گیری

اثرات هسته ای باعث تغییر در ساختار کوارکی نوکلئون مقید در محیط هسته و در نتیجه تابع ساختار آن نسبت به نوکلئون آزاد می شود. بنابراین برای محاسبه تابع ساختار غیر یکتای هسته به یک فاکتور هسته ای نیاز است.

در این مقاله تابع ساختار غیریکتا را برای دو هسته نوعی سبک و سنگین در ناحیه x کوچک و Q^2 کوچک و متوسط محاسبه کردیم. مشاهده می‌شود که پدیده سایه در محدوده x < ۰.۰۵ شروع می‌شود. وابستگی به x، Q^2 و A در شکل‌ها به خوبی مشاهده می‌شود. نتایج ما با داده‌های آزمایشگاهی توافق خوبی دارد. با کاهش x و افزایش A سایه افکنی بیشتری در تابع ساختار غیریکتا به دست می‌آید و این نسبت تقریبا مستقل از Q^2 است.

تغییرات توزیع پارتونی بر حسب x برای هسته سنگین بیشتر از هسته سبک است که به علت وجود پارتون‌های سازنده متعدد درون آن می‌باشد و این امر باعث اثر سایه بیشتر برای هسته سنگین‌تر می‌باشد. این تغییرات برای هسته سبک در مقادیر بزرگتر x بسیار کوچک است.

در تحول Q^2 تابع ساختار هسته برای هسته سبک و سنگین، مشاهده می شود که وابستگی تابع ساختار به Q^2 بسیار ضعیف بوده و در انرژی‌های بالا ($Q^2 > ۴\text{GeV}^2$) تقریبا مستقل از این پارامتر می‌باشد. این رفتار به مقیاس بندی تابع ساختار هسته در ناحیه مقیاس بندی بیورکن اشاره دارد. نقض لگاریتمی مقیاس بندی در ناحیه انرژی‌های کوچک دارای اهمیت است. تصحیحات مراتب بالاتر در تابع ساختار غیریکتا در ناحیه x و Q^2 کوچک وجود دارد که از مرتبه $\frac{1}{Q^2}$ می‌باشد و در این ناحیه تاثیر گذار است.



شکل۳. تابع ساختار غیریکتا برحسب Q^2 برای دو هسته سبک و سنگین.

مرجع‌ها

[۱] M. Arneodo, et al., NMC, *Nucl. Phys. B* **483** (1997) 3.
[۲] C. Adloff, et al., *Phys. Lett. B* **520** (2001) 183.
[۳] N. M. Nath, N. Baruah, J.K. Sarma, *Indian. J. Phys* **88** (2014) 745, DOI 10.1007/s12648-014-0467-9.
[۴] W. A. Bardeen et. al., *Phys. Rev. D* **18**(1978)3998.
[۵] R. T. Herrrod, S. Wada, *Phys. Lett. B* **96** (1980) 195.
[۶] M. Hirai, S. Kumano, T.H. Nagai, *Phys. Rev. C* **76** (2007) 065207.
[۷] A. D. Martin, R. G. Roberts, W. J. Stirling, R. S. Thorne, *Eur. Phys. J. C* **4** (1998) 463.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بررسی ساختار الکترونی، خواص مغناطیسی و اپتیکی ترکیب تمام‌هویسلر Cr_2ScSb

فاطمه کرمی[۱]، قاسم فروزانی[۱]، محمود مرادی[۲]

[۱] گروه فیزیک، دانشگاه پیام‌نور، صندوق پستی ۳۶۹۷-۱۹۳۹۵، تهران، ایران

[۲] گروه فیزیک، دانشکده فیزیک، دانشگاه شیراز، شیراز، ایران

چکیده

بر پایه نظریه تابعی چگالی، خواص الکترونی، مغناطیسی و اپتیکی ترکیب تمام‌هویسلر Cr_2ScSb مورد بررسی قرار گرفته است. این ترکیب در ثابت شبکه تعادلی برای منحنی چگالی حالت‌ها یک گاف نیم‌فلزی ۰/۰۷ الکترون‌ولتی دارد اما در ساختار نواری گاف انرژی مشاهده نمی‌شود. این ترکیب در حالت فرومغناطیس پایدار می‌باشد. Cr_2ScSb دارای مغناطش کل ٤ مگنتون بور می‌باشد و از رابطه اسلیتر-پائولینگ پیروی می‌کند. بررسی خواص اپتیکی نشان می‌دهد که این ترکیب برای استفاده به عنوان جاذب امواج الکترومغناطیسی گزینه مناسبی است.

واژه‌های کلیدی: *ترکیب تمام‌هویسلر، خاصیت نیم‌فلزی، خواص اپتیکی، اسپینترونیک.*

Investigation of Electronic structure, Magnetic and Optical Properties of Cr_2ScSb Full-Heusler Compound

Fateme Karami[1], Ghasem Forozani[1], Mahmood Moradi[2]

[1] *Department of Physics, Payame Noor University, P.O. Box 19395-3697, Tehran, Iran*

[2] *Department of Physics, College of Sciences, Shiraz University, Shiraz 71946, Iran*

Abstract

Based on density functional theory the electronic, magnetic and optical properties of the Cr_2ScSb full-Heusler compound have been investigated. This compound has half-metallic gap of 0.07 eV at equilibrium lattice constant, but there is no band gap in the band structure.Cr_2ScSb is stable in ferromagnet state. The total magnetic moment of Cr_2ScSb is 4 μ_B and following the Slater-Pauling rule. Results of the investigation of optical properties showed that this compound is a good choice for use as an electromagnetic waves absorbent.

***Keywords**: Full-Heusler compounds, Half-metallic properties, Optical properties, Spintronic.*

PACS No.70

مقدمه

در سال‌های اخیر برخی از ترکیب‌های تمام‌هویسلر[۱] [۱-۳] و نیم-هویسلر[۲] [٥،٤] مورد توجه محققان قرار گرفته‌اند. این ترکیب‌ها معمولا به دلیل دارا بودن خواص نیم‌فلزی و دمای کوری[۳] بالا در ساخت ابزار اسپینترونیک[٤][٦،٧] و همچنین شیرهای اسپینی[٥][٨] کاربرد دارند. ترکیب‌های فرومغناطیس نیم‌فلز دارای قطبش اسپینی کامل (۱۰۰٪) در سطح فرمی هستند. قطبش اسپینی کامل به این معنا است که ترکیب مورد نظر در سطح فرمی، در یک جهت اسپینی رفتار فلزی دارد و در جهت دیگر اسپینی مانند عایق‌ها رفتار می‌کند. فرمول کلی تمام‌هویسلرها به صورت X_2YZ است. این ترکیب‌ها دارای ساختار $L2_1$ هستند.

در این مقاله ساختار الکترونی، خواص مغناطیسی و اپتیکی ترکیب تمام‌هویسلر Cr_2ScSb مورد مطالعه قرار می‌گیرد و همچنین این ترکیب از نظر خاصیت نیم‌فلزی مورد بررسی قرار می‌گیرد.

[1] Full-Heusler
[2] Half-Heusler
[3] Curie temperature
[4] Spintronic device
[5] Spin valves

این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد :
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

روش محاسبات

در این مقاله محاسبات با استفاده از بسته محاسباتی کوانتوم اسپرسو [۹] و کد PWscf انجام شده است. برای تابع تبادل-همبستگی تقریب گرادیان تعمیم یافته[6] (GGA) به کار برده شده است. شبه-پتانسیل‌های مورد استفاده فوق‌نرم هستند. انرژی قطع برای تابع‌موج ۶۰ ریدبرگ و انرژی قطع برای چگالی بار ۴۸۰ ریدبرگ در نظر گرفته شده است. تعداد نقاط k به صورت ۱۰×۱۰×۱۰ برای ساختن منطقه اول بریلوئن در نظر گرفته شده است.

نتایج و بحث

ابتدا باید ساختار پایدار برای ترکیب تمام‌هویسلر Cr_2ScSb را پیدا کنیم. به همین منظور دو ساختار معمول برای این ترکیب‌ها از نظر انرژی با هم مقایسه شد و ساختاری که انرژی کل کمتری داشت و در نتیجه پایدارتر بود به عنوان ساختار پایدار در نظر گرفته شد. این ساختار پایدار به گونه‌ای است که در آن اتم‌های Cr در $(0, 0, 0)$ و $(0.5, 0.5, 0.5)$، اتم Sc در $(0.25, 0.25, 0.25)$ و اتم Sb در $(0.75, 0.75, 0.75)$ قرار می‌گیرند. برای مشاهده مکان اتم‌ها، ساختار بلوری ترکیب Cr_2ScSb در شکل ۱ نشان داده شده است. جهت پیدا کردن حالت مغناطیسی پایدار، این ترکیب را در سه حالت غیرمغناطیس، فرومغناطیس و پادفرومغناطیس، از نظر انرژی با هم مقایسه کردیم. نتایج نشان داد که ترکیب Cr_2ScSb در حالت فرومغناطیس نسبت به حالت غیرمغناطیس بسیار پایدارتر است و نسبت به حالت پادفرومغناطیس به مقدار کمی پایدارتر است. بنابراین بقیه محاسبات برای ساختار پایدار و در حالت فرومغناطیس انجام شده است. ثابت شبکه و مدول حجمی برای ساختار پایدار ترکیب Cr_2ScSb در جدول ۱ ارائه شده است.

جدول ۱: ثابت شبکه تعادلی a_0، انرژی گاف نیم‌فلزی E_{HM} و مدول حجمی B_0.

	a_0(Å)	$E_{HM}(eV)$	$B_0(GPa)$
Cr_2ScSb	۶/۴۸	۰/۰۷	۹۱/۸

منحنی چگالی حالت‌های الکترونی کل در شکل ۲ رسم شده است. همان‌طور که دیده می‌شود در حالت اسپین بالا در انرژی فرمی هیچ حالت الکترونی وجود ندارد و در واقع یک گاف انرژی مشاهده می‌شود و رفتار فلزی دارد ولی در حالت اسپین پایین در انرژی فرمی چگالی حالت الکترونی وجود دارد و رفتاری شبیه نیم‌رساناها دارد. گاف نیم‌فلزی به صورت اختلاف انرژی بین انرژی فرمی و یکی از دو انتهای گاف انرژی که به انرژی فرمی نزدیک‌تر است تعریف می‌شود لذا این ترکیب دارای گاف نیم‌فلزی به اندازه ۰/۰۷ الکترون-ولت است که مقدار آن در جدول ۱ نیز ارائه شده است. در شکل ۳ نمودار ساختار نواری رسم شده است. در نمودار ساختار نواری در حالت‌های با اسپین بالا نوارهای انرژی به مقدار بسیار کمی انرژی فرمی را قطع کرده‌اند و در حالت‌های با اسپین پایین نیز در سطح فرمی گافی مشاهده نمی‌شود. بنابراین در نمودار ساختار نواری، گاف انرژی مشاهده نمی‌شود. با توجه به اینکه در منحنی چگالی حالت‌ها یک گاف نیم‌فلزی مشاهده می‌شود و در نمودار ساختار نواری، نوارهای انرژی اسپین بالا به مقدار بسیار کمی انرژی فرمی را قطع می‌کنند، می‌توان نتیجه گرفت که این ترکیب بسیار نزدیک به نیم‌فلز است و ممکن است تحت تنش خاصیت نیم‌فلزی پیدا کند.

محاسبه دمای کوری با استفاده از رابطه زیر انجام گرفته است [۱۰]:

$$T_c = \frac{\Delta E_{NM-FM}}{3k_B} \qquad (۱)$$

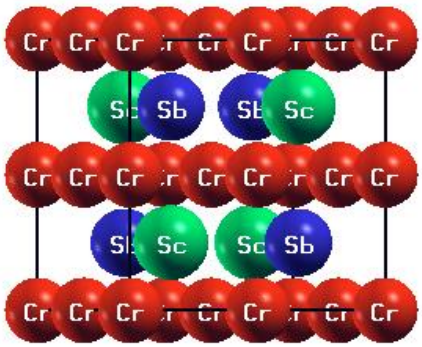
در این رابطه ΔE_{NM-FM} اختلاف انرژی بین حالت غیرمغناطیس و حالت فرومغناطیس است و k_B ثابت بولتزمن است. با استفاده از رابطه ۱، دمای کوری برای ترکیب Cr_2ScSb را حدود ۶۴۰ کلوین تخمین زده‌ایم. این دمای کوری که خیلی بالاتر از دمای اتاق است برای ترکیب Cr_2ScSb، یک نقطه قوت است و این ترکیب برای ساخت ابزار اسپینترونیک می‌تواند به کار برده شود.

این ترکیب دارای گشتاور مغناطیسی کل μ_B ۴/۰۰ می‌باشد که یک عدد صحیح است و بنابراین از قاعده اسلیتر-پائولینگ[7] $M_{tot} = (Z_{tot} - 24)\mu_B$ پیروی می‌کند [۱۱،۱۲]. در این رابطه Z_{tot} تعداد کل الکترون‌های ظرفیت و μ_B مگنتون بور است.

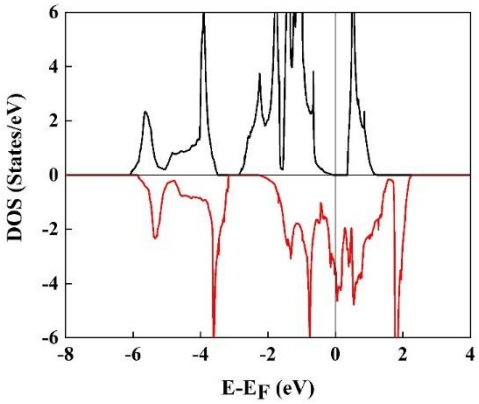
[6] Generalized Gradient Approximation

[7] Slater-Pauling rule

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



شکل ۱: ساختار بلوری ترکیب Cr_2ScSb.



شکل ۲: چگالی حالت‌های الکترونی کل برای ترکیب Cr_2ScSb. مقادیر منفی نشان دهنده حالات با اسپین پایین است.

برای بررسی خواص اپتیکی ترکیب Cr_2ScSb، تابع دی‌الکتریک مورد بررسی قرار می‌گیرد. تابع دی‌الکتریک $\varepsilon(\omega)$ دو بخش حقیقی[8] $\varepsilon_1(\omega)$ و موهومی[9] $\varepsilon_2(\omega)$ دارد. قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک، با استفاده از قسمت موهومی آن و روابط کرامرز-کرونیک به دست می‌آید [۱۳]

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + \varepsilon_2(\omega) \quad (۲)$$

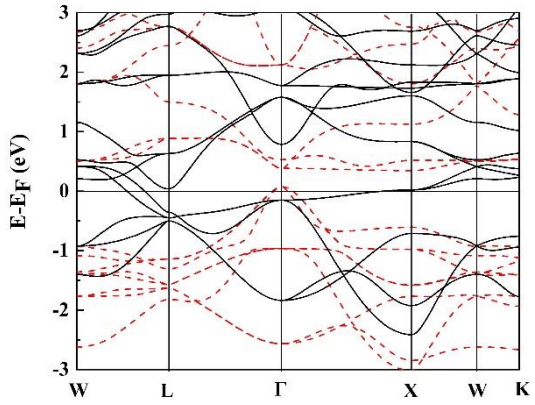
$$\varepsilon_1 = 1 + \frac{2}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{\acute{\omega}\varepsilon_2(\acute{\omega})d\acute{\omega}}{\acute{\omega}^2 - \omega^2} \quad (۳)$$

$$\varepsilon_2(\omega) = \frac{4\pi^2 e^2}{m^2\omega^2} \sum \int \langle i|M|j\rangle^2 f_i(1-f_i) \times \delta(E_f - E_i - \omega) d^3k \quad (٤)$$

قسمت حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک در شکل ٤ رسم شده است همچنین ضریب شکست[10] $n(\omega)$ و ضریب خاموشی[11] $k(\omega)$ برای ترکیب Cr_2ScSb در شکل ۵ رسم شده است. روابط ضریب شکست و ضریب خاموشی به صورت زیر هستند:

$$n(\omega) = \left[\frac{\sqrt{\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)} + \varepsilon_1(\omega)}{2}\right]^{\frac{1}{2}} \quad (۵)$$

$$k(\omega) = \left[\frac{\sqrt{\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)} - \varepsilon_1(\omega)}{2}\right]^{\frac{1}{2}} \quad (٦)$$



شکل ۳: نمودار ساختار نواری برای ترکیب Cr_2ScSb. خط‌چین قرمز نشان دهنده اسپین بالا و خط مشکی نشان دهنده اسپین پایین است.

برای محاسبه خواص اپتیکی، محاسبات غیرمغناطیسی انجام شده است. همان‌طور که می‌دانیم ضریب شکست جذر قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک است و بنابراین رفتاری شبیه به قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک دارد که این شباهت از مقایسه شکل ٤ و ۵ نیز پیداست. رفتار ضریب خاموشی نیز مشابه قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک است.

در منحنی ضریب خاموشی یک قله در انرژی ۰/۵ الکترون‌ولت وجود دارد که نشان دهنده جذب بالا در این انرژی است. در شکل ٤ مشاهده می‌شود که در یک محدوده‌ای از انرژی، قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک منفی می‌شود، این می‌تواند نشان دهنده جذب بالا در این محدوده از انرژی باشد. در نتیجه این ترکیب می‌تواند یک جاذب نسبتا خوبی برای امواج باشد. در منحنی قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک قله‌های ریز و درشتی مشاهده می‌شود که نشان دهنده گذارهای درون‌نواری و بین‌نواری است. قله بلندی که در ابتدای این منحنی است نشان دهنده یک گذار بین‌نواری است.

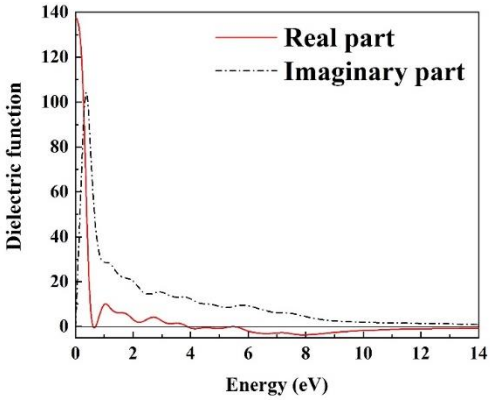
[8] Real part

[9] Imaginary part

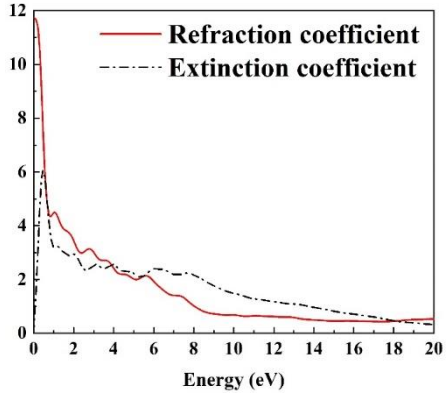
[10] Refraction coefficient

[11] Extinction coefficient

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



شکل ٤: قسمت حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک برحسب انرژی.



شکل ٥: ضریب شکست و ضریب خاموشی برحسب انرژی برای ترکیب تمام-هویسلر Cr_2ScSb.

نتیجه‌گیری

با استفاده از نظریه تابعی چگالی به بررسی خواص ساختاری، مغناطیسی و اپتیکی ترکیب تمام‌هویسلر Cr_2ScSb پرداختیم. نتایج حاصله نشان داد که این ترکیب در ثابت شبکه تعادلی، یک گاف نیم‌فلزی ۰/۰۷ الکترون‌ولتی دارد. Cr_2ScSb دارای قطبش اسپینی صددرصد در سطح فرمی است. نمودار منحنی چگالی حالت‌های الکترونی به وضوح گویای این مطلب است. در ساختار نواری گاف انرژی مشاهده نشد. این ترکیب دارای گشتاور مغناطیسی کل صحیحی می‌باشد و از قانون اسلیتر–پائولینگ پیروی می‌کند. دمای کوری Cr_2ScSb، ٦٤٠ کلوین است. با توجه به نتایج محاسبات می‌توان به این نتیجه رسید که ترکیب تمام‌هویسلر Cr_2ScSb می‌تواند گزینه مناسبی برای ساخت ابزار اسپینترونیک باشد. نتایج بررسی خواص اپتیکی نشان دهنده این مطلب هستند که این ترکیب در محدوده‌هایی از انرژی می‌تواند جاذب امواج الکترومغناطیسی باشد.

مرجع‌ها

[1] N. Kervan, S. Kervan, Half-metallic properties in the Fe2TiP full-Heuslercompound, *Intermetallics* **37** (2013) 88-91.
[2] O. Canko, F. Ta¸skin, M. Ati¸s, N. Kervan, S. Kervan, Magnetism and halfmetallicity in the Fe2ZrP Heusler alloy, *J. Supercond. Nov. Magn.* **29** (2016) 1-6.
[3] X.D. Xu, Z.X. Chen et al. Microstructure, magnetic and transport properties of a Mn2CoAl Heusler compound, *Acta Materialia* **176** (2019) 33-42.
[4] A. Birsan, V. Kuncser, First principle investigations of the structural, electronic and magnetic properties of predicted new zirconium based full-Heusler compounds, Zr2MnZ (Z=Al, Ga and In), *J. Mang. Mang. Mat.* **406** (2016) 282–288.
[5] I. Asfour, H. Rached, S. Benalia, D. Rached, Investigation of electronic structure, magnetic properties and thermal properties of the new half-metallic ferromagnetic full-Heusler alloys Cr2GdSi1-xGex: an ab-initio study, *J. Alloys. Compd.* **676** (2016) 440– 451.
[6] F. Bagverdi, F. Ahmadian, First principles study of half-metallic ferromagnetism of the full-Heusler compounds RbSrX2 (X = C, N, and O), *J. Supercond. Nov. Magn.* **28** (2015) 2773–2781.
[7] J. Jalilian, Comment on 'Study of electronic, magnetic, optical and elastic properties of Cu2MnAl a gapless full Heusler compound, *J. Alloys. Compd.* **626** (2015) 277–279.
[8] M. Moradi, N. Taheri, M. Rostami, Structural, electronic, magnetic and vibrational properties of half-Heusler NaZrZ (Z = P, As, Sb) compounds, *Physics Letters A* **382** (2018) 3004-3011.
[9] M. Safavi, M. Moradi, M. Rostami, Structural, Electronic and Magnetic Properties of NaKZ (Z = N, P, As, and Sb) Half-Heusler Compounds: a First-Principles study, *J. Superconduct. Nov. Magn.* **30** (2016) 989-997.
[10] K. Sato, et al. Exchange interactions in diluted magnetic semiconductors, *J. Phys. Condens. Matter* **16** (2004) S5491–S5497.
[11] J. C. Slater, The Ferromagnetism of Nickel. II. Temperature Effects, *Phys. Rev.* **49** (1936) 931-937.
[12] L. Pauling, The Nature of the Interatomic Forces in Metals, *Phys. Rev.* **54** (1938) 899-904.
[13] A. Delin, O. Eriksson, R. Ahuja, B. Johansson, M.S.S. Brooks, T. Gasche, S. Auluck, and J.M. Wills, Optical properties of the group-IVB refractory metal compounds, *Phys. Rev. B* **54** (1996) 1673-1681.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بررسی دامنه موج عقبه تولید شده در انتشار پالس قوی لیزر با گاز

جعفری، محمد جعفر؛ خلیل زاده ، الناز*؛ رضائی، سمیه؛ دهقانی، زهره

سازمان انرژی اتمی، پژوهشگاه علوم و فنون هسته ای، پژوهشکده پلاسما و گداخت هسته ای

چکیده

در این مقاله، شکل‌گیری موج عقبه در برهمکنش پالس قوی لیزر با گاز، با استفاده از نتایج کد شبیه سازی PIC به همراه یونیزاسیون، بررسی شده و با حالتی که پالس لیزر در پلاسمای پیش فرض منتشر می‌شود، مقایسه گردیده است. نتایج نشان می دهند که بر خلاف کارهای قبلی که به دلیل ایجاد نوسانات چگالی هنگام یونیزاسیون، به راه اندازی قوی ناپایداری رامان رو به جلو و به دنبال آن به مدوله شدن قوی پالس لیزر اشاره کرده بودند، اندازه میدان عقبه تولیدی در حالت انتشار پالس لیزر در گاز نسبت به پلاسما، به شدت به شیب پالس لیزر وابسته می‌باشد. علاوه برآن برای پالس‌هایی با شیب تند (با زمان خیزش ۳۰ فمتو ثانیه)، این دو مقدار تقریبا یکسان هستند. این در حالی است که برای پالس‌هایی با شیب ملایم‌تر(با زمان خیزش۴۵ فمتو ثانیه)، میدان عقبه در پلاسما دارای مقادیر بزرگتری بوده و برای پالس های با شیب کمتر از آن (با زمان خیزش۶۰ فمتو ثانیه)، دامنه میدان عقبه در گاز بزرگتر می‌باشد.

Investigation of wake-field generation in propagation of intense laser pulse in gas

M. J. Jafari, E.KHalilzadeh*, S. Rezaei, Z.Dehghany

Plasma and Fusion Research School, Nuclear Science and Technology Research Institute, AEOI, P.O.BOX: 14395-836, Tehran, Iran

Abstract

In this work, first the formation of wake field during the interaction of intense laser pulse with a gas medium has been investigated by using PIC simulation code, which also includes the ionization process and then the results have been compared with the case of pre-formed plasma medium. Previous works carried out in this area, have indicated the strong launch of forward Raman's instability in result of plasma density fluctuations during ionization and the subsequent strong laser pulse modulation. Wherein, our results show that, the amplitude of the laser wake field in result of laser propagation in a gas in comparison with a plasma medium strongly depends on the laser pulse rise time. According to our simulation results, by increasing the laser pulse slope, the amplitude of the wake field formation has been changed. So that, by applying a lower rise time of laser pulse(i.e steep slope), the amplitude of wake electric field is quite the same in both gas and plasma mediums, while by enhancing the laser rise time(i.e soft slope), the wake electric field has larger values in the plasma in comparison with the gas medium. Further increase of laser rise time leads to a larger wake electric field in a gas than a plasma environment.)

PACS No. 52

مقدمه

پیشرفت های زیادی که در یک دهه گذشته، در زمینه ساخت پالس‌های لیزری فمتو ثانیه صورت گرفته، باعث شده انتشار این پالس‌ها در گازها، کاربردهای مختلفی در بسیاری از حوزه ها از جمله شتابدهنده‌های پلاسمایی داشته باشد. یکی از چندین روشی که برای شتابدهی به ذرات استفاده می‌شود، شتابدهی با استفاده از میدان عقبه لیزر[1] در اثرخود مدوله شدن پالس لیزر (SM-LWFA[2]) است که در آن، پالس لیزر طولانی (در مقایسه با طول

[1] Wake field

[2] Self-modulated laser wake field accelerator

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد

http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

موج پلاسما) مدوله شده و موج پلاسما با دامنه بزرگ (میدان عقبه) و با سرعت فاز نزدیک به سرعت نور تولید می‌کند [۱]. این پالس می‌تواند برای سرعت دادن به ذرات باردار تا انرژی‌های بالا مورد استفاده قرار گیرد. با انتشار پالس لیزر در گاز، میدان‌های پالس می‌توانند از طریق تونل‌زنی کوانتومی الکترون‌ها، اتم‌های خنثی را یونیزه کنند، که این امر، می تواند دینامیک میدان عقبه پلاسما را تا حدودی تغییر دهد.

ویژگی میدان‌های عقبه، که توسط پالس‌های لیزر در پلاسماهای یونیزه شده با میدان لیزر، تولید شده‌اند، به صورت تحلیلی و عددی در کارهای قبلی مورد بررسی قرار گرفته است[۲-۵]. در یکی از این کارها، نشان داده اند که هنگام انتشار پالس لیزر در گاز، به دلیل یونیزاسیون، خاصیت دی الکتریک محیط ثابت نبوده و به زمان وابسته هست [۲]. در کار دیگری با کمک مدل‌های تحلیلی و شبیه‌سازی عددی یک بعدی، نتیجه گرفتند که وقتی لیزر محیط گازی را یونیزه می‌کند، نیروی پاندرماتیوو میدان عقبه طولی در این محیط، بسیار قوی‌تر از نیروهای موجود در پلاسمای از پیش آماده شده می‌باشند [۳]. همچنین تحریک امواج پلاسما به دلیل نیروی پاندرموتیو ناشی از وابستگی به زمان خاصیت دی الکتریکی محیط و نیروی ناشی از ایجاد شیب تند در شدت پالس را مورد بررسی قرار گرفته است [۴]. در تحقیقی دیگرنشان داده شد که با در نظر گرفتن یونیزاسیون، دامنه میدان عقبه در حدود ۵۰٪ بالاتراز زمانی که پلاسما در نظر گرفته می شود بدست می‌آید [۵].

در این مقاله، سعی شده است با استفاده از نتایج کد شبیه سازی PIC که شامل یونیزاسیون میدانی نیز می‌شود، میدان عقبه تولید شده هنگام انتشار پالس لیزر درون هیدروژن گازی بررسی و با حالت انتشار پالس لیزر در پلاسمای زیرچگال مقایسه گردد.

تئوری مساله

امروزه از پالس‌های لیزری قوی برای کاربردهای متنوع انتشار پالس لیزر در گاز، استفاده می‌شود. به طور دقیق، سازوکار یونیزاسیون، به شدت وابسته است. سازوکار واقعی یونیزاسیون با پارامتر γ که پارامتر کلدیش نامیده می‌شود، تعیین می‌گردد [۶]:

$$\gamma = \frac{\omega_L \sqrt{2I_p}}{E}, \qquad (۱)$$

که در آن I_p ، ω_L و E به ترتیب، پتانسیل یونیزاسیون اتمی، فرکانس و دامنه میدان لیزر می‌باشند. هنگامی که مقدار پارامتر کلدیش بزرگ باشد، $\gamma >> 1$، سازوکار یونیزاسیونی که بر فرآیند چیره است، یونیزاسیون چند فوتونی است، در حالی که، برای $\gamma << 1$، یونیزاسیون میدان اپتیکی (OFI) می‌باشد. این یونیزاسیون میدان اپتیکی می‌تواند در دو سازوکار مختلف یونیزاسیون حذف سد (BSI) و یونیزاسیون تونل زنی (TI) رخ دهد [۶]. در توضیح این نوع یونیزاسیون باید گفت الکترون در داخل چاه پتانسیل اتمی غیر اختلالی و بر روی سطح انرژی I_p قرار می‌گیرد. با توجه به اینکه فرکانس گذار اتمی، بسیار کمتر از فرکانس لیزر است، میدان الکتریکی لیزر، به طور معمول ثابت می‌ماند. میدان لیزر اعمالی، پتانسیل اتمی چاه را از شکل طبیعی خارج کرده و سد پتانسیلی که الکترون در اتم یا یون می‌بیند، را پایین می‌آورد. در نتیجه الکترون از ساختار اتمی خارج می‌شود. وقتی میدان به اندازه کافی قوی باشد، سد پتانسیل، زیر سطح انرژی الکترون قرار گرفته و الکترون را آزاد می‌کند. در شرایطی که افت سد پتانسیل کولنی امکان پذیر نباشد، برای آزاد کردن الکترون، احتمال تونل‌زنی کوانتومی وجود دارد. این فرآیند تونل‌زنی یونیزاسیون نامیده می‌شود. تاکنون بررسی‌های مختلفی برای محاسبه احتمال یونیزاسیون انجام شده است. اما تئوری که به صورت تجربی و به صورت گسترده مورد بررسی قرار گرفته، کار آموسوسف، دلون و کرینف، که به عنوان نظریه ADK شناخته می‌شوند [۷]. با در نظر گرفتن میدان خارجی به فرم

$$E = E_0 \cos(\omega t) \qquad (۳)$$

احتمال تونل‌زنی الکترونی که در پتانسیل کولنی مجموعه‌ای از اتم / یون، با مدل ADK داده می‌شود، به شرح زیر است:

$$W = C^2_{n^*l} f(l,m) I_p \left(\frac{3E}{\pi (2I_p)^{3/2}}\right)^{1/2} \left[\frac{2}{E}(2I_p)^{3/2}\right]^{2n^*-|m|-1} \exp\left(-\frac{2}{3E}(2I_p)^{3/2}\right)$$

$$f(l,m) = \frac{(2l+1)(l+|m|)!}{2^{|m|}(|m|)!(l-|m|)!} \qquad (۴)$$

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

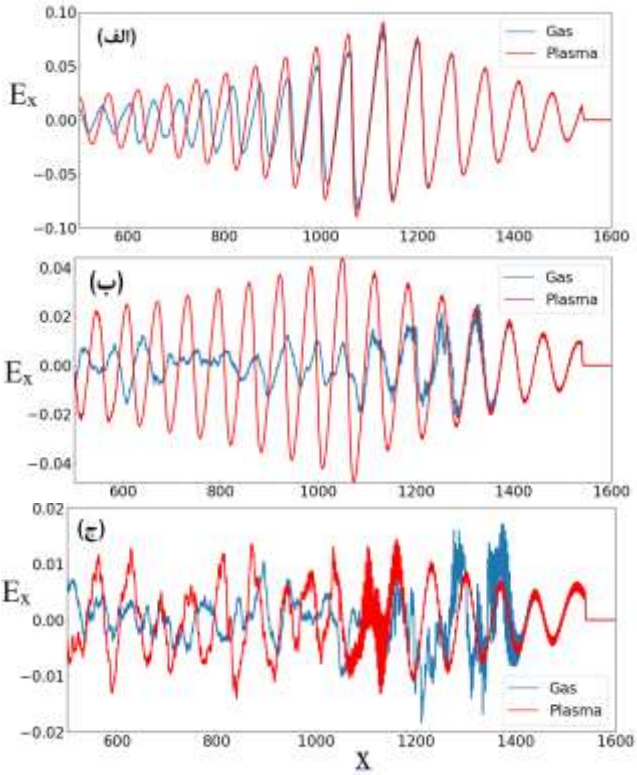
$$C_{n^*l}=\left(\frac{2e}{n^*}\right)^{n^*}\frac{1}{(2\pi n^*)^{1/2}}$$

در این روابط، n^* ، عدد کوانتومی اصلی موثر است و l ،m و e به ترتیب عددهای کوانتومی مداری، مغناطیسی و عدد اویلر می‌باشند.

شبیه سازی مساله و نتایج آن :

برای جلوگیری از تکرار شدن پارامترهای شبیه‌سازی در تمام این بخش، این پارامترها قبل از ارائه نتایج شبیه‌سازی بیان می‌شوند. شبیه‌سازی‌ها با استفاده از کد شبیه‌سازی اسمایلی[۳] [λ] که تک بعدی در مکان و سه بعدی در سرعت می‌باشد، انجام شده است. پالس لیزر دارای طول موج $\lambda=1\mu m$ و دامنه میدان الکتریکی بی‌بعد شده $a_0=1$ است که $a_0^2 \propto I\lambda_\mu^2/1.37\times10^{18}$ می‌باشد. برای تمامی نتایج شبیه‌سازی، پلاسما با پروفایل اولیه پله‌ای و چگالی $n=0.01\ n_{cr}$ در محدوده $x=[200-1400]\mu m$ در نظرگرفته شده است. برای داشتن وضوح و دقت قابل قبول در شبیه‌سازی، در هر طول موج لیزر، ۲۷۰۰۰ سلول شبیه‌سازی که داخل هرکدام ۴۸ ابر ذره وجود دارد قرار دارد. طول مکانی هر سلول شبیه‌سازی در حدود $DX/\lambda_D\approx0.01$ می‌باشد. در تمام این کار، مقادیر، موقعیت (x) و میدان الکتریکی طولی (E_x) به ترتیب به λ و $\omega_0 m_e c/q_e$ نرمالیزه شده اند (q_e و ω_0 به ترتیب، بار الکترونی و فرکانس لیزر می‌باشد).

برای نشان دادن چگونگی تشکیل میدان عقبه، سه پالس با طول ۳۰۰ فمتو ثانیه و زمان‌های خیزش متفاوت انتخاب می‌گردند. نتایج شبیه سازی در شکل ۱ به ترتیب برای پالس های (الف) (۳۰، ۲۴۰، ۳۰) فمتوثانیه، (ب) (۴۵، ۲۱۰، ۴۵) فمتو ثانیه، و (ج)(۶۰، ۱۸۰، ۶۰) فمتو ثانیه در زمان ۸۰۰ فمتو ثانیه نشان داده شده است. این شکل ها، میدان عقبه تولید شده در گاز و پلاسما را نشان می‌دهند. همانطور که مشاهده می‌شود، اگرچه طول پالس لیزر (۳۰۰ فمتو ثانیه) و دیگر پارامترهای پلاسما و پالس لیزر برای هر سه حالت یکسان است، اما ویژگی‌های میدان‌های عقبه تولیدی در گاز و پلاسما متفاوت



شکل ۱: میدان عقبه تولید شده در گاز و پلاسما برای پالس های (الف) (۳۰، ۲۴۰، ۳۰) فمتوثانیه، (ب) (۴۵، ۲۱۰، ۴۵) فمتو ثانیه، و (ج)(۶۰، ۱۸۰، ۶۰) فمتو ثانیه در زمان ۸۰۰ فمتو ثانیه

می‌باشند. در توصیف نتایج بدست آمده، باید به این نکته نیز توجه داشت که زمانی که مسئله انتشار پالس لیزر، به صورت ۱ بعدی در نظرگرفته می‌شود و از پدیده‌هایی چون خودتمرکزی و رشته رشته شدن صرف نظر می‌گردد، ناپایداری رامان رو به جلو نقش اساسی در خود مدوله شدن پالس لیزر و تشکیل موج پلاسمایی با دامنه بلند دارد [۴و ۸]. از طرفی، ناپایداری‌های پارامتری از جمله رامان، معمولاً در اثر نوسانات در پوش لیزر و چگالی ایجاد می‌گردند [۲].دو سازوکار مختلف، که در آن‌ها یونیزاسیون باعث نوسان چگالی می‌شود، نیز وجود دارد. سازوکار اول تولید نیروی پاندرموتیو به دلیل وابسته به زمان بودن خاصیت دی الکتریک محیط (به هنگام یونیزاسیون به دلیل تغییر چگالی، خاصیت دی الکتریک محیط ثابت نمی باشد) و دومی، نیروی ناشی از تغییرات شیب ناشی از یونیزاسیون است. همانطور که در شکل ۱ نشان داده شده است، برای پالس لیزر با خیزش ۳۰ فمتو ثانیه، رفتار پلاسما و گاز تقریباً یکسان هستند. این بدان معنا است که یونیزاسیون نقش

[۳] Smilei

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مهمی در مدولاسیون پالس لیزر در این زمان خیزش بازی نمی‌کند و نیروی پاندرماتیو ناشی از گرادیان شدت عامل اصلی در راه‌اندازی ناپایداری رامان و تولید میدان عقبه است. به عبارت دیگر با توجه به افزایش سریع شدت پالس لیزر به دلیل زمان خیزش کم، نوسانات چگالی شدیدی ایجاد نمی‌شود که تاثیر شدیدی در تولید تابش رامان رو به جلو داشته باشد. با این حال، با افزایش زمان خیزش پالس لیزر تا ۴۵ فمتو ثانیه، نتایج برای دامنه میدان عقبه تولیدی کاملاً متفاوت بوده و در دو حالت گاز و پلاسما نتایج کاملا متفاوتی مشاهده می‌شود. همانطور که در شکل ۱(ب) آورده شده است، در این حالت بیشینه میدان عقبه تولیدی، در حالت پلاسما بیشتر می باشد. نکته جالب توجه، شکست سریع موج پلاسمایی است که در شکل کاملا مشهود می‌باشد و می‌تواند به دلیل کاهش سرعت فاز باشد. در ادامه در شکل۱(ج)، نتایج شبیه‌سازی برای پالس لیزر با زمان خیزش ۶۰ فمتو ثانیه آورده شده است. با توجه به شکل (ج)، رفتارهای میدان‌ها برای حالت گاز و پلاسما متفاوت می‌باشند. بیشینه میدان عقبه تولیدی، در حالت انتشار پالس لیزر در گاز، بزرگتر از بیشینه میدان عقبه تولیدی در حالت انتشار پالس، در پلاسما است. با توجه به ملاحظات فوق، می‌توان نتیجه گرفت که نمی‌توان در مورد مقدار میدان عقبه تولیدی در دو حالت انتشار پالس لیزر در گاز و پلاسما نتیجه یکسان گرفت. بر خلاف کارهای قبلی انجام شده در این زمینه[۲-۵]، که به دلیل وجود نوسانات چگالی، راه اندازی قویتر ناپایداری رامان و مدوله شدن قویتر پالس لیزر و تولید میدان عقبه قویتر را پیش بینی کرده بودند، مقایسه بین این دو به شدت به شکل پالس لیزر و میزان شیب آن بستگی دارد.

نتیجه‌گیری

در این مقاله، میدان عقبه تولیدی، در زمان انتشار پالس قوی لیزر در گاز با کمک کد شبیه سازی PIC که شامل یونیزاسیون میدانی نیز می‌شود، بررسی شده است. سعی شده است با حالتی که پالس لیزر در پلاسما منتشر می شود مقایسه شده و دلایل فیزیکی و سازوکارهای رخ داده شده توضیح داده شود. در این بررسی، نتایج نشان داد که نمی‌توان نتیجه‌گیری یکسانی در مورد بزرگی میدان عقبه تولیدی در گاز نسبت به پلاسما بدست آورد. از آنجایی که یونیزاسیون باعث نوسانات چگالی شده و این نوسانات نیز باعث ایجاد نویز برای راه اندازی پراکندگی رامان رو به جلو می‌شود، انتظار می‌رود با در نظر گرفتن یونیزاسیون، تولید میدان عقبه نسبت به پلاسمای پیش فرض، قوی‌تر باشد. در حالی‌که نتایج شبیه‌سازی نشان می‌دهد برای پالس‌های با شیب‌های مختلف، نتایج متفاوتی بدست می‌آید. برای شیب های تند مانند ۳۰ فمتو ثانیه، میدان عقبه تولید شده در دو حالت گاز و پلاسما تقریبا یکسان است که نشاندهنده این است که به دلیل افزایش سریع دامنه میدان لیزر و شدت پالس، نوسانات چگالی اثر چندانی در فیزیک مساله ندارد. در حالی که با کاهش شیب و برای پالس با زمان خیزش ۴۵ فمتو ثانیه، میدان عقبه برای حالت پلاسما قویتر می‌باشد چراکه به دلیل کاهش سرعت فاز، موج تولید شده سریعتر می‌شکند. از طرفی برای پالس با زمان خیزش ۶۰ فمتو ثانیه، دامنه میدان عقبه برای حالت انتشار پالس در گاز بزرگتر از میدان عقبه تولیدی برای حالت انتشار در پلاسما است.

مرجع‌ها

[1] C. I. Moore, A. Ting, K. Krushelnick, E. Esarey, R. F. Hubbard, B. Hafizi, H. R. Burris, C. Manka, and P. Sprangle, Phys. Rev. Lett. 79, 3909 (1997).

[2] W. B. Mori and T. Katsouleas, Phys. Rev. Lett. 69, 3495 (1992).

[3] N. E. Andreev, M. E. Veisman, M. G. Cadjan, and M. V. Chegotov, Plasma Phys. Rep. 26, 947–959 (2000).

[4] D. F. Gordon, B. Hafizi, P. Sprangle, R. F. Hubbard, J. R. Pen ano3 and W. B. Mori, Phy. Rev. E, 64, 046404 (2001).

[5] Prabhat Kumar, Kwangmin Yu, Rafal Zgadzaj, L_ıgia Diana Amorim, M. C. Downer, James Welch, Phys. Plasmas 26, 083106 (2019).

[6] L.V. Keldysh, Eksp. Teor. Fiz. 47, 1945 (1964).

[7] M. V. Ammosov, N. 8. Delone, and V. P. Kraino, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 91, 2008 (1986).

[8] J. Yazdanpanah, *Plasma Phys. Control. Fusion* 61, 085021 (2019).

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بررسی محدود کنندگی نوری و پاسخ اپتیکی غیرخطی محلول کربن نقطه‌ای تهیه شده از عصاره گل رز زرد

محسن ، بالایی[۱] ؛روح‌اله، کریم‌زاده[۱]*؛فاطمه ، بالایی[۲]

[۱]دانشکده فیزیک دانشگاه شهید بهشتی، تهران

[۲]گروه زیست‌شناسی، دانشکده علوم‌پایه، دانشگاه رازی، کرمانشاه

چکیده

در این تحقیق ابتدا از عصاره‌ی گل رز زرد، محلول‌های حاوی کربن نقطه‌ای به روش هیدروترمال سنتز شده است و سپس پاسخ محدود کنندگی نوری آن با استفاده از لیزر پیوسته با طول موج های ۴۰۵ و ۵۳۲ نانومتر اندازه گیری شده است. مشاهده می شود که محلول تهیه شده پاسخ محدود کنندگی قابل ملاحظه ای از خود نشان داده است. برای بررسی ساز و کار های موثر بر محدود کنندگی نوری، ضریب جذب و ضریب شکست غیرخطی نمونه به روش جاروب z (z-scan) و همچنین با استفاده از تکنیک خود مدولگی فازی فضایی مورد بررسی قرار گرفته است. مشاهده شد که نمونه پاسخ جذب غیر خطی در این محدوده شدت لیزر ندارد. همچنین، نتایج بدست آمده مشخص کرد که ضریب شکست غیر خطی در پاسخ محدود کنندگی لیزری نقش موثری دارد. با مقایسه نتایج بدست آمده در دو طول موج ، مشاهده می شود که پاسخ محدود کنندگی نوری در طول موج ۴۰۵ نانومتر نسبت به طول موج ۵۳۲ نانومتر بزرگتر است.

واژه های کلیدی:*کربن نقطه‌ای، محدود کنندگی نوری، ضریب شکست غیر خطی، ضریب جذب غیر خطی*

Investigation of optical limiting and nonlinear optical response of carbon dot solution prepared from yellow rose extract

Balaei, Mohsen[1]; Karimzadeh, Rouhollah[1*]; Fatemeh Balaei[2]

[1]Department of Physics, Shaid Beheshti University, Tehran

[2]Department of Biology, Faculty of Science, Razi University, Kermanshah

Abstract

In this research, at first, solution containing carbon dot has been synthesized by the hydrothermal method and then its optical limiting response has been measured by CW laser at wavelengths of 405 and 532 nm. Results illustrate that the sample shows considerable optical limiting response. To understand the mechanisms underlying these results, we use the Z-scan and spatial self-phase modulation techniques to measure the nonlinear absorption and refractive index. It is observed that the sample does not have the nonlinear absorption response. Also, these findings highlight the significant role of the nonlinear refractive index effect in the optical limiting response. By comparing the obtained results in two wavelengths, it is observed that the optical limiting response at wavelength of 405 nm is larger than its response at wavelength of 532 nm

***Keywords**:carbon dot, optical limiting, nonlinear refractive index, nonlinear absorption coefficient*

PACS No.

مقدمه

گیاهان و رنگ دانه‌ها منبع غنی از کربن نقطه‌ای هستند. با توجه به ابعاد کوچک کربن های نقطه‌ای و حضور اتم‌های کربن، می‌توان انتظار داشت که عصاره گیاهان و رنگ دانه‌ها میتوانند خواص نوری غیرخطی داشته باشند. این نکته میتواند اهمیت بررسی خواص اپتیکی و غیرخطی این نوع مواد را نشان دهد. از جمله مزیت‌های

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

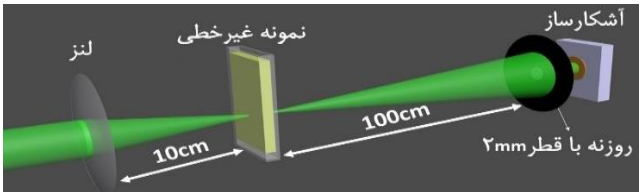
استفاده از این مواد می‌توان به ارزان بودن، در دسترس بودن و غیر سمی بودن آنها اشاره کرد. کربن های نقطه‌ای در واقع ذرات شبه کروی با ابعاد ۱ تا ۱۰نانومتر از اتم‌های کربن هستند. در مطالعات پیشین روش‌هایی برای سنتز و استخراج کربن های نقطه‌ای موجود در گل‌ها و گیاهان استفاده شده است[۱و۲]. در این تحقیق برای سنتز کربن نقطه‌ای موجود در گل رز از روش هیدروترمال استفاده شده است. با توجه به مطالعات انجام شده، در این کار برای اولین بار خواص غیرخطی کربن نقطه ای ساخته شده از گل رز گزارش شده است.

محدود کنندگی نوری یک پدیده غیرخطی است که به دلیل جذب غیرخطی یا شکست غیرخطی مشاهده می‌شود. دراین پدیده میزان عبور نور از ماده غیرخطی با افزایش شدت باریکه تابشی به آرامی از حالت خطی به یک مقدار ثابت می‌رسد که به این شدت، شدت آستانه محدود کنندگی نوری گفته می شود. برای شدت‌های تابشی بزرگتر از شدت آستانه، مقدار شدت خروجی از ماده غیرخطی ثابت باقی خواهد ماند. از جمله کاربردهای این پدیده می توان به محافظت از آسیب وسایل اپتیکی حساس مانند چشم و حسگرهای نوری اشاره کرد[۳].

مواد و چیدمان تجربی

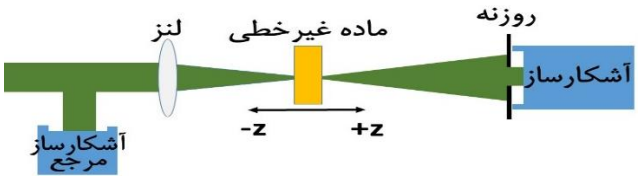
روش هیدروترمال یک روش سنتز نانوذرات است که بعد از اختلاط مواد و عناصر به منظور سنتز واکنش‌دهنده، از دما و فشار زیاد برای انجام واکنش‌های لازم در سنتز نانو مواد استفاده می‌شود. در این روش کنترل دما و چگونگی گرمارسانی به واکنش‌دهنده‌ها نقش بسیار مهمی در ابعاد و توزیع سایز نانوذرات دارد[٤].

در این تحقیق از روش جاروبz [٥] و همچنین روش خودمدولگی فازی فضایی[٦] برای اندازه گیری ضریب شکست و ضریب جذب غیرخطی استفاده شده است. برای این منظور از باریکه لیزری گاوسی با قطر باریکه ۱میلی‌متر استفاده می‌شود. در این آزمایشات از لیزرهای پیوسته با نام تجاری CNI-MLL-III در طول موج‌های ٤۰۵ و ۵۳۲ نانومتراستفاده شد. توان لیزر درآزمایش جاروبz ۱۰میلی‌وات بود. نور لیزر توسط یک عدسی با فاصله کانونی ۱۰سانتی‌متر بر روی نمونه تابانده شد. برای اندازه گیری محدود کنندگی نوری، نمونه در کانون عدسی قرار داده شد و سپس توان عبوری از نمونه توسط آشکارساز برای توان های ورودی مختلف اندازه گیری شد (شکل ۱).



شکل۱: چیدمان آزمایش محدود کنندگی نوری.

در چیدمان جاروبz، نمونه در راستای محور اپتیکی(محورz) حول کانون عدسی جابجا می‌شود و مقدار توان رسیده به آشکار ساز ثبت می‌شود همچنین از یک آشکار ساز مرجع برای اندازه گیری مقدار توان باریکه تابیده شده به ماده نیز استفاده می شود بنابراین مقدار توان عبوری(T) بر حسب مکان ماده نسبت به نقطه کانون عدسی از آزمایش اندازه گیری می شود. برای اینکه چیدمان جاروب z برای ضریب شکست غیرخطی حساس باشد، از یک روزنه قبل از آشکارساز استفاده می شود (شکل۲). به عبارتی از چیدمان جاروب z باز (بدون روزنه) برای اندازه گیری ضریب جذب غیرخطی واز چیدمان جاروب z بسته (با حضور روزنه) برای اندازه گیری ضریب شکست غیرخطی استفاده می شود.

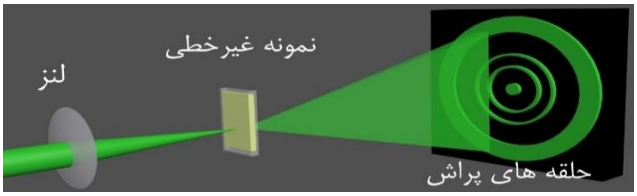


شکل۲: چیدمان تجربی آزمایش جاروب z.

در شکل۳ چیدمان تجربی مربوط به آزمایش خود مدولگی فازی فضایی نشان داده شده است. در این آزمایش ابتدا نور لیزر به وسیله عدسی کانونی می‌شود، سپس نمونه غیرخطی در کانون قرار داده می‌شود و پس از عبور نور از درون ماده غیرخطی به دلیل شیفت فازی در اثر ضریب شکست غیر خطی حلقه های پراش تشکیل می شود که بر روی صفحه اندازه گیری قابل مشاهده است[۵]. در محدوده شدتی که توسط لیزر تولید می شود تغییری در ماده ایجاد نمی شود و ماده تخریب نمی شود. همچنین در تمام موارد آزمایشها جندین بار تکرار شده است و نتایج یکسان بدست امده است. برای اندازه گیری ضریب شکست‌غیرخطی لازم است تعداد حلقه های

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

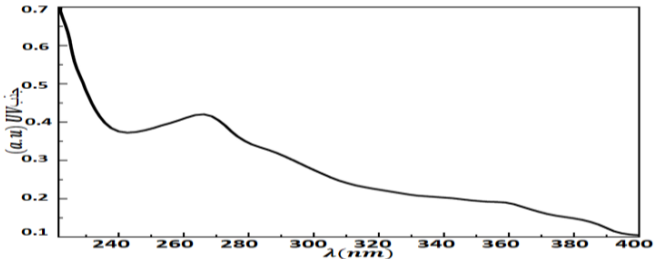
ظاهر شده بر روی پرده(N) و شدت نور تابشی به نمونه(I) مشخص باشند.



شکل۳: چیدمان تجربی آزمایش خود مدولگی فازی فضایی

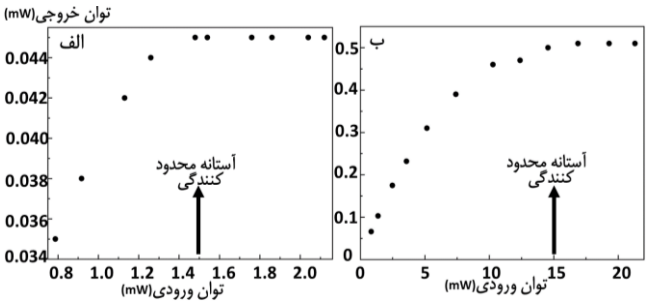
نتایج تجربی و بحث

در ابتدا سنتز کربن نقطه‌ای به روش هیدروترمال در حلال آب صورت گرفت. به این منظور ابتدا گلبرگ‌های گل رز زرد به مدت ۳۰ دقیقه در کوره گرمایی در دمای ۶۰ درجه سانتیگراد گرما دهی شد، سپس ۳ گرم از گلبرگ‌های خشک شده به ۱۰۰ میلی لیتر آب مقطر افزوده شد ومحلول حاصل در ظرف اتوکلاو در دمای ۲۰۰ درجه سانتیگراد به مدت ۲ ساعت قرار داده شد. پس از سرد شدن به منظور جدا کردن گلبرگ‌ها، محلول یک بار از کاغذ صافی عبور داده شد. طیف UV-Vis محلول‌های سنتز شده که در شکل٤ نشان داده شده است با گزارشات قبلی تطابق داشت[۲].



شکل٤: طیف جذبی گل رز زرد.

با استفاده از چیدمان تجربی پاسخ محدود کنندگی نوری نمونه اندازه گیری شد. همانطور که در شکل۵ مشاهده می شود پاسخ محدود کنندگی نوری نمونه در هر دو طول موج قابل توجه است . با استفاده از نمودارهای بدست آمده می توان آستانه محدود کنندگی را برای دو طول موج مشخص کرد. مشاهده می شود که آستانه محدود کنندگی در طول موج ٤٠٥ نانومتر در توان تابشی ۱,۵ میلی-وات و برای طول موج ۵۳۲ نانومتر در توان تابشی ۱۵ میلی‌وات رخ می دهد. برای مشخص شدن ساز و کارهای غیرخطی موثر در پاسخ محدود کنندگی‌نوری، لازم است ضرایب جذب و شکست غیر خطی اندازه گیری شود که در ادامه نتایج آن ارایه خواهد شد.



شکل۵: داده های مربوط به آزمایش محدود کنندگی نوری مطابق با شکل۱ . الف)طول‌موج٤٠٥ نانومتر ب) طول‌موج۵۳۲نانومتر.

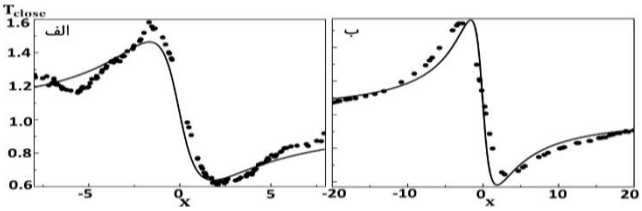
برای اندازه گیری ضریب جذب غیرخطی از چیدمان جاروب z در حالت باز استفاده شد. نتایج اندازه گیری نشان می دهد که نمونه در هر دو طول موج برای محدوده توان تابشی استفاده شده در این کار جذب غیرخطی از خود نشان نمی دهد.

در طول موج‌های ٤٠٥نانومتر و۵۳۲نانومتر ضریب شکست غیرخطی با لیزر پیوسته اندازه گیری شد که نتایج آن در شکل٦ نشان داده شده است. با توجه به اینکه در این آزمایش از لیزر پیوسته استفاده شد، به همین دلیل مکانیسم غالب مربوط به ویژگی ترمو-اپتیکی ماده می باشد. در این مکانیسم، انرژی لیزر توسط نمونه جذب شده و موجب گرم شدن نمونه خواهد شد. با توجه به اینکه باریکه تابشی پروفایل گوسی دارد، توزیع دمایی در ماده نیز یکنواخت نبوده و از این توزیع فضایی پیروی خواهد کرد. اما به دلیل پخش حرارتی، تغییر ضریب شکست، موضعی نخواهد بود. به همین دلیل به این نوع غیرخطی، غیرخطی غیرموضعی نیز گفته می شود[۷]. برای بدست آوردن ضریب شکست غیرخطی در این آزمایش می توان از مدل ضریب شکست غیرخطی حرارتی استفاده کرد که رابطه میزان عبور آن به صورت زیر است[۸] :

$$T_{close} = 1 - A\tan^{-1}\left(\frac{2x}{3+x^2}\right) + \left(\frac{A}{2}\tan^{-1}\left(\frac{2x}{3+x^2}\right)\right)^2 + \left(\frac{A}{4}log\left(\frac{x^2+1}{x^2+9}\right)\right)^2 \quad (۱)$$

در این رابطه $x\equiv\frac{z}{z_0}$ یک کمیت بدون واحد است. z فاصله نسبت به نقطه کانون است، z_0 طول رایلی و $A\equiv\frac{kI_0Ln_2}{(1-\alpha_0L)}$ که k عدد موج باریکه، I_0 شدت در نقطه کانون، L ضخامت نمونه و α_0 ضریب جذب خطی نمونه است. با استفاده از برازش داده های (حالت بسته) با معادله۱، ضرایب شکست غیر خطی در دو طول موج ٤٠٥ و ۵۳۲ نانومتر بدست آمده که در جدول۱ ارایه شده است.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



شکل۶: داده‌های تجربی مربوط به T_{close} .الف)طول موج۴۰۵نانومتر با شعاع کمره ۲۷میکرومتر ب)طول‌موج ۵۳۲نانومتر با شعاع کمره ۱۵میکرومتر.

جدول۱: نتایج جاروبz برای ضریب‌شکست‌غیرخطی.

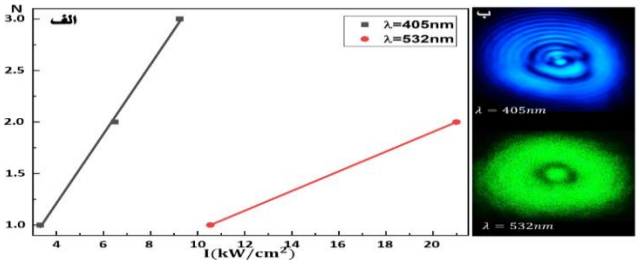
	۴۰۵نانومتر		۵۳۲نانومتر	
نمونه	$n_2(cm^2/W)\times10^{-8}$	$I_0(kW/cm^2)$	$n_2(cm^2/W)\times10^{-8}$	$I_0(kW/cm^2)$
رز زرد	-۶/۰۹	۰/۱۹	-۲/۵۹	۲/۹۶

اندازه‌ی ضریب شکست غیرخطی را می توان به روش خود مدولگی فازی فضایی اندازه گیری کرد. رابطه(۲) ارتباط تعداد حلقه-های ظاهر شده و شدت باریکه در ماده غیرخطی را نشان می دهد[۷]. همچنین می توان پذیرفتاری‌الکتریکی مرتبه سوم کل را با استفاده از رابطه(۳) برای نمونه بدست آورد.

$$|n_2|=\left(\frac{\lambda}{2L_{ef}n_0}\right)\frac{N}{I} \qquad (۲)$$

$$\chi^{(3)}_{Total}=\frac{c\lambda n_0}{2.4\times10^4\pi^2L_{ef}}\left(\frac{dN}{dI}\right) \qquad (۳)$$

در این روابط N تعداد حلقه‌های ظاهر شده، I شدت در باریکه در نقطه کانون است که ماده غیر خطی در آن قرار دارد، n_0 ضریب شکست خطی ماده است و $L_{ef}=z_0\tan^{-1}(L/z_0)$. در رابطه(۳) $\frac{dN}{dI}$ بیان‌کننده آهنگ تغییر تعداد حلقه ها نسبت به افزایش شدت در کانون است. با اندازه گیری تعداد حلقه ها بر حسب شدت تابشی و با استفاده از روابط (۲) و(۳) می توان ضریب شکست غیرخطی و همچنین پذیرفتاری الکتریکی مرتبه سوم کل را بدست آورد[۹] . نتایج بدست آمده در جدول۲ ارایه شده است. مشاهده می شود که ضریب شکست های بدست آمده از این روش با ضریب شکست های بدست آمده از روش جاروب z همخوانی دارد.



شکل۷: الف)داده‌های‌تجربی مربوط به آزمایش خود مدولگی فازی فضایی. ب) تصویر یک نمونه از حلقه های ایجاد شده.

جدول۲:اندازه ضریب شکست غیرخطی و پذیرفتاری مرتبه سوم به دست آمده از آزمایش خود مدولگی فازی فضایی.

	۴۰۵نانومتر		۵۳۲نانومتر	
نمونه	$n_2(cm^2/W)\times10^{-8}$	$\chi^{(3)}_T\times10^{-9}$ (e.s.u)	$n_2(cm^2/W)\times10^{-8}$	$\chi^{(3)}_T\times10^{-9}$ (e.s.u)
رز زرد	۶/۱۱	۱/۶۱	۲/۴۳	۱/۲۰

نتیجه گیری

محلول کربن نقطه‌ای از عصاره گل رز زرد با روش هیدروترمال استخراج شد و ضریب شکست غیرخطی با دو روش جاروبz و خود مدولگی فازی فضایی در طول‌موج‌های ۴۰۵ و۵۳۲ نانومتراندازه‌گیری شد و نتایج اندازه‌گیری در توافق کامل با هم بودند. در این دو طول موج ضریب شکست غیر خطی تقریبا در مرتبه $10^{-8}(\frac{cm^2}{W})$ بود. نتایج اندازه گیری محدود کنندگی نوری نشان داد که نمونه می تواند به عنوان یک محدود کننده نوری کاربرد داشته باشد. همچنین مشاهده شد که محدود کنندگی در طول موج ۴۰۵نانومتر در مقایسه با طول‌موج ۵۳۲نانومتر بیشتر است و در توان ورودی کوچکتری، حالت اشباع برای توان خروجی رخ می دهد.

مرجع‌ها

[۱] Vasimalai, Nagamalai, et al. "Green synthesis of fluorescent carbon dots from spices for in vitro imaging and tumour cell growth inhibition." *Beilstein journal of nanotechnology* 9.1 (2018): 530-544.
[۲] Sharma, Vinay, et al. "Bioinspired carbon dots: from rose petals to tunable emissive nanodots." *Nanoscale Advances* 1.4 (2019): 1290-1296.
[۳] Ganavatkar, Chaitannya W., et al. "Benzothiazole pyrazole containing emissive azo dyes decorated with ESIPT core: Linear and non linear optical properties, Z scan, optical limiting, laser damage threshold with comparative DFT studies." *Journal of Molecular Structure* 1203 (2020): 127401
[۴] Shi, Weidong, et al. "Hydrothermal synthetic strategies of inorganic semiconducting nanostructures." *Chemical Society* Reviews 42.13 (2013): 5714-5743.
[۵] Zhang, Han, et al. "Z-scan measurement of the nonlinear refractive index of graphene." *Optics letters* 37.11 (2012): 1856-1858.
[۶] Wu, Yanling, et al. "Emergence of electron coherence and two-color all-optical switching in MoS2 based on spatial self-phase modulation ."*Proceedings of the National Academy of Sciences* 112.38 (2015): 11800-11805.
[۷] Han, Yuxiao, et al. "Identification and separation of local and nonlocal optical nonlinear refraction effects: theory and experiment." *Chinese Optics Letters* 17.6 (2019): 061901
[۸] Carter et al. "Comparison of models describing the thermal lens effect." *Applied optics* 23.3 (1984): 476-481.
[۹] Hu, Lili, et al. "Nonlinear optical response spatial self-phase modulation in MoTe 2: correlations between $\chi^{(3)}$ and mobility or effective mass." *Optics letters* 44.21 (2019): 5214-5217.

تصحیح تابشی انرژی کازیمیر برای میدان اسکالر روی سطح کره

ولوئیان ، مددعلی

دانشکده فیزیک، واحد سمنان، دانشگاه آزاد اسلامی، سمنان، ایران

چکیده

در این مقاله، به صورت خلاصه به ارائه محاسبه انرژی کازیمیر میدان اسکالر روی یک سطح کروی با توپولوژی S^2 با روش منظم سازی کم کردن جمله ها پرداخته شده است. نتایج بدست آمده برای انرژی کازیمیر میدان اسکالر روی سطوح S^1 و S^3 نیز در قالب نمودار ارائه گردیده است. غالباً در محاسبه انرژی کازیمیر روی سطحی با توپولوژی S^2 یک واگرایی در نهایت باقی می ماند که برای حذف آن معمولا از بازبهنجارش ثانویه استفاده می شود. مزیت مهم روش کم کردن جمله ها در این است که می توان در روش مذکور، مرتبه صفرم از انرژی کازیمیر را به صورت مستقیم بدست آورد و نیاز به اعمال بازبهنجارش دیگری نیست. در این مقاله علاوه بر ارائه مرتبه صفرم انرژی کازیمیر به محاسبه مرتبه اول تصحیح تابشی انرژی کازیمیر روی سطحی با توپولوژی S^2 نیز پرداخته شده است. بکارگیری کانترترم وابسته به مکان (و نه کانترترم آزاد) جهت برقراری سازگاری با شرایط مرزی و پس زمینه حاکم بر مساله از نکات مهم روش بکاررفته در این مطالعه می باشد. نتایج بدست در مرتبه صفرم انرژی کازیمیر برای همه توپولوژی های ذکر شده با پاسخهای ارائه شده در گذشته سازگار است. اما پاسخ ما در مرتبه اول تصحیح تابشی انرژی کازیمیر دارای تفاوت آشکار می باشد که البته ریشه این تفاوت آشکار را باید در نوع بازبهنجارش بکار رفته جستجو نمود.

واژه های کلیدی: *انرژی کازیمیر، تصحیح تابشی، کانترترم، بازبهنجارش، منظم سازی.*

Radiative Correction to the Casimir Energy for Scalar Field on Spherical Surface

Valuyan, Madad Ali

Department of Physics, Semnan Branch, Islamic Azad University, Semnan, Iran

Abstract

In this paper, the first-order radiative correction to the Casimir energy for a massive scalar field in the ϕ^4 theory on a spherical surface with S^2topology was calculated. In common methods for calculating the radiative correction to the Casimir energy, the counter-terms related to free theory are used. However, in this study, by using a systematic perturbation expansion, the obtained counter-terms in renormalization program were automatically position-dependent. Additionally, along with the renormalization program, a supplementary regularization technique that we named Box Subtraction Scheme (BSS) was performed. This scheme presents a useful method for the regularization of divergences, providing a situation that the infinities would be removed spontaneously without any ambiguity. Moreover, in this study, the final results regarding to the Casimir energy for massive and massless scalar field with periodic boundary condition on spherical surfaces with S^1 and S^3 topologies were discussed as a language of figure. Analysis of the necessary limits of the obtained results for the Casimir energy of the massive and massless scalar field confirmed the appropriate and reasonable consistency of the answers.

***Keywords**: Casimir Energy, Radiative Correction, Counterterm, Renormalization, Regularization*

PACS No. 11.10.-z, 11.10.Gh, 03.70.+k, 42.50.Lc

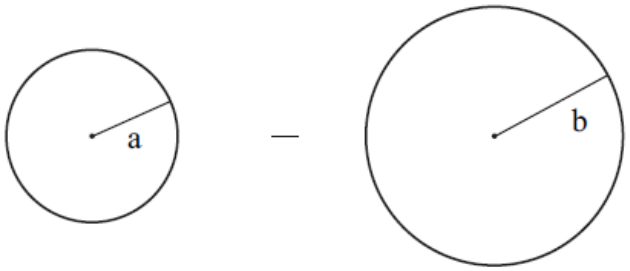
مقدمه

بیش از هفتاد سال از اولین پیش بینی کازیمیر در خصوص وجود نیروی جاذبه بین دو رسانای بدون بار که ناشی از اعوجاج خلا بود، می گذرد. این پیش بینی ده سال بعد توسط اسپارنای مورد آزمایش واقع شد و تایید گردید. سپس برداگ و همکاران ایشان در سال ۱۹۸۵ تصحیحات تابشی انرژی کازیمیر را نیز مورد بررسی قرار

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

دادند، و توجه به مقولهٔ تصحیحات تابشی بعد از آن نیز ادامه یافت[۱]. معمولاً آن چیزی که در محاسبه تصحیحات تابشی انرژی کازیمیر بحث های چالش برانگیزی را ایجاد نموده است، نحوه بازبهنجارش پارامترهای برهنهٔ موجود در لاگرانژی است. در حالت معمول این کانترترم‌ها[۱] هستند که وظیفه بازبهنجارشِ پارامترهای برهنه موجود در لاگرانژی را برعهده دارند و درواقع این کانترترم‌ها هستند که در برنامه بازبهنجارش[۲] واگرایی‌های ناشی از این پارامترها را در خود هضم می کنند و پارامترهای فیزیکیِ لاگرانژی را بدست می دهند. در اجرای برنامه بازبهنجارش در بسیاری از مقالات گذشته حتی در مسائلی که میدان کوانتومی در آنها تحت اثر یک شرط مرزی و یا پس زمینهٔ غیربدیهی بوده است، از کانترترم‌های فضای آزاد برای بازبهنجارش کمیت‌های برهنه استفاده شده است [۳-۲]. در تعدادی از مطالعات انجام شده در گذشته نظر بر این است که، اگر در مساله-ای میدانهای کوانتومی تحت اثر یک شرط مرزی بگیرد، باید برنامه بازبهنجارش مربوط به این میدان‌ها نیز بگونه‌ای اجرا شود که با شرط مرزی اعمال شده، سازگار باشد؛ و در واقع استفاده ازکانترترم مربوط به فضای آزاد در هر مسأله ای بدون توجه به شرط مرزی حاکم بر آن مساله نمی تواند امری فیزیکی باشد. یک جستجو در مطالعات گذشته نشان می دهد که با انتخاب نادرست کانترترم منجر به این می‌شود که برنامه بازبهنجارش بدرستی عمل نکرده و در نهایت تصحیح تابشی انرژی کازیمیر واگرا بدست آید [۵-٤]. لذا برای اولین بار در مقالاتی چون [٦] روش بازبهنجارشی معرفی گردید که در آن شرط مرزی حاکم بر مساله در برنامه بازبهنجارش به صورت سیستماتیک و سازگار ورود یافته و این ورود منجر به بدست آمدن کانترترم‌های وابسته به مکان در برنامه بازبهنجارش شده است. در این مقاله نیز با استفاده از روش بازبهنجارش مذکور، تصحیح تابشی انرژی کازیمیر را برای میدان اسکالر جرمدار تعریف شده در نظریه ϕ^4 روی یک سطح کروی با توپولوژی S^2 ارائه خواهیم کرد. پاسخ بدست آمده با مبانی قابل انتظار فیزیکی کاملاً سازگار است.

جهت حذف واگرایی‌های موجود در فرایند محاسبات انرژی کازیمیر، استفاده از روشهای منظم سازی اجتناب‌ناپذیر است. از آنجائیکه نوع واگرایی های ظاهر شده در مسائلی که در فضای دوبعدی مطرح هستند به صورت لگاریتمی است، این امر به دشواری های فرایند منظم سازی می افزاید. اما در این مقاله، با استفاده از روش منظم سازی کم کردن جعبه ها به خوبی بر این دشواری ها فائق آمده و کلیه محاسبات تصحیح تابشی انرژی کازیمیر با استفاده از روش منظم سازی مذکور انجام پذیرفته است. برای محاسبه انرژی کازیمیر با استفاده از این روش، معمولاً دو ساختار مشابه در نظر گرفته می شود، و اختلاف انرژی های خلا این دو ساختار از هم محاسبه می شوند.



شکل۱ : این شکل به صورت نمادین منظم سازی به روش کم کردن جعبه ها را نشان می دهد. شکل سمت چپ را ساختار A و شکل سمت راست را ساختار B می نامیم.

بر این اساس انرژی کازیمیر را بصورت زیر تعریف کرد:

$$E_{\text{Cas.}} = \lim_{b/a\to\infty} (E_A - E_B) \qquad (۱)$$

که در آن E_A و E_B انرژی خلا مربوط به دو ساختار A و B است و a و b شعاع کره ها در دو ساختار می باشد.

مرتبه صفرم و اول انرژی کازیمیر

رابطه لاگرانژی برای میدان اسکالر حقیقی در نظریه ϕ^4 روی یک منیفلد به صورت زیر است:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}\sqrt{-g}\left[g^{\mu\nu}\partial_\mu\phi\partial_\nu\phi - (m_0^2 + \xi\mathcal{R})\phi^2 - \frac{\lambda_0}{4!}\phi^4\right] \qquad (۲)$$

که در آن m_0 و λ_0 به ترتیب پارامترهای برهنه جرم و ثابت جفت شدگی میدان هستند و برای یک سطح دوبعدی با توپولوژی S^2 و شعاع a مقدار پارامتر انحنای اسکالر $\mathcal{R} = 2a^{-2}$ است. همچنین ثابت جفت شدگی $\xi = \frac{1}{8}$ می باشد. با در نظر گرفتن متریک $ds^2 = dt^2 - a^2(d\theta^2 + \sin^2\theta\, d\varphi^2)$ و با توجه به معادله حرکتی که از لاگرانژی داده شده در معادله (۲) بدست می

[۱] Counterterm

[۲] Renormalization Program

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

آید، پس از اعمال کوانتش کانونیکی، انرژی خلا روی یک سطح کروی با توپولوژی S^2 برای یک میدان با شرط مرزی نوسانی به صورت زیر خواهد[۷-۸]:

$$E_{\text{Vac.}} = E^{(0)}_{\text{Vac.}} + E^{(1)}_{\text{Vac.}} = \frac{1}{4\pi a^2}\sum_{\ell=0}^{\infty}\left(\ell+\frac{1}{2}\right)\omega_\ell + \frac{-\lambda}{8}\int_S G^2(x^\mu, x^\mu)dS \quad (۲)$$

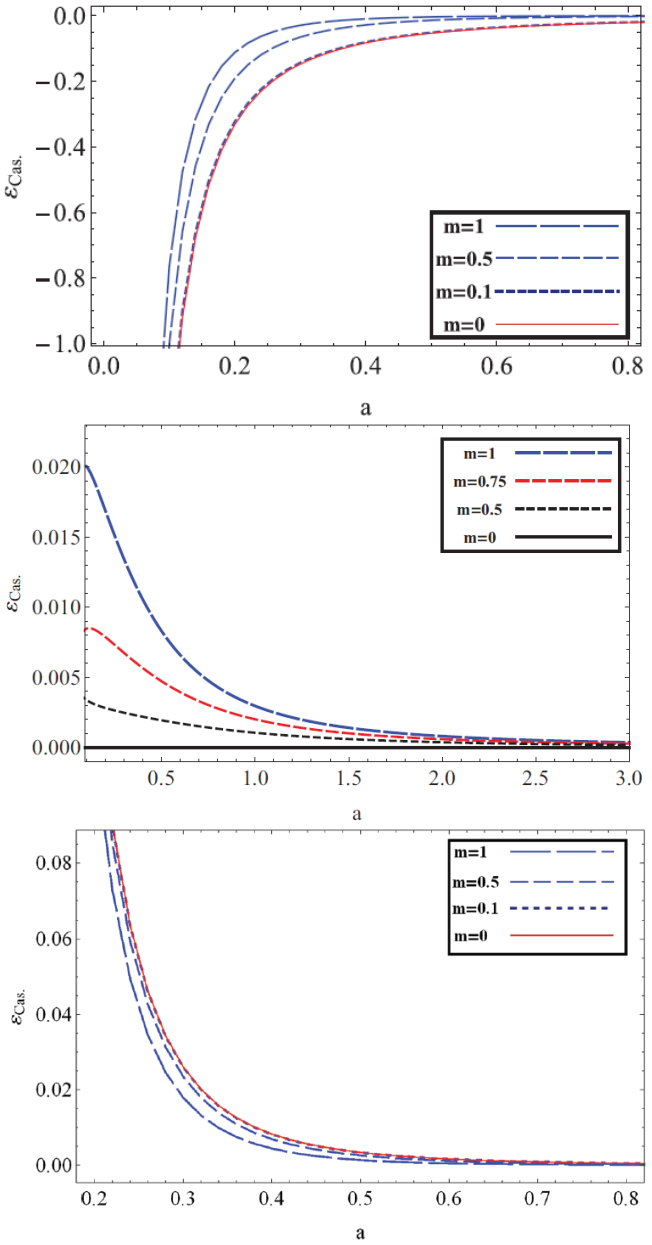
که در آن $\omega_\ell^2 = \frac{1}{a^2}\left(\ell+\frac{1}{2}\right)^2 + m^2$ فرکانس‌های مجاز پس از اعمال شرایط مرزی می باشند و تابع $G(x^\mu, x'^\mu)$ نیز تابع گرین می‌باشد. منظور از مختصه $x^\mu = (t, r, \theta, \varphi)$ است و پارامتر λ و m نیز به ترتیب نشان دهنده ثابت جفت شدگی در نظریه ϕ^4 و جرم میدان اسکالر است. فرم تابع گرین برای یک میدان اسکالر روی سطح کره به صورت زیر خواهد شد:

$$G_A(x^\mu, x'^\mu) = \int_{-\infty}^{\infty}\frac{-d\omega}{2\pi} \times \sum_{\ell=0}^{\infty}\sum_{M=-\ell}^{\ell}\frac{e^{-\omega(t-t')}Y_\ell^M(\theta,\varphi)Y_\ell^{M*}(\theta',\varphi')}{\omega^2+\omega_\ell^2} \quad (۳)$$

با استفاده از تعریف ارائه شده از انرژی کازیمیر در معادله (۱) لازم است انرژی خلا برای ساختار B نیز محاسبه شود که البته اینکار تنها با جایگذاری b به جای a انجام خواهد شد. سپس اختلاف انرژی های خلا دو ساختار A و B از هم محاسبه گردد. انجام این رویه برای جمله اول در سمت راست معادله (۲) منجر به یافتن مرتبه صفرم از تصحیح تابشی انرژی کازیمیر می گردد. با انجام کلیه جزئیات مربوط به این محاسبات که البته در مقاله [۷] نیز گزارش شده است، خواهیم داشت:

$$\mathcal{E}^{(0)}_{\text{Cas.}} = \frac{\mu_a^2}{8\pi a^3}\sum_{j=1}^{\infty}\frac{(-1)^{j+1}}{j}\left[\frac{4}{3}\mu_a j - I_2(2\pi\mu_a j) + L_2(2\pi\mu_a j)\right] \quad (۴)$$

که در آن تابع $I_2(x)$ و $L_2(x)$ به ترتیب تابع بسل اصلاح شده و تابع لاگر می باشد. پاسخ به دست آمده برای مرتبه صفرم انرژی کازیمیر با آنچه در گذشته برای این مرتبه از انرژی گزارش شده است تطابق کامل دارد [۹]. تکرار این محاسبات برای توپولوژی های S^1 و S^3 نیز انجام پذیرفته است که نتایج آن در قالب نمودارهای (۲) و (۳) ارائه شده است.



شکل ۲. سه نمودار رسم شده نمودار تغییرات مرتبه صفرم انرژی کازیمیر روی سطح کره را برحسب شعاع آن برای چند مقدار از جرم میدان اسکالر نشان می دهد. سه نمودار فوق به ترتیب (از بالا به پایین) مربوط به رویه هایی با توپولوژی S^1 S^2 و S^3 می باشد.

جمله دوم در سمت راست معادله (۲) بیانگر مرتبه اول($\mathcal{O}(\lambda)$) از انرژی خلا می باشد. این رابطه برای انرژی خلا با در نظر گرفتن کانترترم های وابسته به مکان محاسبه شده است(جهت بررسی جزئیات بیشتر به [۸] مراجعه گردد). برای محاسبه مرتبه اول از تصحیح تابشی انرژی کازیمیر، ابتدا لازم است تابع گرین برای هر

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

یک ساختارهای مشخص شده در شکل (۱) با جایگذاری شعاع هر کره در عبارت (۳) بدست آید. سپس با جایگذاری تابع گرین مربوط به هرساختار، با استفاده از تعریف انرژی کازیمیر در معادله (۱) به محاسبه اختلاف انرژی های خلا دو ساختار A و B می پردازیم. تشابه دو ساختار به انضمام منظم‌سازی تابع قطع[۳] باعث می شود تا تعداد زیادی از واگرایی ها در انجام این تفاضل یکدیگر را حذف کنند. در نهایت نیز با محاسبه حد موجود در رابطه (۱)، تصحیح تابشی انرژی کازیمیر برای یک سطح کروی با توپولوژی S^2 بصورت زیر بدست می آید:

$$E^{(1)}_{\text{Cas.}} = \frac{-\lambda}{128\pi^2}\left[B(a)^2 - \left(\frac{1}{24m}\right)^2\right] \qquad (٦)$$

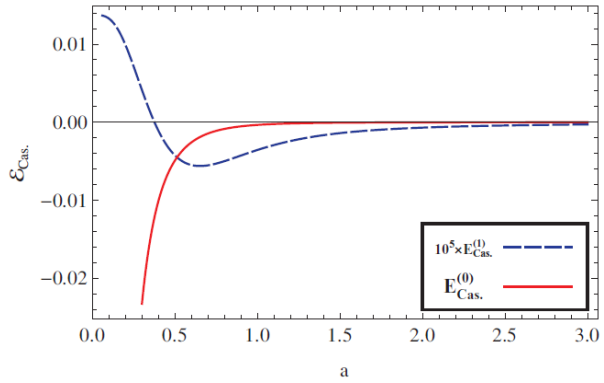
که در آن تابع $B(a)$ عبارتست از:

$$B(a) = \sum_{j=1}^{\infty}(-1)^{j+1}\pi\mu_a a[-I_1(2\pi\mu_a j) + L_{-1}(2\pi\mu_a j)]$$

یکی از مهمترین حدهایی که معمولاً در مبحث انرژی کازیمیر مورد توجه ویژه قرار می گیرد، یافتن پاسخ برای میدانهای بدون جرم است. محاسبه حد بدون جرم برای مرتبه اول تصحیح تابشی انرژی کازیمیر با استفاده مستقیم از رابطه (٦) رابطه زیر به میزان صفر برای آن ختم خواهد شد.

نتیجه گیری

در این مقاله به ارائه محاسبه انرژی کازیمیر برای مرتبه صفر و اول تصحیح تابشی میدان اسکالر تعریف شده روی یک منیفلد با توپولوژی S^2 پرداخته شده است. این محاسبات در مرتبه اول تصحیح تابشی برای بار اول ارائه گردیده است. در انجام این محاسبات، از منظم سازی کم‌کردن جمله ها برای حذف واگراییهای ناشی از انرژی خلا استفاده شده است. برای حذف واگرایی‌های ناشی از پارامترهای برهنه در لاگرانژی نیز از کانترترم‌های وابسته به مکان استفاده شده است. پاسخ های بدست آمده در هردو مرتبه از انرژی با انتظارات فیزیکی موجود سازگار است[۹].



شکل۲ : مرتبه صفرم و مرتبه اول از تصحیح تابشی انرژی کازیمیر برای یک رویه با توپولوژی S^2 برحسب شعاع کره رسم شده است. این نمودار نشان می دهد که به ازای تعیین مقدار مقدار ثابت جفت شدگی برابر $\lambda = 0.1$ انرژی کازیمیر در مرتبه اول تصحیح تابشی 10^5 مرتبه از انرژی مرتبه صفرم کوچکتر است.

همچنین این محاسبات برای میدان بدون جرم نیز انجام شده است و تصحیح تابشی مرتبه اول انرژی کازیمیر برای میدان بدون جرم صفر می باشد.

مرجع‌ها

[1] M. Bordag, D. Robaschik, E. Wieczorek, *Ann. Phys. (N.Y.)* **165** (1985) 192.
[2] M. Bordag, J. Lindig, *Phys. Rev. D* **58** (1998) 045003.
[3] N. Graham, R. Jaffe, H. Weigel, "Casimir effects in renormalizable quantum field theories", *Int. J. Mod. Phys. A* **17** (2002) 846.
[4] R.M. Cavalcanti, C. Farina, F.A. Barone, Radiative corrections to Casimir effect in the $\lambda\phi^4$ model, *arXiv:hep-th/0604200*, 2006.
[5] S.S. Gousheh, R. Moazzemi, M.A. Valuyan, "Radiative correction to the Dirichlet Casimir energy for $\lambda\phi^4$ theory in two spatial dimensions", *Phys. Lett. B* **681** (2009) 477.
[6] R. Moazzemi, A. Mohammadi, S. S. Gousheh, "A renormalized perturbation theory for problems with non-trivial boundary conditions or backgrounds", *Eur. Phys. J. C* **56** (2008) 585.
[7] M.A. Valuyan, "Casimir energy calculation for massive scalar field on spherical surfaces: an alternative approach", *Can. J. Phys.* **96** (2018) 1004.
[8] M.A. Valuyan, "Radiative correction to the Casimir energy for massive scalar field on a spherical surface", *Mod. Phys. Lett. A* **32**, No. 24 (2017) 1750128.
[9] M. Bordag, U. Mohideen, and V.M. Mostepanenko, "New developments in the Casimir effect ", Phys. Rep. **353** (2001) 1.

[۳] Cut-off Regularization Technique

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

شبیه سازی ذره در سلول دینامیک جزایر مغناطیسی در پلاسمای تاج خورشیدی

شهرکی پور، مهدی ؛ حسین پور،محبوب

دانشکده فیزیک دانشگاه تبریز

چکیده :

بازاتصالی مغناطیسی یکی از پدیده‌های مهم در پلاسماهای مغناطیده می باشد که با تغییر ساختار خطوط میدان مغناطیسی باعث آزاد شدن انرژی ذخیره شده مغناطیسی به انرژی‌های جنبشی و حرارتی می شود. در فرآیند توسعه یافته بازاتصالی غیر خطی ، لایه جریان الکتریکی دچار یک تغییر شکل غیر خطی می‌شود، این آشفتگی در واقع به شکل قطع شدن لایه جریان الکتریکی خود را نشان می‌دهد و این پدیده باعث ایجاد جزایر مغناطیسی در دو طرف نقطه قطع، می‌شود که به آنها پلاسموئید می‌گویند.در این پژوهش، ناپایداری پلاسموئیدی توسط شبیه سازی ذره در سلول مورد بررسی قرار می‌گیرد و نقش میدان هدایت در تغییر شکل ظاهری و سرعت ادغام پلاسموییدها تحقیق می شود.

واژگانکلیدی: *بازاتصالی مغناطیسی، ناپایداری پلاسموئید، شبیه‌سازی ذره در سلول*

particle in a cell simulation of magnetic islands dynamics in plasmas of solar corona

Shahraki pour , Mahdi ; Hosseinpour, Mahboub

Faculty of Physics, University of Tabriz

Abstract

Magnetic reconnection is one of the most important phenomena in magnetic plasmas which changes the structure of the magnetic field lines to release the stored magnetic energy into kinetic and thermal energies. In the developed process of nonlinear reconnection, the electric current layer undergoes a nonlinear deformation. This phenomenon reveal in the form of a x-point in the layer of electric current, creating magnetic islands on either side of the x-point, called plasmoids. In this paper, plasmoid instability is investigated by particle in a cell simulation, and the role of the guide field in the formation and the rate of plasmoide coalescence is investigated.

***Keywords**: Magnetic reconnection, plasmoid instability, Particle in cell simulation*

مقدمه

بازاتصال مغناطیسی شامل تغییر هندسی مجموعه‌ای از خطوط میدان مغناطیسی است، که منجر به ایجاد تعادل جدید با انرژی مغناطیسی پایین‌تر می‌شود. هنگامی که خطوط میدان به یکدیگر متصل[1] می‌شوند، ترکیب هندسی خطوط مغناطیسی تغییر می‌کند و نیروی $\vec{J}\times\vec{B}$ منجر به تبدیل انرژی مغناطیسی به انرژی جنبشی می‌شود[1]. اندرکنش خطوط میدان، منجر به شکل‌گیری لایه جریان در نزدیک یک نقطه خنثی(نقطه ایکس) می شود، خطوط نیرو در لایه جریان می‌توانند شکسته و مجدد متصل شوند در بازاتصالی مغناطیسی خطوط میدان مغناطیسی به صورت مخالف جهت‌گیری شده‌اند[1],[2]. بازاتصالی مغناطیسی در واقع

[1] reconnected

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

با تغییر در شکل هندسی خطوط میدان مغناطیسی آغاز می‌شود و به تبع آن، پلاسموئیدها شکل می‌گیرند و با ادغام با یک دیگر، به صورت پیوسته رشد می‌کنند[7][4].بازاتصالی مغناطیسی و شکل گیری پلاسموییدها نقش اساسی در تاج خورشیدی ایفا می‌کند. باید به این نکته اشاره کرد که زبانه‌های خورشیدی یک موضوع مهم در مطالعه بازاتصالی مغناطیسی به شمار می‌آید مشاهدات رصدی و نیز تصاویر ماهواره‌ای از جو خورشید وجود پلاسموییدها را تایید می کنند بازاتصالی مغناطیسی در مگنتوسفر زمین نیز رصد شده است[2][3] .

شواهد تجربی، وجود بازاتصالی مغناطیسی در دستگاه‌های تحقیقاتی گداخت پلاسما را نیز تائید می‌کند[7]. نمونه تجربی بازاتصالی مغناطیسی، بازاتصالی دندان اره‌ای[1] در توکامک[2] می باشد. اگر بازاتصالی مغناطیسی در چندین نقطه اتفاق بیفتد جریان-های خارجی پلاسما از مکان‌های بازاتصالی مجاور چندین پلاسموئید را شکل می‌دهند، که همانند مهره‌های یک زنجیره سازمان یافته‌اند. پلاسموئیدها می توانند با یکدیگر ادغام شوند و پلاسموئید بزرگتر را شکل دهند[4][6][8].

جزئیات شبیه سازی

شبیه سازی ذره در سلول[3]مبتنی بر توصیف جنبشی از پلاسما می باشد در این روش تابع توزیع ذرات بوسیله مجموعه‌ای از ذرات گسسته در فضای فاز تقریب زده می‌شود که این ذرات درواقع تعداد زیادی ذرات فیزیکی هستند موسوم به ذرات بزرگ[4] که از مسیر یکسانی در فضای فاز پیروی می‌کنند[5].این ذرات نمی‌توانند به صورت مستقیم از ذرات مشابه نیرو دریافت کنند بلکه همدیگر را از طریق شبکه احساس می‌کنند(سهمی از چگالی بار و جریان که در نقاط توری ذخیره شده اند)[5] .

میدان‌ها نیز تنها روی نقاط شبکه ها محاسبه می‌شوند، در شبیه-سازی ذره در سلول، بارها در لحظه اول دارای موقعیت و سرعت مشخصی هستند. با توجه به موقعیت و سرعت اولیه، از حل معادلات چگالی بار و جریان، این دو کمیت بدست خواهد آمد. در مرحله بعد با حل معادلات ماکسول، میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی را بدست می آوریم و با داشتن میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی و حل معادله نیوتون موقعیت و سرعت در لحظه بعدی بدست می آید که این چرخه مدام در حال تکرار است.

در این تحقیق از کد $Epoch$ استفاده شده است و پلاسمای الکترون- پروتون بدون برخورد شبیه سازی شده است .که در آن جرم پروتونها صد برابر جرم الکترونها می باشد $m_p/m_e=100$. تعداد سلول‌های جعبه شبیه‌سازی در دو بعد $N_x\times N_y=512\times256$ است و تعداد 9175040 ذره در شبیه سازی استفاده شده است .ساختار میدان مغناطیسی تعادلی به صورت $B_y=0$ ،$B_x=b_0\tanh((y-l_y/2)/\delta)$ تعریف می‌شود که $\delta=27$ متر نیم ضخامت لایه جریان می‌باشد. $L_x=L_y=10.24d_i=1088$ مترابعاد جعبه شبیه سازی می-باشد که در آن d_i طول لختی یون یا عمق پوسته یونی و برابر با c/ω_{pi}است، cسرعت نور و ω_{pi} فرکانس پلاسمایی یون می باشد. وگام های فضایی به صورت $\Delta x=2.125$ و $\Delta y=4.25$ تنظیم شده اند. $b_0=0.01$تسلا میدان مغناطیسی اولیه و چگالی الکترون و پروتون $10^{13}m^{-3}$ متناسب با شرایط واقعی انتخاب شده است.دمای الکترونها و پروتونها به ترتیب $100ev$و $25ev$می‌باشد. میدان هدایت در دو حالت $b_z=0$ و $b_z=0.0025$ تسلا استفاده شده است. شرایط مرزی برای میدانها و برای ذرات در جهت x دوره ای می باشد و در جهت y امواج الکترومغناطیس از مرز عبور می کنند درحالی که ذرات درمرزهای y بازتاب می کنند.

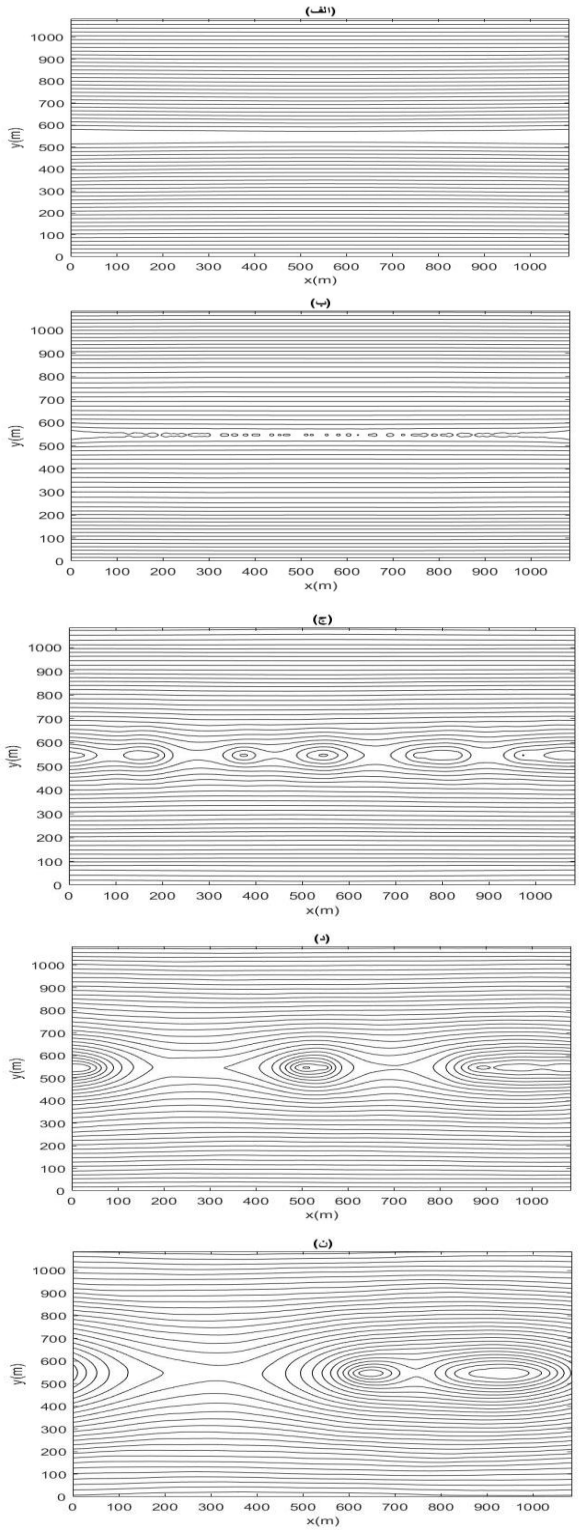
نتایج شبیه سازی

در فرآیند شکل گیری و رشد ناپایداری پلاسموئیدی هنگامی که میدان هدایت وجود ندارد $(b_z=0)$ همچنانکه در شکل (1) نشان داده شده است خطوط میدان مغناطیسی به یکدیگر نزدیک می شوند و لایه جریان الکتریکی در چندین نقطه دچار از هم گسیختگی می شود که منجر به شکل گیری چندین نقطه ایکس در زمان $t=100$ ثانیه می شود. در دو طرف هر نقطه ایکس پلاسموئیدها شکل می گیرند و تا زمانی که عرض پلاسموئیدها کمتر از عرض لایه جریان الکتریکی است، به صورت خطی رشد

[1] sawtooth
[2] tokamak
[3] particle in a cell
[4] Macroparticles

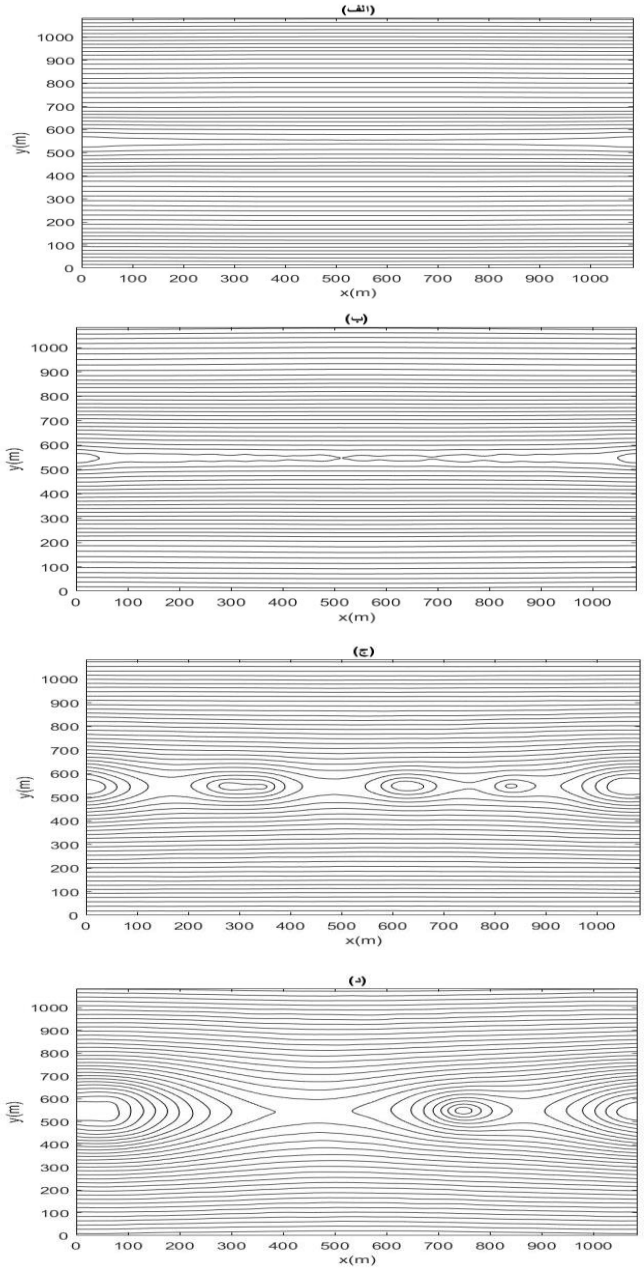
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

می کنند. هنگامی که عرض پلاسموییدها از عرض لایه جریان بیشتر می شود مرحله رشد غیر خطی آغاز می شود.



شکل۱)تصویر خطوط میدان مغناطیسی در زمانهای مختلف: الف) $t=0$ ثانیه، ب) $t=100$ ثانیه ، ج) $t=250$ ثانیه، د) $t=400$ ثانیه، ن) $t=600$ثانیه با میدان هدایت صفر $(b_z=0)$

پلاسموئیدها بزرگتر شده و همچنان با یک دیگر ادغام می شوند در زمان $t=250$ ثانیه پنج نقطه ایکس وشش جزیره مغناطیسی مشخص است. فرآیند ادغام پلاسموئیدهای ادامه می یابد تا اینکه در زمان $t=400$ ثانیه تعداد دو نقطه ایکس و سه جزیره مغناطیسی شکل گرفته اند (شکل (د)). در زمان $t=600$ ثانیه تشکیل تک پلاسموییدبزرگ نشان داده شده است .



شکل۲)تصویر خطوط میدان مغناطیسی در زمانهای مختلف: الف) $t=120$ ثانیه، ب) $t=180$ ثانیه ، ج) $t=400$ ثانیه ، د) $t=600$ ثانیه در حضور میدان هدایت $b_z=(0.0025)$تسلا

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

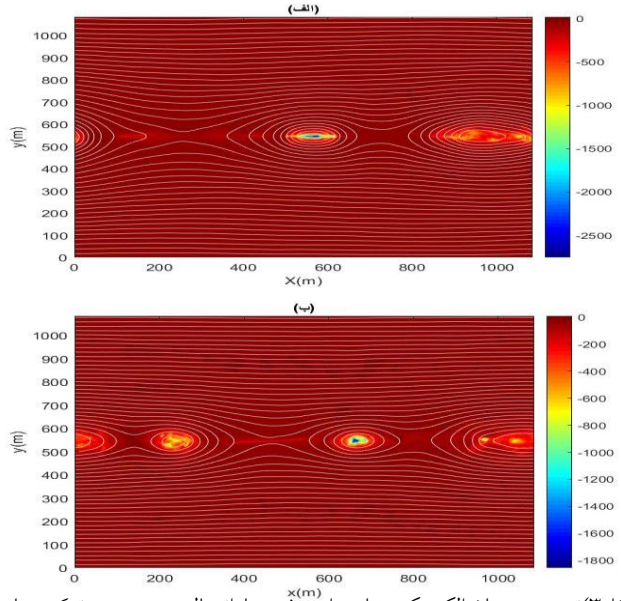
حضور میدان مغناطیسی در جهت z (میدان هدایت)می تواند باعث تغییر در روند شکل گیری و رشد جزایر مغناطیسی شود. همچنانکه در شکل (2) مشخص است بازاتصالی اویه با تاخیری 30 ثانیه ای در زمان $t=120$ ثانیه اتفاق افتاده است.

و دو جزیره مغناطیسی در دو طرف لایه جریان الکتریکی رشد می کنند و لایه جریان در زمان $t=180$ ثانیه (تصویر ب)با تاخیری 80 ثانیه ای دچار از هم گسیختگی می شود و تعدادی جزایر مغناطیسی تشکیل شده و فرآیند رشد و ادغام آنها شروع می‌شود. در زمان $t=400$ ثانیه همچنانکه در تصویر (ج) مشخص است تعداد چهار نقطه ایکس و به تبع آن پنج پلاسموئید شکل گرفته اند این در حالی است که در همین زمان و در غیاب میدان هدایت تنها دو نقطه ایکس و سه پلاسموئید تشکیل شده اند که عرض آنها 37.5 درصد بیشتر از پلاسموئیدهایی است که درهمین زمان و در حضور میدان هدایت ایجاد شده اند. میدان هدایت فرآیند ادغام را کندتر می‌کند به گونه ای که در زمان $t=600$ ثانیه فاصله بین دو جزیره در حال ادغام 16.55 درصد بیشتر از حالت مشابه فاقد میدان هدایت می باشد.

شکل(۳) تغییرات جریان الکتریکی خارج از صفحه بازاتصالی را در زمان $t=500$ ثانیه نشان می دهد. جریان الکتریکی خارج از صفحه در مرکز پلاسموئیدها کمترین مقدار خود را دارد و در پلاسموئیدهایی که در حال حرکت به سمت پلاسموئید بزرگتر هستند به حداقل می رسد وجود میدان هدایت باعث افزایش نسبی چگالی جریان الکتریکی خارج از صفحه بازاتصالی می شود.

نتیجه گیری

در این مقاله توسط شبیه سازی ذره در سلول توصیف جنبشی از پدیده بازاتصالی مغناطیسی و شکل گیری جزایرمغناطیسی در تاج خورشیدی ارایه شد و نشان داده شد که حضور میدان مغناطیسی در جهت z (میدان هدایت)می تواند باعث تغییر در روند شکل گیری و رشد جزایر مغناطیسی شود .میدان هدایت فرآیند ادغام را کند تر می کند و باعث افزایش نسبی چگالی جریان الکتریکی خارج از صفحه بازاتصالی می شود.



شکل۳)تصویر جریان الکتریکی خارج از صفحه بازاتصالی به صورت ترکیبی با خطوط میدان مغناطیسی در زمان $t=500$ ثانیه با الف)میدان هدایت صفر $(b_z=0)$ تسلا ، ب) میدان هدایت $b_z=(0.0025)$ تسلا

منابع

[1]- Masaaki Yamada, Russell Kulsrud, and Hantao Ji. Magnetic reconnection ,*Reviews of modern physics*, **82**, (2010), 08543.

[2]- Ellen G. Zweibel1 and Masaaki Yamada. Magnetic Reconnection in Astrophysical and Laboratory Plasmas . *Annual Review of Astronomy and Astrophysics* , **4**,(2009), 53706.

[3] P.A. Cassak·M.A. Shay, Magnetic Reconnection for Coronal Conditions: Reconnection Rates, Secondary Islands and Onset , *Space Science Reviews*, **172** , (2011) 283.

[4]-Feibin Fan, Can Huang, , The structures of magnetic islands formed during collisionless magnetic reconnections in a force-free current sheet, *Physics of plasmas*, **23**, (2016) 112106,

[5]- F. Wilson, T. Neukirch, M. Hesse. Particle-in-Cell Simulations of Collisionless Magnetic Reconnection with a Non-Uniform Guide Field, *Physics of Plasmas*, **23**, (2016), 032302

[6]- S. Markidis, P. Henri, G. Lapenta, , Collisionless magnetic reconnection in a plasmoid chain, Nonlin. *Processes Geophys*., **19**, (2012),145–153

[7]-Masaaki Yamada, Jongsoo Yoo, .Conversion of magnetic energy in the magnetic reconnection layer of a laboratory plasma , *Nature communication*, **5**, (2014), 4774.

[8]- Lorenzo Sironi, Dimitrios Giannios .Plasmoids in relativistic reconnection, from birth to adulthood: first they grow, then they go, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, **462**,(2016) 48

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بررسی خواص اپتیکی $FeSe_{0.5}Te_{0.5}$ با استفاده از نظریه تابعی چگالی

برزوئی ، مریم[۱] ؛ قربانی، شعبان رضا[۱]؛ واحدی فخرآباد ، داوود[۲]؛ عربی، هادی[۱]

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

[۲]گروه فیزیک، دانشگاه نیشابور، نیشابور

چکیده

در این مقاله خواص اپتیکی ترکیب $FeSe_{0.5}Te_{0.5}$ بررسی شده است. قسمت های حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک، ضریب های شکست و خاموشی، تابع اتلاف انرژی و بازتابندگی با استفاده از روش شبه پتانسیل در چارچوب نظریه تابعی چگالی و بر اساس تقریب شیب تعمیم یافته تعیین شده اند. با استفاده از نتایج بدست آمده برای طیف عبور فوتون، انرژی‌هایی که رفتار شفاف ماده در آن مشاهده می‌شود مشخص شدند و ضریب شکست ماده محاسبه شد. نتایج محاسبات نشان داد که خواص اپتیکی ترکیب $FeSe_{0.5}Te_{0.5}$ ناهمسانگرد است.

واژه های کلیدی: *نظریه تابعی چگالی، ساختار $FeSe_{0.5}Te_{0.5}$، خواص اپتیکی، کوانتوم اسپرسو*

Optical properties of $FeSe_{0.5}Te_{0.5}$ by density functional theory

Barzoei, Maryam[1]; Ghorbani, ShabanReza[1]; Vahedi Fakhrabad, Davoud[2];Arabi, Hadi[1]

[1]Department of Physics, Faculty of Science, Ferdowsi UniversityofMashhad, Mashhad
[2]Department of Physics, Nyshabur University, Nyshabur

Abstract

In this article, optical properties of $FeSe_{0.5}Te_{0.5}$such as real and imaginary part of dielectric function, refractive index and extinction, energy loss and reflectivity have been investigatedby using pseudo-potential method within the framework of density functional theory (DFT) with the generalized gradient approximation (GGA). The refractive index and thetransparent regions in photon spectrum were specified. The results of calculations show that the properties of $FeSe_{0.5}Te_{0.5}$ are anisotropic.

Keywords: *density functional theory, $FeSe_{0.5}Te_{0.5}$, Optical properties, Quantum Espresso*

مقدمه

کشف LaOFeAs در سال ۲۰۰۸، به عنوان یک ابررسانا دمای بالا، سرآغازی جهت مطالعات ابررساناهای پایه آهن شد [۱]. ترکیب $\alpha - FeSe$ ساده‌ترین ساختار را در بین ابررساناهای پایه‌آهن دارد. مطالعات تجربی انجام شده نشان داد که در ترکیب $FeSe_{1-x}Te_x$ با افزایش Te دمای بحرانی افزایش می‌یابد به طوری که ترکیب $FeSe_{0.5}Te_{0.5}$ با $T_c = 15K$ بیشترین دمای بحرانی را دارد. همچنین مشاهده شده است که افزایش بیشتر Te باعث کاهش دمای بحرانی می‌شود[۲].

خواص اپتیکی ترکیب $FeSe_{1-x}Te_x$ برای x=1 و x=0 بررسی شده است[۳و٤]. در این مقاله خواص این ترکیب برای x=0.5 بررسی می گردد.

روش محاسبات

بررسی ساختار اتمی و خواص اپتیکی ترکیب $FeSe_{0.5}Te_{0.5}$ با استفاده از نظریه تابعی چگالی بر مبنای روش شبه‌پتانسیل بر پایه موج تخت [۵] به کمک کد محاسباتی کوانتوم‌اسپرسو انجام شده است. شبه‌پتانسیل مورد استفاده از نوع شیب تعمیم یافته (GGA) می‌باشد. تقسیم بندی منطقه بریلوئن به روش منخورست-پک

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

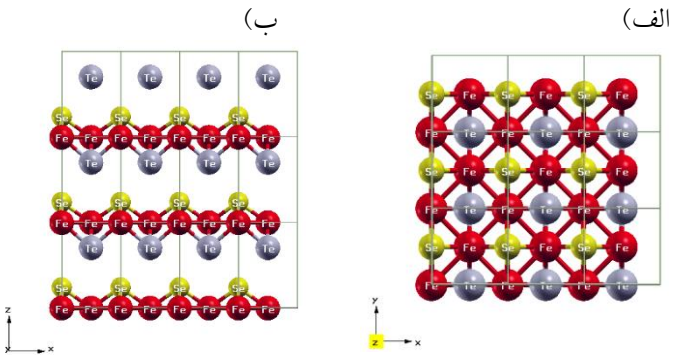
انجام شد. تعداد نقاط k بهینه برابر $10 \times 14 \times 14$ و انرژی قطع بهینه برابر 75 Ry درمحاسبات مورد استفاده قرار گرفته است. بازه انرژی جهت بررسی خواص اپتیکی از صفر تا 20 eV درنظرگرفته شده است.

نتایج و بحث

سلول واحد $FeSe_{0.5}Te_{0.5}$ با گروه فضایی P4/nmm دارای دو اتم آهن، یک اتم تلوریم و یک اتم سلنیم است. نتایج پارامترهای شبکه بهینه شده این ساختار در جدول ۱ آمده است که در توافق با نتایج نظری[٦] و تجربی[٧] بدست آمده توسط دیگران است. ساختار $FeSe_{0.5}Te_{0.5}$ پس از واهلش در شکل ۱ نمایش داده شده است.

جدول۱: پارامترهای شبکه ساختار $FeSe_{0.5}Te_{0.5}$

پارامتر شبکه	نتایج این پژوهش	نتایج نظری [٦]	نتایج تجربی [٧]
a (Å)	۳/۷۲۵۶	۳/۷۱۱۵	۳/۷۹۱۳
c (Å)	۵/۴۰۰۳	۵/۷۱۱۸	۵/۹۷۸۴



شکل۱: نمایش ساختار $FeSe_{0.5}Te_{0.5}$ الف) از نمای بالا ب)از نمای جانبی

تابع دی‌الکتریک یک تابع مختلط وتوصیف کننده خواص اپتیکی جامدات است و طبق رابطه زیر معرفی می‌شود:

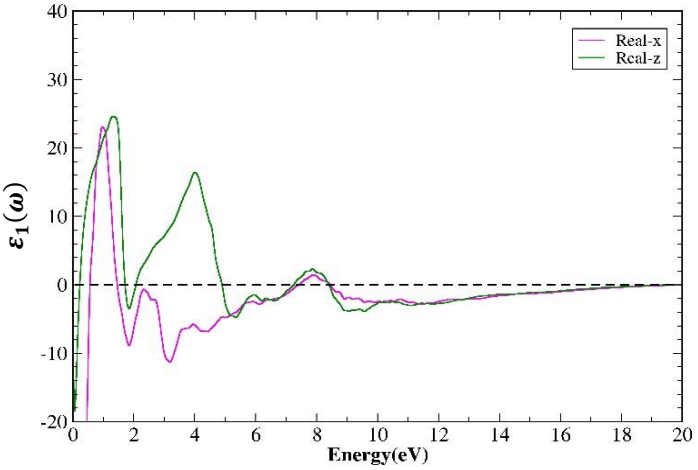
$$\varepsilon = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega) \quad (۱)$$

که قسمت حقیقی و قسمت موهومی توسط روابط کرامز-کرونیگ به هم مربوط می‌شوند. تمام ثابت های اپتیکی را می‌توان از روی نتایج به دست آمده برای قسمت های حقیقی و موهومی تابع دی-الکتریک تعیین کرد.

نمودار قسمت حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک در راستای x و z به ترتیب در شکل های ۲ و ۳ رسم شده است. نتایج نشان می-دهد که بخش های موهومی و حقیقی تابع دی‌الکتریک در دو راستای x و y بر هم منطبق اند. بنابراین این ساختار در صفحه x-y همسانگرد است.

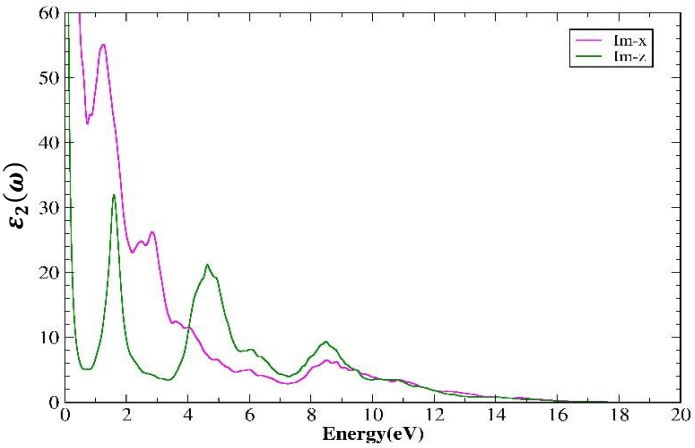
بخش موهومی تابع دی‌الکتریک $\varepsilon_2(\omega)$ جذب نور را نشان می-دهد و قله‌های موجود در نمودار آن نشان‌دهنده گذارهای اپتیکی بین نواری است. اولین قله $\varepsilon_2(\omega)$ نشان‌دهنده اولین گذار از نوار ظرفیت به نوار رسانش است که در راستای محور x در انرژی ۱.۲٦۱ eV و در راستای محور z در انرژی ۱.٥٩٤ eV ظاهر شده‌است. قسمت موهومی تابع دی الکتریک در انرژی های بالاتر از 18 eV صفر می‌شود بنابراین در این نواحی ماده تاریک است و هیچ موج الکترومغناطیس در آن نفوذ نمی‌کند و می‌توان از این ماده در این انرژی ها به عنوان یک ماده جاذب استفاده کرد.

با توجه به شکل ۲ نمودار سهم حقیقی تابع دی الکتریک در بازه-های زیادی از انرژی منفی است. در ناحیه‌هایی که $\varepsilon_1(\omega)$ منفی است امواج منتشر نمی‌شوند و فرآیندهای جذب و اتلاف صورت می‌گیرد.



شکل۲: قسمت حقیقی تابع دی الکتریک ساختار $FeSe_{0.5}Te_{0.5}$ در جهت محورهای x و z

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



شکل۳: قسمت موهومی تابع دی الکتریک ساختار $FeSe_{0.5}Te_{0.5}$ در جهت محورهای x و z

ضریب شکست یک تابع مختلط بوده و از رابطه زیر محاسبه می-شود:

$$N(\omega) = n(\omega) + ik(\omega) \quad (۲)$$

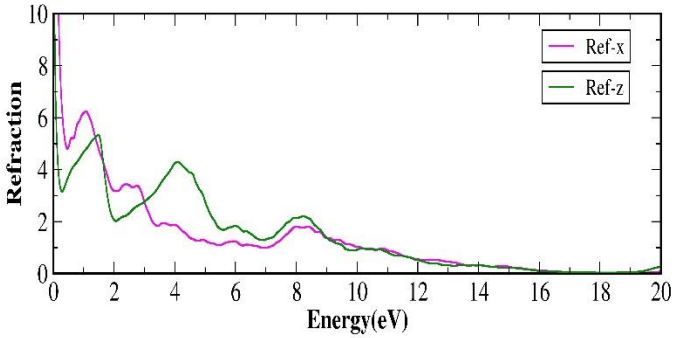
که در آن $n(\omega)$ قسمت حقیقی ضریب شکست و $k(\omega)$ قسمت موهومی ضریب شکست یا همان ضریب خاموشی است. ضریب خاموشی معیاری از میزان جذب امواج الکترومغناطیس توسط ماده است. ضریب خاموشی پایین نشان‌دهنده این است که امواج الکترومغناطیس به آسانی از داخل ماده عبور می‌کنند [۸]. نتایج بدست آمده برای ضریب‌های شکست و خاموشی در شکل‌های ٤ و٥ رسم شده اند.

مقدار بخش حقیقی ثابت دی‌الکتریک در انرژی صفر معرف ثابت دی‌الکتریک استاتیک $\varepsilon_1(0)$ می‌باشد که مطابق رابطه ۳ جذر آن را ضریب شکست استاتیک $n(0)$ می‌گویند.

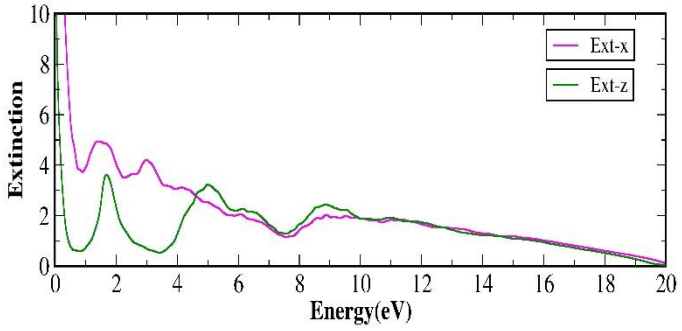
$$n(0) = \sqrt{\varepsilon_1(0)} \quad (۳)$$

مقادیر به دست آمده برای ثابت دی الکتریک استاتیک و ضریب شکست استاتیک در راستای محور x به ترتیب برابر۱٦۲.۱۲٥ و ۱۲.۷۳۲ و درراستای محور y برابر ٤.۲۰٦- و ۲.۰٥۰ هستند.

اگر ضریب شکست با افزایش فرکانس افزایش یابد این رفتار پاشندگی بهنجار و اگر شیب ضریب شکست منفی باشد پاشندگی نابهنجار گفته می‌شود [۹]. باتوجه به شکل ٤ ضریب شکست با افزایش انرژی رو به کاهش است بنابراین ماده پاشندگی نابهنجار دارد و در انرژی های بالاتر از 18 eV از شفافیت کمی برخوردار است. برای انرژی‌های بالاتر از 18 eV ضریب خاموشی نزدیک به صفر می‌شود یعنی ماده جاذب خوبی است که با نمودار قسمت موهومی تابع دی الکتریک همخوانی دارد.



شکل٤: قسمت حقیقی ضریب شکست ساختار $FeSe_{0.5}Te_{0.5}$ در جهت محورهای x و z



شکل٥ قسمت موهومی ضریب شکست ساختار $FeSe_{0.5}Te_{0.5}$ در جهت محورهای x و z

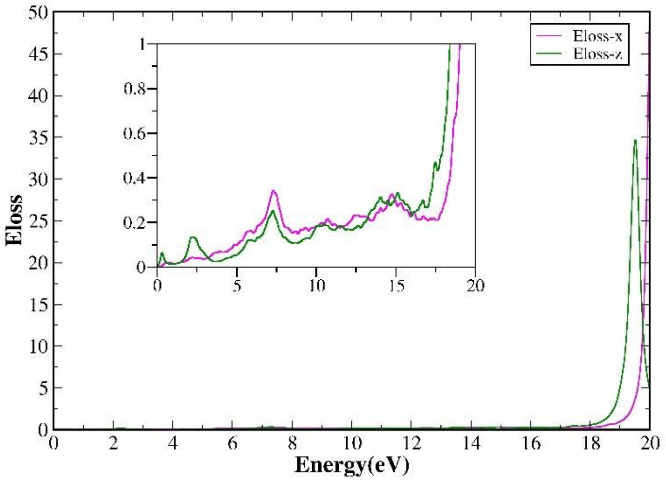
تابع اتلاف انرژی یکی از مهم ترین کمیت ها به منظور بررسی خواص ماکروسکوپی و میکروسکوپی جامدات می‌باشد. تابع اتلاف انرژی متناسب با احتمال اتلاف انرژی در واحد طول برای یک الکترون در حال عبور از محیط است. رابطه تابع دی الکتریک و تابع اتلاف انرژی به صورت زیر است:

$$L_{ij}(\omega) = -Im\left(\frac{1}{\varepsilon_{ij}(\omega)}\right) \quad (٤)$$

نتایج به دست آمده برای اتلاف در شکل ٦ نشان داده شده است. همان طور که در شکل ٦ مشاهده می‌شود چندین قله در تابع اتلاف وجود دارد. شاخص ترین قله در تابع اتلاف به عنوان پیک

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

پلاسمونی شناخته می‌شود که نشان‌دهنده برانگیختگی های جمعی چگالی بار در بلور است[۱۰]. پیک پلاسمونی در راستای محور x در انرژی ۱۹.۵۱ eV و در راستای محور z در انرژی ۲۰ eV قرار دارد.

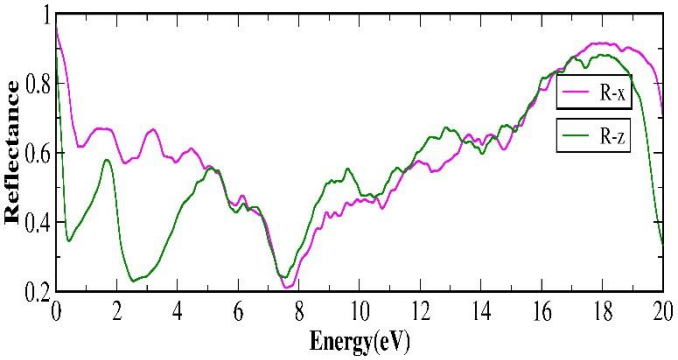


شکل۶: اتلاف انرژی ساختار $FeSe_{0.5}Te_{0.5}$ در جهت محورهای x و z

ضریب بازتاب نشان دهنده شدت موج بازتابیده نسبت به موج پیشامد است و طبق رابطه زیر به دست می آید:

$$R(\omega)=\left|\frac{\sqrt{\varepsilon(\omega)}-1}{\sqrt{\varepsilon(\omega)}+1}\right|^2 \quad (۵)$$

نمودار طیف بازتابندگی در شکل ۷ رسم شده است. با مقایسه شکل ۷ و شکل ۲ می‌توان به این نتیجه رسید در انرژی‌هایی که تابع دی‌الکتریک مقداری کمتر از صفر دارد مقدار بازتاب انرژی زیاد است زیرا در این انرژی ها، نور در داخل بلور منتشر نمی‌شود.



شکل۷: طیف بازتابی ساختار $FeSe_{0.5}Te_{0.5}$ در جهت محورهای x و z

نتیجه گیری

در این پژوهش خواص اپتیکی ساختار $FeSe_{0.5}Te_{0.5}$ در سه راستای x و y و z مطالعه شده است. محاسبات برپایه نظریه تابعی چگالی بر اساس روش شبه پتانسیل با تقریب شبه‌پتانسیل از نوع شیب تعمیم یافته نشان داد که از ترکیب $FeSe_{0.5}Te_{0.5}$ در انرژی های بالاتر از ۱۸ eV می‌توان به عنوان ماده جاذب استفاده کرد. ضریب شکست استاتیکی این ترکیب در راستای x برابر ۱۲.۷۳۲ و در راستای z برابر ۲.۰۵۰ تعیین گردید. پیک پلاسمونی در راستای محور x در انرژی ۱۹.۵۱ eV و در راستای محور z در انرژی ۲۰ eV رخ می‌دهد. همچنین نتایج به دست آمده نشان‌دهنده غیرهمسانگردی ماده در راستاهای x و z می‌باشد.

مرجع‌ها

[۱] Y. Kamihara, T. Watanabe, M. Hirano, H. Hosono, J.Amer. *Chem. Soc*. **130**(2008), 3296

[۲] K.W. Yeh, H.C. Hsu, T.W. Huang, P.M. Wu,Y.LHung, T.K. Chen, J.Y. Luo,andM.K.Wu, *J. Phys. Soc. Jpn*,**77**(2008), 19-22.

[۳] الحنتوشی, احمدموسی؛ قربانی، شعبان‌رضا؛ عربی، هادی؛ واحدی فخرآباد، داود: «مطالعه نظری خواص اپتیکی ساختار FeTe با استفاده از محاسبات اصول اولیه»، *اولین کنفرانس ملی شیمی کاربردی و نانوشیمی*، گناباد، مجتمع آموزش عالی گناباد، ۱۳۹۷.

[٤] جوادالبدیری, رافد؛ قربانی،شعبان‌رضا؛ عربی،هادی؛ واحدی فخرآباد، داود:«مطالعه نظری خواص اپتیکی ساختار FeSe با استفاده از نظریه تابعی چگالی»، *اولین کنفرانس ملی شیمی کاربردی و نانوشیمی*، گناباد، مجتمع آموزش عالی گناباد، ۱۳۹۷.

[۵] W. Kohn and L. J. Sham, *Phys. Rev. A*, **140** (1965) 1133-1138.

[۶] S.Chandra, A.K.M.A. Islam , arXiv:1008.1448v1

[۷] R.W. Gomez, V. Marquina, J.L. Perez-Mazariego, R. Escamilla, R. Escudero, M. Quintana, J.J. Hernandez-Gomez, R.Ridaura, M.L. Marquina*JSupercond.Nov. Magn.***23**(2010) 551-557.

[۸] ریتس؛ میلفورد؛کریستی: «*مبانی نظری الکترومغناطیس*» ترجمه جلال صمیمی، مرکز نشر دانشگاهی، ۱۳۸۵.

[۹] پدورتی، فرانک ال؛پدورتی، لئون اس: «*آشنایی با اپتیک*»، ترجمه محی الدین شیخ الاسلامی، مرکز نشر دانشگاهی، ۱۳۸۲.

[۱۰] ابراهیمی، ثمین؛ هاشمی زاده عقدا، سیدعلی: «مطالعه خواص اپتیکی ترکیبات چهارتاییAlInGaN»، *فصلنامه اپتوالکترونیک*، **سال اول**، ۲۸-۲۱، تابستان ۱۳۹۵.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

گرمایش دینامیکی ناشی از برخورد Au-Au در انرژی RHIC با استفاده از ادغام مدل های EPOS و PHSD

جعفرپور، محبوبه[۱] ؛ براتکواسکایا، النا[۲] ؛ ورونیوک، ودیم[۳] ؛ ورنر، کلاوس[۴]

[۱،۴] دانشگاه نانت، آی ام تی اتلانتیک، سوباتک، نانت، فرانسه

[۲] گروه فیزیک نظری، دانشگاه جان ولفگنگ گوته، فرانکفورت، آلمان

[۳] گروه مشترک فیزیک هسته ای، دوبنا، مسکو، روسیه

چکیده

در این مقاله، از یک مدل پیچیده EPOS برای تعیین توزیع اولیه ماده (پارتون / هادرون) و سپس از PHSD برای تحول ماده با یک روش غیر تعادلی استفاده می شود. درک مراحل اولیه واکنش یونهای سنگین تأثیر قابل توجهی بر روی دینامیک کامل سیستم از جمله تشکیل، خواص و گرمایش پلاسمای کوارکی و گلوئونی و نهایتاً برهمکنشهای هادرونی دارد. درک میکروسکوپی از مرحله اولیه برخورد یونهای سنگین یک مساله پیچیده است، از این نظر، مدلهای EPOS و PHSD یک فرصت عالی برای رفع این مشکل فراهم کرده اند. در آخر، نتایج حاصل از EPOS + PHSD را نشان خواهیم داد.

واژه های کلیدی: *ایپوس، پی اچ اس دی، آر اچ آی سی، اچ آی سی اس*

Dynamical thermalization of Au-Au collision at RHIC energy using merging of EPOS and PHSD models

Jafarpour, Mahbobeh[1]; Bratkovaskaya, Elena[2]; Voronyok, Vadym[3]; Werner, Klaus[4]

[1,4] SUBATECH, University of Nantes- IN2P3/CNRS, Nantes,France
[2] Institute for Theoretical Physics, Johann Wolfgang GoetheUniversit¨at, Frankfurt am Main, Germany
[3]Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Moscow region, Russia

Abstract

In this paper, we endeavor to employ a sophisticated EPOS approach to determine the initial distribution of matter (partons/hadrons) and then use PHSD for the evolution of matter in a non-equilibrium transport approach. The perception of the initial phases of heavy-ion reactions has a significant impact on the entire dynamics – including the Quark-Gluon-Plasma (QGP) formation, QGP properties, approach to thermalization of the QGP and final hadronic interactions. The microscopic understanding of the initial phase of heavy-ion collisions is an intricate dilemma, in this respect, the EPOS and PHSD approaches provide a unique possibility to address this problem. Finally, we desire to show the EPOS+PHSD results.

***Keywords**: EPOS, PHSD, RHIC, HICs*

مقدمه

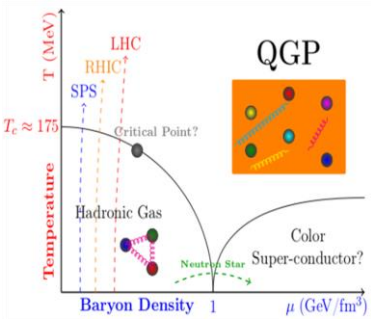
برهمکنش بین کوارکها و گلوئونها (پارتونها) توسط نظریه برهمکنش قوی (QCD) در مدل استاندارد توصیف می شود. یکی از پارامترهایی که در این نظریه حائز اهمیت می باشد، ثابت جفت شدگی α_s است که قدرت برهمکنش را نشان می دهد. بر این اساس پارتونها به صورت مجموعه‌ای به نام هادرون تعریف می شوند و هیچ پارتونی در طبیعت به صورت آزاد وجود نخواهد داشت. تحولات QCD با استفاده از معادلات DGLAP به صورت زیر تعریف می شود:

$$\alpha_s(Q) = \frac{12\,\pi}{(11\,N_c - 2\,N_s)\ln(Q^2/\Lambda^2_{\mathrm{QCD}})}$$

Λ^2_{QCD} مقیاس QCD می‌باشد. بر اساس این معادله در تکانه‌های انتقالی کمتر Q، انرژی پتانسیل و جفت شدگی بین پارتونها افزایش می‌یابد. از طرفی دیگر، در تکانه‌های بالاتر این انرژی و جفت شدگی کاهش می‌یابد که در این شرایط پارتونها به صورت تقریبی

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

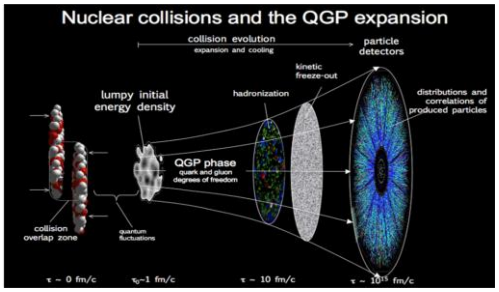
آزاد و مستقل می‌باشند. همانطور که در شکل ۱ فازهای مختلف یک ماده هسته‌ای نشان داده می‌شود، فاز ماده بر اساس دو متغیر دما و تراکم باریونی μ تغییر می‌کند.



شکل ۱: فازهای مختلف ماده هسته‌ای.

در دما و μ پایین، جفت شدگی بین پارتونها به شدت بالا می‌رود و ماده هسته‌ای یا هادرونی را تشکیل می‌دهند حال آنکه در μ بالا و دمای‌های بالاتر از ۲۰۰ GeV طبق قضیه آزادی تقریبی ماده به شکل پلاسمای کوارکی و گلوئونی (QGP) تعریف می‌شود [۱]. که بیش از سی سال تحت بررسیهای شتاب دهنده‌های مختلفی از جمله SPS، RHIC و LHC قرار گرفته است [۲].

در آزمایشگاه برای ساخت QGP از برخورد یونهای سنگین از جمله اتم طلا یا اتم سرب استفاده می‌شود. تحول فضا-زمان از برخورد یون‌های سنگین (HIC) توسط نظریه بورکن مدل سازی شده است [۳] (شکل ۲).



شکل ۲: تحول فضا-زمان ناشی از برخورد یون های سنگین.

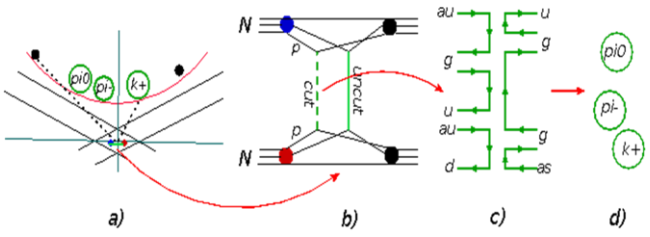
اگر این تحول را از ابتدا دنبال کنیم، ماده بر اساس مراحل مختلف تحول پیدا می‌کند که به ترتیب به صورت زیر می‌باشد ۱- برخورد اولیه و قبل از تعادل ۲- پلاسمای کوارکی گلوئونی و فاز هیدرودینامیکی ۳- حالت مخلوط هادرونی و پارتونی ٤- گاز هادرونی ٥- شکل‌گیری نهایی هادرونی که تمام برخوردهای الاستیک و غیر الاستیک به پایان می‌رسد. با استفاده از این برخوردها، اطلاعات زیادی در ارتباط با نحوه‌ی شکل‌گیری و خواص QGP بدست آمده است، اما همچنان سؤالات زیادی در ارتباط با گرمایش باقی‌مانده است. دینامیک سیستم بسیار پیچیده است و همانطور که ذکر شد باید مراحل مختلفی مورد بررسی قرار گرفته شود. همچنین درک میکروسکوپی از فاز اولیه برخورد یونهای سنگین یک مشکل پیچیده است زیرا ماده تولید شده در طول نفوذ دو هسته از طریق یکدیگر در انرژی‌های بالا، به دور از تعادل است. بنابراین این موضوع را نمی‌توان با مدل‌های معمولی HIC مانند مدل‌های آماری یا هیدرودینامیکی که بر اساس فرضیات تعادل کلی یا جزیی است، مورد بررسی قرار داد. مدلهای مختلف دارای درجه‌های مختلف پیچیدگی در مراحل مختلف (برخورد اولیه ، تحول ، تشکیل هادرون بعد از پلاسما یا هادرونیزاسیون) هستند. از این نظر مدل های EPOS و PHSD یک امکان منحصربفرد برای پاسخ به این سؤال ارایه می‌دهند [٤و٥]. هرچند تحول در هر دو مدل کاملاً متفاوت است، اما در بسیاری از موارد می‌بینیم که در پایان نتایج یکسانی داریم. در قسمت اول کار، از برخورد اولیه EPOS استفاده می‌شود به دلیل اینکه EPOS یک مولد تولید رویداد بسیار موفق است که از مانتی کارلو استفاده می‌کند، همچنین یک مدل جامع برای همه برخوردها با انرژی‌های مختلف RHIC(۷/۷ GeV) تا LHC (۱۳ TeV) است. سپس ما از تحول فضا-زمان PHSD استفاده می‌کنیم تا ادامه شبیه‌سازی را انجام دهیم.

برخورد اولیه با استفاده از EPOS

تئوری اصلی درون EPOS, PBGRT است [٦]، همانطور که از نام آن پیداست، این روش شامل ادغام بین نظریه پارتونی و نظریه (GRT) است. به طور خلاصه، این مدل تعریف کاملی از فرآیندهایی با انرژی کم و زیاد و همچنین محاسبه سطح مقطع الاستیک و غیرالاستیک با تقسیم انرژی از طریق تبادل چند پامرون است. هر پامرون به عنوان برخورد اولیه بین پارتون یا هادرون تعریف می‌شود. دو نوع پامرون باز و بسته وجود دارد (شکل ۳ب، خط چین و خط سبز). مورد اول برای تولید ذرات و مورد دوم برای محاسبه سطح مقطع استفاده می‌شود. نقاط آبی و قرمز شرکت کنندگان (پروتون یا نوترون) در پرتابه یا هدف و نقاط سیاه به عنوان ذرات رمنانت شناخته می‌شوند. بر اساس پامرون باز می‌توان

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

نمودار جریان رنگ (شکل۳ث) را ساخت و ارتباط رنگی بین پارتون‌های پرتابه و هدف را رسم کرد. این مرحله پایه پیش هارونیزاسیون نامیده می‌شود و منجر به تولید هادرونها در هایپربولا می‌شود (شکل ۳آ و ۳د).

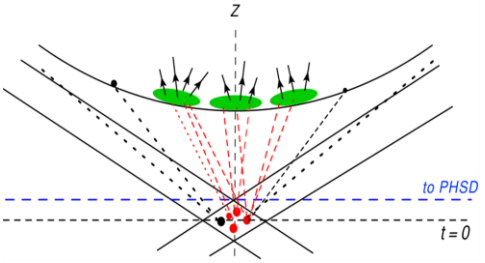


شکل ۳: از پامرون تا تشکیل هادرون در ناحیه هایپربولی.

در پایان، ما تعداد زیادی هادرون در ناحیه هایپربولی داریم که در نواحی شامل تعداد هادرون بالا، هپوشانی و تعامل بین هادرون‌ها خواهیم داشت که اصطلاحاً به آن‌ها روپ گفته می شود. روپ نیز مانند هادرون‌های معمولی می‌باشد، با این تفاوت که دارای تکانه عرضی و انرژی بیشتر است. به منظور آماده‌سازی تحول برای PHSD، باید روپ‌های شکل گرفته را به ذرات کوچکتری به نام پیش–هادرون فروپاشی کرد. برای این کار از روش میکروکانونیکی استفاده می‌شود که قادر به محاسبه احتمال تولید ذرات آماری کامل بر اساس قوانین پایستگی مانند طعم، انرژی و تکانه می‌باشد. سرانجام، می‌توان از این پیش–هارونها به عنوان ذرات ورودی و شروع تحول در PHSD استفاده کرد.

چگونه می‌توان پیش–هادرون‌ها را وارد PHSD کرد؟

تفاوت اصلی بین این دو مدل در تحقق مربوط به این واقعیت است که EPOS از دینامیک مخروط نوری (در مختصات مایلز) استفاده می‌کند، در حالی که PHSD از دینامیک زمان واقعی (در مختصات مینکوفسکی) استفاده می‌کند. بنابراین، وارد کردن ذرات از EPOS به PHSD یک فرآیند پیچیده است به این دلیل که پیش–هادرونها در EPOS درمختصات فضا–زمان بر روی یک هایپربولا تولید می‌شوند، و آنها باید با در نظر گرفتن والدین، مجدداً خارج شوند. به همین منظور، رابط کاربری ویژه EPOS2PHSD انجام می‌شود که امکان انتقال بین دو کد را فراهم می‌کند. در رابط کاربری، ما همه انواع ذرات (تماشاگر یا به عبارتی ذراتی که در برخورد شرکت نمی‌کنند، ذرات با انرژی زیاد، رمانتها، روپ‌ها و والدین و فرزندانشان و غیره) و مشخصاتشان را که EPOS در ناحیه هایپربولی تولید کرده است را ذخیره می‌کنیم (شکل ٤)، سپس آنها را به طور مستقیم و غیرمستقیم در آرایه‌های PHSD وارد می‌کنیم. ذراتی همانند تماشاگرها، ذرات با انرژی بالا وارد اولین پلکان زمانی PHSD می‌شوند، اصطلاحاً این ذرات پیش–هادرون کرونا نامیده می‌شوند. دسته دوم ذرات که مربوط به روپ‌ها هستند باید والدین و فرزندانشان مورد بررسی قرار بگیرند، در اینجا یک شرط وجود دارد، چنانچه میانگین چگالی انرژی مربوط به والدین یک مجموعه روپ، بیشتر از چگالی انرژی بحرانی(GeV ۰/۵) باشد، سپس فرزندان این مجموعه به عنوان پیش–هادرون وارد دومین پلکان زمانی در PHSD می‌شوند که این ذرات به عنوان پیش–هادرون کور شناخته می‌شوند و در QGP ذوب می‌شوند.



شکل ٤: تشکیل ذرات در ناحیه هایپربولی، بیضی‌های سبز رنگ مربوط به مجموعه روپ‌ها، نقاط قرمز مربوط به والدین و فلشهای سیاه مربوط به فرزندان همچنین نقاط سیاه مربوط به ذرات با انرژی بالا می‌باشند. خط چین آبی مربوط به زمانی است که تحول فضا–زمان توسط مدل PHSD آغاز می‌شود.

تحول فضا–زمان در PHSD

PHSD یک رویکرد دینامیکی کووارینت میکروسکوپی برای سیستم‌های برهمکنش قوی است که براساس معادلات کادانوف–بایم فرمول بندی شده است [۷]. پس از ذوب پیش–هادرونها در QGP به صورت کوارک و گلوئونهای آزاد، رفتار پارتونها در پلاسما توسط مدل ذرات گوسی دینامیکی (DQPM) توصیف می‌شود [۸]. پارتونها در این قسمت می‌توانند به طور الاستیک و غیر الاستیک با هم برخورد داشته باشند و همچنین سطح مقطع، چگالی و دمای آنها نیز قابل اندازه‌گیری می باشد. با گذشت زمان و خنک شدن سیستم، پارتونها به هم می‌چسبند و هادرونیزاسیون انجام می‌گیرد. تا زمانی که هادرونها انرژی کافی داشته باشند با هم

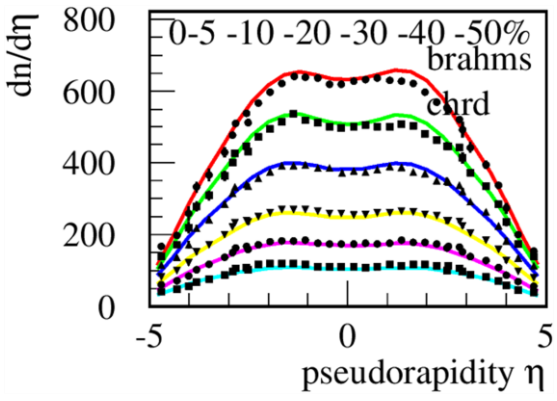
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

برخورد می‌کنند و ذرات جدیدی را تولید می‌کنند. در ادامه نتایج حاصل از برخورد اتمهای طلا را در انرژی مرکز جرم ۲۰۰ GeV نشان داده خواهد شد.

نتیجه گیری

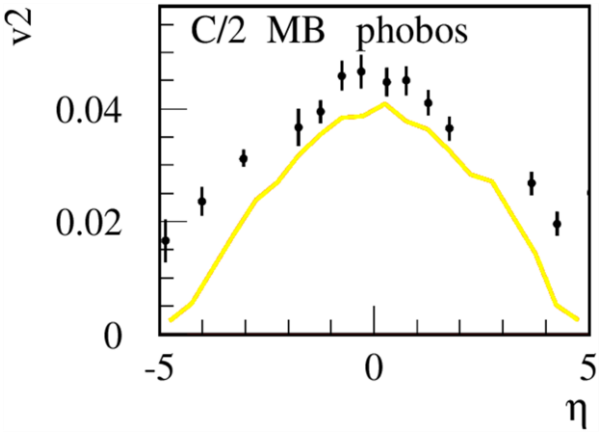
یک روش ساده برای مطالعه پلاسما و گرمایش سیستم، بررسی تعداد ذرات تولید شده در گروه های سنترالیتی مختلف می‌باشد. سنترالیتی‌های کوچکتر به معنی برخورد یونها با بیشترین تعداد نوکلیون می‌باشد. همانطور که در شکل ۵ دیده می‌شود. درمحدوده سنترالیتی بین صفر تا ۵ بیشترین مقدار تولید ذرات باردار را داریم و با افزایش محدوده سنترالیتی این تعداد کاهش پیدا می‌کنند. تولید ذرات بیشتر به معنی برهمکنش های بیشتر در پلاسما می‌باشد که خود نشانگر نزدیکی سیستم به گرمایش مطلوب می‌باشد. همانطور که دیده می‌شود نتایج حاصل از شبیه سازی مدل EPOS+PHSD به نتایج واقعی بسیار نزدیک است.

دومین پارامتری که مورد بررسی قرار گرفته شد "جریان بیضوی v_2" است که یک مشاهده پذیر هارونیکی منحصر به فرد است که اطلاعات مستقیمی را درباره مرحله QGP ارائه می‌دهد. جریان بیضوی، دومین هارمونیک است که به طور معمول با ضریب فوریه $v_n \leq \cos(n[\Phi - \Psi_{RP}])$ برای $n = 2$ مشخص می‌شود. اطلاعات بیشتر در مورد جریان بیضوی در این مرجع آورده شده است [۱۰]. همانطور که در شکل ٦ قابل مشاهده است روش جدید ما قادر به تولید ذرات و محاسبه مقدار v_2 نزدیک به داده های واقعی می‌باشد.



شکل ۵: تولید ذرات باردار براساس سنترالیتی‌های مختلف به عنوان تابعی از مید-رپیدیتی. نقاط سیاه رنگ مربوط به داده‌های واقعی گرفته شده از آزمایش براهامز [۹] می‌باشد. رنگ قرمز مربوط به کلاس سنترالیتی صفر تا ۵ می‌باشد. همینطور از بالا به پایین کلاس سنترالیتی از صفر به ۵۰ افزایش می یابد.

به طور خلاصه در روش EPOS + PHSD ، ما از روش پراکندگی اولیه EPOS استفاده کردیم تا پیش-هادرون ها را برای پیوند PHSD تولید کند و سپس از تحول فضا-زمان مبتنی بر دینامیک PHSD استفاده کردیم. مقایسه از طریق تحول تعادلی با یک رویکرد غیر تعادلی در PHSD ، اطلاعات کاملاً جدید و موردنیاز درباره آنچه را که ما می توانیم از داده های تجربی امروزه



شکل ٦: جریان بیضوی بر حسب میدرپیدیتی برای تمام کلاس‌های سنترالیتی از صفر تا۱۰۰ و ذرات باردار.

در مورد وجود یک گرمایش پلاسما نتیجه بگیریم ، فراهم می کند.

مرجع ها

[1] H. A. Grunder, C. W. Leemann; "Relativistic Heavy Ion Accelerators"; 10th International Conference on High-Energy Accelerators, HEACC 1977, v.1-2: Protvino, USSR, July 11-17, 977.
[2] N. Cabibbo and G. Parisi; "Exponential Hadronic Spectrum and Quark Liberation"; Phys. Lett. 59B:67-69, 1975.
[3] J. D. Bjorken; "Highly Relativistic Nucleus-Nucleus Collision"; Phys. Rev., D27:140-151,1983.
[4] K. Werner et al; "EPOS LHC: Test of collective hadronization with data measured at the CERN Large Hadron Collider"; Phys. Rev. C 92 (2015) 034906.
[5] W. Cassing and E. L. Bratkovskaya; "Parton transport and hadronization from the dynamical quasiparticle point of view"; Phys. Rev. C78, 034919.
[6] H. J. Drescher, K. werner et al; "Parton based Gribov-Regge theory"; Phys. Pept., 350:93-289,2001.
[7] W Cassing, E. L. Bratkovskaya; "Parton-Hadron-String Dynamics: an off-shell transport approach for relativistic energies"; Nucl. Phys. A 831 (2009) 215-242.
[8] W. Cassing; "Dynamical quasiparticles properties and effective interactions in the sQGP"; Nucl. Phys. A795, 70–97 (2007).
[9] I. Arsene et al; "(BRAHMS)"; Nucl. Phys. A757, 1 (2005).
[10] R. Snellings; "Elliptic Flow: A Brief Review"; New J. Phys., 13:055008, 2011.

Contact:
jafarpou@subatech.in2p3.fr (Mahbobeh Jafarpour)
werner@subatech.in2p3.fr (Klaus Werner)

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

شبیه سازی مونت کارلوی طیف پرتوی ایکس شتابدهنده Linatron mi-6 برای دو انرژی ٤ و ٦ MeV با استفاده از کد MCNPX

غائبی، میثم[۱]؛ تاجیک، مجتبی[۱]؛ عظیمی راد، روح اله[۲]

[۱]دانشکده فیزیک، دانشگاه دامغان، دامغان

[۲]دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی مالک اشتر تهران، تهران

چکیده

Linatron mi-6 که در حدود یک دهه است به بازار معرفی شده است، چشمه پرتوی ایکس استاندارد برای بازرسی محموله‌ها است. این شتابدهنده، پالسهای پرتوی ایکس پی در پی با دو انرژی ٦ و ٤ مگاالکترون ولت تولید می‌کند که با یک بار عبور از یک محموله، امکان تفکیک مواد را فراهم می‌آورد. برای بررسی عملکرد سیستم‌های تصویربرداری و مطالعه فرایند تشکیل تصویر، شناخت طیف خروجی پرتوی ایکس ضروری است. هدف از این مطالعه، بدست آوردن طیف پرتوی ایکس خروجی این شتابدهنده در دو انرژی ذکر شده با استفاده از شبیه‌سازی مونت کارلو توسط کد MCNPX است. بدین منظور اجزای شرکت‌کننده در تولید و شکل‌دهی باریکه پرتوی ایکس Linatron mi-6 با هندسه و ترکیب مواد واقعی شبیه‌سازی شد. طیف خروجی محاسبه شده در هر دو مد انرژی در سطح خروجی شتابدهنده کاملا غیر یکنواخت است، بطوریکه شدت فوتون‌ها در فاصله حدود ۱۷ تا ۲۳ سانتیمتری از پایین موازی‌ساز دوم بیشینه بوده و با افزایش فاصله از این نقطه کاهش می‌یابد. یافته‌های این تحقیق در بهینه‌سازی استفاده از این دستگاه و رسیدن به قدرت مطلوب تفکیک مواد مختلف نقشی اساسی دارند.

واژه های کلیدی: *Linatron mi-6، شبیه سازی مونت کارلو، شتابدهنده، طیف پرتوی ایکس*

Monte Carlo simulation of the X-ray spectrum from Linatron mi-6 accelerator in 4 and 6 MeV energies using MCNP code

Ghaebi, Meysam[1]; Tajik, Mojtaba[1]; Azimirad, Rouholah[2]

[1] School of physics, Damghan University, Damghan
[2] Department of Physics, Malek Ashtar University of Technology, Tehran

Abstract

Linatron mi-6 which has been introduced about one decade ago, is the standard X-ray source for cargo inspection. This accelerator generates 4 and 6 MeV dual energy X-ray pulses that provides material discrimination possibility with one pass through the cargo. In order to investigate the performance of radiography systems and studying image production process, characterisation of the exit X-ray spectrum is necessary. This study aims at obtaining output X-ray spectrum of this accelerator in two energy modes using Monte Carlo simulation by the MCNPX code. For this purpose, components contributing in production and collimation of the X-ray beam from Linatron mi-6 was simulated with realistic geometry and material compositions. Output spectra calculated at both energy modes at the accelerator's exit surface are non-uniform, so that photon intensity at 17 to 23 cm distance from the down side of the secondary collimator is maximum and it is decreasing with increasing distance from this point. This information is essential for the optimized use of the system and to reach desired discrimination ability of various materials.

***Keywords**: Linatron mi-6, Monte Carlo simulation, Accelerator, X-ray spectrum*

PACS No. 23

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد

http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مقدمه

تصویر برداری با پرتوی ایکس یا همان پرتونگاری، کاربردهای شناخته شده‌ای در پزشکی، صنعت، بازرسی امنیتی و پژوهش‌های علمی دارد. در هر یک از این شاخه‌ها، نیازمندی‌های مشخصی وجود دارند که در عمل، تعیین کننده انرژی پرتوی ایکس، سیستم‌های آشکارسازی، روش‌های پردازش تصویر و مدت زمان تصویربرداری است. یکی از مهم‌ترین کاربردهای پرتونگاری، تصویربرداری از محموله‌های با اندازه بزرگ برای تشخیص مواد ممنوعه مانند مواد منفجره، مواد مخدر، مواد هسته‌ای، شیلدهای با چگالی بالا برای پرتوها و غیره است. چنین محموله‌هایی ممکن است اندازه‌هایی تا چندین متر و چگالی‌هایی تا چندین هزار کیلوگرم بر متر مکعب داشته باشند. برای تصویربرداری از چنین اشیاء بزرگی، پرتوهای ایکس پر انرژی با قابلیت نفوذ بالا مورد نیاز است. پرتوهای ایکس با انرژی در محدوده مگاالکترون ولت برای این منظور مناسب بوده و چنین تکنیک تصویربرداری، پرتونگاری مگاولتاژ[1] نامیده می‌شود.

جنبه مفید دیگر تصویربرداری پرتوی ایکس، امکان جداسازی مواد با عدد اتمی موثر و چگالی‌های مختلف است. به منظور تفکیک مواد از یکدیگر، باید دو تصویر پرتوی ایکس از سوژه در دو انرژی مختلف، تنها در یک تصویربرداری بدست آید. این روش تصویربرداری، پرتونگاری دو انرژی[2] نامیده می‌شود [۱]. به این دلیل که مواد مختلف مقادیر متفاوتی از تضعیف در برابر پرتوهای ایکس کم انرژی و پرانرژی نشان می‌دهند، قدرت تفکیک مواد با مقایسه نسبت تضعیف پرتوهای ایکس کم انرژی به پرانرژی بدست می‌آید.

Linatron mi-6 یک شتابدهنده مورد استفاده در سیستم‌های تصویربرداری دو انرژی است که در حال حاضر بطور گسترده در حال استفاده است [۲]. هدف از این مطالعه شبیه‌سازی مونت کارلوی طیف خروجی پرتوی ایکس این شتابدهنده با استفاده از کد MCNPX به منظور استفاده در فاز تحقیقاتی بعدی برای مطالعه تشکیل تصویر و قدرت تفکیک مواد توسط این شتابدهنده است.

روش شبیه سازی

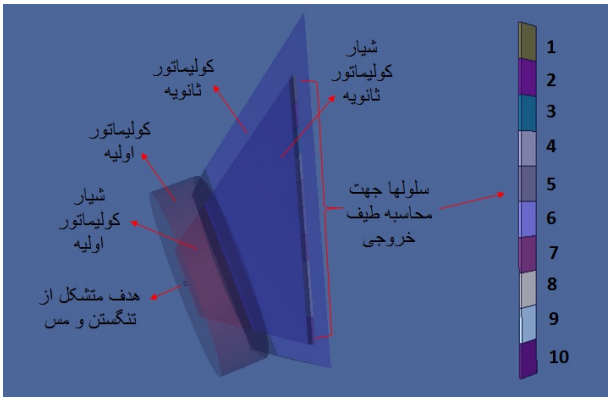
Linatron mi-6 یک شتابدهنده خطی RF بوده و دارای اجزایی از قبیل مگنترون 2.6 MW، تفنگ الکترونی، حفره‌ها، واحد کنترل فرکانس اتوماتیک، انتشار دهنده و ... است. تولید پرتوی ایکس در قسمت هد شتابدهنده که هدف تنگستنی در مقابل باریکه الکترونی قرار دارد انجام می‌گیرد. اجزایی از شتابدهنده Linatron mi-6 که در تولید، تضعیف و شکل‌دهی باریکه پرتوی ایکس تاثیرگذار هستند، شامل هدف از جنس تنگستن، پایه مسی هدف، موازی‌ساز اولیه استوانه‌ای شکل از جنس سرب و موازی‌ساز ثانویه سربی به شکل ذوزنقه هستند. این اجزا با هندسه و ترکیب مواد واقعی با استفاده از کد MCNPX نسخه 2.6.0 شبیه‌سازی شدند. با استفاده از شیار موازی‌سازها یک زاویه ٦٠ درجه برای خروج پرتوی ایکس ایجاد می‌شود که این طراحی برای پوشش‌دهی کامل به بلوکهای آشکارسازی سیستم تصویربرداری است که در فاصله حدودا هفت متری از دریچه خروجی موازی‌ساز دوم قرار گرفته‌اند. شیار موازی‌سازهای اول و دوم به ترتیب دارای پهنای ۰.٤ سانتیمتر و ٤.٤ سانتیمتر هستند. هدف از جنس تنگستن و بصورت دیسک کروی به ضخامت ۸۰۰ میکرومتر و قطر ۱ سانتیمتر با پایه مسی به شکل دیسک کروی با ضخامت ۰.۵ سانتیمتر و قطر ۱ سانتیمتر شبیه‌سازی شد. لازم به ذکر است که محور مرکزی استوانه هدف و موازی‌ساز اول با سطح زمین زاویه ۱۸ درجه می‌سازد که باریکه الکترونی به شعاع ۱ میلیمتر، موازی با این محور و بصورت عمود بر هدف تابیده می‌شود. انرژی الکترونها در دو اجرای مستقل کد برای گرفتن طیف پرتوی ایکس در دو مد انرژی، ٤ و ٦ MeV در نظر گرفته شد.

از آنجا که هدف از این مطالعه، بدست آوردن طیف پرتوی ایکس در سطح خروجی موازی‌ساز دوم است، سلولهای آشکارساز از جنس هوا با ضخامت ۰.۵ سانتیمتر و عرضی برابر با شیار موازی‌ساز دوم، در سطح خروجی آن بصورت موازی با سطح و به تعداد ۱۰ عدد در نظر گرفته شدند تا کل فوتونهای خروجی از آشکارسازها عبور کرده و هرگونه غیر یکنواختی در طیف خروجی

۱ Megavoltage radiography
۲ Dual energy imaging

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

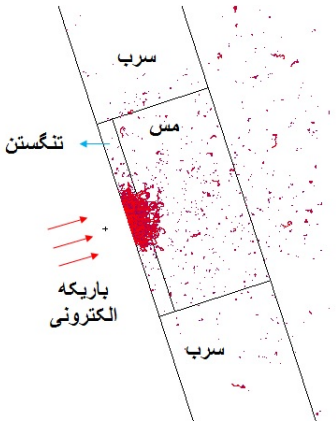
قابل تشخیص باشد. برای شمارش فوتونها در سلولهای آشکارساز، از تالی F4 کد MCNPX استفاده شد و بازه‌های انرژی برای شمارش، با پهنای ۰.۱ MeV در نظر گرفته شدند. شکل ۱ نمای شماتیکی از هندسه اجزای شبیه‌سازی شده در کد را نشان می‌دهد. با توجه به انرژی بالای الکترونها و با مراجعه به نتایج تحقیق [۳] به منظور کاهش زمان محاسبات، انرژی قطع[۳] ۰.۰۱ MeV و ۰.۱ MeV به ترتیب برای فوتونها و الکترونها در نظر گرفته شدند و به این ترتیب کد، ذرات را تا رسیدن به این انرژی دنبال کرده و پس از آن باقیمانده انرژی آنها در همان محل واگذار شده و دنبال کردن آنها متوقف می‌شود.



شکل ۱: هندسه شبیه‌سازی شده در این تحقیق با استفاده از کد MCNPX شامل هدف، موازی‌سازها، شیارها و سلولهای آشکارساز شماره گذاری شده از بالا به پایین.

تعداد الکترونهای گسیلی اولیه تا جایی افزایش داده شد که عدم قطعیت محاسبات مونت کارلوی ارائه شده توسط کد، در کلیه بازه‌های انرژی به میزان کمتر از ۱۰ درصد (که میزان خطای قابل قبول در محاسبات بوسیله کد MCNP است) برسد.

بدین منظور در مورد انرژی ٤ MeV، 4.5×10^{8} و برای انرژی ٦ MeV، 3×10^{8} الکترون گسیلی اولیه استفاده شد. زمان محاسبات با استفاده از یک رایانه با پردازنده Intel Core i7 با فرکانس ۳.٦ GHz به ترتیب ٤٤ و ٥٠ ساعت بود. شکل ۲ نمایی از برخورد ۱۰۰۰ الکترون اولیه با هدف و گسیل پرتوهای ایکس از آن را نشان می‌دهد. نقاط و خطوط قرمز در واقع نمایش دهنده نقاط برهمکنش و رد ذرات هستند.



شکل ۲: برخورد 10^{3} الکترون اولیه با هدف تنگستنی و برهمکنش پرتوهای ایکس حاصل.

نتایج و بحث

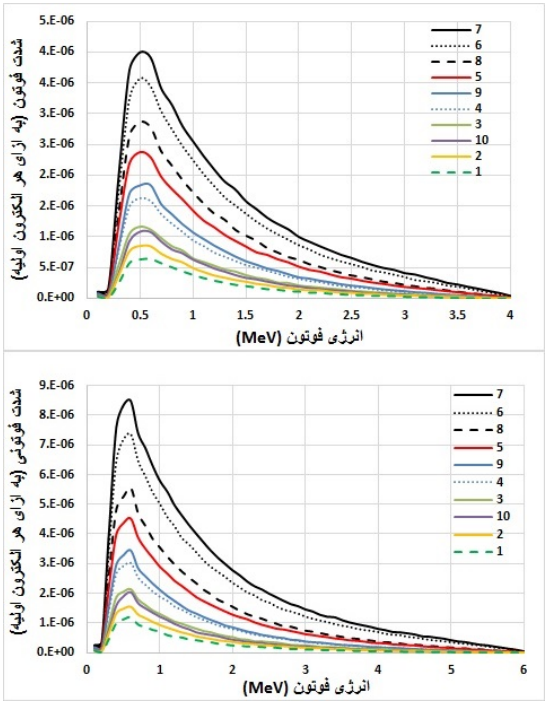
کد MCNPX نتیجه شمارش فوتونها در سلولهای آشکارساز را بصورت نرمالیزه شده به تعداد ذرات گسیلی اولیه از چشمه که در این مورد الکترونها هستند، به دست می‌دهد. توزیع تعداد (شدت) فوتونها در هر بازه انرژی یا به عبارت دیگر طیف فوتونها برای دو انرژی ٤ و ٦ MeV در نمودارهای بالا و پایین شکل ۳ نشان داده شده‌اند. برچسب شماره هر منحنی طیف، مربوط به شماره آشکارساز مورد نظر از شکل ۱ می‌باشد و برای سادگی مشاهده، به ترتیب شدت طیفها از بیشترین به کمترین شدت، شماره گذاری شده است.

همانطور که در نمودار هر دو طیف انرژی پیداست، شدت طیف فوتونی در آشکارساز شماره ۷ بیشینه بوده و پس از آن آشکارسازهای شماره ٦ و ۸ بیشترین شدت را ثبت کرده‌اند و به همین ترتیب با دور شدن از آشکارساز شماره ۷ (که در فاصله حدود ۱۷ تا ۲۳ سانتیمتری از پایین‌ترین نقطه شیار موازی‌ساز دوم قرار دارد) شدت فوتونی کاهش می‌یابد. این رفتار مستقل از انرژی اولیه الکترونها بوده و برای هر دو مد انرژی، ثابت است. آشکارسازهای ۱ و ۲ که در بالاترین نقطه شیار قرار دارند، کمترین

۳ energy cut off

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

تعداد فوتونها را دریافت می‌کنند که شدت آنها برای انرژی ٤ MeV به ترتیب ۱۸.۱٪ و ۱۳.۸٪ شدت آشکارساز شماره ۷ و برای انرژی ٦ MeV ، ۱٤.٤٪ و ۱۰.۸٪ آشکارساز شماره ۷ هستند.

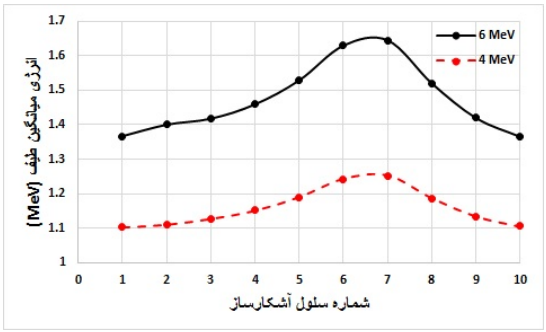


شکل ۳: انرژی میانگین طیف پرتوی ایکس در انرژی‌های ٤ MeV (نمودار بالا) و ٦ MeV (نمودار پایین) در سلولهای آشکارساز با شماره‌بندی نشان داده شده در شکل ۱.

برای داشتن امکان مقایسه کمی انرژی طیف پرتوی ایکس خروجی، انرژی میانگین هر طیف با استفاده از رابطه (۱) برگرفته از [٤] محاسبه گردید.

$$E_m = \frac{\sum_{m}^{n} N(E_i)E_i}{\sum_{m}^{n} N(E_i)} \qquad (۱)$$

که در آن E_m انرژی متوسط طیف و $N(E_i)$ تعداد فوتونهای شمارش شده در بازه انرژی E_i است و i از مقدار کمینه (در اینجا ۰.۱ MeV) تا بیشینه انرژی فوتونها (٤ و ٦ MeV) متغیر است. مقادیر انرژی میانگین بدست آمده در شکل ٤ نشان داده شده‌اند.



شکل ٤: انرژی میانگین طیف در انرژیهای ٤ و ٦ MeV در سلولهای آشکارساز با شماره‌بندی نشان داده شده در شکل ۱.

همان گونه که در شکل ٤ دیده می‌شود، انرژی میانگین طیف بدست آمده از آشکارسازهای مختلف روندی مشابه شدت طیفها نشان می‌دهند، به این معنی که انرژی میانگین فوتونهای عبوری از آشکارساز شماره ۷ بیشینه بوده و با دور شدن از این آشکارساز کاهش می‌یابد.

نتیجه‌گیری

طیف پرتوی ایکس تولیدی توسط شتابدهنده Linatron mi-6 در این تحقیق با استفاده از شبیه‌سازی مونت کارلو محاسبه گردید. نتایج بدست آمده نشان می‌دهد که طیف خروجی محاسبه شده در هر دو مد انرژی در سطح خروجی شتابدهنده کاملا غیر یکنواخت است. در نظر گرفتن این یافته‌ها، در بهینه‌سازی استفاده از این شتابدهنده و رسیدن به قدرت مطلوب تفکیک مواد مختلف در تصاویر بدست آمده، نقش مهمی دارند.

مرجع‌ها

[۱] S. Ogorodnikov and V. Petrunin, “Processing of interlaced images in 4–10 MeV dual energy customs system for material recognition”; *Physical Review special topics – Accelerators and Beams* **5**, (2002) 104701.

[۲] G. Chen, J. Turner, D. Nisius, K. Holt and A. Brooks, “Linatron Mi6, the X-Ray Source for Cargo Inspection”; *Physics Procedia* **66** (2015) 68 – 74.

[۳] F. Moradi, M. A. Olatunji, S. F. Abdul Sani, N. M. Ung, F. Forouzeshfar, M. U. Khandaker and D. A. Bradley, “Composition and thickness dependence of TLD relative dose sensitivity: A Monte Carlo study”; *Radiation Measurements* **129** (2019) 1-10.

[٤] F. M. Khan, “*Physics of Radiation Therapy*” 3rd ed. (2003), Baltimore, MD: Williams and Wilkins.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

اثر جهت‌گیری مولکول فرمالدهید در تولید هارمونیک‌های مرتبه بالا

حسینی ، زهرا[۱] ؛ ایرانی ، الناز[۱] ؛ منفرد ، محمد[۱و۲]

[۱] دانشکده علوم پایه، بخش فیزیک اتمی-مولکولی دانشگاه تربیت مدرس، خیابان جلال آل احمد، تهران

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

چکیده

در این مقاله اثر شدت و زاویه قطبش میدان لیزر نسبت به راستای مولکول فرمالدهید در برهم‌کنش با لیزر فمتوثانیه برای تولید هماهنگ‌های مرتبه بالابررسی شده است. محاسبات با استفاده از نظریه تابعی چگالی وابسته به زمان و در فضای حقیقی سه بعدی انجام شده است. در طیف هماهنگ‌های مراتب بالای منتج دو فرکانس قطع مشاهده می‌شود که ناشی از مشارکت اوربیتال‌های مختلف این مولکول در فرایند تولید هماهنگ‌ها است. این دو فرکانس قطع با تنظیم شدت لیزر تغییر کرده و با افزایش شدت لیزر فرکانس‌های قطع نیز افزایش می‌یابند. همچنین نتایج این پژوهش نشان می‌دهد که با تغییر جهت‌گیری مختلف مولکولی نسبت به راستای قطبش میدان لیزر می‌توان میزان مشارکت اوربیتال‌های مختلف مولکول فرمالدهید در فرایند تولید هماهنگ‌ها را کنترل کرد. بیشینه شدت طیف هماهنگ‌ها برای زاویه $\pi/4$ ، زاویه قطبش لیزر و راستای CO در مولکول فرمالدهید حاصل می شود.

واژه های کلیدی: *تولید هماهنگ‌های مرتبه بالا، لیزر فمتوثانیه، مولکول فرمالدهید، جهت‌گیری مولکولی*

The effect of formaldehyde orientation on the high harmonic generation

Hoseini , Zahra[1]; Irani , Elnaz[1]; Monfared , Mohammad[1,2]

[1] *Basic science faculty, Tarbiat Modares University, Tehran*
[2] *Physics Department, Sharif University of Technology, Tehran*

Abstract

In this paper the interaction of femtosecond laser with formaldehyde molecule has been studied to investigate the effect of intensity and angle of laser polarization on the high harmonic generation. Calculation has been done with time dependent density functional theory in three dimensional real space. In the obtained high order harmonic spectrums two cut-off frequencies are shown from calculation result that due to contribution of different orbitals of this molecule in the harmonics generation process. By adjusting the laser intensity, the value of these two cut-off frequencies changes such that by increasing the laser intensity, the cutoff frequencies also increase. Also the results show that we can control the contribution of different orbitals of formaldehyde molecule in harmonics generation process by variation of molecular orientation relation to laser polarization direction. The maximum intensity in harmonics spectrum is shown from calculation result for $\pi/4$ angle as angle of between laser polarization and CO direction in formaldehyde molecule.

***Keywords**: high harmonic generation, femtosecond laser, formaldehyde molecule, molecular orientation.*

PACS No. 30,31,33

مقدمه

تولید هماهنگ‌های مرتبه بالا یکی از پدیده‌هایی است که در چند دهه اخیر بسیار مورد توجه پژوهشگران بوده است. هماهنگ‌های مرتبه بالا از برهم‌کنش میدان قوی لیزر با اتم‌ها و مولکول‌ها منتج می‌شود. از برهم‌نهی تعدادی از هارمونیک‌ها می‌توان پالس آتوثانیه با طول موج بسیار کوتاه در محدوده XUV تولید کرد. تئوری فرایند تولید هارمونیک‌ها اولین بار در سال ۱۹۹۳

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

توسط کرکوم[1] ارائه شد[۱]. این تئوری نیمه کلاسیکی به مدل سه گام[2] مشهور است. طبق این مدل، زمانی که اتم یا مولکول در معرض میدان قوی لیزر قرار می‌گیرد الکترون به روش تونل زنی از قید هسته خارج می‌شود و سپس در میدان لیزر شتاب می‌گیرد. با تغییر علامت میدان لیزر، الکترون در جهت معکوس به سمت یون مادر شتاب می‌گیرد. این الکترون می‌تواند با یون مادر باز ترکیب شده و در هنگام بازترکیب انرژی جنبشی خود را به علاوه انرژی یونش در قالب یک فوتون گسیل می‌کند. بیشترین انرژی جنبشی که الکترون در میدان لیزر قطبیده خطی کسب می‌کند برابر $3.17U_p$ است. بنابراین بیشینه انرژی فوتون گسیلی حاصل از آن که انرژی قطع نیز نام دارد، به صورت زیر است:

$$\hbar\omega_{\max} = 1.3I_p + 3.17U_p \qquad (۱)$$

I_p انرژی پتانسیل یونش، U_p انرژی پاندروماتیو الکترون و $\omega_{\max}$ فرکانس قطع است. انرژی پاندروماتیو الکترون تحت تاثیر لیزری با میدان الکتریکی E_L، فرکانس مرکزی ω_0، شدت بیشینه I_L و طول موج مرکزی λ_L به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$U_p = \frac{E_L^2}{4\omega_0^2} = 0.93\times10^{-13} I_L\left(\frac{w}{cm^2}\right)\lambda_L^2\left(\mu m^2\right) \qquad (۲)$$

یکی از کاربردهای تولید هماهنگ‌های مرتبه بالا توموگرافی مولکولی است که به بررسی ساختار اوربیتالی و بازسازی توزیع چگالی الکترونی در مولکول‌ها می‌پردازد [۲]. همچنین با بازسازی توزیع چگالی الکترونی در زمان‌های مختلف می‌توان پدیده‌هایی همچون انتقال بار در مولکول‌ها که در بازه‌های زمانی زیر فمتوثانیه و مقیاس نانومتری رخ می‌دهند را مورد کاوش قرار داد [۳-٤]. لذا بررسی نقش اوربیتال‌های مختلف یک مولکول در فرایند تولید هماهنگ‌های مرتبه بالا و کنترل میزان سهم آن‌ها به وسیله پارامترهای لیزر تشعشعی مانند شدت و قطبش آن، بسیار حایز اهمیت است که در این پژوهش مطالعه شده است.

روش محاسباتی

جهت مطالعه برهم‌کنش مولکول فرمالدهید با میدان قوی لیزر، معادله کوهن-شم (KS) با استفاده از نظریه تابعی چگالی وابسته به زمان[3] (TDDFT) حل شده است[٦-۵]. این معادله به صورت زیر است (تمام معادلات در دستگاه واحد اتمی[4] نوشته شده اند):

$$i\frac{\partial}{\partial t}\psi_i(\mathbf{r},t) = \left[-\frac{\nabla^2}{2} + v_{KS}[n](\mathbf{r},t)\right]\psi_i(\mathbf{r},t) \qquad (۳)$$

$$n(\mathbf{r},t) = \sum_{i=1}^{N}\psi_i^*(\mathbf{r},t)\psi_i(\mathbf{r},t) \qquad (٤)$$

$n(\mathbf{r},t)$ چگالی الکترون وابسته به زمان و v_{KS} پتانسیل کوهن-شم وابسته به زمان است که به صورت زیر تعریف می شود:

$$v_{KS}[n](\mathbf{r},t) = v_H[n](\mathbf{r},t) + v_{xc}[n](\mathbf{r},t) + v_{ext}(\mathbf{r},t) + v_{ne}(\mathbf{r}) \qquad (۵)$$

در رابطه فوق v_H پتانسیل هارتری ، v_{xc} پتانسیل تبادلی-همبستگی، v_{ext} پتانسیل خارجی و v_{ne} پتانسیل برهم کنشی الکترون و هسته هستند .

از نوسان ممان دو قطبی الکتریکی سیستم، طیف هماهنگ‌های مرتبه بالا تولید می‌شوند که با توجه به شتاب دوقطبی الکتریکی ($\ddot{\mathbf{d}}(t)$) مطابق رابطه زیر قابل محاسبه است[۸-۷]:

$$H(\omega) = \left|\frac{1}{T_{tot}}\int_0^{T_{tot}}\ddot{\mathbf{d}}(t)\exp(-i\omega t)\,dt\right|^2 \qquad (٦)$$

T_{tot} زمان کل پالس فمتوثانیه تشعشعی به سیستم است. از برهم نهی تعدادی از هارمونیک‌ها، یک پالس آتوثانیه تولید می‌شود که شدت آن به صورت زیر بدست می‌آید[۹] :

$$I(t) = \left|\sum_q a_q e^{iq\omega_0 t}\right|^2 \qquad (۷)$$

q مرتبه هماهنگ و a_q دامنه هماهنگ در فضای فرکانس و ناشی از تبدیل فوریه شتاب دو قطبی است که به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$a_q = \int_0^{T_{tot}}\ddot{d}(t)e^{-iq\omega_0 t}dt \qquad (۸)$$

در برهم کنش لیزر قطبیده خطی با مولکول فرمالدهید، طول موج مرکزی لیزر فرودی ۸۰۰ nm، تعداد چرخه ها ٦ و تابع پوش آن به صورت ذوزنقه‌ای فرض شده است. محاسبات با

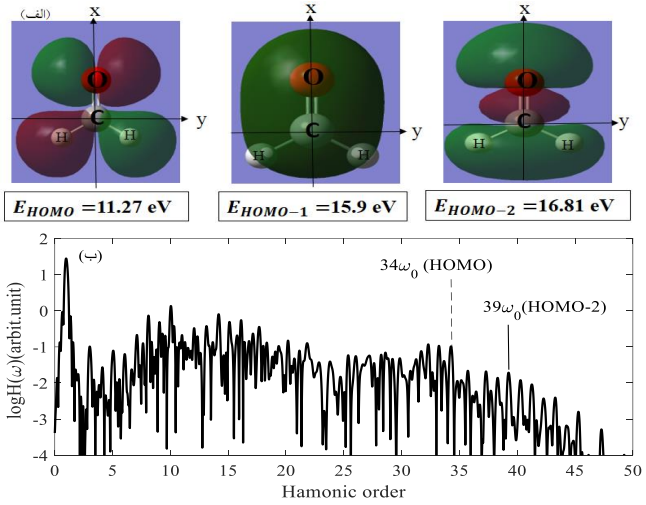
[1] Corkum
[2] Three Step Model
[3] Density Functional Theory
[4] atomic unit

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

استفاده از نرم افزار محاسباتی اختاپوس[1] [۱۰] در فضا و زمان حقیقی و به صورت سه بعدی انجام شده است.

نتایج

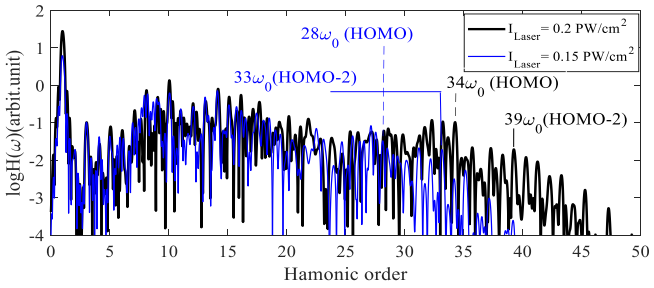
طیف هماهنگ تولید شده ناشی از برهم کنش لیزر قطبیده فمتوثانیه با مولکول فرمالدهید در شکل ۱ مشاهده می‌شود. جهت قطبش میدان لیزر موازی با راستای CO در مولکول فرمالدهید (جهت مثبت محور x) فرض شده است.



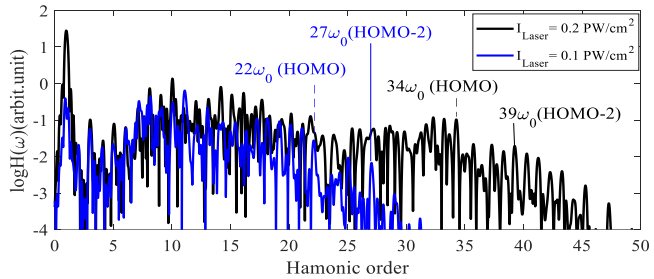
شکل ۱ : الف) نمایش سه اوربیتال HOMO, HOMO-1, HOMO-2 مولکول فرمالدهید. این اوربیتال ها توسط نرم افزار گوسین به روش DFT و با مجموعه پایه های ۳۱۱-۶ شبیه سازی شده است. رنگ‌های قرمز و سبز به ترتیب نشانگر مقادیر مثبت ومنفی تابع موج است. ب) طیف هماهنگ‌های مرتبه بالای ناشی از برهم کنش مولکول فرمالدهید با لیزر قطبیده خطی دارای طول موج ۸۰۰ nm و شدت بیشینه ۰/۲ PW/cm^2.

در شکل۱ دو فرکانس قطع قابل مشاهده است. فرکانس قطع اول برابر $34\omega_0$ و ناشی از الکترون واقع در اوربیتال HOMO است. با جایگذاری انرژی یونش تراز HOMO (Ip= 11.27 eV) در رابطه نیمه کلاسیکی کرکوم، این فرکانس قطع ($34\omega_0$) حاصل می‌شود که تاییدی بر نقش اوربیتال HOMO در تولید آن است. اما برای توجیه فرکانس قطع دوم باید نقش اوربیتال‌های ترازهای داخلی‌تر را نیز لحاظ کنیم. ترازهای HOMO-1 و HOMO-2 اختلاف انرژی کمی دارند و به ترتیب دارای قطبش π و σ هستند. از آنجایی که قطبش σ در اوربیتال HOMO-2 پاسخ شدیدتری به میدان لیزر از خود نشان می‌دهد، می‌توان گفت فرکانس قطع دوم ناشی از نقش این اوربیتال است. با جایگذاری انرژی یونش تراز HOMO-2 (Ip=16.81eV) در رابطه کرکوم، فرکانس قطع آن برابر $38,5\ \omega_0$ خواهد شد که در تطابق خوبی با طیف رسم شده در شکل۱ است. در نتیجه می‌توان گفت چند اوربیتال مختلف با جهت گیری‌های فضایی متفاوت در فرآیند تولید هماهنگ‌های مراتب بالای فرمالدهید مشارکت می‌کنند. در ادامه با بررسی اثر شدت و زاویه قطبش لیزر نشان خواهیم داد که چگونه می‌توان اثر این اوربیتال ها را کنترل کرد.

طبق رابطه۲ با افزایش شدت می‌توان به فرکانس قطع بالاتری رسید. همانطور که در شکل۲ و۳ مشاهده می‌شود، با افزایش شدت فرکانس قطع افزایش پیدا کرده است. در شکل۲ و۳ جهت قطبش میدان لیزر موازی با راستای CO در مولکول فرمالدهید (جهت مثبت محور x) فرض شده است.



شکل ۲ : مقایسه طیف هماهنگ های مرتبه بالای منتج از برهم کنش مولکول فرمالدهید با لیزر فمتوثانیه با دو شدت متفاوت ۰/۲ PW/cm^2 و ۰/۱۵ PW/cm^2.



شکل ۳ : مقایسه طیف هماهنگ های مرتبه بالا از برهمکنش مولکول فرمالدهید با لیزر فمتوثانیه با دو شدت متفاوت ۰/۲PW/cm^2 و۰/۱ PW/cm^2.

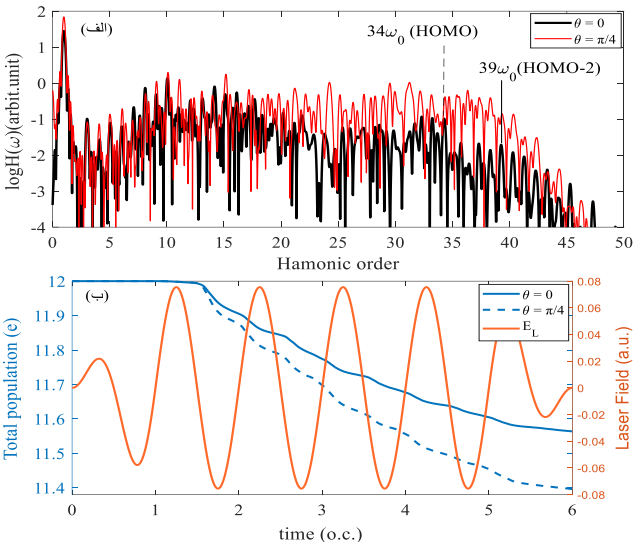
با توجه به اینکه برای شدت میدان لیزر۰/۲ PW/cm^2 فرکانس قطع بالاتری حاصل شده است لذا در ادامه شدت میدان لیزر ۰/۲ PW/cm^2 را برای بقیه محاسبات در نظر گرفته‌ایم.

مطابق شکل٤ الف) و٥ الف) اگر قطبش میدان لیزر با راستای مولکول زاویه π/٤ و π/۲ داشته باشد، با ثابت ماندن

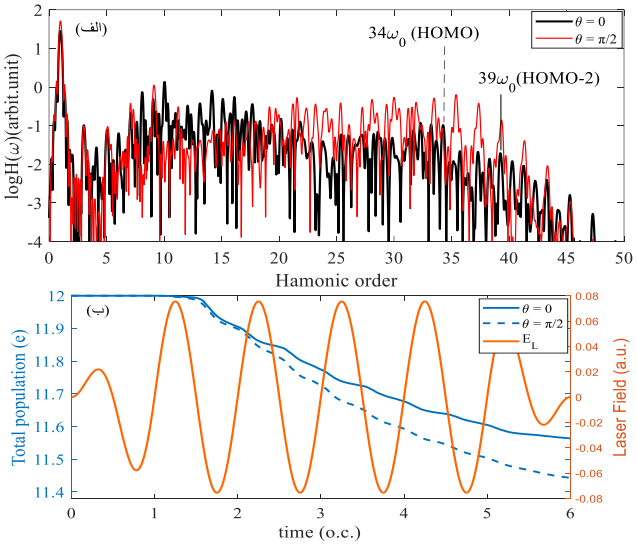
[1] Octopus

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

فرکانس قطع شدت هارمونیک‌ها افزایش می‌یابد. این موضوع به علت افزایش میزان یونش اوربیتال‌های مولکولی است (شکل ٤ ب) و ٥ ب)). افزایش میزان **یونش باعث می‌شود بسته موج الکترونی یونیزه شده احتمال بیشتری برای بازترکیب با** یون مادر، داشته باشد.



شکل ٤ : الف) مقایسه طیف هماهنگ های مرتبه بالای منتج از از برهم کنش مولکول فرمالدهید با لیزر فمتوثانیه برای دو زاویه جهت گیری ۰و$\pi/4$ ب) نمودار نرخ یونش برای دو زاویه مختلف مذکور.



شکل ٥ : الف) مقایسه طیف هماهنگ های مرتبه بالای منتج از از برهم کنش مولکول فرمالدهید با لیزر فمتوثانیه برای دو زاویه جهت گیری ۰و$\pi/2$. ب) نمودار نرخ یونش برای دو زاویه مختلف مذکور.

همانطور که از نتایج مشخص است زمانی که زاویه قطبش میدان لیزر با راستای مولکول $\pi/4$ و $\pi/2$ باشد، شدت طیف هماهنگ‌ها افزایش می‌یابد. مقایسه طیف‌های مربوط به زوایای $\pi/4$ و $\pi/2$ نشان **می‌دهد که** شدت طیف مربوط به زاویه $\pi/4$ اندکی بیشتر است که این **نتیجه به علت ساختار اوربیتال** HOMO است که باعث افزایش میزان یونش ودر نتیجه شدت هارمونیک‌ها می‌شود.

نتیجه‌گیری

نتایج این پژوهش نشان می‌دهد که در طیف هماهنگ مراتب بالای منتج از برهم‌کنش مولکول فرمالدهید با لیزر فمتوثانیه، با افزایش شدت لیزر دو فرکانس قطع بدست آمده از نتایج محاسبات، افزایش می‌یابد. هم‌چنین نتایج محاسبات نشان می‌دهد که با تغییر زاویه قطبش لیزر با راستای CO در مولکول فرمالدهید می‌توان میزان مشارکت اوربیتال‌های مختلف در فرایند تولید هماهنگ‌ها را **کنترل** کرد. نتیجه این کنترل، بیشینه‌سازی شدت طیف هماهنگ‌ها خواهد بود. در واقع نتایج محاسبات نشان می‌دهد که زاویه $\pi/4$ نسبت به دو زاویه ۰ و $\pi/2$ بیشینه شدت طیف هماهنگ‌ها را دارد.

مراجع

[1] Lewenstein, M., Balcou, P., Ivanov, M.Y., L'huillier, A. and Corkum, P.B., 1994. *Theory of high-harmonic generation by low-frequency laser fields*. Physical Review **A, 49**(3), p.2117.
[2] Zhai, C., He, L., Lan, P., Zhu, X., Li, Y., Wang, F., Shi, W., Zhang, Q. and Lu, P., 2016. *Coulomb-corrected molecular orbital tomography of nitrogen*. Scientific reports, ***6***, p.23236.
[3] Yuan, K.J. and Bandrauk, A.D., 2020. *Asymmetry of molecular frame photoelectron angular distributions in by intense two-color attosecond pulses: coherent excitation and charge migration effects*. Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics, ***53***(6), p.064002.
[4] Calegari F, Trabattoni A, Palacios A, Ayuso D, Castrovilli MC, Greenwood JB, et al. *Charge migration induced by attosecond pulses in bio-relevant molecules*. J Phys B At Mol Opt Phys. 2016;**49**(14):142001.
[5] Marques, M.A., Maitra, N.T., Nogueira, F.M., Gross, E.K. and Rubio, A. eds., 2012. *Fundamentals of time-dependent density functional theory* (Vol. 837). Springer Science & Business Media.
[6] Parr, Robert G. "*Density functional theory of atoms and molecules*." Horizons of Quantum Chemistry. Springer, Dordrecht, 1980. 5-15.
[7] Lewenstein, Maciej, et al. "*Theory of high-harmonic generation by low-frequency laser fields*." Physical Review **A49**.3 (1994): 2117.
[8] Irani, E. and Monfared, M., 2019. *Efficient high harmonic generation of bromine molecule by controlling the carrier-envelope phase and polarization of driving laser pulse*. Chemical Physics Letters, **719**, pp.27-33.
[9] Feng, Liqiang, and Hang Liu. "*Attosecond-resolution molecular high-order harmonic emission and isolated attosecond pulse generation from H2+*." Optics Communications **389** (2017): 144-149.
[10] Nance, D.V., 2019. *Test Driving the OCTOPUS TDDFT Computer Program Around NM and RDX*.

برانگیختگی موج پلکسیتون سطحی در یک لایه نازک ستونی دی الکتریک با یک حائل اکسایتونیک

رستمی، منا ؛ بابائی، فریدون
دانشکدهٔ علوم، گروه فیزیک، دانشگاه قم، قم

چکیده

در این مقاله برانگیختگی موج پلکسیتون سطحی در یک لایه نازک ستونی دی الکتریک با یک حائل اکسایتونیک در پیکربندی کریشمن بطور نظری وکلاسیکی با استفاده از روش ماتریس انتقال مطالعه شده است. طیف انرژی شاخه‌های پلکسیتونی برحسب فرکانس واکوکی نشان‌دهنده‌ی رفتار غیر متقاطع مدهای پلکسیتونی به ازای ضخامت‌های مختلف محیط اکسیتونی است. با تنظیم ضخامت محیط اکسیتونی از (nm)175 تا (nm)284 قدرت جفت شدگی بین پلاسمون و اکسیتون می تواند در نواحی متوسط تا قوی قرار گرفته باشد.

واژه های کلیدی: *پلکسیتون، اکسیتون، پلاریتون- پلاسمون سطحی*

Excitation of surface plexciton wave in a dielectric columnar thin film with a excitonic spacer

Rostami, Mona; Babaei, Ferydon
Department of Physics, University of Qom, Qom

Abstract

In this paper, excitation of surface plexciton wave in a dielectric columnar thin film with a excitonic spacer in Kretschmann configuration theoretically and classically has been studied using transfer matrix method. Energy spectra of plexcitonic branches as a function of detuning frequency indicates to the anticrossing behavior of plexciton modes at different thicknesses of excitonic medium. By tuning the thickness of excitonic medium from 175 (nm) to 284 (nm), the coupling strength between plasmon and exciton can be located from the intermediate to strong ranges.

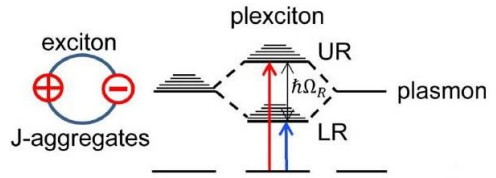
***Keywords**: Plexciton, Exciton, Surface plasmon- polariton*
PACS No. (78)

مقدمه

از جفت شدگی بین پلاسمون‌ها و اکسیتون‌ها شبه ذره‌ی پلاریتونی به نام پلکسیتون تشکیل می‌شود که دارای مدهای پلاریتونی بالا (UP) و پایین (LP) است. این شبه ذره‌ی اپتیکی جدید در نانولیزرها، سلول‌های خورشیدی و سوویچ‌های تک فوتون می‌تواند مورد استفاده قرار گیرد [۱-۳]. بر اساس مطالعات انجام شده گستره‌ی قدرت جفت شدگی نور و ماده می‌تواند از نواحی ضعیف تا خیلی قوی باشد. پلاریتون-پلاسمون‌های سطحی (SPP)، امواج الکترومغناطیسی هستند که در امتداد فصل مشترک بین فلز و محیطی که دارای گذردهی دی‌الکتریک با علامت مخالف محیط فلزی است، می‌توانند انتشار یابند [٤]. در این پژوهش، بخش اکسیتونی یک نیمرسانای ارگانیک از نوع فرنکل است که مولکول اولیه‌ی سازنده‌ی آن رنگدانه‌ی سیانین TDBC است و ۱۵ مولکول TDBC یک واحد J شکل را تشکیل می‌دهد، از این‌رو به اختصار ساختار اکسیتونی J-aggregate نامیده می‌شود [٦،٥]. بدلیل قابلیت تنظیم پذیری جفت شدگی بین پلاسمون‌ها و اکسیتون‌ها، آن‌ها را می‌توان به عنوان گزینه‌ای شایسته وبالقوه در فناوری‌های جدید عرضه کرد. نوسانگرهای SPP و اکسیتونی هر کدام دارای فرکانس مختص به خود هستند که به ترتیب با ω_{SPP} و ω_{exc} مشخص می‌شوند و اختلاف بین آن‌ها

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

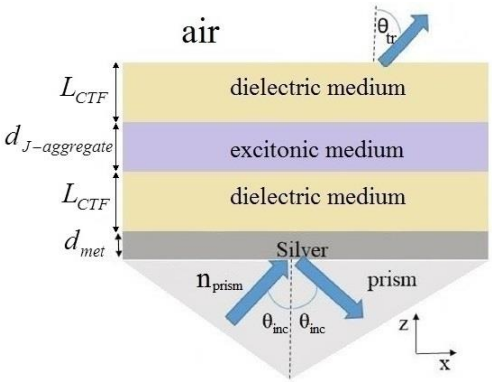
$\delta = \omega_{SPP} - \omega_{exc}$ به فرکانس واکوکی موسوم است. تفاوت انرژی بین مدهای پلاریتونی بالا و پایین در $\delta = 0$ با انرژی شکافتگی رابی $(\hbar\Omega_R)$ در ارتباط است. با تغییر پارامترهای ساختاری محیط‌های پلاسمونی و اکسیتونی قدرت برهم‌کنش آن‌ها و در نتیجه $\hbar\Omega_R$ تغییر می‌کند [۸،۷]. نمودار طرحوار پلکسیتون در شکل۱ نمایش داده شده است. در این پژوهش هدف آن است که جفت شدگی قوی بین امواج SPP و اکسیتون‌ها به صورت نظری بررسی شود.



شکل۱. طرح شماتیکی مربوط به جفت شدگی قوی بین مولکول‌های اکسیتونی J-aggregate و سیستم پلاسمونی [۹].

۱- مدل سازی اپتیکی

به منظور شبیه سازی اپتیکی ساختاری سه لایه‌ای بصورت شکل ۲ در پیکربندی کریشمن در نظر بگیرید که محیط پلاسمونی یک لایه نازک نقره، محیط دی الکتریک یک لایه نازک ستونی منیزیوم فلوراید و محیط اکسیتونی یک لایه‌ی همگن J-aggregate است. هنگامی که فرکانس پلاسمون‌ها به فرکانس اکسیتون‌ها نزدیک است، شرایط تشدید برقرار می‌شود و اکسیتون‌ها می‌توانند با پلاریتون– پلاسمون‌های سطحی هیبرید شده و پلکسیتون‌ها تشکیل شوند. در این کار اکسیتون‌های سطحی در فصل مشترک محیط اکسیتونی و محیط دی الکتریک حضور دارند و پلاریتون– پلاسمون‌های سطحی در فصل مشترک فلز و محیط دی الکتریک منتشر می‌شوند، تحت شرایط خاصی که به آن اشاره شد امواج آنها می‌توانند با یکدیگر ترکیب شده و موج پلکسیتون سطحی را بوجود آورند. محاسبات برای این مدل سازی به روش ماتریس انتقال انجام شده است که جزئیات آن را در کار قبلی ما و دیگران بطور مفصل آمده است [۱۰،۱۱]. ثابت دی الکتریک منشور (سلنید روی) مقدار $n^2_{prism} = 6.656$ انتخاب شده است. برای محاسبه‌ی گذردهی دی‌الکتریک لایه‌های نازک ستونی ناهمسانگرد، از روش همگن سازی بروگمن استفاده شده است [۱۰]. کسر حجمی هوا $f_v = 0.8$ در نظر گرفته شده و ضریب شکست آن نیز $n_{air} = 1$ است. پارامترهای مورد استفاده در این تحقیق $d_{met} = 40(nm)$ و $L_{CTF} = 500(nm)$ انتخاب شده است و زاویه‌ی ستون‌های لایه نازک متخلخل (هوا و منیزیوم فلوراید) $\chi = 20^\circ$ نسبت به محور x فرض شده است.



شکل۲. طرحی از شبیه سازی اپتیکی جهت برانگیختگی موج پلکسیتون سطحی در یک لایه نازک ستونی با یک حائل اکسایتونیک در پیکربندی کریشمن.

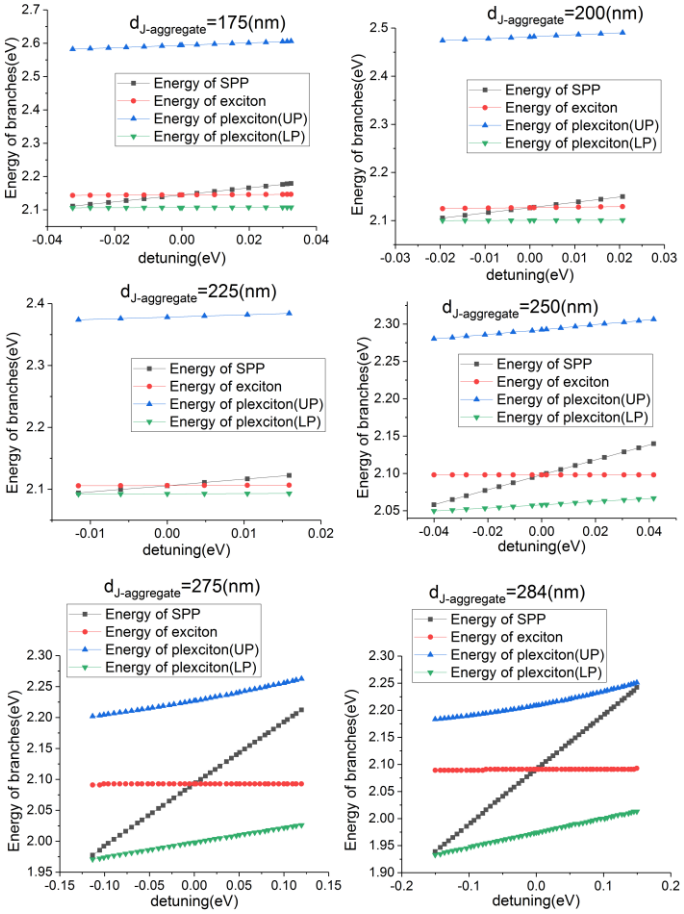
۲- نتایج و بحث

با توجه به شکل۱، اگر دو مد پلکسیتونی مربوط به نوسانگرهای جفت شده با ω_+, ω_- بیان شوند، با محاسبه‌ی اتلاف‌های مربوط به مد پلاسمونی γ_{SPP} و مد اکسیتونی γ_{exc}، $\hbar\Omega_R$ به عنوان انرژی جفت شدگی بین SPP و اکسیتون، با رابطه‌ی $\hbar\Omega_R = \sqrt{\hbar^2(\omega_+ - \omega_-)^2 + 0.25\,(\gamma_{SPP} - \gamma_{ext})^2}$ مشخص می‌شود [۱۲]. جفت شدگی در سیستم پلکسیتونی به چند ناحیه تقسیم می‌شود: (۱) ناحیه‌ی جفت شدگی ضعیف که در آن انرژی‌های مربوط به سیستم جفت شده نسبت به سیستم جفت نشده، بی تغییر می‌ماند. در این حالت رابطه‌ی $\hbar\Omega_R < (\gamma_{ext}, \gamma_{SPP})$ برقرار است. (۲) ناحیه‌ی جفت شدگی متوسط که با رابطه‌ی $\gamma_{ext} < \hbar\Omega_R < \gamma_{SPP}$ مشخص می‌شود. در این ناحیه شکافتگی مربوط به مدهای نرمال در نزدیکی قلمرو فرکانسی مدهای اصلی رخ می‌دهد. (۳) ناحیه‌ی جفت شدگی قوی که در آن رابطه‌ی $\hbar\Omega_R > (\gamma_{ext}, \gamma_{SPP})$ برقرار است، قبل از آنکه دو مد اصلی کاملاً منهدم شوند، تبادل انرژی بین آن‌ها انجام می‌گیرد [۱۳،۶]. در ابتدا طیف‌های جذب اپتیکی بر حسب زوایای

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

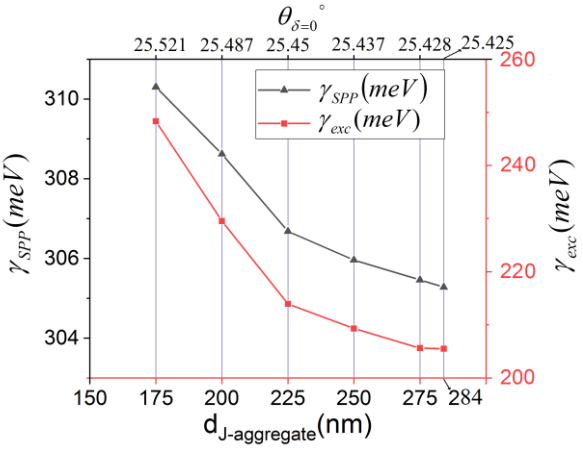
مختلف نور فرودی (θ) با قطبش p، به منظور برانگیختگی‌های SPP، اکسیتونی و پلکسیتونی محاسبه شده و سپس فرکانس‌های بیشینه‌ی آن‌ها استخراج شده است.

نمودار انرژی شاخه‌های پلکسیتونی، SPP و اکسیتونی بر حسب فرکانس واکوکی $\delta(\text{detuning frequency})$ به ازای ضخامت‌های مختلف $d_{J-aggregate}$ در شکل۳ ترسیم شده است. در $\delta = 0$ که فرکانس حالت‌های SPP و اکسیتونی برابر هستند، مدهای مربوط به حالت‌های جفت شده به صورت غیرمتقاطع ظاهر می‌شوند.

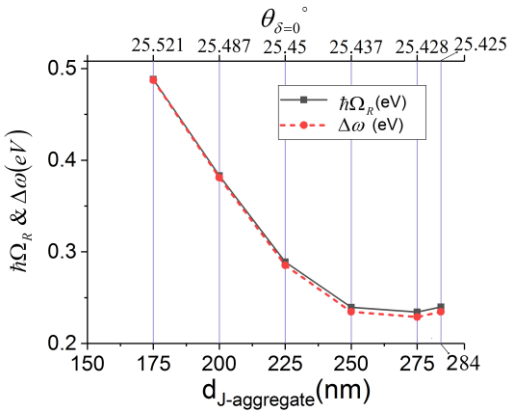


شکل۳. جفت شدگی بین مد SPP و مد اکسیتونی به ازای ضخامت‌های مختلف J-aggregate.

با استفاده از نمودارهای جذب اپتیکی، پهنای نمودار SPP (γ_{SPP}) بر حسب $\theta_{\delta=0}$ و پهنای نمودار اکسیتونی (γ_{exc}) بر حسب $d_{J-aggregate}$ و $\theta_{\delta=0}$ را به دست آورده و نتایج در شکل٤ نشان داده شده است. مقادیر مختلف $d_{J-aggregate}$ و $\theta_{\delta=0}$ به عنوان پارامترهای ورودی برنامه در به دست آوردن نمودارهای جذب اکسیتونی و پلکسیتونی، توسط خطوط قائم در شکل٤ مرتبط می‌گردند، از این‌رو می‌توان نتیجه گرفت در نمودارهای جذب مذکور با افزایش $d_{J-aggregate}$، $\theta_{\delta=0}$ کاهش می‌یابد. با توجه به شکل٤ با افزایش $d_{J-aggregate}$، γ_{exc} سیر نزولی دارد و با افزایش $\theta_{\delta=0}$، γ_{SPI} سیر صعودی دارد. نمودارهای $\hbar\Omega_R$ و $\Delta\omega = \omega_+ - \omega_-$ برحسب $d_{J-aggregate}$ و $\theta_{\delta=0}$ در شکل۵ آمده است. با توجه به شکل۵ با افزایش $d_{J-aggregate}$، $\Delta\omega, \hbar\Omega_R$ تا $d_{J-aggregate} = 250(nm)$ سیر نزولی دارند و از آن پس تقریباً ثابت می‌مانند. به ازای $d_{J-aggregate}$ برابر با $175، 200(nm)$ جفت شدگی از نوع قوی است و به ازای $d_{J-aggregate}$ برابر با $225، 250، 275، 284(nm)$ جفت‌شدگی از نوع متوسط است.



شکل٤. نمودارهای پهنای SPP بر حسب $\theta_{\delta=0}$ و پهنای اکسیتونی در برحسب $d_{J-aggregate}$ و $\theta_{\delta=0}$.



شکل۵. نمودار های $\hbar\Omega_R$ و $\Delta\omega$ بر حسب مقادیر مختلف $d_{J-aggregate}$ و $\theta_{\delta=0}$.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

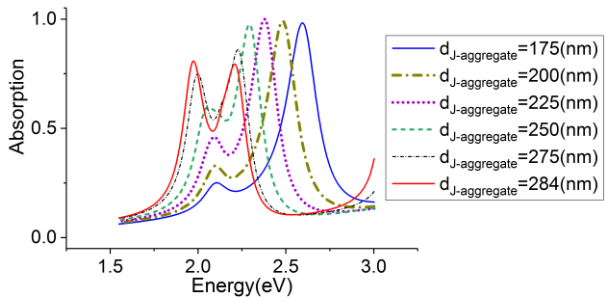
به ازای هر $\theta_{\delta=0}$، حاصل $(\gamma_{SPP}-\gamma_{exc})$ نسبت به مقدار $\Delta\omega$ خیلی کوچک‌تر است. از این‌رو مقادیر $\Delta\omega,\hbar\Omega_R$ با اختلاف کمی دارای تغییرات هماهنگ بر حسب $d_{J-aggregate}$ هستند.

نمودارهای جذب اپتیکی پلکسیتون برحسب انرژی نور فرودی برای مقادیر مختلف $d_{J-aggregate}$ در شکل٦ ترسیم شده است. با افزایش $d_{J-aggregate}$، مدهای بالا و پایین دارای جابه‌جایی قرمز هستند و جذب مد پایین افزایش می‌یابد، به ازای $d_{J-aggregate}=284(nm)$ پهنای دو مد و جذب آن‌ها تقریباً با هم برابر هستند. نتایج به دست آمده در توافق با کار گروه مانخ‌بات و همکارانش است [١٤]. آن‌ها در کارشان جفت‌شدگی بین کاواک و اکسیتون‌ها از نوع TMDC را مورد مطالعه قرار دادند، با افزایش ضخامت TMDC جابه‌جایی قرمز در مدهای پلاریتونی مشاهده کردند و با بررسی نمودارهای جذب اپتیکی متوجه شدند که با افزایش ضخامت TMDC، جذب به صورت قابل توجهی افزایش می‌یابد و به $50-60\%$ می‌رسد [١٤].

با توجه به آنکه امواج SPP در فصل مشترک فلز و دی‌الکتریک پایین منتشر شده و امواج اکسیتونی نیز در فصل مشترک J-aggregate و دی الکتریک بالا انتشار می‌یابند، افزایش ضخامت اکسیتون تا $250(nm)$ سبب می‌شود که امواج پلاسمونی و اکسیتونی به سختی به هم رسیده و با هم جفت شوند. از این رو تا $d_{J-aggregate}=250(nm)$ شاهد کم‌تر شدن مقادیر $\hbar\Omega_R,\Delta\omega$ و کاهش قدرت جفت شدگی در سیستم پلکسیتونی هستیم. در محدوده‌ی $250<d_{J-aggregate}<284(nm)$ اگرچه با افزایش $d_{J-aggregate}$ به دلیل خاصی که به آن اشاره شد، انتظار می‌رود $\hbar\Omega_R,\Delta\omega$ همچنان کاهش یابند، اما γ_{exc} نیز به مقادیر کمینه‌ی خود می‌رسد و افزایش طول عمر امواج اکسیتونی، جفت شدگی را تقویت می‌کند. با در نظر داشتن این دو عامل، تغییرات خاصی را در $\hbar\Omega_R,\Delta\omega$ در بازه‌ی 250 تا $284(nm)$ مشاهده نمی‌کنیم.

نتیجه‌گیری

بررسی جفت شدگی SPP و اکسیتون‌های J-aggregate به صورت نظری در پیکربندی کریشمن انجام شد. نتایج نمودارهای انرژی شاخه‌های پلکسیتونی برحسب فرکانس واکوکی δ حاکی از رفتار غیرمتقاطع مدهای بالا و پایین در $\delta=0$ به ازای مقادیر مختلف $d_{J-aggregate}$ است. همچنین معلوم شد به ازای ضخامت های کوچک $175<d_{J-aggregate}<200(nm)$ جفت شدگی سیستم پلکسیتونی از نوع قوی است. با افزایش $d_{J-aggregate}$ انتظار داریم امواج پلاسمونی و اکسیتونی به سختی به هم رسیده و قدرت جفت شدگی کاهش یابد، اما نتایج این پژوهش نشان داد که قدرت جفت شدگی همچنین تحت تأثیر افزایش طول عمر امواج اکسیتونی با افزایش $d_{J-aggregate}$ قرار گرفته است و رقابت این دو اثر سبب می‌شود که تا $d_{J-aggregate}=250(nm)$ شاهد کاهش قدرت جفت شدگی و از آن پس تغییرات بسیار کوچک $\hbar\Omega_R,\Delta\omega$ در سیستم پلکسیتونی باشیم.



شکل٦. الف: جذب اپتیکی به ازای مقادیر $d_{J-aggregate}=(175-284)(nm)$.

مرجع‌ها

[1] S. Balci, C. Kocabas, B. Küçüköz, A. Karatay, E. Akhüseyin, H. Gul Yaglioglu, and A. Elmali, *Applied Physics*, **105** (2014), 051105.
[2] J. Yao, W. Qian Ji, D. Wu, Y. Cheng, X. Liu, *Optics Communications*, **389** (2017), 310-313.
[3] E. S. H. Kang, S. Chen, S. Sardar, D. Tordera, N. Armakavicius, V. Darakchieva, T. Shegai, and M. P. Jonsson, *ACS Photonics* (2018).
[4] M. El Kabbash, A. Rahimi Rashed, K. Valiyaveedu Sreekanth, A. De Luca, M. Infusino, and G. Strangi, *Journal of Nanomaterials*, Article ID 4819040, 21 pages (2016).
[5] S. Balci, B. Kucukoz, O. Balci, A. Karatay, C. Kocabas, and G. Yaglioglu, *Acs Photonics* (2016), 2010-2016 .
[6] J. R. Tischler, M. S. Bradley, Q. Zhang, T. A. A. Nurmikko, V. Bulovic, *Organic Electronics*, **8** (2007) 94–113.
[7] P. Torma and W. L. Barnes, Iop Publishing, *Rep. Prog. Phys.* **78** (2015) 013901 (34pp).
[8] S. Balci, C. Kocabas, S. Ates, E. Karademir, O. Salihoglu, and A. Aydinli, *Physical Review* **B 86**, 235402 (2012).
[9] D. Melnikau, A.A. Govyadinov, A. Sánchez-Iglesias, M. Grzelczak, L.M. Liz-Marzán, Y.P. Rakovich, *Nano letters* (2017), 1808−1813.
[10] F.Babaei,M.Rostami,*Opt.commun* **439**(2019)8.
[11] A. Lakhtakia, R. Messier, Library of Congress Cataloging-in-Publication Data, SPIE—The International Society for Optical Engineering, "*Sculptured Thin Films Nanoengineered Morphology and optics*".
[12] G. D. Chatzidakis and V. Yannopapas, *Journal of Modern optics* (2019).
[13] G. Zengin, M. Wersall, S. Nilsson, T. J. Antosiewicz, M. Kall, and T. Shegai, *Physical Review Letters*, **114**, 157401 (2015).
[14] Battulga Munkhbat, Denis G. Baranov, Michael Stührenberg, Martin Wersäll, Ankit Bisht, and Timur Shegai, *ACS Photonics* (2018).

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

محاسبهٔ خواص ارتعاشی، گرمایی و کشسانی سوخت کاربردی نیروگاه هسته‌ای

صحافی، محمد حسین؛ مهدوی ، محمد

گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه مازندران، بابلسر

چکیده

در این کار، خواص کشسانی، حرارتی و ارتعاشی نیترید توریم که سوخت نیروگاه هسته‌ای است با استفاده از نظریهٔ تابعی چگالی و روش شبه پتانسیل‌های فوق با تابعیت تقریب شیب تعمیم یافته مورد مطالعه قرار گرفته است. خواص مکانیکی و ضرایب الاستیک محاسبه شده با سایر داده‌های نظری مقایسه شدند و توافق خوبی با یکدیگر داشتند. ٦ شاخهٔ فونونی در نمودار پاشندگی فونونی نیترید توریم مشاهده شد. عدم مشاهدهٔ فرکانس‌های فونونی موهومی حاکی از پایداری دینامیکی ساختار بلوری دارد. خواص گرمایی تحت مدل شبه هماهنگ محاسبه شده است. مشاهده شد که مدول حجمی با افزایش دما کاهش پیدا می‌کند.

واژه های کلیدی: *نظریهٔ تابعی چگالی، پاشندگی فونونی، خواص گرمایی، نیروگاه هسته ای*

Calculation of vibrational, thermal and elastic characteristics of Applied fuel of nuclear power plant

Sahafi, Mohammad Hossein; Mahdavi, Mohammad

Department of Physics, Faculty of Science, University of Mazandaran, babolsar

Abstract

In this work, the elastic, thermal and vibrational properties of ThN, which is the fuel of the nuclear power plant, have been studied using the density functional theory and ultrasoft pseudopotential method with the functional of generalized gradient approximation. The calculated mechanical properties and elastic constant were compared with other theoretical data and had good agreement with each other. 6 phonon branches were observed in the phonon dispersion diagram of ThN. Failure to observe imaginary phonon frequencies indicated dynamic stability of crystalline structure. The thermal properties are calculated under the quasi-harmonic model. It was observed that the bulk modulus decreases with increasing temperature.

***Keywords**: Density Functional Theory, Phonon Dispersion, Thermal Properties, Nuclear Plant*

PACS No. 60 ,63 ,65 ,81

مقدمه

نیتریدهای اکتنید به عنوان سوخت های بالقوه در راکتورهای نسل چهارم مورد آزمایش قرار گرفته‌اند. این راکتورها نگرانی‌های زیادی راجع به مسئلهٔ انرژی هسته‌ای ایجاد می‌کنند. استفاده مؤثر از انرژی هسته‌ای به پیشرفت‌های مستمر در فناوری هسته‌ای نیاز دارد[1] .
امروزه، به جز سوخت‌های مبتنی بر اکسید، سوخت‌های نیتریدی به دلیل داشتن خواص ترموفیزیکی برتر از قبیل نقطهٔ ذوب بالا، رسانندگی گرمایی بالا، چگالی بالا و همچنین سازگاری مناسب با خنک کننده (سدیم مایع) به عنوان مواد جایگزین، با سایر سوخت‌های اکسیدی رقابت می‌کنند [۲]. از آن‌جا که چگالی سوخت‌های نیتریدی بالا است، نوترون کمتری را جذب می‌کند، از این رو، پسماند های آن ها پرتو زایی کمتری دارند و می توان آن ها را در دراز مدت نگهداری کرد. این سوخت‌ها ترکیبی از یک فلز (توریم) و نیترید است [3]. به منظور درک بهتر از رفتار این مواد تحت تابش، توصیف دقیق از ساختار الکترونی، خواص گرمایی و ارتعاشی آن‌ها توسط محاسبات اصول اولیه ضروری است. در دو دههٔ اخیر، مطالعات متعددی بر روی

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

توریم و ترکیباتش انجام شده است. برای مثال: رزنیک و همکاران [٤] انتقال حرارتی سوخت‌های هسته‌ای بر پایه توریم را با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی مورد بررسی قرار دادند. آتا و همکاران [٥] خواص ساختاری، الکترونی و مغناطیسی نیترید توریم را بررسی کردند. شین و همکاران [٦] طبیعتِ پیوندهای شیمیایی و خواص فیزیکی سرامیک‌های توریمی را توسط محاسبات ابتدا به ساکن مورد مطالعه قرار دادند. تاکنون خواص گرمایی، ارتعاشی و کشسانی نیترید توریم مورد بررسی قرار نگرفته است.

در این تحقیق، خواص ترموفیزیکی، ارتعاشی و ضرایب الاستیک نیترید توریم با استفاده از نظریهٔ تابعی چگالی در چارچوب رهیافت امواج تخت مورد مطالعه قرار می‌گیرد. خواص ترموفیزیکی نیترید توریم توسط مدل شبه هماهنگ در دماهای بالا بررسی می‌شود.

جزئیات محاسبات

محاسبهٔ انرژی کل توسط محاسبات اصول اولیه با استفاده از کد محاسباتی کوانتوم اسپرسو [٧] در چارچوب شبه پتانسیل‌های فوق نرم با تابعیت تقریب شبه تعمیم یافته و روش امواج تخت انجام شده است. الکترون‌های $2s^2 2p^3$ و $6s^2 7s^2 6p^6 6d^1 5f^1$ به ترتیب برای توریم و نیترید به عنوان الکترون‌های ظرفیت رفتار می‌کنند. تابع موج الکترونی توسط امواج تخت بسط داده شده است و انرژی قطع توابع موج ٥٠٠ev در نظر گرفته شده است. نمونه برداری از منطقهٔ اول بریلوئن به صورت یک شبکه ١٤×١٤×١٤ توسط روش مش‌بندی مونخورست [٨] پک انجام شده است. انتخاب این مقادیر به ما اطمینان می‌دهد که خطای مجاز بین دو چرخهٔ خودسازگار کمتر از 10^{-4}ev بر اتم باشد. انتگرال‌گیری از منطقهٔ اول بریلوئن به روش متفسل – پکستون [٩] انجام شده است و میزان پهن شدگی گاوسی ٠/٠٢Ry انتخاب گردیده است. محاسبهٔ ماتریس های دینامیکی برای یک شبکه از نقاط کاهش ناپذیر به صورت ٤×٤×٤ انجام شده است.

مدل شبه هماهنگ

انرژی استاتیک با استفاده از معادلهٔ حالت درجه سوم بریچ – مورناگون[10] به صورت زیر محاسبه می‌شود

$$E(V) = E_0 + \frac{9V_0B_0}{16}\left\{[(V_0/V)^{2/3}-1]^3 B_0' + [(V_0/V)^{2/3}-1]^2[6-4(V_0/V)^{2/3}]\right\} \quad (١)$$

که در آن E_0، V_0، B_0 به ترتیب انرژی استاتیک، حجم سامانه و مدول حجمی در حالت پایدار می‌باشند. فشار سامانهٔ بلوری به صورت زیر محاسبه می‌شود

$$P(V) = \frac{3B_0}{2}[(V_0/V)^{7/3} - (V_0/V)^{5/3}]\left\{1 + \frac{3}{4}(B_0' - 4)[(V_0/V)^{2/3} - 1]\right\} \quad (٢)$$

که در آن B_0' مشتق مرتبه اول مدول حجمی است. خواص ترمودینامیکی نیترید توریم با استفاده از مدل شبه هماهنگ [١١] محاسبه شده است. در این مدل، انرژی آزاد هلمهولتز به صورت زیر بیان می‌شود

$$F(V,T) = E(V) + F_{ph}(V,T) + F_{ele}(V,T) \quad (٣)$$

که در آن $E(V)$ بیانگر انرژی کل در حالت پایه، $F_{ph}(V,T)$ بیانگر انرژی آزاد فونونی در حجم V و F_{ele} انرژی الکترون می‌باشد. تحت مدل شبه هماهنگ، انرژی آزاد فونون می‌تواند توسط چگالی حالت‌های فونونی، $g(\omega)$، به صورت زیر محاسبه شود

$$F_{ph}(V,T) = k_B T \int_0^{\infty} g(\omega) \ln\left[2\sinh\left(\frac{h\omega}{2k_B T}\right)\right] d\omega \quad (٤)$$

که در آن $\omega = \omega(V)$ فرکانس فونونی وابسته به حجم است. بنابراین رابطهٔ (٤) برخی از اثرات ناهماهنگ را در نظر می‌گیرد. انرژی الکترونی از سهم های الکترونی آنتروپی و انرژی به صورت $F_{ele} = E_{ele} - TS_{ele}$ بدست می‌آید. آنتروپی الکترونی، S_{ele}، به صورت زیر بیان می‌شود

$$S_{ele}(V,T) = -k_B \int n(\varepsilon,V)[f \ln f + (1-f)\ln(1-f)]d\varepsilon \quad (٥)$$

که در آن $n(\varepsilon)$ چگالی حالت‌های الکترونی است و f بیانگر توزیع فرمی – دیراک می باشد. E_{ele} ناشی از برانگیختگی های الکترونی است که به صورت زیر بدست می‌آید

$$E_{ele}(V,T) = \int n(\varepsilon,V) f \varepsilon d\varepsilon - \int_0^{\varepsilon_F} n(\varepsilon,V)\varepsilon d\varepsilon \quad (٦)$$

که در آن ϵ_f انرژی فرمی است. مدول حجمی، B، که بیانگر مقاومت (سختی) ماده در برابر فشرده‌سازی است به صورت زیر محاسبه می‌شود

$$B \cong B(V) = V\left(\frac{d^2E(V)}{dV^2}\right) \quad (٧)$$

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics٩٩

خواص الاستیک

ضرایب الاستیک اطلاعاتی در مورد پایداری و خواص مکانیکی مواد با استفاده از تحلیل رفتار بلورها تحت اعوجاج های کشسانی در اختیار قرار می‌دهند. نیترید توریم ساختار مکعبی مرکز وجوه پر دارد. در ساختارهای مکعبی تنها ۳ ثابت الاستیک مستقل C_{44}, C_{12}, C_{11} وجود دارد. با محاسبهٔ ضرایب الاستیک می‌توان خواص مکانیکی از قبیل مدول حجمی (B_0)، مدول برشی (G)، مدول یانگ (E)، نسبت پواسون (υ) و پارامتر ناهمسانگردی (A) را به صورت روابط زیر بدست

$$B_0 = \frac{1}{3}(C_{11} + 2C_{12}) \quad (۸)$$

$$G = \frac{1}{5}(C_{11} - C_{12} + 3C_{44}) \quad (۹)$$

$$E = \frac{9B_0G}{3B_0+G} \quad (۱۰)$$

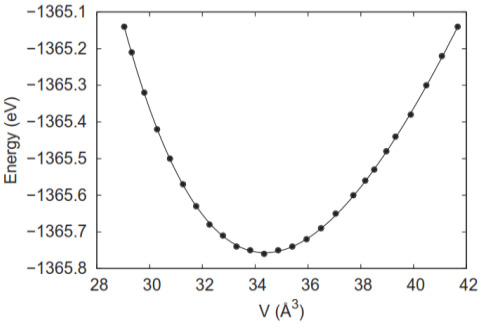
$$\upsilon = \frac{3B_0-E}{6B_0} \quad (۱۱)$$

$$A = \frac{2C_{44}}{C_{11}-C_{12}} \quad (۱۲)$$

نتایج و بحث

خواص ساختاری و مکانیکی

نیترید توریم (ThN) ساختار سنگ نمک طعام دارد که تنها ۲ اتم در سلول واحد اولیه خودش جای می دهد. با برازش معادلهٔ حالت درجه سوم بریچ- مورناگون بر نمودار انرژی – حجم که در شکل (۱) نشان داده شده، ثابت شبکه (a_0)، مدول حجمی (B) و مشتق مرتبه اول مدول حجمی (B_0') بدست آمدند. نتایج حاصل با داده‌های نظری [۵] و تجربی [۱۲] کارهای دیگر در جدول (۱) مقایسه و لیست شدند.



شکل۱ : انرژی کل بر حسب حجم بلور.

جدول ۱: ثابت شبکه (a_0)، مدول حجمی (B) و مشتق مرتبه اول مدول حجمی (B_0') محاسبه شده و مقایسه با داده های نظری و تجربی.

	a_0(Å)	B(GPa)	B_0'
کار حاضر	۵٫۱۵	۱۸۰٫۱	٤٫۲
کار نظری	۵٫۱۸	۱۷۸	–
کار تجربی	۵٫۱٦	۱۷۵	٤٫۰

مقایسه ها نشان می‌دهند که نتایج بدست آمده در توافق خوبی با داده های قابل دسترس تجربی و نظری هستند. ضرایب الاستیک محاسبه شده در جدول (۲) لیست و با سایر داده های نظری [٦] مقایسه شدند. معیار پایداری مکانیکی منجر به محدودیت‌های ضرایب الاستیک به صورت C_{11}-C_{12}>0، C_{44}>0، C_{11}+2C_{12}>0 می‌شود. تمام این روابط، نتایج بدست آمده را تأیید می‌کند، بنابراین، سامانه در تعادل مکانیکی قرار دارد.

جدول ۲ : خواص مکانیکی و کشسانی محاسبه شده و مقایسه با داده های دیگر.

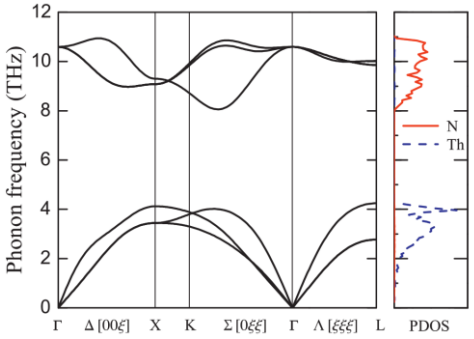
	کار حاضر	کار نظری
C_{11}(GPa)	۳۳٤/۷	۳۹٦/٦
C_{12}(GPa)	۱۰۲/۰	۱۰۱/۵
C_{44}(GPa)	۷٦/۰	۷۹/۹
B_0(GPa)	۱۸۰/۱	۱۹۹/۹
G(GPa)	۸۹/۸	۱۰۲/٤
E(GPa)	۲۳۰/٤	۲٦۲/۵
υ	۰/۲۷۳	۰/۲۸۱
A	۰/٦۷	۰/۵٤

پاشندگی فونونی

به منظور محاسبهٔ پاشندگی فونونی و چگالی حالت‌های فونونی از تئوری هلمان – فیمان و روش مستقیم استفاده شده است. برای محاسبهٔ نیروهای هلمان – فیمان، اتم توریم و نیترید را با دامنهٔ جابجایی ۰٫۰۰۳nm از موقعیت تعادلشان جابجا کردیم. نمودار پاشندگی فونونی در امتداد مسیرهای پرتقارن $\Gamma \to X \to K \to \Gamma \to L$ در شکل (۲) نشان داده شده است. نیترید توریم با ساختار سنگ نمک طعام تنها دو اتم در سلول واحد اولیه دارد، بنابراین، ٦ مد فونونی در روابط پاشندگی آن دیده می‌شود. همچنین چگالی حالت‌های فونونی تصویر شده برای ThN در شکل (۲) نشان داده شده است. به دلیل سنگین‌تر بودن

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

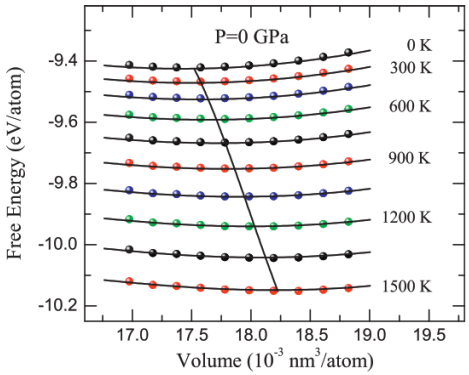
اتم توریم نسبت به اتم نیترید، چگالی حالت‌های فونونی به دو قسمت تقسیم می‌شود قسمت اول در بازهٔ THZ ٤-۰ قرار می‌گیرد، جایی که ارتعاشات اتم توریم غالب هستند. قسمت دیگر در ناحیهٔ THZ۱۱-۸ قرار می‌گیرد. جایی که عمدتاً ارتعاشات ناشی از اتم نیترید است. فرکانس نوری محاسبه شده در نقطه Γ در حدود THZ۱۰٫۵ می‌باشد. هیچ فرکانس موهومی در نمودار طیف فونونی نیترید توریم مشاهده نشد که حاکی از پایداری دینامیکی ساختار بلوری نیترید توریم است.



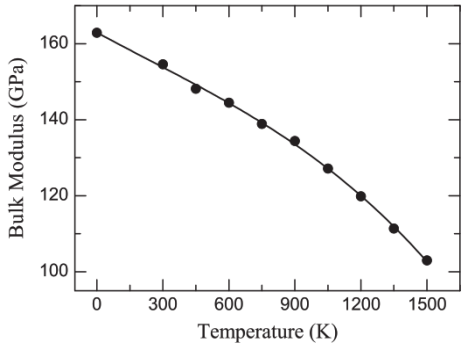
شکل ۲ : نمودار پاشندگی فونونی و چگالی حالت های فونونی برای نیترید توریم.

خواص گرمایی

نمودار انرژی آزاد هلمهولتز، *F(V,T)*، در بازهٔ دمایی K۱۵۰۰-۰ در شکل (۳) نمایش داده شده است. همچنین مقادیر مختلف ثابت شبکه در دماهای مختلف T نشان داده شده است. حجم تعادلی، *V(T)*، و مدول حجمی، *B(T)*، توسط معادلهٔ حالت بریچ – مورناگون بدست آمده‌اند. شکل (٤) وابستگی دمایی مدول حجمی را نشان می‌دهد. واضح است که مدول حجمی با افزایش دما، کاهش می‌یابد.



شکل ۳ : وابستگی انرژی آزاد هلمهولتز به حجم بلور در دماهای مختلف.



شکل ٤ : وابستگی دمایی مدول حجمی برای نیترید توریم.

نتیجه گیری

در این پژوهش، خواص کشسانی، ارتعاشی و گرمایی نیترید توریم تحت نظریهٔ تابعی چگالی و روش امواج تخت مورد مطالعه قرار گرفت. خواص ساختاری نیترید توریم با استفاده از برازش معادلهٔ حالت درجه سوم بریچ – مورناگون بدست آمدند. ضرایب الاستیک محاسبه شده با سایر داده‌های نظری موجود مقایسه شد و توافق خوبی مشاهده گردید. هیچ فرکانس موهومی در نمودار پاشندگی فونونی نیترید توریم مشاهده نشد که حاکی از پایداری دینامیکی ساختار کریستالی ThN بود. ضرایب الاستیک بدست آمده در روابط پایداری مکانیکی صدق می کردند.

مرجع‌ها

[۱] T. Allen, R. Konings and A. Motta, 5.03 corrosion of zirconium alloys, *Comprehensive nuclear materials* **5** (2012) 49-68.

[۲] S. Kotake, Y. Sakamoto, T. Mihara, S. Kubo, N. Uto, Y. Kamishima, K. Aoto and M. Toda, Development of advanced loop-type fast reactor in Japan, *Nuclear technology* **170**(1) (2010) 133-147.

[۳] T. Abram and S. Ion, Generation-IV nuclear power: A review of the state of the science, *Energy Policy* **36**(12) (2008) 4323-4330.

[۴] J. Park, E.B. Farfán, K. Mitchell, A. Resnick, C. Enriquez and T. Yee, Sensitivity of thermal transport in thorium dioxide to defects, *Journal of Nuclear Materials* **504** (2018) 198-205.

[۵] R. Atta-Fynn and A.K. Ray, Density functional study of the actinide nitrides, *Physical Review B* **76**(11) (2007) 115101.

[۶] I. Shein and A. Ivanovskii, Thorium compounds with non-metals: Electronic structure, chemical bond, and physicochemical properties, *Journal of Structural Chemistry* **49**(2) (2008) 348.

[۷] P. Giannozzi, S. Baroni, N. Bonini, M. Calandra, R. Car, C. Cavazzoni, D. Ceresoli, G.L. Chiarotti, M. Cococcioni and I. Dabo, QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials, *Journal of physics: Condensed matter* **21**(39) (2009) 395502.

[۸] J.D. Pack and H.J. Monkhorst, " Special points for Brillouin-zone integrations"—a reply, *Physical Review B* **16**(4) (1977) 1748.

[۹] M. Methfessel and A. Paxton, High-precision sampling for Brillouin-zone integration in metals, *Physical Review B* **40**(6) (1989) 3616.

[۱۰] F. Birch ,Finite strain isotherm and velocities for single-crystal and polycrystalline NaCl at high pressures and 300 K, *Journal of Geophysical Research: Solid Earth* **83**(B3) (1978) 1257-1268.

[۱۱] S. Baroni, de Gironcoli, A. dal Corso, and P. Giannozzi, *Rev. Mod .Phys* **73** (2001) 515.

[۱۲] L. Gerward, J. Staun Olsen, U. Benedict, J.-P. Itié and J. Spirlet, The crystal structure and the equation of state of thorium nitride for pressures up to 47 GPa, *Journal of applied crystallography* **18**(5) (1985) 339-341.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

معرفی سنجهٔ درهم‌تنیدگی کوانتومی بر اساس مقادیر چشمداشتی عملگرهای پائولی

زهیری ، محمود

گروه فیزیک، دانشگاه شهید چمران، اهواز

چکیده

در این مقاله، سعی کردیم با استفاده از مفهوم درهم‌تنیدگی کوانتومی در حالت‌های کیوبیتی و تأثیر آن بر مقادیر چشمداشتی عملگرهای پائولی، پارامتری با عنوان «شاخص جداپذیری» تعریف کنیم. سپس با استفاده از این شاخص، سنجهٔ درهم‌تنیدگی را معرفی کردیم و در پایان، مثال‌هایی از حالت‌های Nکیوبیتی و حالت‌های دوکیوتریتی و دوکیودیتی بررسی و کارآمدی سنجه، توسط نتایج مثال‌ها تأیید گردید.

واژه های کلیدی: *سنجهٔ درهم‌تنیدگی، شاخص جداپذیری، عملگر پائولی، کیوبیت، کیوتریت، کیودیت.*

Introduction Of Quantum Entanglement Measure Based On The Expectation Values Of Pauli Operators

Zeheiry, Mahmood

Department of Physics, Shahid Chamran University, Ahwaz

Abstract

In this paper, we have tried to define a parameter called the "separability index" using the concept of quantum entanglement in qubit states and its effect on the expectation values of pauli operators. Then, using this indicator, we introduced the entanglement measure, and at the end, the examples of N-qubit states and 2-qutrit and 2-qudit states were examined, and the efficiency of the measure was confirmed by the results of the examples.

***Keywords**: entanglement measure, separability index, pauli operator, qubit, qutrit, qudit.*

PACS No. 3

مقدمه

درهم‌تنیدگی یکی از مفیدترین منابع در پردازش اطلاعات کوانتومی است و کاربردهای زیادی در نظریهٔ اطلاعات کوانتومی و نظریهٔ میدان‌های کوانتومی دارد[۱]. به‌همین دلیل، شناخت حالت‌های درهم‌تنیده و تعیین میزان درهم‌تنیدگی آن‌ها از اهمیت بالایی برخوردار است. با توجه به اهمیت درهم‌تنیدگی در دنیای کوانتومی، سنجه‌های مختلفی جهت سنجش میزان درهم‌تنیده بودن حالت‌ها معرفی شده‌اند. از میان این سنجه‌ها، می‌توان به سنجهٔ هندسی اشاره کرد که اولین بار توسط آبنر شیمونی در سال ۱۹۹۵ بر اساس کمترین فاصلهٔ حالت موردنظر با حالت‌های جداپذیر معرفی شد[۲]. سپس در سال ۲۰۱۵، روش مقدار چشمداشتی اسپین، به‌عنوان روش محاسبهٔ سنجهٔ هندسی، برای حالت‌های کیوبیتی، استفاده شد که این روش، حالت چندکیوبیتی را به‌صورت یک حالت دوجزئی در نظر می‌گیرد و مقدار درهم‌تنیدگی یک اسپین را با بقیهٔ سیستم، محاسبه می‌کند [۳].

در این مقاله، قصد داریم بدون استفاده از روابط و مفاهیم سنجهٔ هندسی و به‌طور مستقل، با یافتن تأثیر درهم‌تنیدگی بر مقادیر چشمداشتی عملگرهای پائولی، سنجه‌ای برای حالت‌های

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

N کیوبیتی معرفی کنیم، سپس مسئله را برای حالت‌های کیودیتی نیز تعمیم دهیم.

۱- حالت‌های کیوبیتی، ویژه‌حالت‌های عملگر پائولی

حالت $|\psi\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle+|1\rangle)$ را در نظر می‌گیریم که در آن $|0\rangle$ و $|1\rangle$ ویژه‌حالت‌های عملگر σ_z با ویژه‌مقادیر ۱ و ۱- هستند. مقدار چشمداشتی این عملگر روی این حالت صفر است ولی می‌دانیم که این حالت، ویژه‌حالت عملگر σ_x است که مقدار چشمداشتی این عملگر را بیشینه می‌کند. به‌طور کلی برای هر حالت کیوبیتی دلخواه $|\chi\rangle=\alpha|0\rangle+\beta|1\rangle$ عملگری مانند σ_n را می‌توان یافت که حالت $|\chi\rangle$ ویژه‌بردار آن با ویژه‌مقدار بیشینهٔ ۱ باشد. بدیهی است که مقدار چشمداشتی عملگر σ_n در این حالت، مقدار ۱ خواهد بود. پیداکردن این عملگر، برای حالت‌های تک کیوبیتی، کاری آسان است.

۲- بررسی حالت‌های دوکیوبیتی

حال مسئله را برای حالت‌های دوکیوبیتی بررسی می‌کنیم. یک حالت دوکیوبیتی جداپذیر $|\psi\rangle=|A\rangle|B\rangle$ را درنظر می‌گیریم، فرض کنید: کیوبیت $|A\rangle$ در اختیار آلیس و کیوبیت $|B\rangle$ در اختیار باب باشد، آلیس می‌تواند یک عملگر σ_1 را پیدا کند که ویژه‌حالت آن $|A\rangle$ با ویژه‌مقدار ۱ باشد و همین‌طور باب σ_2 را برای $|B\rangle$ پیدا می‌کند. اگر مجموع مقادیر چشمداشتی σ_1 و σ_2 را در حالت $|\psi\rangle$ محاسبه کنیم، خواهیم داشت:

$$\langle\psi|\sigma_1|\psi\rangle+\langle\psi|\sigma_2|\psi\rangle=\langle AB|\sigma_1|AB\rangle+\langle AB|\sigma_2|AB\rangle=2 \qquad (۱)$$

برای حالت‌های درهم‌تنیده، مانند حالت $|\phi\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle+|10\rangle)$ با توجه به مفهوم درهم‌تنیدگی، آلیس نمی‌تواند عملگری را پیدا کند که $|\phi\rangle$، ویژه‌حالت آن باشد و اصولاً چنین چیزی بی‌معنی است. بنابراین برای حالت‌های درهم‌تنیده، مقدار چشمداشتی به بیشینهٔ مقدار رابطهٔ (۱) نمی‌رسد. با استفاده از این واقعیت، که از مفهوم درهم‌تنیدگی ناشی می‌شود، می‌توانیم شاخص جداپذیری حالت را به‌صورت زیر تعریف می‌کنیم:

$$\gamma=\frac{\max\langle\sigma_1\rangle+\max\langle\sigma_2\rangle+\ldots\max\langle\sigma_N\rangle}{N} \qquad (۲)$$

در این رابطه، N تعداد کیوبیت‌ها است.

با این تعریف، γ برای حالت‌های جداپذیر، برابر ۱ خواهد شد.

توجه: در صورت کسر رابطهٔ (۲)، از بیشینهٔ مقادیر چشمداشتی استفاده شده‌است، زیرا برای حالت‌های جداپذیر به‌سبب آزادی در انتخاب عملگرهای پائولی(σ_iها)، عملگرها را طوری می‌توان انتخاب کرد که مجموع مقادیر چشمداشتی عملگرهای σ_1 و σ_2 در حالت مورد نظر از صفر تا ۲ متغیر باشد ولی برای حالت‌های درهم‌تنیده، این آزادی عمل از بین می‌رود و هر چه درهم‌تنیدگی بیشتر شود، مجموع مقادیر چشمداشتی عملگرهای σ_1 و σ_2 به صفر نزدیک‌تر می‌شود و برای حالت کاملاً درهم‌تنیده این مقدار برابر میانگین ویژه‌مقادیر یعنی صفر می‌شود.

برای این‌که شاخص جداپذیری مقصود ما را به خوبی برآورده کند، باید برای حالت‌های کاملاً درهم‌تنیده مقدارش صفر شود. برای این‌کار، رابطهٔ (۱) را برای حالت کاملاً درهم‌تنیدهٔ $|\phi\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle+|10\rangle)$ در نمایش ماتریسی بررسی می‌کنیم:

ابتدا ماتریس‌های σ_1 و σ_2 را به‌دست می‌آوریم[۴]:

با توجه به این‌که $\sigma_i=\sigma_x\sin\theta_i\cos\varphi_i+\sigma_y\sin\theta_i\sin\varphi_i+\sigma_z\cos\theta_i$ که در آن θ_i، زاویهٔ قطبی که عملگر σ_i در کرهٔ بلاخ با محور Z می‌سازد و φ_i، زاویهٔ سمتی که عملگر σ_i در کرهٔ بلاخ با محور X می‌سازد.

$$\sigma_1=\sigma_1\otimes I=\begin{pmatrix}\cos\theta_1 & 0 & e^{-i\varphi_1}\sin\theta_1 & 0\\ 0 & \cos\theta_1 & 0 & e^{-i\varphi_1}\sin\theta_1\\ e^{i\varphi_1}\sin\theta_1 & 0 & -\cos\theta_1 & 0\\ 0 & e^{i\varphi_1}\sin\theta_1 & 0 & -\cos\theta_1\end{pmatrix} \qquad (۳)$$

$$\sigma_2=I\otimes\sigma_2=\begin{pmatrix}\cos\theta_2 & e^{-i\varphi_2}\sin\theta_2 & 0 & 0\\ e^{i\varphi_2}\sin\theta_2 & -\cos\theta_2 & 0 & 0\\ 0 & 0 & \cos\theta_2 & e^{-i\varphi_2}\sin\theta_2\\ 0 & 0 & e^{i\varphi_2}\sin\theta_2 & -\cos\theta_2\end{pmatrix} \qquad (۴)$$

$$\langle\phi|\sigma_1|\phi\rangle=0 \quad , \quad \langle\phi|\sigma_2|\phi\rangle=0 \qquad (۵)$$

بنابراین شاخص جداپذیری(γ) برای حالت کاملاً درهم‌تنیده، صفر می‌شود.

در حالت $|\psi\rangle=\frac{1}{2}(|00\rangle+|01\rangle+|10\rangle+|11\rangle)$، مقادیر چشمداشتی به‌صورت زیر خواهند بود:

$$\langle\sigma_1\rangle=\cos\varphi_1\sin\theta_1 \quad \Rightarrow \max\langle\sigma_1\rangle=1 \qquad (۶)$$

$$\langle\sigma_2\rangle=\cos\varphi_2\sin\theta_2 \quad \Rightarrow \max\langle\sigma_2\rangle=1 \qquad (۷)$$

بنابراین شاخص جداپذیری برابر ۱ می‌شود و حالت مورد نظر جداپذیر است.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

۳- تعریف سنجهٔ درهم‌تنیدگی

اینک می‌توانیم سنجهٔ درهم‌تنیدگی را به کمک شاخص جداپذیری به‌صورت زیر تعریف کنیم:

$$E = 1 - \gamma \qquad (۸)$$

مطابق این رابطه، مقدار سنجه برای حالت‌های جداپذیر و کاملاً درهم‌تنیدهٔ معرفی شده در بخش۲ به‌ترتیب صفر و ۱ خواهد بود. این سنجه، ویژگی‌های لازم ازجمله یکنوایی درهم‌تنیدگی تحت تبدیلات LOCC [۵]، بیشینهٔ مقدار برای حالت‌های بل و مقدار صفر برای حالت‌های جداپذیر را داراست.

مثال۱: درهم‌تنیدگی حالت $|\psi\rangle = \frac{1}{2}|00\rangle + \frac{\sqrt{3}}{2}|11\rangle$ را محاسبه می‌کنیم:

$$\langle\psi|\sigma_1|\psi\rangle = \frac{1}{4}\begin{pmatrix}1 & 0 & 0 & \sqrt{3}\end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \cos\theta_1 & 0 & e^{-i\varphi_1}\sin\theta_1 & 0 \\ 0 & \cos\theta_1 & 0 & e^{-i\varphi_1}\sin\theta_1 \\ e^{i\varphi_1}\sin\theta_1 & 0 & -\cos\theta_1 & 0 \\ 0 & e^{i\varphi_1}\sin\theta_1 & 0 & -\cos\theta_1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\\0\\\sqrt{3}\end{pmatrix} = -\frac{1}{2}\cos\theta_1$$

$$\langle\psi|\sigma_2|\psi\rangle = \frac{1}{4}\begin{pmatrix}1 & 0 & 0 & \sqrt{3}\end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \cos\theta_2 & e^{-i\varphi_2}\sin\theta_2 & 0 & 0 \\ e^{i\varphi_2}\sin\theta_2 & -\cos\theta_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cos\theta_2 & e^{-i\varphi_2}\sin\theta_2 \\ 0 & 0 & e^{i\varphi_2}\sin\theta_2 & -\cos\theta_2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\\0\\\sqrt{3}\end{pmatrix} = -\frac{1}{2}\cos\theta_2$$

$$\gamma = \frac{\max\langle\sigma_1\rangle + \max\langle\sigma_2\rangle}{N} = \frac{1}{2} \qquad \Rightarrow E = 1 - \frac{1}{2} = \frac{1}{2}$$

مثال۲: محاسبهٔ درهم‌تنیدگی حالت‌های سه‌کیوبیتی:

ابتدا ماتریس‌های σ_1، σ_2 و σ_3 را به‌دست می‌آوریم

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} \cos\theta_1 & 0 & 0 & 0 & e^{-i\varphi_1}\sin\theta_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\theta_1 & 0 & 0 & 0 & e^{-i\varphi_1}\sin\theta_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cos\theta_1 & 0 & 0 & 0 & e^{-i\varphi_1}\sin\theta_1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cos\theta_1 & 0 & 0 & 0 & e^{-i\varphi_1}\sin\theta_1 \\ e^{i\varphi_1}\sin\theta_1 & 0 & 0 & 0 & -\cos\theta_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{i\varphi_1}\sin\theta_1 & 0 & 0 & 0 & -\cos\theta_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{i\varphi_1}\sin\theta_1 & 0 & 0 & 0 & -\cos\theta_1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{i\varphi_1}\sin\theta_1 & 0 & 0 & 0 & -\cos\theta_1 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_2 = \begin{pmatrix} \cos\theta_2 & 0 & e^{-i\varphi_2}\sin\theta_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\theta_2 & 0 & e^{-i\varphi_2}\sin\theta_2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ e^{i\varphi_2}\sin\theta_2 & 0 & -\cos\theta_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{i\varphi_2}\sin\theta_2 & 0 & -\cos\theta_2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cos\theta_2 & 0 & e^{-i\varphi_2}\sin\theta_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cos\theta_2 & 0 & e^{-i\varphi_2}\sin\theta_2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & e^{i\varphi_2}\sin\theta_2 & 0 & -\cos\theta_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & e^{i\varphi_2}\sin\theta_2 & 0 & -\cos\theta_2 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_3 = \begin{pmatrix} \cos\theta_3 & e^{-i\varphi_3}\sin\theta_3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ e^{i\varphi_3}\sin\theta_3 & -\cos\theta_3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cos\theta_3 & e^{-i\varphi_3}\sin\theta_3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{i\varphi_3}\sin\theta_3 & -\cos\theta_3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cos\theta_3 & e^{-i\varphi_3}\sin\theta_3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & e^{i\varphi_3}\sin\theta_3 & -\cos\theta_3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cos\theta_3 & e^{-i\varphi_3}\sin\theta_3 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & e^{i\varphi_3}\sin\theta_3 & -\cos\theta_3 \end{pmatrix}$$

اگر حالت ما به‌صورت $|\phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{5}}|011\rangle + \frac{2}{\sqrt{5}}|100\rangle$ باشد؛

$$\langle\phi|\sigma_1|\phi\rangle = -\frac{3}{5}\cos\theta_1 \ , \ \langle\phi|\sigma_2|\phi\rangle = \frac{3}{5}\cos\theta_2 \ , \ \langle\phi|\sigma_3|\phi\rangle = \frac{3}{5}\cos\theta_3$$

$$\gamma = \frac{\max\langle\sigma_1\rangle + \max\langle\sigma_2\rangle + \max\langle\sigma_3\rangle}{N} = \frac{9}{5} = \frac{3}{5} \qquad \Rightarrow E = 1 - \frac{3}{5} = \frac{2}{5}$$

۴- تعمیم به حالت‌های کیودیتی

اکنون می‌خواهیم سنجه را برای حالت‌های دوکیودیتی تعمیم دهیم. این سنجه، فقط برای حالت‌های دوکیودیتی که به‌صورت $|\psi\rangle = a|ij\rangle + b|kl\rangle$، $(i, j, k, l = 0, 1, ..., d-1)$ هستند، بررسی شده‌است و در مورد دیگر حالت‌ها باید احتیاط شود.

رابطهٔ (۸) برای حالت‌های دوکیودیتی به‌صورت زیر است:

$$E = \lambda_{\max} - \gamma \qquad (۹)$$

در این رابطه، $\lambda_{\max}$ بزرگترین ویژه‌مقدار عملگر σ برای حالت تک‌کیودیتی موردنظر است و به‌این دلیل استفاده می‌شود، که مقدار سنجه را طوری تنظیم کند که برای حالت کاملاً درهم‌تنیده، بیشینهٔ ویژه‌مقدار و برای حالت‌های جداپذیر مقدار صفر را نتیجه دهد چون همان‌طور که در بخش۲ این مقاله، شاخص جداپذیری (γ) طوری تعریف شد که برای حالت جداپذیر، آلیس و باب عملگرهایی پیدا می‌کردند که مقدار چشمداشتی حالت را برابر بیشینهٔ ویژه‌مقدار عملگر به‌دست آورند. بدیهی است که مقدار $\lambda_{\max}$ برای حالت‌های کیوبیتی ۱، برای حالت‌های کیوتریتی ۲ و برای حالت‌های کیودیتی $d-1$ است.

برای حالت‌های دوکیودیتی، رابطهٔ (۲) را باید به‌صورت زیر تصحیح کرد:

$$\gamma = \alpha\frac{|\max\langle\sigma_1\rangle - \eta| + |\max\langle\sigma_2\rangle - \eta|}{2} \qquad (۱۰)$$

در حقیقت، در صورت کسر، هدف پیدا کردن فاصلهٔ بین بیشینهٔ مقدار چشمداشتی که مشخصهٔ جداپذیری و کمینهٔ مقدار چشمداشتی که مشخصهٔ درهم‌تنیدگی است و کمینهٔ این مقدار، همان میانگین ویژه‌مقادیر مربوط به حالت‌های مربوط به تک‌ذره است ($\eta = \frac{|\lambda_1 + \lambda_2|}{2}$). برای حالت‌های کیوبیتی، چون دو ویژه‌مقدار ۱ و ۱- وجود دارد، η برابر با صفر می‌شود. اما در کیوتریت‌ها اگر حالت مورد نظر از ترکیب $|0\rangle$ و $|1\rangle$ یا $|1\rangle$ و $|2\rangle$ باشد مقدار برابر با ۱ و اگر از $|0\rangle$ و $|2\rangle$ باشد این مقدار صفر می‌شود. در نهایت

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

ضرورت وجود ضریب α به این دلیل است که با توجه به این‌که در رابطهٔ (۹)، $\lambda_{\max}$ استفاده شده است و بعضی از حالت‌ها؛ مثلاً، در کیوتریت‌ها حالت $|1\rangle$ که ویژه‌مقدار برابر صفر دارد و با بیشینه ویژه‌مقدار اختلاف دارد، لذا جهت کالیبره کردن سنجه، ضریب α که به‌صورت $\alpha = \frac{\lambda_{\max}}{\frac{1}{2}(|\lambda_1-\eta|+|\lambda_2-\eta|)}$ تعریف می‌شود، به کار می‌رود.

مثال۳: درهم‌تنیدگی حالت‌های دوکیوتریتی:

برای حالت تک‌کیوتریتی،نمایش ماتریسی $\sigma.n$ به صورت زیر است:

$$\sigma.n = \begin{pmatrix} 2\cos\theta & \sqrt{2}e^{-i\varphi}\sin\theta & 0 \\ \sqrt{2}e^{i\varphi}\sin\theta & 0 & \sqrt{2}e^{-i\varphi}\sin\theta \\ 0 & \sqrt{2}e^{i\varphi}\sin\theta & -2\cos\theta \end{pmatrix}$$

بنابراین برای $\sigma_1 = \sigma_1 \otimes I$ و $\sigma_2 = I \otimes \sigma_2$ خواهیم داشت:

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 2\cos\theta_1 & 0 & 0 & \sqrt{2}e^{-i\varphi_1}\sin\theta_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2\cos\theta_1 & 0 & 0 & \sqrt{2}e^{-i\varphi_1}\sin\theta_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2\cos\theta_1 & 0 & 0 & \sqrt{2}e^{-i\varphi_1}\sin\theta_1 & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2}e^{i\varphi_1}\sin\theta_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{2}e^{-i\varphi_1}\sin\theta_1 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2}e^{i\varphi_1}\sin\theta_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{2}e^{-i\varphi_1}\sin\theta_1 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2}e^{i\varphi_1}\sin\theta_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{2}e^{-i\varphi_1}\sin\theta_1 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{2}e^{i\varphi_1}\sin\theta_1 & 0 & 0 & -2\cos\theta_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{2}e^{i\varphi_1}\sin\theta_1 & 0 & 0 & -2\cos\theta_1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{2}e^{i\varphi_1}\sin\theta_1 & 0 & 0 & -2\cos\theta_1 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_2 = \begin{pmatrix} 2\cos\theta_2 & \sqrt{2}e^{-i\varphi_2}\sin\theta_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2}e^{i\varphi_2}\sin\theta_2 & 0 & \sqrt{2}e^{-i\varphi_2}\sin\theta_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2}e^{i\varphi_2}\sin\theta_2 & -2\cos\theta_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2\cos\theta_2 & \sqrt{2}e^{-i\varphi_2}\sin\theta_2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{2}e^{i\varphi_2}\sin\theta_2 & 0 & \sqrt{2}e^{-i\varphi_2}\sin\theta_2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{2}e^{i\varphi_2}\sin\theta_2 & -2\cos\theta_2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2\cos\theta_2 & \sqrt{2}e^{-i\varphi_2}\sin\theta_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{2}e^{i\varphi_2}\sin\theta_2 & 0 & \sqrt{2}e^{-i\varphi_2}\sin\theta_2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{2}e^{i\varphi_2}\sin\theta_2 & -2\cos\theta_2 \end{pmatrix}$$

اگر بخواهیم درهم‌تنیدگی حالت $|\phi\rangle = \frac{1}{2}|02\rangle + \frac{\sqrt{3}}{2}|20\rangle$ را محاسبه کنیم، داریم:

$$\langle\sigma_1\rangle = -\cos\theta_1 \quad , \quad \langle\sigma_2\rangle = \cos\theta_2$$

$$\eta = \frac{|\lambda_1+\lambda_2|}{2} = \frac{|2+-2|}{2} = 0 \qquad \alpha = \frac{\lambda_{\max}}{\frac{1}{2}(|\lambda_1-\eta|+|\lambda_2-\eta|)} = \frac{2}{\frac{1}{2}(|2|+|-2|)} = 1$$

$$E = \lambda_{\max} - \alpha\frac{|\max\langle\sigma_1\rangle-\eta|+|\max\langle\sigma_2\rangle-\eta|}{2} = 2 - \frac{1+1}{2} = 1$$

و برای حالت $|\phi\rangle = \frac{1}{2}|01\rangle + \frac{\sqrt{3}}{2}|10\rangle$:

$$\langle\sigma_1\rangle = \frac{1}{2}\cos\theta_1 \quad , \quad \langle\sigma_2\rangle = \frac{1}{2}\cos\theta_2$$

$$\eta = \frac{|\lambda_1+\lambda_2|}{2} = \frac{|2+0|}{2} = 1 \qquad \alpha = \frac{\lambda_{\max}}{\frac{1}{2}(|\lambda_1-\eta|+|\lambda_2-\eta|)} = \frac{2}{\frac{1}{2}(|2-1|+|0-1|)} = 2$$

$$E = \lambda_{\max} - \alpha\frac{|\max\langle\sigma_1\rangle-\eta|+|\max\langle\sigma_2\rangle-\eta|}{2} = 2 - 2\frac{\left|\frac{1}{2}-1\right|+\left|\frac{1}{2}-1\right|}{2} = 1$$

مثال۴: درهم‌تنیدگی حالت‌های کیودیتی ردهٔ $d = 4$

نمایش ماتریسی عملگر $\sigma.n$ برای تک‌کیودیت به‌صورت زیر است:

$$\sigma.n = \begin{pmatrix} 3\cos\theta & \sqrt{3}e^{-i\varphi}\sin\theta & 0 & 0 \\ \sqrt{3}e^{i\varphi}\sin\theta & \cos\theta & 2e^{-i\varphi}\sin\theta & 0 \\ 0 & 2e^{i\varphi}\sin\theta & -\cos\theta & \sqrt{3}e^{-i\varphi}\sin\theta \\ 0 & 0 & \sqrt{3}e^{i\varphi}\sin\theta & -3\cos\theta \end{pmatrix}$$

اگر برای حالت دوکیودیتی $|\phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{5}}|01\rangle + \frac{2}{\sqrt{5}}|10\rangle$ محاسبه کنیم:

$$\langle\sigma_1\rangle = \frac{7}{5}\cos\theta_1 \quad , \quad \langle\sigma_2\rangle = \frac{13}{5}\cos\theta_2$$

$$\eta = \frac{|\lambda_1+\lambda_2|}{2} = \frac{|3+1|}{2} = 2 \qquad \alpha = \frac{\lambda_{\max}}{\frac{1}{2}(|\lambda_1-\eta|+|\lambda_2-\eta|)} = \frac{3}{\frac{1}{2}(|3-2|+|1-2|)} = 3$$

$$E = \lambda_{\max} - \alpha\frac{|\max\langle\sigma_1\rangle-\eta|+|\max\langle\sigma_2\rangle-\eta|}{2} = 3 - 3\frac{\left|\frac{7}{5}-2\right|+\left|\frac{13}{5}-2\right|}{2} = \frac{6}{5}$$

برای حالت دوکیودیتی $|\phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{5}}|03\rangle + \frac{2}{\sqrt{5}}|30\rangle$:

$$\langle\sigma_1\rangle = -\frac{9}{5}\cos\theta_1 \quad , \quad \langle\sigma_2\rangle = \frac{9}{5}\cos\theta_2$$

$$\eta = \frac{|\lambda_1+\lambda_2|}{2} = \frac{|3+-3|}{2} = 0 \qquad \alpha = \frac{\lambda_{\max}}{\frac{1}{2}(|\lambda_1-\eta|+|\lambda_2-\eta|)} = \frac{3}{\frac{1}{2}(|3-0|+|-3-0|)} = 1$$

$$E = \lambda_{\max} - \alpha\frac{|\max\langle\sigma_1\rangle-\eta|+|\max\langle\sigma_2\rangle-\eta|}{2} = 3 - \frac{\frac{9}{5}+\frac{9}{5}}{2} = \frac{6}{5}$$

و برای حالت دوکیودیتی $|\phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{5}}|12\rangle + \frac{2}{\sqrt{5}}|21\rangle$:

$$\langle\sigma_1\rangle = -\frac{3}{5}\cos\theta_1 \quad , \quad \langle\sigma_2\rangle = \frac{3}{5}\cos\theta_2$$

$$\eta = \frac{|\lambda_1+\lambda_2|}{2} = \frac{|1+-1|}{2} = 0 \qquad \alpha = \frac{\lambda_{\max}}{\frac{1}{2}(|\lambda_1-\eta|+|\lambda_2-\eta|)} = \frac{3}{\frac{1}{2}(|1-0|+|-1-0|)} = 3$$

$$E = \lambda_{\max} - \alpha\frac{|\max\langle\sigma_1\rangle-\eta|+|\max\langle\sigma_2\rangle-\eta|}{2} = 3 - 3\frac{\frac{3}{5}+\frac{3}{5}}{2} = \frac{6}{5}$$

نتیجه‌گیری

سنجهٔ معرفی‌شده، مبتنی بر مفهوم درهم‌تنیدگی و اثر آن بر مقادیر چشمداشتی عملگرهای پائولی است. این سنجه، به‌خوبی مقدار درهم‌تنیدگی حالت‌های N کیوبیتی را مشخص می‌کند. همچنین، این سنجه، درهم‌تنیدگی حالت‌های دوکیودیتی را به خوبی تعیین می‌کند. مقدار سنجه برای حالت‌های کاملاً درهم‌تنیده، برابر با $d-1$ می‌باشد، که d بُعد حالت است.

مرجع‌ها

[۱] D. Sarka, "*On measures of quantum entanglement*", *International journal of quantum information*, volume **14**, Issue 06, (2016).

[۲] A. Shimony, *"Degree of entanglement", Ann. N. Y. Acad. Sci*. **755**, 675-679 (1995).

[۳] A. M. Frydryszak and V. M. Tkachuk, *"Geometric measure of entanglement for pure states and mean value of spin"*, arXiv:1211.6472 quant-ph

[۴] D. McMahon, "*Quantum computing explained*", John Wiley & Sons, Inc, Hoboken, New Jersey (2007).

[۵] R. Horodecki, P. Horodecki, M. Horodecki, and K. Horodecki, "*Quantum entanglement*", Rev. Mod. Phys. **81** (2009).

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

شریک‌های پاریته-زمان ابرمتقارن چاه مربعی

کوهرخی، طه[۱]؛ گرایلو، میترا ؛ محمدی، علی

[۱]گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه گلستان، گرگان، ایران

چکیده

در این مقاله شریک‌های مختلط چاه مربعی نامتناهی، توسط مکانیک کوانتومی ابرتقارنی به دست آمده است. ایده‌ی معرفی‌شده، که در واقع از پیوند دو توسعه جدید مکانیک کوانتومی، یعنی مکانیک کوانتومی ابرتقارنی و پاریته-زمان متقارن به وجود آمده است، ما را به ایجاد یک توسعه‌ی جدیدتر از مکانیک کوانتومی به نام مکانیک کوانتومی پاریته-زمان ابرمتقارن، رهنمون می‌سازد. رابطه‌ی جدید ارائه‌شده برای چاه مربعی غیرهرمیتی، طیف انرژی حقیقی دارد و شرایط مرزی را ارضا می‌کند.

واژه های کلیدی: *ابرتقارن، ابرپتانسیل، پتانسیل‌های شریک*

Parity-Time Supersymmetric Partners of Square Well

Koohrokhi, Taha[1]; Gerayloo, Mitra; Mohammadi, Ali

[1]Department of Physics, Faculty of Sciences, Golestan University, Gorgan, Iran

Abstract

In this paper, complex partners of infinite square well are derived by supersymmetric quantum mechanics. The introduced idea, that is indeed generated by combination of two new developments of quantum mechanics, e.g. supersymmetric and parity-time quantum mechanics, leads us to generate a newer development of quantum mechanics entitled PT-supersymmetric quantum mechanics. The new stated relation for non-Hermitian square well has real energy spectrum and satisfies boundary conditions.

***Keywords**: Supersymmetry, Superpotential, Partner Potentials*

PACS No. 3

مقدمه

در خلال چند دهه‌ی گذشته، دو توسعه جدید مکانیک کوانتومی، به نام‌های مکانیک کوانتومی ابرتقارنی و مکانیک کوانتومی پاریته-زمان متقارن، موضوع بسیاری از تحقیقات نظری و تجربی قرار گرفته است [۱و۲]. این دست‌یافت‌های نظری، به طور جداگانه نگرش‌های بنیادی جدید و همچنین ابزار محاسباتی قوی برای تحلیل سامانه‌های کوانتومی به ارمغان آورده‌اند [۳]. مکانیک کوانتومی پاریته-زمان متقارن با جایگزینی شرط فیزیکی پاریته-زمان ناشکسته به جای شرط ریاضی هرمیتی، نشان داده است که هامیلتونی‌های غیرهرمیتی می‌توانند ویژه‌مقادیر انرژی حقیقی داشته باشند [۴]. چاه مربعی مختلط، به عنوان پایه‌ای‌ترین نمونه از این محاسبات مورد توجه محققین قرار گرفته است [۵-۹]. از طرف دیگر، مکانیک کوانتومی ابرتقارنی، برمبنای روش‌های فاکتورگیری و عملگری، ساز و کار جدیدی را معرفی کرده است که نشان می‌دهد معادله‌ی شرودینگر برای پتانسیل‌های شکل‌ناوردا جواب تحلیلی صریح دارد [۱۰]. همچنین، در مکانیک کوانتومی ابرتقارنی با معرفی ابرپتانسیل و سلسله‌مراتب هامیلتونی‌ها، نشان داده شده است که پتانسیل‌های شریک، به جز انرژی حالت پایه، طیف انرژی یکسانی دارند. پیوند این دو توسعه جدید از مکانیک کوانتومی، سبب پیدایش توسعه جدیدتر دیگر، یعنی مکانیک کوانتومی پاریته-زمان ابرمتقارن شده است [۱۱]. در این مطالعه، رابطه‌ی جدیدی برای چاه مربعی

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

یک‌بعدی بر مبنای مکانیک کوانتومی پاریته-زمان ابرمتقارن، پیشنهاد شده است.

چاه مربعی یک‌بعدی پاریته-زمان ابرمتقارن

در مکانیک کوانتومی ابرتقارنی، ابرپتانسیل n-ام، به صورت مشتق لگاریتمی تابع موج حالت پایه (با شاخص پایین صفر نشان داده شده است) تعریف می‌شود [۲]:

$$W_n(x) = -\psi_0'^{(n)}(x)/\psi_0^{(n)}(x) \quad (۱)$$

که در اینجا، به منظور ساده‌سازی $\hbar = 2m = 1$ در نظر گرفته شده است. بر طبق این تعریف و جواب معادله‌ی شرودینگر برای پتانسیل $V = 0$ درون چاه مربعی، ابرپتانسیل‌های مربوطه برابر می‌شوند با:

$$\begin{cases} W_{1c} = -k\cot(\alpha x) \\ W_{1t} = k\tan(\alpha x) \end{cases} \quad (۲)$$

که در آن $k = \sqrt{E}$ عدد موج و شاخص‌های پایین c و t به ترتیب بیانگر توابع کتانژانت و تانژانت هستند. اکنون با افزودن یک تابع موهومی به صورت زیر، رابطه‌ی جدیدی را برای ابرپتانسیل چاه مربعی معرفی می‌کنیم:

$$\begin{cases} W_{1c}(x) = -k\cot(\alpha x) + if_c(x) \\ W_{1t}(x) = k\tan(\alpha x) + if_c(x) \end{cases} \quad (۳)$$

در مکانیک کوانتومی ابرتقارنی، ارتباط بین پتانسیل‌های شریک و ابرپتانسیل به صورت زیر تعریف می‌شود [۲]:

$$\begin{cases} V_1(x) = W_1^2(x) - W_1'(x) \\ V_2(x) = W_1^2(x) + W_1'(x) \end{cases} \quad (۴)$$

با قراردادن ابرپتانسیل‌های $W_{1c}(x)$ و $W_{1t}(x)$ از رابطه‌ی (۳) در رابطه (۴)، به دست می‌آوریم:

$$\begin{cases} V_{1c}(x) = k(k-\alpha)\csc^2(kx) - k^2 - f_c^2(x) \\ \quad -i\{f_c'(x) - 2k\cot(\alpha x)f_c(x)\} \\ V_{1t}(x) = k(k-\alpha)\sec^2(kx) - k^2 - f_t^2(x) \\ \quad +i\{f_t'(x) + 2k\tan(\alpha x)f_t(x)\} \end{cases} \quad (۵)$$

و:

$$\begin{cases} V_{2c}(x) = k(k+\alpha)\csc^2(kx) - k^2 - f_c^2(x) \\ \quad -i\{f_c'(x) - 2k\cot(\alpha x)f_c(x)\} \\ V_{2t}(x) = k(k+\alpha)\sec^2(kx) - k^2 - f_t^2(x) \\ \quad +i\{f_t'(x) + 2k\tan(\alpha x)f_t(x)\} \end{cases} \quad (۶)$$

باقی‌مانده اختلاف پتانسیل‌های شریک، یعنی:

$$R_1 = V_2(k,x) - V_1(k+\alpha,x) \quad (۷)$$

برابر می‌شود با:

$$\begin{cases} R_{1c} = \alpha(\alpha+2k) + i2\{f_c'(x) + \alpha\cot(\alpha x)f_c(x)\} \\ R_{1t} = \alpha(\alpha+2k) + i2\{f_t'(x) - \alpha\tan(\alpha x)f_t(x)\} \end{cases} \quad (۸)$$

اگر پتانسیل‌های شریک، نسبت به متغیر اصلی (در اینجا x)، تابعیت یکسانی داشته و فقط در پارامترهایی که در آن‌ها ظاهر می‌شوند متفاوت باشند، به آن‌ها شکل‌ناوردا می‌گویند. طبق این تعریف، جمله‌ی باقی‌مانده باید مستقل از متغیر x باشد. این قید، شرطی را فراهم می‌کند که با استفاده از آن می‌توان توابع $f_c(x)$ و $f_t(x)$ را با صفر قراردادن جمله‌ی موهومی رابطه‌ی (۸) بدست آورد:

$$\begin{cases} f_c(\alpha x) = q\csc(\alpha x) \\ f_t(\alpha x) = q\sec(\alpha x) \end{cases} \quad (۹)$$

که در آن، q یک ثابت اختیاری است. همچنین رابطه‌ی (۹) تضمین می‌کند که باقی‌مانده‌ها حقیقی باشند:

$$R_{1c} = R_{1t} = \alpha(\alpha+2k) \quad (۱۰)$$

اکنون با قراردادن $\alpha = k$، ابرپتانسیل‌ها به صورت زیر به دست می‌آیند:

$$\begin{cases} W_{1c}(k,x) = -k\cot(kx) + iq\csc(kx) \\ W_{1t}(k,x) = k\tan(kx) + iq\sec(kx) \end{cases} \quad (۱۱)$$

بنابراین، پتانسیل‌های شریک، با جای‌گذاری این رابطه در روابط (۵) و (۶) به دست می‌آیند:

$$\begin{cases} V_{1c}(k,x) = -q^2\csc^2(kx) - k^2 \\ \quad -iqkcot(kx)csc(kx) \\ V_{1t}(k,x) = -q^2\sec^2(kx) - k^2 \\ \quad +iqktan(kx)sec(kx) \end{cases} \quad (۱۲)$$

و:

$$\begin{cases} V_{2c}(k,x) = (2k^2 - q^2)\csc^2(kx) - k^2 \\ \quad -iqk\cot(kx)csc(kx) \\ V_{2t}(k,x) = (2k^2 - q^2)\sec^2(kx) - k^2 \\ \quad +i2qktan(kx)sec(kx) \end{cases} \quad (۱۳)$$

طبق رابطه‌ی (۱)، تابع موج را می‌توان با استفاده از ابرپتانسیل بدست آورد:

$$\psi_0^{(s)}(x) = A\exp\{-\int W_s(x)dx\} \quad (۱۴)$$

در نتیجه، با قراردادن روابط (۱۱) در این رابطه، داریم:

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

$$\begin{cases} \psi_{\cdot}^{(1c)}(kx) = A\sin(kx) \\ \quad \times \exp\left\{i\frac{q}{k}\,\mathrm{Ln}[\csc(kx) - \cot(kx)]\right\} \\ \psi_{\cdot}^{(1t)}(kx) = B\cos(kx) \\ \quad \times \exp\left\{i\frac{q}{k}\,\mathrm{Ln}[\sec(kx) + \tan(kx)]\right\} \end{cases} \quad (15)$$

اکنون یک چاه مربعی یک‌بعدی بی‌نهایت، با طول $L=\pi$ را در نظر بگیرید. شرایط مرزی:

$$\psi(-L/2) = \psi(L/2) = 0 \quad (16)$$

ایجاب می‌کند که:

$$k = n + 1 \quad (17)$$

که $n= 0,1,2,\ldots$ است. بنابراین مطابق با رابطه (۷)، باقیمانده برابر می‌شود با:

$$R_1 = 3k_1^2 \quad (18)$$

ابرتقارن ناشکسته ایجاب می‌کند که $E_{\cdot}^{(1)} = 0$ باشد. بنابراین، طیف انرژی به صورت زیر بدست می‌آید:

$$E_n^{(1)} = k_n^2 - 1 = n(n+2) \quad (19)$$

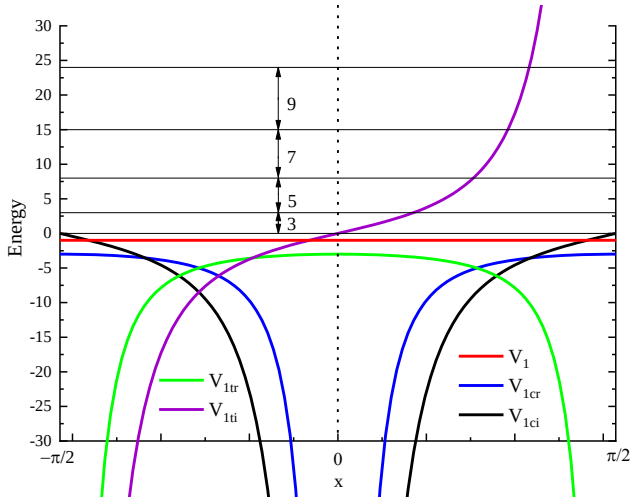
پتانسیل‌های $V_1 = -1$ $\left(k = 1$ و $q = 0\right)$ و قسمت‌های حقیقی V_{1cr} (V_{1tr}) و موهومی V_{1ci} (V_{1ti}) به ترتیب برای مقادیر نوعی $q=2$ و $k=1$ در شکل (۱) رسم شده‌اند. شکل (۲) پتانسیل‌های V_{2c} $\left(k = 1$ و $q = 0\right)$ و قسمت‌های حقیقی V_{2cr} (V_{2tr}) و موهومی V_{2ci} (V_{2ti}) به ترتیب برای مقادیر $q=2$ و $k=1$ نشان داده شده است.

نتیجه‌گیری

در روابط به دست آمده برای ابرپتانسیل‌ها (رابطه‌ی (۱۱))، پتانسیل‌های شریک (روابط (۱۲) و (۱۳)) و توابع موج (رابطه‌ی (۱۵))، چنانچه $q = 0$ را قرار دهیم، این کمیات مختلط به حالت حقیقی شناخته‌شده تبدیل می‌شوند. بنابراین می‌توانیم اینطور تفسیر کنیم که کمیات حقیقی، در واقع حالات خاصی از کمیات مختلط محسوب می‌شوند، هنگامی که قسمت‌های موهومی صفر باشد. تقارن پاریته–زمان ایجاب می‌کند که پتانسیل تحت تبدیلات زیر متقارن باشد [۱]:

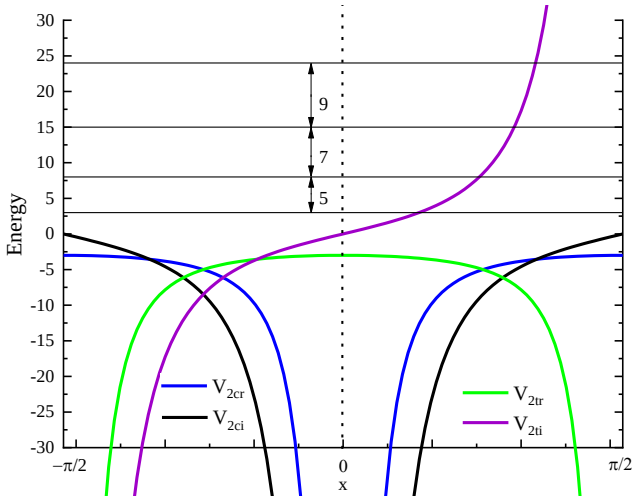
$$\begin{cases} x \to -x \\ p \to -p \\ i \to -i \end{cases} \quad (20)$$

در نتیجه، بر مبنای این تبدیلات، قسمت‌های حقیقی و موهومی پتانسیل باید به ترتیب توابع زوج و فردی از x باشند. شکل (۱) نشان می‌دهد که پتانسیل‌های V_{1tr} و V_{1ti} و شکل (۲) نشان می‌دهد که V_{2tr} و V_{2ti} این شرایط را ارضا می‌کنند (تقارن پاریته–زمان را حفظ می‌کنند). این شریک‌های پاریته–زمان ابرمتقارن، طیف انرژی یکسانی با چاه مربعی نامتناهی دارند. بنابراین برای حالت پایه، تابع موج متناظر با این پتانسیل‌ها یعنی $\psi_{\cdot}^{(1t)}(kx)$ حالت مقید و تابع موج $\psi_{\cdot}^{(1c)}(kx)$ حالت غیرمقید را نتیجه می‌دهد.



شکل ۱: پتانسیل $V_1 = -1$ $(q = 0, k = 1)$ (خط قرمز) و قسمت‌های حقیقی V_{1tr} (خط سبز) و موهومی V_{1ti} (خط بنفش) و همچنین قسمت‌های حقیقی V_{1cr} (خط آبی) و موهومی V_{1ci} (خط مشکی)، برای مقادیر نوعی $q=2$ و $k=1$ رسم شده‌اند.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



شـکل۲: قسـمت‌های حقیقی $V_{۲tr}$ (خط سـبز) و موهومی $V_{۲ti}$ (خط بنفش) و همچنین قسـمت‌های حقیقی $V_{۲cr}$ (خط آبی) و موهومی $V_{۲ci}$ (خط مشـکی)، برای مقادیر نوعی q= ۲ و k= ۱ رسم شده‌اند.

مرجع‌ها

[۱] C. M. Bender and S. Boettcher, *Phys. Rev. Lett.* ۸۰ (۱۹۹۸) ۵۲۴۳.

[۲] W. F. Cooper, A. Khare and U. Sukhatme, *Phys. Rep.* ۲۵۱ (۱۹۹۵) ۲۶۷-۳۸۵.

[۳] M. A. Miri, M. Heinrich, and D. N. Christodoulides*et al*, *Phys. Rev. A*, ۸۷ (۲۰۱۳) ۰۴۳۸۱۹.

[۴] C. M. Bender, *Rep. Prog. Phys.* ۷۰ (۲۰۰۷) ۹۴۷.

[۵] C. M. Bender et al, *J. Phys. A: Math. Gen.* ۳۲ (۱۹۹۹) ۶۷۷۱–۶۷۸۱.

[۶] M. Znojil, *Phys. Lett. A* ۲۸۵ (۲۰۰۱) ۷–۱۰.

[۷] Z. Ahmed, *Phys. Lett. A* ۳۲۴ (۲۰۰۴) ۱۵۲.

[۸] A. Mostafazadeh, *J. Math. Phys.* ۴۶ (۲۰۰۵) ۱۰۲۱۰۸.

[۹] F. Cannata, J.-P. Dedonder and A. Ventura, *Ann. Phys.* ۳۲۲ (۲۰۰۷) ۳۹۷.

[۱۰] A. Gangopadhyaya, J. V. Mallow and C. Rasinariu, *Supersymmetric Quantum Mechanics: An Introduction*, (World Scientific) ۲۰۱۱.

[۱۱] M. Znojil, F. Cannata, B. Bagchi, and R. Roychoudhury, *Phys. Lett. B* ۴۸۳ (۲۰۰۰) ۲۸۴.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

نظریه‌ای جدید برای محاسبه عامل-S اخترفیزیکی واکنش $^{3}H(d,n)^{4}He$

کوهرخی، طه[۱]؛ گرایلو، میترا ؛ محمدی، علی

[۱]گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه گلستان، گرگان، ایران

چکیده

عامل-S اخترفیزیکی برای واکنش $^{3}H(d,n)^{4}He$ در گستره وسیعی از انرژی، توسط نظریه‌ای جدید برای تونل‌زنی کوانتومی مورد مطالعه قرار گرفته است. در واقع این نظریه بر مبنای تلفیق نظریه‌ی پراکندگی امواج جزئی، مدل اپتیکی هسته‌ای و مکانیک کوانتومی پاریته-زمان ابرمتقارن بنا نهاده شده است. در این ارتباط، یک پتانسیل شکل ناوردای پاریته-زمان متقارن مختلط توسط مکانیک کوانتومی ابرتقارنی ناشکسته استخراج می‌شود. در حالی که پراکندگی و جذب همزمان ذرات، به ترتیب توسط قسمت‌های حقیقی و موهومی پتانسیل توصیف می‌شود، تقارن پاریته-زمان تضمین می‌کند که چاه پتانسیل در هسته‌ی مرکب، طیف انرژی حقیقی داشته باشد. تطابق بسیار خوب نتایج با داده‌های تجربی، مؤید اعتبار نظریه است.

واژه های کلیدی: *سطح مقطع، تونل‌زنی کوانتومی، همجوشی هسته‌ای*

A New Theory for Calculation of Astrophysical S-Factor of $^{3}H(d,n)^{4}He$ Reaction

Koohrokhi, Taha[1]; Gerayloo, Mitra; Mohammadi, Ali

[1]*Department of Physics, Faculty of Sciences, Golestan University, Gorgan, Iran*

Abstract

The astrophysical S-factor for $^{3}H(d,n)^{4}He$ reaction is studied over wide range of energies by a new theory for quantum tunneling. In fact, this theory is based on combining of partial waves scattering theory, nuclear optical model and PT-supersymmteric quantum mechanics. In this regard, a complex PT-symmetry shape invariant potential is derived by the unbroken supersymmetric quantum mechanics. In a while simultaneous scattering and absorption of particles are described by real and imaginary parts of the potential, respectively, the PT-symmetry guarantees that the potential well has real energy spectrum in the compound nucleus. The obtained excellent agreement the results with experimental data, indicates validation of the theory.

***Keywords**: Cross Section, Quantum Tunneling, Nuclear Fusion*

PACS No. 25

مقدمه

بر طبق مکانیک کلاسیک، عبور از سد تنها هنگامی امکان‌پذیر است که انرژی قابل دسترس برای واکنش از ارتفاع سد بیشتر باشد. اما بر طبق مکانیک کوانتومی، هنگامی که انرژی قابل دسترس در سیستم مختصات مرکز جرم کوچک‌تر از سد کولنی باشد، واکنش به علت اثر تونل‌زنی کوانتومی تحقق‌پذیر خواهد بود. در این حالت سطح مقطع واکنش همجوشی متناسب با احتمال تونل‌زنی است[۱]:

$$\sigma(E) \propto \exp(-2\pi\eta) \qquad (1)$$

که در آن $\eta = 1/ka_c$ پارامتر کولنی بی‌بعد، $k = \sqrt{2\mu E}/\hbar$ عدد موج، E انرژی کل در سامانه‌ی مختصات مرکز جرم، $\eta = \hbar^2/\mu Z_p Z_t e^2$ طول واحد کولنی، μ جرم کاهیده و $Z_p e$ بار پرتابه و $Z_t e$ بار هدف است. مکانیک کوانتومی نشان می‌دهد که احتمال واکنش همجوشی، با عامل هندسی $\pi\lambda^2 \propto 1/E$ نیز متناسب است که λ بیانگر طول موج دوبروی است. وابستگی شدید این عامل و احتمال نفوذ از سد پتانسیل کولنی به انرژی، باعث معرفی کمیت جدیدی به نام عامل-S اخترفیزیکی شده

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد

http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

است [۳و۲]. با ضرب این سه جمله، سطح مقطع همجوشی به شکل زیر تعریف می‌شود:

$$\sigma(E) = \frac{1}{E}\exp(-2\pi\eta)S(E) \qquad (۲)$$

انگیزهٔ تعریف سطح مقطع همجوشی به این صورت، جداسازی عامل‌های قویاً وابسته به انرژی (که مربوط به قسمت کولنی و کانال فرودی می‌شوند) و معرفی عامل-S است. عامل-S تغییرات آرامی نسبت به انرژی از خود نشان می‌دهد و این تابع به قسمت هسته‌ای احتمال واکنش همجوشی مربوط می‌شود [۳].

شریک‌های پاریته-زمان ابرمتقارن

برای قسمت هسته‌ای، پتانسیل روزن-مورس یک را در نظر می‌گیریم [۴]. ابرپتانسیل این پتانسیل به صورت زیر است:

$$W(x) = -A\cot(\alpha x) - \frac{B}{A} \qquad (۳)$$

که در آن، A, α و B ضرایب ثابت هستند و $0 \le x \le \pi$ می‌باشد. اکنون با توجه به ویژگی شکل ناوردایی این پتانسیل، یک شریک مختلط برای آن بدست می‌آوریم. با یک تابع اختیاری حقیقی $f(x)$، آن را به صفحه‌ی مختلط تعمیم می‌دهیم:

$$\widetilde{W}(x) = -A\cot(\alpha x) - \frac{B}{A} + if(x) \qquad (۴)$$

علامت " ~ " بر روی پتانسیل و ابرپتانسیل، بیانگر مختلط بودن آن‌ها است. در مکانیک کوانتومی ابرتقارنی، پتانسیل‌های شریک از معادله‌ی ریکاتی بدست می‌آیند [۵]:

$$\begin{cases}\tilde{V}_1(x) = \widetilde{W}^2(x) - \widetilde{W}'(x)\\ \tilde{V}_2(x) = \widetilde{W}^2(x) + \widetilde{W}'(x)\end{cases} \qquad (۵)$$

برای سادگی، فرض کرده‌ایم که $\hbar = 2m = 1$ باشد. با جایگذاری رابطه‌ی (۴) در (۵) داریم:

$$\begin{cases}\tilde{V}_1(x) = A(A-\alpha)\csc^2(\alpha x) - A^2 + \frac{B^2}{A^2}\\ \qquad +2B\cot(\alpha x) - f^2(x)\\ +i\left\{-2\left(A\cot(\alpha x)\right) + \frac{B}{A}f(x) - f'(x)\right\}\\ \tilde{V}_2(x) = A(A+\alpha)\csc^2(\alpha x) - A^2 + \frac{B^2}{A^2}\\ \qquad +2B\cot(\alpha x) - f^2(x)\\ +i\left\{-2\left(A\cot(\alpha x)\right) + \frac{B}{A}f(x) + f'(x)\right\}\end{cases} \qquad (۶)$$

باقیمانده‌ی این دو پتانسیل شکل ناوردا، از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید [۵]:

$$\begin{aligned}R_1 &= \tilde{V}_2(A,x) - \tilde{V}_1(A+\alpha,x)\\ &= (A+\alpha)^2 - A^2 + \frac{B^2}{A^2} - \frac{B^2}{(A+\alpha)^2}\\ &+2i\{\alpha\cot(\alpha x) + f'(x)\} + i\frac{\alpha B}{A(A+\alpha)}f(x)\end{aligned} \qquad (۷)$$

برای اینکه طیف انرژی در هسته‌ی مرکب حقیقی باشد، قسمت موهومی باقیمانده باید برابر با صفر باشد. با اعمال این قید بر رابطه‌ی (۷)، تابع اختیاری $f(x)$ به صورت زیر بدست می‌آید:

$$f(x) = q\,\csc(\alpha x)\exp\left\{\frac{\alpha B}{A(A+\alpha)}x\right\} \qquad (۸)$$

که در آن، q یک ثابت دلخواه انتگرال‌گیری است. در نتیجه، تعمیم ابر پتانسیل روزن-مورس یک به صفحه‌ی مختلط برابر می‌شود با:

$$\begin{aligned}\widetilde{W}(x) &= -A\cot(\alpha x) - \frac{B}{A}\\ &+iq\,\csc(\alpha x)\,\exp\left\{\frac{\alpha B}{A(A+\alpha)}x\right\}\end{aligned} \qquad (۹)$$

اگر در این رابطه ثابت اختیاری q را صفر قرار دهیم، ابرپتانسیل روزن-مورس یک (رابطه‌ی (۳)) بدست می‌آید.

احتمال عبور از سد

مدل اپتیکی، مدلی است که برای توصیف پراکندگی همراه با اثرات جذبی به کار می‌رود. در اپتیک، عبور یک موج الکترومغناطیسی از محیطی که رسانندگی آن صفر نیست، با یک ضریب شکست مختلط توصیف می‌شود. به این ترتیب، انتشار و جذب موج الکترومغناطیسی توسط محیط، به ترتیب به قسمت‌های حقیقی و موهومی ضریب شکست مربوط می‌شود [۶]. در مدل اپتیکی واکنش‌های هسته‌ای، توصیف هم‌زمان پراکندگی و واکنش ذرات با یک جابجایی فاز مختلط صورت می‌گیرد [۷]:

$$\delta_\ell = \delta_{\ell r} + \mathrm{i}\delta_{\ell i} \qquad (۱۰)$$

که در آن $\delta_{\ell r}$ قسمت حقیقی و $\delta_{\ell i}$ قسمت موهومی جابجایی فاز است. در نتیجه، تانژانت جابجایی فاز نیز کمیتی مختلط است:

$$\tan\delta_\ell = \mathrm{T}\delta_{\ell r} + \mathrm{iT}\delta_{\ell i} \qquad (۱۱)$$

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

که در آن $\mathrm{T}\delta_{\ell r}$ قسمت حقیقی و $\mathrm{T}\delta_{\ell i}$ قسمت موهومی تانژانت جابجایی فاز است. با این فرض، احتمال عبور از سد به صورت زیر بدست می‌آید [۸]:

$$P_\ell(E)=\frac{۴\mathrm{T}\delta_{\ell i}}{(\mathrm{T}\delta_{\ell r})^۲+(۱+\mathrm{T}\delta_{\ell i})^۲} \qquad (۱۲)$$

پیوستگی مشتق اول تابع موج از طرفی، و یکتایی تابع موج از طرف دیگر، ایجاب می‌کند که مشتق لگاریتمی تابع موج در هر موقعیت پیوسته باشد. پتانسیل هسته‌ای و کولنی به ترتیب دارای بردهای محدود و نامحدود هستند. بنابراین فرآیند جذب توسط پتانسیل جاذب هسته‌ای، در فاصله‌ای که آن‌را شعاع مؤثر جذب R_{E} می‌نامیم، رخ می‌دهد. برای پیوستگی مشتق لگارتیمی توابع موج داخل و خارج این ناحیه، روی مرز داریم:

$$\left.\frac{u'_{\mathrm{int}}(r)}{u_{\mathrm{int}}(r)}\right|_{r=R_{\mathrm{E}}}=\left.\frac{u'_{\mathrm{ext}}(r)}{u_{\mathrm{ext}}(r)}\right|_{r=R_{\mathrm{E}}} \qquad (۱۳)$$

در ناحیه‌ی خارج ($r>R_{\mathrm{E}}$)، پتانسیل کولنی غالب است و در نتیجه تابع موج در این ناحیه، همان تابع موج کولنی است. بنابراین، مشتق لگاریتمی تابع موج در ناحیه‌ی خارج از شعاع مؤثر جذب برابر می‌شود با [۸]:

$$\left.\frac{u'_{\mathrm{ext}}(r)}{u_{\mathrm{ext}}(r)}\right|_{r=R_{\mathrm{E}}}=\frac{F'_\ell(R_{\mathrm{E}})+\tan\delta_\ell G'_\ell(R_{\mathrm{E}})}{F_\ell(R_{\mathrm{E}})+\tan\delta_\ell G_\ell(R_{\mathrm{E}})} \qquad (۱۴)$$

در ناحیه‌ی داخل ($r<R_{\mathrm{E}}$)، پتانسیل جاذب هسته‌ای بر دافعه‌ی کولنی غلبه می‌کند. مطابق با تعریف ابرپتانسیل، مشتق لگاریتمی این ناحیه جدا از یک ضریب، با ابرپتانسیل برابر است:

$$\frac{u'_{\mathrm{int}}(r)}{u_{\mathrm{int}}(r)}=-\frac{\sqrt{۲\mu}}{\hbar}W(r) \qquad (۱۵)$$

جابجایی فاز مختلط ایجاب می‌کند که ابرپتانسیل، کمیتی مختلط باشد:

$$W(r)=W_r(r)+\mathrm{i}W_i(r) \qquad (۱۶)$$

با جایگذاری این ملاحظات در رابطه‌ی (۱۳)، قسمت‌های حقیقی و موهومی تانژانت جابجایی فاز هسته‌ای به صورت زیر بدست می‌آیند:

$$\begin{cases}\mathrm{T}\delta^N_{\ell r}=\frac{A}{C}\\ \mathrm{T}\delta^N_{\ell i}=\frac{B}{C}\end{cases} \qquad (۱۷)$$

که در آن داریم:

$$\begin{cases}\mathrm{A}=W_r\rho_E\left(G_\ell F'_\ell+F_\ell G'_\ell\right)\\ \quad -G'_\ell F'_\ell\rho_E^۲(W_r^۲+W_i^۲)-F_\ell G_\ell\\ \mathrm{C}=G'^{۲}_\ell\rho_E^۲(W_r^۲+W_i^۲)\\ \quad +G_\ell\left(G_\ell-۲G'_\ell W_r\rho_E\right)\end{cases} \qquad (۱۸)$$

که $\rho_E=kR_E$ است. این روابط نشان می‌دهند که با تعیین ابرپتانسیل هسته‌ای، احتمال عبور از سد و در نتیجه سطح مقطع واکنش بدست می‌آید. با جایگذاری قسمت‌های حقیقی و موهومی ابرپتانسیل روزن-مورس یک که در بخش قبل بدست آوریم (رابطه‌ی ۹)، در رابطه‌ی (۱۸) احتمال عبور از سد بدست می‌آید.

عامل-S اخترفیزیکی

عامل-S اخترفیزیکی از رابطه‌ی (۲) برابر می‌شود با:

$$S_\ell(E)=E\sigma_\ell(E)\exp(۲\pi\eta) \qquad (۱۹)$$

که در آن $\sigma_\ell(E)$ سطح مقطع واکنش پاره‌موج ℓام است و برابر می‌شود با [۸]:

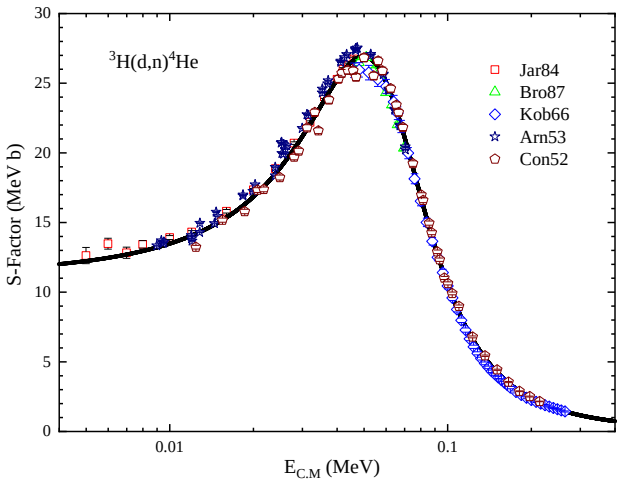
$$\sigma_\ell(E)=\frac{\pi}{k^۲}g\left(I,s_p,s_t\right)\left(۱+\delta_{p,t}\right)P_\ell(E) \qquad (۲۰)$$

و:

$$g\left(I,s_p,s_t\right)=\frac{۲I+۱}{(۲s_p+۱)(۲s_t+۱)} \qquad (۲۱)$$

عامل آماری اسپینی، وابسته به تکانه‌ی زاویه‌ای کل تراز انرژی در هسته‌ی مرکب I، اسپین پرتابه s_p و اسپین هدف s_t است. در رابطه‌ی (۲۰)، $\delta_{p,t}$، دلتای کرونکر است که به دلیل احتساب ویژگی تمیزناپذیری ذرات یکسان در مکانیک کوانتومی، وارد شده است.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



شکل (۱): عامل-S اخترفیزیکی نتایج حاصل از محاسبه و مقایسه با داده‌های تجربی را برای واکنش همجوشی دوتریوم-تریتیوم بر حسب انرژی در دستگاه مختصات مرکز جرم، به ازای $\ell = 0$ رسم شده است [۱۳-۹].

نتیجه‌گیری

در شکل (۱)، نتایج حاصل از محاسبه‌ی عامل-S اخترفیزیکی و داده‌های تجربی برای واکنش ^{3}H(d,n)^{4}He بر حسب انرژی در دستگاه مختصات مرکز جرم، به ازای $\ell = 0$ رسم شده است [۱۳-۹]. توافق بسیار خوب نتایج بدست آمده از به کارگیری نظریه‌ی پراکندگی و مدل اپتیکی در محاسبه‌ی عامل-S اخترفیزیکی، به همراه استفاده‌ی صحیح از دو توسعه‌ی جدید مکانیک کوانتومی، یعنی مکانیک کوانتومی ابرتقارنی و مکانیک کوانتومی پاریته-زمان متقارن، نویدبخش پایه‌ریزی نظریه‌ای جدید برای تونل‌زنی کوانتومی و محاسبه‌ی سطح مقطع واکنش‌های هسته‌ای است.

مرجع‌ها

[۱] G. Z. Gamov. *Phys.* ۵۱ (۱۹۲۸) ۲۰٤.
[۲] E. M. Burbidge, G. R. Burbidge, W. A. Fowler, F. Hoyle, Rev. Mod. *Phys.* ۲۹ (۱۹۵۷) ٥٤۷.
[۳] D. D. Clyton, Principles of Stellar Evolution And Nucleosynthesis, Mcgraw-Hill, New York (۱۹٦۸).
[٤] A. Barut, A. Inomata and R. Wilson, *Jour. Phys. A* ۲۰, ٤۰۷٥ (۱۹۸۷).
[٥] W. F. Cooper, A. Khare and U. Sukhatme, *Phys. Rep.* ۲٥۱ (۱۹۹٥) ۲٦۷-۳۸٥.
[٦] J. R. Reitz, F. J. Milford and R. W. Christy, *Foundations of Electromagnetic Theory*, Addison-Wesley; ٤th Edition (۲۰۰۸).
[۷] P. H. Hodgson, *The Nuclear Optical Model*, Oxford, (۱۹۹٤).
[۸] T. Koohrokhi, A. M. Izadpanah and S. K. Hosseini J. Fusion Energy, ۳٥ (٦), (۲۰۱٦) ۸۱٦-۸۲۲.
[۹] N. Jarmie, R. E. Brown, and R. A. Hardekopf, Phys. Rev. C ۲۹, ۲۰۳۱ ۸۰ (۱۹۸٤).
[۱۰] R. E. Brown, N. Jarmie, and G. M. Hale, Phys. Rev. C ۳٥, ۱۹۹۹ (۱۹۸۷).
[۱۱] A. P. Kobzev, V. I. Salatskij, and S. A. Telezhnikov, Sov. J. Nucl. Phys. ۳, ۷۷٤ (۱۹٦٦).
[۱۲] W. R. Arnold, J. A. Phillips, G. A. Sawyer, E. J. S. Jr., and J. L. Tuck,۸٥ Absolute cross section for the reaction T(d; n)٤He from ۱۰ to ۱۲۰ keV,Tech. Rep. LA-۱٤۷۹, Los Alamos Scienti_c Laboratory, Los Alamos, NM,۱۹٥۳ (unpublished).
[۱۳] J. P. Conner, T. W. Bonner, and J. R. Smith, Phys. Rev. ۸۸, ٤٦۸ (۱۹٥۲).

این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد :
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

تحلیل گرمایی، تعیین انرژی فعالسازی و ظرفیت گرمایی ویژه در فشار ثابت شیشه‌های MoO_3-V_2O_5-TeO_2

حسینی، سیده فاطمه؛ سوری، داریوش

گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه ملایر، ملایر

چکیده

در کار حاضر، ترکیبات توده‌ای آمورف $xMoO_3$-$(60-x)V_2O_5$-$40TeO_2$ با درصدهای مولی مختلف $0\leq x\leq 60$، با روش معروف فرونشانی مذاب ساخته شدند. نمودارهای گرماسنجی روبشی تفاضلی (DSC) این نمونه‌ها در نرخ‌های گرمایش مختلف مورد استفاده قرار گرفت تا اطلاعات بیشتری در مورد ویژگی‌های کالریمتری آنها حاصل شود. دمای گذار شیشه‌ای (T_g)، ناحیه گذار شیشه‌ای، دمای شروع بلورینگی (T_x) و دمای بلورینگی(T_{cr}) نمونه‌ها در نرخ‌های گرمایش مختلف تعیین شده است، تا با استفاده از آنها انرژی فعالسازی گذار شیشه‌ای و بلورینگی نمونه‌ها با استفاده از مدل‌های اوزاوا، موینهان و کیسینجر محاسبه شود. از منحنی‌های کالریمتری برای رسم منحنی‌های ظرفیت گرمایی ویژه در فشار ثابت برحسب دما استفاده شده است. علاوه براین، وابستگی ظرفیت گرمایی و پارامتر تردی نمونه به میزان مؤلفه‌ی MoO_3 مورد بررسی قرار گرفتند. نمونه های با ۱۰ و ۲۰ درصد مولی اکسید مولیبدن نمونه‌های بهینه با کمترین تردی جهت استفاده‌های عملی می‌باشند.

Thermal analysis, determination of the activation energy and specific heat capacity at the constant pressure of MoO_3-V_2O_5-TeO_2 glasses

Hosseini, Seyyedeh Fatemeh; Souri, Dariush

Department of Physics, Faculty of Science, Malayer University, Malayer

Abstract

In the present work, $xMoO_3$-$(60-x)$ V_2O_5-$40TeO_2$ amorphous bulk compositions with different molar contents of $0\leq x\leq 60$, were prepared by well-known melt-quenching method. Differential scanning calorimetry (DSC) at different heating rates (φ) was used to thermal analyze and to find out more insight about calorimetric characteristics of the present glasses. The characteristic temperatures such as glass transition temperature (T_g), glass transition region, the temperature corresponding to the onset of crystallization (T_x) and also the crystallization temperature (T_{Cr}) were obtained at different heating rates, to estimate the key kinetic parameters of glass transition and crystallization activation energies by using Ozawa, Moyinhan and Kissinger methods. Calorimetric curves have used to plot the specific heat capacity curves at constant pressure versus temperature. In addition, the dependence of the heat capacity and fragility parameter on the MoO_3 content were investigated. Samples having 10 and 20% of MoO_3 are the optimal samples (with the least fragility) for applications.

PACS No. 65

مقدمه

نظر به اهمیت ویژه‌ی نیم‌رساناها، در دهه‌های اخیر شیشه‌های اکسیدی حاوی عناصر واسطه نیز به‌طور گسترده مورد بررسی قرار گرفته‌اند؛ دلیل توجه روزافزون به این دسته از جامدات، ویژگی‌های منحصر به‌فرد آن‌هاست[۲و۱]. بر اساس دیگر پژوهش‌ها، شیشه‌های تلوریمی به دلیل دمای ذوب پایین، ویژگی غیر نمگیری، گذار فروسرخ خوب، ویژگی‌های الکتریکی و اپتیکی و ساختار مقاوم در برابر شوک‌های گرمایی دارای اهمیت خاصی هستند[۴و۳]. روش گرماسنجی روبشی تفاضلی به طور گسترده در بررسی فرآیند گذار شیشه‌ای مورد استفاده قرار می‌گیرد. پویایی گذار شیشه‌ای که در روش DSC مورد مطالعه قرار می‌گیرد، در بررسی فرآیند گذار شیشه‌ای بسیار حائز اهمیت است. دمای گذار شیشه‌ای و دیگر دماهای مشخصه با استفاده از اندازه گیری‌های DSC به طور دقیق قابل اندازه گیری هستند[۶و۵]. در پژوهش حاضر، شیشه‌های MoO_3-V_2O_5-TeO_2 جهت تحلیل گرمایی، یافتن ظرفیت گرمایی ویژه در فشار ثابت و همچنین تردی آنها مورد بررسی قرار گرفته‌اند.

فرآیند آزمایشگاهی و تشریح دستگاه‌ها

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد

http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

کار حاضر، جهت تهیه شیشه‌های $xMoO_3$-$(60-x)V_2O_5$-$40TeO_2$ (x دارای مقادیر ۰ تا ۶۰ درصد مولی است و شیشه‌های حاصل به اختصار TVMx نامیده می‌شوند)، از ذوب پودرهای اولیه با درصد خلوص بالا به روش سرمایش مذاب استفاده شده است که جزئیات مربوطه در مرجع شماره (۷) آمده است. تحلیل ساختاری و بررسی گرمایی این نمونه‌ها، به ترتیب به وسیله پراش پرتو X توسط دستگاه (XRD-Diffractometer: SEIFERT3003, CuK_α) و دستگاه گرماسنجی روبشی تفاضلی (DSC. 822, Mettler Toledo, Switzer land) انجام شده‌است.

نتایج و بحث

الف: مشخصه نگاری ساختاری توسط پراش پرتو X

مشخصه یابی پرتو ایکس روی نمونه‌های توده‌ای TVMx به روش پودری انجام شده است که نتایج آن در مرجع شماره (۷) آمده است و عدم وجود پیک‌های بلوری در این الگوها طبیعت آمورف و غیر بلوری نمونه‌ها را تایید می‌کند[۷].

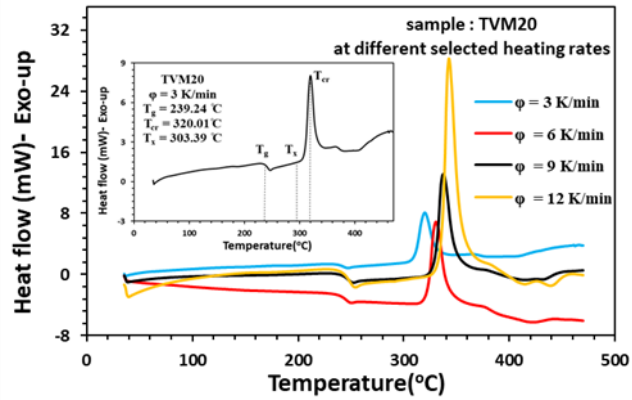
ب: تحلیل گرمایی و ظرفیت گرمایی ویژه

شکل(۱) نمودار DSC را برای نمونه‌ی نوعی TVM20 در نرخ‌های گرمایش مختلف نشان می‌دهد؛ دماهای T_g، T_x و T_{cr} که به ترتیب دمای گذار شیشه‌ای، دمای شروع تبلور و بلورینگی هستند که برای نرخ گرمایش ۳ K/min در تصویر درونی شکل (۱) نشان داده شده‌اند. با ملاحظه این نمودارها، گذار شیشه‌ای با یک تغییر گرماگیر مشهود است که در این کار، میانه ناحیه گرماگیر به عنوان دمای گذار شیشه‌ای (T_g) درنظر گرفته شده‌است. با توجه به شکل (۲) علت انتخاب میانه ناحیه گرماگیر این است که اولین قله از مشتق اول منحنی بر میانه ناحیه گرماگیر منطبق است. همچنین نقطه شروع بلندترین قله گرمازا در منحنی های DSC دمای شروع بلورینگی(T_x) درنظر گرفته می‌شود. علاوه بر این قله گرمازا در دماهای بالاتر از گذار شیشه‌ای مربوط به ایجاد فاز بلوری در نمونه بوده و آن را با دمای بلوری (T_{cr}) نشان می‌دهیم.

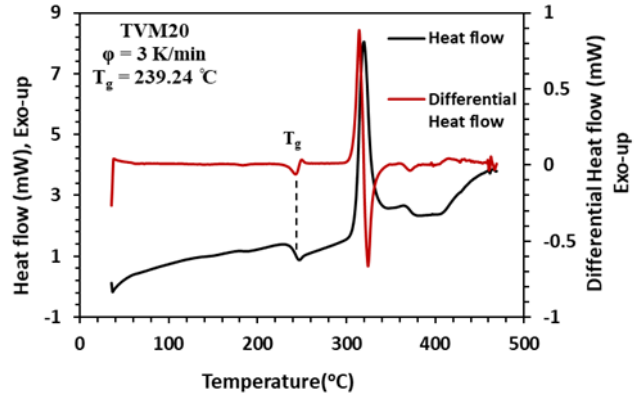
مدل‌های گرماسنجی اوزاوا [۸]، موینهان [۹] و کیسینجر [۱۰] رابطه‌هایی برای محاسبه انرژی فعالسازی گذار شیشه‌ای در ناحیه ی گذار شیشه‌ای ارائه می‌دهند. در مدل اوزاوا براساس معادله (۱) از رسم نمودار $\ln(\phi)$ برحسب $1000/T_x$، و محاسبه شیب آن می‌توان انرژی فعالسازی بلورینگی را برای نمونه های مختلف محاسبه کرد که نتایج در جدول (۱) ذکر شده است.

$$dln(\varphi)/d(1/T_x) = -\Delta E_{Ozawa}/R \qquad (۱)$$

در این رابطه ΔE_{Ozawa} انرژی فعالسازی بلورینگی بدست آمده از روش اوزاوا است.

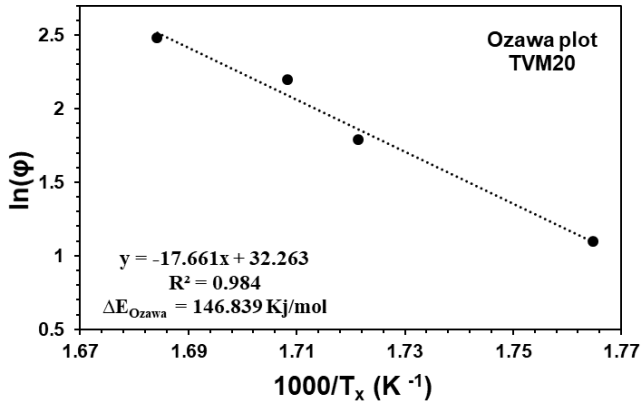


شکل(۱): ترموگراف DSC نمونه‌ی TVM20 در نرخ‌های گرمایش مختلف.



شکل(۲): منحنی DSC و مشتق آن برای نمونه‌ی TVM20 در نرخ گرمایش ۳ K/min.

شکل (۳) نمودار $\ln(\phi)$ بر حسب $1000/T_x$ را جهت ارزیابی مدل اوزاوا برای نمونه‌ی نوعی TVM20 نشان می‌دهد.

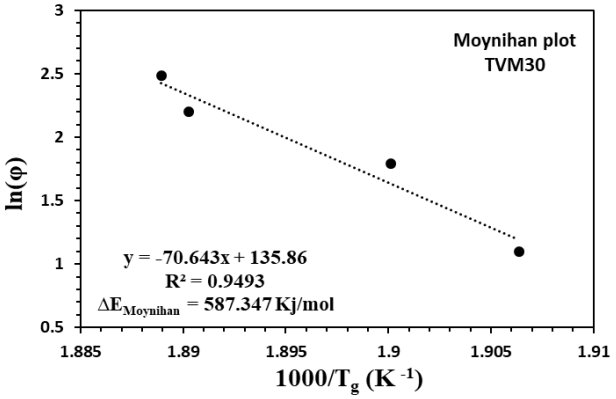


شکل(۳): نمودار اوزاوا برای نمونه های TVM20.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مویینهان بر اساس معادله (۲) از رسم نمودار $\ln(\phi)$ برحسب $1000/T_g$، و محاسبه شیب آن می‌توان انرژی فعالسازی را بدست آورد (شکل (۴) برای نمونه نوعی TVM30).

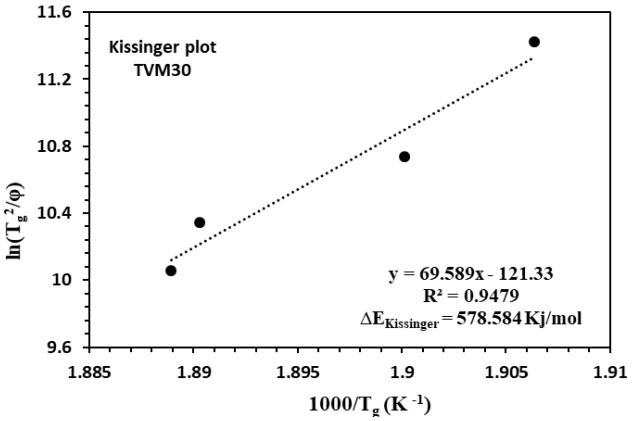
$$ln\varphi = - \Delta E_{Moynihan}/ (RT_g) \qquad (۲)$$



شکل (۴): نمودار $\ln\varphi$ بر حسب $1000/T_g$ برای نمونه‌ی TVM30.

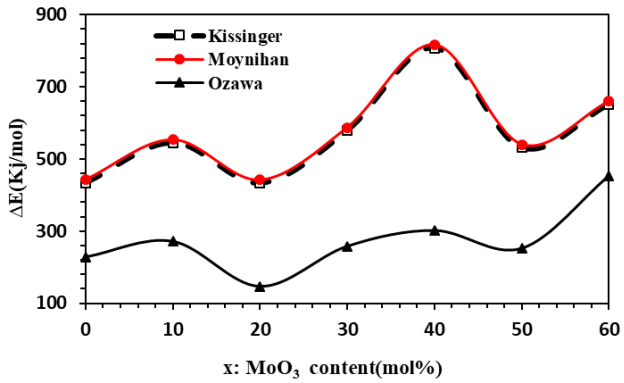
همچنین شکل (۵) نمودار $\ln(T^2g/\phi)$ بر حسب $1000/T_g$ را جهت ارزیابی مدل کیسینجر مبتنی بر رابطه (۳) برای نمونه‌ی TVM30 نشان می‌دهد.

$$ln\ (T_g^2\ /\varphi) = \Delta E_{Kissinger}/R\ T_g \quad . \qquad (۳)$$

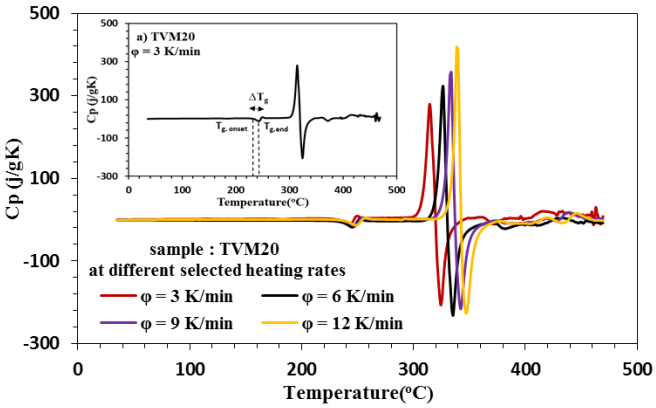


شکل(۵): نمودار کسینجر برای نمونه های TVM30.

انرژی فعالسازی نمونه‌ها برحسب تراکم MoO_3 در شکل (۶) رسم شده است که نشاندهنده تفاوت نزدیکی مقادیر انرژی فعالسازی بدست آمده در هر دو روش موینهان و کیسینجر می‌باشد و اختلاف در مقدار ΔE ممکن است ناشی از اختلاف در تعیین مقدار دقیق T_g باشد. در کار حاضر، به طور کلی ضریب همبستگی نمودارها (R^2) برای مدل موینیهان به یک نزدیکتر است که حاکی از مناسب‌تر بودن مدل موینیهان است. از طرف دیگر، جهت حصول منحنی ظرفیت گرمایی در فشار ثابت بر حسب دما، مقادیر شار گرما بر جرم نمونه-ی آزمون تقسیم شده و حاصل در زمان آزمون کالریمتری ضرب می‌شود؛ سپس نمودار مقادیر حاصل بر حسب دما در برنامه‌ی اوریجین رسم شده که منحنی مشتق اول آن نمودار ظرفیت گرمایی ویژه در فشار ثابت خواهد بود (بررسی آنتالپی). شکل (۷) نمودار ظرفیت گرمایی فشار ثابت نمونه‌ی نوعی *TVM20* را در نرخ‌های گرمایش مختلف نشان می‌دهد که به صورت نوعی برای نرخ گرمایش *۳K/min* در تصویر درونی شکل (۷) نشان داده است.



شکل(۶): نمودار وابستگی انرژی فعالسازی محاسبه شده به میزان مؤلفه-ی MoO_3 در شیشه‌های TVMx.



شکل(۷): منحنی ظرفیت گرمایی فشار ثابت نمونه‌ی TVM20 در نرخ‌های گرمایش متفاوت.

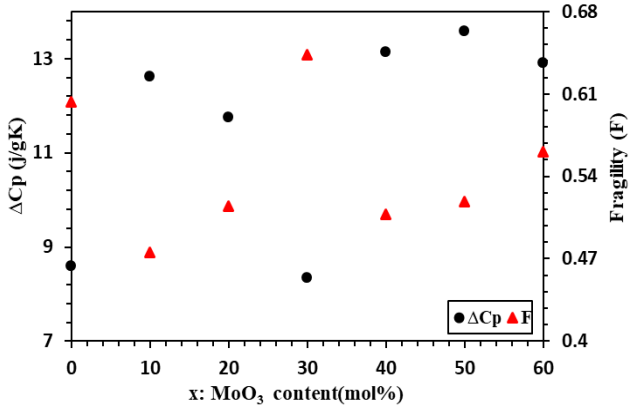
منحنی تغییرات تغییر ظرفیت گرمایی (ΔC_p) در عرض ناحیه‌ی گذار شیشه‌ای (ΔT_g) برحسب MoO_3 در شکل (۸) رسم شده است، و با استفاده از رابطه شماره (۴) پارامتر تردی نمونه‌ها (F) محاسبه و در جدول (۱) و شکل (۸) گزارش شده است[۱۱].

$$F = (0.151 - \chi) / (0.151 + \chi) \qquad (۴)$$

در این رابطه $\chi = \Delta T_g / T_g$ می‌باشد که (ΔT_g) بصورت $T_{g.end} - T_{g.onset}$ بوده و $T_{g.end}$ و $T_{g.onset}$ بترتیب انتها و ابتدای ناحیه‌ی گذار شیشه‌ای محسوب می‌شوند که در شکل درونی شکل (۷) بصورت نوعی نمایش داده شده‌اند. تردی نمونه‌ها در محدوده ۰/۶۴۳۰ – ۰/۴۷۵۳ است که کمترین مقادیر تردی به نمونه-های TVM10 و TVM20 بعنوان نمونه های بهینه با ساختار مقاوم

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مدولهای الاستیک بالاتر اختصاص دارد. همانطور که مشاهده می-شود، رابطه‌ی عکس بین مقادیر ΔC_p و تردی نمونه‌ها وجود دارد. همچنین کمترین مقدار مربوط به نمونه‌ی TVM30 است که به طورکلی ویژگی مشخصه‌ی یک شیشه‌ی شکننده است.



شکل (۸): منحنی حساسیت ترکیبی تردی F و ΔC_p در شیشه‌های TVMx.

نتیجه گیری

نمونه های TVM10 و TVM20 دارای کمترین تردی یا بعبارتی بیشترین استحکام مکانیکی و بالاترین مدولهای الاستیک می‌باشند. نمونه‌ی TVM30 دارای کمترین تغییرات ظرفیت گرمایی و بعبارتی شکننده‌ترین نمونه است. نتایج به دست آمده برای انرژی فعالسازی بلورینگی نمونه‌ها نشان می‌دهد که نمونه‌ی TVM20 کمترین و نمونه‌های TVM40 و TVM60 دارای بیشترین مقادیر انرژی فعالسازی هستند. نتایج به دست آمده برای انرژی فعالسازی نمونه‌ها نشان می‌دهد که روند تغییرات انرژی فعالسازی برای هر دو روش موینهان و کیسینجر مشابه است.

جدول (۱): مقادیر دماهای مشخصه، میانگین تغییرات دمای گذار شیشه‌ای (ΔT_g)، میانگین تغییرات ظرفیت گرمایی (ΔC_p) در عرض ناحیه‌ی گذار شیشه‌ای، پارامتر تردی (F)، انرژی‌های فعالسازی به روشهای اوزاوا، موینهان و کیسینجردر نمونه‌های TVMx.

sample	φ (K/min)	T_g(°C)	T_x(°C)	T_{cr} (°C)	ΔT_g	ΔC_p	ΔE_{Ozawa}	$\Delta E_{Moynihan}$	$\Delta E_{kissinger}$	F
TVM0	3	226.09	253	265.74	8.6	11.7087	228.078	442.445	434.09	0.6029
	6	229.18	260.5	272.16						
	9	231.71	265.4	276.94						
	12	232.30	266.6	280.09						
TVM10	3	232.15	273.5	290.10	12.625	13.696	271.653	553.375	544.928	0.4753
	6	234.64	281.4	300.49						
	9	237.08	284.6	304.61						
	12	236.52	285.8	309.01						
TVM20	3	239.24	293.5	320.01	11.75	12.522	146.839	441.905	433.325	0.5145
	6	241.61	307.8	330.64						
	9	244.14	312.2	337.95						
	12	246.05	320.6	344.24						
TVM30	3	251.41	294.6	303.75	8.35	8.196	258.018	587.347	578.584	0.6430
	6	253.13	302.3	311.37						
	9	255.87	305	317.52						
	12	256.25	309.8	320.57						
TVM40	3	265.97	289.1	309.64	13.15	11.458	301.726	816.722	807.734	0.5077
	6	265.84	293.5	315.69						
	9	266.18	295.4	319.69						
	12	268.46	301.4	322.89						
TVM50	3	279.64	292.4	317.02	13.575	11.615	252.372	540.463	531.217	0.5183
	6	282.86	299	322.08						
	9	284.78	303.8	326.57						
	12	286.26	307.4	330.03						
TVM60	3	300.44	311.1	330.24	12.9	13.482	453.553	660.288	650.702	0.5607
	6	302.13	314.4	334.30						
	9	304.80	318.2	337.89						
	12	305.82	319.4	340.95						

مراجع

[1] G.S. Murugan, & Y. Ohishi; Journal of Non-Crystalline Solids 341(2004) 86–92.
[2] D. Souri; Journal of Materials Science 47(2012)625-631.
[3] D. Souri; Measurment 44 (2011) 1906-1908
[4] G. Turky, M. Dawy, Mater. Chem. Phys77, 48 (2002).
[5] D. Souri, M. Elahi; Physica Scripta 75, No. 2 (2007) 219-222.
[6] D. Souri, H. Zaliani, E. Mirdawoodi, M. Zendehzaban; Measurement 82 (2016) 19–25.
[7] M. Elahi, D. Souri; Physica Scripta 75 (2007) 219-226.
[8] D. Souri; Physica B: Condensed Matter 456 (2015) 185-190.
[9] C.T. Moynihan, J. Am. Ceram. Soc. 76 (1993) 1081.
[10] S.A.Salehizadeh and D.Souri; Journal of Physics and Chemistry of Solids 72 (2011) 1381–1385.
[11] D. Souri, A. Salehizadeh; J Therm Anal Calorim 112 (2013) 689-695.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

سنتز و مطالعه ویژگی‌های ساختاری نانوذرات ZnSe:Cu و هسته/پوسته ZnSe:Cu@ZnS رشد یافته به روش مایکروویو-همراه به روش‌های شرر، ویلیامسون-هال و نمودارهای کرنش-چگالی دررفتگی

ابراهیمی، سعید ؛ سوری، داریوش

گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه ملایر، ملایر

چکیده

نانوذرات ZnSe:Cu و هسته/پوسته ZnSe:Cu@ZnS با درصدهای مختلف ناخالصی مس با استفاده از یک رویکرد آبی-فوتوشیمیایی سنتز شده و توسط تابش مایکروویو(MWIR) رشد داده شدند. در همه مراحل سنتز، آب دی یونیزه به عنوان حلال استفاده شد. بررسی ابعاد ساختاری نانوذرات مذکور توسط تحلیل XRD بر اساس روش‌های شرر و ویلیامسون-هال صورت گرفت. الگوی XRD ساختار مکعبی زینک بلند را برای نانوذرات سنتز شده نشان داد که اندازه‌ای در محدوده ۰/۵۰-۱/۴۱ nm دارند. جابجایی اندک قله‌های پهن XRD برای نانوذرات ZnSe@ZnS نسبت به ZnSe تشکیل ساختار هسته/پوسته را تایید کردند و مشاهد شد که بین کرنش با چگالی دررفتگی رابطه مستقیم و بین اندازه ذرات با عرض کامل در نیم‌بیشینه رابطه‌ای معکوس وجود دارد. در این کار دریافته شد که تابش مایکروویو به طورکلی، منجر به رشد اندازه نانوذرات و کاهش میزان کرنش شبکه و درنتیجه کاهش چگالی دررفتگی می‌گردد و نمونه ZnSe:Cu(0.1%) با تابش مایکروویو دارای بهترین کیفیت بلوری است.

Synthesis and study of the structural futures of ZnSe:Cu and ZnSe:Cu@ZnS Core/Shell nanoparticles grown by microwave-assisted method with Scherrer and Williamson-Hall method and strain-dislocation density plots

Ebrahimi, Saeed; Souri, Dariush

Department of Physics, Faculty of science, Malayer University, Malayer

Abstract

ZnSe:Cu and ZnSe:Cu@ZnS core/shell nanoparticles with different percent of Cu dopant were synthesized using a aqueous-photochemical approach and have been grown by microwave irradiation (MWIR). In all synthesis process, deionized water was used as solvent. Investigation the structural aspects of mentioned nanoparticles was performed by XRD analysis upon the Scherrer and Williamson-Hall methods. XRD pattern indicated cubic zinc blende structure for synthesized nanoparticles that those have size in the range of 0.50-1.41 nm. The low displacement of XRD broad peaks for ZnSe@ZnS nanoparticles compered to ZnSe, confirmed the formation of core/shell structure and was observed that there is a direct relationship between the strain with dislocation density and inverse relationship between sizes of particles with full width at half of the maximum. In this work it founded that in general, MWIR lead to growth of particles size and reduce lattice strain and as result reduce dislocation density and ZnSe:Cu(0.1%) with MWIR sample have the best crystalline quality.

PACS No. 61, 81

مقدمه

در میان مواد نیمرسانای دوتایی، سلنیدروی یکی از موادی است که بیشترین مطالعات را به خود اختصاص داده است. کاربردها و خواص برجسته بسیاری برای نانوذرات ZnSe ذکر شده است که می‌توان برخی از آن‌ها را با افزودن ناخالصی و نیز با ایجاد یک پوشش با گاف پهن‌تر مانند ZnS بهبود بخشید[۴-۱]. با این حال کاوش بهترین مواد جهت کاربردهای ویژه، نیازمند دستیابی به کیفیت مطلوب بلوری است[۵]. یک بلور کامل، به طور نامحدود در همه جهات گسترش یافته است و انحراف از بلورینگی کامل باعث پهن شدگی پیک‌های پراش می‌گردد. این پهن شدگی‌ها برای محاسبه دو خاصیت مهم اندازه بلورک و کرنش شبکه‌ای قابل استفاده‌اند. اندازه بلورک مقیاسی از اندازه پهنه‌های مربوط به پراش و کرنش شبکه مقیاسی از توزیع ثوابت شبکه ناشی از نقص‌های بلوری از جمله دررفتگی شبکه است[۶و۷]. ناخالصی و آلایش نیز

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

می‌تواند ساختار بلوری و الگوی XRD را تحت تاثیر قرار دهد. هردوی اندازه بلورک و کرنش شبکه از طریق افزایش پهنا و شدت، پیک‌های براگ را تحت تاثیر قرار داده و بر این اساس، موقعیت پیک را تغییر می‌دهد[۷]. در این پژوهش پس از سنتز و رشد نانوذرات هسته/پوسته ZnSe:Cu@ZnS توسط مایکروویو، اثر تابش مذکور روی برخی خواص ساختاری آن‌ها از قبیل اندازه نانوذرات، چگالی دررفتگی، کرنش شبکه‌ای به دو روش شرر و ویلیامسون-هال (W-H) مورد بررسی قرار گرفته است.

روش آزمایشگاهی سنتز

الف) سنتز نانوذرات ZnSe:Cu به عنوان هسته

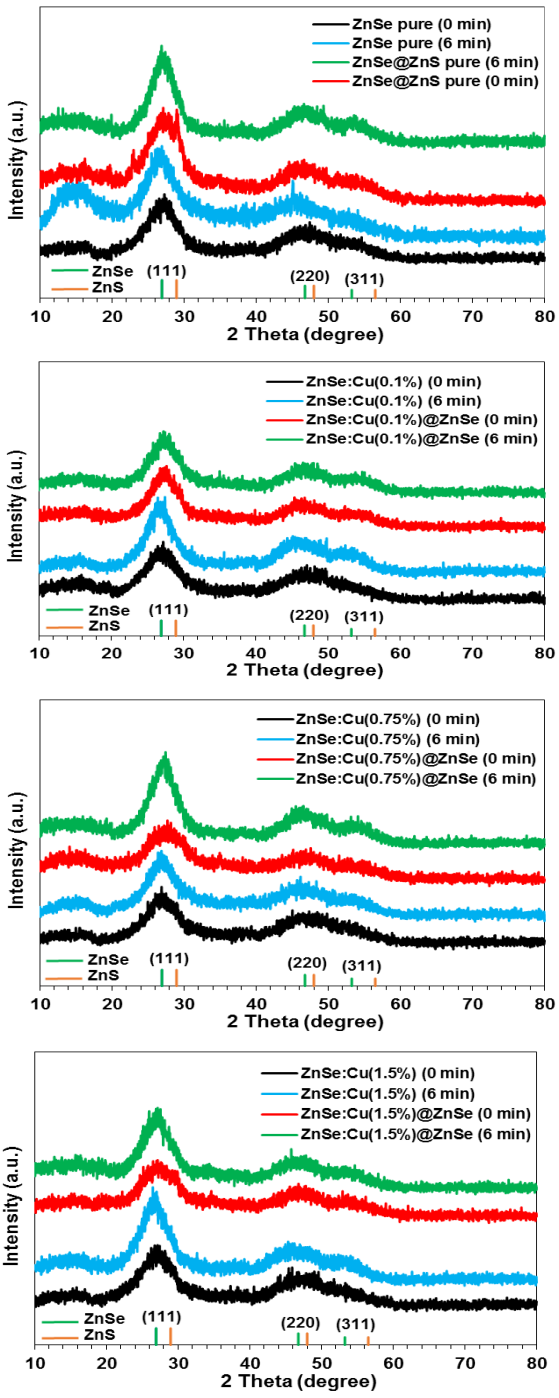
جهت سنتز نانوذرات ZnSe، منابع یون سلنیوم و روی، تحت شارش گاز آرگون ترکیب می‌گردند. برای تهیه نانوذرات ZnSe:Cu نیز قبل از ترکیب دو منبع، ابتدا مقدارهای ۰/۲، ۱/۵ و ۳ میلی لیتر از محلول سولفات مس ۶ میلی مولار به منبع یون روی اضافه می‌شود. جزئیات سنتز در مرجع[۴] قابل مشاهده است.

ب) سنتز نانوذرات هسته-پوسته ZnSe:Cu@ZnS

مقدار ۰/۱۱۷ g از سدیم تیوسولفات ($Na_2S_2O_3$) در ۷/۵ cc آب دی یونیزه حل شده و محلول حاصل به مدت ۸۰ دقیقه در معرض تابش نور UV قرار می‌گیرد و منبع یون S ایجاد می‌گردد. سپس برای تهیه منبع یون Zn، مقدار ۰/۰۳۳ g از استات روی در ۷/۵ cc آب دی یونیزه حل می‌شود. سپس دو منبع مذکور، ترکیب شده و ۳۰ cc از ZnSe به آن افزوده می‌شود. سپس مقدار مناسبی از تیوگلیکولیک اسید (TGA) خالص به محلول حاصل اضافه شده و pH محلول با استفاده از NaOH به ۹ می‌رسد. در نهایت محلول بدست آمده به مدت ۹۰ دقیقه تحت تابش UV قرار گرفته[۳] تا هسته پوسته مورد نظر تشکیل شود.

نتایج و بحث

الگوهای XRD نمونه‌های سنتز شده در شکل ۱ نشان داده شده‌اند. موقعیت پیک‌های اصلی نانوذرات ZnSe منطبق بر صفحات (۱۱۱) و (۲۲۰) و (۳۱۱) بوده و نمایانگر یک ساختار مکعبی زینک بلند می‌باشند که در مرجع استاندارد (JCPDS No. 05-0566) قابل مشاهده است.



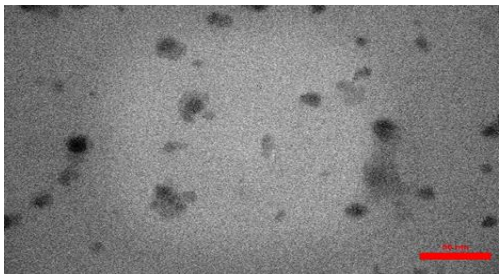
شکل۱: الگوی‌های XRD نانوذرات ZnSe:Cu و ZnSe:Cu@ZnS با درصدهای مولی مختلف ناخالصی مس، برای ۰ و ۶ دقیقه تابش مایکروویو

با تشکیل پوسته ZnS روی هسته‌های ZnSe، علاوه بر حفظ شدن شبکه مکعبی، به دلیل ثابت شبکه کوچکتر ZnS در مقایسه با ZnSe به طور کلی، قرار گرفتن قله‌های پراش در بین فازهای ZnSe و ZnS قابل انتظار است[۸و۹]. علاوه بر این مشاهده می‌شود که با تابش مایکروویو، تغییر محسوس و جابجایی قابل

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

ملاحظه‌ای در قله‌های الگوی پراش صورت نگرفته است. بر این اساس می‌توان گفت که این تغییرات تاثیری بر ساختار بلوری نانوذرات سنتز شده از لحاظ نوع شبکه براوه نخواهد داشت.

در ادامه برای تایید مورفولوژی و تشکیل ساختار هسته/پوسته، به صورت نوعی تصویر TEM نانوذرات ZnSe@ZnS سنتز شده با MWIRT=0 min در شکل۲ آورده شده است. مشاهده می‌شود که نانوذرات هسته/پوسته سنتز شده دارای شکلی کروی می‌باشند.



شکل۲: تصویر TEM نانوذرات ZnSe@ZnS با MWIRT=0 min

تحلیل قله XRD جهت برآورد مشخصه‌یابی شبکه‌ای: روش شرر

پارامترهای شبکه برای ساختار مکعبی به صورت زیر می‌باشند:

$$a=b=c \text{ (cubic)}: d_{hkl}=a/(h^2+k^2+l^2)^{1/2} \quad (۱)$$

که درآن h، k و l اندیس‌های میلر قله، d_{hkl} فاصله بین صفحه‌ای و a ثابت شبکه که در این کار برابر ۵/۶۶۸۸۲ A° می‌باشد. پهن شدگی قله‌های پراش، بیانگر اندازه نانومتری ذرات می‌باشد[۱و۵] که اندازه آن‌ها (D_{hkl}^{SCH}) توسط رابطه ۲ (شرر) معرفی می‌گردد:

$$D_{hkl}^{SCH} = k\lambda/\cos\theta_{hkl}\,\beta_{hkl} \quad (۲)$$

که در آن λ =۱/۵۴ A° طول موج تابشی پرتو ایکس، θ_{hkl} زاویه پراش، ثابت k=۰/۸۹ (برای نانوبلورهای کروی شکل) و β_{hkl} عرض کامل قله در نیم‌بیشینه‌ی شدت می‌باشد[۵].

همچنین در روش شرر کرنش (ε^{SH}) و چگالی دررفتگی شبکه‌ای (δ^{SH}) از روابط زیر محاسبه می‌گردند.[۱و۵].

$$\varepsilon^{SH} = \beta_{hkl}/4\tan\theta_{hkl} \quad (۲)$$

$$\delta^{SH} = 15\beta_{hkl}\cos\theta_{hkl}/4aD_{hkl} \quad (۳)$$

که D_{hkl} اندازه نانوذرات می‌باشد. نتایج، در جدول۱ گزارش شده‌اند. می‌توان دریافت که رابطه مستقیمی بین کرنش و چگالی دررفتگی وجود دارد که رفتاری معقول است. همچنین ملاحظه می‌شود که ارتباط بین اندازه ذرات با پهنای کل در نیم بیشینه یک رابطه معکوس می‌باشد. تابش مایکروویو به طور کلی منجر به افزایش اندازه همه نانوذرات شده ولی روی کرنش و درنتیجه چگالی دررفتگی آن‌ها، اثری نوسانی دارد که می‌تواند ناشی از نوع جانشینی ناخالصی مس باشد[۵]. چنانکه مشاهده می‌شود با تابش مایکروویو، میزان کرنش شبکه نسبت به نمونه بدون تابش، درکل کاهش یافته است که می‌تواند به رشد نانوذرات و ایجاد فرصت لازم برای انتظام اتمی در اثر گرمای مایکروویو نسبت داده شود.

جدول۱: نتایج تحلیل XRD به روش شرر برای نانوذرات ZnSe:Cu و ZnSe:Cu@ZnS با و بدون تابش مایکروویو به مدت ۶ دقیقه

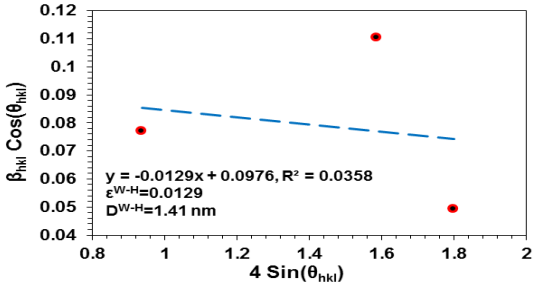
NPs	MWIRT (min)	β_{hkl} (rad)	ε^{SH}	$\delta^{SH}\times10^{17}$ (line/m^2)	D^{SH} (nm)
ZnSe Pure	۰	۰/۱۰۴۳	۰/۰۷۸۲	٦/۰۹۸	۱/۳۸
	٦	۰/۱٤۸۸	۰/۱۱٦۷	۱٥/٥٥۳	۰/۹٥
ZnSe@ZnS	۰	۰/۱۱۷۱	۰/۰۷۹۱	٥/٥٥۲	۱/۲۱
	٦	۰/۰۷۹٥	۰/۰٥۹۸	۳/۳۱۱	۱/۷۸
ZnSe:Cu(0.1%)	۰	۰/۱۰٦٤	۰/۰۷٦۰	٥/٤۲۱	۱/۳۳
	٦	۰/۰۸۸۱	۰/۰۷۰۹	٤/۷٦٦	۱/٦۰
ZnSe:Cu(0.1%)@ZnS	۰	۰/۰۹۲٦	۰/۰٦٦۰	۳/۸٤۷	۱/٥۲
	٦	۰/۰۹٤۷	۰/۰٦٦۹	۳/۹۸۰	۱/٤۹
ZnSe:Cu(0.75%)	۰	۰/۱۱۱۱	۰/۰۸٤۱	۷/٥٦۳	۱/۲۷
	٦	۰/۱۰۸۳	۰/۰۹۳٥	۱۰/۱۰۳	۱/۳۰
ZnSe:Cu(0.75%)@ZnS	۰	۰/۱٦۰۳	۰/۱۰۱٥	۱۰/۳٤٥	۰/۸۸
	٦	۰/۰۸۳٤	۰/۰٦۰٥	۳/۲٦۳	۱/٦۹
ZnSe:Cu(1.5%)	۰	۰/۱۱٦٤	۰/۰۸٥۰	۷/۳۹۷	۱/۲۱
	٦	۰/۰۹٦۳	۰/۰۷۳۳	٥/۱٤۰	۱/٤٦
ZnSe:Cu(1.5%)@ZnS	۰	۰/۱٤۷۲	۰/۰۹۹۰	۹/۳۲٥	۰/۹٦
	٦	۰/۱۰۱۰	۰/۰٦۸۳	٤/۰٥۳	۱/٤۰

تعمیم تحلیل قله XRD: روش ویلیامسون و هال

توسط روش W-H و با ملاحظه همه پیک‌های پراش امکان برآورد اندازه دقیق‌تر نانوذرات (D^{W-H}) و کرنش شبکه‌ای(ε^{W-H}) وجود دارد. این رهیافت توسط رابطه زیر ارائه می‌گردد[۵]:

$$\beta_{hkl}\cos\theta_{hkl} = \frac{k\lambda}{D^{W-H}} + 4\varepsilon^{W-H}\sin\theta_{hkl} \quad (۴)$$

بر اساس این رابطه، اگر نمودارهای ویلیامسون–هال نانوذرات سنتز شده رسم شوند، کرنش شبکه‌ای به طور مستقیم از شیب خط $\beta_{hkl}\cos\theta_{hkl}$ بر حسب $4\sin\theta_{hkl}$ و اندازه نانوذرات از مقدار عرض از مبدا آن قابل حصول خواهند بود (جدول۲). بصورت نوعی نمودار ویلیامسون–هال نانوذرات ZnSe@ZnS برای صفر دقیقه تابش مایکروویو در شکل ۳ نشان داده شده است.



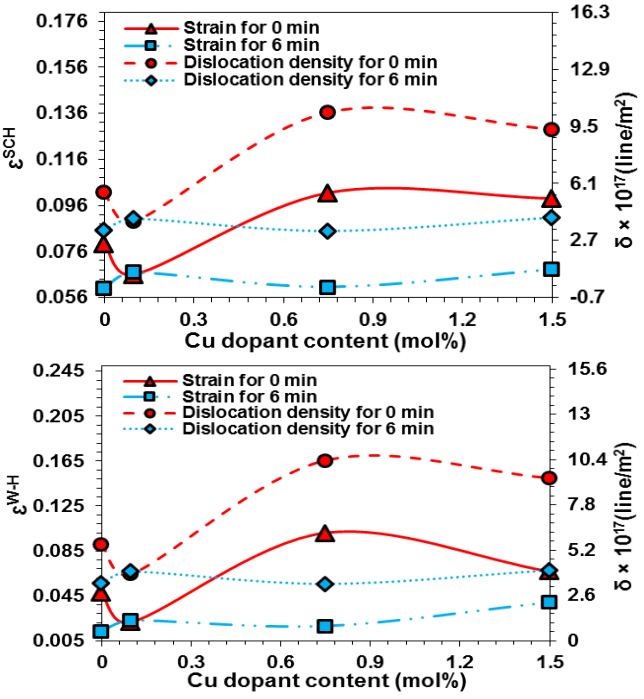
شکل۳: نمودار ویلیامسون–هال نانوذرات ZnSe@ZnS با MWIRT= 0 min

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

جدول۲: نتایج تحلیل XRD به روش ویلیامسون-هال برای نانوذرات ZnSe:Cu و ZnSe:Cu@ZnS با و بدون تابش مایکروویو به مدت ۶ دقیقه

NPs	MWIRT (min)	Peak position ($2\theta_{hkl}$) (rad)			ε^{W-H}	D^{W-H} (nm)
		(111)	(220)	(311)		
ZnSe Pure	۰	۰/۴۷۰	۰/۸۱۶	۰/۹۲۹	۰/۰۲۲۶	۱/۰۲
	۶	۰/۴۶۵	۰/۷۹۰	۰/۹۲۸	۰/۰۷۰۱	۰/۵۵
ZnSe@ZnS	۰	۰/۴۷۲	۰/۸۱۲	۰/۹۳۱	۰/۰۴۷۷	۰/۸۱
	۶	۰/۴۷۳	۰/۸۱۶	۰/۹۳۴	۰/۰۱۲۹	۱/۴۱
ZnSe:Cu(0.1%)	۰	۰/۴۶۹	۰/۸۱۶	۰/۹۰۶	۰/۰۳۳۱	۰/۹۵
	۶	۰/۴۶۷	۰/۸۰۵	۰/۹۲۴	۰/۰۰۷۲	۱/۳۲
ZnSe:Cu(0.1%)@ZnS	۰	۰/۴۷۶	۰/۸۱۵	۰/۹۳۷	۰/۰۲۱۶	۱/۱۷
	۶	۰/۴۷۸	۰/۸۱۸	۰/۹۴۰	۰/۰۲۲۹	۱/۱۳
ZnSe:Cu(0.75%)	۰	۰/۴۷۲	۰/۸۲۰	۰/۹۳۰	۰/۰۳۲۴	۰/۸۸
	۶	۰/۴۷۲	۰/۸۰۵	۰/۹۳۱	۰/۰۱۵۰	۰/۹۴
ZnSe:Cu(0.75%)@ZnS	۰	۰/۴۷۶	۰/۸۱۶	۰/۹۳۳	۰/۱۰۱۱	۰/۵۰
	۶	۰/۴۷۳	۰/۸۱۶	۰/۹۳۸	۰/۰۱۷۹	۱/۳۱
ZnSe:Cu(1.5%)	۰	۰/۴۷۱	۰/۸۲۳	۰/۹۲۹	۰/۰۳۷۲	۰/۸۴
	۶	۰/۴۶۵	۰/۸۰۷	۰/۹۲۳	۰/۰۲۳۸	۱/۰۷
ZnSe:Cu(1.5%)@ZnS	۰	۰/۴۷۷	۰/۸۱۹	۰/۹۴۲	۰/۰۶۶۶	۰/۶۱
	۶	۰/۴۶۹	۰/۸۱۳	۰/۹۳۳	۰/۰۳۹۳	۰/۹۶

باتوجه به جدول۲ در روش W-H به طور کلی، اثرات مشاهده شده ناشی از تابش مایکروویو بر اندازه نانوذرات و ارتباط آن با کرنش شبکه‌ای، روندی مشابه با روش شرر دارد. به منظور درک بهتر، نمودارهای تغییرات کرنش شبکه‌ای-چگالی دررفتگی برای روش‌های مذکور به صورت نوعی در شکل۴ نشان داده شده است.



شکل۴: نمودارهای تغییرات کرنش شبکه‌ای و چگالی دررفتگی برای نانوذرات ZnSe:Cu@ZnS بر حسب درصدهای مختلف ناخالصی برای با و بدون تابش مایکروویو، در روش‌های شرر و ویلیامسون-هال

مشهود است که مقادیر بدست آمده از روش W-H کوچکتر از روش شرر است. روش شرر منشأ پهن شدگی قله‌ها را تنها ناشی از اندازه دانه می‌داند اما روش دقیق‌تر W-H علاوه بر اندازه دانه، کرنش شبکه (توزیع ثوابت شبکه و نقایص بلوری مانند دررفتگی) را نیز به عنوان دلیل دیگری برای پهن شدگی قله معرفی می‌کند. در بین نانوذرات غیر هسته/پوسته، نمونه ZnSe:Cu(0.1%) با تابش مایکروویو و در میان نانوذرات هسته/پوسته، نمونه ZnSe@ZnS با تابش مایکروویو، نمونه‌های بهینه از نظر کیفیت بلوری بالاتر، قابل انتخاب جهت استفاده‌های عملی می‌باشند.

نتیجه گیری

مطابق نتایج، بین کرنش و چگالی دررفتگی رابطه مستقیم و بین D_{hkl} و β_{hkl} یک رابطه معکوس وجود دارد. تابش مایکروویو به طورکلی منجربه رشد ذرات شده و میزان کرنش شبکه را به دلیل نظم آرایش اتمی بیشتر، کاهش داد. روند تغییرات پارامترهای بدست آمده از هر دو روش همسان بوده ولی روش W-H دقیق‌تر است.

مرجع‌ها

[۱] K. Yadav, Y. Li, H. Zhang, Y. Dwivedi, and N. Jaggi; "Structural and optical properties of Ni doped ZnSe nanoparticles"; *Journal of Luminescence* **158**, (2015) 181–187.
[۲] Q. Zhang, H.Li and T. Zhai;"ZnSe nanostructures:Synthesis, properties and applications"; *Progress in Materials Science* **83**, (2016) 472–535.
[۳] M. Molaei, A.R. Bahador and M. Karimipour; "Green synthesis of ZnSe and core–shell ZnSe@ZnS nancrystals (NCs) using a new, rapid and room temperature photochemical approach"; *Journal of Luminescence* **166**, (2015) 101-105
[۴] S. Ebrahimi, D. Souri and M. Ghabooli; "Third Order Non-linear Optical Susceptibility ($\chi^{(3)}$) and Evaluation of Antibacterial Activity of Cu-Doped ZnSe Nanocrystals Fabricated by Hydro-Microwave Technique"; *Cluster Science* **30**, no. 3 (2019) 1040-7278.
[۵] M. Ghasemi Hajiabadi, M. Zamanian and D. Souri; "Williamson-Hall analysis in evaluation of lattice strain and the density of lattice dislocation for nanometer scaled ZnSe and ZnSe:Cu particles"; *Ceramics International* **45**, (2019) 14084–14089.
[۶] A. Khorsand Zak, W.H. Abd. Majid, M.E. Abrishami and R. Yousefi; "X-ray analysis of ZnO nanoparticles by WilliamsoneHall and sizeestrain plot methods"; *Ceramics International* **13**, (2011) 251-256.
[۷] A. Khorsand Zak, W.H. Abd. Majid, M. Ebrahimizadeh Abrishami, R. Yousefi and R. Parvizi; "Synthesis, magnetic properties and X-ray analysis of Zn0.97X0.03O nanoparticles (X ¼ Mn, Ni, and Co) using Scherrer and sizeestrain plot methods"; *Ceramics International* **14**, (2012) 488-494.
[۸] M. Liu and L. Li; "Microwave-assisted One-pot Synthesis of Yellow Cu: ZnSe/ZnS Quantum Dots Using Selenium Dioxide Containing Copper Impurity"; *Journal of Optics Applications* **4**, (2015) 1-6.
[۹] L. Wang, L. Cao, W. Liu, C. Xia and H. Zhou; "Preparation and characterization of water-soluble ZnSe:Cu/ZnS core/shell quantum dots"; *Applied Surface Science* **280**, (2013) 673– 678.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

اثر زمان تابش بر نورتابی نقاط کوانتومی ZnSe هم‌آلاییده با Mn و Cu، رشد یافته توسط تابش مایکروویو

صرفه‌جو، مرضیه؛ سوری، داریوش؛ خضری پور، علیرضا
دانشکده علوم پایه، گروه فیزیک، دانشگاه ملایر، ملایر

چکیده

هدف کار حاضر سنتز و رشد نقاط کوانتومی ZnSe:Cu(0.1%)Mn(0.1%) با توزیع باریک و قابل تنظیم اندازه ذرات، با استفاده از روش مستقیم آبی همراه با تابش مایکروویو است. نقاط کوانتومی ZnSe هم‌آلاییده به مس و منگنز در حضور مرکاپتواستیک اسید(MAA:TGA) به عنوان عامل پوششی، در زمان های مختلف تابش مایکروویو(0، 1، 2، 3، 4 و 6 دقیقه) سنتز شدند؛ سپس، نقاط کوانتومی تهیه شده از نظر ساختاری(به کمک XRD,FESEM,EDX,MAP) و نورتابی(PL)، مشخصه نگاری شدند. نتایج نشان می‌دهد که نقاط کوانتومی سلنیدروی خالص، آلاییده به مس و هم‌آلاییده به مس و منگنز، از ساختار مکعبی زینک بلند مشابهی برخوردار هستند. به اختصار، نقاط کوانتومی بر پایه روی مورد مطالعه به عنوان نقاط کوانتومی نورتاب در گستره ی سبز-آبی برای توسعه ی نانو پروب ها در تصویر برداری های زیستی مطرح می شوند.

The effect of irradiation time on the photoluminescence (PL) of Mn and Cu-codoped ZnSe quantum dots, grown by microwave irradiation

Sarfehjou, Marziyeh; Souri, Dariush; Khezripour, Alireza
Faculty of Science, Department of Physics, Malayer University, Malayer

Abstract

The present work aims at the synthesize and growth of ZnSe:Cu(0.1%)Mn(0.1%) quantum dots (QDs), with a tunable narrow size distribution, by using the direct aqueous method assisted with microwave irradiation (MWIR). The Cu-Mn codoped ZnSe QDs were synthesized at the presence of mercaptoacetic acid (MAA: Tioglycolic acid) capping agent at different MWIR times (0, 1, 2, 3, 4 and 6 min); Then, produced QDs were characterized structurally (by means of XRD, FESEM, EDX and Map) and photoluminescence (PL). Results show that the as-synthesized undoped, Cu doped ZnSe and Cu-Mn codoped ZnSe quantum dots (cdQDs) have similar cubic zinc blend structure. In brief, the studied QDs promises a novel range of green-blue emission Zn-based luminescent QDs for development of nano-probes in bio-imaging applications.

PACS No. 78, 81

مقدمه

نانوذرات مشخصه‌های متمایزی چون نسبت سطح به حجم بالا و اندازه کوچک و قابل تنظیم دارند؛ بنابراین، می‌توانند مهندسی شوند و در بسیاری از زمینه‌ها مثل حسگرهای زیستی مورد استفاده قرار گیرند [1]. نیم‌رساناهای نوین به سوی کاربردهای وسیع آینده پیش می‌روند، لذا تلاش های فراوانی برای سنتز و مشخصه نگاری آن‌ها صورت می‌گیرد[2,3]. از میان مواد نیمرسانای دو مولفه‌ای نانومقیاس مانند CdTe، CdS، ZnS و ZnSe، سلنیدروی به عنوان نیمرسانای متعلق به گروه II-VI، با گاف انرژی حدود 2.7 الکترون ولت در حالت توده‌ای، ماده‌ای نو بوده و به دلیل پایداری شیمیایی بالا قابلیت آن را دارد که به منظور کاربردهای خاص بهینه سازی شود. یکی از ویژگی‌های این نانوذرات، گسیل نور است به صورتی که با تاباندن نور ماوراءبنفش به آن‌ها، نور مرئی گسیل می‌کنند. اهمیت این نور گسیل شده در این است که در محدوده طول موج‌های مرئی(400-600 نانومتر) است و علاوه بر استفاده‌های تجاری، در صنایع الکترونیک مانند LED ها، در آشکار سازها مخصوصا در سلول‌های زنده کاربرد بسیار زیادی دارد [4,5,6]. روش‌های سنتز متعددی برای سلنیدروی معرفی شده است که روش همراه با تابش مایکروویو به دلایل سرعت بالا، امکان آلایش آسان نمونه، هزینه نه چندان زیاد، توزیع اندازه باریک و تنظیم پذیر ذرات، سازگاری با محیط زیست و پایداری محیطی و شیمیایی

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

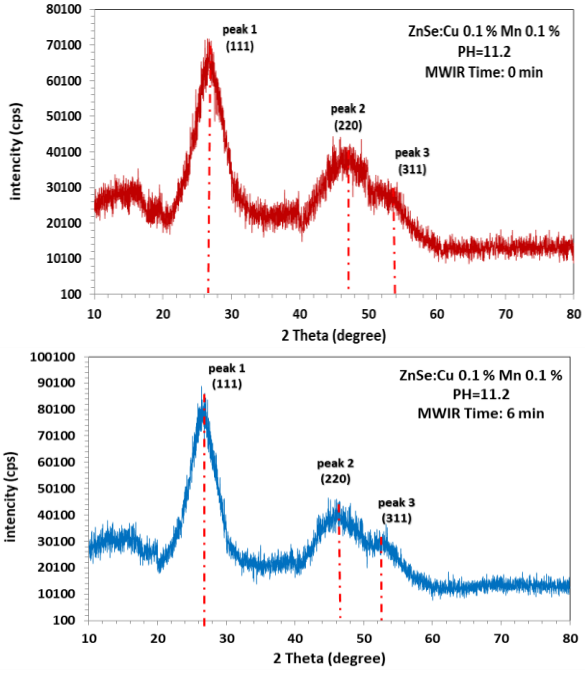
بالا روشی موثر است. در کار حاضر تلاش شده است تا با بهره‌گیری از ویژگی‌های منحصر به فرد سلنیدروی در مقیاس نانو و همچنین مزایای روش تابش مایکروویو، نمونه‌های موردنظر با تغییر شرایط سنتز در زمان‌های مختلف تابش مایکروویو، سنتز و مشخصه‌نگاری ساختاری و نورتابی شوند و به کارگیری فناورانه آن‌ها پیشنهاد گردد.

روش آزمایشگاهی ساخت نانوذرات

نانوذرات ZnSe از واکنش بین منبع یون سلنیوم و منبع یون روی ساخته می‌شوند. منبع یون سلنیوم، ماده $NaHSe^-$ است که از واکنش بین پودر سلنیوم و سدیم بوروهیدرید به‌دست می‌آید. منبع یون روی نیز با حل کردن 0.2638 گرم پودر استات‌روی در 150 میلی‌لیتر آب دیونیزه آماده می‌شود. با اضافه‌کردن حجم مناسب از NaOH یک مولار، pH موردنظر برای محیط ساخت نانوذرات تعیین می‌شود (طبق مرجع [7]، pH بهینه مقدار 11.2 می‌باشد). سپس با اضافه‌کردن مرکاپتو استیک اسید (MAA) به عنوان عامل پوششی، محلول را به مدت 40 دقیقه تحت شارش گاز آرگون قرار داده تا اکسیژن‌زدایی شود. لازم به ذکر است که عامل پوششی مورد استفاده، متضمن پایداری و کنترل اندازه نانوذرات سنتز شده می باشد. اکنون منبع یون روی نیز آماده است. در ادامه، جهت آلایدن نانوذرات، سولفات مس (0.1%) و منگنز (برای نمونه نوعی 0.1%) به عنوان ناخالصی‌های مورد هدف، به محلول استات روی اضافه می‌شود و سپس منبع یون سلنیوم به آرامی درون منبع یون روی حاوی یون‌های ناخالصی تزریق می‌شود. رنگ محلول نهایی کمی زرد رنگ خواهد بود. بعد از این مرحله، نانوذرات ساخته‌شده در مدت زمان‌های مختلف در معرض تابش امواج مایکروویو با توان 1000 وات قرار داده شده و در هر مرحله نمونه برداری انجام می‌گیرد. در نهایت به منظور استخراج پودر از نمونه‌های سنتز شده، محلول 0 و 6 دقیقه تابش، سانتریفیوژ شده و پودرهای حاصل در دمای محیط خشک می شوند.

نتایج و بحث: آنالیز XRD

XRD، روشی استاندارد برای تشخیص ساختارهای فازی موجود در یک ماده و نوع ترکیب آن محسوب می‌شود. شکل 1 الگوی پراش نمونه سنتز شده در زمان‌های 0 و 6 دقیقه تابش مایکروویو را نشان می‌دهد. همانگونه که از این شکل مشاهده می‌شود، سه قله مربوط به صفحات بلوری (111)، (220) و (311) موید تشکیل ساختار مکعبی fcc سلنیدروی (ساختار زینک بلند) می‌باشد. با توجه به شکل واضح است که با تغییر زمان تابش امواج مایکروویو هیچ گونه جابه جایی محسوسی در مکان قله‌ها اتفاق نیفتاده است و در واقع ساختار مکعبی سلنیدروی حفظ و ساختار براوه مذکور دستخوش تغییر نمی‌گردد.



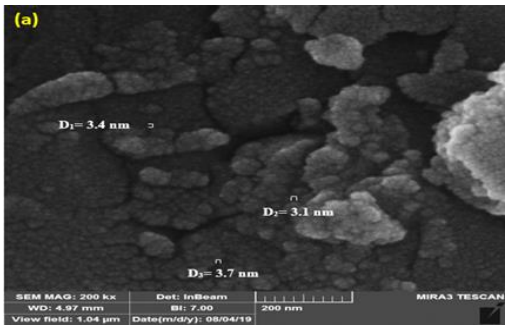
شکل1: الگوهای پراش پرتو x نانوذرات ZnSe:Cu(0.1%)Mn(0.1%) سنتز شده در pH=11.2 تحت تابش مایکروویو به مدتهای 0 و 6 دقیقه.

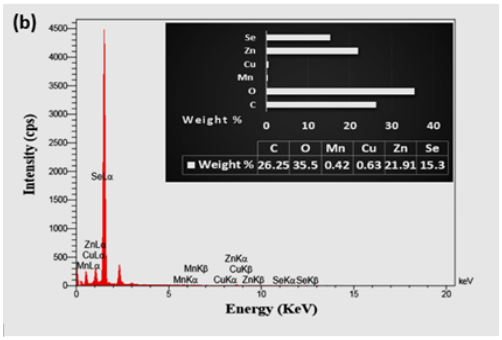
آنالیزهای FESEM، EDX و MAP

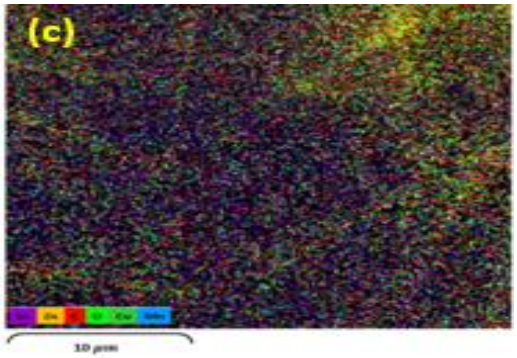
شکل 2-a تصویر میکروسکوپ الکترونی روبشی گسیل میدانی (FESEM) نمونه سنتز شده در این پژوهش را نشان می‌دهد. نتایج موید تشکیل

این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد :
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

نانوذرات کروی شکل بوده و آنالیز عنصری پاشندگی انرژی پرتو ایکس (EDX) به همراه نقشه های توزیع عناصر (MAP) در نمونه ها، تشکیل سلنیدروی هم آلاییده به یون های ناخالصی مس و منگنز را که دارای توزیع همگنی از نانوذرات هستند نشان می دهد.



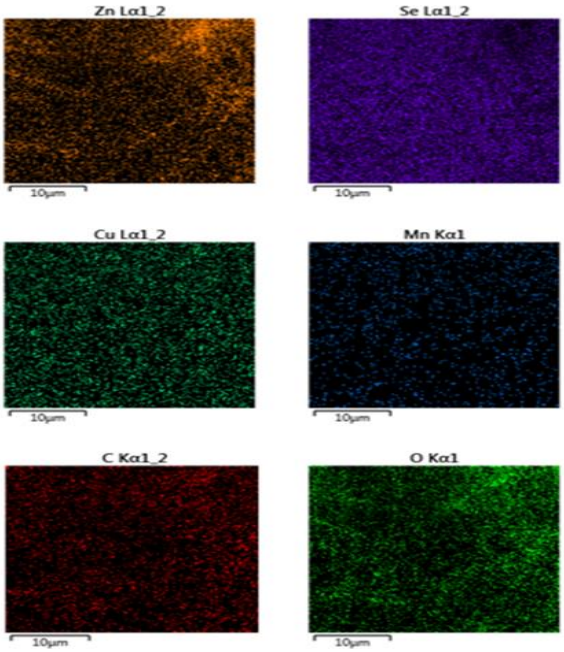




شکل2: a) تصویر نوعی FESEM، b) گراف EDX توزیع عناصر c) نقشه عناصر موجود در نمونه ZnSe:Cu(0.1%)Mn(0.1%) سنتز شده بدون تابش مایکروویو در pH=11.2.

تحلیل طیف های نورتابی(PL)

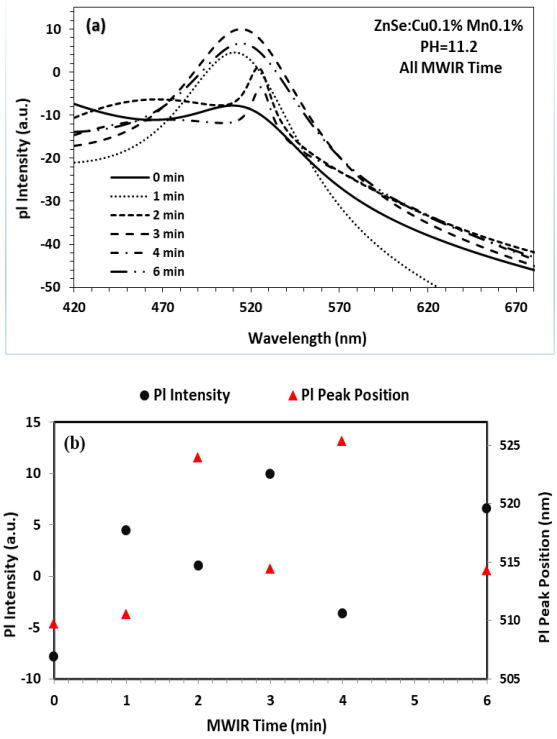
به دلیل اهمیت زیاد و کاربرد فراوان نورتابی در فناوری‌های زیست‌شناسی، پزشکی، آشکارسازها و دیودهای نوری و...، تعیین و بررسی تاثیر شرایط سنتز نانوساختارها در نورتابی بسیار حائز اهمیت است که در کار حاضر بررسی شده است.



نورتابی به‌طور ویژه با اندازه نانوذرات ارتباط دارد واندازه نانو ذرات به وسیله تغییردادن شرایط آزمایش قابل کنترل ومهندسی است [8]. در کار حاضر، نمونه های سنتز شده در معرض تابش امواج مایکروویو، به عنوان عامل کاتالیزور دمایی برای رشد نانوذرات، قرار داده شده اند. امواج مایکروویو از طریق فراهم نمودن انرژی فعالسازی با سرعت بالا و همچنین تاثیر مستقیم روی نانو ذرات، باعث رشد سریع نانوذرات می‌شوند به طوری که با افزایش زمان تابش از 0 تا 6 دقیقه، اندازه نانوذرات با استفاده از تقریب جرم موثر[9] محاسبه شده و دارای روند افزایشی از مقدار 1.681 به 1.731 نانومتر بوده اند. در اثر درشت تر شدن نانو ذرات، تغییراتی در ویژگی‌های اپتیکی آن‌ها از جمله نورتابی پدید می‌آید. شکل 3-a طیف نورتابی نانو ذراتی را نشان می‌دهد که با ثابت بودن شرایط سنتز مانند pH، در زمان‌های مختلف تابش مایکروویو نورتابی آن‌ها در محلول آبی و طول موج تحریک 254 نانومتر مورد بررسی قرار گرفته است. موقعیت قله های نورتابی و همچنین شدت آن ها در شکل 3-b گزارش شده است. با توجه

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

به مراجع 6 تا 8، گاف انرژی نمونه ها به روش دقیق DASF [9] محاسبه شده که با افزایش زمان تابش و ضمن افزایش اندازه نانوذرات دارای روند کاهشی از 3.555 به 3.507 الکترون ولت بوده است. بنابراین قله های نورتابی نمونه های حاضر که در گستره‌ی طول موجی 510 تا 520 نانومتر واقع شده اند، گسیل لبه نواری محسوب نمی شوند و عملا ناشی از گسیل تله‌ای بدلیل ناخالصی‌ها و ناراستی‌های شبکه‌ای می‌باشند. علاوه براین، مشاهده می‌شود که با تغییر مدت زمان تابش امواج مایکروویو، تغییراتی در ویژگی‌های نانوذرات به وجود می‌آید که بررسی این تغییرات در بخش نتیجه گیری بیان خواهد شد. لازم به ذکر است که محاسبات برای 7 نمونه با درصدهای مختلف ناخالصی منگنز انجام شده است ولی به علت حجم زیاد اطلاعات، نتایج یک نمونه نوعی در مقاله حاضر آورده شده است و چند نمونه دیگر نیز روندی مشابه با نتایج ارایه شده درمقاله داشته اند.



شکل3:a)طیف نورتابی b) شدت و موقعیت قله های نورتابی نانوذرات سنتز شده در مدت زمان مختلف تابش امواج مایکروویو

نتیجه گیری

با تحریک نانوذرات توسط نور ماوراءبنفش، گسیل نور در محدوده مرئی مشاهده شد. قله های مشاهده شده ناشی از گسیل تله‌ای ناشی از ناخالصی‌ها و ناراستی‌های شبکه‌ای می‌باشند که در گستره‌ی طول موجی 510 تا 520 نانومتر واقع شده اند. همچنین بعد از تابش امواج مایکروویو به محلول نانوذرات و هم زمان با درشت تر شدن اندازه ذرات، مشاهده گردید که علاوه بر جابجایی قله های نورتابی به سمت طول‌موج‌های بزرگتر، شدت نورتابی نیز تا حدی افزایش یافته است. به طور خلاصه، نانوذرات مطالعه شده طیف جدیدی از نانوذرات نورتاب بر پایه Zn دارای نشر سبز-آبی را برای توسعه نانوابزارها در کاربردهای تصویر برداری زیستی وعده می‌دهند.

مرجع ها

[1] Y.S. Liu, Y.Sun, P. T. Vernier, C. H. Liang,S. Y. C. Chong and M.A. Gundersen; “pH-sensitive photoluminescence of CdSe/ZnSe/ZnS quantum dots in human ovarian cancer cells”; *The Journal of Physical Chemistry C*. **111** (2007) 2872-2878.

[2] N. Gaponik, D. V. Talapin, A. L. Rogach, K. Hoppe, E. V. Shevchenko, A. Kornowski and et al; “Thiol-capping of CdTe nanocrystals: an alternative to organometallic synthetic routes*”; The Journal of Physical Chemistry B*. **106** (2002) 7177–7185.

[3] B. L. Wehrenberg, C. Wang and P. Guyot-sionnest; “Interband and intraband optical studies of PbSe colloidal quantum dots”; *The Journal of Physical Chemistry B*. **106** (2002) 10634–10640.

[4] I. A. Mir, K. Rawatb and H. B. Bohidar; “Interaction of plasma proteins with ZnSe and ZnSe@ZnS core-shell quantum dots*”; Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*. **520** (2017) 131–137.

[5] N. Pradhan, D. M. Battaglia, Y. Liu and X. Peng; “Efficient, stable, small, and water-soluble doped ZnSe nanocrystal emitters as non-cadmium biomedical labels”; *Nano Letters.* **7**(2) (2007) 312-317

[6] D. Souri, M. Sarfehjou and A. R. Khezripour; “The effect of ambient temperature on the optical properties and crystalline quality of ZnSe and ZnSe: Cu NCs grown by rapid microwave irradiation”; *Journal of Materials Science: Materials in Electronics* **29**(4) (2018) 3411-3422.

[7] D. Souri, K. Ahmadian and A. R. Khezripour; “Optical properties of ZnSe nanocrystals (NCs) prepared by microwave irradiation method at different pH and different irradiation times”; *Journal of Electronic Materials* **47**(11) (2018) 6759-6766.

[8] A. R. Khezripour and D. Souri; “PH- microwave irradiation time-, and dopant content-sensitive photoluminescence of pure and Cu-doped ZnSe quantum dots fabricated by rapid microwave activated method”; *Optik*, **183** (2019) 294-301.

[9] D. Souri, Z. E. Tahan; ” A new method for the determination of optical band gap and the nature of optical transitions in semiconductors”; *Applied Physics* B 119, no. 2(2015)273-279.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

جهت تهیه نانو ذرات ZnSe بدون ناخالصی، از ترکیب منبع یون سلنیوم و منبع یون روی استفاده می‌شود. به منظور سنتز نانو ذرات ZnSe:Cu نیز پیش از ترکیب این دو منبع، ابتدا مقدار مناسبی از محلول سولفات مس به منبع یون روی اضافه شده و سپس با منبع یون سلنیوم ترکیب می‌شود که جزییات بیشتر روش تهیه در مرجع [۶] آمده است. جهت تهیه نانو ذرات سلنیدروی هم‌آلاییده به یون‌های ناخالصی مس و منگنز، سولفات مس(0.1%) و منگنز (0, 0.1, 1, 1.5, 2 ,4 %) با درصدهای مشخص به طور همزمان به محلول استات روی اضافه و پس از افزودن TGA، از مقدار مناسب NaOH جهت تنظیم pH نمونه‌ها در مقدار ثابت ۱۱/۲ استفاده شده ودرنهایت محلول سدیم هیدروسلنید به آهستگی به محلول حاوی یون‌های ناخالصی تزریق شد. در ادامه فرآیند سنتز محلول نهایی سانتریفیوژ شده و از نمونه‌های پودری جهت بررسی خواص ساختاری(XRD)و از آنالیز UV-Visible جهت بررسی خواص نوری نانوذرات سنتز شده استفاده شد.

نتایج و بحث :

رهیافت شرر و ویلیامسون–هال

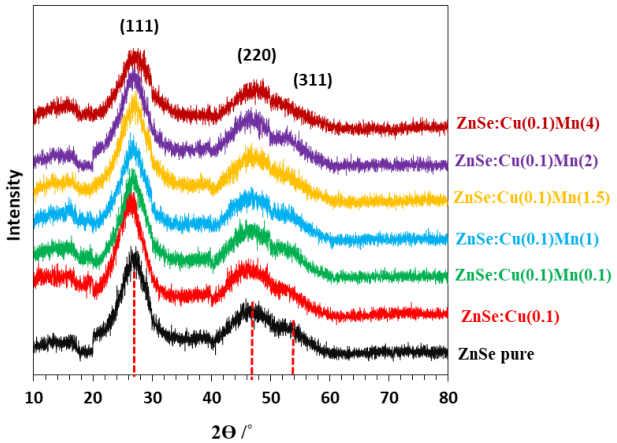
شکل ۱الگوهای XRD نانوذرات سنتز شده را نشان می‌دهد که هیچ جابه‌جایی در قله‌های الگوی پراش نانوذرات سلنید روی با افزایش میزان ناخالصی منگنز مشاهده نشده و این نشان می‌دهد که افزایش درصد ناخالصی تأثیری بر ساختار بلوری سلنیدروی از لحاظ نوع شبکه براوه ندارد که بدلیل نزدیکی شعاع یونی مس و منگنز با روی و همچنین درصد کم ناخالصی ها می‌باشد. درروش شرر، اندازه‌نانو بلورک‌ها،کرنش شبکه‌ای و چگالی دررفتگی به ترتیب از روابط زیر محاسبه می‌شوند[۷] :

$$D^{SCH} = \frac{k\lambda}{\cos\theta_{hkl}\,\beta_{hkl}} \qquad (۱)$$

$$\varepsilon^{SCH} = \beta_{hkl}/4\tan\theta_{hkl} \qquad (۲)$$

$$\delta^{SCH} = 15\beta_{hkl}\cos\theta_{hkl}/4aD_{hkl} \qquad (۳)$$

k= ۰/۸۹ (مربوط به نانوبلورهای کروی شکل: که در کار حا ضر، شکل کروی آن ها برا ساس ت صویر TEM تایید شده ا ست)، λ طول موج پرتو X تابشی، θ_{hkl} زاویه پراش، β_{hkl} پهنای کل در نیم بیشینه قله اصلی پراش و a ثابت شبکه و برابر با ۵/۶۶۸۸۲ آنگستروم می باشد.



شکل۱: الگوهای XRD نانوذرات ZnSe:Cu (0.1%) Mn (0, 0.1, 1, 1.5, 2, 4 %) سنتز شده در pH=11.2 بدون تابش امواج مایکروویو.

جدول۱: نتایج مشخصه‌یابی ساختاری نانوذرات هم‌آلاییده‌ی ZnSe:Cu,Mn در pH=11.2 و درصدهای مختلف ناخالصی منگنز بر پایه روش شرر.

Scherrer's method						
Sample	**Mn (%)**	**$2\theta_{hkl}$ (rad)**	**β_{hkl} (rad)**	**D^{SCH} (nm)**	**$\delta*10^{17}$ (line/m^2)**	**ε^{SCH}**
ZnSe	Pure	0.469	0.108	1.30	5.354	0.113
ZnSe:Cu 0.1 %	0	0.457	0.104	1.36	4.913	0.111
	0.1	0.467	0.101	1.40	4.619	0.106
	1	0.466	0.106	1.33	5.122	0.112
	1.5	0.469	0.116	1.22	6.115	0.121
	2	0.470	0.111	1.27	5.659	0.116
	4	0.473	0.126	1.12	7.205	0.130

علاوه براین می‌توان اندازه نانوبلورها و کرنش شبکه‌ای را به روش دقیق‌تر(روش ویلیامسون–هال) با ملاحظه همه قله‌های پراش دنبال کرد. بر خلاف روش شرر(که پهن شدگی قله را صرفا ناشی از کاهش اندازه نانوبلور می‌داند)، تحلیل ویلیامسون–هال این پهن شدگی را ناشی از دو عامل اندازه ذره و اثر کرنش شبکه می داند. روابط زیر جهت معرفی رهیافت ویلیامسون–هال بوده و به درک بهتر مسأله کمک می‌کند[۸] .

$$\beta_{hkl}\cos\theta_{hkl} = \frac{k\lambda}{D^{W-H}} + 4\varepsilon^{W-H}\sin\theta_{hkl} \qquad (۴)$$

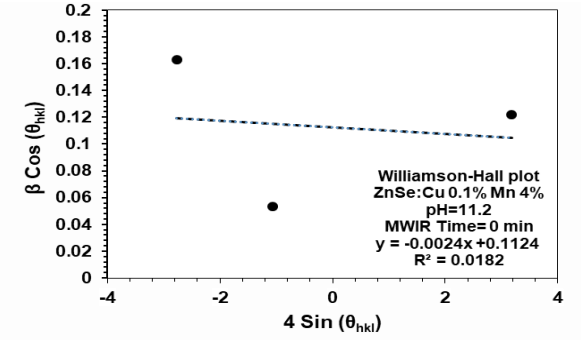
$$D^{W\text{-}H} = \frac{k\lambda}{y\text{-}axis\ intercept} \qquad (۵)$$

$$\varepsilon^{W\text{-}H} = \frac{\text{slope of the fitted line}}{4} \qquad (۶)$$

اگر نمودار $\beta_{hkl}\cos\theta_{hkl}$ بر حسب $4\sin\theta_{hkl}$ رسم شود(شکل ۲)، از شیب خط، مستقیما کرنش و از عرض از مبدأ آن اندازه نانوبلورها تخمین می‌یابد. با افزایش میزان ناخالصی تا حدی مقدار کرنش شبکه‌ای افزایش می‌یابد و باید توجه کرد که مقادیر کرنش شبکه‌ای و چگالی دررفتگی نسبت به مقادیر حاصل در روش شرر به طور معناداری کوچکتر می‌باشند. دلیل اصلی تفاوت

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

می‌توان به دقت بیشتر روش ویلیامسون-هال مرتبط کرد، چرا که در این روش همه قله‌های پراش در قالب یک نمودار مورد تحلیل یکپارچه قرار می‌گیرند[۸].

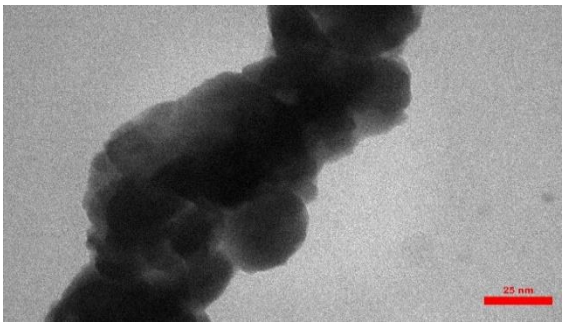


شکل۲: نمودار ویلیامسون- هال نانو ذرات نوعی ZnSe:Cu(0.1%)Mn(4%)

جدول۲: نتایج مشخصه‌یابی ساختاری نانوذرات سنتز شده در رهیافت ویلیامسون- هال.

Williamson-Hall method				
Sample	**Mn (%)**	**D^{W-H} (nm)**	**Average $\delta\times10^{17}$ (line/m^2)**	**ε^{W-H}**
ZnSe	Pure	1.87	3.916	0.027
ZnSe:Cu 0.1 %	0	1.45	4.170	0.002
	0.1	1.43	4.460	0.008
	1	1.47	4.444	0.022
	1.5	1.36	5.272	0.018
	2	0.81	6.767	0.061
	4	1.22	6.122	0.002

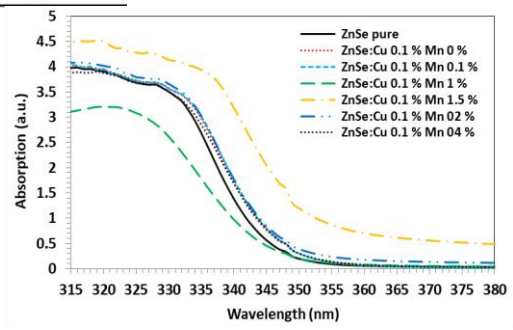
شکل ۳ تصویر TEM نانوذرات نوعی ZnSe:Cu(0.1%)Mn(4%)، سنتز شده بدون تابش مایکروویو در pH=11.2 را نشان می‌دهد. این تصویر موید تشکیل نانو ساختارهایی با توزیع یکنواخت و شکل کروی است که اندازه ای در حدود ۲ تا ۵ نانومتر را دارا می‌باشند.



شکل۳: تصویر TEM نانوذرات ZnSe:Cu(0.1%)Mn(4%) سنتز شده در pH=11.2.

تحلیل طیف سنجی UV-Visible

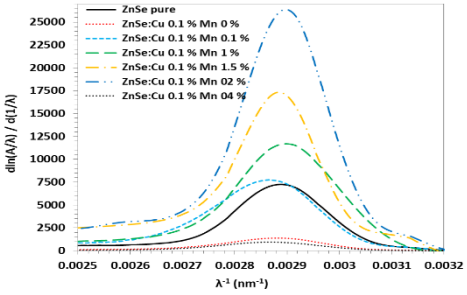
شکل 4 طیف های جذب مربوط به نانوذرات سلنیدروی را با درصدهای مختلف ناخالصی نشان می‌دهد.



شکل۴: طیف جذب نوری ناحیه فرابنفش-مرئی نانوذرات سلنیدروی در درصدهای مختلف ناخالصی.

در کار حاضراز روش DASF [۹] به عنوان روشی دقیق و کارآمد برای یافتن گاف انرژی و نوع گذار نوری موادنیمرسانابهره گرفته شده است. طبق روابط این روش، نمودار شکل ۵ در $\frac{1}{\lambda_g}$ دارای یک ناپیوستگی خواهد بود که با تعیین آن، مقدار طول موج گاف انرژی نوری با دقت تعیین خواهد شد و بدین ترتیب گاف انرژی بدست خواهد آمد.

$$E_g^{DASF}(eV)=\frac{hc}{\lambda_g}=\frac{1239.83}{\lambda_g} \qquad (۷)$$



شکل۵: نمودارDASF نانوذرات سلنیدروی در درصدهای مختلف ناخالصی.

با رسم نمودار $\ln(\frac{A}{\lambda})$ برحسب $\ln(\frac{1}{\lambda}-\frac{1}{\lambda_g})$، شیب بخش خطی منحنی مقدار m و در نتیجه تشخیص نوع گذار مستقیم نوری صورت گرفته را در کار حاضرامکان پذیر می‌سازد(شکل ۶).

انرژی اورباخ معیاری از بی‌نظمی اتمی و انحراف از وجود لبه‌های تیز نوارهای ظرفیت و رسانش می‌باشد. طبق آنچه در شکل ۷ آمده‌است، می‌توان از قرار دادن شیب ناحیه خطی نمودار $\ln(A)$ برحسب λ^{-1} در رابطه ۸، انرژی اورباخ را برای نمونه‌های سنتز شده محاسبه نمود [۶].

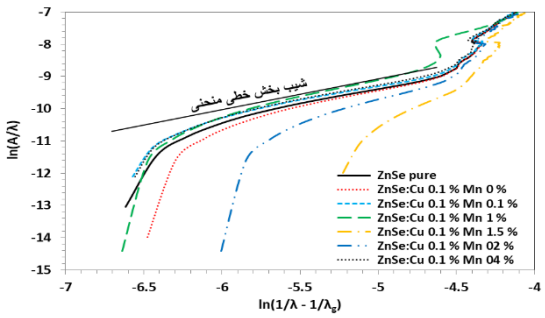
$$E_{tail}(\mathrm{eV})=1239.83/slop \qquad (۸)$$

ضریب شکست و ثابت دی الکتریک نمونه ها در لبه جذب، با استفاده از داده‌های گاف نوری واز روابط ۹ و ۱۰ حاصل می شود[۶].

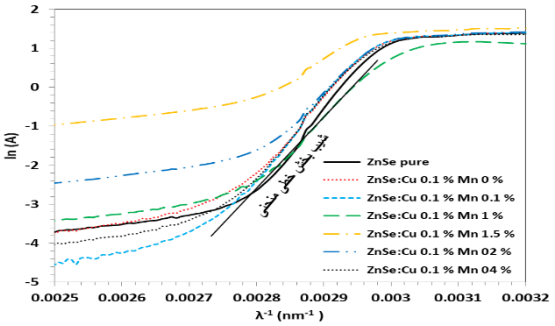
$$\frac{n^2-1}{n^2+2}=1-\left(E_g/20\right)^{1/2} \qquad (۹)$$

$$\varepsilon=n^2 \qquad (۱۰)$$

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



شکل۶: نمودار $Ln(A/\lambda)-Ln(1/\lambda-1/\lambda_g)$ نانوذرات سلنیدروی هم آلاییده.



شکل ۷: نمودار اورباخ نانوذرات سلنیدروی در درصدهای مختلف ناخالصی.

و پذیرفتاری نوری غیرخطی، دو پارامتر دیگری هستند که به ترتیب با توجه به مقادیر به دست آمده گاف نوری و رابطه تقریب جرم مؤثر [۱۰] و همچنین با توجه به ملاحظات گاف انرژی و ضریب شکست نمونه‌ها قابل محاسبه می‌باشند [۱۱].

جدول۱: نتایج خواص نوری نانوذرات سنتزشده در pH=11.2 و عدم تابش امواج مایکروویو.

Sample	ZnSe	ZnSe:Cu (0.1 %)					
		Mn 0 %	Mn 0.1%	Mn 1 %	Mn 1.5 %	Mn 2 %	Mn 4 %
λ^{-1}_g (nm^{-1})	0.002888	0.002881	0.002868	0.002898	0.002884	0.002898	0.002868
E_{gap}^{DASF} (eV)	3.581	3.572	3.556	3.593	3.576	3.593	3.556
Value of m	0.88	0.97	0.82	1.00	2.02	1.28	0.85
E_{tail} (eV)	0.056	0.062	0.061	0.067	0.107	0.068	0.057
n	2.256	2.258	2.262	2.253	2.257	2.253	2.262
ε	5.090	5.099	5.115	5.078	5.095	5.078	5.115
Size (nm)	1.658	1.666	1.682	1.646	1.663	1.646	1.680
χ^3 ($\times10^{-15}$) (m^2/V^2)	1907.98	1924.10	1954.45	1885.24	1917.17	1885.24	1954.45

نتیجه‌گیری

این نانوذرات دارای ماهیت گاف مستقیم هستند. گاف انرژی نانوذرات درحدود ۳/۵eV بدست آمد که از مقدار آن در حالت توده‌ای(۲/۷ eV) بیشتر بوده و موید تشکیل نانوذراتی با ابعاد نانومتری است. به نظر می‌رسد که انرژی اورباخ در نمونه‌های دارای 0.1% و 4% منگنز، دارای کمترین مقدار بوده که نشان دهنده ساختار بلوری منظم‌تر این نمونه‌ها می‌باشد. طبق رویکرد ویلیامسون–هال، کرنش شبکه و چگالی دررفتگی در نمونه 4% دارای کمترین مقدار و پارامتر $\chi^{(3)}$ بالاترین مقدار را داشته و این به معنی استحکام ساختاری بالاتر و مدول الاستیک بیشتر این نمونه می‌باشد. همچنین اندازه نانوبلورها در تقریب جرم موثر حدود ۱.۶ نانومتر بدست آمده که قابل مقایسه با نتایج رابطه‌ی شرر و ویلیامسون–هال است.

مرجع‌ها

[1] A. Dieguez, A. Romano-Rodriguez, J. R. Morante, J. Kappler, N. Barsan and W. Göpel; "Nanoparticle engineering for gas sensor optimisation: improved sol–gel fabricated nanocrystalline SnO 2 thick film gas sensor for NO_2 detection by calcination, catalytic metal introduction and grinding treatments"; *Sensors and Actuators B: Chemical* **60** (1999) 125-137.

[2] D. Souri, K. Ahmadian and A. R. Khezripour; "Optical properties of ZnSe nanocrystals (NCs) prepared by microwave irradiation method at different pH and different irradiation times"; *Journal of Electronic Materials* **47**(11) (2018) 6759-6766.

[3] A. R. Khezripour and D. Souri; "PH- microwave irradiation time-, and dopant content-sensitive photoluminescence of pure and Cu-doped ZnSe quantum dots fabricated by rapid microwave activated method"; *Optik* **183** (2019) 294-301.

[4] B. Feng, J. Cao, J. Yang, S. Yang and D. Han; "Characterization and photocatalytic activity of ZnSe nanoparticles synthesized by a facile solvothermal method, and the effects of different solvents on these properties"; *Materials Research Bulletin* **60** (2014) 794-801.

[5] K. Yadav, Y. Dwivedi, and N. Jaggi; "Structural and optical properties of Ni doped ZnSe nanoparticles"; *Journal of Luminescence* **158** (2015) 181-187.

[6] D. Souri, M. Sarfehjou and A. R. Khezripour; "The effect of ambient temperature on the optical properties and crystalline quality of ZnSe and ZnSe: Cu NCs grown by rapid microwave irradiation"; *Journal of Materials Science: Materials in Electronics* **29**(4) (2018) 3411-3422.

[7] H. P. Klong and L. F. Alexander; "X-ray Diffraction Procedures for Crystalline and Amorphous Materials"; *New York: Wiley* (1954).

[8] M. G. Hajiabadi, M. Zamanian and D. Souri; "Williamson-Hall analysis in evaluation of lattice strain and the density of lattice dislocation for nanometer scaled ZnSe and ZnSe:Cu particles"; *Ceramics International* **45**(11) (2019) 14084-14089.

[9] D. Souri and Z. E. Tahan; "A new method for the determination of optical band gap and the nature of optical transitions in semiconductors" ; *Applied Physics B* **119**, no. 2 (2015) 273-279.

[10] A. K. Singh, V. Viswanath, V. C. Janu; "Synthesis, effect of capping agents, structural, optical and photoluminescence properties of ZnO nanoparticles"; *Journal of Luminescence* **129**, no. 8 (2009) 874-878.

[11] S. Ebrahimi, D. Souri and M. Ghabooli; "Third Order Non-linear Optical Susceptibility (χ (3)) and Evaluation of Antibacterial Activity of Cu-Doped ZnSe Nanocrystals Fabricated by Hydro-Microwave Technique"; *Journal of Cluster Science* **30**(3) (2019) 677-686.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بررسی خواص الکتریکی و مغناطیسی گرافن متخلخل با یک و دو اتم کربن در تهی‌جا در چگالی و شکل‌های مختلف حفره

موسوی ، سیده زینب ؛ دوستی، حسین[۱]

[۱] دانشکده فیزیک، دانشگاه لرستان، خرم آباد

چکیده

در چارچوب نظریه تابعی چگالی نسبیتی و بکارگیری کد محاسباتی FPLO-14 ، خواص الکتریکی و مغناطیسی در ساختار گرافن با یک و دو اتم کربن در تهی‌جا بررسی شده‌است. نتایج حاکی از آن است که خواص الکتریکی و مغناطیسی در ساختارهای گرافن با حذف یک یا دو اتم کربن به شکل حفره بستگی دارد. این محاسبات همچنین نشان داده است که مغناطش اسپینی در ساختار گرافن با یک اتم کربن در تهی جا (1h) با حداکثر مقدار ۰.۹۷ مگنتون بوهر و یکی از سه ساختار گرافن با دو اتم کربن در تهی جا (نوع t) با حداکثر مقدار ۲.۶۱ مگنتون بوهر مشاهده می شود در حالی که در دو ساختار دیگر گرافن با دو اتم کرین در تهی جا (انواع b و d) مشاهده نمی شود. نتایج محاسبات نسبیتی کامل نشان می‌دهند که در تمامی ساختارها و چگالی‌های مختلف سهم مغناطش مداری فرو نشانده شده و برهمکنش اسپین مدار قابل چشم پوشی است.

Investigation of electric and magnetic properties of porous graphene with one and two carbon atoms at vacancy in different densities and hole shapes

mousavi, seyedeh zeynab; Doosti, Hosein[1]

[1] *Department of Physics, Lorestan university, Khoramabad.*

Abstract

Within the frame work of relativistic density functional theory and using FPLO-14 package, electric and magnetic properties of porous graphene with one and two carbon atoms at vacancy are investigated. Results demonstrate that electric and magnetic properties are depend on hole shape in porous graphene. More also these results are shown that spin magnetic moment in graphene whit one Carbon atom at vacancy (1h model) and in graphene whit two Carbon atoms at vacancy and in T hole shape in maximum vacancy densities have $0.97\mu_B$ and $2.61\ \mu_B$ spin magnetic moment respectively, while graphene whit two Carbon atoms at vacancy in B and D hole model have not any spin magnetic moments. The full relativistic calculation results show that orbital magnetic moments are quenched in all structures and hole densities and spin-orbit interaction is negligible.

Pacs NO: 70, 73,75 *DFT, Porous graphene, electric, magnetic* :کلمات کلیدی

مقدمه

گرافن اولین ماده دو بعدی واقعی از یک لایه‌ی منفرد شبکه لانه زنبوری است که دارای یک شبکه کربنی شش گوشه با آرایش sp^2 است و به سبب کاربردهای منحصر به فردش در تولید وسایل الکترونیکی[۱] و وسایل ذخیره انرژی [۲] توجه زیادی را به خود جلب کرده است. به دلیل دارا بودن خواص فوق العاده در رسانندگی الکتریکی، گرمایی، اپتیکی و خواص مکانیکی و همچنین تحرک پذیری بسیار بالای حامل های بار، به ساختاری منحصر به فرد تبدیل شده است. این ماده به واسطه این خواص فوق العاده به عنوان گزینه مناسبی برای نسل بعدی قطعات فوتونیکی و الکترونیکی مطرح شده است [۳]. با اینکه گرافن ایده آل به خودی خود مغناطیسی نیست، بسیاری از مشتقات و نانو

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

ساختارهای آن، که به صورت نظری و تجربی بررسی شده اند، شکل‌های مختلفی از مغناطش را نشان می‌دهند[۴]. مشاهدات تجربی مبنی بر وجود مغناطش در این ساختار معمولا با حضور ناخالصی و وجود نقص گزارش شده است[۵]. اخیراً موضوع تهی-جای‌ها در گرافن به منظور تولید نانو فیلترهای دو بعدی توجه شگرفی را به خود اختصاص داده است، تهی‌جای‌ها باعث تشدید پراکندگی در نقاط دیراک شده وعامل اصلی تغییر رسانندگی گرافن در نظر گرفته می‌شوند[۶]. همچنین وجود تهی جا باعث بوجود آمدن پیوندهای آزاد شده که این پیوندها خود می توانند باعث ایجاد خواص مغناطیسی در گرافن دارای تهی جا شوند. وجود چنین خواص الکتریکی و یا مغناطیسی خود می تواند قابلیت های جدیدی را به نانو فیلترهای گرافنی بیافزاید. در این تحقیق اثر شکل حفره های ناشی از تهی جا و همچنین اثر چگالی حفره ها در واحد سطح گرافن بر روی خواص الکتریکی و مغناطیسی نانو فیلترهای گرافنی با یک و دو اتم کربن در تهی جا بررسی شده است. علاوه بر این در این مطالعه سهم مغناطش اسپینی در حالت نسبیتی اسکالر (SR) و نسبیتی کامل (FR) بررسی شده و سهم مغناطش مداری در جهت محور قطبش عمودی (۰۰۱) در رهیافت کاملا نسبیتی (FR) محاسبه شده است.

روش محاسبه

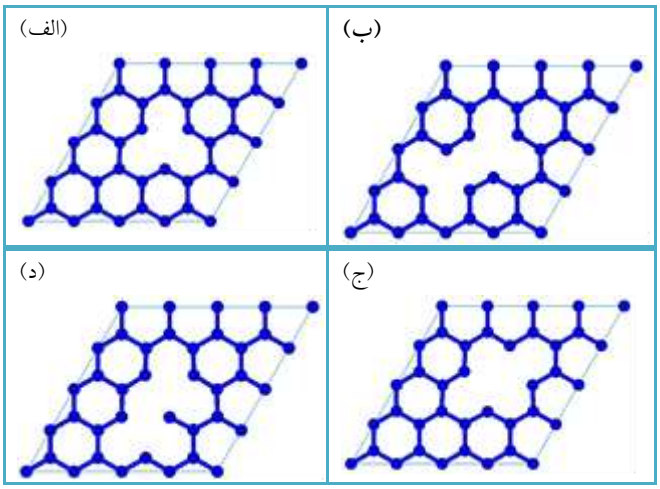
در این تحقیق با به کار گیری نظریه تابعی چگالی نسبیتی (RDFT) موجود در نسخه نسبیتی کد محاسباتی FPLO محاسبات انجام شده‌است. محاسبات در رهیافت غیر نسبیتی و غیر اسپین قطبیده (NR) از حل معادلات کان-شم غیر اسپینی انجام می شود. در این رهیافت نه تنها هیچ اثر نسبیتی در هامیلتونی سیستم لحاظ نمی شود بلکه اثرات ناشی از اسپین الکترونها نیز منظور نمی شود. به منظور مشاهده اثرات ناشی از لحاظ کردن اسپین الکترون در چگالی بار و همچنین اثرات نسبیتی در هامیلتونی سیستم بس الکترونی محاسبات را می توان یا به صورت غیر نسبیتی نوشت و اثرات اسپینی و نسبیتی را به صورت اختلال به هامیلتونی سیستم اضافه نمود، یا آنکه در همان ابتدا محاسبات را در رهیافت اسپین قطبیده ی نسبیتی با استفاده از حل معادلات چهار مؤلفه ای دیراک-کان-شم انجام داد، که در این تحقیق از روش دوم که نسبیتی اسکالر (SR) نامیده می شود استفاده شده است. همچنین وجود الکترون های دیراک با تحرک پذیری بسیار بالا از دیگر عوامل انتخاب روش نسبیتی در این تحقیق بوده است. در روش (SR) اثرات ناشی از قطبش اسپینی و همچنین اثرات نسبیتی همچون داروین و جمله جرم-سرعت بدون در نظر گرفتن جفت شدگی اسپین-مدار در هامیلتونی محاسبات اسپین قطبیده اسکالر نسبیتی (SR) لحاظ می شود. همچنین به منظور محاسبه قطبش مداری و بررسی برهمکنش احتمالی اسپین مدار محاسبات در رهیافت نسبیتی کامل (FR) نیز انجام شده است. دقت 10^{-6} eV برای محاسبه انرژی در تمامی محاسبات در نظر گرفته شده و برای پتانسیل تبادلی-همبستگی از نسخه‌ی غیر نسبیتی GGA-98 استفاده شده است. دقت در محاسبه نیرو به منظور یافتن مکان تعادلی در محاسبات واهلش (ریلکسیشن)، ۰/۰۱ eV/Å در نظر گرفته شده است. افزایش دقت در محاسبات واهلش تا eV/Å ۰/۰۰۱ برای ابر یاخته ۳×۳ در تعیین موقعیت تعادلی اتم های کربن شبیه نتایج محاسبات واهلش با دقت ۰/۰۱ eV/Å حاصل شده است. از آنجا که محاسبات واهلش یکی از زمان گیرترین بخش های محاسبات است و به منظور صرفه جویی در مدت زمان محاسبات از دقت محاسبات کمتر استفاده شده است. همچنین به منظور بررسی اثرات چگالی های مختلف حفره از سه ابریاخته ۳×۳، ۴×۴ و ۵×۵ به ترتیب با ۱۸، ۳۲ و ۵۰ اتم کربن در ابر یاخته استفاده شده است. ثابت‌های شبکه a و b برای ابریاخته های ۳×۳، ۴×۴ و ۵×۵ به ترتیب برابر با ۷/۳۷۸۵Å ، ۹/۸۳۸Å و ۱۲/۲۹۷۵۶Å متناظر با طول پیوند کربن-کربن ۱/۴۲Å در نظر گرفته شده‌اند. به منظور جلوگیری از برهم‌همکنش بین لایه‌های مجاور بالا و پایین صفحه، ثابت شبکه C بسیار بزرگ و برابر ۲۰Å انتخاب شده است. همچنین زوایای بین بردارهای پایه، (α,β,γ) = (۶۰، ۹۰، ۹۰) برای ساختار شش گوشه‌ی گرافن دوبعدی تعیین شده است. تعداد نقاط K بهینه به کار رفته در منطقه اول بریلوئن برابر با ۱×۲۰×۲۰ در نظر گرفته شده است. لازم به ذکر است که برای یافتن این تعداد نقاط K بهینه در ابتدا محاسبات با تعداد نقاط K برابر با ۱×۱۲×۱۲ و ۱×۱۵×۱۵ و ۱×۲۰×۲۰ و ۱×۲۵×۲۵ انجام شده است. از آنجا که نتایج

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

۱×۲۰×۲۰ با ۱×۲۵×۲۵ تفاوت معناداری نداشت، در حالی که با سایر K ها تا حدود دقت meV اختلاف داشت از تعداد K ۱×۲۰×۲۰ استفاده شده است.

نتایج و بحث

در ابتدا به منظور یافتن مکان تعادلی جدید اتم ها در شکل ها و چگالی های مختلف محاسبات واهلش انجام شد. گرافن های حفره دار که با حذف یک اتم کربن و ایجاد حفره و یا حذف دو اتم کربن و ایجاد حفره بوجود آمده اند، برای سادگی به ترتیب با نمادهای ساختار 1h و ساختار 2h نشان داده شده اند. حذف دو اتم کربن منجر به تولید سه نوع حفره با شکل های مختلف شد که در شکل۱ نشان داده شده اند. این اشکال مختلف b[۱] ، d[۲] و t[۳]



شکل۱ تصویر (الف) یک ابریاخته دوبعدی ۴×۴ با یک حفره را نشان می دهد تصاویر (ب)، (ج) و (د) به ترتیب ابریاخته های دوبعدی با دو حفره در مدل های b، d و t را نشان می دهد.

نام گذاری شده اند. وجود یک حفره درابریاخته‌های ۳×۳، ۴×۴ و ۵×۵ به ترتیب معادل تقریبا ۰/۰۲۱، ۰/۰۱۲و ۰/۰۰۸ چگالی حفره در واحد سطح انگستروم مربع می‌باشند. در جدول زیر سهم مغناطش اسپینی در رهیافت SR در ساختارهای 1h و 2h در مدل های مختلف و در چگالی حفره های مختلف و برای اتم‌های اطراف حفره آورده شده است. همانطور که در جدول۱ مشاهده می شود در ساختار 1h بیشتر سهم مغناطش اسپینی کل ناشی از اتم های کربن مجاور حفره با دو پیوند و در ساختار 2h و نوع t این سهم ناشی از اتم‌های یک پیوندی و با سه پیوند آزاد می‌باشد. همچنین نتایج محاسبات حاکی از آن است که انواع حفره b و d در ساختار 2h خاصیت مغناطیسی ندارند. این امر می تواند به دلیل تقارن در جایگیری اتم‌های با پیوند های آزاد و همچنین تعداد برابر این اتم‌ها در این دو نوع ساختار باشد. همانگونه که در شکل ۲ نشان داده شده است، نتایج بیانگر آن است که خاصیت مغناطیسی با چگالی حفره‌ها در دو ساختار مغناطیسی 1h و 2h-t نسبت مستقیم داشته و با افزایش چگالی حفره‌ها در واحد سطح این کمیت افزایش می‌یابد. همچنین مطابق شکل۲ مشاهده می شود که مغناطش اسپینی در مدل‌های b و d در تمامی چگالی های حفره فرونشانده شده است. به منظور بررسی و مقایسه خواص الکترونی گرافن و گرافن حفره دار نتایج محاسبات DOS گرافن با یک و دو اتم کربن در تهی‌جا در ساختار 1h و 2h در مدل‌های b و d و t در شکل۳ نشان داده شده است.

جدول ۱: محاسبات مربوط به مغناطش اسپینی در چگالی حفره‌های مختلف در رهیافت SR: M_s^t و M_s^1 به ترتیب معرف مغناطش اسپینی کل ابریاخته و مغناطش اسپینی همسایه های مرتبه اول حفره بر حسب مگنتون بوهر(μ_B) می باشند. همچنین یک،دو و سه در ستون NN-b قبل از ستون M_s^1 معرف تعداد پیوند اتم کربن همسایه اول حفره با سایر اتم های کربن مجاور می باشد.

structure	M_s^t	NN-b	M_s^1
۱h-۳×۳	۰/۹۵۶	۲	۰/۲۸
		۳	-۰/۰۳
۱h-۴×۴	۰/۸۰۹	۲	۰/۲۱
		۳	-۰/۰۱
۱h-۵×۵	۰/۳۸۹	۲	۰/۱۲۸
		۳	-۰/۰۰۷
۲h-t-۳×۳	۲/۶۱	۱	۰/۵۸
		۲	۰/۲۸
		۳	۰/۱۳
۲h-t-۴×۴	۱/۵۴	۱	۰/۴۲۲
		۲	۰/۱۳
		۳	۰/۱۶
۲h-t-۵×۵	-۱/۶	۱	-۰/۳۳۴
		۲	-۰/۱

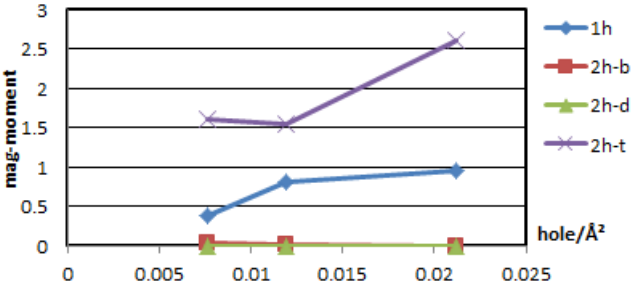
[۱] Butterfly

[۲] Diamond

[۳] Trapezoidal

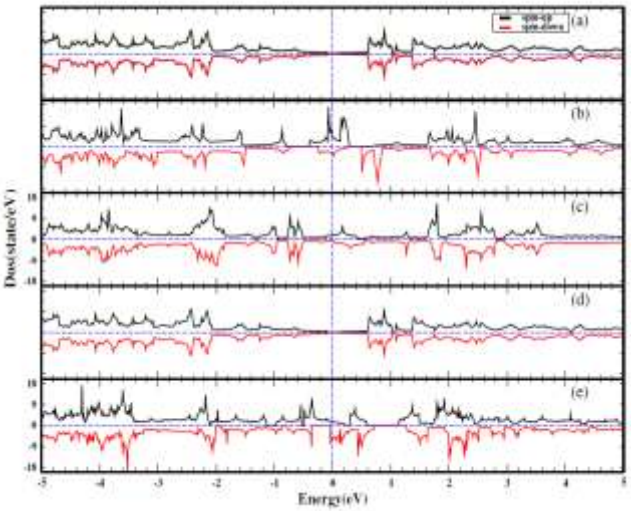
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

-۰/۱۴۶	۳		



شکل۲ نمودار مربوط به تغییرات مغناطش اسپینی بر حسب چگالی حفره ها در واحد سطح در ساختار 1h و 2h در مدل‌های b، d و t

. در این شکل، (a) بیانگر چگالی حالت مجاز الکترونی برای گرافن بدون حفره می‌باشد، چنان که این شکل نشان میدهد گرافن یک نیمرسانای با گاف انرژی صفر است. (b) بیانگر چگالی حالت مجاز الکترونی برای ساختار 1h است. این شکل بیان می دارد که ایجاد نقص با حذف یک اتم کربن باعث شده گرافن 1hرفتاری کاملاً فلزی از خود نشان دهد. (c)، (d) و (e) بیانگر چگالی حالت مجاز الکترونی در ساختار 2h به ترتیب در مدل b، d و t می‌باشد. شکل c نشانگر آنست که در ساختار b چگالی حالت های مجاز در سطح فرمی در مقایسه با ساختار 1h کاهش یافته



شکل۳ نمودار مربوط به محاسبات DOS در حالت SR مغناطیسی در ساختار 1h و 2h در مدل های b، d و t در ابریاخته ۴×۴

ولی ساختار کماکان رفتار فلزی از خود نشان می‌دهد. این در حالی است که شکل d بیان کننده آنست که ساختار d یک نیم رسانای با گاف انرژی صفر است. شکل e نشان می دهد که ساختار t نیز یک فلز است ولی دو اختلاف عمده با رفتار فلزی نوع b از خود نشان می دهد. اول آنکه چگالی حالت‌های مجاز در سطح فرمی در ساختار t در مقایسه با ساختار b بیشتر است و دوم آنکه چگالی حالت های مجاز در سطح فرمی در نوع t صرفاً ناشی از الکترون های اسپین بالا می باشد و این امر نیز به دلیل عدم تقارن چگالی الکترونهای اسپین بالا و اسپین پایین در این ساختار است و همین امر باعث به وجود آمدن خاصیت مغناطیسی در این ساختار شده است. وجود فقط یک جهت اسپینی در سطح فرمی در نوع t می تواند نوید بخش توانایی این ساختار در کاربرد های اسپینترونیکی باشد. به طور کلی تغییر رفتار الکتریکی و مغناطیسی این ساختارها با یکدیگر می تواند ناشی از اختلاف تقارنی شکل حفره ها و اختلاف در جهت گیری اربیتالها و اختلاف در میزان همپوشانی آنها باشد.

نتیجه گیری

نتایج تحقیق نشان می دهد در حالی که گرافن یک نیمرسانای با گاف صفر است اما گرافنهای حفره دار در ساختارهای 1h, t و b رفتاری کاملاً فلزی خواهند داشت. همچنین چگالی حالتها در سطح فرمی و در ساختار t ناشی از الکترونهای اسپین بالا است که بیانگر توانایی این ساختار در کاربردهای اسپینترونیکی می باشد. علاوه بر این نتایج این مطالعه نشان می دهد که ساختارهای 1h و t به ترتیب داری مغناطش اسپینی در حدود۰.۹۷ و ۲.۶۱ مگنتون بوهر در بیشترین چگالی حفره و۰.۳۹ و ۱.۶ مگنتون بوهر در کمترین چگالی حفره می باشند در حالی که دو ساختار دیگر (b و d) خواص مغناطیسی از خود نشان نمی دهند. در مجموع می توان گفت که تغییر شکل و چگالی حفره منجر به ایجاد خواص الکتریکی و مغناطیسی مختلف در گرافن می گردد.

مرجع‌ها

[1] O V Yazyev , and L Helm, Phys . Rev . B 75 (2007) 125408.
[2] T. You, Z. Sui, B. Han, J. Matt. ChemA. 2020
[3] A.K. Geim and K.S. Novoselov;Nat. Mater. 6 (2007) 183
[4] O Yazyev, Rep. Prog. Phys.73 (2010) 056501.
[5] Yu Zhang, et al, Phys. Rev. Lett. 117, 166801 (2016).
[6] J.P. Robinson, H. Schomerus, L. Oroszlány, V.I. Fal'ko, Adsorbate-limited conductivity of graphene, Physical review letters 101 (2008) 196803/1-196803/4

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بررسی ویژگی های کشسانی ترکیب زیرکونیوم نیترید (ZrN) : محاسبات اصول اولیه مکانیک کوانتومی

شیروانی ، فاطمه[۱] ؛ شکری، علی اصغر[۱و۲] ؛ عابدی روان ، بهرام[۳]

[۱] گروه فیزیک ، دانشگاه پیام نور تهران- شرق ، تهران ، ایران

[۱و۲] دانشکده فیزیک، دانشگاه علم و صنعت ایران ، تهران ، ایران

[۳] گروه فیزیک ، دانشگاه علوم و فنون هوایی شهید ستاری، تهران ، ایران

چکیده

گروه ترکیبات فلزات واسطه ی نیتریدی به دلیل ویژگی های منحصر به فردی چون میزان سختی بالا ، مقاومت در برابر خوردگی و فرسایش اخیراً مورد توجه بسیاری از محققین و صنایع قرار گرفته اند. در این مقاله ما با استفاده از نظریه تابعی چگالی و تقریب شیب تعمیم یافته به بررسی ویژگی های کشسانی ترکیب ZrN پرداخته ایم. کمیت هایی چون مدول های کشسانی، ثابت های کشسانی مرتبه ی دوم ، نمودارهای انرژی – کشش ، تنش – کشش را بررسی کرده ایم و با توجه به نتایج به دست آمده میزان سختی ترکیب را مورد مطالعه قرار داده ایم.

واژه های کلیدی: مدول های کشسانی ، ثابت های کشسانی مرتبه ی دوم ، نسبت پواسون ، رهیافت انرژی

Investigation of elastic poperties of Zirconium nitride (ZrN) : First pricnciple calculations of quantum mechanic

Shirvani , Fatemeh[1]; Shokri, Aliasghar[1,2]; Abedi Ravan, Bahram[3]

[1] *Department of Physics, Payame Noor University (PNU), P. O. Box 19395-3697 Tehran, Iran*
[2] *Department of Physics, Iran University of Science and Technology (IUST), 19395-3697 Tehran, Iran*
[3] *Faculty of Basic Sciences, Shahid Sattari Aeronautical University of Science and Technoology, Tehran, Iran*

Abstract

Recently transition metal nitrides because of special properties like high hardness, resistance against corrosion and erosion have been noticed by many scientist and industries. In this paper, we have investigated elastic properties of ZrN compound by using density functional theory. Qualities like elastic modulus, second order elastic constant, energy – strain and stress – strain have been investigated, and considering with results amount of hardness of the compound have been studied.

***Keywords**:Eestic mudulus, Second order elastic constants, Poison's ratio, Energy approach*

PACS No. 60

مقدمه

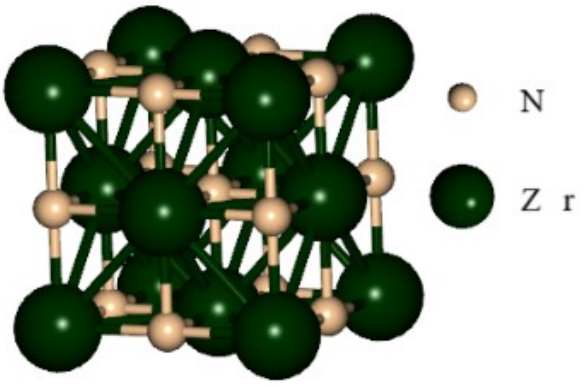
گروه ترکیبات نیتریدی فلزات واسطه به دلیل ویژگی هایی چون سختی زیاد ،دمای ذوب بالا ، مقاوم بودن در برابر فرسودگی ، در طی سال ها مورد توجه مطالعات تجربی و نظری بسیاری قرار گرفته اند [٤-١]. این گروه ترکیبات به لحاظ رسانایی در محدوده ای از عایق ، نیم رسانا و فلز قرار دارند و ترکیبات سرامیکی را نیز در بر میگیرند [۹-۵]. صنایعی همچون صنایع کالای خانگی ، صنایع هواپیما و خوردرو سازی برای پوشش دهی رو بدنه ی وسایل نقلیه و کالا های خود می توانند این گروه ترکیبات را مورد استفاده ی خود قرار دهند. همچنین برخی از ترکیبات این گروه به دلیل خاصیت درخشندگی بالایی که دارند در تهیه و ساخت اشیاء زینتی می توانند مورد استفاده قرار بگیرند. از آنجا که ترکیب زیرکونیوم نیترید این خاصیت را دارد که وقتی به عنوان پوشش روی ابزار آلات قرار بگیرند به سهولت هر گونه آلودگی از روی آن زدوده شود، در این مقاله به بررسی این

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

ترکیب پرداخته ایم. زیرکونیوم نیترید در دما و فشار محیط دارای ساختار مکعبی مرکز سطحی نمک طعام با ثابت شبکه حدود ٤/٥٨ انگستروم می باشد[۱۰]. ساختار های دیگر این ترکیب نیز ، ورت سایت ، سزیوم کلرید ، نیکل آرسنید و بلند روی می باشند[۱۱]. در این مقاله به بررسی ویژگی های کشسانی مانند نمودارهای انرژی کشش و تنش کشش، مدول های حجمی ، برشی و یانگ ، ثابت های کشسانی مرتبه ی دوم می پردازیم.

روش محاسبات

در این مقاله برای انجام محاسبات از نظریه ی تابعی چگالی و تقریب شیب تعمیم یافته (شبه پتانسیل فوق نرم) استفاده کرده ایم[۱۲]. برای انجام محاسبات خود سازگار از بسته ی محاسباتی کوانتوم اسپرسو بهره برده ایم [۱۳]. جهت بررسی ویژگی های کشسانی هم از کد محاسباتی الاستیک (Elastic) استفاده کرده ایم که از ورودی کد کوانتوم اسپرسو استفاده می کند و با کمک نظریه لاگرانژی کشسانی و رهیافت انرژی و فشار، محاسبات کشسانی را به انجام می رساند[١٤]. محاسبات بر روی محاسبات ساختار مکعبی نمک طعام ترکیب زیرکونیوم نیترید (شکل ۱)، با مش بندی کاپوینت ۹ ×۹ × ۹ و انرژی قطع ۳۸ ریدبرگ انجام شده است.



شکل ۱: سلول واحد ساختار مکعبی مرکز حجمی زیرکونیم نیترید

نتایج و بحث ها

در این بخش به بررسی نتایج محاسبات ویژگی های کشسانی می پردازیم. با استفاده از رهیافت مشتق مریتبه ی دوم انرژی و روابط زیر نمودارهای انرژی – کشش و ثابت های کشسانی مرتبه ی دوم را به دست آورده ایم [۱۵]:

$$E(\eta) = E(0) + V_0 \sum_{\alpha} \tau_{\alpha}^{(0)} + \frac{V_0}{2!} \sum_{\alpha,\beta} C_{\alpha,\beta} \eta_{\alpha} \eta_{\beta} \quad (۱)$$

$$+ \ldots$$

$$C_{\alpha,\beta} = \frac{1}{V_0} \frac{\partial^2 E}{\partial \eta \alpha \, \partial \eta_{\beta}} | \eta = 0 \quad (۲)$$

که در آن ها $E(\eta)$ ، $E(0)$، τ، η و $C_{\alpha\beta}$ به ترتیب مربوط به انرژی حالت کشش یافته ، انرژی حالت بدون کشش ، تنش ، کشش ، و ثابت های کشسانی مرتبه ی دوم می باشند، و α و β هم مربوط به نام گذاری ویجت (Voigt) می باشد. برای به دست آوردن نمودار های تنش – کشش هم از رابطه ی زیر استفاده کرده ایم[١٦]:

$$\tau = \frac{\Delta E}{A \Delta L} \quad (۳)$$

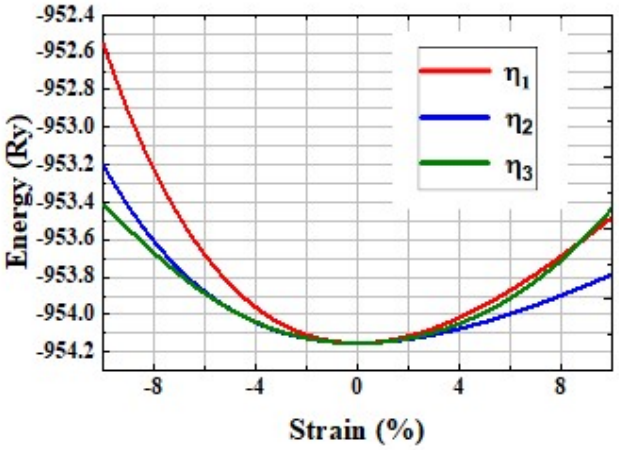
که ΔE، ΔL و A به ترتیب نمایانگر اختلاف انرژی حالت کشش یافته و پایه ، اختلاف ثابت شبکه کشش یافته و پایه و مساحت سطح می باشند. برای ساختار مکعبی مرکز سطحی سه نوع تغییر کشش در جهت های مختلف داریم (η_1,η_2,η_3) که برای هر کدام یک سری محاسبات تحت کشش به انجام رساندیم. شکل های ۲ و۳ نمودارهای انرژی –کشش و تنش – کشش را برای زیرکونیوم نیترید نشان می دهد. برای نمودارهای انرژی – کشش هر چه که عمق بیشتر باشد، نمودار نشان دهنده ی سختی بالاتر ترکیب می باشد، در اینجا نیز عمق نمودارها برای هر سه نوع تغییر کشش بالا می باشد که تایید کننده ی میزان سختی بالای ترکیب است. در نمودار های تنش – کشش (در صفحات yz, xz, xy برای هر سه نوع تغییر کشش) نیز هر چه شیب نمودار کمتر باشد نشان دهنده سختی بالاتر ترکیب می باشد. در اینجا نیز همان گونه که در شکل۳ ملاحظه می نمایید ، میزان شیب نمودار بسیار کم می باشد که در توافق با نتایج نمودار های انرژی – کشش است و میزان سختی بالای ترکیب را مشخص می کند. در نهایت مدول های کشسانی (مدول حجمی ، مدول برسی و مدول یانگ) و نسبت پواسون را با استفاده از روش هیل(Hill) به دست آورده ایم[۱۷]. ساختار مکعبی مرکز دار سه ثابت کشسانی مرتبه ی

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

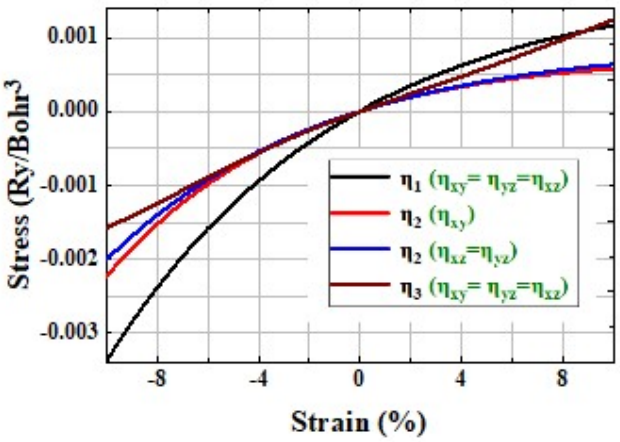
دوم مستقل از هم (C_{11},C_{12},C_{44})دارد. طبق اطلاعات بدست آمده برای مدول ها و ثابت های کشسانی که در جدول ۱ ملاحظه می نمایید ، مقادیر بالای ثابت های کشسانی نشان دهنده ی میزان سختی بالای این ترکیب است.

جدول۱ : مدول های کشسانی (مدول حجمی(B) ، برشی(G) و یانگ(Y)) و ثابت های کشسانی (C_{ij}) (بر حسب گیگا پاسکال) و نسبت پواسون (ν) (بدون بعد)

B	۲۴۷/۳۶
G	۱۵۰/۶۸
Y	۳۷۵/۷۴
C_{11}	۵۱۸/۷
C_{12}	۱۱۱/۷
C_{44}	۱۲۳
ν	۰/۲۵



شکل ۲ : نمودارهای انرژی – کشش برای زیرکونیوم نیترید



شکل ۳: نمودارهای تنش – کشش برای زیرکونیوم نیترید در صفحات مختلف

جمع بندی

محاسبات با استفاده از نظریه ی تابعی چگالی و تقریب شیب تعمیم یافته صورت گرفت. ویژگی های کشسانی با استفاده از نظریه ی لاگرانژی کشسانی و رهیافت مشتق مرتبه دوم انرژی مورد مطالعه قرار گرفت. مقادیر بالای مدول ها و ثابت های مرتبه ی دوم کشسانی و همچنین عمق بالای نمودارهای انرژی – کشش و شیب کم نمودار های تنش – کشش نشان دهنده ی میزان سختی بالای ترکیب زیرکونیوم نیترید می باشد. ویژگی سختی بالا و مقاومت بالا در برابر کشش برای کاربرد در صنایع پوشش دهی سخت سطوح مناسب است که می توان در آینده با جایگزین کردن عناصر بسیار سبک به جای زیرکونیوم و در عین حال با حفظ ویژگی مقاومت و سختی بالای این ترکیب در صنایعی مانند صنایع تولید وسایل نقلیه ، کالای خانگی و ساخت کامپوزیت ها نیز از آن بهره گرفت.

مراجع

[۱] S. T. Oyama, The Chemistry of Transition Metal Carbides and Nitrides, *Blackie Academic & Professional*, Glasgow, (1996).

[۲] L. E. *Toth, Transition Metal Carbides and Nitrides*, *Academic Press*, (1970).

[۳] K.-H. Zum Gahr, *Microstructure and Wear of Materials*, **10**,Elsevier,(1987).

[۴] L. M. Corliss, N. Elliott, and J. M. Hastings, *Phys. Rev*, **117**, (1960).

[۵] P. H. Mayrhofer, C. Mitterer, L. Hultman, and H. Clemens, Progress *in Materials Science*, **51**, (2006) 1032.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

[٦] L. Hultman, *Nanostructured Coatings Springer*, New York, (2006).

[٧] P. Steyer, A. Mege, D. Pech, C. Mendibide, J. Fontaine, J. F. Pierson, C. Esnouf, and R. Goudeau, *Surface & Coatings Technology*, **202**, (2008) 2268.

[٨] M. Stueber, H. Holleck, H. Leiste, K. Seemann, S. Ulrich, and C. Ziebert, *Journal of Alloys and Compounds*, **483**, (2009) ,321.

[٩] A. Raveh, I. Zukerman, R. Shneck, R. Avni, and I. Fried, *Surface & Coatings Technology*, **201**, (2007) 6136.

[١٠] A. F. Guillermet, J. Haglund, and G. Grimvall, Phys. Rev. B, Volume 45, (1992).

[١١] A. T. Asvini Meenaatci. Pressure induced phase transition of zrn and hfn: first principles study,*Journal of Atomic and Molecular Sciences*, **4**, (2013).

[١٢] J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett*, **77**, (1996).

[١٣] P. Giannozzi, S. Baroni, N. Bonini, M. Calandra, R. Car, C. Cavazzoni, D. Ceresoli, G. L. Chiarotti,M. Cococcioni, I. Dabo, A. Dal Corso, S. de Gironcoli, S. Fabris, G. Fratesi, R. Gebauer, U. Gerst mann, Ch. Gougoussis, A. Kokalj, M. Lazzeri, L. Martin-Samos, N. Marzari, F. Mauri, R. Mazzarello,S. Paolini, A. Pasquarello, L. Paulatto, C. Sbraccia, S. Scandolo, G. Sclauzero, A. P. Seitsonen, A. Smo gunov, P. Umari, and R. M. Wentzcovitch. Quantum espresso: a modular and open-source softwareproject for quantum simulations of materials. *Journal of physics. Condensed matter*: An Institute of Physics journal, **21**, Issue number 39, (2009).

[١٤] R. Golesorkhtabar, P. Pavone, J. Spitaler, P. Puschnig, and C. Draxl. Elastic: A tool for calculating second-order elastic constants from first principles.*Computer Physics Communications*, **84**, Issue number8, (2013) 1861- 1873.

[١٥] A. Reuss. *Berechnung der ie_grenze von mischkristallen auf grund der plastizita* tsbedingung fur einkristalle. ZAMM - Zeitschrift fur Angewandte Mathematik und Mechanik, **9**,(1929) 49 – 58.

[١٦] H K Barron and M L Klein. Second-order elastic constants of a solid under stress. *Proceedings of the Physical Society*, **85**, (1965) 523 – 532.

[١٧] R. Hill. The elastic behaviour of a crystalline aggregate. *ZAMM - Zeitschrift fur Angewandte Mathematik and Mechanik*, **65**, (1952) 349 – 354.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد

http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بلور فوتونی یک بعدی با دو لایه پلاسما

گلزاری ضمیر، سعیده؛ عبدی کیان، علیرضا

گروه فیزیک و فوتونیک، دانشگاه ملایر، ملایر

چکیده

در این مقاله یک بلور فوتونی یک بعدی با دوره تناوب سه لایه ای شامل پلاسمای ۱-دی الکتریک-پلاسمای ۲ مورد مطالعه نظری قرار می گیرد. رابطه پاشندگی بلور با استفاده از فرمول بندی ماتریس انتقال به دست می آید. از منحنی پاشندگی معلوم می شود که سه ناحیه فرکانسی وجود دارد: برای فرکانس های کمتر از کوچک ترین فرکانس پلاسما، هیچ انتشار نوری در بلور وجود نخواهد داشت؛ در فرکانس های بین دو فرکانس پلاسما، دو منحنی پاشندگی با گاف زیاد شکل می گیرد؛ و برای فرکانس های بالاتر از بزرگ ترین فرکانس پلاسما، نمودار پاشندگی به منحنی متعارف در بلورهای فوتونی با لایه های دی الکتریکی ساده میل پیدا می کند. نتیجه اینکه استفاده از دو لایه پلاسما کوک پذیری گاف اپتیکی بلور فوتونی را افزایش می دهد.

واژه های کلیدی: *بلور فوتونی دو پلاسمایی، ماتریس انتقال، منحنی پاشندگی.*

One-dimensional Photonic Crystal with Two Plasma Layers

Golzari Zamir, Saeideh; Abdikian, Alireza

Department of Physics and Photonics, Malayer University, Malayer

Abstract

In this paper, a one-dimensional photonic crystal with three-layer periodicity including plasma 1-dielectric-plasma 2 is theoretically studied. Dispersion relation of the crystal is obtained using transfer matrix formulation. From the dispersion curve it is revealed that there are three frequency regions: for frequencies smaller than the smallest plasma frequency, there is no light propagation in the crystal; at frequencies between the plasma frequencies, two curves with a large gap are formed; and for frequencies larger than the largest plasma frequency, the dispersion plot tends to the ordinary curve for photonic crystals of simple dielectric layers. The result is that, using of two plasma layers increases the tunability of photonic crystal optical gap.

***Keywords**: Double plasma photonic crystal, transfer matrix, dispersion relation.*

PACS No. 41, 42, 52.

مقدمه

پلاسماها علاوه بر کاربردهای زیادی که در زمینه های مختلف دارند در حوزه فوتونیک نیز نفوذ بسیاری پیدا کرده اند. "فوتونیک پلاسما" به مفاهیم بدیعی همچون بلورهای فوتونی پلاسمایی، آینه های پهن باند و صافی های کوک پذیر و چند کاناله پلاسمایی، فراموا‌د پلاسمایی، آینه های همه جهتی، توری های پراش، مشددهای نوری و موجبرهای پلاسمایی و ... می پردازد [۱]. از بین این موارد، پژوهش های فراوانی در خصوص بلور فوتونی پلاسمایی که متشکل از لایه های متناوب پلاسما و دی الکتریک می باشد انجام شده است [۷-۲]. مطالعات گسترده ای در مورد گاف نوری این بلورها، خواص غیرخطی آنها، شکل دهی باریکه های نوری با آنها، تاثیر آنها بر قطبش نور، به دام اندازی نور، دستکاری پالس های لیزری، تاثیر میدان مغناطیسی، نقایص بلوری، و نیز بلورهای فوتونی با پلاسمای گرد و غباری و ... در

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

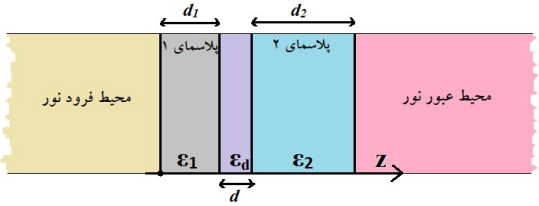
مراجع قابل یافت می باشند. خوشبختانه، بلورهای فوتونی پلاسمایی در کشور ایران نیز توجه پژوهشگران زیادی را به خود جلب کرده و کارهای بسیار ارزشمندی در این خصوص به ثمر رسیده است [۱۰-۲].

اکثر گزارش هایی که در مورد بلورهای فوتونی دید می شود مربوط به عبور، بازتاب و نیز رابطه پاشندگی بوده و ترکیب های متنوعی از تناوب های دو لایه ای، سه لایه ای و یا بیشتر که یکی از لایه ها از جنس پلاسما باشد مد نظر قرار گرفته اند. البته، پژوهش هایی در خصوص به کارگیری دو لایه پلاسما در تناوب بلوری نیز در مراجع به چشم می خورد و به نظر می رسد که استفاد از دو لایه پلاسما می تواند انعطاف پذیری بلور در طراحی گاف اپتیکی را بالا ببرد [۱۰-۸].

در این مقاله، یک بلور فوتونی با تناوب سه لایه ای (شامل دو لایه پلاسما و یک لایه دی الکتریک بین آن دو) با تکنیک ماتریس انتقال مورد مطالعه نظری و ترسیمی قرار می گیرد.

بلور فوتونی دوپلاسمایی

یک لایه پلاسما به ضخامت d_1 که توسط تیغه دی الکتریکی به پهنای d از لایه پلاسمای دوم با ضخامت d_2 فاصله دارد لحاظ می شود، شکل ۱.

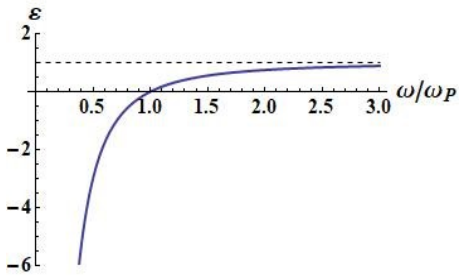


شکل ۱: طرح واره ای از سه لایه پشت سر هم متشکّل از پلاسمای ۱، دی الکتریک، و پلاسمای ۲ به ترتیب با توابع اپتیکی ε_1، ε_d و ε_2 و ضخامت های d_1، d و d_2. محور z عمود بر لایه ها است و محیط های سمت چپ و راست نیز به ترتیب، محیط های فرود و تراگسیل نور می باشند.

لایه دی الکتریک با ثابت ε_d لحاظ می شود. اگر فرکانس پلاسمای اول و دوم هم به ترتیب ω_{p1} و ω_{p2} باشند (با فرض $\omega_{P1}<\omega_{P2}$) آنگاه تابع دی الکتریک در سه لایه بر حسب z (عمود بر لایه ها) با اغماض از اثرات برخورد الکترونی به صورت زیر خواهد بود [۵و۶]:

$$\varepsilon(\omega,z)=\begin{cases}1-\dfrac{\omega_{p1}^2}{\omega^2} & 0<z<d_1\\ \varepsilon_d & d_1<z<d_1+d\\ 1-\dfrac{\omega_{p2}^2}{\omega^2} & d_1+d<z<d_1+d+d_2\end{cases} \qquad (۱)$$

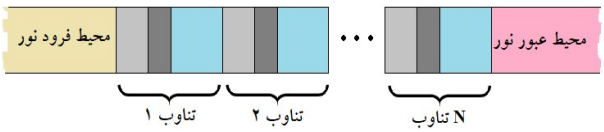
نمودار تابع دی الکتریک یک پلاسمای نوعی به شکل زیر است:



شکل ۲: نمودار تابع دی الکتریک یک پلاسما بدون لحاظ اثرات برخوردی.

واضح است که تابع دی الکتریک یک پلاسما در فرکانس های کمتر از ω_P دارای مقدار منفی و برای فرکانس های بیشتر از آن دارای مقدار مثبت است. حال نوری با فرکانس ω بر شکل ۱ به صورت عمود بر لایه ها تابانده می شود. تا حدی (البته به صورت کیفی) قابل پیش بینی است که برای $\omega<\omega_{P1}$ چون هر دو پلاسما دارای $\varepsilon<0$ هستند و ضریب شکست موهومی محض (طبق رابطه $n=\sqrt{\varepsilon}$) دارند پس هیچ عبوری برای نور وجود نخواهد داشت. در $\omega_{P1}<\omega<\omega_{P2}$ نیز علی رغم شفاف بودن پلاسمای اول (یعنی $\varepsilon_1>0$)، پلاسمای دوم به خاطر منفی بودن ε_2 مانع از انتشار مناسب خواهد شد. از طرف دیگر، در بازه $\omega_{P2}<\omega$ هر دو محیط پلاسما شفاف هستند و انتظار انتشار و عبور نور وجود دارد. البته باید دقت داشت که میزان انتشار نور در این بازه ها بسته به هندسه مسئله و شرایط مرزی حاکم تابعی از فرکانس ω خواهد بود.

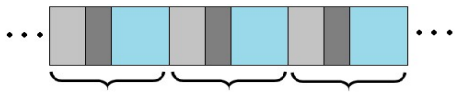
مطالبی که ذکر شد برای سه لایه مذکور در شکل ۱ بود. حال فرض کنید که به تعداد N تکرار از این سه لایه وجود داشته باشد، شکل ۳. آنگاه باز هم انتظار می رود که برای $\omega<\omega_{P1}$ هیچ عبوری از این پُشته ها برای نور امکان پذیر نباشد ولی در $\omega_{P2}<\omega$ نور به صورت تابعی از فرکانس قابل انتشار و عبور باشد.



شکل ۳: شماتیکی از N تناوب متشکل از پلاسمای ۱-دی الکتریک-پلاسمای ۲ واقع در بین محیط فرود و محیط عبور نور.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

برای نگاه دقیق ریاضیاتی به این مسئله باید از روش ماتریس انتقال استفاده کرد. در این روش به هر محیط و نیز به هر سطح مشترک بین دو محیط یک ماتریس ۲×۲ نسبت داده می شود و در نهایت، ماتریس انتقال مربوط به تناوب بلوری، و نیز ماتریس انتقال کل N تناوب با ضرب ماتریسی به دست می آید. در یک بلور فوتونی، تعداد تناوب ها بی نهایت است (شکل ٤) و دیگر چیزی به نام محیط فرود و عبور نور وجود ندارد.



شکل ٤: طرحواره ای از یک بلور فوتونی که شامل بی نهایت تناوب پلاسمای ۱-دی الکتریک-پلاسمای ۲ (طبق شکل ۱) می باشد.

برای محاسبه خواص اپتیکی این بلور فوتونی نیز می توان از ماتریس انتقال کمک گرفت. برای این کار باید ابتدا ماتریس انتقال یک تناوب بلوری را به دست آورد. موج الکترومغناطیسی در انتقال از تناوب بلوری (شکل ۱) سه محیط با ضخامت های d_1، d و d_2 و ضرایب شکست n_1، n و n_2 را طی می کند و از سه سطح مشترک یعنی پلاسمای ۱-دی الکتریک، دی الکتریک-پلاسمای ۲ و پلاسمای ۲-پلاسمای ۱ نیز گذر می کند. با این تفاسیر، ماتریس انتقال یک تناوب بلوری به شکل زیر خواهد بود [۱۱]:

$$T=\frac{1}{2\sqrt{\varepsilon_1}}\begin{bmatrix}\sqrt{\varepsilon_1}+\sqrt{\varepsilon_2} & \sqrt{\varepsilon_1}-\sqrt{\varepsilon_2}\\ \sqrt{\varepsilon_1}-\sqrt{\varepsilon_2} & \sqrt{\varepsilon_1}+\sqrt{\varepsilon_2}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}e^{-ik\sqrt{\varepsilon_2}d_2} & 0\\ 0 & e^{ik\sqrt{\varepsilon_2}d_2}\end{bmatrix}\times$$
$$\frac{1}{2\sqrt{\varepsilon_2}}\begin{bmatrix}\sqrt{\varepsilon_2}+\sqrt{\varepsilon_d} & \sqrt{\varepsilon_2}-\sqrt{\varepsilon_d}\\ \sqrt{\varepsilon_2}-\sqrt{\varepsilon_d} & \sqrt{\varepsilon_2}+\sqrt{\varepsilon_d}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}e^{-ik\sqrt{\varepsilon_d}d} & 0\\ 0 & e^{ik\sqrt{\varepsilon_d}d}\end{bmatrix}\times \quad (۲)$$
$$\frac{1}{2\sqrt{\varepsilon_d}}\begin{bmatrix}\sqrt{\varepsilon_d}+\sqrt{\varepsilon_1} & \sqrt{\varepsilon_d}-\sqrt{\varepsilon_1}\\ \sqrt{\varepsilon_d}-\sqrt{\varepsilon_1} & \sqrt{\varepsilon_d}+\sqrt{\varepsilon_1}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}e^{-ik\sqrt{\varepsilon_1}d_1} & 0\\ 0 & e^{ik\sqrt{\varepsilon_1}d_1}\end{bmatrix}$$

که حاصل ضرب شش ماتریس است که به ترتیب از راست به چپ شامل انتشار در پلاسمای ۱، گذر از سطح مشترک پلاسمای ۱-دی الکتریک، انتشار در دی الکتریک، گذر از فصل مشترک دی الکتریک-پلاسمای ۲، انتشار در پلاسمای ۲ و در نهایت گذر از سطح مشترک پلاسمای ۲-پلاسمای ۱ می باشند. با داشتن این ماتریس انتقال می توان ضرایب عبور t و بازتاب r یک تناوب بلوری را از معادله زیر محاسبه کرد [۱۱]:

$$\begin{bmatrix}t(\omega)\\ 0\end{bmatrix}=T\begin{bmatrix}1\\ r(\omega)\end{bmatrix} \quad (۳)$$

از این معادله ماتریسی، یک دستگاه دو معادله و دو مجهول حاصل می شود که با حل آن به راحتی r و t به دست می آیند. در نهایت نیز، با به کارگیری ضریب عبور t در فرمول زیر معادله پاشندگی بلور فوتونی پیدا می شود [۱۱]:

$$Cos(2\pi\frac{K}{G})=\mathrm{Re}(\frac{1}{t(\omega)}) \quad (٤)$$

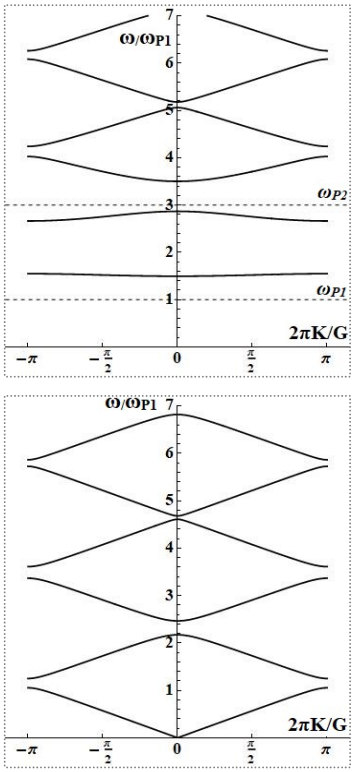
که در آن $G=2\pi/\Lambda$ ثابت شبکه وارون بلور فوتونی، $\Lambda=d_1+d+d_2$ دوره تناوب بلور، K عدد موج بلاخ و منظور از Re نیز قسمت حقیقی می باشد. یک کد کامپیوتری در محیط برنامه نویسی Mathematica توسط نویسندگان مقاله نوشته شده است که با دریافت مشخصات دو لایه پلاسما و محیط دی الکتریک بین آنها، ابتدا ماتریس انتقال یک تناوب بلوری را از طریق رابطه (۲) پیدا می کند و سپس ضریب عبور t آن را از حل معادله (۳) به دست می آورد. در نهایت نیز از رابطه (٤) استفاده کرده و رابطه پاشندگی بلور فوتونی را محاسبه می کند و آنرا ترسیم می نماید.

نتایج محاسبات و بحث و بررسی

یک بلور فوتونی که سلول واحد آن طبق شکل ٤ دارای یک لایه پلاسما، یک لایه دی الکتریک و یک لایه پلاسمای دیگر باشد در نظر گرفته می شود. پلاسمای اول به ضخامت و فرکانس دلخواه d_1=۱ mm و ω_{P1}=۲۵۰ GHz و پلاسمای دوم هم به ضخامت d_2=۱٫۵ mm و فرکانس ω_{P2}=۷۵۰ GHz لحاظ می گردند. لایه دی الکتریک هم به ضخامت d=۰٫۵ mm و ضریب شکست $\sqrt{\varepsilon_d}=1.5$ در نظر گرفته می شود. سپس، رابطه پاشندگی این بلور فوتونی دو پلاسمایی با کد مذکور به دست می آید. در شکل ۵ منحنی پاشندگی آن ترسیم شده است. نمودار پاشندگی یک بلور فوتونی که در آن به جای لایه های پلاسما، هوا قرار گرفته باشد نیز جهت مقایسه آورده شده است. از این نمودار مشخص است که می توان پاشندگی بلور فوتونی دو پلاسمایی را به سه ناحیه تقسیم بندی کرد: ۱) ناحیه $\omega<\omega_{P1}$، ۲) ناحیه $\omega_{P1}<\omega<\omega_{P2}$ و ۳) ناحیه $\omega_{P2}<\omega$. در ناحیه اول هیچ انتشار موجی وجود ندارد و بلور فوتونی دارای یک گاف اپتیکی بزرگ در این ناحیه است. علت آنرا می توان به منفی بودن تابع دی الکتریک هر دو پلاسما در این ناحیه مربوط دانست که باعث ضریب شکست موهومی و عدم

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

نفوذ نور می شود. برای ناحیه دوم، دو منحنی پاشندگی یکی نزدیک به ω_{P1} (که تقریباً تخت است) و دیگری نزدیک ω_{P2} وجود دارد. در این ناحیه تابع دی الکتریک پلاسمای ۱ مثبت (یعنی ضریب شکست حقیقی) و تابع دی الکتریک پلاسمای ۲ منفی (ضریب شکست موهومی) می باشد. گاف اپتیکی پهنی نیز بین این دو منحنی پاشندگی دیده می شود. در ناحیه سوم، هر دو پلاسما دارای تابع دی الکتریک مثبت هستند و منحنی پاشندگی بلور شبیه پاشندگی بلورهایی با لایه های ضریب شکست مثبت (شکل ۵-پایین) خواهد شد. این نتایج توافق خوبی با مراجع [۹و۱۰] دارند ولی چون تعداد محدودی از تناوب های بلوری در آنها لحاظ گردیده است از اینرو ظهور سه ناحیه فرکانسی فوق در این مراجع قابل مشاهده نمی باشد.



شکل ۵: منحنی پاشندگی بلور فوتونی با دو لایه پلاسمای مختلف (شکل بالا)؛ و پاشندگی همان بلور برای وقتی که لایه های پلاسما با هوا (n=۱) جایگزین شده باشند (شکل پایین).

نتیجه گیری

در این مقاله، منحنی پاشندگی بلور فوتونی که شامل دو لایه پلاسمای مختلف با یک تیغه دی الکتریک بین آنها است با استفاده از روش ماتریس انتقال به دست آمد. از نمودار پاشندگی معلوم شد که در چنین بلور فوتونی پلاسمایی، سه ناحیه فرکانسی (که توسط فرکانس های پلاسمای ω_{P1} و ω_{P2} از هم جدا می شوند) وجود دارد. چنین رفتاری در یک بلور فوتونی تک پلاسمایی دیده نشده است و برای اولین بار است که در اینجا گزارش می شود و نشان از قابلیت بالای به کارگیری دو لایه پلاسما در تنظیم و مهندسی انتشار نور در بلور فوتونی دارد. این چنین می توان نتیجه گیری کرد که استفاده از لایه های متعدد پلاسما در یک تناوب بلور فوتونی قادر خواهد بود انعطاف زیادی در میزان دستکاری و کوک پذیری گاف اپتیکی بلور ایجاد کند.

سپاسگزاری

از دانشگاه ملایر به خاطر حمایت از این کار پژوهشی قدردانی می شود.

مرجع ها

[۱] J. G. Eden; "Emergence of Plasma Photonics"; *IEEE Photonics Journal* **3**, No. 2 (2011) 302-306.

[۲] H. Mehdian, Z. Mohammadzahery, and A. Hasanbeigi; "Analysis of plasma-magnetic photonic crystal with a tunable band gap"; *PHYSICS OF PLASMAS* **20**, 043505 (2013).

[۳] K. Jamshidi-Ghaleh, F. Karami-Garehgeshlagi, and A. A. Mazloom; "Tunability of multichannel optical filter based on magnetized one-dimensional plasma photonic crystal"; *PHYSICS OF PLASMAS* **22**, 103507 (2015).

[۴] ALIREZA AGHAJAMALI; "Transmittance properties in a magnetized cold plasma–superconductor periodic multilayer", *Applied Optics* **55** No. 23 (2016) 6336-6340.

[۵] ZAHRA NADERI DEHNAVI, HASSAN RANJBAR ASKARI, MOSLEM MALEKSHAHI, DAVOUD DORRANIAN; "Properties of low frequency TE-electromagnetic wave in ternary plasma photonic crystal"; *Optica Applicata* **XLVII**, No. 3 (2017) 457-470.

[۶] Zahra Naderi Dehnavi, Hassan Ranjbar Askari, Moslem Malekshahi, and Davoud Dorranian; "Investigation of tunable omnidirectional band gap in 1D magnetized full plasma photonic crystals"; *PHYSICS OF PLASMAS* **24**, 093517 (2017).

[۷] D. Nobahar, K. Hajisharifi, and H. Mehdian; "Twisted beam shaping by plasma photonic crystal"; *Journal of Applied Physics* **124**, 213102 (2018).

[۸] نامدار، عبدالرحمان؛ حسین پور، مهدی؛ "مقایسه گاف باندهای سه نوع بلور فوتونی پلاسمایی یک بعدی شبه متناوب با بلور فوتونی متناوب"؛ *بیست و یکمین کنفرانس اپتیک و فوتونیک ایران و هفتمین کنفرانس مهندسی و فناوری فوتونیک ایران*، **۲۳-۲۵** دیماه ۱۳۹۳، دانشگاه شهید بهشتی.

[۹] E. Ataei, M. Sharifian, and N. Zare Bidoki; "Magnetized plasma photonic crystals band gap"; *Journal of Plasma Physics*, **80** 4 (2014) 581-592.

[۱۰] Z. Rahmani, and N. Rezaee; "The reflection and absorption characteristics of one-dimensional ternary plasma photonic crystals irradiated by TE and TM waves"; *Optik* **184** (2019) 134-141.

[۱۱] صالح، بهاء؛ *مبانی فوتونیک*، ترجمه: محمدصادق ابریشمیان، دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی، ۱۳۹۳.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

عامل شکل بار هسته‌های دو نوترونی هاله‌ای به روش نظریه‌ی میدان مؤثر هاله‌ای در مرتبه اول

جسری، سونیا[۱]؛ بایگان، شهریار[۲]

[۱] دانشکده فیزیک دانشگاه تهران ، انتهای خیابان کارگر شمالی ، تهران

[۲] دانشکده فیزیک دانشگاه تهران ، انتهای خیابان کارگر شمالی ، تهران

چکیده

برای محاسبه عامل شکل بار هسته‌های هاله‌ای دو نوترونی با برهمکنش‌های هسته – نوترون از نوع موج- S درچارچوب نظریه‌ی میدان مؤثر هاله‌ای فرمول بندی ارائه می‌دهیم. عامل‌های شکل و شعاع‌های بار نسبت به هسته را تا مرتبه اول در روش نظریه‌ی میدان مؤثر هاله‌ای برای هسته‌های ^{11}Li، ^{14}Be و ^{22}C با اندرکنش‌های دوجسمی از نوع موج- S محاسبه می‌کنیم و تا جایی که در دسترس است با نتایج دیگر مقایسه می‌کنیم.

واژه‌های کلیدی: *هسته‌های هاله‌ای، نظریه‌ی میدان مؤثر هاله‌ای، عامل شکل بار، شعاع بار.*

Charge Form Factor of Two-Neutron Halo Nuclei in Halo Effective Field Theory at Leading-order

Jesri, Sounya[۱]; Bayegan, Shahriar[۲]

[۱] *Department of Physics, University of Tehran, Tehran,*

[۲] *Department of Physics, University of Tehran, Tehran*

Abstract

We set up a formalism to calculate the charge form factor of two-neutron halo nuclei with S-wave neutron-core interactions in the framework of the halo effective field theory. We calculate the form factors and charge radii relative to the core at leading order in the halo EFT for ^{11}Li, ^{14}Be and ^{22}C nuclei with S-wave two-body interactions and compare to other results where they are available.

Keywords: *Halo nuclei, Halo effective field theory, Charge form factor, Charge radius.*

PACS No. ۲۱, ۲۵

مقدمه

در زمان جستجوی مقیاس فاصله‌ی بزرگتر از مقیاس برهمکنش تحت بررسی r ، برهمکنش‌ها را می‌توان با یک سری از برهمکنش‌های ثابت که با نام نظریه‌ی میدان مؤثر کوتاه–برد EFT شناخته می‌شود، تقریب زد [۱].

روش EFT، یک روش ریاضی است که بسته به اینکه به چه دقتی در محاسبات نیاز داریم، چند جمله‌ی اول بسط را به جای رابطه‌ی اصلی در محاسبات وارد می‌کنیم که البته در برخی از ناحیه‌های خاص معتبر است، به عبارت دیگر زمانی که سری ایجاد شده همگرا باشد، می‌توان گفت که EFT معتبر است. این همگرایی به طور مستقیم به کوچکی پارامتر بسط اشاره دارد. EFT به طور سیستماتیک و بدون وابسته به مدل، مسئله‌ی انرژی پایین را با شروع از یک لاگرانژی محلی حل می‌کند. برای انجام محاسبات طبق نظریه‌ی EFT از نمودارهای فاینمن استفاده می‌کنیم. با استفاده از EFT مرتبه به مرتبه به حل مسئله می‌پردازند و تا جایی که دقت محاسبات به حد دلخواهی برسد، نمودارها را تا چند مرتبه وارد محاسبات می‌کنند [۲].

معمولاً هسته‌های هاله‌ای به وسیله‌ی شعاع ماده‌ی هسته‌ای بزرگ یا کاهش ناگهانی در انرژی جداسازی یک یا دو نوکلئون در راستای زنجیره‌ی ایزوتوپی تعیین می‌شوند. بنابراین این هسته‌ها یک جداسازی در مقیاس‌ها را نشان می‌دهند که در مشاهده‌پذیرهای پراکندگی انرژی پایین از طریق طول پراکندگی a

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

که در مقایسه با برد برهمکنش هسته و نوکلئون R بزرگ است، نشان داده می‌شود[۳].

در این مطالعه به معرفی لاگرانژی با برهمکنش‌های موج-S تشدیدی و انتشارگرهای دو-جسمی و سه-جسمی می‌پردازیم. با محاسبه‌ی دیاگرام های سهیم در موج- S در مرتبه‌ی اول، عامل شکل و شعاع بار هسته‌های هاله‌ای دو نوترونی ^{11}Li، ^{14}Be و ^{22}C را محاسبه می‌کنیم.

لاگرانژی مؤثر

در صدد برقراری یک نظریه‌ی میدان غیرنسبیتی برای هسته‌هایی (c) با اسپین صفر و جرم m_0 و بار الکترومغناطیسی Ze هستیم که با دو نوترون (n) با اسپین $\frac{1}{2}$ و جرم m_1 برهمکنش می‌کند. هسته با میدان اسکالر ψ_0 و نوترون‌ها با میدان اسپینور دو مؤلفه‌ای $\overrightarrow{\psi_1}=\begin{pmatrix} n_\uparrow \\ n_\downarrow \end{pmatrix}$ (اسپین بالا $(n_\uparrow)$ و اسپین پایین $(n_\downarrow)$) توصیف می‌شوند. فرض می‌کنیم که تمام برهمکنش‌های دو ذره‌ای کوتاه-برد هستند و غالب برهمکنش‌ها از نوع موج-S تشدیدی است، یعنی برهمکنش‌هایی با اندازه‌ی تکانه زاویه‌ی $l=0$ که در مرتبه‌ی اول (L.O) قرار دارند. برهمکنش هسته-نوترون با میدان دایباریون اسپین $\frac{1}{2}$، $\left(\overrightarrow{d_1}=\begin{pmatrix} d_{1,\uparrow} \\ d_{2,\downarrow} \end{pmatrix}\right)$ و برهمکنش دو نوترون با میدان دایباریون اسپین صفر(d_0) توصیف می‌شوند. برای برهمکنش سه-جسمی بین هسته و دو نوترون از میدان کمکی ترایمر t استفاده می‌کنیم. علاوه بر برهمکنش‌های قوی بین نوترون‌ها و هسته، برهمکنش‌های الکترومغناطیسی با پتانسیل برداری از نوع A_μ را نیز در نظر می‌گیریم. جملات برهمکنشی به وسیله‌ی جفت‌شدگی مینیمم بدست آمده‌اند که ناوردای پیمانه‌ای را مطمئن می‌سازد، $i\partial_\mu \mapsto i\partial_\mu - \hat{Q}A_\mu$، که $\hat{Q}$ عملگر بار است. مسئله را در پیمانه‌ی کولن $(\vec{\nabla}.\vec{A}=0)$ بررسی می‌کنیم. در مسئله‌ی ما هسته دارای بار Ze است، به طوری که $\hat{Q}\psi_0 = Ze\,\psi_0$ و $\hat{Q}\psi_1 = 0$ است[۳]. در مرتبه‌ی اول، لاگرانژی به صورت جمع سهم‌های یک- و دو- و سه-جسمی $\mathcal{L}=\mathcal{L}^{(1)}+\mathcal{L}^{(2)}+\mathcal{L}^{(3)}$ نوشته می‌شود به طوری که:

$$\mathcal{L}^{(1)} = \psi_0^\dagger\left(i\partial_0 + \frac{\vec{\nabla}^2}{2m_0}\right)\psi_0 + \overrightarrow{\psi_1}^\dagger\left(i\partial_0 + \frac{\vec{\nabla}^2}{2m_1}\right)\overrightarrow{\psi_1} - Ze\,\psi_0^\dagger A_0\psi_0$$

$$-\frac{1}{2m_0}\psi_0^\dagger\left(2i\hat{Q}\vec{A}.\vec{\nabla} + \hat{Q}^2\vec{A}^2\right)\psi_0,$$

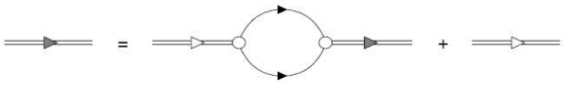
$$\mathcal{L}^{(2)} = \Delta_1\overrightarrow{d_1}^\dagger\overrightarrow{d_1} - g_1\left[\overrightarrow{d_1}^\dagger\overrightarrow{\psi_1}\psi_0 + \psi_0^\dagger\overrightarrow{\psi_1}^\dagger\overrightarrow{d_1}\right] + \Delta_0 d_0^\dagger d_0 \qquad (1)$$

$$-\frac{g_0}{2}\left[d_0^\dagger\left(\overrightarrow{\psi_1}^T P\overrightarrow{\psi_1}\right)\left(\overrightarrow{\psi_1}^T P\overrightarrow{\psi_1}\right)^\dagger d_0\right],$$

$$\mathcal{L}^{(3)} = \Omega\, t^\dagger t - h[t^\dagger\psi.d_0 + (\psi.d_0)^\dagger t].$$

بخش دو-جسمی $\mathcal{L}^{(2)}$ شامل انتشارگر دایباریون خالص و جفت‌شدگی دایباریون به دو ذره‌ی منفرد است. $\mathcal{L}^{(3)}$ نشان‌دهنده‌ی برهمکنش سه-جسمی است که بر حسب میدان کمکی ترایمر t نوشته می‌شود، که شامل انتشارگر ترایمر خالص از جنس $\Omega\, t^\dagger t$ و جفت‌شدگی ترایمر به دایباریون d_0 و میدان هسته ψ_0 است[۳]. کمیت های Δ_0 و Δ_1 و g_0 و g_1 به کات‌آف Λ بستگی دارد. در L.O پارامترهای Δ_i و g_i برای $(i=0,1)$ پارامترهای مستقل نیستند و مشاهده‌پذیرهای فیزیکی تنها به پارامتر $\frac{g_i^2}{\Delta_i}$ بستگی دارند. پارامترهای Ω و h نیز به کات‌آف Λ بستگی دارند و باز ترکیب $\frac{h^2}{\Omega}$ در L.O ظاهر می‌شود. در ادامه، قوانین فاینمن را در فضای تکانه به کار می‌گیریم. در دیاگرام‌های فاینمن، ذرات، دایباریون‌ها و ترایمرها به ترتیب با خطوط تکی، دوتایی و سه تایی نشان داده می‌شوند. به علاوه انتشارگرها را با فلش و جفت‌شدگی‌ها را با بیضی نمایش می‌دهیم. اگر این علائم خالی باشند، متناظر به کمیت‌های خالص برهمکنشی می‌باشند و اگر این علائم پر باشند متناظر به کمیت‌های کامل برهمکنشی می‌باشند.

مسئله‌ی دو-جسمی



شکل ۱ : نمایش دیاگرامی از معادله انتگرالی برای انتشارگرکامل دایباریونی[۳].

به منظور اختصار در نوشتار، پارامترهای جرم زیر را معرفی می‌کنیم:

$$M_{tot}=m_0+2m_1\,,\quad M_i=M_{tot}-m_i\,,\quad \mu_i=\frac{m_0 m_1^2}{m_i M_i}\,,\quad \tilde{\mu}_i=\frac{m_i M_i}{M_{tot}}. \qquad (2)$$

انتشارگر کامل دایباریونی بازبهنجارش شده به صورت زیر است:

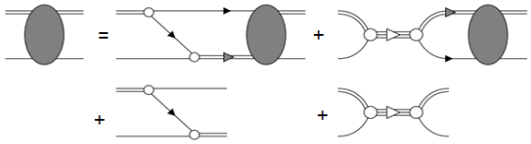
$$D_i(p_0,\vec{p}) = \frac{2\pi}{s_i g_i^2 \mu_i}\left[\frac{1}{a_i} - \sqrt{2\mu_i\left(\frac{\vec{p}^2}{2M_i} - p_0 - i\epsilon\right)}\right]^{-1}. \qquad (3)$$

برای طول پراکندگی مثبت a_i، این انتشارگر یک قطب با باقیمانده‌ی $Z_i = \frac{2\pi}{s_i g_i^2 \mu_i^2}\frac{1}{a_i}$ را دارد. همچنین در این رابطه $s_i = \frac{\delta_{i0}}{2} + \delta_{i1}$ است.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مسئله‌ی سه–جسمی

با محاسبه‌ی عنصرهای ماتریس T برای فرآیند پراکندگی دایباریون – ذره که به صورت T_{ij} هستند، شروع می‌کنیم [۴،۳]. دایباریون و ذره در کانال‌های ورودی (خروجی) هر دو به ترتیب با اندیس‌های $i(j)$ نشان داده می‌شوند. معادله انتگرالی برای ماتریس T در شکل۲ نشان داده شده است.



شکل۲ : نمایش دیاگرامی از معادله انتگرالی برای ماتریس T دایباریون– ذره[۳].

ما در چارچوب مرکز جرم کار می‌کنیم، که در آن ماتریس T تنها به انرژی کل E و تکانه‌ی نسبی در کانال های ورودی و خروجی که به ترتیب با p و k نشان داده می‌شوند، بستگی دارد. معادله انتگرالی ماتریس به صورت زیر نوشته می‌شود[۵]:

$$T(E,\mathrm{p},\mathrm{k}) = \int_0^\Lambda dq\, R(E,p,q)\bar{D}(E,q)T(E,q,\mathrm{k}) + R(E,p,\mathrm{k}), \quad (۴)$$

جمله‌ی کرنل $R(E,p,q)$ در معادله (۴) یک ماتریس۲×۲ است که به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$R(E,p,k) = \begin{pmatrix} R_{00}(E,p,k) & R_{01}(E,p,k) \\ R_{10}(E,p,k) & R_{11}(E,p,k) \end{pmatrix}, \quad (۵)$$

مؤلفه‌های کرنل برای $(i,j = 0,1)$ به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$R_{ij}^{[l]}(E,p,k) = \frac{(1-\delta_{i0}\delta_{j0})}{\sqrt{s_i s_j}}(-1)^l \frac{\pi}{\sqrt{|a_i||a_j|}} \frac{M_{tot}-m_i-m_j}{\mu_i\mu_j} \frac{2}{pk} Q_l\left(c_{ij}(E,p,k)\right) - \delta_{i0}\delta_{j0}\delta_{l0} H,$$

$$c_{ij}(E,p,k) = \frac{M_{tot}-m_i-m_j}{pk}\left(\frac{p^2}{2\mu_j} + \frac{k^2}{2\mu_i} - E - i\epsilon\right), \quad (۶)$$

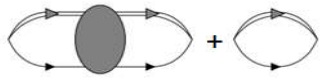
و $Q_0(a) = \frac{1}{2}\ln\left(\frac{1+a}{a-1}\right)$ است. H را به نام نیروی سه–جسمی معرفی می‌کنیم، به طوری که مقدار آن در ادامه به منظور حذف سهم‌های کاهش‌پذیر برابر صفر است[۳]. در نهایت $\bar{D}(E,q)$ ماتریسی قطری به صورت $\bar{D} = diag(\bar{D}_0,\bar{D}_1)$ با مؤلفه‌های

$$\bar{D}_i(E,q) = \frac{\mu_i|a_i|}{2\pi^2}\frac{q^2}{-\frac{1}{a_i}+\sqrt{b_i(E,q)}}, \quad b_i(E,q) = 2\mu_i\left(\frac{q^2}{2\mu_i} - E - i\epsilon\right), \quad (۷)$$

است. محاسبه‌ی ویژگی‌های حالت مقید هسته‌های هاله‌ای دو نوترونی به تابع موج سه–جسمی نیاز دارد که به طور مستقیم به تابع سه نقطه‌ای ذره–دایباریون–ترایمر (تابع رأس ترایمر) مرتبط است [۳،۱]. تابع رأس ترایمر در مرتبه‌ی اول توسط معادله انتگرالی جفت شده به معادله‌ی ماتریسی زیر می‌انجامد:

$$\vec{\mathcal{G}}(E,p) = \int_0^\Lambda dq\, R(E,p,q)_{|H=0}\bar{D}(E,q)\vec{\mathcal{G}}(E,q) + \vec{e}_0, \quad (۸)$$

به طوری که $\vec{e}_0 = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$ جمله‌ی ناهمگن مسئله است و $\vec{\mathcal{G}}(E,p) = \begin{pmatrix}\mathcal{G}_0(E,p)\\ \mathcal{G}_1(E,p)\end{pmatrix}$ مؤلفه‌های بردار $\vec{e}_0$ هستند و $(\vec{e}_0)_i = \delta_{i0}$ است. تابع $\vec{\mathcal{G}}(E,p)$ به کات‌آف وابسته است اما ترکیب $\sqrt{Z_{tr}}H\vec{\mathcal{G}}(E,p)$ مستقل از کات آف Λ است. این ترکیبی است که دقیقاً در محاسبه‌ی عامل شکل بار وارد می‌شود.

$t(E,0) =$ 

شکل۳ : دیاگرام های فاینمن سهیم در انتشارگر کامل ترایمر[۳].

باقیمانده‌ی قطب حالت مقید در انتشارگر کامل ترایمر به فاکتور بازبهنجارش Z_{tr} منجر می‌شود. دیاگرام‌های فاینمن سهیم در انتشارگر کامل ترایمر در شکل۳ نشان داده شده است، جایی که نقطه‌ی اتصال، متناظر به حالت d,ψ_0، در تطابق با انتخاب ما برای برهمکنش سه–جسمی در رابطه‌ی (۱) است، بنابراین تنها سهم T_{00} در t ظاهر می‌شود. بازبهنجارش تابع موج ترایمر از رابطه‌ی $Z_{tr} = -\lim_{E\to -B}(E+B)\,t(E,0)$ با $B = B_{cnn}$، انرژی جداسازی دو نوترون از هسته، قابل استخراج است که

$$t(E,0) = \int_0^\Lambda dq \int_0^\Lambda dq'\, \bar{D}_0(E,q)T_{00}(E,p,q')\bar{D}_0(E,q'). \quad (۹)$$

خود انرژی ترایمر با تمام سهم‌های کاهش‌ناپذیر در انتشارگر با رابطه‌ی $\Sigma(E) = t(E,0)_{|H=0}$ داده می‌شود که در نهایت ضریب بازبهنجارش وارد شده در رابطه‌های عامل شکل به صورت $H^2 Z_{tr} = \frac{1}{\Sigma'(-B)}$ در می‌آید.

عامل شکل بار

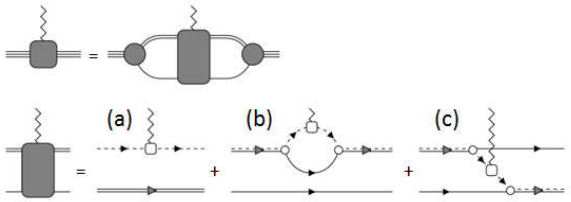
تکانه‌ی برداری ورودی وخروجی ترایمر را به ترتیب با $\vec{P}$ و $\vec{K}$ نشان می‌دهیم. قرارداد است که عامل شکل بار $(\mathcal{F}_E)$ را از مؤلفه‌ی صفرم المان ماتریسی جریان الکترومغناطیسی (j_0) ، در چارچوب بریت که هیچ انرژی‌ای به فوتون منتقل نمی‌شود، یعنی، $P_0 = K_0$ و $\vec{K}^2 = \vec{P}^2$ استخراج نمود. در نتیجه عامل شکل بار تنها به انتقال تکانه $\vec{Q}^2 = \left(\vec{K}-\vec{P}\right)^2$ بستگی دارد:

$$\langle t(K_0,\vec{K})|j_0|t(P_0,\vec{P})\rangle = \sqrt{Z_{tr}}\Sigma(-B)^{-1}i\Gamma_0(\vec{Q})\Sigma(-B)^{-1}\sqrt{Z_{tr}} = Z_{tr}H^2 i\Gamma_0(\vec{Q}), \quad (۱۰)$$

که $i\Gamma_0(\vec{Q})$ سهم تمام دیاگرام‌های فاینمن کاهش‌ناپذیر با ترایمر خارجی و فوتون جفت شده به هسته است. با در نظر گرفتن

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

جفت‌شدگی فوتون–هسته، عامل شکل از جمع سه سهم دیاگرام در شکل۴ استخراج می‌شود، یعنی $\mathcal{F}_E = \mathcal{F}_E^{(a)} + \mathcal{F}_E^{(b)} + \mathcal{F}_E^{(c)}$



شکل۴ : نمایش دیاگرامی از عامل شکل مطابق با رابطه (۱۰)[۳].

برای انتقال تکانه‌ی کوچک، عامل شکل را می‌توان بر حسب توان‌هایی از Q^2 به صورت $\mathcal{F}_E(Q^2) = 1 - \frac{\langle r_E^2\rangle}{6}Q^2 + \mathcal{O}(Q^4)$ بسط داد که شعاع بار است و با گرفتن حد $\langle r_E^2\rangle = -6\lim_{Q^2\to 0}\frac{d\mathcal{F}_E(Q^2)}{dQ^2}$ به صورت عددی به دست می‌آید.

بحث و نتیجه‌گیری

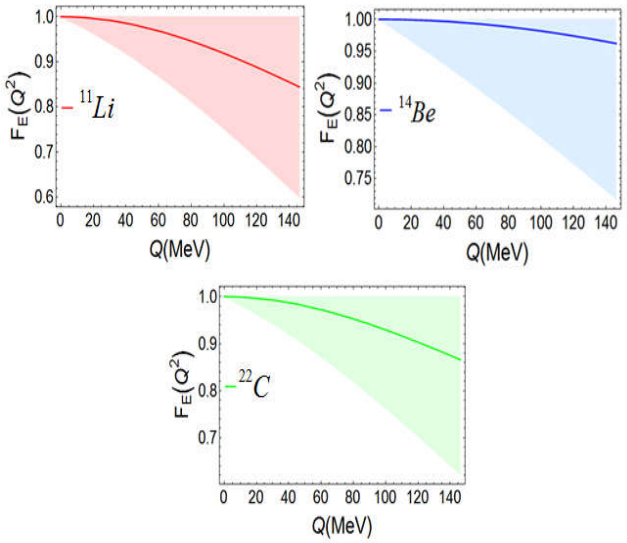
بعد از انجام محاسبات طبق قوانین فاینمن و ساده‌سازی‌های لازم، برای سه دیاگرام سهیم در عامل شکل بار به رابطه‌های (۱۱) ، (۱۲) و (۱۳) می‌رسیم که کمیت $d(r,q,x) = \sqrt{q^2 + 2\,qrx + r^2}$ در این رابطه‌ها معرفی می‌شود. انرژی‌های جداسازی یک و دو نوترون به ترتیب $B_{cn} = B_1$ و $B_{cnn} = B$ است. طول پراکندگی cn از رابطه‌ی $a_1 \equiv a_{cn} = \frac{sign(B_1)}{\sqrt{2\mu_1|B_1|}}$ تعیین می‌شود و $a_* \equiv a_{nn} = -18/76fm$ است. در شکل۵ و جدول۱ نتیجه‌های مربوط به عامل شکل و شعاع بار سه هسته‌ی هاله‌ای مورد مطالعه‌ی ما آمده است. در این مطالعه، شعاع محاسبه شده را به صورت شعاع بار هسته‌ی هاله‌ای cnn نسبت به شعاع بار هسته تفسیر می‌کنیم.

$$\mathcal{F}_E^{(a)}(Q^2) = Z_{tr}H^2\int_0^\Lambda dp\int_0^\Lambda dk\left\{\vec{\mathcal{G}}(p)^T\bar{D}(p)\Upsilon^{(a)}(Q,p,k)\bar{D}(k)\vec{\mathcal{G}}(k) + 2\int_0^\Lambda dp\,\vec{\mathcal{G}}(p)^T\bar{D}(p)\vec{\Upsilon}^{(a)}(Q,p) + \Upsilon_0^{(a)}(Q)\right\},$$
$$\Upsilon_{\dots}^{(a)}(Q,\dots) = \frac{\mu_1}{4\pi}\int_0^\Lambda\frac{dq}{q}\int_{-1}^{1}\frac{dx}{x}\chi_{\dots}^{(a)}\left(\frac{M_\cdot}{M_{tot}}\frac{Q}{2},q,x\dots\right). \quad (11)$$

$$\mathcal{F}_E^{(b)}(Q^2) = Z_{tr}H^2\int_0^\Lambda dp\int_0^\Lambda dk\,\vec{\mathcal{G}}(p)^T\bar{D}(p)\Upsilon^{(b)}(Q,p,k)\bar{D}(k)\vec{\mathcal{G}}(k),$$
$$\Upsilon_{ij}^{(b)}(Q,p,k) = \frac{\mu_1|a_1|}{(2\pi)^2}\frac{m_\cdot m_1}{2M_{tot}}\int_0^\Lambda dq\,q^2\int_{-1}^{1}dx\,\chi_{ij}^{(b)}\left(\frac{m_1}{M_{tot}}\frac{Q}{2},q,x,p,k\right). \quad (12)$$

$$\mathcal{F}_E^{(c)}(Q^2) = Z_{tr}H^2\int_0^\Lambda dp\int_0^\Lambda dk\,\vec{\mathcal{G}}(p)^T\bar{D}(p)\Upsilon^{(c)}(Q,p,k)\,\bar{D}(k)\vec{\mathcal{G}}(k), \quad (13)$$
$$\Upsilon_{ij}^{(c)}(Q,p,k) = \frac{2}{|a_1|}\int_{-1}^{1}dx\int_{-1}^{1}dy\int_0^\pi d\varphi\,\chi_{ij}^{(c)}\left(\frac{m_1}{M_{tot}}Q,x,y,\varphi,p,k\right).$$

که تعریف عنصرهای $\chi_{\dots}^{(a)}\left(\frac{M_\cdot}{M_{tot}}\frac{Q}{2},q,x\dots\right)$ ، $\chi_{ij}^{(b)}\left(\frac{m_1}{M_{tot}}\frac{Q}{2},q,x,p,k\right)$ و $\chi_{ij}^{(c)}\left(\frac{m_1}{M_{tot}}Q,x,y,\varphi,p,k\right)$ در مرجع [۳] آمده است.



شکل۵ : عامل شکل بار برای هسته‌های ^{11}Li، ^{14}Be و ^{22}C در مرتبه‌ی اول نظریه‌ی میدان مؤثر. خطای تئوری برآورد شده با نوار سایه مشخص شده است.

جدول۱ : پارامترهای نظریه‌ی مؤثر و پیش بینی‌هایی برای شعاع بار $\langle r_E^2\rangle$ نسبت به هسته در ^{11}Li، ^{14}Be و ^{22}C c نشان دهنده‌ی هسته و m_c جرم هسته را نشان می‌دهد.

c cn cnn	$m_c[MeV]$ $B_{cn}[MeV]$ $B_{cnn}[MeV]$	$\langle r_E^2\rangle[fm^2]$
$^{9}_{3}Li$ $^{10}_{3}Li$ $^{11}_{3}Li$	۸۴۰۶ −۰/۰۲۶(۱۳) ۰/۳۷	[مطالعه حاضر] ۰/۷۴۰۳ ۱/۷(۶) [۳] ۱/۷۱۱(۱۲۰) [۶] ۰/۷۴۴(۲۵۵) [۱]
$^{12}_{4}Be$ $^{13}_{4}Be$ $^{14}_{4}Be$	۱۱۲۰۱ −۰/۵۱(۱) ۱/۲۷(۱۳)	[مطالعه حاضر]۰/۱۲۳ ۰/۴(۳) [۳] ۰/۱۲۶(۹۸) [۱]
$^{20}_{6}C$ $^{21}_{6}C$ $^{22}_{6}C$	۱۸۶۶۴ −۰/۰۱۴(۶۷) ۰/۱۱(۶)	[مطالعه حاضر]۰/۷۳۱۷۸ $۱/۷^{\infty}_{-۰/۵}$ [۳] $۰/۵۱۹^{\infty}_{-۰/۲۷۴}$ [۱]

مرجع‌ها

[۱] J. Vanasse, *Phys. Rev. C* ۹۵, ۰۲۴۳۱۸ (۲۰۱۷).

[۲] Daniel Phillips, *Czechoslovak Journal of Physics* ۵۲, B۴۹-B۱۰۱ (۲۰۰۲).

[۳] P. Hagen, H.-W. Hammer, and L. Platter, *Eur. Phys. J. A*۴۹, ۱۱۸ (۲۰۱۳).

[۴] Harald W. Grießhammer, *Nuclear Physics A* ۷۴۴ (۲۰۰۴).

[۵] G.V. Skorniakov, K.A. Ter-Martirosian, *Sov. Phys. JETP* ۴, ۶۴۸ (۱۹۵۷).

[۶] R. Sánchez et al., *Phys. Rev. Lett.*۹۶, ۰۳۳۰۰۲ (۲۰۰۶).

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

انرژی جداسازی دو نوترون و گذار فازی شکلی در هسته‌ها

مریم قپانوری[1]، مسعود صیدی[2*]

[1]سازمان انرژی اتمی، پژوهشکده پلاسما و گداخت هسته ای، پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، تهران، ایران

[2]گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه ایلام، ایلام، ایران

چکیده

در این مقاله به منظور بررسی ساختار هسته از مشاهده‌پذیرهایی مانند انرژی بستگی، انرژی جداسازی دونوترونی و اختلاف انرژیهای جداسازی دو نوترونی مجاور در هسته‌های زوج و فرد استفاده شد. این مشاهده‌پذیرها را برای زنجیره ایزوتوپی زوج-زوج و A فرد در چارچوب‌های مدل‌های IBM و IBFM محاسبه و سپس برای ایزوتوپ‌های زوج-زوج $^{128-136}_{56}Ba$ و $^{100-110}_{44}Ru$ همچنین ایزوتوپ‌های A فرد $^{127-137}_{56}Ba$ و $^{101-109}_{45}Rh$ بکار بردیم. نتایج ما نشان می‌دهد که مشاهده پذیر انرژی جداسازی یک کمیت مناسب برای بررسی ساختار هسته، تعیین نوع گذار فازی شکلی و همچنین مشخص نمودن هسته‌های گذاری در طول یک زنجیره ایزوتوپیک می‌باشد.

واژه های کلیدی:*گذار فاز کوانتومی، انرژی جداسازی دو نوترونی، هسته گذاری*

Two Neutron Separation Energy and Shape Phase Transition in Nuclei

Maryam Ghapanvari[1], Masoud Seidi[2*]

[1]Institute of Plasma and Nuclear Fusion, Institute of Nuclear Science and Technology, Tehran, Iran
[2] Department of Physics, Faculty of Science, Ilam University, Ilam, Iran

Abstract

In this paper, in order to investigate the structure of the nucleus, observables such as binding energy, neutron separation energy and difference of separation energies of two neutrons in even and odd nuclei were used. We calculated these observations for the even-even and odd-A isotope chains within the IBM and IBFM models, and then for the $^{128-136}_{56}Ba$ and $^{100-110}_{44}Ru$ isotopes and the $^{127-137}_{56}Ba$ and $^{101-109}_{45}Rh$ isotopes were applied. Our results show that the neutron separation energy is the suitable quantity to examine the structure of the nucleus, determine the type of shape phase transition and also the nuclei of transitional along an isotopic chain.

***Keywords**: Quantum Phase Transition, Two Neutron separation energy, Transitional nuclei*

PACS No. (21)

مقدمه

انرژی بستگی حاوی اطلاعات مهمی در مورد ساختار هسته است. به کمک انرژی بستگی، مشاهده‌پذیر دیگری موسوم به انرژی جدایی دو نوترون تعریف می‌شود که برای بررسی QPT حائز اهمیت است. انرژی بستگی و بطور خاص انرژی جداسازی دو نوترونی (S_{2n}) مشاهده‌پذیرهای بسیار حساسی به تغییرات در ساختار هسته می‌باشند. از طریق این مشاهده‌پذیرها میتوان گذار فاز کوانتومی (QPT) را در هسته‌ها مطالعه کرد [1-3]. انرژی بستگی مشاهده پذیر بسیار مهمی است که مبنای اندازه گیری و محاسبهٔ انرژی جدایی دو نوترون، انرژی واپاشی آلفازا و انرژی واپاشی دوبتایی می‌باشد. بطور کلی گذار فاز به علت تغییر ناگهانی ساختار حالت پایه سیستم رخ میدهد که این نیز مرتبط با تغییر پارامترهای کنترلی سیستم است[1-3].با مشاهده تغییرات صورت گرفته در کمیت‌های مربوط به جرم و شعاع هسته به علت تغییر پارامترهای کنترلی میتوان نشانه‌های گذار فاز را دید. انتظار می رود چون این کمیت‌ها ارتباط بسیار نزدیکی با شکل هسته دارند، اطلاعات بسیار واضح و دقیقی در مورد رفتار گذار فاز فراهم کنند[1-3].کمیت‌هایی مانند: تلاقی ترازهای انرژی،

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

نسبت انرژی حالت های 2_1^+ و 4_1^+ یعنی $R_{\frac{4}{2}}$، انرژی جدایی دو نوترونی وغیره می‌توانند بیانگر QPT میباشند. طیف انرژی، نسبت $R_{\frac{4}{2}}$ (به غیر از نقاط دقیق مثل 2 و3/3) و گذارهای الکترومغناطیسی به تنهایی ساختار را تعیین نمی‌کند بنابراین احتیاج به کمیت‌های دیگری مانند همچون روند انرژی جدایی دونوترونی، انرژی واپاشی آلفازا (Q_α) و انرژی واپاشی دو بتایی ($Q_{2\beta^-}$) نیز هست[1-3]. با استفاده از مشاهده‌پذیرهای ذکر شده میتوان QPT را در چارچوب مدل برهمکنش بوزونی (IBM) با بوزونهای s و d مطالعه کرد. در چارچوب $\mathrm{IBM-sd}$، QPT مرتبهٔ اول و دوم بین شکلهای کروی، تغییرشکل یافته کشیده و پخت در طول یک زنجیره از ایزوتوپها رخ میدهد[1-3]. اولین بار در دهه 80 دپرینک[1]، اسکولتن[2] و یاکلو[3] این نوع گذار فازها را در $IBM-sd$ کشف کردند [4]. علاوه بر هسته‌های زوج-زوج QPT نیز میتواند در هسته های A–فرد رخ بدهد.[5]. گذار مرتبهٔ اول منجربه ناپیوستگی مشتق اول انرژی جداسازی دو نوترونی نسبت به کنترل پارامتر میشود. گذار مرتبهٔ دوم یا ناپیوستگی مشتق دوم در نقطهٔ بحرانی، تغییر شیبی را در انرژی جداسازی دو نوترونی القاء میکند. زامفیر[4] و همکاران یک تغییر شیب همواری را در هسته هایی که متحمل QPT مرتبهٔ دوم بین حدهای کروی ($U(5)$) و پرخندهٔ گاما ناپایدار ($SO(6)$) میشوند را گزارش کردند[6].

در این مقاله ما نشان خواهیم داد که انرژی‌های جداسازی دو نوترونی یک مشاهده پذیر مناسب برای بررسی ساختار هسته در طول یک زنجیره ایزوتوپیک می‌باشد. بنابراین پس از معرفی روابط انرژی‌های بستگی و جداسازی دو نوترونی در چارچوب‌های IBM و IBFM به محاسبه این کمیت‌ها در زنجیره های ایزوتوپیک Ba، Ru و Rh پرداختیم.

روش کار

الف) انرژی بستگی (E_B)

انرژی بستگی تعریف شده در چارچوب IBM و IBFM دارای دو بخش عمومی (E_B^{gl}) و موضعی (E_B^{lo}) است. بخش E_B^{gl} مربوط به انرژی کپه ای هسته میباشد و تغییرات در آن به کندی صورت میگیرد. این بخش، از هامیلتونین عمومی مدل حاصل میشود. بخش E_B^{lo} نسبتاً کوچک است و از ساختار خاص هسته مورد نظر نتیجه میشود[1و8-7]. هامیلتونین‌های مدل IBM و IBFM به هامیلتونین‌های موضعی موسوم‌اند و E_B^{lo} سیستم را میدهند. میتوان به این هامیلتونی‌ها بخش دیگری موسوم به هامیلتونین عمومی نیز اضافه کرد که تأثیر چندانی بر طیف انرژی و بویژه انرژیهای برانگیختگی درونی ندارد [1و8-7]. بخش E_B^{gl} در مدلهای $sd-\mathrm{IBM}$ و $sd-\mathrm{IBFM}$ مرتبط با عملگرهای کازیمیر جبر $U(6)$ میباشد. این بخش از انرژی پیوندی را میتوان در جملاتی از تعداد بوزونهای لایهٔ ظرفیت (N) به صورت زیر نوشت:

$$E_B^{gl}(N) = E_C + AN + \frac{1}{2}BN(N-1) \qquad (1)$$

که در آن E_C انرژی مربوط به مغز هسته است. بطور کلی E_B^{lo} از تأثیر هامیلتونین بر حالت پایه سیستم به ازای برچسب های کوانتومی حالت پایه در روابط روابط (2) و (3) بدست میآید. مجموع این دو بخش، انرژی بستگی کل را می‌دهد که به کمک روش حداقل مربعات و داده های تجربی برای زنجیره‌های ایزوتوپیک محاسبه میگردد[10و9].

$$E^{(k)} = \sum_{i=1}^{k}\frac{\varepsilon}{x_i} + \gamma v_d(v_d+3) + \delta L(L+1) + \varepsilon\Lambda_1^0 \qquad (2)$$

$$\Lambda_0^1 = \varepsilon\frac{1}{2}[c_s^2(v_s+\frac{1}{2}) + c_d^2(v_d+\frac{5}{2})]$$

$$E^{(k)}\left(j=\frac{1}{2}\right) = \sum_{i=1}^{k}\frac{\varepsilon}{x_i} + \beta v_d(v_d+3) + \delta L(L+1) + \varepsilon\Lambda_1^0 + \gamma j(j+1) \qquad (3)$$

$$E^{(k)}\left(j=\frac{3}{2}\right) = \sum_{i=1}^{k}\frac{\varepsilon}{x_i} + \beta\left(\tau_1(\tau_1+3) + \tau_2(\tau_2+1)\right) + \varepsilon\Lambda_1^0 + \gamma j(j+1)$$

ب) انرژی جدایی دو نوترونی (S_{2n})

[1] Dieperink
[2] . Scholten
[3] . Iachello
[4] . Zamfir

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

انرژی جدایی دو نوترون را برحسب تعداد بوزونها میتوان به صورت زیر تعریف کرد[1و8-7]:

$$S_{2n}(N) = E_B(N) - E_B(N-1) \qquad (4)$$

با استفاده از انرژی بستگی کل که شامل قسمت‌های عمومی و موضعی است می‌توانیم انرژی بستگی را محاسبه کنم.

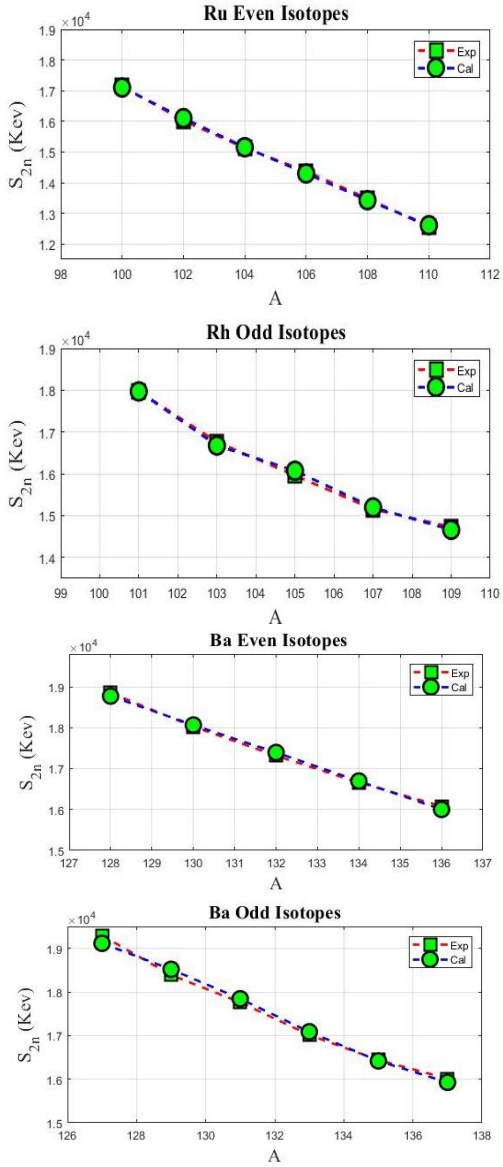
برای بررسی QPT، اختلاف انرژیهای جداسازی دو نوترونی هسته های مجاور میتوانند به عنوان مشاهده پذیرهای بسیار حساسی به تغییرات ناگهانی در ساختار هسته مطرح گردند. برای این کار از روابط زیر استفاده میکنیم

$$D\{S_{2n}(N)\} = S_{2n}(N) - S_{2n}(N-1) \qquad (5)$$

بحث و نتایج

در این مقاله ما به کمک انرژی جدایی دو نوترون و اختلاف انرژیهای جداسازی دو نوترونی هسته های مجاور ، به بررسی ساختار هسته و گذار فاز کوانتومی در ایزوتوپ‌های زوج-زوج $^{128-136}_{56}Ba$ و $^{100-110}_{44}Ru$ و نیز ایزوتوپ‌های A فرد $^{127-137}_{56}Ba$ و $^{101-109}_{45}Rh$ میپردازیم. داده‌های تجربی مربوط به این زنجیره‌ها از منابع [11] گرفته شده‌اند. برای محاسبهٔ انرژی جداسازی این ایزوتوپها ، ثابت های بخش‌های عمومی و موضعی معادله انرژی بستگی به کمک روش حداقل مربعات بدست آمدند. نتایج حاصل برای هسته‌های زوج و فرد درشکل(1) ارائه شده است.

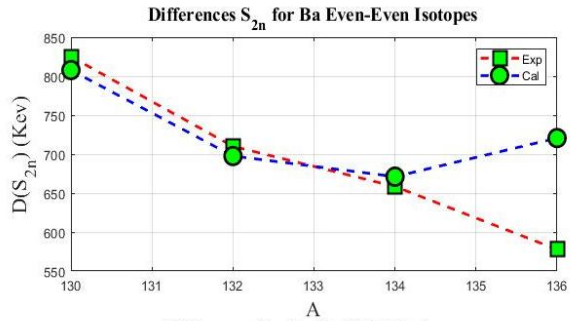
بطوریکه از نمودار (1) برای هسته‌های زوج و فرد می‌توان دید، تغییرات انرژی جدایی دو نوترون نسبت به عدد جرمی در طول زنجیره ایزوتوپیک $^{128-136}_{56}Ba$ و $^{100-110}_{44}Ru$ و نیز ایزوتوپ‌های A فرد $^{127-137}_{56}Ba$ و $^{101-109}_{45}Rh$ خطی است. بنابراین نتایج ما پیش بینی‌های انجام شده در مراجع [1 و8-7] که پیشنهاد میکنند تغییرات انرژی جدایی دو نوترون برای منطقه گذار $U(5) \leftrightarrow SO(6)$ خطی است را تایید میکند. پس رفتار خطی و با شیب نسبتاً ملایم این مشاهده پذیرها حاکی از نوعی QPT مرتبهٔ دوم میباشد. همچنین با توجه به شکل می‌توان دید که توافق خوبی بین نتایج تجربی و تئوری وجود دارد.

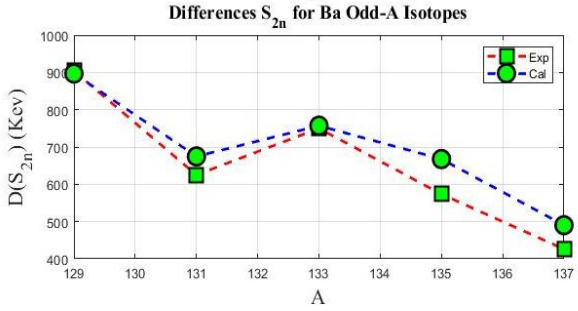


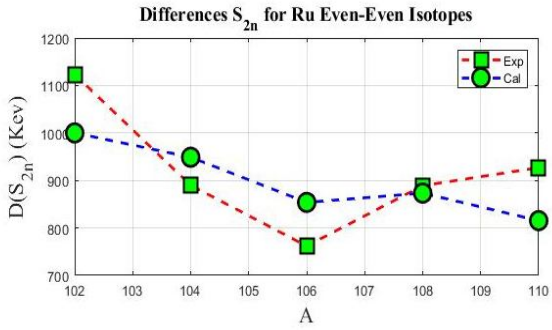
شکل 1. انرژیهای جدایی دو نوترونی در ایزوتوپهای زوج – زوج و فرد - زوج Ba، Ru-Rh.

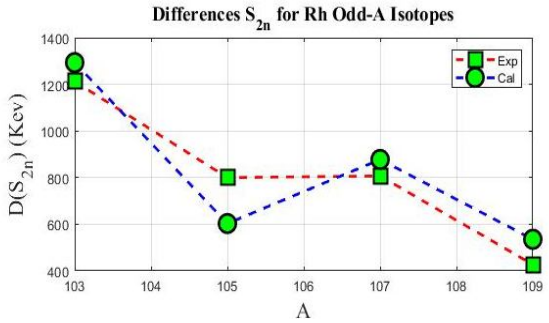
برای بررسیهای دقیقتر به منظور مشخص کردن هستهٔای گذار $E(5)$، اختلاف انرژیهای جداسازی دو نوترونی هسته‌های مجاور را محاسبه کردیم. نتایج حاصل از این محاسبات در شکل (2) نشان داده شده است.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹









شکل 2 اختلاف انرژیهای جدایی دو نوترونی در ایزوتوپهای زوج – زوج و فرد - زوج Ba، Ru-Rh.

در تعیین نقطه گذاری باید به نمودارهای $D\{S_{2n}(N)\}$ توجه کرد. شکل (2) یک تغییر رفتار در شیب نمودار در هسته های زوج-زوج Ba و Ru ، به ترتیب در هسته‌های $^{134}_{56}Ba$ و $^{106}_{45}Rh$ را نشان می‌دهد. بنابراین این هسته‌ها می‌توانند بعنوان کاندیدای هسته‌های گذاری انتخاب شوند. به منظور تعیین نقطه گذاری در ناحیهٔ $U(5)\leftrightarrow SO(6)$ در ایزوتوپ‌های فرد مطابق با نمودار $D\{S_{2n}(N)\}$ با توجه به تغییر ناگهانی شیب نمودار بنظر میرسد هستهٔ گذار در ایزوتوپهای زوج-فرد باریوم، $^{133}_{56}Ba$ یا $^{135}_{56}Ba$و همچنین در ایزوتوپ‌های فرد-زوج Rh، $^{105}_{45}Rh$ یا $^{107}_{45}Rh$باشند چون این ایزوتوپ‌ها رفتار متفاوتی با هسته‌های کناری خود دارند.

نتیجه گیری

در این مقاله به بررسی ساختار هسته‌هایی با عدد جرمی زوج و فرد در چارچوب مدلهای IBM-1 و IBFM-1 با استفاده از انرژی جداسازی دو نوترونی و اختلاف متوالی این انرژیها پرداختیم. محاسبات ما یک گذار فاز مرتبه دوم را برای زنجیره های ایزوتوپیک Ba، Ru و Rh را نشان می‌دهد همچنین $^{134}_{56}Ba$ و $^{106}_{45}Rh$ هسته های گذار در ناحیهٔ $U(5)\leftrightarrow SO(6)$ برای ایزوتوپهای زوج – زوج و ایزوتوپهای A فرد به ترتیب $^{133-135}_{56}Ba$ و $^{105-107}_{45}Rh$ میباشند.

مرجع ها

[1] M. Ghapanvari, A. H. Ghorashi, Z. Ranjbar, M. A. Jafarizadeh, High-spin level structure and Ground-state phase transition in the odd-mass 103-109 Rh isotopes in the framework of exactly solvable sdg - interacting boson-fermion model , *Nuclear Physics A*, **971** (2018) 51-70.

[2] S. Sachdev, *Quantum Phase Transitions* Cambridge: Cambridge University Press (2011).

[3] J. Kotila, K. Nomura, L. Guo, N. Shimizu, and T. Otsuka, Shape phase transitions in the interacting boson model: Phenomenological versus microscopic descriptions, *Physical Review C*, 85 (2012) 054309.

[۴] A. E. L. Dieperink, O. Scholten, F. Iachello, Classical Limit of the Interacting-Boson Model, *Physical Review Letter*, 44 (1980) 1747.

[۵] O. Scholten and N. Blasi, Description of the Europium isotopes in the interacting boson-fermion model, *Nuclear Physics A*, 380 (1982) 509.

[۶] N. Zamfir, S. Anghel, and G. Cata-Danil, Phase/Shape Transitions and the Two Neutron Separation Energies, *AIP Conference Proceedings*, 1072 (2008)118.

[۷] R. Fossion, C. De Coster, J.E. Garc´ıa-Ramos, T.Werner, K. Heyde, Nuclear binding energies: Global collective structure and local shell-model correlations, *Nuclear Physics A*, 697 (2002) 703–747.

[۸] J.E. Garc´ıa-Ramos, C. De Coster, R. Fossion and K. Heyde, Two-neutron separation energies, binding energies and phase transitions in the interacting boson model, *Nuclear Physics A*, **688** (2001) 735–754.

[۹] Feng Pan, J. P. Draayer, Algebraic solutions of an *sl*- boson system in the $U(2l+1) \supset O(2l+2)$ transitional region, *Journal of Physics A: Mathematical and General*, **35** (2002) 7173.

[۱۰] M. A. Jafarizadeh, M. Ghapanvari, and N. Fouladi, Algebraic solutions for $U^{BF}(5)\leftrightarrow O^{BF}(6)$ quantum phase transition in odd-mass-number nuclei, *Physical Review C*, **92** (2015) 054306.

[۱۱] https://www.nndc.bnl.gov/nudat2/chartNuc.jsp

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

ارزیابی دز رسیده به کودکان ناشی از رادیوداروی پوزیترون زا

محمدی ، نجمه

گروه فیزیک دانشگاه صنعتی سهند، تبریز

چکیده

یکی از روش های تشخیص تومورهای مغزی در کودکان استفاده از روش تصویربرداری PET و رادیو داروی FDG می باشد. به دلیل حساسیت بالای اندام در حال رشد کودکان به پرتو، ارزیابی دز رسیده به کودکان تحت این روش تصویربرداری برای تعیین دقیق خطر ابتلا به سرطان ثانویه ضروری است. در این مطالعه دز جذبی ناشی از رادیو داروی FDG در فانتوم وکسل کودک ۹ ماه، ٤ سال، ۸ سال، ۱۱ سال و ١٤ سال با استفاده از کد MCNPX 2.6 محاسبه شده است. نتایج نشان دادند که میزان دز رسیده به اندام مختلف بسیار وابسته به فاصله اندام های چشمه و هدف از یکدیگر است. به طوری که با افزایش سن کودک، و افزایش فاصله اندام ها از یکدیگر، میزان دز رسیده کاهش می یابد.

واژه های کلیدی:PET، دزسنجی داخلی، محاسبات مونت کارلو، رادیوداروی FDG، فانتوم کودک

Evaluation of radiation dose to pediatric patients from positron-emitting tracer

Mohammadi, Najmeh

Department of Physics, Sahand University of Technology, Tabriz

Abstract

FDG-PET imaging is one of the methods for brain tumors diagnosis in pediatric patients. Evaluation of received dose by children is necessary to accurate determining secondary cancer risk due to the high radiation sensitivity of pediatrics' growing tissues and organs. In this study, the absorbed dose of FDG was calculated in a 9-month-old, 4-year-old, 8-year-old, 11-year-old, and 14-year-old voxel phantoms using MCNPX2.6 code. The results showed that the amount of radiation dose to different organs is very dependent on the distance of the source and target organs from each other. So that in the older children, the distance between the organs increases and the amount of received dose decreases.

***Keywords**: PET, Internal dosimetry, Monte Carlo, FDG, pediatric phantom*

PACS No.87

مقدمه

در روش تصویربرداری تشخیصی هسته ای PET (Positron Emission Therapy) از رادیو داروی نشان دار شده با ایزوتوپ پوزیترون زا استفاده می شود. با اینکه در این روش، بیمار تحت پرتوهای یونیزان دز پایین قرار می گیرد، اما این مسئله برای کودکان باید مورد توجه قرار گیرد [۱و۲]. زیرا در کودکان به دلیل حساسیت اندام های در حال رشد، خطر ابتلا به سرطان ثانویه در

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد

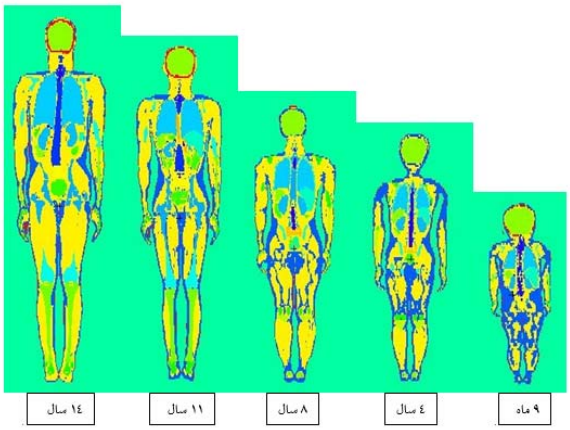
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

اثر پرتو بیشتر از بزرگسالان است. بنابراین محاسبه و ارزیابی دز رسیده به کودکان تحت تصویربرداری تشخیصی PET ، برای تعیین خطر ابتلا به سرطان در نرم افزارهای طراحی درمان ضرروی می باشد. در این پژوهش، دز جذبی اندام مختلف ناشی از رادیو داروی FDG (Fluoro-2-deoxy-2-D-Glucose) که برای تصویربرداری تشخیصی تومورهای مغزی مورد استفاده قرار می گیرد، در کودکان با سنین مختلف بررسی شده است. برای تعیین دقیق دز رسیده به بیمار و ترابرد ذرات، محاسبات مونت کارلو به عنوان ابزاری ارزشمند و دقیق شناخته شده است. در این پژوهش نیز، محاسبات دزسنجی با استفاده از روش مونت کارلو و کد MCNPX2.6 انجام شده است [۳].

مواد و روش ها

فانتوم های محاسباتی

برای انجام محاسبات دقیق دزسنجی لازم است تا بدن و آناتومی بیمار با جزییات کامل مدلسازی شود. دو دسته فانتوم محاسباتی وجود دارد؛ ۱) فانتوم های مبتنی بر معادلات ریاضی، که اندام بدن با استفاده از معادلات ریاضی شبیه سازی شده است. ۲) فانتوم های وکسل که با استفاده از عکس های CT ساخته شده اند. در این مقاله، فانتوم های وکسل کودک UF-Series B مورد استفاده قرار گرفته است. این فانتوم ها شامل سنین ۹ ماهه، ٤ سال، ۸ سال، ۱۱ سال و ١٤ سال می باشد [٤]. در شکل ۱ نمایی از این فانتوم ها نمایش داده شده است.



شکل ۱ : نمایی از فانتوم های وکسل UF-Series B

محاسبات دزسنجی

رادیوایزوتوپ ^{18}F مورد استفاده در رادیوداروی FDG از طریق گسیل پوزیترون با انرژی ۰٫۶۳۳ MeV و با نیمه‌عمر ۱۰۹٫۷۷ دقیقه به ایزوتوپ پایدار ^{18}O واپاشی می‌کند. پس از ورود رادیو دارو به بدن، بر اساس فرمول شیمیایی رادیو دارو، اندام های مختلفی از بدن ممکن است آن را جذب کرده و رادیودارو در آن ها انباشت شود. در این صورت هر اندامی که برداشت رادیودارو دارد مانند یک چشمه پرتوزا عمل می کند. دز جذبی رسیده به هر اندام هدف T را می توان از رابطه زیر به دست آورد:

$$D_T = \sum_S \tilde{A}_S S(T \leftarrow S) \qquad (۱)$$

که در آن، $\tilde{A}_S$ اکتیویته انباشت شده در اندام چشمه S است. مقدار $S(T \leftarrow S)$ که (S-Value) نامیده می شود، مقدار دز میانگین رسیده به اندام هدف T به ازای یک واپاشی در اندام چشمه S می باشد. مقدار اکتیویته انباشت شده در هر اندام به مدل زیستی رادیو دارو بستگی دارد. از اینرو لازم است تا برای هر رادیو دارو اندام هایی که برداشت رادیودارو دارند و مقدار پرتوزایی انباشت شده در آن ها تعیین شود. اندام چشمه و کسر پرتوزایی برداشت شده در مدل زیستی رادیو داروی FDG در جدول ۱ آورده شده است [٥].

جدول ۱: مدل زیستی رادیو داروی FDG

اندام چشمه	کسر اکتیویته برداشت شده
مغز	۰٫۲۱
دیواره قلب	۰٫۱۱
ریه	۰٫۰۷۹
کبد	۰٫۱۳
سایر بافت/اندام	۱٫۷
محتویات مثانه	
بزرگسال، ۱۵ سال، ۱۰ سال	۰٫۲٦
۵ سال	۰٫۲۳
۱ سال	۰٫۱٦

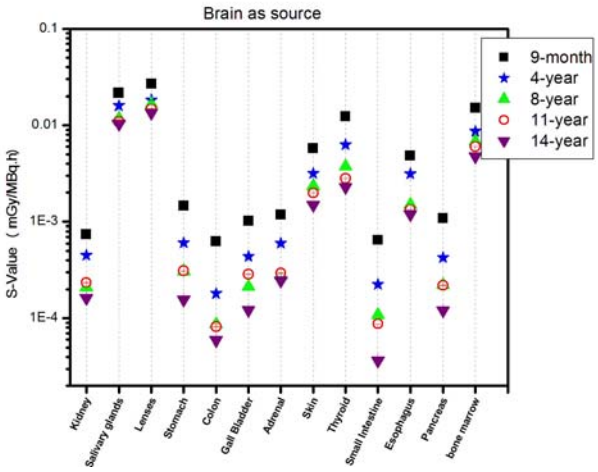
برای محاسبه دز جذبی ناشی از FDG برای ۵ فانتوم کودک، و برای هر عضو چشمه، در مجموع ۳۰ برنامه MCNPX اجرا

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

گردید. دز جذبی با استفاده از تالی F6+ محاسبه و بر حسب mGy/MBq گزارش شده است. لازم به ذکر است برای هر برنامه تعداد 10^8 ذره ردگیری شده و در تمامی محاسبات خطای نسبی داده‌ها کمتر از ۳٪ می باشد.

نتایج

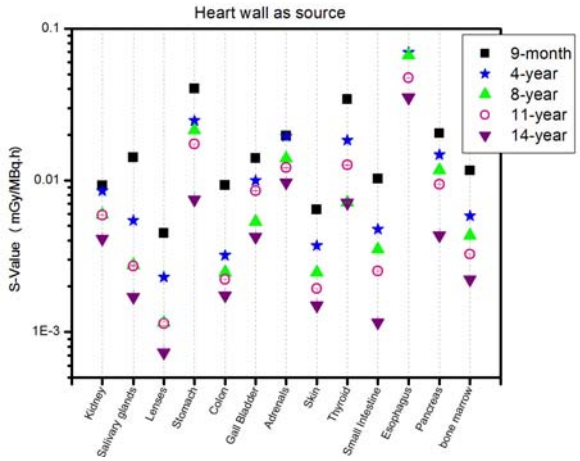
همانطور که در رابطه ۱ بیان شده است، برای محاسبه دز جذبی ابتدا باید مقدار S-Value برای اندام های چشمه محاسبه شود. در شکل ۲ مقدار S-Value برای اندام های هدف مختلف در حالتی که مغز به عنوان اندام چشمه باشد، بر حسب mGy/MBq.h نشان داده شده است.



شکل۲ : مقایسه مقدار S در برخی اندام هدف فانتوم های با سنین مختلف (مغز به عنوان چشمه)

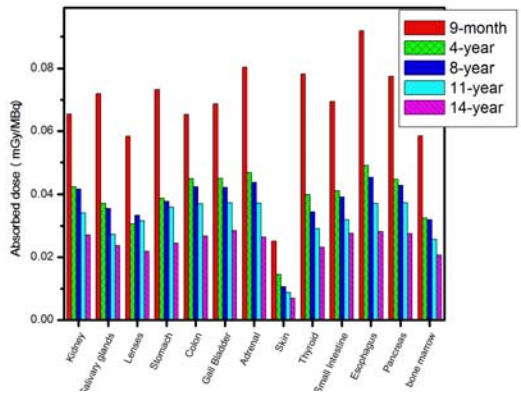
ملاحظه می شود که اندام های هدفی که به اندام چشمه مغز نزدیکتر هستند، مانند غدد بزاقی، لنز چشم ها و تیروئید دز بیشتری دریافت کرده اند. اما با افزایش فاصله اندام هدف از اندام چشمه، بافت بدن بیشتری در مسیر پرتو قرار گرفته و موجب تضعیف و کاهش انرژی آن خواهد شد. در نتیجه به اندامی مانند دیواره روده بزرگ، روده کوچک و لوزوالمعده دز کمتری رسیده است. علاوه بر این مشاهده می شود که دز رسیده به اندام فانتوم ۹ ماه بیشتر از سایر سنین است. زیرا با افزایش سن و قد فانتوم، فاصله بین اندام چشمه مغز و اندام هدف افزایش می یابد. در نتیجه در سنین بالاتر میزان دز رسیده به اندام مختلف کاهش می یابد.

در شکل ۳ مقدار S-Value برای اندام های هدف مختلف در حالتی که دیواره قلب به عنوان اندام چشمه باشد، بر حسب mGy/MBq.h نشان داده شده است.



شکل ۳ : مقایسه مقدار S در برخی اندام هدف فانتوم های با سنین مختلف (دیواره قلب به عنوان چشمه)

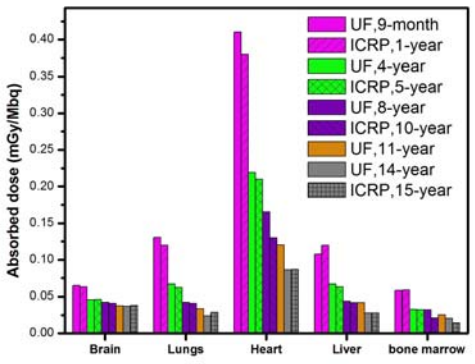
در این شکل نیز اثر فاصله بین اندام هدف و چشمه مشاهده می شود. به طوری که زمانی که دیواره قلب اندام چشمه باشد، دز رسیده به غدد بزاقی برای فانتوم ۹ ماه تا ۳۵ ٪ و برای فانتوم ۱٤ سال تا ۸٤ ٪ نسبت به حالتی که مغز اندام چشمه باشد، کاهش یافته است. اما دز رسیده به دیواره روده بزرگ برای فانتوم ۹ ماه و ۱٤ سال، به ترتیب ۱٤ ٪ و ۲۸٪ نسبت به حالتی که مغز اندام چشمه باشد، افزایش یافته است، زیرا فاصله اندام چشمه دیواره قلب تا این اندام کاهش یافته است.



شکل ٤ : مقایسه دز جذبی در برخی اندام هدف فانتوم های با سنین مختلف

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

در شکل ٤ مقدار دز جذبی رسیده به برخی اندام هدف برای سنین مختلف کودک مقایسه شده است. ملاحظه می شود که برای تمامی اندام ها، میزان دز جذبی در فانتوم ۹ ماه از سایر سنین بیشتر است. به طوری که میزان دز جذبی کلیه در فانتوم ۹ ماه، ٥٤٪، ٥٧٪، ۹۲٪ و ١٤٢٪ به ترتیب نسبت به فانتوم ٤ سال، ۸ سال، ۱۱ سال و ١٤ سال بیشتر است.



شکل ٥ : مقایسه دز جذبی در برخی اندام هدف فانتوم های UF و ICRP با سنین مختلف

در شکل ٥ مقدار دز جذبی محاسبه شده در این پژوهش، با مقادیر گزارش شده توسط نشریه ICRP برای سنین ۱ سال، ٥ سال، ۱۰ سال و ۱٥ سال مقایسه شده است [٤] . ملاحظه می شود که تطابق خوبی بین نتایج حاصل از این پژوهش و گزارش ICRP128 وجود دارد و تاییدی بر نحوه محاسبات انجام شده برای فانتوم UF است.

نتیجه گیری

در این مطالعه دز جذب شده ناشی از رادیوداروی FDG که در تشخیص تومورهای مغزی در روش تصویربرداری PET استفاده می شود، برای فانتوم های کودک با سنین مختلف محاسبه شده است. نتایج نشان می دهند که با افزایش سن کودک، میزان دز جذبی در اندام مختلف، کاهش می یابد. اما به دلیل بالابودن حساسیت اندام در حال رشد کودکان به پرتو، لازم است تا حد امکان میزان دز رسیده به کودکان کاهش یابد. به همین دلیل پیشنهاد می شود که تا حد امکان پرتوزایی رادیو داروی تزریق شده کاهش یابد.

مقایسه مقادیر دز جذبی محاسبه شده برای فانتوم UF و فانتوم ICRP نشان می دهند که میزان دز جذبی به نوع و نژاد فانتوم نیز وابسته است. زیرا آناتومی بدن، قد، حجم و فاصله بین اندام متفاوت است و موجب تفاوت در دز رسیده به اندام مختلف فانتوم با سنین مختلف می شود. بنابراین لازم است تا برای تعیین دقیق خطر ابتلا به سرطان و اثرات ثانویه روش PET اطلاعات کتابخانه ای دقیقی برای سنین و نژاد های مختلف کودکان محاسبه و مورد استفاده کلینیکی قرار گیرد.

مرجع ها

[۱] T. Xie and H. Zaidi; "Evaluation of radiation dose to anthropomorphic paediatric models from positron-emitting labelled tracers" ; *Phys. Med. Biol.* **59** (2014) 1165–1187.

[۲] L. Uslu, J. Donig; "Value of 18F-FDG PET and PET/CT for Evaluation of Pediatric Malignancies" ; *THE JOURNAL OF NUCLEAR MEDICINE*. **56**. No.2 (2015) 274–286.

[۳] D. B. Pelowitz, MCNPX User's Manual *LA-CP-05-0369 Los Alamos National Laboratory*, *Tech*. **Rep. 2.5.0**, Apr. (2005).

[٤] C. Lee, C. Lee and etal; "Whole-body Voxel Phantoms of Pediatric patients--UF Series B"; *Physics in Medicine and Biology*, **51** (2006) 4649-61.

[٥] S. Mattsson, L. Johansson, etal. **;** "Radiation Dose to Patients from Radiopharmaceuticals: a Compendium of Current Information Related to Frequently Used Substances" ; *ICRP **128***, (2014).

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

رشد و مشخصه یابی تک بلور نیم رسانای $Cd_{0/96}Zn_{0/04}Te$ به روش بریجمن

لطفی، سجاد[1]؛ میرزاخانی، حمیدرضا[1]؛ عسگری، اصغر[1]؛ حسین خانی، پرویز[2]

[1]دانشکده فیزیک، دانشگاه تبریز، تبریز

[2]دانشکده فیزیک، دانشگاه جامع امام حسین (ع)، تهران

چکیده

در این پژوهش تک بلور های $Cd_{0/96}Zn_{0/04}Te$ به روش بریجمن و بدون هسته اولیه و با قطر $2cm$ رشد داده شد. مطالعات انجام شده با پراش پرتو X نشان می دهد که بلور های رشد یافته تک فازند و ترجیحا به موازات محور بلور (111) قرار دارند .مقاومت ویژه به وسیله پروب چهار نقطه ای اندازه گیری شد که نشان می دهد مقاومت ویژه تک بلور ها از مرتبه $10^6\ \Omega.cm$ است و رسانندگی الکتریکی بلور های رشد یافته به روش بریجمن نوع P است.

واژه های کلیدی: تک بلور، نیم رسانا، بریجمن، رشد بلور، کادمیوم زینک تلورایدِ.

Growth and characterization of single crystal semiconducting $Cd_{0.96}Zn_{0.04}Te$ by Bridgman method

Lotfi, Sajad[1]; Mirzakhani, Hamidreza[1]; Asgari, Asghar[1]; Hossein Khani, Parviz[2]

[1]Department of Physics, University of Tabriz, Tabriz

[2] Department of Physics, Imam Hossein University, Tehran

Abstract

In this research, Single crystals of $Cd_{0/96}Zn_{0/04}Te$ (CZT) with 2cm in diameter were grown by seedless Bridgman method. Identification and investigation of their properties was performed using various structural analyzes. XRD study show that the grown crystals are single phase, which preferentially have been grown along [111] crystal axis. The electrical resistivity measured by Four Point Probe show that the resistivity is in order of $10^6\Omega.cm$ and the electrical conductivity of crystals grown by Bridgman method is p-type.

***Keywords**: Single crystal, Semiconductor, Bridgman method, Crystal growth, CdZnTe.*

PACS No. 61.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد

http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مقدمه

بلور شکلی از ماده جامد است که در آن مولکول ها اتم ها و یون ها با آرایش منظم در کنار یکدیگر قرار دارد. نظم بیرونی بلورها بر اثر نظم درونی آنهاست.به دلیل همین نظم سطح های خارجی بلورها صاف و هموار هستند. بلورها کاربردهای زیادی در زمینه های اپتیکی، هسته ای، الکترونیکی و غیره دارند، و همه ی این کاربردها مربوط به خواص فیزیکی آن ها است، که در اثر نظم در ساختارشان ایجاد شده است. در دو قرن اخیر تحقیقات مهمی درباره ی رشد بلورهای مختلف به عمل آمده است. امروزه روش های مختلفی برای رشد بلور معرفی شده است، که امکان ساخت قطعات هسته ای، اپتیکی، الکترونیکی و ... را به همراه داشته است. ما در این تحقیق برای رشد بلور از روش بریجمن استفاده کرده ایم. در این روش ماده ای قرار است رشد داده شود، داخل بوته ریخته می شود، سپس بوته از میان کوره ای که دارای گرادیان درجه حرارتی معینی می باشد، با سرعت قابل تنظیم و یکنواخت عبور داده می شود. بین نیمرساناهای با گاف انرژی پهن، ترکیب $Cd_{1-x}Zn_xTe$ به خاطر کاربردهای آن در زمینه ی ساخت دیودهای نور گسیل، لیزرهای نیمرسانا، باتریهای خورشیدی و آشکارسازها بیشترین توجه را به خود جلب کرده است[1]. از آنجا که خواص اپتیکی، الکتریکی، گرمایی و ساختاری ترکیب $Cd_{1-x}Zn_xTe$ به ازای $X\cong 0/04$ بهینه است[2]، لذا در این تحقیق تک بلور $Cd_{0/96}Zn_{0/04}Te$ به روش بریجمن مطالعه شده است.

لذا ما در این تحقیق ابتدا نیمرسانای کادمیوم زینک تلوراید را با روش بریجمن رشد داده ایم، سپس ویژگی ساختاری کادمیوم زینک تلوراید رشد داده شده به روش بریجمن به وسیله ی ابزار های پراش اشعه ی ایکس، طیف سنجی تفکیک انرژی (EDS) و میکروسکوپ الکترونی عبوری (TEM) مطالعه شده است.

تهیه نمونه ها

برای تولید کادمیوم زینک تلوراید با استفاده از روش بریجمن عناصر اولیه با جرم های مختلف داخل کپسول کوارتز اضافه گردید. جرم عناصر به کار رفته در هر نوبت در جدول 1 ارائه شده است.

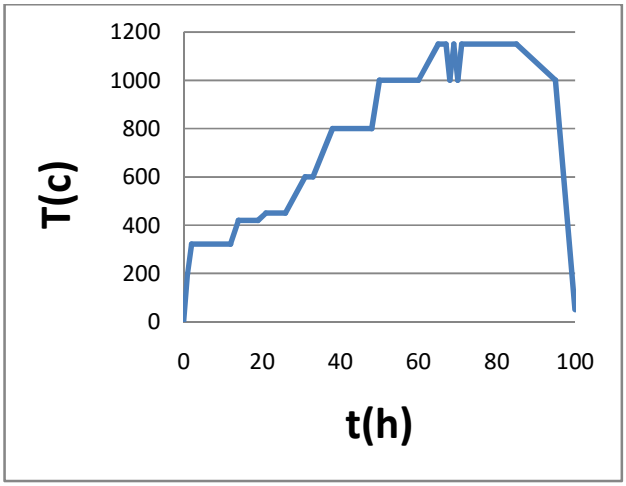
جدول1–جرم مواد اولیه نمونه های رشد یافته به روش بریجمن

نمونه	$M_{Cd}(g)$	$M_{Zn}(g)$	$M_{Te}(g)$	$M_{tot}(g)$
1CZT	4/55	0/11	5/44	10/1
2CZT	1/35	0/03	1/63	3/01
3CZT	2/72	0/72	3/26	6/7
4CZT	4/55	0/11	5/44	10/1
5CZT	4/05	0/99	4/89	9/93

پس از ریختن مواد در داخل کپسول کوارتز نیاز بود تا فشار کپسول کنترل شود، برای این کار از دو پمپ روتاری و دیفیوژن به منظور کاهش فشار داخل کپسول استفاده شد. عملیات گرمادهی درون کوره ی عمودی که دمای نقطه مرکزی آن با دقت 1 درجه سیلیوس قابل تنظیم است انجام شد. تهیه ی بلور کادمیوم زینک تلوراید شامل دو مرحله ی سنتز و رشد است. روند کار به این ترتیب می باشد که در مرحله ی اول به مواد اولیه طی زمان مشخصی که در اینجا 8 ساعت بود، حرارت داده می شود تا کاملا ذوب شوند. مرحله ی بعد، مرحله ی رشد بلور است که برنامه ی زمان دهی آن توضیح داده خواهد شد. هنگامی که بلور شکل گرفت نباید آن را به طور ناگهانی سرد کرد، زیرا موجب تغییر شکل در بلور می شود. این مرحله آنیلینگ نام دارد که به معنی سرد کردن تدریجی است. این مرحله بیش از 20 ساعت زمان احتیاج دارد تا دمای بلور رشد یافته به دمای محیط برسد.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

در شکل 1 کاملترین برنامه زمان دهی که برای رشد نمونه بکارگرفته شد نشان داده شده است.



شکل1- برنامه زمان دهی جهت رشد بلورCdZnTe.

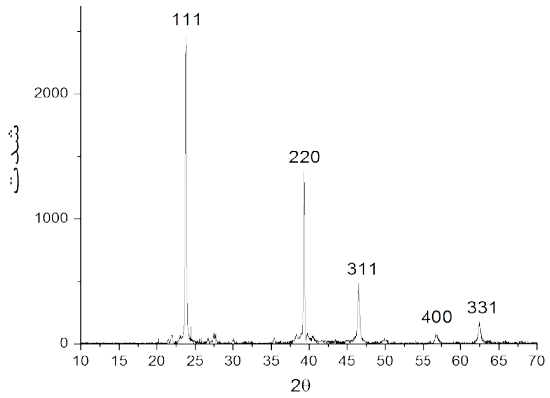
توقف در نزدیکی دمای ذوب هر یک از عناصر فرصت انجام واکنش ها را می دهد. برای حذف گازهای باقیمانده در نمونه همچنین افزایش کیفیت ، دما چندین بار بین 1150 درجه و 1000 درجه تغییر داده شد که به این روش، روش نوسان دمای مذاب گفته می شود. در شکل 2 تصویری از نمونه بلور رشد داده شده دیده می شود.



شکل2-نمونه بلور رشد داده شده به روش بریجمن.

بحث و نتایج

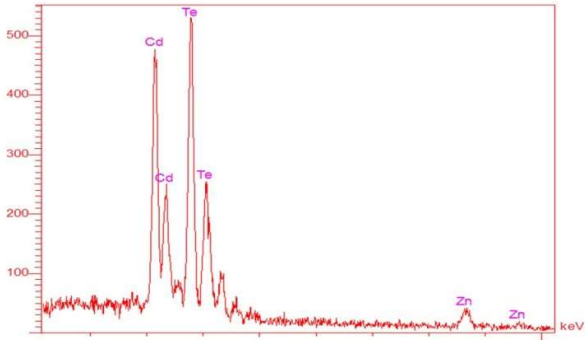
برای اطمینان از تشکیل فاز بلوری کادمیوم زینک تلوراید و عدم وجود ناخالصی از نمونه الگوی پراش اشعه ی ایکس گرفته شد. شکل 3 الگوی پراش پرتوی ایکس نمونه ($Cd_{0.96}Zn_{0.04}Te$) را نشان می‌دهد. همان‌طور که از شکل هم به وضوح دیده می‌شود هیچ گونه قله‌ی اضافی که نشان‌دهنده فاز ناخالصی درنمونه‌ها باشد درالگوی پراش مشاهده نمی‌شود.



شکل3- طیف پراش پرتو ایکس نمونه $Cd_{0.96}Zn_{0.04}Te$

برای بررسی کمی در صد عناصر موجود در نمونه ما از آزمون طیف سنجی پراکندگی پرتو ایکس (EDS) استفاده کردیم[3]. همانطور که در شکل 4 دیده می شود نمونه ما از سه عنصر کادمیوم، روی وتلوریم تشکیل شده و نسبت جرمی روی به کادمیوم که ما در نظرداشتیم 4 به 96 بود که در شکل نیز این درصد جرمی در حدود 4 به 96 دیده می شود که نشان دهنده صحیح بودن روند آزمایش و درصد جرمی عناصر موجود در نمونه می باشد.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

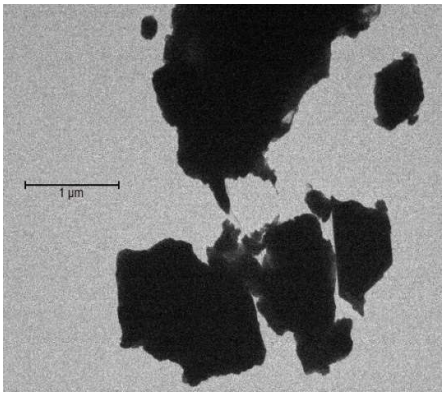


شکل4–طیف (EDS)برای نمونه بدست آمده.

جدول 2–نسبت اتمی و جرمی عناصر بدست آمده از آزمون (EDS)

Elt	W%	A%
Zn	1.15	55.05
Cd	44.37	41.85
Te	54.48	3.10

به منظور بررسی و ارزیابی شکل و تخمین اندازه ی ذرات از میکروسکوپ الکترونی عبوری (TEM) استفاده شد. شکل 5 تصاویر (TEM) بلور کادمیوم زینک تلوراید را نشان می دهد.



شکل5–تصویر میکروسکوپ الکترونی عبوری.

همچنین به منظور به دست آوردن مقاومت ویژه الکتریکی بلور کادمیوم زینک تلوراید از دستگاه پروب چهار نقطه ای استفاده شد. همانطور که در شکل 6 مشاهده می شود مقاومت ویژه برای نمونه مورد نظر $2.34\times10^{6}\Omega.cm$ به دست آمد. نمونه بدست آمده دارای رسانندگی از نوع p بود که نتایج تجربی نشان داده است این امر می تواند ناشی از وجود Te اضافی در مواد اولیه باشد[4].



شکل6–نتیجه بدست آمده برای مقاومت ویژه نمونه.

نتیجه گیری

بلورهای $Cd_{0/96}Zn_{0/04}Te$ رشد یافته به روش بریجمن، تک فاز و دارای خلوص بالایی هستند. در رشد بلور ها از هسته اولیه استفاده نمی شد. بلورها دارای مقاومت نسبتا بالا $(10^{6}\Omega.cm)$ هستند و بیشتر جهت گیری بلور ها در جهت (111) می باشد. بنابراین می توان نتیجه گرفت روش بریجمن برای ساخت تک بلورها با مقاومت بالا روش خوبی می باشد.

مرجع ها

[1] Zhu, S.-f., et al., Modified growth of $Cd_{1-x}Zn_xTe$ single crystals. Journal of Crystal Growth, 2000. **208**(1): p. 264-268.

[2] Carcelén, V., et al., Influence of thermal environments on the growth of bulk cadmium zinc telluride (CZT) single crystals. Journal of Crystal Growth, 2009. **311**(5): p. 1264-1267.

[3] N. B. Chaure, S. Chaure, and R. K. Pandey, "$Cd_{1-x}Zn_xTe$ thin films formed by non-aqueous electrochemical route," *Electrochimica Acta*, vol. 54, no. 2, pp. 296-304, 2008/12/30/ 2008

[4] A. Muranevich, M. Roitberg, and E. Finkman, "Growth of CdTe single crystals," *Journal of Crystal Growth*, vol. 64, no. 2, pp. 285-290, 1983/11/01/ 1983.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

لوله های آوازخوان: بررسی عوامل موثر بر صوت ایجاد شده در لوله های موجدار

فرشی عالی، یلدا[1]؛ ابراهیمی، عقیله سادات[2]

[1] دبیرستان فرزانگان یک تهران، تهران

[2] گروه فیزیک، دانشگاه کاشان، کاشان

چکیده

آوالوله یک لوله موجدار است که برخی از ویژگی های فیزیک تشدید، امواج و دینامیک سیالات را نشان می دهد. آوالوله به هنگام عبور جریان هوا از سطح داخلی اش، هوا را دارای یک فرکانس مشخص می کند. در صورتیکه این فرکانس با یکی از فرکانس های تشدید لوله برابر شود، باعث تشدید صوت می شود. در این تحقیق تاثیر برخی از عوامل موثر روی صوت ایجاد شده، که شامل طول، قطر و سرعت زاویه ای لوله می شوند، را بررسی کرده ایم و مقایسه ای از آزمایشات انجام شده برای درک تاثیر هر یک از عوامل انجام داده ایم. طبق نتایج گزارش شده، با افزایش سرعت زاویه ای لوله، فرکانس تشدید افزایش میابد. کاهش طول لوله موجب افزایش فرکانس‌های تشدید لوله می‌شود و همچنین با افزایش قطر، فرکانس های تشدید کاهش میابند که با تئوری گزارش شده همخوانی دارد.

Singing tubes: Investigating the factors affecting the sound created in corrugated tubes

Farshi Aali, Yalda[1]; Ebrahimi, Aghileh Sadat[2]

[1] *Farzanegan 1 Highschool, Tehran*

[2] *Department of Physics, Kashan University, Kashan*

Abstract

Sound tube is a corrugated tube that illustrates some basic features of the physics of resonance, waves and fluid dynamics. Sound tube is a flexible tube and it has corrugations. When the air flows through its inner surface, sound produces with a certain frequency. If this frequency equals to one of the resonance frequencies of the tube, the tube will amplify the sound. In this study, we have been investigating the effect of some factors on sound, including length, diameter and angular velocity of the tube and we have done a comparison of experiments to understand the impact of each factor. According to the reported results, with increasing angular velocity of the tube, the resonance frequency increases. Decreasing the tube length increases the tube resonance frequency. Also, as the diameter increases, the resonance frequency decreases, which is consistent with the reported theory.

PACS No. 6

مقدمه

آوالوله[1] یک لوله موجدار پلاستیکی و انعطاف پذیر است که هنگامیکه در هوا حول یک انتهایش، در یک حرکت دایره ای چرخانده میشود، مجموعه ای از فرکانس ها و صدایی سوت مانند و مشابه به فلوت را تولید می‌کند.

آوالوله ها در دهه 70 میلادی وقتی که اسباب بازی به نام هیومر برای اولین بار، به بازار عرضه شد محبوب شدند[1].

هیومر یک لوله موجدار پلاستیکی با حدود یک متر طول بود که هنگام چرخانده شدن مجموعه ای از صداها را تولید می‌کرد.

مارک سیلورمن در سال 1989 آکوستیک این لوله ها را مورد بررسی قرار داد[2]. همچنین کرافورد آکوستیک این لوله ها را به

[1] sound tube

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

طرز متفاوتی بررسی کرد. او لوله را به خودرو متصل کرد و فرکانس های متفاوت را با تغییر سرعت چرخش خودرو تولید کرد[3]. سیلورمن، لوله را به یک چرخ آزاد و قابل چرخش در راستای عمودی متصل کرد و از یک موتور برای چرخاندن چرخ و رئوستات برای تغییر سرعت زاویه ای چرخ استفاده کرد و فرکانس‌ها را اندازه گیری کرد و آنالیزها را با استفاده از آنالیز فوریه انجام داد. سیلورمن فرکانس های لوله در حال چرخش را با فرکانس های لوله ثابت که هوا در آن با استفاده از یک دمنده جریان میافت، را مقایسه کرد و برای این کار، اختلاف فشار هوا در دو انتهای لوله و سرعت جریان هوا را برای هر دو حالت با استفاده از اصل برنولی محاسبه کرد.

هر دو پژوهشگر به مشاهدات زیر دست یافتند: با افزایش سرعت چرخش لوله، ذرات بیشتری تشدید می‌شوند و فرکانس تولید شده، افزایش پیدا می‌کند. طول لوله فرکانس های آن را تعیین می‌کند. با دمیدن داخل لوله صاف یا چرخاندن آن، هیچ صوتی تولید نمی-شود. همچنین سرعت هوا، اندازه قطر لوله و فاصله بین موج‌های لوله بر فرکانس تولید شده تاثیر می‌گذارند. در این تحقیق با طراحی وسیله‌ای شامل یک موتور که آوالوله به صورت افقی بر روی آن سوار شده است، به بررسی فرکانس امواج صوتی تولید شده توسط آوالوله پرداخته‌ایم که سرعت دورانی آن توسط یک مقاومت، قابل کنترل بوده است. همچنین به بررسی تاثیر طول و قطر لوله بر فرکانس تولیدشده پرداخته‌ایم.

آکوستیک لوله موجدار

برای یک لوله ایده آل دو سر باز به طول L مدهای تشدید با استفاده از فرمول زیر محاسبه می‌شوند[4]:

$$f_n = \frac{nv_s}{2L} \qquad n=1\ 2\ 3... \qquad (1)$$

که v_S سرعت صوت در هوا است. چون هوا در داخل و خارج از لوله دو سر باز حرکت می‌کند، باید طول آکوستیک L' در فرمول (1) نقش داشته باشد که کمی بزرگتر از طول فیزیکی لوله است. طول آکوستیک به شعاع بستگی دارد و برای لوله ای با دو انتهای باز و با شعاع r به صورت زیر محاسبه می‌شود[5]:

$$L' = L + 1.22r \qquad (2)$$

اختلاف فشار بین دو انتهای لوله، یک جریان هوای محوری با سرعت v را در طول لوله ایجاد می‌کند. با فرض اینکه جریان هوا در طول لوله، تراکم ناپذیر و صاف باشد، با استفاده از اصل برنولی داریم[2]:

$$P(s) + \frac{1}{2}\rho\,[v(s)^2 + \omega^2 s^2] = const. \qquad (3)$$

که در آن $P(s)$ فشار، $v(s)$ سرعت هوای محوری که داخل لوله جریان دارد، و حاصل $\omega.s$ برابر با سرعت هوای مماسی لوله است.

با همان فرضیات، سرعت هوای محوری که در طول لوله جریان دارد، در تمام نقاط لوله یکنواخت و ثابت است. بنابر این، با محاسبه اختلاف فشار بین دو انتهای لوله داریم[2]:

$$P_0 - P_L = \frac{1}{2}\rho\omega^2 L^2 \qquad (4)$$

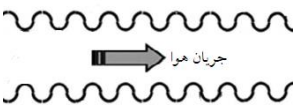
برای توضیح دادن نقش موج های لوله از رابطه زیر استفاده میکنیم:

$$f = \frac{V}{\lambda} \qquad (5)$$

و با استفاده از آن رابطه زیر استخراج می‌شود[2]:

$$f_n = \alpha_1 \frac{v_n}{d} \qquad (6)$$

که در آن f_n برابر با فرکانس تشدید لوله در مد n ، d فاصله بین موج های لوله، v_n سرعت هوای محوری مد n که در داخل لوله جریان دارد، α_1 یک ضریب ثابت است که مربوط به تاثیر اصطکاک بر جریان هوا است.



شکل 1: هوایی که در داخل لوله جریان دارد، فرکانسی برابر با f_n دارد.

معادله 4 در واقع بیان میکند که هوایی که در داخل لوله حرکت می‌کند، با گذشتن از موج های لوله، دارای یک فرکانس مشخص می‌شود که نسبت معکوسی با فاصله بین موج های لوله دارد. هنگامیکه این فرکانس با یکی از فرکانس های تشدید لوله برابر میشود، صدا تشدید میشود.

با استفاده از معادله (3) سرعت هوای یکسان محوری در طول لوله، با سرعت مماسی در انتهای در حال چرخش لوله یکسان است.[2]:

$$v_n = \omega_n \qquad (7)$$

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

اما جریان کاملا بدون اصطکاک نیست، بنابراین ما فرض می کنیم که سرعت هوای محوری با ضریب ثابت α_2 ، با سرعت هوای مماسی، متناسب است. [2]:

$$v_n = \alpha_2 \omega_n L \quad (8)$$

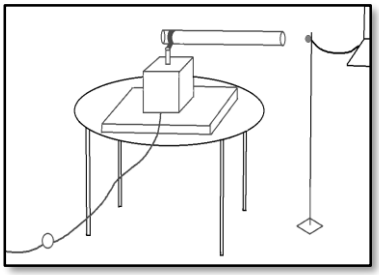
اکنون با استفاده از معادله 7 و 8 داریم[2]:

$$f_n = \frac{\alpha_1 \alpha_2 \omega_n L}{d} \quad (9)$$

که بیان می کند که فرکانس های تشـــدید لوله در حال چرخش، نسبتی مستقیم با سرعت زاویه ای لوله و نسبتی معکوس با فاصله بین موج های لوله دارند.

آزمایشات

دستگاه طراحی شده برای آزمایشات (شکل 2) شامل یک موتور که لوله به وسیله یک بست به آن متصل شده است و یک مقاومت که سرعت چرخش موتور را کنترل می‌کند، می‌باشد. برای اینکه نویز و صـدای موتور حذف شـود، از عایق بندی چوب و پشـم شـیشـه استفاده کرده‌ایم. همچنین از میکروفون و نرم افزار اودا سیتی[۲] برای ضبط داده‌ها و تحلیل فرکانس‌ها استفاده کرده‌ایم.



شکل 2: بخشی از ست آپ (موتور در داخل جعبه عایق بندی شده و لوله با یک بست به رابط موتور در حال چرخش متصل شده است. در سمت راست تصویر، میکروفون به یک میله متصل شده است تا در راستای لوله باشد. در سمت چپ تصویر، قطعه مقاومت دیده می‌شود که به منبع تغذیه متصل میباشد.)

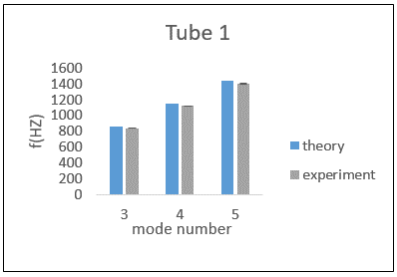
در 3 آزمایش انجام شـــده با لوله های متفاوت، که طول و شـــعاع آن‌ها در جداول 1 و 2 و 3 ذکر شده است، سرعت دورانی موتور را با مقاومت، تغییر دادیم و شـــدت و فرکانس تشـــدید لوله را با اســـتفاده از نرم‌افزار اوداســـیتی اندازه‌گیری کردیم. دومین ســـتون جداول 1 و 2 و 3، فرکانس های تئوری تشـدید لوله برای مدهای اول تا پنجم که با استفاده از رابطه 1 محاسبه شده است، را نشان می‌دهد. خطای آزمایش‌ها با گزارش کردن 6 فرکانس و محاســـبه انحراف معیار استخراج شده است. همچنین، شکل‌های 3 و 4 و 5، مقایسه‌ای از ستون‌های اول و دوم جداول را نشان می‌دهند.

جدول1 : آزمایشات روی لوله به طول 0.58 متر و شعاع 0.01 متر

مد	فرکانس تئوری تشدید	فرکانس تشدید (آزمایش)	فرکانس چرخش لوله
1	288.75	-	-
2	577.50	-	-
3	864.25	839.5 ± 2.16	2.46 ± 0.027
4	1155.01	1120.6 ± 2.33	3.40 ± 0.229
5	1443.75	1398 ± 4.60	3.70 ± 0.099

در این آزمایش، تشخیص اولین و دومین مد لوله، دشوار بود و همچنین وضعیت مشابهی در مراجع [1] و [2] و [6] گزارش شده است.

طبق ستون سوم جدول 1، فرکانس تشدید لوله با افزایش فرکانس چرخش لوله، افزایش میابد. که طبق رابطه 9 نیز، با افزایش ω_n، f_n *افزایش میابد و* نسبت مستقیمی بین سرعت زاویه‌ای و فرکانس تشدید لوله وجود دارد.



شکل 3: نمودار مقایسه فرکانس های تئوری و آزمایش برای مدهای 3 و 4 و 5 آزمایش اول

آزمایش دوم برای مقایسه نتایج آزمایشات برای لوله با طول متفاوت طراحی شده است.

جدول2 : آزمایشات روی لوله به طول 0.38 متر و شعاع 0.01 متر

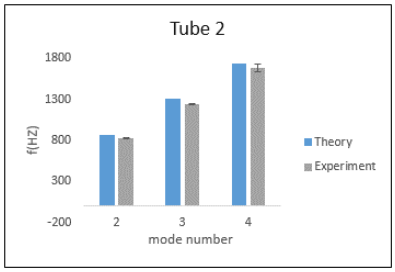
مد	فرکانس تئوری تشدید	فرکانس تشدید (آزمایش)	فرکانس چرخش لوله
1	436.002		-
2	872.004	824.42 ± 6.399	3.47 ± 0.109
3	1308.006	1245.83 ± 9.516	5.07 ± 0.037
4	1744.008	1681.16 ± 48.532	6.90 ± 0.179
5	2180.010		

با مقایسه جداول 1 و 2، فرکانس‌های تشدید لوله افزایش یافته است که این نتیجه با رابطه 1 نیز سازگاری دارد و به دلیل نسبت

[۲] Audacity

این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد :
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

معکوس f_n با L، با کاهش طول لوله، فرکانس تشدید افزایش پیدا می‌کند.



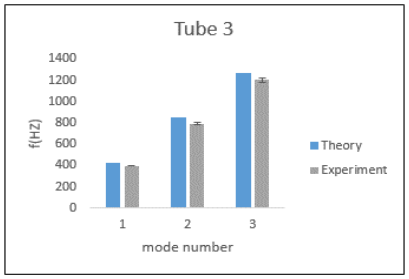
شکل 4: نمودار مقایسه فرکانس های تئوری و آزمایش برای مدهای 2 و 3 و 4 آزمایش دوم

آزمایش سوم به منظور بررسی تاثیر قطر انجام شده است.

جدول3 : آزمایشات روی لوله به طول 0.38 متر و شعاع 0.019 متر

مد	فرکانس تئوری تشدید	فرکانس تشدید (آزمایش)	فرکانس چرخش لوله
1	424.128	398.83 ± 3.92	2.14 ± 0.032
2	848.256	794.66 ± 7.229	4.03 ± 0.075
3	1272.384	1204 ± 20.314	5.46 ± 0.149
4	1696.512		
5	2120.640		

با مقایسه جداول 2 و 3، فرکانس‌های تشدید لوله مقداری کاهش یافته‌اند. طبق رابطه 2 با افزایش شعاع لوله (r)، *طول آکوستیک لوله* (L') *افزایش میابد. در نتیجه با توجه به رابطه 1 به دلیل نسبت معکوس طول لوله و فرکانس تشدید (f_n)، فرکانس تشدید لوله کاهش میابد.*



شکل 5: نمودار مقایسه فرکانس های تئوری و آزمایش برای مدهای 1 و 2 و 3 آزمایش سوم

نتیجه گیری

آوالوله یک لوله موجدار است که هنگام چرخانده شدن حول یک انتهایش، طبق معادله 4 ، به دلیل اختلاف فشاری که بین دو انتهای آن وجود دارد، جریان هوایی از انتهای ثابت لوله به سمت انتهای در حال چرخش آن به وجود می آید. با گذر جریان هوا از داخل آوالوله، به دلیل موجدار بودن سطح داخلی آن، هوا دارای یک فرکانس مشخص می شود. در صورتیکه این فرکانس با یکی از فرکانس‌های تشدید لوله که از فرمول 1 به دست می آید، برابر شود، صدا تشدید می شود.

عوامل موثر روی صوت ایجاد شده، شامل سرعت زاویه ای لوله، طول لوله و فاصله بین موج های لوله و همچنین شعاع لوله که طبق رابطه 2 و 8 داده شده، میشوند. در این تحقیق، تاثیر سرعت زاویه ای لوله بر فرکانس تشدید در سه نوع آزمایش با سه لوله متفاوت بررسی شد. همچنین در آزمایشات دوم و سوم تاثیر طول و قطر لوله را بررسی کردیم.

در آزمایشات انجام شده، ست آپ طراحی شده برای چرخش لوله، شامل یک موتور و مقاومت برای تغییر سرعت چرخش لوله بود. همچنین موتور برای افزایش دقت آزمایش و کاهش نویز، عایق بندی شده بود.

طبق نتایج گزارش شده در جدول های 1 و 2 و 3 ، با افزایش سرعت زاویه ای لوله، فرکانس تشدید افزایش میابد. کاهش طول لوله موجب افزایش فرکانس‌های تشدید لوله می‌شود که در جدول 2 نمایش داده شده است و همچنین با افزایش قطر، فرکانس های تشدید کاهش میابند که در جدول 3 گزارش شده است. نتایج آزمایشات با روابط 1 و 9 همخوانی دارند

سپاسگزاری

از راهنمایی ها و پشتیبانی های آقای غلامرضا فرشی عالی و خانم سوسن ایرانشهر صمیمانه تشکر می‌کنم.

مرجع‌ها

[1] Serafin, S. and Kojs, J., 2003, September. The voice of the dragon: a physical model of a rotating corrugated tube. In *Proc. DAFX*.

[2] Silverman, M.P. and Cushman, G.M., 1989. Voice of the dragon: the rotating corrugated resonator. *European Journal of Physics*, *10*(4), p.298

[3] Crawford, F.S., 1974. Singing corrugated pipes. *American Journal of Physics*, *42*(4), pp.278-288.

[4] Halliday, Resnick, Walker., 2001. "Fundamentals of Physics 3," fluids, waves, heat

[5] Beranek, L.L., 1954. "Acoustics," pp. 91-115. McGraw-Hill, New York; reprinted.

[6] Amorim, M.E., Sousa, T.D., Carvalho, P.S. and Sousa, A.S., 2011. A simple experiment to explore standing waves in a flexible corrugated sound tube. *The Physics Teacher*, *49*(6), pp.360-362.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

نوسانات مگنتوهیدرودینامیک تشدید شده در پلاسمای بتای بزرگ در حضور جریان

شاه‌حسینی، نجیمه؛ بهاری، کرم[1]

[1]گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه رازی، کرمانشاه، ایران

چکیده

حرکت پلاسما در لایه‌ی اتلافی یک جریان پلاسمای بتای بزرگ مطالعه شده است. به منظور مطالعه‌ی حرکت پلاسما معادلات خطی شده مگنتوهیدرودینامیک استفاده شده‌اند. با استفاده از روش اختلال ارائه شده توسط رادرمن(2009) جواب معادلات حرکت تعیین شده‌اند. اثر جریان پلاسما تغییر فاصله‌ی بین نقاط تشدید آرام و آلفن است، همچنین این جریان باعث می‌شود که ضخامت لایه تشدیدی ترکیبی تغییر کند. این تغییر به عدد موج و جهت جریان پلاسما بستگی دارد.

واژه های کلیدی: *مگنتوهیدرودینامیک، پلاسما، تاج خورشیدی، نوسانات، امواج، پایداری*

Resonant Magnetohydrodynamic Oscillations in Flowing High Beta Plasmas

K. Bahari, N. Shahhosaini[1]

[1] Physics Department, Faculty of Science, Razi University, Kermanshah, Iran

Abstract

The plasma motion in the dissipative layer of a flowing high beta plasma is studied. The linearized Magnetohydrodynamic (MHD) equations are used to study the plasma motion. Using the perturbation method presented by Ruderman (2009) the solution of equations of motion are determined. The effect of the plasma flow is to change the distance between the slow and Alfv´enic resonant points and also the flow causes the plasma to oscillate as it has a different thickness of the dissipative layer.

***Keywords**: magnetohydrodynamics(MHD), plasmas, sun: corona, sun: oscillations, waves, stability*

مقدمه

در طبیعت و آزمایشگاه امواج مگنتوهیدرودینامیک(MHD) در محیط‌های غیریکنواخت منتشر می‌شوند. هنگامی‌که یک موج MHD گلوبال در یک پلاسمای ناهمگن با عدد رینولدز بزرگ $R \gg 1$، که اتلاف در آن بسیار ضعیف است منتشر شود ممکن است به طور تشدیدی با هر یک از امواج MHD آلفن یا آرام در نقطه‌ی تشدید، جاییکه سرعت فاز موج گلوبال با سرعت فاز هر یک از امواج آلفن یا آرام منطبق است، برهم‌کنش کند. در نتیجه‌ی این برهم‌کنش یک لایه‌ی اتلافی با ضخامتی از مرتبه‌ی $R^{-1/3}$ در نقطه‌ی تشدید شکل می‌گیرد. در این لایه‌ی اتلافی انرژی موج گلوبال به امواج لوکال منتقل و باعث رشد آنها می‌شود. این فرآیند جذب تشدید نامیده می‌شود. جذب تشدید باعث اتلاف شدید موج گلوبال و در نتیجه‌ی آن گرمایش پلاسما و همچنین رشد بی-حدومرز دامنه‌ی نوسان امواج لوکال در نقاط تشدید می‌شود که این دامنه‌ی نوسان از مرتبه‌ی $R^{1/3}$ است. اما در واقع مکانیزم‌های میرایی از قبیل رسانش گرمایی، ویسکوزیته یا مقاومت این رشد بی حدومرز را متوقف می‌کنند.

پارامتر بتای پلاسما،β ، بصورت نسبت فشارهای مشخصه‌ی پلاسما و فشار مغناطیسی تعریف می‌شود. همانطور که در جدول(1–1) کتاب اشواندن(2005) بیان شده است، در لوله‌های شار تاجی داغ پارامتر بتای پلاسما می‌تواند به 0.2 برسد. همچنین توسط وانگ و همکاران(2007) بیان شده است که در لوله‌های داغ منطقه فعال پارامتر بتا می‌تواند به 0.9 برسد. بنابراین جو فوقانی خورشید یک محیط با بتای کوچک، $\beta \lesssim 1$ ، است. در چنین

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

محیطی نقاط تشدید مربوط به تشدیدهای آلفن و آرام به خوبی از هم جدا هستند، طوری که حرکت موج در لایه‌های اتلافی آلفن و آرام به ترتیب در نقاط تشدید آلفن و آرام، می تواند به طور جداگانه مورد مطالعه قرار گیرد. اما فضای داخلی خورشید یک محیط با بتای بزرگ است. گوت و مکینتایر(1998) و رادرمن(2009) اظهار داشتند در تکوکلاین که نواحی همرفت و تابشی خورشید را از هم جدا می‌کند پارامتر بتا بسیار بزرگتر از یک است و هنگامیکه پارامتر بتای پلاسما بزرگ باشد، $\beta \gtrsim R^{1/3}$ ، نقاط تشدید بقدری نزدیک هستند که دو لایه‌ی اتلافی همپوشانی دارند. در این حالت، به جای دو لایه اتلافی، یک لایه اتلافی مختلط آلفن–آرام وجود دارد.

در این مقاله پلاسمای با بتای بزرگ را در نظر گرفته‌ایم و حرکت موج در چنین لایه‌ی اتلافی مختلطی مورد مطالعه قرار داده‌ایم. رادرمن(2009) نشان داد که حرکت پلاسما در لایه‌ی اتلافی پلاسمای با پارامتر بتای بزرگ می‌تواند به عنوان برهم‌نهی از دو موج ، یکی مربوط به موج آرام و دیگری مربوط به موج آلفن فرض شود. در این مقاله مدل درنظرگرفته شده توسط رادرمن(2009) را به مدلی که جریان پلاسما را شامل می‌شود تعمیم می‌دهیم و بررسی می‌کنیم که چطور جریان می‌تواند بر حرکت پلاسما در یک لایه‌ی اتلافی مختلط تاثیر بگذارد.

مدل لوله

نوسانات یک محیط ایستا در نظرگرفته شده است. مختصات دکارتی برای مطالعه‌ی حرکت موج مناسب هستند. کمیت‌های تعادلی تنها وابسته به مختصات x هستند. فشار گاز تعادلی، چگالی پلاسما، سرعت جریان و میدان مغناطیسی تعادلی را به ترتیب با $p_0(x)$ ، $\rho_0(x)$ ، $\boldsymbol{U}_0(x)$ و $\boldsymbol{B}_0(x)$ نشان می‌دهیم. میدان مغناطیسی در صفحه‌ی xy فرض شده است و زاویه‌ی بین محور z و $\boldsymbol{B}_0(x)$، $\alpha = const$ می‌باشد. اگرچه صرف‌نظر از جهت میدان مغناطیسی می‌توان جریان پلاسما را در هر جهتی درنظر گرفت اما برای سادگی تنها میدان هم‌راستا با جریان پلاسما را درنظر می‌گیریم، از این رو میدان مغناطیسی و جریان پلاسما در یک جهت قرار گرفته و توسط روابط زیر تعریف می‌شوند

$$\boldsymbol{B}_0(x) = B_0(x)(0, sin\alpha, cos\alpha) \quad (1)$$

$$\boldsymbol{U}_0(x) = U_0(x)(0, sin\alpha, cos\alpha) \quad (2)$$

شرط تعادل محیط بصورت زیر است

$$P_0(x) + \frac{B_0^2(x)}{\mu_0} = const \quad (3)$$

حالت استاتیک این مدل توسط رادرمن(2009) مورد مطالعه قرار گرفته است، در اینجا ما به منظور یافتن تاثیر جریان بر حرکت پلاسما آن مدل را تعمیم داده‌ایم که شامل جریان پلاسما و تعمیم فرمول‌بندی معرفی شده توسط رادرمن(2009)است. فرض براین است که نوسانات توسط معادلات خطیMHD توصیف می‌شوند

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + U_z \frac{\partial \rho}{\partial z} + u \frac{d\rho_0}{dx} + \rho_0 \nabla . \boldsymbol{v} = 0 \quad (4)$$

$$\rho_0 \left(\frac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial t} + u \frac{d\boldsymbol{U}}{dx}\right) - \nabla P + \frac{1}{\mu_0}(\boldsymbol{B}.\nabla)b + \frac{b_x}{\mu_0}\frac{d\boldsymbol{B_0}}{dx} - \rho_0 v \frac{d\boldsymbol{U}}{dx} - \rho_0(\boldsymbol{U}.\nabla)\boldsymbol{v} + \rho_0 v \frac{\partial^2 \boldsymbol{v}}{\partial x^2} + \rho v \frac{\partial^2 \boldsymbol{U}}{\partial x^2} = 0 \quad (5)$$

$$\frac{\partial \boldsymbol{b}}{\partial t} + U_z \frac{\partial \boldsymbol{b}}{\partial z} = (\boldsymbol{B}.\nabla)\boldsymbol{v} + b_x \frac{\partial \boldsymbol{U}}{\partial x} - u \frac{d\boldsymbol{B_0}}{dx} - \boldsymbol{B_0}\nabla . \boldsymbol{v} + \lambda \frac{\partial^2 \boldsymbol{b}}{\partial t^2} \quad (6)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(p - c_s^2 \rho) + u\left(\frac{dp_0}{dx} - c_s^2 \frac{d\rho_0}{dx}\right) + U_z\left(\frac{dp}{dz} - c_s^2 \frac{d\rho}{dz}\right) = 0 \quad (7)$$

$$P = p + \frac{\boldsymbol{B}.b}{\mu_0} \quad (8)$$

در این معادلات $\boldsymbol{v} = (u, v, w)$ اختلال سرعت جریان و $\boldsymbol{b} = (b_x, b_y, b_z)$، p و ρ به ترتیب میدان مغناطیسی، فشار گاز و چگالی پلاسما هستند و فشار اختلالی کل با P نشان داده شده است. برای نشان دادن سرعت صوت از C_s استفاده می‌کنیم که توسط $c_s^2 = \gamma p_0/\rho_0$ تعیین می‌شود و در آن γ نسبت گرماهای

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

ویژه است. در بخش بعد به منظور مطالعه‌ی پلاسما در لایه‌ی اتلافی جواب معادلات حرکت را تعیین می‌کنیم.

حرکت پلاسما در لایه‌ی اتلافی

از آنجا که کمیت‌های تعادلی تنها وابسته به x هستند آنالیز فوریه تمام اختلالات در معادلات (4) تا(8) را می‌توان نسبت به z ، y و t نوشت. بدون از دست دادن کلیت می‌توان فرض کرد که جهت انتشار در جهت z قرار دارد و اختلالات را متناسب با $exp(i\omega t + ikz)$ درنظر گرفت. همانند رادرمن(2009) فرض اتلاف ضعیف یعنی $\epsilon = R^{-1/3} \ll 1$ را درنظر می‌گیریم و مقیاس پارامترهای اتلافی را بصورت زیر تعریف می‌کنیم

$$\bar{\nu} = \epsilon^{-3}\nu\,, \qquad \bar{\lambda} = \epsilon^{-3}\lambda \tag{9}$$

که ν ضریب ویسکوزیته جنبشی و λ ضریب پخش مغناطیسی است.

در MHD ایده‌آل موقعیت نقطه‌ی تشدید آلفن توسط رابطه‌ی زیر تعریف می‌شود

$$V_A(x_A)\,cos\alpha = \frac{\omega}{k} - U_0(x_A)cos\alpha \tag{10}$$

دراینجا V_A سرعت آلفن لوکال در پلاسما می‌باشد. سرعت لوله را بصورت زیر تعریف می‌کنیم

$$C_T^2 = \frac{C_S^2 V_A^2}{C_S^2 + V_A^2} \tag{11}$$

و همچنین در MHD ایده‌آل موقعیت نقطه‌ی تشدید آرام توسط رابطه‌ی زیر تعریف می‌شود

$$C_T(x_c)\,cos\alpha = \frac{\omega}{k} - U_0(x_c)cos\alpha \tag{12}$$

در مورد $\beta \gg 1$ می‌توان معادله‌ی(12) را بصورت زیر بازنویسی کرد

$$V_A(x_c)\,cos\alpha\left[1 - \frac{V_A^2(x_c)}{2C_S^2(x_c)} + \mathcal{O}(\beta^{-2})\right] = \frac{\omega}{k} - U_0(x_c)cos\alpha \tag{13}$$

با استفاده از معادلات(11) و(13) فاصله‌ی بین نقاط تشدید آلفن و آرام بصورت زیر تعیین می‌شود

$$x_c = x_{A+}\frac{V_A^4(x_A)cos^2\alpha}{C_S^2\Delta} \tag{14}$$

که Δ برابر است با

$$\Delta = cos^2\alpha\,\frac{d}{dx}\left(V_A^2 - \frac{(\omega - U_0 k cos\alpha)^2}{k^2 cos^2\alpha}\right) \tag{15}$$

همانطور که توسط گوسنس و همکاران(1995) و ساکورایی و همکاران(1991) بیان شده است، در نزدیکی نقطه‌ی تشدید آلفن حرکت عمدتا در جهت‌های عمود بر هردو جهت ناهمگنی و میدان مغناطیسی قرار دارد و در نزدیکی نقطه‌ی تشدید آرام حرکت عمدتا در جهت موازی با میدان مغناطیسی قرار دارد. از این رو همانند رادرمن(2009) مولفه‌های عمود و موازی میدان مغناطیسی و اختلالات سرعت را بصورت زیر تعریف می‌کنیم

$$v_\parallel = v\,sin\alpha + \omega\,cos\alpha \qquad v_\perp = v\,cos\alpha - \omega\,sin\alpha$$
$$b_\parallel = b_y\,sin\alpha + b_z\,cos\alpha \qquad b_\perp = b_y\,cos\alpha - b_z\,sin\alpha \tag{16}$$

متغیر $\xi = (x - x_A)/\epsilon$ را تعریف می‌کنیم. اکنون معادلات(4) تا(8) را برحسب متغیرهای جدید بازنویسی می‌کنیم که وجود پارامتر کوچک ϵ در مجموعه معادلات جدید به این معنی است که می‌توانیم برای بدست آوردن جواب‌های این معادلات از روش اختلال استفاده کنیم. برای این منظور اختلالات سرعت و میدان مغناطیسی را بصورت زیر بسط می‌دهیم

$$v_\parallel = v_{\parallel 1} + \epsilon v_{\parallel 2} \ldots \qquad v_\perp = v_{\perp 1} + \epsilon v_{\perp 2} \ldots$$
$$b_\parallel = b_{\parallel 1} + \epsilon b_{\parallel 2} \ldots \qquad b_\perp = b_{\perp 1} + \epsilon b_{\perp 2} \ldots \tag{17}$$

بسط‌های u ، b_x ، ρ و P با جمله‌ای از مرتبه‌ی ϵ شروع می‌شوند درحالیکه بسط p با جمله‌ای از مرتبه‌ی واحد شروع می‌شود

$$u = \epsilon u_1 + \epsilon^2 u_2 + \cdots \qquad \rho = \epsilon\rho_1 + \epsilon^2\rho_2 + \cdots$$
$$b_x = \epsilon b_{x1} + \epsilon^2 b_{x2} + \cdots \qquad p = p_1 + \epsilon p_2 + \cdots$$
$$P = \epsilon P_1 + \epsilon^2 P_2 + \cdots \tag{18}$$

با جاگذاری بسط‌های(17) و(18) در مجموعه معادلات جدید، معادلات در تقریب مرتبه‌ی صفر و معادلات از مرتبه‌ی ϵ را جدا می‌کنیم. لازم به ذکر است که در تمام این معادلات همه کمیت‌های تعادلی در $x = x_A$ محاسبه می‌شوند. از معادلات در تقریب مرتبه

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

صفر در ابتدا بوضوح می‌بینیم که در میان لایه‌ی اتلافی $P_1 = const$ می‌باشد. و سپس معادلات زیر را بدست می‌آوریم

$$b_{x1} = -\frac{B_0}{V_A}u_1,\ b_{\parallel 1} = -\frac{B_0}{V_A}v_{\parallel 1}, b_{\perp 1} = -\frac{B_0}{V_A}v_{\perp 1} \quad (19)$$

$$\rho_1 = \frac{\rho_0 V_A}{C_s^2}v_{\parallel 1} - \frac{iu_1}{\omega - U_0\, k\, cos\alpha}\frac{d\rho_0}{dx} \quad (20)$$

با قرار دادن این عبارات در معادلاتی که از مرتبه‌ی ϵ هستند و با استفاده از عملیات ریاضی در نهایت به دو معادله‌ی زیر می‌رسیم

$$\Delta\xi v_{\perp 1} + \frac{\mathrm{i}(\omega - U_0\, k\, cos\alpha)}{k^2}(\bar{\lambda} + \bar{\nu})\frac{d^2 v_{\perp 1}}{d\xi^2} = \frac{(\omega - U_0\, k\, cos\alpha)sin\alpha}{k\rho_0}P_1 \quad (21)$$

$$\Delta\left(\xi - \frac{V_A^4 cos^2\alpha}{\Delta C_s^2}\right)v_{\parallel 1} + \frac{\mathrm{i}(\omega - U_0\, k\, cos\alpha)}{k^2}(\bar{\lambda} + \bar{\nu})\frac{d^2 v_{\parallel 1}}{d\xi^2} = -\frac{(\omega - U_0\, k\, cos\alpha)cos\alpha}{k\rho_0}P_1 \quad (22)$$

ضخامت لایه‌ی اتلافی آرام(که در پلاسماهای با بتای بزرگ معادل با ضخامت لایه‌ی اتلافی آلفن می‌باشد) مطابق آنچه که توسط گوسنس و همکاران(1995) بیان شده است توسط رابطه‌ی زیر تعریف می‌شود

$$\delta_A = \left(\frac{\omega(\nu + \lambda)}{k^2|\Delta|}\right)^{1/3} \quad (23)$$

کمیت بدون بعد $\tau = (x - x_A)/\delta_A = \epsilon\xi/\delta_A$ را تعریف می‌کنیم. اگر $v_\parallel \simeq v_{\parallel 1}$ ، $v_\perp \simeq v_{\perp 1}$ و $P \simeq \epsilon P_1$ را درنظربگیریم می‌توانیم معادلات(21) و(22) را بصورت زیر بازنویسی کنیم

$$\frac{d^2}{d\tau^2}v_\perp - i\tau v_\perp \mathrm{sign}\Delta = \frac{-i(\omega - U_0\, k\, cos\alpha)sin\alpha}{k\delta_A|\Delta|\rho_0}P \quad (24)$$

$$\frac{d^2}{d\tau^2}v_\parallel - i(\tau - d)v_\parallel \mathrm{sign}\Delta = \frac{-i(\omega - U_0\, k\, cos\alpha)cos\alpha}{k\delta_A|\Delta|\rho_0}P \quad (25)$$

در اینجا

$$d = \frac{V_A^4 cos^2\alpha}{\Delta C_s^2 \delta_A} = \frac{x_c - x_A}{\delta_A} \quad (26)$$

معادلات(24) و(25) مطابق با معادلات(49) و(50) رادرمن(2009) می‌باشد جز اینکه در اینجا Δ توسط معادله‌ی(15) داده می‌شود. از این رو جواب‌های معادلات(24) و(25) همانند جواب‌های داده‌شده توسط رادرمن(2009) می‌باشد

$$[P] = 0\,, \qquad [u] = -\frac{\pi\omega P}{\rho_0|\Delta|} \quad (27)$$

با تکرار همان آرگومان‌های داده شده توسط رادرمن(2009) می‌توانیم چنین استدلال کنیم که در در حضور جریان نیز در لایه‌ی اتلافی مختلط حرکت پلاسما می‌تواند بصورت برهم‌نهی از دو حرکت، حرکت پلاسما در لایه‌ی اتلافی آرام و حرکت پلاسما در لایه‌ی اتلافی آلفنی، درنظرگرفته شود. تنها تفاوت اینست که در اینجا Δ توسط معادله‌ی(15) داده می‌شود که مقدار آن به مشخصات U_0 در لایه‌ی اتلافی و همچنین به فرکانس نوسان شیفت دوپلری بستگی دارد. تغییر Δ به علت حضور جریان دو پیامد اصلی دارد، اول اینکه بر فاصله‌ی بین نقاط تشدید آرام و آلفن تاثیر می‌گذارد که از معادلات(14) و(26) بوضوح دیده می‌شود و دوم اینکه بر مقدار δ_A داده شده توسط معادله‌ی(23) اثر می‌گذارد. به بیان دیگر اثر جریان بر نوسان، تغییر فاصله‌ی بین نقاط تشدید و ضخامت لایه‌ی اتلافی می‌باشد.

نتایج

در این مقاله حرکت پلاسما در لایه‌ی اتلافی یک موج MHD رونده را مطالعه کرده‌ایم. پلاسمای بتای بزرگ را که در آن نقاط تشدید آرام و آلفن، به هم نزدیک هستند و با یکدیگر همپوشانی دارند، درنظرگرفته ایم. مدل مطالعه شده توسط رادرمن(2009) را به پلاسمای شامل جریان تعمیم داده‌ایم و با استفاده از فرمول بندی ارائه شده در آن به حل معادلات حرکت پرداخته‌ایم. نتایج ما نشان می‌دهد که شیفت دوپلری نوسانات جریان پلاسما دو اثر مهم بر حرکت پلاسما در لایه‌ی اتلافی دارد. تاثیر اول این است که فاصله‌ی بین نقاط تشدید آرام و آلفن را تغییر می‌دهد و تاثیر دوم این است که در حضور جریان ضخامت لایه‌ی اتلافی مختلط تغییر می‌یابد. همانند مورد پلاسمای ایستا حرکت پلاسما برهم نهی از حرکت پلاسما در لایه‌های اتلافی آرام و آلفنی است.

مراجع

[1] Aschwanden, M. J., Physics of the Solar Corona. Springer, Berlin ISBN 3-540-30765-6 (2005)
[2] Goossens, M., Ruderman, M. S., PhST T60, 171 (1995)
[3] Goossens, M., Ruderman M. S., Hollweg, J. V., SoPh 157, 75 (1995)
[4] Gough, D. O., McIntyre, M. E, Nature (London) 394, 755 (1998)
[5] Rudermana, M. S., Physics of Plasmas 16, 042109 (2009)
[6] Sakurai, T., Goossens, M., Hollweg, J. V., SoPh 133, 227s (1991)
[7] Wang, T., Innes, D.E., Qiu, J., ApJ 656, 598 (2007)

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بررسی ویژگی های ساختاری نانوذرات فریت آهن و ترمودینامیک جذب یونهای سرب از پساب

لطفی، سجاد[۱]؛ اصلی بیکی، باقر[۱]؛ زارعی، محمود[۲]

[۱]دانشکده فیزیک، دانشگاه تبریز، تبریز

[۲]دانشکده شیمی، دانشگاه تبریز، تبریز

چکیده

در کار پژوهشی حاضر نانوذرات مغناطیسی Fe_3O_4 به عنوان جاذب در حذف فلز سرب از فاضلاب تهیه گردیدند. شناسایی و بررسی خواص آنها به کمک آنالیزهای طرح پراش پرتو ایکس (XRD)، طیف تبدیل فوریه مادون قرمز، میکروسکوپهای الکترونی روبشی و عبوری انجام گرفت. و کاربرد این نانوذرات در حذف سرب Pb(II)، با روش جذب سطحی به وسیله ی دستگاه جذب اتمی بررسی گردید. نتایج آزمایش های جذب نشان داد که می توان با استفاده از نانوذرات مغناطیسی Fe_3O_4 بازده درصد حذف را تا ۹۸٪ افزایش داد. داده های جذبی نیز مطابقت خوبی با مدل ایزوترمی لانگمویر و فروندلیچ نشان دادند. همچنین مطالعات ترمودینامیکی ماهیت خودبخودی فرایند جذب سطحی و فیزیکی بودن آن را تایید کرد.

واژه های کلیدی: *نانوذرات، Fe_3O_4، تصاویر میکروسکوپ الکترونی، حذف فلزات سنگین، جذب.*

Study of structural properties of Iron ferrite nanoparticlesand thermodynamics of Pb(II) adsorption from wastewater

Lotfi, Sajad[1]; Aslibeiki, Bagher[1]; Zarei, Mahmoud[2]

[1]Department of Physics, University of Tabriz, Tabriz

[2]Department of Applied Chemistry, University of Tabriz, Tabriz

Abstract

In this research, Fe_3O_4 magnetic nanoparticles were prepared as adsorbents in the removal of lead metal from wastewater. Identification and investigation of their properties was performed using various structural analyzes and application of these adsorbents in removal Pb (II), by atomic absorption method, was investigated. The results of adsorption experiments showed that the efficiency of removal can be increased up to 98% by using Fe_3O_4 magnetic nanoparticles.Absorption data showed good consistency with the Langmuir and Freundlich isothermal models. Also, Thermodynamic studies confirmed the spontaneous nature of the process of surface adsorption and its physicality.

***Keywords**: Nanoparticles, Fe_3O_4, Electron microscopy, Heavy metals removal, Adsorption.*

PACS No.61,81.

مقدمه

بیش از ۷۰٪ سطح زمین را آب فراگرفته که بی شک با ارزش ترین منبع طبیعی موجود در سیاره ماست. در سده ی اخیر به دلیل رشد صنعت و تکنولوژی، گسترش کارخانجات و در نتیجه پساب های آنها و عدم رعایت بهداشت محیط زیست، آبهای زیر زمینی و جاری دچار آلودگی شده اند. فناوری نانو با راهکارهای جدید خود اظهار می‌دارد که مواد با پایه نانو می‌توانند به فناوری‌های

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد

http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

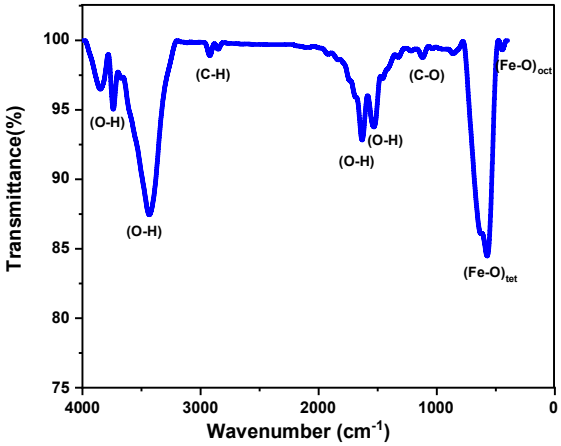
تصفیه آب ارزان قیمت‌تر، بادوام‌تر و مؤثرتری منجر شوند. نانوذرات اکسید آهن به دلیل فراوانی، ارزانی، غیر سمی بودن و توانایی و بازده بالا در تجزیه آلاینده ها و همچنین حذف فلزات سنگین از آب های آلوده بیشتر مورد توجه بوده است. نانوذرات مغناطیسی در اثر برهمکنش های مستقیم بین ذره ای مانند نیروی واندروالسی و بر همکنش مغناطیسی تمایل به هماوری داشته و تشکیل ذرات میکرون یا بزرگتر را می دهند که باعث کاهش سطح ویژه و واکنش پذیری می شود. بنابراین نانوذرات مغناطیسی برای حذف یون های فلزی از محلول های آبی به کار برده می شوند[۱].

تهیه نمونه ها

برای ساخت نانوذرات Fe_3O_4 به روش هم رسوبی ابتدا محلولی از نمکهای آهن($FeCl_2.4H_2O$) و ($FeCl_3.6H_2O$) با نسبت مولی ۱ به ۲ بر روی هیتر قرار گرفت و در ۸۰ درجه ی سانتی گراد همزده شدند. سپس محلول NaOH به مخلوط واکنش اضافه شد. به محض افزودن باز، رسوبی به رنگ سیاه تشکیل شد. رسوب تهیه شده بارها با آب مقطر شست و شو داده شد، و سپس خشک گردید.

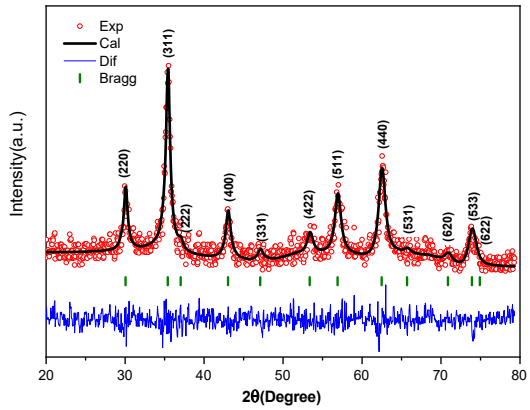
بحث و نتایج

شکل ۱ طیف FTIR نمونه Fe_3O_4 را نشان می دهد. پیوندهای جذبی در $3434cm^{-1}$ تا $3850cm^{-1}$ مربوط به مولکول آب (O-H) هستند. قله های واقع در $2922cm^{-1}$ و $2852cm^{-1}$ به پیوند های کششی (C=H) اختصاص داده می شود. جذب در $1632cm^{-1}$ و $1533cm^{-1}$ به ترتیب مربوط به پیوند کششی (N-H) و (N-O) است. دوقله مهم در زیر $1000\ cm^{-1}$ مشاهده می‌شود که مربوط به ساختار فریت های اسپینلی است. قله واقع در $574cm^{-1}$ مربوط به پیوند های اکسیژن–فلز در محل چهاروجهی و قله واقع در اطراف $445cm^{-1}$ نشان دهنده پیوندهای اکسیژن–فلز در جایگاه های هشت وجهی ساختار اسپینلی مکعبی است.



شکل ۱- طیف FT-IR نمونه نانوذرات Fe_3O_4.

شکل ۲ نتایج حاصل از تحلیل ریتولد طیف XRD نمونه Fe_3O_4 سنتز شده را نشان می دهد. در این شکل دایره های توخالی داده های تجربی، منحنی خطی نتیجه ریتولد، خط زیگزاک تفاوت بین داده های تجربی و محاسباتی و نمادهای عمودی مکان قله های براگ را نشان می دهد. تطبیق کامل طیف تجربی و نتایج محاسباتی بیانگر خلوص ماده سنتز شده می باشد. همچنین با استفاده از این تحلیل، ثابت شبکه اسپینلی برابر $8/40Å$ به دست آمد.

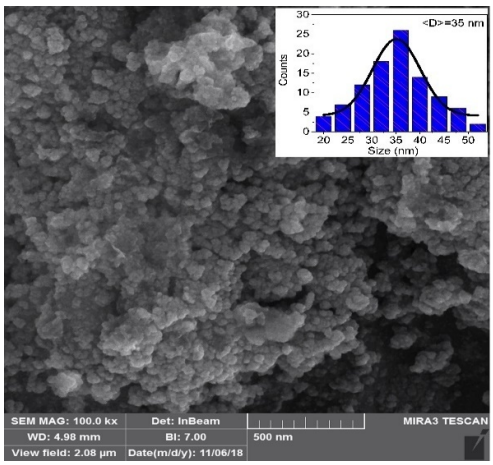


شکل ۲-نتایج تحلیل ریتولد نمونه Fe_3O_4.

شکل۳ تصویر FE-SEM نمونه رانشان می‌دهد. همانطور که در شکل دیده می‌شود ماده شامل نانوذرات تقریبا کروی کلوخه شده

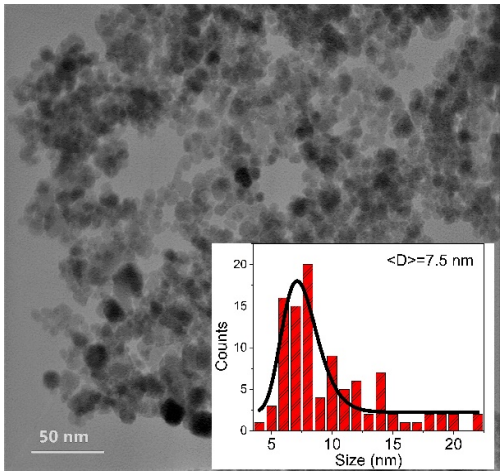
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

و به هم چسبیده است. این کلوخه‌شدگی به مغناطیسی بودن و برهمکنش‌های دوقطبی- دوقطبی بین نانوذرات برمی‌گردد. منحنی توزیع کلوخه ها در داخل شکل ۳ مشخص شده است.



شکل۳-تصویر میکروسکوپ الکترونی روبشی نمونه نانوذرات.

برای تعیین اندازه نانوذرات تصویر میکروسکوپ الکترونی عبوری تهیه گردید. با استفاده از تصویر TEM اندازه متوسط نانوذرات حدود ۷/۵ nm به دست آمد. شکل ٤ نتایج این آزمایش را نشان می دهد.



شکل٤-تصویر میکروسکوپ الکترونی عبوری نمونه Fe_3O_4.

نتایج جذب سرب از آب

محلول ۲۰ میلی گرم در لیتر سرب، با اضافه کردن مقدار مشخصی از نیترات سرب به چهار لیتر از آب مقطر تهیه گردید. سپس با رقیق سازی آنها محلول هایی با سه غلظت ۱۰، ۱۳ و ۲۰ میلی گرم در لیتر تهیه شد. پارامترهای مختلفی از قبیل مقدار اولیه جاذب، حجم محلول حاوی سرب و غلظت اولیه ی سرب مورد بررسی قرار گرفت. در همه ی نمونه ها pH محلول روی ۷ تنظیم شد. و زمان تماس بین جاذب و محلول حاوی سرب ۳۰ دقیقه در نظر گرفته شد. به منظور محاسبه بازده درصد حذف و ظرفیت جذب عناصر سنگین توسط نانوذرات مغناطیسی اکسید آهن ازروابط زیر استفاده گردید[۲]:

$$R = \frac{C_0 - C}{C_0} \times 100 \qquad (۱)$$

$$q = \frac{C_0 - C}{m} \times V \qquad (۲)$$

در این روابط R درصد حذف یون ها، C_0 و C به ترتیب غلظت اولیه و نهایی یون های موجود در آب، qمقدار یون جذب شده، m جرم جاذب وVحجم محلول می باشد[۲]. نتایج حاصل از تاثیر مقادیر مختلف جاذب بر روی جذب سرب نشان داد که می توان با استفاده از نانوذرات Fe_3O_4 تا ۹۸ درصد از سرب را جذب کرد. همچنین ظرفیت جذب در بهترین حالت ۲۱ میلی گرم بر گرم به دست آمد.

محاسبه ی پارامترهای مختلف جذب

در ادامه پارامترهای مختلف جذب از قبیل ایزوترم جذب و ترمودینامیک فرایند جذب مطالعه گردید. با استفاده از ایزوترم جذب می توان بیشینه ظرفیت جذب و با استفاده از کمیت ترمودینامیکی انرژی آزاد گیبس مطلوب بودن سیستم جذب سطحی را نشان داد. ایزوترم، مهم ترین پارامتر در طراحی سیستم های جذب و توصیف کننده رابطه بین غلظت ماده جذب شونده و ظرفیت جذب یک جاذب است. در این تحقیق دو ایزوترم لانگمویر و فروندلیچ برای جذب Pb بررسی شد. ایزوترم لانگمویر بر مبنای جذب تک لایه ای و یکنواخت ماده جذب

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

شونده با انرژی یکسان بر تمام سطوح روی جاذب است[۳]. ایزوترم فروندلیچ برخلاف مدل لانگمویر، بر مبنای جذب چند لایه ای و ناهمگن ماده جذب شونده روی جاذب می باشد[٤]. ایزوترم های لانگمویر و فروندلیچ به ترتیب توسط رابطه های ۳ و ٤ بررسی شدند.

$$\frac{C_e}{q_e} = \frac{1}{ab} \times \frac{1}{a} C_e \qquad (۳)$$

$$\log q_e = \log k_f \times \frac{1}{n} (\log C_e) \qquad (٤)$$

در این روابط q_e ظرفیت جذب جاذب در شرایط تعادلی، C_e غلظت تعادلی، b گرمای جذب، a ثابت ایزوترم لانگمویر تک لایه، k_f ثابت ایزوترم فروندلیچ و $1/n$ شدت جذب سطحی را نشان می دهد. به ازای $n>1$ شرایط جذب سطحی مطلوب ارزیابی می شود. همان طور که در جدول ۱ مشاهده می شود مقدار n شرایط مطلوب جذب سطحی را نشان می دهد. علاوه بر این، درایزوترم لانگمویر کمیت R که یک ثابت بدون بعد برای نشان دادن میزان مطلوب بودن سیستم جذب سطحی است، به صورت زیر نشان داده می شود:

$$R = \frac{1}{1+bC} \qquad (۵)$$

برای $0<R<1$ سیستم جذب سطحی مطلوب است[۵]. با استفاده از رابطه ی ۵، مقدار ثابت R، ۰/٦۱ به دست آمد که مطلوب بودن سیستم جذب سطحی را نشان می دهد.

جدول۱-نتایج بررسی ایزوترم های جذب سرب با استفاده از نانوذرات فریت آهن.

b(l/mg)	**a**(mg/g)	**N**	$\mathbf{K_f}$(mg/g)
۰/۰۳۷٦	۳۱/٦٦	۸/۸٦	۱۲/۳

در ادامه، مقدارکمیت ترمودینامیکی انرژی آزاد گیبس (ΔG) با استفاده از معادلات ٦ و ۷ تعیین گردید.

$$k = \frac{q}{c} \qquad (٦)$$

$$\Delta G = -RT \, Ln \, k \qquad (۷)$$

در روابط بالا q ظرفیت جذب بر حسب میلی گرم بر گرم، c غلظت تعادلی بر حسب میلی گرم بر لیتر، R ثابت عمومی گازها و T دما بر حسب کلوین می باشد. نتایج محاسبات در جدول ۲ آورده شده است. در اینجا هم مقدار منفی انرژی آزاد گیبس بیانگرطبیعت خودبخودی فرایند جذب یون ها توسط نانوذرات است[٦].

جدول۲-نتایج پارامتر ترمودینامیکی انرژی آزاد گیبس.

C(mg/l)	q(mg/g)	**ΔG**(kJ/mol)
۰/۲٦	۱۵/۷۹	-۱۰/۲۲

نتیجه گیری

با استفاده از نانوذرات فریت آهن ۹۸ درصد از سرب موجود در آب جذب شد. نتایج حاصل از ایزوترم های لانگمویر و فروندلیچ مطلوب بودن سیستم جذب سطحی را نشان می دهد. همچنین مقدار انرژی آزاد گیبس برای نانوذرات فریت آهن نشان داد که فرایند جذب مطلوب بوده و طبیعت خودبخودی دارد.

مرجع ها

[۱]E.N.Zare, A. Motahari, and M. Sillanpää, "Nanoadsorbents based onconducting polymer nanocomposites with main focus on polyaniline and its derivatives for removal of heavy metal ions/dyes: A review";*Environmental Research*, **162**, (2018) 173-195.

[۲] D. M. Martín, et al., "Highly efficient removal of heavy metal ions from polluted water using ion-selective polyacrylonitrile nanofibers";*Journal of Environmental Chemical Engineering*, **6**(2018) 236-245.

[۳]V.Janaki, et al., "Application of polyaniline/bacterial extracellular polysaccharide nanocomposite for removal and detoxification of Cr(VI)";*Cellulose*, **21**,(2014) 463-472.

[٤]S.Pandey, and S.B. Mishra, "Organic–inorganic hybrid of chitosan/organoclaybionanocomposites for hexavalent chromium uptake"; Journal of Colloid and Interface Science, **361**, (2011) 509-520.

[۵]G.Bayramoglu, , B. Altintas, and M.Y. Arica, "Adsorption kinetics and thermodynamic parameters of cationic dyes from aqueous solutions by using a new strong cation-exchange resin";*Chemical Engineering Journal*, **152**, (2009) 339-346.

[٦]A.Olad, and F. FarshiAzhar, "A study on the adsorption of chromium (VI) from aqueous solutions on the alginate-montmorillonite/polyaniline nanocomposite";*Desalination and Water Treatment*, **52**, (2014) 2548-2559.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد

http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

ابرگرانش دوازده بعدی در مرتبه هشت مشتق

بختیاری زاده، حمیدرضا

گروه فیزیک، دانشگاه صنعتی سرجان، سیرجان

چکیده

پیشنهادی برای نظریه میدان بوزونی موثر در مرتبه هشت مشتق در دوازده بعد مطرح کرده‌ایم، که فشرده‌سازی آن روی یک دایره و روی یک چنبره به ترتیب به ابرگرانش یازده بعدی و ابرگرانش نوع II در مرتبه هشت مشتق می‌انجامد.

12-dimensional supergravity at eight-derivative level

Bakhtiarizadeh, Hamid Reza

Department of Physics, Sirjan University of Technology, Sirjan

Abstract

We introduce a proposal for effective bosonic field theory at eight-derivative level in twelve dimensions, whose compactification on a circle and on a torus respectively yields eleven-dimensional and type IIB supergravity theories at eight-derivative level.

PACS No. 10

مقدمه

ابرگرانش نوع IIA و بسیاری از نظریه‌های ابرگرانش در ابعاد پایین‌تر را می‌توان از ابرگرانش یازده بعدی [۱]، که حد انرژی پایین نظریه M [۲] است، با فشرده‌سازی روی یک منیفلد فشرده بدست آورد. برخلاف ابرگرانش نوع IIA، ابرگرانش نوع IIB را نمی‌توان با کاهش ابعادی ابرگرانش یازده بعدی روی یک دایره فشرده بدست آورد.

تقارن $SL(2,\mathbb{R})$ نظریه ابرریسمان نوع IIB، که گروه مدولار (کالبدی) یک چنبره نیز هست، شهود فیزیکی محکمی دال بر این که ممکن است منشاء نظریه ابرریسمان نوع IIB در ده بعد در یک نظریه دوازده بعدی موسوم به نظریه F [۳] باشد، را فراهم می‌کند.

با فهم حاضر اعتقاد بر این می‌رود که نظریه F، که حد انرژی پایین آن ابرگرانش دوازده بعدی است، بایستی شامل محتویات میدان نظریه IIB در ده بعد و نظریه M در یازده بعد باشد.

کنش ابرگرانش در دوازده بعد شامل کنش پایین‌ترین مرتبه به علاوه تعداد نامتناهی از جملات مشتق بالاتر ورای مرتبه اصلی است.

در این مقاله، از رهیافت کاهش ابعادی برای یافتن برخی تصحیحات در مرتبه هشت مشتق به کنش ابرگرانش دوازده بعدی استفاده کرده‌ایم. با ساخت کلی‌ترین جفت‌شدگی‌های ممکن مختلف در دوازده بعد شروع کرده و آن‌ها را تحت یک کاهش ابعادی سازگار به ابعاد پایین‌تر قرار داده‌ایم. سپس جملات بدست آمده در یازده و ده بعد را با به ترتیب با جملات متناظر در ابرگرانش یازده بعدی و نیز ابرگرانش نوع IIB مقایسه کرده تا جفت‌شدگی‌های مرتبه هشت مشتق را در دوازده بعد بیابیم [۴]. بدین‌منظور از رهیافت معرفی شده در مرجع [۵] برای کاهش ابعادی سازگار میدان‌های بوزونی کنش ابرگرانش دوازده بعدی در پایین‌ترین مرتبه به یازده و ده بعد استفاده کرده‌ایم.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

کاهش به ابرگرانش یازده بعدی

ابتدا رهیافت مطرح شده در [۵] برای کاهش ابعادی نظریه دوازده بعدی به یازده و در بخش بعدی به ده بعد را مرور می‌کنیم. محتویات میدان بوزونی در دوازده بعد شامل متریک، دیلتون، یک پتانسیل ۳-فرم و یک پتانسیل ۴-فرم می‌باشد. در یک نمادگذاری واضح، F_4 که شدت میدان ۴-فرم مربوط به پتانسیل ۳-فرم است، پس از فشرده‌سازی روی دایره‌های داخلی که با $i, j, ...$ نشان داده می‌شوند، به $F_4, F_3^{(i)}, F_2^{(ij)}, ...$ می‌انجامد. به طور مشابه G_5 که شدت میدان ۵-فرم مربوط به پتانسیل ۴-فرم است، نیز به $G_5, G_4^{(i)}, G_3^{(ij)}, ...$ می‌انجامد. کاهش ابعادی خمش ریمن نیز به $R_4, R_3^{(i)}, R_2^{(ij)}, ...$ منجر می‌شود. از آن‌جا که نظریه کاهش یافته در یازده بعد شامل میدان‌هایی بیش از آنچه در یازده بعد است می‌باشد، واضح است که بایستی برخی از آن‌ها صفر باشند. نکته اساسی این است که این کاهش بایستی سازگار باشد؛ یعنی صفر قرار دادن میدان‌ها بایستی با معادلات حرکت سازگار باشد. در [۵] نشان داده شده است که به شکل سازگاری می‌توان نوشت:

$$G_5 = F_3^{(1)} = 0. \qquad (۱)$$

برای بدست آوردن ابرگرانش یازده بعدی، بایستی به جای دو شدت میدان ۴-فرم یک شدت میدان ۴-فرم داشته باشیم. بدین‌منظور بایستی این دو ۴-فرم با یکدیگر به شکل زیر متناسب باشند:

$$G_4^{(1)} = \sqrt{\frac{2}{3}}\mathrm{F}_4, F_4 = \sqrt{\frac{1}{3}}\mathrm{F}_4, \qquad (۲)$$

که در آن $\mathrm{F}_4 = \mathrm{dA}_3$ همان شدت میدان ۴-فرم ابرگرانش یازده بعدی است.

کاهش به ابرگرانش نوع IIB

در اینجا نیز می‌توان یک کاهش ابعادی سازگار را با برابر با صفر قرار دادن آن دسته از شدت میدان‌هایی که در محتویات میدان نظریه ابرگرانش نوع IIB حاضر نیستند بدست آورد. یعنی،

$$F_4 = G_4^{(1)} = G_4^{(2)} = G_3^{(12)} = 0. \qquad (۳)$$

همانند مورد یازده بعدی، از معادلات حرکت دیده می‌شود مادامی که شرایط (۳) برقرار باشند، کاهش این میدان‌ها به ابعاد پایین‌تر سازگار خواهد بود. با در نظر گرفتن تصحیحات چرن-سایمونز به شدت‌های میدان مختلف، درمیابیم که میدان‌های $F_3^{(1)}$ و $F_3^{(2)}$ با روابط زیر داده می‌شوند:

$$F_3^{(1)} = dA_2^{(1)}, F_3^{(2)} = dA_2^{(2)} - \chi dA_2^{(1)}. \qquad (۴)$$

این‌ها دقیقا به ترتیب همان ساختارهای شدت‌های میدان ۳-فرم NSNS و RR در ابرگرانش نوع IIB می‌باشند. یعنی،

$$F_3^{(1)} = H_3, F_3^{(2)} = F_3. \qquad (۵)$$

علاوه بر این، یک کاهش سازگار به ده بعد ایجاب می‌کند که شدت میدان ۵-فرم G_5 همان شدت میدان ۵-فرم F_5 معمول میدان RR ابرگرانش نوع IIB باشد. یعنی،

$$G_5 = F_5. \qquad (۶)$$

برای خمش ریمن خطی نیز می‌توان فرض کرد که بدون تغییر به ده بعد منتقل شود.

تصحیحات مشتق بالاتر

در این بخش قصد داریم تصحیحات مشتق بالاتر شامل دو شدت میدان ۵-فرم و دو خمش ریمن، دو شدت میدان ۴-فرم و دو خمش ریمن و نیز جفت شدگی‌های شامل چهار میدان ۴-فرم را برای کنش ابرگرانش دوازده بعدی بدست آوریم.

۱. $(\partial G_5)^2 R^2$

برای یافتن جملات شامل دو شدت میدان ۵-فرم و دو خمش ریمن در کنش موثر نظریه F از این حقیقت استفاده می‌کنیم که جملات $(\partial F_5)^2 R^2$ در ده بعد بدست آمده از کاهش چنبره‌ای کلی‌ترین جفت‌شدگی ممکن بین دو میدان ۴-فرم و دو خمش ریمن با ضرایب نامعلوم بایستی با جملات مشابه در ابرگرانش نوع IIB که قبلا در [۶,۷,۸,۹] بدست آمده‌اند، یکسان باشند. با استفاده از این قید می‌توان مجموعه‌ای از شرایط را روی ضرایب نامعلوم بدست آورد. این شرایط همچنین بایستی قادر باشند یک کاهش سازگار به جفت‌شدگی‌های $(\partial F_4)^2 R^2$ در یازده بعد را تضمین کنند. برای تایید این سازگاری شرایط بدست آمده را در این جفت‌شدگی‌ها اعمال می‌کنیم. می‌توان دید که همه ضرایب نامعلوم بدست می‌آیند. این نشان می‌دهد که شرایط بالا ضرایب نامعلوم را به شکل درستی تعیین می‌کنند و هیچ ضریب نامعلوم

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

دیگری باقی نمی‌ماند. جایگذاری شرایط بدست آمده در کلی‌ترین جفت‌شدگی ممکن شامل دو میدان ۴-فرم و دو خمش ریمن با ضرایب نامعلوم، به جفت‌شدگی زیر در دوازده بعد می‌انجامد:

$$e^{-1}L_{(\partial G_5)^2R^2}=-\frac{32}{3}\times$$
$$(6G_{5ce}{}^{ghi,j}G_{5dfghj,i}R_{ab}{}^{ef}R^{abcd}-4G_{5ce}{}^{ghi,j}G_{5dghij,f}R_{ab}{}^{ef}R^{abcd}$$
$$+12G_{5be}{}^{ghi,j}G_{5dfghj,i}R_{a}{}^{e}{}_{c}{}^{f}R^{abcd}-2G_{5b}{}^{ghij}{}_{,e}G_{5dghij,f}R_{a}{}^{e}{}_{c}{}^{f}R^{abcd}$$
$$+8G_{5be}{}^{hij}{}_{,c}G_{5dfhij,g}R_{a}{}^{efg}R^{abcd}-8G_{5cf}{}^{hij}{}_{,b}G_{5dghij,e}R_{a}{}^{efg}R^{abcd}$$
$$+48G_{5bce}{}^{hi,j}G_{5\,fghij,d}R_{a}{}^{efg}R^{abcd}-8G_{5bc}{}^{hij}{}_{,e}G_{5\,fghij,d}R_{a}{}^{efg}R^{abcd}$$
$$+12G_{5be}{}^{hij}{}_{,c}G_{5\,fghij,d}R_{a}{}^{efg}R^{abcd}-18G_{5abe}{}^{ij}{}_{,g}G_{5cdfij,h}R^{abcd}R^{efgh}$$
$$+3G_{5abef}{}^{i,j}G_{5cdghi,j}R^{abcd}R^{efgh}),$$

(۷)

که در آن $e=\sqrt{-g}$ و کاما بر مشتق جزئی نسبت به اندیس بعد از خود دلالت می‌کند.

۲. $(\partial F_4)^2R^2$

اکنون در موقعیتی هستیم که می‌توانیم تصحیحات شامل دو میدان ۴-فرم و دو خمش ریمن را به کنش ابرگرانش دوازده بعدی اضافه کنیم. کاهش ابعادی کلی‌ترین جفت‌شدگی ممکن شامل دو میدان ۴-فرم و دو خمش ریمن با ضرایب نامعلوم روی یک چنبره به $(\partial H_3)^2R^2$ و $(\partial F_3)^2R^2$ در ده بعد می‌انجامد. این امکان وجود دارد که جملات اول را با عبارات متناظر شناخته شده برای دو میدان B و دو گرویتون در نظریه ابرریسمان نوع IIB که سال‌ها قبل توسط گراس و اسلوان [۱۰] بدست آمده است، مقایسه کنیم. از مقایسه قیدهایی بر روی ضرایب ثابت بدست می‌آید. با جایگذاری این قیدها در کلی‌ترین جفت‌شدگی ممکن و نوشتن آن برحسب پارامترهای مستقل می‌توان دید که برخی ضرایب ثابت هنوز نامعین می‌باشند. این بدان معنی است که حداقل بایستی یک قید اضافی دیگر وجود داشته باشد که بایستی اعمال شود. ضرایب باقیمانده را می‌توان با استفاده از این قید که جفت‌شدگی‌های $(\partial F_4)^2R^2$، ناشی از کاهش دایروی نظریه دوازده بعدی، بایستی با جملات متناظرشان در یازده بعد سازگار باشند. یک تحلیل دقیق نشان می‌دهد که این جفت‌شدگی‌های نظریه کاهش یافته از دو سهم ناشی می‌شوند اولین سهم از کاهش دایروی کلی‌ترین جفت‌شدگی ممکن بین دو شدت میدان ۴-فرم و دو خمش ریمن و سهم دیگر از کاهش دایروی کلی‌ترین جفت‌شدگی ممکن بین دو شدت میدان ۵-فرم و دو خمش ریمن به یازده بعد بدست می‌آید. با جمع کردن این دو سهم با یکدیگر و مقایسه نتیجه بدست آمده با عبارت متناظر در ابرگرانش نوع IIB یک قید اضافه دیگر نیز بدست می‌آید. با اعمال دو مجموعه قیدهای بدست آمده در کلی‌ترین ادغام شوندگی اندیس‌های ممکن شامل دو میدان ۴-فرم و دو خمش ریمن با ضرایب نامعلوم جفت‌شدگی $(\partial F_4)^2R^2$ را در دوازده بعد چنین بدست می‌دهد:

$$e^{-1}L_{(\partial F_4)^2R^2}=\frac{32}{3}\times$$
$$(3F_4{}^{eghi,f}F_{4\,fghi,e}R_{abcd}R^{abcd}+8F_4{}^{b}{}_{fgh,i}F_4{}^{efgh,i}R_{abcd}R_{e}{}^{acd}$$
$$+4F_{4\,fghi}{}^{,b}F_4{}^{fghi,e}R_{abcd}R_{e}{}^{acd}-12F_4{}^{bf}{}_{gh,i}F_4{}^{degh,i}R_{abcd}R_{e}{}^{a}{}_{f}{}^{c}$$
$$+24F_4{}^{bghi,d}F_4{}^{ef}{}_{gh,i}R_{abcd}R_{e}{}^{a}{}_{f}{}^{c}-16F_4{}^{e}{}_{ghi}{}^{,b}F_4{}^{fghi,d}R_{abcd}R_{e}{}^{a}{}_{f}{}^{c}$$
$$+24F_4{}^{d}{}_{ghi}{}^{,b}F_4{}^{fghi,e}R_{abcd}R_{e}{}^{a}{}_{f}{}^{c}+12F_4{}^{ae}{}_{gh,i}F_4{}^{bfgh,i}R_{abcd}R_{ef}{}^{cd}$$
$$-12F_4{}^{e}{}_{ghi}{}^{,a}F_4{}^{fghi,b}R_{abcd}R_{ef}{}^{cd}-24F_4{}^{bghi,f}F_4{}^{ce}{}_{hi}{}^{,a}R_{abcd}R_{efg}{}^{d}$$
$$+24F_4{}^{be}{}_{hi}{}^{,a}F_4{}^{cfhi,g}R_{abcd}R_{efg}{}^{d}-120F_4{}^{ce}{}_{hi}{}^{,a}F_4{}^{fghi,b}R_{abcd}R_{efg}{}^{d}$$
$$+96F_4{}^{be}{}_{hi}{}^{,a}F_4{}^{fghi,c}R_{abcd}R_{efg}{}^{d}-48F_4{}^{bc}{}_{hi}{}^{,a}F_4{}^{fghi,e}R_{abcd}R_{efg}{}^{d}$$
$$-24F_4{}^{acg}{}_{i}{}^{,e}F_4{}^{bdhi,f}R_{abcd}R_{efgh}+12F_4{}^{cdgh}{}_{,i}F_4{}^{iabe,f}R_{abcd}R_{efgh}).$$

(۸)

۳. $(\partial F_4)^4$

برای یافتن تصحیحات شامل چهار شدت میدان ۴-فرم به کنش موثر نظریه F، ابتدا جفت‌شدگی‌های $(\partial F_3)^2(\partial H_3)^2$ ناشی از کاهش چنبره‌ای کلی‌ترین جفت‌شدگی ممکن بین چهار شدت میدان ۴-فرم را با جفت‌شدگی‌های متناظر در ابرگرانش نوع IIB که در [۶,۷,۸,۹] یافت شده‌اند مطابقت می‌دهیم. این تطابق به مجموعه‌ای از روابط قیدی بین ضرایب نامعلوم می‌انجامد. قبل از جایگذاری این قیدها در کلی‌ترین جفت‌شدگی‌ممکن بین چهار شدت میدان ۴-فرم، بایستی اطمینان حاصل کنیم که این قیدها به شکل صحیحی جفت‌شدگی‌ها در یازده و ده بعد را بدست می‌دهند. بدین‌منظور ابتدا آن‌ها را در جفت‌شدگی‌های $(\partial F_4)^4$ در یازده بعد، که ساختار یکسانی با مورد دوازده بعدی اما با یک ضریب کلی $4/9$ اضافی دارد، جایگذاری می‌کنیم. پس از نوشتن

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

نتیجه برحسب پارمترهای مستقل مشاهده می‌کنیم که آن‌ها به درستی جفت‌شدگی‌های $(\partial F_4)^4$ در یازده بعد بدست آمده در[۱۱,۱۲] را به دست می‌دهند. به عنوان یک آزمون سازگاری دیگر اضافی، اعمال قیود بدست آمده به جملات $(\partial H_3)^4$ به نتیجه درستی برای این جفت‌شدگی‌ها می‌انجامد. با جایگذاری شرایط بدست آمده در کلی‌ترین جفت‌شدگی ممکن بین چهار شدت میدان ۴-فرم، جملات زیر را برای تصحیحات شامل چهار شدت میدان ۴-فرم در دوازده بعد بدست می‌آوریم:

$$e^{-1}L_{(\partial F_4)^4} = \frac{2}{9}\times$$
$$(576F_4{}^{a}{}_{fgh}{}^{,b}F_{4bcde,a}F_4{}^{cdf}{}_{j,i}F_4{}^{eghi,j} - 288F_{4bcde,a}F_4{}^{b}{}_{fgh}{}^{,a}F_4{}^{cdf}{}_{j,i}F_4{}^{eghj,i}$$
$$+2304F_{4bcde,a}F_4{}^{b}{}_{fgh}{}^{,a}F_4{}^{df}{}_{ij}{}^{,c}F_4{}^{eghj,i} - 3456F_4{}^{ac}{}_{fg}{}^{,b}F_{4bcde,a}F_4{}^{df}{}_{ij,h}F_4{}^{eghj,i}$$
$$+864F_{4bcde,a}F_4{}^{bc}{}_{fg}{}^{,a}F_4{}^{df}{}_{ij,h}F_4{}^{eghj,i} + 576F_{4bcde,a}F_4{}^{cdf}{}_{j}{}^{,b}F_4{}^{ehij,g}F_{4fghi}{}^{,a}$$
$$-64F_4{}^{aghi,j}F_{4bcde,a}F_4{}^{cde}{}_{j}{}^{,f}F_{4fghi}{}^{,b} - 576F_4{}^{aeij,h}F_{4bcde,a}F_4{}^{c}{}_{fgh}{}^{,b}F_4{}^{fg}{}_{ij}{}^{,d}$$
$$+32F_{4bcde,a}F_4{}^{bcd}{}_{f}{}^{,a}F_4{}^{e}{}_{hij,g}F_4{}^{fhij,g} - 64F_4{}^{acde,j}F_{4bcde,a}F_{4fghi}{}^{,b}F_4{}^{ghi}{}_{j}{}^{,f}$$
$$+576F_{4bcde,a}F_4{}^{b}{}_{fgh}{}^{,a}F_4{}^{cde}{}_{j,i}F_4{}^{ghij,f} - 672F_{4bcde,a}F_4{}^{bc}{}_{fg}{}^{,a}F_4{}^{e}{}_{hij}{}^{,d}F_4{}^{ghij,f}$$
$$-16F_{4bcde,a}F_4{}^{bcd}{}_{f}{}^{,a}F_{4ghij}{}^{,e}F_4{}^{ghij,f} - F_{4bcde,a}F_4{}^{bcde,a}F_{4ghij,f}F_4{}^{ghij,f}).$$

(۹)

نتیجه‌گیری

در این مقاله نشان داده‌ایم که یک نظریه میدان موثر برای نظریه F در مرتبه α'^3 وجود دارد که کاهش ابعادی آن به یازده و ده بعد، یک کاهش سازگار به بخش بوزونی به ترتیب ابرگرانش یازده بعدی و ابرگرانش نوع IIB می‌باشد.

همان‌گونه که در [۵] نیز قبلا برای مرتبه اصلی بحث شده است، ما یک نظریه دوازده بعدی را در مرتبه هشت-مشتق بدست آورده‌ایم که شامل درجات آزادی بوزونی بیشتری نسبت به ابرگرانش یازده بعدی و نیز ابرگرانش نوع IIB است. می‌توان رهیافت دیگری را برگزید و این کاهش ابعادی را در همان دوازده بعد انجام داد، اما انجام این کار به روشی هموردا در دوازده بعد امکانپذیر نیست. درنتیجه این فرمول‌بندی از نظریه میدان در دوازده بعد تنها همووردایی یازده و ده بعدی را در بر دارد.

به طور خلاصه، دو روش برای فرمولبندی نظریه داریم، یک نظریه دوازده بعدی هموردا با درجات آزادی اضافی یا یک نظریه دوازده بعدی ناهموردا با درجات آزادی صحیح. در این مقاله رهیافت اول را برگزیده‌ایم.

همچنین می‌توان جفت‌شدگی‌های شامل دیلتون را با استفاده از رهیافت معرفی شده در این مقاله یافت. جواب‌های شامل برین و نیز کاربردها در کیهانشناسی از جمله دیگر کاربردها می‌باشند.

مرجع‌ها

[1] E. Cremmer, B. Julia and J. Scherk, Phys. Lett. B **76**, 409 (1978) [Phys. Lett. 76B, 409 (1978)]. doi:10.1016/0370-2693(78)90894-8

[2] E. Witten, Nucl. Phys. B **443**, 85 (1995) doi:10.1016/0550-3213(95)00158-O [hep-th/9503124].

[3] C. Vafa, Nucl. Phys. B **469**, 403 (1996) doi:10.1016/0550-3213(96)00172-1 [hep-th/9602022].

[4] H. R. Bakhtiarizadeh, Class. Quant. Grav. **36**, no. 3, 035001 (2019) doi:10.1088/1361-6382/aaf86e [arXiv:1806.01160 [hep-th]].

[5] N. Khviengia, Z. Khviengia, H. Lu and C. N. Pope, Class. Quant. Grav. **15**, 759 (1998) doi:10.1088/0264-9381/15/4/005 [hep-th/9703012].

[6] G. Policastro and D. Tsimpis, Class. Quant. Grav. **23**, 4753 (2006) doi:10.1088/0264-9381/23/14/012 [hep-th/0603165].

[7] M. R. Garousi, JHEP **1306**, 030 (2013) doi:10.1007/JHEP06(2013)030 [arXiv:1302.7275 [hep-th]].

[8] H. R. Bakhtiarizadeh and M. R. Garousi, Nucl. Phys. B **884**, 408 (2014) doi:10.1016/j.nuclphysb.2014.05.002 [arXiv:1312.4703 [hep-th]].

[9] H. R. Bakhtiarizadeh, Eur. Phys. J. C **77**, no. 12, 823 (2017) doi:10.1140/epjc/s10052-017-5391-7 [arXiv:1708.02805 [hep-th]].

[10] D. J. Gross and J. H. Sloan, Nucl. Phys. B **291**, 41 (1987). doi:10.1016/0550-3213(87)90465-2

[11] K. Peeters, J. Plefka and S. Stern, JHEP **0508**, 095 (2005) doi:10.1088/1126-6708/2005/08/095 [hep-th/0507178].

[12] H. R. Bakhtiarizadeh, Eur. Phys. J. C **78**, no. 8, 686 (2018) doi:10.1140/epjc/s10052-018-6152-y [arXiv:1711.11313 [hep-th]].

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

خواص نوری نانوساختار فلز-بلور مایع -فلز

رحیمی، حامد ؛ کریمی ، محمد جواد

دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی شیراز ، شیراز

چکیده

در این مقاله خواص نوری نانوساختار فلز-بلور مایع-فلز برای دو فلز نقره و آلمینیوم بررسی شده است. ضریب شکست از معادلات درود-لورنتس بدست آمده است و خواص نوری با استفاده از روش اجزای محدود شبیه سازی شده است. نتایج نشان می دهد که بیشینه جذب زمانی اتفاق می افتد که ساختار شامل دو صفحه فلزی باشد؛ صفحه فلزی پایینی کاملا تخت و صفحه فلزی بالایی بصورت قرص های فلزی. همچنین نتایج نشان می دهد که ساختار مبتنی بر فلز آلمینیوم جذب و پهنای باند بیشتری نسبت به ساختار شامل فلز نقره دارد.

واژه های کلیدی: *خواص نوری، بلور مایع، جذب بالا، روش اجزای محدود .*

Optical properties of metal-liquid crystal-metal nanostructure

Rahimi, Hamed; Karimi, Mohammad Javad

Department of Physics, Shiraz University of Technology, Shiraz.

Abstract

In this paper, the optical properties of metal-liquid crystal-metal nanostructure for two metals, Aluminum and Silver, are investigated. The refractive index of metals is obtained from Drude-Lorentz equations and the optical properties are simulated using finite element method. The results show that the highest adsorption occurs when the structure consists of two metal plates; the lower metal plate is completely flat and the upper metal plate is in the form of metal tablets. The results also show that the structure based on Aluminum metal has more absorption and bandwidth than the structure including Silver metal.

***Keywords**: Optical properties, Liquid crystal, Absorption.*
PACS No: 78, 70.

مقدمه

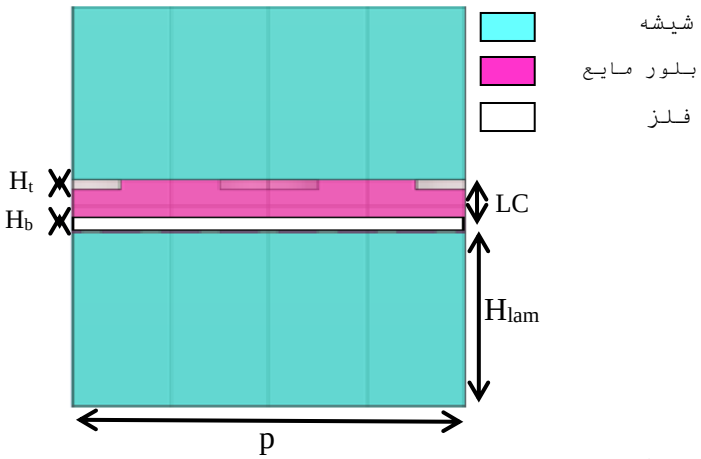
دید رنگی یکی از ویژگی های اساسی درک بصری انسان است. آزمایش های اولیه نشان می دهد که با تجزیه نور سفید می توان رنگ مطلوب را بدست آورد. به طور معمول، چنین طیف مبتنی بر رنگدانه است که نور را در طول موج خاصی جذب می کند. از سوی دیگر می توان با برهمکنش نور با نانوساختارهای خاص که به شدت باعث انتشار نور از طریق ساختار می شوند می توان رنگ ایجاد کرد[۱]. نانو ساختار مبتنی بر فلز که حفره های برای رسیدن نور به بین دو صفحه را دارند نانوساختار پلاسمونی می گویند. چنین نانوساختار پلاسمونی قادر به تغییر رنگ در طیف نور مرئی هستند. فیلترهای پلاسمونی متشکل از نانوساختارها برای جداسازی کامل رنگ در سیستم عبوری و بازتابی مورد استفاده قرار می گیرند. فیلترهای پلاسمونی مبتنی بر نانوساختارها در تولید تصویر رنگی و نمایش آنها در میکروسکوپ کاربرد دارند. همچنین نانو ساختار پلاسمونی در چاپ تصاویر با وضوح بالا مورد استفاده قرار می گیرند که از نظر تفکیک رنگ از فن آوری های چاپ

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

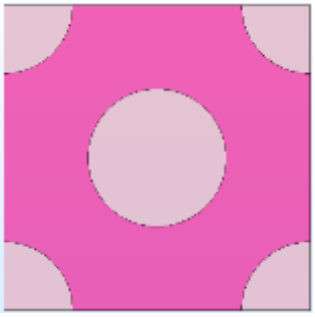
رنگی فعلی فراترند[۲]. همچنین از آنها در فن آوری های ذخیره سازی نوری به عنوان ابزاری دقیق برای تولید تصاویر استریوسکوپی با وضوح فوق العاده بالا استفاده شده است. این فن آوری برای فعال کردن درجه ای از مقاومت در برابر رنگ و به عنوان یک شناساگر رنگ برای کاربردهای بیوسنسور مورد استفاده است[۳]. به طور معمول، فیلتر با دهانه حفره پلاسمونی از نانو سوراخ های دایره ای قابل تنظیم تشکیل شده است برای طول موج مختلف بسیار کارآمد است[٤]. مشخص است که علاوه بر این تغییرات در ویژگی های هندسی، تغییر در محیط موثر دی الکتریک در اطراف فلز می تواند تشدید پلاسمونی را تغییر دهد. این امر باعث می شود آنها برای فناوری های تصویری یا برنامه های تصویربرداری مناسب باشند که در آنها قطبش خاص نور لازم است[٥]. بلور های مایع نمونه ای عالی از رسانه های اطراف سازه های فلزی هستند که از طریق آن می توان قطبش نور را کنترل و تنظیم کرد[٦]. ویال و همکارش به صورت عددی ساختار طلا جایگزیده را در محیط بلور مایع نماتیک بررسی کردند. آنها نشان دادند که تشدید پلاسمونی به فاصله بین نانوذرات برای کلیه جهتهای مولکولهای بلور مایع بسیار حساس است. آنها همچنین نشان دادند که با چرخاندن هدایت کننده ها می توانیم میدان های جایگزیده را کنترل کنیم[۷]. لی و همکارانش روش دیگری را پیشنهاد کردند که باعث جذب کل نور در تک لایه سولفیدمنگنز می شود. نتایج شبیه سازی آنها نشان می دهد که با انتخاب صحیح شعاع سوراخ که به صورت دوره ای در بستر بلور فوتونی قرار دارد، جذب بالا حاصل می شود و محل قرار گیری قله های جذب با تغییر جزئی درشعاع سوراخ ها و ضخامت بستر تنظیم می شود[۸]. یین و همکارانش یک فیلتر قابل تنظیم با بلور پلاسمونی را پیشنهاد کردند و خواص فیلتر آن را به صورت عددی بررسی کردند. این فیلتر شامل یک موجبر فلزی با عایق در ابعاد نانو است که با پر کردن نانوذرات با بلور های مایع می توانیم با کنترل هم ترازی مولکولهای بلور مایع، ضریب شکست موثر نانوذرات را تغییر دهیم تا تنظیم شود. خواص فیلتر تنظیم با جزئیات بیشتر با استفاده از تئوری حالت همزمان و روش محدود-اختلاف زمان محدود تجزیه و تحلیل می شود. نتایج شبیه سازی نشان می دهد که با افزایش ضریب شکست نانو ساختار، طول موج تشدید به صورت خطی تغییر شکل می یابد و بازده تشدید صرف نظر از اتلاف داخلی نانوسیم ها و موجبرها بیش از ٦٥٪ است[۹]. ما در این مقاله ، به مطالعه عددی نانوساختاری ساخته شده با فلزاتی مانند نقره و آلمینیوم که در یک آرایه منظم تحت پوشش بلور های مایع تجاری E44 قرار گرفته است، پرداخته ایم. تولید و شبیه سازی فیلتر های رنگی جذبی با حداقل دو لایه فلز میسر می شود که ما به مطالعه فیلتر های با ساختار فلز- بلور مایع – فلز پرداخته ایم. شبیه سازی ها با استفاده از روش اجزاء محدود انجام می شود که یک ابزار عددی قدرتمند است و به خوبی با مطالعات طیف سنجی سازگار است.

روش و ساختار

ما بلور فوتونی مبتنی بر دو لایه شیشه ای، دو لایه فلزی و یک لایه مرکزی بلور مایع نماتیک E44 را در محیط نرم افزار کامسول که از روش اجزای محدود بهره می برد شبیه سازی کرده ایم. آرایه ها بین دو زیر لایه شیشه ای قرار دارند که در شکل ۱و۲ نشان داده شده اند. در شکل۱ P طول ضلع یاخته مربعی انتخابی از کل سیستم، H_{lam} ضخامت لایه شیشه ای، LC ارتفاع بلور مایع مورد استفاده و H_b, H_t ارتفاع قرص و صفحه فلزی است.



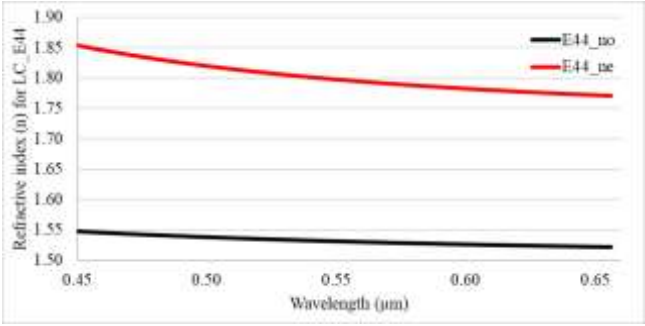
شکل۱ : نمای دو بعدی از صفحه xoz از نانو ساختار فلز-بلورمایع-فلز



شکل۲: نمای دو بعدی از بالای نانو ساختار فلز-بلورمایع-فلز

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

ما شرایط مرزی دوره ای را در جهت x و y و لایه کاملاً همسان (UPML) با جذب مرز در جهت z اتخاذ کرده ایم. در شبیه سازی ها ما از ضریب شکست عادی n_o و ضریب شکست غیرعادی n_e برای بلور مایع نماتیک E44 استفاده کردیم که تفاوت این دو ضریب شکست در شکل ۲ نشان داده شده است.



شکل۳ : ضریب شکست بلور مایع نماتیک E44 در بازه نور مرئی.

همچنین ضریب شکست و ضریب خاموشی فلزات بر اساس معادلات درود-لورنس به صورت زیر محاسبه می شود

$$\varepsilon_{DL}(\omega)=\varepsilon_D(\omega)+\varepsilon_L(\omega) \quad (۱)$$

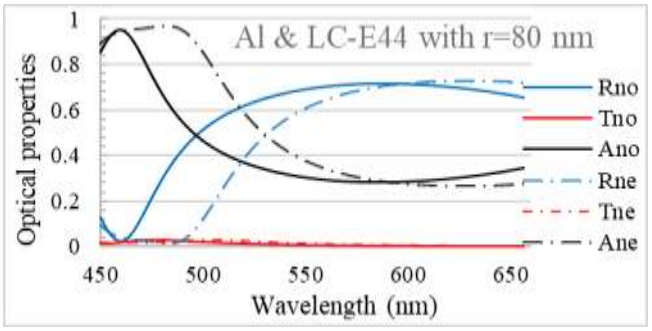
$$\varepsilon_{DL}(\omega)=1-\frac{f_0{\omega_p}^2}{\omega^2-i\omega\Gamma_0}+\sum_{j=1}^{N}\frac{f_j{\omega_p}^2}{{\Omega_j}^2-\omega^2+i\omega\Gamma_j} \quad (۲)$$

که در آن ω_p فرکانس پلاسما، N شمارنده Ω_j نوسانگر فرکانسی و $1/\Gamma_j$ دوره تناوب نوسان است. ضریب شکست عددی مختلط است که دارای بخش حقیقی n و بخش موهومی k می باشد که به قسمت حقیقی ضریب شکست و به قسمت موهومی ضریب خاموشی می گویند[۱۰].

$$\varepsilon(\omega)=n(\omega)+ik(\omega) \quad (۳)$$

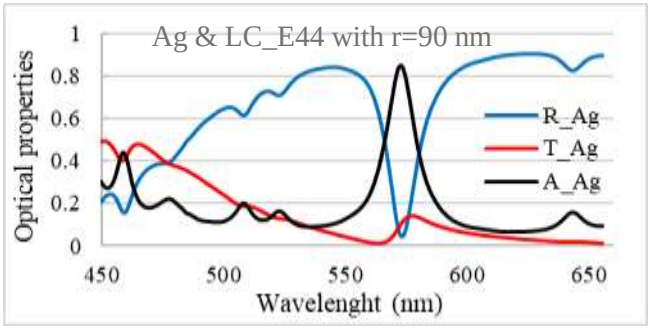
نتایج و تحلیل ها

همانطور که ساختار مورد مطالعه را در شکل ۱ نشان داده شد، ساختار دارای دو لایه دی الکتریکی شیشه ای با ضریب شکست۱/۴۵ است، p برابر با ۴۰۰ نانومتر و یاخته به صورت مربعی در نظر گرفته شده است. ارتفاع شیشه، ارتفاع بهینه H_{lam}=200 nm، فاصله بین دو لایه شیشه ای LC=60 nm از بلور مایع نماتیک پر شده است و دو لایه ۲۰ نانومتری از فلزات نقره و آلمینیوم در این ساختار مورد بررسی قرار گرفته است. شکل٤ خواص نوری برحسب طول موج برای ساختار مبتنی بر آلمینیوم با دو دسته ضریب شکست عادیn_o و غیر عادی n_e، بلور مایع E44 را نشان می دهد. شکل نشان می دهد که استفاده از بلور های مایع با ضریب شکست مختلف باعث تفاوت در میزان جذب می شود. همچنین نتایج نشان می دهد قرص های فلزی به شعاع ۸۰ نانومتر فلز آلمینیوم جذب بالای ۹۰ درصد برای هر دو بلور مایع مورد استفاده را دارا است.



شکل٤ : خواص نوری نانو ساختار که R نشان دهنده بازتاب T عبور و A جذب نور.

خواص نوری نانوساختار مبتنی بر نقره که قرص فلزی به شعاع ۹۰ نانو متر دارد در شکل ۵ نشان داده ایم. این شکل جذب بالای۸۰ درصد همراه با قله ای تیز را نشان می دهد. همچنین بازتاب کل نور بجز طول موج جذب شده نشان دهنده فیلتر جذبی مناسب برای بخش کوچکی از طول موج است .

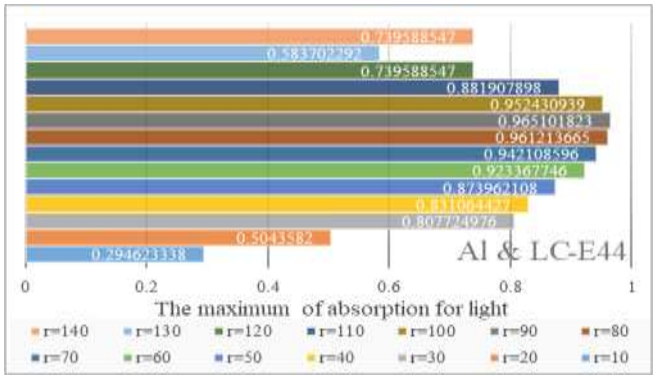


شکل۵ : خواص نوری نانو ساختار فلز نقره و بلور مایع E44.

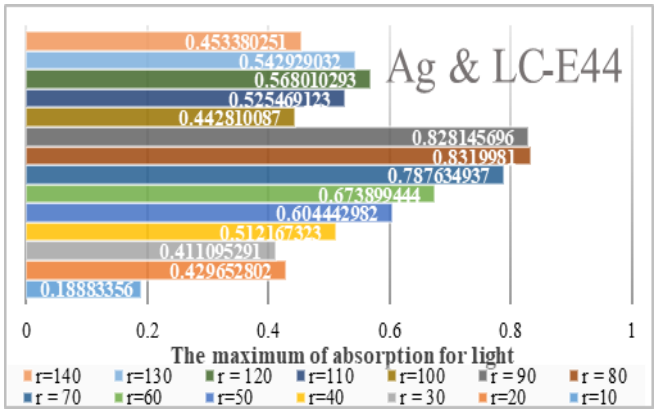
جذب ساختار فلز شامل نقره و آلمینیوم برای قرص های فلزی با شعاع مختلف را مورد بررسی قرار داده ایم که در شکل های ٦ و۷ ارائه گردیده اند. نتایج نشان می دهد جذب بالای ایجاد شده در بین دو صفحه با کم بودن شعاع قرص باعث عبور نور می شود و همچنین زیاد بودن شعاع قرص و نزدیک شدن به صفحه تخت باعث ایجاد بازتاب بالا خواهد شد. بیشترین جذب نور برای ساختار متشکل از فلز آلمینیوم و بلور مایع نماتیک در شعاع ۹۰

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

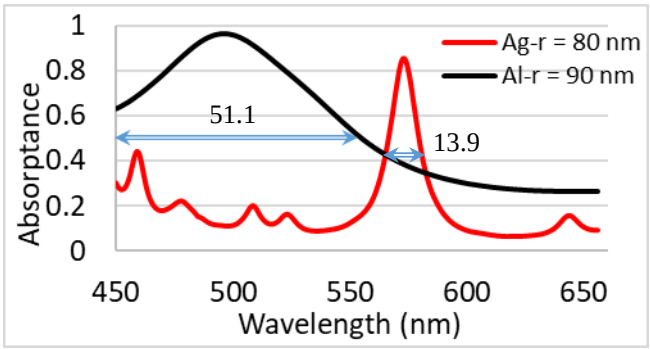
نانومتر و بیشترین جذب برای ساختار مبتنی بر فلز نقره زمانی اتفاق می افتد که قرص بالایی شعاع ۸۰ نانومتر داشته باشد. جذب بالای ۸۰ درصد گستره وسیعی از شعاع های ساختار مبتنی بر آلمینیوم نشان دهنده این است که ساختار شامل آلمینیوم جذب بهتری نسبت به ساختار مبتنی بر نقره دارد.



شکل۶: بیشترین جذب نور در نانوساختار مبتنی بر فلز آلمینیوم همراه با بلور مایع نماتیک E44.



شکل۷: بیشترین جذب نور در نانوساختار مبتنی بر فلز نقره همراه با بلور مایع نماتیک E44.



شکل۸ : بیشترین جذب نور در نانوساختار همراه با پهنا باند موثر.

در شکل۸ بیشینه جذب مربوط به نانو ساختار مبتنی بر آلمینیوم و نقره باهم مقایسه شده است. مقایسه پهنای باند نور جذب شده که مشخصه تفکیک رنگ توسط ساختار است نشان می دهد که ساختار مبتنی بر فلز نقره با وجود جذب کمتر تفکیک رنگ بهتری دارد. بیشترین جذب نور توسط ساختار متشکل از فلز آلمینیوم ۹۶ درصد نور تابیده شده در طول موج ۴۹۶ نانومتر با پهنای باند ۵۱/۱ نانومتر است. همچنین بیشترین جذب نور توسط ساختار ساخته شده با فلز نقره ۸۵ درصد نور تابیده شده در طول موج ۵۷۳ نانومتر با پهنای باند ۱۳/۱ نانومتر است.

نتیجه گیری

در این مقاله جذب نور بلور فوتونی مبتنی بر ساختار شیشه–فلز–بلورمایع–فلز–شیشه را مورد مطالعه قرار گرفته است. نتایج نشان می دهد که بیشترین جذب مربوط به زمانی است که صفحه اول متشکل از قرص با شعاع مناسب و صفحه دوم صفحه ای کاملا تخت باشد. جذب در ساختاری که با فلز آلمینیوم ساخته شده است بیشتر بوده و ساختاری که مبتنی بر فلز نقره است تفکیک رنگ بهتری دارد.

مرجع ها

[1] J. J. Cowan;"Aztec surface-relief volume diffractive structure"; *JOSA. A.* **7**, no. 8 (1990)1529-1544.
[2] S. J. Tan, L. Zhang, D. Zhu, X. M. Goh, Y. M. Wang, K. Kumar, C.W. Qiu and J. K. W. Yang; "Plasmonic Color Palettes for Photorealistic Printing with Aluminum Nanostructures"; *Nano. Lett.* **14**, no. 7 (2014)4023-4029.
[3] P. Zijlstra, J. W. M. Cho and M. Gu; "Five-dimensional optical recording mediated by surface plasmons in gold nanorods"; *Nature.* **459**, no. 7245 (2009)410-413.
[4] J. B. Pendry, L. Martín-Moreno and F. J. Garcia-Vidal; "Mimicking Surface Plasmons with Structured Surfaces"; *Science.* **305**, no. 5685 (2004)847-848.
[5] B. Y. Zheng, Y. Wang, P. Nordlander and N. J. Halas; "Color-selective and CMOS-compatible photodetection based on aluminum plasmonics"; *Adv. Mater.* **26**, no. 36 (2014)6318–6323.
[6] I. Abdulhalim; "Surface plasmon TE and TM waves at the anisotropic film–metal interface"; *Pure Appl. Opt.* **11**, no. 1 (2009)015002
[7] M. Dridi and A. Vial; "FDTD modelling of gold nanoparticle pairs in a nematic liquid crystal cell"; *Appl. Phys.* **43**, no. 41 (2010)415102.
[8] H. Li, Q. Meng, W. Lingling, Z. Xiang, R. Rongze, and H. Jigang; "Total absorption of light in monolayer transition-metal dichalcogenides by critical coupling"; *Optics Express.* **25** (2017)31612-31621.
[9] S. Yin, Y.J. Liu, D. Xiao, H. He, D. Luo, S. Jiang, H. Dai, W. Ji and X.W. Sun; "Liquid-crystal-based tunable plasmonic waveguide filters"; *Appl. Phys.* **51**, no. 23 (2018)235101.
[10] B. Prade, J. Y. Vinet and A. Mysyrowicz; "Guided optical waves in planar heterostructures with negative dielectric constant"; *Phys. Rev.* **24** (1991)13556.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بررسی چگونگی تعلیق مغناطیسی با استفاده از همزن مغناطیسی و مایع گرانرو

مرتضوی ، نیلوفر[1] ؛ ابراهیمی، عقیله[2]

[1] دبیرستان فرزانگان یک تهران ، خیابان سرپرست ، تهران

[2] گروه فیزیک، دانشگاه کاشان ،راوند ، کاشان

چکیده

در این تحقیق با استفاده از همزن مغناطیسی که یکی از ابزارهای استاندارد آزمایشگاهی است، به تعلیق پایدار استیربار دریک مایع گرانرو پرداخته ایم. این تعلیق به سرعت دورانی آهنربا، میزان گرانرو ی ونیروی مقاومت شاره، برآیند گشتاور های وارده به استیر بار و نیروی شناوری بستگی دارد به طوری که با افزایش سرعت همزن، سرعت استیربار کاهش و با افزایش حجم مایع، سرعت استیر بار در هنگام تعلیق کم تر می‌شود.

واژه های کلیدی:*تعلیق، میدان مغناطیسی، سرعت دورانی، گشتاور، نیروی مقاومت شاره، نیروی شناوری.*

How to suspend magnetic levitation using magnetic stirrer and viscos liquid

Mortazavi, Niloofar[1]; Ebrahimy, Aghileh[2]

[1] *Farzanegan high school, Sarparast street, Tehran,*

[2] *Department of Physics, Kashan University, Ravand, Kashan*

Abstract

In this study, using a magnetic stirrer, which is one of the standard laboratory tools, we have reviewed levitation of stir bar in a stable viscous liquid. This suspension depends on the rotational speed of the magnet, viscosity of fluid, drag force, the resultant of torques and the buoyancy force, so that the speed of the stir bar decreases with increasing stirrer speed and decreases by increasing fluid volume.

Keywords: levitation , magnetic filed , rotational speed ,torque ,drag force ,buoyancy force

PACS No.6

مقدمه

تعلیق، روشی برای غلبه ی پایدار بر نیروی جاذبه است. می‌توان جامدات و حتی مایعات را با استفاده از چندین عامل فیزیکی مانند: جت گاز، امواج‌صوتی، تابش نور لیزر، ذرات باردار در میدان الکتریکی متناوب و میدان مغناطیسی معلق کرد[۱]. دو کاربرد اصلی تعلیق مغناطیسی در زندگی امروزی مربوط به حمل و نقل و چرخش یاتاقان است که از این دو کاربرد شاید قطار های مگلو مثال شناخته شده ای باشند[۲]. پیدا کردن روش های ارزان و آسان تعلیق پایدار در حوزه‌های حمل و نقل بدون اصطکاک و ذخیره سازی بدون مخزن در آینده کاربرد گسترده ای خواهد داشت. در سال ۱۸۴۲میلادی ارنشاو[۱] ثابت کرد که تعلیق پایدار اجسام، در یک میدان نیروی استاتیک دفع کننده ویا جذب کننده که در آن نیرو و مسافت از قانون مربع معکوس پیروی می‌کنند، غیرممکن است. نمونه هایی از این سیستم ها، نیروی بین بار الکتریکی،تک قطبی های مغناطیسی و توده ی گرانشی است [۳]. تئوری تاثیرات ارشمیدس[۲] نیز راهی آسان برای دستیابی به جابجایی مواد مغناطیسی ضعیف توسط آهنرباهای معمولی با کمک نیروی شناوری ناشی ازالقای مغناطیسی از محیط اطراف است [٤].

تعلیق با استفاده از همزن مغناطیسی از این لحاظ حائز اهمیت است که همزن مغناطیسی یکی از وسایل استاندارد آزمایشگاهی است که

[۱] Ernshaw

[۲] magneto-Archemides effect

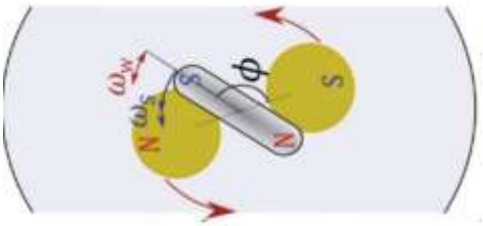
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد

http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

در بیشتر آزمایشگاه ها در دسترس است . با استفاده از استیربار که میله ی همزن مغناطیسی و از جنس آهنربا است، می‌توان در یک مایع گرانرو از چرخشی پایدار به تعادل نوسانی پایدار رسید که در این تحقیق مورد بررسی قرار گرفته است.

همزن مغناطیسی از اختراعش تاکنون تغییرات بسیار جزئی داشته است. در سال ۱۹٤۲ ساده ترین مدل آن شامل دو آهنربای میله ای بود که موازی و بالای یکدیگر قرار گرفته بودند. آهنربایی که با موتور الکتریکی چرخش می‌کرد آهنربای متحرک و دیگری که در مایع قرار داشت استیر بار نامیده می‌شد.

در همزن های مغناطیسی آزمایشگاهی، امکان تغییر سرعت دورانی آهنربای متحرک وجود دارد. در این مقاله سرعت دورانی آهنربای متحرک واستیر بار به ترتیب ω_d و ω_{st} در نظر گرفته شده است. برای انجام آزمایش، استیر بار را درون بشری شیشه ای قرار می‌دهیم که این کار موجب حداقل کردن تاثیرآن بر روی نیروی مغناطیسی می‌شود. سپس داخل آن مایعی گرانرو ریخته و بالای آهنربای متحرک قرار دهیم. در ابتدا که ω_d=0 است، زاویه فاز بین قطب های هم نام $\phi = ۱۸۰$ است. با افزایش سرعت،استیر بار عمود بر بلند ترین محورش، هماهنگ با آهنربای متحرک شروع به چرخش می‌کند که در نتیجه $\omega_d = \omega_{st}$ است. اما در شرایطی خاص که به گشتاور های استیر بار، سرعت استیربار و گرانروی مایع بستگی دارد، این زاویه فاز کمتر از ۹۰ درجه شده، نیروی دافعه‌ی مغناطیسی بر جاذبه، غلبه و استیر بار شروع به بالا رفتن می‌کند.



شکل ۱: زاویه فاز بین آهنربای متحرک و استیربار نمایش داده شده است.

به طور کلی، استیر بار دو حرکت دورانی[۳] و الاکلنگی[٤] دارد که اگر سرعت دورانی حاصل از آن ها را به ترتیب ω_s و ω_w بنامیم، سرعت کلی استیربار طبق رابطه ی زیر داده می‌شود:

$$\omega_t = \omega_s + \omega_w \qquad (۱)$$

از آن جایی که حرکت الاکلنگی را می‌توان، حرکتی سینوسی با دامنه های متفاوت در نظر گرفت، رابطه ی زاویه بر حسب زمان، طبق رابطه‌ی زیر داده می‌شود:

$$\theta = \omega_s + A\sin(\omega_w t) \qquad (۲)$$

A ، متوسط دامنه های ممکن و یا به عبارتی آستانه می‌باشد.

اگر استیر بار را یک استوانه فرض کنیم، معادله‌ی حرکت آن مطابق قانون دوم نیوتن استخراج می‌شود [5] :

$$I\ddot{\theta} + D\dot{\theta} - M(z)\sin(\theta - \omega_d t) = 0 \qquad (۳)$$

که در این معادله $\ddot{\theta}$ شتاب زاویه ای، $\dot{\theta}$ سرعت زاویه ای، I ممان اینرسی، D ضریبی است برای نیروی مقاومت شاره و M(z) ضریب مغناطیسی آهنربا است.

نیرو ها

در این تحقیق دو نیروی مقاومت شاره و نیروی مغناطیسی حائز اهمیت هستند. نیروی مغناطیسی نیرویی است که آهنربای متحرک به استیربار وارد می‌کند و باعث حرکت آن می‌شود و نیروی مقاومت شاره نیز طبق فرمول زیر محاسبه می‌شود:

$$D = -bv \qquad (۳)$$

این رابطه نیروی مقاومت شاره را بر حسب سرعت بیان می‌کند که b ضریبی متناسب با چگالی، ضریب مقاومت شاره و سطح مقطع جسم است.

[۳]Spinning

[٤]waggling

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

به علت شباهت شکل استیربار به نوعی باکتری میله ای می‌توان نیروی مقاومت شاره برای استیر بار را از فرمول ذیل محاسبه نمود [۵و۶]:

$$D = 8\pi\gamma K\mu L^3 \qquad (۵)$$

که در این فرمول K عاملی هندسی و برابر با ۰,۲۱۲ است (معادله ی ۱۸ مرجع [۶]) γ افزایش نیروی مقاومت شاره به علت نزدیکی به کف ظرف را در نظر می‌گیرد،L نصف طول استیر بار و μ گرانروی شاره است.

گشتاور ها

بر اثر چرخش استیر بار در مایع گرانرو نیروی مقاومت شاره به جسم وارد می‌شود که باعث ایجاد گشتاوری بر خلاف جهت گشتاور حاصل از نیروی مغناطیسی می‌شود.

اختلاف این گشتاور ها باعث ایجاد زاویه فازمی‌شود. با افزایش سرعت آهنربای متحرک، این اختلاف بیش تر و در زاویه فاز کمتر از نود درجه نیروی دافعه‌ی مغناطیسی، استیر بار را بالا می‌برد.

گشتاور کل طبق رابطه ی زیر داده می‌شود :

$$\sum torque = F_M \times r - F_D \times r \qquad (۶)$$

F_M نیروی مغناطیسی، F_D نیروی مقاومت شاره و r نصف طول استیر بار است.

پس از آن که نیروی دافعه‌ی مغناطیسی به استیربار وارد شد، استیر بار شروع به بالا رفتن می‌کند و در همین حین آهنربای متحرک به چرخش خود ادامه می‌دهد تا جایی که زاویه فاز مضربی از ۱۸۰ شده واستیر بار و آهنربای متحرک دوباره به چرخش همزمان خود ادامه خواهند داد.

عاملی که مانع از سقوط استیر بار می‌شود، نیروی شناوری حاصل از شاره است.

میزان ارتفاعی که استیربار از کف ظرف می‌تواند بگیرد تابعی از چگالی جسم، گرانروی شاره، سرعت دورانی جسم و طول آن است که با استفاده از تئوری پی باکینگهام[۵] می‌توان ارتفاع را از رابطه ی زیر به دست آورد:

$$h = \frac{\mu l \omega \ddot{\theta}}{pgh_{liq} + p_0} \qquad (۷)$$

p_0 فشار هوا، ρgh فشار مایعی به ارتفاع h ، μ گرانروی مایع ، ω سرعت دورانی استیربار ، L طول استیربار و $\ddot{\theta}$ شتاب زاویه ای استیربار است که در تحقیقات بعدی ارتفاع نیز اندازه گیری خواهد شد.

آزمایش ها

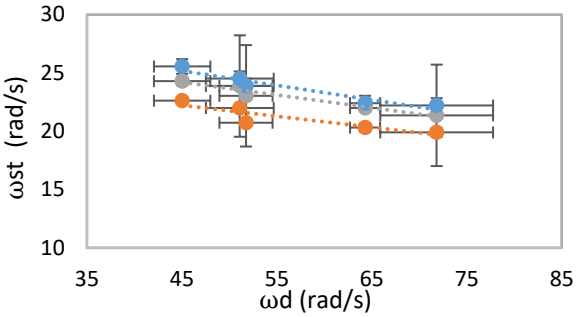
برای انجام آزمایشات، بشری شیشه ای به حجم ۲۵۰ میلی لیتر را وسط صفحه ی همزن مغناطیسی قرارداده و سعی کردیم در چهار حجم مختلف ۵۰، ۶۰، ۷۰ و ۸۰ میلی لیتری از مایعی‌گرانرو، استیر بار هایی به طول های ۲cm، ۳,۱cm، ۳,۷cm را معلق کنیم. برای این کار استیر بار را به موازات و بالای آهنربای متحرک در مایع گرانرو قرار داده و سرعت آهنربای متحرک را به تدریج، برای کاهش تاثیرات اینرسی، افزایش دادیم تا معلق شود. این عمل را برای هر استیر بار، در چهار حجم مختلف انجام دادیم و درنهایت کوچک ترین استیربار در حجم های۵۰ و۶۰ و۷۰ میلی‌لیتر در مایع گرانرو معلق شد و دیگر استیر بار ها در هیچ شرایطی معلق نشدند.

سرعتی که استیر بار شروع به تعلیق می‌کند را سرعت بحرانی می-نامیم. برای به دست آوردن سرعت بحرانی استیر بار تعداد دوران استیر بار در مایع گرانرو را شمارش کردیم ونیز با قرار دادن استیر بار روی صفحه ی همزن و شمارش تعداد دوران استیر بار دراین حالت با تقریب خوبی به سرعت دورانی آهنربای متحرک رسیدیم.

برای تمامی حجم ها، نمودار سرعت استیر بار را پس از تعلیق در چهار سرعت مختلف آهنربای متحرک رسم کردیم که طبق نمودار ۱ همگی سیر نزولی داشتند.

[۵] Buckingham pi

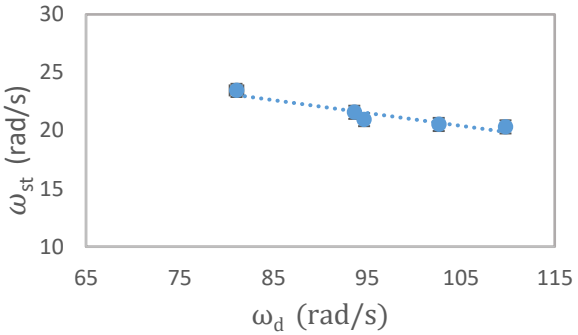
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



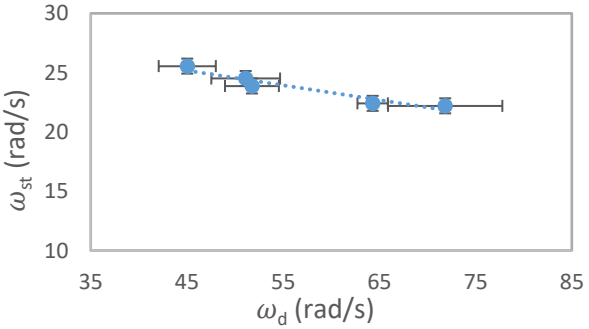
شکل۱: نمودار سرعت استیربار بر حسب آهنربای متحرک در حجم های مختلف که رنگ نارنجی ۵۰ میلی‌لیتر و رنگ طوسی ۶۰ میلی‌لیتر و رنگ آبی ۵۰ میلی لیتر است.

در نمودار بالا اولین نقطه ی هر نمودار ، سرعت بحرانی استیر بار است که برای هر حجم متفاوت است.

همچنین نمودار ۲و۳ ، سرعت های استیربار را بر حسب سرعت آهنربای متحرک در دو شاره با حجم یکسان نشان می‌دهند که سرعت های بحرانی در این دو نمودار به علت متفاوت بودن گرانروی و تاثیر آن بر مقاومت شاره طبق فرمول ۶ نیز متفاوت است.



شکل۲: نمودارسرعت استیربار برحسب آهنربای متحرک در حجم ۵۰ میلی‌لیتر درمایع ۱



شکل۳: نمودار سرعت استیربار برحسب سرعت آهنربای متحرک در حجم ۵۰ میلی لیتر درمایع ۲

سیر نزولی شکل های ۱، ۲و۳ در سازگاری کامل با تئوری می باشند به طوری که با فرمول (٤) می‌توان بیان کرد که با افزایش سرعت آهنربای متحرک، سرعت استیر بار به علت افزایش نیروی مقاومت شاره کاهش می‌یابد.

نتیجه گیری

در این مقاله فهمیدیم که تعلیق به کمک همزن مغناطیسی به علت اختلاف گشتاور های نیروی مقاومت شاره و نیروی مغناطیسی اتفاق می افتد، به طوری که در زاویه فاز کمتر از نود درجه دافعه‌ی مغناطیسی استیر بار را بالا می‌برد که با توجه به شکل ۱ می‌توان نتیجه گرفت که با افزایش حجم مایع گرانرو، به علت افزایش فشارمایع، سرعت بحرانی کاهش می‌یابد .

علاوه بر آن طبق دو نمودار با ۲و۳، با در نظر گرفتن این که گرانروی مایع ۲ بیش‌تراز مایع ۱ است، می‌توان گفت که هرچه گرانروی بیش تراباشد در سرعت های بالاتری از آهنربای متحرک، استیر بار شروع به تعلیق می‌کند که علت آن را می‌شود با استفاده از فرمول (۳) این گونه بیان کرد که با افزایش ضریب D بقیه ی پارامتر ها نیز بایستی افزایش یابند و با فرض ثابت دانستن ضریب نیروی مغناطیسی (M(z)) ، می‌توان نتیجه گرفت که سرعت آهنربای متحرک نیز افزایش می‌یابد .

مرجع ها

[۱] Brandt, E.H., 1989. Levitation in physics. *Science*, *243*(4889), pp.349-355

[۲] Bleuler, H., 1992. A survey of magnetic levitation and magnetic bearing types. *JSME international ournal. Ser. 3, Vibration, control engineering, engineering for industry*, *35*(3), pp.335-342.

[۳] Earnshaw, S., 1842. On the nature of the molecular forces. In *Cambridge Philosophical Society* (Vol. 7, pp. 97-112).

[٤] Hirota, N., Ikezoe, Y., Uetake, H., Kaihatsu, T., Takayama, T. and Kitazawa, K., 2002. Magneto-Archimedes levitation and its application. RIKEN review, pp.159-161.

[٥] Baldwin, K.A., de Fouchier, J.B., Atkinson, P.S., Hill, R.J.A., Swift, M.R. and Fairhurst, D.J., 2018. Magnetic levitation stabilized by streaming fluid flows. Physical review letters, 121(6), p.064502.

[٦] Kong, D., Lin, W., Pan, Y. and Zhang, K., 2014. Swimming motion of rod-shaped magnetotactic bacteria: the effects of shape and growing magnetic moment. *Frontiers in microbiology*, *5*, p.8.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بررسی اثر کواندا در شاره در حال عبور از سطوح کوژ

حاجی پور، پریا[1]؛ احمد جواهری، پارمیدا سادات [2]؛ ابراهیمی،عقیله سادات[3]

[1,2] دبیرستان دخترانه فرزانگان یک ، خیابان ایتالیا ، تهران

[۳] دانشکده فیزیک، دانشگاه کاشان، کاشان

چکیده

در این تحقیق به بررسی اثر کواندا در شاره درحال عبور از یک سطح کوژ پرداخته‌ایم. طبق آزمایش شاره تمایل به خمیدگی حول سطح کوژ را دارد که با تئوری نیز سازگار است. در این تحقیق، شاره در سه مرحله مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج آزمایشات نشان می‌دهد که پارامترهایی همچون قطر مانع و فاصله‌ی دستگاه منفی بوده و از حداکثر فاصله شمع و زاویه جدایی می‌کاهد. اما تاثیر سرعت و قدرت دستگاه دمنده و نسبت عرض دمنده به شعاع مانع مثبت بوده و موجب افزایش پارامترهای ذکر شده می‌شود. که با شبیه سازی‌های انجام شده توسط نرم افزار کامسول، سازگاری کامل دارد.

واژه های کلیدی : *اثر کواندا، عدد رینولدز، شاره جتی ، قانون برنولی، فشار، معادله پیوستگی*

A Study On coanda effect in the fluid passing through a curved wall

Hajipour, Paria[1]; Ahmad Javaheri, Parmida sadat [2]; Ebrahaimi,Aghile sadat[3]

[1,2] Farzanegan 1 Highschool , Tehran

[3] Physics Faculty, Kashan University

Abstract

This research is about Coanda effect on fluid moving across a curved wall. On the basis of this examination, the fluid has tendency to be curved around the curved wall that is compatible with the theory. In this study, the fluid is analyzed in three steps. The results show that parameters like the blower's distance from the curved wall and the curved wall's radius have negative effect on the maximum distance of the candle and separation angle but the effect of speed and power of the blower and the ratio of the width of the blower to the radius of the curved wall are positive and will increase the above parameters that is completely compatible with the simulations done by Camsol software.

Keywords: *coanda effect, Reynolds number, fluid, bernoulli's law, pressure, equation of continuity*
PACS No.6

مقدمه

اثر کواندا پدیده‌ای است که برای اولین بار در سال ۱۹۱۱ توسط آن ماری کواندا شناخته شد.

اثر کواندا تمایل سیالات را به چسبندگی و خم شدن اطراف یک سطح کوژ و پیوسته ماندن آن سیال بر سطح را بررسی می‌کند.

این پدیده بارها توسط اساتید بسیاری مورد توجه و آزمایش قرار گرفته است. از جمله نیومن[1] که به صورت آزمایشگاهی زاویه‌ی جدایی شاره را در حالت دو بعدی برای گازهای کامل در اعداد رینولدز بالا و نسبت کوچک عرض دمنده به شعاع مانع $(\frac{b}{a})$ اندازه‌گیری کرده است.[1] این آزمایش بعدها توسط فیت[2] و رسک[3] هم تکرار شده است.[2 و 3] فیت بعد ها با الهام گرفتن از نیومن به طور آزمایشگاهی سرعت، فشار بدنه و موقعیت جدایی شاره را بررسی و به نتایج قابل تاملی دست یافت. همچنین بعدها بردشاو[4] [4]، گویتن[5] [5]، نئوئندورف و وایگنسکی[6] [6]، گلیستال[7] [7] و بسیاری دیگر روی این مسئله تحقیقاتی انجام داده‌اند. که در این تحقیق نیز به بررسی اثر کواندا در شاره های عبوری از سطح کوژ پرداخته‌ایم و متغیرهایی همچون زاویه جدایی و حداکثر فاصله شمع

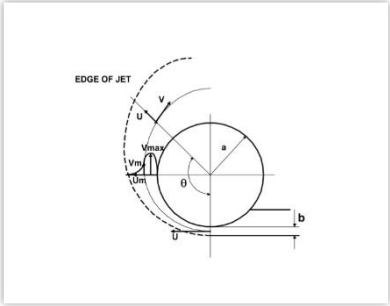
[1] Newman
[2] Feet
[3] Rask
[4] Bradshaw
[5] Guitton
[6] Neoendorf & Wygnanski
[7] Giles et al

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

را در اثر کواندا مورد بررسی قرار داده‌ایم. و با شبیه سازی این پدیده در نرم افزار کامسول به نتایج همسو با تئوری دست یافته ایم.

بررسی تئوری اثر کواندا:

اثر کواندا در واقع پدیده‌ای است که مطابق آن شاره‌های جتی هنگامی که از نزدیکی یک سطح کوژ می گذرند، به سمت آن سطح متمایل می شوند. علت اصلی این پدیده، توازن نیروهای وارد شده به شاره می‌باشد.



شکل ۱. نمای کلی از ستاپ آزمایش طراحی شده در این تحقیق را نمایش می‌دهد.[1]

همانطور که در شکل ۱ نمایش داده شده است، هنگامی که شاره‌ی جتی دمیده می‌شود، هنگام گذشتن از کنار سطح کوژ (مانع)، دچار کاهش سطح مقطع شده و طبق اصل برنولی این موجب افزایش بیشتر سرعت شاره می‌شود. با افزایش سرعت شاره، فشار آن طبق اصل برنولی کاهش یافته و کمتر از فشار هوای اطراف می‌شود. نابرابری فشار بین این دو ناحیه، ایجاد نیرویی از هوای اطراف به سمت جت می کند و آن را به سطح خمیده نزدیک می‌کند. برخورد و نزدیکی شاره‌ی جتی با سطح خمیده، باعث کاهش سرعت جت و در نتیجه‌ی معادله‌ی پیوستگی موجب افزایش سطح مقطع آن می‌شود. همچنین، به فشار شاره‌ی جتی می‌افزاید. این افزایش فشار،تا برابر شدن با فشار هوای اطراف به طول می‌انجامد و برابر شدن فشار جت و هوای اطراف،باعث جدا شدن جت از مانع می-شود.

یکی از مهم ترین پارامتر های اندازه گیری عدد رینولدز است که به شکل زیر محاسبه می‌شود:

$$\mathrm{Re} = \frac{uc}{v} \qquad (۱)$$

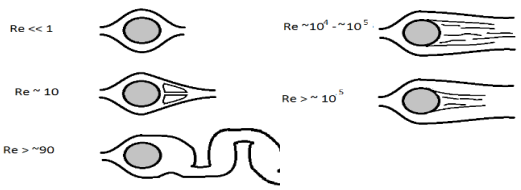
که در آن u برابر سرعت شاره، c برابر با طول وتری که در دایره (مانع) است که ابتدای آن محل برخورد شاره و انتهای آن محل جدایی است وv برابر ویسکوزیته جنبشی شاره است.که هنگام دمیدن از مرکز مانع، طول وتر c برابر قطر مانع خواهد شد. عدد رینولدز محاسبه شده در آزمایش های این مقاله همواره بیش تر از 1.1×10^4 بوده و از حد بحرانی شاره آشفته نمی‌گذرد. نیومن با انجام آزمایش‌های متعدد در اعداد رینولدز بالای 10^4 و نسبت عرض دمنده به شعاع مانع کوچک، زاویه جدایی را طبق رابطه۳ محاسبه کرد. همچنین به تاثیرگذار نبودن جنس سطح در اعداد رینولدز اشاره کرده است.[1] ۲:

$$\theta_{sep} = 245 - 391.\frac{\frac{b}{a}}{1+\frac{9}{8}.\frac{b}{a}} \qquad (۲)$$

که در آن a برابر شعاع مانع و b برابر با عرض دمنده است.

پارامترها و متغیرها، شبیه سازی و نحوه انجام آزمایش‌ها:

در این تحقیق، شمعی در مقابل یک مانع کوژ قرار داده‌ایم و سپس از پشت مانع به آن توسط جت هوا دمیده ایم، طبق اثر کواندا، شاره به سمت سطح کوژ منحرف و باعث خاموش شدن شمع می‌شود. در نتیجه می‌توان از شمع برای تشخیص شاره در مکان‌های مختلف استفاده کرد. علت خاموش شدن شمع ، کاهش فشار در اثر سرعت بالای جت و در نتیجه کاهش اکسیژن خواهد بود. یکی از موانع استفاده از شمع، ناحیه‌ی احیا[8]است که در واقع به ناحیه‌ای گفته می‌شود که به دلیل جریان‌های متفاوت هوا در پشت بطری، هوا در آن جا جریان ندارد و شمع در آن ناحیه خاموش نخواهد شد. اما با توجه به اینکه آزمایش‌های این مقاله، در اعداد رینولدز بالای 1.1×10^4 انجام شده است، ناحیه‌ی احیا دیده نمی‌شود.

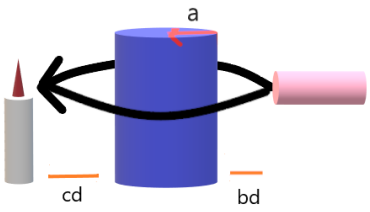


شکل ۲: برحسب رفتار شاره در اعداد رینولدز بالا که نشان می‌دهد ناحیه احیا در بازه‌ی این تحقیق وجود ندارد.

[8] Wake area

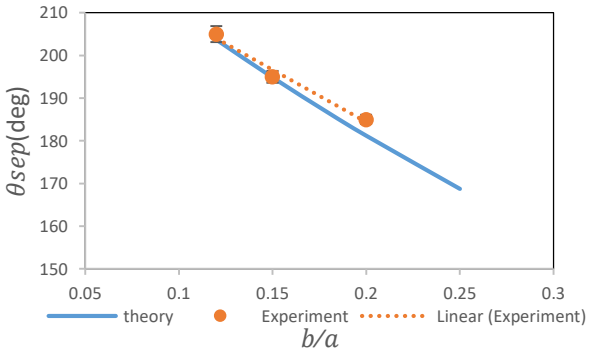
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

پارامترهای اندازه گیری شده در آزمایش‌ها، عدد رینولدز (Re)، زاویه جدایی شاره θ_{sep} (شکل ۱) و حداکثر فاصله ی شمع می‌باشد. متغیرها: نسبت $\frac{b}{a}$ عرض دمنده به شعاع مانع هنگام دمیدن از گوشه مانع و فاصله bd و سرعت دستگاه هنگام دمیدن از مرکز وشعاع مانع a هنگام دمیدن از مرکز مانع. همچنین برای فهم بهتر پدیده، شبیه سازی کامپیوتری با استفاده از برنامه‌ی کامسول‌مولتی-فیزیکس[9]نیز انجام شده است. لازم به ذکر است که به دلیل محدودیت کدها و اجرای آنها، شعاع مانع و سرعت دمنده در شبیه سازی ها کمتر از ازمایش‌ها بوده و عدد رینولدز در آنها کمتر می-باشد. به همین دلیل در آنها ناحیه‌ی احیا دیده می‌شود. لازم به ذکر است که در تمام پارامترهای اندازه‌گیری شده، هر آزمایش ۵ بار تکرار و خطاها با استفاده از انحراف معیار اندازه گیری شده است. همچنین برای ایجاد خطای کمتر دستگاه دمنده، هم ارتفاع با شمع بوده و دقیقا رو به روی آن روشن شده است.



شکل ۳: شماتیک ستاپ آزمایش و اندازه ها را در این تحقیق نشان می‌دهد

نتایج آزمایش‌ها و شبیه‌سازی‌ها:



شکل ٤: نمودار تغییرات زاویه جدایی برحسب تغییرات نسبت عرض دمنده به شعاع مانع هنگام دمیدن از گوشه را نشان می‌دهد. خطای آزمایش‌ها به دلیل کوچک بودن دیده نمی‌شود.

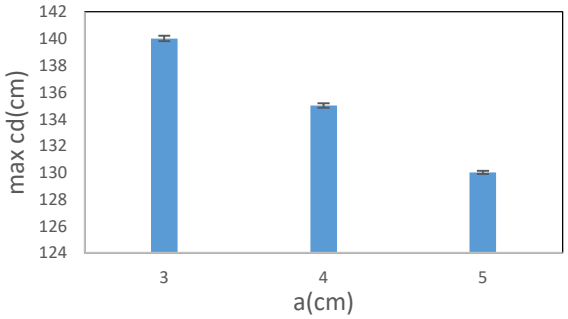
معادله های مربوط به روند رشد:

($R^2 = 0.9796$ و $y = -244.9x + 233.37$)

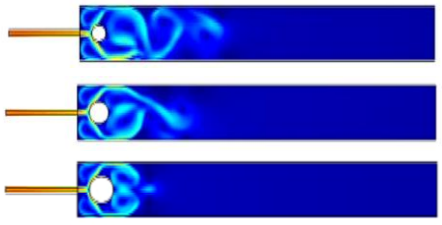
زاویه جدایی شاره طبق شکل ٤ نمایش داده می شود.که در آن دمنده در گوشه ی مانع قرار دارد که نشان می‌دهد با افزایش $\frac{b}{a}$ زاویه جدایی کاهش می‌یابد. و با تئوری همخوانی دارد (فرمول۲).

با تغییر دیگر متغیرها همچون شعاع مانع، فاصله دمنده و سرعت جت ورودی، پارامتر حداکثر فاصله شمع اندازه‌گیری شده است.

حداکثر فاصله شمع طبق شکل ۵ داده می‌شودو هنگام افزایش شعاع مانع طبق شکل ۳، حداکثر فاصله شمع دستخوش کاهش می‌شود. زیرا با افزایش شعاع، سطح کوژ به مانعی همچون دیوار برای شاره شبیه می‌شود و از چرخش بیشتر جلوگیری می‌کند و سرعت آن را کاهش می‌دهد. در نتیجه باز هم شاره کاهش فشار کمتری خواهد داشت. این نتایج طبق شکل ٦ در شبیه سازی‌ها هم مشاهده شده و حداکثر فاصله کاهش یافته است.



شکل ۵: نمودار تغییرات حداکثر فاصله‌ی شمع برحسب تغییرات شعاع مانع هنگام دمیدن ار مرکز را نشان می‌دهد.



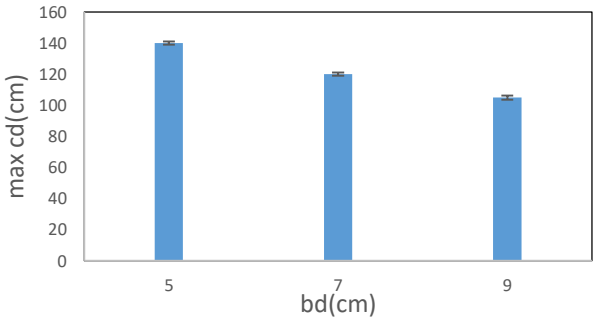
شکل ٦: شبیه‌سازی حرکت شاره با افزایش قطر مانع از بالا به پایین را نشان می‌دهد.

فاصله دمنده نیز مانند دو متغیر قبل تاثیر منفی داشته و با افزایش آن، حداکثر فاصله شمع کاهش یافته است. زیرا با افزایش فاصله دمنده طبق شکل ۳، شاره فاصله بیشتری را تا مانع طی کرده و کاهش سرعت بیشتری خواهد داشت. در نتیجه کاهش در روند کاهش فشار

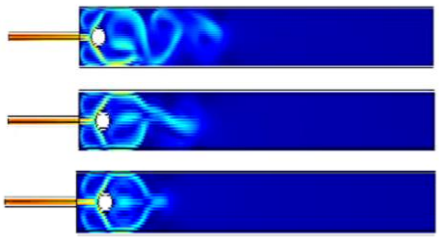
[9] Comsol Multiphysics

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

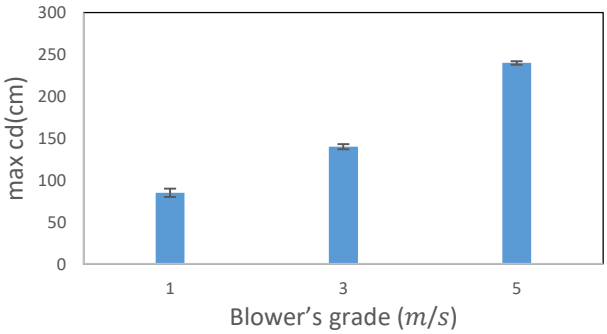
ایجاد خواهد شد. این نتایج هم طبق شکل ۸ در شبیه سازی‌ها مشاهده شده است.



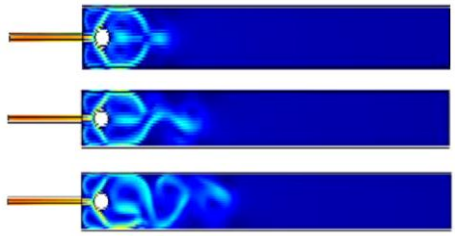
شکل ۷: نمودار تغییرات حداکثر فاصله‌ی شمع برحسب تغییرات فاصله دمنده هنگام دمیدن ار مرکز را نشان می‌دهد.



شکل ۸: شبیه‌سازی حرکت شاره با افزایش فاصله‌ی دمنده از بالا به پایین را نشان می‌دهد.



شکل ۹: نمودار تغییرات حداکثر فاصله‌ی شمع برحسب تغییرات سرعت دمنده هنگام دمیدن ار مرکز را نشان می‌دهد.



شکل ۱۰: شبیه‌سازی حرکت شاره با افزایش قدرت دمنده از بالا به پایین را نشان می‌دهد.

سرعت وقدرت دمنده بر خلاف دو متغیر قبل طبق شکل ۹ تاثیر مثبت داشته و حداکثر فاصله شمع را افزایش داده است. زیرا با افزایش سرعت ورودی، کاهش فشار بیشتری رخ خواهد داد. تاثیر مثبت این متغیر نیز طبق شکل ۱۰ در شبیه‌سازی‌ها که از بالا به پایین سرعت دمنده افزایش یافته است نیز مشاهده شده است.

نتیجه گیری

در این تحقیق، پارامترهای مختلفی همچون فاصله شمع و زاویه جدایی بررسی شد. با افزایش نسبت عرض دمنده به شعاع مانع، هنگام دمیدن از گوشه، طبق شکل ٤ زاویه جدایی کاهش پیدا می‌کند. همچنین برای دقت بیشتر و اطمینان از درستی نتایج، با استفاده از برنامه‌ی کامسول، شبیه سازی انجام شده‌است . در نتیجه‌ی آن ها، تاثیر متغیرهایی همچون قطر مانع و فاصله ی دستگاه، طبق شکل‌های ۵و۷ و شکل‌های شبیه‌سازی ٦و۸ منفی بوده و از حداکثر فاصله شمع و زاویه جدایی می‌کاهد. اما تاثیر سرعت و قدرت دستگاه دمنده، طبق شکل ۹ و شکل ۱۰ مثبت بوده و موجب افزایش پارامترهای حداکثر فاصله شمع و زاویه جدایی می‌شود.

مرجع‌ها

[1] Newman, B. G., "The Deflexion of Plane Jets by Adjacent Boundaries- Coanda Effect," Boundary Layer and Flow Control, edited by Lachmann, G. V., Vol. 1, Pergamon Press, Oxford, 1961, pp. 232-264
[2] Fekete, G. I., "Coanda Flow of a Two-Dimensional Wall Jet on the Outside of a Circular Cylinder," Tech. Rept. 63-11, Mechanical Engineering Research Laboratories, McGill University, 1963
[3] Wille, R., and Fernholz, H., "Report on the First European Mechanics Colloquium", Journal of Fluid Mechanics, Vol. 23, 1965, pp. 801-819.
[4] Bradshaw, P., "Effects of Streamline Curvature on Turbulent Flow," AGARDograph, 1990, AGARDograph AG-169.
[5] Guitton, D. E., and Newman, B. G., "Self-Preserving Turbulent Wall Jets over Convex Surfaces," Journal of Fluid Mechanics, Vol. 81, No. 1, 1977, pp. 155-185.
[6] Neuendorf, R., and Wygnanski, I., "On a Turbulent Wall Jet Flowing over a Circular Cylinder," Journal of Fluid Mechanics, Vol. 381, 1999, pp. 1-25.
[7] Giles, J. A., Hays, A. P., and Sawyer, R. A., "Turbulent Wall Jets on Logarithmic Spiral Surfaces," The Aeronautical Quarterly, 1966, pp. 201-215

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

حل عددی تاثیر موقعیت تومور-پیچه بر راندمان درمان در گرمادرمانی نانوسیال مغناطیسی

ظُهرابی، زهرا[۱]؛ توکّلی، محمد حسین[۱]؛ بُستان‌پیرا، سروش[۲]

[۱]دانشکده علوم پایه، دانشگاه بوعلی سینا، همدان

[۲]دانشکده علوم پایه، دانشگاه قم، قم

چکیده

در این مقاله، تأثیر موقعیت تومور مغزی نسبت به سیم‌پیچ القایی ۱۰حلقه‌ای، بر روی میدان مغناطیسی تولید شده، گرمای نانوذرات مغناطیسی (MNPs) و توزیع دما با استفاده از روش المان محدود بررسی شده است. نتایج به‌دست آمده نشان می‌دهد که شدت و توزیع میدان مغناطیسی، گرما و دمای تولید شده در تومور، مستقیماً به موقعیت تومور-پیچه بستگی دارد.

واژه های کلیدی: *گرمادرمانی سیال مغناطیسی، توزیع میدان مغناطیسی، توزیع گرمای نانوذرات، دما.*

Numerical study of tumor-coil location on the treatment efficiency in magnetic fluid hyperthermia

Zohrabi, Zahra[1]; Tavakoli, Mohammad Hossein[1]; Bostanpira, Soroush[2]

[1]Department of Physics, Bu-Ali Sina University, Hamedan
[2]Department of Physics, Qom University, Qom

Abstract

In this article, the effect of a brain tumor location with respect to the induction coil including 10 turns on the produced magnetic field, magnetic nanoparticles (MNPs) heating generation and temperature distribution has been studied using the finite element method. The obtained results show that the intensity and distribution of magnetic field, generated heat and temperature in the tumor depends directly on the tumor-coil orientation.

***Keywords**: Magnetic fluid hyperthermia, magnetic field distribution, MNPs Heat distribution, Temperature.*

PACS No. 81,87,89.

مقدمه

گرمادرمانی سیال مغناطیسی ازجمله تکنیک‌های جدید پیشرفته برای درمان سرطان است، که در این روش نانوسیال مغناطیسی حاوی نانوذرات سوپرپارامغناطیس (معمولا نانوذرات مغناطیسی اکسید آهن Fe_3O_4)، به داخل بافت تومور تزریق می‌شود و سپس با اعمال میدان مغناطیسی متناوب به محل تومور، نانوذرات شروع به نوسان کرده، حرارت تولید شده و دمای بافت سرطانی تا حدود ۴۲-۴۶ درجه سانتی‌گراد بالا می‌رود و سلول‌های سرطانی تخریب می‌شوند، بدون اینکه برای بافت سالم اطراف آن آسیب‌رسان باشد [۱].

سعیدی و همکاران [۲] توزیع دما در تومور سرطانی مغز و بافت سالم اطراف آن‌را شبیه‌سازی و میزان مرگ‌ومیر سلول‌های سرطانی را با استفاده از همبستگی بین دمای محلی بافت و میزان مرگ سلولی محاسبه کردند.

در بسیاری از مطالعات انجام شده، توزیع میدان مغناطیسی ایجاد شده توسط پیچه را به‌صورت یکنواخت فضایی در محل تومور برای حل مدل‌های عددی و برآورد دمای درمان درنظرگرفته‌اند. اما در مطالعات آزمایشگاهی، به‌طور گسترده از سیم‌پیچ‌های معمولی برای تولید میدان مغناطیسی متناوب استفاده می‌کنند که به‌خوبی ثابت شده است که میدان مغناطیسی درون یک سیم‌پیچ یکنواخت نیست [۱].

در این پژوهش، میدان مغناطیسی تولید شده توسط یک مدل واقعی از سیم‌پیچ و اثرات آن بر نحوه‌ی توزیع گرما و دما در بافت‌های زنده بررسی می‌شود. معادلات دیفرانسیل با مشتقات جزئی که میدان

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مغناطیسی را درون یک سیم‌پیچ توصیف می‌کنند و رفتار توزیع دما در محل تومور و بافت سالم اطراف آن، در یک مدل واحد ترکیب شده و با استفاده از روش المان محدود حل می‌گردند.

مدل‌سازی ریاضی

الف) فرضیات، معادلات و شرایط مرزی

جهت ساده‌سازی مسأله فرض می‌شود که مدت زمان مورد نیاز برای پخش نانوسیال در تومور (زمان پایداری) سپری شده و توزیع نانوذرات درون تومور به‌حالت یکنواختی رسیده است و تمام معادلات مستقل از زمان فرض شده اند. همچنین در مدل حرارتی پنس دمای خون (T_b) در سراسر بافت، یکنواخت و دمای وریدی (T)، برابر دمای بافت در همان نقطه بوده و رسانایی گرمایی (k)، میزان خون‌رسانی (ω_b) و تولید گرمای سوخت‌وساز بدن (Q_{met}) در این مدل یکنواخت فرض می‌شود.

هنگامی که جریان متناوبی به یک سیم‌پیچ اعمال می‌شود، یک میدان مغناطیسی در فضای اطراف و داخل آن ایجاد می‌گردد که با معادله دیفرانسیلی زیر محاسبه می‌شود [۱]:

$$\varepsilon_0 \frac{\partial^2 A}{\partial t^2} + \sigma \frac{\partial A}{\partial t} + \nabla \times \mu_0^{-1}(\nabla \times A) = J^e \qquad (۱)$$

در این معادله، A پتانسیل برداری، J^e چگالی جریان خارجی، σ رسانندگی الکتریکی و t زمان می‌باشد. با محاسبه A از این رابطه و با استفاده از معادله $H = \frac{B}{\mu_0} = \frac{(\nabla \times A)}{\mu_0}$ می‌توان شدت میدان مغناطیسی (H) را محاسبه کرد.

پس از تزریق نانوسیال‌مغناطیسی به بافت توموری و با اعمال میدان مغناطیسی خارجی، گرمای تولید شده (گرمای هیسترزیس) برای هر منطقه از مدل، طبق نظریه‌ی روزنزویگ[۳] با توجه به ویژگی‌های میدان مغناطیسی و نانوذرات، به‌صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$P(W/m^3) = \pi \mu_0 H_0^2 \chi_0 f \frac{2\pi f \tau}{1+(2\pi f \tau)^2} \qquad (۲)$$

که در آن، P توان مصرفی ذرات در واحد حجم و H_0 و f شدت و فرکانس میدان مغناطیسی خارجی می‌باشد [۳].

گرمای تولید شده در ناحیه توموری، منجربه افزایش دمای این ناحیه می‌شود، که توزیع دما درون بافت، با استفاده از معادله انتقال حرارت زیستی پنس محاسبه می‌گردد، که بیانگر تعادل حرارتی در بافت‌های زنده است [۲]:

$$\rho C \frac{dT}{dt} + \nabla \cdot (-k \nabla T) = \rho_b C_b \omega_b (T_b - T) + (Q_{met} + Q_{ext}) \qquad (۳)$$

در این رابطه، ρ_b و ρ چگالی خون و چگالی بافت است. همچنین C_b و C ظرفیت گرمایی ویژه خون و بافت و Q_{ext} گرمای تولید شده در بافت ناشی از منبع خارجی (P) است.

دو شرط مرزی مهم و اساسی نیز برای حل مساله در نظر گرفته شده است: دما و شار حرارتی در مرز تومور و بافت سالم پیوسته است و در سطح تماس با محیط خارج، انتقال حرارت جابجایی در نظر گرفته می‌شود [٤]:

$$h(T - T_\infty) = -K \frac{dT}{dx} \qquad (۴)$$

در این رابطه، $h = 8 \frac{W}{m^2 \cdot K}$ ضریب انتقال حرارت جابجایی، $T_\infty = 25°C$ دمای اتاق و $\frac{dT}{dx}$ مشتق دما نسبت به هردو محور x و z است.

ب) شرایط محاسبه

در مدل در نظر گرفته شده، هدف درمان کاملاً در داخل سیم‌پیچ ۱۰حلقه‌ای، به ارتفاع ۱۱٦mm و قطر ۱۲۰mm قرار می‌گیرد. ابعاد بافت سالم در جدول۱ ذکر شده و بافت سرطانی دایره‌ای به شعاع ۳۰mm فرض شده است (شکل۱) و میدان مغناطیسی با فرکانس ۳۰۰kHz [۲] بر بافت مورد نظر اعمال می‌شود. مقادیر مورد نیاز جهت حل معادله گرما و انتقال حرارت پنس در مراجع [٦-۱] ذکر شده است.

شبکه بندی مورد ا ستفاده در این پژوهش، مثلثی بی‌نظم (روش عناصر متناهی) با تعداد ۲۹۰۹۱ عنصر شبکه می‌باشد. این نوع شبکه‌بندی محدودیتی بابت استفاده از یک نوع سلول ندارد و می‌توان از ترکیبی از شبکه‌بندی‌ها ا ستفاده کرد (ترکیب شبکه مثلثی و چهاروجهی). جهت انجام شبیه سازی، مساله به صورت دوبُعدی در فضای نرم‌افزار کامسول طراحی شده است، که می‌تواند در یک محیط شبیه‌سازی پدیده‌های فیزیکی، معادلات دیفرانسیل را به روش المان محدود (عناصر متناهی) حل نماید.

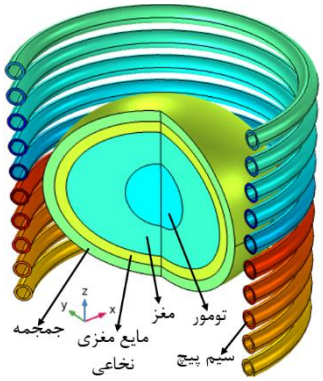
واضح است که میدان مغناطیسی تولید شده توسط یک مدل واقعی از سیم‌پیچ، یکنواخت فضایی نیست. بدین منظور در این

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

پژوهش، جهت تجزیه و تحلیل موقعیت تومور–سیم‌پیچ، مکان‌های متفاوت بافت روی محور z در نظر گرفته می‌شود.

جدول۱:ابعاد بافت سالم اطراف تومور.

مغز	مایع مغزی نخاعی (CSF)	جمجمه	
۴۰	۴۵	۵۰	شعاع بزرگ بیضی(mm)
۳۰	۳۵	۴۰	شعاع کوچک بیضی(mm)



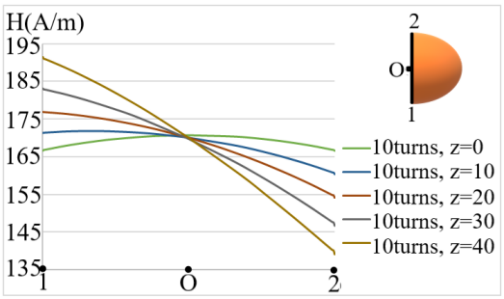
شکل۱: طرح‌واره‌ای از بافت مورد مطالعه و سیم‌پیچ ۱۰حلقه‌ای.

نتایج و بحث

نتایج بدست آمده از محاسبات به سه دسته کلی تقسیم می‌شود:

الف) میدان مغناطیسی

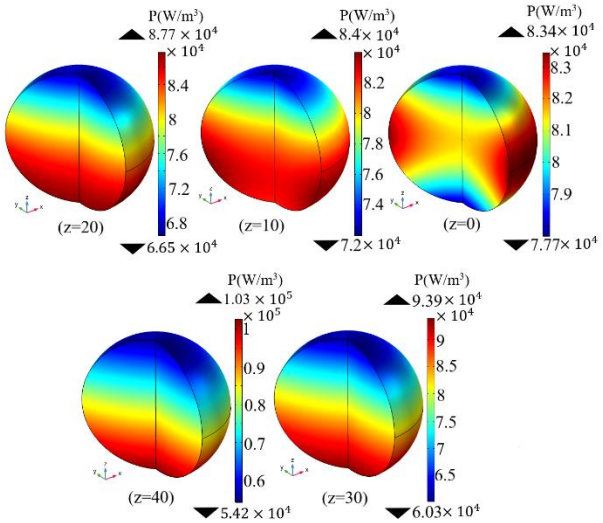
تحت اثر پیچه ۱۰حلقه و با جابجایی بافت روی محورz به سمت بالا، با فرض ثابت ماندن پیچه، میزان بافتی که تحت تاثیر میدان مغناطیسی سیم‌پیچ قرار می‌گیرد، تغییر می‌کند و به‌همان نسبت، توزیع شدت میدان مغناطیسی درون تومور تغییر خواهد داشت (غیریکنواخت‌تر می‌شود) و میزان میدان مغناطیسی موثر بر بافت کاهش می‌یابد. همان‌طور که از شکل۲ مشهود است، کاهش شدت میدان مغناطیسی با توجه به فاصله از مرکز سیم‌پیچ غیرخطی است و منجربه پارابولایی (رفتار بیضی‌گونی) می‌شود که در z=۴۰mm بیشتر از حالت‌های دیگر است و در نزدیکی مرکز سیم‌پیچ (حداکثر فاصله۱۰ میلی‌متری از مرکز پیچه) میدان مغناطیسی تقریبا یکنواخت و متقارنی نسبت به محور افقی بافت، به بافت هدف اعمال می‌شود، زیرا اختلاف بین بیشینه و کمینه H نسبت به حالت‌های دیگر بسیار کمتر است.



شکل۲: نمودار توزیع شدت میدان مغناطیسی درون تومور در امتداد قطر عمودی، تحت اثر پیچه ۱۰حلقه و به ازای مقادیر مختلف z.

ب) گرمای هیسترزیس (پسماند)

توزیع گرما در ناحیه‌ی توموری، وابسته به مکان تومور نسبت به پیچه و نحوه‌ی توزیع شدت میدان مغناطیسی در تومور خواهد بود. شکل۳ توزیع گرمای پسماند درون ناحیه توموری را نشان می‌دهد. مشاهده می‌شود که با جابجایی در امتداد محورz به طرف بالا، به تدریج بافت از درون سیم‌پیچ خارج شده و توزیع گرما حالت غیرمتقارن و غیریکنواخت‌تر شده و مکان بیشینه گرما به سمت پایین تومور جابجا می‌شود. ناحیه‌ای که گرمای بیشتری دارد، تحت شدت میدان مغناطیسی قوی‌تری قرار دارد و همین امر اثر منفی روی درمان خواهد داشت. بنابراین بافت باید در محدوده‌ای در نزدیکی مرکز سیم‌پیچ قرار داشته باشد تا شدت میدان مغناطیسی و گرما را به‌صورت متقارن و یکنواخت‌تر دریافت کند.

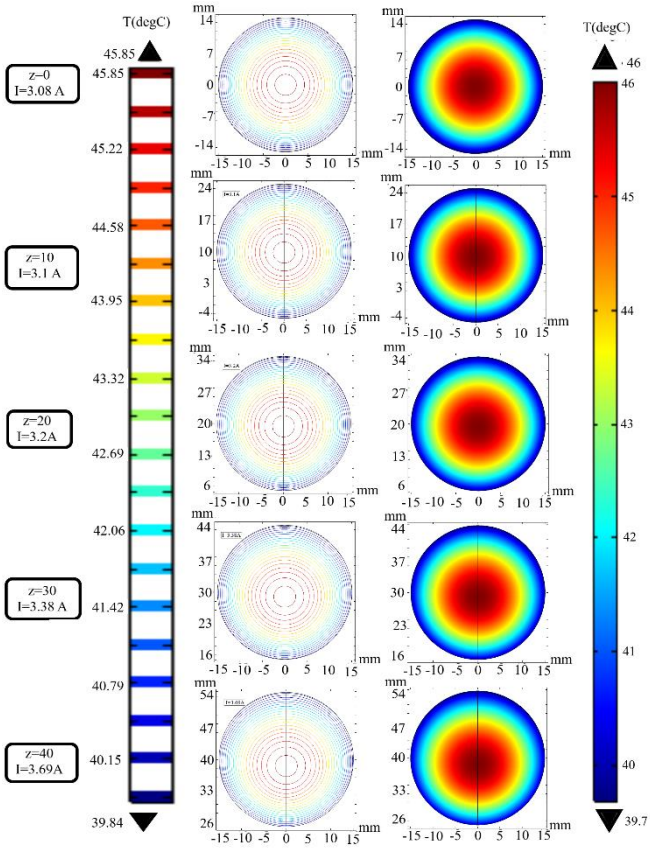


شکل۳: توزیع گرمای پسماند درون تومور تحت اثر سیم‌پیچ ۱۰حلقه و به ازای مقادیر مختلف z.

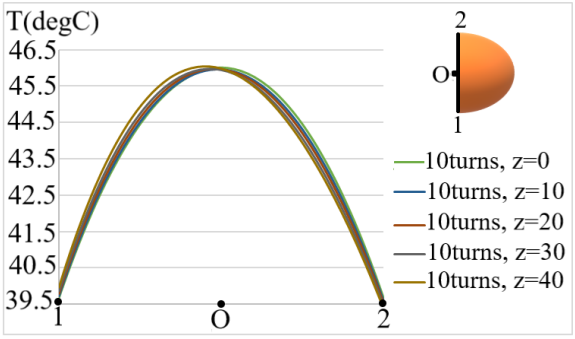
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

ج) دما

برای دست‌یابی به دمای درمان (٤٦°C) برای هر موقعیت بافت، باید یک مقدار جریان الکتریکی خاصی در نظر گرفت. در شکل٤ مشاهده می‌شود که با تغییر مکان تومور نسبت به پیچه، مکان بیشینه دما تغییر کرده است. به‌طوری که با افزایش z (به طرف بالا)، تومور به تدریج از داخل سیم‌پیچ خارج می‌شود و نقطه‌ی گرم‌تر که دارای دمای حدودی ٤٦°C است، روی محور z به‌طرف پایین جابجا می‌شود. این امر ناشی از آن است که میزان بافتی که تحت تاثیر میدان مغناطیسی و گرما قرار دارد، در حال تغییر است. از شکل ۵ نیز مشاهده می‌شود که حالت‌های z=۰ و z=۱۰ تقریبا مشابه یکدیگر هستند ولی با حالت‌های دیگر متفاوت می‌باشند. که همان نتیجه یکنواختی میدان مغناطیسی در نزدیکی مرکز سیم‌پیچ را تایید می‌کند. در جدول۲ میزان جریان موردنیاز برای رسیدن دمای تومور به دمای درمان، در هر موقعیت بافت روی محورz بیان شده است. مشاهده می‌شود که با افزایش مقدار z میزان جریان موردنیاز افزایش می‌یابد.



شکل٤: توزیع دما در ناحیه‌ی توموری به همراه کنتورهای دمایی، تحت اثر پیچه ۱۰حلقه به ازای مقادیر مختلف z.



شکل۵: نمودار توزیع دما درون تومور، در امتداد قطر عمودی، تحت تاثیر پیچه ۱۰حلقه و به ازای مقادیر مختلف z.

جدول۲: میزان جریان اعمالی بر پیچه به ازای مقادیر مختلفz.

موقعیت بافت (mm)	Z= ۰	Z= ۱۰	Z= ۲۰	Z= ۳۰	Z= ٤۰
جریان (A)	۳/۰۸	۳/۱	۳/۲	۳/۳۸	۳/٦۹

نتیجه‌گیری

با جابجایی بافت روی محور z به طرف بالا، مکان بیشینه دما به طرف پایین در امتداد محور z جابجا می‌شود که منجر به از دست رفتن تقارن در توزیع دما می‌شود که این امر روی راندمان درمان اثر منفی خواهد داشت. میدان مغناطیسی تولید شده توسط سیم‌پیچ ۱۰حلقه‌ای و توزیع گرمای پسماند را می‌توان برای فاصله حداکثر ۱۰میلی‌متری از مرکز سیم‌پیچ، تقریبا یکنواخت فرض کرد، که این بازه مکانی بهتری برای شرایط درمانی را مهیا می‌کند.

مرجع‌ها

[۱] Y.D. Tang, R.C.C. Flesch, et al.; "Numerical analysis of the effect of non-uniformity of the magnetic field produced by a solenoid on temperature distribution during magnetic hyperthermia"; *J. Magn. Magn. Mater*. **449** (2018) 455-460.

[۲] M. Saeedi, O. Vahidi; "Induced Tissue Cell Death by Magnetic Nanoparticle Hyperthermia for Cancer Treatment: An in silico Study"; *Ir. J. Chem. Eng*. **14** (2017) 59-76.

[۳] R.E. Rosensweig; "Heating magnetic fluid with alternating magnetic field"; *J. Magn. Magn. Mater*. **252** (2002) 370-374.

[٤] A. Bousselhama, O. Bouattanea, et al.; "Brain tumor temperature effect extraction from MRI imaging using bioheat equation"; *Proc. Comp. Science*.**127** (2018) 336–343.

[۵] S. Maenosono and S. Saita; "Theoretical Assessment of FePt Nanoparticles as Heating Elements for Magnetic Hyperthermia"; IEEE Trans. Magn.**42** (2006) 1638-1642.

[٦] http://itis.swiss/virtual-population/tissue-properties/databa

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

طراحی فیلتر جاذب دوگانه برای طول‌موج‌های ۱۰۶۴ و ۵۴۰ نانومتر

داودی، سمیه؛ قشلاقی*، مریم

پژوهشگاه علوم و فنون هسته ای، پژوهشکده فوتونیک و فناوری‌های کوانتومی
sdavodi@aeoi.org.ir
mgheshlaghi@aeoi.org.ir

چکیده

در این مقاله، برای طراحی فیلتر جاذب کامل در طول‌موج ۵۴۰ نانومتر و جذب ۵۰ درصد در طول‌موج ۱۰۶۴ نانومتر ساختار MDM به‌صورت $BK7/Ag/MgF_2/Ag/Air$ در نظر گرفته شد. در این ساختار با ضخامت ربع موج هر یک از لایه‌ها، پاسخ نوری بازتاب، صد در صد و پاسخ نوری جذب، صفر درصد است. پاسخ نوری بازتاب و جذب ساختار فوق، با تغییر ضخامت لایه‌ها (لایه‌های فلزی و دی‌الکتریک) همچنین تغییر جنس لایه‌های فلزی بررسی شد. برخی از این تغییرات منجر به کاهش یا افزایش درصد جذب و برخی منجر به جابجا شدن پیک جذب شدند. برای فیلتر جاذب مورد نظر بهترین ساختار $BK7/150Ag/339MgF_2/50Ag/Air$ حاصل شد.

واژه های کلیدی: *فیلتر جاذب، ساختار MDM، لایه‌نشانی.*

Design of double absorption filter for 1064 and 540 nm wavelengths

Davodi, Somaye; Gheshlaghi*, Maryam

Photonics and Quantum Technologies Research School, Nuclear Science and Technology Research Institute (NSTRL)
sdavodi@aeoi.org.ir
mgheshlaghi@aeoi.org.ir

Abstract

In this paper, MDM structure as $BK7/Ag/MgF_2/Ag/Air$ was considered as the design of the complete absorption filter at 540 nm and 50% absorption at 1064 nm. In this structure, with a quarter-wavelength thickness of each layers, the reflective optical response is 100% and the absorption optical response is zero. The optical response of reflection and absorption of the above structure was investigated by changing the thickness of the layers (metal and dielectric layers) also changing the material of the metal layers. Some of these changes led to a decrease or increase in the percentage of absorption, and some led to a shift in the peak of absorption. The best structure for the absorption filter was obtained $BK7/150Ag/339MgF_2/50Ag/Air$.

***Keywords**: absorption filter, MDM structure, coating.*
PACS No. 73

مقدمه

فیلتر جاذب، می‌تواند تمام یا بخشی از پرتوهای الکترومغناطیسی برخوردی را در طول‌موج مورد نظر جذب کند، به این معنی که در فیلتر جاذب کامل، بازتاب و عبور به‌طور مؤثر حذف می‌شوند. در سال‌های اخیر، ساختارهای پلاسمونی به‌دلیل توانایی عالی در دستیابی به تعامل نور و ماده در فضای نامتناهی امکان ایجاد بازتاب، عبور و جذب خاص را داشتند. بسیاری از جاذب‌های کامل با استفاده از ساختارهای نانو، جذب فوق‌العاده بالایی را نشان

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

داده‌اند و با تنظیم هندسه، اندازه و تناوب سازه‌ها می‌توان طیف‌های جذب آنها را هم‌زمان تنظیم کرد. در مقایسه با ساختارهای پلاسمونی، فیلم‌های نازک متشکل از یک یا چند فیلم از مواد دی-الکتریک یا فلزی به طور گسترده‌ای استفاده می‌شوند که هندسه آنها از اثر تداخل *Fabry-Perot* پیروی می‌کند.

در این مقاله نسبت به فیلترهای ساخته شده مشابه [۱،۲]، تفاوت در جنس لایه‌های دی‌الکتریک و فلزی و همچنین تغییر در ضخامت لایه‌ها ایجاد شد تا فیلتر جاذب در طول‌موج‌های ۱۰۶۴ و ۵۴۰ نانومتر طراحی گردد.

مبانی نظری

برای دو لایه فلز و دی‌الکتریک روی زیرلایه شیشه، نور از هوا ($n_1 = 1$) بر روی یک فیلم نازک با ضخامت h و ضریب شکست مختلط $\tilde{n}_2 = n_2 + ik_2$، که روی یک لایه فلزی با ضریب شکست مختلط n_3 انباشت شده است، برخورد می‌کند. ضریب بازتاب برای قطبش s نوری فرودی با زاویه β با فرمول۱ محاسبه می شود [۳]:

$$\tilde{r} = \frac{\tilde{r}_{12}+\tilde{r}_{23}e^{2i\beta}}{1+\tilde{r}_{12}\tilde{r}_{23}e^{2i\beta}} \quad (۱)$$

که در آن

$$\tilde{r}_{mn} = \frac{\tilde{p}_m-\tilde{p}_n}{\tilde{p}_m+\tilde{p}_n} \quad (۲)$$

و

$$\tilde{p}_m = \tilde{n}_m \cos\tilde{\theta}_m \quad (۳)$$

$$\beta = \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)\tilde{n}_2 h \cos\tilde{\theta}_2 \quad (۴)$$

$$\tilde{\theta}_m = \sin^{-1}\left(\frac{\sin\theta_1}{\tilde{n}_m}\right) \quad (۵)$$

که شکل مختلط قانون اسنل است. برای قطبش p نوری فرودی، مولفه $\tilde{p}_m$ با $\tilde{q}_m$ جایگزین می‌شود، که از فرمول۶ به‌دست می‌آید:

$$\tilde{p}_m = \frac{\cos\tilde{\theta}_m}{\tilde{n}_m} \quad (۶)$$

بازتاب کل با رابطه $R = |\tilde{r}|^2$ مشخص می‌شود. چون لایه اول روی زیرلایه، یک لایه فلزی با ضخامت زیاد است و عبور نور نداریم پس $A = 1 - R$ می‌باشد.

مورد خاص قابل‌توجه از ساختار سه لایه‌ای، یک حفره *Fabry Perot* نامتقارن است که شامل یک فیلم ربع‌موج ($h \cong \frac{m\lambda}{4\,n_2}$) بر روی یک بازتاب‌دهنده کامل است. علاوه بر این، توزیع جذب در لایه‌های سه‌گانه را می‌توان به‌طور مستقیم با فرمول کاهش موضعی اهمی محاسبه کرد [۴]:

$$A(r,\omega) = \frac{1}{2}\varepsilon_0 Im\varepsilon(\omega)|E|^2 \quad (۷)$$

$$A = \int_V A(r,\omega)\,dV \quad (۸)$$

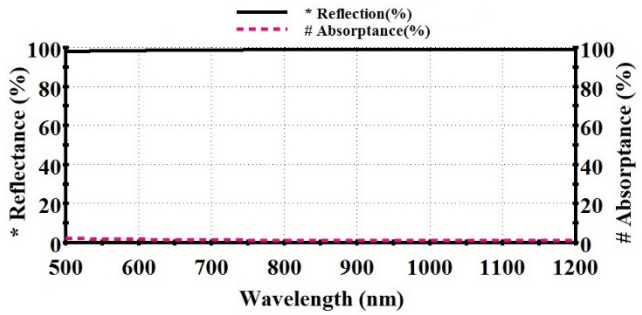
که در آن ω فرکانس زاویه‌ای است، $Im\varepsilon(\omega)$ قسمت موهومی از گذردهی دی‌الکتریک است، و E میدان الکتریکی است.



شکل۱:. شماتیک ساختار جاذب MDM

طراحی و بحث

ابتدا طراحی با یک ساختار فلز، دی الکتریک، فلز (M/D/M) شروع شد (شکل۱). در این ساختار جنس لایهM، فلز نقره، جنس لایهD، دی‌الکتریک دیفلوریدمنیزیم و جنس زیرلایه، BK7 است. این طراحی را در بازه ۵۰۰ تا ۱۲۰۰ نانومتر بررسی شد. در مرحله اول ضخامت اپتیکی هر یک از لایه‌ها ربع‌موج در نظر گرفته شد.

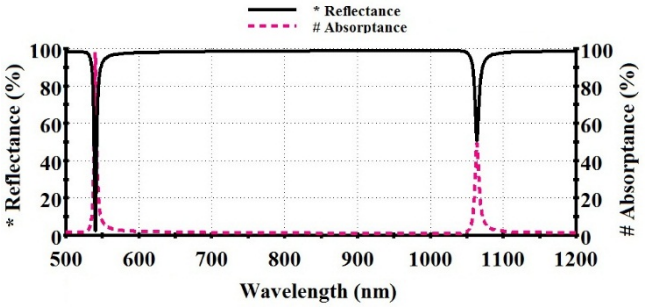


شکل۲: نمودار درصد بازتاب و جذب برحسب طول موج برای ساختار Ag/MgF_2/Ag با ضخامت اپتیکی $\frac{\lambda}{4}$

همانطور که در شکل۲ نشان داده شده پاسخ نوری بازتاب و جذب در بازه ۵۰۰ تا ۱۲۰۰ نانومتر به ترتیب ۱۰۰٪ و ۰٪ است. از آنجایکه فیلتر جاذب، فقط برای طول‌موج‌های ۱۰۶۴ و ۵۴۰ نانومتر مد نظر است لذا نمودار فوق مطلوب نیست و باید برای ساختار BK7/Ag/MgF_2/Ag/Air ضخامت‌ها تغییر کند. از این پس، به

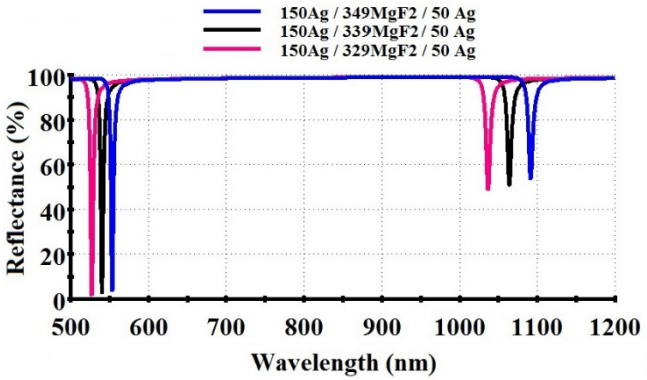
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

لایه فلزی روی زیرلایه، لایه پایینی و به لایه فلزی مجاور با هوا، لایه بالایی می‌گوییم. طراحی با نرم‌افزار لایه‌نشانی مکلئود، با تغییر ضخامت لایه‌ها، در چندین مرحله انجام شد تا بالاخره نمودار شکل۳ به‌عنوان بهترین نتیجه حاصل گردید. در این طراحی ضخامت لایه‌ها ۱۵۰، ۳۹۹ و ۵۰ نانومتر به‌ترتیب برای لایه Ag پایینی، لایه MgF_2 و لایه Ag بالایی است.



شکل۳: نمودار درصد بازتاب و جذب برحسب طول موج برای ساختار 150Ag/ 339MgF_2/50Ag

همانطوریکه در نمودار شکل۳ مشخص است پاسخ نوری درصد بازتاب برای دو طول‌موج ۱۰۶۴ و ۵۴۰ نانومتر ، مقادیر ۵۰٪ و ۰٪ می‌باشد و همینطور درصد جذب برعکس است. این حالت فقط زمانی امکان‌پذیر است که در ساختار Ag/MgF_2/Ag لایه فلزی بالایی، خیلی نازک باشد. حال به بررسی تاثیر ضخامت اپتیکی لایه دی‌الکتریک و لایه فلزی می‌پردازیم. نمودار شکل ۴ تغییر ضخامت اپتیکی لایه دی‌الکتریک را برای ساختار فیلتر جاذب فوق، نشان می‌دهد.

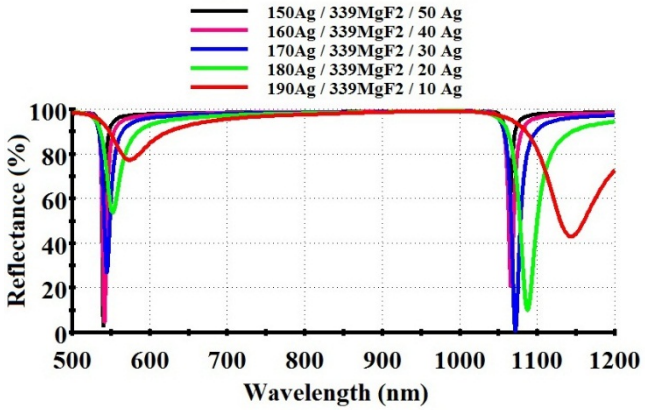


شکل۴: نمودار درصد بازتاب نسبت به طول موج برای ساختار Ag/MgF_2/Ag با تغییرات ضخامت لایه دی‌الکتریک

جدول۱: مقادیر درصد جذب و بازتاب هر یک از ساختارهای شکل۴ در طول‌موج‌های مورد نظر

ساختار M/D/M	R% & A% (For 540nm)	R% & A% (for 1064nm)
150Ag /329MgF_2/50Ag	1.3 & 98.7	48.2 & 51.8
150Ag /339MgF_2/50Ag	2.06 & 98.3	50.8 & 49.2
150Ag /349MgF_2/50Ag	2.99 & 96.9	53.2 & 46.8

با اضافه و کم کردن ضخامت اپتیکی لایه دی‌الکتریک مشاهده شد که منحنی بازتاب به‌ترتیب به سمت طول‌موج‌های بیشتر و کمتر انتقال پیدا کرد. جدول۱ مقادیر درصد جذب و بازتاب هر یک از ساختارهای شکل۴ را در طول‌موج‌های مورد نظر نشان می‌دهد. نمودار شکل۵ تغییر ضخامت اپتیکی لایه‌های فلزی را برای ساختار فیلتر جاذب فوق، نشان می‌دهد.



شکل۵: نمودار درصد بازتاب نسبت به طول موج برای ساختار Ag/MgF_2/Ag با تغییرات ضخامت لایه‌های فلزی

جدول۲: مقادیر درصد جذب و بازتاب هر یک از ساختارهای شکل۵ در طول‌موج‌های مورد نظر

ساختار M/D/M	R% & A% (For 540nm)	R% & A% (for 1064nm)
150Ag /339MgF_2/50Ag	2.06& 98.3	50.8 & 49.2
160Ag /339MgF_2/40Ag	4.40 &95.6	20.13&79.9
170Ag /339MgF_2/30Ag	26.3& 73.6	0.6 & 99.40
180Ag /339MgF_2/20Ag	53.6 & 46.40	10.03 &90.00
190Ag /339MgF_2/10Ag	77.18 & 22.83	42.85 & 57.14

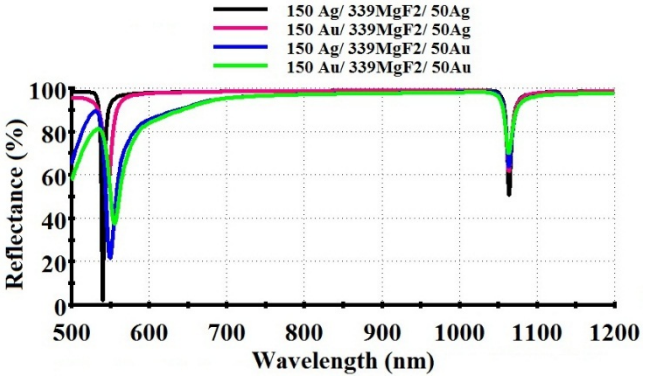
ملاحظه شد که با تغییر ضخامت لایه‌های فلزی پاسخ نوری بازتاب و جذب مطلوب در طول‌موج ۱۰۶۴ و ۵۴۰ نانومتر حاصل نمی‌شود چون با افزایش ضخامت لایه فلزی پایینی و کاهش ضخامت لایه فلزی بالایی، در طول‌موج ۱۰۶۴ نانومتر، نه تنها بازتاب کاهش

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

می‌یابد، بلکه مینیمم آن از طول‌موج ۱۰۶۴ نانومتر به سمت طول-موج‌های بالاتر انتقال پیدا می‌کند. همینطور با افزایش ضخامت لایه فلزی پایینی و کاهش ضخامت لایه فلزی بالایی، در طول‌موج ۵۴۰ نانومتر بازتاب افزایش یافته و مینیمم آن به سمت طول‌موج‌های بالاتر انتقال پیدا می‌کند. جدول۲ مقادیر درصد جذب و بازتاب هر یک از ساختارهای شکل۵ را در طول‌موج‌های مورد نظر نشان می-دهد. در نمودار شکل۶ با تغییر جنس لایه‌های فلزی و ثابت گرفتن بقیه پارامترها در چهار ساختار

$BK7/150Ag/339MgF_2/50Ag/Air$
$BK7/150Ag/339MgF_2/50Au/Air$
$BK7/150Au/339MgF_2/50Au/Air$
$BK7/150Au/339MgF_2/50Ag/Air$

ملاحظه شد که تغییر لایه فلزی از نقره به طلا، در نمودار پاسخ نوری بازتاب، با وجود اینکه در طول‌موج ۱۰۶۴ نانومتر، جابجا نشد ولی بازتاب افزایش داشت و در طول‌موج ۵۴۰ نانومتر علاوه بر افزایش بازتاب، مینیمم نمودار نیز به سمت طول‌موج‌های بالاتر انتقال پیدا کرد. جدول۳ مقادیر درصد جذب و بازتاب هر یک از ساختارهای شکل۶ را در طول‌موج‌های مورد نظر نشان می‌دهد.



شکل۶: نمودار درصد بازتاب نسبت به طول‌موج برای ۴ ساختار با لایه-های فلزی مختلف

جدول۳: مقادیر درصد جذب و بازتاب هر یک از ساختارهای شکل۶ در طول‌موج‌های مورد نظر

ساختار M/D/M	R% & A% (For 540nm)	R% & A% (for 1064nm)
$150Ag /339MgF_2/50Ag$	2.06& 97.88	50.8 & 49.20
$150Au /339MgF_2/50Ag$	54.54& 45.14	61.61& 38.40
$150Ag /339MgF_2/50Au$	21.43 & 78.6	63.3& 36.73
$150Au /339MgF_2/50Au$	37.2 & 62.72	69.6& 30.42

نتیجه‌گیری

برای طراحی فیلتر جاذب کامل در طول موج ۵۴۰ نانومتر و جذب ۵۰ درصد در طول موج ۱۰۶۴ نانومتر ساختار MDM به صورت $BK7/Ag/MgF_2/Ag/Air$ طراحی شد. با در نظر گرفتن ضخامت ربع موج برای هر یک از لایه ها بازتاب کامل و جذب، صفر است. با تغییر ضخامت لایه‌ها (لایه‌های فلزی و دی‌الکتریک) همچنین تغییر جنس لایه‌های فلزی پاسخ نوری بازتاب و جذب بررسی شد. برای فیلتر جاذب مورد نظر بهترین ساختار $BK7/150Ag/339MgF_2/50Ag/Air$ است. با افزایش و کاهش ضخامت اپتیکی لایه دی‌الکتریک منحنی بازتاب به‌ترتیب به سمت طول‌موج‌های بیشتر و کمتر انتقال پیدا کرد. با افزایش ضخامت لایه فلزی پایینی و کاهش ضخامت لایه فلزی بالایی، در طول‌موج ۱۰۶۴ نانومتر، بازتاب کاهش یافته و مینیمم آن از طول‌موج ۱۰۶۴ نانومتر به سمت طول‌موج‌های بالاتر انتقال پیدا کرد. در طول‌موج ۵۴۰ نانومتر نیز با تغییر فوق، بازتاب افزایش یافته و مینیمم آن به سمت طول‌موج‌های بالاتر انتقال پیدا کرد. تغییر در جنس لایه‌های فلزی منجر به تغییر مقدار مینیمم بازتاب در طول موج ۱۰۶۴ نانومتر شده در صورتیکه در محدوده طول‌موج ۵۴۰ نانومتر، طول-موج مینیمم بازتاب جابجا شد. به این ترتیب می توان برای کاربردهای مختلف از ساختارهایی با جنس و ضخامتهای متفاوت ساختار MDM استفاده نمود.

مرجع‌ها

[1] Q. Li, Z. Li, X. Xiang, T. Wang, H. Yang, X. Wang,Y. Gong & J. Gao,"*Tunable Perfect Narrow-Band Absorber Based on a Metal-Dielectric-Metal Structure*", Coatings 9, 393, 2019.

[2] M. A. Kats, R. Blanchard, P. Genevet & F. Capasso, "*Nanometre optical coatings based on strong interference effects in highly absorbing media*", nature materials, vol. 12, 2013.

[3] M. Born & E. Wolf, "*Principles of Optics*", 7th edn (Cambridge Uni. Press, 2003).

[4] J. Hao, L. Zhou & M. Qiu, "*Nearly total absorption of light and heat generation by plasmonic metamaterials*", Physical Review B 83, 165107, 2011.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

محاسبه نرخ پراکندگی برهم کنش الکترون- فونون در چاه‌ها و سیم‌های کوانتومی

مهتاب ارتی[۱]، محمد جواد کریمی[۲]

گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه صنعتی شیراز

چکیده

ما در این مقاله نرخ پراکندگی کل و احتمال گذار را برای برهم‌کنش الکترون - فونون در چاه‌ها و سیم‌های کوانتومی با ابعاد محدود محاسبه می کنیم. از مدل پیوسته دی الکتریک که یکی از پرکاربردترین مدل ها برای بررسی دقیق نرخ پراکندگی برهم کنش الکترون-فونون است، استفاده می‌نماییم. نتایج نشان می‌دهد که با افزایش انرژی و ابعاد سیستم نرخ جذب و گسیل کاهش می‌یابد.

واژه های کلیدی: پراکندگی، الکترون، فونون، چاه ها، سیم ها

Calculation of scattering rate of electron-phonon interaction in quantum wells and wires

Mahtab, Arti [1]; Mohammad. J, Karimi [2]

Department of Physics, Faculty of Basic Sciences, Shiraz University of Technology

Abstract

In this paper, we calculate the total scattering rate and transition probability for electron-phonon interaction in quantum wells and quantum wires with finite size. We use the dielectric continuum model, which is one of the most widely used models to accurately investigate the scattering rate of electron-phonon interaction. The results show that as the energy and sizes of the system increase, the rate of the absorption and emission decrease.

***Keywords**: Scattering, Electron, Phonon, Wells, Wires*

PACS No. 63, 68

مقدمه

فونون‌ها کوانتش ارتعاشات شبکه هستند که اهمیت آن‌ها در زمینه‌های مختلف فیزیک حالت جامد مانند انتقال گرما و ابررسانایی به خوبی شناخته شده‌است. فونون‌ها به دو صورت اپتیکی و آکوستیکی هستند که هرکدام با دو مد عرضی و طولی نمایش داده می‌شوند. مدهای اپتیکی با فرکانس بالاتر شامل نوسانات خارج از سطح یونهای مجاور است، درحالیکه مدهای صوتی با فرکانس پایین با حرکت یونهای مجاور با منحنی سینوسی نشان داده می‌شوند[۱]. مدل‌های مختلفی برای محاسبه نرخ پراکندگی الکترون – فونون وجود دارد ازجمله: مدل پیوسته دی الکتریک(DC)، مدل هیدرودینامیکی(HD) و....پرکاربرد ترین مدل، مدل پیوسته دی الکتریک است. این مدل برای توصیف تغییر شکل پتانسیل، برهم کنش‌های پیزوالکتریک و فرولیخ در نانو ساختارها از جمله چاه کوانتومی، سیم کوانتومی و نقاط کوانتومی کاربرد دارد. پراکندگی فونون های اپتیکی قطبی یک فرآیند ناکشسان است و دیگر پراکندگی ها نظیر پراکندگی فونون‌های آکوستیکی و پراکندگی پیزو الکتریک از فرآیندهای کشسان شناخته شده اند[۲]. در سال ۱۹۸٤ لبرتون و همکارانش تاثیرات اندازه چاه کوانتومی بر پراکندگی فونون‌های اپتیکی قطبی گاز الکترون یک بعد و دو بعد را در چندین نیمه رسانا مورد بررسی قرار دادند وبا محاسبه نرخ پراکندگی متوجه شدند که تاثیرات اندازه چاه کوانتومی برگاز الکترونی دو بعدی، وابستگی نسبتا ضغیف نرخ پراکندگی را روی لایه‌های کم ضخامت نشان می‌دهد[۳]. کیم و

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

همکارانش در سال ۱۹۹۹ موضوع پراکندگی الکترون از طریق برهم کنش با فونون های اپتیکی در ساختار شش گوشی و چاه کوانتومی را بررسی کردند و به این نتیجه رسیدند که در انرژی های بالاتر همه نرخ های پراکندگی موجود کاهش می‌یابند[٤]. ماسلوو و همکارانش در سال ۲۰۱٦ مطالعاتی را بر روی برهم کنش الکترون – فونون در چاه‌های کوانتومی انجام دادند. آن‌ها توانستند اهمیت اندازه جرم پلارون را درچاه‌های کوانتومی نوع ZnO-ZnMgO بیان‌کنند[٥]. محمد احمد و همکارانش در سال ۲۰۱۹ موضوع گسیل فونون‌های اپتیکی محدود و سطحی درچاه‌های کوانتومی GaN/InGaN مطالعه کردند و توانستند گسیل فونون‌ها را برروی مدهای فونون اپتیکی و سطحی ساختار شش گوشی بررسی کنند[٦و٧].

تئوری

در این مقاله نرخ پراکندگی الکترون – فونون را در چاه و سیم کوانتومی مورد بررسی قرار می‌دهیم. در تقریب چاه ها و سیم ها با سد پتانسیل نامتناهی، توابع موج الکترونی چاه کوانتومی و سیم کوانتومی به ترتیب بصورت زیر هستند:

$$|k_{2-D} \geq \frac{e^{ik\|.r\|}}{\sqrt{L_y L_X}} \sqrt{\frac{2}{L_z}}\, sin\frac{\pi z}{L_z} \qquad (۱)$$

$$|k_{1-D}> = \frac{e^{ik_x x}}{\sqrt{L_X}} \sqrt{\frac{2}{L_y}} sin\frac{\pi y}{L_y} \sqrt{\frac{2}{L_z}} sin\frac{\pi z}{L_z} \qquad (۲)$$

با انرژی‌های مربوطه‌ی:

$$E_{2-D} = \frac{\hbar^2 k_\|^2}{2m} + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL_x^2} \qquad (۳)$$

$$E_{1-D} = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m}\left(\frac{1}{L_z^2} + \frac{1}{L_y^2}\right) \qquad (۴)$$

زیرنویس های 1- D و 2- D تعداد درجات محدودیت سیستم را نشان می‌دهد. $k_\|$ مولفه‌ی بردارموج است و L_x که $L_x > L_y. L_z$ طول سیم است. احتمال گذار برای گازهای الکترونی دوبعدی (چاه کوانتومی) و یک‌بعدی (سیم کوانتومی) بصورت زیر است[٨و٩]:

$$W_{2-D}^{\{a\}^{e}}(k_\|.\acute{k}_\|) = \frac{L_Z|C|^2}{4\pi^2\hbar}\left(N_q + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}\right)\ I_{2-D}(q_\|.L_z) \times \delta_{k\|-\acute{k}_\|\pm q_\|}\ \delta[E(k_\| \mp q_\|) - E(k_\|) \pm \hbar w] \qquad (۵)$$

و

$$W_{1-D}^{\{a\}^{e}}(k_x.\acute{k}_x) = \frac{L_Z L_Y|C|^2}{4\pi^2\hbar} \times \left(N_q + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}\right)\ I_{1-D}(q_X.L_y.L_z) \times \delta_{kx-\acute{k}_{x\pm q_x}}\ \delta[E(k_x \mp q_x) - E(k_x) \pm \hbar w] \qquad (۶)$$

و

$$I_{2-D}(q_\|.L_z) = \int_{+\infty}^{-\infty} dq_x \frac{|F(q_x L_z)|^2}{q_\|^2 + q_z^2} \qquad (۷)$$

و

$$I_{1-D}(q_x.L_y.L_z) = \int_{+\infty}^{-\infty} dq_y\ |F(q_y L_y)|^2 \times I_{2-D}(q_x.L_y.L_z) \qquad (۸)$$

برای مقادیر نامتناهی L_z، احتمال گذار دوبعدی کم است. در واقع برهم کنش بین تابع موج الکترون و مولفه عرضی q_z فونون رخ می‌دهد. از این رو تاثیرات اندازه چاه کوانتومی، احتمال گذار را با تقریب دو بعدی کاهش می‌دهند.همچنین اگر L_z بزرگ باشد، برهم کنش الکترون–فونون کوچک خواهد بود. بردار موج گسیل و جذب فونون دوبعدی به این فرم است:

$$q_\pm^a = k_\| \cos\emptyset \pm \sqrt{k_\|^2 cos_\emptyset^2 + \frac{2m\omega}{\hbar}} \qquad (۹)$$

و

$$q_\pm^e = k_\| \cos\emptyset \pm \sqrt{k_\|^2 cos_\emptyset^2 - \frac{2m\omega}{\hbar}} \qquad (۱۰)$$

و برای یک بعدی به این صورت است:

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

$$q_{\pm}^{a} = -k_x \pm \sqrt{k_x^2 + \left(\frac{2m\omega}{\hbar}\right)} \quad (۱۱)$$

$$q_{\pm}^{e} = k_x \pm \sqrt{k_x^2 - \left(\frac{2m\omega}{\hbar}\right)} \quad (۱۲)$$

α ضریب ثابت فرولیخ است که به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\alpha = \frac{1}{2}\frac{e^2}{\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}}\left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_s}\right)/\hbar\omega \quad (۱۳)$$

با توجه به $q_l=1/L_0$ تاثیر کم L_z نرخ پراکندگی گسیل و جذب فونون سیم کوانتومی و چاه کوانتومی را بدست می‌آوریم. برای سیم کوانتومی این گونه هست[۱۰و۱۱و۱۲]:

$$\frac{1}{\tau_{1-D}^{e}(E)} = \frac{\alpha w}{2\pi}(N_q + 1)\frac{I_{1-D}^{e}[q_{+}^{e}(E)] + I_{1-D}^{e}[q_{-}^{e}(E)]}{\sqrt{\frac{E}{\hbar w} - 1}} \quad (۱۴)$$

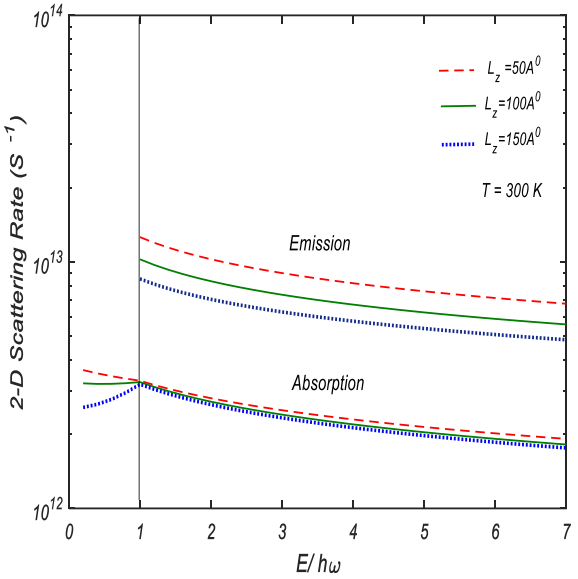
$$\frac{1}{\tau_{1-D}^{a}(E)} = \frac{\alpha w}{2\pi}N_q\frac{I_{1D}^{e}[q_{-}^{a}(E)]}{\sqrt{\frac{E}{\hbar w} + 1}} \quad (۱۵)$$

برای چاه کوانتومی به این صورت هستند:

$$\frac{1}{\tau_{2-D}^{e}(E)} = \frac{\alpha\omega}{\pi}(N_q + 1)\int_0^{\emptyset_{max}} d\emptyset \times \frac{I_{2-D}[q_{+}^{e}(E.\emptyset)]q_{+}^{e}(E.\emptyset) + I_{2-D}[q_{-}^{e}(E.\emptyset)]q_{-}^{e}(E.\emptyset)}{\sqrt{\frac{E}{\hbar\omega}\cos^2\emptyset + 1}} \quad (۱۶)$$

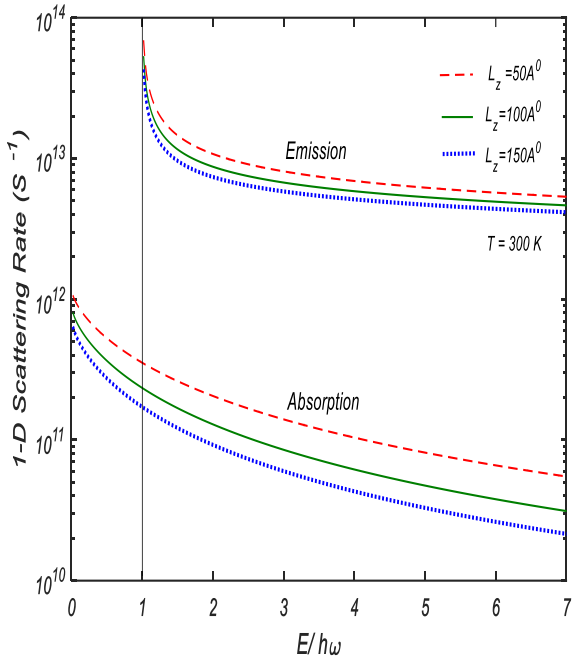
$$\frac{1}{\tau_{2-D}^{a}(E)} = \frac{\alpha\omega}{\pi}N_q\int_0^{\pi} d\emptyset\frac{I_{2-D}^{a}[q_{+}^{a}(E.\emptyset)]q_{+}^{a}(E.\emptyset)}{\sqrt{\frac{E}{\hbar\omega}\cos^2\emptyset + 1}} \quad (۱۷)$$

باتوجه به روابط بالا نرخ پراکندگی را بررسی می‌کنیم. شکل(۱) نرخ پراکندگی جذب و گسیل در چاه کوانتومی را نشان می‌دهد. در این شکل با افزایش انرژی و افزایش پهنای چاه کوانتومی نرخ پراکندگی جذب و گسیل فونون کاهش می‌یابد. همانطور که دیده می‌شود با افزایش پهنای چاه کوانتومی کاهش نرخ پراکندگی گسیل بیشتر از کاهش نرخ پراکندگی جذب است.



شکل ۱: نرخ پراکندگی گسیل و جذب فونون برای چاه کوانتومی در دمای ۳۰۰K

همچنین شکل(۲) نرخ پراکندگی جذب و گسیل برای سیم کوانتومی با ابعاد $L_y=50A^0$ و $L_z=50, 100, 150A^0$ را نشان می‌دهد. در این شکل با افزایش انرژی و ابعاد سیستم نرخ پراکندگی گسیل و جذب فونون کاهش می‌یابد. کاهش نرخ پراکندگی جذب بیشتر از کاهش نرخ پراکندگی گسیل است.



شکل۲: نرخ پراکندگی فرآیند گسیل و جذب فونون برای سیم کوانتومی با $L_{y=}\ 50A^0$ در دمای ۳۰۰ K.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

نتیجه گیری

ما در این مقاله روابط پراکندگی برهم کنش الکترون- فونون را در چاه ها و سیم های کوانتومی محاسبه نموده‌ایم. نرخ پراکندگی را براساس انرژی برای چاه‌های کوانتومی و سیم‌های کوانتومی شبیه سازی کرده‌ایم. نتایج نشان می‌دهد که با افزایش انرژی و ابعاد سیستم، نرخ پراکندگی در چاه ها و سیم های کوانتومی کاهش می‌یابد.

مرجع‌ها

[۱] M. A. Stroscio and M. Dutta; "Phonons in Nanostructures"; University of Cambridge, UK, 2000.
[۲] K. Huang and B. Zhu; "Dielectric continuum model and Frohlich interaction in superlattices"; Phys. Rev. B, **38**, (1988)13377-13386.
[۳] J. P. Leburton; "Size effects on polar optical phonon scattering of 1-D and 2-D electron gas in synthetic semiconductors"; J. Appl. Phys., **56**. (1984)2850-2855.
[٤] S. M. Komirenko and K. W. Kim; "Energy-dependent electron scattering via interaction with optical phonons in wurtzite crystals and quantum wells"; Phys. Rev. B. **61**. (1999)2034-2040.
[٥] A. Y. Maslov and O. V. Proshina; "Electron–phonon interaction in ll-Vl quantum wells"; Phys. Status. Solidi. **13**. (2016)507-509.
[٦] P. Kihoon and A. Mohamed; "Confined and interface optical phonon emission in GaN/InGaN double barrier quantum well heterostructures"; Plos. One. **14**. (2019)1-12.
[۷] B. K. Ridley; "Electrons and phonons in semiconductor multilayers "; University of Essex. UK, 1997.
[۸] D. Datta., K. Krishnababu, M. A. Stroscio1 and M. Dutta; "Effect of quantum confinement on lifetime of anharmonic decay of optical phonons in semiconductor nanostructures"; J. Appl. Phys. **30**. (2018)1-8.
[۹] E. Pavarini, E. Koch, R. Scalettar and R. Martin; "Electron-Phonon Coupling"; Karlsruhe Institute of Technology. (2017).
[۱۰] K. Park and A. Mohamed; "Investigation of electron mobility and saturation velocity limits in gallium nitride using uniaxial dielectric continuum model"; J. Appl. Phys. **121**. (2017)245109.
[۱۱] H. B. Teg, J. P. Sun, G. I. Haddad, M. A. Stroscio and K. W. Kim; "Phonon assisted intersubband transition in step quantum well structures"; J. Appl. Phys. **84.** (1998)2155-2164.
[۱۲] B. K. Ridley; "The electron-phonon interaction in quasi-dimensional semiconductor quantum well structures"; Solid State Physics. **28**. (1982)5899.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

محاسبه دز جذبی رادیونوکلیدهای ^{177}Lu، ^{153}Sm و ^{166}Ho با استفاده از کد MCNPX

وثوقی ، سارا[۱] ؛ سالک، نفیسه*[۲]

[۱] پژوهشکده کاربرد پرتوها، پژوهشگاه علوم و فنون هسته ای، انتهای خیابان کارگر شمالی ، تهران

[۲] پژوهشکده مواد و چرخه سوخت هسته ای، پژوهشگاه علوم و فنون هسته ای، انتهای خیابان کارگر شمالی ، تهران

چکیده

سه رادیونوکلید درمانی ^{177}Lu، ^{153}Sm و ^{166}Ho در صورت نشاندارشدن با عامل‌های استخوانخواه، در درمان متاستازهای استخوانی کاربرد دارند. در طراحی یک عامل درمانی، پرتوگیری حداقل بافت‌های غیر هدف و افزایش میزان در جذبی بافت هدف از اهداف اصلی به شمار می‌آیند. در این مطالعه، دز جذبی رادیونوکلیدهای ^{177}Lu، ^{153}Sm و ^{166}Ho در درمان متاستازهای استخوانی ، با استفاده از کد مونت کارلو MCNPX محاسبه گردید و نتایج با یکدیگر مقایسه شده است. نتایج نشان داده است که دز رسیده به بافت های سالم از طریق تابش بتا و گامای رادیونوکلید ^{177}Lu بسیار کمتر از دو رادیونوکلید دیگر می‌باشد.

واژه های کلیدی: *متاستازهای استخوانی، نشاندارسازی، دز جذبی،* MCNPX.

Dosimetry calculations of ^{177}Lu, ^{153}Sm and ^{166}Ho using MCNPX

Vosoughi, Sara[1]; Salek, Nafise*[2]

[1] Radiation Application Research School, Nuclear Science and Technology Research Institute (NSTRI), Tehran, Iran
[2]Material and Nuclear Fuel Research School, Nuclear Science and Technology Research Institute (NSTRI), Tehran, Iran

Abstract

The radiolabeling of bone seeking agents with ^{177}Lu, ^{153}Sm and ^{166}Ho radionuclides have been used in bone Metastases therapy. In design of a therapy agent, it is principal to consider the minimal exposure to the non-target tissues and increasing the absorbed dose in target tissue. In this study, the adsorbed doses of ^{177}Lu, ^{153}Sm and ^{166}Ho radionuclides in bone metastases therapy were calculated using the Monte Carlo MCNPX code and the results were compared. The results show that absorbed dose of normal tissue by beta and gamma radiation of ^{177}Lu is much lower than others.

***Keywords**: Metastases, labeling ,absorbed dose, MCNPX.*

PACS No. 28

مقدمه

تابش می‌تواند باعث اثرات آسیبی به سیستم‌های زنده گردد. بنابراین ارزیابی این اثرات در انسان برای یک رویه پزشکی هسته‌ای در تجویز درون تنی یک رادیودارو ضروری است. اثرات بیولوژیکی درمان با رادیونوکلید از طریق کمیت فیزیکی دز جذبی – که به صورت انرژی جذب شده در واحد جرم تعریف می‌گردد– بیان می‌شود. رادیونوکلیدهای با تابش بتا که نفوذ زیادی در بافت

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

دارند (حدود mm ۱۲-۲) با توجه به اندازه و موقعیت سلول‌های توموری انتخاب می‌شوند. برای نمونه هلمیوم-۱۶۶ با تابش بتا با انرژی بالا و برد متوسط حدود ۸/۳ میلیمتر در بافت نرم، برای تومورهای بزرگ انتخاب می‌شود [۱]. یون های سه ظرفیت ^{153}Sm، ^{177}Lu و ^{166}Ho اغلب به طور مستقیم به عامل‌های شلاته‌ساز[۱] قوی مثل DTPA [۲] ، HEDP [۳] ، DOTMP [۴] یا EDTMP[۵] به مولکول‌های زنده سرطان متصل می شوند[۳،۲].

اساس موفقیت درمان رادیونوکلئیدی تمرکز خوب، انتخابی و بقاء بلند مدت رادیودارو در محل تومور است که آن را از سایر روش-های درمان متمایز می‌کند. این روش درمان برای بیماران به خوبی قابل تحمل خواهد بود.

روش مونت کارلو یک روش عددی برای حل مسائل ریاضی بوسیله نمونه‌برداری تصادفی است. این روش به‌عنوان یک تکنینک عددی جامع بعد از ورود کامپیوتر به زمینه محاسبات عددی ظهور پیدا کرد. زمینه‌های کاربردی این روش با ظهور کامپیوترهای پیشرفته جدید، گسترش زیادی پیدا کرد. MCNPX از جمله کدهای هسته‌ای مبتنی بر روش مونت کارلو می‌باشد که موارد استفاده بسیار در زمینه هسته‌ای دارند. در این پژوهش، به منظور ترابرد ذرات بتا و همچنین پرتوهای گامای گسیل‌شده از رادیونوکلیدهای ذکر شده و بررسی میزان دز جذبی بافت‌های مورد مطالعه از کد MCNPX استفاده شده است [۴].

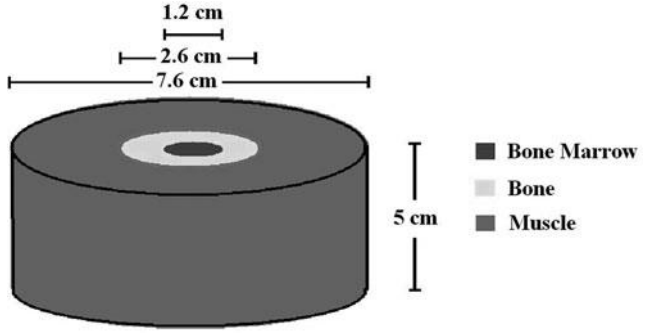
کد MCNPX یکی از قویترین کدهای محاسباتی هسته‌ای است که بر اساس روش مونت کارلو کار می‌کند. این کد در طراحی نوترونی راکتورهای هسته‌ای و بررسی ایمنی آنها، محاسبات مصرف سوخت، طراحی خفاظ، طراحی آشکارسازها، چاه‌پیمایی هسته‌ای، طراحی هدف در شتاب‌دهنده‌ها، پرتوپزشکی و....کاربردهای بسیاری دارد. این کد برای اولین بار در سال ۱۹۶۳ در آزمایشگاه لوس‌آلاموس، تحت عنوان MCS، تهیه شد ودر سال ۱۹۷۷ برای اولین بار با نام MCNP ارائه گردید و در ادامه نسخه‌های 4A و 4B، که تنها ذرات نوترون و فوتون را در نظر می‌گرفت، ارائه شد. در سال ۲۰۰۰ ذره الکترون به نسخه قبلی آن اضافه گردید و با نام MCNP4C به بازار آمد. بعد از آن نسخه‌های X، ۵ و ۶ ارائه گردید که دارای قابلیت‌های فراوانی می‌باشند، از جمله اینکه می‌توان حداقل ۳۵ نوع ذره مختلف را در آنها در نظر گرفت. در این تحقیق از نسخه X۲/۶ که در سال ۲۰۰۸ ارائه شده است، استفاده گردید. برای استفاده از این کد بایستی یک فایل ورودی با ساختار مشخص شامل اطلاعات مسئله شامل هندسه، مواد، چشمه، نوع خروجی و غیره تهیه گردد. کد با در نظر گرفتن اطلاعات فایل ورودی و استفاده از کتابخانه سطح مقطع‌ها، مسئله را حل و نتایج را در یک فایل خروجی تولید می‌کند [۴].

روش کار

به‌منظور شبیه‌سازی دز جذبی و دز معادل استخوان و سایر اندام‌های مجاور آن هنگام تزریق رادیوداروهای استخوان‌خواه، از یک فانتوم ساده متشکل از مغز قرمز استخوان، استخوان و بافت نرم اطراف استفاده می‌شود. شبیه‌سازی‌ها با یک تا دو میلیون تاریخچه انجام شده و خطای تالی‌های محاسبه شده کمتر از ۰/۵٪ بوده است.

تعریف هندسه فانتوم استخوان ران

برای شبیه‌سازی قسمتی از استخوان ران از هندسه استوانه‌ای استفاده گردید. به‌منظور شبیه‌سازی عضله، استخوان و مغز استخوان به‌ترتیب از استوانه‌هایی به قطر ۷/۶، ۲/۶ و ۱/۲ سانتیمتر و ارتفاع ۵ سانتیمتر استفاده شد. ساختمان فیزیکی استخوان ران با استفاده از متون علمی تعریف شده است [۵، ۶]. طول استخوان ران انسان ۴۸ سانتی‌متر و قطر آن ۲/۳۴ سانتی‌متر است. فانتوم ران استخوان مدل‌سازی شده در شکل۱ نشان داده شده است.



شکل ۱ هندسه فانتوم مدل‌سازی شده [192].

[۱] Chelating agent
[۲] Di acetic acid penta ethylenetriamine
[۳] Hydroxyl ethylidene-dipHospHonate
[۴] Ethylene Diamine Tetramethylene PHospHonate
[۵] Ethylene Diamine Tetramethylene PHospHonate

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

تعریف چشمه

MCNPX برای ترابرد ذرات نیاز به تعریف چشمه در فایل ورودی دارد. چشمه شامل نوع ذره، مکان، انرژی و جهت ذرات است. چشمه‌ها در این شبیه‌سازی به‌صورت حجمی و همگن با توزیع یکنواخت مواد رادیواکتیو در داخل آنها تعریف شدند. در کد MCNPX، چشمه‌های حجمی در کارت داده با دستورات ERG، PAR، POS، AXs، EXT و RAD تعریف می‌شود. این دستورات به‌ترتیب بیانگر انرژی، نوع ذره، موقعیت، راستا، ارتفاع و شعاع پوسته‌های استوانه‌ای می‌باشد. در این کار، برای تعریف انرژی از طیف پیوسته بتا برای رادیونوکلیدها استفاده گردید [۷]. از آنجایی‌که رادیوداروهای استخوان‌خواه به دلیل عامل فسفانات روی سطح استخوان جذب می‌شوند [۸]، در این تحقیق فرض شد که این رادیوداروها در بافت استوانه‌ای استخوان از شعاع ۱/۱ تا ۱/۳ سانتیمتر و کل ارتفاع استوانه به‌طول ۵ سانتیمتر به‌طور همگن توزیع شوند.

تعریف مواد و تالی استفاده شده

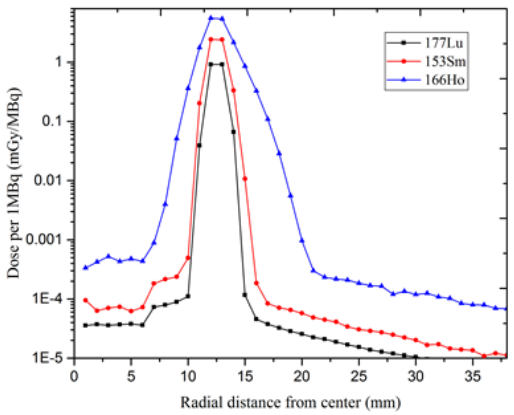
به‌منظور محاسبه دز جذبی بافت‌ها، از تالی F8* استفاده شد. تالی مورد نظر انرژی به‌جا گذاشته شده در سلول را فقط به‌ازای یک تابش فرودی محاسبه می‌کند. خروجی این کد برای تالی مورد نظر بر حسب MeV ارائه می‌شود که با تقسیم عدد بدست آمده بر جرم سلول و ضرب عدد حاصل در ضریب تبدیل انرژی به ژول ($1MeV=1/6\times10^{-13}J$)، دز جذبی مربوط به آن نوع تابش بر حسب گری (Gy) بر هر تاریخچه بدست خواهد آمد. با ضرب مقدار نهایی بدست آمده بر حسب گری بر تاریخچه، در نسبت انشعاب آن نوع تابش، نتایج بر حسب Gy/Bq بدست خواهد آمد. با دانستن اکتیویته تجمع یافته در بافت استخوان و ضرب آن در عدد بدست آمده، می‌توان به دز جذبی هر بافت دست یافت.

در این شبیه‌سازی، ترکیب و چگالی بافت‌ها از داده‌های انسانی منطبق بر توصیه‌های ICRP بدست آمد [۹]. چگالی مغز استخوان، بافت استخوان و بافت نرم به‌ترتیب $1/06 gcm^{-1}$، $1/85 gcm^{-1}$ و $1/03 gcm^{-1}$ در نظر گرفته شد.

نتایج

توزیع دز جذبی برای سه رادیونوکلید ^{177}Lu، ^{153}Sm و ^{166}Ho در هندسه تعریف شده با استفاده از کد بدست آمده است و با یکدیگر مقایسه گردیده‌اند. فرض بر این است که در صورت نشاندارشدن عامل‌های فسفاناتی با هر یک از این سه رادیونوکلید با فرض یکسان بودن لیگاند نشاندار شده برای هر سه رادیونوکلید میزان جذب اکتیویته تزریق شده به ازای 1MBq در عضله، بافت استخوانی و مغز استخوان بررسی شده‌است. به دلیل جذب سطحی فسفانات‌ها در استخوان، چشمه در بافت استوانه‌ای استخوان از شعاع ۱/۱ تا ۱/۳ سانتی‌متری استخوان فرض کرده‌ایم. توزیع دز جذبی حاصل از توزیع اکتیویته استوانه‌ای با استفاده از دستور F8* محاسبه و منحنی آنها رسم گردید. از آنجایی که رادیوداروهای مورد بررسی، هم بتازا و هم گامازا هستند. بنابراین توزیع دز تابشی برای هم ذرات الکترون (بتا و الکترون اوژه) و هم فوتون (گاما و اشعه ایکس) در نظر گرفته شده است.

شکل ۲، دوز جذبی حاصل از تابش‌های بتا و گاما را در مغز استخوان، بافت استخوان و بافت نرم در راستای شعاع بر حسب فاصله از مرکز برای سه رادیونوکلید ^{177}Lu، ^{166}Ho و ^{153}Sm نشان می‌دهد. دز جذبی حاصل از پرتوهای بتا و گامای ^{177}Lu در مغز استخوان و همچنین بافت نرم کمتر از دو رادیونوکلید دیگر است، درحالی که توزیع دز در بافت استخوانی برای سه رادیونوکلید مشابه یکدیگر است. هر چند که برای رادیونوکلید ^{177}Lu مقدار دز کمتر از دو رادیونوکلید دیگر می‌باشد ولی مقدار آن با دز ^{153}Sm که رادیونوکلیدی است که به طور معمول برای درمان متاستازهای استخوانی استفاده می‌گردد، برابری می‌کند.



: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

شکل۲ توزیع دز شعاعی حاصل از ذرات بتا و گامای رادیونوکلیدهای ^{177}Lu، ^{166}Ho و ^{153}Sm.

جدول ۱ دز کل جذب شده برحسب mGy در هریک از ارگان-های مورد بررسی را برای تزریق 1MBq اکتیویته نشان می‌دهد. دز کل رسیده به مغز استخوان برای رادیونوکلید ^{177}Lu کمتر از ^{166}Ho و ^{153}Sm می‌باشد. این زمانی که نیاز است اکتیویته بالایی از رادیوداروی مورد نظر به بیمار تزریق گردد، اهمیت پیدا می‌کند. دز رسیده به بافت سالم و مغز استخوان که ارگان بحرانی برای کاربردهای متاستازهای استخوانی محسوب می‌گردد، برای رادیونوکلید ^{166}Ho و ^{153}Sm بسیار بالاتر است و می‌تواند این بافت‌ها را مورد آسیب قرار دهد. دز کل رسیده که بافت استخوانی که هدف رادیوراداروهای تسکین درد استخوان است برای ^{177}Lu و ^{153}Sm بسیار نزدیک به هم می‌باشد بنابراین رادیونوکلید ^{177}Lu، کاندیدای مناسبتری برای این کاربردها می‌باشد زیرا دز مورد نظر را با کمترین آسیب به بافت هدف می‌رساند. رادیونوکلید ^{166}Ho با تو جه به انرژی بالای آن برای تخریب مغز استخوان در مراحل پیشرفته سرطان استفاده می‌گردد.

جدول۱: دز کل جذب شده حاصل از پرتوهای بتا و گاما برای سه رادیونوکلید ^{177}Lu، ^{153}Sm و ^{166}Ho

دز کل رسیده به ارگان (mGy/MBq)	^{177}Lu	^{153}Sm	^{166}Ho
مغز استخوان	$۷/۴۹\times۱۰^{-۵}$	۰/۰۰۰۱۳	۰/۰۰۰۲
استخوان	۰/۰۰۲۱	۰/۰۰۵۲	۰/۰۱۳۶
عضله	۰/۰۰۰۲	۰/۰۰۰۴۸	۰/۰۰۳۹

میزان دوزی که در بافت‌های هدف و غیر هدف ایجاد می‌گردد، غالباً مربوط به تابش‌های الکترونی رادیودارو می‌باشد و از آنجایی که نفوذ پرتو بتا به انرژی آن بستگی دارد، دز حاصل از پرتو بتای هلمیوم به بافت‌های اطراف و مغز استخوان باید بیشتر باشد که محاسبات این موضوع را تایید می‌کند. سهم مربوط به تابش‌های گاما خیلی کمتر از سهم مربوط به ذرات بتای آن می‌باشد و در بررسی رادیوداروها این موضوع باید در نظر گرفته شود.

نتیجه گیری

نتایج محاسبات دزیمتری با کد MCNPX نشان داد که دز رسیده به بافت‌های سالم برای رادیونوکلید ^{177}Lu بسیار کمتر از دو رادیونوکلید ^{153}Sm و ^{166}Ho می‌باشد و در صورت استفاده از اکتیویته‌های بالا برای کاربردهای بالینی، با رساندن بیشینه دز به متاستازهای استخوانی، کمترین آسیب را در مغز استخوان بیمار می‌رساند.

مرجع‌ها

[۱] Shuang Liu and D.Scott Edwards, Biofunctional Chelators for Therapeutic Lanthanide Radiopharmaceutical, Bioconjugate Chem;, 12(1), pp 7-34, 2001.

[۲] Sudipta Chakraborty, Tapas Das, Haladhar Dev Sarma, Meera Venkatesh, Sharmila Banerjee." Comparative Studies of ^{177}Lu-EDTMP and ^{177}Lu-DOTMP as potential agents for palliative radiotherapy of bone metastasis ".Appl.Radiat.Isot. 66: pp 1196-1205, 2008.

[۳] Sandar W.Zielhuis, and co-workers; "Long-term toxicity of holmium-loaded poly(L-lactic acid) microspheres in rats", Biomaterials.28 , pp4591-4599, 2007.

[۴] Pelowitz, D.B., MCNPX user's manual version 2.5. 0. Los Alamos National Laboratory, 76, 2005.

[۵] Lewington, V.J., McEwan, A.J., Ackery, D.M., Bayly, R.J., Keeling, D.H., Macleod, P.M., Porter, A.T. and Zivanovic, M.A., A prospective, randomised double-blind crossover study to examine the efficacy of strontium-89 in pain palliation in patients with advanced prostate cancer metastatic to bone. Eur. J. Cancer, 27(8), pp.954-958, 1991.

[۶] Robinson, R.G., Spicer, J.A., Preston, D.F., Wegst, A.V. and Martin, N.L., Treatment of metastatic bone pain with strontium-89. Nucl Med Biol, 14(3), pp.219-222 (1987).

[۷] http://www.doseinfo-radar.com/RADARDecay.html.

[۸] Bagheri, R., Afarideh, H., Maragheh, M.G., Shirmardi, S.P. and Samani, A.B., Study of Bone Surface Absorbed Dose in Treatment of Bone Metastases via Selected Radiopharmaceuticals: Using MCNP4C Code and Available Experimental Data. Cancer. Biother. Radiopharm, 30(4), pp.174-181,2015.

[۹] International Commission on radiological protection. Committee 2, Basic Anatomical and Physiological Data for Use in Radiological Protection: the Skeleton: A Report of a Task Group of Committee 2 of the International Commission on Radiological Protection Adopted by the Commission in July 1994. Pergamon Press (1995).

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بررسی جت‌های کوارک و گلوئون در سه برهمکنش مختلف

صالح‌مقدم، ریحانه[۱] ؛ زمردیان، محمد ابراهیم[۱]

[۱]دانشکده فیزیک دانشگاه فردوسی مشهد، میدان آزادی، ۱۴۳۶-۹۱۷۷۵، مشهد

چکیده

به منظور محاسبه مقدار ثابت جفت‌شدگی در این مقاله، به تفکیک جت‌های کوارک و گلوئون ذرات باردار در برهمکنش‌های مختلف می‌پردازیم. جداسازی و تفکیک جت‌های کوارک و گلوئون را از طریق به‌کارگیری الگوریتم JADE انجام می‌دهیم. سپس با تفکیک آن‌ها، چندگانگی ذرات باردار هر جت در انرژی‌های مرکز جرم مختلف را مورد بررسی قرار داده و با توجه به نمودار میانگین چندگانگی جت‌های کوارک و گلوئون مشاهده می‌کنیم که با افزایش انرژی مرکز جرم، چندگانگی ذرات نیز سیر صعودی دارند که البته آمار افزایشی جت‌های گلوئون همواره در تمامی برهمکنش‌ها نسبت به جت‌های کوارک بالاتر است. در نهایت نیز با محاسبه نسبت چندگانگی جت‌های گلوئون به چندگانگی جت‌های کوارک (r) مقدار ثابت جفت‌شدگی را در هر انرژی به‌دست می‌آوریم. جزئیات بیشتر از این مطالعات و بررسی‌ها در متن مقاله آمده است.

The study of quark and gluon jets in three different interactions

Saleh Moghaddam, Reihaneh[1]; Zomorrodian, Mohammad Ebrahim[1]

[1]Department of Physics, Ferdowsi University of Mashhad, 91775-1436, Mashhad, Iran

Abstract

In this paper, we calculate the values of strong coupling constant by separating the quark and gluon jets in different interactions. We use the JADE algorithm for separating jets. Then we study the multiplicity of the charge particles in jets for different center of mass energies. By considering the average multiplicity of quark and gluon jets, we observe that this multiplicity is rising by increasing energy. Also these values for gluon jets are considerably higher than the values for quark jets. By calculating the ratio of multiplicity for quark and gluon jets, we obtain the strong coupling constant in different energies as well as different interactions. More details will be explained in the main text.

PACS No. 13.66.Bc; 12.38.Bx

مقدمه

در انواع برهمکنش‌ها، زوج کوارکی که از واپاشی بوزون واسطه تولید می‌شوند، شروع به تابش گلوئون‌هایی می‌کنند که به نوبه‌ی خود تبدیل به گلوئون های دیگر و یا تبدیل به زوج کوارک دیگر می‌شوند. این‌روش به بارش پارتونی معروف است و بر طبق مدل *QCD* گلوئون‌ها حامل رنگ بیشتری نسبت به کوارک‌ها هستند. این باعث افزایش چندگانگی جت‌های گلوئون نسبت به جت‌های کوارک می‌شود. بنابراین سهم هر ذره از انرژی در جت‌های گلوئون کاهش می‌یابد که این نیز به نوبه‌ی خود باعث کاهش انرژی جت گلوئون نسبت به جت کوارک می‌شود [۱].

در این مقاله از داده‌های شبیه‌سازی‌شده مونت کارلو استخراج شده از برنامه *PYTHIA* برای سه نوع برهمکنش الکترون-پوزیترون، الکترون-پروتون و پروتون-پروتون استفاده می‌شود.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

الگوریتم *JADE*

یک جت عبارت است از مجموعه‌ای از هادرون‌ها که همگی در یک جهت حرکت می‌کنند. می‌توان این جت‌ها را به عنوان محصولات واپاشی کوارک‌ها تعبیر کرد. بنابراین کوارک‌ها به طور غیرمستقیم به‌صورت جت‌های کوارکی حاصل از آزمایش‌ها قابل مشاهده‌اند و رویدادی دو جتی ایجاد می‌شود. همچنین امکان دارد که کوارک و پادکوارک حاصل از نابودی، گلوئون تابش کنند که بنابراین با رویدادهای سه‌جتی و یا حتی چند جتی روبه‌رو می‌شویم.

هر جت یک محور اصلی دارد که مشخصه‌ی آن جت می‌باشد. محور اصلی یا محور تراست، محوری در امتداد بیشینه مؤلفه طولی اندازه حرکت ذرّات است.

الگوریتم‌های یابنده جت (در اینجا الگوریتم JADE) براساس ترکیب خوشه‌ای زوج ذرات نزدیک به یکدیگر کار می‌کند. این الگوریتم برای تشکیل شبه ذرات بنا شده‌اند که در آن، تشکیل شبه ذرات به صورت تکراری برای ترکیب ذرات ادامه می‌یابد تا زمانی که رویدادها شامل تعداد اندکی شبه ذره جداشده مناسب در چارچوب قواعد تعریف شده در الگوریتم مورد نظر قرار گیرند. این شبه ذرات باقی مانده جت‌های خروجی را تشکیل می‌دهند. برای تعیین نزدیکی ذرات به یکدیگر در درون یک جت از cutoff اندازه حرکت عرضی استفاده می‌شود. اساس متداول‌ترین نوع الگوریتم‌های خوشه‌ای عبارتست از [۲].

الف) تعیین پارامتر تفکیک Y_{cut}

ب) محاسبه‌ی جدایی متناظر Y_{kl} برای هر یک از جفت ذرات k و l

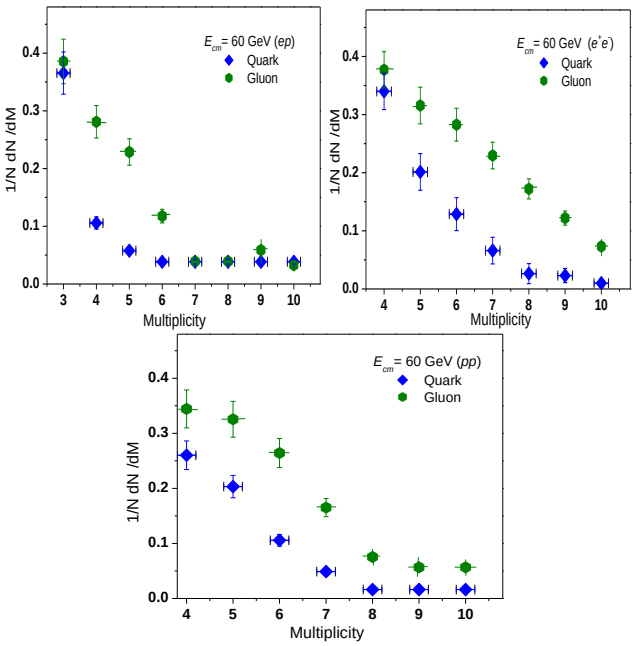
ج) اگر مقدار Y_{kl} محاسبه شده در قسمت (ب) کوچکتر یا مساوی از مقدار در نظر گرفته‌ی Y_{cut} باشد، دو ذره در یک جهت یا دسته قرار می‌گیرند. به این ترتیب یک شبه ذره ایجاد می‌شود.

د) مراحل (ب) و (ج) تا زمانی ادامه می‌یابد که $Y_{kl} \geq Y_{\text{cut}}$ شود. در اینصورت ذراتی که در یک دسته (جهت خاص) قرار گرفته‌اند، یک جت را تشکیل می‌دهند. همچنین ذرات در دسته‌های مشخص دیگر نیز تشکیل جت می‌دهند، به این ترتیب ذرات در دسته‌هایی موسوم به جت تفکیک می‌شوند و رویدادهای چندجتی شکل می‌گیرند. تعداد این دسته‌ها، تعداد جت های هر رویداد را مشخص می‌کنند.

نتایج فیزیکی

هدف ما در این مقاله، بررسی جت‌های کوارک و گلوئون به منظور محاسبه ثابت جفت‌شدگی در سه نوع برهمکنش مختلف است. این برهمکنش‌ها عبارتند از برهمکنش نابودی الکترون-پوزیترون، برهمکنش الکترون-پروتون و برهمکنش پروتون-پروتون. برای دستیابی به این هدف، ابتدا به کمک الگوریتم JADE که در بخش قبل توضیح داده شد، به تفکیک و جداسازی جت‌های کوارک و گلوئون از یکدیگر می‌پردازیم.

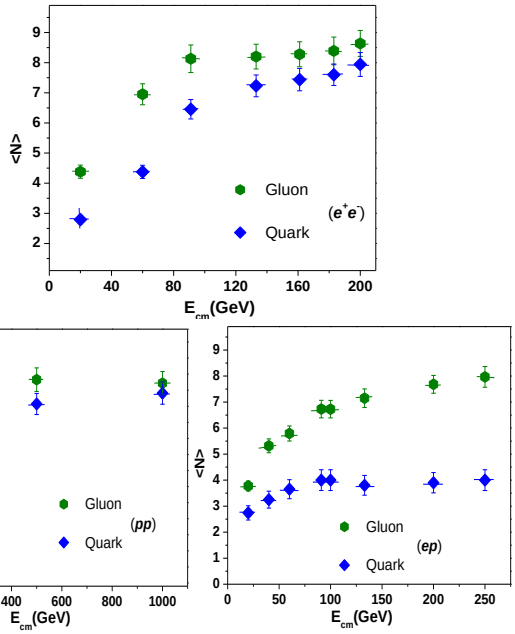
در ابتدا با استفاده از جداسازی جت‌های کوارک و گلوئون، چندگانگی آن‌ها را در برهمکنش‌های مختلف مورد بررسی و مقایسه قرار می‌دهیم. توزیع چندگانگی متناظر با این برهمکنش‌ها برای انرژی ۶۰GeV در شکل ۱ مشاهده می‌شود. همانطور که از نمودارها پیداست چندگانگی برای جت‌های گلوئون در مقایسه با جت‌های کوارک دارای مقادیر بالاتری است.



شکل ۱ : نمودار توزیع چندگانگی جت‌های کوارک و گلوئون ذرات باردار برای برهمکنش‌های مختلف در انرژی مرکز جرم ۶۰GeV.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد :
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

با به‌دست آوردن چندگانگی جت‌های کوارک و گلوئون ذرات باردار در انرژی‌های مختلف از برهمکنش‌های متفاوت، اکنون می‌توان با میانگین‌گیری از مقادیر چندگانگی در هر انرژی مرکز جرم، نمودار میانگین چندگانگی جت‌های کوارک و گلوئون را برحسب انرژی مرکز جرم رسم نمود که این نمودار در شکل ۲ نشان داده شده است. از این شکل نیز مشخص است که در انرژی‌های مشابه، میانگین چندگانگی جت‌های گلوئون در هر سه نوع برهمکنش از میانگین جت‌های کوارک بالاتر است و این مقادیر با افزایش انرژی مرکز جرم نیز در حال بیشتر شدن هستند و سیر صعودی دارند. این امر به دلیل احتمال بیشتر گسیل گلوئون در انرژی‌های بالاست که در نظریه QCD نیز پیش‌بینی شده است.

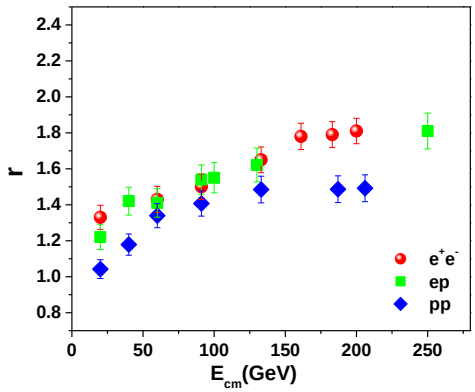


شکل۲ : نمودار میانگین توزیع چندگانگی جت‌های کوارک و گلوئون برحسب انرژی مرکز جرم برای برهمکنش‌های مختلف.

در مرحله بعد، نسبت چندگانگی جت‌های گلوئون را به چندگانگی جت‌های کوارک مورد بررسی قرار می‌دهیم. این نسبت را که با r مشخص می‌شود [۳]:

$$r = \frac{\langle N_G \rangle}{\langle N_Q \rangle} \qquad (۱)$$

که مقدار مجانبی آن از نسبت ضرایب رنگ $r = \frac{C_A}{C_F} = 2.25$ قابل محاسبه است. همان‌گونه که در شکل ۳ نسبت r برحسب انرژی مرکز جرم برای سه نوع برهمکنش نشان داده شده است، با افزایش انرژی مرکز جرم مقدار r سیر صعودی دارد و چنانچه این روند برای انرژی‌های بالاتر ادامه یابد پارامتر r به مقدار مجانبی ۲/۲۵ میل می کند.



شکل۳ : نسبت چندگانگی جت‌های گلوئون به چندگانگی جت‌های کوارک برای برهمکنش‌های مختلف.

با استفاده از این نسبت و روابط زیر [۳] می‌توان مقدار ثابت جفت‌شدگی را برای انرژی‌های مختلف در انواع برهمکنش‌ها به‌دست آورد. مقادیر آن‌ها در جدول ۲ تا ٤ آمده است.

$$r(Q) = r_0(1 - r_1\gamma_0 - r_2\gamma_0^2 - r_3\gamma_0^3) \qquad (۲)$$

$$\gamma_0(Q) = \sqrt{2C_A\alpha_s(Q)/\pi} \qquad (۳)$$

در این روابط $r_0 = \frac{C_A}{C_F} = 2.25$ و ضرایب تصحیحی r_i برحسب تعداد طعم‌ها از جدول ۱ استخراج شده است [٤]:

جدول۱ : ضرایب تصحیحی استفاده شده برحسب تعداد طعم‌ها

n_F	r_1	r_2	r_3
3	0.185	0.426	0.189
4	0.191	0.468	0.080
5	0.198	0.510	−0.041

این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد :
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

جدول۲ : مقدار ثابت جفت‌شدگی در انرژی‌های مختلف نابودی الکترون-پوزیترون.

$E_{cm}(GeV)$	$\alpha_s(e^+e^-)$
20	0.1319 ± 0.02
60	0.1314 ± 0.022
91	0.121 ± 0.012
133	0.1174 ± 0.009
161	0.117 ± 0.031
183	0.121 ± 0.035
200	0.1282 ± 0.028

جدول۳ : مقدار ثابت جفت‌شدگی در انرژی‌های مختلف برهمکنش الکترون-پروتون.

$E_{cm}(GeV)$	$\alpha_s(e^{\pm}p)$
20	0.1455 ± 0.027
40	0.1198 ± 0.002
60	0.1049 ± 0.014
91	0.1035 ± 0.015
100	0.1015 ± 0.017
130	0.1017 ± 0.017
250	0.1008 ± 0.018

جدول٤ : مقدار ثابت جفت‌شدگی در انرژی‌های مختلف برهمکنش پروتون-پروتون.

$E_{cm}(GeV)$	$\alpha_s\ (pp)$
20	0.1889 ± 0.032
40	0.1852 ± 0.028
60	0.1435 ± 0.025
91	0.1288 ± 0.012
133	0.1184 ± 0.008
187	0.1091 ± 0.015
500	0.1063 ± 0.012

همان‌طور که از اعداد به‌دست آمده پیداست، مقادیر ثابت جفت-شدگی با درنظر گرفتن خطای آماری، از مرتبه ۰/۱ هستند که با پیش‌بینی QCD و نتایج به‌دست آمده در براوردهای قبلی [۵] سازگاری و مطابقت خوبی دارند.

نتیجه‌گیری

در این مقاله، به تفکیک جت‌های کوارک و جت های گلوئون در برهمکنش‌های مختلف می‌پردازیم. جداسازی و تفکیک جت‌های کوارک و گلوئون از طریق به کارگیری الگوریتم JADE صورت می‌گیرد. با تفکیک جت‌ها از یکدیگر، چندگانگی ذرات باردار هر جت را در انرژی‌های مرکز جرم مختلف مورد بررسی قرار می‌دهیم. با مشاهده نمودار میانگین چندگانگی جت‌های کوارک و جت‌های گلوئون نتیجه می‌گیریم که با افزایش انرژی مرکز جرم، چندگانگی ذرات سیر صعودی دارند. همچنین مشاهده می‌شود که در تمامی انواع برهمکنش‌ها، میانگین چندگانگی جت‌های گلوئون نسبت به میانگین چندگانگی جت‌های کوارک بیشتر است. در نهایت نیز با محاسبه نسبت چندگانگی جت‌های گلوئون به چندگانگی جت‌های کوارک (r)، مقدار ثابت جفت‌شدگی را در هر انرژی به‌دست می-آوریم. مشاهده می‌شود نتایج حاصل از نمودارها و نتایج مقدار ثابت جفت‌شدگی با مقدار پیش‌بینی‌شده QCD سازگاری و همخوانی کامل دارند.

مرجع‌ها

[۱] OPAL Coll., G. Abbiendi et al., *Eur. Phys. J. C.* **11217** (1999).
[۲] JADE and OPAL Collaboration, G. Abbiendi et.al. *Eur. Phys. J. C.* **1719** (2000).
[۳] I.M. Dremin and J.W. Gary, *Phys. Lett. B.* **459** 341-346 (1999).
[۴] A. Capella, I.M. Dremin and et, al. *Phys. Rev. D.* **61** 074009 (2000).
[۵] R. Saleh-Moghaddam and M. E. Zomorrodian, *Indian J Phys*, **93** 9 1211–1217 (2019).

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مطالعه تراز زمینه ایزوتوپ‌های $^{22-26}O$ با استفاده از برهم‌کنش‌های موثر نوکلئون- نوکلئون

نادری بنی، احمد[۱]؛ رئیسی، مرتضی[۲]؛ اسماعیلی، جعفر[۲]؛ امینی مصطفی‌آبادی، کبری [۲]

[۱] گروه فیزیک، بخش علوم پایه، دانشگاه پیام نور، ص. پ. ۳۶۹۷-۱۹۳۹۵ تهران، ایران

[۲] گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه شهرکرد، شهرکرد ۱۱۵

چکیده

در این تحقیق با استفاده از برهم کنش های موثر نوکلئون-نوکلئون مختلف انرژی حالت زمینه زنجیره ایزوتوپی $^{22-26}O$ مورد بررسی قرار گرفته است. مقادیر انرژی زمینه که بر اساس برهم‌کنش‌های رهیافت تجربی و نیمه تجربی هستند نشان می‌دهند که مرزگسیل نوکلئونی در ^{24}O قرار دارد که با مقادیر تجربی سازگار است. در حالی‌که برهم‌کنش واقعیتر BONN-A این مرز را فراتر از ایزوتوپ N=۱۶ پیش بینی می‌کند. همچنین با بهره‌گیری ازنتایج تجربی حاصل از اندازه گیری های جدید و فرض جادویی بودن ^{24}O نشان داده‌ایم که در مورد ایزوتوپ‌های ۲۶ و N= ۲۵ مقادیر برهم‌کنش های تجربی و نیمه‌تجربی بهتر می‌تواند خواص هسته‌ها را در مجاورت خط گسیل نوکلئونی تفسیر کند.

Study of ground states of $^{22-26}O$ isotopes by using effective nucleon-nucleon interactions

Naderi Beni, Ahmad[1]; Raeisi, Morteza[2]; Esmaili, Jafar[2]; Amini Mostafiabadi, Kobra[2]

[1] Department of Physics, Payame Noor University, P. O. Box 19395-3697, Tehran, Iran
[2] Department of Physics, Shahrekor University , 115, Iran

Abstract

In this research, the ground state energies of isotope chain O^{22-26} were studied by using different nucleon-nucleon effective interactions. The obtained values show that interactions based on empirical or semi-empirical interactions correctly predict nucleon decay line at O^{24} which is consistent with the experimental values. However, the more realistic interaction of BONN-A predicts this boundary beyond the N=16 isotope. Also, using experimental results from new measurements and the assumption that O^{24} is magical, we have shown that in the case of isotopes N =25 and N =25, the values of experimental and semi-experimental interactions can better interpret the properties of the nuclei adjacent to the nucleon drip line.

PACS No. 20, 21

مقدمه

یکی از جنبه‌های مهم ساختار لایه‌ای هسته‌ها بررسی گاف‌های انرژی در طیف ترازهای تک‌ذره‌ای می‌باشد. اعداد جادویی ۲، ۸، ۲۰، ۲۸،۵۰، ۸۲ و ۱۲۶ که بر اساس پر شدن این ترازهای تک‌ذره-ای به‌وجود آمده مبین گاف‌های انرژی بین مدارهای هسته‌ای در محدوده هسته‌های پایدار است [۱]. برای هسته‌های ناپایدار، گاف-ها می‌توانند دچار تغییر شوند که به عنوان نمونه می‌توان ایزوتوپ-های اکسیژن را به ازای N=۱۴-۱۸ که نتیجه‌ای از وجود گاف‌های انرژی در این محدوده جرمی است، نام برد [۲]. بررسی های اخیر نشان می‌دهند که برهم‌کنش اسپین-مدار با افزایش نوترون کاهش می‌یابد [۳]. هرچند وابستگی اعداد جادویی به عدد نوترونی و پروتونی را می‌توان به صورت کیفی بر اساس مدل‌های پدیده-شناختی میدان میانگین درک کرد اما ارتباط مستقیم این وابستگی به برهم‌کنش‌های پایه میان نوکلئون‌ها به صورت کمی و مفهومی مشخص نشده است. نتایج مدل‌سازی‌های اخیر حاکی از آن است

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

که در هسته‌های با A>۱۲ برهم‌کنش‌های سه-جسمی اهمیت زیادی دارند. ایزوتوپ‌های اکسیژن جزء سنگین‌ترین هسته‌هایی هستند که برای آن‌ها خط گسیل نوترون به لحاظ تجربی قابل شناسایی هستند [٤]. حالت‌های پایه‌ی هسته‌هایی که درون خط گسیل هستند، نوعاً طول عمرهای واپاشی β را دارا هستند(درحدود چند میلی ثانیه). برای هسته‌هایی که خارج از محدوده جرمی خط گسیل قرار دارند، طول عمرها دارای مشخصه برهم-کنش قوی بین نوترون‌های نامقید و هسته‌ها می‌باشند (s 10^{-21}). بنابراین در یک آزمایش که در آن شکسته شدن یک هسته سنگین در اثر برخورد به یک هدف، باعث تولید یک هسته اگزوتیک بسیار ناپایدار می‌شود، هسته‌های موجود در داخل خط گسیل را می‌توان از طریق یک طیف‌سنج جرمی از هم جدا و لذا خواص آن‌ها را به وسیله یک آشکارساز دور از هدف مطالعه نمود و این درحالی است که هسته‌های خارج از دره پایداری ، سریعاً در هدف دچار واپاشی می‌شوند. با استفاده از این تکنیک هسته ^{24}O در درون خط گسیل و ^{25}O [٥و ٦] ^{26}O [٧و ٨] ^{27}O [٩] و حتی ^{28}O [١٠] در خارج از خط گسیل هستند. در کار حاضر در ابتدا هدف بررسی این رفتار با استفاده از برهم‌کنش های دوجسمی موثر نوکلئون می-باشد در اینجا از پنج برهمکنش استفاده می‌شود. سپس از داده‌های جدید مربوط به ایزوتوپ‌های ۲٦ و۲٥ $N=$ برای تعیین عنصر ماتریسی $\langle jj';JT|V|jj';JT\rangle = \langle ٣٣;٠١|V|٣٣;٠١\rangle$ و مقایسه آن با پنج برهم‌کنش ذکر شده استفاده می‌شود.

در محاسبات انجام گرفته هسته ^{16}O به عنوان مغز در نظر گرفته شده است. بقیه نوترون‌ها به صورت نوترون ظرفیت در فضای مدل sd که شامل مدارهای تک‌ذره ای $0d_{5/2}$ ، $1s_{1/2}$ و $0d_{3/2}$ هستند حرکت می کنند. تابع موج هسته برحسب دترمینان اسلیتر که مربوط به چینش های مختلف نوترون‌های ظرفیت هستند بسط داده می‌شود. با قطری کردن هامیلتونی هسته در فضای پایه ساخته شده مقادیر انرژی و تابع موج‌ها به ازای اسپین کل، ایزواسپین کل و پاریته مشخص محاسبه می‌شوند. مسئله مهم در اینجا وابستگی عناصر ماتریسی هامیلتونین به عناصر ماتریسی دوجسمی نوکلئون-نوکلئون می‌باشد. این عناصر بر اساس سه رهیافت تجربی، نیمه-تجربی و روش واقعیتر *G-matrix* محاسبه شده‌اند در حالت کلی نتایج مربوط به رهیافت تجربی سازگاری بیشتری با مقادیر تجربی دارد. پتانسیل‌های مورد استفاده در اینجا عبارتند از، پتانسیل OBEP [1](نیمه تجربی) [١٢] و دیگری پتانسیل نوکلئون- نوکلئونِ Bonn-A (روش *Gmatrix*) [١٣] است. از پتانسیل‌های USD، USDA و USDB (تجربی) [١٤] نیز در محاسبه انرژی پایه ایزوتوپ‌های اکسیژن استفاده شده است.

در سال‌های پیشین، مخلوط‌شدگی پیکربندی‌ها در مدل لایه‌ای توسط ماتریس بهنجار G ارائه و این مدل برای سیستم‌های با دو نوکلئون ظرفیت [١٥و١٦] به کار گرفته شد و توافق قابل قبولی با تجربه حاصل گردید. این توافق با این حقیقت همراه بود که حالت‌های غیرمعمول مربوط به این هسته‌ها (حالت‌های $2p-2h$ و $4p-4h$) از A=١٨ با انرژی ٤MeV و از A=٤٢ با انرژی MeV ١/٨ آغاز می‌شود. با ارتقاء روش‌های بررسی هسته‌ها توسط مدل لایه‌ای، مشخص گردید که همراه با افزایش تعداد نوکلئون‌های ظرفیت، توافق نتایج تجربی با مقادیر نظری به دست آمده کمتر می‌شود. به عنوان مثال می‌توان طیف ^{22}Na [١٧] (با ٦ نوکلئون ظرفیت در لایه *sd*) و طیف ^{48}Ca [١٨] (با ٨ نوکلئون ظرفیت در لایه *pf*) را نام برد. بررسی‌ها نشان داده که بهبود حداکثری در توافق با تجربه هنگامی حاصل می‌شود که تغییرات نسبتاً کوچکی را در مقادیر عناصر ماتریس دو ذره‌ای که بیان کننده برهم‌کنش دو ذره‌ای هستند، اِعمال نماییم [١٩و٢٠]. کاربرد مخلوط‌شدگی پیکربندی‌ها در مدل لایه‌ای برای هسته‌های موجود در فضای مدل داده شده و در یک محدوده جرمی مشخص، نیازمند استفاده از یک دسته از مقادیر موثر عناصر ماتریس دو جسمی است که می‌توان آن‌ها را از روی برازش داده‌ای به دست آورد. برای هسته‌های میانی، می‌توان دید که تعداد کمی از عناصر دوجسمی وجود دارند که مقادیر آن‌ها به تعداد زیادی از داده‌های تجربی مرتبط هستند. داده‌های مربوط به حالت‌های تراز-پایینِ هسته‌ها به بعضی از ترکیب‌های خطی از عناصر ماتریس دوجسمی نسبت به سایر

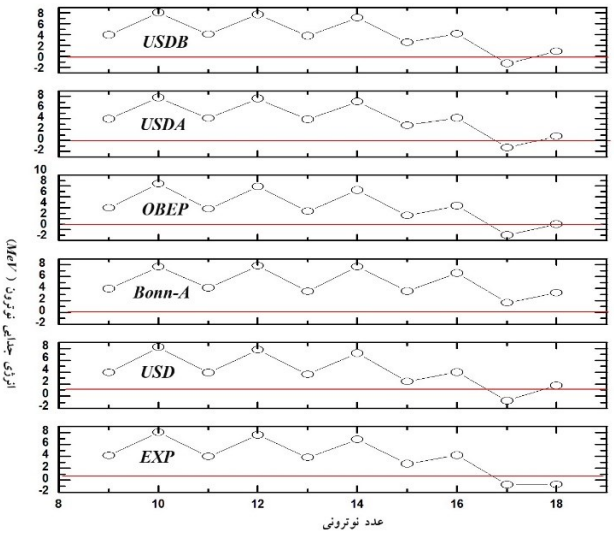
[1] One Boson Exchange Potential

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

ترکیب‌ها، حساس‌تر هستند. مهم‌ترین ترکیب خطی را می‌توان از روی ویژه مقادیر ماتریس برازش مشخص نمود [۲۱]. ترکیب‌های خطی که به خوبی با کمک داده‌های تجربی انرژی مشخص نشده-اند، به وسیله مقادیر ماتریس بهنجار G محدود گردیده‌اند.

بحث و تحلیل

همان‌طوری که در شکل۱ دیده می‌شود، رفتار انرژی جدایی نوترون نسبت به عدد نوترونی یک رفتار نوسانی است و این به دلیل انرژی زوجیت بین نوترون‌هاست که باعث می‌شود انرژی بستگی هسته‌های زوج-زوج بیشتر باشد. همچنین در این نمودار می‌توان روند کاهشی هموواری را در تمام مدل‌های پتانسیلی و مقادیر تجربی [۱۱] مشاهده نمود به این ترتیب که مقادیر انرژی جدایی (چه در ایزوتوپ‌های زوج-زوج و چه زوج-فرد) با افزایش عدد نوترونی روند رو به کاهشی را دارا هستند.



شکل(۱): تغییرات انرژی جدایی یک نوترون بر حسب عدد نوترونی برای برهم‌کنش‌های مختلف موثر نوکلئون- نوکلئون.

نکته دیگر در این نمودارها آن است که دو پتانسیل USD و OBEP به ازای N>۱۶ انرژی جدایی را با مقدار منفی پیش‌بینی می‌کنند که این امر نشان می‌دهد N>۱۶ می‌تواند به عنوان مرز خط گسیل نوترون قلمداد گردد، به‌طوری که ایزوتوپ‌های با عدد نوترونی N>۱۶ هسته‌های ناپایدار هستند و می‌توانند نوترون گسیل نمایند. این مطلب می‌تواند ناشی فاصله‌ی کم انرژی بین دو مدار $1s_{1/2}$و $od_{3/2}$ در هسته‌ی اکسیژن باشد و به این ترتیب باید ^{24}O مرز خط گسیل درنظر گرفته شود. در قسمت دوم این مقاله برای بررسی اهمیت و نقش عناصر ماتریس دوجسمی، دو ایزوتوپ ^{24}O و ^{25}O را مورد توجه قرار می‌دهیم. با توجه به مطالب گفته شده در قسمت قبلی مقاله می‌خواهیم اختلاف انرژی جدایی دو نوترون را برای ^{26}O مورد بررسی قرار دهیم. برای ارزیابی عناصر ماتریس دوجسمی، رابطه۱ را برای محاسبه انرژی جدایی دو- نوترون مدنظر قرار می‌دهیم [۲۲] و داریم

$$\Delta E = E(c+2) - E(c) = 2\epsilon_{\frac{3}{2}} + \langle 33;01|V|33;01\rangle \quad (1)$$

در این رابطه ΔE انرژی جدایی دو نوترون است و منظور از c، مغز (هسته دو-جادویی) می‌باشد که در اینجا ما ^{24}O را به عنوان مغز در نظر گرفته‌ایم. $E(c)$ و $E(c+2)$ به‌ترتیب انرژی بستگی دو ایزوتوپ ^{24}O و ^{26}O و $\epsilon_{\frac{3}{2}}$ انرژی تراز انرژی تک‌ذره‌ای یعنی همان انرژی جدایی نوترون از اکسیژن ^{25}O می‌باشد و $\langle 33;01|V|33;01\rangle$ عنصر ماتریس برهم‌کنش دو-ذره‌ای است که مبین برهم‌کنش بین دو نوترون در اربیتال $od_{3/2}$ می‌باشد.

جدول (۱): مقایسه مقادیر عناصر ماتریس دوجسمی نوکلئون-نوکئون موثر مربوط به برهم‌کنش‌های تجربی و نیمه‌تجربی (چهار ستون اول) و عناصر ماتریس دوجسمی مربوط به برهم‌کنش واقعی یعنی پتانسیل BONN-A (روش Gmatrix) با مقدار تجربی. مقادیرجدول با استفاده از رابطه۱ به دست آمده‌اند.

المان ماتریس $\langle 33;01\|V\|33;01\rangle$	USD	USDA	USDB	OBEP	BONN-A
نظری	-۱/۹۵۶۳	-۱/۳۴۷۸	-۱/۷۰۰۸	-۱/۰۴۱۰	-۱/۳۵۱۱
تجربی	-۱/۵۱۶۰				

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

با استفاده از رابطه۱ می‌توان برآوردی از اعتبار مقدار عنصر ماتریسی $\langle ۰۱;۳۳|V|۰۱;۳۳\rangle$ انجام داد. لازم به ذکر است که مقدار تجربی انرژی جدایی دونوترون برای هسته‌ی ^{۲۶}O، ۱۸ keV است [۲۳]. به جای $\epsilon_{\frac{۳}{۲}}$، انرژی جدایی نوترونِ ^{۲۵}O را با مقدار تجربی ۷۴۹ keV قرار داده‌ایم [۲۳] در این صورت می‌توان مقدار تجربی به دست آمده برای $\langle ۰۱;۳۳|V|۰۱;۳۳\rangle$ را با نتایج نظری بدست آمده با استفاده از پتانسیل‌های مختلف (رابطه۱) مورد مقایسه قرار داد. نتایج مربوطه در جدول۱ نمایش داده شده است.

جمع‌بندی

در قسمت اول مقادیر انرژی جدایی نوترون ایزوتوپ های $^{۲۲-۲۶}O$ با استفاده از برهم‌کنش های موثر مختلفِ نوکلئون- نوکلئون محاسبه شده است. برهم‌کنش های تجربی و نیمه‌تجربی نشان می-دهند ^{۲۴}O نسبت به گسیل نوترون پایدار و ایزوتوپ‌های ^{۲۵}O و ^{۲۶}O نسبت به گسیل نوترون ناپایدار هستند. در حالی‌که برهم-کنش‌های واقعیتر مثل Bonn-A (روش *Gmatrix*) [۱۳] پیش‌بینی می‌کنند که ^{۲۵}O و ^{۲۶}Oنیز پایدار هستند. پیش‌بینی دوم با نتایج تجربی به دست آمده در سال‌های اخیر ناسازگار است و علت آن کاهش گاف انرژی بین ترازهای تک ذره‌ای$۱s_{۱/۲}$و$od_{۳/۲}$است که باعث می‌شود ^{۲۵}O و ^{۲۶}O به ترتیب بالای آستانه‌ی یک و دو نوترونی قرار بگیرند. در قسمت دوم انرژی جدایی دو نوترونی ^{۲۶}O با فرض ^{۲۴}O به‌عنوان یک هسته جادویی، معیاری برای تعیین دقیقتر بودن برهم‌کنش‌های USD، USDA و USDB و OBEP نسبت به برهم‌کنش BONN-A است. نتایج جدول۱ نشان می دهد که عناصر ماتریس $\langle\langle ۰۱;۳۳|V|۰۱;۳۳\rangle\rangle$ دوجسمی نوکلئون- نوکئون موثر مربوط به برهم‌کنش های تجربی و نیمه‌تجربی که با برهم‌کنش ارائه شده توسط معادله۱ محاسبه گردیده، با مقدار متناظر تجربی$\langle\langle ۰۱;۳۳|V|۰۱;۳۳\rangle\rangle$=-۱/۵۱۶۰ سازگاری بیشتری دارد. بنابراین این نتیجه بیانگر آن است که استفاده از پتانسیل‌های تجربی و نیمه تجربی بهتر می‌تواند خواص هسته‌ها را توصیف کند.

مرجع‌ها

[۱] B. A. Brown, Prog. Part. *Nucl. Phys*. ۴۷, ۵۱۷ (۲۰۰۱).

[۲] E. K. Warburton, J. A. Becker, and B. A. Brown, *Phys. Rev. C* ۴۱, ۱۱۴۷ (۱۹۹۰).

[۳] J. P. Schiffer et al., *Phys. Rev. Lett*. ۹۲, ۱۶۲۵۰۱ (۲۰۰۴); D. Warner, Nature ۴۳۰, ۵۱۷ (۲۰۰۴).

[۴] M. Thoennessen M., *Rep. Prog. Phys*. ۶۷, ۱۱۸۷ (۲۰۰۴).

[۵] M. Langevin et al., *Phys. Lett. B* ۱۵۰, ۷۱ (۱۹۸۵).

[۶] M. Thoennessen et al., *Phys. Rev. C* ۶۸, ۰۴۴۳۱۸ (۲۰۰۳).

[۷] D. Guillemaud-Mueller et al., *Phys. Rev. C* ۴۱, ۹۳۷ (۱۹۹۰).

[۸] M. Fauerbach et al., *Phys. Rev. C* ۵۳, ۶۴۷ (۱۹۹۶).

[۹] H. Sakurai et al., *Phys. Lett. B* ۴۴۸, ۱۸۰ (۱۹۹۹).

[۱۰] O. Tarasov et al., *Phys. Lett. B* ۴۰۹, ۶۴ (۱۹۹۷).

[۱۱] B. Alex Brown and W. A. Richter, *Phys. Rev. C* ۷۲, ۰۵۷۳۰۱ (۲۰۰۵).

[۱۲] B. A. Brown, W. A. Richter, R. E. Julies, and B. H. Wildenthal, *Ann. Phys*. ۱۸۲, ۱۹۱ (۱۹۸۸).

[۱۳] M. Hjorth-Jensen, T. T. S. Kuo, and E. Osnes, *Phys. Rep*. ۲۶۱, ۱۲۵ (۱۹۹۵).

[۱۴] B. Alex Brown and W. A. Richter, *Phys. Rev. C* ۷۴, ۰۳۴۳۱۵ (۲۰۰۶).

[۱۵] T. T. S. Kuo and G. E. Brown, *Nucl. Phys*. ۸۵, ۴۰ (۱۹۶۶); T. T. S. Kuo, Nucl. *Phys. A* ۱۰۳, ۷۱ (۱۹۶۷).

[۱۶] T. T. S. Kuo and G. E. Brown, *Nucl. Phys*. ۱۱۴, ۲۴۱ (۱۹۶۸).

[۱۷] B. A. Brown and B. H. Wildenthal, *Ann. Rev. of Nucl. Part. Sci*. ۳۸, ۲۹ (۱۹۸۸).

[۱۸] J. B. McGrory, B. H. Wildenthal, and E. C. Halbert, *Phys. Rev. C* ۲, ۱۸۶ (۱۹۷۰).

[۱۹] B. H. Wildenthal, *Prog. Part. Nucl. Phys*. ۱۱, ۵ (۱۹۸۴). Ann. Phys. ۱۸۲, ۱۹۱ (۱۹۸۸).

[۲۰] A. Poves and A. P. Zuker, *Phys. Rep*. ۷۰, ۲۳۵ (۱۹۸۱).

[۲۱] M. Honma, B. A. Brown, T. Mizusaki, and T. Otsuka, *Nucl. Phys. A* ۷۰۴, ۱۳۴c (۲۰۰۲).

[۲۲] B. Alex Brown, National Superconducting Cyclotron Laboratory and Department of Physics and Astronomy Michigan State University, E. Lansing, MI ۴۸۸۲۴ (۲۰۱۷).

[۲۳] Y. Kondo et al., *Phys. Rev. Lett*. ۱۱۶, ۱۰۲۵۰۳ (۲۰۱۶)

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

گذار فاز در ایزوتوپ‌های $^{97,98}MO$

الاهی‌زاده، لیلا[۱]؛ رحمتی‌نژاد، اعظم[۲]؛ ظریفی، عباس[۱]؛ رضوی‌نژاد، روح‌اله[۳]

[۱] گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه یاسوج، یاسوج

[۲] موسسه تحقیقاتی هسته‌ای، دوبنا، روسیه

[۳] دانشکده فیزیک، دانشگاه جامع امام حسین(ع)، تهران

چکیده

در این کار با استفاده از داده‌های تجربی چگالی ترازهای هسته‌ای، شواهد گذار فاز مرتبه اول در هسته‌های $^{97,98}MO$ بررسی شده است. نتایج با مدل نظری BCS و مدل نیمه تجربی CTM مقایسه شده‌اند. این بررسی نشان می‌دهد که گذار فاز مرتبه اول در این ایزوتوپ‌ها می‌تواند ناشی از شکست جفت‌شدگی بین نوکلئون‌ها با افزایش انرژی برانگیختگی باشد. در گذار فاز مرتبه‌ی اول، آنتروپی در انرژی‌های بالاتر از 2.5 MeV ثابت بوده و دمای بحرانی با دمای ثابت انطباق دارد.

واژه‌های کلیدی: *گذار فاز، تئوری ابرسانایی، شکستن زوج‌های هسته.*

Phase transition in $^{97,98}MO$ isotopes

Elahizadeh, L[1]; Rahmatinejad, A[2]; Zarifi, A[1]; Razavi, R[3].

[1]Department of Physics, Faculty of Science, Yasuj University, Yasuj
[2]Join institute for nuclear reseaech, Dubna, Russia
[3]Physics Department, Faculty of Science, Imam Hossein Comprehensive University, Tehran

Abstract

In this work, using experimental data on nuclear level densities evidences of a first order phase transition are studied for $^{97,98}MO$ isotopes. The results are compared with the theoretical BCS, and semi-empirical CTM models. This investigation shows that the first order phase transition on the considered isotopes can be due to breaking of nucleon pairs with increasing excitation energy.In the first order phase transition, the entropy at above 2.5 MeV energies is constant, and the critical temperature corresponds to the constant temperature.

***Keywords**: Phase transition, Theoretical BCS, Breaking of nucleon pairs.*

PACS No: 74, 21

مقدمه

برای استخراج کمیت‌های ترمودینامیکی (آنتروپی، انرژی، ظرفیت گرمایی، پتانسیل شیمیایی) از سیستم‌های آماری متفاوتی می‌توان استفاده کرد که نتایج یکسانی را در حدود ترمودینامیکی می‌دهند. ممکن است بررسی این کمیت‌ها در هر مجموعه‌ی آماری برای سیستم‌های بزرگ پاسخ یکسان اما برای سیستم‌های کوچک پاسخی متفاوت داشته باشد. چون نیروهای هسته‌ای کوتاه‌برد هستند و هر هسته انرژی خود را با اطراف خودش به اشتراک نمی‌گذارد؛ بنابراین آنسامبل ریزبنددادی[1] انتخاب خوبی برای هسته‌ی اتم است. در آنسامبل ریزبنددادی کمیت‌های ترمودینامیکی مثل دما و ظرفیت گرمایی ممکن است افت‌وخیزهای بزرگ و

[1] Micro-canonical

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مقدار منفی را نشان دهد در حالی که در آنسامبل بنادادی[۲] میانگین‌گیری ساختار سیستم را تغییر می‌دهد و انتخاب مناسبی برای سیستم‌های کوچک نیست. آنتروپی کمیتی اساسی برای بررسی سیستم‌های بس‌ذره‌ای است که در آنسامبل ریزبنادادی متناسب با لگاریتم تعداد حالت‌های سیستم در انرژی برانگیختگی است و تعداد حالت‌های سیستم وابسته به چگالی ترازها می‌باشد [۱]. یکی از مدل هایی که برای محاسبه‌ی چگالی ترازهای هسته‌ای وجود دارد مدل BCS است که بر پایه‌ی نظریه‌ی ابررسانایی (Bardeen, Cooper, Schrieffer) بنا شده است [۲] و جفت‌شدگی هسته‌ای را به خوبی توصیف می‌کند. این مدل مستقل از داده‌های تجربی است و کمیت‌های مربوط به سیستم‌های نوترونی و پروتونی و کمیت‌های ترمودینامیکی هسته را بررسی می‌کند. در مورد سیستم‌های متناهی فرمیونی مانند هسته، افت‌وخیزهای آماری اهمیت زیادی دارند. جفت‌شدگی در گذار فاز، ناگهانی از بین نمی‌رود بلکه با افزایش دما کاهش یافته و با افزایش دما شبه ذرات تولید می‌شوند تا زمانی که دما به دمای بحرانی برسد و زوج شکسته شود. در واقع در دمای بحرانی گذار فاز از ابررسانایی به گاز فرمی بدون برهم کنش اتفاق می‌افتد. این گذار را می‌توان گذار فاز مرتبه اول تعبیر کرد. از نشانه‌های تجربی گذار فاز مرتبه اول در هسته، رفتار خطی آنتروپی با افزایش انرژی برانگیختگی است. داده‌های تجربی گزارش شده برای بسیاری از هسته‌ها نشان می‌دهد که در بیشتر موارد در انرژی‌های بزرگ‌تر از گاف جفت‌شدگی Δ مدل دمای ثابت تطبیق خوبی با چگالی ترازهای هسته‌ای دارد [۳]. ما در مطالعات پیشین، روی ٤٤٠ هسته نشان دادیم که دمای ثابت به دست آمده با استفاده از مدل CTM تطبیق خوبی با دمای بحرانی بدست آمده با استفاده از مدل ابررسانایی BCS دارد [٤]. در این کار با مقایسه‌ی دمای ثابت حاصل از رفتار خطی آنتروپی در ایزوتوپ‌های مجاور $^{97,98}MO$ با دمای بحرانی مدل BCS و مدل نیمه تجربی CTM به بررسی ارتباط بین شکست جفت‌شدگی و گذار فاز مرتبه اول در این ایزوتوپ‌ها پرداختیم.

محاسبات و تحلیل نتایج

با مقدار آنتروپی ΔS و انرژی ثابت شبه ذره ΔU می‌توان دمای ثابت گذار فاز مرتبه اول را طبق رابطه (۱) بدست آورد [۵].

$$T_c = \frac{\Delta U}{\Delta S} = \frac{U_{97_{Mo}} - U_{98_{Mo}}}{S_{97_{Mo}} - S_{98_{Mo}}} \qquad (۱)$$

این داده‌ها با روش محاسباتی درون‌یابی شده و با میانگین‌گیری $(\Delta U, \Delta S)$ به ترتیب مقادیر $(0.99,1.2)$ بدست آمده‌اند. بنابراین طبق معادله (۱) مقدار $T_c = 0.825$ MeV بدست می‌آید. مدل BCS دمای بحرانی گذار فاز جفت‌شدگی را طبق رابطه‌ی تقریبی (۲) پیش‌بینی می‌کند [٦].

$$T_{cr} = \frac{\Delta_0}{3.53} \qquad (۲)$$

در این کار برای محاسبه‌ی گاف جفت‌شدگی Δ_0 از روش سه نقطه‌ای (اختلاف جرم هسته‌های زوج و فرد [۷]) استفاده شده است [۸و۹]. برای هسته‌ای با تعداد پروتون Z و نوترون N، شکاف جفت‌شدگی از انرژی بستگی B هسته‌ی دو ایزوتوپ مجاور بدست می‌آید. Δ_{0n} گاف جفت‌شدگی نوترونی، Δ_{0p} گاف جفت‌شدگی پروتونی می‌باشد.

$$\Delta_n(N,Z) = -\frac{1}{2}\left[B(N-1,Z) + B(N+1,Z) - 2B(N,Z)\right] \qquad (۳)$$

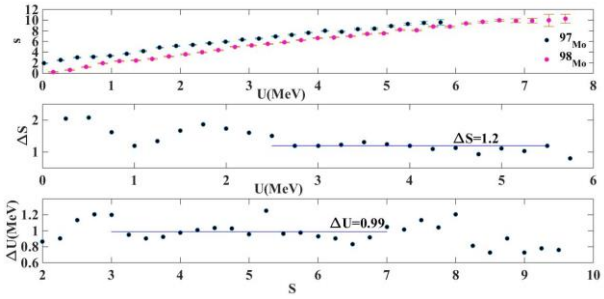
$$\Delta_p(N,Z) = -\frac{1}{2}\left[B(N,Z-1) + B(N,Z+1) - 2B(N,Z)\right] \qquad (٤)$$

$$\Delta_0 = \Delta_{0p} + \Delta_{0n} \qquad (۵)$$

طبق معادلات بالا مقادیر بدست آمده در جدول ۱ گزارش شده است. آنتروپی محاسبه شده با استفاده از داده‌های تجربی گروه اسلو برای $^{97,98}MO$ در شکل ۱ نمایش داده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود می‌توان گفت که هر دو منحنی در انرژی‌های بزرگتر از حدود 2.5 MeV رفتار خطی با شیب تقریبا یکسان دارند. این به معنی سهم آنتروپی و انرژی برانگیختگی ثابت به‌ازای شبه‌ذره‌ی فرد در ^{97}MO بوده و از شواهد تجربی گذار فاز مرتبه اول محسوب می‌شود. ΔS و ΔU به ترتیب در نمودارهای وسط و پایین شکل ۱ نمایش داده شده‌اند.

[2] canonical

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



شکل۱: نمودار بالا: رفتار خطی آنتروپی تجربی هسته‌های $^{97,98}MO$ با مقدار خطای آن را نمایش می‌دهد. نمودار وسط: تغییرات اختلاف آنتروپی بر حسب انرژی برانگیختگی و نمودار پایین: تغییرات انرژی برانگیختگی بر حسب آنتروپی را نشان می‌دهد.

اختلاف آنتروپی بین دو ایزوتوپ مجاور $^{97,98}MO$ بر حسب انرژی برانگیختگی و مقدار ثابت اختلاف آنتروپی در انرژی‌های بزرگتر از گاف جفت‌شدگی با خط آبی نشان داده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود در این شکل از انرژی 2.5 MeV هر شبه ذره مقدار ثابتی از آنتروپی $\Delta S = 1.2$ را حمل می‌کند که نشانه‌ای از گذار فاز مرتبه‌ی اول است. در نمودار پایین اختلاف انرژی برانگیختگی بین دو ایزوتوپ $^{97,98}MO$ بر حسب آنتروپی مورد بررسی قرار گرفت و میانگین اختلاف انرژی مقدار ثابت MeV $\Delta U = 0.99$ را با خط آبی نمایش داده‌ایم.

همین‌طور انتظار می‌رود که گذار فاز مرتبه‌ی اول در چگالی ترازهای هسته‌ای ناشی از شکست جفت‌های نوکلئونی با افزایش انرژی در این هسته‌ها باشد. آنتروپی لگاریتم حالت‌های در دسترس سیستم $\Omega(E)$ در انرژی بین E و $E+\delta E$ برابر است با:

$$S(E) = K_B \ln \Omega(E) \qquad (۶)$$

K_B ثابت بولتزمن، که یک فرض شده است تا آنتروپی بدون بعد و دما بر حسب MeV باشد. در این کار چگالی حالت‌ها را متناسب با چگالی ترازهای تجربی ρ تعریف می‌کنیم. ρ_0 ثابت بهنجارش است که از طریق قانون سوم ترمودینامیک $S(T \to 0) = 0$ بدست می‌آید و با فرض نظم کامل در دمای صفر برای هسته زوج-زوج ^{98}MO مقدار $\rho_0 = 0.75$ به دست آمده و همین مقدار برای ایزوتوپ فرد مجاور استفاده شده است.

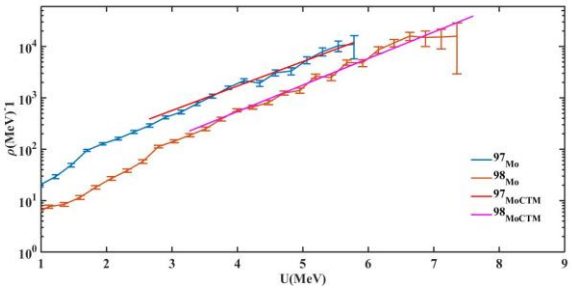
$$\Omega(E) = \frac{\rho(E)}{\rho_0} \qquad (۷)$$

دمای ثابت T_{CT} طبق مدل CTM با رابطه‌ی زیر بدست می‌آید [۱۰]:

$$\rho(U) = \frac{1}{T_{CT}} e^{\frac{U-E_0}{T_{CT}}} \qquad (۸)$$

در این رابطه $\rho(U)$ و U مقادیر بدست آمده از داده‌های تجربی گروه اسلو هستند. مقادیر T_{CT} و E_0 با برازش داده‌های تجربی اسلو بدست آمده‌اند که در جدول ۱ گزارش شده است.

در شکل ۲ رفتار نمایی چگالی تراز با انرژی برانگیختگی بعد از گاف انرژی را برای هر دو ایزوتوپ $^{97,98}MO$ به خوبی گزارش می‌کند که تطبیق خوبی با مدل CTM دارد.



شکل۲: مقایسه بین چگالی ترازهای تجربی گزارش شده توسط گروه اسلو [۳] و مدل دمای ثابت در انرژی برانگیختگی $\Delta < U$.

	E_0 (MeV)	Δ_0 (MeV)	T_{CT} (MeV)	T_{cr} (MeV)	T_{CT} (MeV) [۳]	E_{0CT} (MeV) [۳]
^{97}MO	-2.696	2.6	0.912	0.736	0.771	-0.76
^{98}MO	-1.151	3.15	0.842	0.892	0.752	0.147

جدول۱ : پارامترهای آزاد به دست آمده برای مدل CTM، گاف جفت شدگی و دمای بحرانی محاسبه شده در مدل BCS برای ایزوتوپ های $^{97,98}MO$ و مقایسه با نتایج مرجع [۳] ارائه شده است.

همانطور که انتظار داشتیم دمای بحرانی مدل BCS با مدل دمای ثابت و دمای ثابتی که بدست آوردیم تقریبا به هم نزدیک هستند. داده‌هایی که در این کار استخراج شده به دلیل استفاده از داده‌های تجربی، نتایج قابل استنادتر و دقیق‌تری نسبت به داده‌های تعیین شده از رفتار سیستماتیک می‌باشند.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

نتیجه‌گیری

چگالی تراز ایزوتوپ‌های همسایه با یک شیفت در طول محور انرژی برانگیختگی، یکدیگر را همپوشانی می‌کنند. با بدست آوردن مقدار ثابت آنتروپی $\Delta S = 1.2$ و مقدار ثابت انرژی MeV $\Delta U = 0.99$ دمای بحرانی گذار فاز مرتبه اول MeV $T_c = 0.825$ بدست آوردیم. با مقایسه‌ی دمای ثابت و دمای بحرانی گذار فاز جفت‌شدگی که برای ایزوتوپ ^{97}MO به ترتیب مقادیر 0.771 و 0.736 و برای ایزوتوپ ^{98}MO مقادیر 0.752 و0.892 بدست آمده است، مشاهده شد مقادیر هر سه دما نزدیک به هم هستند؛ بنابراین شاهد گذار فاز مرتبه‌ی اول ناشی از شکست جفت‌های نوکلئون هستیم. این داده‌ها را با چگالی تراز بدست آمده توسط گروه اسلو بدست آوردیم و با داده‌های قبلی [۳] مقایسه کردیم، نتایج با لحاظ داده‌های تجربی دقیق‌تر استخراج شدند.

مرجع‌ها

[۱] E. Algin, U. Agvanluvsan, M. Guttormsen, A.C. Larsen, G. E. Mitchell, J. Rekstad, A. Schiller, S. Siem, A. Voinov; Eur; Phys. J. B 15, 115–126 (2000).
[۲] J. Bardeen, L. N. Cooper and J. R. Schrieffer, Phys. Rev. 108, 1175 (1957).
[۳] T. Egidy, and D. Bucurescu, Phys. Rev. C. 80 , 054310 (2009).
[٤] R. Razavi, A. Rashed mohassel, A. Rahmatinejad, A. Jabbarpour, Nucl. Phys. A, 976, 61 (2018).
[٥] L. G. Moretto, A. C. Larsen, F. Giacoppo, M. Guttormsen, S. Siem; Journal Of Physics: Conference Series. 580. 012048. (2015).
[٦] L.G. Moretto, A.C. Larsen, F. Giacoppo, M. Guttormsen, S. Siem. Journal of physics: conference series 580 (2015).
[۷] P. Moller, A. J. Sierka, T. Ichikawab, and H. Sagawa, Atomic Data Nucl. Data Tables, 109-110, 1-204 (2016).
[۸] W. Satua, J. Dobaczewski, W. Nazarewicz, Phys. Rev. Lett. 81, 3599 (1998).
[۹] V. G. Soloviev, Theory of Complex Nuclei Pergamon Press, Oxford, (1976).
[۱۰] رضوی‌نژاد، روح‌اله؛ رحمتی‌نژاد، اعظم؛ کاکاوند، طیب؛ «*ترمودینامیک هسته ای و گذار فاز جفت شدگی*»؛ مرکز نشر دانشگاه جامع امام حسین(ع)، صفحه ۵۷ تا ٦۱.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

اثرات پوسته‌ای بر هسته‌ها

زنگنه، هادی – امیرزاده، فاطمه– کاردان، اعظم

دامغان، دانشگاه دامغان، دانشکده فیزیک

چکیده

ما نمودارهای سطوح انرژی پتانسیل و انرژی پوسته ای را برای برخی ایزوتوپ‌های پلوتونیوم محاسبه کردیم، سپس انرژی کل برحسب میزان تغییرات شکل را محاسبه و با یکدیگر مقایسه کردیم. در این پژوهش دریافتیم که انرژی پوسته‌ای در مینیمم‌های انرژی، نقاط تعادل هسته، منفی است. ما به این نتیجه رسیدیم که انرژی پوسته ای به سبب منفی بودن در مینیمم‌ها در این ایزوتوپ ها، با کاهش انرژی مینیمم‌های انرژی در مدل ماکروسکوپیکی سبب می‌شود مینیمم‌های انرژی ایزوتوپ‌های یادشده، در انرژی پایین‌تری شکل بگیرند. اما در ماکزیمم‌ها، انرژی پوسته‌ای مثبت است و در جمع با ماکزیمم‌های انرژی ماکروسکوپیک، که خودشان نیز مثبت هستند، سبب افزایش ماکزیمم‌ها می‌شود اما چون مقدار مثبت بودن ماکزیمم‌ها در انرژی پوسته‌ای بسیار کمتر از مقدار مثبت بودن آنها در انرژی ماکروسکوپیک است، هر چند به مقدار کمی سبب افزایش ماکزیمم‌ها می‌شود ولی شیب صعودی انرژی ماکروسکوپیک را کم می‌کند. در نهایت با منفی‌تر شدن مینیمم‌ها و افزایش ماکزیمم‌ها، سبب افزایش ارتفاع سد شکافت هسته‌ای می‌شود و انرژی لازم برای جداسازی یک نوکلئون از هسته، افزایش می‌یابد.

واژه‌های کلیدی: *CNS، انرژی پوسته‌ای، سطوح انرژی پتانسیل، Pu*

The effects of shells on the nuclei

Zanganeh, Hadi – Amirzadeh, Fatemeh- Kardan, Azam

School of Physics, Damghan University, Damghan

Abstract

We calculated the diagrams of potential energy Surface and the Shell energy and total Energy in term of deformation for isotopes of Pu, and then compared them. In this study we show that the shell energy is negative in the minima of energy or in the equilibrium points of the nucleus. We concluded that the shell energy due to being negative in these isotopes, by reducing the macroscopic energy, causes the minimum energies of these isotopes to form at lower energy. But at maxima, the shell energy is positive, and together with the macroscopic energy maxima, which are also positive, increase the maxima but since the positive value of the maxima in the crustal energy is much lower than the positive value of the macroscopic energy, although it slightly increases the maximum, it decreases the ascending slope of the macroscopic energy. Eventually, as the minima become more negative and the maxima increase, they increase the height of the nuclear fission barrier and increase the energy required to separate a nucleon from the nucleus.

Keyword: *CNS, Shell energy, Potential Energy Surface, Pu*

PACS No 20

مقدمه

در سال ۱۹۶۹ نیلسون و برخی دانشمندان دیگر بر روی هسته های سنگین و بسیار سنگین تحقیقاتی در زمینه اثرات پوسته ای بر ساختار هسته ای انجام دادند[۱و۲].

وونگ در سال ۱۹۷۳ در مورد اثرات پوسته‌ای بر هسته‌ها گفت نمی‌توان پایداری هسته‌ای را تنها از دیدگاه مدل قطره مایعی بررسی کرد. وونگ عنوان کرد که وجود پوسته‌های هسته‌ای به برخی هسته‌ها این امکان را می‌دهد که پایداری بیشتری در برابر تغییرات شکل هسته‌ای داشته باشند[۳ و ٤]. در سال های ۱۹۹۵ و بعد از آن، اثرات تثبیت کنندگی ساختار پوسته‌ای طی آزمایش‌هایی اثبات شد[۵] که این پایداری به برخی هسته‌های تغییرشکل یافته نیز رسیده است[٦].از سال ۲۰۰۰ تا سال ۲۰۲۰ نیز تحقیقات در این زمینه ادامه یافت[۷و۸].

سطوح انرژی پتانسیل هسته‌ای (PES) در هسته‌های سنگین و فوق سنگین بسیار مهم است زیرا به محقق این امکان را می‌دهدکه میزان ثبات هسته در برابر شکافت خودبخودی هسته‌ها را تخمین بزند[۹]. ما در این مقاله با استفاده از یکی از به روزترین نسخه‌های کد مدل نیلسون–استروتینسکی[۱۰و۱۱] که در بالا به برخی از تحقیقات استروتینسکی و نظریه او در سال ۱۹٦٦ اشاره کردیم، اثرات پوسته‌ای ایزوتوپ‌های پلوتونیوم را مطالعه و بررسی می‌کنیم.

روش کار

مدل CNS [۱۲] مدلی است که در آن، هسته ها به عنوان ذرات مستقل در حال حرکت در یک پتانسیل دورانی توصیف می شوند. هامیلونی کل کرنکینگ ترکیبی از مدل‌های کرنکینگ و قطره مایع دورانی است:

$$H^{\omega} = H - \omega j_x \qquad (1)$$

که ω فرکانس دوران هسته حول محور x است. بسیاری از اثرات مشاهده شده یا مورد انتظار در اسپین‌های بالا را می‌توان در دوران پتانسیل نوسان‌گر اصلاح شده نشان داد:

$$\mathrm{H}(\varepsilon_2,\gamma,\varepsilon_4) = \frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}m(\omega_x^2x^2+\omega_y^2y^2+\omega_z^2z^2)+-\kappa\hbar\omega_0[2l_t.s+\mu(l_t^2-<l_t^2>_N)]+V_4(\varepsilon_4,\gamma) \qquad (2)$$

شاخص t در عملگر حرکت زاویه ای مداری l_t نشانگر این است که در مختصات کشیده تعریف شده است. معادله ۲ نشان دهنده هامیلتونی اصلاح شده نوسانگر هماهنگ ساده براساس پارامترهای چهارقطبی محوری ε_2 و شانزده قطبی محوری ε_4 است. فرکانس‌های نوسانگر به پارامترهای ε_2 و γ به صورت زیر مربوط می‌شود:

$$\omega_j = \omega_j(\varepsilon_2.\gamma)\left[1-\frac{2}{3}\varepsilon_2 cos\left(\gamma+\frac{2\pi v_j}{3}\right)\right] . \; j = \{x.y.z\} \qquad (3)$$

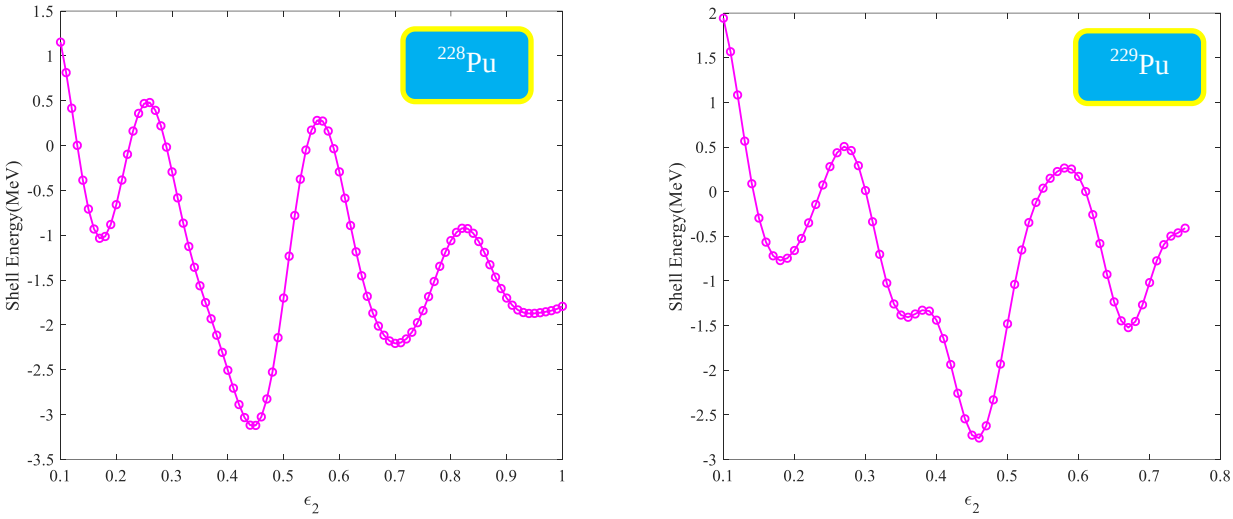
به طوری‌که v_x=۱ و v_y=−۱ و v_z =۰ است. استروتینسکی در روش خود ابتدا حالت ماکروسکوپیک هسته را درنظر گرفت و انرژی آن را محاسبه کرد سپس اثرات پوسته‌ای را به آن اضاف کرد تا انرژی کل هسته به صورتی نزدیک به واقعیت را بتوان محاسبه کرد:

$$E_{tot}(\varepsilon_2,\gamma,\varepsilon_4,I)= E_{LD}(\varepsilon_2,\gamma,\varepsilon_4,I)+E_{sh}(\varepsilon_2,\gamma,\varepsilon_4,I) \qquad (6)$$

نتایج

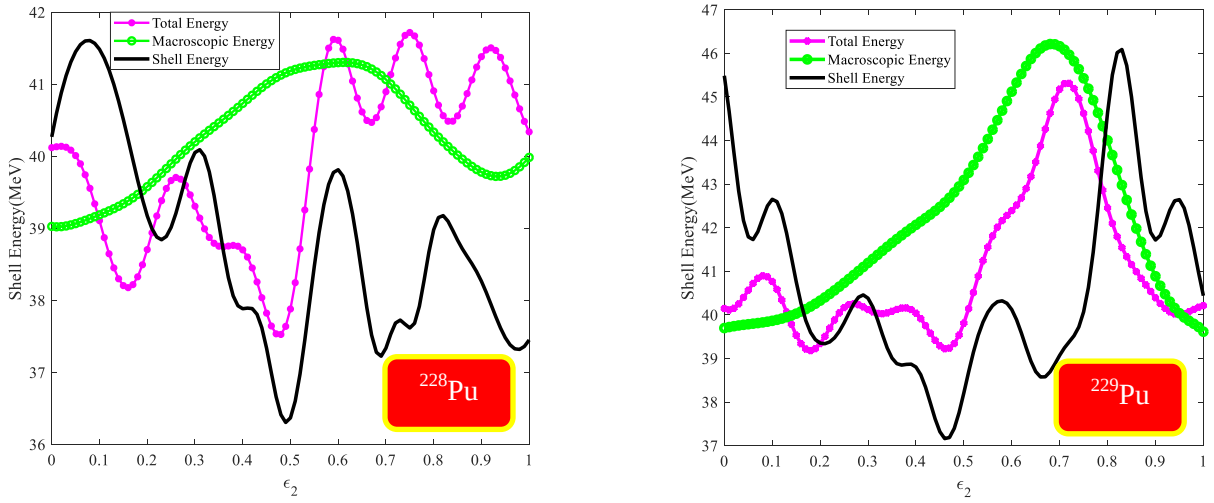
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

در شکل۱ و ۲، نمودار انرژی پوسته ای بر حسب پارامتر تغییرشکل چهارقطبی محوری و انرژی کل را برای ^{229}Pu و ^{228}Pu رسم کردیم.



شکل۱: نمودار انرژی پوسته ای بر حسب پارامتر تغییرشکل چهارقطبی محوری

مطابق شکل۲، برای^{228}Pu در $\varepsilon_2 = 0.16$ انرژی کل برابر $E_{tot} = 38\ MeV$ است و مطابق شکل۱ برای این ایزوتوپ، $E_{shell} = -1MeV$ و در مینیمم دوم در نمودار انرژی کل $\varepsilon_2 = 0.49$ و در نمودار انرژی پوسته ای $\varepsilon_2 = 0.45$ که به مقدار 0.04 با هم اختلاف دارند، از لحاظ انرژی نمودار انرژی پوسته ای $E_{shell} = -3.2MeV$ را نشان می دهد و نمودار انرژی کل در مینیمم دوم مقدار $E_{tot} = 37.5\ MeV$ را نشان می دهد.



شکل ۲: مقایسه تاثیرات انرژی پوسته‌ای بر روی انرژی ماکروسکوپیک و انرژی کل نهایی هسته

I. با توجه به شکل ۲، انرژی پوسته‌ای در مینیمم‌های انرژی، نقاط تعادل، منفی است. ما در شکل ۲ نقاط منفی و مثبت انرژی پوسته‌ای را ۴۰MeV افزایش داده‌ایم. انرژی پوسته ای به سبب منفی بودن در مینیمم‌ها در این ایزوتوپ ها، با کاهش انرژی مینیمم‌های انرژی در مدل ماکروسکوپیکی، سبب می‌شود مینیمم‌های انرژی ایزوتوپ‌های یادشده، در انرژی پایین‌تری شکل بگیرند. اما در ماکزیمم‌ها، انرژی پوسته‌ای مثبت است و در جمع

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

با ماکزیمم‌های انرژی ماکروسکوپیک، که خودشان نیز مثبت هستند، سبب افزایش ماکزیمم‌ها می‌شود اما چون مقدار مثبت بودن ماکزیمم‌ها در انرژی پوسته‌ای بسیار کمتر از مقدار مثبت بودن آنها در انرژی ماکروسکوپیک است، هر چند به مقدار کمی سبب افزایش ماکزیمم‌ها می‌شود ولی شیب صعودی انرژی ماکروسکوپیک را کم می‌کند. در نهایت با منفی‌تر شدن مینیمم‌ها و افزایش ماکزیمم‌ها، سبب افزایش ارتفاع سد شکافت هسته‌ای می‌شود و انرژی لازم برای جداسازی یک نوکلئون از هسته، افزایش می‌یابد وسبب افزایش پایداری هسته می‌شود. برای مثال در ^{228}Pu ارتفاع سد شکافت نمودار انرژی ماکروسکوپیک (LD) ۲ MeV است ولی ارتفاع سدشکافت در نمودار انرژی کل که حاصل جمع انرژی ماکروسکوپیکی با پوسته‌ای است، ٤ MeV است که طبیعتا غلبه بر آن نسبت به سدشکافت ماکروسکوپیک ایزوتوپ، سخت‌تر است. علاوه‌بر این مسیر شکافت نیز پس از افزودن انرژی پوسته‌ای نسبت به مسیر شکافت انرژی ماکروسکوپیکی، کاملا تغییر کرده است.

II. انرژی پوسته‌ای سبب دو یا چند کوهانه شدن سد شکافت هسته‌ای می‌شود. همانطور که در شکل ۲ مشاهده می‌کنید انرژی ماکروسکوپیکی هسته (LD) یک قله دارد ولی با افزودن انرژی پوسته‌ای به آن برای رسیدن به انرژی کل نهایی هسته، نمودار انرژی کل نهایی هسته دو یا چند کوهانه شده است و به عبارتی دارای چند مینیمم و ماکزیمم شده است در صورتی که نمودار انرژی ماکروسکوپیک هسته تنها یک قله داشت.

III. میزان تغییرات شکل چهارقطبی محوری هسته‌ها نیز پس از افزودن انرژی پوسته‌ای نسبت به انرژی ماکروسکوپیکی هسته، تغییر می‌کند. برای مثال پارامتر تغییرشکل چهارقطبی محوری در ^{228}Pu در نقطه تعادل هسته در انرژی ماکروسکوپیکی نزدیک به صفر است ولی نقطه تعادل در نمودار انرژی پوسته‌ای در ۰/۵ است و در نمودار انرژی کل نیز در۰/٤۸ قرار دارد.

مرجع‌ها

[1] S. G. Nilsson, C. F. Tsang, A. Sobiczewski, Z. Szymanski, S.Wycech, C. Gustafson, I.-L. Lamm, P. Mo¨ller, and B. Nilsson, Nucl. Phys. **A 131**, (1969) 1.

[2] U. Mosel and W. Greiner, Z. Phys. **222**, (1969) 261.

[3] W. D. MYERS AND W. J. SWIATECKI, Mucl. Phys. **81**, (1966) 1.

[4] Wong, C. Y. "Toroidal and spherical bubble nuclei." Annals of Physics **77**, (1973) 2.

[5] S. Hofmann, V. Ninov, F. P. Hessberger, P. Armbruster, H.Folger, G. Mu¨nzenberg, H. J. Scho¨tt, A. G. Popeko, A. V.Yeremin, A. N. Andreyev, S. Saro, R. Janik, and M. Leino, Z.Phys. A **350**, (1995) 277.

[6] Z. Patyk and A. Sobiczewski, Nucl. Phys. **A 533**, (1991) 132.

[7] Pomorski, Krzysztof, Bozena Nerlo-Pomorska, Artur Dobrowolski, Johann Bartel, and Costel M. Petrache. "Shape isomers in Pt, Hg and Pb isotopes ," arXiv preprint arXiv:2001.09997 (2020).

[8] K. Pomorski and J. Dudek, Phys. Rev. C **67**, (2003) 044316.

[9] Bender, Michaël, Klemens Rutz, P-G. Reinhard, Joachim A. Maruhn, and Walter Greiner. "Potential energy surfaces of superheavy nuclei." Physical Review C **58**, 4 (1998) 2126.

[10] H. Taheri, A. Kardan, and M. H. Hadizadeh Yazdi, Phys. Rev. C **98**, (2018) 054313.

[11] M. Akbari and A. Kardan, Nucl. Phys. A **990**, (2019) 109.

[12] Zanganeh, H., A. Kardan, and MH Hadizadeh Yazdi. "Fission–Barrier actinides." *Nuclear*)properties at the ground and high-spin states in the *Physics A*, (2020) 121716

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بهبود حساسیت سنسور فیبر نوری پلاسمونی با استفاده از لایه نازک دی اکسید تیتانیوم

کوهی، محمد* ؛ واحدی، علی

گروه فیزیک، واحد تبریز، دانشگاه آزاد اسلامی، تبریز، ایران

مرکز تحقیقات بیوفوتونیک، واحد تبریز، دانشگاه آزاد اسلامی، تبریز، ایران

چکیده

در این مقاله کارآیی یک سنسور ضریب شکست فیبر نوری مبتنی بر تشدید پلاسمون سطحی با لایه ی نقره مورد بررسی قرار گرفته است. ایده ی استفاده از لایه های نازک اکسید روی و دی اکسید تیتانیوم روی نقره به منظور افزایش حساسیت سنسور معرفی شده است. برای تحلیل عملکرد سنسور پارامترهای حساسیت، ضریب کیفیت و دقت آشکارسازی محاسبه شد. نتایج نشان می دهند اضافه کردن لایه نازک اکسید روی یا دی اکسید تیتانیوم هردو باعث افزایش حساسیت سنسور می شود. اما لایه ی نازک دی اکسید تیتانیوم روی نقره تاثیر بیشتری روی بهبود حساسیت سنسور دارد.

واژه های کلیدی: *سنسور؛ فیبرنوری؛ پلاسمون سطحی؛ حساسیت*

Sensitivity Improvement of Plasmonic Fiber Optic Sensor by Using Titanium Dioxide Thin Film

Kouhi, Mohammad*; Vahedi, Ali

Department of Physics, Tabriz Branch, Islamic Azad University, Tabriz, Iran
Biophotonic Research Center, Tabriz Branch, Islamic Azad University, Tabriz, Iran

Abstract

In this paper, the performance of a fiber optic refractive index sensor based on surface plasmon resonance with the silver layer is investigated. The idea of using thin layers of zinc oxide and titanium dioxide on the silver to increase the sensitivity of the sensor has been introduced. To analyze the performance of the sensor, the sensitivity, quality factor, and detection accuracy were calculated. The results show that adding a thin layer of zinc oxide or titanium dioxide both are caused to increase the sensitivity of the sensor. But the thin layer of titanium dioxide on silver has a greater effect on improving the sensitivity of the sensor.

***Keywords**: Sensor; Fiber Optic; Surface Plasmon; Sensitivity*

PACS No. 80, 81, 87

مقدمه

امروزه تشدید پلاسمون سطحی در طراحی و ساخت سنسورهای مختلف به کار گرفته می شود[1-3]. به ویژه در سنسورهای زیستی به دلیل نیاز به ابعاد پایین سنسور و ضرورت امکان کنترل از راه دور، سنسورهای فیبرنوری بیشتر مورد توجه هستند[2-7]. حجم کم و قابل انعطاف بودن (درحالت فیبرنوری پلاستیکی) سنسورهای فیبرنوری یک مزیت اساسی در کاربردهای بیوحسگری این نوع سنسورها محسوب می شود. برعکس سنسورهای پلاسمونی منشوری در سنسورهای پلاسمونی فیبرنوری نمودار طیف پلاسمونی برحسب طول موج نور تابشی گرفته می شود.

نویسندگان مرجع [2] یک بیوسنسور فیبرنوری پلاسمونی پوشش داده شده با گرافن و دی سولفید تنگستن را طراحی و بصورت عددی مطالعه کرده اند. آنها نتیجه گرفته اند که اضافه کردن یک لایه دی سولفید تنگستن بین نقره و گرافن باعث افزایش چشمگیر حساسیت بیوسنسور میشود. کوی‌ونگ و همکاران[3] با استفاده از لایه نشانی باریوم تیتانات روی طلا افزایش زیادی در حساسیت سنسور فیبرنوری پلاسمونی را گزارش داده اند.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

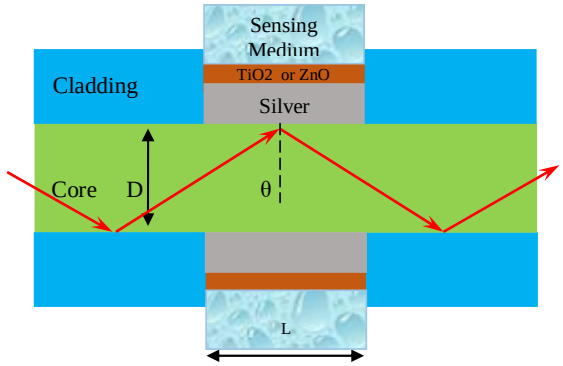
در این مقاله سه ساختار پلاسمونی "هسته فیبر/نقره/محیط حساس"، "هسته فیبر/نقره/اکسید روی/محیط حساس"، و "هسته فیبر/نقره/دی اکسید تیتانیوم/محیط حساس" بصورت مقایسه ای مطالعه شده اند. پارامترهای حساسیت، ضریب کیفیت و دقت آشکارسازی این سنسورها محاسبه شده اند. نتایج نشان می دهند استفاده از لایه نازک دی اکسید تیتانیوم باعث افزایش حساسیت سنسور مورد مطالعه می شود.

ساختار سنسور و روش محاسباتی

شکل1 طرح شماتیکی سنسور ضریب شکست مورد مطالعه در این مقاله را نشان می دهد. پوشش فیبر نوری در یک ناحیه بطول L=5 mm برداشته شده و بجای آن لایه ای از نقره با ضخامت 40nm پوشش داده می شود، سپس برای سنسور معمول محیط حساس قرار دارد. اما در این کار به منظور بهبود کارآیی سنسور قبل از محیط حساس لایه ی نازکی به ضخامت 10 nm از اکسید روی یا دی اکسید تیتانیوم به کار گرفته می شود. نور لیزر تابشی به درون فیبر نوری بعد از بازتابهای کلی متوالی موقع خروج آشکارسازی می شود. به ازای طول موج تشدید شدت نور خروجی بطور ناگهانی افت می کند. طول موج تشدید بستگی به ضریب شکست محیط حساس دارد.

در این مقاله ابتدا با استفاده از مدل ماتریسی N لایه ای [3-1] ضریب بازتاب و سپس بازتابندگی R_p محاسبه و توان عبوری نرمالیزه از رابطه زیر برآورد شده است[2، 3، 7]:

$$P_{trans}=\frac{\int_{\theta_{cr}}^{\frac{\pi}{2}} R_p^{N_{ref}(\theta)}\left[\frac{n_1^2\sin\theta\cos\theta}{(1-n_1^2\cos^2\theta)^2}\right]d\theta}{\int_{\theta_{cr}}^{\frac{\pi}{2}}\left[\frac{n_1^2\sin\theta\cos\theta}{(1-n_1^2\cos^2\theta)^2}\right]d\theta} \qquad (1)$$



شکل1 : طرح هندسی سنسور ضریب شکست مورد مطالعه

که در آن $N_{ref}(\theta)=\frac{L}{D\tan\theta}$ تعداد بازتابهای کلی داخلی مربوط به طول L محیط حساس و قطرD هسته فیبر نوری است. θ_{cr} و n_1 به ترتیب زاویه حد و ضریب شکست هسته فیبر نوری را نشان می دهند. با محاسبه توان عبوری نرمالیزه برحسب طول موج نور تابشی، طیف پلاسمون سطحی سنسور بدست می آید که به ازای طول موج تشدید توان عبوری نرمالیزه دارای مینیمم است. با تغییر جزئی در ضریب شکست محیط حساس طول موج تشدید هم تغییر می کند. نسبت تغییر طول موج به تغییر ضریب شکست محیط حساس را بعنوان حساسیت سنسور تعریف می کنند:

$$S=\frac{\Delta\lambda}{\Delta n}\quad [nm/RIU] \qquad (2)$$

ضریب کیفیت سنسور بصورت نسبت حساسیت به نیم پهنای طیف پلاسمون سطحی ($\Delta\lambda_{0.5}$) تعریف می شود[3]:

$$Q=\frac{S}{\Delta\lambda_{0.5}}\quad [RIU^{-1}] \qquad (3)$$

دقت آشکارسازی سنسور از رابطه زیر بدست می آید:

$$D.A.=\frac{\Delta\lambda_{res}}{\Delta\lambda_{0.5}} \qquad (4)$$

که در آن $\Delta\lambda_{res}$ تغییر طول موج تشدید را نشان می دهند.

در این مقاله قطر هسته فیبر نوری سلیکونی D=62.5μm و روزنه عددی NA=0.14 انتخاب شده اند. ضریب شکست هسته فیبر با استفاده از ضرایب سئلمیر بصورت زیر نوشته می شود[7]:

$$n(\lambda)=\sqrt{1+\frac{a_1\lambda^2}{\lambda^2-b_1}+\frac{a_2\lambda^2}{\lambda^2-b_2}+\frac{a_3\lambda^2}{\lambda^2-b_3}} \qquad (5)$$

$$a_1=0.6961663,\ a_2=0.4079426,\ a_3=0.8974794$$

$$b_1=0.0684043\,\mu m,\ b_2=0.1162414\,\mu m,\ b_3=9.896161\,\mu m$$

برای ثابت دی الکتریک نقره از مدل درود استفاده شده است:

$$\varepsilon(\lambda)=1-\frac{\lambda^2\lambda_c}{\lambda_p^{\,2}(\lambda_c+i\lambda)} \qquad (6)$$

$$\lambda_p=0.14541\,\mu m\ \ and\ \ \lambda_c=17.614\,\mu m$$

ثابت دی الکتریک اکسید روی از رابطه زیر بدست می آید[1]:

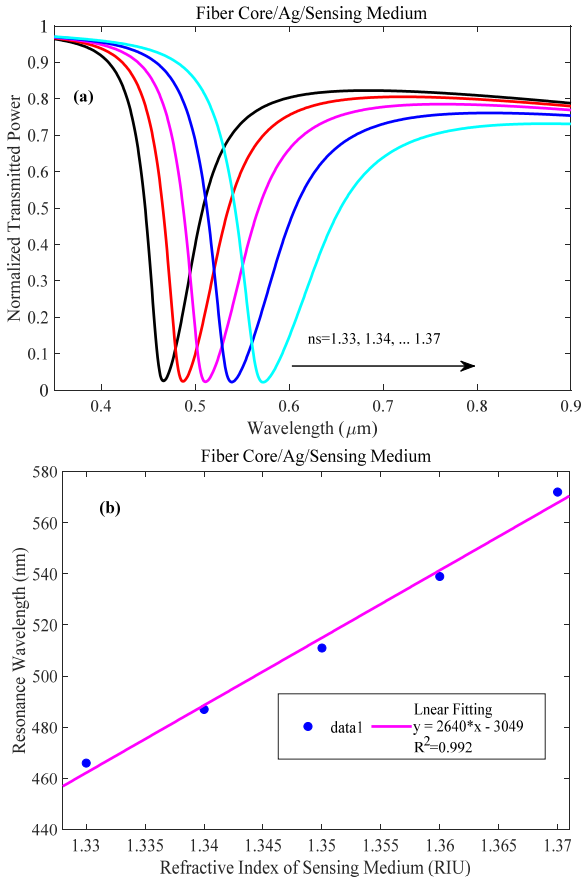
$$\varepsilon_{ZnO}(\lambda)=2.81418+\frac{0.87968\lambda^2}{\lambda^2-03042^2}-0.00711\lambda^2 \qquad (8)$$

ضریب شکست دی اکسید تیتانیوم بصورت زیر می باشد [4]:

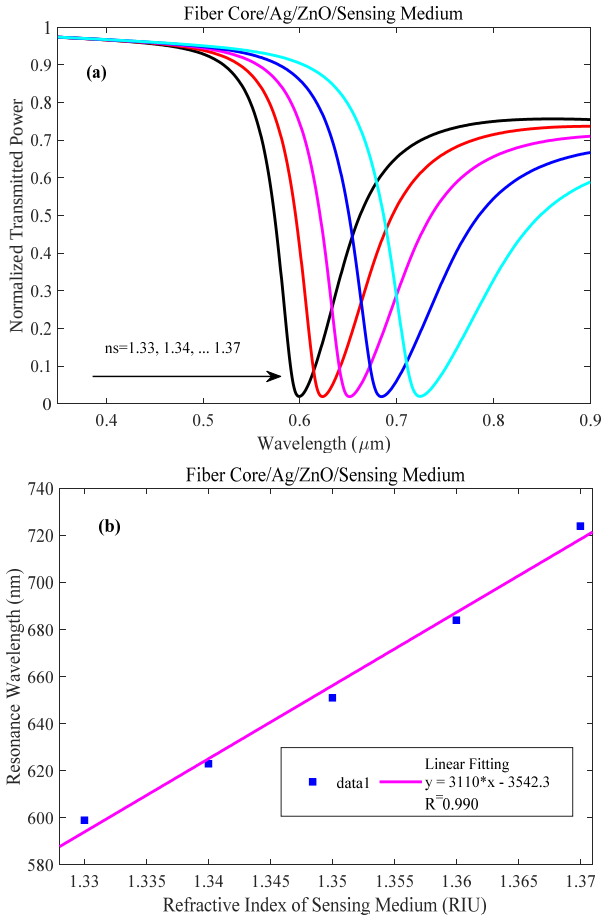
$$n_{TiO_2}(\lambda)=\sqrt{5.913+\frac{0.2441}{\lambda^2-0.0843}} \qquad (7)$$

۱ https://refractiveindex.info/?shelf=main&book=ZnO&page=Bond-o

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



شکل2 : (a) طیف تشدید پلاسمون سطحی (b) طول موج تشدید برحسب ضریب شکست برای ساختار هسته فیبر/نقره/محیط حساس



شکل3 : (a) طیف تشدید پلاسمون سطحی (b) طول موج تشدید برحسب ضریب شکست برای ساختار هسته فیبر/نقره/اکسید روی/محیط حساس

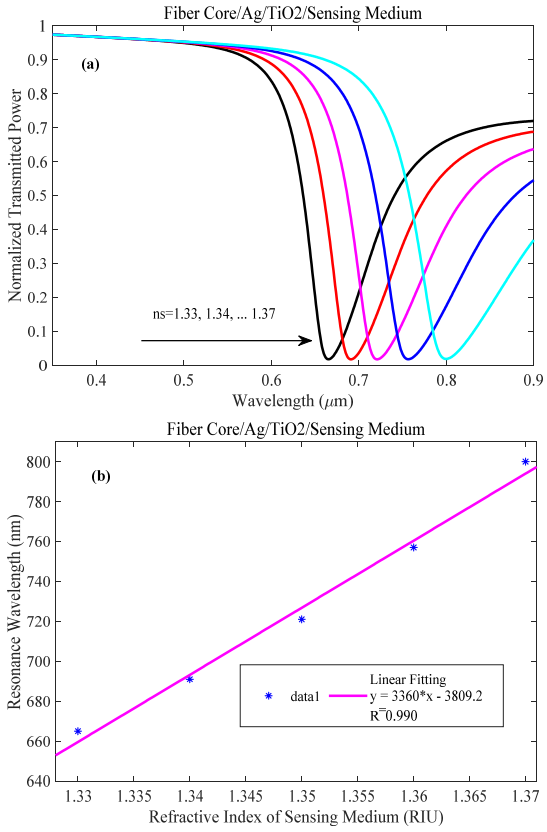
نتایج و بحث

با تغییر دادن ضریب شکست محیط حساس از 1.33 تا 1.37 در بازه های 0.01 توان عبوری نرمالیزه محاسبه و نتایج برای سه ساختار پلاسمونی " هسته فیبر/ نقره/محیط حساس"، " هسته فیبر/ نقره/اکسید روی/محیط حساس"، و " هسته فیبر/نقره/دی اکسید تیتانیوم /محیط حساس" به ترتیب در شکلهای 2الف، 3الف و 4الف نشان داده شده اند. همچنین تغییرات طول موج تشدید برحسب ضریب شکست محیط حساس در شکهای 2ب، 3ب و 4ب رسم شده اند. برازش خطی روی داده های این شکلها انجام گرفته و نمودار خطی به همراه معادله خط نشان داده شده اند. مطابق تعریف حساسیت، شیب این خط ها نشان دهنده حساسیت سنسور هست. همچنین، ضریب همبستگی برازش خطی نشان می دهد هر سه ساختار سنسور در ناحیه ی ضریب شکست از 1.33 تا 1.37 با اطمینان 99 درصد خطی هست.

با توجه به شکل 2الف با افزایش ضریب شکست محیط حساس طول موج تشدید نیز افزایش می یابد. اما در بازه های یکسان افزایش ضریب شکست، اندازه افزایش طول موج تشدید ثابت نمانده و با افزایش ضریب شکست محیط حساس افزایش می یابد. این رفتار برای هر سه ساختار پلاسمونی مورد مطالعه در این کار اتفاق می افتد. با مقایسه شکلهای 2الف، 3الف و 4الف ملاحظه می شود با افزودن لایه ی نازک اکسید روی و دی اکسید تیتانیوم ناحیه ی طول موجی تشدید پلاسمون سطحی از ناحیه ی مرئی به طرف ناحیه ی مادون قرمز نزدیک انتقال می یابد.

سنسور معمول مطابق شکل 2ب دارای حساسیت 2640 nm/RIU بوده و با افزودن لایه نازک اکسید روی حساسیت به 3110 nm/RIU افزایش یافته (شکل3ب) و استفاده از دی اکسید تیتانیوم موجب دستیابی به حساسیت 3360 nm/RIU شده است (شکل4ب). با افزودن لایه ی نازک اکسید روی یا دی اکسید تیتانیوم افزایش زیادی در حساسیت سنسور حاصل می شود.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



شکل4 : (a) طیف تشدید پلاسمون سطحی (b) طول موج تشدید برحسب ضریب شکست برای ساختار هسته فیبر/نقره/دی اکسید تیتانیوم/محیط حساس

پارامترهای حساسیت، ضریب کیفیت و دقت آشکارسازی برای هرکدام از ساختارهای سنسور ضریب شکست معرفی شده در این مقاله محاسبه و در جدول1 نشان داده شده است. تغییر ضریب شکست محیط حساس به اندازه 0.04 بوده و از 1.33 تا 1.37 تغییر داده شده است. ملاحظه می شود با افزودن لایه ی نازک اکسید روی روی نقره حساسیت از 2650 nm/RIU به 3125 nm/RIU افزایش می یابد. استفاده از لایه نازک اکسید تیتانیوم حدود یک ونیم برابر بیشتر از اکسید روی باعث افزایش حساسیت سنسور می شود. هرچند که لایه ی نازک دی اکسید تیتانیوم باعث افزایش حساسیت سنسور می شود اما ضریب کیفیت و دقت آشکارسازی کاهش می یابد.

جدول1 : پارامترهای کارآیی سنسورهای مورد مطالعه به ازای تغییر ضریب شکست محیط حساس به اندازه 0/04 از 1/33 تا 1/37

ساختار	$\Delta\lambda_{res}$(nm)	$\Delta\lambda_{0.5}$(nm)	S(nm/RIU)	Q(RIU^{-1})	D.A.
Ag	106	51	2650	51/96	2/08
Ag/ZnO	125	68	3125	45/96	1/84
Ag/TiO2	135	76	3375	44/41	1/78

جدول2 : مقایسه نتایج حساسیت سنسور مورد مطالعه با نتایج مقالات دیگر

ساختار سنسور	محدوده ضریب شکست	حساسیت (nm/RIU)	مرجع
Fiber/Au	1/3332-1/3710	2049	[3]
Fiber/Au/$BaTiO_3$	1/3332-1/3710	2543	[3]
Fiber/Au Nanohole/Si	1/333-1/385	487	[5]
Fiber/Ag/WS_2/Graphene	1/33-1/39	3200	[2]
Fiber/Ag/TiO_2	1/333-1/358	3800	[4]
Fiber/Ag	1/33-1/37	2640	این کار
Fiber/Ag/ZnO	1/33-1/37	3110	این کار
Fiber/Ag/TiO_2	1/33-1/37	3360	این کار

نتایج به دست آمده در این مقاله به همراه نتایج بعضی از مقالات چاپ شده برای مقایسه در جدول2 نشان داده شده است. افزایش حساسیت سنسور فیبر نوری پلاسمونی با استفاده از لایه نازک دی اکسید تیتانیوم به عنوان یک روش کم هزینه توسط داده های جدول2 تایید می شود.

نتیجه گیری

در این مقاله کارایی یک سنسور ضریب شکست فیبر نوری مبتنی بر تشدید پلاسمون سطحی با لایه ی نقره مطالعه و ایده ی استفاده از لایه های نازک اکسید روی یا دی اکسید تیتانیوم روی نقره به منظور افزایش حساسیت بیوسنسور معرفی شد. نتایج نشان می دهند استفاده از لایه ی نازک دی اکسید تیتانیوم یک و نیم برابر بیشتر از مورد اکسید روی حساسیت را افزایش می دهد. سنسور ضریب شکست مورد مطالعه در این مقاله می تواند بعنوان یک بیوسنسور با حساسیت بالا مورد استفاده قرار بگیرد.

مرجع ها

[1] A. Vahedi and M. Kouhi; “Liquid Crystal-Based Surface Plasmon Resonance Biosensor”; *Plasmonics* **15** (2020) 61–71.

[2] M.S. Rahman et al.; “Design and numerical analysis of a graphene-coated fiber-optic SPR biosensor using tungsten disulfide”; *Photonics Nanostruct.*, **33** (2019) 29–35.

[3] Q. Wang, L.Y. Niu, J.Y. Jing and W.M. Zhao; “Barium titanate film based fiber optic surface plasmon sensor with high sensitivity”; *Optics and Laser Technology*. **124** (2020) 105899.

[4] Y.A. Qazini, A.S.M. Noor, T.K. Yadav, M.H. Yaacob, S.W. Harun and M. A. Mahdi; “Performance Evaluation of a Bilayer SPR-Based Fiber Optic RI Sensor With TiO_2 Using FDTD Solutions”; *Photonics Sensors* **4**, No. 4 (2014) 289-294.

[5] E.M. Zhao, P.P. Jia, H. Ebendorff-Heidepriem, et al.; “Localized surface Plasmon resonance sensing structure based on gold nanohole array on beveled fiber edge”; *Nanotechnology* **28** (2017) 435504.

[6] Y. Zhao, R.J. Tong, F. Xia and Y. Peng; “Current status of optical fiber biosensor based on surface plasmon resonance”; *Biosensors and Bioelectronics* **142** (2019) 111505.

[7] N. Sharma; “Performances of different metals in optical fibre-based surface plasmon resonance sensor”; *Pramana – J. Phys.* **78** No. 3 (2012) 417–427.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

تاثیر آهنگ اسپری بر ویژگی های فیزیکی لایه های نازک اکسید کادمیوم تهیه شده به روش اسپری پایرولیزیز

سیاس، محمد رضا[1] ؛ فدوی اسلام، محمد رضا[1]

[1]دانشکده فیزیک دانشگاه دامغان، میدان دانشگاه، دامغان

چکیده

لایه های نازک اکسید کادمیوم به روش اسپری پایرولیزیز لایه نشانی و اثر آهنگ اسپری بر ویژگی های ساختاری، ریخت ساختاری، اپتیکی و الکتریکی لایه‌های نازک تحقیق شد. نمونه ها توسط پراش پرتو ایکس، میکروسکوپ روبشی الکترونی گسیل میدان، میکروسکوپ نیروی اتمی، طیف سنجی نور مرئی – ماوراء بنفش و اندازه گیری الکتریکی مشخصه یابی شدند. طیف پراش پرتوایکس ساختار بس بلور فاز خالص مکعبی CdO را تایید می کند که با افزایش آهنگ اسپری بهینه شده‌است. همه لایه های نازک قله های مربوط به صفحات (۱۱۱)، (۲۰۰)، (۲۲۰) و (۲۱۱) را نشان می دهند. تصاویر FE-SEM ریخت ساختاری دانه ای را برای تمام نمونه ها ارائه می‌کند. تصاویر AFM متوسط زبری نمونه ها را بین ۳۱٫۳ و ۶۰٫۹ nm ارائه می کند. گاف اپتیکی مقادیر بین ۲٫۳۷ و ۲٫۵ eV را برای تمام نمونه ها نشان می دهد. آزمایشات اثرهال برای تمام نمونه ها رسانش نوع n را تایید می کند.

The Effect of the spray rate on physical properties of thin Cadmium Oxide film prepared through pyrolysis technique

M. R. Sayyas[1]; M. R. Fadavieslam[1]

[1] *School of physics, Damghan University*

Abstract

Thin Cadmium Oxide films which were deposited through spray pyrolysis method, and the effect of the spray rate on the structure, morphology, optical, and electrical properties of the thin films was investigated in the present paper. The samples were characterized by X-ray diffraction (XRD), field emission scanning electron microscopy (FE-SEM), atomic force microscope (AFM), UV–Vis spectroscopy, and electrical measurements. The XRD pattern confirms the polycrystalline nature with cubic structure of pure CdO phase, which is modified after increasing the spray rate. All thin films show peaks related to (111), (200), (220), and (211) planes. FE-SEM images represent grain morphology for all of samples. AFM images represent the average roughness between 31.3 and 60.9 for all the samples. The optical band gap values were between 2.37 and 2.5eV for all the samples. Hall effect experiments confirm n-type conduction in all of the samples.

PACS No. 68

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد

http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مقدمه

انرژی خورشیدی ارزان ترین منبع تجدید پذیر است. تلاشهای بیشماری برای بالا بردن راندمان تبدیل انرژی صورت می گیرد. در این راستا هنوز نیاز به تحقیق برای مواد کارآمد جهت تبدیل انرژی نورانی خورشید به الکتریکی وجود دارد [۱]. اکسیدهای رسانای شفاف نظیر ZnO، SnO_2، In_2O_3 و CdO بدلیل شفافیت نوری و رسانندگی الکتریکی بالا در دستگاههای فوتوولتائیک، الکترونیکی و اپتوالکترونیکی مورد توجه می باشند [۱و۲]. اکسید کادمیوم با ساختار FCC، نیمرسانای نوع n با گاف اپتیکی حدود ۲٫۷ eV و هدایت الکتریکی بالا به طور گسترده در دستگاههای نوری و فوتوولتائیک مورد تحقیق قرار گرفته است [۳و٤]. در این پژوهش لایه های نازک CdO به روش اسپری پایرولیزیز تهیه شدند و تاثیر آهنگ اسپری بر خواص فیزیکی آنها مورد مطالعه قرار گرفت.

بخش تجربی:

در این پژوهش لایه های نازک اکسید کادمیوم بر روی بسترهای شیشه ای لایه نشانی شدند. محلول اسپری از حل ۲٫۲۸ گرم از استات کادمیوم در ml ۱۰۰ برای تهیه محلول ۰٫۱ مولار کادمیوم بدست آمد. قبل از تهیه لایه ها، بسترهای شیشه ای از آلودگی های آلی و معدنی تمیز کاری شده و بر روی صفحه چرخان دستگاه اسپری قرار داده شدند. با هدف بررسی آهنگ اسپری لایه نشانی در شرایط یکسان فاصله نازل تا بستر cm ۳۵، فشار گاز حامل atm ۳ و دمای بستر ^{o}C ۳۲۰ تنظیم شد و سپس محلولها با آهنگهای ۵، ۱۰، ۱۵ و ml/min ۲۰ اسپری شدند. در طی فرآیند اسپری از مقایسه حجم محلول اسپری و زمان اسپری آن، آهنگ اسپری مورد ارزیابی قرار گرفت.

جهت تعیین ساختار بلوری از دستگاه پراش پرتو ایکس مدل D8 ADVANCE-BRUKER استفاده شد. بررسی خواص ریخت شناسی سطح نمونه ها با بکارگیری دستگاه میکروسکوپ الکترونی اثر میدان مدل MIRA3 TESCAN انجام شد. خواص اپتیکی نمونه ها با دستگاه اسپکتروسکپی UV-vis مدل ٤٨٠٢ UV-vis double beam spectrophotometer اندازه گیری شد.

بحث و نتیجه‌گیری:

پراش پرتو ایکس: طیفهای مقایسه ای پراش پرتو ایکس نمونه ها در شکل (۱) ارائه شده است. مطالعه این شکل نشان می دهد که لایه‌ها ساختار بس بلوری دارند. شدیدترین قله ها در راستای صفحات بلوری (۱۱۱)، (۲۰۰)، (۲۲۰) و (۳۱۱) بترتیب متناظر با زاویه های ۳۳٫۱۵، ۳۸٫٤۳، ۵۵٫٦٦ و ۵۵٫٤۲ مربوط به فاز مکعبی مرکز سطحی اکسید کادمیوم هستند که با کارت استاندارد JCPDS card no. 01-075-0592 تطبیق دارند [۵]. شدت قله ها با افزایش آهنگ اسپری روند افزایشی دارند. علاوه بر آن با افزایش آهنگ اسپری از۱۰ به ml/min ۲۰ قله ارجح از (۱۱۱) به (۲۰۰) تغییر می‌کند. محاسبه اندازه دانه‌ها با استفاده از رابطه شرر انجام شد [۱]:

$$D = \frac{0.94\lambda}{\beta \cos\theta} \qquad (۱)$$

که در آن D اندازه نانو بلورکها، λ طول موج پراش پرتو ایکس (۰٫۱۵٤ nm)، β نیم پهنا در نصف ارتفاع قله و θ زاویه در شدت بیشینه قله هستند. نتایج محاسبه اندازه نانو بلورکها بر پایه رابطه شرر در جدول (۱) ارائه شده است. این نتایج نشان می دهد که اندازه نانو بلورکها برای صفحه (۲۰۰) با افزایش آهنگ اسپری افزایش یافته است.

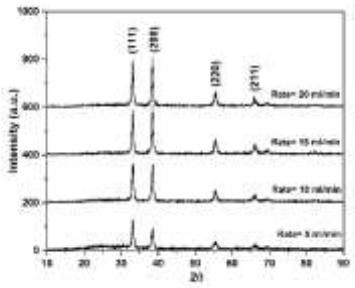
متوسط اندازه نانو بلورکها و میکروکرنشها با استفاده از رابطه ویلیامسون–هال محاسبه شد [٦]:

$$\beta \cos\theta = \frac{k}{D_{W-H}} + 4\varepsilon \sin\theta \qquad (۲)$$

که در آن D_{W-H} متوسط اندازه نانو بلورکها و ε میکرو کرنش هستند. نتایج محاسبات بر پایه رابطه ویلیامسون–هال در جدول (۱) ارائه شده است. این نتایج نشان می دهد که به طور کلی اندازه نانو بلورکها روند کاهشی دارند.

تصویر FE-SEM: این تصاویر در شکل (۲) نشان داده شده‌است. این تصاویر نشان می‌دهند که لایه‌های تهیه شده دارای مورفولوژی دانه‌ای هستند و دارای سطح یکنواخت، بدون ترک و با تخلخل ناچیز می‌باشند. اندازه دانه ها با افزایش آهنگ اسپری روند افزایشی–کاهشی داشته است که با نمودار های XRD در توافق است.

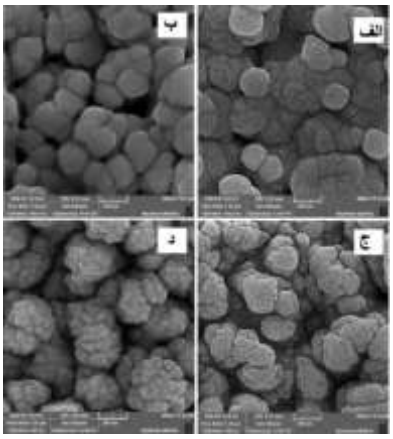
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



شکل ۱: طیفهای مقایسه ای پراش پرتو ایکس نمونه ها

جدول ۱: نتایج مشخصه یابی پراش پرتو ایکس نمونه ها

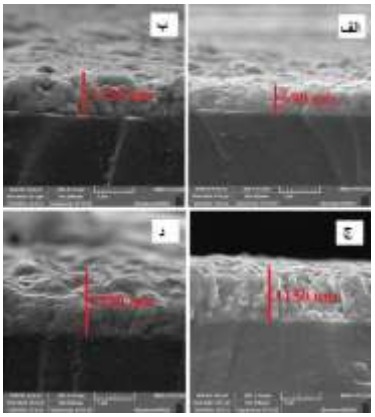
Rate (ml/min)	(hkl)	2θ (°)	D_s (nm)	D_{H-W} (nm)	ε_{H-W} ($\times10^{-3}$)
۵	(۱۱۱)	۳۳٫۰۱٤	۲۹٫۳۲	٤۰٫٥٦	۸٫۷
	(۲۰۰)	۳۸٫٥۲۱	۱٤٫۸۹		
	(۲۲۰)	٥٥٫٤۹۹	۱۱٫۹۱		
۱۰	(۱۱۱)	۳۳٫۱٥٦	۱۷٫٦۰	۱٥٫٦٤	-۰٫۹
	(۲۰۰)	۳۸٫۸۲٥	۱۷٫۸٦		
	(۲۲۰)	٥٥٫٤۰۱	۱۹٫۰٥		
۱٥	(۱۱۱)	۳۳٫۱٥۷	۱۷٫٦۰	٦۷٫۰٤	٤٫۳۷
	(۲۰۰)	۳۸٫٤۹۰	۲۲٫۳۳		
	(۲۲۰)	٥٥٫٤۲۲	۱۳٫٦۱		
۲۰	(۱۱۱)	۳۳٫۱۱۷	۲۹٫۳۲	۲٦٫٦۷	۸٫٥
	(۲۰۰)	۳۸٫٤۱٤	۲۹٫۷٦		
	(۲۲۰)	٥٥٫٥٥۷	۱٤٫۳٦		



شکل ۲: تصاویر FE-SEM نمونه ها با آهنگهای اسپری (الف) ۵، (ب) ۱۰، (ج) ۱۵ و (د) ۲۰ ml/min

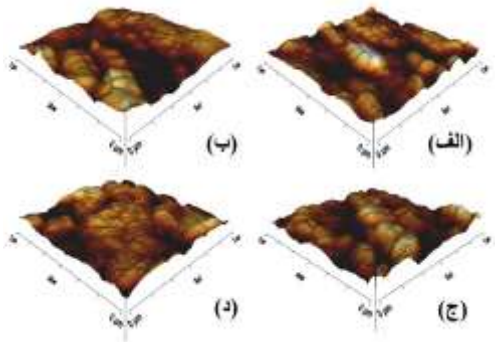
با استفاده از تصاویر برش عرضی FE-SEM نمونه ها ضخامت آنها برای آهنگهای اسپری ۵، ۱۰، ۱۵ و ۲۰ ml/min بترتیب مقادیر ٦۹۰، ۱۱۱۰، ۱۱٥۰ و ۱۲٥۰ nm با دقت ده نانومتر بدست آمده است که در شکل (۳) نمایش داده شده است. این نتایج نشان می دهد که با افزایش آهنگ اسپری ضخامت لایه ها افزایش می یابد.

این پدیده احتمالاً به این دلیل است که در آهنگهای پایین واکنش کامل شیمیایی در روی صفحه داغ دستگاه اسپری انجام نمی شود.



شکل ۳: تصاویر برش عرضی FE-SEM نمونه ها با آهنگهای اسپری (الف) ۵، (ب) ۱۰، (ج) ۱۵ و (د) ۲۰ ml/min

تصویر AFM: شکل (٤) تصاویر AFM سه بعدی نمونه ها در آهنگ های اسپری مختلف را نمایش می دهد. میانگین زبری لایه ها برای آهنگ های اسپری ۵، ۱۰، ۱۵ و ۲۰ ml/min بترتیب مقادیر ۳۲٫۰۹، ٦۰٫۹۰، ۳۱٫۳۰ و ٤٦٫۲٥ nm بدست آمده است. آهنگ اسپری بر روی آهنگ رشد خوشه ها و نهایتاً زبری سطح تاثیر دارد. از طرفی دیگر زبری لایه متاثر از زبری زیر لایه است.



شکل ۴: تصاویر AFM نمونه ها با آهنگهای اسپری (الف) ۵، (ب) ۱۰، (ج) ۱۵ و (د) ۲۰ ml/min

عبور اپتیکی لایه‌ها: طیف عبوری لایه‌ها در گستره طول موج ٤٥۰–۱۱۰۰nm اندازه‌گیری شد. در شکل (۵) نمودار مقایسه ای عبور بر حسب طول موج نشان داده شده‌است. مطالعه این شکل نشان می‌دهد که با افزایش طول موج عبور لایه ها افزایش می یابد و علاوه بر آن لایه ها با آهنگ های اسپری ۵ و ۱۵ ml/min بترتیب بیشترین و کمترین عبور را دارند. میزان عبور بستگی به ساختار بس بلوری، اندازه دانه ها، ضخامت و زبری لایه ها دارد،

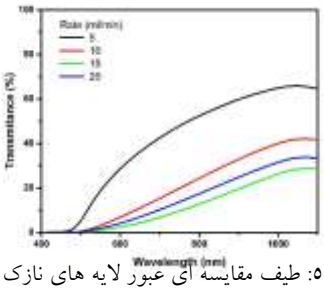
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بطوری که ســـاختار بلوری بهینه و اندازه دانه های بزرگتر عبور را افزایش در حالی که ضخامت و زبری بیشتر عبور را کاهش میدهند.

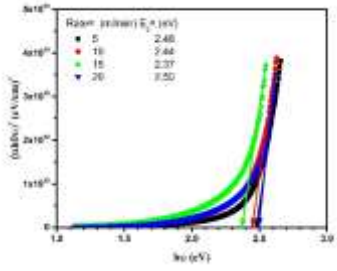
گاف نوری لایه‌ها: با استفاده از معادله (۳) گاف نوری نمونه ها بدست آمد [۶]:

$$(\alpha h\vartheta)^2 = \beta(h\vartheta - E_g) \qquad (۳)$$

که در آن α ضریب جذب و β یک ثابت است و E_g گاف نوری است. شکل (۵) طیف مقایسه ای تغییرات بر حسب لایه های نازک را نشان می دهد. گاف نوری نمونه ها با استفاده از رابطه (۳) بدست آمده و در شکل (٦) نمایش داده شده است. گاف اپتیکی اکسید کادمیوم در حالت لایه نازک از حالت توده (۲/۲ eV) بیشتر است [۷و۸].



شکل ۵: طیف مقایسه ای عبور لایه های نازک



شکل ٦ : نمودار مقایسه ای $(\alpha h\nu)^2$ بر حسب hν نمونه ها

اندازه گیری مقاومت الکتریکی و اثر هال نمونه ها به روش وندر پاو و توسط سامانه ای که در آزمایشگاه لایه نازک دانشگاه دامغان تهیه شده بود، اندازه گیری شد و نتایج آن در جدول (۲) ارائه شده است. در مشخصه یابی اثر هال تمام نمونه ها رسانش نوع n را نشان دادند [۷و۹]. این نتایج نشان می دهد که بطور کلی با افزایش ضخامت نمونه ها مقاومت ویژه آنها کاهش یافته است. نمونه ها با مقاومت الکتریکی کمتر برای کاربرد در سلولهای خورشیدی مناسب می باشند [۱۰].

جدول ۲: نتایج مشخصه یابی الکتریکی نمونه ها

Rate (ml/min)	t (nm)	n ($\times 10^{19}$ cm^{-3})	μ (cm^2/v.s)	ρ (Ω.cm)
۵	٦۹۰	۳٫۵۹	۰٫۰۲	۸٫۱۵
۱۰	۱۱۱۰	۳٫۰۳	۰٫۱۷	۱٫۱۹
۱۵	۱۱۵۰	۱٫٤٤	۰٫۱٦	۲٫۷۲
۲۰	۱۲۵۰	۳٫۱	۰٫۱۸	۱٫۱

نتیجه گیری

لایه های نازک اکسید کادمیوم تهیه شده دارای ساختار نانو می-باشند. افزایش آهنگ اسپری بطور کلی سبب بهینه شدن ساختار بس بلوری لایه‌ها شده و مقاومت الکتریکی آنها را کاهش می دهد. مقایسه مشخصات ساختاری، اپتیکی و الکتریکی نمونه ها نشان می-دهد که بطور کلی نمونه تهیه شده با آهنگ اسپری ۱۰ ml/min شرایط بهینه را دارد.

مرجع

[۱] S. Majumder, A.C. Mendhe, D. Kim, B.R. Sankapal, "CdO nanonecklace: Effect of air annealing on performance of photo electrochemical cell"; *Journal of Alloys and Compounds* **788**, No. 5 (2019) 75-82.

[۲] M. Ramamurthy, M. Balaji, P. Thirunavukkarasu, "Characterization of jet nebulizer sprayed CdO thin films for solar cell application"; *Optik* **127**, No. 8 (2016) 3809-3819.

[۳] S. Pavithra, D. Balamurugan, R. Pandeeswari, B.G. Jeyaprakash, "CTAB and acetic acid effect in the nanocrystallite growth of spray deposited CdO thin films"; Superlattices and Microstructures **75** (2014) 444-435.

[۴] M. Anitha, K. Saravanakumar, N. Anitha, I. Kulandaisamy, L. Amalraj, "Influence of annealing temperature on physical properties of Sn-doped CdO thin films by nebulized spray pyrolysis technique"; Materials Science and Engineering: B **243** (2019) 54-64.

[۵] M. Anitha, N. Anitha, I. Kulandaisamy, L. Amalraj, "Effect of substrates on the structural, morphological, and optical properties of sprayed CdO thin films using nebulizer"; Journal of Sol-Gel Science and Technology **86** (2018) 580–589.

[۶] F. Ghiyasi, M.R. Fadavieslam, M. Ardyanian, "Facile deposition and study of substrate temperature effect on the structural and physical properties of Cu_2FeSnS_4 (CFTS) thin films"; Journal of Materials Science: Materials in Electronics **31** (2020) 2398-2405.

[۷] C. H. Bhosale, A. V. Kambale, A. V. Kokate, and K. Y. Rajpure, "Structural, optical and electrical properties of chemically sprayed CdO thin films"; Materials Science and Engineering: B 122 (2005) 67-71 .

[۸] M. Ramamurthy, M. Balaji, P. Thirunavukkarasu, "Characterization of jet nebulizer sprayed CdO thin films for solar cell application"; Optik 127 (2016) 3809-3819.

[۹] M. Anitha, L. Amalraj, and N. Anitha, "Influence of precursor concentration on physical properties of CdO thin films prepared by spray pyrolysis technique using nebulizer"; Applied Physics A 123 (2017) 764.

[۱۰] S. Joishy, S. D. Kulkarni, R. J. Choudary, S. R. Maidur, P. Shankaragouda Patil, and B. V. Rajendra, "Influence of solution molarity on structure, surface morphology, non-linear optical and electric properties of CdO thin films prepared by spray pyrolysis technique"; Materials Research Express 6, 106447 (2019).

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مطالعه خواص اپتیکی نانوورقه P_2SiS : رهیافت نظریه تابعی چگالی

بهزادی، پروین ؛ کتابی، سید احمد [۱] ؛ امیری، پیمان[۲]

[۱] دانشکده فیزیک، دانشگاه دامغان ،دامغان

[۲] گروه فیزیک ، دانشکده علوم ، دانشگاه شهید چمران اهواز،اهواز،ایران

چکیده

در این مقاله خواص اپتیکی از جمله بخش حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک ، ضریب شکست ، ضریب بازتاب و ضریب جذب نانوورقه P_2SiS مورد مطالعه قرار گرفته است. محاسبات با استفاده از روش شبه پتانسیل بر پایه نظریهٔ تابعی چگالی با تقریب شیب تعمیم یافته انجام گرفته است. نتایج بدست آمده نشان می‌دهد که خواص اپتیکی این نانوورقه، به خصوص در انرژی‌های پایین و میانی، ناهمسانگرد است. عمده قله‌های قسمت موهومی تابع دی الکتریک برای راستای درون صفحه ای از انرژی های پایین تا حدود ۶eV است که به انتقال‌های اپتیکی از Si-p,P-p و Si-s به Si-p و S-s مربوط می‌شود. نتایج ما نشان می‌دهد که بیشترین بازتاب در راستای y در انرژی ۸/۳۷eV برابر با ۷۷٪ است.

واژه های کلیدی: *خواص اپتیکی، نانوورقه، P_2SiS ، نظریه تابعی چگالی*

Study of optical properties of P_2SiS nanosheet: Density functional theory method

Behzadi, Parvin ; Ketabi, Seyed Ahmad [1]; Amiri, Peiman[2]

[1] School of Physics, Damghan University, Damghan
[2] Department of Physics, Faculty of Science, Shahid Chamran University of Ahvaz,Ahwaz,Iran

Abstract

In this paper, the optical properties of P_2SiS compound as a nanosheet such as the real and imaginary parts of dielectric function, refractive index, extinction coefficient and absorption coefficient orthorhombic phase have been studied. The calculations have been performed using the pseudopotential method in the framework of density functional theory (DFT) with generalized gradient approximation (GGA). Our results show that The optical properties of this nanosheet especially in the lower and middle energies are anisotropic. The main peaks of imaginary part of dielectric function are for in-plane of low energies to about 6 eV which are related to optical transition from P-p,Si-p and Si-s to Si-p and S-s. Our results show that the highest reflectance in the y direction at energy of 8.37 eV is 77%.

***Keywords**: Optical properties, nanosheet, P_2SiS compound, Density functional theory*
PACS No.

مقدمه

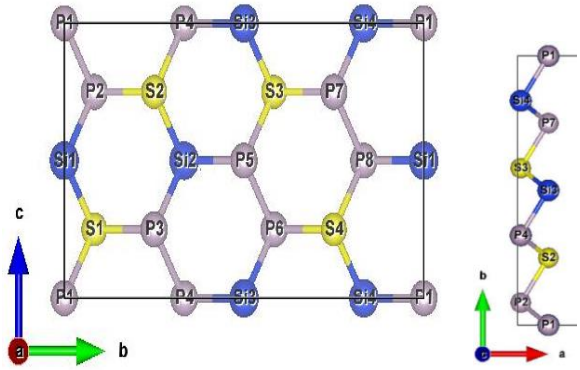
در دهۀ اخیر بررسی نانومواد دوبعدی به دلیل جزئیات ساختاری و خواص منحصربه فرد آن‌ها، بسیار مورد توجه پژوهشگران فیزیک مادۀ چگال، مهندسی مواد و شیمی قرار گرفته است. در این میان از همه مهم‌تر کاربردهای متنوع این مواد در الکترونیک، اپتوالکترونیک است[۱]. که این مواد را در دهۀ اخیر به مرکز توجه پژوهشگران تبدیل ساخته است. کینگ زینگ در سال ۲۰۱۷ با تجزیه و تحلیل ساختار بلوری نانوصفحه Si_2BN و جانشانی متفاوت از اتم‌های گروه IV ، V و VIترکیبات جدیدی را پیش بینی کرد. این ترکیبات با فرمول شیمیایی مشابه با Si_2BN و ساختاری مشابه با فسفرین ،شبه دوبعدی هستند که سطح آن‌ها دارای چین خوردگی است. پایداری این ترکیبات توسط کینگ زینگ و همکاران با استفاده از نظریه تابعی چگالی مورد بررسی قرار گرفت و به عنوان ترکیباتی نیمرسانا معرفی شدند که می‌توانند کاندیدای مناسبی برای کاربردهای الکترونیکی و اپتیکی باشند[۲]. از آنجا که ترکیبات نیمرسانای تک لایه گروه IV، V و VI دارای ساختاری مشابه فسفرین آبی هستند و با توجه به اهمیت و کاربرد بالقوۀ نانومواد دوبعدی، بررسی و محاسبۀ خواص ساختاری و

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

الکترونی این مواد مورد توجه است. با این هدف، در نظر داریم که خواص اپتیکی ساختار نانوورقه P_2SiS را بررسی و محاسبه کنیم.

روش محاسبه

محاسبات بر اساس نظریهٔ تابعی چگالی و با استفاده از پایه‌های موج تخت توسط نرم‌افزار کوانتوم اسپرسو انجام گرفته است [۳]. در این محاسبات از شبه‌پتانسیل‌های ساخته شده به روش بقای نرم با تقریب PBE استفاده کرده‌ایم[۴]. محاسبات با تقریب GGA ،تعداد نقاط بهینه k برابر ۱×۸×۸ و انرژی قطع Ry ۷۰ برای نانوورقه P_2SiS درمحاسبات مورد استفاده قرار گرفت برای جلوگیری از برهم کنش با ساختار مجاور یک لایه خلا ۱۵ آنگستری در نظر گرفته شده است. در محاسبات اپتیکی از تقریب فاز تصادفی استفاده شده است. ساختار بهینه شده و واهلش یافته‌ی نانوورقه‌ی P_2SiS در شکل ۱ نشان داده شده است .



شکل ۱: ساختار بلوری نانوورقه‌ی P_2SiS

نتایج و بحث

اصولا برای بررسی خواص نوری مواد، تابع دی الکتریک بررسی می‌شود. در واقع تابع دی الکتریک پاسخ ماده به امواج الکترومغناطیس است. تابع دی الکتریک یک تابع مختلط است که به صورت زیر تعریف می‌شود:

$\varepsilon(\omega)=\varepsilon_1(\omega)+i\varepsilon_2(\omega)$ که $\varepsilon_1(\omega)$ قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک است. در ناحیه ای که $\varepsilon_1(\omega)$ منفی است، امواج منتشر نمی‌شود و فرایندهای جذب واتلاف غالب هستند. قسمت موهومی تابع دی الکتریک مستقیماً ناشی از گذارهای بین نواری است. روابط کرامرز–کرونیگ قسمت‌های حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک را به هم مرتبط می‌کند و تمام ثابت‌های اپتیکی را می‌توان از این داده‌ها به دست آورد. با توجه به روابط کرامرز–کرونیک، قسمت‌های حقیقی و موهوحی تابع دی‌الکتریک بصورت زیر داده می‌شوند [۵].

$$\varepsilon_1(\omega)=1+\frac{2}{\pi}P\left\{\int_0^{\infty}\frac{\omega'\varepsilon_2(\omega')}{\omega'^2-\omega^2}d\omega'\right\} \qquad (۱)$$

که درآن قسمت موهومی تابع دی الکتریک بصورت زیر داده می‌شود:

$$\varepsilon_2(\omega)=\frac{4\pi^2e^2}{m^2\omega^2}\sum\int\langle i|M|j\rangle^2 f_i(1-f_i)\delta(E_f-E_i-\omega)d^3k \qquad (۲)$$

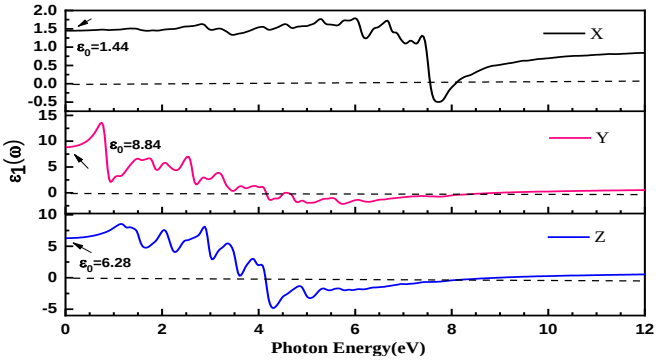
در رابطه (۲)، M ماتریس دو قطبی، i و j حالت‌های اولیه و نهایی و f_i تابع توزیع فرمی برای حالت i ام و E_i انرژی الکترون در آن حالت است. در شکل‌های ۲و۳ نمودارهای بخش حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک نانوورقه P_2SiS برای نور فرودی قطبیده در راستای درون صفحه ای (y,z) و عمود بر صفحه (x) رسم شده‌اند که چینش دسته مبلی در جهت y و چینش زیگزاگ در راستای z است.همان طور که می‌دانیم مقدار تابع دی‌الکتریک در انرژی‌های بسیار پایین، تابع دی‌الکتریک استاتیک (الکترونی) را مشخص میکند. این کمیت در محاسبه برخی کمیتهای مهم دیگر مانند ثابت استتار بار از اهمیت برخوردار است. تابع دی‌الکتریک استاتیک درجدول ۱ خلاصه شده‌اند. مشاهده می‌شود که اولاً این مقادیر در سه راستا متفاوت هستند و تفاوت تابع دی الکتریک استاتیک در راستای x نسبت به دو راستای دیگر قابل توجه است به گونه ای که کمترین ثابت دی الکتریک در این راستا است. ثانیاً مقدار تابع دی‌الکتریک استاتیک در جهت y از جهات دیگر بیشتر است. بنابراین مشاهده می شود که رفتار تابع دی الکتریک ناهمسانگرد است. این رفتار ناهمسانگردی برای راستای درون صفحه ای از انرژی های بسیار پایین تا حدود ۶eV است واز ۶eV به بعد در دو راستای yوz کاملا بر هم منطبق هستند.

جدول ۱ : تابع دی‌الکتریک استاتیک، ضریب شکست استاتیک، و حد انرژی پایین بازتابش

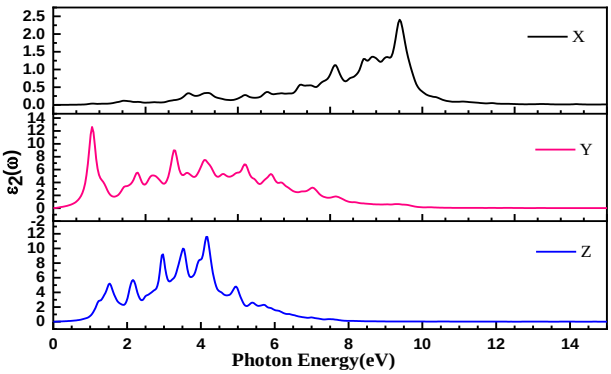
جهت	ε_0	n_0	R_0(٪)
x	۱/۴۴	۱/۲	۰
y	۸/۸۴	۲/۹۷	۲۴
z	۶/۲۸	۲/۵	۲۰

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

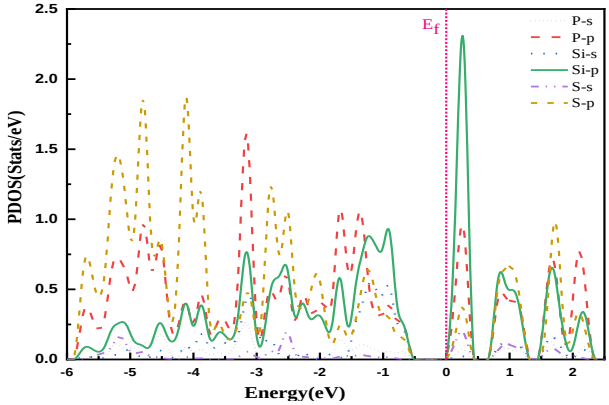
ریشه‌های قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک استاتیک مفهوم فیزیکی دارند. این ریشه‌ها از طرفی به انرژی‌های پلاسمونی در ساختار مربوط می‌شوند و از طرف دیگر بازه ممنوعه برای انتشار امواج الکترومغناطیس را معین میکنند. محاسبات ما نشان می‌دهد که در راستای z و y در بازه انرژی ۴/۱۴ eV تا ۶/۹۶ eV برای راستای y و از انرژی ۴/۱۴ eV تا ۷/۷ eV در راستای z تابع دی الکتریک منفی است. مشاهده می‌شود که در راستای z در گستره انرژی نسبتا بیشتری موج الکترومغناطیس منتشر نمی‌شود. همچنین در راستای x یک جفت ریشه در انرژی‌های ۷/۵۳ eV و ۸/۱۰ eV وجود دارد. همان طور که می‌دانیم قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک به فرایندهای جذب و انتقال‌های اپتیکی مربوط می‌شود. قله‌های $\varepsilon_2(\omega)$ به محتملترین انتقال‌های اپتیکی در ترکیب مربوط می‌شوند. در شکل ۴ چگالی حالت‌های جزئی این نانوورقه آورده شده است. با توجه به شکل ۳و۴ مشاهده می‌شود که قله‌های برجسته در راستای y و z در انرژی‌های پایین‌تری نسبت به راستای x واقع شده‌اند.که عمده این قله‌ها به انتقال‌های اپتیکی P-p، Si-p و Si-s در زیر تراز فرمی و به Si-p و S-s در بالای تراز فرمی مربوط هستند.



شکل۲: قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک نانوورقه P_2SiS

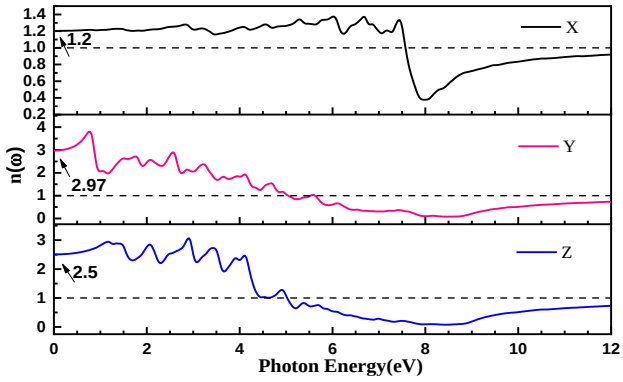


شکل۳: قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک نانوورقه P_2SiS



شکل۴: چگالی حالت‌های الکترونی نانوورقه P_2SiS

با محاسبه قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک در انرژی صفر و با استفاده از رابطه $n(\omega)=\sqrt{\varepsilon(\omega)}$ می‌توان ضریب شکست استاتیک را بدست آورد.ضریب شکست نانوورقه ساختار P_2SiS در درسه جهت y,x وz درشکل۵ نشان داده شده است. مقایسه نتایج شکل ۵ نشان می‌دهد که بالاترین ضریب شکست استاتیک در راستای y با مقدار ۲/۹۷ است. بررسی ما نشان می‌دهد که در راستای y ضریب شکست در انرژی ۰/۸ eV به بیشینه مقدار خود یعنی ۳/۸ می‌رسد این در حالی است که در راستای z مقدار بیشینه ضریب شکست ۳ و در انرژی ۲/۹ eV رخ می‌دهد.



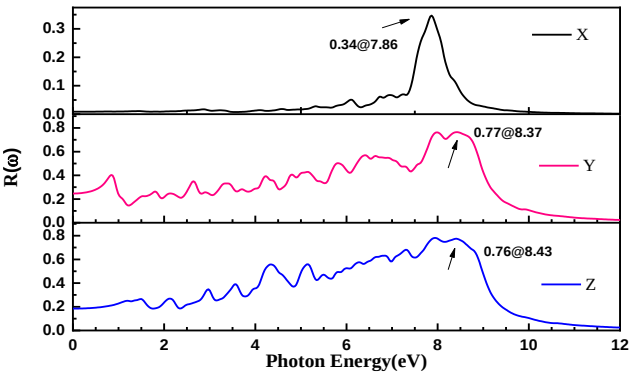
شکل۵: ضریب شکست نانوورقه P_2SiS

ضریب بازتاب مشخص کننده شدت موج بازتابیده نسبت به موج فرودی است. با استفاده از رابطه۳ می‌توان ضریب بازتاب را تعیین نمود. مقایسه نتایج مربوط به ضریب بازتاب نانوورقه ساختار P_2SiS درسه جهت x,y وz درشکل۶ نشان می‌دهد که بیشترین بازتاب در راستای y در انرژی ۸/۳۷eV برابر با ۷۷٪ است. مشاهده می شود که در راستای درون صفحه ای تقریبا با افزایش انرژی فوتون فرودی بازتاب افزایش نسبی همراه با نوسان دارد و

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

در بازه انرژی حدودeV ۸ تا eV ۹ بیشترین بازتابندگی دیده می شود.

$$R(\omega)=\frac{(n-1)^2+k^2}{(n+1)^2+k^2} \qquad (۳)$$

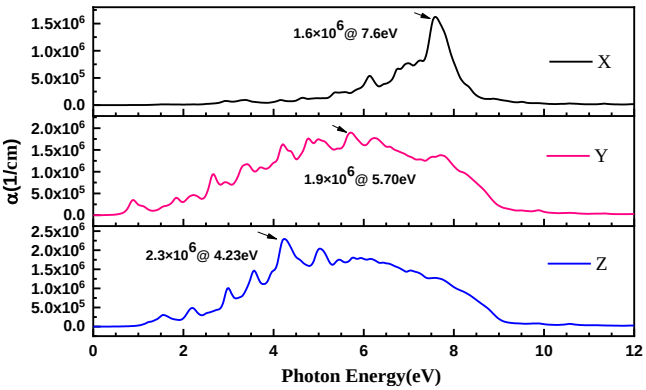


شکل۶: ضریب بازتاب نانوورقه P_2SiS

طیف جذبی نشان دهنده گذارهای اپتیکی مجاز الکترون بین حالت‌های اشغال شده نوار ظرفیت و حالت‌های اشغال نشده نوار رسانش است. رابطه کلی که می‌توان با استفاده از آن ضریب جذب مواد را محاسبه کرد بصورت زیر داده می‌شود:

$$\alpha(\omega)=\frac{2\omega k}{c} \qquad (۴)$$

نتایج مربوط به محاسبه ضریب جذب اپتیکی نانوورقه در سه جهت x,yوz در شکل۷ نشان داده شده است. انرژی آستانه گذار نانوورقه در راستای y وz به ترتیب ۰/۷۸eV و ۰/۹eVاست. که راستای y با انداز گاف نواری غیرمستقیم با مقدار۰/۷ eV تقریبا مطابقت دارد[۲]. علاوه بر این در راستای z دارای بیشترین ضریب جذب در انرژی ۴/۲۳ eV است.



شکل۷: ضریب جذب نانوورقه P_2SiS

نتیجه گیری

در این مقاله، خواص اپتیکی نانوورقه P_2SiS با رهیافت نظریه تابعی چگالی بررسی گردیده است. نتایج بدست آمده نشان می‌دهد که که رفتار تابع دی الکتریک ناهمسانگرد است. این رفتار ناهمسانگردی برای راستای درون صفحه‌ای از انرژی های بسیار پایین تا حدود ۶eV است واز ۶eV به بعد در دو راستای zوy کاملا بر هم منطبق هستند. قسمت موهومی تابع دی الکتریک نشان داد که قله‌های برجسته در راستای y وz در انرژی‌های پایین‌تری نسبت به راستای x واقع شده‌اند.که عمده این قله‌ها به انتقال‌های اپتیکی P-p، Si-p و Si-s در زیر تراز فرمی و به Si-p وS-s در بالای تراز فرمی مربوط هستند. بررسی بازتابش اپتیکی نشان می‌دهد که بیشترین بازتاب در راستای y در انرژی ۸/۳۷ eV برابر با ۷۷٪ است. و مشاهده می شود که در راستای درون صفحه ای تقریبا با افزایش انرژی فوتون فرودی بازتاب افزایش نسبی همراه با نوسان دارد. بررسی ضریب شکست اپتیکی نشان می‌دهد که بالاترین ضریب شکست استاتیک در راستای y با مقدار ۲/۹۷ است. از نمودار ضریب جذب در راستای z بیشترین ضریب جذب در گستره انرژی ۴/۲۳ eV به دست آمده است. نانوورقهP_2SiS نیمرسانا معرفی شد که می‌تواند کاندیدای مناسبی برای کاربردهای الکترونیکی و اپتیکی باشد.تاکنون هیچ داده تجربی و نظری برای خواص اپتیکی این ترکیب جهت مقایسه با نتایج حاصل از کار حاضر وجود ندارد.

مرجع‌ها

[1] A.K. Geim, K.S. Novoselov, "The rise of graphene, Nature materials", **6**, 183-191, (2007).
[2] Xie Q, Yuan J, Yu N, Wang L, Wang L," Prediction of new group IV-V-VI nanosheet semiconductors based on first principle Calculation". *Comput Mater Sci*, 2017, 135:160e4.
[3] P. Giannozzi, et al., 'QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials', *J. Phys. Condens. Matter* 21 (2009) 395502.
[4] J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, Generalized gradient approximation made simple, Phys. Rev. Lett. 77 (1996) 3865
[5] P. Ravindran, A. Delin, R. Ahuja, B. Johansson, S. Auluck, J. Wills, *et al.*, *Physical Review B*, vol. 56, p. 6851, 1997.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مسیر حرکت نانوذرات مغناطیسی در سیستم های ریزسیال در حضور آهنربای کروی

کشاورز ، زهرا[۱] ؛ کدیور، عرفان[۱]

دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی شیراز، بلوار مدرس ، شیراز

چکیده

در این مطالعه، مسیر حرکت نانوذرات مغناطیسی را در حضور آهنربای کروی مورد بررسی قرار می دهیم. با استفاده از معادله حرکت ذرات در حضور نیروهای مغناطیسی و شناوری، مسیر حرکت ذرات مغناطیسی در یک سیستم ریزسیال مورد بررسی قرار می گیرد. نتایج عددی نشان می دهد که احتمال به دام افتادن ذرات مغناطیسی در یک کانال ریز سیال مستقیم تابعی از شدت میدان مغناطیسی، شعاع ذره، مغناطش ذره و ابعاد کانال می باشد. نتایج نشان می دهد که با افزایش شعاع ذره و مغناطش اشباع آن، احتمال به دام افتادن ذره شناور در کانال افزایش می یابد.

The motion path of magnetic nanoparticles in microfluidic systems in the presence of spherical magnet

Keshavarz, Zahra ; Kadivar, Erfan

Department of Physics, Shiraz University of Technology, Shiraz

Abstract

In this study, we investigate the trajectory of magnetic nanoparticles in the presence of spherical magnet. By using the equation of motion of particles in the presence of magnetic and fluidic forces, the path of motion of magnetic particles in a micro fluid is examined. Numerical results show that the probability of trapping magnetic particles in a straight microfluidic channel is a function of the intensity of the magnetic field, the particle radius, the particle magnetization, and the channel size. The results show that as the particle's radius and saturation magnetization increase, the probability of the floating particle trapping in the channel increases.

PACS No. 47

مقدمه

علم میکروسیال شناسی یک تکنولوژی است که با پدیده های سیال در مقیاس میکروسکوپی سروکار دارد.اغلب فرآیندهایی که به طور معمول در آزمایشگاه انجام می شود برروی یک تراشه کوچک به صورت مینیاتوری درآورده می شوند. با استفاده از میدان مغناطیسی به کار رفته در ناحیه تومور یک شیب مغناطیسی در آن تولید می شود که خود باعث اعمال نیروی جاذبه برروی نانوذرات مغناطیسی وارد شده در جریان خون می شود که در این حالت نانوذرات به درون تومور راه می یابند. وقتی نیروی مغناطیسی وارده به ذرات از نیروی کشش هیدرودینامیکی که از طرف جریان خون به ذرات وارد می شود فراتررود و به آن غلبه کند،در این حالت ذرات به تومور نفوذ می کنند. در حالیکه عوارض جانبی آن کاهش می یابد.

مطالعات زیادی بر روی مسیرحرکت و جداسازی ذرات مغناطیسی انجام شده است. در سال ۲۰۱۶ ژائو و همکاران از آهنرباهای دائمی راست گوش برای انحراف ذرات مغناطیسی استفاده کردند انها نشان دادند که تأثیر آهنرباهای راست گوش از نیم دایره و مثلثی روی انحراف ذرات بیشتر است[۱]. در سال

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

۲۰۱۴برین و همکاران به جداسازی مغناطیسی با استفاده از ریز دانه های مغناطیسی پرداختند [۲]. درسال۲۰۰۶ فرلانی و همکاران مسیر حرکت نانوذرات مغناطیسی را با پذیرفتاری مغناطیسی ثابت در حضور آهنربای کروی شکل بررسی کردند[۳].

هدف از این تحقیق بررسی مسیر حرکت نانوذرات مغناطیسی با پذیرفتاری مغناطیسی وابسته به میدان مغناطیسی در حضور آهنربای کروی شکل است.

مدل فیزیکی

در این مطالعه چگونگی مسیرحرکت نانوذرات مغناطیسی در حضور آهنربای کروی شکل مورد بررسی قرار میگیرد. آهنربای مورد مطالعه دارای شعاع R_{mag} و در جهت y بینهایت فرض شده است یعنی در صفحه دوبعدی (x,z) قرار دارد. مسیر حرکت ذره با استفاده از قانون دوم نیوتون $m_p \frac{dv_p}{dt} = F_m + F_f$ پیش بینی می شود. $F_m = \mu_0 V_p \left(M_p \cdot \nabla \right) H$ نیروی مغناطیسی ، $\mu_0 = 4\pi * 10^{-7}$ H/m ثابت تراوایی خلأ ، V_p حجم ذره ، M_p مغناطش ذره وبرابر است با $M_p = f(H_a) H_a$ که $f(H_a)$ پذیرفتاری مغناطیسی که تابعی از میدان و برابر با $f(H_a) = M_{sp} / H_a$. H_a میدان مغناطیسی و M_{Sp} مغناطش اشباع ذره است . $F_f = -6\pi\eta \left(v_p - v_f\right) R_p$ نیروی سیالی است ، η ویسکوزیته سیال، v_p سرعت ذره ، v_f سرعت سیال و R_p شعاع ذره است. [1,2,3]

w پهنای کانال و مقدار آن ۳/۵ سانتی متر است. $w = (1+\alpha) R_{mag}$ است که αیک ثابت و مقدار آن ۰/۵ است.

میدان مغناطیسی تولید شده توسط یک آهنربای کروی توسط روابط زیر توصیف می شود:[3]

$$H_a = H_{ax}(x,z) + H_{az}(x,z) \qquad (۱)$$

$$H_{ax}(x,z) = \frac{M_s R_{mag}^2}{2} \frac{(x^2 - z^2)}{(x^2 + z^2)^2} \qquad (۲)$$

$$H_{az}(x,z) = \frac{M_s R_{mag}^2}{2} \frac{2xz}{(x^2 + z^2)^2} \qquad (۳)$$

بنابراین نیروی مغناطیسی وارد بر نانو ذرات مغناطیسی برابر است با:

$$F_m(x,z) = F_{mx}(x,z) + F_{mz}(x,z) \qquad (۴)$$

$$F_{mx}(x,z) = \mu_0 v_P f(H) \left[H_{ax}(x,z) \frac{\partial H_{ax}(x,z)}{\partial x} + H_{az}(x,z) \frac{\partial H_{ax}(x,z)}{\partial z} \right] \qquad (۵)$$

$$F_{mz}(x,z) = \mu_0 v_P f(H) \left[H_{ax}(x,z) \frac{\partial H_{az}(x,z)}{\partial x} + H_{az}(x,z) \frac{\partial H_{az}(x,z)}{\partial z} \right] \qquad (۶)$$

قبل از حل معادله لازم است که کلیه پارامترهای فیزیکی تعریف شده در این مسئله را بی بعد کنیم. برای بدون بعد سازی این پارامترها از تعاریف زیر استفاده می کنیم:[3]

$$\bar{x} = \frac{x}{R_v} \qquad (۷)$$

$$\bar{z} = \frac{z}{(1+\alpha) R_{mag}} \qquad (۸)$$

$$\bar{t} = \frac{t\, 2\bar{v}_f}{(1+\alpha) R_{mag}} \qquad (۹)$$

$$\bar{v}_x = v_x \frac{(1+\alpha) R_{mag}}{2\bar{v}_f R_v} \qquad (۱۰)$$

$$\bar{v}_z = \frac{v_z}{2\bar{v}_f} \qquad (۱۱)$$

با جایگذاری نیروهای مغناطیسی و شناوری در معادله دوم نیوتون و استفاده از روابط ۷ تا ۱۱ برای بدون بعد کردن پارامترهای فیزیکی مسئله و استفاده از تقریب های زیر :

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

$$\frac{d\bar{x}}{d\bar{t}} = -c\,\frac{1}{(1+\bar{z}^{2})^{3}} \qquad (۱۲)$$

$$\frac{d\bar{z}}{d\bar{t}} = (1-\bar{x}^{2}) \qquad (۱۳)$$

$$\frac{d\bar{x}}{d\bar{z}} = -\frac{c}{(1+\bar{z}^{2})^{3}(1-\bar{x}^{2})} \qquad (۱۴)$$

به معادله مسیر حرکت ذره می رسیم:

$$\left(\bar{X} - \frac{\bar{X}^{3}}{3}\right) = \left(\bar{X}_{0} - \frac{\bar{X}_{0}^{3}}{3}\right) - c\left[\frac{3}{8}(\tan^{-1}(\bar{z}) - \tan^{-1}(\bar{z_{0}})) + \frac{1}{8}\left(\frac{\bar{z}(5+3\bar{z}^{2})}{(1+\bar{z}^{2})^{2}} - \frac{\bar{z_{0}}(5+3\bar{z_{0}}^{2})}{(1+\bar{z_{0}}^{2})^{2}}\right)\right] \qquad (۱۵)$$

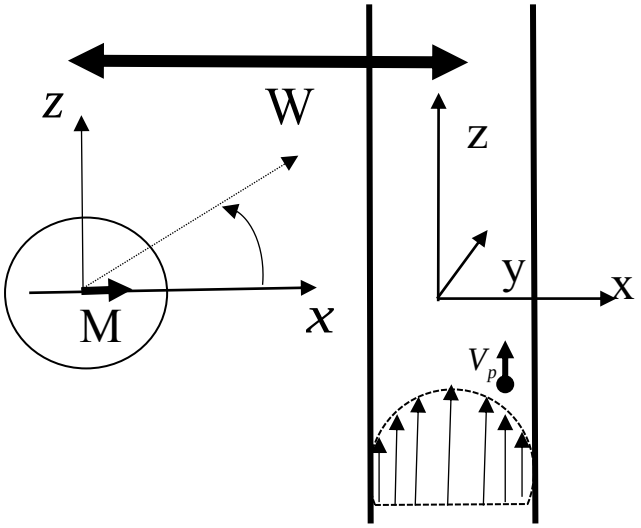
رابطه (۱۵) معادله مسیر حرکت ذره در مویرگ است که در این رابطه $\bar{x_{0}} = 0$ ، $\bar{z_{0}} = -4/(1+\alpha)$ و $\bar{z}$ بصورت $-4R_{mag} \le \bar{z} \le 4R_{mag}$ است و c بصورت زیر نوشته می شود:

$$c = \frac{\mu_{0} R_{p}^{2} f(H_{a}) M_{s}^{2}}{18\eta R_{v} v_{f} (1+\alpha)^{4}} \qquad (۱۶)$$

در این رابطه $\mu_{0} = 4\pi * 10^{-7}$ H/m ، M_{s}مغناطش آهنربا ، R_{p}شعاع ذره، R_{v}شعاع مویرگ، v_{f} سرعت سیال و η ویسکوزیته سیال و مقدار آن برابر حاصلضرب ویسکوزیته نسبی در ویسکوزیته پلاسماست. میدان مغناطیسی در داخل کانال را محاسبه کرده سپس مقدار پذیرفتاری مغناطیسی را به دست می آوریم. معادله (۱۵) را به روش روش عددی حل می کنیم. برای هر مقدار داده شده $\bar{z}$ ، معادله (۱۵) دارای سه جواب است که فقط یکی از آنها جواب فیزیکی است. با استفاده از نرم افزار متلب معادله مسیر حرکت ذره را برحسب شعاع ذره ، مغناطش اشباع ذره ومغناطش آهنربا حل شده است.

نتایج

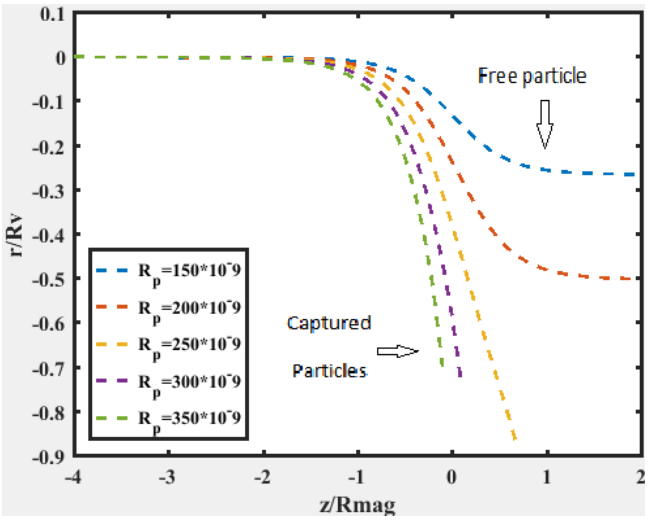
در این مطالعه چگونگی مسیرحرکت نانوذرات مغناطیسی در حضور آهنربای کروی شکل با پذیرفتاری مغناطیسی وابسته به میدان مغناطیسی قوی را مورد بررسی قرار می گیرد. همانطور که در رابطه (۲)و(۳) مشاهده می شود، میدان تابعی از x و z است. مقدار سرعت سیال v_{f} برابرست با ۱۵ mm/s است شعاع رگ که با R_{v} نشان می دهیم برابرست با ۷۵ μm .شعاع آهنربا ۲cmو ویسکوزیته پلاسما برابربا ۰/۰۰۳Ns/ m^{2} گرفتیم، رابطه به شعاع ذره، مغناطش، ویسکوزیته وابسته است و با تغییر این عوامل، نمودار تحت تأثیر قرار می گیرد. شکل (۱) مسیر حرکت ذره و هندسه کانال مورد مطالعه را نشان می دهد. کانال مورد مطالعه در صفحه (x,z) قرار گرفته است. فاصله مرکز کانال تا مرکز میدان مغناطیسی را w در نظر گرفته ایم.



شکل ۱: هندسه و سیستم مختصات. مرکز آهنربا در صفحه (x,z) قرار دارد که M مغناطش آهنرباست.از سیستم مختصات دکارتی برای نشان دادن مویرگ استفاده می کنیم محور z در طول مویرگ قرار دارد وw پهنای کانال است.

شکل(۲) مسیر حرکت ذره را در داخل کانال برای مقادیر متفاوت اندازه ذره نشان می دهد. نتایج عددی نشان می دهد که با افزایش شعاع ذره احتمال به دام افتادن ذره افزایش می یابد. در این شکل مغناطش آهنربا و مغناطش اشباع ذره ثابتند و شعاع ذره تغییر می کند.

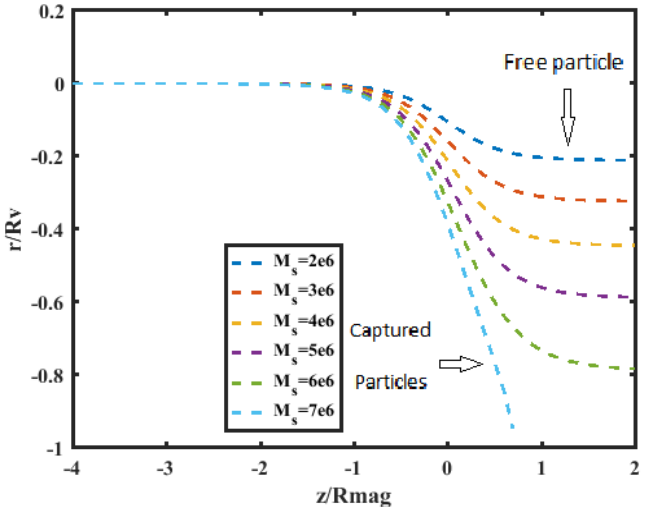
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



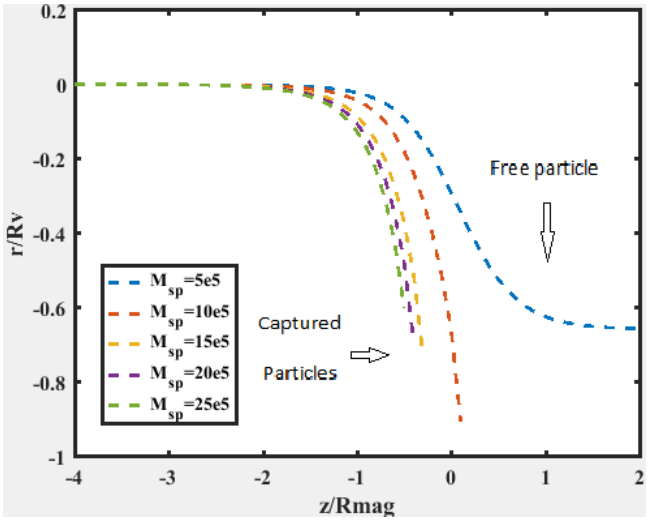
شکل ۲: نمودار مسیر حرکت ذره با مغناطش ثابت و شعاع ذره متغیر با آلفا ۰/۵

شکل (۳) مسیر حرکت ذره برحسب مغناطش آهنربا برای شعاع ذره و مغناطش اشباع ذره ثابت را نشان می دهد. نتایج عددی نشان می دهد که با افزایش شدت مغناطش آهنربا، احتمال به دام افتادن ذره افزایش می یابد.

شکل (۴) مسیر حرکت ذره برحسب مغناطش اشباع ذره را نشان می دهد که با افزایش مغناطش اشباع، ذرات در دام نیز افزایش می یابند. شعاع ذره ومغناطش آهنربا ثابت ولی مغناطش اشباع ذره تغییر می کند . در تمام محاسبات آلفا ثابت و برابر ۰/۵ است.



شکل ۳: نمودار مسیر حرکت ذره با مغناطش آهنربا متغیر و شعاع ذره ثابت با آلفا ۰/۵



شکل ۴: نمودار مسیر حرکت ذره با مغناطش اشباع ذره متغیر و شعاع ذره ثابت با آلفا ۰/۵

نتیجه گیری

با استفاده از قانون دوم نیوتون و با بی بعد کردن پارامترهای فیزیکی مسئله ،معادله مسیر حرکت نانو ذره مغناطیسی در ریزسیال را حل کردیم. مسیر حرکت نانوذرات مغناطیسی به ویسکوزیته، مغناطش، مغناطش اشباع و شعاع ذره ارتباط دارد. از این مدل در عرصه پزشکی برای درمان سرطان از طریق انتقال دارو به جریان خون و ناحیه تومور استفاده می شود.

مرجع ها

[1] R. Zhou, Q. Yang, F. Bai, J. A. Werner, H. Shi, Y. Ma and C. Wang; "Fabrication and integration of microscale permanent magnets for particle separation in microfluidics"; *Microfluidics and Nanofluidics*. **20**, no. 7 (2016)110.

[2] B. D. Plouffe, S. K. Murthy and L. H. Laura; "Fundamentals and application of magnetic particles in cell isolation and enrichment: a review"; *Rep. Prog. Phys*. **78**, no. 1 (2014)016601.

[3] E. P. Furlani and K. C. Ng; "Analytical model of magnetic nanoparticle transport and capture in the microvasculature"; *Phys. Rev*. **73**, no. 6 (2006)061919.

.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

تعیین کسر حجمی سیالات سه فازی به روش تضعیف اشعه گاما و شبیه سازی MCNP

علی ربانی نژاد*[۱]، داریوش نادری[۱]، سعید ستایشی[۲]، غلامحسین روشنی[۳]

[۱] گروه فیزیک، دانشکده علوم دانشگاه رازی ، کرمانشاه

[۲] گروه مهندسی هسته ای، دانشکده مهندسی انرژی و فیزیک، دانشگاه صنعتی امیر کبیر، تهران

[۳] گروه مهندسی برق، دانشکده مهندسی انرژی ، دانشگاه صنعتی کرمانشاه، کرمانشاه

چکیده

امروزه مبحث جریان سنجی سیالات چند فازی در صنعت دارای اهمیت زیادی می باشد که مهمترین و اصلی ترین پارامتر مورد نیاز جریان سنجی سیالات چندفازی، کسر حجمی هر یک از فازهاست. در این پژوهش به کمک نرم افزار مونت کارلوی MCNPX در سه رژیم جریانی(حلقوی، لایه ای و همگن) برای سه فاز (مایع-مایع-گاز) به تعیین کسر حجمی فازها با استفاده تضعیف اشعه گاما پرداخته ایم که میانگین خطای نسبی متوسط محاسبه شده، در بهترین چیدمان، حدود ۰,۰۲ بدست آمد. نکته حائز اهمیت در این پژوهش این است که مقدار خطای اندک مذکور فقط با کم کردن اثر ضریب انباشت از رابطه لمبرت بیر و بدون استفاده از هوش مصنوعی حاصل شده است. همچنین لازم به ذکر است که شبیه سازی ها و آزمایشات این پژوهش تنها با استفاده از یک آشکار ساز عبوری سوسوزن (NaI) و دو چشمه گامای تک انرژی **Cs- 137(0.662 MeV) + Am-241(0.0595MeV)** *برای سه فاز، انجام شده اند.*

واژه های کلیدی: *کسر حجمی ، سیالات چند فازی ، اشعه گاما ، مونت کارلو*

Determination of volume fraction of three-phase fluids by gamma ray attenuation method and MCNP simulation

A.Rabani*[1], D.Naderi[1], S.Setayeshi[2], G.H,Roshani[3]

1 Department of Physics, Faculty of Basic Sciences, Razi University, Kermanshah - Iran

2 Department of Nuclear Engineering, Faculty of Energy and Physical Engineering, Amir Kabir University of Technology, Tehran – Iran

3 Department of Electrical Engineering, Faculty of Energy, Kermanshah University of Technology,, Kermanshah - Iran

Abstract

Nowadays, multiphase fluid flowmetry is of great importance in the industry. The most important parameter required for multi-phase fluid flowmeter is the volume fraction of each phase. In this study, three flow regimes (annular, strafied and homogeneous) for three-phase (liquid-liquid-gas) to determine the volume fraction of phases using gamma-ray attenuation were simulated by MCNPX code. That obtained mean relative error, for determination of volume fraction in best setup, was obtained about 0.02. The important note in this study is that the small error value was obtained only by reducing the effect of the buildup factor on the Lambert-Beer relation without using artificial intelligence. It should be noted that the simulations and experiments of this study were performed using only a transmission detector (NaI) and two single energy gamma sources Cs-137 (0.662 MeV) + Am-241 (0.0595 MeV), for three phases.

***Keywords**: Volume fraction, Multiphase Fluids, Gamma ray, Monte Carlo*

مقدمه

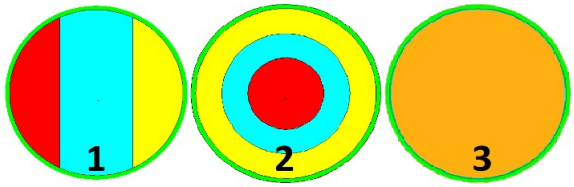
امروزه اهمیت دقت اندازه‌گیری کسر حجمی فازها، که یکی از مهمترین پارامتر های مورد نیاز سیال سنجی است، در جریان‌های چندفازی موجود در صنایع مختلف از جمله در صنعت نفت و گاز بر کسی پوشیده نیست [۱]. چرا که سیالی که از چاه های نفت استحصال می شود به ندرت به طور خالص و تک فاز مایع یا گاز است و اغلب، سیال به شکل یک مخلوط چندفازی دیده می شود. در ساده ترین شکل ممکن ترکیبی از سه فاز آب، گاز و نفت طبیعی است ولی در بسیاری از سیستم ها مواد جامد مختلفی مثل ماسه ها، هیادرات ها و آسافالتین ها نیز می توانند وجود داشته باشند [۳و۲]. یکی از روش های تعیین کسر حجمی سیال های چندفازی، استفاده از روش های هسته ای است که دقیق ترین آن

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

ها تضعیف اشعه گاما می باشد [٤]. در این روش جریان‌سنجی، سیال تحت تاثیر پرتوهای گامایی که از یک منبع خاص برای مثال (کبالت، سزیم و یا ...) منتشر می شود، قرار می گیرد و ذرات گاما پس از عبور از سیال و تضعیف شدت تابش آن‌ها، به آشکار سازهای تعبیه شده می رسند و ثبت می شوند[٥]. نخستین تحقیقات پیرامون پیش بینی درصد های حجمی محلول های چند فازی با استفاده از تضعیف اشعه گاما در سال ۱۹۸۰ توسط Abouelwafa و همکارش شروع شد[٦] که تا امروزه، به دلیل اهمیت موضوع، آزمایشات متفاوتی در این حوزه انجام شده و همچنان نیز در حال انجام است. از سال ۱۹۹۵، بعد از پژوهش Bishop، تا امروزه هدف انجام پژوهش های این حوزه به دو دسته جدا از هم تقسیم شده اند؛ دسته اول که از هوش مصنوعی، غالبا شبکه های عصبی، در تحقیقات خود استفاده می کنند و صرفا روی نتایج و دقت پژوهش بدون در نظر گرفتن روش های پیاده سازی در صنعت مانور می دهند، و دسته دوم که اولویت را به قابل اجرا بودن روش های مد نظرشان در صنعت داده اند [٦-۱۳]. همانطور که ذکر شد پر مسلم است که نتایج حاصل از پژوهش های دسته اول دارای دقت بالایی هستند ولیکن برای اجرایی شدن، خصوصا در خاورمیانه نیازمند هزینه های گزافی هستند و لذا به مرحله اجرا نرسیده و صرفا گزارش کاری از این پژوهش ها به یادگار می ماند. اما پژوهش های دسته دوم، که در سال های اخیر هم خیلی کمرنگ شده اند، در واقع پایه و اساس روش های مورد استفاده در صنعت و حتی به نوعی پایه پژوهش های دسته اول می باشند که خطاهای گزارش شده از این پژوهش ها بعضا دارای مقادیر بزرگی می باشند. ما در این پژوهش ضمن قابل پیاده سازی بودن روش های اندازه گیری کسر حجمی فازهای سیالات چند فازی توانسته ایم بدون استفاده از هوش مصنوعی و صرفا به کمک علم فیزیک هسته ای، با کم کردن اثر ضریب انباشت از طریق نزدیک کردن شرایط هندسی مسئله به شرایط هندسی خوب، خطای اندازه گیری کسر حجمی فاز ها را به اندازه قابل توجهی کم کرده و دقت اندازه گیری را افزایش دهیم.

روش کار

در این پژوهش برای تعیین کسر حجمی فازها، در رژیم های جریانی (حلقوی ، لایه ای و همگن)، شبیه سازی های متعددی با کمک کد مونت کارلوی MCNPX انجام شد. که با استفاده از تالی F8 ، شمارش همه ذرات ثبت شده در آشکار ساز به منظور خروجی از این نرم افزار و ورودی به معادلات تضعیف اشعه گاما در نظر گرفته شد. معادلات، لمبرت – بیر، مربوط به محاسبه کسر حجمی برای رژیم‌های جریانی سه‌فازی به صورت زیر بیان می شود:



شکل۲: سطح مقاطع رژیم های سیالات سه‌فازی شبیه سازی شده: ۱-لایه‌ای ۲-حلقوی ۳-همگن

$$I_1 = I_{01}e^{(-\mu_{a1}h_a)}e^{(-\mu_w 1h_w)}e^{(-\mu_o 1h_o)} \rightarrow ln(\frac{I_1}{I_{01}}) = -(\mu_{a1}h_a + \mu_{w1}h_w + \mu_{o1}h_o)$$

$$I_2 = I_{02}e^{(-\mu_{a2}h_a)}e^{(-\mu_{w2}h_w)}e^{(-\mu_{o2}h_o)} \rightarrow ln(\frac{I_2}{I_{02}}) = -(\mu_{a2}h_a + \mu_{w2}h_w + \mu_{o2}h_o)$$

که در روابط فوق I_1 و I_2 به ترتیب نشاندهنده شدت فوتون های مستخرج از چشمه گامای اول و دوم است و همچنین I_0 ها مربوط به شدت اولیه چشمه مورد نظر می باشند.

الف)رژیم جریانی حلقوی:

کسر حجمی فاز مایع با استفاده از رابطه ماندگی مایع ، که در ذیل آمده است، قابل محاسبه است[٤]:

$$\varepsilon_o = \frac{h_o}{D} - \frac{\left(\frac{\ln\left(\frac{I_2}{I_{a2}}\right)}{ln\left(\frac{I_{w2}}{I_{a2}}\right)}\right) - \left(\frac{\ln\left(\frac{I_1}{I_{a1}}\right)}{ln\left(\frac{I_{w1}}{I_{a1}}\right)}\right)}{\left(\frac{\ln\left(\frac{I_{o2}}{I_{a2}}\right)}{ln\left(\frac{I_{w2}}{I_{o2}}\right)}\right) - \left(\frac{\ln\left(\frac{I_{o1}}{I_{a1}}\right)}{ln\left(\frac{I_{w1}}{I_{o1}}\right)}\right)} \qquad (۳)$$

ب)رژیم جریانی لایه ای:

معادله (٤) رابطه کسرحجمی فاز گاز برای رژیم لایه ای دوفازی است [۱۰]:

$$\alpha_o = 1 - \frac{1}{\pi}[\cos^{-1}(2\beta_o - 1)] - [2(2\beta_o - 1)\sqrt{\beta_o(1-\beta_o)}]$$

که در آن:

$$\beta_o = \frac{\left(\frac{\ln\left(\frac{I_2}{I_{a2}}\right)}{ln\left(\frac{I_{w2}}{I_{a2}}\right)}\right) - \left(\frac{\ln\left(\frac{I_1}{I_{a1}}\right)}{ln\left(\frac{I_{w1}}{I_{a1}}\right)}\right)}{\left(\frac{\ln\left(\frac{I_{o2}}{I_{a2}}\right)}{ln\left(\frac{I_{w2}}{I_{o2}}\right)}\right) - \left(\frac{\ln\left(\frac{I_{o1}}{I_{a1}}\right)}{ln\left(\frac{I_{w1}}{I_{o1}}\right)}\right)} \qquad (۵)$$

ج)رژیم جریانی همگن:

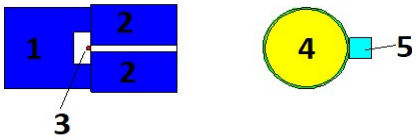
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

معادله (٦) رابطه محاسبه کسر حجمی فاز گاز برای رژیم همگن دو فازی است[۱۰]:

$$\alpha_o = \frac{\left(\frac{\ln(\frac{I_n}{I_{g2}})}{\ln(\frac{I_{w2}}{I_{g2}})}\right)-\left(\frac{\ln(\frac{I_1}{I_{g1}})}{\ln(\frac{I_{w1}}{I_{g1}})}\right)}{\left(\frac{\ln(\frac{I_{o2}}{I_{g2}})}{\ln(\frac{I_{w2}}{I_{o2}})}\right)-\left(\frac{\ln(\frac{I_{o1}}{I_{g1}})}{\ln(\frac{I_{w1}}{I_{g1}})}\right)} \qquad (٦)$$

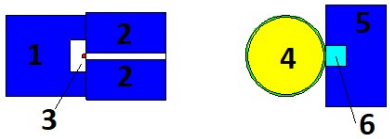
لازم به ذکر است که در تمام شبیه سازی های انجام شده، از یک آشکار ساز عبوری سوسوزن یدور سدیم ۱ اینچی به همراه کارت STOP با تعریف خطای نسبی ۰,۰۰۵، و در شبیه سازی های سیالات دوفازی از ^{137}Cs و در آزمایشات سه فازی از ^{137}Cs + ^{241}Am به عنوان چشمه استفاده شد. ضمنا برای سیالات دو فازی(مایع-گاز)، هوا با چگالی 0.001205 g/cm3 را بعنوان فاز گاز و مایع هیدرو کربنی C5H10 با چگالی 0.826 g/cm3 بعنوان فاز مایع و همچنین برای سیالات سه فازی(مایع-مایع-گاز) هوا، C5H10و آب با چگالی 0.980 g/cm3 در نظر گرفته و شبیه سازی شد. در تمام چیدمان های آزمایش شده فاصله لوله حاوی سیالات از چشمه ثابت و برابر25cm بود. لوله آزمایش هم از جنس پیرکس ، با چگالی 2.2g/cm3، شعاع داخلی4.75cm و ضخامت دیواره 0.25cm در نظر گرفته شده است. در ادامه چیدمان ها تشریح شده اند:

چیدمان ۱: در این حالت آشکار ساز بدون موازی ساز و حفاظ می باشد که به لوله آزمایش چسبیده شده است. در شکل ۲ سطح مقطع این چیدمان نشان داده شده است.



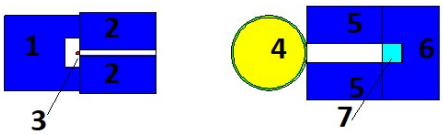
شکل ۳: سطح مقطع عمودی هندسه شبیه سازی شده آزمایش که در آن ۱)حفاظ چشمه ۲) موازی ساز ۳) چشمه ٤) لوله ٥) آشکارساز

چیدمان ۲: در این چیدمان آشکار ساز به لوله آزمایش چسبیده شده و به همراه حفاظ سربی است. سطح مقطع عمودی این شبیه سازی در شکل ۳ نشان داده شده است.



شکل ٤: سطح مقطع عمودی هندسه شبیه سازی شده آزمایش که در آن ۱)حفاظ چشمه ۲) موازی ساز ۳) چشمه ٤) لوله ٥) حفاظ آشکار ساز ٦) آشکار ساز

چیدمان ۳: در چیدمان ۳ آشکار ساز از مرکز لوله دارای فاصله ای 15 cm به همراه موازی ساز و حفاظ سربی می باشد که سطح مقطع عمودی این چیدمان برای رژیم لایه ای در شکل ٤ آمده است.



شکل ٥: سطح مقطع عمودی هندسه شبیه سازی شده آزمایش که در آن ۱)حفاظ چشمه ۲) موازی ساز ۳) چشمه ٤) لوله ٥) موازی ساز ٦) حفاظ آشکار ساز ۷) آشکار ساز

نتایج:

برای هر رژیم جریانی در هر یک از چیدمان ها کسر های حجمی متفاوتی شبیه سازی شد. در این پژوهش برای هر رژیم جریانی سه فازی ۱۹۸ شبیه سازی و مجموعا ٥٩٤ شبیه سازی متفاوت انجام شد. با جایگذاری پارامتر های بدست آمده از شبیه سازی ها در معادلات مشروح در بخش قبل، کسر های حجمی شبیه سازی شد. میانگین خطای نسبی متوسط برای هر رژیم در هر چیدمان را محاسبه کرده و در جدول ذیل آورده ایم.

جدول۱: میانگین خطای نسبی کسر های حجمی محاسبه شده در سه رژیم جریانی و سه چیدمان متفاوت آزمایشگاهی

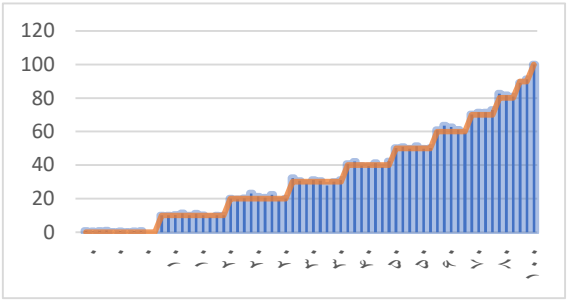
نوع چیدمان	رژیم حلقوی	رژیم لایه ای	رژیم همگن	میانگین
۱-سه فازی	۰,٦٨٥	۰,۷۱۱	۰,٦۷۸	۰,٦۹۱
۲-سه فازی	۰,۳٤۳	۰,۳٦۸	۰,۳٦۷	۰,۳٥۹
۳- سه فازی	۰,۰۳٥	۰,۰٤٥	۰,۰٤۳	۰,۰٤۱

با تحلیل اطلاعات بدست آمده به راحتی استنتاج می شود که در شرایط عملیاتی ثابت و یکسان اگر اطراف تنها آشکار ساز عبوری استفاده شده در آزمایش را با حفاظ های سربی به قطر5cm بپوشانیم (مانند شکل ۳)، خطای متوسط نسبی برای تعیین کسر حجمی فاز ها حدودا ٥۰٪ نسبت به زمانی که آشکار ساز بدون حفاظ است (مانندشکل ۲) تقلیل می یابد. همچنین اگر آشکار حفاظ گذاری شده را از لوله آزمایش دور کنیم و همزمان از موازی ساز سربی به قطر 5cm برای ورودی آشکار ساز استفاده کنیم(مانند شکل ٤) نسبت این خطای متوسط نسبی برای تعیین کسر حجمی فازها بیش از ۹٥٪ از آزمایش با آشکار ساز بدون

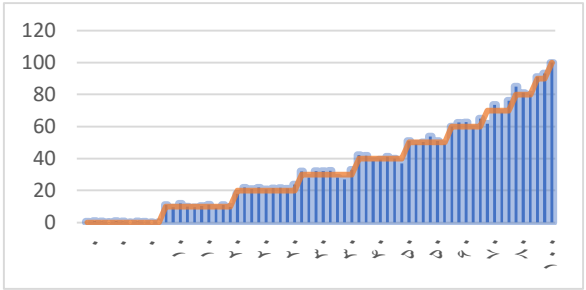
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

حفاظ و چسبیده به لوله (مانند شکل ۲) کاهش می یابد، که در این حالت میانگین خطای نسبی متوسط کسر حجمی فاز مایع محاسبه شده در سه رژیم حدود ۰,۰۳ بدست آمد که این مقدار خطای اندک نسبت به گزارشات پژوهش های مشابه صورت گرفته با روش های دیگر از جمله استفاده از شبکه های عصبی بسیار قابل تامل و مطلوب است. نمودار های مربوط به تعیین کسر حجمی سیالات برای سه رژیم جریانی مطروح، در چیدمان ۳، در ذیل آمده است که دقت بالای کسر های حجمی محاسبه شده در قیاس با کسر های حجمی شبیه سازی شده به خوبی نمایان است.

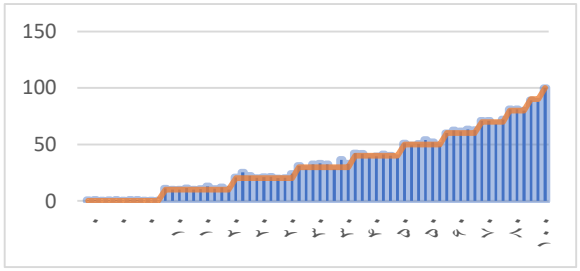
لازم به ذکر است که دلیل استحصال این نتایج نزدیک کردن شرایط آزمایش به شرایط هندسی خوب است. همچنین باید توجه کرد که این میزان اندک خطای موجود هم دارای دلایل دیگری برای توجیه هستند از جمله خطای ناشی از شبیه سازی فانتوم ها، خطای ناشی از آمار گسیل ذرات و ... است؛ که به نظر می رسد با کم کردن خطا های یاد شده در بخش شبیه سازی عملا خطای ناشی از محاسبات کسر حجمی فاز ها بسیار ناچیز شود.



شکل۶: نمودار مقایسه ای بین کسر حجمی محاسبه شده و واقعی برای چیدمان ۳ سه فازی رژیم حلقوی ؛ نمودار قرمز: کسر های حجمی واقعی نمودار آبی: کسر حجمی محاسبه شده.



شکل۷: نمودار مقایسه ای بین کسر حجمی محاسبه شده و واقعی برای چیدمان ۳ سه فازی رژیم لایه ای ؛ نمودار قرمز: کسر های حجمی واقعی نمودار آبی: کسر حجمی محاسبه شده.



شکل۸: نمودار مقایسه ای بین کسر حجمی محاسبه شده و واقعی برای چیدمان ۳ سه فازی رژیم همگن ؛ نمودار قرمز: کسر های حجمی واقعی نمودار آبی: کسر حجمی محاسبه شده

مراجع:

1. Jiang, Y., Rezkallah, K., *An experimental study of the suitability of using a gamma densitometer for void fraction measurements in gas-liquid flow in a small diameter tube*. Meas. Sci. Technol. 4, 496, (1993).
2. Cember, H. and Johnson, T. H. *Introduction to Health Physics*, 4th ed., (McGraw Hill, 2009)
3. Åbro, E., and Johansen, G. A., *Improved Void Fraction Determination by Means of Multibeam GammaRay Attenuation Measurements*, Flow Measurement and Instrumentation, Volume 10, (1999)
4. Abouelwafa, M. S. A., and Kendall, E. J. M., *The Measurement of Component Ratios in Multiphase Systems using γ-ray Attenuation*, J. Phys. E: Sci. Instrum., Volume 13, (1980)
5. Johansen, G.A., Jackson, P., *Salinity independent measurement of gas volume fraction in oil/gas/water pipe flows*, Applied Radiation and Isotopes, vol 53, (2000)
6. Tambouratzis, T., & Pázsit, I, *A fuzzy inference system for two-phase flow regime identification from radiography images*, International Journal of Nuclear Energy Science and Technology, 5, 321-334, (2010)
7. Salgado Cesar M et al, *Prediction of volume fractions in three-phase flows using nuclear technique and artificial neural network*, Radiation and Isotopes 67 ,(2009)
8. Zhao, Y. et al, *Recognition and measurement in the flow pattern and void fraction of gas-liquid twophase flow in vertical upward pipes using the gamma densitometer*, Thermal Engineering 60,(2013)
9. G.H. Roshani et al, *Prediction of materials density according to number of scattered gamma photons using optimum artificial neural network*, J. Comput. Method. Phys. (2014)
10. Satre, C., Johansen, G.A., Tjugum, S.A., *Salinity and flow regime independent multiphase flow measurements*, Flow Measurement and Instrumentation, vol 21, (2010)
11. Bishop C. M et al, *Analysis of multiphase flows using dual-energy gamma densitometry and neural networks*, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A, 327, 580-593, (1993)
12. El Abd, A. *Intercomparison of gamma ray scattering and transmission techniques for gas volume fraction measurements in two phase pipe flow*, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A 735, (2014)
13. Rabiei, A. et al, *Void fraction and flow regime determination by means of MCNP code and neural network*, NUKLEONIKA (2012)

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

ساخت و بررسی خواص ساختاری، نوری و مغناطیسی نانوکامپوزیت $SiO_2/ZnFe_2O_4$ آلاییده شده با نئودیوم

علیزاده شرکانلو، نسترن[1]؛ مالکی، حامد[1]

[1]دانشکده فیزیک، دانشگاه شهید باهنر کرمان ، کرمان ، ایران

چکیده

در این مقاله خواص ساختاری، نوری و مغناطیسی نانو کامپوزیت $Sio_2/Zn_{(1-x)}Nd_xFe_2O_4$ (۰/۲۵، ۰/۲۰، ۰/۱۵، ۰/۱۰، ۰/۰۵، ۰=x) سنتز شده به روش سل ژل مورد بررسی قرار گرفت. از پراش اشعه X (XRD) و طیف سنجی تبدیل فوریه مادون قرمز (FTIR) برای بررسی خواص ساختاری استفاده شد که در پراش اشعه ایکس وجود یک فاز خالص از فریت روی در نمونه ها تایید گردید. مورفولوژی ذرات با آنالیز FE-SEM مورد مطالعه قرار گرفت که طبق این آنالیز بعد از افزودن نئودیوم ذرات بهم چسبیده اند که می تواند ناشی از خاصیت مغناطیسی نئودیوم باشد. برای بررسی خواص اپتیکی نانو ذرات از آنالیز DRS و برای مطالعه میزان گاف انرژی از نمودار تاوک استفاده شد که براساس نتایج به دست آمده، با افزایش میزان نئودیوم گاف انرژی نیز افزایش یافت. در انتها برای خواص مغناطیسی نمونه ها از مغناطیس سنج نمونه نوسانی استفاده شد و خاصیت فرو مغناطیسی مواد تایید گردید.

Synthesis and study of structural, optical and magnetic properties of $SiO_2/Nd:ZnFe_2O_4$ nanocomposites.

Alizadeh sharkanloo, Nastaran[1]; Maleki, Hamed[1]

[1] Faculty of Physics, Shahid Bahonar University of Kerman, Kerman, Iran

Abstract

In this paper, the structural, optical and magnetic properties of $SiO_2/Zn_{(1-x)}Nd_xFe_2O_4$ (x=0,0.05, 0.1,0.15,0.2,0.25) nanocomposites, synthesized by sol-gel method, was studied. X-ray diffraction (XRD) and Furrier transform infrared (FTIR) spectroscopy have been used to study the structural properties. The X-ray diffraction confirms the presence of pure phase of zinc ferrite in all synthesized samples. In addition, nanoparticles morphology has been studied by FE-SEM images. According to this analysis, nano particles have been strongly agglomerated among all samples which were neodymium-dopan. This could be due to the magnetic properties of Nd. To investigate the optical properties of nanoparticles, DRS analysis and Tauc diagram were performed to study the optical band gap. As shown in this analysis by increasing concentration of neodymium, the band gap increased. According to the VSM spectrum, the particles have ferromagnetic properties.

PACS No.60.61.75.81

مقدمه

کامپوزیت ها موادی هستند که از ترکیب دو یا چند ماده با خواص فیزیکی، شیمیایی یا مکانیکی گوناگون ساخته شده اند. اخیراً این دسته از مواد نقش پررنگی در صنایع مختلف از جمله هوافضا، رباتیک، ساختمان سازی و پزشکی داشته اند. در این بین نانو کامپوزیت ها به موادی اطلاق می گردد که حداقل یک فاز از آن ها از مرتبه نانو باشد. این مواد به همراه مواد هوشمند کاربرد

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

های فراوانی در صنعت اتومبیل سازی، انتقال دارو و هوافضا دارند[۱].

فریت روی ($ZnFe_2O_4$) یک ساختار اسپینلی با گاف انرژی کم می باشد که کاربرد های فراوانی به عنوان مواد مغناطیسی یا کاتالیست ها دارد[۲و۳]. از طرف دیگر سیلیکا یا اکسید سیلیسیم با فرمول شیمیایی SiO_2 فراوان‌ترین ترکیب اکسیدی موجود در پوسته زمین است. اکسید سیلیسیم به سه شکل پودری، ژل و کلوییدی وجود دارد که دارای دو ساختار متفاوت در طبیعت است. اولین ساختار، ساختار کریستالی است که در آن یک اتم سیلیسیم (Si) توسط چهار اتم اکسیژن (O) در یک ساختار چهارگوش قرار گرفته اند و ساختار دیگر سیلیکا در طبیعت، ساختار آمورف است[٤].

در این مقاله نانوکامپوزیت $SiO_2/ZnFe_2O_4$ به روش سل ژل ساخته شد و اثر جانشانی عنصر نئودیوم با روی بر روی خواص فیزیکی نانوکامپوزیت های ساخته شده بررسی گردید.

روش آزمایش

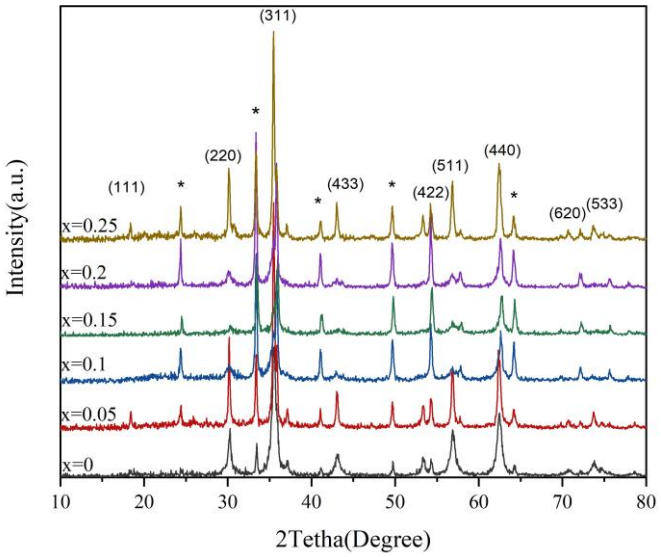
در این کار نانوکامپوزیت های $SiO_2/Zn_{(1-x)}Nd_xFe_2O_4$ (x=۰، ۰/۰۵، ۰/۱۰، ۰/۱۵، ۰/۲۰، ۰/۲۵) به روش سل ژل سنتز شدند. از نیترات آهن ($Fe(NO_3)_3.9H_2O$)، نیترات روی ($N_2O_6Zn.6H_2O$)، نیترات نئودیوم ($N_3NdO_9.6H_2O$) و تترااتیل اورتوسیلیکات (TEOS) با خلوص بالا به عنوان مواد اولیه استفاده شد. با استفاده از روابط استوکیومتری مقادیر مناسبی از نمک های آهن و روی به صورت جداگانه هر کدام در ٤٠ سی سی آب دیونیزه توسط همزن مغناطیسی همزده شدند. همزمان نیترات نئودیوم در ۲۰ سی سی آب دیونیزه حل گردید. سپس محلول نمک ها با هم ترکیب و به مدت یک ساعت همزده شدند. ۱/۵ گرم سیتریک اسید حل شده در مقدار کمی آب به عنوان کاتالیزور و سوخت، به محلول اضافه گردید و به مدت یک ساعت همزده شد. در مرحله بعد مقدار مناسبی TEOS در اتانول و هیدروکلریک اسید حل و به محلول نمک ها اضافه گردید و به مدت یک ساعت در دمای ۷۵ درجه سانتی گراد هم زده شد سپس دما به ۹۰ درجه افزایش یافت و ژل قهوه ای رنگی به دست آمد و در نهایت دما به ۱۱۰ درجه سانتی گراد افزایش یافت و پودر حاصل شده به مدت ۳ ساعت در دمای٦٥٠ درجه سانتی گراد کلسینه شد.

برای بررسی خواص ساختاری نمونه ها از طیف سنجی پراش اشعه ایکس استفاده شد. طیف های FT-IR نمونه ها در محدوده $500–4000 cm^{-1}$ ضبط شدند. ریخت شناسی نانوذرات سنتز شده توسط میکروسکوپ الکترونی روبشی انتشار میدانی مورد مطالعه قرار گرفت. خواص نوری نمونه ها توسط آنالیز طیف سنج بازتابی انتشاری (DRS) در محدوده طول موج ۳۰۰–۱۰۰۰nm اندازه گیری شد. خواص مغناطیسی نمونه ها با استفاده از مغناطیس سنج نمونه ارتعاشی (VSM) در میدان اعمالی بین ۱۵–تا ۱۵KOe+ در دمای اتاق بررسی گردید.

نتایج و بحث

بررسی ویژگی های ساختاری

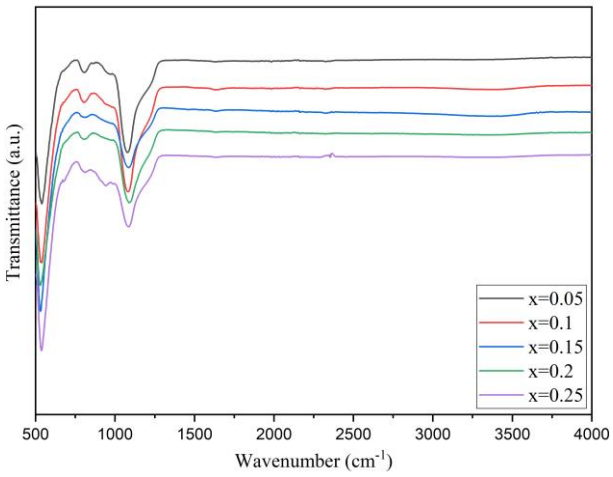
الگو های پراش اشعه x نمونه ها در شکل ۱ نشان داده شده است. تمام پیک های موجود در نمودار با الگوی استاندارد نمونه $ZnFe_2O_4$ با شماره کارت استاندارد (JCPDS No.۱۰۱۲–۲۲) مطابقت دارند که حضور فاز فریت روی خالص را نشان می دهند. برای محاسبه اندازه ذرات از معادله شرر ($D=0.94\lambda/\beta_{hkl}\cos\theta$) استفاده شد که در این رابطه β_{hkl} پهنای کامل در نصف بیشینه پیک پراش است. براساس الگو های XRD ، اندازه ذرات محاسبه شده با رابطه شرر بین ۸۰ تا ۱۰۰nm است.



شکل۱:الگو های پراش اشعه x نانو ذرات $SiO_2/Zn_{(1-x)}Nd_xFe_2O_4$ به ازای x=۰-۰/۲۵.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

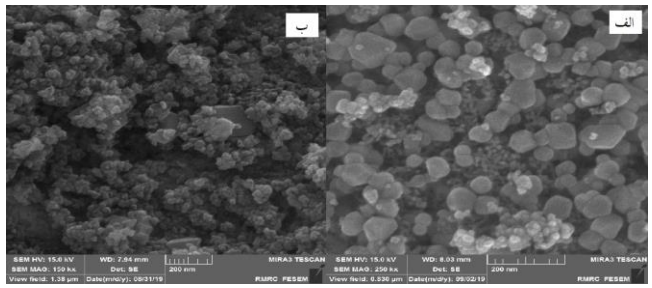
طیف سنجی تبدیل فوریه مادون قرمز (FTIR) یکی دیگر از تجزیه تحلیل های ساختاری است که تبلور بلورینگی نمونه ها و تشکیل پیوند های فلزی را نشان می دهد. طیف FTIR نمونه های سنتز شده در شکل ۲ آورده شده است. با توجه به تحلیل FTIR در دامنه $۶۰۰cm^{-1}$-۴۰۰ دو قله مشاهده شده است که مرتبط با پیوند های فلزیFe-O و Zn-O می باشند. همچنین ارتعاش کششی Si-O-Si در محدوده $۱۰۹۰\ cm^{-1}$ دیده می شود.



شکل۲:طیف FTIR نمونه های سنتز شده با غلظت های مختلف نئودیوم.

ریخت شناسی نانوکامپوزیت ها

میکروسکوپ الکترونی روبشی انتشار میدانی (FESEM) آنالیزی است که مورفولوژی نمونه ها را مورد مطالعه و بررسی قرار می دهد. تصویر FE-SEM نمونه های خالص $SiO_2/ZnFe_2O_4$ و $SiO_2/Zn_{0.75}Nd_{0.25}Fe_2O_4$ ساخته شده به روش سل-ژل در شکل ۳ نشان داده شده است. شکل ۳- الف نشان می دهد که نانو ذرات $SiO_2/ZnFe_2O_4$ دارای شکل کروی هستند در حالی که نانو ذرات $SiO_2/ZnFe_2O_4$ آلاییده شده با Nd به صورت آگلومره و چسبیده می باشند. این تفاوت را می توان به خاصیت مغناطیسی نئودیوم و اثر آن در آگلومره شدن نانو ذرات نسبت داد.



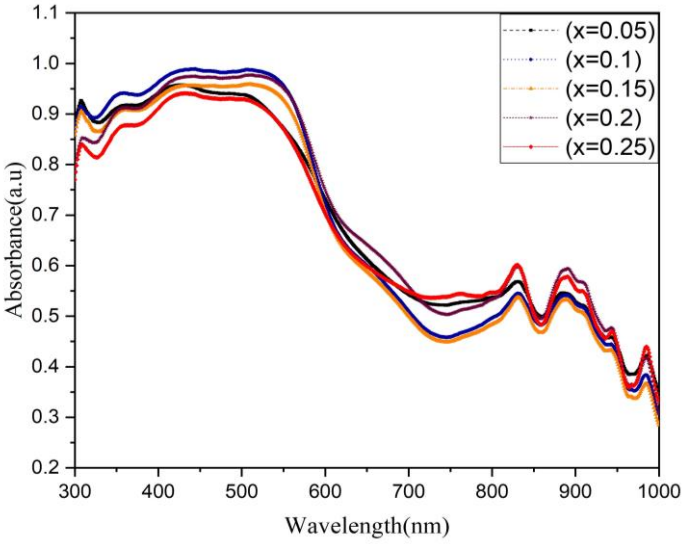
شکل۳: تصاویری از اسکن میکروسکوپ الکترونی روبشی انتشار میدانی برای نمونه های (الف) $SiO_2/ZnFe_2O_4$ (ب) $SiO_2/Zn_{0.75}Nd_{0.25}Fe_2O_4$.

بررسی خواص نوری

در قسمت بعدی کار به مطالعه خواص نوری نانوکامپوزیت های سنتز شده پرداخته می شود. برای این کار از آنالیز DRS استفاده شده است. شکل های ٤ و ٥ به ترتیب طیف جذب ماوراءبنفش- مرئی بازتابی انتشاری و نمودار تاوک نمونه های خالص $SiO_2/ZnFe_2O_4$ و آلاییده شده با نئودیوم را نشان می دهند. با استفاده از معادله تاوک (رابطه ۱) اندازه گاف انرژی قابل محاسبه است:

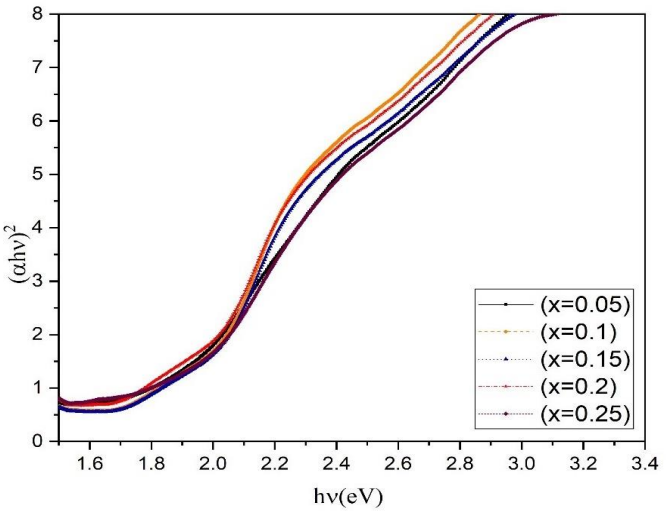
$$(\alpha h\nu)^2=k(h\nu-E_g) \qquad (۱)$$

که در این رابطه k یک ثابت، α ضریب جذب، hν انرژی فوتون و E_g شکاف باند است. آنالیز DRS نمونه ها یک جذب نوری گسترده در محدوده $۸۵۰nm$-۶۰۰ را نشان می دهد. گاف انرژی نمونه ها طبق شکل ۵ درمحدوده$۱/۸$-$۲/۱eV$ به دست آمد.



شکل ٤ :آنالیز DRS نمونه های $SiO_2/Zn_{(1-x)}Nd_xFe_2O_4$ به ازای غلظت های متفاوت نئودیوم(۰/۲۵ -۰/۰۵=x).

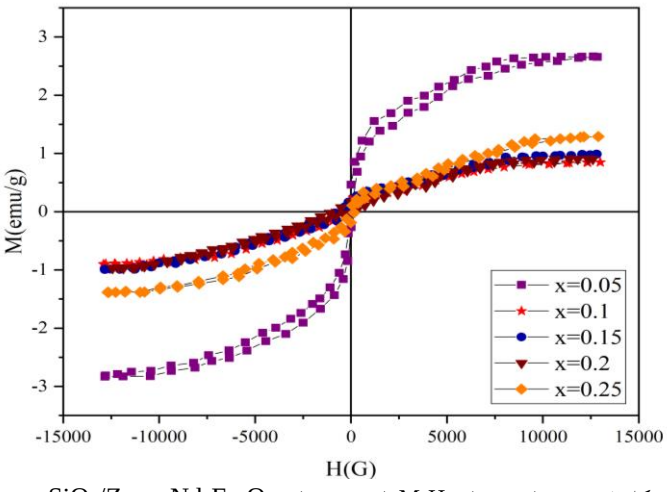
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



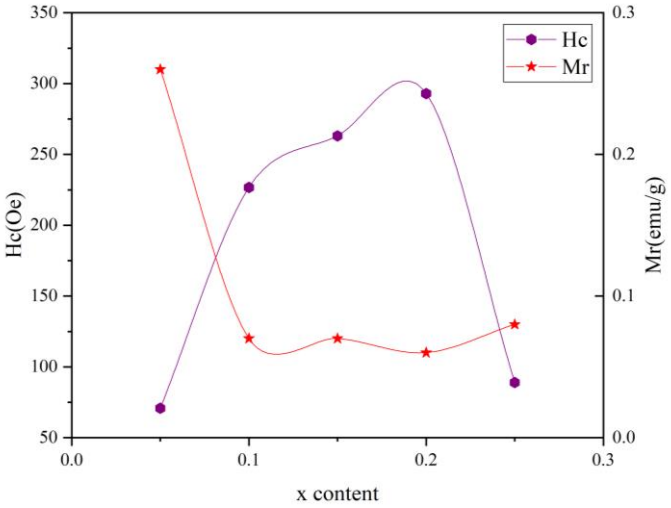
شکل ۵:نمودار تاوک نمونه های $SiO_2/Zn_{(1-x)}Nd_xFe_2O_4$ (۰/۲۵، ۰/۲۰، ۰/۱۵، ۰/۱۰، ۰/۰۵=x)

بررسی خواص مغناطیسی

حلقه های پسماند مغناطیسی نانوکامپوزیت های سنتز شده در شکل ٦ نمایش داده شده است. همان طور که در این شکل مشاهده می شود تمامی نمونه ها دارای خاصیت فرو مغناطیسی هستند که این بر خلاف رفتار غیرمغناطیسی SiO_2 و رفتار سوپر پارامغناطیس فریت روی است. همچنین مشاهده می کنیم که نمونه x=۰/۰۵ دارای بیشترین مغناطش اشباع می باشد. شکل ٦ منحنی های میدان بازدارنده (H_c) و مغناطش باقی مانده (M_r) را به ازای مقدار غلظت نئودیوم نشان می دهد. در میان نمونه های سنتز شده، نمونه ی $SiO_2/ZnFe_2O_4$ با ۲۰٪ آلاییدگی نئودیوم دارای بیشترین میزان میدان بازدارنده در حدود ۲۹۲/۹۳Oe است.



شکل٦:منحنی های پسماند M-H نانو پودر های $SiO_2/Zn_{(1-x)}Nd_xFe_2O_4$ به ازای x=۰/۰۵ –۰/۲۵.



شکل٦:میدان باز دارنده (H_c) و مغناطش باقی مانده (M_r) به ازای غلظت های متفاوت نئودیوم.

نتیجه گیری

هدف از این پژوهش بررسی اثر افزودن نئودیوم، بر روی خواص ساختاری، نوری و مغناطیسی نانو کامپوزیت $SiO_2/ZnFe_2O_4$ است که به روش سل–ژل سنتز شده اند. در طیف XRD تمام نمونه های سنتز شده یک فاز فریت روی خالص نشان داده شد. همچنین اندازه ذرات با استفاده از رابطه شرر به دست آمد. طیف های FTIR وجود پیوند های فلزی Zn-O و Fe-O را نشان داد. طبق تصاویر FE-SEM ذرات بعد از افزودن نئودیوم بهم چسبیده اند و شکل کروی خود را از دست داده اند. آنالیز DRS یک جذب نوری گسترده در محدوده طول موج نور مرئی را نشان داد و منحنی های پسماند M-H رفتار فرو مغناطیس نمونه ها را تایید کردند.

مرجع ها

[۱] E. Mangino, Carruthers, G. Pitarresi, International Journal of Vehicle Design 44(3-4) (2007) 211.

[۲] S. Falahatnezhad, H. Maleki, A.M. Badizi, M. Noorzadeh, Journal of Materials Science: Materials in Electronics 30(17) (2019) 15972

[۳] S. Falahatnezhad, H. Maleki, Journal of Materials Science : Material in Elecrtonics 29(20) (2018) 17360.

[٤] X. Ke, Z. Wu, J. Lin, F. Wang, P. Li, R. Xu, M. Yang, L. Han, D. Zha Ng, Journal of Non-Crystalline Solids 531(November 2019) (2020) 1.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

طول عمر(زمان واهلش) نوسانات گرافن با استفاده از دینامیک مولکولی وچگالی انرژی طیفی

مفاخری ، مرتضی ؛ صبوری، امیر عباس ؛ شکری، علی اصغر

گروه فیزیک ، دانشگاه پیام نور ، واحد تهران- شرق

چکیده

در این تحقیق شبیه سازی دینامیک مولکولی با تجزیه و تحلیل طیفی فونون با هدف درک رسانش حرارتی دو بعدی در گرافن انجام شده است. با استفاده از سرعت اتمهای به دست آمده از شبیه سازی دینامیک مولکولی ، و ترسیم نمودار چگالی انرژی طیفی طول عمر فونون ها را محاسبه کردیم. محاسبات انجام شده نشان داد که فونونهای آکوستیکی یعنی فونونهای مربوط به مدهای ZA، LA وTA طول عمر بیشتری دارند در نتیجه سهم بیشتری در رسانش گرمایی دارند. در بین فونونهای اپتیکی فونونهای مربوط به مد ZO یعنی ارتعاشات خارج از صفحه گرافن نسبت به مدهای LO,TO طول عمر قابل ملاحظه ای دارند ولی به دلیل سرعت گروه پایین نقش آنها در رسانش گرمایی ناچیز است.

کلمات کلیدی: *گرافن، طول عمر فونون، دینامیک مولکولی، چگالی انرژی طیفی*

Vibrational Lifetimes of Graphene by Using of Molecular Dynamics and Spectral Energy Density

Mafakheri, Morteza; Sabouri, Amir Abbass; Shokri, Ali Asghar

Physics Group, Payame Noor University, Tehran-Shargh Branch

Abstract

In this research we performed molecular dynamics simulations with phonon spectral analysis aiming at understanding the thermal transport in graphene. We calculated phonon lifetime using atomic velocities drived from molecular dynamics simulation and plotting spectral energy diagram. Calculations showed that acoustical phonons ZA, LA and TA phonons have larger lifetimes and so they have more contribution in thermal conductivity. In Optical phonons, ZO, out of plane modes, have longer lifetimes respect to LO and TO phonon modes but because of little group velocity their contribution in thermal conductivity is negligible.

***Keywords**: Graphene, Phonon Lifetime, Molecular Dynamics, Spectral Energy Density*

مقدمه

در سالهای اخیر به خصوصیات حرارتی مواد در مجامع تحقیقاتی علمی و صنعتی توجه زیادی شده است. این امر بیشتر در مورد دفع گرما و مدیریت حرارت در صنایع الکترونیکی و همچنین نیاز به درک انتقال گرما در مقیاس نانو از منظر علمی بوده است. ترابرد حرارتی در سیستم های دو بعدی و یک بعدی یک چالش علمی جالب را ارائه می کند. موادی که دارای رسانایی حرارتی بسیار زیاد یا بسیار کم هستند ، به دلیل کاربردهای احتمالی برای حذف گرما یا عایق حرارتی ، توجه را به خود جلب می کنند. در سیستم های نیمه هادی غیر فلزی گرما توسط فونون ها از طریق ارتعاشات شبکه منتقل می

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

شود [۱]. فونون ها شامل محدوده وسیعی از فرکانسها و محدوده وسیعتری در مقادیر مسیر آزاد میانگین می باشند. با این حال بیشتر گرما توسط فونونهایی که دارای یک بردار موج بزرگ و یک مسیر آزاد متوسط بین ۱ تا ۱۰۰ نانومتر در دمای اتاق هستند انجام می شود.

گرافن یک لایه جدا شده از اتمهای کربن هیبریدی شده sp2 است که به شکل شبکه لانه زنبوری می باشد. پیشنهادهای نظری وجود دارد که گرافن از هدایت حرارتی غیرمعمول بالایی برخوردار است [۲]. گذشته از تحرک الکترونیکی بالا [۳] رسانش گرمایی بالایی نیز در گرافن به صورت تجربی اثبات شده است [٤،٥]. پیش بینی شده است که چنین ترابرد دو بعدی می تواند به هدایت حرارتی ذاتی بی نهایت بزرگ منجر شود [٦-٨].

روش

اهمیت مدلهای تحلیلی ترابرد گرما به دلیل تقریبها و پیش فرضهای لازم که فقط پیش بینی های کیفی یا نیمه کمی را مجاز می سازد تا حدود زیادی کاهش یافته است [۹،۱۰]. در صورت استفاده از روش گرین-کوبو یا روشهای مستقیم ، شبیه سازی دینامیکی مولکولی می تواند رسانش گرمایی را پیش بینی کند [۱۱-۱٤]. از آنجا که تجزیه و تحلیل در این دو روش در سطح سیستم انجام می شود ، هیچ اطلاعاتی درباره فونون ها بدست نمی آید. با استفاده از شبیه سازی های دینامیک مولکولی و تجزیه و تحلیل مدهای نرمال ، می توان خصوصیات فونون مورد نیاز برای محاسبه هدایت حرارتی (سرعت گروه ، زمان واهلش) را پیش بینی کرد ، اما این روش نیاز به دانش قبلی در مورد فرکانسهای فونون و بردارهای قطبش دارد و زمانبر است. فرکانس های فونون و زمان واهلش را می توان از محاسبات دینامیک شبکه هارمونیک و غیرهارمونیک ، [۱۵،۱۸-۲۱] بدست آورد اما اینها از نظر تئوری و محاسباتی پیچیده بوده و فقط در دمای پایین معتبر هستند. چگالی انرژی طیفی[۲۵-۲۲]، که ما در اینجا مورد بحث قرار می دهیم ، روش ساده ای را ارائه می دهد که با استفاده از آن فرکانسهای فونونها و زمانهای واهلش با استفاده از سرعتهای اتمی حاصل از یک شبیه سازی دینامیک مولکولی به عنوان ورودی بدست می آید. چگالی انرژی طیفی که میانگین انرژی جنبشی به ازای سلول واحد و به صورت تابعی از بردار موج و فرکانس می باشد ، عبارتست از[۲۱]

$$\Phi(\boldsymbol{\kappa},\omega)=\frac{1}{4\pi\tau_0 N_T}\sum_{\alpha}\sum_{b}^{\beta}m_b \qquad (۱)$$
$$\times\left|\int_0^{\tau_0}\sum_{n_{x,y,z}}^{N_T}\dot{u}_\alpha\binom{n_{x,y,z}}{b};t\right)$$
$$\times exp\left[i\boldsymbol{\kappa}.\boldsymbol{r}\binom{n_{x,y,z}}{0}-i\omega t\right]dt\Bigg|^2$$

که در آن $N_T(=N_xN_yN_z)$ تعداد کل سلول واحدها، α جهت حرکت اتمها، m_bجرم اتم b ام، $n_{x,y.z}$شماره سلول واحد، $u_\alpha\binom{n_{x,y,z}}{b},t)$مولفه سرعت هر اتم، $\boldsymbol{\kappa}$ بردار موج، $\mathbf{r}\binom{n_{x,y,z}}{0}$مکان تعادلی هر سلول واحد و ωفرکانس زاویه ای می باشد.

چگالی انرژی طیفی باید ترکیبی از ۳nتابع لورنتسی با مراکزی در ω_cبا نیم پهنایی در نیم بیشینه γ باشد. از دینامیک شبکه ناهماهنگ می دانیم که [۱۵،۱۸] $\tau\binom{\boldsymbol{\kappa}}{\nu}=\frac{1}{2\gamma\binom{\boldsymbol{\kappa}}{\nu}}$که در آن τزمان واهلش فونون است.

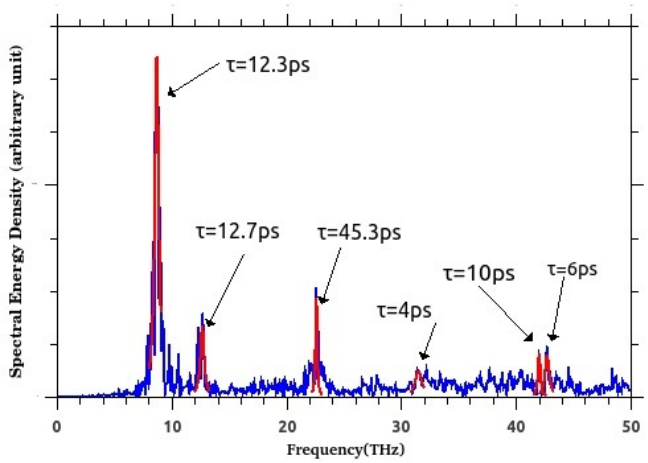
نتایج و بحث ها

در محاسبات ما از شبیه سازی دینامیک مولکولی آغازین و آنالیز چگالی انرژی طیفی استفاده شده است[۲٦]. تجزیه و تحلیل مدهای نرمال و روش چگالی انرژی طیفی ، مسیرهای دینامیک مولکولی را بر روی هر مدهای نرمال هر فونون ترسیم می کند ، که این امر باعث می شود تا بتوان زمان واهلش فونون ها را بدست آورد[۲۵،۲٦]. بنابراین ، تمام مرتبه های فرایندهای فونونی در شبیه سازی دینامیک مولکولی در نظر گرفته می شوند. بنابراین ، طول عمر پیش بینی شده با این روش اثر پراکندگی n -فونون را نیز در بر می گیرد. به این ترتیب ،

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

روش چگالی انرژی طیفی یک روش قدرتمند برای محاسبه طول عمر ارتعاشی است.[۲۷]

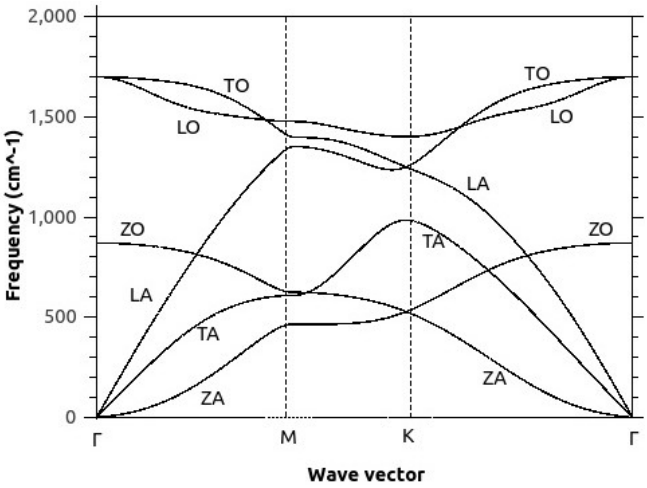
ابعاد این شبیه سازی که با استفاده از تئوری تابع چگالی (DFT) و کد SIESTA [۲۳] انجام گردیده به ترتیب برای طول و عرض و ارتفاع عبارتند از nm^3 ۲/۲۱٤ ×۲/۲۱٤ ×۱/٦. دمای شروع برای شبیه سازی در ابتدای کار T=۳۰۰K ، دمای بدن انسان استفاده شد.محاسبات در تقریب generalized gradient با پارامتر Perdew-Zunger انجام شد. مدت زمان شبیه سازی در حدود sp ۹۰ با طول گام زمانی sf ۰/۳ بود. دما با دماسنج Nose-Hoover ثابت نگه داشته شد. پس از این که سرعت اتمها با روش دینامیک مولکولی بدست آمد با استفاده از رابطه(۱) طیف چگالی انرژی برای هر بردار موج رسم گردید (مانند شکل۱) سپس زمان واهلش فونونهای مختلف را با استفاده از فیت کردن پیکها با تابع لورنتس و محاسبه پهنای هر پیک بدست آمد.



شکل ۱: نمودار چگالی انرژی طیفی گرافن برای بردار موج

$^{-1}$ (?) ۰/۹۸۳=k در مسیر Γ-K

شکل ۱ نشان می دهد که ارتعاش گرافن در دمای ۳۰۰k برای بردار موج $^{-1}$ (?) ۰/۹۸۳=k در مسیر Γ-K دارای فرکانس های ۸/۵۲ ، ۱۲/۳۵ ، ۲۲/٦۵ ، ۳۱/۳٤ ، ٤۲ ، ٤۲/۵ ، THz با طول عمر ، به ترتیب ۱۲/۳ ، ۱۲/۷ ، ٤۵/۳، ٤ ، ۱۰ ، ٦ ps است. ما همچنین بررسی کردیم که مکان قله ها با فرکانس فونونهای بدست آمده توسط محاسبات دینامیکی شبکه هارمونیک (شکل ۲) مطابقت دارد.

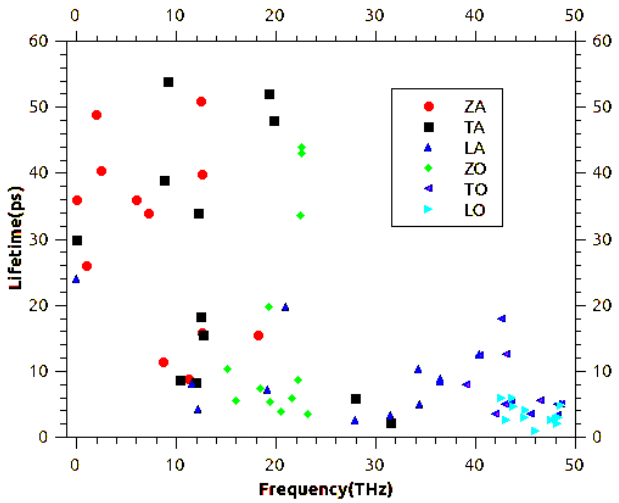


شکل۲: نمودار پراکندگی فونونی گرافن با استفاده از نظریه تابع چگالی و کد SIESTA

شکل۳ نشان می دهد که طول عمر فونونهای ZA محدوده ۱۰تا ۵۰ پیکوثانیه را شامل می شود طول عمرهای طولانی این مد به دلیل همبستگی نسبتا ضعیفی است که بین ارتعاشات خارج صفحه و داخل صفحه گرافن وجود دارد که همین امر باعث کاهش پراکندگی فونونهای این مد می گردد.به همین دلیل فونونهای مد ارتعاشی ZO نیز دارای طول عمرهای نسبتا زیاد می باشد. با افزایش فرکانس طول عمر فونونهای LA و TA کاهش می یابد که دلیل آن می تواند نقش موثرتر فرایند واگرد باشد. در نزدیکیهای مرکز ناحیه بریلوین و برای فرکانسهای کوچک طول عمر فونونهای LA و TA افزایش می یابد دلیل آن این است که این فونونها بردار موج کوچکی دارند و بدلیل قوانین بقای تکانه و انرژی به ندرت توسط سایر فونونها پراکنده می شوند.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بطورکلی مشاهده شد که طول عمر فونونهای گرافن لزوما بیشتر از سایرجامداتی که رسانش گرمایی کمتری دارند بیشتر نیست بلکه دلیل رسانش گرمایی بالای گرافن وزن اتمی کوچک کربن و نیز نیروی قوی پیوند کربن-کربن می باشد که باعث افزایش سرعت گروه فونونها می شود.



شکل۳: طول عمر فونونها بر حسب فرکانس برای همه مدهای ارتعاشی

مرجعها

[1] Wonbong Choi, Jo-won Lee. *Graphene Synthesis and Applications* (2012) Taylor & Francis Group

[2] Swapan K. Pati, Toshiaki Enoki, C. N. R. Rao. *Graphene and its Fascinating Attributes* (2011) World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd.

[3] A. K. Geim and K. S. Novoselov, *Nature Mater*. 6, 183 (2007)

[4] A. A. Balandin, S. Ghosh, W. Bao, I. Calizo, D. Teweldebrhan, F. Miao, and C. N. Lau, *Nano Lett.* 8, 902 (2008)

[5] J. H. Seol, I. Jo, A. L. Moor, Lindsay, Z. H. Aitken, M. T. Pettes, X. Li, Z. Yao, R. Huang, D. Broido, et al., *Science* 328, 213 (2010)

[6] A. A. Balandin, *Nature Mater*. 10, 569 (2011)

[7] G. Basile, C. Bernardin, and S. Olla, *Phys. Rev. Lett.* 96, 204303 (2006)

[8] W. Cai, A. L. Moore, Y. Zhu, X. Li, S. Chen, L. Shi, and R. S. Ruoff, *Nano Lett.* 10, 1645 (2010)

[9] Callaway, J., *Physical Review*, 113, p. 1046 (1959)

[10] Holland, M. G., *Physical Review*, 132, p. 2461 (1963).

[11] McGaughey, A. J. H., and Kaviany, M., *Physical Review B*, 69, p. 094303 (2004).

[12] Landry, E. S., Hussein, M. I., and McGaughey, A. J. H., *Physical Review* B, 77, p. 184302 (2008).

[13] Schelling, P. K., Phillpot, S. R., and Keblinski, P., *Physical Review B*, 65, p. 144306 (2002).

[14] Sellan, D. P., Landry, E. S. Turney, J. E., McGaughey, A. J. H., Amon, C. H., and McGaughey, A. J. H., *Physical Review B*, 81, p. 214305(2010).

[15] Ladd, A. J. C., Moran, B., and Hoover, W. G., *Physical Review B*, 34, 5058 (1986)

[16] Henry, A. S., and Chen, G., *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience*, 5, 1 (2008)

[17] Goicochea, J. V., Madrid, M., and Amon, C. H., *Journal of Heat Transfer*, 132, 012401 (2010)

[18] Maradudin, A. A., and Fein, A. E., *Physical Review*, 128, 2589 (1962)

[19] Wallace, D. C., *Thermodynamics of Crystals*. Cambridge, (1972)

[20] Dove, M. T., *Introduction to Lattice Dynamics*. Cambridge (1993)

[21] Turney, J. E., Landry, E. S., McGaughey, A. J. H., and Amon, C. H., *Physical Review B*, 79, 064301 (2009)

[22] Marayuma, S., Nanoscale and *Microscale Thermophysical Engineering*, 7, 41 (2003)

[23] Shiomi, J., and Maruyama, S., *Phys. Rev. B*, 73 205420 (2006)

[24] de Koler, N., *Physical Review Letters*, 103, 125902 (209)

[25] Thomas, J. A., Turney, J. E., Iutzi, R. M., Amon, C. H., and McGaughey, *Physical Review B*, 81, 081411 (2010)

[26] Mukherjee, P., Kass, I., Arkin, I., and Zanni, M., T., *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, 103, 8571 (2006)

[27] Bo Qiu and Xiulin Ruan , *Condensed Matter* (2011)

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بررسی تاثیر روش ساخت بر ویژگی‌های ساختاری، نوری و مغناطیسی نانوذرات $BiFeO_3$ و نانوکامپوزیت $rGO/BiFeO_3$

اقبالی، الهام؛ علیزاده شرکانلو، نسترن؛ بهادر، علیرضا؛ مالکی، حامد

دانشکده فیزیک، دانشگاه شهید باهنر کرمان، کرمان، ایران

چکیده

در این پژوهش تاثیر روش ساخت بر ویژگی های ساختاری ، نوری و مغناطیسی $BiFeO_3$ و نانوکامپوزیت $rGO/BiFeO_3$ تهیه شده به دو روش سل- ژل و همروسوبی مورد مطالعه قرار گرفته است. ویژگی‌های ساختاری با استفاده از آنالیزهای پراش پرتو ایکس(XRD) و میکروسکوپ الکترونی روبشی(SEM) مورد مطالعه قرار گرفته است. دیده می‌شود که حضور اکسید گرافن کاهش یافته باعث کاهش تبلور و افزایش سایز ذرات در هر دو نمونه می‌شود . مشخصه‌یابی نوری با استفاده از طیف سنجی بازتابی انتشاری (DRS) انجام شد و با محاسبه گاف نواری از روی نمودار جذب مرئی- فرابنفش، مشاهده شد که با حضور اکسید گرافن کاهش یافته گاف نواری در نمونه های ساخته شده در هر دو روش ساخت کاهش می‌یابد. ویژگی های مغناطیسی به وسیله مغناطیس سنج نمونه ارتعاشی (VSM)مورد بررسی قرار گرفته است و مشاهده شد نانوکامپوزیت $rGO/BiFeO_3$ در دمای اتاق خاصیت فرومغناطیس ضعیف از خود نشان می‌دهد.

The study of the effect of synthesis method on the structural, optical and magnetic properties of $BiFeO_3$ nanoparticles and $rGO/BiFeO_3$ nanocomposites

Eghbali, Elham; Alizadeh sharkanloo, Nastaran; Bahador, Alireza; Maleki, Hamed

faculty of Physics, Shahid Bahonar University of Kerman.

Abstract

In this study, the effect of synthesis method on the structural, optical, and magnetic properties of pure $BiFeO_3$ and $rGO/BiFeO_3$ nanocomposite prepared by sol-gel and coprecipitation methods has been studied. Structural properties have been studied by using X-ray diffraction (XRD) and Scanning electron microscope (SEM) analyses. As a result, the addition of rGO resulted in decreasing the crystallization and increasing the size of nanoparticles in both methods. The optical properties were investigated using diffuse reflectance spectroscopy (DRS), and it was observed that the band gap decreases with adding rGO, in both methods. Magnetic properties were measured by a vibrating sample magnetometer (VSM). According to VSM analysis, $rGO/BiFeO_3$ nanocomposite exhibits weak ferromagnetic properties at room temperature.

PACS NO. 60.61.75.81

مقدمه

در سال های اخیر بررسی های متعددی بر روی مواد مولتی فرویک[۱]و کاربرد آنها انجام شده است. مولتی فرویک ها موادی هستند که همزمان دارای دو یا چند خاصیت فرویک مانند فرومغناطیس، فروالکتریک و فروالاسیتیسه می‌باشند[۱]. این مواد با اعمال میدان مغناطیسی، قطبیده و با اعمال میدان الکتریکی، مغناطیده می‌شوند و در ذخیره اطلاعات، سنسورها و تجهیزات اسپین ترونیک به کار می‌روند [۲]. فریت بیسموت با ساختار رمبوهدرال[۲]با گروه تقارنی R3c یکی از شناخته شده‌ترین مواد

[۱] Multi ferroic

[۲] Rhombohedral

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مولتی فرویک است که به طور همزمان در پایین دمای کوری (۱۱۰۰K) دارای خاصیت فروالکتریک و در پایین دمای نیل (۶۳۰K) دارای خاصیت آنتی فرومغناطیس می‌باشد. به دلیل داشتن گاف نواری کوچک در حدود ۲/۱۸ الکترون ولت به عنوان فوتوکاتالیست و ادوات سلول خورشیدی فوتوولتائیک نیز مورد استفاده قرار گرفته است[۳]. از طرف دیگر، گرافن به عنوان یک ماده کربنی دارای خواص منحصر بفرد از نظر الکتریکی ، حرارتی ، مکانیکی و همچنین پایداری شیمیایی بالایی است. از آنجا که تابع کار اکسید گرافن در بین گاف نواری نانو ذرات فریت بیسموت قرار گرفته است که باعث جدایی حامل‌های بار و جلوگیری از باز ترکیب آنها می‌شود، این ویژگی سبب بهبود خواص و عملکرد در کاربردهایی نظیر فوتوکاتالیست می‌گردد. در این پژوهش نانوکامپوزیت $rGO/BiFeO_3$ به دو روش مقایسه ای سل-ژل و همروسوبی سنتز شد و تاثیر روش سنتز بر خصوصیات ساختاری، نوری، مغناطیسی و مقایسه با نمونه خالص $BiFeO_3$ مورد مطالعه قرار گرفته است.

مواد و روش تحقیق

ساخت اکسید گرافن

در این پژوهش اکسید گرافن به روش هامر اصلاح یافته سنتز شد[٤]. در این فرآیند، ٦٧/٥میلی‌لیتر اسید سولفوریک، ۲۲/۵میلی‌لیتر اسید نیتریک، ۱۰ میلی‌لیتر اسید فسفریک و ۱ گرم گرافیت در ظرف قرار گرفته در حمام یخ با یکدیگر مخلوط شدند تا مخلوطی همگن به دست آید. سپس ٦ گرم پرمنگنات پتاسیم به مدت ۲ ساعت به آرامی به مخلوط اضافه شد. در این مرحله، رنگ محلول به رنگ سبز تیره تغییر یافت. سپس محلول به مدت ۲ ساعت در دمای ٤٥ درجه سانتی‌گراد در حمام روغن قرار گرفت.۱۰۰ میلی‌لیتر آب دوبار یونیزه به محلول اضافه و به مدت ۱ ساعت در دمای ۸۵ درجه سانتی‌گراد قرار داده شد. سپس آب اکسیژنه ٪۳۰ جهت توقف عمل اکسیداسیون به محلول اضافه شد. در این مرحله، رنگ محلول به رنگ زرد تبدیل شد که نشان دهنده تشکیل اکسید گرافن است. در نهایت محلول بدست آمده چندین مرتبه با آب دوبار یونیزه و اتانول شستشو و سانتریفیوژ شد تا مواد اضافه از محلول جدا شود و پی اچ محلول خنثی گردد و در دمای ٦٠ درجه سانتی‌گراد به مدت ٢٤ ساعت خشک شد.

ساخت نمونه‌ها به روش سل-ژل

در این روش مقادیر استوکیومتری نیترات آهن ($Fe(NO_3)_3.9H_2O$) در ۱۰۰ سی‌سی اتیلن گلیکول و نیترات بیسموت ($Bi(NO_3)_3.5H_2O$) در ۱۰۰ سی‌سی آب حل شدند، دو محلول با یکدیگر ترکیب شدند و با هم‌زدن مداوم به مدت ۱ ساعت در دمای اتاق محلولی شفاف به دست آمد. سپس برای تولید نانو کامپوزیت rGO/BiFeO3، اکسید گرافن به مدت ۱۰ دقیقه اولتراسونیک شده و به محلول اضافه شد سپس به مدت ۳ ساعت در دمای ۷۰ درجه سانتی‌گراد قرار گرفت تا ژل قهوه‌ای شفاف به دست آمد. در آخر دمای محلول روی ۱۰۵ درجه سانتی‌گراد تنظیم شد تا جامد پودری قهوه ای رنگی به دست آمد. در نهایت پودر بدست آمده در ٦٠٠ درجه سانتی‌گراد به مدت ٤ ساعت کلسینه شد.

ساخت نمونه‌ها به روش همروسوبی

در این روش مقادیر استوکیومتری نیترات آهن ($Fe(NO_3)_3.9H_2O$)، نیترات بیسموت ($Bi(NO_3)_3.9H_2O$) هر یک در ۱۰۰ سی‌سی آب حل شدند، دو محلول با یکدیگر ترکیب شد و با هم‌زدن مداوم به مدت ۱ ساعت در دمای اتاق محلولی شفاف به دست آمد. سپس برای تولید نانوکامپوزیت $rGO/BiFeO_3$، اکسید گرافن به مدت ۱۰ دقیقه اولتراسونیک شده و به محلول اضافه شد و به مدت ۱ ساعت هم‌زده شد. سپس، محلول آمونیاک ۲ مولار به آرامی و به صورت قطره‌قطره به محلول اضافه شد تا پی اچ محلول به ۱۰ برسد. پس از اضافه شدن آمونیاک در محلول رسوب قهوه ای رنگی تشکیل شد. رسوب جمع آوری شده چندین مرتبه با آب دوبار یونیزه و اتانول شست و شو داده شد تا پی اچ محلول به ۷ رسید و در دمای ۱۵۰ درجه سانتی‌گراد به مدت ۲ ساعت خشک شد. پودر خشک شده در دمای ٦٠٠ درجه سانتی‌گراد به مدت ٤ ساعت کلسینه شد.(به علت حرارت موجود در حین فرآیند ساخت، اکسید گرافن به اکسید گرافن کاهش یافته تبدیل می شود.)

نتایج و بحث

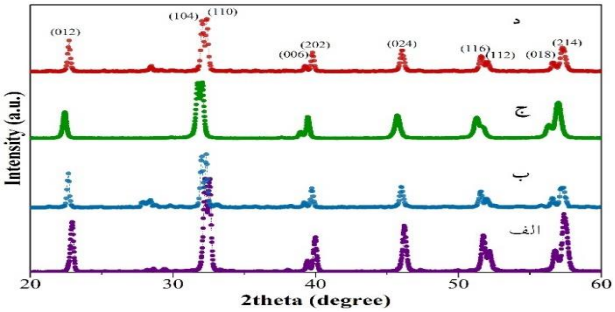
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

آنالیز ساختاری

شکل۱ الگوهای پراش اشعه ایکس پودر های کلسینه شده $BiFeO_3$خالص و نانوکامپوزیت $rGO/BiFeO_3$ تهیه شده از دو روش همروسوبی و سل ژل را نشان می دهد. الگوی پراش اشعه ایکس ساختار رمبوهدرال با گروه فضایی R3c را به عنوان فاز خالص فریت بیسموت خالص را در تمام نمونه ها تایید می کند و همچنین با توجه به شکل ۱ شدت پراش نانوکامپوزیت $rGO/BiFeO_3$ در هر دو نمونه نسبت به فاز خالص کاهش یافته است که می‌تواند به دلیل وجود اکسید گرافن کاهش یافته در ساختار باشد که باعث کاهش تبلور نانوکامپوزیت خواهد شد. جابجایی های قله های پراش به سمت زوایای بالاتر در روش همرسوبی و به سمت زوایای پایینتر در روش سل-ژل به ترتیب به تنشهای انقباضی و انبساطی در نتیجه برهمکنش نانوذرات با اکسید گرافن بر میگردد که به ماهیت روشها و دمای موجود در آنها مرتبط است. این تنشها سبب تغییر فاصله بین صفحات بلوری شده که طبق رابطه براگ سبب جابجایی قله ها می‌شود. اندازه ذرات نانوکامپوزیت $rGO/BiFeO_3$ و نانوذرات $BiFeO_3$ با استفاده از فرمول شرر (رابطه۱) قابل محاسبه‌اند:

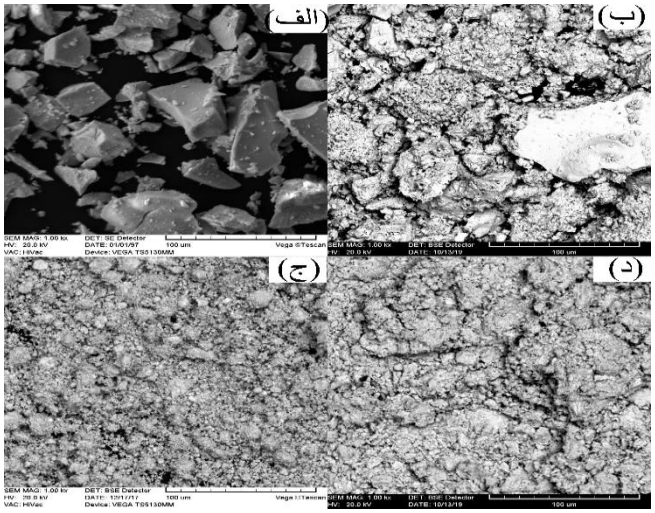
$$D = \frac{0/89\lambda}{\beta\, Cos\theta} \qquad (۱)$$

طبق این محاسبه اندازه متوسط ذرات در $BiFeO_3$ خالص و در نانوکامپوزیت $rGO/BiFeO_3$ در روش سل-ژل به ترتیب برابر با ۷۱ نانومتر و۹۵ نانومتر و در روش همروسوبی به ترتیب برابر با ۹٤ نانومتر و ۱۱۸ نانومتر به دست آمده‌اند.



شکل ۱ پراش اشعه ایکس از(الف) $BiFeO_3$ به روش سل ژل، (ب) نانوکامپوزیت $rGO/BiFeO_3$ به روش سل- ژل، (ج) $BiFeO_3$ به روش همروسوبی، (د) نانوکامپوزیت $rGO/BiFeO_3$ به روش همروسوبی

در شکل۲ تصاویر میکروسکوپ الکترونی روبشی از مورفولوژی $BiFeO_3$ و نانوکامپوزیت $rGO/BiFeO_3$ تهیه شده با روش سل-ژل و روش همروسوبی نشان داده شده است. همانطور که دیده می‌شود، در $BiFeO_3$ خالص همه نمونه ها از ذرات کوچکی تشکیل شده‌اند که با اضافه کردن اکسید گرافن کاهش یافته، در نانوکامپوزیت $rGO/BiFeO_3$ در روش سل-ژل ، ذرات به صورت تکه های آگلومره شده هستند که بسیاری از ذرات کوچک بر روی سطح آنها جمع شده‌اند و وجود منافذ بین دانه‌ای نیز در آنها مشاهده می‌شود. در نانو کامپوزیت $rGO/BiFeO_3$ تولید شده در روش همروسوبی ذرات کروی کوچک به هم چسبیده‌اند که صفحات گرافن می‌تواند باعث این چسبندگی باشد. این تغییر مورفولوژیکی به فرآیند سنتز وابسته است و نشان می دهد که روش آماده سازی بر ساختار محصولات تهیه شده موثر است.



شکل۲ تصویر میکروسکوپ الکترونی روبشی گرفته شده از (الف) $BiFeO_3$ خالص تهیه شده به روش سل-ژل، (ب) نانوکامپوزیت $rGO/BiFeO_3$ سنتز شده به روش سل- ژل، (ج) $BiFeO_3$ تهیه شده به روش همروسوبی، (د)نانوکامپوزیت $rGO/BiFeO_3$ سنتز شده به روش همروسوبی

آنالیز نوری و گاف نواری

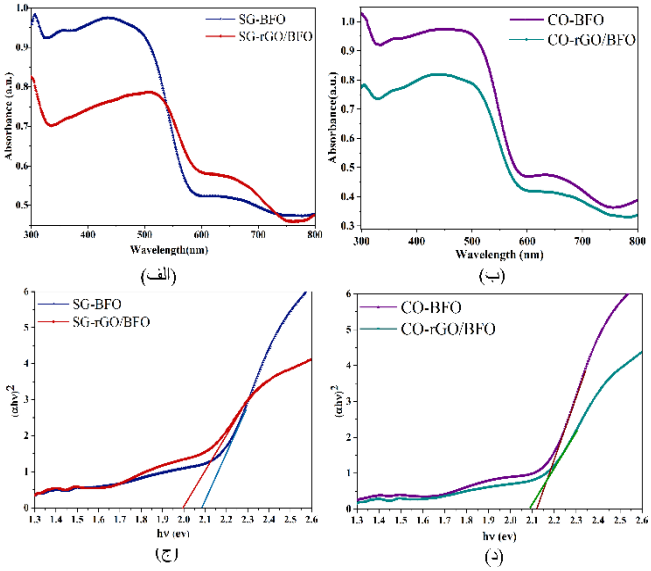
شکل ۳ طیف سنجی ماورإبنفش-نورمرئی $BiFeO_3$ و نانوکامپوزیت $rGO/BiFeO_3$ ساخته شده به دو روش سل-ژل و همروسوبی را نشان می دهد. همانطور که دیده می‌شود برای تمام نمونه‌ها جذب در ناحیه مرئی اتفاق می‌افتد و می‌توان از این ویژگی در فعالیت فوتوکاتالیستی و سلول‌های خورشیدی استفاده کرد. افزودن اکسید گرافن کاهش یافته باعث جذب بهتر نور و

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

تغییر اندازه گاف نواری شده است. با استفاده از معادله تاک (رابطه۲) میتوان اندازه گاف نواری را اندازه گیری کرد.

$$(\alpha h\nu)^2=k(h\nu-E_g) \qquad (۲)$$

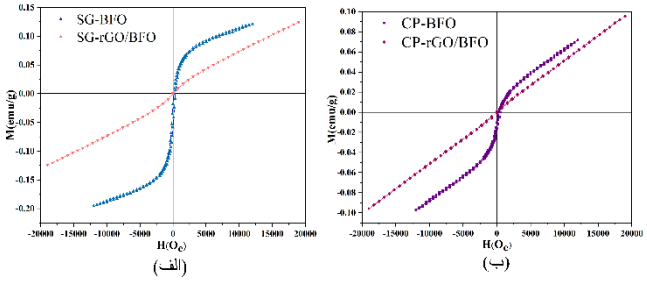
با استفاده از نتایج بدست آمده می‌توان دریافت که جدا از روش ساخت، پهنای گاف نواری در نانوکامپوزیت $rGO/BiFeO_3$ کاهش یافته است. برای $BiFeO_3$ خالص در روش سل-ژل (همروسوبی) اندازه گاف نواری ۲/۰۷ (۲/۱۲) الکترون ولت و برای نانوکامپوزیت $rGO/BiFeO_3$ در روش سل ژل (همروسوبی) برابر با۱/۹۹ (۲/۰۸) الکترون ولت می باشد.



شکل ۳ طیف ماورا بنفش-مرئی انتشار بازتابی گرفته شده از $BiFeO_3$ و کامپوزیت $rGO/BiFeO_3$ به روش (الف) سل- ژل، (ب) همروسوبی، نمودار تاک نانوکامپوزیتهای سنتز شده به روش ج) سل-ژل و د) همرسوبی

آنالیز مغناطیسی

شکل ٤ حلقه های پسماند مغناطیسی $BiFeO_3$ خالص و نانوکامپوزیت $rGO/BiFeO_3$ ساخته شده به روش سل-ژل و روش همروسوبی را نشان می‌دهد. با توجه به مقالات موجود و نمونه‌های سنتز شده فریت بیسموت خالص در هر دو روش خاصیت فرومغناطیس ضعیفی را از خود نشان میدهد[۵و۶]. افزودن اکسید گرافن کاهش یافته، در نانوکامپوزیت $rGO/BiFeO_3$، باعث کاهش مقدار مغناطش اشباع در هر دو روش شده است. دلیل این موضوع را می‌توان به تغییر اندازه ذرات در دو روش نسبت داد.



شکل ٤ منحنی پسماند $BiFeO_3$ خالص و نانوکامپوزیت $rGO/BiFeO_3$ تهیه شده به دو روش (الف) سل-ژل، (ب) همروسوبی

نتیجه گیری

در این پژوهش، تأثیر روش سنتز بر خصوصیات ساختاری، مورفولوژی، نوری و مغناطیسی نانوکامپوزیت $rGO/BiFeO_3$ و مقایسه با نمونه خالص بررسی شده است. $BiFeO_3$ خالص، و نانوکامپوزیت $rGO/BiFeO_3$ با روش های سل-ژل و همروسوبی سنتز شده‌اند. آنالیز اشعه ایکس نشان می‌دهد که ساختار کریستالی $BiFeO_3$ خالص و نانوکامپوزیت $rGO/BiFeO_3$ به درستی ساخته شده‌اند. در روش همروسوبی اندازه ذرات نسبت به روش سل- ژل بزرگتر بوده و رشد بیشتری را شاهد هستیم که تاثیر روش ساخت بر رشد نانوذرات را نشان می‌دهد. تجزیه و تحلیل میکروسکوپ الکترونی روبشی نشان می دهد که تمام نمونه ها از ذرات کوچک به هم چسبیده تشکیل شده است. طیف سنجی انتشاری بازتابی نشان می‌دهد که اندازه گاف نواری با اضافه شدن اکسید گرافن کاهش یافته در هر دو روش سنتز کاهش می‌یابد. حلقه‌های پسماند از تمام نمونه‌های آماده شده نشان می‌دهد که نانوکامپوزیت ساخته شده از دو روش دارای خاصیت فرومغناطیس ضعیف می‌باشد.

مرجع ها

[۱] W. Azeem, S. Riaz, A. Bukhtiar, S. Sajjad Hussain, Y. Xu, and S. Naseem, ," *J. Magn. Magn. Mater.*, vol. 475, no. November 2018, pp. 60–69, 2019,

[۲] K. S. Kumar, S. Ramu, A. Sudharani, M. Ramanadha, G. Murali, and R. P. Vijayalakshmi, *Phys. E Low-Dimensional Syst. Nanostructures*, vol. 115, no. April 2019, p. 113689, 2020,

[۳] P. Hou, B. Liu, Z. Guo, P. Zhou, B. Wang, and L. Zhao, *J. Alloys Compd.*, vol. 775, pp. 59–62, 2019,

[۴] M. F. Zainuddin, N. H. Nik Raikhan, N. H. Othman, and W. F. H. Abdullah, *IOP Conf. Ser. Mater. Sci. Eng.*, vol. 358, no. 1, pp. 0–6, 2018

[۵] H. Maleki, M. Haselpour, and R. Fathi, *J. Mater. Sci. Mater. Electron.*, vol. 29, no. 5, pp. 4320–4326, 2018

[۶] S. Falahatnezhad and H. Maleki, *J. Mater. Sci. Mater. Electron.*, vol. 29, no. 20, pp. 17360–17366, 2018

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بررسی خواص فیزیکی نانوفیبرهای $MgCo_2O_4$ تهیه شده به روش سل-ژل

مهین زاد، ماجده[۱] ؛ مظلوم، جمال[۱] ؛ اسمعیلی قدسی، فرهاد[۱]

[۱]دانشکده فیزیک دانشگاه گیلان، خیابان نامجو، رشت

چکیده

در این پژوهش، نانوفیبرهای کبالتیت منیزیم ($MgCo_2O_4$) با استفاده از تکنیک الکتروریسی سل-ژل تهیه گردید. اثر دمای کلسینه شدن بر ویژگی‌های ساختاری، شیمیایی، مورفولوژی، عنصری و اپتیکی مورد مطالعه قرار گرفت. الگوی پراش پرتو ایکس ساختار اسپینلی نانوفیبرهای $MgCo_2O_4$ را نشان می‌دهد. پارامترهای ساختاری نانوفیبرهای تهیه شده به روش ویلیامسون-هال مورد ارزیابی قرار گرفت. نتایج XRD نشان می‌دهد که شدت قله‌های پراش و اندازه بلورک نمونه‌ها با افزایش دمای کلسینه، افزایش می‌یابد. تصاویر FESEM بیانگر آن است که کلسینه کردن نمونه‌ها علاوه بر ایجاد تغییرات روی مورفولوژی، موجب کاهش قطر نانوفیبرها نیز می‌شود. طیف‌های EDS حضور عناصر Mg، Co و O را تایید می‌کنند. مطالعات اپتیکی کاهش مقدار گاف نواری از ۳/۸۸ به eV ۳/۸۵ را با افزایش دمای کلسینه نشان می‌دهد.

واژه های کلیدی: *نانوفیبرهای کبالتیت منیزیم، الکتروریسی سل-ژل، ویژگی های ساختاری، گاف نواری.*

Investigation of physical properties of $MgCo_2O_4$ nanofibers prepared by sol-gel method

Mahinzad, majedeh[1]; Mazloom, Jamal[1]; Esmaeili ghodsi, Farhad[1]

[1] Department of Physics, University of Guilan, Namjoo Avenue, Rasht

Abstract

In this research, Magnesium cobaltite ($MgCo_2O_4$) nanofibers were prepared by the sol-gel electrospinning technique. The influence of calcination temperature was studied on the structural, chemical, morphological, elemental, and optical properties. The XRD pattern reveals the spinel structure of the $MgCo_2O_4$ nanofibers. The structural parameters of prepared nanofibers were evaluated by the Williamson-Hall method. The results of XRD show that the intensity of the diffraction peaks and crystallite size samples are enhanced with increasing calcination temperature. The FESEM images indicate that calcination of samples, in addition to the change in the morphology, causes a reduction in the diameter of nanofibers. Energy dispersive spectra confirmed the presence of Mg, Co, and O elements in the samples. Optical studies show the decrease of the bandgap from 3.88 to 3.85 eV with increasing calcination temperature.

Keywords: *Magnesium cobaltite nanofibers, Sol-gel electrospinning, Structural properties, Band gap.*

PACS NO. 61-78-81

مقدمه

نانوساختارهای کبالتیت (MCo_2O_4 که M کاتیون فلزی است) کاربردهای بسیاری در زمینه‌های مختلف از جمله فوتوکاتالیست‌ها، لایه‌های الکتروکرومیک و ابرخازن‌ها دارند. نانوساختارهای $MgCo_2O_4$ به‌وسیله‌ی روش‌های مختلفی همچون روش احتراقی، هیدروترمال و سولوترمال تهیه شده‌اند [۱-۳]. در کار حاضر،

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

نانوفیبرهای $MgCo_2O_4$ به روش سل-ژل و با تکنیک الکتروریسندگی با توجه به مقرون به صرفه بودن آن تهیه شده است. هدف در این پژوهش، تحقیق در مورد تاثیر افزایش دمای کلسینه بر روی ویژگی‌های ساختاری، مورفولوژی و اپتیکی نانوفیبرهای $MgCo_2O_4$ است.

کار تجربی و مشخصه‌یابی

در تهیه سل مناسب برای تولید نانوفیبرهای $MgCo_2O_4$ از نیترات کبالت، نیترات منیزیم، پلی وینیل پیرولیدون، دی متیل فرمامید و اتانول به‌عنوان پیش‌ماده، پلیمر و حلال استفاده شد. ابتدا نیترات کبالت و منیزیم با نسبت‌های مولی ۲ به ۱ در اتانول حل شد و سپس دی متیل فرمامید به آن اضافه شد در ادامه ۱ گرم پلی وینیل پیرولیدون به صورت تدریجی به محلول اضافه گردید و سل حاصل برای الکتروریسی آماده شد. اختلاف پتانسیل اعمال شده توسط منبع تغذیه ۱۷ کیلوولت، فاصله سوزن تا صفحه جمع‌کننده ۱۰ سانتی‌متر و نرخ شارش سل از نوک سوزن $0/4\ mLh^{-1}$ تنظیم شد. سپس نانوفیبرهای تولیدشده به مدت ۱۲ ساعت در دمای ۱۰۰ درجه سلسیوس جهت خشک‌سازی قرار داده شدند، در پایان به مدت ۲ ساعت در دمای ۵۰۰ و ۶۰۰ درجه سلسیوس کلسینه شدند.

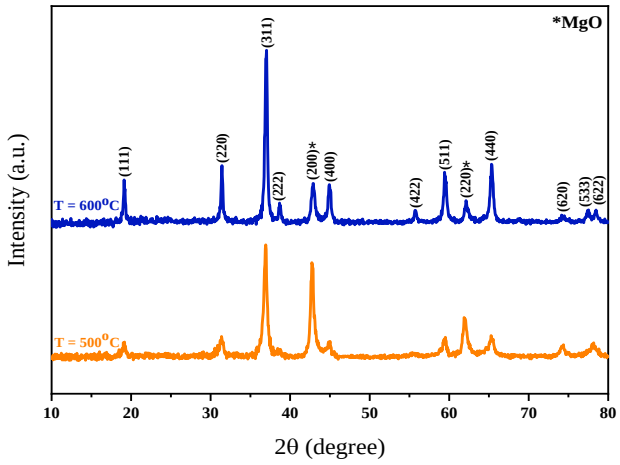
خواص ساختاری نمونه‌ها توسط پراش پرتو ایکس و با استفاده از دستگاه XRD مدل Panalytical X' pert Pro با تابش Cu-Kα با طول موج ۰/۱۵۴۰۶ نانومتر مورد مطالعه قرار گرفت. مورفولوژی نانوساختارها از آنالیز FESEM و EDS با استفاده از دستگاه MIRA3TESCAN-XMU بررسی شد. پیوندهای شیمیایی نمونه‌ها با آنالیز FTIR با استفاده از طیف‌سنج Alpha Bruker در محدوده عددموج ۴۰۰ تا $4000\ cm^{-1}$ بررسی شد. ویژگی‌های نوری با آنالیز DRS مدل Scinco 4100 مورد مطالعه قرار گرفت.

نتایج و بحث

الگوی پراش پرتو ایکس نانوفیبرهای $MgCo_2O_4$ کلسینه شده در دمای ۵۰۰ و ۶۰۰°C در شکل ۱ نشان داده شده است. مطابقت خوب قله‌های مشاهده شده با الگوی پراش استاندارد (81-0667 JCPDS NO.) در نمونه‌های مختلف، نشان دهنده شکل‌گیری فازهای $MgCo_2O_4$ با ساختار اسپینلی می‌باشد [۳]. فازهای MgO در حدود 2θ برابر با $42/82^o$ و $62/17^o$ متناظر با صفحات (۲۰۰) و (۲۲۰) نیز شکل گرفته است. مشاهده می‌شود که افزایش دمای کلسینه از ۵۰۰ به ۶۰۰°C موجب تیزتر و باریک شدن قله‌ها می‌شود که نشان‌دهنده بهبود بیشتر در بلورینگی ساختار است. برای تعیین اندازه متوسط بلورک و کرنش شبکه، رابطه ویلیامسون-هال به‌کار گرفته شد [۴]:

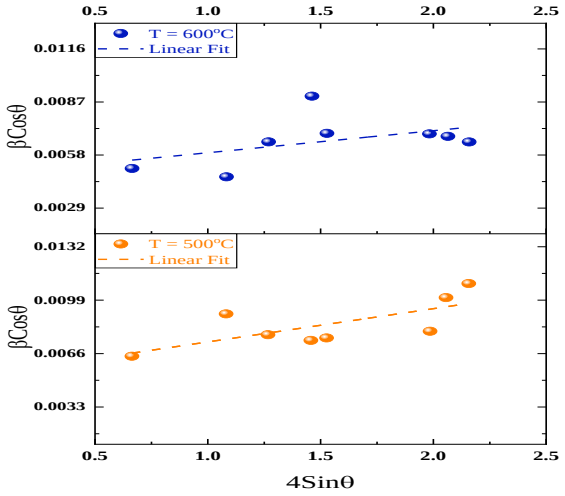
$$\beta \mathrm{Cos}\,\theta = (\frac{K\lambda}{D}) + 4\varepsilon \mathrm{Sin}\,\theta \qquad (۱)$$

که در آن β پهنا در نصف بیشینه هر یک از قله‌ها، K ثابتی برابر ۰/۹، λ طول موج پرتو فرودی و برابر ۱/۵۴۰۶ آنگستروم، D اندازه متوسط بلورک، ε کرنش و θ زاویه براگ است. با استفاده از رابطه ۱، نمودار $\beta\cos\theta$ بر حسب $4\sin\theta$ رسم شده است. با استفاده از شیب و عرض از مبدا بهترین خط مستقیم برازش شده با نقاط نمودار، به ترتیب اندازه بلورک‌ها و کرنش موجود در شبکه به دست آمد. با افزایش دمای کلسینه، اندازه متوسط بلورک‌ها از ۲۶/۳ به ۲۹/۳ نانومتر افزایش می یابد. همچنین با افزایش اندازه بلورک، مقدار کرنش از ۰/۰۰۲۰۶ به ۰/۰۰۱۲۰ کاهش می‌یابد. مقدار مثبت کرنش دلالت بر انبساط شبکه با افزایش دمای کلسینه دارد.



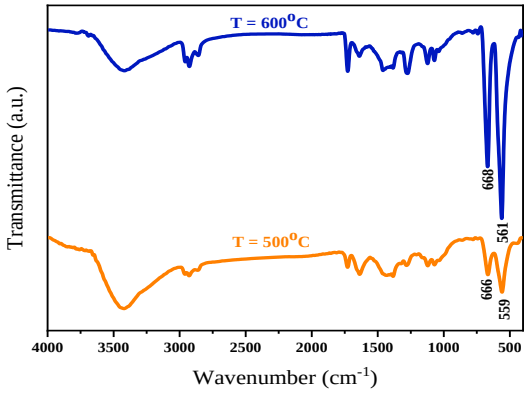
شکل ۱ : الگوی پراش پرتو ایکس نانوفیبرهای $MgCo_2O_4$.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



شکل۲ : نمودار ویلیامسون–هال نانوفیبرهای $MgCo_2O_4$.

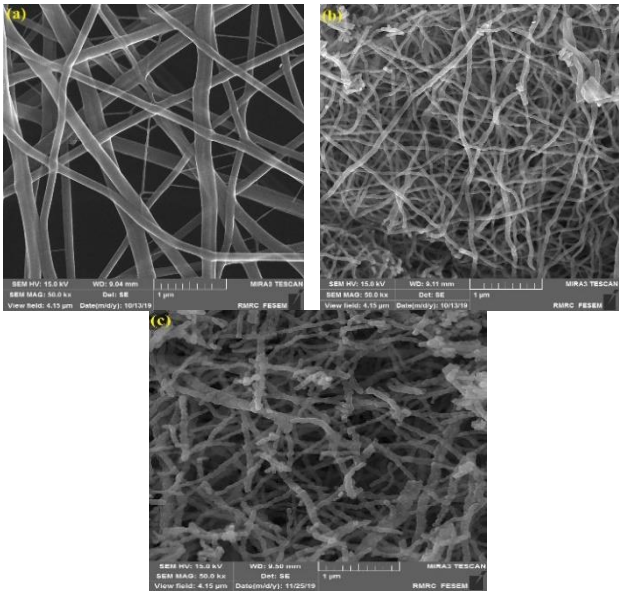
به منظور مطالعه پیوندهای شیمیایی و گروه‌های عاملی نانوفیبرهای $MgCo_2O_4$ کلسینه شده در دمای ۵۰۰ و ۶۰۰°C از طیف‌سنجی FTIR استفاده شد.



شکل۳ : طیف FTIR نانوفیبرهای $MgCo_2O_4$.

مطابق شکل۳ برای نمونه کلسینه شده در دمای ۵۰۰°C طیف FTIR دارای دو قله جذب قوی در ۵۵۹ و ۶۶۶ cm^{-1} است که این نوارهای جذب در نمونه کلسینه شده در دمای ۶۰۰°C به ۵۶۱ و ۶۶۸ cm^{-1} منتقل شده‌اند. همان‌طور که مشاهده می‌شود شدت این قله‌ها با افزایش دما به‌طور قابل ملاحظه‌ای افزایش می‌یابد. این قله‌های جذب مشخصه‌ی شبکه اسپینل $MgCo_2O_4$ است. قله‌های واقع در ۵۵۹ و ۵۶۱ cm^{-1} به ارتعاشات کششی پیوند بین اکسیژن و یون فلزی در جایگاه هشت وجهی و قله‌های موجود در ۶۶۶ و ۶۶۸ cm^{-1} به پیوند میان اکسیژن و یون‌های فلزی در جایگاه چهاروجهی نسبت داده می‌شود. قله‌های ظاهرشده در حدود ۱۶۰۰ و ۳۴۰۰ cm^{-1} به‌ترتیب به پیوند خمشی H-O-H و پیوند کششی O-H مولکول‌های آب به دلیل جذب رطوبت توسط نمونه نسبت داده می‌شود، قله‌های مربوط به حالت‌های کششی پیوندهای C=O و C-O در حدود ۱۷۲۸ و ۱۲۸۲ cm^{-1} ظاهرشده‌اند که ناشی از جذب CO_2 هوا روی سطح نانوفیبرها است.

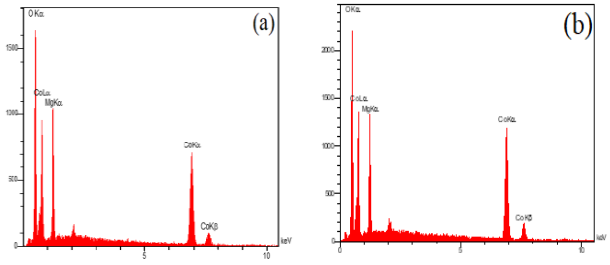
برای بررسی مورفولوژی نانوفیبرهای $MgCo_2O_4$ از میکروسکوپ الکترونی روبشی گسیل میدانی استفاده شد. تصاویر FESEM نانوفیبرهای $MgCo_2O_4$ در شکل۴ نمایش داده شده است. همان طور که مشاهده می‌شود قطر نانوفیبرها پس از کلسینه کاهش می‌یابد. این کاهش قطر را می‌توان به تجزیه و احتراق PVP در دماهای بالا نسبت داد. سطح صاف نمونه‌ها پس از کلسینه به حالت دانه‌ای تبدیل می‌شود. نمونه کلسینه شده در دمای ۵۰۰°C به‌صورت منظم‌تر و یکنواخت شکل گرفته است.



شکل۴ : تصاویر FESEM نانوفیبرهای کبالتیت منیزیم (a) قبل کلسینه و کلسینه شده در دمای (b) ۵۰۰°C و (c) ۶۰۰°C .

شکل۵ طیف EDS مربوط به نانوفیبرهای $MgCo_2O_4$ را نشان می‌دهد که حضور عناصر Mg، CO و O را در هر دو نمونه تایید می‌کند.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



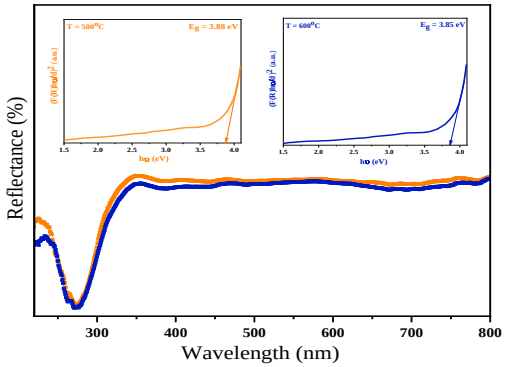
شکل۵ : طیف EDS نانوفیبرهای کلسینه شده در ۵۰۰°C (a) و ۶۰۰°C (b).

برای بررسی ویژگی‌های نوری نانوفیبرهای $MgCo_2O_4$ از طیف‌سنجی بازتاب پخشی استفاده شد. طیف بازتاب نمونه‌های تهیه شده در شکل۶ نشان داده شده است. انرژی گاف نواری (E_g) نمونه‌ها در گذارهای مستقیم مجاز با رسم و برون‌یابی قسمت خطی منحنی $(F(R)h\upsilon/d)^2$ بر حسب انرژی فوتون و با استفاده از رابطه تاوک تعیین می‌شود [۵]:

$$(F(R)h\upsilon/d)=A(h\upsilon-E_g)^n \qquad (۲)$$

در این رابطه $h\upsilon$ انرژی فوتون، A مقدار ثابت، d ضخامت قرص و n بسته به ماهیت انتقال الکترونیکی نمونه، گذارهای مستقیم مجاز، مقدار ۱/۲ می‌گیرد. F(R) تابع کوبلکا مانک می‌باشد که با استفاده از طیف بازتاب نمونه‌ها (R) و رابطه۳ به‌دست‌آمد [۵]:

$$F(R)=\frac{(1-R)^2}{2R} \qquad (۳)$$



شکل۶ : طیف بازتاب نانوفیبرهای کلسینه شده در دماهای مختلف (شکل الحاقی : نمودار محاسبه انرژی گاف نواری).

گاف نواری نانوفیبرهای $MgCo_2O_4$ کلسینه شده در دمای ۵۰۰ و ۶۰۰°C به‌ترتیب ۳/۸۸ و ۳/۸۵ eV محاسبه شد. همان‌طور که مشاهده می‌شود با افزایش دمای کلسینه، انرژی گاف نواری نمونه‌ها کاهش می‌یابد که می‌تواند به دلیل بزرگ‌تر شدن اندازه بلورک‌ها و به‌وجود آمدن تهی‌جاهای اکسیژنی باشد.

نتیجه گیری

در این پژوهش نانوفیبرهای $MgCo_2O_4$ با روش سل-ژل و تکنیک الکتروریسی تهیه شدند و اثر دمای کلسینه شدن بر ویژگی‌های فیزیکی نانوساختارهای تهیه‌شده مورد بررسی قرار گرفت. الگوی پراش پرتو ایکس نمونه‌ها نشان داد که نانوفیبرهای تهیه‌شده دارای ساختار اسپینلی هستند. با محاسبه اندازه بلورک‌ها با استفاده از رابطه ویلیامسون-هال مشخص شد که افزایش دمای کلسینه موجب بزرگ‌تر شدن اندازه بلورک‌ها می‌شود. تصاویر میکروسکوپ الکترونی روبشی گسیل میدانی نشان داد که کلسینه کردن موجب کاهش قطر نانوفیبرها می‌شود و سطح صاف آن‌ها را به حالت دانه‌ای تبدیل می‌کند. حضور عناصر کبالت، منیزیم و اکسیژن در آنالیز پاشندگی انرژی پرتو ایکس تایید شد. نتایج طیف‌سنجی بازتاب پخشی نشان داد افزایش دمای کلسینه موجب کاهش انرژی گاف نواری نمونه‌های تهیه شده می‌گردد.

مرجع ها

[۱] Zamudio, Miguel A., Samir Bensaid, Debora Fino, and Nunzio Russo; "Influence of the $MgCo_2O_4$ preparation method on N_2O catalytic decomposition"; *Industrial & engineering chemistry research* **50**, No. 5 (2011) 2622-2627.

[۲] Krishnan, Syam G., Midhun Harilal, Izan Izwan Misnon, M. V. Reddy, S. Adams, and Rajan Jose; "Effect of processing param eters on the charge storage properties of $MgCo_2O_4$ electrodes"; *Ceramics International* **43**, No. 15 (2017) 12270-12279.

[۳] Wang, Ya, Xingyi Ma, Shanshan Li, Jiale Sun, Yanfei Zhang, Huiyu Chen, and Chunju Xu; "Facile solvothermal synthesis of novel $MgCo_2O_4$ twinned-hemispheres for high performance asymmetric supercapacitors"; *Journal of Alloys and Compounds* **818** (2020) 152905.

[۴] Wiranwetchayan, Orawan, Surin Promnopat, Titipun Thongtem, Arnon Chaipanich, and Somchai Thongtem; "Effect of polymeric precursors on the properties of TiO2 films prepared by sol-gel method"; *Materials Chemistry and Physics* **240** (2020) 122219.

[۵] Bouzidi, A., I. S. Yahia, and M. S. A. El-Sadek; "Novel and highly stable indigo (CI Vat Blue I) organic semiconductor dye: Crystal structure, optically diffused reflectance and the electrical conductivity/dielectric behaviors"; *Dyes and Pigments* **146** (2017) 66-72.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

رسانایی اتصال شامل دو سد پتانسیل فرومغناطیسی با مغناطش‌های عمود بر صفحه‌ی فسفرین

دوست خواه هروان، لیلا؛ عبداللهی پور، بابک

گروه فیزیک ماده چگال، دانشکده فیزیک، دانشگاه تبریز، تبریز

چکیده

فسفرین ماده‌ای دو بعدی است که به دلیل ساختار نواری ناهمسانگردش اخیرا بسیار مورد توجه قرار گرفته است. در این مطالعه ما رسانایی اتصال متشکل از دو سد پتانسیل فرومغناطیسی با مغناطش‌های عمود بر صفحه‌ی فسفرین را برای آرایش موازی و پادموازی مغناطش‌ها مورد بررسی قرار می‌دهیم. همچنین رفتار مغناطومقاومت این اتصال را بر حسب انرژی پتانسیل و پهنای چاه پتانسیل بین دو سد فرومغناطیسی بازای انرژی‌های پتانسیل مختلف سدها مورد مطالعه قرار می‌دهیم. مشاهده میکنیم که ترابرد الکترونی و مغناطومقاومت این اتصال با استفاده از پارامترهای چاه پتانسیل قابل کنترل است.

واژه های کلیدی: *فسفرین، رسانایی موازی، رسانایی پادموازی، مغناطومقاومت*

Conductance of a junction composed of two ferromagnetic potential barriers with magnetizations perpendicular to the phosphorene sheet

Dustkhah Heravan, Leila; Abdollahipour, Babak

Department of condensed matter physics, Faculty of Physics, University of Tabriz, Tabriz

Abstract

Phosphorene is a two-dimensional material that has recently attracted a great attention due to its anisotropic band structure. We investigate conductance of the junction composed of two ferromagnetic potential barriers with magnetizations perpendicular to the phosphorene sheet for parallel and antiparallel configurations of the magnetizations. We also study the magnetoresistance of this junction in terms of the potential energy and width of the potential well between two ferromagnetic potential barriers. We observe that electronic transport and magneto resistance of the junction can be controlled by the parameters of the potential well.

***Keywords**: Phosphorene, Parallel conductance, Antiparallel conductance, Magnetoresistance*

PACS No. 68,72,75

مقدمه

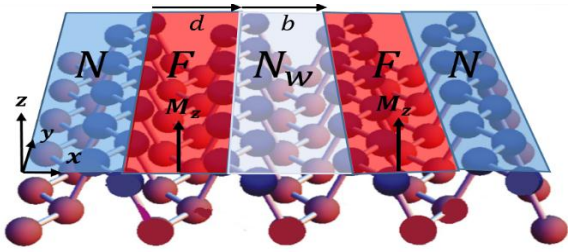
فسفرین، یک ماده دو بعدی و تک لایه از فسفر سیاه است که به روش مکانیکی و توسط چسب نواری از فسفر توده‌ای جدا می-شود. فسفرین در راستای صندلی ساختار چروکیده و در راستای زیگزاگ بصورت دو لایه دیده می‌شود. این ماده بدلیل ناهمسانگردی در طیف انرژی‌اش به تازگی بسیار مورد توجه قرار گرفته است و در صنعت الکترونیک می‌تواند کاربرد بسیاری داشته باشد[۱]. در اسپینترونیک، اسپین الکترون علاوه بر بار آن به عنوان یک درجه آزادی بیشتر مورد استفاده قرار می‌گیرد. این امر به معنای امکان ذخیره‌سازی یا انتقال حجم داده‌ی بیشتری است. یکی از مهمترین قطعات کاربردی در اسپینترونیک سیستم سوپاپ اسپینی است. در این مطالعه ما رسانایی یک سوپاپ اسپینی مبتنی بر فسفرین را محاسبه کرده و رفتار مغناطومقاومت این اتصال را مورد بررسی قرار می‌دهیم.

مدل و معادلات اساسی

ساختار مورد مطالعه شامل دو سد پتانسیل مغناطیسی است که مغناطش‌های آنها در راستای عمود بر صفحه‌ی تک لایه‌ی فسفرین در نظر گرفته می‌شوند (شکل ۱). هامیلتونی دو نواری فسفرین در انرژی‌های کم به شکل زیر نوشته می‌شود[۲]:

$$H_0 = f_k I + g_{1k_x}\tau_x + g_{2k_x}\tau_y$$
$$g_{1k_x} = m + \alpha k_x^2 + \beta k_y^2 \text{ ، } g_{2k_x} = \gamma k_x \qquad (۱)$$

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



شکل(۱): ساختار سیستم مورد مطالعه در حالت مغناطش‌های موازی.

ماتریس‌های پائولی در پایه نوارهای انرژی هستند و $\tau_{x,y}$ ماتریس I واحد در این پایه است. سایر پارامترها به صورت زیر داده می‌شوند:

$$f_k = t_4(4 - 3k_x^2/2 - k_y^2/2)، m = 0.76\ \text{eV}$$
$$\gamma = 2.29\ \text{eV}، \alpha = -0.045\ \text{eV}، \beta = 0.36 \qquad (۲)$$

$\gamma \gg \alpha$ است و این نشان دهنده‌ی پاشندگی خطی در امتداد k_x و پاشندگی سهمی شکل در امتداد k_y برای k های کوچک است. در مرجع [۳] رسانایی اتصال فرومغناطیس- نرمال- فرومغناطیس با مغناطش‌های همجهت با صفحه‌ی فسفرین مطالعه شده است. در این مطالعه از اثر جملات مرتبه دوم در عناصر غیر قطری هامیلتونی صرفنظر شده است و فقط جمله خطی در نظر گرفته شده است. ما اثر این جملات در رسانایی بار از میان دو سد پتانسیل مغناطیسی که مغناطش‌های آنها در راستای عمود بر صفحه‌ی تک لایه‌ی فسفرین در نظر گرفته می‌شوند را برای آرایش‌های موازی و پادموازی مغناطش‌ها مورد مطالعه قرار می‌دهیم. در حضور میدان تبادلی فرومغناطیسی هامیلتونی فسفرین در فضای نوارهای انرژی و اسپین بصورت زیر نوشته می‌شود:

$$H = H_0 \otimes \sigma_0 + \tau_0 \otimes \vec{h}.\vec{\sigma} + U(r)\tau_0 \otimes \sigma_0 \qquad (۳)$$

در اینجا $\vec{h} = h_z\hat{k}$ اندرکنش تبادلی در راستای z در نواحی فرومغناطیسی و $U(r)$ پتانسیل الکترواستاتیک در طول اتصال است، $\vec{\sigma} = \sigma_z$ ماتریس پائولی در فضای اسپینی در راستای z است، σ_0 و τ_0 به ترتیب ماتریس‌های واحد در فضای اسپین و نواری را نشان می‌دهند. با توجه به اینکه جهت مغناطش در نواحی مغناطیسی هم-راستا است، بنابراین می‌توان حالت‌های اسپین بالا و پایین را از هم تفکیک کرده و آنها را جداگانه حل کرد. توابع موج در نواحی نرمال و فرومغناطیس بصورت زیر نوشته می‌شوند:

$$\begin{pmatrix}\psi_c^{N\uparrow}\\ \psi_v^{N\uparrow}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\psi_c^{N\downarrow}\\ \psi_v^{N\downarrow}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}1\\ \lambda_N e^{i\theta_N}\end{pmatrix}$$
$$\begin{pmatrix}\psi_c^{F\uparrow}\\ \psi_v^{F\uparrow}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}1\\ \lambda_\uparrow e^{i\theta_\uparrow}\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}\psi_c^{F\downarrow}\\ \psi_v^{F\downarrow}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}1\\ \lambda_\downarrow e^{i\theta_\downarrow}\end{pmatrix} \qquad (٤)$$

برای بررسی ترابرد الکترونی در امتداد محور x در اتصال نرمال- فرومغناطیس- نرمال- فرومغناطیس- نرمال از روش ماتریس انتقال برای محاسبه ضرایب عبور استفاده می‌کنیم. ماتریس انتقال برای هر کدام از جهت‌های اسپینی بصورت جداگانه محاسبه می‌شوند. در حالت کلی ماتریس انتقال برای دو سد مغناطیسی عبارت است از:

$$N_1^{\uparrow,\downarrow} = [P_2.M_2(0)]^{-1}.[P_1.M_1(0)].[P_1.M_1(d)]^{-1}.[P_w.M_w(d)]$$
$$N_2^{\uparrow,\downarrow} = [P_w.M_w(d+b)]^{-1}.[P_1.M_1(d+b)].[P_1.M_1(2d+b)]^{-1}.[P_2.M_2(2d+b)] \qquad (٥)$$

اندیس‌های ۱ و۲ و w در این رابطه به ترتیب به ناحیه نرمال و فرومغناطیس و ناحیه چاه پتانسیل اشاره دارند و d پهنای ناحیه فرومغناطیس و b پهنای چاه پتانسیل را نشان می‌دهد. ماتریس‌های موجود در این رابطه بصورت زیر داده می‌شوند:

$$P_{1,2,w} = \begin{pmatrix}1 & 1\\ \lambda_{1,2,w}e^{i\theta_{1,2,w}} & \lambda_{1,2,w}e^{-i\theta_{1,2,w}}\end{pmatrix}$$

$$M_{1,2,w}(x) = \begin{pmatrix}e^{ik_{1,2,w}x} & 0\\ 0 & e^{-ik_{1,2,w}x}\end{pmatrix} \qquad (٦)$$

k_1 و k_2 و k_w به ترتیب از حل عددی روابط ویژه مقداری در نواحی نرمال و فرومغناطیس و چاه پتانسیل به دست می‌آیند. ویژه مقادیر انرژی در نواحی نرمال و فرومغناطیس و ناحیه‌ی چاه پتانسیل از روابط زیر به دست می‌آیند:

$$E_N = f_{k_1} + \sqrt{g_{1k_1}^2 + g_{2k_1}^2}$$
$$E_w = U_w + f_{k_w} + \sqrt{g_{1k_w}^2 + g_{2k_w}^2}$$
$$\mathrm{E}_F^{\pm} = U + f_{k_2} + \sqrt{g_{1k_2}^2 + g_{2k_2}^2} \pm h \qquad (٧)$$

در این رابطه U و U_w انرژی پتانسیل الکترواستاتیک به ترتیب در سدهای پتانسیل فرومغناطیسی و چاه پتانسیل بین آنها می‌باشند. $\lambda_{1,2,w}$ ، $\theta_{k_{1,2,w}}$ نیز بصورت زیر تعریف می شوند:

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

$$\lambda_1 = sign(E_N - f_{k_1})$$

$$\lambda_w = sign(E_w - f_{k_w} - U_w)$$

$$\lambda_2 = sign(E_F - f_{k_2} - U - \vec{h}.\vec{\sigma})$$

$$\tan\theta_{1,2,w} = \frac{\gamma k_{1,2,w}}{m+\alpha k^2_{1,2,w}+\beta k_y^2} \qquad (۸)$$

ماتریس انتقال کل از میان دو سد پتانسیل فرومغناطیسی با $N^{\uparrow,\downarrow} = N_1^{\uparrow,\downarrow}.N_2^{\uparrow,\downarrow}$ داده می‌شود. ضرایب عبور اسپین بالا و پایین بصورت زیر بدست می‌آیند:

$$t^{\uparrow} = \frac{1}{N_{11}^{\uparrow}},\ t^{\downarrow} = \frac{1}{N_{11}^{\downarrow}} \qquad (۹)$$

رسانایی بار برابر است با رد ماتریس احتمال عبور $(T = tt^{\dagger})$ ، روی مدهای عرضی مختلف انتگرال‌گیری می‌شود:

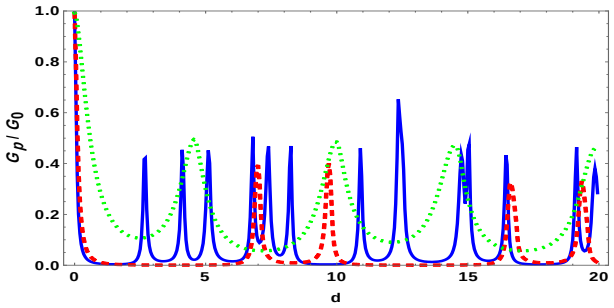
$$G_c = G_0 \int \frac{dk_y}{2\pi}\left(|t^{\uparrow}|^2+|t^{\downarrow}|^2\right) \qquad (۱۰)$$

که G_0 حداکثر رسانایی اتصال است. مغناطومقاومت اتصال بصورت اختلاف رسانایی حالت‌های موازی و پاد موازی مغناطش‌ها تقسیم بر رسانایی حالت موازی تعریف می‌شود:

$$MR = \frac{(G_p - G_{ap})}{G_p} \qquad (۱۱)$$

بررسی نتایج

در ادامه رسانایی حالت‌های موازی و پادموازی بازای سه مقدار متفاوت انرژی پتانسیل سدها مورد بررسی قرار می‌گیرد. در ناحیه سد مغناطیسی، اندرکنش تبادلی سبب شکافته شدن نوارهای انرژی برای اسپین‌های بالا و پایین به اندازه $2h$ می‌شود. شکافته شدن نوارهای انرژی موقعیت لبه نوارهای انرژی نسبت به انرژی فرمی را تغییر می‌دهد و سبب می‌شود که بسته به مقادیر E ، U و h نوار انرژی مربوط به یک جهت اسپینی در مقابل انرژی الکترون فرودی قرار گرفته و نوار انرژی مربوط به جهت اسپینی دیگر در موقعیت بالاتر از انرژی الکترون فرودی باشد. بنابراین انتظار می‌رود که وجود اندرکنش تبادلی سبب کاهش ارتفاع پیک‌های رسانایی در حالت تشدیدی شود. البته رسانایی برای جهت مغناطش عمود بر صفحه فسفرین نسبت به حالتی که مغناطش همجهت با صفحه فسفرین است، افزایش پیدا کرده است. در شکل (۲) رسانایی بار در حالت موازی برای مغناطش $h = 0.3$ eV و انرژی $E/2m = 0.01$ به صورت تابعی از پهنای سدهای پتانسیل رسم شده است. بازای $U/2m = 1.5$ در شکل (۲) ملاحظه می‌شود که شدت پیک‌های تشدیدی نسبت به زمانی که مغناطش وجود نداشت کاهش پیدا کرده است اما نسبت به زمانی که مغناطش همجهت با صفحه فسفرین باشد افزایش دوبرابری دارد. بازای $U/2m = 1$ رسانایی با افزایش پهنای سد پتانسیل به سرعت کاهش می‌یابد ولی در مقادیری که برای آنها شرط تشدید برای یکی از جهت‌های اسپینی برقرار می‌شود شاهد وجود پیک در رسانایی حالت موازی هستیم. در نهایت بازای $U/2m = 0.005$ با افزایش پهنای سد، بدلیل وجود مغناطش پیک‌های منظمی در رسانایی شاهد هستیم.



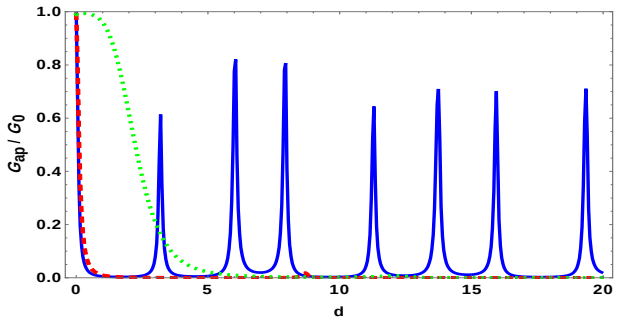
شکل(۲): رسانایی بار برای فسفرین تک لایه با دو سد پتانسیل فرومغناطیسی در حالت موازی، بازای $E/2m = 0.01$ و $h = 0.3$ eV برای $U/2m = 1.5$ (منحنی پیوسته) ، $U/2m = 1$ (منحنی خط چین) و $U/2m = 0.005$ (منحنی نقطه چین).

شکل (۳) مربوط به رسانایی بار در حالت پادموازی برای مغناطش $h = 0.3$ eV و انرژی $E/2m = 0.01$ به صورت تابعی از پهنای سدهای پتانسیل رسم شده است. بازای $U/2m = 1.5$ پیک های رسانایی مرتب تر و از شدت رسانایی بیشتری برخوردارند. بازای $U/2m = 1$ رسانایی با افزایش پهنای سد پتانسیل کاهش سریع داشته و یک پیک جزئی با شدت رسانایی خیلی کم را شاهد هستیم. در نهایت بازای $U/2m = 0.005$ با افزایش پهنای سد رسانایی کاهش می‌یابد و برخلاف حالت موازی هیچ تشدید و پیکی برای رسانایی شاهد نیستیم.

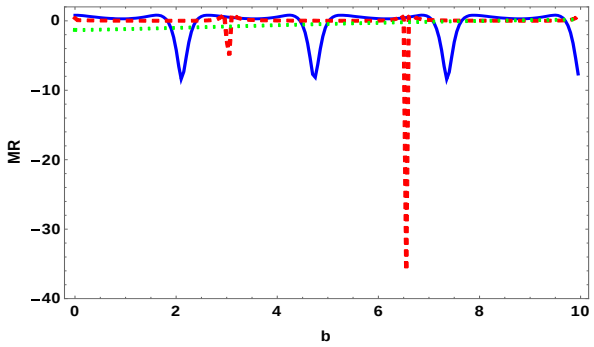
MR در شکل (٤) برای سه مقدار متفاوت انرژی پتانسیل سدهای پتانسیل و بازای انرژی $E/2m = 0.01$ و پهنای سدهای پتانسیل

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

$d = 5$ و مغناطش $h = 0.05$ eV بر حسب پهنای چاه پتانسیل بین سدهای فرومغناطیسی رسم شده است. MR بر حسب پهنای چاه پتانسیل رفتار متناوب داشته و دارای فرورفتگی‌های نسبتا تیزی است که در اطراف آنها رسانایی حالت پادموازی چندین برابر رسانایی حالت موازی است. فاصله بین این فرورفتگی‌ها با افزایش $U/2m$ افزایش یافته و ارتفاع آنها نیز تغییر می‌یابد.

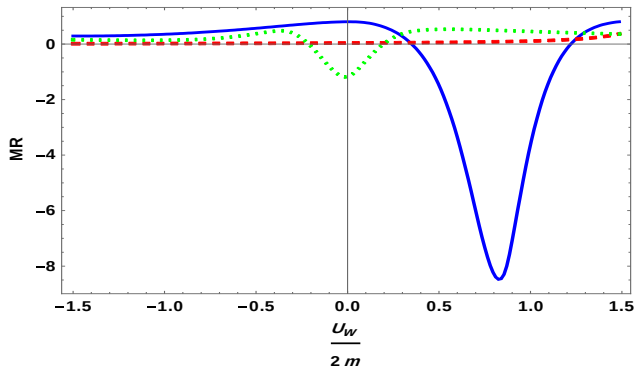


شکل(۳): رسانایی بار برای فسفرین تک لایه با دو سد پتانسیل فرومغناطیسی در حالت پادموازی، بازای $E/2m = 0.01$ و $h = 0.3$ eV، برای $U/2m = 1.5$ (منحنی پیوسته) ، $U/2m = 1$ (منحنی خط چین) و $U/2m = 0.005$ (منحنی نقطه چین).



شکل (٤): MR برای دو سد پتانسیل مغناطیسی بر حسب پهنای چاه پتانسیل(b)، بازای $E/2m = 0.01$ و $d = 5$ و $h = 0.05$ eV، برای $U/2m = 1.5$ (منحنی پیوسته) ، $U/2m = 1$ (منحنی خط چین) و $U/2m = 0.005$ (منحنی نقطه چین).

در شکل(۵) نمودار MR بر حسب انرژی پتانسیل چاه پتانسیل $(U_w/2m)$ برای مقدار مشخص پهنای چاه پتانسیل(b=1) رسم شده است. مشاهده می‌شود که با افزایش انرژی پتانسیل چاه پتانسیل از مقادیر منفی به مقادیر مثبت مغناطومقاومت دچار تغییر علامت می‌شود. و بازای مقداری از انرژی پتانسیل چاه یک فرورفتگی نسبتا بزرگ در مغناطومقاومت مشاهده می‌شود. این فرورفتگی نشان دهنده بزرگتر بودن رسانایی حالت پادموازی نسبت به حالت موازی است. ملاحظه می‌شود که با افزایش مقدار $U_w/2m$ از عمق فرورفتگی ها کاسته شده و اندازه رسانایی پادموازی به رسانایی موازی نزدیکتر می‌شود. بازای مقادیر خیلی بزرگتر و خیلی کوچکتر انرژی پتانسیل چاه پتانسیل مغناطومقاومت بسیار ناچیز است که نشان‌دهنده برابری تقریبی رسانایی در حالت‌های موازی و پادموازی است.



شکل (۵): MR برای دو سد پتانسیل مغناطیسی بر حسب انرژی پتانسیل$(Uw/2m)$، بازای $E/2m = 0.01$ و $d = 5$ و $h = 0.05$ eV برای $U/2m = 1.5$ (منحنی پیوسته) ، $U/2m = 1$ (منحنی خط چین) و $U/2m = 0.005$ (منحنی نقطه چین).

نتیجه گیری

ما رسانایی اتصال شامل دو سد فرومغناطیسی با مغناطش‌های عمود بر صفحه تک لایه‌ی فسفرین را در حالت‌های موازی و پادموازی مطالعه کردیم. ملاحظه کردیم که رسانایی حالت پادموازی نسبت به رسانایی حالت موازی می‌تواند بزرگتر باشد. و همچنین نشان دادیم که مغناطومقاومت اتصال با انرژی پتانسیل و پهنای چاه پتانسیل قابل کنترل بوده و با تغییر آنها دچار تغییر علامت می‌شود.

مرجع ها

[1] H. Liu, A. T. Neal, Z. Zhu, Z. Luo, X. Xu, D. Tomanek, and P. D. Ye, *"Phosphorene: an unexplored 2D semiconductor with a high hole mobility" ACS NANO* **8**, (2014) 4033.

[2] S. D. Sarkar, A. Agarwal and K. Sengupta , *"Anisotropic transport of normal metal-barrier-normal metal junctions in monolayer phosphorene", J. Phys.: Condens. Matter* **29**, (2017) 285601.

[3] M. Zare, L. Majidi, R. Asgari, *"Giant magnetoresistance and anomalous transport in phosphorene-based multilayers with non-collinear magnetizations", Physical Review B*, (2017) 115426.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

قیدهای جدید روی قابلیت تغییر شکل‌پذیری کشندی و رابطه جرم – شعاع در ستاره های هیبریدی در چارچوب مدل FCM

خانمحمدی ، سمیه ؛ مشفق، حمیدرضا

دانشکده فیزیک دانشگاه تهران ، انتهای خیابان کارگر شمالی ، تهران

چکیده

قیود جدید روی جرم بیشینه, تغییر شکل‌پذیری کشندی و رابطه جرم- شعاع برای ستاره هیبریدی در چارچوب مدل کوارکی غیر اختلالی همبسته سازهای میدانی FCM ترکیب شده با مدل هادرونی به روش وردشی با کمترین مرتبه قید LOCV بررسی شده است. برای مقدار چگالی گلوئونی G2=0.006 GeV ^4 که دمای گذار فاز را Tc~170 MeV می دهد, ستاره هیبریدی پایدار با جرم ماکزیمم 2.04Mʘ پیش بینی شده است. ستاره های هیبریدی بررسی شده, قید روی قابلیت تغییر شکل‌پذیری کشندی و در نتیجه قید روی شعاع ناشی از آن را که از دوتایی ستاره نوترنی GW170817 استخراج شده برقرار میکنند. همچنین رابطه جرم – شعاع ستاره های هیبریدی قید جدید به دست آمده از NICER را برقرار کرد. قابلیت تغییر شکل‌پذیری کشندی برای جرم های چهچهه‌ای[1] و نسبتهای مختلف جرم اجزای دوتایی بررسی شده است. محاسبات ما مقدار پارامتر پتانسیل کوارک-آنتی کوارک را حول و حوش ۰,۰۸ پیشنهاد می دهد.

واژه های کلیدی:قابلیت تغییر شکل پذیری کشندی, ستاره نوترونی, ستاره هیبریدی, گذار فاز هادرون – دوتایی GW170817, مدل کوارکی FCM

New constraints on the tidal deformability and mass-radius relation of hybrid star within the frame work of the field correlator method

Khanmohammadi, Somaye; Moshfegh, Hamidreza

Department of Physics, University of Tehran, Tehran

Abstract

New constraints on maximum mass, tidal deformability and mass-radius relation of hybrid stars within the non perturbative frame work of the field correlator (FCM) method combined with the lowest order constraint variational (LOCV) method as hadron model, has been studied. For adapted value of gluon condensate, G2=0.006 GeV ^4 which gives the critical temperature of about Tc~170 MeV, stable hybrid star with the maximum mass of 2.04Mʘ is predicted. Hybrid equation of state fulfills the constraints on tidal deformability and hence on the the radii of the stars, extracted from the binary GW170817. The mass-radius relation satisfies the new constraint obtained from the neutron star interior composition explorer (NICER). Moreover, tidal deformability for different chirp masses and different binary mass ratios of hybrid stars has been studied. Our calculations suggest the value of quark-anti quark potential, V1, to be around 0.08 GeV.

***Keywords**: Tidal deformability, Neutron star, Hybrid star, Hadron-Quark phase transition, The binary GW170817, FCM quark model*

[1] Chirp masses

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد

http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مقدمه

با توجه به نتایج محاسبات میکروسکوپی, چگالی در مرکز ستاره های فشرده به بیش از ۶ برابر چگالی اشباع هسته می‌رسد و در این بازه چگالی احتمال حضور کوارک‌ها و گذار ماده‌ی هسته‌ای به ماده‌ی کوارکی در هسته‌ی ستاره وجود دارد. ما این گذار را بررسی و برای توصیف گذار فاز ماده‌هسته‌ای به ماده‌ی کوارکی از گذار فاز ماکسول که در آن هر فاز به طور جداگانه در حال تعادل بتایی است و فازها در تماس مستقیم با هم هستند, استفاده کرده‌ایم. در این مقاله با توجه به قیود استخراج شده از داده‌های رصدی و امواج گرانشی, برای پارامترهای آزاد مدل کوارکی بررسی شده محدوده‌ای تعیین شده است.

مدل هادرونی و کوارکی

برای توصیف ماده‌ی هسته‌ای از مدل LOCV با پتانسیل دو جسمی AV18 که نیروی سه جسمی اوربانا به آن اضافه شده شده است و برای توصیف ماده‌ی کوارکی از مدل FCM استفاده کرده‌ایم. روش LOCV یک روش وردشی است که در آن توابع همبستگی به طور مستقیم با حل معادلات اویلر-لاگرانژ که از کمینه کردن تابعی مقدار چشم‌داشتی هامیلتونی استخراج شده, به دست می‌آید. در این صورت‌بندی از قید طبیعی بهنجارش برای یافتن توابع همبستگی مناسب در هر کانال استفاده می‌شود[۱]. مدل کوارکی FCM مدلی غیر اختلالی است که در آن از همبسته سازهای میدانی برای به دست آوردن معادله حالت ماده‌ی کوارکی استفاده می‌شود[۲]. این مدل دو پارامتر آزاد دارد, G2 چگالش گلوئونی, که از قواعد جمع کوانتومی استخراج می‌شود و V1 پتانسیل استاتیکی کوارک-آنتی کوارک, که از محاسبات شبکه به دست می‌آید .

نتایج و نمودارها

ما در مقاله سال گذشته در کنفرانس فیزیک سال ۹۸ نشان دادیم که نتایج به دست آمده برای مقادیر خیلی کوچک V1 با قیودی که از مشاهدات تجربی به دست آمده سازگار نیست بنابراین مقادیر بزرگتر V1 را امتحان کردیم. طبق شکل -۱ برای مقادیر خیلی بزرگ V1 , حدود V1=0.5 *GeV* گذار بین فاز هادرونی و کوارکی رخ نمی‌دهد بنابراین ما محاسبات را برای مقادیر V1=0.05,0.07,0.08,0.09,0.1 *GeV* انجام دادیم و نتایج مربوط به نمودار جرم – شعاع ستاره برای هر دسته پارامتر مختلف مدل FCM در شکل – ۲ نمایش داده شده است. همان‌طور که از شکل واضح است با افزایش مقدار V1 و همچنین G2 , مقدار جرم بیشینه ستاره هیبریدی افزایش می‌یابد. علاوه بر آن با افزایش مقدار V1 و همچنین G2, با ناپایداری ستاره هیبریدی مواجه می‌شویم. بنابراین باید به دنبال دسته پارامترهایی بگردیم که علاوه بر اینکه جرم بیشینه ستاره هیبریدی را بالاتر از ۲ برابر جرم خورشید, منطبق با داده‌های رصدی, پیش‌بینی می‌کند, پایداری ستاره را هم تضمین کند. همان‌طور که از شکل -۲ روشن است, ستاره هیبریدی با V1>0.07 *GeV* جرم ستاره هیبریدی را بالاتر از ۲ برابر جرم خورشید پیش‌بینی می‌کند و همزمان ستاره هیبریدی هم پایدار است (ناپایداری ستاره خودش را به شکل تیزی در نمودار جرم – شعاع نشان می‌دهد). بنابراین طبق بررسی ما و از آنجایی مقدار چگالش گلوئونی G2=0.006 *GeV* ^4 , دمای گذار را T=170 درجه منطبق با محاسبات شبکه می‌دهد, مقدار V1=0.08 *GeV* را می‌توان بهترین مقدار پیش‌بینی شده برای پتانسیل استاتیکی کوارک-آنتی کوارک در نظر گرفت. هرچند V1=0.09 *GeV*به همراه G2=0.005 *GeV* ^4 هم جرم ستاره هیبریدی را بالای ۲ برابر جرم خورشید پیش‌بینی می‌کند. در شکل a -۳ نمودار جرم بیشینه Mmax/M$\odot$ بر حسب پتانسیل استاتیکی کوارک-آنتی کوارک. شکل b -۳ نمودار جرم بیشینه Mmax/M$\odot$ بر حسب چگالی گلوئونیG2 و شکل c -۳ نمودار جرم بیشینه Mmax/M$\odot$ بر حسب چگالی گلوئونی G2 را برای ستاره‌های هیبریدی پایدار به ازای پتانسیل استاتیکی کوارک-آنتی‌کوارک V1 مختلف رسم شده است. محدوده پایداری به رنگ زرد نشان داده شده است. همچنین قید روی جرم ماکزیمم بالای ۲ برابر جرم خورشید هاشور خورده است. خط چین مقدار چگالی گلوئونی برای دمای گذار ۱۷۰ را نمایش می‌دهد.

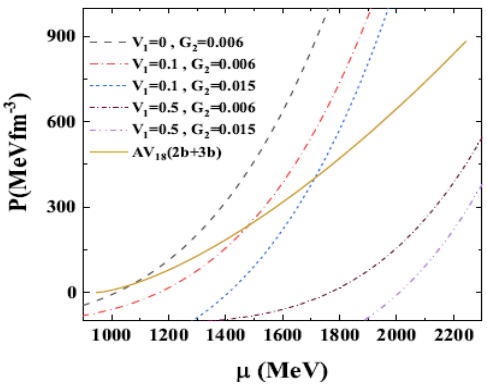
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

قید قابلیت تغییر شکل‌پذیری کشندی

در ۸ آگوست سال ۲۰۱۷ امواج گرانشی حاصل از یک ستاره نوترونی دوتاییGW رصد شد[۳] . با بررسی این امواج, قید جدیدی روی قابلیت تغییر شکل‌پذیری کشندی Λ ناشی از یکی از اجزای دوتایی روی دیگری گذاشته شد. از آنجایی که قابلیت تغییر شکل‌پذیری کشندی تابع معادله حالت ستاره است بنابراین عملا قید جدیدی رو معادله حالت ستاره‌های نوترونی گذاشته شد. این قید روی کمیت بدون بعد تغییر شکل تایدال برای ستاره‌های نوترونی خالص به جرم ۱,۴ برابر جرم خورشید $375\leq\Lambda\leq800$ و برای ستاره‌های هیبریدی به جرم ۱,۴ برابر جرم خورشید $35.5\leq\Lambda\leq800$ گذاشته شده است [٤] (برای جزییات محاسبه Λ و روابط مربوطه به مرجع [۵] مراجعه شود). از طرف دیگر به دلیل اینکه قابلیت تغییر شکل‌پذیری کشندی همانطور که اشاره شد, مستقیما به معادله حالت و ساختار ستاره وابسته است, از روی این قید, محدودیت جدیدی روی شعاع ستاره نوترونی به جرم ۱,۴ برابر جرم خورشید گذاشته شد. این قید روی شعاع بر حسب کیلومتر برای ستاره نوترونی خالص به جرم ۱,۴ جرم خورشید $12\leq R\leq13.45$ و برای ستاره هیبریدی $8.35\leq R\leq13.74$ است. برای تمام حالت‌های ستاره‌های هیبریدی پایدار در مدل FCM این قید برقرار شد. برای ستاره‌های هیبریدی با V1 های خیلی کوچک, از آنجایی که ستاره با جرم ۱,۴ جرم خورشید در شاخه‌ی کوارکی قرار می‌گیرد, کمیت قابلیت تغییر شکل‌پذیری کشندی کوچکتری به دست می‌آید و برای V1 های بزرگ, کمیت قابلیت تغییر شکل‌پذیری کشندی مقدار بزرگتری محاسبه می‌شود. اما در هر صورت, این کمیت در بازه تخمین زده شده برای این کمیت قرار می‌گیرد. همچنین "شعاع" ستاره‌های هیبریدی با جرم ۱,۴ برابر جرم خورشید, نیز قیود به دست آمده از GW170817 را برقرار کرد. نتایج مربوط به کمیت‌های شعاع R, فشردگیC , yR , عدد Love و کمیت تغییر شکل‌پذیری کشندی Λ برای ستاره با جرم ۱,۴ جرم خورشید در جدول -۱ نمایش داده شده است. علاوه بر بررسی این قیود, کمیت قابلیت تغییر شکل‌پذیری کشندی را برای مقادیر مختلف جرم چهچه‌ای و نسبت‌های مختلف جرم q=M2/M1 اجزای دوتایی ستاره نوترونی محاسبه کردیم. دیده شده است محدوده‌ی $0.7\leq q\leq1$ است [۶]. شکل a -۴ , نمودار Λ بر حسب جرم ستاره $M/M\odot$ را برای جرم‌های مختلف ستاره هیبریدی و شکل b- 4 , نمودار $\Lambda2$ بر حسب $\Lambda1$ را برای جرم کوچک و جرم بزرگ دوتایی را به همراه قیود استخراج شده از GW17018 نشان می‌دهد. تمام معادله حالت‌های هیبریدی ما این قیود را برقرار می‌کنند.

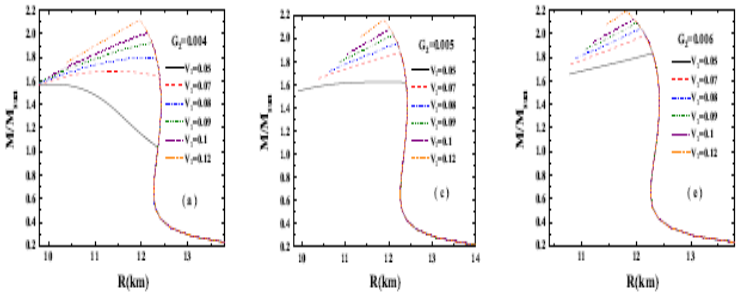
قید ناشی از NICER

در سال ۲۰۱۹ گروه NICR امواج گرانشی ناشی از ستاره PSR J0030+451 را رصد کرد[۷] و با تحلیل این داده‌ها, قیود جدیدی روی نمودار جرم-شعاع گذاشته شد. این قید در شکل - ۵ به همراه نمودارهای جرم - شعاع برای ستاره‌های هیبریدی پایدار نشان داده شده است. علاوه بر آن, در مرجع [۸] , از روی دو تایی GW170817 , قید جدیدی روی شعاع ستاره با جرم بیشینه و همچنین شعاع ستاره به جرم ۱,۶ برابر جرم خورشید گذاشته شد. نواحی کنار گذاشته شده ناشی از آن با رنگ قرمز در شکل نشان داده شده است. در حالت‌های های خیلی کوچک که جرم بیشینه حتی به ۱,۶ جرم خورشید هم نمی‌رسد, این قیود براورده نمی‌شود. این نتیجه, یافته‌های قبلی ناشی از این که V_1 های خیلی کوچک قیود رصدی روی جرم بیشینه را ارضا نمی‌کند را تایید می‌کند. همچنین این شکل, یافته قبلی ما مبنی بر این‌که V_1 های بزرگ در حدود ۰,۰۸ قیود رصدی مربوط به ستاره‌های نوترونی را برقرار می‌کند را تایید می‌کند.

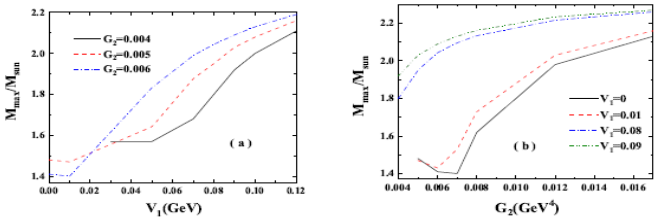


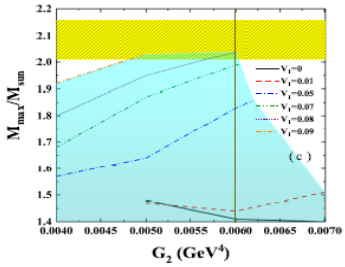
شکل ۱ : معادله حالت‌های ماده هسته‌ای و کوارکی برای پارامترهای مختلف در حالت تعادل بتایی

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

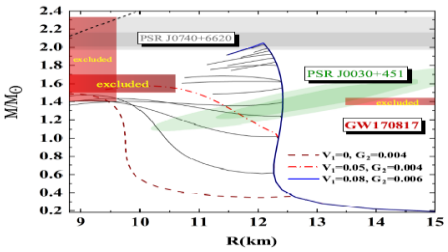


شکل۲ : نمودار جرم-شعاع برای ستاره های هیبریدی برای مقادیر بزرگ پتانسیل کوارک-آنتی کوارک





شکل۳: a-نمودار جرم- پتانسیل کوارک آنتی کوارک برای تمام حالتهای ستاره هیبریدی. b- نمودار جرم – چگالش گلوئونی برای تمام حالتهای ستاره هیبریدی. C- نمودار جرم-چگالی گلوئونی فقط برای ستاره‌های هیبریدی. قید روی جرم ماکزیمم هاشور زرد رنگ خورده و محدوده پایداری ستاره هیبریدی با رنگ آبی نمایش داده شده.



شکل4 : نمودار جرم-شعاع برای ستاره‌های هیبریدی پایدار به همراه قیود روی شعاع ناشی از PSR J0030+451به رنگ سبز و قید روی جرم بیشینه استخراج شده از PSRJ0740+6620به رنگ خاکستری و ناحیه حذف شده استخراج شده ازGW170817به رنگ قرمز. خط چین مشکی قید علیت را نشان می‌دهد.

جدول۱ : کمیت‌های شعاع، فشردگی، yR ، عدد Love ، کمیت قابلیت تغییر شکل‌پذیری کشندی

V_1	G_2	ρ_{CB}	R	C	y_R	k_2	Λ
0	0.005	1.065	9.44	0.219	0.393	0.0646	84.573
	0.006	1.42	9.47	0.218	0.388	0.0655	88.396
	0.007	1.39	10.01	0.206	0.380	0.0720	128.498
0.01	0.005	1.078	9.72	0.212	0.388	0.0685	105.545
	0.006	1.156	10.27	0.201	0.378	0.0750	152.721
	0.007	0.42	12.42	0.168	0.356	0.0951	469.980
	≥ 0.008	0.42	12.42	0.168	0.356	0.0951	469.980
0.05	0.004	0.72	11.28	0.183	0.365	0.0861	279.02
0.055	0.004	0.65	11.75	0.175	0.365	0.0906	361.243
≥ 0.05	≥ 0.005	0.42	12.42	0.168	0.355	0.0958	469.980
≥ 0.063	≥ 0.004	0.42	12.42	0.168	0.355	0.0958	469.980

جمع بندی و نتیجه گیری

در این مقاله ما ساختار ستاره‌های هیبریدی بر پایه‌ی مدل هسته‌ای LOCV با پتانسیل دو جسمی AV18 به همراه نیروی سه جسمی اوربانا و مدل کوارکی غیر اختلالی FCM را بررسی کردیم. بر پایه محاسبات ما, پارامتر V_1که پتانسیل استاتیکی کوارک-آنتی کوارک است, در حدود ۰/۰۸ تعیین شد همراه با $G2=0.006\ GeV^4$ که دمای گذار را ۱۷۰ می‌دهد تا همه قیود رصدی که شامل قید بر روی جرم بیشینه ناشی از PSRJ0740+6620 و قید روی قابلیت تغییر شکل‌پذیری کشندی ناشی از GW170817 و قید روی شعاع ناشی از GW170817 و PSR J0030+45 است, ارضا شود. هر چند موارد دیگری مثل $V1=0.09\ GeV$ به همراه $G2=0.005\ GeV^4$ هم که جرم بیشینه را بالای ۲ برابر جرم خورشید می‌دهد نتایج خوبی بودند. اما بهترین حالت که جرم را بالای ۲ برابر جرم خورشید می‌دهد و منطبق با دمای گذار پیش بینی شده در محاسبات شبکه است $V1=0.08\ GeV$ است, نتیجه مشخص آنکه مقادیر خیلی کوچک V1 قیود روی جرم ماکزیمم ناشی از PSRJ0740+6620 و بخشی از قید روی نمودار جرم – شعاع ناشی از GW170817 را برقرار نمیکنند. با در نظر گرفتن تمام محاسبات بالا سناریو ستاره نوترونی با مرکز کوارکی که قسمت هسته‌ای توسط فرمالیسم LOCV و قسمت کوارکی با مدل FCM توصیف شود, سناریوی قابل قبول با توجه به قیود به دست آمده از داده‌های رصدی و امواج گرانشی جدید است.

مرجع‌ها

[1] S. Goudarzi, H. R. Moshfegh and P. Haensel, *Nucl. Phys.* **A 969, 206** (2018)
[2] Y. A. Simonov and M. A. Trusov, *JETP Lett*. **85, 598** (2007)
[3] B. P. Abbott et al. [LIGO Scientific and Virgo Collaborations], *Phys. Rev. X* 9**, no. 1, 011001** (2019)
[4] E. R. Most, L. R. Weih, L. Rezzolla and J. Schaffner-Bielich, *Phys. Rev. Lett*., **120, no. 26, 261103** (2018)
[5] S. Khanmohamadi, H. R. Moshfegh and S. Atashbar Tehrani, *Phys. Rev. D* **101,023004** (2020)
[6] F.Özel and P. Freire, *Ann. Rev. Astron. Astrophys.* **54, 401-440** (2016)
[7] M. Miller, F. Lamb, A. Dittmann, S. Bogdanov, Z. Arzoumanian,K. Gendreau, S. Guillot, A. Harding, W. Ho, J. Lattimer, R. Ludlam, S. Mahmoodifar, S. Morsink, P. Ray, T. Strohmayer, K. Wood, T. Enoto, R. Foster, *Astrophys. J*. **887, no.1**, L24 (2019)
[8] A. Bauswein, N. Friedrich Bastian, D. Blaschke, K. Chatziioannou, J. A. Clark, T. Fischer, H. Janka, O. Just, M. Oertel and N. Stergioulas, *AIP Conf. Proc.* **2127, no.1, 020013** (2019)

بررسی تشکیل هسته ی فوق سنگین $^{297}_{118}Og$ با در نظر گرفتن تغییرشکل و جهت گیری هسته ی هدف

نادری ، داریوش[1] ؛ شریفی، بهادر[1]

دانشگاه رازی،دانشکده علوم، گروه فیزیک

چکیده

برای هسته ی فوق سنگین $^{297}_{118}Og$ سطح مقطع باقیمانده تبخیر در واکنش $^{48}_{20}Ca + ^{249}_{98}Cf$ محاسبه شده است. هسته ی $^{48}_{20}Ca$ کروی و هسته ی $^{249}_{98}Cf$ تغییر شکل یافته است. پتانسیل بین دو هسته برخورد کننده را با استفاده از مدل کولنی و مجاورت برای حالت های کروی و تغییر شکل یافته و با در نظر گرفتن جهت گیری هسته ی هدف محاسبه کرده ایم. محاسبات نشان می دهد که دو پارامتر تغییر شکل و جهت گیری هسته ی هدف بر روی سطح مقطع باقیمانده تبخیر موثر هستند. همچنین اگر هسته ی هدف را به شکل کروی در نظر بگیریم سطح مقطع باقیمانده تبخیر نسبت به حالتی که آن را تغییر شکل یافته در نظر می گیریم کمتر خواهد بود.

واژه های کلیدی: سطح مقطع باقیمانده تبخیر، عناصر فوق سنگین، جهت گیری، پارامتر تغییر شکل

Study of the formation of superheavy nucleus $^{297}_{118}Og$ considering the deformation and orientation of the target nucleus

Naderi, Dariush[1]; Sharifi,Bahador[1]

[1] *Razi university, Faculty of science & Department of Physics*

Abstract

For the superheavy nucleus $^{297}_{118}Og$, the evaporation residue cross section in the $^{48}_{20}Ca + ^{249}_{98}Cf$ is calculated. The nucleus $^{48}_{20}Ca$ is spherical and the nucleus $^{249}_{98}Cf$ is deformed. We have calculated the potential between two colliding nuclei using the Coulomb and proximity potential for the spherical and deformed cases and with take into account the orientation of target nucleus. Calculations show that two parameters of deformation and orientation of target nucleus are effective on evaporation residue cross section. Also, if we consider the nuclei to be spherical, the residue cross sectional will be lower than the state in which it is deformed.

Keywords : ***Evaporation residue cross section , Superheavy elements, Orientation, Deformation parameter***
PACS No:20

مقدمه

عناصر فوق سنگین تا عدد اتمی ۱۱۸بصورت تجربی تولید شده اند[1,2]. پیشرفت های تجربی امکان تحقیق و تولید عناصر فوق سنگین بیشتر را فراهم کرده است. اخیرا تلاش های برای تولید هسته های فوق سنگین با عدد اتمی ۱۱۹ توسط واکنش های $^{50}Ti + ^{249}Bk$ [۲]، $^{58}Fe + ^{244}Pu$

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

[3] و $^{54}Cr + ^{248}Cm$[4] انجام شده است. سطح مقطع اندازه گیری شده برای این واکنش ها فقط $50\ fb$ مربوط به واکنش $^{50}Ti + ^{249}Bk$ برای تولید هسته فوق سنگین با عدد اتمی ۱۱۹ گزارش شده ا ست و شاهدی برای آ شکار سازی هسته ی با عدد اتمی ۱۱۹ وجود ندارد. همچنین هافمن و همکارانش[5] با استفاده از واکنش $^{54}Cr + ^{248}Cm$ تحقیقاتی بر روی تولید و ویژگی های هسته با عدد اتمی ۱۲۰ انجام داده اند.

یکی از عواملی که می تواند بر تشکیل هسته فوق سنگین تاثیرگذار باشد،اثرات تغییر شکل و جهت گیری هسته های هدف و پرتابه می باشد. گیراندازی پرتابه توسط هسته هدف، تشکل هسته مرکب و همچنین بقای هسته مرکب در مقابل شکافت از جمله مواردی هستند که این اثرات می تواند بر آنها تاثیرگذار باشد. در مقاله ی حاضر با توجه به تأثیر اثرات فوق در تشکیل هسته فوق سنگین، به بررسی همزمان این سه پارامتر $(W_{sur}\ P_{CN}, \sigma_{captuer})$ می پردازیم. در این مقاله پتانسیل بین دو هسته برخورد کننده را با استفاده از مدل کولنی و مجاورت در دو حالت کروی و با در نظر گرفتن تغییر شکل و جهت گیری هسته های برخورد دهنده محاسبه کرده ایم .

روش کار

برای دو هسته برخورد کننده سد برهمکنش با توجه به رابطه زیر تعیین می شود[6]

$$V = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} + V_p(z) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} \qquad (1)$$

که l نشان دهنده تکانه زاویه ای و r فاصله بین مراکز هسته پرتابه و هدف و μ جرم کاهش یافته می باشد. برهمکنش کولنی بین دو هسته تغییر شکل یافته برابرست با[7]

$$V_c = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} + 3\ Z_1 Z_2 e^2 \sum_{\lambda,i=1,2} \frac{1}{2\lambda+1} \frac{R_i^{\lambda}(\alpha_i)}{r^{\lambda+1}} Y_{\lambda}^{(0)}(\theta_i) \times \left[\beta_{\lambda i} + \frac{4}{7}\beta_{\lambda i}^2 Y_{\lambda}^{(0)}(\theta_i)\right] \qquad (2)$$

که Z_1وZ_2عدد اتمی پرتابه و هدف هستند.θ_iوα_i زاویه جهت گیری وزاویه بین محورهای تقارن وبردار شعاعی هسته های برخورد دهنده هستند.$\beta_{\lambda i}^2$نیز پارامتر تغییر شکل می باشدکه ما فقط حالت۲=λ رابرای هسته و هدف در نظر میگیریم.همچنین در ساختار تغییر شکل یافتهθ_iاز زاویه ۰تا ۱۸۰ درجه تغییر می کند.

پارامتر تغییر شکل هسته های برخورد کننده از رابطه زیر بدست می آیند[8]

$$R_i(\alpha_i) = R_{0i}\left[1 + \sum_{\lambda} \beta_{\lambda i} Y_{\lambda}^{(0)}(\alpha_i)\right] \qquad (3)$$

$$R_{0i} = 1.28A_i^{1/3} - 0.76 + 0.8A_i^{-1/3} \ ;i=1,2$$

که V_p بدین صورت تعریف می گردد[9]

$$V_p = 4\pi \bar{R}\gamma b \Phi(z/b) \qquad (4)$$

که z فاصله بین سطوح نزدیک پرتابه و هدف و z/b پارامتر پخش شدگی سطح هسته می باشد که در آن b≈1fm است. ضریب کشش سطح هسته بصورت زیر تعریف می شود

$$\gamma = 0.9517[1 - 1.7826(N-Z)^2/A^2] \qquad (5)$$

که Aعدد اتمی وZ تعداد پرتون ها و N تعداد نوترون های هسته مرکب می باشند.متوسط شعاع انحنا ازرابطه زیر بدست می آید.[8]

$$\frac{1}{\bar{R}^2} = \frac{1}{R_{11}R_{12}} + \frac{1}{R_{21}R_{22}} + \left\{\frac{1}{R_{11}R_{22}} + \frac{1}{R_{12}R_{22}}\right\} sin^2\varphi + \left\{\frac{1}{R_{11}R_{22}} + \frac{1}{R_{21}R_{12}}\right\} cos^2\varphi \qquad (6)$$

$\acute{R}_i(\alpha_i)$ و$R_i^{"}(\alpha_i)$ به ترتیب مشتق اول و دوم$R_i\ (\alpha_i)$ نسبت به α_i می باشد.جزییات و شکلهای لازم در مرجع موجود می باشد. فرم تابع جهانی $\emptyset(\xi)$ در مرجع [9] موجود است. سطح مقطع گیراندازی با رابطه زیر تعریف می شود

$$\sigma_{captuer} = \frac{\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\,T(E,l) \qquad (7)$$

عدد موج با $k = \sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar^2}}$ محاسبه می شود که در آن μ جرم کاهش یاغته هسته هدف و پرتابه است. احتمال جذب پاره موج l از فرمول هیل –ویلر بدست می آید[10,11]

$$T(E,l) = (1 + \exp\left[\frac{2\pi(E_l - E)}{\hbar\omega}\right])^{-1} \qquad (8)$$

سطح مقطع همجوشی را نیز بصورت زیر محاسبه می کنیم[10]

$$\sigma_{fusion} = \frac{\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\,T(E,l)P_{CN}(E,l) \qquad (9)$$

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

وهمچنین احتمال تشکیل هسته مرکب از رابطه زیر بدست می آید[11]

$$P_{CN}(E,l)=\frac{\exp[-c(x_{eff}-x_{thr})]}{1+\exp[\frac{E_B^*-E^*}{\Delta}]} \qquad (10)$$

در این رابطه$\Delta=4\text{MeV}$ ، E^* انرژی برانگیختگی هسته مرکب وE_B^* انرژی برانگیختگی هسته مرکب برای حالتی است که انرژی چارچوب مرکز جرم با سد کولنی و مجاورت برابر است. x_{eff} شکافت پذیری موثر، $c=82$ و $x_{thr}=0.69$ می باشد. همچنین کمیت x_{eff} با رابطه زیرمحاسبه می شود

$$x_{eff}=\left[\frac{(\frac{Z^2}{A})}{(\frac{Z^2}{A})_{crit}}\right][1-\alpha+\alpha f(K)] \qquad (11)$$

$(\frac{Z^2}{A})_{crit}$ با رابطه زیر تعریف می شود

$$(\frac{Z^2}{A})_{crit}=50.883\left[1-1.7826(\frac{N-Z}{A})^2\right] \qquad (12)$$

همچنین $f(K)$ بصورت زیر بیان می شود

$$f(K)=\frac{4}{K^2+K+\frac{1}{K}+\frac{1}{K^2}} \qquad (13)$$

که در آن $K=(\frac{A_1}{A_2})^{1/3}$ می باشد[11,10]

سطح مقطع باقی مانده تبخیر از رابطه زیر بدست می آید.[12]

$$\sigma_{ER}^{xn}=\frac{\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)T(E,l)P_{CN}(E,l)W_{sur}^{xn}(E^*,l) \qquad (14)$$

احتمال بقا(W_{sur}) در واقع احتمال برای واپاشی هسته مرکب به حالت پایه ی هسته باقی مانده نهایی، از طریق تابش ذرات سبک و اشعه گاما برای اجتناب از فرآیند شکافت است. این کمیت به شکل زیر نوشته می شود

$$W_{sur}=P_{xn}(E_{CN}^*)\prod_{i=1}^{i_{max}=x}(\frac{\Gamma_n}{\Gamma_n+\Gamma_f})_{i,E^*} \qquad (15)$$

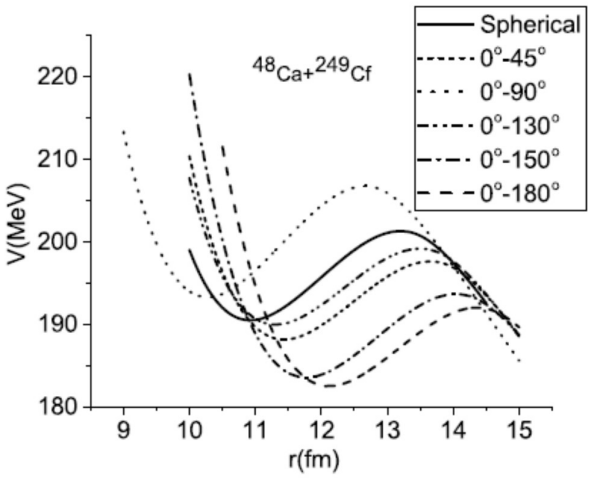
که در آن اندیس i برابرست با تعدادنوترون های منتشر شده و P_{xn} احتمال تابش xتا نوترون است.

$$P_{xn}(E_{CN}^*)=P[x]-P[x+1] \qquad (16)$$

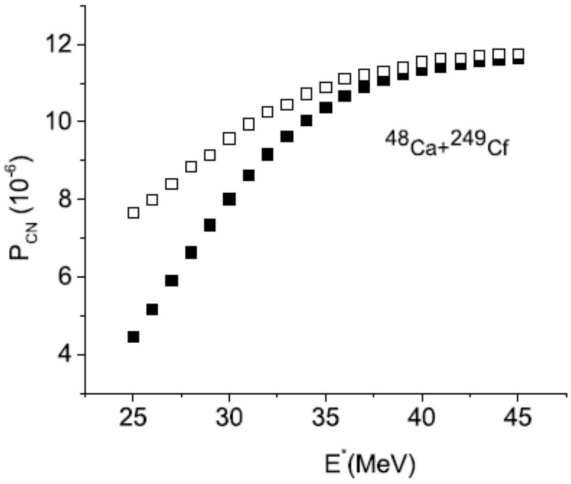
Γ_fوΓ_n و P[x] در مرجع[13] معرفی شده اند.

نتایج

در این مقاله محاسبات را برای سیستم $^{48}_{20}Ca+^{249}_{98}Cf$ انجام داده ایم. این واکنش هسته ی $^{297}_{118}Og$ را بوجود می آورند. نتایج در شکل های ۱تا ٤ نشان داده شده اند. در شکل ۱ تغییرات انرژی پتانسیل بصورت تابعی از فاصله بین هسته پرتابه و هدف برای حالت کروی و تغییر شکل یافته با جهت گیری های مختلف هسته هدف نشان داده شده است.

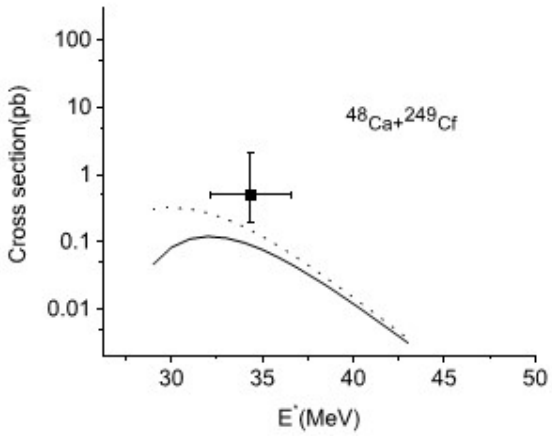


شکل۱ : تغییرات انرژی پتانسیل برحسب فاصله پرتابه و هدف.

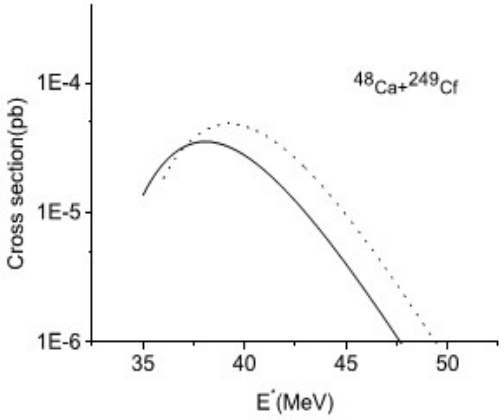


شکل۲ : تغییرات احتمال تشکیل هسته مرکب برحسب انرژی. مربع های توپر و توخالی به ترتیب مربوط به حالت کروی و تغییر شکل یافته (جهت گیری ۱۸۰ درجه) می باشند.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



شکل ۳ :تغییرات سطح مقطع گیراندازی با انرژی برای کانال *3n*



شکل٤: تغییرات سطح مقطع گیراندازی با انرژی برای کانال *4n*

همانطور که در شکل ۱ مشخص است، ارتفاع سد پتانسیل در حالتی که زاویه جهت گیری پرتابه و هدف (۹۰-۰)می باشد، در مقایسه با حالت کروی دارای ارتفاع بیشتری است. هم چنین کمترین سد مربوط به حالت تغییر شکل یافته با جهت گیری (۱۸۰-۰) می باشد. در شکل ۲ تغییرات احتمال همجوشی با انرژی برانگیختگی هسته مرکب نشان داده شده است. کاملا واضح است که احتمال تشکیل هسته مرکب در حالت تغییر شکل یافته نسبت به حالت کروی بیشتر است که با توجه به رابطه (١٤) می توان به این نتیجه رسید که مقدار سطح مقطع باقی مانده تبخیر در کانالهای 3nو 4n در مورد واکنش بررسی شده در حالت تغییر شکل یافته نسبت به حالت کروی در انرژی های مختلف بیشتر است. در شکل های ۳ و ٤ تغییرات سطح مقطع باقی مانده تبخیر در انرژی های مختلف به تر تیب در کانال 3n و 4n رسم شده است. منحنی های توپرو نقطه چین به ترتیب مربوط به ساختار کروی و ساختار تغییر شکل یافته با میانگین گیری بر روی همه ی جهت گیری ها ، می باشند. مربع توپر هم مربوط به مقدار تجربی می باشد که از مرجع [14] گرفته شده است.

نتیجه گیری

با بررسی واکنش $^{48}_{20}Ca + ^{249}_{98}Cf$ که برای تشکیل هسته ی $^{297}_{118}Og$ **بکار رفته است به** این نتیجه میرسیم که سطح مقطع باقی مانده تبخیردر کانال 3n نسبت به کانال 4nبیشتر می باشد. همچنین مشخص گردید که با در نظر گرفتن دو پارامتر تغییر شکل و جهت گیری هسته ی هدف می توان همخوانی بهتری بین نتایج تجربی و تئوری ایجاد کرد.

مرجع ها

[1] L. Öhrström and J. Reedijk, Pure Appl. Chem. **88**, 1225 (2016).
[2] V. I. Z1agrebaev andW. Greiner, Nucl. Phys. A **944**, 257 (2015).
[3] Yu. Ts. Oganessian, et al., Phys. Rev. C **79**, 024603 (2009).
[4] S. Hafman, et al., Eur. Phys. J. A **52**, 180 (2016).
[5] V. I. Zagrebaev andW. Greiner, Nucl. Phys. A **944**, 257 (2015).
[۶] Y.T.Oganessian .et al.,Phys. Rev **C72**, 034611(2005).
[7] P. Möller, A.J. Sierk, T. Ichikawa, H. Sagawa, At. Data Nucl. Data Tables 109 (2016) 1.
[8] R.K. Gupta, N. Singh, M. Manhas, Phys. Rev. C 70 (2004) 034608.
[9]J. Blocki, J. Randrup, W.J. Swiatecki, C.F. Tsang, Ann. Phys. (N.Y.) 105 (1977) 427.
[10] K. P. Santhosh and V. Safoora, Phys. Rev. C **94**, 024623 (2016).
[11] K. P. Santhosh and V. Safoora, Phys. Rev. C **95**, 064611 (2017).
[12] J.D.Jackson,Can.j.Phys.**34**,676(1956).
[13] R.Vandenbosch J.R.Huizenga, Nuclear Fission (Acadmic New York ,1973), **P.233**
[14] Yu.Ts. Oganessian, J. Phys. G, Nucl. Part. Phys. 34(2007)**R165**.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

تاثیر کسر مولی بر مشخصه های دیود نورگسیل فرابنفش بر پایه GaN

بهروز، کلهر[۱] ؛ داود، کلهر[۲] ؛ معصومه، موسی رضایی[۳]

[۱] مرکز اپتیک، جهاد دانشگاهی صنعتی شریف، تهران

[۲] دانشکده فیزیک، دانشگاه دامغان؛ دامغان

[۳] دانشکده فیزیک، دانشگاه امام خمینی، قزوین

چکیده

در این تحقیق یک دیود نور گسیل بر پایه GaN با استفاده از نرم افزار سیلواکو (اتلس) شبیه سازی شده و تاثیر کسر مولی در لایه سد کننده الکترون بر روی عملکرد آن بررسی شده است. لازم به ذکر است که لایه سد کننده الکترون از جنس $Al_xGa_{1-x}N$ می‌باشد و به منظور جلوگیری از نشت الکترون‌ها در ساختار این دیود نورگسیل قرار گرفته است. چگالی شدت توان نور خروجی و لومینسانس دیود نور گسیل به ازای مقادیر مختلف از کسر مولی Al در ترکیب $Al_xGa_{1-x}N$ شبیه سازی شده و بدست آمده است. طبق نتایج، بیشینه لومینسانس به ازای $x=۰/۳۵$ و بیشترین مقدار چگالی شدت توان نور خروجی به ازای $x=۰/۳$ می‌باشد.

The Effect of Mole Fraction on the Properties of Ultraviolet Light Emitting Diode (LED) Based on GaN

Behroz, Kalhor [1], Davood, Kalhor[2], Masoumeh, Mousa Rezaei[3]

[1] 1Optics Center of Jahad Daneshghahi Sharif, Tehran

[2]Department of Physics, University of Damghan, Damghan

[3]Physics Group, Department of Science, Imam Khomeini University, Ghazvin

Abstract

In this study, a light emitting diode (LED) based on GaN has simulated by using Silvaco (Atlas) software. The effect of mole fraction of blocking layer on the properties of LED was studied. It should be mentioned that the the $Al_xGa_{1-x}N$ has chosen as the blocking layer. The electron-blocking layer has been used for preventing of electron leakage. The optical power output and luminescence of LED with respect of increasing the Al mole fraction in the composition of $Al_xGa_{1-x}N$ was simulated. The Al mole fraction has assessed from x=0.05 to x=0.3 The results show us, maximum luminescence and output power is obtain in x=0.35 and x=0.3 respectively.

PACS No. 78

مقدمه

دیودهای نورگسیل (LED) ساخته شده بر پایه *GaN محدوده طول موجی از* فرابنفش تا سبز را پوشش می‌دهند[۱]. به علت کارایی و طول عمر بالا، استفاده از این نوع دیودهای نور گسیل به صورت تجاری گسترش یافته است[۲]. در این میان بهینه سازی دیودهای محدوده فرابنفش به دلیل کاربردهای گوناگون در صنایع شیمیایی، بیوتکنولوژی، تصویربرداری پزشکی، پاکسازی آب و هوا، ساخت نمایشگرها و حسگرها بسیار مورد توجه محققان است[۱-۳].

تحقیقات اخیر منجر به بهبود برخی از مشخصه‌های مهم در این نوع از دیودهای نورگسیل شده است[۳]. با این وجود هنوز مشکلاتی در راه ساخت و بهینه سازی آن‌ها وجود دارد که باید حل شود. برخی از این مشکلات عبارتند از پایین بودن توان نور خروجی و همچنین ضعیف بودن نرخ بازترکیب‌های نوری. استفاده از ساختارهایی با چند چاه کوانتومی به عنوان راه حلی برای این مشکلات پیشنهاد می‌شود[۳]. مهمترین مزیت استفاده از ساختار چاه‌های کوانتومی در LEDها، افزایش باز ترکیب سطحی حاملهای بار الکتریکی و به دنبال آن ارتقاء توان نور خروجی می‌باشد[٤]. اما یکی از معایبی که در

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

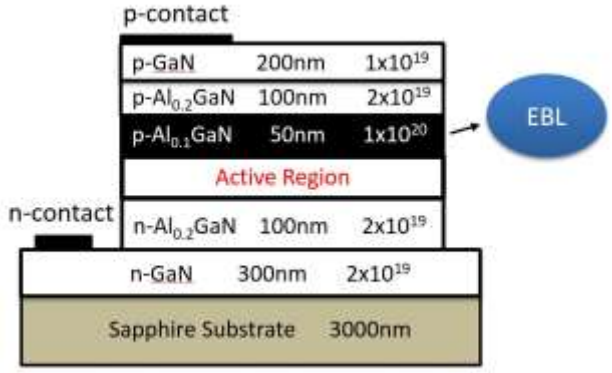
ساختارهایی با چاه کوانتومی وجود دارد، نشت الکترون‌ها هنگام تزریق الکترون و حفره از آند به کاتد می‌باشد که باعث کاهش بازترکیب‌های نوری و در نتیجه کاهش لومینسانس می‌گردد[٤-٥]. به همین منظور در ساختار آنها یک لایه با نام لایه سد کننده الکترون (EBL) بعد از چاه‌های کوانتومی قرار داده می‌شود تا مانع از نشت الکترون‌ها شود. با توجه به اینکه هدف از لایه سد کننده الکترون جلوگیری از نشت الکترون‌ها و در نتیجه افزایش شدت نور خروجی از دیودهای نورگسیل می‌باشد، لذا مشخصات این لایه که شامل جنس، ضخامت، چگالی آلایش و کسر مولی می‌باشد حائز اهمیت است.

در این مقاله ابتدا یک دیود نورگسیل بر پایه GaN در محدوده طول موج فرابنفش شبیه سازی شده و نمودار جریان-ولتاژ و نمودار طول موج آن گزارش شده است. برای اطمینان از صحت شبیه سازی، نتایج بدست آمده از شبیه سازی اولیه با یک مقاله تجربی مقایسه شده است. در دیود شبیه سازی شده لایه‌ای از جنس AlGaN و به ضخامت ۵۰ نانومتر به عنوان EBL در نظر گرفته شده است. با توجه به اینکه کسر مولی (Mole Fraction) نسبت Al در ترکیب $Al_xGa_{1-x}N$ یکی از مولفه‌های موثر در لایه EBL می‌باشد لذا در ادامه اثر تغییرات کسر مولی بر مشخصه‌های LED شبیه سازی شده مورد بررسی قرار گرفته است.

روش انجام شبیه سازی

ساختاری که در این شبیه سازی استفاده شده مطابق شکل (۱) می‌باشد. زیر لایه از جنس سافایر (Sapphire) و بقیه لایه‌ها از جنس GaN و AlGaN در نظر گرفته شده‌اند. محیط فعال این LED از چهار چاه کوانتومی به ضخامت ۳ نانومتر از جنس GaN و سه دیوار که بین چاه‌های کوانتومی قرار دارند تشکیل شده است. دیوارها از جنس $Al_{0.2}GaN$ و به ضخامت ۷ نانومتر می‌باشند. مشخصات لایه‌ها، محل اتصال آند و کاتد و همچنین محل قرار گیری لایه سد کننده الکترون (EBL)، در شکل نمایش داده شده است.

برای مشاهده نور گسیل شده از LED، بازترکیب نوری در شبیه سازی لحاظ شده است. با توجه به اینکه وجود ناخالصی در نیمرساناها باعث ایجاد ترازهای انرژی در محدوده نوار ممنوعه و در نتیجه ایجاد بازترکیب های غیر نوری می شود[٤] لذا پدیده شاتکی-رید-هال طبق رابطه (۱) در شبیه سازی در نظر گرفته شده است.



شکل۱: ساختار دیود نورگسیل شبیه سازی شده است.

$$R_{SRH} = \frac{pn - n_i^2}{TAUP0\left[n + n_i \exp\left(\frac{ETRAP}{kT_L}\right)\right] + TAUN0\left[p + n_i \exp\left(\frac{-ETRAP}{kT_L}\right)\right]} \quad (۱)$$

در رابطه (۱) ETRAP اختلاف انرژی مرکز بازترکیب و انرژی فرمی ذاتی (ET-EI)، TL دمای شبکه بر حسب کلوین و TAUN0 و TAUP0 مقادیر طول عمر الکترون و حفره می‌باشند. همچنین ni، n و p به ترتیب چگالی حامل‌های ذاتی، چگالی الکترون‌ها و حفره‌ها می‌باشند. در دیودهای نورگسیل با چگالی حاملهای بالا، پدیده اوژه به عنوان یک بازترکیب غیر تابشی بر عملکرد دیودهای نورگسیل اثر نامطلوب دارد[٤-٥]. به همین دلیل این پدیده نیز در این شبیه سازی مد نظر قرار گرفته و طبق رابطه زیر لحاظ شده است.

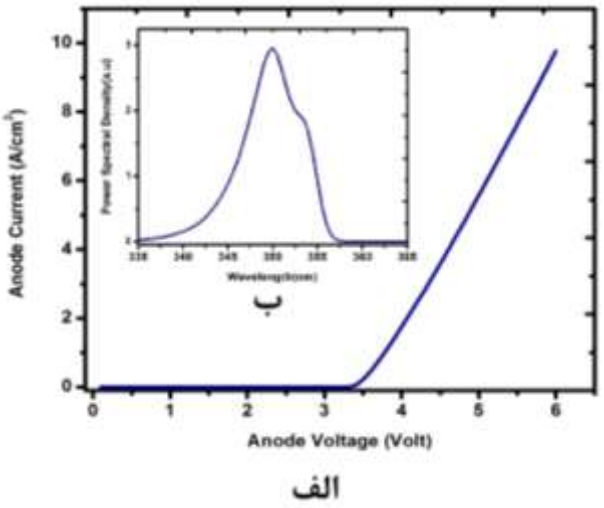
$$R_{Auger} = AUGN(pn^2 - nn_i^2) + AUGP(np^2 - pn_i^2) \quad (۲)$$

در رابطه (۲) AUGN و AUGP به ترتیب طول عمر الکترون و حفره می‌باشند. با توجه به اینکه در شبیه سازی، چگالی حامل های بار الکتریکی متغیر انتخاب شده است، لذا اختلاف چگالی بار ایجاب می‌کند که برای انتقال بار مدل پخشی لحاظ شود. همچنین با اعمال پتانسیل الکتریکی و در نتیجه وجود میدان الکتریکی ضرورت دارد که سهم سوق الکترون‌ها در هدایت الکتریکی نیز در نظر گرفته شود.

بحث و تحلیل نتایج

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

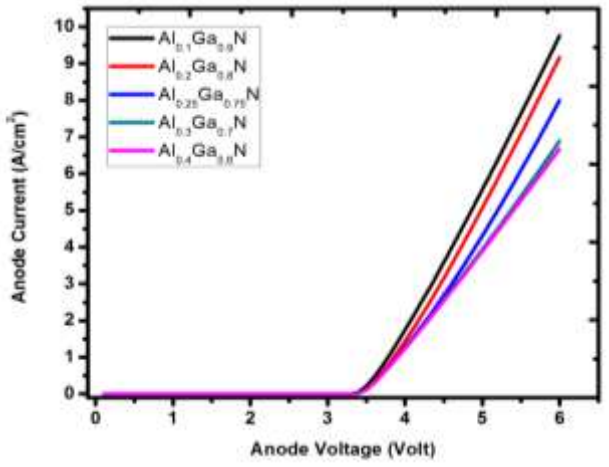
در ابتدا مشخصات دیود نورگسیل شبیه سازی شده به ازای اعمال ولتاژ ٤ ولت گزارش شده است. شکل (۲-الف) نمودار I-V را نشان می‌دهد. طبق این شکل ولتاژ آستانه هدایت ۳/٤ ولت می‌باشد که معادل گاف انرژی AlGaN است[٦].



الف

شکل۲: (الف) نمودار I-V و (ب) نمودار طول موج برای دیود شبیه سازی شده.

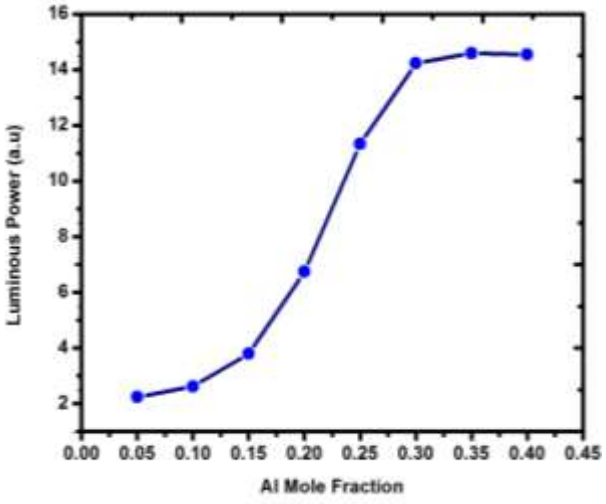
شکل(۲-ب) نشان میدهد که LED شبیه سازی شده در محدوده فرابنفش و با طول موج ۳۵۰ نانومتر می‌باشد. اطلاعات موجود در شکل(۲) که بیانگر مشخصات دیود نورگسیل شبیه سازی شده است با مرجع [۱] که یک مقاله تجربی در زمینه ساخت دیودهای نورگسیل در ناحیه طول موج فرابنفش می‌باشد مطابقت دارد. در ادامه به ازای مقادیر مختلف کسر مولی Al در ترکیب $Al_xGa_{1-x}N$ که به عنوان لایه EBL مورد استفاده قرار گرفته، شبیه سازی‌ها مجدد انجام گردیده و نتایج بدست آمده گزارش شده است. در شکل (۳) نمودار I-V بدست آمده به ازای مقادیر مختلف کسر مولی نمایش داده شده است.



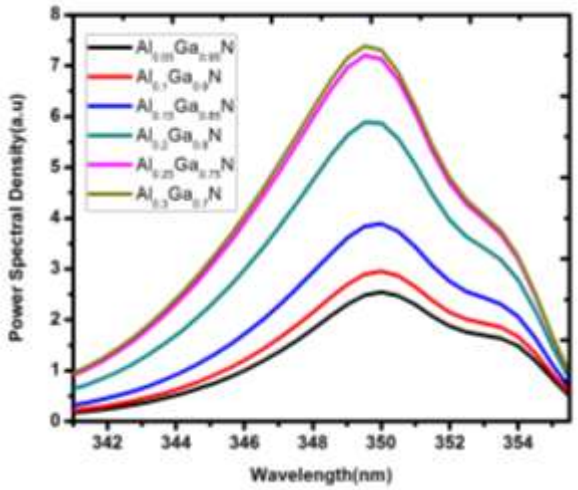
شکل۳: نمودار تغییرات I-V برای کسرمولی های مختلف.

طبق شکل (۳) با افزایش کسر مولی Al از x=۰/۱ تا x=۰/۳ مقدار جریان به طور محسوس شروع به کاهش می‌کند ولی با بیشتر شدن کسر مولی Al از مقدار۰/۳ تغییرات جریان کم می‌شود. ازطرفی این تغییرات در مقدار ولتاژ آستانه هدایت تغییر محسوسی ایجاد نکرده و همچنین خللی در رفتار نمودار I-V مشاهده نمی‌شود.

شکل (٤) تغییرات لومینسانس را به ازای مقادیر مختلف کسر مولی نشان می‌دهد. بر اساس این شکل با افزایش کسر مولی Al از مقدار x=۰/۰۵ تا x=۰/۳۵ لومینسانس با شیب زیاد افزایش پیدا می‌کند. ولی با افزایش مقدار کسر مولی Al از x=۰/۳۵ لومینسانس با شیب کمی شروع به کاهش می‌کند. بنابراین طبق شکل (٤) بیشینه لومینسانس به ازای x=۰/۳۵ قابل دستیابی است.



شکل٤: نمودار تغییرات لومینسانس برای کسرمولی های مختلف.



: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

شکل۵: نمودار تغییرات طول موج و چگالی توان خروجی برای کسرمولی های مختلف.

شکل (۵) تغییرات طول موج وچگالی شدت نور خروجی را نشان می‌دهد. طبق این شکل افزایش کسر مولی Al تاثیر محسوسی بر طول موجی خروجی نداشته است و در محدوده ۳۵۰ نانومتر می‌باشد ولی چگالی شدت توان نور خروجی با افزایش مقدار کسر مولی Al تقریبا دو برابر شده است. بر اساس شکل (۵) بیشترین مقدار چگالی شدت توان نور خروجی به ازای x=۰/۳ مشاهده شده است.

نتیجه‌گیری

در این مقاله با استفاده از شبیه سازی، تاثیر کسر مولی بر مشخصه‌های یک دیود نورگسیل در محدوده طول موج فرابنفش بر پایه GaN بررسی شد. طبق نتایج بدست آمده در لایه سد کننده الکترون با افزایش کسر مولی Al در ترکیب $Al_xGa_{1-x}N$ از x=۰/۰۵ تا x=۰/۳۵ مقادیر لومینسانس و توان نور خروجی شروع به افزایش یافته و به حالت بهینه می‌رسند ولی با افزایش کسر مولی از مقدار x=۰/۳۵ مقدار لومینسانس شروع به کاهش می‌کند. بنابراین بیشینه لومینسانس به ازای x=۰/۳۵ و بیشینه چگالی شدت توان نور خروجی به ازای x =۰/۳ قابل دستیابی می‌باشد.

مرجع‌ها

[1] W.Lin, T.Wang, J.Liang, S.Ou, D.Wuu "Analysis of the thickness effect of undoped electron blocking layer in ultraviolet LEDs" IEEE, Vol.61,NO.11, **(2014)** pp.3790-3795.

[2] J.Hwang, R.Hashimoto, S.Saito, S.Nunoue "Development of InGaN-based red LED grown on (0001) polar surface" Applied Physics Express 7, **(2014)** 071003.

[3] X.Zhang, H.Sun, Z.Li, X.Wang, T.Liu, M.Guo, Y.Hou, Z.Guo "Characteristics of AlGaN-based deep ultraviolet LED with a hole strengthened injection layer", Modern optics, **(2018)**.

[4] Y.Zhang, Z.Zhang, W.Liu, S.Tan, X. Zhang,Y. Ji, L.Wang, Z. Kyan, N.Hasanov, B. Zhu, S. Lu, X. Sun,H.Demir,"Nonradiative recombination critical in choosing quantum well number for InGan/GaN LED",OPTICS EXPRESS,Vol. 23, No.3, **(2015)**.

[5] F.Romer and B.Witzigmann, "Effect of auger recombination and leakage on the droop in InGaN/GaN quantum well LEDs", OPTICS EXPRESS,Vol. 22, No. 6, **(2014)**.

[6] Prajapati , P. Dey, T. D. Das, "The Effect of Mole-fraction on Power Spectral Density of Single Quantum well based InxGa1-xN/GaN Blue Light Emitting Diode", IEEE, 97, **(2016)** 4673-6621.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بررسی خواص اپتیکی و الکترونی نانوساختارهای بیسموت و آنتیموان با استفاده از نظریه تابعی چگالی

صابر،کورش[1]؛ رهبریزدی، شیوا [2] ؛ کاظم پور، علی [3]

[1] کارشناسی ارشد فیزیک پزشکی، دانشگاه علوم پزشکی شهید صدوقی یزد

[2] کارشناسی ارشد فیزیک، دانشگاه پیام نور استان یزد مرکز مهریز

[3] استادیار،فیزیک،دانشگاه پیام نور استان یزد مرکز مهریز

چکیده

در این مقاله، به بررسی خواص ساختاری و الکترونی دو ماده بیسموت و آنتیموان در حالت حجیم و تک لایه در فاز پایدار پرداخته‌ایم. محاسبات با استفاده از روش‌های محاسباتی کوانتومی ابتدا به ساکن مبتنی بر نظریه تابعی چگالی انجام شده است. هدف اصلی مطالعه و بررسی خواص اپتیکی از جمله قسمت‌های حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک، ضریب جذب، انعکاس، ضریب شکست، رسانندگی و تابع اتلاف برای این دو ماده می‌باشد. با بررسی تابع دی الکتریک نشان دادیم که این تابع اپتیکی شدیدا تحت تاثیر ابعاد مواد می‌باشد و چون تابع دی الکتریک پایه‌ی دیگر خواص اپتیکی است روی آنها نیز تاثیرگذار می‌باشد. به گونه‌ای که با تبدیل به حالت دوبعدی مکان قله‌های بخش موهومی تابع دی الکتریک به سمت انرژی فوتون‌های بالاتری پیش می‌روند از آنجایی که این قله‌ها جذب را نشان می‌دهند، ضریب جذب نیز افزایش می‌یابد. در پی آن رسانندگی اپتیکی و ضریب شکست و همچنین انعکاس حالت دوبعدی نسبت به حالت حجیم بیشتر می‌شود. باتوجه به نتایج به دست آمده دیدیم که با کاهش ابعاد، مواد رفتار متفاوتی از خود نشان می‌دهند. این نتایج پایه فیزیکی برای کاربرد بالقوه در وسایل اپتوالکترونیکی فراهم می‌کند.

واژه‌های کلیدی: *نظریه تابعی چگالی، بیسموت، آنتیموان، خواص اپتیکی و الکترونی*

Investigation of optical and Electronic properties of Bismuth and Antimony monolayer Using Density Function Theory

Saber,Korosh[1]; Rahbar Yazdi, Shiva [2] ; Kazempour ,Ali[3]

[1] *MSc.Medical physics, Yazd shahid Sadoughi University of Medical Sciences and Health Services*

[2] *MSc.,Physics, Department of Mehriz, Payame Noor Universiy*

[3] *Assistant Professor,Physics, Department of Mehriz, Payame Noor Universiy*

. Abstract

In this paper, the structural and electronic prosperities of Bismuth and Antimuan in the massive state and single layer were studied in a stable phase. The calculations have been done using quantum calculating methods based on the density functional theory. The main aim of this study is to study and investigate the

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

optical properties such as the real and unsubstantial parts of dielectric function, absorption coefficient, reflex, refractive index, conductivity and damp function for these both materials. Through studying the dielectric function, we indicated that this optical function is strongly under effect of the dimensions of materials and since the dielectric function is another base of the optical properties, it also affects on them. In the manner that by converting to the two dimensional state, the peak place of the unsubstantial part of dielectric function goes toward the energy of the higher photons, since these peaks indicate the absorption, the absorption coefficient is also increased. Subsequently, the optic conductivity and refractive index as well reflection of two dimensional state is increased more than massive state. Considering the obtained results, we observed that with decrease in the dimensions, material show different behavior. These results provide the physical base for the potential application in the optoelectronic means.

***Keywords**: Density functional theory, Bismuth, Antimuan, Optical and electronic properties*

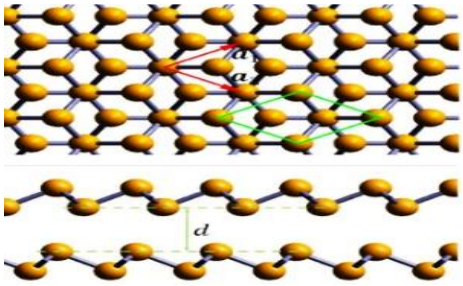
***PACS.** 70,78*

مقدمه

تک لایه بیسموت و آنتیموان متشکل از اتم‌های بیسموت و آنتیموان دارای ساختاری لانه زنبوری با پارامتر خمیدگی 1/ 75Å و 1/98Å و ثابت شبکه‌ی 4/30 Å و 3/97Å هستند.بلور بیسموت و آنتیموان همپوشانی ضعیفی بین نوارهای ظرفیت و هدایت آنها وجود دارد که به تعداد محدود الکترون‌های آزاد و حفره‌ها مربوط می‌شود.

روش و جزئیات محاسبات

کلیه‌ی محاسبات بوسیله رابطه کوهن-شم با بهینه‌سازی ساختار الکترونی در چارچوب نظریه‌ی تابعی چگالی و با استفاده از کد CASTEP از بسته‌ی نرم افزاری متریال استودیو انجام شد. با استفاده از محاسبات اصول اولیه، ویژگی‌های ساختاری و الکترونی تک‌لایه‌های بیسموت و آنتیموان مورد مطالعه قرار گرفتند.



شکل 1 :ساختار لانه زنبوری اتمی تک لایه بیسموت و آنتیموان

خواص الکترونی

ساختارهای نواری، نشان دهنده‌ی ترازهای انرژی مجازی هستند که الکترون با بردار موج k می‌تواند داشته باشد. اگر نوارهای رسانش و ظرفیت در تراز فرمی برهم مماس باشند، ماده شبه فلز است [1].

خواص اپتیکی

خواص اپتیکی یک رابطه بین توضیح میکروسکوپی و ماکروسکوپی برهمکنش بین ماده با پرتو الکترومغناطیسی در منطقه مرئی می‌باشد[2].

خواص اپتیکی از تابع دی الکتریک استخراج می‌شود که توزیع بار الکترونی را نشان می‌دهد. تابع دی الکتریک به مجموع گذارهای بین نواری(ناشی از تحریک در لبه‌های جذب) و داخل نواری(ناشی از تحریک پلاسمون‌ها) مربوط است. تابع دی‌الکتریک وابسته به فرکانس $\varepsilon(\omega)$ می‌باشد.

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1 + i\varepsilon_2(\omega) \qquad (1)$$

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

$$\varepsilon_2(\omega) = 8/2\pi w^2 \sum_{n\acute{n}} \int |p_{n\acute{n}}(k)|^2 \frac{ds}{\nabla w_{n\acute{n}}(k)} \quad (2)$$

$$\varepsilon_1(\omega) = 1 + \frac{2}{\pi} p \int_0^{\infty} \frac{\omega' \varepsilon_2(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega' \quad (3)$$

بخش حقیقی $\varepsilon_1(\omega)$ می‌تواند با استفاده از رابطه‌ی کرامرز-کروینگ استخراج شود که به قطبش الکترونی مواد و بخش موهومی $\varepsilon_2(\omega)$ شامل همه گذارهای الکترونی از حالات اشغال شده به اشغال نشده می‌باشد.

ضریب جذب نشان می‌دهد که چه مقدار یک پرتو نور می‌تواند توسط ماده جذب شود. زمانیکه پرتو الکترومغناطیسی انرژی کافی برای بالابردن الکترون در میان گاف نواری را ندارد جذب صورت نگرفته است[3].

$$a(\omega) = \frac{4\pi k(\omega)}{\lambda} \quad (4)$$

تابع بازتاب نشان‌دهنده پراکندگی در ماده و مکمل جذب می‌باشد. بازتاب به طول موج نور، مسیر نور ورودی، قطبش نور، نوع ماده (فلز، نیمه فلز، ...)، وضعیت شیمیایی و ساختار ماده، حالت ماده و سطحش (دما، ناهمواری سطح، درجه اکسایش و آلایش) بستگی دارد[4].

$$R(\omega) = \left|\frac{\hat{n}-1}{\hat{n}+1}\right| = \frac{(n-1)^2+K^2}{(n+1)^2+K^2} \quad (5)$$

تابع اتلاف انرژی اتلاف شده بعلت عبور سریع الکترون در ماده می‌باشد. اتلاف انرژی ناشی از ترکیب پیچیده الکترون-های برانگیخته منفرد و برانگیختگی‌های جمعی (پلاسمون) می باشد.

$$L(\omega) = \frac{\varepsilon_2(\omega)}{\varepsilon_1^2(\omega)+\varepsilon_2^2(\omega)} \quad (6)$$

وقتی حالت‌های الکترونی اشغال شده به سمت حالت‌های الکترونی اشغال نشده در بالای سطح فرمی بوسیله فوتون‌های جذب شده برانگیخته شدند به این گذار بین نواری رسانندگی اپتیکی گفته می‌شود.

$$\sigma(\omega) = \frac{2W_{cv}\hbar\omega}{(E_0^2)} \quad (7)$$

نتیجه گیری

اثر محدود شدگی کوانتومی بر ابعاد:

ماده ازحالت رسانا به نیمه‌رسانا تبدیل می‌شود و ترازها گسسته‌تر می‌شود، فاصله ترازها بیشتر می‌شود و گاف نواری بوجود می‌آید.

در بخش موهومی تابع دی الکتریک پیک‌ها بسمت انرژی فوتون‌های بالاتری خواهند رفت و ثابت دی الکتریک افزایش می‌یابد.

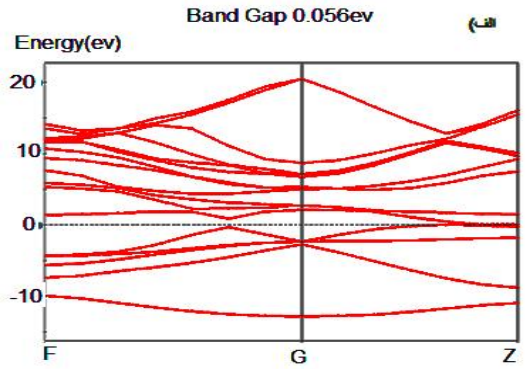
جذب اپتیکی افزایش می‌یابد.

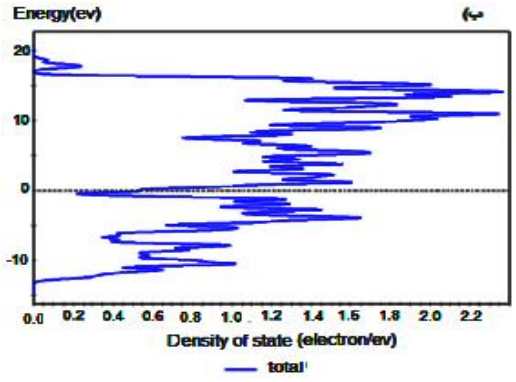
رسانندگی اپتیکی بالاتر در انرژی فوتون کمتر خواهیم داشت.

طیف تابع اتلاف گسسته‌تر می‌شود.

پلاسمون‌ها با شدت کمتری رخ می‌دهند.

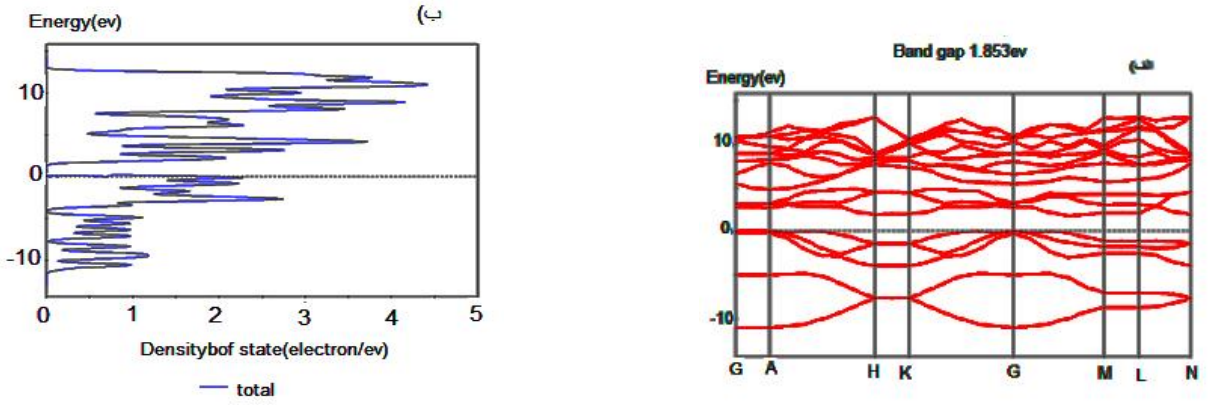
فرکانس پلاسمون‌ها بسمت انرژی فوتون‌های بیشتری شیفت پیدا می‌کند.



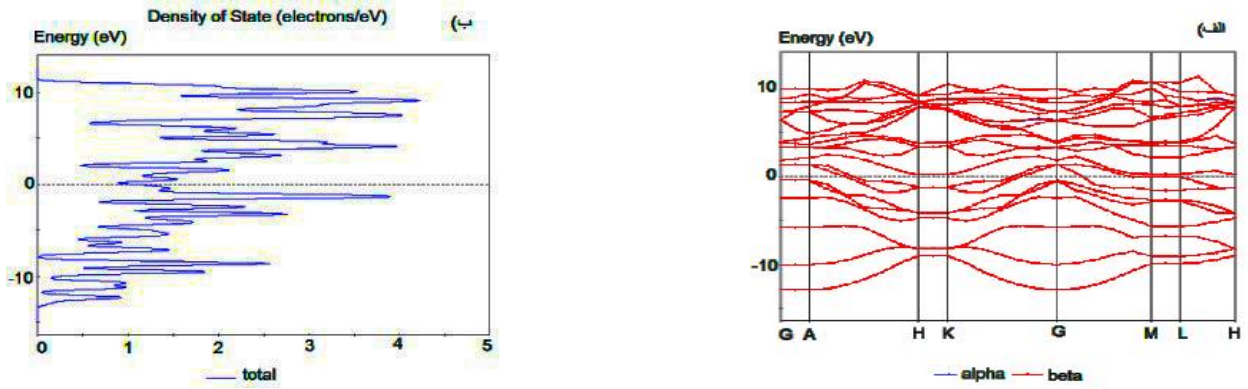


این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد :
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

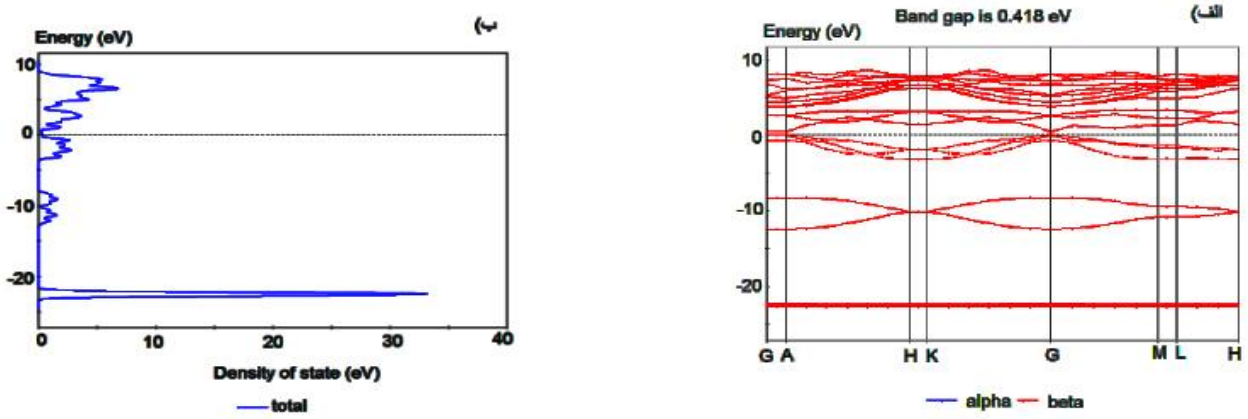
شکل2: الف) ساختار نواری ب) چگالی حالات در حالت حجیم ماده آنتیموان در اولین منطقه‌ی بریلوئن $(-\frac{\pi}{L},\frac{\pi}{L})$



شکل 3 : الف) ساختار نواری ب) چگالی حالات تک لایه انتیموان



شکل4: الف) ساختار نواری ب) چگالی حالات در حالت حجیم ماده بیسموت در اولین منطقه‌ی بریلوئن $(-\frac{\pi}{L},\frac{\pi}{L})$



شکل 5 : الف) ساختار نواری ب) چگالی حالات تک لایه بیسموت

مراجع

[1] Kotov,V. N.; Uchoa, B.; Pereira,V. M.; Guinea, F.; Neto, A. C., *Reviews of modern physics*, (2012) 84,1067.
[2] G. Grosso and G. Pastori Parravicini, *Solid State Physics* (Academic Press, 2000).
[3] Rahman, Md, and Md Rahman. "*The structural, elastic, electronic and optical properties of MgCu under pressure: A first-principles study*."arXiv preprint arXiv.
[4] I.J. Wu, G.Y.Guo, Phys. Rev. B 76(2007) 035343

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بررسی سریع و کیفی عناصر یک نمونه از دریاچه نمک قم به روش فعالسازی نوترونی

بیات، اسمعیل[۱]؛ دیوانی ویس، نازیلا[۲]؛ قربانی؛ پرویز[۳]

[۱]پژوهشگاه علوم و فنون، سازمان انرژی اتمی ایران، [۲]گروه فیزیک دانشگاه بیرجند، [۳]دانشگاه آزاد، واحدعلوم و تحقیقات

چکیده

آنالیز سریع مواد در زمینه های تحقیقاتی و صنعتی گوناگون همواره مورد نیاز است. نمونه ارایه شده از دریاچه نمک قم، جهت آنالیز سریع عنصری، توسط آنالیز گامای تاخیری حاصل از فعالسازی نوترون بطور کیفی مورد بررسی قرار گرفت. فعالسازی توسط یک چشمه ^{241}Am-Be با اکتیویته 20Ci صورت گرفت. طیف گامای نمونه توسط یک آشکارساز HPGe با بازده نسبی ۴۰ درصد ثبت گردید. کل طیف، جهت دقت بیشتر، بطور دستی آنالیز گردید. در نمونه بجز عناصر سدیم و کلر، عنصر شاخص دیگری وجود نداشت. زمان صرف شده از دریافت نمونه تا ارایه نتایج آنالیز طیف، کمتر از سه ساعت بود.

واژه های کلیدی: *آنالیز کیفی، فعالسازی نوترونی، نمونه نمک، آشکارساز HPGe*

Quick and qualitative study of the elements of a sample of Qom salt lake by neutron activation method

Bayat, Esmaeil [1]; Divani Veis, Nazila [2]; Ghorbani, Parviz [3]

[1] Research Institute of Science and Technology, AEOI, [2] Physics Dep., University of Birjand, [3] Sciences & Research Branch of Azad University

Abstract

Quick analysis of materials in various research and industrial fields is always needed. The sample presented from Qom Salt Lake, for quick elemental analysis, was qualitatively evaluated by delayed gamma analysis resulting from neutron activation. Activation was performed by a ^{241}Am-Be source with an activity of 20Ci. The sample gamma spectrum was recorded by an HPGe detector with a relative efficiency of 40%. The whole spectrum was manually analyzed for greater accuracy. In the sample, there was no other significant element other than sodium and chlorine. It took less than three hours from receiving the sample to presenting the results of spectrum analysis.

***Keywords**: Qualitative Analysis, Neutron Activation, salt Sample, HPGe detector.*

PACS No. 29

مقدمه

آنالیز به روش فعالسازی نوترونی (NAA) یک روش قدرتمند برای آنالیز نمونه‌ها و تعیین کیفی و کمی عناصر موجود در آنهاست. اساس این روش بر پایه تبدیل عناصر مختلف موجود در نمونه به ایزوتوپ‌های رادیواکتیو آن است که در اثر پرتودهی با چشمه‌های نوترونی یا راکتور هسته‌ای انجام می‌شود. روش NAA برحسب اینکه پرتو گامای حاصل از فعالسازی در حین پرتودهی با نوترون و یا مدتی بعد از اتمام پرتودهی اندازه‌گیری شود به دو روش PGNAA و DGNAA تقسیم‌بندی می‌شود. تکنیک PGNAA به دلیل نیاز به حفاظسازی آشکارساز در مقابل تابش نوترون و نیز بازشدن کانال‌های واکنشی مختلف و ایجاد تداخل، پیچیدگی بسیار بیشتری دارد [۱و۲و۳]. روش

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

DGNAA نسبت به زمان انعطاف‌پذیر است. چنانچه حساسیت رادیونوکلوئید با نیمه‌عمر بلند با رادیونوکلوئید با نیمه‌عمر کوتاه تداخل داشته باشد، می‌توان با گذر زمان و واپاشی رادیونوکلوئید کوتاه عمر، آنالیز را بهبود داد.

آنالیز سریع که عموماً کیفی می‌باشد در اکتشاف معادن، زمین شناسی و ... مورد کاربرد می‌باشد. اخیرا نمونه‌هایی از دستگاه‌های XRF پرتابل بدین منظور ساخته و بکار گرفته شده‌اند [٤]. اما نفوذ کم اشعه ایکس، منجر به آنالیز سطحی نمونه می‌گردد و بعضاً اشتباهاتی در تخمین عناصر موجود در نمونه ایجاد می‌کند. نوترون به علت نفوذ بسیار بالا، عمق زیادی از نمونه را مورد تابش قرار داده و گامای حاصل از فعالسازی نیز، انرژی کافی جهت خروج از نمونه و ثبت توسط آشکارساز را دارد. در این زمینه مقایسه‌هایی نیز انجام شده است [٥]. در صورتی که از یک مولد نوترون‌سیلد استفاده شود، به راحتی می‌توان آنالیز نمونه را در محل و با دقت خوبی انجام داد. در این حالت با حفاظ‌گذاری آشکارساز امکان پیاده‌سازی روش PGNAA نیز وجود دارد. در این پژوهش، آنالیز سریع یک نمونه نمک از دریاچه نمک قم و شناسایی عناصر موجود در آن توسط روش DGNAA مورد بررسی قرار گرفت. هدف از آنالیز، بررسی کیفی و سریع نمونه بوده است تا بتوان به نوعی، عملکرد سامانه را در حالت پرتابل ارزیابی نمود. لذا نمونه‌سازی در این حالت نیاز نمی‌باشد. برای انتخاب آشکارساز، با درنظر گرفتن قدرت تفکیک، بازدهی، نیاز به خنک‌سازی و هزینه، گزینه‌های مختلفی وجود دارد که بطور معمول در این زمینه از آشکارساز HPGe استفاده می‌شود [٦].

روش کار

مقدار۵۵۰گرم نمونه نمک بدون فرآیند خشک کردن، داخل یک ظرف پلاستیکی نازک قرار داده شد. آشکارساز مورد استفاده، HPGe پرتابل نوع n، با بازده نسبی٤٠درصد و پنجره بریلیوم بود. آشکارساز فاقد حفاظ‌گذاری برای کاهش تابش زمینه بود تا اثر زمینه روی طیف و امکان آنالیز پرتابل بررسی گردد. سخت افزار الکترونیک از نوع دیجیتال بوده و با استفاده از باتری قابل شارژ، مقدار HV مورد نیاز آشکارساز و تغذیه مدارات ثبت داده را تامین می‌کند. کالیبراسیون انرژی توسط چشمه‌های ^{60}Co، ^{137}Cs و ^{241}Am انجام گرفت. فعالسازی عناصر نمونه توسط چشمه نوترون ^{241}Am-Be با اکتیویته 20Ci و شار نوترون $4.4x10^{7}$ n/s صورت پذیرفت. با قرار دادن صفحات پلی‌اتیلن و گرافیت به عنوان بازتابنده، شار نوترون در محل نمونه افزایش داده شد [٧]. در ابتدا با استفاده از نرم‌افزار GAS طیف گامای حاصل آنالیز گردید [٨]. اما با توجه به احتمال همپوشانی قله‌ها، جهت دقت بیشتر برای این نمونه، طیف بصورت دستی نیز قله‌یابی شده و تطابق آن با عناصر مختلف با استفاده از جداول گامای تاخیری [٩ و ١٠] مورد بررسی قرار گرفت. شکل١ قرارگیری نمونه نمک را در مقابل آشکارساز نشان می‌دهد.

مراحل انجام کار به شرح ذیل می‌باشد:

- ثبت طیف تابش زمینه
- ثبت طیف گامای نمونه نمک (قبل از فعالسازی)
- پرتودهی نوترونی نمونه نمک به مدت دو ساعت
- قراردادن نمونه مقابل آشکارساز و ثبت طیف گامای تاخیری نمونه در دو بازه زمانی ١٢٠٠ ثانیه‌ای متوالی



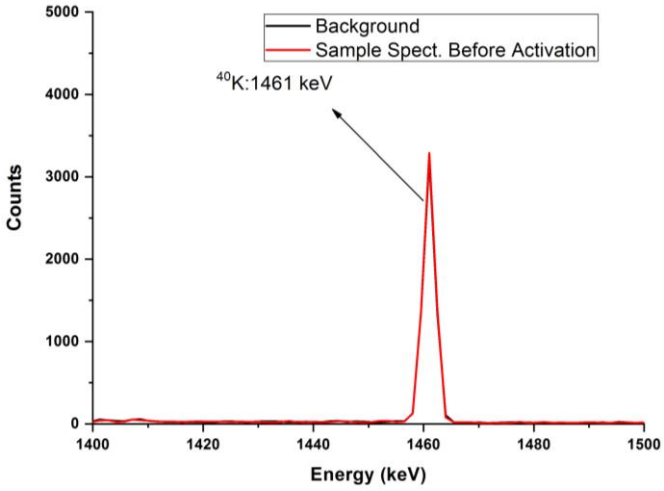
شکل١. نمونه نمک و قرارگیری آن در مقابل آشکارساز.

نتایج

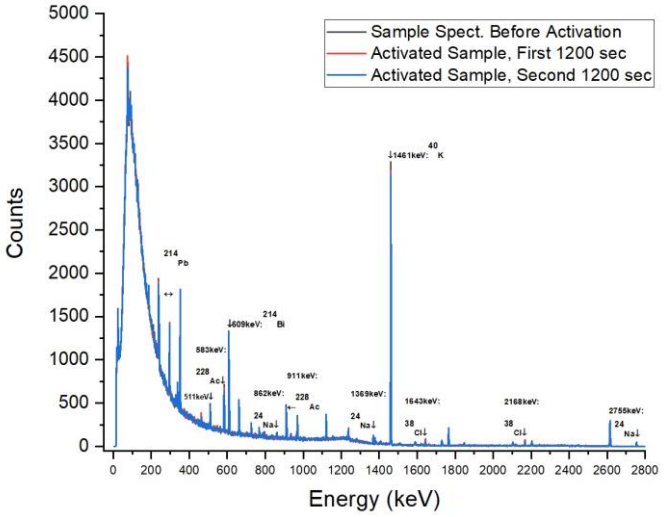
در شکل٢ طیف نمونه قبل از فعالسازی، در ناحیه گامای ^{40}K آورده شده است. دیده می‌شود که با میزان ^{40}K ثبت شده (٣٢٨٩ شمارش) برای تابش زمینه محیط اختلافی ندارد. میزان سطح زیر قله بعد از فعالسازی طی دو بازه زمانی شمارش، به ٣١٨٧ و ٣١٤٧ کاهش یافت که کمتر از مقدار تابش زمینه است و نتیجه می‌دهد پتاس، داخل نمونه نمک در حد دیگر نمونه‌های طبیعی است. در شکل٣ طیف‌های نمونه بعد از پرتودهی در دو زمان ١٢٠٠ ثانیه متوالی و مقایسه آن با طیف قبل از پرتودهی آورده شده است.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

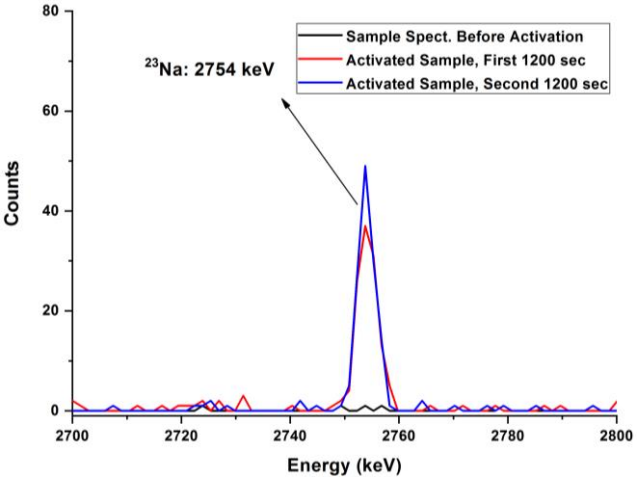
عناصر رایج در تابش زمینه در طیف ها دیده می‌شوند. شمارش سطح زیر قله‌ها در سه حالت ذکر شده اختلاف معنا داری نداشتند.



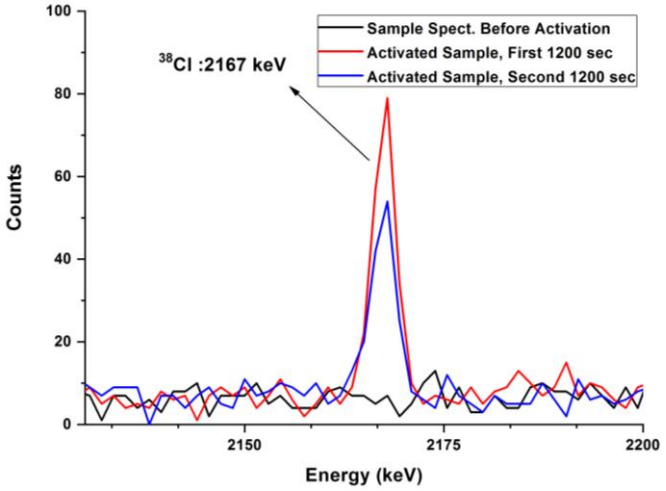
شکل۲. طیف گامای ^{40}K قبل از پرتودهی و مقایسه آن با ^{40}K محیط.



شکل۳. طیف‌های نمونه قبل از فعالسازی و بعد از فعالسازی در دو زمان متوالی.



شکل٤. طیف گامای نمونه در ناحیه قله 2754 keV سدیم.



شکل۵. طیف گامای نمونه در ناحیه قله 2167 keV کلر.

کاهش شمارش سطح زیر قله‌های طبیعی در نمونه اکتیو شده، ناشی از افزایش اثر زمان مرده آشکارساز، به دلیل افزایش آهنگ شمارش در نمونه‌های اکتیو شده است. در شکل‌های ٤ و ٥ ناحیه طیف مربوط به عناصر کلر و سدیم آورده شده است. بنابراین همانگونه که از یک نمونه نمک انتظار می‌رفت، این قله‌ها بخوبی قابل مشاهده می‌باشند.

بحث و نتیجه گیری

در آنالیز طیف گامای تاخیری مربوط به نمونه دریاچه نمک قم، قله‌های عناصر کلر و سدیم بطور شاخص وجود دارند. بطور مثال قله انرژی 1643keV به وضوح قابل مشاهده می‌باشد. با توجه به کاهش شمارش در ۱۲۰۰ ثانیه دوم نسبت به ۱۲۰۰ ثانیه اول، نیمه‌عمر تلاشی حدود ۳۰ دقیقه خواهد بود. این انرژی و قله انرژی 2168keV ناشی از ^{38}Cl با نیمه‌عمر 37.24 min است که نتیجه گیراندازی نوترون در ^{37}Cl می‌باشد. مقایسه زمینه پرتویی با طیف نمونه قبل از فعالسازی نشان می‌دهد که قله انرژی 1461keV مربوط به ^{40}K بدون تغییر مانده است و این یعنی اینکه نمونه نمک حاضر فاقد پتاسیم می‌باشد.

بررسی کل طیف نشان داد عنصر معدنی خاصی مانند منگنز، گوگرد، آرسنیک و... در نمونه وجود ندارد. این پژوهش نشان داد که می توان به سرعت عناصر یک نمونه مجهول را شناسایی کرده و آنگاه در صورت نیاز، به آنالیزهای زمان بر و پر هزینه اقدام

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

نمود. در صورت وجود یک مولد نوترون‌سیلد، امکان آنالیز به این روش در محل و در هر نقطه‌ای از کشور قابل انجام است. این پژوهش با هدف بررسی برتری روش آنالیز نوترونی در محل، نسبت به روش هایی مانند XRF پرتابل است که از کل حجم bulk اطلاعات تولید می‌شود و لذا در معدنیابی و بررسی غنای رگه‌ها، می تواند کاربردی باشد. با توجه به اینکه در دانشگاه‌های مختلف کشور، چشمه نوترون و آشکارساز وجود دارد. این مقاله سعی نموده نشان دهد بدون نیاز به امکانات پیشرفته مانند بیم نوترونی راکتور، می‌توان آنالیز اولیه (کیفی) برخی نمونه‌ها (معمولاً معدنی) را بسرعت انجام داده و در صورت نیاز نمونه جهت آنالیز دقیقتر به مراکز مربوطه ارسال شود.

مرجع‌ها

[1] E. Bayat, H. Afarideh, F. Abbasi Davani, N. Ghal–Eh, “A quality survey on different shielding configurations of gamma ray detector used with a portable PGNAA system”, *Radiation Physics and Chemistry*, March 2016, vol. **120**, pp. 7-1.

[2] P. Ghorbani, D. Sardari, E. Bayat, V. Doostmohammadi, “Neutron Beam Preparation with Am-Be Source for Analysis of Biological Samples with PGNAA Method”, *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry* **291** (2012) 839–842.

[۳] تورنگ، مهدی؛ دوست‌محمدی، وحید؛ بیات، اسمعیل؛ "بررسی خطای ناشی از اثر هیدروژن در آنالیز کمی مواد به روش PGNAA"، *کنفرانس فیزیک ایران، دانشگاه بوعلی سینا همدان*، شهریور ۱۳۸۹.

[4] M. Rincheval, D. R. Cohen, F. A. Hemmings, “Biogeochemical mapping of metal contamination from mine tailings using field-portable XRF”, *Science of The Total Environment*, volume **662**, 20 April 2019, Pages 404-413.

[5] E. Eftekhari Zadeh, S. A. H. Feghhib, and E. Bayat, “Determination of the Major, Minor, and Trace Element Mass Fractions in Iranian Cement by INAA and WDXRF”, *Radiochemistry*, 2016, Vol. **58**, No. 2, pp. 216–220.

[٦] قربانی، پرویز؛ بیات، اسمعیل؛ سرداری، داریوش؛ دوست محمدی، وحید، "مقایسه بین آشکارسازهای NaI، BGO و HPGe جهت آنالیز کادمیم در نمونه کبد در محل به روش PGNAA"، *اولین کنفرانس بین‌المللی فیزیک پزشکی، دانشگاه شیراز*، آبان ۱۳۹۰.

[۷] قربانی، پرویز؛ بیات، اسمعیل؛ سرداری، داریوش؛ دوست محمدی، وحید، "افزایش شار نوترون گرمایی در نمونه با استفاده از بازتابنده‌های نوترون جهت بهبود آنالیز PGNAA"، *کنفرانس فیزیک ایران، دانشگاه ارومیه*، شهریور ۱۳۹۰.

[۸] جمیلی، سعید؛ بیات، اسمعیل؛ روشن، محسن؛ علیپور، زهرا؛ "طراحی و نگارش نرم افزار GAS جهت آنالیز طیف گامای آشکارسازHPGe"، *بیست و پنجمین کنفرانس هسته‌ای ایران، دانشگاه ازاد بوشهر*، اسفند ۱۳۹۷.

[9] Neutron Activation Analysis Information Document, Corvallis (USA): Radiation Center, Oregon State Univ., 2003.

[10] IAEA-TECDOC-564; 252 pp; Date Published: 1990.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مطالعه سیستماتیک رفتار وابسته به انرژی سطح مقطع‌های همجوشی یون-سنگین برپایه اثرات جفت-شدگی کانال‌ها: ارائه مدلی جدید برای پتانسیل هسته-هسته

قرائی، رضا؛ شهرکی فرخنده، معین

گروه فیزیک دانشگاه حکیم سبزواری

چکیده

برپایه دیدگاه جفت-شدگی کانال‌ها و با فرض جفت-شدگی با حالت‌های برانگیخته کم انرژی 2^+ و 3^- در هر دو هسته پرتابه و هدف، به مطالعه سیستماتیک نقش اثرات فیزیکی ضریب کشش سطحی و شعاع میانگین هسته‌ها برروی رفتار وابسته به انرژی سطح مقطع‌های همجوشی یون-سنگین پرداخته‌ایم. نتایج بدست آمده نسخه اصلاح شده‌ای از پتانسیل هسته-هسته را در چارچوب فرمالیزم مجاورت ارائه می‌دهد که قادر است داده‌های آزمایشگاهی سطح مقطع همجوشی را برای تعداد قابل توجهی از واکنش‌های یون-سنگین با دقت خوبی بازتولید کند.

واژه‌های کلیدی: واکنش‌های یون-سنگین، سطح مقطع‌های همجوشی، مدل پتانسیل مجاورت، اثرات جفت-شدگی کانال‌ها

A systematic study of the energy-dependent behavior of heavy-ion fusion cross sections using the coupled-channel effects: a new nucleus-nucleus potential

Gharaei, Reza; Shahraki Farkhonde, Moein

Department of Physics, Hakim Sabzevari University

Abstract

Using the coupled-channel approach and by assuming the couplings to the low-lying 2^+ and 3^- states in both target and projectile, the role of the nuclear surface tension coefficient and mean radius of interacting nuclei is systematically analyzed in the heavy-ion fusion cross sections The obtained results present a modified version of the nucleus-nucleus potential within the framework of the proximity formalism that can reproduce the experimental data of the fusion cross sections for different heavy-ion reactions with good accuracy.

***Keywords**: Heavy-ion reactions, fusion cross sections, proximity potential model, coupled-channels effects*
PACS No. 24

مقدمه

مطالعه واکنش‌های همجوشی یون-سنگین همواره از موضوعات مورد توجه محققان فیزیک هسته‌ای در طول سال‌های اخیر بوده است. مطالعات انجام شده در این زمینه حاکی از آن است که پتانسیل هسته-هسته یکی از مهم‌ترین ابزارهای تئوری برای آنالیز واکنش-های همجوشی می‌باشد. چراکه ثابت شده است هر اندازه مدل پتانسیل بکاررفته در توصیف برهم‌کنش هسته-هسته دقیق‌تر باشد، به همان نسبت پیش‌بینی‌های ارائه شده برای داده‌های تجربی سطح مقطع همجوشی دقیق‌تر خواهد بود. یکی از کاربردی‌ترین و در عین حال ساده‌ترین رویکردهای تئوری برای محاسبه این پتانسیل "مدل مجاورت" [۱] است. از مهم‌ترین مزایای این مدل، وجود پارامترهای قابل تنظیم در بخش‌های مختلف آن است که امکان آنالیز نقش اثرات فیزیکی مختلف همچون شعاع مؤثر، کشش سطحی و پخشیدگی سطح هسته‌ها در طول فرایند همجوشی را فراهم می‌کند. محققان در طول سال‌های اخیر بواسطه بررسی نقش چنین اثراتی موفق به معرفی نسخه‌های متعددی از پتانسیل‌های مجاورت شده‌اند [۲,۳]. نکته‌ای که در این بین می‌بایست به آن توجه داشت این است که در اکثر مطالعات سیستماتیکی که تاکنون برای معرفی نسخه‌های جدید این مدل پتانسیل انجام شده، همخوانی میان داده‌های تئوری و تجربی ارتفاع و محل سد همجوشی ملاکی برای تعیین برتری یک مدل نسبت به سایرین بوده است [۳,٤]. این درحالی است که یافته‌های آزمایشگاهی آشکار می‌سازند که سطح مقطع‌های همجوشی تنها

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

کمیتی هستند که امکان اندازه‌گیری مستقیم آنها در طی آزمایش وجود دارد. در این شرایط اطلاعات مربوط به سدهای همجوشی در واکنش‌های مختلف را می‌بایست بعنوان داده‌های تجربی غیرمستقیمی تلقی کرد که از سطح مقطع‌های آزمایشگاهی استخراج می‌شوند. با علم به این مفاهیم، بدیهی است که تلاش برای دستیابی به یک نسخه جدید از فرمالیزم مجاورت برپایه همخوانی میان داده-های تئوری و تجربی سطح مقطع همجوشی می‌تواند از ارزش فیزیکی بالاتری نسبت به مطالعات انجام شده برخودار باشد. موضوعی که در مقاله حاضر آنرا دنبال کرده و تلاش کردیم تا با محوریت همخوانی میان داده‌های تئوری و تجربی کمیت مذکور برای تعداد ۱۸۱ واکنش همجوشی یون-سنگین در محدوده جرمی $30 < Z_1Z_2 < 2460$، به بررسی نقش اثرات فیزیکی پخشیدگی سطح هسته‌ها و همچنین کشش سطحی هسته‌ها پرداخته و نسخه جدیدی از فرمالیزم مجاورت را ارائه دهیم.

روش کار:

نخستین نسخه فرمالیزم مجاورت در سال ۱۹۷۷ و برپایه نظریه نیروهای مجاورت معرفی گردید [۱]. برپایه این مدل که با نام "Prox.77" شهرت دارد، بخش هسته‌ای پتانسیل برهم‌کنشی کل بصورت زیر تعریف می‌شود،

$$V_N(r)=4\pi\gamma\,\bar{R}b\Phi\left(\frac{r-C_1-C_2}{b}\right) \qquad (۱)$$

که در آن حاصل‌ضرب $4\pi\gamma b\bar{R}$ بخش وابسته به شکل و هندسه‌ی هسته‌های برهم‌کنشی می‌باشد و $\Phi\left(\frac{s}{b}\right)$ یک تابع بدون بعد به نام تابع جهانی است که از طریق معادله (۶) مرجع [۳] قابل محاسبه خواهد بود. بخش هندسی این فرمالیزم شامل پارامترهای ضریب انرژی سطحی γ، ضخامت سطح b و شعاع کاهش یافته $\bar{R}$ است که جزئیات مربوط به نحوه محاسبه هر یک از آنها در مرجع [۳] قابل مشاهده می‌باشد. نتایج مطالعات سیستماتیک مختلف آشکار می‌سازد که نسخه اصلی پتانسیل مجاورت مقادیر ارتفاع سد همجوشی را بالاتر از داده‌های تجربی متناظر پیش‌بینی می‌کند. تحت این شرایط انتظار خواهیم داشت که مقادیر سطح مقطع‌همجوشی حاصل از این مدل پایین‌تر از داده‌های آزمایشگاهی متناظر قرار گیرند، بعنوان مثال مراجع [۳,۵] را ملاحظه نمایید. برای اصلاح این نقیصه، براساس مراجع [۲,۶,۷]، تعاریف جدیدی از دو بخش شعاعی $\bar{R}$ و ضریب کشش سطحی γ را در فرمالیزم مدل Prox. 77 اعمال نموده‌ایم. تحت این شرایط، فرم اصلاح شده‌ای "Prox. New 2020" نامگذاری کرده‌ایم. خاطر نشان می‌شود که در این مدل اصلاح شده برای تعیین شعاع میانگین $\bar{R}$ از تعریف زیر بهره گرفته‌ایم [۲,۶]،

$$R = C_1C_2/(C_1+C_2) \qquad (۲)$$

که در آن C_i برای هر یک از هسته‌ها بصورت زیر تعریف می‌شود،

$$C_i = c_i\left(1-\frac{N_i}{A_i}t_i^2\right) \qquad (۳)$$

$$c_i = R_i\left(1-\frac{7b}{2R_i}-\frac{48b^4}{9R_i^4}\right) \qquad (۴)$$

در این تعریف، برای شعاع مؤثر R_1 و R_2 برحسب پارامتر عدم تقارن A_s هم داریم،

$$R_i = \left(1.2332A_i^{1/3}+2.8961A_i^{-2/3}-0.18688A_i^{1/3}A_s\right) \qquad (۵)$$

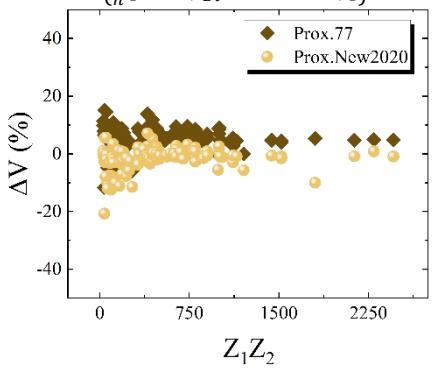
علاوه براین، ضریب کشش سطحی γ در مدل Prox. New 2020 به شکل زیر تعریف می‌گردد [۷]،

$$\gamma = 1.86109\left(1-0.2885\left(\frac{N-Z}{N+Z}\right)\right) \qquad (۶)$$

در اینجا N و Z به ترتیب به عدد نوترونی و پروتونی هسته مرکب اشاره دارد. نتایج محاسبات انجام شده برای مجموعه ۱۸۱ واکنش انتخابی حاضر نشان می‌دهند که اعمال هر یک از تغییرات معرفی شده در بخش شعاعی و ضریب کشش سطحی، باعث کاهش ارتفاع سدهای همجوشی حاصل از مدل Prox. 77 و بهبود توافق میان داده‌های تئوری و تجربی در محدوده جرمی انتخابی می‌شود. تحت این شرایط قابل درک خواهد بود که احتساب همزمان این دو تغییر در غالب استفاده از مدل Prox. New 2020، موجب دستیابی به نتایج دقیق‌تری از داده‌های مربوط به سدهای همجوشی خواهد شد. با این وجود برای دستیابی به درک بیشتر، در شکل (۱)، درصد اختلاف نسبی میان مقادیر تئوری و تجربی ارتفاع سد همجوشی

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

حاصل از مدل‌های پتانسیل Prox. 77 و Prox. New 2020 را بصورت تابعی از حاصل‌ضرب Z_1Z_2 سیستم‌های همجوشی انتخابی رسم نموده‌ایم. همانگونه که از این شکل هم بخوبی قابل درک است، استفاده از تعاریف جدید شعاع میانگین $\overline{R}$ و ضریب γ در نسخه اصلی مدل مجاورت موجب کاهش قابل توجه اختلاف میان داده-های تئوری و تجربی V_B شده است. بطوریکه میزان انحراف استاندارد داده‌های تئوری از تجربی، از حد σ=٤,٠٧ در مدل Prox. 77 به σ=١,٩٨ در مدل اصلاح شده Prox. New 2020 کاهش می‌یابد، در اینجا $\sigma = \left\{\frac{1}{n}[\sum_{i=1}^{n}(V_{Bi}^{\mathrm{Exp}} - V_{Bi}^{\mathrm{Theor}})]\right\}^{1/2}$.



شکل۱: میزان انحراف بین مقادیر تئوری و تجربی ارتفاع سد همجوشی برحسب Z_1Z_2 برپایه نسخه‌های اصلی و اصلاح شده پتانسیل مجاورت.

با وجود توافق‌های بدست آمده، اما همانگونه که قبلاً نیز بدان اشاره شد تمرکز محاسبات انجام شده در این تحقیق برروی آنالیز رفتار وابسته به انرژی سطح مقطع‌های همجوشی در واکنش‌های مختلف است. بنابراین برای دستیابی به این هدف، مقادیر تئوری سطح مقطع را برپایه دیدگاه جفت-شدگی کانال‌ها[1] [۸] محاسبه نموده‌ایم. اساس این مدل که بعنوان یکی از پرکاربردترین رویکردهای تئوری در زمینه مطالعه سطح مقطع‌های همجوشی واکنش‌های یون-سنگین شناخته می‌شود، مبتنی بر اثرات جفت-شدگی میان درجات آزادی ذاتی هسته‌ها (همانند مدهای ارتعاشی و دورانی) و فاصله نسبی میان آنهاست. هاگینو و همکارانش در سال ۱۹۹۹ توانستند کد برنامه نویسی دقیقی را برای حل معادلات CC و تعیین سطح مقطع‌های همجوشی به ازای مقادیر مختلف انرژی فرودی ارائه دهند که امروزه آنرا با نام کد CCFULL می‌شناسند [۸]. شاید به جرات بتوان گفت که مطالعه حاضر نخستین اتفاق سیستماتیک برای بررسی رفتار وابسته به انرژی سطح مقطع‌ها در واکنش‌های همجوشی یون-سنگین می‌باشد که اساس آن مبتنی بر مدل پتانسیل مجاورت و دیدگاه CC است. چراکه در اکثر تحقیقات صورت گرفته بر پایه فرمالیزم مجاورت، محققان از مدل‌هایی نظیر وانگ و یا مدل نفوذ از سد تک بعدی برای محاسبات سطح مقطع همجوشی بهره گرفته‌اند که با توجه به فرض بدون ساختار بودن هسته‌ها در اینگونه از مدل-های تئوری نتایج حاصل از آنها نسبت به دیدگاهی همچون CC از اعتبار کمتری برخوردار خواهد بود. در ادامه جزئیات مربوط به محاسبات سطح مقطع‌های همجوشی در چارچوب کد CCFULL، نیاز است تا اشاره نمائیم که در تحقیق حاضر اثرات جفت-شدگی با حالت‌های برانگیخته کم‌انرژی $^{+}$۲ و $^{-}$۳ [۹,۱۰] را برای هر دو هسته پرتابه و هدف لحاظ نموده‌ایم. شکل‌های ۲ و ۳، مقایسه‌ای را میان داده‌های تجربی سطح مقطع همجوشی و مقادیر تئوری حاصل از مدل‌های Prox. 77 و Prox. New 2020 را بصورت تابعی از انرژی فرودی $E_{c.m.}$ برای تعداد ٢٤ سیستم برهم‌کنشی دلخواه نمایش می‌دهند. نتایج حاصل به وضوح عدم همخوانی میان داده‌های تئوری و تجربی این کمیت براساس نسخه اصلی پتانسیل مجاورت را در سیستم‌های مختلف تأیید می‌کنند. پس از اعمال اثرات شعاعی و کشش سطحی در فرمالیزم این مدل و انجام محاسبات سطح مقطع همجوشی برپایه مدل اصلاح شده Prox. New 2020، شاهد افزایش مقادیر این کمیت و بهبود توافق آنها با داده‌های متناظر بویژه در محدوده انرژی‌های زیرسدی هستیم.

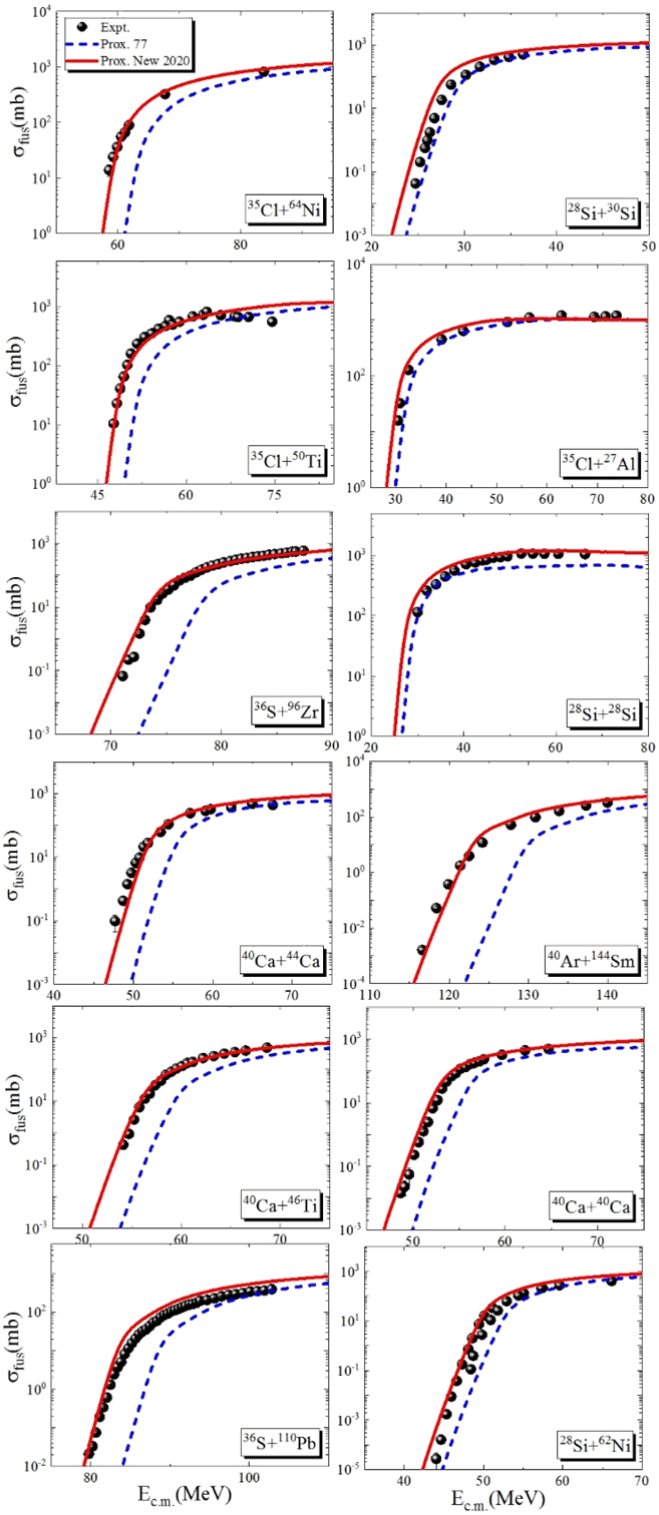
نتیجه‌گیری

با اعمال اثرات اصلاحی ناشی از کشش سطحی و شعاع هسته‌ها نسخه جدیدی از فرمالیزم مجاورت را معرفی کردیم که نسبت به

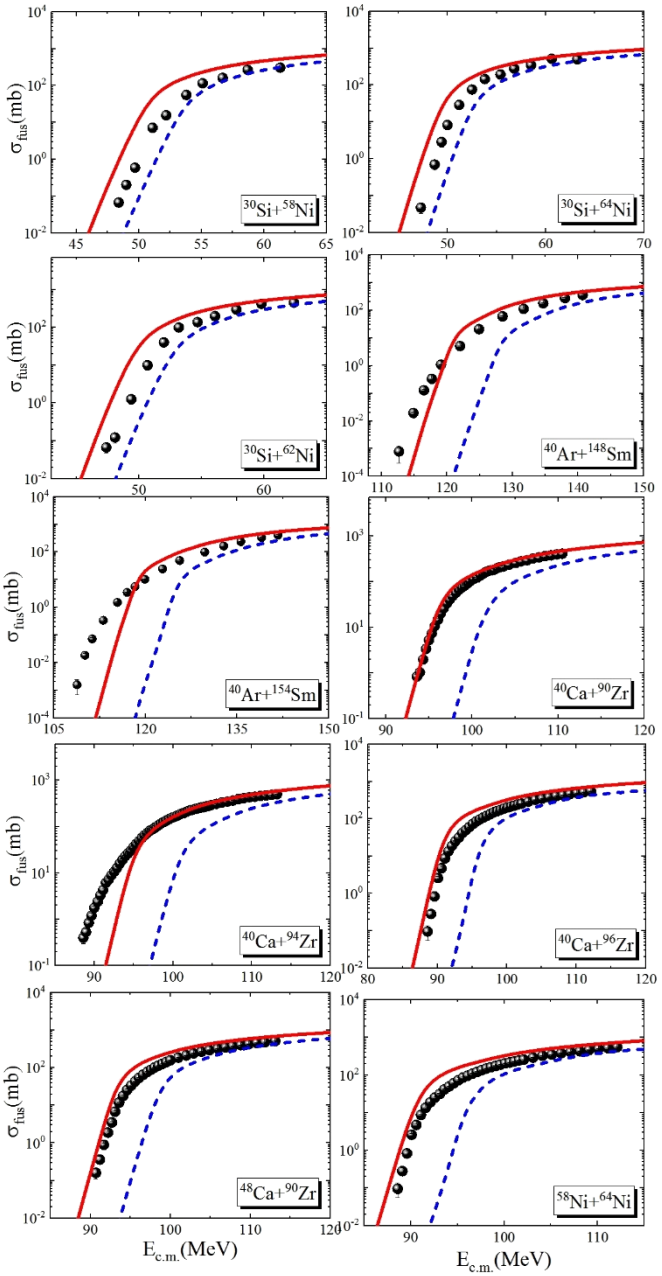
[1]. Coupled-channel (CC)

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مدل Prox. 77 پیش‌بینی‌های دقیق‌تری را برای سطح مقطع‌های همجوشی در واکنش‌های یون-سنگین ارائه می‌دهد. نتایج بدست آمده همچنین نشان می‌دهد مدل معرفی شده Prox. New 2020 در ارزیابی ارتفاع سد همجوشی نسبت به نسخه اصلی پتانسیل مجاورت عملکردی بهتری را از خود نشان می‌دهد.



شکل ۲: مقایسه مقادیر تئوری و تجربی سطح مقطع همجوشی براساس مدل‌های اولیه و اصلاح شده پتانسیل مجاورت برای واکنش‌های مختلف.



شکل ۳: مقایسه مقادیر تئوری و تجربی سطح مقطع همجوشی براساس مدل‌های اولیه و اصلاح شده پتانسیل مجاورت برای واکنش‌های مختلف.

مرجع‌ها

[1] J. Blocki *et al.*, Ann. Phys. (N.Y.) **105**, 427 (1977).
[2] I. Dutt and R. K. Puri, Phys. Rev. C **81**, 047601 (2010).
[3] I. Dutt and R. K. Puri, Phys. Rev. C **81**, 064609 (2010).
[4] I. Dutt and R. K. Puri, Phys. Rev. C **81**, 044615 (2010).
[5] R. Gharaei, Ann. Phys. **398**, 123 (2018).
[6] I. Dutt, Pramana, **76**, 921 (2011).
[7] R. Gharaei, and S. Mohammadi, Eur. Phys. J. A **55**, 119 (2019).
[8] K. Hagino *et al.*, Comput. Phys. Commun. **123**, 143 (1999).
[9] S. Raman *et al.*, At. Data Nucl. Data Tables **78**, 1 (2001).
[10] R. H. Spear, At. Data Nucl. Data Tables **42**, 55 (1989).

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

سنتز نانوساختار اکسیدگرافن-اکسیدقلع (RGO/SnO_2) به روش فوتوشیمیایی و بررسی خواص فوتوکاتالیستی آن

رضائیه،اکرم[۱]؛ بیضایی،سیدمهدی[۲]

[۱،۲]گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه ولی عصر(عج) رفسنجان

چکیده

در این پژوهش نانوساختار اکسیدگرافن-اکسیدقلع(RGO/SnO_2) درمدت زمان‌های مختلف تابش نور فرابنفش، به روش بسیار سریع فوتوشیمیایی سنتز شدند.نانوساختارها با استفاده از طیف سنجی تبدیل فوریه مادون قرمز FTIR، طیف سنجی UV-Vis ، پاشندگی انرژی اشعه ایکس EDX و پراش سنجی اشعه ایکس XRD مشخصه یابی شدند. نتایج تحلیلها نشان داد که فعالیت فوتوکاتالیستی نانو ساختار RGO/SnO_2 در مقایسه با اکسید گرافن ۶۰ درصد افزایش داشته است همچنین اندازه نانوذرات حدود ۲۹ نانومتر اندازه گیری شد.

واژه های کلیدی: *اکسید گرافن، اکسید قلع، فعالیت فوتوکاتالیستی*

Synthesis of graphene oxide-Tin oxide (RGO / SnO_2) nanostructure by photochemical method and study of its photocatalytic properties.

Rezaeyeh, Akram[1]; Baizaee, Seyyed Mahdy[2]

[1,2] Department of Physics, Faculty of Science, Vali-e-Asr University, Rafsanjan, Iran

Abstract

In this study, graphene-oxide-nanoparticle nanostructures (RGO / SnO_2) were synthesized in a very fast photochemical method during different times of ultraviolet radiation. Synthesized nanostructures were characterized using Fourier transform-infrared (FTIR), UV-Vis spectroscopy, Energy dispersive x-ray spectroscopy (X-EDX) and X-ray diffraction spectroscopy (XRD). The results showed that the photocatalytic activity of RGO/SnO_2 structure increased by 60% compared to graphene oxide and the nanoparticle size was measured at about 29 nm.

***Keywords**: Graphene oxide, tin oxide, photocatalytic activity .*

PACS No.71.

مقدمه:در دهه‌های اخیرنانوذرات اکسید قلع به دلیل قابلیت الکتریکی، نوری، مغناطیسی و خواص فوتوکاتالیستی توجه بسیاری را به خود جلب کرده‌اند[۱-۶]. در میان نانو ذرات اکسید فلزی،SnO_2 به دلیل داشتن گاف نواری پهن،

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

غیرسمی بودن، مناسب برای ناخالص سازی، کاربرد دردستگاه‌های الکترونیکی، حسگرها، سلول‌های خورشیدی و فعایت فوتوکاتالیستی، مورد توجه خاصی قرارگرفته‌اند. در این پژوهش نمونه‌های نانوساختار گرافن اکسید تقلیل یافته –اکسید قلع (RGO/SnO_2)از طریق فوتوشیمیایی ساخته شدند.

سنتزنانوساختار : ابتدا با روش هامر اکسید گرافیت را تولید کرده. سپس ۵۰ میلی‌لیتر آب دیونیزه را درون یک بشر ریخته ۰/۱ گرم از $SnCL_4$ را درون آب ریخته وبه مدت ۲۰ دقیقه در سانتریفیوژ قرار داده شد تا کامل حل شود سپس برروی استیرر قرار داده تا کاملا حل شود. سپس ۲۵ میکرولیتر محلول پلی اتیلن گلیکول (به عنوان عامل پوششی) به محلول اضافه شده سپس ۸۰۰ میلی لیتر از NaOH را درون محلول ریخته تا PHمحلول ۱۱ شود.و ۵۰ میلی‌لیتر آب درون بشری دیگرریخته و ۰/۱ گرم از GO را درون بشرریخته و مدت ۲۰ دقیقه داخل سانتریفیوژقرار داده شد تاحل شود در نهایت محلول GO و $SnCL_4$ را با هم مخلوط کرده و بر روی همزن قرار داده شد تاهم بخورد محلول حاصل را در معرض نور فرابنفش در فاصله ۲۰ سانتی‌متری قرار داده که با استفاده از لامپ پرفشار جیوه ۲۵۰ واتی تحت عنوان نور فرابنفش قرار داده سپس محلول را با استفاده از کاغذ صافی رسوب داده و رسوب حاصل را می‌گذاریم خشک شود و آنالیزهای ذکر شده را روی آن انحام می‌دهیم. ابه روش هیدروترمال نیز سنتز را انجام دادیم با این تفاوت که منبع انرژی درهیدروترمال حمام روغن داغ است.

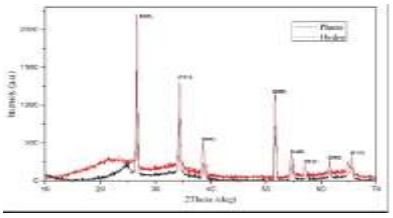
روش تجربی

نانوبلورهای اکسید به روش فوتوشیمیایی در محیط آبی سنتز شد منبع انرژی مورد نیازجهت انجام واکنش لامپ ۲۵۰ وات پرفشار جیوه مولد نورفرابنفش بود.ابتدا محلولی با غلظت معین با استفاده از پیش ماده مناسبی از قلع ساخته شده و سپس با اضافه نمودن مقدار بهینه‌ای از عامل پوششی (PEG) مقدار PH محلول را با استفاده ازمحلول یک مولار هیدروکسید سدیم روی عدد ۹ تنظیم می‌شود. محلول‌های نهایی در فاصله ۲۰ سانتی‌متری از لامپ پرفشار جیوه با توان ۲۵۰وات در فاصله زمانی‌های ۱۵دقیقه قرارمی‌گیرد. تابش فرابنفش انرژی لازم برای شکستن پیوندهای اولیه و تشکیل پیوندهای جدید را فراهم کرده و سبب تشکیل و رشد نانو ذرات می‌شود.

ارزیابی فعالیت فوتو کاتالیستی: فوتوکاتالیست یک کاتالیست (کاتالیزرو) تحت تابش نور است. با فعالیت فوتوکاتالیستی جذب مواد بیشتر می‌شود و در نتیجه باعث تخریب بیشتر می شود. کاتالیست ها بااستفاده ازویژگی نیمرساناها در یک واکنش آلاینده های آلی راتجزیه می کنند. ترکیبات آلی در سیستم فوتوکاتالیستی با اکسیژن ترکیب می‌شوند واتم های اکسیژن جذب شده برروی فوتوکاتالیست توسط الکترون ها درنوار رسانش کاهش می یابند در طول فرآیند فوتو کاتالیستی،رادیکال سوپراکسید و دیگر گروه های واکنش پذیر به دلیل واکنش بااکسیژن تولید می شوند.

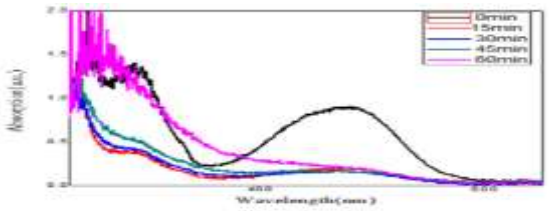
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

نتایج وبحث: پراش اشعه‌ی ایکس روشی استاندارد برای تشخیص ساختارهای فازی موجود در یک ماده و نوع ترکیب آن محسوب می‌شود. نانوبلورهای اکسید قلع به روش فوتوشیمیایی سنتز شدند. نتایج XRD نشان می‌دهد چندین قله پراش شدید در (۱۱۰). (۱۱۱)، (۱۰۱)، (۲۰۰)، (۳۱۰)، (۳۱۱)، (۲۰۲)، (۱۱۲)وجوددارد. یک قله پهن درنزدیک ۲۵ درجه وجود دارد که مربوط به RGO هست.همچنین در نزدیکی ۱۲ درجه قله‌ای مشاهده نمی‌شود که نشان می‌دهد GO به RGO تبدیل شده است وبقیه قله‌ها نشان دهنده‌ی ساختار اکسید قلع است. با استفاده ازپهنای نصف ماکزسمم (FWHM) قله اول ورابطه‌ی دبای شرر اندازه نانوذرات رابه دست می‌آوریم $D = \frac{K\lambda}{\beta\cos\theta}$ که D اندازه نانو ذرات, θ زاویه براگ, K ضریب ثابت(۰/۹), λ طول موج اشعه ایکس (۰/۱۵۴۰۵۶) نانومتر است. β نیم پهنای قله‌ی پراش(FWHM) است. که اندازه نانو ذرات ۲۹نانومتر درروش هیدروترمال به دست آمد واندازه نانوذرات درروش فوتوشیمیایی ۳۵ نانومتر به دست آمد.



شکل۱ : طیف پراش اشعه‌ی ایکس (XRD) نانوساختارهای RGO/SnO_2

آنالیز طیف جذب نانوذرات: شکل۲ طیف جذبی نانوساختارهای سنتزشده هنگامی که متیل اورانژ به محلول اضافه شده و زیر نور فرابنفش گذاشته شده،تاثیر فعالیت فوتوکاتالیستی را برای زمان‌های سنتز متفاوت نشان می‌دهد. همان‌طور که مشاهده می‌شود با افزایش زمان سنتز و رشد نانوبلورها لبه جذب به سمت طول موج‌های بیشتر وانرژی‌های کمتر انتقال می‌یابد. دلیل این انتقال آن است که با بزرگ‌تر شدن اندازه نانوذرات گاف نواری آن‌ها کاهش می‌یابد و در نتیجه نور با انرژی کمتر و طول موج بزرگ‌تر توسط آن‌ها جذب می‌شود. همان‌طور که در شکل۲ مشاهده می‌شود با گذشت زمان جذب بیشتر می‌شود. یعنی جذب در ۱۵دقیقه اول نسبت به جذب در ۱۵ دقیقه آخر کمتر است.

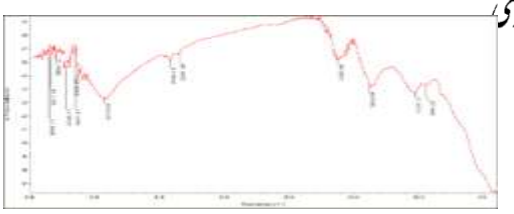


شکل۲: طیف جذبی نانوساختارهای RGO/SnO_2

بعدازفعالیت فوتوکاتالیستی

آنالیز طیف FTIR:طیفFTIR تنوع گروه‌های عاملی موجود در اکسید گرافن را نشان می‌دهد با توجه به شکل۳ حضور پیوند C-O در۹۴۴، حضور پیوند C-O-C در۱۰۲۸، حضور پیوند C-OH در۱۳۸۳و حضور پیوند C=O در ۱۶۲۶و در۱۲۵۰ قله مربوط به ارتعاشات C-C که از حوزه‌های گرافیتی ناشی شده است،مشاهده می‌شود. هم‌چنین به دلیل آب جذب شده در سطح اکسید گرافن، قله پهنی در محدوده ۳۴۲۹وجود دارد

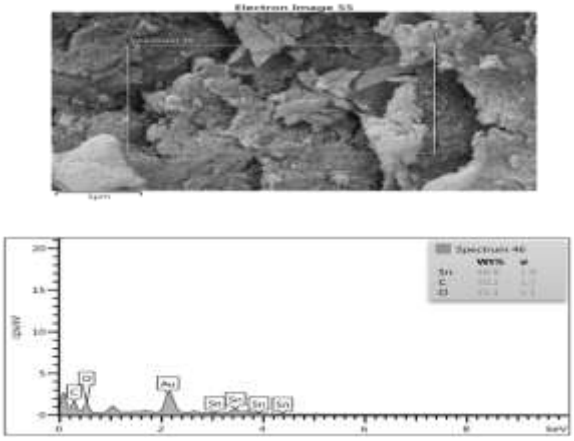
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



شکل۳: طیف FTIR نانوساختارهای RGO/SnO_2

طیف نگاری پاشندگی اشعه ایکس(EDX):

طیف نگاری اشعه ایکس روش تحلیلی برای بررسی عناصر موجود در نمونه و تجزیه و تحلیل خواص ساختاری آن است شکل۴ طیف نگاری پاشندگی اشعه ایکس (EDX) نمونه RGO/SnO_2 را نشان می‌دهد. همان‌طور که مشاهده می‌شود عنصر کربن به طور کامل با قله‌های بزرگ مشخص شده است وازآن‌جا که تندی قله عناصر نیتروژن، قلع، اکسیژن و کربن درشکل حضور دارند ناخالصی دیگری در آنالیز EDX دیده نشده است و حضور نانو ذرات SnO_2 در هیبرید RGO/SnO_2 مورد تایید است. این ذرات نانومتری به طور یکنواخت روی سطح ورقه ای RGO پوشش داده شده‌اند.



شکل۴ طیف نگاری پاشندگی اشعه ایکس (EDX) نانوساختار RGO/SnO_2

نتیجه گیری: نانوساختارهای RGO/SnO_2 به روش فوتوشیمیایی سنتز شدند. گاف انرژی این نانو بلورها کاهش یافت. دلیل این کاهش گاف نواری، رشد اندازه نانوبلورها در حین تابش نور فرابنفش به آن‌ها می‌باشد. با افزایش زمان سنتز و رشد نانوبلورها، جذب به سمت طول موج‌های بیش‌تر و انرژی کم‌تر رفت. نتایج تحلیلها نشان داد که فعالیت فوتوکاتالیستی نانو ساختار RGO/SnO_2 در مقایسه با اکسید گرافن ۶۰ درصد افزایش داشته است همچنین اندازه نانوذرات با استفاده از رابطه‌ی دبای شرر حدود ۲۹ نانومتر اندازه گیری شد.

مراجع

[۱] S. A. Corr, "Metal oxide nanoparticles"; *Nanoscience*. **1** (2013) 180–234.

[۲] M. Gancheva, M. Markova-Velichkova, G. Atanasova, D. Kovacheva, I. Uzunov, R. Cukeva; "Design and photocatalytic activity of nanosized zinc oxides", *Applied Surface Science*, **368** (2016) 258-266.

[۳] R. Wallace, A. P. Brown, R. Brydson, K. Wegner ,S. J. Milne; "Synthesis of ZnO nanoparticles by flame spray pyrolysis and characterisation protocol" ;*J. Mater. Sci*. **48** (2013) 6393-6403.

[٤] T. Tajima, H. Goto, M. Nishi, T. Ohkubo, Y. Nishina, H. Miyake, Y. Takaguchi, "A facile synthesis of SnO_2/Graphene oxide nano-nano composite and its photoreactivity," *Mater. Chem. and Phys.* **212**, (2018). 149-154

[٥] C. Aydın, "Synthesis of SnO_2:rGO nanocomposites by the microwave-assisted hydrothermal method and change of the morphology, structural, optical and electrical properties," *J. Alloys. Compd*. **771**, (2018). 964-972

[٦] Z. Wang, T. Zhang, T. Han, T. Fei, S. Liu and G. Lu, "Oxygen vacancy engineering for enhanced sensing performances: A case of SnO2 nanoparticles-reduced graphene oxide hybrids for ultrasensitive ppb-level room-temperature NO_2 sensing," *Sens. Actuators B: Chem.* **266**, (2018) 812-822.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

محاسبه طیف میکرودوزیمتری پروتون‌ها برای ساختارهای میکروسکوپی زنده با کد Geant4-DNA

مکاری، مجتبی[۱]؛ معینی، حسین [۲]

[۱] گروه فیزیک دانشگاه صنعتی خاتم الانبیاء (ص) بهبهان، بهبهان

[۲] بخش فیزیک دانشکده علوم، دانشگاه شیراز، شیراز

چکیده

با تعریف کمیت‌های تصادفی که بتوانند به ابعاد ساختارهای میکروسکوپی در معرض پرتو ارتباط داده شوند، میکرودوزیمتری معطوف به شاخص‌بندی‌هایی از کیفیت پرتو می‌باشد که منجر به حاصل شدن بینشی ژرف از اثرات تابش می‌گردد. در این پژوهش، با به‌کارگیری مفهوم مسافت آزاد میانگین تصادفی مشهور به μ-randomness، تعدادی از کمیت‌های میکرودوزیمتری برای ساختارهای میکروسکوپی زنده مثل DNA، نوکلئوزوم و فیبر کروماتین در کره‌ای از آب که توسط پروتون‌ها پرتودهی شده، محاسبه شده است. ترابرد کامل پروتون‌ها در محدوده انرژی ۰٫۵ تا ۱۰۰ MeV و نیز ذرات ثانویه تولید شده در آب مایع توسط کد Geant4-DNA شبیه‌سازی شده و به منظور اعتبارسنجی این کد و رسیدن به درکی بهتر از مکانیزم‌های برهم‌کنشی و اثرات آن در ساختارهای زیستی ریز، نتایج حاصل با نتایج کد KURBUC نیز مقایسه شده است. این مقایسه نشان می‌دهد که فارغ از اینکه انرژی پرتو پروتون و حجم استوانهٔ پرتو داده شده چقدر باشد، مقادیر میانگین فرکانسی انرژی ویژه به‌دست آمده توسط دو کد از سازگاری بیشتری نسبت به مقادیر میانگین دوز برخوردارند. بدین ترتیب، برای حجمی با جرم و طول یال قابل قیاس با DNA، تناظر آشکاری بین نتایج انرژی ویژه و انرژی طولی میانگین با نتایج بازده[۱] شکست دورشته‌ای[۲] DNA مشاهده شده است.

واژه های کلیدی: *میکرودوزیمتری، کمیت تصادفی، انرژی ویژه، انرژی طولی، شبیه‌سازی مونت کارلو، Geant4-DNA*

Calculation of microdosimetric spectra of protons for living microscopic structures using Geant4-DNA

Mokari, Mojtaba[1]; Moeini, Hossein[2]

[1] Department of Physics, Behbahan Khatam Alanbia University of Technology, Behbahan

[2] Department of Physics, College of Sciences, Shiraz University, Shiraz

Abstract

Through introducing stochastic quantities that can be connected to the dimensions of the microscopic structures exposed to radiations, microdosimetry is concerned with the substantive specifications of radiation quality that could help gain insight into radiation effects. Employing the concept of mean-free-path randomness, known as μ-randomness, we calculated some microdosimetric quantities, for living microscopic structures like the DNA, nucleosome, and chromatin, as the result of radiating a spherical body of water with protons. Hence, we used the Geant4-DNA Monte Carlo simulation toolkit for the transportation of particles and calculation of the associated energy depositions. We compared our results with those obtained with the KURBUC code, in an attempt to validate the code and gain more insight into the interaction mechanisms and their effects on microscopic living structures. Irrespective of both proton energy and volume of the cylinder under study, we observed a generally better agreement between our frequency-mean, than dose-mean, specific energy results and the KURBUC results. As such, for a volume with comparable mass and mean chord length to the DNA, we could observe a clear correspondence of the mean lineal and specific energy results with the DNA double-strand-break yields of protons.

***Keywords**:* Microdosimetry, stochastic, specific energy, lineal energy, Monte Carlo simulations, Geant4-DNA

PACS No. 20, 87.

[1] Yield

[2] Double Strand Break (DSB)

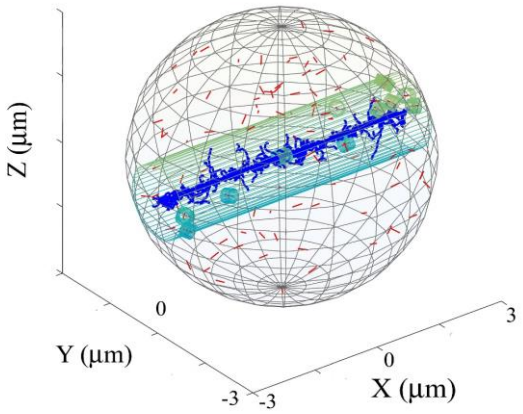
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد

http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مقدمه

پرتوهای یونی می‌توانند دوز جذبی را به ناحیه‌ای از بافت محدود کرده که منطبق بر حجم غده سرطانی باشد و بر بافت‌های سالم مجاور آن تأثیر کمی نیز بگذارند. میزان انباشت انرژی و توزیع فضایی چنین تابش‌هایی در امتداد مسیر ذره در ماده رفتاری تصادفی از خود نشان می‌دهد. فاکتورهای تابشی که می‌توانند ساختارهای زیستی را تحت تأثیر قرار دهند علاوه بر مقدار انرژی انباشت، شامل دوز جذبی، تعداد، شکل توزیع و هم‌بستگی نقاط انباشت انرژی نیز می‌باشند. از آنجا که سلول‌های زنده عمدتاً از مولکول‌های آب تشکیل شده‌اند، برهم‌کنش پرتوها هم فیزیکی و هم شیمیایی خواهد بود که می‌تواند اثرات زیستی شامل آسیب DNA و ساختارهای زیستی در زمان پرتودهی به همراه داشته باشند. از آنجا که احتساب کامل ساختارهای زیستی و کلیه برهم‌کنش‌های ممکن پرتوها با آنها به‌راحتی امکان‌پذیر نیست، از این رو نیاز به معرفی مفاهیمی است که قادر به ارتباط دادن مشخصه‌های اصلی جذب پرتو با ابعاد و نوع بافت باشند. بدین جهت میکرودوزیمتری توسط Rossi و همکاران [۱] برای غلبه بر مشکلات اندازه‌گیری دوز دریافتی توسط حجم‌های میکرومتری پا به عرصه ظهور گذاشت تا زمینه مطالعه اصولی توزیع‌های تصادفیِ فضایی و زمانی فرایندهای انباشت انرژی در سطح میکروسکوپی را فراهم کند [۲]. از این رو با معرفی پارامترهایی نظیر انرژی ویژه z و انرژی طولی y، مفاهیم میکرودوزیمتری برای ارزیابی میزان تصادفی بودن مسیر پرتویی توسعه یافتند (این مفاهیم و تعاریف پایه‌ای به شکل مفصل در مراجع [۳] و [٤] شرح داده شده‌اند).

در این پژوهش، با بهره‌گیری از کد Geant4-DNA، برای شبیه‌سازی مونت کارلو، و الگوریتمی نوشته شده با زبان پایتون، پارامترهای میکرودوزیمتری و توزیع فضایی انرژی انباشت پرتوهای یونی در داخل حجم‌های نانومتری، به‌عنوان جایگزینی برای DNA، نوکلئوزوم، و تکه‌های فیبر کروماتین در کره آب، محاسبه می‌شوند. بدین ترتیب مقادیر میانگین فرکانسی (اندیس F) و دوزی (اندیس D) انرژی‌های طولی و ویژه $\bar{y}_D$، $\bar{y}_F$، $\bar{z}_F$، و $\bar{z}_D$ برای پروتون‌های ۰٫۵ تا ۱۰۰ MeV در سه هدف استوانه‌ای با ابعاد متفاوت محاسبه و مقایسه می‌شوند.



شکل ۱: محیط شبیه‌سازی که در آن پروتون‌های ۱۰۰ MeV در امتداد محور x قطر ٦ میکرومتری آن را طی می‌کنند. تعدادی از ذرات ثانویه با مسیرهایی تصادفی حول امتداد تابش پروتون‌ها به رنگ آبی نشان داده شده‌اند. هم‌چنین ۱۰۰ یال ریز (chord) که به‌صورت تصادفی در محیط کره پراکنده شده‌اند، به رنگ قرمز قابل مشاهده‌اند. هر استوانه نمونه‌گیری شده حول چنین یال‌هایی ایجاد می‌گردد (برای وضوح بهتر، این استوانه‌های سبز رنگ با ابعاد طولی و قطری ۳۰۰۰ آنگستروم ترسیم شده‌اند).

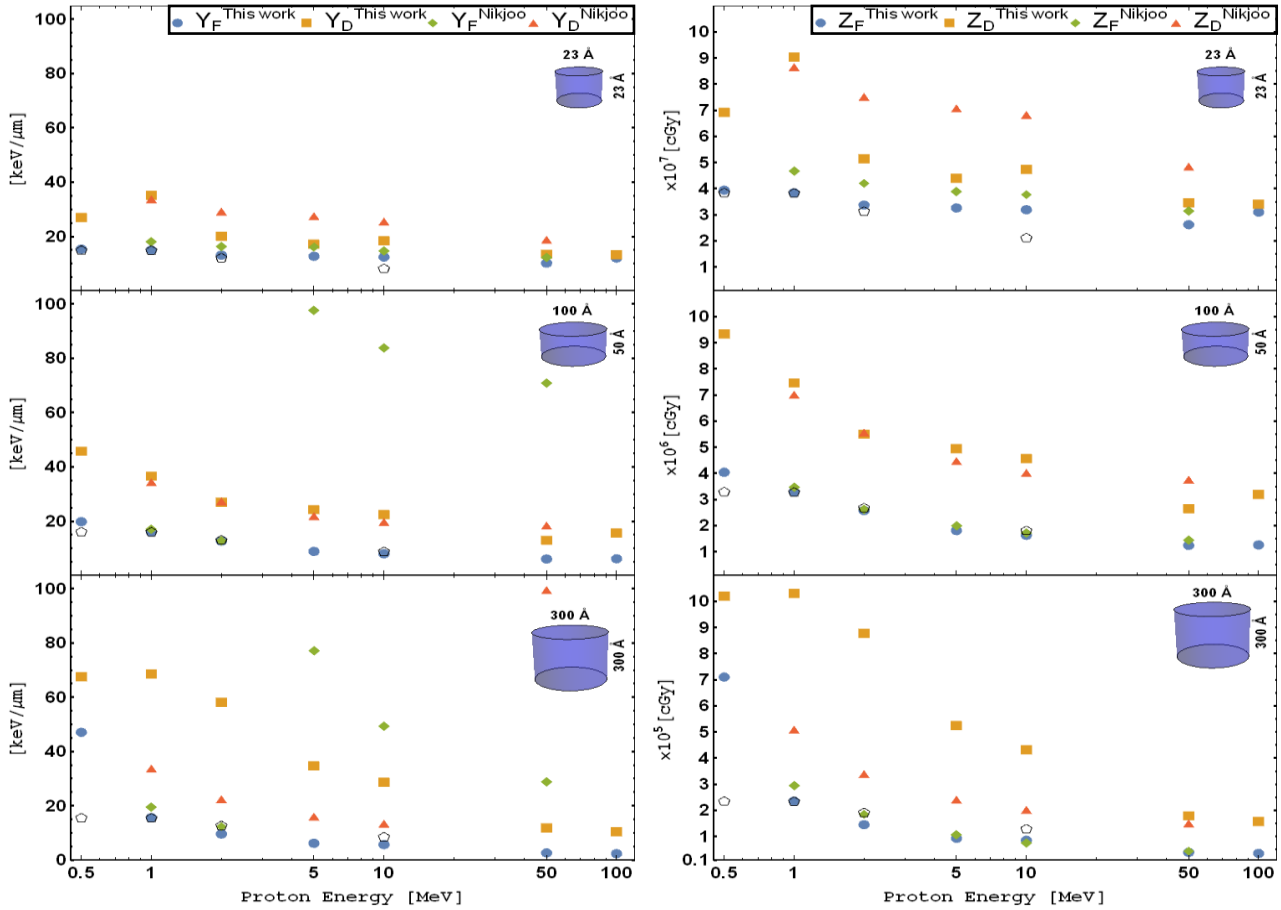
مواد و روش ها

کد مونت کارلوی Geant4-DNA (Geant4 v10.05p1) برای شبیه‌سازی محیط‌های بیولوژیکی از کد مادر توسعه داده شده و قادر به ترابرد ذرات تحت برهمکنش‌های فیزیکی و شیمیایی در آب می‌باشد و از این طریق اطلاعاتی شامل انرژی‌های انباشت و تاریخچه مکانی-زمانی برهم‌کنش‌های ذرات اولیه و ثانویه را در اختیار کاربر قرار می‌دهد [۵]. دسته‌بندی برهم‌کنش‌ها در این کد شامل الاستیک، غیرالاستیک (یونیزاسیون و برانگیختگی الکترونی)، و ریز-برانگیختگی غیرالاستیک (برانگیختگی ارتعاشی و پیوند مولکولی) می‌باشد [٦]. به‌صورت پیش فرض، الکترون‌ها تا انرژی برش ۷٫٤ eV ترابرد شده و سپس ذرات با انرژی کمتر از انرژی برش، تمامی انرژی جنبشی خود را در یک نقطه انباشت می‌کنند. مدل‌های الکترونی مورد استفاده در این کار شامل پراکندگی

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

الاستیک (۱ MeV – ۷٫٤ eV)، برانگیختگی الکترونی (۱ MeV – ۹ eV)، یونیزاسیون (۱ MeV – ۱۱ eV)، برانگیختگی ارتعاشی (۱۰۰ eV – ۲)، و پیوند مولکولی (۱۳ eV – ٤) و همچنین مدل‌های پروتونی (و اتم‌های هیدروژن) شامل پراکندگی الاستیک (۱ MeV – ۱۰۰ eV)، برانگیختگی الکترونی (۱۰۰ MeV – ۱۰ eV)، یونیزاسیون (۱۰۰ MeV – ۱۰۰ eV)، و جذب الکترونی (۱۰۰ MeV – ۱۰۰ eV) هستند. هندسه محیط کره ای به قطر ٦ میکرومتر در نظر گرفته شده که معادل میانگین قطر هسته سلول‌های انسان (قطر هسته سلول بین ۲ تا ۱۱٫۱ μm [۷]) می‌باشد. چشمه پرتوها به شکلی است که پروتون‌های اولیه از سطح کره در امتداد قطر آن تولید شده‌اند. مراحل کار در این پژوهش شامل شبیه‌سازی برهم‌کنش‌های فیزیکی ذرات اولیه و ثانویه در محیط آب (با برون کشی مختصات نقاط برهم‌کنشی با انباشت انرژی از کد Geant4-DNA) و استفاده از نتایج آنها برای محاسبه پارامترهای میکرودوزیمتری با الگوریتم نوشته شده در این کار می‌باشد.

هدف‌های استوانه‌ای انتخاب شده برای محاسبه کمیت‌های میکرودوزیمتری به ابعاد (ارتفاع×قطر) ۲۳×۲۳، ۱۰۰×۵۰، و ۳۰۰×۳۰۰ هستند که به‌صورت تصادفی در آب پراکنده شده و برای داشتن توزیع مناسبی با نمونه‌گیری آماری قابل قبول، تعداد قابل توجهی از آنها به روش μ-randomness توزیع شده‌اند (شکل ۱) [۸]. همچنین تایید نمونه‌گیری با دو معیار بررسی شده است. معیار اول تساوی نسبت انرژی انباشت داخل کره به حجم آن را با نسبت انرژی انباشت در استوانه‌ها به حجم کل آنها بررسی می‌کند. معیار دوم مقدار میانگین فرکانسی انرژی ویژه $\bar{z}_f$ را محاسبه و تساوی معکوس آن را با فرکانس انرژی‌های انباشت (یعنی تحقیق شرط $f(>0)=\frac{1}{\bar{z}_f}$) بررسی می‌کند. برای هر دو معیار، حداکثر اختلاف قابل قبول مقادیر دو طرف تساوی ٥٪ است و در صورت تایید همزمان دو شرط ذکر شده، مقادیر میکرودوزیمتری برای حجم و انرژی مربوطه محاسبه می‌شود [۹].



شکل ۲: مقایسه کمیت‌های میکرودوزیمتری به‌دست آمده در این پژوهش با نتایج نیکجو و همکاران [۱۰] برای استوانه‌های آب با ابعاد متناظر ذکر شده در هر شکل را نشان می‌دهد. همچنین پنج ضلعی‌های توخالی نتایج بازده شکست‌های دو رشته‌ای DNA توسط پروتون را نشان می‌دهد که به نتایج $\bar{y}_F$ و $\bar{z}_F$ این پژوهش در انرژی ۱ MeV نرمال شده‌اند (نتایج بازده در کار قبلی ما برای یک مدل B-DNA به طول ۷۳٤٫٤ و قطر ۲۳ آنگستروم محاسبه شده است [۱۱]).

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

نتایج

شکل ۲ نتایج شبیه‌سازی میکرودوزیمتری این پژوهش را در مقایسه با نتایج نیکجو و همکاران [۱۰] که با استفاده از کد KURBUC بدست آمده، نشان می‌دهد. هم‌چنین، نتایج بازده شکست دو رشته‌ای که به داده‌های MeV ۱ نرمال شده‌اند، قابل مشاهده است. این نتایج، از لحاظ مقدار و روند، از سازگاری بیشتری با کمیت‌های میکرودوزیمتری استوانه میانی برخوردار است. این موضوع در مورد نتایج انرژی ویژه با مقایسه حجم و جرم DNA با استوانه‌های مختلف به روشنی مشاهده می‌شود. هم‌چنین، با توجه به طول یال‌های میانگین به‌دست آمده برای DNA با استوانه کوچک، میانی و بزرگ (۲۲٫۶، ۱۵٫۳، ۲۵، ۲۰۰ آنگستروم)، این نتیجه حاصل شد که نتایج انرژی طولی (نسبت انرژی انباشت به طول یال) DNA نیز به نتایج متناظر استوانه میانی نزدیک‌تر است.

بحث و نتیجه گیری

با در نظر گرفتن سه حجم استوانه‌ای با ابعادی مشابه ساختارهای زیر سلولی نظیر DNA، نوکلئوزوم، و فیبر کروماتین در محیطی کروی از آب با اندازه قابل مقایسه با سلول انسان، پارامترهای میکرودوزیمتری مربوط به پرتوهای پروتونی ۰٫۵ تا MeV ۱۰۰ از طریق شبیه‌سازی و نمونه‌گیری آماری به روش μ-randomness محاسبه شد. نتایج به‌دست آمده برای انرژی ویژه، به‌ازای انرژی‌های مختلف پروتونی، حساسیت بیشتری در استوانه‌های کوچک نسبت به حجم‌های بزرگتر از خود نشان دادند. البته چنین الگویی برای میانگین فرکانسی انرژی طولی تنها برای پروتون‌های با انرژی بیش از MeV ۲ مشاهده شد. صرف نظر از اینکه انرژی پروتون و حجم استوانه چقدر باشد (به جز پروتون‌های MeV ۱ گذرنده از کوچکترین استوانه) سازگاری بهتری بین نتایج میانگین فرکانسی (تا میانگین دوزی) انرژی ویژه در این کار با نتایج متناظر نیکجو و همکاران [۱۰] مشاهده شد. به‌طور کلی رابطه نسبی بین نتایج میانگین فرکانسی و میانگین دوزی انرژی طولی مشاهده نگردید و تنها برای استوانه با حجم میانی، نتایج میانگین دوزی انرژی طولی در هر دو مطالعه سازگاری بسیار خوبی با یکدیگر نشان داد. در مجموع، تفاوت‌های مشاهده شده بین نتایج پژوهش حاضر و نتایج نیکجو و همکاران می‌تواند به‌دلیل تفاوت در پارامترهای سطح مقطع‌های درنظرگرفته شده در دو شبیه‌سازی و نیز معیارهای در نظر گرفته شده برای انباشت انرژی نظیر انرژی برش باشد. هم‌چنین، در بررسی دیگری که زمینه مقایسه کمیت‌های میکرودوزیمتری با بازده شکست‌های دو رشته‌ای DNA را فراهم ساخت، سازگاری بهتری بین نتایج بازده و نتایج انرژی ویژه و طولی برای استوانه با حجم میانی مشاهده گردید که نتیجهٔ مستقیم این واقعیت است که حجم DNA مورد مطالعه دارای میانگین جرم و طول یال نزدیک‌تری به استوانه میانی نسبت به دو استوانه دیگر می‌باشد.

مرجع‌ها

[1] H. H. Rossi, "Microscopic energy distribution in irradiated matter", Radiation Dosimetry (Academic Press, New York), vol.1 (2004).

[2] G. A. Santa Cruz, "Microdosimetry: Principles and applications," *Reports of Practical Oncology and Radiotherapy*, vol. 2I (2016) pp. 135-139.

[3] ICRU, Radiation Quantities and Units, vol. 33, Washington: International Commission on Radiation Units and Measurements (1987).

[4] CRU, Microdosimetry, vol. 36, Washington: International Commission on Radiation Units and Measurements (1983).

[5] S. Agostinelli, et al., "Geant4-a simulation toolkit", *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A* **506** (2003) 250–303.

[6] S. Incerti, et al., "Geant4-DNA example applications for track structure simulations in liquid water: A report from the Geant4-DNA Project", *Med. Phys.* **45**, no. 8 (2018) e722-e739.

[7] E. Polig, D. B. Kimmel and W. S. S. Jee, "Morphometry of bone cell nuclei and their location relative to bone surfaces," *Phys. Med. Biol.* **29** (1984) 939–952.

[8] A. Kellerer, "*Fundamental of microdosimetry*", in The Dosimetry of Ionizing Radiation, vol. 1, K. R. Kase, B. E. Bjarngaard and F. H. Attix, Eds., Academic Press (1975) pp. 77-162.

[9] H. Nikjoo, et al., "Energy deposition in small cylindrical targets by monoenergetic electrons", *Int. J. Radiat. Biol.* **60**, no. 5 (1991) 739-756.

[10] H. Nikjoo, D. Emfietzoglou, T. Liamsuwan, R. Taleei, D. Liljequist and S. Uehara, "Radiation track, DNA damage and response - a review," *Rep. Prog. Phys.* **79** (2016) 116601.

[11] M. Mokari, M. H. Alamatsaz, H. Moeini and R. Taleei, "A Simulation Approach for Determining the Spectrum of DNA Damage Induced by Protons," *Phys. Med. Biol.* **63**, no. 17 (2018) 175003.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

شبیه‌سازی و اندازه‌گیری باریکه خروجی از تفنگ الکترونی گرمایونی با استفاده از نرم‌افزار CST

دهقانی ، زهره*[۱] ؛ بخش زاد محمودی، مهدی[۱] ؛ اکبری، مریم[۱] ؛ عطایی سرشت، لاله[۱] ؛ قربانی، عمار[۱]

[۱]پژوهشکده پلاسما و گداخت هسته ای، پژوهشگاه علوم و فنون هسته ای انتهای خیابان کارگر شمالی، تهران

چکیده

در این کار، شبیه سازی و مشخصه یابی مسیر حرکت الکترون های تولیدی به روش گرمایونی از تفنگ الکترونی و در حضور میدان مغناطیسی، توسط نرم افزار CST-Particle Studio انجام گرفته است. با تغییر در پارامترهای مختلف طراحی از جمله فاصله بین دو الکترود و اعمال میدان مغناطیسی، ویژگی‌های باریکه الکترونی از نظر میزان انرژی خروجی که اهمیت زیادی در دستگاه‌های لایه نشانی دارد، بررسی شده است.

واژه های کلیدی: *تفنگ الکترونی، انرژی باریکه خروجی، نرم افزار CST.*

Simulation and measurement of electron beam in thermionic electron gun by CST software

Z. Dehghany[1*]; M. Bakhshzad Mahmoudi[1]; M. Akbari[1]; L. Ataei Seresht; A. Ghorbani[1]

[1]Plasma and Fusion Research School, NSTRI, AEOI

Abstract

In this paper, a thermionic electron gun is simulated and fabricated. Several parameters characterize electron beams, including current, energy, electrical potential, perveance in this simulation. Moreover, electron beam energy of electron gun has been investigated by changing the various design parameters such as the distance between the two electrodes and applying the magnetic field.

***Keywords**: Electron gun, Energy beam, CST STUDIO*

PACS No. 50

مقدمه

امروزه با پیشرفت تکنولوژی، کاربرد تفنگ‌های الکترونی وسعت چشمگیری پیدا کرده است. در تفنگ الکترونی به وسیله یک چشمه الکترونی الکترون تولید می‌شود، سپس الکترون‌های تولید شده شتاب داده می‌شوند. الکترون‌های تولیدی توسط تفنگ الکترونی سرعت و انرژی بالایی دارند، به همین دلیل در زمینه‌های گوناگونی مثل صنعت، پزشکی، هوافضا، کشاورزی و غیره کاربرد دارند. پرتو الکترونی دراین تفنگ‌ها، با کانونی کردن توسط لنزهای مغناطیسی و الکتریکی، توزیعی کانونی را بر روی هدف‌های مختلف به دست آورده و در کابردهای مختلف استفاده می‌گردند. در تفنگ های الکترونی استفاده شده در دستگاه‌های لایه نشانی، فشار محفظه کمتر از $۱۰^{-۵}$ تور بوده و انتشار الکترون از کاتد فیلمانی داغ از جنس تنگستن یا تانتالیم، صورت می پذیرد [۱-۳]. روش‌های مختلف و متنوعی در زمینه تولید الکترون وجود دارد. در هر یک از این روش‌ها، تفاوت در نوع و ابعاد باریکه الکترونی می‌باشد. یکی از کاربردهای تفنگ الکترونی و تولید باریکه الکترونی می توان به، استفاده از آن در دستگاه‌های لایه نشانی اشاره کرد. همانطور که می دانید، لایه نشانی یکی از مهمترین

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

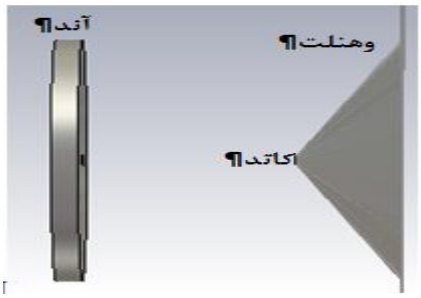
بخش های مهندسی سطح است که امروزه با پیشرفت صنعت لایه های نازک و پوشش دهی، این فناوری وارد بخش های گوناگون صنعت شده است که می توان به کاربرد آن در ادوات اپتیکی، میکروالکترونیک، معماری و ساختمان اشاره کرد. روش های مختلفی برای ساخت لایه های نازک به کار گرفته می شود. یکی از این روشها، لایه نشانی بخار فیزیکی[1] است که در خلا انجام می شود. یکی از روشهای لایه نشانی بخار فیزیکی، تبخیر به کمک باریکه الکترونی[2] است [۲].

با استفاده از این روش می توان لایه ها را با نرخ‌های متفاوت پوشش دهی از ۱ نانومتر در هر دقیقه تا چندین میکرومتر در هر دقیقه انجام داد. کنترل ساختار و مورفولوژی (ریخت) پوشش ها در مقایسه با سایر روش های لایه نشانی بیشتر است. این روش لایه نشانی در صنایع مختلف صنعتی مانند پوشش های نوری و الکترونیکی و پوشش های حرارتی و مکانیکی در هوا و فضا کاربرد گسترده دارد [٤ و٥].

تئوری شبیه سازی

در این کار برای تبخیر و استفاده در دستگاه لایه نشانی، تفنگ الکترونی توسط نرم افزار CST STUDIO شبیه سازی می‌شود. مدل گسیلی مورد استفاده در این کار از نوع گسیل گرما یونی می باشد که بر اساس گرم شدن فیلمان و گسیل الکترون از آن کار می‌کند. هدف از این بررسی، تولید انرژی باریکه خروجی تا حدود ۱ کیلو ولت می‌باشد. نکته مهمی که در طراحی تفنگ الکترونی اهمیت دارد این است که سعی شود کل سیستم طوری طراحی گردد که جریان مورد نظر تا حد امکان کمتر باشد. زیرا جریان زیاد باریکه هزینه‌های ساخت منبع تغذیه را افزایش می دهد.

نرم افزار CST STUDIO از جمله نرم افزار شبیه ساز مسیر باریکه یونی یا الکترونی است که برای شبیه سازی تفنگ الکترونی در آن لازم است نخست شکل ابتدایی الکترودها رسم شده و سپس پتانسیل های هر الکترود تعیین و نوع مدل گسیل و نوع ذرات تعریف گردند. شرایط مرزی تعیین و سپس دقت مورد نظر مشخص گردد. به منظور دستیابی به باریکه‌ای مناسب با بهترین شکل، خطوط هم پتانسیل االکتریکی از اهمیت زیادی برخوردارند. طرحواره‌ای از اجزای تفنگ الکترونی گرمایونی در شکل ۱ آورده شده است. در این کار، از کاتد تنگستنی به ضخامت ۰/۸ میلی متر استفاده شده است.

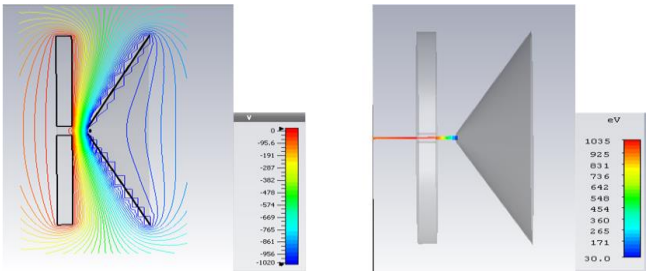


شکل ۱: طرحواره ای از تفنگ الکترونی گرمایونی طراحی شده.

شبیه سازی و نتایج

در این بخش مراحل شبیه سازی تفنگ الکترونی و نتایج آن آورده شده است. در این طراحی با توجه به اهداف در نظر گرفته شده در کار، پتانسیل کاتد ۱- کیلو ولت و پتانسیل وهنلت ۱۰۲۰- ولت و پتانسیل آند صفر در نظر گرفته می‌شود. همچنین فاصله کاتد تا آند ٤٠ میلی متر می‌باشد.

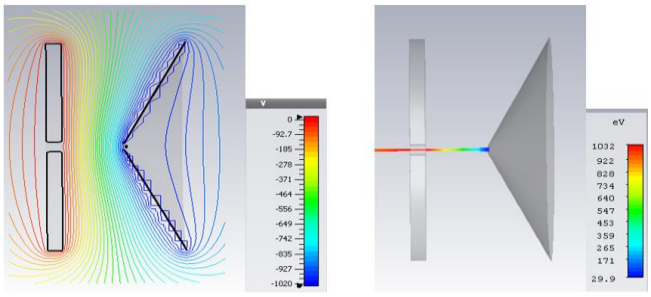
یکی از پارامترهای تاثیر گذار در انرژی و شکل پرتو خروجی در تفنگ الکترونی، فاصله بین کاتد و آند می باشد. در شکل ۲، مسیر پرتو و شکل خطوط هم پتانسیل برای تفنگ الکترونی در فاصله های مختلف کاتد و آند آورده شده است.



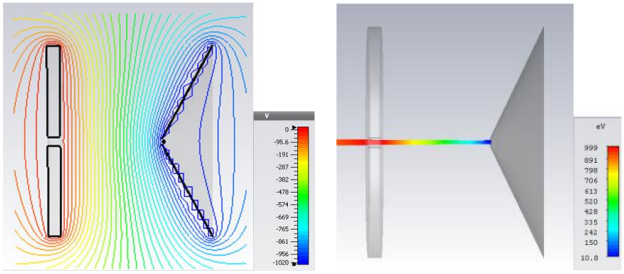
(الف)

[1] Physical Vapor Deposition (PVD)
[2] Electron Beam Evaporation

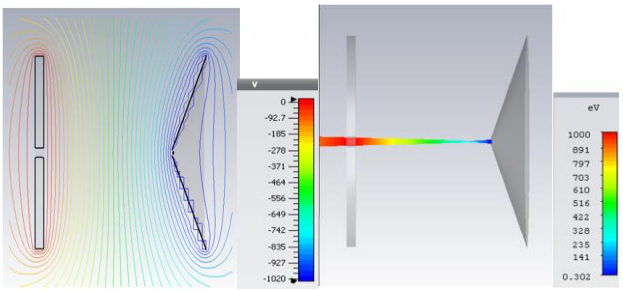
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



(ب)



(ج)



(د)

شکل ۲: مسیر پرتـو و شـکل خطـوط هـم‌پتانسـیل بـرای تفنـگ الکترونـی در فاصله‌های مختلف کاتد و آند. (الف) ۱۰ میلی‌متـر، (ب) ۲۰ میلـی‌متـر، (ج) ٤٠ میلی‌متر و (ج) ۷۰ میلی‌متر.

همانطور که در شکل ۲ نشان داده شده است، با افزایش فاصله بین کاتد و آند انرژی الکترون‌های خروجی از آند کاهش یافتـه و قطـر باریکه الکترونی نیز زیاد می شود.

نتایج شبیه سازی برای فاصله کاتد تـا آنـدهای متفـاوت در تفنـگ الکترونی در جدول ۱ زیر آورده شده است.

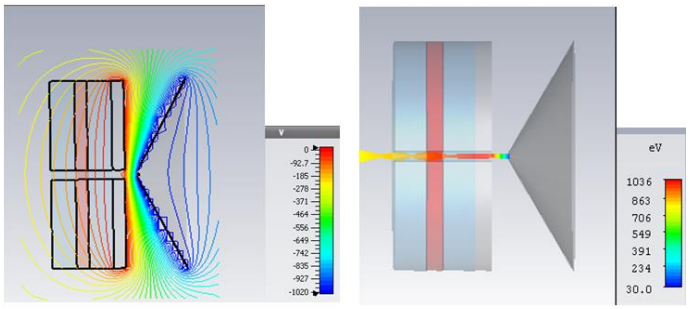
جدول ۱: نتایج شبیه سازی برای فاصله های متفاوت کاتد تا آند

فاصله آند تا کاتد (mm)	۱۰	۲۰	٤٠	۷۰
جریان (mA)	۰/۲۵	۰/۲۵	۰/۱	۰/۰۰٤
پروه انس (μprev)	۰/۰۰۸۲۱	۰/۰۰۸۱۸	۰/۰۰۳٤٤	۰/۰۰۱۳۲

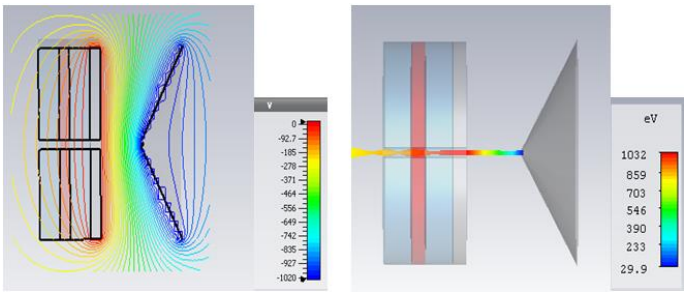
همان طور که از شکل ۲ و جدول ۱ مشخص است، با افزایش فاصله بین کاتد و آند پارامتر پروه انس کمتر شده و این در حالی است که جریان الکترونی تولیدی بین کاتد و آند نیز کاهش می‌یابد. با توجه به نتایج بدست آمده با در نظر گرفتن مشخصات دیگر تفنگ الکترونی، در این کار فاصله کاتد تا آند بین ۲۰ تا ٤٠ میلی متر مطلوب می‌باشد. علاوه بر این باریکه الکترونی نیز در این حالت متمرکزتر می‌شود.

علاوه برآن، برای کنترل تمرکز و قطر پرتوی الکترونی، با افزایش انرژی خروجی از یک آهنربای مغناطیسی استفاده شده است. این آهن‌ربایی است که درست پس از آند قرار داده می‌شود. مولفه ی میدان مغناطیسی ناشی از این آهنربا، در راستای محور اپتیکی و در جهت z می‌باشد. چنین میدان مغناطیسی، نهایتا سبب تمرکز پرتوهای الکترونی می‌شود.

شکل ۳ اعمال میدان مغناطیسی ۱۰۰۰ گوس را با استفاده از آهنربای مغناطیسی، بر روی باریکه الکترونی خروجی از تفنگ الکترونی گرمایونی و در شرایطی که فاصله بین کاتد و آند در تفنگ تغییر می‌کند، را نشان می‌دهد. در این بررسی پتانسیل کاتد ۱- کیلو ولت و پتانسیل وهنلت ۱۰۲۰- ولت و پتانسیل آند صفر در نظر گرفته می‌شود.

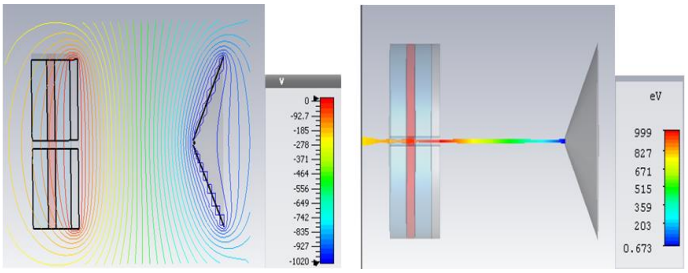


(الف)



(ب)

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



(ج)

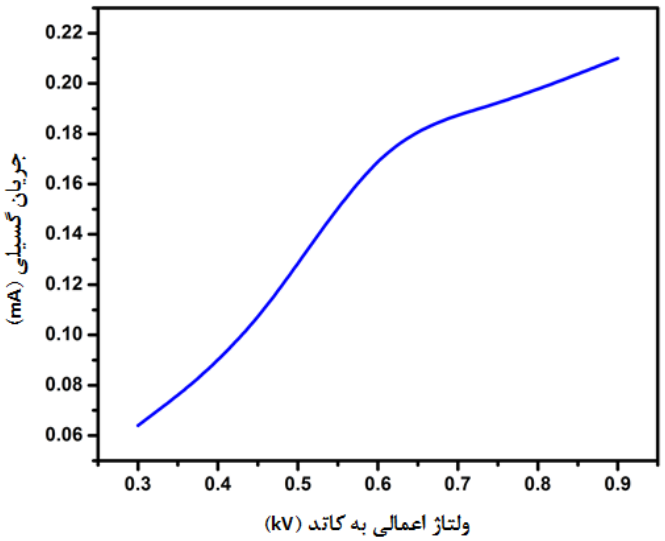
شکل ۳: شکل مسیر پرتو و خطوط هم پتانسیل برای تفنگ الکترونی با فاصله‌های مختلف کاتد و آند و با اعمال میدان مغناطیسی ۱۰۰۰ گوس (الف) ۱۰ میلی‌متر، (ب) ۲۰ میلی‌متر و (ج) ۷۰ میلی‌متر.

همان طور که از شکل ۳ دیده می‌شود، میدان مغناطیسی ناشی از آهنربا سبب تمرکز پرتو خروجی و کاهش قطر آن می‌شود. با تغییر فاصله بین کاتد و آند و افزایش فاصله بین آن‌ها، میدان مغناطیسی سبب تمرکز بهتر پرتو خروجی می‌شود و قطر آن را کاهش می‌دهد.



شکل ٤: تصویر تفنگ الکترونی گرمایونی ساخته شده

شکل ٤ تفنگ الکترونی ساخته شده می‌باشد. علاوه بر آن شکل ۵، نتایج تجربی ناشی از تغییرات جریان گسیلی را با تغییر ولتاژ اعمالی به کاتد نشان می دهد. همان طور که مشاهده می شود، جریان باریکه که توسط تفنگ الکترونی تولید می گردد، در محدوده میلی آمپر می باشد که در توافق کامل با نتایج بدست آمده از شبیه سازی است. علاوه بر آن با افزایش ولتاژ اعمالی به کاتد جریان گسیلی از آند نیز افزایش می یابد.



شکل ۵: تغییرات جریان گسیلی با تغییر ولتاژ اعمالی به کاتد.

نتیجه گیری

در این پژوهش، از طریق میدان مغناطیسی منبع تبخیر الکترونی به وسیله نرم افزار CST طراحی شده و بر اساس نتایج شبیه سازی، دارای قابلیت استفاده در دستگاه های لایه نشانی‌می باشد. نمونه ساخته شده آن به دلیل دارا بودن فاصله متغیر بین کاتد و آند، قابلیت تغییر انرژی و قطر پرتو را دارد . به همین دلیل، می تواند برای تبخیر و لایه نشانی مواد مختلف با نقاط ذوب متفاوت مورد استفاده قرار گیرد.

مرجع ها

[1] S. Humphries; “John Wiley and Sons”; Charged Particle Beams, 1990.
[2] J. Rodney and M. Vaughan; “IEEE TRANSACTIONS ON ELECTRON DEVICES”; VOL. ED-28, NO. 1. (1981) 37.
[3] D M Mattox, “Handbook of Physical Vapor Deposition (PVD) Processing, Noyes Publications”, (1998).
[4].N P Blanchard, A Niguès, M Choueib, S Perisanu, A Ayari, P Poncharal, S T Purcell, A Siria and P Vincent, Appl. Phys. Lett, 106 (2015) 193102.
[5] M. M. Abdelrahman, etal, “Simion Calculations for the triode extraction system” International Journal of theoretical and mathematical physics, 2, No. 5, (2012), 122-129

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مطالعه عددی خواص الکترونی نانولوله‌کربنی تک‌دیواره از نوع کایرال تحت تغییر قطر

خورشیدی میانائی، پریسا[۱] ؛میلانی مقدم، حسین[۱]

[۱]گروه فیزیک حالت جامد، دانشکده علوم پایه، دانشگاه مازندران، بابلسر

چکیده

در این پژوهش، خواص الکترونی نانولوله کربنی تک دیواره نوع کایرال بطور عددی مطالعه شده است. با استفاده از روش تنگ‌بست، رهیافت تابع گرین و فرمول-بندی لانداور، بطور عددی چگالی حالت‌های الکترونی، رسانندگی الکترونی برای نانولوله‌های کربنی (کایرال) به ازای قطرهای مختلف محاسبه شده است. محاسبات نشان می‌دهد تغییر قطر بر ویژگی‌های الکترونی و گاف انرژی نانولوله‌کربنی (کایرال) تأثیر قابل توجهی دارد.

The numerical study of electronic properties of carbon single-walled nanotube (chiral) under diameter change

Khorshidi Mianaei, Parisa[1]; Milani Moghaddam, Hossain[1]

[1]*Department of Solid State Physics, Faculty of Basic Sciences, University of Mazandaran, Babolsar*

Abstract

In this research, the electronic properties of chiral single-walled carbon nanotubes have been numerically studied. Using tight-binding model, Green function theory and Landauer formalism, we numerically investigate the density of states, electronic conductance of chiral single-walled carbon nanotubes under different diameters. Our calculations show that changing diameter of carbon nanotube has remarkable effect on its electronic properties and energy gap.

PACS No. 81

مقدمه

یکی از قابل توجه‌ترین ویژگی‌های نانولوله‌های کربنی، خواص الکترونی منحصر به فرد آنها است [۳-۱]. نانولوله‌های کربنی(n,m) را می‌توان بر اساس ساختار به سه دسته با تعریف یک بردار به نام بردار کایرال C_{h} به صورت زیر تقسیم کرد (m و n اعداد صحیح).

$$C_h = n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2 \qquad (۱)$$

$\vec{a}_1$ و $\vec{a}_2$ بردارهای شبکه گرافن هستند [۲]. یکی از سه دسته به نام نانولوله‌کربنی کایرال $m \neq n \neq 0$ است. نانولوله‌های کربنی کایرال از لحاظ نوری فعال هستند و می‌توانند دو جهت‌گیری غیر معادل مارپیچی داشته باشند [۴]. بدین جهت بررسی چنین نانولوله‌هایی مورد توجه است. همچنین وقتی حاصل $\frac{n-m}{3}$ عدد صحیح باشد، نانولوله ویژگی فلزی و در غیر این صورت ویژگی نیمه‌رسانایی دارد [۵].

در این پژوهش چگالی حالت‌های الکترونی،رسانندگی الکترونی و میزان گاف انرژی نانولوله‌کربنی تک‌دیواره نوع کایرال به ازای قطرهای مختلف محاسبه شده است.روشهای عددی بکار رفته در این محاسبات مبتنی بر هامیلتونی تنگ بست، رهیافت تابع گرین و فرمول بندی لانداور است.

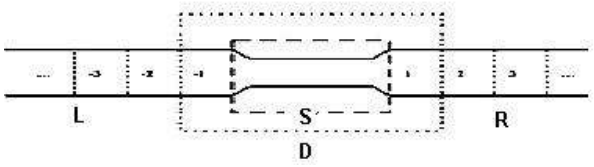
روش محاسبات

در غیاب برهم‌کنش الکترون-الکترون برطبق فرمول‌بندی لانداور،رسانندگی الکترونی، g، در دمای صفر با احتمال عبور کل الکترونی، T(E)، متناسب است [۶]

$$g_0 = \frac{2e^2}{h},\ g = g_0 T(E) \qquad (۲)$$

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مدلی بر طبق شکل ۱ در نظر می‌گیریم و محاسبات طبق مرجع [۷] انجام شده است، که شامل الکترود چپ (L) و الکترود راست (R) و بخش مرکزی (D) است.



شکل۱: مدل طرحواری برای سیستمی شامل دو بخش L و R و قطعه D

با توجه به این تقسیم‌بندی،ماتریس هامیلتونی سیستم به صورت زیر نوشته می‌شود

$$H = \begin{pmatrix} H_L H_{LD} & 0 \\ H_{DL} H_D H_{RD} \\ 0 & H_{DR} H_R \end{pmatrix} \quad (۳)$$

در این مدل فرض می‌کنیم الکترودهای چپ و راست به طور مستقیم با هم برهم‌کنش ندارند. ماتریس تابع گرین به صورت زیراست

$$G = \begin{pmatrix} G_L G_{LD} G_{LR} \\ G_{DL} G_D G_{DR} \\ G_{RL} G_{RD} G_R \end{pmatrix} \quad (۴)$$

با حل معادله زیر می‌توان هر یک از ماتریس های بالا را بدست آورد

$$G(E)(E - H) = 1 \quad (۵)$$

$$G_D(E) = \left(E - H_D - \sum_L(E) - \sum_R(E)\right)^{-1} \quad (۶)$$

که در معادلات بالا E انرژی الکترون، $\sum_{L(R)}(E)$ خود-انرژی الکترود چپ (راست) به‌صورت زیر است

$$\sum_L(E) = H_{\mathrm{DL}} \mathrm{g_L(E) H_{LD}} \quad (۷)$$

$$\sum_R(E) = H_{DR} g_R(E) H_{RD} \quad (۸)$$

که در روابط بالا $g_{L(\mathrm{R})}(\mathrm{E}) = \left(E - H_{L(R)}\right)^{-1}$ نشان‌دهنده تابع گرین الکترودها است.

با کمک فرمول بندی لانداور، احتمال عبور کل الکترونی T(E) و چگالی حالت‌های الکترونی (DOS) عبارت است از

$$T(\mathrm{E}) = \mathrm{Tr}[\Gamma_L(\mathrm{E}) G_D^+(\mathrm{E}) \Gamma_R(\mathrm{E}) \mathrm{G_D(E)}] \quad (۹)$$

$$DOS(E) = -\frac{1}{\pi} Im\{Tr[G_D(E)]\} \quad (۱۰)$$

در رابطه بالا $\Gamma_{L(R)}(\mathrm{E})$ قسمت موهومی خود-انرژی الکترودها است.

هامیلتونی نانولوله‌کربنی در مدل تنگ‌بست عبارت است از

$$H = \sum_i \varepsilon_i c_i^+ c_i - \sum_i t_{i+1,i} (c_{i+1}^+ c_i + c_i^+ c_{i+1}) \quad (۱۱)$$

که c_i^+, c_i به ترتیب عملگرهای خلق و فنای الکترون در جایگاه iام و ε_i انرژی موضعی‌جایگاهی اتم iام، $t_{i+1,i}$ انتگرال انتقال نزدیکترین همسایه‌ها برای الکترون است.طبق مرجع [۸] گاف انرژی E_{g} و قطر نانولوله d عبارتند از

$$E_g = 2\frac{t_0 a_{cc}}{d} \quad (۱۲)$$

$$d = \frac{a_{cc}\sqrt{3(n^2+m^2+mn)}}{\pi} \quad (۱۳)$$

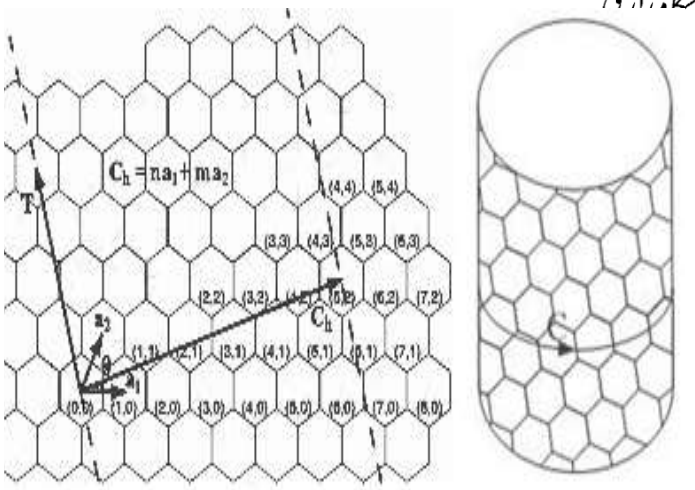
که $a_{cc} = 0.142\, nm$ فاصله بین دو اتم کربن و t_0 انتگرال انتقال نزدیکترین همسایه‌ها برای الکترون است.

بحث و نتایج

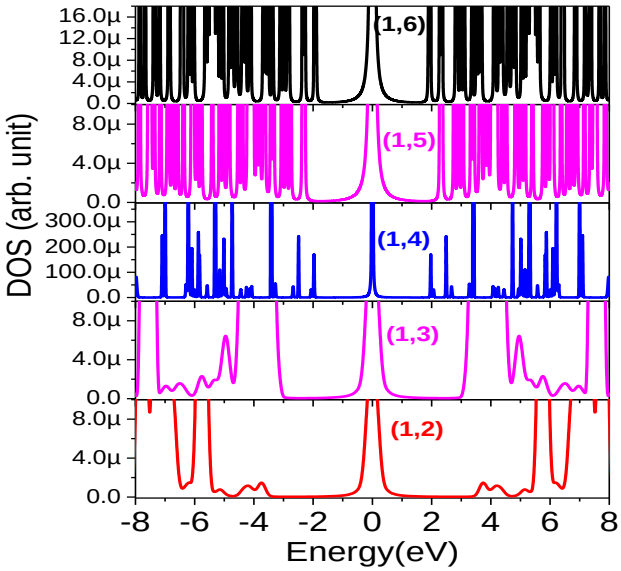
جهت بررسی تأثیر تغییر قطر نانولوله‌های تک‌دیواره نوع کایرال بر خواص الکترونی، محاسبات بر روی ۱۵ نانولوله‌کربنی کایرال (۱،۲)، (۱،۳)، (۱،۴)، (۱،۵)، (۱،۶)، (۲،۳)، (۲،۴)، (۲،۵)، (۲،۶)، (۲،۷)، (۳،۴)، (۳،۵)، (۳،۶)، (۳،۷) و (۳،۸) با طول ۱۰ سلول واحد انجام شده است که نانولوله‌ها (۱،۴)، (۲،۵) و (۳،۶) ویژگی فلزی دارند. طول ۱۰سلول نانولوله‌های (۱،n) انتخابی حدود ۲/۱۳ نانومتر، برای نانولوله‌های (۲،n) انتخابی حدود ۴/۲۶ نانومتر و برای نانولوله‌های (۳،n) انتخابی حدود ۶/۳۹ نانومتر است. هر یک از الکترودهای راست و چپ با طول ۵سلول واحد نانولوله‌کربنی تک دیواره از نوع کایرال به همان صورت مولکول بین دو الکترود فرض شده‌اند.

انرژی‌های موضعی‌جایگاهی اتم‌های کربن صفر و همچنین مقادیر انتگرال انتقال برابر ۳eV- ازمرجع [۷] گرفته شده و شکل ۲ طرحواره یک نانولوله‌کربنی تک‌دیواره نوع کایرال را نشان می‌دهد. شکل ۳، ۴ و ۵ نمودارهای چگالی حالت‌های الکترونی برحسب انرژی و شکل ۶، ۷ و ۸ لگاریتم رسانندگی الکترونی نانولوله‌های کربنی نوع کایرال را نشان می‌دهند. در شکل ۹ مقایسه تغییرات میزان گاف انرژی قابل مشاهده است که با دو مقدار تحلیلی (رابطه ۱۲) و محاسباتی (طبق نمودارDOS) رسم شده است. با توجه به نمودار لگاریتم رسانندگی الکترونی بر حسب انرژی، قله‌های مشاهده شده نشان‌دهنده‌ی پدیده‌ی تونل‌زنی تشدیدی مولکولی نانولوله‌ی کربنی است و همانطور که نمودارهای چگالی الکترونی و رسانندگی الکترونی نشان می‌دهند، تغییرات قطر نانولوله‌کربنی در میزان گاف انرژی تأثیر بسزایی دارد.

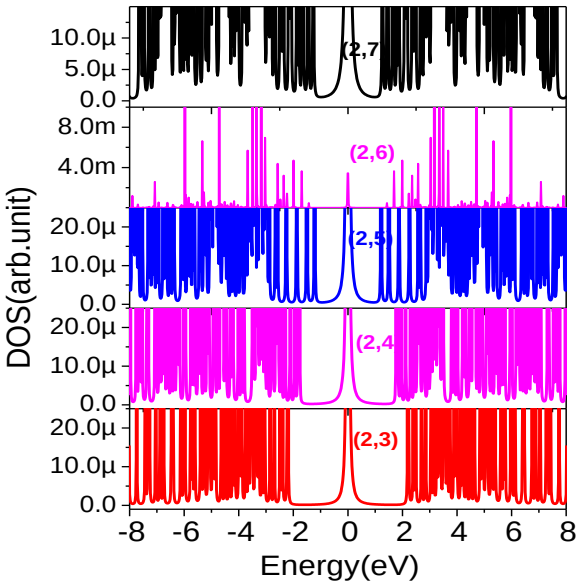
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



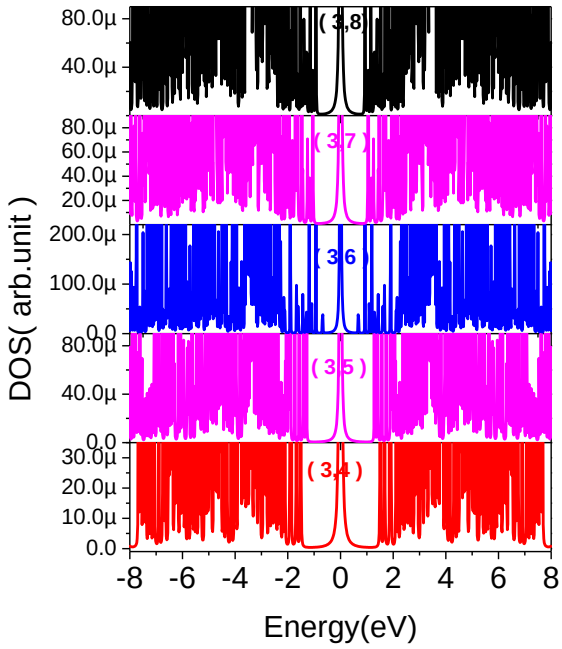
شکل ۲. طرحواره‌ی یک نانولوله کربنی تک‌دیواره نوع کایرال.



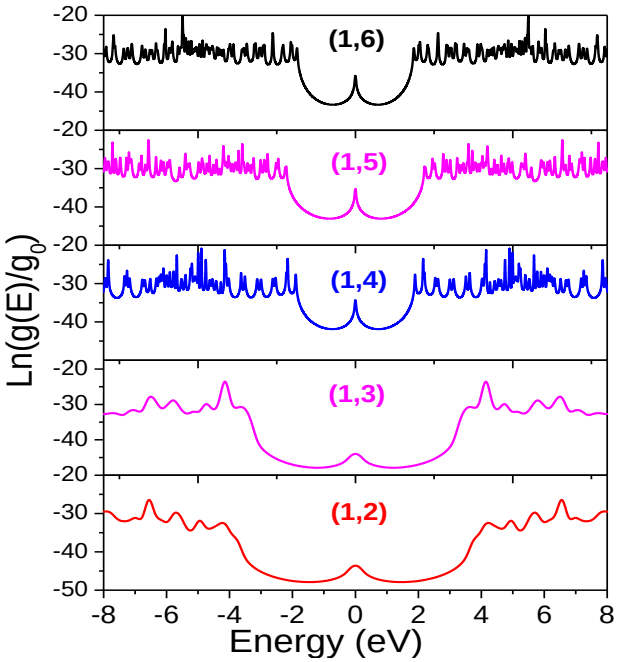
شکل ۳. چگالی نانولوله کربنی نوع کایرال(n،۱)، n مقدار ۲ تا ۶ است.



شکل ۴. چگالی نانولوله کربنی نوع کایرال(n،۲)، n مقدار ۳ تا ۷ است.

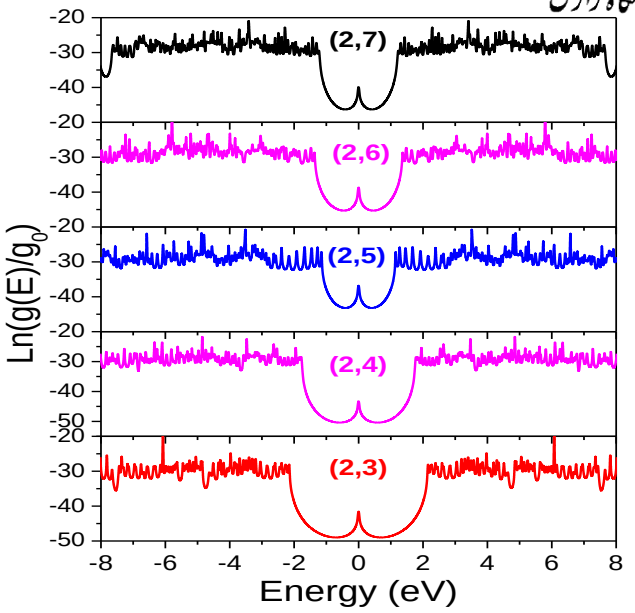


شکل ۵. چگالی نانولوله کربنی نوع کایرال. (n،۳)، n مقدار ۴ تا ۸ است.

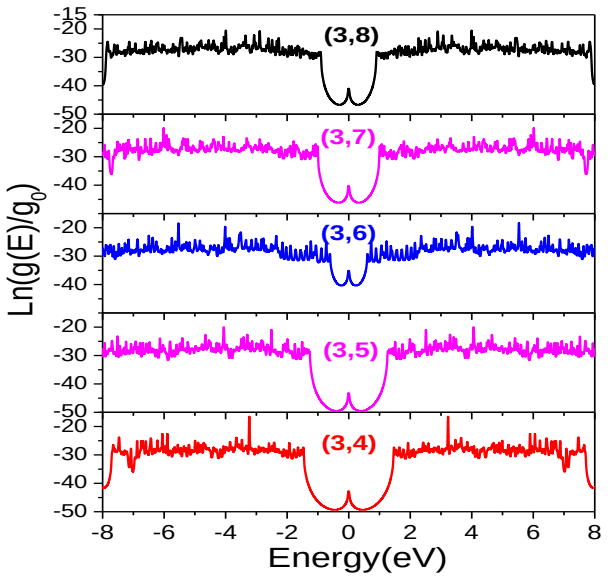


شکل ۶. لگاریتم رسانندگی الکترونی نانولوله کربنی نوع کایرال (n،۱)، n مقدار ۲ تا ۶ است.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد :
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

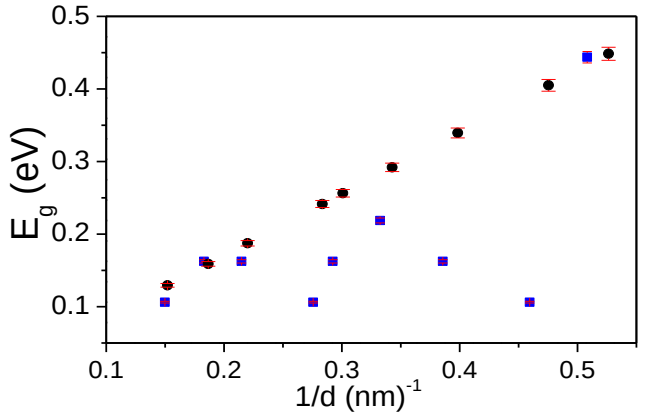


شکل ۷. لگاریتم رسانندگی الکترونی نانولوله کربنی نوع کایرال (n،۲)، n مقدار ۳ تا ۷ است.



شکل ۸. لگاریتم رسانندگی الکترونی نانولوله کربنی نوع کایرال (n،۳)، n مقدار ۴ تا ۸ است.

علت اختلاف نقطه سیاه و آبی در شکل ۹ می‌تواند به دلیل استفاده از روش تنگ‌بست به عنوان یک روش نیمه تجربی با در نظر گرفتن برهم‌کنش نزدیکترین همسایه ها و نیز تقریب در انتخاب پارامترهای استفاده شده در روش تنگ‌بست باشد. اگر از روش اصول اولیه با مدل ابرسلول استفاده شود، نتایج بهتری حاصل خواهد شد.



شکل ۹. تغییرات گاف انرژی به صورت تابعی از $\frac{1}{d}$، که در آن d قطر نانولوله-کربنی کایرال است. نقاط دایره سیاه طبق رابطه (۱۲) و نقاط مربع آبی از روی شکل چگالی حالت‌های الکترونی می‌باشد.

نتیجه گیری

در این تحقیق خواص الکترونی برخی نانولوله‌های کربنی از نوع کایرال مورد بررسی قرار گرفت. چگالی حالت‌های الکترونی و رسانندگی الکترونی آنها طبق فرمول‌بندی لانداور و رهیافت تابع گرین محاسبه شد. نتایج نشان می‌دهد که دو نمودار-های چگالی حالت‌های الکترونی و رسانندگی الکترونی از نظر قله-ها تطابق خوبی با هم دارند. همچنین تغییر گاف انرژی از طریق مقدار از روی نمودار چگالی حالت‌های الکترونی و رابطه (۱۲) بررسی شد و نشان داد که تا حدودی یک روند را دنبال می‌کنند.

مرجع‌ها

[۱] T. Han, A. Nag, S. C. Mukhopadhyay and Y. Xu; "Carbon Nanotubes and its gas-sensing applications: A review"; *Sensors and Actuators A: Physical* **291** (2019) 107-143.

[۲] M. Pakkhesal and R. Ghayour (edited by: J. M. Marulanda); "*Electronic properties of carbon nanotubes; chapter 18-Electronic Band Structure of Carbon Nanotubes in Equilibrium and None-Equilibrium Regimes*"; 1st edition, InTech. (2011) 391-408.

[۳] M. Ghodrati and A. Mir and A. Farmani; "*Nanosensors for smart cities; chapter 11-Carbon nanotube field effect transistors–based gas sensors*"; 1st edition, Elsevier Press (2020) 171-183.

[۴] S. Saito and A. Zettl; *"Carbon Nanotubes, Quantum Cylinders of Graphene";* 1stedition, Elsevier Press (2008).

[۵] C. H. Liu and H. L. Zhang; "Chemical approaches towards single-species single-walled carbon nanotubes"; *Nanoscale* **2** (2010) 1901-1918.

[۶] M. Büttiker, Y. Imry, R. Landauer, and S. Pinhas; "*Generalized many-channel conductance formula with application to small rings*"; *Physical Review B* **31** (1985) 6207 (1-9).

[۷] H. M. Moghaddam; "The CNT/BCN/CNT structure (zigzag type) as a molecular switch"; *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* ***42*** (2009) 167-171.

[۸] G. R. A. Jamal; "Chirality (n,m) dependence of band gap of semiconducting SWCNT"; *ECTI Transactions on Electrical Engineering, Electronics, and Communications* ***11*** (2013).38-42.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بررسی اثر تعداد پالس بر میکروموجبرهای ایجاد شده در شیشه طی فرآیند laser backwriting

عباسی ، شبنم[۱]؛ جعفرفرد ، محمدرضا[۱]؛ رزاقی، داوود[۲]؛ منتظرالقائم، محسن[۲]؛ پازکیان، هدیه[۲]

[۱] دانشکده فیزیک، دانشگاه علم و صنعت ایران، تهران، ایران

[۲] پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، پژوهشکده فوتونیک و فناوری‌های کوانتومی، تهران، ایران

چکیده

در این مقاله فرآیند laser backwriting (LBW) بر روی زیرلایه‌ی شفاف شیشه با استفاده از نمونه‌ی هدف استیل انجام شده است. برای این منظور از لیزر کیوسوئیچ شده‌ی Nd:YAG با طول موج ۱۰۶۴ نانومتر، شاریدگی J/cm^2 ۲/۹، نرخ تکرار ۱۰ Hz و تعداد پالس‌های ۳۰، ۶۰، ۹۰ و ۱۲۰ استفاده شده است. زیرلایه‌ی شیشه به همراه نمونه‌ی استیل توسط عدسی استوانه‌ای با فاصله‌ی کانونی ۱۰ cm تابش‌دهی شده است. نتایج به دست آمده در تعداد پالس‌های مختلف بررسی شده است. نتایج نشان‌دهنده‌ی وابستگی مستقیم نرخ نفوذ یون‌داخل زیرلایه‌ها به تعداد پالس لیزر است. برای بررسی میزان جذب یون بر روی زیرلایه‌ی شفاف از طیف‌سنجی UV-Visible و برای بررسی نوع و درصد عناصر موجود در سطح کانال از آنالیزهای SEM و EDX استفاده شده است.

واژه های کلیدی: فرآیند laser backwriting، زیرلایه‌ی شیشه، نمونه‌ی هدف استیل، لیزر کیوسوئیچ شده‌ی Nd:YAG

The effect of laser pulse number on microchannels formed on glass by laser backwriting process

Abbasi, Shabnam[1]; Jafarfard, Mohammad reza[1]; Razaghi, Davoud[2]; Montazerolghaem, Mohsen[2]; Pazokian, Hedieh[2]

[1] *Physics Department, Iran University of Science and Technology, Tehran, Iran*

[2] *Photonic and Quantum Technologies Research School, Nuclear Science and Technology Research Institute, Tehran, Iran*

Abstract

In this paper, the laser backwriting (LBW) process on glass via ablation of steel as a metal target is studied. A Q-switched Nd:YAG laser worked at 1064 nm, Fluence of 2.9 J/cm^2, repetition rate of 10 Hz and pulse numbers of 30, 60, 90 and 120 is used. The glass substrate with steel target is irradiated by a cylindrical lens with the focal length of 10 cm. The LBW process is investigated under different pulse numbers of laser and the results show that the penetration rate of ions in glass depends on the pulse numbers of laser. The UV-Visible spectroscopy is used for studying the absorption rate of ions on glass and SEM and EDX analysis are used for investigating the concentration and kind of ions on the channels.

***Keywords**: laser backwriting process, glass substrate, steel target, Q-switched Nd:YAG laser*

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد

http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

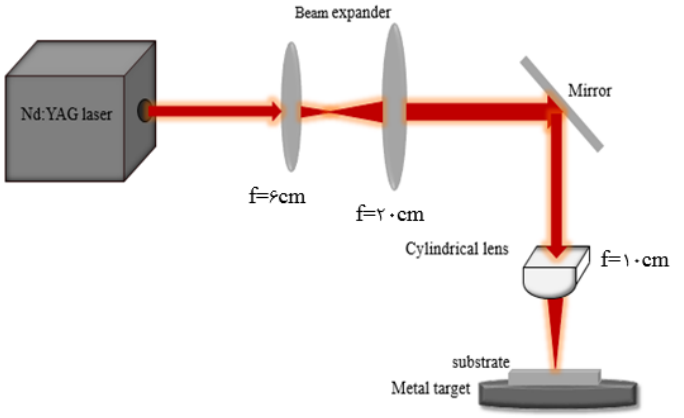
مقدمه

فرآیند LBW روشی برای ساخت میکروموجبرهای نوری جهت استفاده در کاربردهای پزشکی و صنعتی است که برای نخستین بار در سال ۲۰۰۶ به عنوان روشی بر پایه‌ی فرآیند کاشت یونی مطرح شد [۱]. این فرآیند به دلیل کم هزینه بودن و سرعت بالای ساخت می‌تواند جایگزین مناسبی برای ساخت موجبرها به جای استفاده از روش‌های دیگر در نظر گرفته شود [۲]. در این تکنیک نور لیزر کیوسوئیچ شده پس از عبور از زیرلایه‌ی شفاف به سطح نمونه‌ی هدف فلزی برخورد کرده و باعث کندگی و ایجاد پلاسما از سطح فلز می‌شود. مواد کنده شده از سطح فلز به دلیل فشار و دمای بالا در زیرلایه‌ی شفاف ته‌نشین شده و باعث تغییر ضریب شکست در نقاطی که مواد ته‌نشین شده جایگزین اتم‌های اولیه‌ی شبکه‌ی زیرلایه شده‌اند، می‌شود. با تغییر ضریب شکست در منطقه‌ای از زیرلایه، هسته‌ی موجبر تشکیل می‌شود [۳]. بنابراین برای ساخت میکروموجبرها به روش LBW نیاز به دانشی درباره‌ی پارامترهای لیزر و اثر آن بر میزان مواد کنده شده از سطح هدف فلزی است. با دانستن نرخ مواد کنده شده از سطح فلز و انرژی، سرعت و زاویه‌ی این مواد هنگام برخورد با سطح شیشه، می‌توان نرخ نفوذ یون به داخل زیرلایه‌ی شیشه و همچنین درصد مواد درگیر در فرآیند کندوپاش از سطح شیشه را مشخص کرد [۴].

در این مقاله نتایج تجربی حاصل از تغییر تعداد پالس لیزر بر نرخ مواد نفوذ یافته به داخل کانال‌های ایجاد شده در زیرلایه بررسی شده است.

چیدمان آزمایش

مشخصه‌یابی فرآیند laser backwriting در این مقاله توسط لیزر کیوسوئیچ شده‌ی Nd:YAG نانوثانیه با پهنای پالس ۸ns و طول موج ۱۰۶۴nm بر روی زیرلایه‌ی شفاف لام شیشه‌ای مورد بررسی قرار گرفت. ترکیبات مولی لام شیشه‌ای مورد استفاده ٪۷۲ SiO_2 ، ٪ ۰/۵ Al_2O_3 و درصد کمی از اکسیدهای دیگر است. ضخامت لام شیشه‌ای ۱/۰۵ میلیمتر است. لام شیشه‌ای با در نظر گرفتن نقطه‌ی نرم شوندگی بالا و ضریب بسط حرارتی پایین، ماده‌ای با ویژگی‌های حرارتی مناسب برای انجام فرآیند LBW است. در این مقاله از فلز استیل به عنوان فلز هدف استفاده شده است. فلز باید رسانندگی گرمایی پایینی داشته باشد تا انرژی لیزر بیشتری را در محل تابش‌دهی شده نگه داشته و باعث بالا رفتن چگالی انرژی در نقطه‌ی موضعی تابش‌دهی شده از فلز شود و درنتیجه باعث کندگی بیشتر پلاسما از سطح شود. استیل از جمله فلزاتی است که با داشتن رسانندگی گرمایی ۱۴ w/m.k دارای رسانندگی گرمایی بسیار پایینی است. میزان رسانندگی گرمایی بسته به آلیاژهای به کار رفته می‌تواند برای نمونه‌های مختلف تاحدی متغیر باشد. عامل دیگری که در میزان چگالی پلاسمای تولید شده توسط فرآیند کندگی لیزری مهم است، نقطه‌ی جوش فلز است. نقطه‌ی جوش استیل مورد استفاده در این پروژه به طور تقریبی ۲۸۶۰ ^{o}c است. در این مقاله تابش‌دهی لیزر Nd:YAG بر روی نمونه‌ی استیل و با استفاده از زیرلایه‌ی شیشه با عدسی استوانه‌ای و با فاصله‌ی کانونی ۱۰cm انجام شده است. شکل ۱ شماتیکی از طرح چیدمان آزمایش را نشان می‌دهد. در این آزمایش به منظور جلوگیری از صدمه به آینه‌ها از دو عدسی به عنوان انبساط گر پرتو لیزر استفاده شده است. نور لیزر از یک آینه‌ی تخت تحت زاویه‌ی ۴۵ درجه بازتاب شده و پس از عبور از زیرلایه به سطح فلز می‌رسد.



شکل ۱ : طرحی از چیدمان آزمایشگاهی مورد استفاده در این پروژه

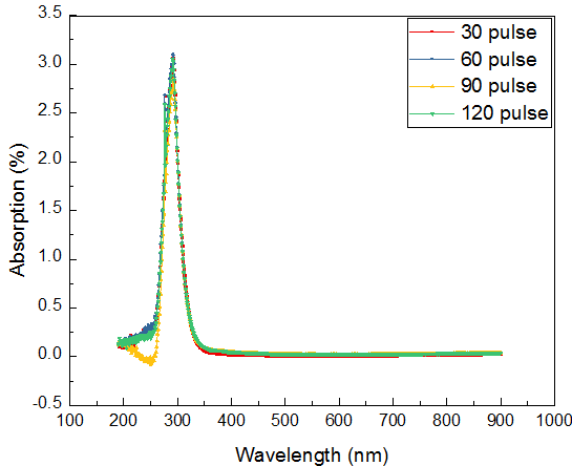
در این مقاله تابش‌دهی در شاریدگی ۲/۹ J/cm^2 با نرخ تکرار ۱۰Hz و تعداد پالس‌های ۳۰، ۶۰، ۹۰ و ۱۲۰ انجام شده است.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

نتیجه‌گیری و بحث

کندگی از سطح فلز و برهم‌کنش پلوم پلاسمای حاصل از کندگی با سطح زیرلایه‌ی شیشه دو فرآیند کلیدی در تئوری LBW به شمار می‌روند. طی برهم کنش پلوم پلاسما با سطح شیشه، فرآیندهای مختلفی شکل میگیرد که باعث می‌شود ذرات پلوم با توجه به انرژی، زاویه‌ی برخورد و سرعت هنگام برخورد با شیشه، در عمق کانال ایجاد شده در زیرلایه نفوذ کنند و یا طی فرآیند کندوپاش از سطح کانال به سمت اطراف کانال پرتاب شوند. هرچه انرژی ذرات برخوردی به سطح شیشه بیشتر باشد، نفوذ ذرات به داخل شیشه افزایش می‌یابد و اگر انرژی ذرات کمتر باشد، این ذرات در فرآیند کندوپاش شرکت می‌کنند و به سمت اطراف کانال پرتاب می‌شوند [۵].

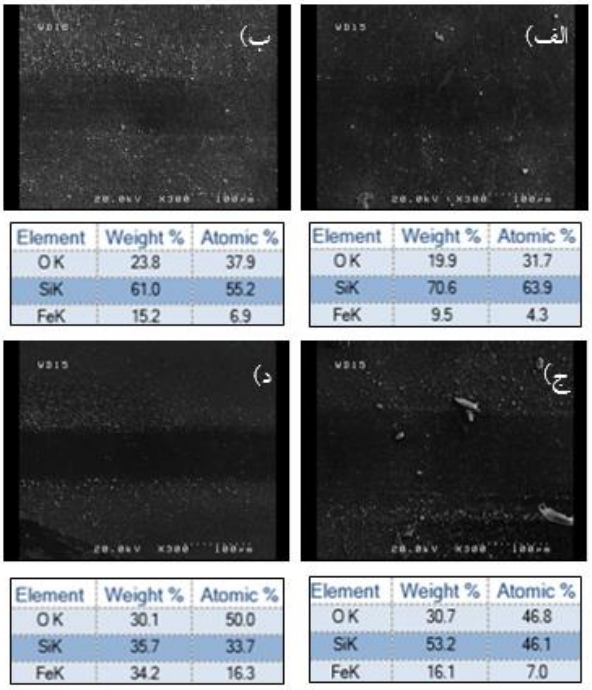
در شکل زیر نتایج طیف‌سنجی مربوط به نمونه‌های ایجاد شده بر روی شیشه با شاریدگی ۲/۹ J/cm^2 و نرخ تکرار ۱۰Hz و تعداد پالس‌های ۳۰، ۶۰، ۹۰ و ۱۲۰ مشاهده می‌شود که به دلیل بزرگتر بودن قطر پرتو موجود در طیف‌سنج نسبت به پهنای کانال-های ایجاد شده در شیشه، طیف موجود نشان دهنده‌ی عناصر قرار گرفته در اطراف و عمق کانال ایجاد شده است. پیک موجود در طیف‌ها مربوط به یون آهن کنده شده از نمونه‌ی استیل است که به سمت شیشه هدایت شده است.



شکل۲ : نمودار طیف جذبی نمونه‌های ایجاد شده بر روی شیشه با شاریدگی ۲/۹ J/cm^2 و نرخ تکرار ۱۰ Hz

همانطور که از شکل ۲ مشخص است با تغییر تعداد پالس، تغییری در میزان جذب یون آهن در نمونه‌های شیشه وجود ندارد که این نشان دهنده‌ی به اشباع رسیدن فرآیند جذب در شیشه است. با توجه به شدت بالای پیک‌های موجود در شیشه طبیعی است که میزان جذب در شیشه بسیار بالا بوده و در نتیجه نفوذ یون اشباع شده است.

شکل ۳ تصاویر SEM و نتایج حاصل از آنالیزهای EDX را در اطراف کانال‌ها نشان می‌دهد.



شکل۳ : نتایج حاصل از آنالیزهای SEM و EDX نمونه‌های ایجاد شده برروی شیشه با شاریدگی ۲/۹ J/cm^2 و نرخ تکرار ۱۰Hz و تعداد پالس الف) ۳۰ ب) ۶۰ ج) ۹۰ د) ۱۲۰

همانطور که از شکل بالا مشخص است، آنالیزهای مربوط به EDX در اطراف کانال‌های ایجاد شده که در تصاویر SEM قابل مشاهده هستند، انجام شده است. عناصر O و Si مربوط به ترکیبات شیشه و Fe مربوط به نمونه‌ی هدف استیل است که طی فرآیند کندگی از استیل جدا شده و برروی شیشه قرار گرفته است. عناصر موجود در نمونه‌ی استیل توسط آنالیز پرتو ایکس (XRF) به دست آمده است که ترکیبات آن حاوی ۶۸/۸۳ % آهن است. با

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

توجه به نتایج حاصل از SEM و EDX با افزایش تعداد پالس از ۳۰ به ۱۲۰ پالس، میزان عناصر موجود در اطراف کانال‌ها افزایش یافته است. این درحالیست که با توجه به نتایج حاصل از شکل ۲ با افزایش تعداد پالس تغییری در میزان جذب یون در کانال‌ها مشاهده نمی‌شود. بنابراین با توجه به ثابت بودن میزان جذب یون در اطراف و داخل کانال در طیف سنجی و تغییر میزان یون در اطراف کانال طی تحلیل EDX می‌توان چنین نتیجه گرفت که با افزایش تعداد پالس نرخ موادی که در فرآیند کندوپاش از سطح شیشه شرکت کرده اند افزایش یافته و میزان موادی که در عمق کانال نفوذ کرده‌اند کاهش یافته است، بدین ترتیب در مجموع مواد ته‌نشین شده در داخل و اطراف کانال‌ها ثابت باقی می‌ماند.

با افزایش تعداد پالس به دلیل بیشتر شدن چگالی انرژی وارد شده به سطح استیل، میزان مواد کنده شده از استیل افزایش می‌یابد و با افزایش حجم مواد کنده شده، مواد از عمق بیشتری از استیل کنده می‌شوند. بنابراین موادی که از استیل کنده شده‌اند، مسافت بیشتری را طی کرده و به سطح شیشه می‌رسند و سرعت و انرژی آن‌ها هنگام برخورد به سطح شیشه کاهش می‌یابد. بنابراین به دلیل کمتر شدن انرژی ذرات، توان نفوذ ذرات به عمق زیرلایه کاهش یافته و طی فرآیند کندوپاش به سمت اطراف کانال پرتاب می‌شوند.

نتیجه گیری

در این مقاله اثر تعداد پالس لیزر بر فرآیند laser backwriting با استفاده از زیرلایه‌ی شفاف شیشه و نمونه‌ی هدف استیل مطالعه شده است. با افزایش تعداد پالس، میزان پلاسمای کنده شده از سطح استیل توسط لیزر کیوسوئیچ شده‌ی Nd:YAG افزایش یافته و در نتیجه باعث کاهش انرژی ذرات هنگام برخورد به سطح شیشه می‌شود. با کاهش انرژی ذرات، میزان نفوذ ذرات به داخل شیشه کاهش یافته و میزان موادی که در فرآیند کندوپاش شرکت کرده‌اند و به سمت اطراف کانال پرتاب شده‌اند، افزایش یافته است.

مرجع‌ها

[1] C. Gómez-Reino *et al.*, "Laser backwriting process on glass via ablation of metal targets," *Opt. Commun.*, vol. 273, no. 1, pp. 193–199, 2007.

[2] R. Rangel-Rojo, A. Castelo, M. T. Flores-Arias, C. Gómez-Reino, C. López-Gascón, and G. F. De La Fuente, "Waveguide formation by laser backwriting ablation of metals unto glass substrates," *AIP Conf. Proc.*, vol. 992, pp. 231–236, 2008.

[3] C. I. López-Gascón, M. T. Flores-Arias, R. Rangel-Rojo, G. F. de la Fuente, C. Gómez-Reino, and A. Castelo, "Refractive index modification in glass by laser backwriting ablation of metals," *Opt. Express*, vol. 14, no. 19, p. 8765, 2006.

[4] W. Möller and S. Resume, "Fundamentals of Ion-Surface Interaction," *a Lect. held Tech. Univ. Dresden*, pp. 1–77, 2002.

[5] E. J. Ku, F. Steiner, J. Tru, A. Ruckenstein, T. Mu, and F. Steiner, *Springer Tracts in Modern Physics Volume 198 Springer Tracts in Modern Physics Solid-State Physics , Editors Elementary Particle Physics , Editors Complex Systems , Editor*, vol. 198. 2003.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مطالعه واپاشی آلفازای ایزوتوپ های فوق سنگین در طیف جرمی $106 \leq Z \leq 118$

سیدی ، سید امین

دانشگاه پیام نور، دانشکده علوم، گروه فیزیک، تهران، ایران

چکیده

در این تحقیق، واپاشی آلفازا برای هسته های فوق سنگین در ناحیه جرمی $106 \leq Z \leq 118$ با استفاده از مدل هارتری- فاک- بوگولیوبوف مطالعه شده است. انرژی های حاصل از واپاشی این هسته های فوق سنگین مورد محاسبه قرار گرفته است. با استفاده از این انرژی های بدست آمده و فرمول های نیمه تجربی به محاسبه نیمه عمر واپاشی های آلفازای هسته های فوق سنگین در بازه مورد بررسی پرداخته ایم. نتایج بدست آمده با داده های تجربی موجود مورد مقایسه قرار گرفته است. نتایج بدست آمده نشان می دهند که انرژی های واپاشی مبتنی بر توابع چگالی انرژی SkP در توافق خوبی با داده های تجربی در مقایسه با سایر پارامتر بندی های مورد مطالعه قرار دارند. همچنین با مقایسه بین نتایج بدست آمده در خصوص نیمه عمرهای واپاشی آلفازا با نتایج تجربی موجود نشان داده شده است که از بین مدل های مورد بررسی، مدل mB1 کمترین انحراف معیار نسبت به داده های تجربی را در مقایسه با سایر مدل های تحت مطالعه دارا می باشد.

واژه های کلیدی: *واپاشی آلفازا، توابع اسکریم، مدل هارتری- فاک- بوگولیوبوف.*

Alpha Decay Study of Superheavy Isotopes in the Mass Range $106 \leq Z \leq 118$

Seyyedi, Seyyed Amin

Sciences Faculty, Physics group, Payame Noor University, P. O. Box 19395-4697, Tehran, Iran

Abstract

In this study, the Alpha decay for superheavy nuclei in the range of 106 10Z≤118 was studied using the Hartree-Fock-Bogoliubov model. The decay energy of these superheavy nuclei has been calculated. Using these obtained energies and semi-empirical formulas, we have calculated the half-lives of alpha decay of superheavy nuclei in the study range. The results are compared with the available experimental data. The results show that the decay energies based on the SkP energy density functional are in good agreement with the experimental data. Also, by comparing the results obtained for Alpha decay half-lives with existing experimental data, it has been shown that among the studied models, mB1 model has the lowest standard deviation compared to experimental data.

***Keywords**: Alpha decay, Skyrme functions, Hartree-Fock-Bogoliubov model.*

PACS No.: 21.10.Dr , 21.10.Tg, 21.60.Jz

مقدمه

در دهه های اخیر مطالعه هسته های واقع در نواحی عناصر فوق سنگین دور از جزایر پایداری، جزء موضوعات مورد توجه و جالب فیزیک هسته ای قرار گرفته است [1-7]. سوال مهمی که در این حوزه وجود دارد این است که نهایتا چند نوکلئون می توانند در تشکیل یک هسته فوق سنگین پایدار مشارکت داشته باشند؟ واپاشی آلفازا یکی از مهم‌ترین مدهای واپاشی هسته های سنگین و فوق سنگین است. واپاشی آلفازا به عنوان نشانه تجربی مهمی است که منجر به شناسایی تجربی عناصر فوق سنگین جدید و ایزوتوپ های آن می‌شود. به لحاظ تجربی مشاهده گر این فرایندهای واپاشی، نیمه عمرهای واپاشی و انرژی ذره آلفای ساطع شده است. پس تفسیر داده های موجود برای پیش بینی آزمایشات جدید

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد

http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

اهمیت پیدا کرده است و این اهمیت در طراحی آزمایشات جدید است چون تکنیک های انتخاب شده به نیمه عمر و مد واپاشی وابسته است. درک اینکه چقدر مدل‌های موجود می‌توانند انرژی Q_α و نیمه عمرهای واپاشی α را به دقت پیش بینی و تفسیر کنند مهم است. این مشاهده پذیرهای Q_α و نیمه عمرهای واپاشی، در طول چند سال گذشته توسط فرمالیسم های نظری مختلفی مورد بررسی قرار گرفتند [8]. در این مقاله با استفاده از مدل خودنگهدار هارتری- فاک - بوگولیوبوف برای مقادیر Q_α واپاشی آلفازای هسته های فوق سنگین و نیمه عمرهای مرتبط با آن مطالعه سیستماتیک خواهیم داشت. این محاسبات بر اساس برنامه های محاسباتی مختلف برای حل معادلات هارتری-فاک -بوگولیوبوف با تقارن محوری و اندرکنش های اسکریم مختلف قرار دارد. دلیل جستجوی نتایج اندرکنش‌های مختلف اسکریم این است که بررسی سیستماتیک مقادیر Q_α به اثرات پوسته تغییر شکل یافته و کروی وابسته است و نیز به پارامترهای هامیلتونی وابسته است. چندین پارامتربندی اسکریم وجود دارد که هر کدام با تابع وزنی مختلف و تاکید بر روی خواص ساختارهای هسته‌ای موجود تعیین شدند. از این نتایج برای پیش بینی مقادیر انرژی و نیمه عمر هسته ها استفاده شده است. امیدواریم نتایج این تحقیق در جستجوی تجربی هسته های فوق سنگین ناشناخته مفید فایده باشد.

مبانی نظری تحقیق

نظریه ساختارهای هسته ای در یک چارچوب میکروسکوپیک جامع می تواند خواص هسته ای پایه، برانگیختگی های هسته ای و واکنش های هسته ای را توصیف کند. یک چارچوب مناسب برای توصیف این سیستم های چند جسمی نظریه هارتری-فاک است [9]. این نظریه استفاده از تقریب میدان میانگین را مجاز می کند. در این روش، هامیلتونی دو جسمی یک سیستم چند فرمیونی بر حسب مجموعه ای از اپراتورهای تولید و نابودی $C,C^\dagger$ نوشته می شود:

$$H=\sum_{n_1,n_2} e_{n_1n_2}C^\dagger_{n_1}C_{n_2} + \frac{1}{4}\sum_{n_1n_2n_3n_4}\bar{v}_{n_1n_2n_3n_4}C^\dagger_{n_1}C^\dagger_{n_1}C_{n_4}C_{n_3} \quad (1)$$

در این رابطه $\bar{v}_{n_1n_2n_3n_4}=\langle n_1n_2|V|n_3n_4-n_4n_3\rangle$ عناصر ماتریسی اندرکنش دو جسمی پادمتقارن شده می باشند. اپراتور $\alpha_k,\alpha^\dagger{}_k$ اپراتور تولید و نابودی شبه ذره هستند که با تبدیل بوگولیوبوف به اپراتور های متناظر ذره واقعی مرتبط می شوند:

$$\alpha_k=\sum_n (U^*_{nk}C_n+V^*_{nk}C^\dagger_n) \quad (2)$$

$$\alpha^\dagger{}_k=\sum_n \left(\mathrm{V}_{nk}C_n+\mathrm{U}_{nk}C^\dagger_n\right) \quad (3)$$

مقدار چشمداشتی هامیلتونین رابطه ۱ به صورت تابع انرژی زیر نمایش داده شده است:

$$E[\rho,k]=\frac{\langle\varphi|H|\varphi\rangle}{\langle\varphi|\varphi\rangle}=Tr\left[(\rho+\frac{1}{2}\Gamma)\rho\right]-\frac{1}{2}Tr[\Delta k^*] \quad (4)$$

$$\Gamma_{n_1n_3}=\sum_{n_2n_4}\bar{v}_{n_1n_2n_3n_4}\rho_{n_4n_2} \quad (5)$$

$$\Delta_{n_1n_2}=\frac{1}{2}\sum_{n_3n_4}\bar{v}_{n_1n_2n_3n_4}\kappa_{n_3n_4} \quad (6)$$

با استفاده از روش وردشی و مینیمم کردن انرژی فوق می توان به ویژه مقادیر انرژی دست پیدا کرد. در محاسبات حاضر، از کد فرترن HFBTHO v2.00d [10] استفاده شده است. همچنین از تابع حالت پایه تک ذره به صورت تابع نوسانگر هارمونیک تبدیل یافته استفاده شده است. هامیلتونین هارتری-فاک بر اساس چگالی های انرژی اسکریم تعمیم یافته نوشته شده است. از توابع مختلف اسکریم به عنوان تابع نیروی موثر استفاده شده است. در این کار برای حالت پایه نوسانگر هارمونیک تعداد پوسته های نوسانگر برابر ۲۰ انتخاب شده است. با توجه به اینکه تلاش ها در نواحی فوق سنگین جدول هسته ای در جریان است ایزوتوپ های در طیف $106<Z<118$ انتخاب شده است. برای این هسته های تحت بررسی تغییر شکل ذاتی چارقطبی اعمال شده است. در این تحقیق برای محاسبه نیمه عمر از رابطه نیمه تجربی زیر استفاده شده است:

$$log_{10}(T_{\frac{1}{2}})=(aZ+b)Q+cZ+D+h_{log} \quad (7)$$

در رابطه فوق Z برابر عدد اتمی هسته مادر و مقادیر ثابت های a، c،b و d به ترتیب عبارتند از: $1.66175,\ 8.5166,-0.20228$

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

33.9069. کمیت hlog برای هسته های زوج-زوج در نظر گرفته شده در این تحقیق برابر صفر در نظر گرفته شده است. این رابطه به رابطه VSS مشهور است. همچنین در این تحقیق از روابط mB1،semFIS2 نیز استفاده شده است. جزئیات بیشتر در مرجع [11] آمده است.

نتایج و بحث

در تحقیق حاضر توابع اسکریمSkP, SKM*, Sly4, Sly7 در توصیف خواص حالت پایه هسته های فوق سنگین به عنوان تابع نیروی موثر استفاده شده است.

جدول شماره ۱: انرژی های بدست آمده از مدل هارتری- فاک- بوگولیوبوف مبتنی بر نیروهای اسکریم مختلف. داده های تجربی جهت مقایسه در ستون آخر ارائه شده است [12]. عدد های اتمی و نوترونی هسته های مادر در ستون اول و دوم نشان داده شده اند.

Z	N	$Q_{SkP}^{Calc.}$	$Q_{SLY4}^{Calc.}$	$Q_{SLY7}^{Calc.}$	$Q_{SkM*}^{Calc.}$	$Q^{Expt.}$
118	176	11.76	11.14	13.02	12.14	11.81
117	177	11.08	10.96	11.71	10.68	11.07
117	176	11.47	11.38	12.37	9.41	11.18
116	177	10.62	10.56	11.45	10.82	10.67
116	176	10.85	11.36	10.58	11.48	10.8
115	175	10.12	10.11	11.32	9.96	10.4
115	174	10.09	10.64	10.37	9.55	10.52
114	175	9.74	9.61	10.22	10.34	9.96
114	174	10.45	9.81	10.51	10.7	10.09
113	173	10.5	10.46	8.99	10.41	9.77
113	172	10.55	10.25	9.84	10.82	10.03
112	173	9.91	9.94	9.08	10.27	9.29
112	171	10.79	10.31	9.62	11.52	9.67
111	171	10.17	9.86	9.39	11.42	9.5
111	169	10.45	10.77	9.64	11.61	9.87
110	169	10.15	10.41	10.28	11.26	9.84
110	167	10.39	10.7	11.25	11.38	10.84
109	169	9.55	9.8	9.65	10.6	9.46
109	167	10.15	10.05	8.44	10.79	9.85
108	167	9.66	9.63	9.75	10.32	9.44
108	165	9.82	9.34	8.96	10.24	9.73
107	165	9.39	12.6	11.85	9.98	9.15
107	164	9.57	8.98	9.57	10.21	9.49
106	159	9.8	9.28	8.51	10.11	9.05
106	153	10.23	9.64	10.66	10.99	9.8

در مورد هسته‌ای فرد از تصحیح لیپکین- نوگامی استفاده شده است. این نیروها در جرم موثر، انرژی سطحی و تصحیحات مرکز جرم متفاوت هستند. انرژی قطع برابر ۶۰ MeV در نظر گرفته شده است. با توجه به اینکه تلاش ها در نواحی Z>100 جدول هسته ای برای درک ساختارهای هسته ای و جستجوی ایزوتوپ های پایدار در جریان است. پارامتر تغییر شکل چارقطبی β_2 برای هسته های مادر و دختر در محاسبات انرژی بستگی آنها لحاظ شده است. مقادیر انرژی واکنش واپاشی آلفازا را برای هسته های $106 \leq A \leq 118$ که داده های تجربی آنها موجود است مورد بررسی قرار داده ایم. مقادیر Q_α از روی انرژی های بستگی با استفاده از رابطه زیر محاسبه شده است:

$$Q_\alpha(N,Z) = B(N-2,Z-2) + B(2,2) - B(N,Z)$$

که $B(N,Z)$ و $B(N-2,Z-2)$ انرژی بستگی هسته های مادر و دختر به ترتیب هستند. انرژی بستگی برای ذره α برابر $B(2,2) \approx 28.296\ MeV$ در نظر گرفته شده است. مقادیر Q_α به دست آمده توسط چهار نیروی مختلف در جدول شماره ۱ به نمایش در آمده است. انحراف معیار داده های محاسبه شده با مقادیر تجربی محاسبه شده است. بر اساس نتایج بدست آمده پارامتر بندی SkP کوچکترین انحراف معیار را با داده های تجربی به مقدار ۰,۵۴ نشان می‌دهند در حالی که با استفاده از پارامتر بندی *SKM بیشترین انحراف معیار بدست آمده برابر با ۱,۱۲ است. برای مدل SLY4 انحراف معیار برابر ۰,۶۲ و برای مدل SLY7 برابر ۰,۶۹ است. در این مرحله، با استفاده از پارامتر بندی SkP که کوچکترین انحراف معیار را نسبت دیگر اندرکنش های مورد بررسی، نشان می دهد به محاسبه نیمه عمر واپاشی آلفازای

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

جدول شماره ۲: نیمه عمرهای آلفازا محاسبه شده بر اساس فرمول های نیمه تجربی مختلف. نیمه عمرهای تجربی در ستون آخر جهت مقایسه لیست شده اند [13]. اعداد اتمی و نوترونی در ستون اول و دوم به ترتیب لیست شده اند.

Z	N	$T_{\frac{1}{2}}^{semFIS2}(S)$	$T_{\frac{1}{2}}^{mB1}(S)$	$T_{\frac{1}{2}}^{VSS}(S)$	$T_{\frac{1}{2}}^{Expt.}(S)$
118	176	1.32E-03	7.47E-04	8.33E-04	8.90E-04
117	177	3.86E-01	7.00E-02	2.50E-01	5.10E-02
117	176	8.57E-03	6.66E-03	1.20E-02	1.40E-02
116	177	5.19E-01	1.79E-01	1.68E+00	5.30E-02
116	176	3.70E-02	1.95E-02	3.63E-02	1.80E-02
115	175	2.89E+01	3.44E+00	2.21E+01	1.60E-02
115	174	7.31E+00	2.41E+00	1.20E+01	2.20E-01
114	174	8.51E-02	5.38E-02	9.75E-02	8.00E-01
114	173	1.76E+00	5.13E-01	4.68E+00	4.80E-01
113	173	5.43E-01	1.73E-01	4.74E-01	2.00E+01
113	172	8.19E-02	7.88E-02	1.54E-01	5.50E+00
112	173	1.81E+00	1.02E+00	8.12E+00	3.40E+01
112	171	1.29E-02	1.11E-02	3.79E-02	3.80E+00
111	171	8.47E-01	3.52E-01	8.59E-01	5.00E-01
111	169	2.16E-01	8.29E-02	1.55E-01	3.60E+00
110	169	1.20E-01	1.03E-01	4.13E-01	2.00E-01
110	167	3.74E-02	2.95E-02	9.47E-02	4.10E-03
109	169	8.85E+00	3.77E+00	1.06E+01	7.60E+00
109	167	2.65E-01	1.35E-01	2.15E-01	7.20E-01
108	167	5.25E-01	5.20E-01	2.09E+00	1.90E-01
108	165	2.59E-01	2.14E-01	7.43E-01	7.60E-01
107	165	6.72E+00	3.13E+00	6.29E+00	9.80E+00
107	164	4.41E-01	6.95E-01	8.99E-01	1.20E+00
106	159	8.72E-02	8.17E-02	1.83E-01	2.88E+01
106	158	4.28E-02	5.08E-02	3.13E-02	1.03E-01

هسته‌های فوق پرداخته ایم. در این محاسبات از مدل های نیمه تجربی VSS, mB1, semFIS2 استفاده شده است. مقادیر این نیمه عمرها برای هسته های فوق در جدول شماره ۲ به نمایش درآمده است. بر اساس داده های این جدول و محاسبات حاضر مدل mB1 کمترین انحراف معیار به مقدار ۵,۵۴ و مدل semFIS2 بیشترین انحراف معیار را به مقدار ۷,۷۵ نسبت به داده های تجربی تولید می‌کند. مدل VSS نیز انحراف معیار ۶,۵۹ را با داده های تجربی دارد.

نتیجه گیری:

در این مطالعه، با استفاده از مدل هـارتری- فـاک- بوگولیوبـوف و استفاده از اندرکنش های نوکلئون-نوکلئون واقعی مبتنـی بـر توابـع اسکریم مختلف به بررسی واپاشی آلفازای هسته های فوق سـنگین در ناحیـه جرمـی $\mathbf{106 \le Z \le 118}$ پرداختـه ایـم. انـرژی هـای حاصل از واپاشی این هسته های فوق سـنگین بـا محاسـبه انـرژی بستگی هسته های دختر و مادر حاصـل از واپاشـی مـورد محاسـبه قرار گرفته است. در ادامه با استفاده از این نتایج و نیز فرمول هـای نیمه تجربی به محاسبه نیمه عمرهای واپاشی هـای آلفـازای هسـته های فوق سنگین در بازه مورد بررسی پرداخته ایـم. نتـایج بدسـت آمده در توافق خوبی با داده های تجربی موجود قـرار دارنـد. ایـن نتایج در جدول شماره ۱ و ۲ نشان داده شده انـد. همچنـین نتـایج بدست آمده نشان می دهند که انرژی های واپاشی مبتنی بـر توابـع چگالی انرژی SkP داده های تجربی را با تقریب خوبی در مقایسه با سایر پارامتر بندی های مورد مطالعه بازتولید می کنند. همچنـین نتایج بدست آمده نشان می دهند که از بین مدل های مورد بررسی، مدل mB1 کمترین انحراف معیار نسبت بـه داده هـای تجربـی را دارا می باشد و از توافق خوبی با داده های تجربی برخوردار است.

مرجع‌ها

[1] Y. Lim, Jeremy W. Holt, *Phys. Rev. C* **95** (2017) 065805.
[2] E. Shin, Y. Lim, C. Hyun, Y. Oh, *Phys. Rev. C* **94** (2016) 02430.
[3] H. C. Manjunatha, *Nucl. Phys. A*, **945** (2016) 42-57.
[4] C. Samanta, P. Roy, D. N. Basu, *Nucl. Phys. A*, **789** (2007) 142-154.
[5] H. C. Manjunatha, N. Sowmya, *Nucl. Phys. A*, **969** (2018) 68-82.
[6] D. T. Akrawy, H. Hassanabadi, S. S. Hosseini, K. P. Santhosh, *Nucl. Phys. A*, **975** (2018) 19-28.
[7] P. Roy, C. Samanta, D. N. Basu, *Phys. Rev. C* **77** (2008) 044603.
[8] O. N. Ghodsi, M. Hassanzad, *Nucl. Phys. A* **987**, (2019) 369–381.
[9] M.V. Stoitsov, J. Dobaczewski, W. Nazarewicz, P. Ring, *Comp. Phys. Commun*, **167** (2005) 43.
[10] M. V. Stoitsov *et al*., *Comp. Phys. Commun*, **184** (2013) 1592
[11] V. E . Viola, G.T. Seaborg, J. Inorg. *Nucl. Chem* **28** (1966) 697.
[12] Yu. Ts . Oganessian, V.K. Utyonkov, Yu . V. Lobanov, *Phys. Rev. C* **74** (2006) 044602.
[13] M. Wang, G. Audi, A.H. Wapstra, F.G. Kondev, M. MacCormick, X. Xu, B. Pfeiffer, *Chin. Phys. C* **36** (2012) 1603.

مطالعه ترازهای انرژی زنجیره ایزوتوپی $^{178-184}Pt$ در قالب مدل Z(5)

صیدی، مسعود[1]؛ صبری، هادی[2]

[1] گروه فیزیک، دانشگاه ایلام، ایلام

[2] دانشکده فیزیک، دانشگاه تبریز، تبریز

چکیده

طیف انرژی زنجیره ایزوتوپی هسته $^{178-184}Pt$ در قالب حد تقارنی Z(5) مدل هندسی تجمعی بوهر - ماتلسون مطالعه گردید. با جداسازی هامیلتونین به دو قسمت شعاعی و زاویه ای، از دو نوع پتانسیل چاه مربعی نامتناهی و پتانسیل مورس برای حل قسمت شعاعی استفاده گردید. نتایج حاصل انطباق مناسب پیش بینی های مدل انتخابی با هر دو نوع پتانسیل شعاعی و نتایج تجربی را نشان میدهد. افزایش دقت مدل انتخابی بصورت ویژه در خصوص ترازهای باند پایه با استفاده از پتانسیل چاه مربعی نامتناهی نیز مشهود میباشد. نتایج حاصل را میتوان برای انتخاب هسته ^{178}Pt به عنوان بهترین نمونه برای نقطه بحرانی Z(5) ارزیابی نمود.

واژه های کلیدی: *ترازهای انرژی، مدل هندسی تجمعی بوهر - ماتلسون، مدل Z(5)، باند پایه.*

Investigation of energy levels of $^{178-184}Pt$ isotopic chain by Z(5) model

Seidi, Masoud[1]; Sabri, Hadi[2]

[1] Department of Physics, Ilam University, Ilam, Iran,
[2] Department of Physics, University of Tabriz, Tabriz, Iran

Abstract

The energy spectrum of $^{178-184}Pt$ nucleus is studied in the Z(5) dynamic limit of Bohr-Mottelson geometric collective model. By separating the Hamiltonian of model into radial and angular parts, two infinite square well and Morse potentials are used to solve the radial part of model. The results of model by using both potentials show satisfactory agreement in comparison with experimental counterparts. The high accuracy of considered model by infinite square well potential is obvious in description of the energy levels of ground band. Our results can use to introduce ^{178}Pt nucleus as the best candidate for Z(5) critical point.

***Keywords**: energy levels, Bohr-Mottelson geometric collective model, Z(5) model, ground band.*

PACS No. 21

مقدمه

طیف انرژی هسته های مختلف را میتوان منبع اساسی استخراج اطلاعات پنهان آنها دانست. اطلاعات تجربی غنی به دلیل پیشرفت روشهای اندازه-گیری از یک سو و همچنین افزایش دقت محاسبات عددی از سوی دیگر، مطالعهٔ ترازهای انرژی هسته های مختلف را تبدیل به موضوع مطالعاتی سالیان اخیر نموده است. نشانه‌هایی از ترکیب چند تقارن در ساختار هسته ها، موضوع توسعه مدل های منطبق بر شکل هسته همچون مدل تجمعی بوهر – ماتلسون[1] را توجیه مینماید. تعیین دقیق نقطه بحرانی گذارهای فازی– شکلی با استفاده از مدل تجمعی و استفاده از سطوح انرژی سبب افزایش کاربردهای این مدل شده است[1-2].

هسته‌های نزدیک به لایه بسته Z = 82 و بطور خاص در زنجیره ایزوتوپی Pt به دلیل رقابت دو نیروی جفت شدگی و اندرکنش چهار قطبی، نشانه های متعددی از پدیده های همزیستی شکلی[2] و گذار فازی – شکلی[3] هسته ای را نشان میدهند. بررسی سطوح

[1]. Bohr- Mottelson geometric collective model (BMM)
[2] . Shape coexistence
[3] . Quantum – phase transition (QPT)

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

انرژی این هسته ها، تطابق آنها را با حد Z(5)، یعنی نقطه بحرانی گذار فازی – شکلی بین شکل های کشیده و تخت را نشان میدهد. از طرف دیگر، بررسی‌های متعدد با در نظر گرفتن مشاهده پذیرهای مختلف همچون احتمال گذارهای الکترومغناطیسی، انرژی‌های جدائی، وغیره، انطباق این زنجیرهٔ ایزوتوپی را با حد دینامیکی $O(6)$ مدل برهمکنش بوزونی را نشان میدهد[3-4].

در این مطالعه طیف انرژی هسته $^{178-184}$Pt در قالب مـدل BMM و حد دینامیکی Z(5) بررسی گردیده است. مقایسـه بـا اطلاعـات تجربی و همچنین نتایج مدل با استفاده از پتانسیل هـای مختلـف برای قسمت شعاعی، امکان ارزیابی توانایی آنها را فراهم میسازد.

روش کار

در مدل هندسی BMM، دو پارامتر β (شعاعی) و γ (زاویه ای) در کنار سه پارامتر متناظر با زاویای اویلر، فضای 5 بعدی برای مطالعه ساختار هسته ها ایجاد مینماید. در این مدل شکل هسته ها با استفاده از این 5 پارامتر توصیف میشود. دو شکل کشیده[4] و تخت[5] متناسب با هسته هایی هستند که علیرغم خروج از حالت کروی، تقارن محوری خود را حفظ نموده اند. هسته های تغییر شکل یافته در ناحیه گذار فاز بین این دو حدود همچون خانواده ایزوتوپی Pt با استفاده از حد تقارنی Z(5) این مدل بررسی میشوند. در این مدل هامیلتونین بصورت زیراست[2]:

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2B}\left(\frac{1}{\beta^4}\frac{\partial}{\partial\beta}\beta^4\frac{\partial}{\partial\beta}+\frac{1}{\beta^2\sin 3\gamma}\frac{\partial}{\partial\gamma}\sin 3\gamma\frac{\partial}{\partial\gamma}\right)-\frac{\hbar^2}{2B}\left(\frac{1}{4\beta^2}\sum_{k=1,2,3}\frac{Q_k^2}{\sin^2(\gamma-\frac{2}{3}\pi k)}\right)+V(\beta,\gamma) \quad (1)$$

پارامتر Q_k با ($k=1,2,3$) مولفه های اندازه حرکت زاویه ای و B پارامتر جرمی میباشد. زوایای $\gamma=0$ و $\pi/3$ متناسب با دو شکل کشیده و تخت بوده و لذا نقطهٔ بحرانی یا همان حد دینامیکی Z(5) با مقدار $\gamma=\pi/6$ توصیف میشود. با تعریف دو متغیر انرژی کاهش یافته $\varepsilon=2BE/\hbar^2$ و پتانسیل کاهش یافته $u=2BV/\hbar^2$، امکان جداسازی هامیلتونین به دو بخش شعاعی و زاویه ای حاصل میشود:

$$\left[-\frac{1}{\beta^4}\frac{\partial}{\partial\beta}\beta^4\frac{\partial}{\partial\beta}+\frac{1}{4\beta^2}\left(4L(L+1)-3\alpha^2\right)+u(\beta)\right]\xi_{L,\alpha}(\beta)=\varepsilon_\beta\xi_{L,\alpha}(\beta) \quad (2)$$

$$\left[-\frac{1}{\langle\beta^2\rangle\sin 3\gamma}\frac{\partial}{\partial\gamma}\sin 3\gamma\frac{\partial}{\partial\gamma}+u(\gamma)\right]\eta(\gamma)=\varepsilon_\gamma\eta(\gamma) \quad (3)$$

در این رابطه، L اندازه حرکت مداری، $\langle\beta_2\rangle$مقدار متوسط تغییر شکل چهار قطبی و $\xi(\beta)$ مقدار انرژی راستای شعاعی میباشد. با تغییر متغیر $n_w=L-\alpha$ معادله ی (3) به شکل زیر در میآید.

$$[-\frac{1}{\beta^4}\frac{\partial}{\partial\beta}\beta^4\frac{\partial}{\partial\beta}+\frac{1}{4\beta^2}(L(L+4)+3\eta_w(2L-n_w))+u(\beta)]\xi_{L,n_w}(\beta)=\varepsilon_\beta\xi_{L,n_w}(\beta) \quad (4)$$

که $L=n_w,n_w+2,....$ است. برای باند پایه $n_w=0$ میباشد. با فرض تابع موج سیستم بصورت زیر است:

$$\Psi(\beta,\gamma,\theta)=\xi_{L,\alpha}(\beta)\eta(\gamma)D^L_{M,\alpha}(\theta_i)$$

بخش زاویه ای معادله شرودینگر به صورت زیر میباشد:

$$[-\frac{1}{\langle\beta^2\rangle}(\frac{\partial^2}{\partial\gamma^2}+3\frac{\cos 3\gamma}{\sin 3\gamma}\frac{\partial}{\partial\gamma})+u(\gamma)]\eta(\gamma)=\varepsilon_\gamma\eta(\gamma) \quad (5)$$

حاصل میشود. با جایگذاری $\gamma=\pi/6$ و صفرشدن جمله دوم و البته استفاده از پتانسیل نوسانگر هماهنگی به صورت زیر:

$$u(\gamma)=\frac{1}{2}c(\gamma-\frac{\pi}{6})^2=\frac{1}{2}c\tilde{\gamma}^2 \quad \text{و} \quad \tilde{\gamma}=\gamma-\frac{\pi}{6}$$

شکل معادله بخش زاویه ای بصورت زیر حاصل میشود:

$$[-\frac{\partial^2}{\partial\tilde{\gamma}^2}+\frac{1}{2}c\langle\beta^2\rangle\tilde{\gamma}^2]\eta(\tilde{\gamma})=\varepsilon_{\tilde{\gamma}}\langle\beta^2\rangle\eta(\tilde{\gamma})$$

که این معادلهٔ نوسانگر هماهنگ بوده و ویژه مقادیر انرژی را بصورت زیر حاصل مینماید:

$$\varepsilon_{\tilde{\gamma}}=\sqrt{\frac{2c}{\langle\beta^2\rangle}}\left(n_{\tilde{\gamma}}+\frac{1}{2}\right), \qquad n_{\tilde{\gamma}}=0,1,2,...$$

ویژه تابع بخش زاویه ای (چند جمله ای های هرمیت) و ثابت نرمالیزاسیون آن نیز عبارتند از:

$$\eta_{n_{\tilde{\gamma}}}(\tilde{\gamma})=N_{n_{\tilde{\gamma}}}H_{n_{\tilde{\gamma}}}(b\tilde{\gamma})e^{-b^2\tilde{\gamma}^2/2}, \quad b=(\frac{c\langle\beta^2\rangle}{2})^{\frac{1}{4}}$$

$$N_{n\tilde{\gamma}}=\sqrt{\frac{b}{\sqrt{\pi}2^{n_{\tilde{\gamma}}}n_{\tilde{\gamma}}!}}$$

از طرفی برای بخش شعاعی، دو پتانسیل چاه مربعی نامتناهی

[4] prolate

[5] oblate

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

$$u(\beta)=\begin{cases}0 & \beta\le\beta_w\\ \infty & \beta\ge\beta_w\end{cases}$$

β_w عرض چاه پتانسیل مفروض است. شکل پتانسیل مورس عبارت است از:

$$u(\beta)=e^{-2a(\beta-\beta_w)}-2e^{-a(\beta-\beta_w)}$$

با استفاده از روش تکرار مجانبی[6]، همچنین تغییرمتغیرهای $\varepsilon_\beta=k_\beta^{\,2}$ و $z=\beta k_\beta$ وتغییر $\tilde{\xi}(\beta)=\beta^{3/2}\xi(\beta)$، معادله (4) به شکل زیر درمیآید:

$$\frac{d^2\tilde{\xi}}{dz^2}+\frac{1}{z}\frac{d\tilde{\xi}}{dz}+[1-\frac{v^2}{z^2}]\tilde{\xi}=0$$

با جایگذاری هر کدام از پتانسیل های بالا معادله به تابع مولد چند جمله ای خاصی منجر میگردد. چاه پتانسیل نامتناهی به چند جمله ای های بسل و پتانسیل مورس به چند جمله ای های لاگر منجر میگردد که ترازهای انرژی مختلف، متناسب با صفر های این چند جمله ای ها میباشند.

$$\varepsilon_\beta=\varepsilon_{\beta;s,n_\omega,L}=\left(k_{s,\nu}\right)^2,\qquad k_{s,\nu}=\frac{x_{s,\nu}}{\beta_w}$$

$x_{s,\nu}$ معرف صفر های چند جمله ای های بسل یا لاگر هستند. انرژی کل هسته از ترکیب دو بخش شعاعی و زاویه ای حاصل میشود[2] :

$$E\left(s,n_\omega,L,n_{\bar{\gamma}}\right)=E_0+A\left(x_{s,\nu}\right)^2+Bn_{\bar{\gamma}}$$

کمیت های A، B وE_0 ثابت های بهنجارش میباشند که در مقایسه با اطلاعات تجربی [5] تعیین میگردند.

نتایج

در این مطالعه، زنجیره ایزوتوپی Pt در ناحیه گذار فازی – شکلی هسته ای بین حدود کشیده و تخت مورد بررسی قرار گرفت. هدف این مطالعه ارزیابی توانایی دو نوع پتانسیل متفاوت برای بازیابی طیف انرژی هسته های انتخابی می باشد. بدین منظور کمیت انحراف معیار:

$$\sigma=\left(\frac{1}{N^{\,2}}\sum_i\left(E^i_{\exp}-E^i_{th}\right)\right)^{1/2}$$

را به عنوان معیار ارزیابی دقت محاسبات در نظر میگیریم. در ادامه نتایج حاصل برای ثابت های برازش و همچنین میزان انحراف معیار محاسبات تئوری در مقایسه با نتایج تجربی را برای هر دو پتانسیل انتخابی در جداول 1 و 2 گزارش نموده ایم.

جدول شماره 1. ثابت های برازش(بر حسب keV.) با فرض پتانسیل چاه نامتناهی.

هسته	A	B	E_0	σ
^{178}Pt	-20/41	3/43	14/2	89/2
^{180}Pt	-17/50	7/15	8/55	104/47
^{182}Pt	-18/64	6/32	11/63	115/62
^{184}Pt	-14/32	9/18	10/87	147/25

جدول شماره 2. مشابه جدول 1 با حل معادله شعاعی با پتانسیل مورس.

هسته	A	B	E_0	σ
^{178}Pt	-9/57	5/11	10/61	92/37
^{180}Pt	-7/48	6/83	16/07	142/66
^{182}Pt	-11/25	2/99	8/37	107/41
^{184}Pt	-13/74	1/74	12/15	126/32

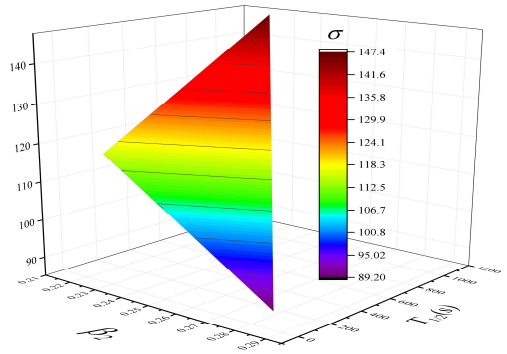
انطباق مناسبی بین نتایج هر دو پتانسیل در مقایسه با اطلاعات تجربی موجود مشاهده میشود. همچنین وجود کمترین مقدار خطای محاسبات نظری با استفاده از هر دو پتانسیل انتخابی برای هسته ^{178}Pt، این هسته را به عنوان بهترین نمونه برای توصیف تقارن های متناظر با مدل Z(5) معرفی مینماید. این نتیجه را میتوان به دلیل نزدیکتر بودن این هسته در مقایسه با سایر هسته های این زنجیره ایزوتوپی به لایه بسته نوترونی مرتبط نمود. کاهش میزان نیروی جفت شدگی به دلیل تعداد کمتر نوترون های بیرون لایه بسته، سبب افزایش میزان اندرکنش چهار قطبی و لذا تولید نشانه هایی از تغییر شکل میشود. انطباق نقطه بحرانی Z(5) با حد دینامیکی O(6) مدل برهمکنش بوزونی که برای توصیف هسته

[6] Asymptotic Iteration Method

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

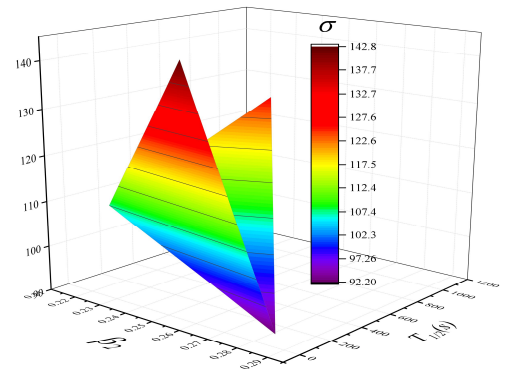
های تغییر شکل یافته غیر محوری استفاده میشود، این نتیجه را تایید میکند [6].

ما در ادامه وابستگی دقت محاسبات ،σ، دو پتانسیل انتخابی به مقدار تغییر شکل چهار قطبی و همچنین نیمه عمر حالت پایه زنجیره ایزوتوپی را بررسی میکنیم. در شکل 1، تغییرات انحراف معیار چاه پتانسیل نامتناهی را بر اساس این دو کمیت ارائه نمودیم.



شکل 1. بررسی وابستگی انحراف معیار چاه پتانسیل مربعی به میزان تغییر شکل چهار قطبی (β_2) و نیمه عمر تراز پایه $(T_{1/2})$.

کاهش خطای محاسبات برای هسته ای با بیشترین میزان تغییر شکل و لذا کمترین میزان نیروی جفت شدگی مشخص است.



شکل 2. مشابه با شکل 1 بر اساس انحراف معیار چاه پتانسیل مورس.

در این شکل نیز کاهش خطا با افزایش میزان تغییر شکل چهار قطبی مشخص است. در پتانسیل مورس، یک شکست در مقدار انحراف معیار مشاهده میشود. این نتیجه را میتوان به عنوان نشانه ای از ترکیب تقارن ها ارزیابی نمود [6-7] که نیازمند بررسی های بیشتر در خصوص سایر زنجیره های ایزوتوپی هم میباشد.

نتیجه گیری

در این مطالعه توانایی مدل هندسی تجمعی بوهر – ماتلسون در حد دینامیکی Z(5) برای بازیابی طیف انرژی زنجیره ایزوتوپی $^{184-178}Pt$ با استفاده از دو نوع پتانسیل متفاوت ارزیابی گردید. افزایش دقت محاسبات با افزایش سهم تغییر شکل چهار قطبی در هسته ها مشهود میباشد. از این نتیجه میتوان برای بررسی تناظر بین حد دینامیکی O(6) مدل برهمکنش بوزونی با محاسبات این مقاله استفاده نمود.

مرجع ها

[1] A. Bohr, The coupling of nuclear surface oscillations to the motion of individual nucleons, Mat.-Fys. Medd. Danske Vid. Selsk. 26 (1952) 14-20.

[2] Dennis Bonatsos, D. Lenis, D. Petrellis, P.A. Terziev, Z(5): critical point symmetry for the prolate to oblate nuclear shape phase transition, Physics Letters B 588 (2004) 172–179.

[3] R. F. Casten, Nuclear Structure from a Simple Perspective, Oxford Univ. Press, Oxford, 1990.

[4] Z. Jahangiri Tazekand, M. Mohseni, M. A. Mohammadi, H. Sabri, Study of the 190Hg Nucleus: Testing the Existence of U(5) Symmetry, Brazilian Journal of Physics 48 (2018) 266–280.

[5](http://www.nndc.bnl.gov/chart/reColor.jsp?newColor=dm).

[6] Y.X. Chen et al, A triaxial critical point symmetry for odd-A nuclei, Nuclear Physics A, 987 (2019) 90-98.

[7] E. E. Jean Marie et al, Bohr Hamiltonian with multi parameter exponential-type potential for triaxial nuclei, Eur. Phys. J. Plus,134 (2019) 490-502.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

ساخت و مشخصه یابی آئروژل تیتانیا آلائیده به نیتروژن

یزدانی ، امیررضا[۱] ؛ خانلری،محمد رضا[۱]؛ ملک فر، رسول[۲] ؛ صدریه ، سیما [۲]

[۱] گروه فیزیک دانشگاه بین المللی امام خمینی (ره)، انتهای خیابان نوروزیان،روبرو ی ساختمان صداو سیما ،قزوین

[۲] گروه فیزیک، دانشگاه تربیت مدرس،پل گیشا،تهران

چکیده

در این پژوهش آئروژل دی اکسید تیتانیوم نا آلائیده و آلائیده به نیتروژن به روش سل-ژل ساخت و مشخصه یابی شد. تاثیر زمان پیر سازی و جدا از آن اثر آلایش در میزان تخلخل و حجم حفره ها مورد ارزیابی و آنالیز قرار گرفتند . تصاویرFESEM که به صورت میکرو متری و نانومتری از نمونه ها و همچنین نمودارهای ایزوترم اخذ شده حکایت از کیفیت بالای آئروژل های ساخته شده دارد.نوع این ایزوترم ها بیانگر حالت ژله ای نمونه و وجود منافذ مزوپوری استوانه ای و مخروطی می باشد..نتایج آنالیز BET نمونه های سنتز شده حاکی از مساحت ویژه ای بالغ بر ۵۰۰ سانتی متر مربع بر گرم و حفره های نانومتری در ابعاد ۲۱۵ آنگستروم بود.

واژه های کلیدی: آئروژل تیتانیا،مساحت سطح ویژه،ساختار مزوپوری،روش سل-ژل

Manufacture and identification of N-doped TiO_2 Aerogel

Yazdani, Amir Reza[1]; Khanlary, Mohammad Reza[1]; Malekfar, Rasoul[2]; Sadrieyeh, Sima[2]

[1] Department of Physics, Imam Khomeini International University, Qazvin
[2] Department of Physics, Tarbiat Modares University, Tehran

Abstract

In this study, nitrogen dioxide and non-alloyed titanium alloy titanium dioxide aerosol was manufactured and characterized by sol-gel method. The effect of aging time and separately the effect of pollution on porosity and volume of cavities were evaluated and analyzed. FESEM images taken as micrometers and nanometers of the samples as well as isothermal diagrams indicate the high quality of the built-in aerogels. The synthesized BET samples showed a specific area of 500 cm^2/g and nanometer sized holes measuring 215 angstroms.

***Keywords**: Titania aerogel,Specific surface area,Mesoporous structures,Sol-Gel method*

PACS No. ۶۸,۸۱

مقدمه

علم و فناوری نانو توانائی بدست گرفتن کنترل ماده در ابعاد نانومتری (مولکولی) و بهره برداری از خواص و پدیده‌های این بعد در مواد ، ابزارها و سامانه های نوین است. فناوری نانو با طبیعت میان رشته ای و فرا رشته ای خود، در آینده در برگیرنده بخش وسیعی از فناوری ها خواهد بود و به جای رقابت با فناوری های موجود، مسیر رشد آنها را در دست خواهد گرفت.[۱] در این میان آئروژل هابه دلیل داشتن چگالی بسیار کم و خصوصیات ظاهری فوق العاده، به ویژه برای عایق کاری حرارتی و صوتی، به عنوان مواد کاملاً انقلابی ظاهر شده اند.[۲] دی اکسید تیتانیوم (TiO2) یکی از پرکاربردترین مواد نیمه رسانا با زمینه کاربردی در اپتیک،

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

لوازم آرایشی و سلولهای خورشیدی و غیره... است. بررسی خواص آئروژلی آنها که با نیتروزن نیز آلائیده شده باشد در دستور کار این پروژه قرار داشته است. نمونه کپه TiO_2 عمدتاً در سه شکل کریستالی مختلف یافت می شود: آناتاز، روتیل و بروکیت. آناتاز پرکاربرد ترین نوع مورد استفاده در صنعت و مراکز تحقیقاتی است. حداکثر سطح ویژه گزارش شده از فاز آناتاز تیتانیا معادل $۵۵\ m^2g^{-1}$ می باشد.[۳] خواص کاتالیزوری این اکسید فلزی ناهمگن با توجه به اثر بخشی آنها در تخریب آلاینده های آلی سمی موجود در هوا و هم در محیط های آبی توجه زیادی را به خود جلب کرده است. بدون شک خواص فوتوکالیستی اکسید تیتانیم عالی است و این ماده خواص مطلوبی از جمله پایداری شیمیایی، مقاومت در برابر خوردگی ، غیر سمی بودن، قدرت اکسید کنندگی قوی و مقرون به صرفه بودن را دارا می باشد. [۴] از میان عمده روش‌های سنتز آئروژل‌ها شامل روش تراکم فاز بخار، روش آلیاژسازی مکانیکی یا برخورد با گلوله‌های پرانرژی، روش پلاسما و روش‌های الکتروشیمیایی روش سل-ژل دارای محبوبیت و کاربرد صنعتی بالاتری نسبت به سایر روش‌های موجوداست. [۳]

کار تجربی

همه ژل های تهیه شده در این مقاله به روش سل-ژل سنتز شدند. اولین نوع از نمونه ها ژل هایی بودند که با هیچ ماده ثانویه و خارجی آلاییدگی نداشتند و ژل معمولی نام گرفتند. این ژل ها با پایه تیتانیا در نهایت آئروژل تیتانیا را تشکیل می دادند. نمونه دوم نیز ژل هایی با ترکیبات نیتروژنی بودند که اوره به عنوان منبع نیتروژنی در آنها مورد استفاده قرار گرفت. دلیل اصلی افزودن نیتروژن به تیتانیا افزایش خاصیت فتوکاتالیسی آن می باشد. مواد اولیه مورد استفاده در سنتز، تیتانیم ایزوپوروپوکساید (TTIP) به عنوان منبع تیتانیم، ساخت شرکت Aldrich و اتانول با خلوص بسیار بالا به عنوان حلال ساخت شرکت ایرانی زکریا جهرم و اسید نیتریک (۶۵درصد)به عنوان کاتالیزور ساخت شرکت Merck و آب دیونیزه بود. این مواد با نسبت مولی ۱،۲۱، ۰/۰۸، ۶/۸ به ترتیب برای مواد اتانول،TTIP، اسید نیتریک ، آب ترکیب شدند و ژل خیس اولیه را ایجاد کردند. با افزودن اسید نیتریک به محلول شیری رنگ تولید شده اولیه رنگ محلول از کدر (شیری) به شفاف مایل به زرد تغییر میکرد. در آخربرای انجام فرایند هیدرولیز مقدار ۲/۱۵ میلی لیتر آب را به این محلول اضافه میکنیم. نمونه ها حداقل پس از ۴۰ روز قرار گرفتن در محیط اطاق فرآیند پیرسازی را طی می کنند. مشاهدات نشان داد که ژل ها بیش از ۳-۴ ماه نباید پیرسازی شوند، که اگر این اتفاق بیافتد تغییرات فیزیکی و ساختاری در نمونه رخ می دهد و میزان آلودگی موجود در ژل افزایش می یابد. [۴] خشک سازی ابر بحرانی کربن دی اکسید سرد فاز آخر سنتز است که توسط دستگاه Suprex MPS/225 صورت پذیرفت. نمونه های معمولی شامل دو نوع ۴۰روزه و ۵ ماهه بودند که به ترتیب با n و j5 برچسب خوردند و به نمونه های آلائیده با نیتروژن عنوان j4 و j7 داده شد.

نتایج و بحث

یکی از ویژگی های بارز آئروژل ها مساحت سطح ویژه بالای آنهاست و هم چنین وجود حفره های هوایی فراوان در ساختار آئروژل حاکی از تخلخل بالا در این مواد می باشد. یکی از آنالیز هایی که در جهت بررسی این ویژگی کمک می کند آنالیز BET می باشد که با بررسی میزان جذب و واجذب گاز نیتروژن روی سطح نمونه اطلاعات نانومتری از حفرات سطح نمونه می دهد. نتایج مربوط به تخلخل سنجی سه تا از نمونه های ذکر شده در بخش تجربی به شرح جدول ۱ است.

جدول۱ : ویژگی های کلی تخلخل سنجی

نمونه ژل	مساحت سطح مخصوص $S_{BET}(m^2g^{-1})$	حجم کل حفره ها (cm^3g^{-1})	اندازه حفره ها (A)
Normal(n)	۳۳۰/۱	۲/۲۹	۲۷۷/۴
J5	۵۲۴/۷	۳/۱۱	۲۳۷
J7	۵۰۳/۹	۲/۷۱	۲۱۵/۴
J4	-	-	-

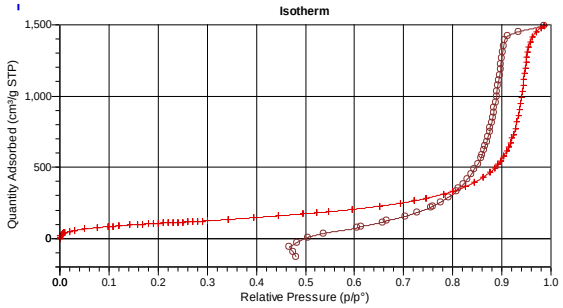
در مورد حجم کل حفره ها که در جدول ۱ مطرح شده به این نکته توجه شود که منظور حفره هایی است که اندازه آنها کم تر از ۹۸۷ آنگستروم (حدود ۱ نانومتر) و فشار نسبی ۰,۹۸ می باشد. نمونه J4 به دلیل این که جرم ناچیزی داشت قابلیت بررسی BET

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

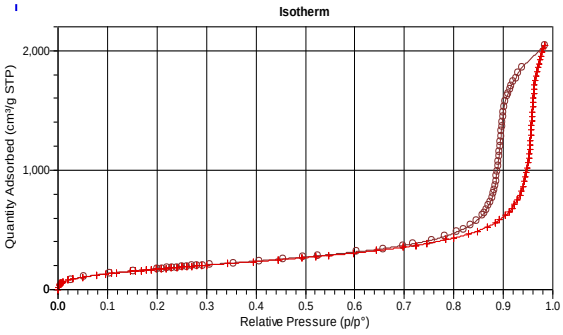
را متاسفانه نداشت و از آن فقط FESEM تهیه گردید و به همین دلیل در جدول ۱ مقابل این نمونه خط تیره مشاهده می شود. همان طور که از این جدول بدست می آید، نمونه n با کمترین مساحت سطح مخصوص و حجم حفرات در مقایسه با نمونه تیتانیایی j5 و همچنین آلائیده j7 ، از کیفیت مناسبی برخوردار نمی باشد و این به معنی آن است که پیرسازی وقتی بیش از حد اتفاق بیافتد ژل به سمت واکنش های شیمیایی بین مولکولی خود می رود و تغییر وضعیت می دهد. نکته ای که کاملا از رنگ نمونه n در مقایسه با دیگر ژل ها قابل مشاهده بود. اما به نظر می رسد این نمونه حفرات بزرگی در مقایسه با دیگر نمونه ها دارد که شایداز جهاتی یک مزیت نسبی برای این نمونه محسوب شود. بهترین کیفیت تخلخل و حفرات را در نمونه j5 می توان مشاهده کرد. از این جهت که نمونه به دقت سنتز شده و مدت پیرسازی در آن کاملا رعایت شد و طبق دستورالعمل های مربوطه عملیات خشک سازی روی آن انجام شد، در مورد نمونه j7 نیز می توان این ادعا را نمود اما با توجه به آلائیده شدن نمونه به نیتروژن توسط اوره،مقداری از سطح ویژه و تخلخل آئروژل کاهش یافته ، که این دور از انتظار نبود. نمونه های مذکور مراحل خشک سازی ابر بحرانی را به خوبی طی کرده اند.

نمودار های ایزوترم

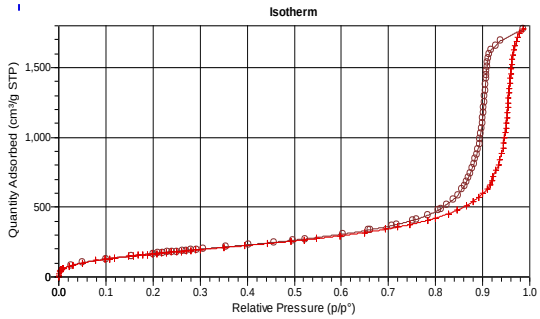
هنگامی که مولکولهای گازی (N_2) روی یک سطح متخلخل جذب می شوند، ابتدا روی دیواره های حفره (تخلخل) جذب صورت می گیرد. در یک فشاری کمتر از فشار مرجع P_o در حفره ها چگالش روی می دهد. از آنجا که بعد از حذف چگالش، در فرایند واجذب یک سطح جدیدی درست می شود. ایزوترم واجذب معمولا در سمت چپ ایزوترم جذب قرار می گیرد و یک پس ماند–جذب روی می دهد. هنگامی که نسبت P/P_o خیلی بزرگ باشد می توان نتیجه گرفت که نمونه دارای منافذ بسیار باریک و به صورت موئین است وگاز جذب شده روی سطح متراکم می شود. این ایزوترم از نوع IV و حالت b نامیده می شود .



شکل ۱: ایزوترم نمونه normal



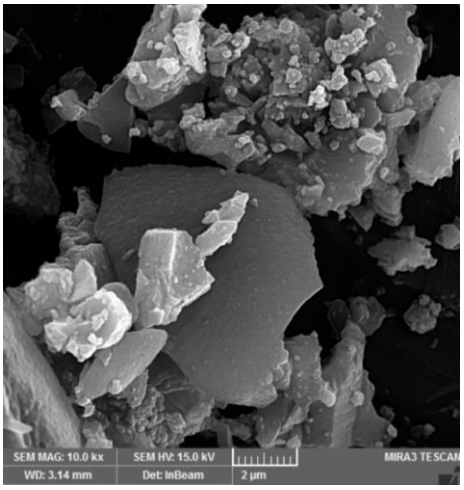
شکل ۲: ایزوترم نمونه j5



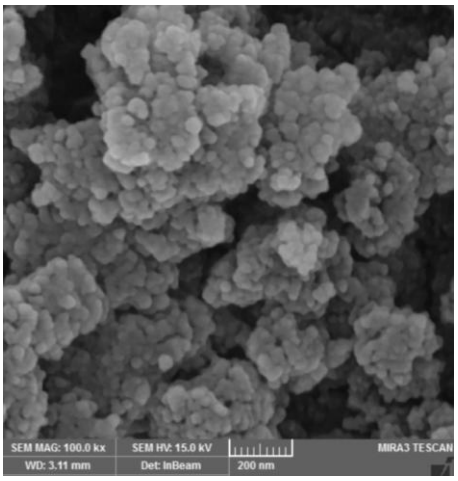
شکل ۳:ایزوترم نمونه j7

با توجه به شکل۱و۲و۳ هر سه نمونه دارای ایزوترم بسیار شبیه به هم هستند. نوع این ایزوترم ها بیانگر حالت ژله ای نمونه و وجود منافذ مزوپوری استوانه ای و مخروطی است.هم چنین شیوه سنتز و مواد به کار برده شده برای سنتز تاثیری بر روی نوع ایزوترم و بالتبع ابعاد و ویژگی های کلی تخلخل نمی گذارد. از طرفی همین نتایج برای نمونه هایی که اوره در آنها وجود دارد نیز قابل استناد است. اما یک اختلال در نمودار واجذب نمونه n مشاهده می شود که به نظر می رسد ناشی از حفرات متزلزلی هستند که شرایط خود را حفظ نکرده اند و در اثر فشار نسبی متراکم شده اند و گاز محبوس در خود را بیرون رانده و چنین وضعیتی را ایجاد کرده اند.که تاثیر پیرسازی بلند مدت را در این ژل به این صورت می بینیم. تصاویر FESEM با دستگاه MIRA3TESCAN انجام شد.

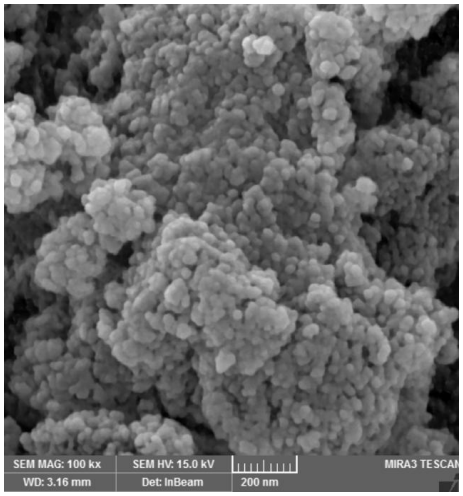
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



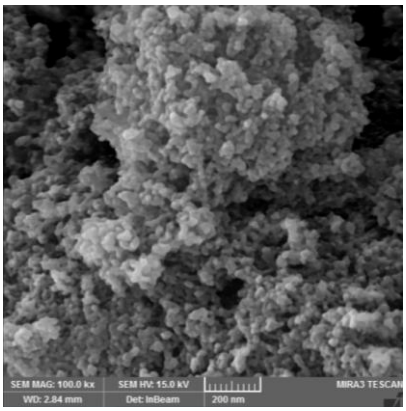
شکل ۲: تصویر میکرومتری FESEM از نمونه J4 که روند خشک سازی را بخوبی طی نکرده است. از این تصویر فقط برای مقایسه ساختار آن با تصاویر نمونه های بعدی استفاده کرده ایم.



شکل ۳:تصویر نانومتری FESEM از نمونه normal



شکل ۴:تصویر نانومتری FESEM از نمونه J5



شکل ۵:تصویر FESEM از نمونه J7

با توجه به این تصاویر و بررسی ابعاد و اندازه ها و مقیاس تصویر، ابعاد تخلخل نمونه ها را میتوان در حد نانو تخمین زد، که در توافق قابل انتظار با آنالیز های قبلی می باشد. در مقایسه با تصویر FESEM از نمونه J4 نقش خشک سازی در تشکیل آئروژل ها بخوبی آشکار است.

نتیجه گیری

در این پژوهش آئروژل های تیتانیا معمولی و آلائیده به نیتروژن بطور موفقیت آمیزی به روش سل- ژل سنتز و بررسی شدند و نتایج به دست آمده حاکی از تخلخل بالای ۵۰۰ مترمربع بر گرم نمونه ها بود. نسبت مولی آب بر ماده TTIP، نمونه ها مقدار ۷ به عنوان بهترین کیفیت شناخته شد. تصاویر نانومتری و میکرومتری از نمونه وضعیت خوبی از تخلخل ها در نمونه ها را نشان داد و این که با افزایش مدت زمان پیرسازیِ نمونه، عملا بخش زیادی از تخلخل ژل های خیس از دست می رود. برای ژل های خیس ۴۰ روز پیرسازی مدت مناسبی است و بعد از ۵ ماه خواص فیزیکی و ساختار نانومتریک آن تغییر اساسی می کند.

مرجع ها

[۱] Poole Jr, C.P. and F.J. Owens, *Introduction to nanotechnology*. 2003: John Wiley & Sons.

[۲] Mutuma, B.K., et al., *Sol–gel synthesis of mesoporous anatase–brookite and anatase–brookite–rutile TiO2 nanoparticles and their photocatalytic properties.* Journal of colloid and interface science, 2015. **442**: p. 1-7.

[۳] Sadrieyeh, S. and R. Malekfar, *The effects of hydrolysis level on structural properties of titania aerogels.* Journal of Non-Crystalline Solids, 2017. **457**: p. 175-179.

[۴] Popa, M., et al., *Synthesis and structural characteristics of nitrogen doped TiO2 aerogels.* Microporous and mesoporous materials, 2010. **132**(1-2): p. 80-86.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

موجک در مطالعه افکار خوشایند و ناخوشایند

رابعی ، اردشیر[۱] ؛ علیایی مقدم، حمیدرضا[۲]

[۱]گروه فیزیک دانشکده علوم دانشگاه رازی ، باغ ابریشم ، کرمانشاه

[۲]گروه فیزیک دانشکده علوم دانشگاه شیراز ، میدان ارم ، شیراز

چکیده

یکی از روش های تصویر برداری از مغز، بررسی سیگنالهای غیرپایای الکتروآنسفالوگرام به کمک آنالیز موجک می باشد. ما نیز در این کار به بررسی افکار خوشایند (دلپذیر) و ناخوشایند می پردازیم. کمیتی که برای این مطالعه انتخاب می نماییم ضریب همبستگی (r) می باشد. این ضریب که ارتباط ۱۹ سیگنال اندازه گیری شده بوسیله الکترودهای الکتروآنسفالوگرام را نشان می دهد می تواند بعنوان معیاری برای تشخیص حالتهای عاطفی خوشایند و ناخوشایند باشد. البته به منظور اجرای برنامه، ما از تبدیل موجک دوبشی مرتبه ٤ در نرم افزار متلب *R2013a* استفاده می نماییم.

کلید واژه: الکتروآنسفالوگرام، تبدیل موجک پیوسته، ضریب همبستگی.

Wavelet in study of pleasant and unpleasant thoughts

Rabeie, Ardeshir[1]; Oliaei Moghaddam, Hamidreza[2]

[1] Department of Physics, Razi University, Kermanshah,
[2] Department of Physics, Shiraz University, Shiraz.

Abstract

The study of non-stationary signals of the Electroencephalogram by using the wavelet analysis, is one of the brain imaging techniques. In this work we also study the behavior of brain about pleasant and unpleasant thoughts. The quantity that we choose for this study is the correlation coefficient (r). This coefficient that shows dependency of 19 signals recorded by Electroencephalogram electrodes can be used as a scale for cognition of pleasant and unpleasant emotional modes. Of course, for running the our programs we use the continuous wavelet transform of Matlab R2013a with the Daubechies wavelet of orders 4.

PACS No. 80-87-89

مقدمه

دو دهه است که فیزیکدانان و ریاضیدانان در شاخه های مختلف علمی به ویژه در علوم پزشکی از موجک (و تبدیل موجک پیوسته) استفاده می کنند. در این کار با استفاده از تبدیل موجک پیوسته ، رفتار مغز را در واکنش به برخی افکار بررسی می کنیم. سیگنال های الکتروانسفالوگرام (EEG) می توانند فعالیت الکتریکی مغز ایجاد شده توسط سلول های عصبی قشر مغز را منعکس کنند. مطالعه سیگنالهای EEG می تواند اطلاعات مهمی در مورد عملکرد مغز به ما بدهد. سیگنال های EEG سیگنال های غیر ایستا هستند و می توانیم آنها را با تبدیل موجک پیوسته (CWT) تجزیه و تحلیل کنیم. در این مقاله ، اثر افکار خوشایند و ناخوشایند را بر روی مغز با استفاده از CWT بررسی می کنیم. در این زمینه ، ما برای تعیین وابستگی بین سیگنالهای ضبط شده توسط الکترودهای EEG ، ضریب همبستگی را استفاده می کنیم. CWT بر روی سیگنالها توسط موجک مادر دوبشی ٤ اعمال می شود [۱]. برای انجام این تبدیل از نرم افزار Matlab استفاده می کنیم. سیگنال های EEG از ۳ آقا در سنین ۲٤-۲۹ سال جمع آوری شده است.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مروری مختصر بر EEG

EEG اندازه گیری مداوم اختلاف در پتانسیل الکتریکی بین نقاط روی پوست سر است. این اختلافات ولتاژها نتیجه فعالیت الکتریکی در مغز است [۲]. ولتاژهای اندازه گیری شده در محدوده میکرو-ولت هستند و به طور معمول در چندین مکان روی پوست سر به طور همزمان ضبط می شوند. این فعالیت الکتریکی ناشی از جریان یونی در درون سلولهای عصبی و تا حدودی سلولهای گلیال مغز است. در مطالعات بالینی و فیزیولوژیکی باندهای فرکانسی به ریتمهای دلتا (کوچکتراز٤ هرتز)، تتا (٤ تا ٨ هرتز)، آلفا (٨ تا ١٤ هرتز)، بتا (١٤ تا٣٠ هرتز) و گاما (بزرگتر از ٣٠ هرتز) طبقه بندی می شود[٣]. در این کار ، محدوده فرکانس مورد استفاده شامل ریتم های دلتا ، تتا و آلفا است.

ازتبدیل فوریه تا تبدیل موجک

تبدیل فوریه احتمالاً کاربردی ترین ابزار پردازش سیگنال در علم و مهندسی است. از محدودیت های این تبدیل این است که نشان نمی دهد که فرکانس با زمان چگونه تغییر میکند. یک راه حل ساده برای غلبه بر محدودیت های تبدیل فوریه ، معرفی یک پنجره آنالیز با عرض معین است که سیگنال زمانی را محدود و سپس تبدیل فوریه آن را اعمال کند. تبدیل جدید با نام تبدیل فوریه پنجره ای (WFT) یا تبدیل فوریه زمان کوتاه (STFT) نامیده می شود. STFT توسط رابطه زیر به دست می آید:

$$\tilde{f}(\tau,\nu)=\int_{-\infty}^{\infty} f(t)g(t-\tau)e^{-2\pi i\nu t}dt. \qquad (1)$$

در این رابطه تابع g تابع پنجره ای می باشد. این تبدیل مقیاس (عرض پنجره) را معرفی کرده و سیگنال را از دید این مقیاس تحلیل می کند. اگر سیگنال دارای جزئیات فرکانس مهم در خارج از مقیاس باشد ، ما در تجزیه و تحلیل سیگنال مشکل خواهیم داشت[٤]. اگر جزئیات سیگنال از عرض پنجره بسیار کوچکتر شود ، جزئیات مشخص می شوند اما تبدیل آنها را موضعی نمی کند. اگر جزئیات سیگنال از عرض پنجره بزرگتر شود ، به درستی تشخیص داده نمی شوند.

در آنالیز موجک ، این مشکلات با معرفی عملکرد مدولاسیون تابع موج برطرف میشود. برای هر سیگنال f (t) ، می توانیم تبدیل موجک آن را به شرح زیر تعریف کنیم:

$$F_{\psi}(s,\tau)=\frac{1}{\sqrt{s}}\int_{-\infty}^{\infty} f(t)\psi^{*}(\frac{t-\tau}{s})dt. \qquad (2)$$

که در آن s مقیاس (یا فرکانس) را نشان می دهد. همچنین $\psi(t)\in L^2(R)$، موجک مادر نام دارد که دارای موضعیت خوبیست و میانگین آن صفر است ($\int_{-\infty}^{\infty}\psi(t)dt=0$).

اهمیت موجک درآنالیز EEG

فرکانس در سیگنال های EEG با گذر زمان به سرعت تغییر میکند (سیگنال غیر ایستا). روش سنتی که برای تحلیل سیگنالهای سری زمانی استفاده میشود تبدیل فوریه است. طیف فرکانس یک سیگنال در نتیجه تبدیل فوریه اطلاعاتی از زمان وقوع فرکانسهای مختلف را نمی دهد. در مقابل ، تبدیل موجک ابزاری مناسب تر و قدرتمندتر برای تجزیه و تحلیل سیگنال های غیر ایستا میباشد زیرا هم فرکانس (مقیاس) و هم اطلاعات زمان مربوط به فرکانس را می توان بدست آورد.

تبدیل کوتاه مدت فوریه یکی دیگر از روشهای تحلیل فرکانس زمان است. در STFT ، اطلاعات زمان و فرکانس توسط یک پنجره زمان یکنواخت برای همه محدوده فرکانس موضعی می شوند. در مقابل ، تبدیل موجک اندازه پنجره را با توجه به فرکانس تنظیم می کند. در فرکانس های بالا ، وضوح تصویر خوب بدست می آید و در فرکانس های کم ، از پنجره های بلند استفاده می شود تا محتوای آن فرکانس را در برگیرد. هنگامی که از تبدیل موجک برای تجزیه سیگنال استفاده می شود ، موجک به عنوان پنجره خاص خود در هر مقیاس عمل می کند. بنابراین ، با کاهش مقیاس تحلیل ، وضوح زمان بهبود می یابد. به همین دلیل، تبدیل موجک از STFT نیز برتر است.

روش انجام پژوهش

الف) جمع آوردی داده:

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

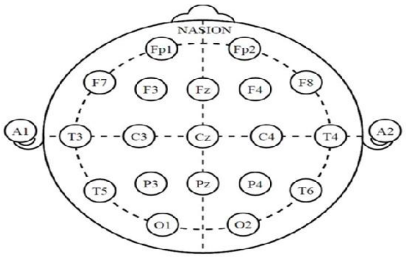
سیگنال های EEG از ۳ آقا در سنین ۲۴-۲۹ سال جمع آوری شده است. دو نمونه داده برای هر شخص ثبت شده است. در یک نمونه از افراد خواسته شده است که درباره خاطرات دلپذیر خود فکر کنند و در نمونه دیگر از آنها خواسته شده تا به خاطرات ناخوشایند خود بیاندیشند. زمان ثبت شده برای هر حالت یک دقیقه است.

ب) ثبت EEG :

سیگنال های EEG با نرخ نمونه برداری ۲۵۰ با SCAN LT , (Neurosoft Inc) ثبت شده است. الکترودها مطابق با سیستم بین المللی ۱۰۲۰ در ۲۱ جایگاه پوست سر قرار گرفتند. الکترودهای Fp1، Fp2، F7، F3، Fz، F4، F8، T3، C3، Cz، C4، T4، T5، P3، Pz، P4، T6، O1، O2، و الکترودهای دو لاله گوش A1 و A2 به عنوان الکترودهای مرجع مشترک در شکل ۱ نشان داده شده است.

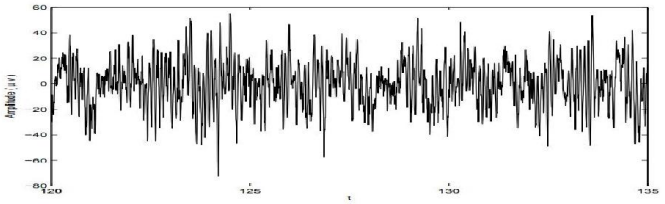
پ) تبدیل موجک سیگنال EEG :

در این مطالعه از تبدیل موجک پیوسته برای آنالیز سیگنال استفاده شده است. ۱۵ ثانیه از سیگنالهای ثبت شده برای آنالیز انتخاب شده اند. موجک استفاده شده برای آنالیز دوبشی

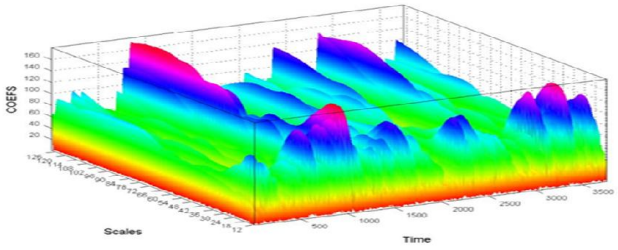


شکل ۱ : سیستم قراردادن الکترودها روی سر.

مرتبه ٤ می باشد. برای انجام این تبدیل از نرم افزار Matlab R2013a استفاده کردیم. محدوده مقیاس مد نظر انجام تبدیل موجک ۱۲۸-۱۲ می باشد. این محدوده مقیاسی معادل با محدوده فرکانسی تقریبا ۱,٤ تا ۱٤,۹ (هرتز) است. به عبارت دیگر ، فقط فرکانسهای بین ۱,٤ تا ۱٤,۹ (هرتز) در این تبدیل موجک به کار گرفته شده است. این محدوده فرکانس شامل امواج مغزی آلفا ، تتا و دلتا است. تبدیل اعمال شده روی سیگنال با استفاده از مقیاس بین ۱۲ تا ۱۲۸ و مدت زمان ۱۵ ثانیه با نرخ ۲۵۰ ،یک ماتریس ضرایب با ابعاد ۱۱۷ * ۳۷۵۰ تولید می کند. به عنوان مثال ، ۱۵ ثانیه سیگنال EEG با مقدار مطلق مرتبط با ضرایب در شکل ۲ نشان داده شده است.



(الف)



(ب)

شکل۲ :الف) یک نمونه سیگنال EEG . ب) اندازه ضرایب تبدیل موجک وابسته به سیگنال در مقیاس ها و زمانهای متفاوت.

ت) ضریب همبستگی ۲ بعدی

برای هر فرد در هر حالت احساسی ، ۱۹ سیگنال ضبط شده توسط الکترودها مورد بررسی قرار گرفته است. سپس وابستگی بین ماتریس ضریب به دست آمده از هر تجزیه و تحلیل سیگنال با ۱۸ سیگنال دیگر مقایسه شده است. وابستگی را می توان از ضریب همبستگی اندازه گیری کرد. ضریب همبستگی بین دو ماتریس A و B توسط رابطه زیر محاسبه می شود [۵]:

$$r = \frac{\sum_{m,n}(A_{mn}-\bar{A})(B_{mn}-\bar{B})}{\sqrt{\sum_{m,n}(A_{mn}-\bar{A})^2 \sum_{m,n}(B_{mn}-\bar{B})^2}} \qquad (3)$$

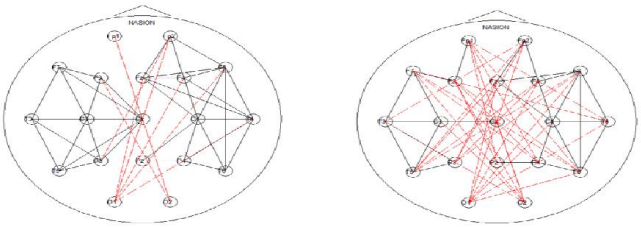
در این رابطه $\overline{A}$ و $\overline{B}$ مقدار میانگین ماتریسهای A و B هستند. ضریب همبستگی r دارای مقداری بین -۱ و ۱ می باشد. عدد ۱ نشان دهنده ی بیشترین همبستگی و عدد ۱- نشان دهنده ی بیشترین ناهمبستگی بین ماتریس ها میباشد.

نتایج

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

از آنجا که در این پژوهش مقیاس پایین در تبدیل موجک استفاده نمی شود ، تأثیر فرکانس های بالا در ماتریس های ضریب وجود ندارد و به دلیل اینکه بیشترین نویزها در محدوده فرکانس بالا قرار دارند، می توان نتیجه گرفت که اثر نویز روی محاسبات نهایی تأثیر نمی گذارد. به عبارت دیگر نیازی به حذف نویز سیگنال ها نیست. پس از بررسی و تجزیه و تحلیل سیگنال های ضبط شده از قسمت های مختلف پوست سر ، نتایج به صورت نمودارهای زیر ترسیم شده است. در این نمودارها (دایره ها موقعیت الکترودهای معادل شکل ۱ را نشان می دهند) ، خطوط سیاه و پیوسته نشانگر همبستگی بیش از ۰,۹ بین ماتریس ضرایب سیگنال های ضبط شده و خط چین های قرمز نشان دهنده همبستگی کمتر از ۰,۳ است.

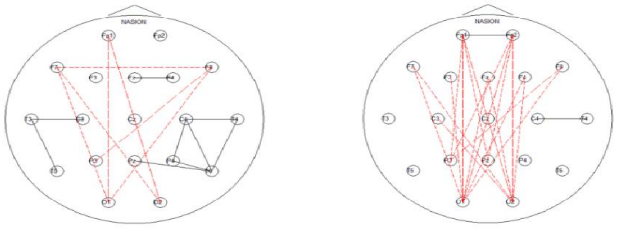
گراف همبستگی یک آقای ۲٤ ساله در شکل ۳ نشان داده شده است. الف) برای حالت دلپذیر، تعداد خطوط سیاه و قرمز به ترتیب ۳۷ و ۸ می باشد ب) برای حالت ناخوشایند، تعداد خطوط سیاه ۲۷ عدد و خطوط قرمز ۳۳ می باشد .



(ب) (الف)

شکل3: گراف هبستگی یک آقای ۲٤ ساله.الف) حالت احساس خوشایند.
ب)حالت احساس ناخوشایند.

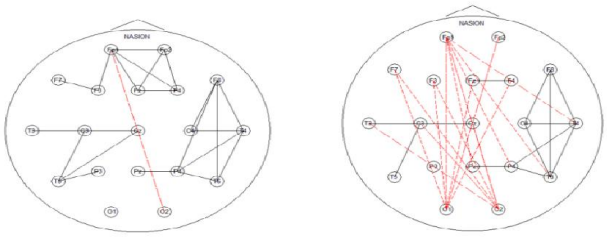
شکل ٤ اختصاص به گراف همبستگی یک آقای ۲۸ ساله دارد. الف) برای حالت دلپذیر، تعداد خطوط سیاه و قرمز به ترتیب ۹ و ۷ می باشد ب) برای حالت ناخوشایند، تعداد خطوط سیاه ۲ عدد و خطوط قرمز ۱۸ می باشد.



(ب) (الف)

شکل٤: گراف هبستگی یک آقای ۲۸ ساله.الف) حالت احساس خوشایند.
ب)حالت احساس ناخوشایند.

همچنین گراف های همبستگی یک آقای ۲۹ ساله در شکل ۵ نشان داده شده است. الف) برای حالت دلپذیر، تعداد خطوط سیاه و قرمز به ترتیب ۲۲ و ۱ می باشد ب) برای حالت ناخوشایند، تعداد خطوط سیاه ۱۳ و خطوط قرمز ۱٦ می باشد.



(ب) (الف)

شکل۵: گراف هبستگی یک آقای ۲۹ ساله.الف) حالت احساس خوشایند.
ب)حالت احساس ناخوشایند.

نتیجه گیری

ما نشان دادیم که تعداد خطوط سیاه ($r>.9$) در حالت احساسی دلپذیر (خوشایند) بیشتر از حالت ناخوشایند است. برعکس ، تعداد خطوط قرمز ($r<0.3$) در حالت عاطفی ناخوشایند بیشتر است. با اجرای یک برنامه (که خیلی هم سخت نیست) ، ما می توانیم همیشه خطوط سیاه و قرمز را روی مانیتور کامپیوتر مشاهده کنیم. این کار به ما امکان می دهد مراقبت های لازم را برای بیماران روانی که قادر به صحبت کردن نیستند ، در نظر بگیریم.

سپاسگزاری

از معاون پژوهشی دانشگاه علوم پزشکی کرمانشاه ، رئیس و پرسنل بخش EEG بیمارستان امام رضا کرمانشاه کمال تشکر و قدردانی را داریم.

مرجع‌ها

*[1] I. Daubechies, Ten Lectures on Wavelets, SIAM, Philadelphia, Pennsylvania, **1992**.*

*[2] S. R. Benbadis,A. M. Husain, P.W. Kaplan, W. O. Tatu, Handbook of EEG Interpretation, Demos Medical Publishing, **2007**.*

*[3] H. Adeli, Z. Zhou , N. Dadmehr, Analysis of EEG records in an epileptic patient using wavelet transform, Journal of Neuroscience Methods **123 (2003) 69-87**.*

*[4] J. Gomes, L. Velho, From Fourier Analysis to Wavelets, Springer International Publishing Switzerland, **2015**.*

[5] W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, The art of scientific computing, Cambridge university press, **1992**.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مدهای فونونی نیم فضا و انتشاری در چاه کوانتومی AlN/GaN/AlN

صادقی جوان ، زهرا[۱] ؛ ارتی، مهتاب[۲] ؛ کریمی، محمد جواد[۳]

گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه صنعتی شیراز

چکیده

در این مقاله پاشندگی فونون های اپتیکی قطبی در چاه کوانتومی AlN/GaN/AlN بررسی شده است. روابط پاشندگی مدهای انتشاری و مدهای نیم فضا بدست آمده است. نتایج نشان می دهد که طیف مد های نیم فضا شامل خطوط گسسته ای است و فرکانس مدهای متقارن و پادمتقارن رفتار افزایشی یا کاهشی با بردار موج دارند.

Propagating and half-space phonon modes in AlN/GaN/AlN quantum well

Sadeghi Javan, Zahra; Arti, Mahtab[2]; Karimi, Mohammad Javad[3]

Department of Physics, Faculty of Basic Sciences, Shiraz University of Technology

Abstract

In this paper, the dispersion of polar optical phonons in AlN/GaN/AlN quantum wells is investigated. The dispersion relationships of the propagating and half-space modes are obtained. The results show that the half-space modes spectra include discrete lines and the frequency of the symmetric and asymmetric modes have increasing or decreasing behavior with increasing the phonon wave vector.

***Keywords**: phonon, quantum, well, propagating, half-space.*

PACS No. 63, 68

مقدمه

فونونها نوسان‌های هماهنگ همه‌یِ اتم‌ها در یک ساختار بلوری هستند که در زمینه‌های مختلف اهمیت بسیاری دارند. بلورها ساختار گوناگونی مانند سولفید روی، ساختار شش گوشی و... دارند. مطالعه فونون ها در نانو ساختارها منجر به درک بیشتر برهم کنش الکترون- فونون در چاه های کوانتومی می‌شوند. ساختارهای شش گوشی دارای چندین مد فونونی از قبیل مدهای نیم فضا، مدهای انتشاری مدهای فصل مشترک و مدهای محبوس هستند[۱]. جان و همکارانش درسال ۲۰۰٤ بر روی موضوع مد های انتشاری فونون اپتیکی و برهم کنش الکترون – فونون در چاه کوانتومی شش گوشی GaN/AlGaN مطالعاتی انجام دادند و با استفاده از مدل پیوسته دی الکتریک رابطه ی پراکندگی فونون اپتیکی انتشاری و معادله قطبش را محاسبه نمودند[۲]. یائو و همکارانش در سال ۲۰۰۵ موضوع تاثیرات قطبش ناشی از فونون های اپتیکی فصل مشترک در چاه کوانتومی شش گوشی GaN/AlN را مطالعه کردند. آن ها توانستند تاثیر میدان الکتریکی بر انرژی قطبش را بررسی کنند[۳]. یانگ و همکارانش در سال ۲۰۰۵ بر روی موضوع جذب فونون در یک چاه کوانتومی GaN/AlN مطالعاتی انجام دادند و متوجه شدند که فرکانس فونون در فرآیند جذب موثر است[٤]. شو و همکارانش در سال ۲۰۱۰ بر روی موضوع مد های فصل مشترک فونون اپتیکی و برهم کنش الکترون فونون در چاه کوانتومی شش گوشی GaN/ZnO مطالعاتی انجام دادند. آن ها توانستند مد های فصل مشترک فونون را در بازه های مختلف فرکانسی بررسی و تحلیل نمایند[۵]. هانگ

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

و همکارانش در سال ۲۰۱۲ بر روی موضوع پاشندگی فونون های اپتیکی انتشاری و برهم کنش الکترون- فونون در چاه کوانتومی شش گوشی GaN/ZnO مطالعاتی انجام دادند و توانستند جفت شدگی الکترون با مد های فونونی انتشاری را بررسی کنند[٦]. ورنتیا و همکارانش در سال ۲۰۱۳ بر روی موضوع تاثیرات قطبش در چاه کوانتومی شش گوشی مطالعاتی انجام دادند و دریافتند که انرژی حالت پایه و انتقال انرژی قطبش چاه کوانتومی شش گوشی را می توانند با چاه کوانتومی سولفید روی مقایسه کنند[۷]. ما در این مقاله به بررسی پاشندگی مدهای نیم فضا و مدهای انتشاری فونون های اپتیکی در چاه های کوانتومی AlN/GaN/AlN می پردازیم.

تئوری

یک چاه کوانتومی AlN/GaN/AlN به پهنای d در جهت محور z در نظر می گیریم. توابع دی الکتریک وابسته به فرکانس بصورت زیرهستند[۱و۸]:

$$\epsilon_z(\omega)=\epsilon_z^{\infty}\frac{\omega^2-\omega_{Lz}^2}{\omega^2-\omega_z^2}\,.\,\epsilon_t(\omega)=\epsilon_t^{\infty}\frac{\omega^2-\omega_{Lt}^2}{\omega^2-\omega_t^2} \qquad (۱)$$

که اندیس t نشان دهنده مولفه مماسی است و فرض می‌کنیم که $\epsilon_z^{\infty}=\epsilon_t^{\infty}$ است. با توجه به اعمال شرایط مرزی بر روی مولفه ی z، بردار جابجایی و مولفه ی مماسی میدان الکتریکی در فصل مشترک های (۲/ ±d) به این صورت هستند:

$$-\epsilon_{2z}(\omega)\frac{\partial\Phi_2(z)}{\partial z}|_{z=\mp\frac{d}{2}}=-\epsilon_{1z}(\omega)\frac{\partial\Phi_1(z)}{\partial z}|_{z=\mp\frac{d}{2}}$$

$$\Phi_2(z)|_{z=\mp\frac{d}{2}}=\Phi_1(z)|_{z=\mp\frac{d}{2}} \qquad (۲)$$

شاخص ۱ چاه کوانتومی (GaN) و شاخص ۲ سد کوانتومی (AlN) را نشان می دهد. مولفه‌ی z بردارموج فونون، k_z، یا حقیقی یا موهومی است، بنابراین داریم[۲و ۹] :

$$\epsilon_z(\omega)\epsilon_t(\omega)>0\quad Re[k_z]=0 \qquad \text{امواج میرایی} \qquad (۳a)$$

$$\epsilon_z(\omega)\epsilon_t(\omega)<0\quad Im[k_z]=0 \qquad \text{امواج نوسانی} \qquad (۳b)$$

مدهای فونونی در چاه های کوانتومی شش گوشی به صورت زیر هستند[۱و۱۵]:

(الف) مدهای انتشاری (P)

مدهای انتشاری (Propagating) مختصه فرکانس های فونون در بازه های مختلف است که به دو صورت متقارن و پاد متقارن هستند. این مدها در چاه کوانتومی و سد کوانتومی رفتار نوسانی دارند. برای محاسبه رابطه‌ی پاشندگی رابطه‌ی زیر را درنظر می‌گیریم[۱و۱۰]:

$$K_Z\frac{\partial\Phi(r)}{\partial q}-q\frac{\partial\Phi(r)}{\partial z}=0 \qquad (۴)$$

$$k_z=\sqrt{\epsilon_t(\omega)/\epsilon_z(\omega)}q$$

با توجه به روابط بالا مولفه‌ی مماسی میدان الکتریکی اینگونه است:

$$\frac{1}{2\beta}\frac{\partial\Phi_2(z)}{\partial z}|_{z=-+\frac{d}{2}}-\frac{1}{2\alpha}\frac{\partial\Phi_1(z)}{\partial z}|_{z=-+\frac{d}{2}}=0$$

$$\alpha=\sqrt{\left|\frac{\epsilon_{1t}(\omega)}{\epsilon_{1z}(\omega)}\right|}\quad \xi_1=\sqrt{|\epsilon_{1z}(\omega)\epsilon_{1t}(\omega)|} \qquad (۵)$$

$$\beta=\frac{1}{2}\sqrt{\left|\frac{\epsilon_{2t}(\omega)}{\epsilon_{2z}(\omega)}\right|}\quad \xi_2=\sqrt{|\epsilon_{2z}(\omega)\epsilon_{2t}(\omega)|}$$

از معادله ۲ و ۳ پتانسیل در محیط ۱ و ۲ برابر با رابطه های زیر هستند:

$$\Phi_1(z)=A\cos(2\alpha Q_m z/d) \qquad (۶)$$

$$\Phi_2(z)=\begin{bmatrix}\pm\left(\mu\frac{\xi_1}{\xi_2}\cos(\beta Q)\sin(\alpha Q)-\cos(\alpha Q)\sin(\beta Q)\right)A\\ +\left(\mu\frac{\xi_1}{\xi_2}\cos(\beta Q)\cos(\alpha Q)+\sin(\beta Q)\sin(\alpha Q)\right)B\end{bmatrix}\times\sin\left(\frac{2\beta Q z}{d}\right)$$
$$+\begin{bmatrix}\left(\mu\frac{\xi_1}{\xi_2}\sin(\alpha Q)\sin(\beta Q)+\cos(\alpha Q)\cos(\beta Q)\right)A\pm\\ \left(\mu\frac{\xi_1}{\xi_2}\cos(\alpha Q)\sin(\beta Q)-\sin(\alpha Q)\cos(\beta Q)\right)B\end{bmatrix}\times\cos\left(\frac{2\beta Q z}{d}\right) \qquad (۷)$$

علامت بالایی و پایینی مطابق با جهت مثبت و منفی محور z است. در این صورت رابطه ۵ را می توان به این شکل نوشت[۱۱و۱۲]:

$$\chi(A\sin(\alpha Q)+B\cos(\alpha Q))=0$$
$$\chi(-A\sin(\alpha Q)+B\cos(\alpha Q))=0 \qquad (۸)$$

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

سراانجام رابطه‌ی پاشندگی برای مدهای انتشاری برابر است با:

$$Q'_m=\frac{m'\pi}{2\alpha} \qquad (۹)$$

مدهای پادمتقارن

$m'=1, 3, 5$

مدهای متقارن

$m'=2, 4, 6$

(ب) مدهای نیم فضا (HS)

مدهای نیم فضا (Half Spase) مدهایی هستند که در فصل مشترک محیط ۱ و۲ دارای پتانسیل صفر هستند. این مدها در چاه کوانتومی رفتار نمایی و در سد کوانتومی رفتار نوسانی دارند. مدهای نیم فضا به دو صورت متقارن و پادمتقارن هستند. برای محاسبه‌ی رابطه‌ی پاشندگی آنها لازم است که شرط ۳a و ۳b به ترتیب در محیط های ۱ و ۲ صدق کنند. پتانسیل در محیط ۱ و۲ به صورت زیر است [۱و۱۳]:

$$\Phi_1(z)=A\cosh\left(\frac{2\alpha Qz}{d}\right)+B\sinh\left(\frac{2\alpha Qz}{d}\right) \qquad (10)$$

$$\Phi_2(z)=a\cos\left(\frac{2\beta Qz}{d}\right)+b\sin\left(\frac{2\beta Qz}{d}\right)$$

با توجه به معادله ۳ و پتانسیل های موجود، رابطه‌ی پاشندگی برای مدهای متقارن و پادمتقارن با انجام محاسبات طولانی به صورت زیر به دست می آیند:

مدهای پادمتقارن

$$\beta Q_m^a-\mu\arctan\left[\frac{\xi_2}{\xi_1}\tanh\left(\alpha Q_m^a\right)\right]-m\pi=0 \qquad (۱۱)$$

مدهای متقارن

$$\beta Q_m^s+\mu\arctan\left[\frac{\xi_1}{\xi_2}\tanh\left(\alpha Q_m^s\right)\right]-m\pi=0$$

در رابطه‌ی بالا .... ٤ و۳ و۲ و۱ و۰ =m و $\mu=1$ است.

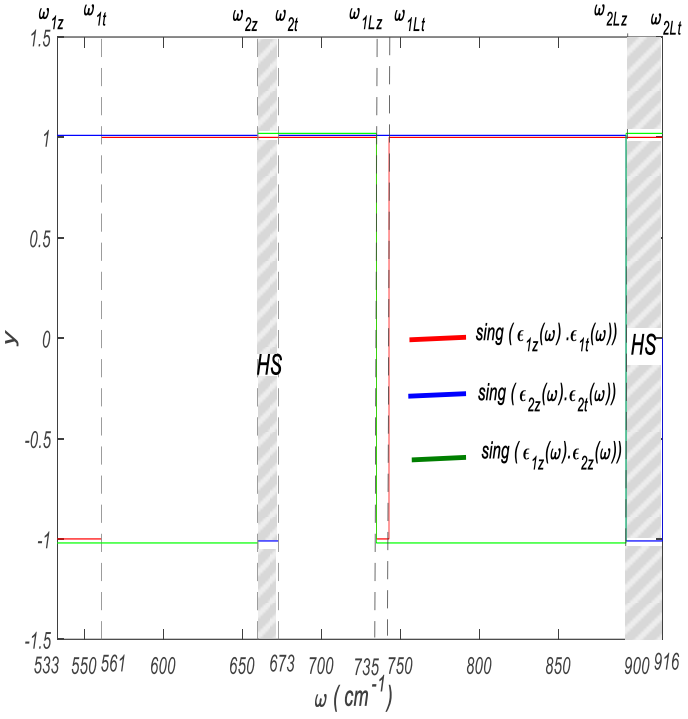
جدول ۱ : پارامترهای ساختاری GaN و AlN

Material	$\omega_{Lz}(cm^{-1})$	$\omega_z(cm^{-1})$	$\omega_{Lt}(cm^{-1})$	$\omega_t(cm^{-1})$	ε^{∞}
GaN	۷۳۵	۵۳۳۴	۷۴۳	۵۶۱	۵/۲۹
AlN	۸۹۳	۶۶۰	۹۱۶	۶۷۳	۴/۶۸

نتایج

با استفاده از مقـادیر جـدول ۱ علامـت توابـع $\epsilon_{1z}(\omega).\epsilon_{1t}(\omega)$, $\epsilon_{2z}(\omega).\epsilon_{2t}(\omega)$ و $\epsilon_{1z}(\omega).\epsilon_{2z}(\omega)$ بر حسـب فرکـانس در شـکل (۱) رسم شده است. با توجه به شرایط مربوط به مدهای نیم فضـا، این مدها در بازه های فرکانس خاصی رخ می‌دهنـد کـه در شـکل نشان داده شده است.

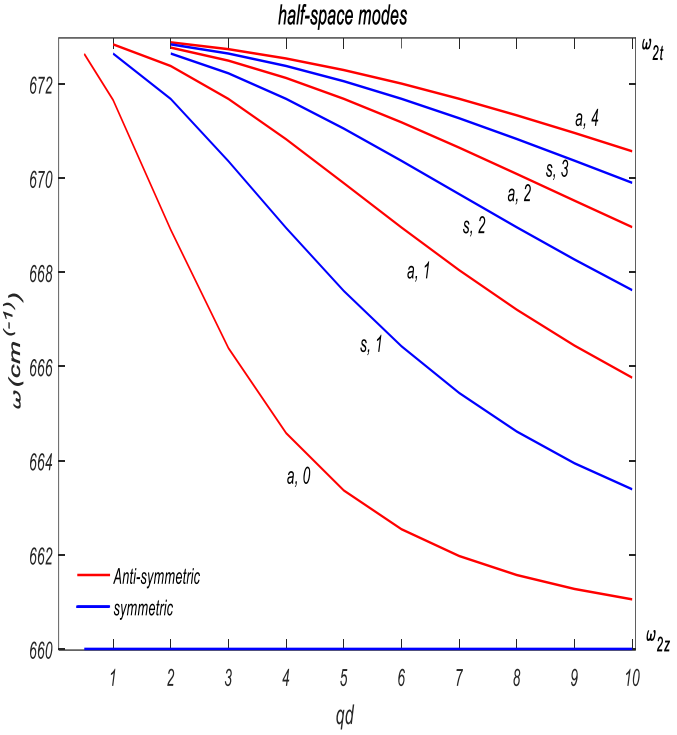
شکل ۲ مدهای نیم فضا اعم از مدهای متقارن و مدهای پاد متقارن را نشان می‌دهد که به دلیل آنکه از شرط معادله ۳ تبعیت می‌کنند دربازه‌ی [ω_{2z} , ω_{2t}] قرار دارند. همانطور که شکل ۲ نشان می دهد با افزایش بردار موج فرکانس مدهای متقارن و پادمتقارن کاهش می یابد و با افزایش عدد کوانتومی m به مقدار ω_{2z} نزدیک می‌شوند. شکل ۳ مدهای نیم فضا متقارن و پاد متقارن را نشان می‌دهد که دربازه‌ی [ω_{2Lz} , ω_{2Lt}] قرار دارند. با توجه به شکل ۳ ، فرکانس مد های متقارن و پادمتقارن با افزایش بردار موج افزایش می یابند و زمانی که عدد کوانتومی m زیاد شود، به مقدار ω_{2Lt} نزدیک می شوند.



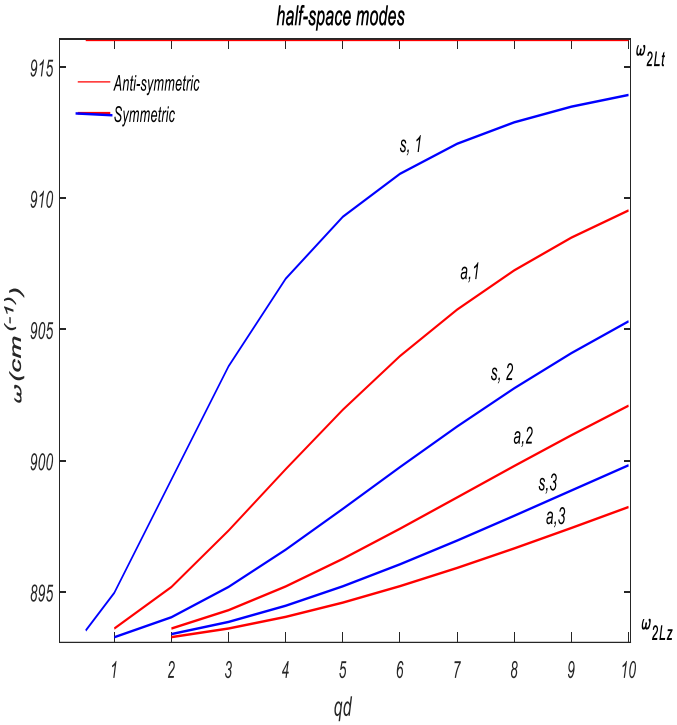
شکل ۱ : علامت توابع $\epsilon_{1z}(\omega).\epsilon_{1t}(\omega)$,$\epsilon_{2z}(\omega).\epsilon_{2t}(\omega)$ و $\epsilon_{2z}(\omega).\epsilon_{1z}(\omega)$ برحسب فرکانس.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

AlN/GaN/AlN را بررسی کردیم و رابطه پاشندگی هرکدام را محاسبه نمودیم. همچنین مدهای نیم فضا را در این چاه کوانتومی شبیه سازی کرده ایم. مدهای نیم فضا به دو صورت متقارن و پادمتقارن هستند. نتایج ما نشان می دهد که مدهای نیم فضای متقارن و پاد متقارن در بازه‌های فرکانسی [ω_{2t} , ω_{2z}] و بازه های فرکانسی [ω_{2Lt} , ω_{2Lz}] قرار دارند و به ترتیب در این بازه ها با افزایش بردار موج، فرکانس آنها کاهش و افزایش می‌یابد.



شکل۲ : مدهای پاد متقارن و متقارن مدهای محبوس در بازه [ω_{2t} , ω_{2z}].



شکل۳ : مدهای پادمتقارن و متقارن مدهای محبوس در ناحیه [ω_{2Lz} , ω_{2Lt}].

نتیجه گیری

ما در این مقاله مد های انتشاری و نیم فضای چاه کوانتومی

مرجع‌ها

[۱] M. A. Stroscio and M. Dutta; "Phonons in Nanostructures"; University of Cambridge, UK, 2000.

[۲] J. S. Jun, L. C. Xing and E. M. Goldys; "Propagating optical-phonon modes and their electron-phonon interactions in wurtzite GaN/$Al_xGa_{1-x}N$ quantum wells"; *Phys. Rev. B*, ***70*** (2004) 115318.

[۳] H. Z. Yao and J. S. Jun; "Polaron effects due to interface optical-phonons in wurtzite GaN/AlN quantum wells"; *Phys. Stat. Sol. B* ***242***, *No. 5* (2005) 1010–1021.

[٤] Y. Yong, J. B. Gail, D. Mitra and M. A. Stroscio; "Photon absorption in the Restrahlen band of thin films of GaN and AlN*"; J. Appl. Phys,* ***98*** (2005) 043517.

[٥] Y. Shu, W. Yan and W. Ling; "Interface optical phonon modes and electron–phonon interactions in wurtzite GaN/ZnO quantum wells"; *Phys. Rev. B,* ***405***(2010) 272-276.

[٦] W. D. Huang, Y. J. Ren and S. Y. Wei; "Dispersions of propagating optical phonons and electron-phonon interactions in wurtzite GaN/ZnO quantum wells"; *Eur. Phys. J. Appl*, ***96*** (2012) 11301.

[٧] Wurentuya and Q. z. Feng; "Polaronic Effects in Wurtzite $In_xGa_{1-x}N$/GaN Parabolic Quantum Well"; *Adv. Mater. Res. Vol* ***629*** (2013) pp 145-151.

[٨] C. Jie and J. S. Jun; "Exciton states in wurtzite InGaN/GaN quantum wells: Strong built-in electric field and interface optical-phonon effects"; *Solid State Commun*, ***145*** (2007) 235 –240.

[٩] C. Dong, L. Yi, W. Lai, L. Hongtao, X. Guangyi, J. Yang, H. Zhibiao, S. Changzheng and H. Yanjun; "Enhancement of electron-longitudinal optical phonon coupling in highly strained InGaN/GaN quantum well structures"; *J. Appl. Phys*, ***101*** (2006) 053712.

[١٠] Sh. L. Shu and B. X. Jian; "Spin-orbit splitting of a hydrogenic donor impurity in GaAs/GaAlAs quantum wells"; *Appl. Phys. Lett*, ***92*** (2007) 022102.

[١١] D. H. Wen, D. Ch. Guang and J. R. Ya; "Effect of ternary mixed crystals on interface optical phonons in wurtizte $In_xGa_{1-x}N$/GaN quantum wells"; *J. Appl. Phys*, ***112*** (2012) 053704.

[١٢] D. H. Wen and Y. W. Shu; "The quasi-confined optical phonons in wurtzite GaN/AlN multiple quantum wells"; *J. Lumin.* ***126*** (2006) 413–420.

[١٣] D. M. Graham, V. A. Soltani, P. Dawson, M. J. Godfrey, T. M. Smeeton, J. S. Barnard, M. J. Kappers, C. J. Humphreys and E. J. Thrush; "Optical and microstructural studies of InGaN/GaN single-quantum-well structures"; *J. Appl. Phys*, ***97*** (2005) 103508.

[١٤] V. Darakchieva, E. Valcheva, P. P. Paskov, M. Schubert. T. Paskova and B. Monemar; "Phonon mode behavior in strained wurtzite AlN/GaN superlattices"; *Phys. Rev. B.****71*** (2005) 115329.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

نقشه برداری دو بعدی توزیع دز تابش های ایکس سخت آزمایشگاه توکامک دماوند

پورشهاب ، بنفشه[۱] ؛ رسولی، چاپار[۱]

[۱]پژوهشکده پلاسما و گداخت هسته ای، پژوهشگاه علوم و فنون هسته ای، سازمان انرژی اتمی ایران، انتهای خیابان کارگر شمالی ، تهران، ایران

چکیده

توکامک دماوند به عنوان یکی از توکامک های سایز کوچک جهان که در طول تخلیه های گریزان به یک چشمه پر قدرت ایکس سخت تبدیل می شود، می تواند ریسک پرتوی بالایی را برای اپراتورهای دستگاه به دنبال داشته باشد. با توجه به اینکه انجام تخلیه های گریزان و در نتیجه تولید تابش های ایکس سخت پر شدت و پر انرژی در توکامک دماوند اجتناب ناپذیر است بنابراین داشتن نقشه دز دقیق تابش ها در این آزمایشگاه امری ضروری خواهد بود. در این مطالعه طی آزمایش هایی با استفاده از دزیمترهای غیرفعال ترمولومینسانس و انجام دزیمتری در ۱۰۰ نقطه از آزمایشگاه دماوند و با اعمال روش های ریاضی جهت درون یابی داده های آزمایشگاهی، یک نقشه برداری دقیق از توزیع دز تابش های ایکس سخت در آزمایشگاه توکامک دماوند انجام شده است. یکی از کاربردهای اصلی این برنامه حفاظ سازی محل کار اپراتورهای دستگاه و همچنین طراحی حفاظ های مناسب برای ادوات و تجهیزات حساس به تابش های هسته ای خواهد بود.

واژه های کلیدی: *توکامک دماوند، نقشه برداری دز، ایکس سخت، دزیمترهای غیرفعال*

2D Mapping of hard x-ray radiation dose distribution of Damavand tokamak laboratory

[1]Pourshahab, Banafsheh; [1]Rasouli, Chapar

[1] School of Plasma Physics and Nuclear Fusion, Nuclear Science and Technology Research Institute, AEOI, Tehran, Iran

Abstract

Damavand tokamak as one of the small size tokamak in the world which turns into an intensive and powerful x-ray source during the runaway discharges, it can lead to high radiation risk for machine operators. Since the runaway discharges and as a result the production of high-intensity and high-energy x-rays are inevitable in tokamak, therefore having an accurate dose map of these radiations will be necessary in this laboratory. In this study, by applying passive thermoluminescence dosimeters and performing dosimetry at 100 points of Damavand laboratory during some experiments and then using mathematical methods to interpolate laboratory data, an accurate mapping of dose distribution of X-ray radiation in Damavand tokamak laboratory has been performed. One of the main applications of this program will be shielding the workplace of the machine operators and designing efficient shields for devices and equipment sensitive to nuclear radiations.

***Keywords**: Damavand Tokamak, dose mapping, hard x-ray, passive dosimeters*

PACS No. ۵۲

مقدمه

توکامک دماوند یکی از ماشین‌های محصورسازی مغناطیسی است که تحقیقات پلاسمای داغ در آن انجام می شود. این دستگاه جزء توکامک‌های سایز کوچک جهان است که توانایی تولید پلاسمای با سطح مقطع کشیده دارد. شعاع اصلی این توکامک ۳۶cm، شعاع فرعی آن ۷cm و میدان مغناطیسی اصلی آن ۱/۲T می باشد. دمای الکترون‌های پلاسما ۳۰۰eV و دمای یون‌های آن ۱۵۰eV بوده و

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

قادر به تولید جریان پلاسمایی با بیشینه ۳۵kA در مدت زمان ۲۲ms می باشد (۱).

توکامک‌های سایز کوچک به عنوان یکی از بسترهای مناسب برای تولید و مطالعه الکترون‌های گریزان به شمار می روند. الکترون‌های گریزان جمعیتی از الکترون‌های پلاسما هستند که تحت تاثیر میدان الکتریکی چنبره ای توکامک شتاب گرفته و وارد محدوده انرژی-های نسبیتی می شوند. بیشینه انرژی این الکترون‌ها در توکامک-های کوچک از مرتبه چند MeV، در توکامک‌های سایز میانی از مرتبه چند ده MeV و در توکامک‌های سایز بزرگ از مرتبه چند صد MeV می باشد. با توجه به اینکه میدان مغناطیسی توکامک‌ها برای محصورسازی چنین انرژی‌هایی طراحی نشده اند بنابراین پس از تولید در داخل پلاسمای توکامک، شعاع حرکت این الکترون‌ها افزایش یافته و با دیواره محفظه خلاء برخورد می کنند. با توجه به حد انرژی بالای الکترون‌های گریزان، در لحظات برخورد این ذرات پرانرژی با عناصر با عدد اتمی بالای موجود در دیواره محفظه خلاء و ادوات و تجهیزات مجاور با پلاسما، در اثر پدیده تابش ترمزی پرتوهای ایکس سخت تولید شده و به خارج از پلاسما گسیل می شوند.

بر اساس مطالب گفته شده بدیهی است که توکامک‌ها به عنوان یک چشمه پر شدت و پر انرژی ایکس سخت شناخته می شوند. دز این تابش ها در توکامک‌های سایز کوچک بسته به شرایط محفظه خلاء می تواند از مقادیر بسیار پایین (حدود چند μSv) تا مقادیر بسیار بالا (حدود چند ده هزار μSv) در هر شات متغیر باشد. منظور از شرایط محفظه خلاء در حقیقت جنس دیواره، محل قرارگیری لیمیترها و چیدمان ادوات و تجهیزات گوناگون مرتبط با محفظه خلاء در زوایای چنبره‌ای متعدد می‌باشد.

با توجه به اینکه تابش‌های ایکس سخت توکامک در تمام جهت‌ها گسیل می شوند بنابراین انجام نقشه‌برداری دقیق از توزیع دز این تابش‌ها در تمامی قسمت‌های آزمایشگاه به ویژه نواحی مهم مانند محل قرارگیری اپراتورهای دستگاه، محل نصب سامانه‌های تشخیصی آسیب‌پذیر در برابر تابش‌های هسته‌ای و محل نصب تجهیزات الکترونیکی حساس به تابش بسیار ضروری خواهد بود. علاوه براین اندازه‌گیری دقیق این تابش‌ها یکی از الزامات اولیه جهت طراحی حفاظ‌های پرتوی مناسب برای ایمن‌سازی محل کار اپراتورهای دستگاه می باشد.

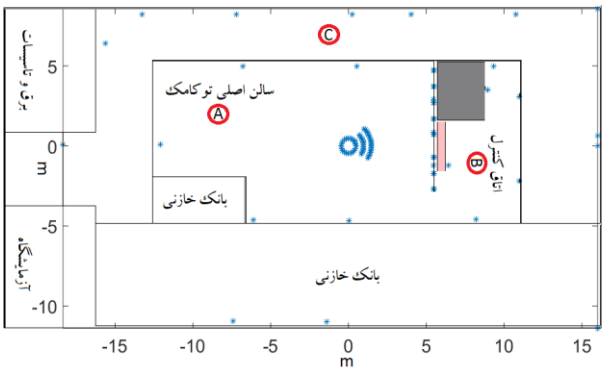
امروزه در جهان برای اندازه‌گیری دز تابش‌های ایکس سخت ابزار فعال و غیرفعال متنوعی مورد استفاده قرار می‌گیرند. دو پارامتر مهم تاثیرگذار در انتخاب ابزار اندازه‌گیری، پهنای زمانی و شدت تابش گسیلی می باشد. با توجه به اینکه پاسخ ابزار اندازه‌گیری فعال در بازه‌های زمانی بسیار کوچک (ms) دارای محدودیت بوده و از دقت کافی برخوردار نیست، لذا برای تابش‌های لحظه‌ای و کوتاه مدت معمولا از ابزار اندازه‌گیری غیر فعال استفاده می‌شود که توانایی انباشت دز در تعداد زیادی از این تابش‌ها را داشته باشند. یکی از انواع دزیمترهای غیرفعال پرکاربرد که در آزمایشگاه توکامک دماوند بطور گسترده مورد استفاده قرار می‌گیرند TLDهای LiF هستند که همراه با ناخالصی های Mg، Cu و P با نام تجاری GR-۲۰۰ شناخته می‌شوند. مشخصات این دزیمترها در مرجع (۲و۳) آورده شده است. در این مطالعه مجموعه‌ای از آزمایش‌ها با استفاده از دزیمترهای مذکور در نواحی تعیین شده‌ای از آزمایشگاه توکامک دماوند انجام گرفته و پس از قرائت و تحلیل داده‌های بدست آمده یک نقشه جامع از توزیع دز تابش‌های ایکس سخت در آزمایشگاه دماوند استخراج گردید.

چیدمان آزمایشگاهی

در این مجموعه آزمایش ها TLDهای GR-۲۰۰ جهت اندازه-گیری توزیع دز تابش‌های ایکس سخت در نواحی تعیین شده از آزمایشگاه توکامک دماوند بکار گرفته شدند. از مهمترین ویژگی های این ابزار می‌توان به عدم حساسیت به نوترون و آستانه دز پایین قابل اندازه‌گیری اشاره کرد. با توجه به عدم قطعیت موجود در پاسخ دزیمترهای ترمولومینسانس، جهت برخورداری از دقت کافی نتایج معمولا از بسته‌های سه تایی جهت اندازه‌گیری دز در هر نقطه استفاده می شود. در این آزمایش‌ها که ۱۰۰ نقطه مورد بررسی و اندازه‌گیری قرار می گیرد مجموعا ۳۰۰ عدد قرص GR-۲۰۰ آماده‌سازی شده و در بسته‌های سه‌تایی بکار گرفته شد. چیدمان بسته‌های به گونه‌ای انجام شده است که کلیه نواحی آزمایشگاه را پوشش دهد. با توجه به غیر همسانگرد بودن و غیر یکنواخت بودن تابش‌های گسیلی از توکامک، تراکم نقاط در

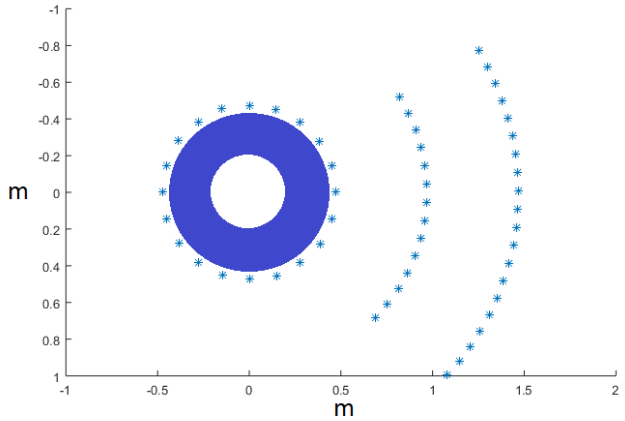
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

فواصل مختلف از دستگاه و همچنین در زوایای چنبره ای مختلف، متفاوت است. نمایی از توزیع نقاط مورد اندازه‌گیری در آزمایشگاه دماوند در شکل ۱ نشان داده شده است. ابعاد منطقه اندازه‌گیری شده در این آزمایش‌ها ۳٤/٥m×۲۰m می باشد. با توجه به اینکه اطلاعات ذخیره شده در دزیمترهای TLD پس از هر بار قرائت تخلیه و صفر می‌شوند، بنابراین این ابزار مجددا برای انجام دزیمتری قابل استفاده هستند. اندازه‌گیری با دزیمترهای TLD شامل مراحلی است که باید بر اساس دستورالعمل استاندارد انجام پذیرد تا علاوه بر سالم ماندن ابزار، دقت بالای نتایج را نیز به همراه داشته باشد. این مراحل شامل کالیبراسیون دستگاه قرائتگر، تعیین ضرایب ECC قرص‌ها، صفر کردن TLD ها قبل از بسته بندی و همچنین آماده‌سازی بسته‌های سه‌تایی جهت نصب در نقاط تعیین شده می‌باشند. همچنین پس از پرتودهی، انجام مراحلی مانند پیش گرمادهی، قرائت و صفر کردن مجدد دزیمترها ضروری خواهد بود(۲و۳).



شکل۱ : نقشه آزمایشگاه توکامک دماوند که چیدمان نقاط مورد اندازه‌گیری روی آن نمایش داده شده است. به دلیل تراکم نقاط اندازه‌گیری شده در فواصل نزدیک به دستگاه، چیدمان این نقاط در شکل ۲ نشان داده شده است.

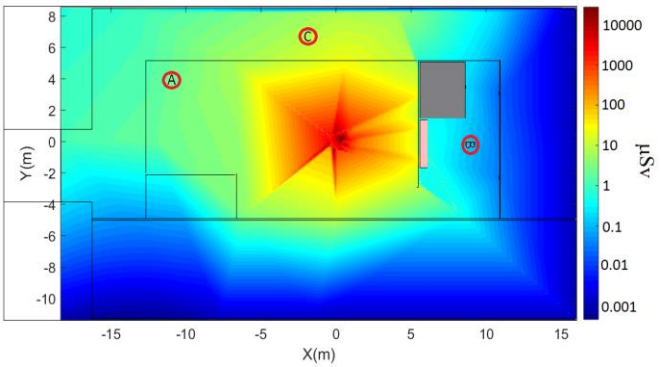
با توجه به اینکه منشاء تولید تابش‌های ایکس سخت برخورد الکترون‌های گریزان با عناصر سنگین موجود در ادوات و تجهیزات داخل محفظه خلاء می‌باشد بنابراین در نواحی که برخی اجزاء مانند لیمیتر، ادوات سامانه‌های تشخیصی و محل‌های اتصال بخش های تشکیل دهنده محفظه خلاء در مجاورت پلاسما حضور دارند، احتمال گسیل تابش‌های افزایش چشمگیری خواهد داشت. بدین ترتیب برای تعیین سهم هر یک از عوامل تاثیرگذار بر شدت تابش‌های ایکس سخت و افزایش وضوح اندازه‌گیری توزیع دز، لازم است تراکم چیدمان TLDها در فواصل نزدیک به توکامک افزایش یابد. در نزدیکی دستگاه توزیع دز با جابه‌جایی‌های کوچک دستخوش تغییرات بزرگی می‌گردد. چیدمان نقاط نصب شده تا فاصله ۱ متری از توکامک در شکل ۲ نشان داده شده است. لازم به ذکر است کلیه اندازه‌گیری ها در این مجموعه آزمایش‌ها در صفحه استوایی توکامک دماوند صورت می‌گیرند.



شکل ۲ : چیدمان بسته‌های TLD در فواصل مختلف تا ۱ متری از دستگاه

پس از نصب بسته‌های TLD بر اساس نقشه تعیین شده در آزمایشگاه، با ثابت نگه داشتن کلیه شرایط کاری اعم از قدرت بانک‌های خازنی، فشار کاری دستگاه، دمای محیط و ...، معمولا ۱۰۰ شات متوالی طی دو روز کاری برای این اندازه‌گیری ها اجرا می‌شود. پس از پایان تخلیه‌ها و برقراری مجدد شرایط ایمن در آزمایشگاه، بسته‌های TLD جمع‌آوری شده و مورد قرائت و محاسبه دز قرار می‌گیرند. در این آزمایش‌ها با توجه به اینکه بدست آوردن توزیع فضایی تابش‌ها در کل محیط اطراف توکامک مدنظر بوده است، لذا علاوه بر نقاط اندازه‌گیری شده، استفاده از روش‌های درون‌یابی نیز جهت تخمین دز سایر نقاط فضا ضروری می‌باشد که در شکل ۳ نتایج حاصل از اندازه‌گیری نقاط تعیین شده و درون‌یابی سایر قسمت‌ها در نقشه آزمایشگاه بطور یکپارچه نشان داده شده است.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



شکل ۳ : نقشه دو بعدی توزیع دز تابش‌های ایکس سخت توکامک دماوند در کل محیط آزمایشگاه. (A) سالن اصلی توکامک دماوند، (B) اتاق کنترل توکامک دماوند، (C) نواحی حاشیه سالن اصلی توکامک دماوند. نتایج ثبت شده به ازای یک شات می‌باشند.

بحث و بررسی

شکل ۳ توزیع دز تابش‌های ایکس سخت توکامک دماوند را به ازای یک شات که پهنای زمانی آن ۲۲ms است نشان می‌دهد. همانطور که مشاهده می‌شود توزیع دز این تابش‌ها تا ٤ متری توکامک با وضوح بالا، غیر یکنواخت بودن و غیرهمسانگرد بودن تابش‌ها را نشان می‌دهد. همچنین بر اساس تئوری، وجود نواحی با دز بالا، که در حقیقت نواحی پربرخورد با الکترون‌های گریزان هستند، پیش بینی می شود که نتایج اندازه گیری‌ها (شکل ۳) نیز تطابق بسیار خوبی را با این پیش‌بینی‌ها بیان می کند. در شکل فوق زبانه‌هایی از تشعشع که بطور واضح مشاهده می‌شوند و توزیع دز در آنها از حدود ۱۲۰۰۰μSv تا ۳۵۰۰۰μSv متغیر است، بیانگر نواحی خاصی هستند که در آنها تیغه‌های لیمیتر ثابت و متحرک، داکت‌های پروب‌های مغناطیسی، هورن‌های تداخل‌سنج میکروموج و محل‌های اتصال بخش‌های محفظه خلاء قرار دارند.

بر اساس نتایج بدست آمده کمترین حد دز در سالن اصلی توکامک (منطقه A) از مرتبه ۱۰μSv به ازای هر شات بوده که این بیانگر منطقه ممنوعه و عدم امکان حضور افراد در هنگام عملیات دستگاه می‌باشد. همانطور که از نقشه دز بدست آمده نیز قابل تشخیص است حضور یک حفاظ سربی به ضخامت ۵cm بین سالن اصلی توکامک و اتاق کنترل (منطقه B) توانسته است از نفوذ تابش‌ها به محل قرارگیری اپراتورها بصورت مطلوبی جلوگیری نماید بطوریکه حد دز در اتاق کنترل دستگاه تا مرتبه دهم μSv به ازای هر شات کاهش یافته است.

نتیجه مهم دیگری که از نقشه‌برداری دز انجام شده حاصل می‌گردد در خصوص نواحی حاشیه سالن اصلی توکامک (مناطق C) است که با توجه به حد دز بدست آمده این نواحی به عنوان مناطق تحت کنترل پرتوی شناخته شده و حضور افراد به هنگام عملیات دستگاه در این نواحی ممنوع است. موضوع مهمی که اندازه‌گیری‌های انجام شده نیز بر آن تاکید می نمایند حفاظسازی کلیه سامانه‌های تشخیصی و ادوات الکترونیکی حساس به تابش‌های هسته‌ای است. با توجه به اینکه بخش بزرگی از این تجهیزات در منطقه ممنوعه و در فواصل بسیار نزدیک به دستگاه نصب می‌شوند، بنابراین نتایج اندازه‌گیری‌های انجام شده در این مطالعه می‌تواند جهت طراحی حفاظ‌های مناسب برای هر یک از این سامانه‌ها بکار برده شود.

نتیجه گیری

در این مطالعه یک نقشه‌برداری دقیق بر اساس اندازه‌گیری‌های تجربی طی ۱۰۰ شات متوالی و درون‌یابی داده‌های آزمایشگاهی برای آزمایشگاه توکامک دماوند انجام شد. نتایج بدست آمده حاکی از وجود نواحی خاص با دز بسیار بالا، از مرتبه چند ده هزار μSv، در سالن اصلی توکامک می‌باشد که به عنوان منطقه ممنوعه در نظر گرفته می‌شود. با توجه به داده‌های تولید شده می‌توان در هر فاصله از دستگاه و هر زاویه چنبره‌ای موردنیاز، حفاظ‌های مناسب برای ادوات و سامانه‌های حساس به تابش‌های هسته‌ای طراحی نمود.

مرجع‌ها

[1] C. Rasouli, D. Iraji, A. H. Farahbod, K. Akhtari, H. Rasouli, H. Modarresi and M. Lamehi, “Runaway electron energy measurement using hard x-ray spectroscopy in “Damavand” tokamak”, *Review of Scientific Instruments* 80 (2009) 013503.

[2] B. Pourshahab, C. Rasouli, & S.M. Hosseini Pooya, H. Rasouli, A. Sadighzadeh, H. Habibi, “Dose measurement of hard X-ray produced by damavand tokamak by means of LiF:Mg, Cu, P TLDs”, *Journal of Fusion Energy*. **32**, (2013). 451-456.

[3] C. Rasouli, B. Pourshahab, S.M. Hosseini Pooya, T. Orouji, H. Rasouli, “Study of runaway electrons using dosimetry of hard x-ray radiations in Damavand tokamak” *Review of scientific instruments*. ۸۵. (2014) 053509.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

محاسبات ابتدا به ساکن آلیاژ تمام هویسلر Fe_2YGa

رسولی، مرضیه السادات[۱]؛ فروزانی، قاسم[۱]؛ اسدی، احمد[۱]

[۱] گروه فیزیک، دانشگاه پیام نور، صندوق پستی ۳۶۹۷-۱۹۳۹۵، تهران، ایران

چکیده

در این مقاله خواص ساختاری، الکترونی و مغناطیسی آلیاژ تمام هویسلر Fe_2YGa به کمک محاسبات ابتدا به ساکن مورد مطالعه قرار گرفته است. محاسبات با استفاده از کد pwscf از بسته نرم‌افزاری کوانتوم اسپرسو بر پایه نظریه تابعی چگالی و با در نظر گرفتن تقریب شیب تعمیم یافته انجام شده است. نتایج به دست آمده نشان می‌دهند که این آلیاژ یک رسانای فرومغناطیس است و ممان مغناطیسی کل آن با قانون اسلاتر- پاولی سازگار است. همچنین این آلیاژ با انرژی بستگی منفی به لحاظ ساختاری پایدار می‌باشد.

واژه های کلیدی: *نظریه تابعی چگالی، آلیاژ هویسلر، فرومغناطیس، کوانتوم اسپرسو*

Ab Initio Calculations of Full Heusler alloy Fe_2YGa

Rasouli, marzieh sadat; Forozani, Ghasem; Asadi, Ahmad

[1] *Department of Physics, Faculty of Science, Payame Noor University, P.O. Box 19395-3697, Tehran, Iran*

Abstract

In this paper, the structural, electronic and magnetic properties of full Heusler alloy Fe_2YGa with the help of ab initio calculations have been performed. Calculations have been done using pwscf program from Quantum Espresso package by applying the generalized gradient approximation. The results show that Fe_2YGa is ferromagnetic conductor. The total spin magnetic moment of Heusler alloy Fe_2YGa was found in accordance with the Slater-Pauling rule. Also, this alloy is stable due to negative cohesive energy.

***Keywords**: Density functional theory, Heusler alloy, Ferromagnetism, Quantum Espresso*

PACS No. 71

مقدمه

معمولاً فهم مطالب حالت جامد دشوار است و باید تا حد امکان ساده شوند. نیاز به ساده سازی پدیده‌های حالت جامد سبب شد مطالعه ترکیبات مشخص، فلزات خاص و آلیاژهای ساده مورد توجه محققان قرار بگیرد. با شناخت ارتباط بین ساختار و خواص مواد می‌توان قطعات بهتری برای فناوری‌های جدید ساخت؛ لذا این شناخت بسیار حائز اهمیت است. فناوری نوین اسپینترونیک به تولید قطعات کوچک و بسیار کارآمدی پرداخته است که انتقال اطلاعات در آنها بر پایه بار و اسپین الکترون صورت می پذیرد. مزیت ابزارهای اسپینترونیکی، افزایش سرعت پردازش داده ها و کاهش توان مصرفی است. برای ساخت ابزار اسپینترونیکی به یک منبع جریان اسپینی نیاز داریم. یکی از راه‌های تولید این جریان، عبور جریان الکتریکی ناقطبیده از درون یک فلز فرومغناطیس نیم‌فلز است [۳-۱].

آلیاژهای هویسلر از جمله مواد فرومغناطیس هستند که توجه محققین زیادی را به خود جلب کرده‌اند. علت توجه به این آلیاژها، خصوصیات مختلف از جمله ویژگی‌های نیم‌فلزی و مغناطیسی و

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

همچنین سادگی فیزیک حاکم بر آنهاست. بطور کلی آلیاژهای هویسلر به دو دسته تقسیم می شوند: ۱- آلیاژهای تمام هویسلر (X_2YZ) ۲- آلیاژهای نیمه هویسلر (XYZ). در این آلیاژها X و Y از فلزات واسطه و Z هر یک از عناصر گروه اصلی ۳ و ٤ می‌تواند باشد. برخی از این آلیاژها ترکیبات نیم‌فلزی مغناطیسی هستند. این ترکیبات از زمان پیدایش صنعت اسپینترونیک اهمیت ویژه‌ای پیدا کرده‌اند [٤].

روش محاسبات

محاسبات با استفاده از کد pwscf از بسته نرم‌افزاری کوانتوم اسپرسو که بر مبنای نظریه تابعی چگالی، شبه پتانسیلها و همچنین توابع موج تخت کار می‌کند، انجام شده است. نظریه تابعی چگالی، مسئله بس ذره ای را به تک ذره ای تبدیل می‌کند و تمام خواص فیزیکی از روی چگالی حالت پایه بدست می‌آید. لازم به ذکر است که در این روش از تقریب شیب تعمیم یافته برای برهم‌کنش تبادلی- همبستگی و از شبه پتانسیل فوق‌نرم برای برهم‌کنش میان هسته و الکترون‌های ظرفیت استفاده شده است [٥]. همچنین، انرژی قطع ۹۰Ry برای خلاصه کردن بسط توابع موج کوهن-شم و کاهش حجم محاسبات استفاده شده است. برای بررسی انرژی و چگالی حالت‌های کل، ناحیه اول بریلوئن با تعداد نقاط k‌ی ۱۰*۱۰*۱۰ مش‌بندی شده است و درجه همگرایی در محاسبات کمتر از 10^{-4}Ry در نظر گرفته شده است.

نتایج و بحث

آلیاژ تمام هاسلر Fe_2YGa با شانزده اتم در سلول واحد، شامل ۸ اتم Fe، ٤ اتم Y و ٤ اتم Ga در فاز مکعبی شبیه‌سازی شده است در شکل ۱ ساختار هندسی این آلیاژ نشان داده شده است. همچنین در جدول ۱ مختصه مکانی اتم‌ها مشخص گردیده‌اند.

در آغاز، برای مشخص شدن نوع نظم مغناطیسی آلیاژ مورد مطالعه، نمودار انرژی بر حسب ثابت شبکه برای دو حالت آنتی‌فرومغناطیس و فرومغناطیس رسم و در شکل ۲ نشان داده شده است. با توجه به نمودار می‌توان گفت که آلیاژ مذکور فرومغناطیس می‌باشد، زیرا حالت فرومغناطیس انرژی کمتری نسبت به حالت آنتی‌فرومغناطیس دارد. از این‌رو، جهت انجام محاسبات بعدی با حالت فرومغناطیس پیش می‌رویم.

در ادامه محاسبات، نمودار انرژی کل بر حسب ثابت شبکه را با معادله حالت مورناگان برازش داده و پارامترهای ساختاری از جمله مدول حجمی، مشتق مدول حجمی را به دست می‌آوریم. این معادله به فرم زیر است:

$$E(V) = E_0 + \frac{9V_0\beta_0}{16}\left\{\left[\left(\frac{V_0}{V}\right)^{\frac{2}{3}}-1\right]^3\beta_0' + \left[\left(\frac{V_0}{V}\right)^{\frac{2}{3}}-1\right]^2\left[6-4\left(\frac{V_0}{V}\right)^{\frac{2}{3}}\right]\right\} \quad (۱)$$

که در آن E_0، V_0، β_0 و β_0' به ترتیب کمینه انرژی کل در حجم تعادلی، حجم سلول واحد، مدول حجمی و مشتق مدول حجمی می‌باشند [٦]. به منظور بررسی پایداری آلیاژ می‌توان انرژی بستگی ساختار را که از رابطه ۲ به دست می‌آید محاسبه نمود.

$$E_{coh} = E_{tot} - (2E_{Fe} + E_Y + E_{Ga}) \quad (۲)$$

در این رابطه E_{coh} انرژی بستگی، E_{tot} انرژی کل ساختار می‌باشد [۷]. در واقع انرژی بستگی، مقدار انرژی لازم برای جداسازی یک ساختار به اجزای سازنده‌اش می باشد با توجه به مقدار منفی به دست آمده برای انرژی بستگی، می‌توان گفت که این آلیاژ به لحاظ ساختاری پایدار است. در جدول ۲ تمامی پارامترهای محاسبه شده برای آلیاژ Fe_2YGa لیست شده‌اند.

جدول ۱. موقعیت نقاط شبکه در این ساختار

Fe_2YGa	
Fe	(0.25,0.25,0.25) (0.75,0.75,0.75)
Y	(0,0,0)
Ga	(0.5,0.5,0.5)

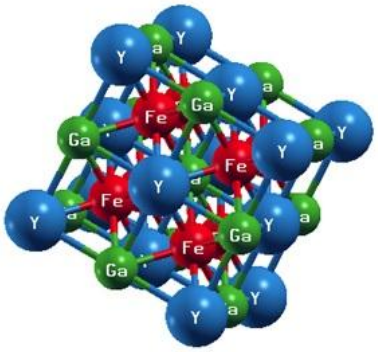
در جدول ۳ ممان مغناطیسی کل آلیاژ Fe_2YGa و ممان مغناطیسی تک‌تک اتم‌ها آورده شده است. با توجه به مقادیر گزارش شده می‌توان نتیجه گرفت که ممان مغناطیسی اسپینی کل آلیاژ با قاعده اسلاتر- پاولی سازگار است. بر طبق این قاعده، ممان مغناطیسی

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

اسپینی کل آلیاژهای تمام هویسلر از رابطه $\mu_t = Z_t - 18$ به دست می‌آید که در این رابطه Z_t تعداد کل الکترون‌های ظرفیت و μ_t ممان مغناطیسی اسپینی کل بر سلول واحد است [۸]. در آلیاژ مذکور تعداد الکترون‌های ظرفیت ۲۲ عدد می‌باشند و از قانون اسلاتر- پاولی، ممان مغناطیسی کل آلیاژ $٤\,\mu_B/f.u$ به دست می‌آید که با عدد به دست آمده از محاسبات سازگار است.

جدول ۲: پارامترهای بهینه محاسبه شده آلیاژ Fe_2YGa

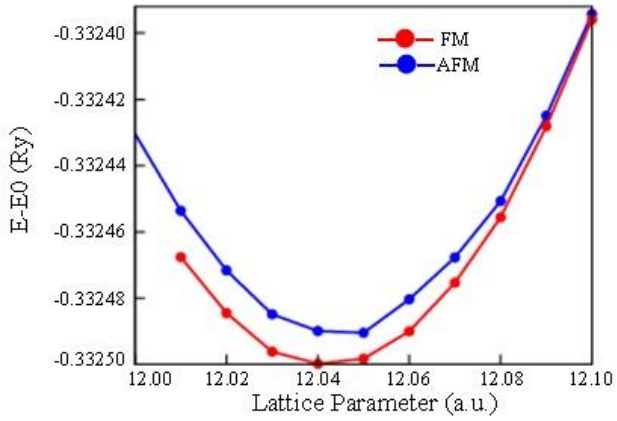
نام آلیاژ	Fe_2YSi
تعداد نقاط K (k-point)	۱۰*۱۰*۱۰
انرژی قطع (Ry)	۹۰
ثابت شبکه ($\AA$)	۱۲/۰۵
مدول حجمی (β)(Kbar)	۲۱٤
مشتق مدول حجمی (β')	۱۱/۵٦
انرژی بستگی (Ry)	-۱/۱۹۰٤



شکل ۱: ساختار هندسی آلیاژ تمام هویسلر Fe_2YGa

جدول۳ : ممان مغناطیسی کل آلیاژ Fe_2YGa و ممان مغناطیسی اتم‌های تشکیل دهنده آلیاژ

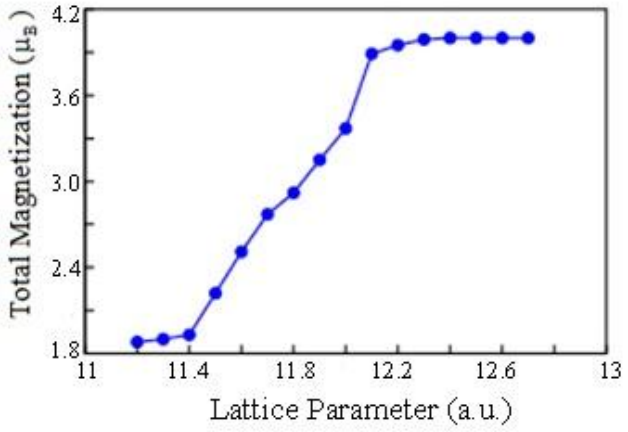
نام آلیاژ	$\mu_a(\mu_B/atom)$			$\mu_t(\mu_B/f.u)$
	Fe	Y	Ga	
Fe_2YGa	۳/۹۸	-۱/۲۳	۱/۲۷	٤/۰۲



شکل ۲: نمودار انرژی بر حسب ثابت شبکه برای آلیاژ Fe_2YGa در دو حالت فرومغناطیس و آنتی‌فرومغناطیس

همچنین نتایج به دست آمده در جدول ۳ نشان می‌دهند که اتم Fe بیشترین سهم را در ممان مغناطیسی اسپینی کل دارد.

برای بررسی رفتار مغناطیسی آلیاژ تحت تنش، نمودار ممان مغناطیسی کل ساختار بر حسب ثابت شبکه رسم شد که در شکل ۳ دیده می‌شود.



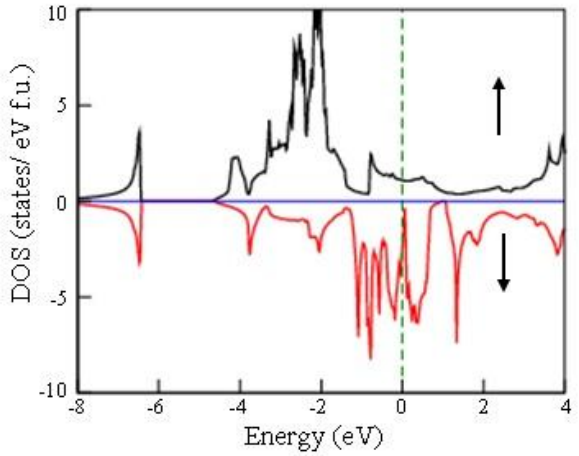
شکل ۳: ممان مغناطیسی کل بر حسب ثابت شبکه برای آلیاژ Fe_2YGa

در نمودار فوق مشاهده می‌شود که با افزایش ثابت شبکه، ممان مغناطیسی کل آلیاژ در نهایت به حالت پایا و ثابتی می‌رسد. بنابراین می‌توان نتیجه گرفت که آلیاژ Fe_2YGa خاصیت مغناطیسی خود را تحت تنش حفظ می‌کند.

در ادامه کار، برای بررسی خواص الکترونی آلیاژ تمام هویسلر Fe_2YGa نمودار چگالی حالت‌های الکترونی رسم شده است که در شکل ٤ مشاهده می‌شود. با توجه به این نمودار می‌توان گفت که آلیاژ مذکور یک رسانای مغناطیسی است، زیرا در نزدیکی تراز فرمی برای هر دو کانال اسپینی (بالا و پایین)، حالت داریم و

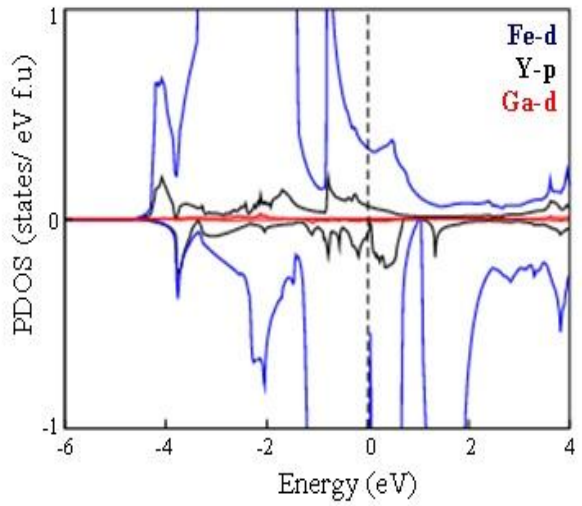
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

نمودار توسط خط فرمی قطع شده است. بنابراین از این آلیاژ نمی‌توان در ساخت قطعات اسپینترونیک استفاده نمود.



شکل ٤: نمودار چگالی حالت‌های الکترونی کل بر حسب انرژی برای آلیاژ Fe_2YGa (انرژی فرمی به صورت خط‌چین مشخص شده و بر صفر منطبق است.)

به منظور بررسی دقیق‌تر خواص الکترونی آلیاژ تمام هویسلر Fe_2YGa، نمودار چگالی حالت‌های جزئی در شکل ۵ نشان داده شده است. با توجه به نمودار مذکور، مشاهده می‌شود که بیشترین سهم چگالی حالت‌های الکترونی اشغال شده در اطراف تراز فرمی، مربوط به اوربیتال d اتم Fe است. همچنین یک هیبریداسیون قوی میان اوربیتال‌های d اتم Fe و اوربیتال‌های d اتم Y وجود دارد.



شکل ۵: نمودار چگالی حالت‌های جزئی آلیاژ Fe_2YGa نزدیک تراز فرمی

نتیجه گیری

با استفاده از کد pwscf از نرم‌افزار کوانتوم اسپرسو، خواص ساختاری، الکترونی و مغناطیسی آلیاژ تمام هاسلر Fe_2YGa مورد مطالعه قرار گرفت. نتایج نشان دادند که این آلیاژ در ثابت شبکه تعادلی یک رسانای فرومغناطیس است و مغناطش خود را تحت تنش حفظ می‌کند. همچنین از روی محاسبات ممان مغناطیسی کل آلیاژ $٤/٠٢\ \mu_B / f.u$ به دست آمد که با قاعده اسلاتر پاولی تطابق دارد. این آلیاژ با داشتن انرژی بستگی منفی از لحاظ ساختاری پایدار است، ولی به دلیل آنکه خاصیت نیم‌فلزی ندارد نمی‌تواند در قطعات اسپینترونیک مورد استفاده قرار بگیرد.

مرجع‌ها:

[۱] M. Rostami, M. Afshari, M. Moradi, "Bulk and surface halfmetallicity of CsS in CsCl structure: a density functional theory study" *J. Alloys Compd*. **575**, 301–308 (2013).

[۲] A.A.M. Abadi, G. Forozani S.M. Baizaee, A. Gharaati "Ab Initio Calculations of New Full Heusler Alloys Rh2ZrX (X= Al, Ga, In, Si, Ge, Sn). *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*, **32**(8) (2019).

[۳] A. Amirabadizadeh, S.A. Emami, Z. Nourbakhsh, S.M. Sadr, S.M. Baizaee, "The effect of substitution of As for Ga on the topological phase and structural, electronic and magnetic properties of Mn2ZrGa Heusler alloy" *J. Super Nove Magn*. **30**, (2017).

[۴] A. Amudhavalli, R. Rajeswarapalanichamy, K. Iyakutti," Half metallic ferromagnetism in Ni based half Heusler alloys" *Comput. Mater. Sci*.**148**, 87–103 (2018).

[۵] J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett*. **80,** 891. (1998).

[۶] F.D. Murnaghan, *Proc. Natl. Acad. Sci*. U.S.A. **9** (1944) 244.

[۷] S. Amari, R.Mebsout, S. Mecabih, B. Abbar, B. Bouhafs, "Firstprinciple study of magnetic, elastic and thermal properties of fullHeusler Co2MnSi" *Intermetallics*. **44**, 26–30 (2014).

[۸] L. Pauling, "The nature of the interatomic forces in metals" *Phys. Rev*. **54**, 899–904 (1938).

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

شبیه سازی عددی تأثیر تغییر ابعاد لایه‌ی نازک فعال سلول خورشیدی آلی بر روی حرکت حامل‌های بار الکتریکی و عملکرد آن

سپه وند، نسرین[۱]؛ بهرامی، محسن[۲]

[۱] گروه فیزیک، دانشگاه لرستان، خرم آباد (nasrinsepah62@gmail.com)

[۲] گروه فیزیک، دانشگاه لرستان، خرم آباد (Bahrami.m@lu.ac.ir)

چکیده

در این کار تأثیر، اثرات تغییر ابعاد ساختار لایه بر روی جمع آوری حامل‌های بار الکتریکی تولید شده در لایه‌ی نازک مرکب از P3HT و PCBM که بین دو الکترود قرار دارد را با استفاده از شبیه سازی عددی مونت کارلو - الگوریتم بورتز، کالوس و لبوویتز- با ساختار شطرنجی و ابعاد مختلف ۶۰×۱۵×۵nm، nm ۶۰×۳۰×۵ تحت شرایط حاکم بر لایه‌ها، مورد بررسی واقع شده است. در نهایت تعداد میانگین الکترون‌ها و حفره‌های تولید شده بر رروی الکترودهای کاتد و آنود محاسبه گردیده است و این نتیجه حاصل شد، با افزایش پهنای لایه تعداد میانگین حامل‌های بار الکتریکی جمع آوری شده بر روی الکترودها کاهش یافته است که این تأثیر مستقیم بر تولید جریان مدار و عملکرد سلول خورشیدی می‌گذارد.

واژه های کلیدی: *حامل بار الکتریکی، سلول خورشیدی آلی، مونت کارلو.*

Numerical simulation of the effect of changing the dimensions of the thin active layer of the organic solar cell’s on move of the electrical charge carriers and it’s function.

Sepahvand, Nasrin[1]; Bahrami, Mohsen[2]

[1] Department of Physics, University of lorestan Khorramabad
[2] Department of Physics, University of Lorestan, Khorramabad

Abstract

In this work, the effect of changing the dimensions of the layer structure on the collection of electrical charge carriers which been produced in the thin layer composed of P3HT and PCBM that is between two electrodes, using the Monte Carlo numerical simulation with Bortez, Callus and Lebowitz algorithms, with checkered structure and different dimensions 60×15×5nm, 60×30×5nm, have been the conditions of the layers. Finally, the average number of electrons and holes produced on the cathode and anode electrodes were calculated and it was concluded that, with increasing layer width, the average number of electrical charge carriers collected on the electrodes has decreased, wich it has a direct impact on production of layer cricuits and solar cell perfomancs.

Keywords: *carrier electrical charge, solar cell, Monte Carlo.*

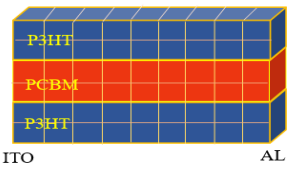
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

۱. مقدمه

در طی دو دهۀ گذشته سلول‌های خورشیدی آلی یک تکنولوژی امیدوارکننده، مقرون به صرفه با وزن سبک و تولید آسان در مقیاس وسیع ارائه کرده‌اند که این نشان از اهمیت بالای آن‌ها دارد [۱و۲]. مدل‌سازی و شبیه‌سازی عددی روشی مؤثر برای پیش‌بینی بهینه‌سازی و ارائه بهتر عملکرد سلول‌های خورشیدی حتی بدون نیاز به ساخت اولیه آنهاست [۳]. این شبیه سازی ها بینشی را در مورد چگونگی ساختار سلول خورشیدی به ما می‌دهند که می‌توانند بر روی ایجاد و جمع‌آوری بارهای الکتریکی روی الکترودها که به تولید جریان مدار خارجی کمک می‌کنند، تأثیرگذار باشند [٤]. یکی از روش های عددی کارآمد، روش مونت کارلو است که در پژوهش حاضر بکار گرفته شده است.

۲. مبانی نظری و روش

برای انجام شبیه‌سازی، ساختار شطرنجی با ترکیبی از مواد آلی PCBM ([6, 6]-Phenyl c_{61}-butyric acid methyl eset)، از مشتقات فولرین به عنوان نیمه رسانای نوع-n و P3HT (Poly (3- hegxylthiophene)) به عنوان نیمه رسانای نوع-P ، مطابق شکل (۱) را طراحی کرده‌ایم. این مواد به دلیل این که انتقال دهنده‌های مناسب الکترون و حفره هستند در این ساختار مورد استفاده قرار می‌گیرند که خواص آن‌ها در جدول (۱) آورده شده است. الکترودهای آنود (اکسید ایندیم قلع) و کاتد (آلومینیوم) برای جمع‌آوری حامل‌های بار الکتریکی در اطراف لایه قرار گرفته است. شبیه‌سازی را مطابق با مراحل ارائه شده در فلوچارت شکل (۲) انجام می‌دهیم.



شکل ۱: ساختار شطرنجی سلول خورشیدی آلی

۱- ابتدا اکسایتونی را در یک مکان تصادفی به نشانۀ تابش فوتون بر روی لایۀ فعال در نظر می‌گیریم.

۲- انرژی ترازهای HOMO و LUMO هر جایگاه از تابع توزیع گاوسی زیر محاسبه می‌شود [۵]:

$$g(E) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}\exp\left(-\frac{(E-E_0)^2}{2\sigma^2}\right) \qquad (۱)$$

که E انرژی و σ پهنای تابع توزیع گاوسی است.

۳- آهنگ پرش اکسایتون‌ها (W_{ij}) بین نقاط مختلف شبکه از طریق رابطۀ زیر محاسبه می‌گردد:

$$W_{ij} = W_e\left(\frac{R_0}{R_{ij}}\right)^6 F(\Delta E_{ij}) \qquad (۲)$$

$$F(\Delta E_{ij}) = \begin{cases} \exp(-\frac{\Delta E_{ij}}{K_B T}) & , \Delta E_{ij} > 0 \\ 1 & , \Delta E_{ij} < 0 \end{cases} \qquad (۳)$$

$$w_{e(n)} = \frac{6k_B T\mu_{e,h}}{qa_0^2}\exp(2\gamma a) \qquad (۴)$$

در این رابطه (ΔE_{ij})، اختلاف انرژی بین دو جایگاه پرش، K_B ثابت بولتزمن، T ثابت دما، W_e فرکانس پرش حامل‌های بار الکتریکی، R_0 شعاع جایگزیدگی و R_{ij} فاصلۀ میان جایگاه‌های پرش و $\mu_{e,h}$ تحرک‌پذیری حامل‌های بار الکتریکی است.

٤- تفکیک اکسایتون‌ها در مرز مشترک به حامل‌های بار الکتریکی و آهنگ پرش با روش آبراهام - میلر انجام می‌شود:

$$w_{ij} = \begin{cases} W_e\exp(-2\gamma R_{ij})F(\Delta E_{ij}), & \Delta E_{ij} > 0 \\ W_e\exp\exp(-2\gamma R_{ij}), & \Delta E_{ij} \le 0 \end{cases} \qquad (۵)$$

۵- محاسبۀ احتمال پرش حامل‌های بار الکتریکی:

$$P_K = \frac{W_{ij}}{W_{total}} \qquad (٦)$$

W_{total}، مجموع آهنگ‌های پرش به جایگاه‌های اطراف است.

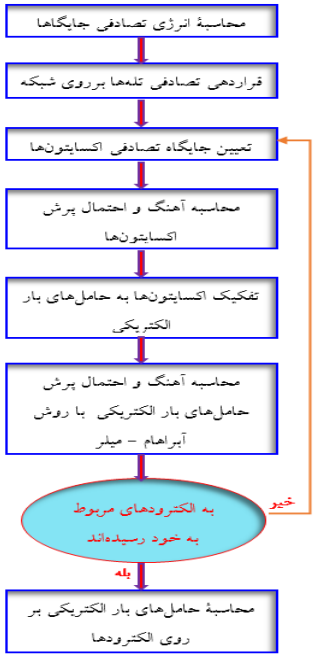
٦- محاسبۀ الکترون‌ها و حفره‌های جمع‌آوری شده روی الکترودهای آنود و کاتد [٦و٧].

۳. نتایج و بحث

برای انجام شبیه‌سازی، محیطی با ابعاد ٦۰×۱۵×۵ nm، با ساختار شطرنجی (متشکل از سه لایه) طول هر لایه ٦۰nm و پهنای ۱۵ nm و ضخامت آن ۵ nm است و محیط دیگری نیز مشابه فوق ولی با ابعاد ٦۰×۳۰×۵ nm، در نظر گرفته می‌شود. فرض می‌کنیم که

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مولکول‌های P3HT و PCBM بر روی نقاط (گره‌های) این شبکه با ثابت ۱nm قرار دارند. در محاسبات عددی γ میزان جایگزیدگی بارها برابر با $2nm^{-1}$، K_BT برابر با ۰٫۰۲۵ ev، R_0 شعاع جایگزیدگی اکسایتون‌ها و R_{ij} فاصلهٔ میان جایگاه‌های پرش i و j نیز ۱nm در نظر گرفته می‌شود. محاسبات عددی در دو مرحله به صورتی که در زیر خواهد آمد انجام می‌گیرد. در هر مرحله نمودار حامل‌های بار الکتریکی جمع‌آوری شده در الکترودهای مربوطه بر حسب تعداد حامل‌های بار تولید شده در مرز مشترک دو ماده در هر دو ساختار رسم و با یکدیگر مقایسه می‌شود.



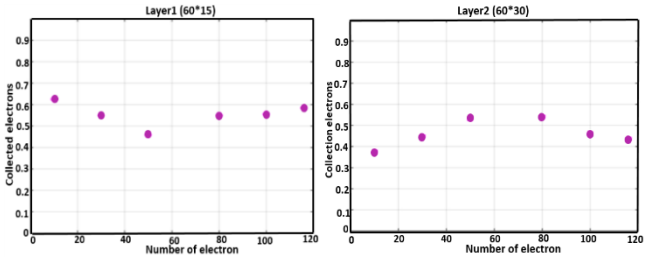
شکل۲- فلوچارت شبیه سازی به روش مونت کارلو.

۳-۱. تزریق هم زمان اکسایتون‌ها بر روی لایه

تزریق تعداد محدودی از اکسایتون‌ها (۱۱۶،۱۰۰،۸۰،۵۰،۳۰،۱۰) را در شرایطی که هر جایگاه (مولکول) فقط می‌تواند یک اکسایتون یا حامل بار الکتریکی را دریافت کند، در اولین مرحله از فرآیند شبیه‌سازی در نظر گرفتیم. با اعمال محدودیت پذیرش جایگاه‌ها در دریافت حامل‌های بار و تنها عامل اتلاف (رسیدن الکترون و حفره جمع‌آوری شده روی الکترودهای کاتد را در لایهٔ nm ۶۰×۱۵×۵، بیشتر از لایهٔ ۶۰×۳۰×۵nm به دست آوردیم. این تفاوت در نمودارهای (۱) و (۲) قابل مشاهده است.

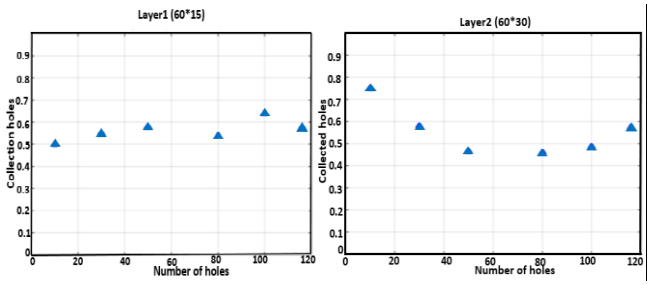
جدول۱: ویژگی‌های مواد P3HT و PCBM [۷].

ویژگی‌ها	P3HT	PCBM
تحرک‌پذیری‌حامل‌ها	۲×۱۰^{-۴}	۳×۱۰^{-۳}
پهنای انرژی چگالی حالت‌ها	۰٫۰۶۳	۰٫۰۶۳
انرژی تراز انتقال دهنده حامل‌ها (ev)	$E_{LUMO}=۳$ $E_{HOMO}=۵٫۱$	$E_{LUMO}=۳٫۷$ $E_{HOMO}=۶٫۱$



الف ب

نمودار ۱: الکترون‌های جمع‌آوری شده در کاتد برحسب تعداد الکترون‌های تولید شده در مرز مشترک دو لایه، الف) لایه ۶۰×۱۵ nm، ب) ۶۰×۳۰ nm.



الف ب

نمودار ۲: حفره‌های جمع‌آوری شده در آنود برحسب تعداد حفره‌های تولید شده در مرز مشترک دو لایه، الف) لایه ۶۰×۱۵ nm، ب) ۶۰×۳۰ nm.

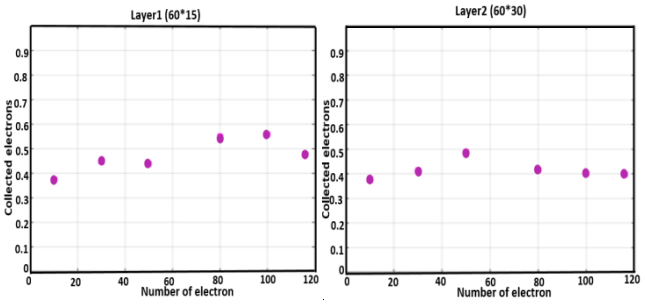
مطابق با رابطه (٤) تحرک پذیری و به دنبال آن آهنگ و احتمال پرش برای الکترون‌ها کمتر از حفره‌ها است. به نظر می‌رسد علت اختلاف رفتار الکترون‌ها و حفره‌ها همین موضوع باشد. علاوه بر ا ین مطابق با نتایج بدست آمده، اگر فضای آزاد بیشتری در اختیار ذرات باشد و آهنگ پرش نیز بالا باشد ذرات مورد نظر با احتمال بیشتری به الکترود مربوطه می‌رسند.

۳-۲. اعمال تله‌های عمیق و گیراندازی حامل‌های بار الکتریکی

در مرحله دوم شبیه‌سازی، مکان تله‌ها عمیق و انرژی جایگاه‌هایی که تله‌ها در آن قرار دارند به طور تصادفی با مرکزیت انرژی تله‌های عمیق و پهنای گأوسی σ=۰٫۰۶ در نظر گرفته شد. تراز انرژی تله‌ها برابر با میانگین تراز انرژی مواد دهنده یا گیرندهٔ بار

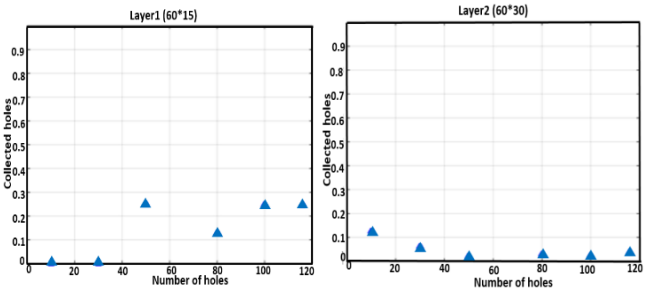
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

الکتریکی، لایهٔ فعال سلول خورشیدی است. برخی از حامل‌های بار الکتریکی در طی حرکت پرشی یا انتقال ممکن است توسط تله‌ها گیر افتاده، ممکن است که همواره در آن‌جا باقی بمانند که در نهایت، این نوع حامل‌ها نمی‌توانند به انتقال جریان مدار کمک کنند، که همین امر باعث کاهش الکترون ها و حفره های جمع آوری شده نسبت به نمودارهای (۱) و (۲) می شود. علاوه بر این از روی داده‌های جدول (۱) می‌توان تشخیص داد که مرکز توزیع انرژی تله‌ها نسبت به مرکز توزیع انرژی ترازهای هومو و لومو برای حرکت حفره‌ها فاصله بیشتری نسبت به الکترون‌ها دارد که این موضوع باعث می‌شود که از حفره‌های گیر افتاده در تله‌ها تعداد خیلی کمتری بتوانند مجدداً در انتقال جریان شرکت کنند که همین امر می‌تواند دلیلی بر افت بیشتر در حفره‌های جمع‌آوری شده نسبت به الکترون‌ها باشد.



الف ب

نمودار ۳: الکترون‌های جمع‌آوری شده در کاتد برحسب تعداد الکترون‌های تولید شده در مرز مشترک دو لایه، الف) لایه ۱۵×۶۰ nm، ب) ۳۰×۶۰ nm.



نمودار ٤: حفره‌های جمع‌آوری شده در کاتد برحسب تعداد حفره‌های تولید شده در مرز مشترک دو لایه، الف) لایه ۱۵×۶۰ nm، ب) ۳۰×۶۰ nm.

این تغییر ابعاد، رابطه‌ی مستقیم عملکرد بهتر ساختار اول را با تعداد حامل‌های بار الکتریکی که نقش مهمی در تولید جریان مدار دارند را نشان می دهد. مقایسه نتایج محاسبات در مراحل ذکر شده بالا در جدول (۲) نشان داده شده است.

جدول۲: مقایسه مقادیر تعداد میانگین حامل‌های بار ساختارهای مختلف.

حفره	الکترون	مرحله ۳-۲
۱۳	۳۰	لایه اول
۹	۲۳	لایه دوم

حفره	الکترون	مرحله ۳-۱
۳۲	۳۶	لایه اول
۲۸	۳۱	لایه دوم

بازده سلول‌های خورشیدی که نتیجه‌ی تفکیک، انتقال و جمع‌آوری حامل‌های بار الکتریکی است، با میانگین تعداد آن‌ها رابطه‌ی مستقیم دارد. در مرحله‌ی دوم کار با گیر افتادن حامل‌های بار در تله‌ها و هم‌چنین با افزایش فاصله رسیدن حامل‌های بار به الکترودهای مرتبط به واسطه‌ی افزایش ابعاد لایه، بازده سلول خورشیدی کاهش می‌یابد.

نتیجه گیری

در این کار تأثیر تغییر ساختار ابعاد لایه بر روی انتقال حامل‌های بار الکتریکی که تأثیر بسزایی در عملکرد سلول خورشیدی دارند مورد بررسی قرار گرفت و این نتیجه حاصل شد که با افزایش پهنای هر لایه و در نظر گرفتن پارامترهای مؤثر، تعداد میانگین حامل‌های بار الکتریکی که با موفقیّت به الکترودهای خود رسیده‌اند و به تولید جریان در مدار خارجی کمک می‌کنند به علت افزایش فاصلهٔ رسیدن تا الکترودها و وجود عامل اتلاف، کاهش یافته است.

مرجع‌ها

[۱] J. Bisquert; *The physics of solar cells: perovskites, organics, and photovoltaic fundamentals* ,*CRC Pres* (2017).

[۲] L. Xu and C-L. Ho and L. Liu and W-Y. Wong; "*Molecular/polymeric metallaynes and related molecules: Solar cell materials and devices"*; *Coordination Chemistry Reviews* **373**, (2018) 233- 257.

[۳] M. C. Heiber and A. Wagenpfahl and C. Deibel; "*Advances in modeling the physics of disordered organic electronic devices"*; *Handbook of Organic Materials for Electronic and Photonic Devices*; (2019) 309–347.

[٤] W .Farooq and A. Daud Khan and A. Daud Khan and M. Noman; "*Enhancing the Power Conversion Efficiency of Organic Solar Cells"; Optik* (2019).

[٥] J. P. G Vazquez; "*Random walk numerical simulation of electron Dynamics in solar cells based on disordered material*"; *Universidad Pablo de Olavide* (2012).

[٦] P. K. Watkins and A. B. Walker and *G. L. Verschoor; "Dynamical Monte Carlo modelling of organic solar cells: The dependence of internal quantum efficiency on morphology*"; *Nano letters* **5**, (2005) 1814-1818.

[۷] X. Xu; "*Monte Carlo simulation of charge transport in organic solar cells*"; *Thesis Duke University* (2012).

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

تأثیر اکسیژن پلاسمایی بر روی الکترود ITO و ویژگی فتوولتائیکی سلول خورشیدی پروسکایت مسطح معکوس

میرباقری فیروزآباد ، زهراالسادات[۱] ؛ صفری، زینب[۱]؛ برهانی زرندی ، محمود[۱] ؛ جهان بخشی زاده، ناصر[۱]

[۱]گروه فیزیک، دانشگاه یزد، یزد

چکیده

یکی از فناوری‌های پیشرو در زمینه تولید ارزان برق خورشیدی، سلول‌های خورشیدی پروسکایتی هستند. در این پژوهش، ابتدا اثر درمان الکترود ITO با اکسیژن پلاسمایی بررسی شد و مشاهده شد که ترشوندگی سطح الکترود ITO و تابع کار آن بعد از اینکه تحت تأثیر با اکسیژن پلاسما قرار گرفت، بهبود یافت. از آنجاییکه، سلول‌های خورشیدی پروسکایتی مسطح معکوس به دلیل داشتن ویژگی‌های برجسته از جمله: ساخت در دمای پایین، تولید در ابعاد بزرگ و هزینه ساخت پایین معروف هستند، در ادامه به ساخت این سلول‌ها بر روی بسترهای ITO درمان شده اکسیژن پلاسمایی و بدون درمان پرداختیم و ویژگی فتوولتائیکی آنها را مقایسه کردیم. پارامترهای فتوولتائیکی سلول‌های ساخته شده بر بستر ITO تحت تأثیر با اکسیژن پلاسما نسبت به سلول‌های ساخته شده بر بستر ITO بدون اثر اکسیژن پلاسما بهبود یافته، بطوریکه بازدهی آن‌ها از ۹/۹۸% به ۱۱/۹% رسید.

واژه های کلیدی: *سلول خورشیدی پروسکایت، اکسیژن پلاسمایی، سلول خورشیدی پروسکایت مسطح معکوس، ویژگی فوتوولتائیک*

The effect of plasma oxygen on the ITO electrode and the Photovoltaic Properties of inverted planar perovskite solar cell

Mirbagheri Firoozabad, Zahra sadat[1]; Safari, Zeinab[1] Borhani Zarandi, Mahmood[1];Jahanbakhshizade, Naser[1]

[1]*Department of Physics, Yazd University, Yazd*

Abstract

A perovskite solar cell is one of the most popular technologies in manufacturing low-cost electricity. In this research, the effects of ITO electrodes treatment with plasma oxygen were first studied And it was seen that the wettability of the electrode surface and its work function improved after being affected by plasma oxygen Since, inverted planar perovskite solar cells are known for their outstanding features such as low-temperature manufacturing, large-scale production, and low build-up costs, we made the construction of these solar cells on ITO-treated with oxygen and without treatment with plasma oxygen, and then compared their photovoltaic properties. The photovoltaic parameters of cells made on ITO improved under the influence of plasma oxygen compared to cells made on the ITO bed without the effect of plasma oxygen, so that their efficiency increased from 9.98% to 11.9%

***Keywords**:Perovskite Solar Cell, Plasma Oxygen, Inverted planar perovskite solar cell, Photovoltaic Properties*

PACS No.68

مقدمه

انرژی خورشیدی یکی از انرژی‌های ارزان و پاک موجود در طبیعت است. امروزه در تکنولوژی‌های پیشرفته تصمیم بر این است تا انرژی‌های مورد نیاز را از خورشید تأمین کنند. سلول‌های خورشیدی نسل سوم لایه نازک یکی از پرطرفدارترین شاخه‌های مورد مطالعه در حال حاضر هستند. پژوهشگران اخیراً از ماده‌ی به نام پروسکایت به عنوان جذب کننده نور در سلول‌های خورشیدی لایه نازک استفاده می‌کنند. در حالت کلی می‌توان پروسکایت را با

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

فرمول ABX_3 نشان داد که A کاتیون آلی یا غیرآلی، M یون فلزی و X آنیون هستند. معمولی‌ترین ساختار و ترکیبی که به عنوان پروسکایت در سلول‌های خورشیدی استفاده می‌شود $CH_3NH_3PbI_3$ است. بازدهی این سلول‌ها در مدت زمان کوتاهی پیشرفت چشمگیری داشت. بطوریکه بازدهی از ۳/۸% به بیش از۲۲%در حال حاضر رسیده است[۱, ۲]. از ویژگی برجسته پروسکایت‌ها می‌توان به ضریب جذب بالا و طول نفوذ بالای حامل‌ها اشاره کرد[۲]. تاکنون تغییراتی در ساختار وروش‌های ساخت برای بهبود عملکرد سلولها صورت گرفته است[۳, ۴]. از جمله ساختارهایی که تاکنون برای سلول‌های خورشیدی پروسکایتی مطرح شده است،ساختارهای متخلخل و مسطح است. سلول‌های خورشیدی پروسکایتی متخلخل/مسطح به دو صورت منظم(n-i-p) و معکوس (p-i-n) دسته‌بندی می‌شود، که این چیدمان‌ها، بستگی به توالی لایه‌نشانی لایه‌های حامل بار در اطراف پروسکایت دارند. ساختارهای مسطح معکوس دارای برخی از ویژگی‌ها مانند ساخت آسان در دمای پایین هستند که هزینه بهره‌وری برای کاربرد صنعتی آن‌ها را پایین آورده است[۴, ۵]. متداول‌ترین ماده‌ی که به عنوان انتقال‌دهنده حفره در سلول‌های خورشیدی پروسکایتی مورد استفاده قرار می‌گیرد وسبب افزایش چشمگیر بازدهی این سلول‌ها شده، Spiro-OMeTAD است، ولی با این‌حال یک ماده بسیار گران قیمت است که برای تولید صنعتی سلول خورشیدی در حجم انبوه مقرون به صرفه نیست. پژوهشگران تا کنون، کارهایزیادی برای به حداقل رساندن هزینه ساخت سلول‌های خورشیدی پروسکایت و بهبود بازدهی آنها انجام داده‌اند، از جمله‌ی این کارها جایگزین کردن ماده‌های انتقال دهنده‌های حفره ازران قیمت‌تر یا اصلاح لایه‌ها به روش‌های مختلف، برای بهبود رسانندگی و انتقال بهتر بار لایه‌ها است[۶, ۷]. تابع کار یک پارامتر مهم در ساخت سلول‌های خورشیدی است، بنابراین انتخاب مواد با تابع کار مناسب هم می‌تواند سبب بهبود عملکرد سلول خورشیدی شود. تحقیقات نشان داد، می‌توان با قرار گرفتن لایه‌ها در معرض اکسیژن پلاسما تابع کار آن‌ها را تغییر داد[۸].

در اینجا، به ساخت سلول خورشیدی پروسکایتی مسطح معکوس با ساختار ITO/Poly-TPD/Perovskite/PCBM/BCP/AL پرداختیم. دو ماده‌ی Poly-TPD و PCBM به ترتیب لایه انتقال دهنده حفره و الکترون می‌باشند. در ادامه برای بهبود ویژگی فتوولتائیکی سلول خورشیدی پروسکایت الکترود ITO را تحت درمان اکسیژن پلاسمایی قرار دادیم و نتایج را بررسی کردیم.

روش تجربی

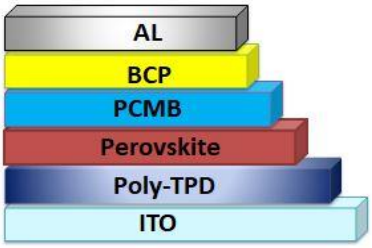
به منظور ساخت سلول، از ITOبه عنوان زیرلایه استفاده شد.سلول‌های خورشیدی لایه نازک و نانو ساختار، نسبت به آلودگی‌های سطحی زیرلایه، بسیار حساس هستند. به همین منظور زیرلایه‌ها در چندین مرحله شست‌وشو داده می‌شوند. ابتدا شیشه-های ITO با آب و صابون شست‌وشو داده و درون یک بشر قرار داده می‌شوند و با محلول آب دو بار تقطیر، استون واتانول به مدت ۱۵دقیقه به ترتیب هر کدام در حمام فراصوت شست‌وشو داده می‌شوند. سپس زیرلایه‌ها با جریان گازN_2 خشک شده تا مرحله شستشو به اتمام برسد. در ادامه برای لایه نشانی،لایه انتقال دهنده-ی حفره، ابتدا مقدار ۱/۸mgازpoly-TPD در ۱mL کلروبنزن حل شده، سپس این محلول را با استفاده از دستگاه لایه‌نشانی چرخشی (سرعت۶۰۰۰دور بر دقیقه و به مدت۶۰ ثانیه) بر بسترهای ITO لایه نشانی شدند و در دمای۱۱۰ درجه سانتیگراد خشک می‌شوند. و در ادامه این بسترها تحت تاثیر اشعه فرابنفش قرار می‌گیرند. در مرحله بعد، به منظور تشکیل پروسکایت به روش تک مرحله‌ی بر روی لایه‌های Poly-TPD، محلول پروسکایت که متشکل از ۴۶۱mg یدید سرب ، ۱۵۹mg پودر مای، ۶۳۵ میکرولیتر DMF و۷۱ میکرولیترDMSO به روش لایه‌نشانی چرخشی بر روی زیرلایه‌های Poly-TPD، لایه‌نشانی می‌شوند. سپس دو لایه انتقال دهنده‌ی الکترون و سد کننده حفره PCMB و BCP به ترتیب لایه‌نشانی شدند. در نهایت لایه نازک آلومینیوم با ضخامت ۵۰nm با روش تبخیر در خلأ بر روی لایه BCP قرار گرفت.

بحث و نتیجه گیری

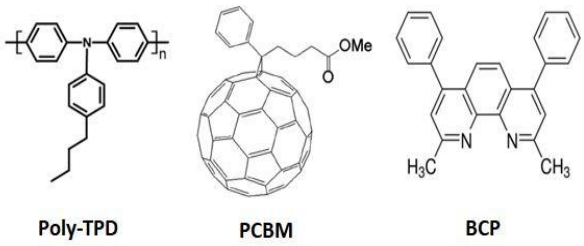
شکل ۱ساختار شماتیک سلول‌های ساخته شده و شکل ۲ ساختار مولکول‌های Poly-TPD، PCBM و BCP را نشان می‌دهد.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

معمولاً در ساختارهای سلول خورشیدی با دمای پایین از ITO استفاده می‌شود. ITO یک ماده رساننده شفاف است که حاوی In_2O_3 و SnO_2 است که بطور گسترده در ادوات اپتیکی، به علت شفافیت بسیار بالا (۹۶%) و مقاومت تقریبی $10\Omega/sq$ استفاده می‌شود. تابع کار ITO همچنین نقش حیاتی در عملکرد بسیاری از برنامه‌های کاربردی مشابه دارد، زیرا بر روی ارتفاع سد انرژی در فصل مشترک ناهمگون تأثیر می‌گذارد. مقادیر منتشر شده تابع کار ITO از ۵/۵۳eV تا ۴/۱eV برآورد می‌شود. روش‌های متعددی برای بهبود مقاومت، هدایت الکتریکی و همچنین تابع کار فیلم‌های ITO از جمله: حرارت‌دهی و اسپری کردن با نسبت‌های گاز مختلف، مورد مطالعه قرار گرفته است.



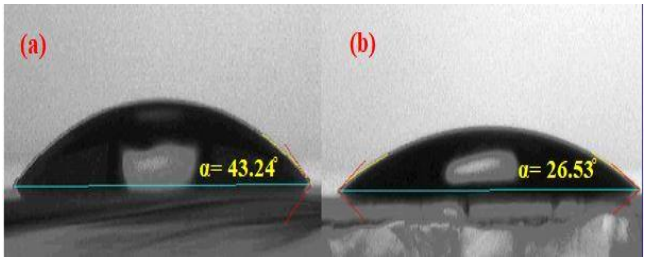
شکل ۱: ساختار سلول خورشیدی پروسکایت مسطح معکوس



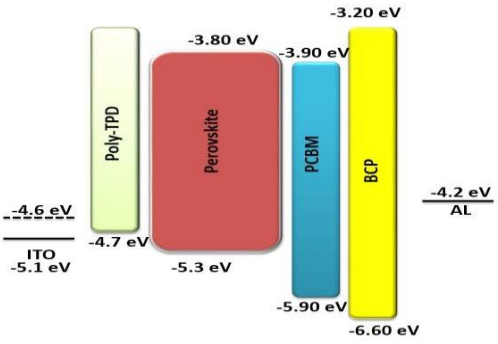
شکل ۲: ساختار مولکولی Poly-TPD ، PCBM و BCP

در این تحقیق، ابتدا بعد از شست‌وشو ITO، بسترهای ITO را تحت تأثیر اکسیژن پلاسما با توان ۴۰٪ برای مدت ۳۰ دقیقه قرار دادیم. اثر این درمان را بر روی تابع کار، ترشوندگی سطح و همچنین پارامترهای فتوولتائیکی بررسی کردیم. در شکل ۳ ترشوندگی سطح ITO را قبل و بعد از قرار گرفتن ITO در معرض با اکسیژن پلاسما نشان داده شده است. همانطور که در شکل ۳ مشاهده می‌شود ترشوندگی سطح ITO بعد از مداخله با اکسیژن پلاسما افزایش می‌یابد.

شماتیک ساختار گاف نواری سلول خورشیدی در شکل۴ نشان داده شده، دیده می‌شود که تابع کار ITO بعد از مداخله با اکسیژن پلاسما از ۵/۱eV– به ۴/۶eV–تغییر می‌یابد. اکسیژن پلاسما علاوه بر تغییر در تابع کارITO، که به دلیل تشکیل دو قطبی‌های سطحی بر ITO است، باعث بهبود ترشوندگی سطح ITOمی‌شود که تشکیل یک فیلم کاملاً یکنواخت از Poly-TPD بر سطح را ایجاب می‌کند.



شکل ۳ : مقایسه‌ی ترشوندگی سطح (a) ITO قبل از درمان با اکسیژن پلاسما (b) بعد از درمان با اکسیژن پلاسما



شکل ٤: شماتیک ساختار گاف نواری قبل از درمان ITO با اکسیژن پلاسما (خط ممتد) بعد از درمان (خط چین)

پارامترهای فتوولتائیکی (J_{SC}: چگالی جریان مدار کوتاه، V_{OC}: ولتاژ مدار باز، FF : عامل پرشدگی و PCE: بازده تبدیل توان) سلولهای خورشیدی پروسکایت ساخته شده بر دو بستر متفاوت ITO که تحت تأثیر با اکسیژن پلاسمایی و بدون اثر با اکسیژن پلاسمایی هستند، با استفاده از دستگاه Keithley2400 و شبیه‌ساز خورشیدی $100\ mW/cm^2$ با 1.5GAM استخراج شدند. نتایج

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

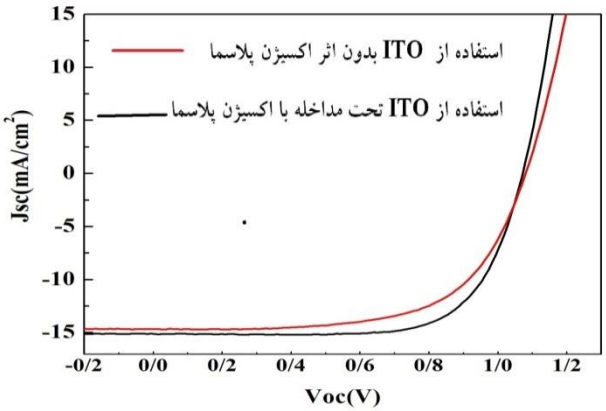
به طور خلاصه، در جدول ۱ آورده شده است. شکل ۵ نمودار مربوط به چگالی جریان برحسب ولتاژ سلول‌ها را نشان می‌دهد. پارامترهای عامل پرشدگی و بازده تبدیل توان سلول‌ها، به ترتیب با معادلات (۱) و (۲) تعریف می‌شود. در معادله‌ی (۲)، P_{in} توان نور فرودی V_{max} و J_{max} به ترتیب ولتاژ و چگالی جریان ماکزیمم هستند.

$$FF = \frac{V_{max} \times J_{max}}{V_{oc} \times J_{sc}} \qquad (۱)$$

$$PCE = \frac{V_{oc} \times J_{sc} \times FF}{P_{in}} \qquad (۲)$$

جدول ۱: مقادیر پارامترهای، چگالی جریان مدار کوتاه، عامل پرشدگی و بازده تبدیل توان برای ۵ نمونه‌ی آزمایشگاهی؛

شرایط ساخت سلول خورشیدی	Jsc (mA/cm^2)	FF (%)	Voc (V)	PCE (%)
استفاده از ITO بدون اثر اکسیژن پلاسما	۱۴/۲۲ ±۰/۹	۵۵/۶ ±۰/۰۱	۱/۰۸۱ ±۰/۰۳	۹/۹۸ ±۰/۱۴
استفاده از ITO تحت مداخله با اکسیژن پلاسما	۱۵/۹۲ ±۰/۳	۷۰/۲ ±۰/۰۲	۱/۰۷۲ ±۰/۰۳	۱۱/۹ ±۰/۱۷



شکل۵ :مقایسه نمودار جریان–ولتاژ سلولهای خورشیدی پروسکایتی ساخته شده

همانطور که در جدول ۱ مشاهده می‌شود پارامترهای فوتوولتائیکی سلول‌های ساخته شده بر ITO تحت تأثیر با اکسیژن پلاسما نسبت به سلول‌های ساخته شده بر بستر ITO بدون اثر اکسیژن پلاسما بهبود یافته، بطوریکه بازدهی آنها از ۹۸ /۹% به ۱۱/۹% رسید و عامل پرشدگی از۵۵/۶% به ۷۰/۲% افزایش یافت، که می‌توان دلیل آن را بهبود فصل مشترک ITO و لایه انتقال دهنده حفره Poly-TPD و همچنین کاهش تابع کار ITO دانست.

نتیجه‌گیری

در این پژوهش ابتدا، اثر ترشوندگی و تابع کار سطح الکترود ITO ، قبل و بعد از اینکه بسترهای ITO تحت تاثیر با اکسیژن پلاسما قرار بگیرند، بررسی شد. ترشوندگی سطح الکترود ITO و تابع کار آن بعد از اینکه تحت تأثیر با اکسیژن پلاسما قرار گرفت، بهبود یافت. سپس به ساخت سلول‌های خورشیدی پروسکایتی مسطح معکوس بر روی بسترهای ITO که تحت تأثیر با اکسیژن پلاسما و بدون تأثیر اکسیژن پلاسما قرار گرفته بودند، پرداختیم. اکسیژن پلاسما علاوه بر تغییر تابع کار، سبب بهبود فصل مشترک ITO و لایه انتقال دهنده‌ی حفره Poly-TPD می شود که نقش تأثیرگذاری در بهبود پارامترهای فتوولتائیکی به ویژه عامل پرشدگی دارد، که سبب می‌شود عملکرد سلول به طور چشمگیری افزایش یابد، بطوریکه از۹/۸% به ۱۱/۹% بهبود یافت.

مرجع‌ها

[1] C. Wehrenfennig, M. Liu, H. J. Snaith, M. B. Johnston, and L. M. Herz, "Homogeneous Emission Line Broadening in the Organo Lead Halide Perovskite $CH3NH3PbI_{3-x}Cl_x$," The journal of physical chemistry letters, vol. 5, no. 8, pp. 1300- 1306, 2014.

[2] G .Xing et al., "Long-range balanced electron-and holetransport lengths in organic-inorganic $CH_3NH_3PbI_3$," Science, vol. 342, pp. 334-341, 2013.

[3] Tonui, P., Oseni, S. O., Sharma, G., Yan, Q., &TessemaMola, G. "Perovskites photovoltaic solar cells: An overview of current status. Renewable and Sustainable Energy Reviews," vol.91, pp.1025-1044, 2018.

[4] J. Tag, D. Jio, L. Zhang, X. Zhang, X. Xu, C. Yao, J. Wu, Z. Lan."High-performance inverted planar perovskite solar cells based on efficient hole-transporting layers from well-crystalline NiO nanocrystals"solarEnergy,vol 61, pp100-108,2017.

[5] Zhou, L., Chang, J., Liu, Z., Sun, X., Lin, Z., Chen, D. Hao, Y. "Enhanced planar perovskite solar cell efficiency and stability using a perovskite/PCBM heterojunction formed in one step,"Nanoscale, vol. 10, no.6, pp.3053–3059,2018.

[6] Jena, A. K., Numata, Y., Ikegami, M., & Miyasaka, T."Role of spiro-OMeTAD in performance deterioration of perovskite solar cells at high temperature and reuse of the perovskite films to avoid Pb-waste". Journal of Materials Chemistry A, vol.6, no.5, pp. 2219–2230, 2018.

[7] Yu, Z., Wang, H., Lai, J., Song, X., Yang, X., Hagfeldt, A., & Sun, L. "One plus one greater than two: high-performance inverted planar perovskite solar cells based on a composite CuI/CuSCN hole-transporting layer".J. Mater. Chem. A.vol. 6, pp.21435-21444, 2016.

[8] S. Zhang, M. Stolterfoht, A. Armin, Q. Lin, f. zu,J. Sobus, H. Jin, N. Koch, P. Meredith, P. L. Burn, and D. Neher."Interface engineering of solution processedhybridorganohalide perovskite solar cells,"ACS Applied Materials & Interfaces.vol.10, no. 25, pp.1681-1687, 2018.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

روشی ساده و دقیق جهت محاسبه‌ی دمای کوری مواد فرومغناطیس

جهرمی زاده، فاطمه؛ دهقان، علی؛ دعوت الحق، سعید

بخش فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شیراز، شیراز ۷۱۹۴۶

چکیده

با استفاده از روش پتانسیل کامل و امواج تخت بهبود یافته‌ی خطی (FP-LAPW) درچارچوب نظریه تابعی چگالی، روشی ساده و دقیق جهت محاسبه‌ی دمای کوری مواد فرومغناطیس ارائه گردیده است. بدین منظور ابتدا با استفاده از شبیه‌سازی مونت کارلو دمای گذار شبکه‌های بلوری و سپس ثابت‌های برهم‌کنش تبادلی یونهای مغناطیسی به روش اصول اولیه محاسبه می گردد. مقادیر دمای کوری بدست آمده برای عناصر فلزی آهن، نیکل و کبالت ونیز فرومغناطیس‌های نیم‌فلزی مانند آلیاژ نیم‌هویسلر NiMnSb نسبت به مقادیر تجربی کمتر از ۱۰٪ خطا نشان می‌دهد.

واژه های کلیدی: *دمای کوری، شبیه‌سازی مونت کارلو، ثابت‌های تبادلی، محاسبات اصول اولیه*

A simple and accurate method for calculating the Curie temperature of Ferromagnets

Jahromizadeh, Fatemeh; Dehghan, Ali; Davatolhagh, Saeed

Dept. of Physics, College of Sciences, Shiraz University, Shiraz 71946

Abstract

Using the full-potential linearized augmented plane wave (FP-LAPW) method within the density functional theory framework, a simple and accurate method for calculating the Curie temperature of ferromagnetic materials is presented. For this purpose, first using the Monte Carlo simulation method the transition temperature of crystal lattices is determined, and then the exchange interaction constants of magnetic ions are calculated from first principles. The calculated Curie temperature values for elemental ferromagnets Fe, Co, *and* Ni *as well as the half-metallic ferromagnets such as the half-Heusler alloy* NiMnSb *show less than 10% deviation with respect to the corresponding experimental values.*

Keywords: *Curie temperature, Monte Carlo simulation, Exchange coupling, First principles calculation*

PACS No. 75

مقدمه

گذار فازهایی نظیر آنچه که در مواد فرومغناطیس و یا ابررساناها مشاهده می‌گردد نمونه هایی از پدیده‌های بحرانی شناخته‌شده هستند که در آنها گذار فاز از حالت بی‌نظم به حالتی منظم (یا بالعکس) اتفاق می‌افتد. در تئوری پدیده شناختی لانداو این نوع گذار فاز با نوعی شکست تقارن همیلتونی سیستم در حالت پایه آن همراه است که بوسیله یک پارامتر نظم توصیف می گردد [۱]. دوقطبی‌های مجاور در مواد فرومغناطیس به دلیل ملاحظات انرژی تمایل به هم-جهت‌شدن با یکدیگر دارند. در دمای صفر این برهمکنش‌ها منجر به بروز مغناطش کامل می‌گردد. اما افت‌وخیزهای گرمایی در دماهای متناهی مانع از ایجاد مغناطش کامل می‌شود. در این نمونه‌ی معروف از پدیده‌های بحرانی، مغناطش کل بیانگر پارامتر نظم سیستم است که مقدار متناهی آن فاز منظم را از فاز بی نظم تفکیک می کند. در دمایی معین موسوم به دمای بحرانی یا دمای کوری T_c گذار فاز از حالت فرومغناطیس (و یا فری‌مغناطیس) به حالت پارامغناطیس اتفاق می‌افتد. لازم به ذکر است که تغییرات پارامتر نظم در این پدیده‌ی بحرانی به صورت پیوسته ولی مشتق‌ناپذیر است که این تغییر پیوسته مشخصه‌ی یک گذار فاز مرتبه‌ی دوم[۱] می‌باشد. در این پژوهش، محاسبه‌ی دمای کوری مواد فرومغناطیس به روشی ساده و البته دقیق

[۱] Second-order phase transition

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

انجام گرفته است که نتایج حاصل سازگاری بسیار خوبی با گزارش-های تجربی دارند.

روش محاسبات

محاسبات بر پایه نظریه تابعی چگالی و با استفاده از بسته محاسباتی Wien2k [۲] انجام شده است. این بسته محاسباتی، معادلات تک ذره‌ای کوهن-شم را با استفاده از روش امواج تخت بهساخته‌ی خطی با پتانسیل کامل (FP-LAPW) حل می‌کند. از تابعی تبادلی-همبستگی در تقریب شیب تعمیم‌یافته (GGA-PBE) استفاده گردید. جهت همگرایی مناسب انرژی مقدار پارامتر مهم $R_{mt}K_{max}$ که در آن R_{mt} و K_{max} به ترتیب بیانگر کوچکترین شعاع کره مافین-تین و بزرگترین بردار موج قطع می‌باشند، ۸ انتخاب گردید. انرژی جداسازی الکترون‌های مغزه و رسانشی ۶- ریدبرگ و تعداد نقاط در منطقهٔ اول بریلوئن ۱۷×۱۷×۱۷ در نظر گرفته شده-اند. دقت همگرایی انرژی در تمام محاسبات خودسازگار، از مرتبه 10^{-6} ریدبرگ بوده که برای مقایسه دقیق انرژیها در فازهای مختلف مقدار مناسبی است. لازم به ذکر است که با توجه به نیروهای بسیار ناچیز، ضرورتی برای واهلش اتمها در ابریاخته احساس نشد.

شبیه‌سازی مدل آیزینگ با بکارگیری روش مونت‌کارلو

مدل آیزینگ[۲] به عنوان ساده‌ترین مدل برهم‌کنشی، ابزاری کارآمد برای بررسی تغییر حالت‌های ماکروسکوپی مواد مغناطیسی می‌باشد [۳]. عمومی‌ترین هامیلتونی مدل آیزینگ با در نظر گرفتن تأثیر میدان مغناطیسی خارجی بر هر اسپین به صورت زیر نوشته می شود:

$$H(S) = -\sum_{\langle i,j\rangle} J_{ij} S_i S_j - \mu \sum_j h_j S_j, \qquad (۱)$$

که J_{ij} ثابت‌های جفت‌شدگی، S بیانگر متغیرهای گسسته (در اینجا اسپین) هستند که می‌تواند دو مقدار ± 1 را بسته به ممان مغناطیسی بالا و یا پایین اختیار کند و برهم‌کنش میدان مغناطیسی خارجی با هر اسپین در جمع دوم اعمال شده است. در این مدل اسپین‌ها بر روی یک شبکه قرار می‌گیرند به طوری که هر اسپین با همسایگان نزدیک خود در تعامل است. نماد $\langle i, j\rangle$ نشان‌دهنده جمع روی همسایه‌های نزدیک اول i و j است.

روش اصلی در شبیه سازی مونت کارلو، شبیه سازی افت و خیز گرمایی سیستم است هنگامی که در یک آزمایش از یک میکروحالت به میکروحالت دیگر می‌رود [۳]. به منظور بررسی خواص حجمی مدل با استفاده از شرایط مرزی دوره‌ای، اسپین‌هایی که روی یک لبه ازشبکه قرار دارند به همسایه‌های متناسب‌شان روی لبه‌ی دیگر وصل می‌شوند. به این ترتیب تمامی اسپین‌های سیستم همسایه‌ها و تعداد پیوندهای برابر خواهند داشت و لذا سیستم بی‌مرز است اگر چه نامتناهی نیست که این باعث ارتقای کیفیت نتایج حاصل از شبیه-سازی خواهد گردید. بر اساس ملاحظات ترمودینامیکی، تنها شبکه-هایی با اندازه‌های نامحدود شرایط ایده‌آل برای دست‌یابی به نتایج مطلوب در حد ترمودینامیک را فراهم می‌آورند؛ اما با توجه به محدودیت اندازه‌ی شبکه در محاسبات کامپیوتری، بایستی شبیه-سازی برای سیستم‌هایی با اندازه‌های محدود اما بزرگ انجام گیرد و تغییرات خواص بحرانی سیستم نسبت به اندازه‌ی شبکه در حد ترمودینامیک برون‌یابی شود. این فرآیند، تصحیح اندازه‌ی محدود نامیده می‌شود.

محاسبه‌ی دمای گذار

کیومولنت مرتبه‌ی چهارم[۳] به عنوان روشی متداول در مطالعه‌ی پدیده‌های بحرانی به صورت زیر تعریف می‌گردد [۴]:

$$U_L = 1 - \frac{\langle m_L^4 \rangle}{3\langle m_L^2 \rangle^2}, \qquad (۲)$$

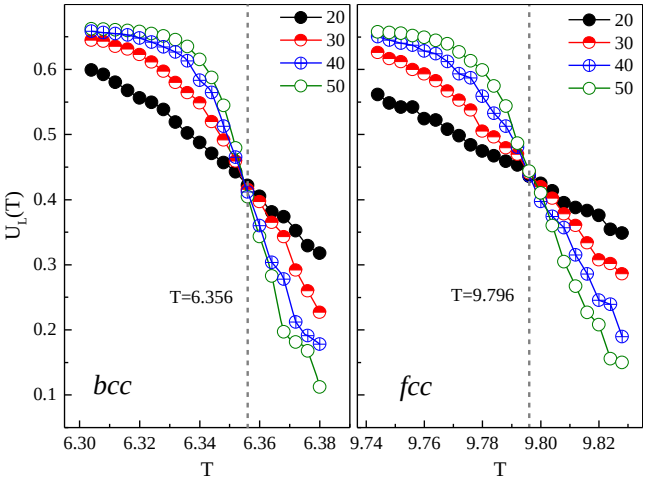
که m_L در آن مغناطش سیستمی با طول خطی L می باشد. رفتار وابسته به اندازه‌ی این کمیت بی بعد به صورت زیر است:

$$U_L(T) = \tilde{U}\left(L^{\frac{1}{\nu}}(T - T_c) \right), \qquad (۳)$$

[۲] Ising model

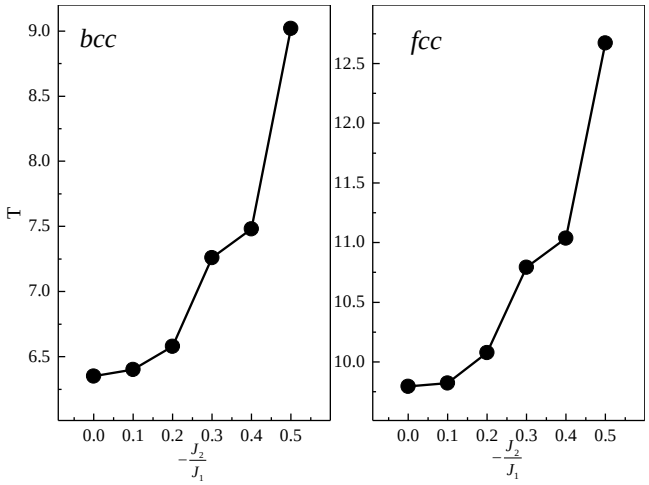
[۳] Fourth-order cumulant

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



شکل ۱: نمودار $U_L(T)$ بر حسب دمای گذار برای سیستم‌هایی با اندازه‌های مختلف در (چپ) شبکه *bcc* و (راست) شبکه *fcc* .

که در $T=T_c$ مستقل از L یا اندازه سیستم خواهد بود. برای محاسبه‌ی دمای بحرانی T_c در سیستم‌هایی با اندازه‌های متفاوت و در شبکه‌های بلوری *fcc* و *bcc*، می‌توان $U_L(T)$ را بر حسب دما برای اندازه‌های مختلف رسم نمود. محل تلاقی نمودارها تقریب خوبی برای دمای بحرانی سیستم در حد ترمودینامیک خواهد بود. شکل (۱) تغییرات $U_L(T)$ بر حسب دما را برای شبکه‌های بلوری تحت مطالعه گزارش می‌کند. مطابق با این نتایج، مقادیر ۶٫۳۵۶ و ۹٫۷۹۶ به ترتیب برای شبکه‌های *bcc* و *fcc* حاصل گردید. لازم به ذکر است که با توجه به تعداد برابر همسایه‌های نزدیک اول شبکه‌ی *hcp* با شبکه‌ی بلوری *fcc* مقدار دمای گذار برای ساختارهای *hcp* نیز مشابه با ساختار *fcc* محاسبه گردید. در واقع دماهای گذار به دست آمده در واحد $\frac{J_1}{k_B}$ است که در آن J_1 برهمکنش تبادلی بین همسایه‌های نزدیک اول و k_B ثابت بولتزمن می‌باشد. مقادیر دمای گذار برای این شبکه‌ها در تقریب میدان میانگین (در غیاب افت وخیزها) به ترتیب ۸ و ۱۲ می‌باشد که بسیار بیشتر از مقادیر بسیار دقیق مونت‌کارلو است. در ادامه علاوه بر همسایه‌های نزدیک اول برهمکنش همسایه‌های نزدیک دوم نیز در نظر گرفته شد و شبیه‌سازی‌ها تکرار گردید. مقادیر دمای گذار بر حسب $-\frac{J_2}{J_1}$ برای شبکه‌های *bcc* و *fcc* در شکل (۲) نشان داده شده است. لازم به



شکل ۲: تغییرات دمای گذار T برحسب $-\frac{J_2}{J_1}$ برای شبکه‌های (چپ) *bcc* و (راست) *fcc* .

ذکر است که علامت J_2 در تطابق با برهمکنش RKKY پادفرومغناطیس یا منفی لحاظ شده است.

محاسبه‌ی ثابت‌های برهم‌کنش تبادلی

هامیلتونی عمومی هایزنبرگ برای یک بلور به صورت زیر نوشته می‌شود [۵]:

$$H=-\sum_{\langle ij\rangle}J_1\vec{S}_i\cdot\vec{S}_j-\sum_{\langle\langle ij\rangle\rangle}J_2\vec{S}_i\cdot\vec{S}_j+\cdots, \qquad (۴)$$

که در آن J_1 و J_2 به ترتیب ثابت‌های برهم‌کنش تبادلی بین اولین همسایه‌های نزدیک و دومین همسایه‌های نزدیک است. برای محاسبه‌ی این ثابت‌ها می‌توان از تفاوت انرژی شبکه در حالت‌های متفاوت مغناطیسی استفاده کرد. اگر فرض شود که N_1 تعداد همسایه‌های نزدیک اول در یک شبکه‌ی مشخص باشد، انرژی حالت فرومغناطیسی با توجه به رابطه‌ی (۴) به صورت زیر قابل محاسبه است:

$$E_{FM}=E_0-N_1J_1|S|^2, \qquad (۵)$$

که در آن E_0 انرژی ماده در حالت غیرمغناطیسی و E_{FM} انرژی در حالت فرومغناطیسی است. هم چنین به دلیل مشابهت اتم‌های مغناطیسی، $|S_i|$ و $|S_j|$ برابر بوده و هر دو با $|S|$ نشان داده می‌شوند. با استفاده از رابطه‌ی (۵) می‌توان بر ثابت هم‌کنش تبادلی J_1 را در محاسبات اصول اولیه بدست آورد. برای محاسبه J_2، انرژی سیستم

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

در حالت آنتی‌فرومغناطیس نیز علاوه بر انرژی غیرمغناطیسی و فرومغناطیسی مورد نیاز بوده و در نظر گرفتن همسایه‌های نزدیک دوم نیز الزامی است. بنابراین:

$$E_{FM} = E_0 - \left(N_1 J_1 + N_2 J_2\right)|S|^2, \qquad (۶)$$

$$E_{AF} = E_0 - \left(-N_1 J_1 + N_2 J_2\right)|S|^2, \qquad (۷)$$

که در آن ها N_2 تعداد همسایه‌های نزدیک دوم است. با توجه به رابطه‌ی (۷) در برهم‌کنش آنتی‌فرومغناطیسی، برهم‌کنش بین اولین همسایه‌های نزدیک، منفی و بین دومین همسایه‌های نزدیک، مثبت در نظر گرفته می‌شود. با توجه به روابط (۶) و (۷) و حل هم زمان دو معادله، می‌توان ثابت های تبادلی J_1 و J_2 را محاسبه کرد.

نتایج محاسبات

در این پژوهش عناصر فرومغناطیسی آهن، کبالت و نیکل به ترتیب در ساختارهای پایه *bcc*، *hcp* و *fcc* و ترکیب نیم‌هویسلر NiMnSb مورد مطالعه قرار گرفت. در ابتدا ثابت شبکه‌ی بهینه برای هر مورد در حالت‌های غیرمغناطیسی و فرومغناطیسی و سپس انرژی بلور در این حالت‌ها محاسبه گردید و در ادامه با استفاده از رابطه‌ی (۵) ثابت برهم‌کنش تبادلی J_1 مطابق با ردیف سوم جدول (۱) حاصل گردید. در این شرایط با در نظر گرفتن انرژی حالت آنتی‌فرومغناطیسی، ثابت های تبادلی مربوط به همسایه‌های نزدیک دوم قابل محاسبه خواهند بود. ثابت‌های J_1 و J_2 حاصل از این نتایج به ترتیب در ردیف چهارم و پنجم جدول (۱) گزارش شده است. با مقایسه ردیف سوم و چهارم این جدول مشاهده می‌گردد که با وارد کردن انرژی آنتی‌فرومغناطیسی، مقدار J_1 نیز تغییر می‌کند. با قرار دادن مقادیر مربوط به ثابت‌های برهم‌کنش تبادلی در رابطه‌ی دمای گذار که از شبیه سازی مونت کارلو حاصل شد، می‌توان دمای کوری T_c مربوط به آهن، کبالت و نیکل را بدست آورد. دمای کوری با در نظر گرفتن تنها ثابت J_1 در ردیف ششم و با در نظر گرفتن همزمان J_1 و J_2 در ردیف هفتم جدول (۱) آورده شده است. در ردیف آخر جدول (۱) نیز دمای کوری تجربی این فلزات به منظور مقایسه با نتایج محاسباتی آورده شده است. با توجه به درصد خطای گزارش شده در جدل (۱) ملاحظه می‌شود که با در نظر گرفتن همزمان J_1 و J_2 میزان اختلاف دمای کوری محاسبه شده و مقادیر تجربی به کمتر از ۱۰٪ می‌رسد که بسیار مطلوب است. در مورد آهن این اختلاف کمی بیشتر شده که می تواند بیانگر اهمیت برهم‌کنش‌های نزدیک سوم باشد [۵]. در مورد ترکیب NiMnSb با توجه به درصد پایین خطا، در نظر گرفتن همسایه‌های نزدیک دوم الزامی نبود.

جدول ۱: ثابت شبکه تعادلی، مقادیر ثابت برهم‌کنش تبادلی و دمای کوری. مقادیر داخل پرانتز درصد خطا نسبت به مقدار تجربی است.

	Fe	Co	Ni	NiMnSb
a (Å) c (Å)	۲٫۸۲۴ --	۲٫۴۸۳ ۴٫۰۱۵	۳٫۵۰۴ --	۵٫۹۱۱ --
J_1 (mRy)	۱٫۰۲۶۰	۰٫۹۹۴۳	۰٫۴۵۹۱	۰٫۴۷۷۰
J_1 (mRy)	۰٫۷۵۶۰	۰٫۸۴۳۸	۰٫۳۹۶۴	--
J_2 (mRy)	-۰٫۳۶۰۰	-۰٫۳۳۷۵	-۰٫۱۲۵۵	--
T_c (K) (only J_1)	۱۰۲۹ (۱٫۳ ٪)	۱۵۳۹ (۱۰٫۷ ٪)	۷۱۰ (۱۳٫۲ ٪)	۷۳۷ (۴٫۳ ٪)
T_c (K) (J_1 and J_2)	۱۰۷۴ (۳٫۰ ٪)	۱۴۹۱ (۷٫۴ ٪)	۶۸۶ (۹٫۴ ٪)	-- --
T_c (K) (Exp.)	۱۰۴۳	۱۳۸۸	۶۲۷	۷۷۰

نتیجه گیری

با استفاده از شبیه‌سازی مونت‌کارلوی مدل آیزینگ و محاسبات اصول اولیه انرژی بلور، دمای کوری عناصر فرومغناطیسی محاسبه گردید که مطابقت خوبی با نتایج تجربی نشان می‌دهد. با در نظر گرفتن همسایه‌های نزدیک دوم، در اغلب موارد این میزان مطابقت افزایش می‌یابد. این روش برای ترکیبات نیم فلزی مانند NiMnSb نیز مورد استفاده قرار گرفته که با مقادیر تجربی مطابقت بسیار نزدیکی نشان می‌دهد [۶].

مرجع‌ها

[1] M. Kardar, "*Statistical Physics of Fields"* Cambridge University Press (2007).

[2] K. Schwartz, P. Blaha; "Solid state calculations using WIEN2k"; *Comput. Mater. Sci.***128** (2003) 259.

[3] K. Schwartz, P. Blaha; "Solid state calculations using WIEN2k"; *Comput. Mater. Sci.***128** (2003) 259.

[4] K. Binder; "Finite size scaling analysis of ising model block distribution functions". *Z. Physics B*, **43** (1981) 119.

[5] N. Sivadas, W. Daniel, H. Swendsek, S. Okamoto, D. Xiao; "Magnetic ground state of semiconducting transition metal trichalcogenide monolayers". *Phys. Rev. B*, **91** (2015) 235425.

[6] A. Dehghan and S. Davatolhagh; "d^0-d half-Heusler alloys: A potential class of advanced spintronic materials". J. Alloys and Compound. (2019).

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بررسی پایداری مدل کیهان‌شناسی جهان شامه‌ای رندال–ساندروم با میدان تاکیونی با پتانسیل نمایی بر روی شامه

روان‌پاک، آروین [۱]

[۱] دانشکده علوم پایه، دانشگاه ولی عصر (عج) رفسنجان

چکیده

در این مقاله به مطالعه پایداری مدل کیهان‌شناسی جهان شامه‌ای رندال–ساندروم با یک میدان اسکالر تاکیونی بر روی شامه با استفاده از روش تحلیل سیستم دینامیکی می‌پردازیم. با در نظر گرفتن یک پتانسیل تاکیونی نمایی، نقاط بحرانی سیستم را تعیین می‌کنیم. رفتار سیستم را حول این نقاط بررسی کرده و ارتباط آنها با دوره‌های کیهان‌شناسی مختلف را بدست می‌آوریم.

واژه های کلیدی: *شامه، تاکیون، پایداری*

Investigation of Stability of Randall-Sundrum Braneworld Cosmological Model with a Tachyon Field with an Exponential Potential on the Brane

Ravanpak, Arvin[1]

[1] *Department of Physics, Vali-e-Asr University of Rafsanjan*

Abstract

In this article we study the stability of Randall-Sundrum braneworld cosmological model with a tachyon scalar field on the brane using the dynamical system approach. Considering an exponential tachyonic potential, we specify the critical points of the system. We investigate the behavior of the system around these points and obtain their relation with various cosmological models.

Keywords: *brane, tachyon, stability*

PACS No. 4, 98

مقدمه

انبساط کنونی شتابدار کیهان، توسط بسیاری از مشاهدات و بررسیهای علمی انجام شده، تشخیص داده و تایید شده است [۱]. کیهان‌شناسان برای توضیح این انبساط شتابدار از مفهوم انرژی تاریک استفاده می‌کنند. یکی از انواع مختلف مدل‌های انرژی تاریک، میدان اسکالر تاکیونی است که ریشه در نظریه ریسمان دارد [۲]. چگالی انرژی و فشار مربوط به یک میدان اسکالر تاکیونی ϕ، به صورت زیر تعریف می‌شود

$$\rho_\phi = \frac{V_\phi}{\sqrt{1-\dot{\phi}^2}} \qquad (1)$$

$$p_\phi = -V(\phi)\sqrt{1-\dot{\phi}^2} \qquad (2)$$

که در آن $V(\phi)$، تابع انرژی پتانسیل تاکیونی است. پتانسیلهای تاکیونی باید ویژگیهای خاصی داشته باشند. آنها باید همواره مثبت باشند و در حالیکه دارای شیب منفی هستند از یک مقدار بیشینه در $\phi = 0$ به مقدار صفر در $\phi \to \infty$ برسند.

از سویی دیگر، برای توضیح پاره‌ای از ابهامات و حل برخی مشکلات در کیهان‌شناسی، مدل‌های گرانشی با ابعاد بالاتر معرفی

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

شدند. این مدل‌ها نیز به نوبه خود از نظریه ریسمان نشات می‌گیرند. یکی از این مدل‌ها، مدل کیهان‌شناسی رندال-ساندروم (RS) است که بر اساس آن، عالم چهاربعدی ما به صورت یک شامه از یک عالم پنج بعدی نامتناهی درنظر گرفته می‌شود و تنها گرانش است که قابلیت و توان نفوذ و انتشار در این فضای پنج بعدی را دارد [۳]. در مقاله حاضر، یک میدان اسکالر تاکیونی محدود به روی شامه در مدل RS، نقش انرژی تاریک را در ایجاد شتاب کیهانی ایفا می‌کند. پیش از این، محققین، تحول چنین سیستمی را مورد بررسی قرار داده‌اند لیکن، این مدل با استفاده از روش تحلیل سیستم دینامیکی، کمتر مطالعه شده است. این روش بسیار کارآمد که در مباحث کیهان‌شناختی مورد توجه قرار گرفته است می‌تواند اطلاعات سودمندی را در مورد تحول عالم، از آغاز تاکنون در اختیار ما قرار دهد. بنابراین در این مقاله، مدل ذکر شده را با استفاده از این رویکرد و به شکلی متفاوت از فرآیند موجود در مقالات دیگر از این دست بررسی خواهیم نمود [٤].

فضای فاز مدل RS با میدان اسکالر تاکیونی بر روی شامه

معادله فریدمان حاصل از معادله حرکت در این مدل عبارت است از

$$3H^2=\rho(1+\frac{\rho}{2\sigma}) \qquad (3)$$

در اینجا $\rho=\rho_m+\rho_\phi$، که ρ_m چگالی انرژی ماده تاریک و ρ_ϕ چگالی انرژی مربوط به میدان تاکیونی می‌باشد. همچنین H ثابت هابل و σ، کشش شامه است. همچنین معادلات پایستگی ماده تاریک و انرژی تاریک به شکل زیر می‌باشند

$$\dot{\rho}_m+3H\rho_m=0 \qquad (4)$$

$$\dot{\rho}_\phi+3H(1+w_\phi)\rho_\phi=0 \qquad (5)$$

که در آن w_ϕ پارامتر معادله حالت میدان اسکالر تاکیونی است.

حال به سراغ روش سیستم دینامیکی می‌رویم. به دنبال محاسبه نقاط بحرانی سیستم، بررسی پایداری مدل در نزدیکی آنها و سرانجام، یافتن حالت‌های فیزیکی متناظر با این نقاط هستیم. بدین منظور متغیرهای جدید بدون بعد زیر را جهت تشکیل فضای فاز تعریف می‌کنیم

$$y=\frac{\sqrt{V}}{\sqrt{3}H}\ ,\ z=\frac{\rho}{3H^2}\ ,\ d=\dot{\phi}\ ,\ \lambda=-\frac{V'}{V^{3/2}} \qquad (6)$$

با توجه به معادله فریدمان و (٦) می‌توان نشان داد که

$$\frac{\rho}{2\sigma}=\frac{1-z}{z} \qquad (7)$$

و از اینجا به قید $0\le z\le 1$ رسید. حالت $z=1$، به حد انرژیهای پایین ($\rho\ll 2\sigma$) مربوط می‌شود و یک مدل استاندارد چهاربعدی را نشان می‌دهد. $z=0$ ، مربوط به حد انرژیهای بالا ($\rho\gg 2\sigma$) است که نمایانگر ابتدای عالم است. همچنین با توجه به تعریف متغیرهای جدید می‌توان گفت هرگاه $z=0$، قطعا $y=0$، زیرا همانطور که گفتیم $z=0$ به ابتدای عالم یعنی $H\to\infty$ دلالت دارد. بازنویسی معادله فریدمان بر حسب متغیرهای جدید نیز که قید فریدمان نامیده می‌شود عبارت است از

$$z-\frac{y^2}{\sqrt{1-d^2}}=\Omega_m \qquad (8)$$

که $\Omega_m=\frac{\rho_m}{3H^2}$. با توجه به عبارت زیر رادیکال $0\le d\le 1$. همچنین می‌دانیم $0\le\Omega_m\le 1$. با توجه به این دو قید و نیز با کمک قید فریدمان نتیجه می‌گیریم که $-1\le y\le 1$. پارامتر معادله حالت کل نیز که از کمیتهای مهم در مباحث کیهان‌شناسی می‌باشد در مدل حاضر و برحسب متغیرهای جدید عبارت می‌شود از

$$w_\phi=-\frac{y^2}{z}\sqrt{1-d^2} \qquad (9)$$

همانطور که می‌بینیم تابع پتانسیل V و تغییرات آن، از طریق y و λ، مستقیما در تحول سیستم، تاثیرگذار است. بنابراین انتخاب V از اهمیت بسزایی برخوردار است. در این مقاله از تابع پتانسیل نمایی $V=e^{-\alpha\phi}$ که شرایط یک پتانسیل تاکیونی را ارضا می‌کند بهره می‌گیریم. در ادامه، از متغیرهای جدید تعریف شده، نسبت به $\ln a$، مشتق می‌گیریم و به یک دسته معادلات دیفرانسیل معمولی به صورت زیر می‌رسیم که تحول مدل مدنظر را نشان می‌دهند

$$y'=-\frac{\sqrt{3}}{2}y^2zd\lambda+\frac{3}{2}y(2-z)(z-y^2\sqrt{1-d^2})$$

$$z'=3z(1-z)(z-y^2\sqrt{1-d^2})$$

$$d'=-(3zd-\sqrt{3}yz\lambda)(1-d^2)$$

$$\lambda'=\frac{\sqrt{3}}{2}yzd\lambda^2 \qquad (10)$$

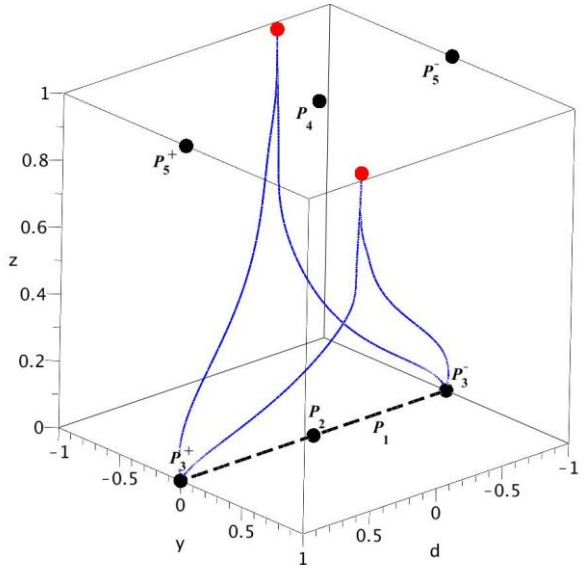
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

لازم به ذکر است که در معادلات بالا $u' = z\frac{d}{d\ln a}$، که $u = y, z, d, \lambda$. این کار بدین دلیل انجام گرفته است که مشکل واگرایی در معادلات اصلی رفع گردد و نقاط بحرانی مربوط به حالت $z = ۰$ را از دست ندهیم. با همزمان برابر صفر قرار دادن معادلات در (۱۰)، نقاط بحرانی سیستم را تعیین می‌کنیم. این نقاط بحرانی که با تمامی قیدهای بدست آمده پیشین سازگاری دارند عبارتند از

$$P_۱ : (y = ۰, z = ۰, d = d, \lambda = \lambda)$$
$$P_۲ : (y = ۰, z = ۰, d = ۰, \lambda = \lambda)$$
$$P_۳^{\pm} : (y = ۰, z = ۰, d = \pm ۱, \lambda = \lambda)$$
$$P_۴ : (y = ۰, z = ۱, d = ۰, \lambda = \lambda)$$
$$P_۵^{\pm} : (y = ۰, z = ۱, d = \pm ۱, \lambda = \lambda)$$

با کمک قید فریدمان به این نتیجه می‌رسیم که $P_۱$، به ابتدای عالم و زمانی اشاره می‌کند که میدان اسکالر تاکیونی در آن غالب است به طوریکه هر چه مقدار d به صفر نزدیکتر باشد سهم انرژی پتانسیل تاکیونی نیز نسبت به انرژی جنبشی آن بیشتر خواهد بود. بر همین اساس می‌توان گفت که نقطه $P_۲$، یک جواب تورمی است، بدین معنا که انرژی پتانسیل میدان اسکالر تاکیونی در عالم، غالب می‌باشد. همچنین $P_۳^{\pm}$، بیانگر عالمی هستند که انرژی جنبشی میدان تاکیونی در آن نقش غالب را دارد. نقطه بحرانی $P_۴$، یک عالم ماده غالب را نمایش می‌دهد. با توجه به رابطه (۹) نیز می‌توان به این نتیجه رسید. $P_۵^{\pm}$ نیز به عالمی دلالت می‌کنند که هم ماده تاریک و هم انرژی جنبشی میدان تاکیونی در آن نقش بسزایی خواهند داشت.

با استفاده از روش اختلال خطی می‌توان ویژه مقادیر مربوط به این نقاط را محاسبه و در مورد پایداری آنها بحث کرد. بر این اساس، در می‌یابیم که ویژه مقادیر مربوط به نقاط بحرانی $P_۴$ و $P_۵^{\pm}$، به ترتیب عبارتند از $(-۳, -۳, ۰, ۳/۲)$ و $(۰, ۶, -۳, ۳/۲)$، که نشان دهنده زینی بودن این نقاط است. بدین معنا که در فضای فاز چهاربعدی مربوط به سیستم، برخی از مسیرهای تحولی، به این نقاط وارد و برخی دیگر از آنها خارج می‌گردند. ویژه مقادیر مربوط به سایر نقاط بحرانی تماما برابر صفر می‌باشند، از این رو نمی‌توان با استفاده از روش اختلال خطی، درباره ماهیت پایداری آنها اطلاعاتی بدست آورد. بنابراین ناچار به بکارگیری روشهایی دیگر هستیم. در این مقاله به روشهای عددی متوسل می‌شویم. از آنجا که نمایش فضای فاز چهاربعدی غیرممکن است و از آنجا که تمام نقاط بحرانی به ازای تمام مقادیر λ معتبر هستند، به نموداری سه بعدی در مقدار $\lambda = ۱$، بسنده می‌کنیم. البته لازم به ذکر است که λ، نمی‌تواند مقداری برابر صفر داشته باشد. چون طبق تعریف این متغیر، به یک پتانسیل ثابت می‌انجامد که با شرایط پتانسیلهای تاکیونی در توافق نیست. شکل (۱)، نشان دهنده رفتار عالم در نزدیکی نقاط بحرانی مربوط به مدل تحت بررسی است. همانطور که ملاحظه می‌کنید، کلیه مسیرهای احتمالی از $P_۳^{\pm}$ شروع می‌شوند. پس این نقاط، جوابهای ناپایدار سیستم می‌باشند. همچنین با توجه به همین شکل نتیجه می‌گیریم که نقطه بحرانی $P_۲$ و خط بحرانی $P_۱$، رفتارهای زینی دارند.

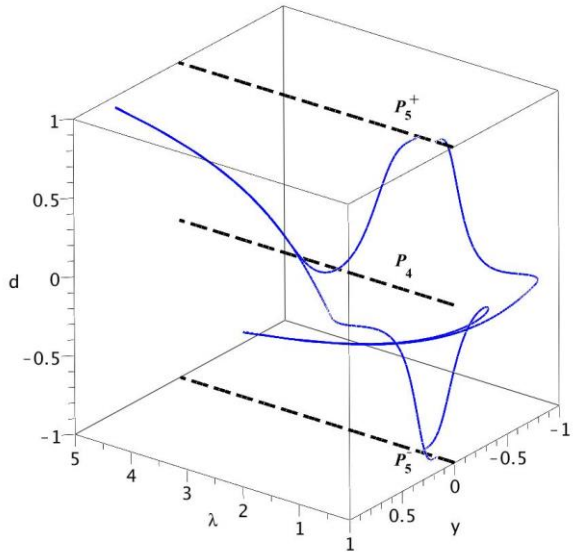


شکل ۱ : فضای فاز سه بعدی به ازای $\lambda = ۱$. $P_۱$، به صورت خط بحرانی خط‌چین مشکی نمایش داده شده است.

نکته مهم دیگری که از شکل (۱) دریافت می‌شود، وجود دو نقطه بحرانی اضافی است که با رنگ قرمز نمایش داده شده‌اند. از آنجایی که تمام مسیرهای تحولی سیستم به این نقاط ختم می‌شوند پس طبیعت پایداری دارند. همچنین چون موقعیت این نقاط در فضای فاز سه بعدی، بسیار نزدیک به خطوط $y = \pm ۱$ می‌باشد، می‌توان از آنها به عنوان جوابهای تورمی یاد کرد که نشان دهنده عالم با انرژی تاریک غالب می‌باشند. اما چرا این نقاط مهم را به صورت ریاضیاتی بدست نیاوردیم؟ علت آن است که مدل درنظرگرفته شده،

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

فشرده یا بسته نمی‌باشد زیرا متغیر λ، به بازه خاصی محدود نیست و می‌تواند تا بینهایت تغییر کند. بنابراین عملا نقاط بحرانی سیستم در بینهایت را بدست نیاورده‌ایم. از آنجا که فشرده کردن مدل و بدست آوردن این نقاط، بحث مفصلتری را می‌طلبد که خارج از حوصله مقاله حاضر می‌باشد آن را به کارهای آتی موکول می‌کنیم. شکل (۲) نمایی از فضای فاز سیستم در $z=1$ است. با توجه به مسیرهای تحولی موجود در این شکل می‌توان به وجود نقاط بحرانی در بینهایت پی برد. نکته مهم دیگری که از مسیرهای موجود در شکل (۲) استنباط می‌شود آن است که اگرچه این نقاط همواره رفتار جاذب دارند ولی موقعیتشان تابعی از مقدار λ است. همانطور که در شکل (۱) نشان دادیم، این نقاط در $\lambda=1$ نمایانگر دوره انرژی تاریک غالب هستند در حالیکه با توجه به شکل (۲) به ازای مقادیر بزرگتر λ، تعابیر فیزیکی و کیهان‌شناختی دیگری خواهند داشت.



شکل ۲ : فضای فاز سه بعدی به ازای $z=1$. P_4 و $P_5^{\pm}$، به صورت خطوط بحرانی خط‌چین مشکی نمایش داده شده اند. به منظور نمایش بهتر، تغییرات λ تا ۵ را درنظر گرفته‌ایم.

نتیجه‌گیری

در این مقاله، از مدل کیهان‌شناسی جهان‌شامه‌ای رندال–ساندروم با در نظر گرفتن میدان اسکالر تاکیونی به عنوان عامل ایجاد شتاب کیهانی استفاده کردیم. با استفاده از روش سیستم دینامیکی به محاسبه نقاط بحرانی مدل پرداختیم و پایداری سیستم در اطراف این نقاط را بحث کردیم. سپس دوره‌های کیهان‌شناسی متناظر با آنها را بررسی کردیم. در این مدل علاوه بر نقاط بحرانی مربوط به دوره تورمی و آغاز عالم و نیز دوره ماده تاریک غالب، نقاط بحرانی دیگری نیز بدست آوردیم که به نقاط بحرانی سیستم در بینهایت نسبت داده شدند و به ازای محدوده خاصی از مقادیر پارامتر λ، بیانگر دوره انرژی تاریک غالب بودند.

مرجع‌ها

[۱] D. Larson, et al.; "Seven-Year Wilkinson Microwave Anisotropy Probe (WMAP) Observations: Power Spectra and WMAP-Derived Parameters"; *Astrophys. J. Suppl. Ser.* **192**, No. 2 (2011).
[۲] G. W. Gibbons; "Cosmological Evolution of the Rolling Tachyon"; *Phys. Lett. B* **537**, 1 (2002).
[۳] L. Randall and S. Sundrum; "A Large Mass Hierarchy From a Small Extra Dimension"; *Phys. Rev. Lett.* **83,** 4690 (1990).
[۴] A. Ravanpak and G. F. Fadakar; "Dynamical system Analysis of Brane Induced Gravity with Tachyon Field"; *Class. Quantum Grav.* **36**, 235003 (2019).

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بررسی خواص ساختاری، الکترونی و مغناطیسی آلیاژ تمام هویسلر Ir_2YSi با استفاده از نظریهٔ تابعی چگالی

اسدی ، احمد[۱]؛ بیضایی، سید مهدی[۲]

[۱] گروه فیزیک، دانشگاه پیام نور، صندوق پستی ۳۶۹۷-۱۹۳۹۵، تهران، ایران

[۲] گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه ولی‌عصر (عج)، رفسنجان، ایران

چکیده

*در این مقاله، خواص ساختاری، الکترونی و مغناطیسی آلیاژ تمام هاسلر Ir_2YSi بر **پایهٔ نظریهٔ** تابعی چگالی در فاز مکعبی مورد بررسی قرار گرفته است. محاسبات با استفاده از کد pwscf از بستهٔ نرم‌افزاری کوانتوم اسپرسو انجام شد. نتایج نشان می‌دهند که این آلیاژ در ثابت شبکه تعادلی خود یک شبه نیم‌فلز است، اما تحت تنش، با افزایش ثابت شبکه تعادلی به اندازه ٤ درصد، به نیم‌فلز تبدیل می‌شود. همچنین با بررسی خواص مغناطیسی آلیاژ مذکور، مشاهده شد که این آلیاژ پادفرومغناطیس است و گشتاور مغناطیسی اسپینی کل آن از قانون اسلاتر- پائولی تبعیت می‌کند. بنابراین این آلیاژ می‌تواند انتخاب مناسبی برای کاربرد در قطعات اسپینترونیک باشد.*

واژه های کلیدی: *آلیاژ هویسلر، اسپینترونیک، کوانتوم اسپرسو، **نظریهٔ** تابعی چگالی*

Investigating the Structural, Electronic and Magnetic Properties of Full Huesler Alloy Ir_2YSi Using Density Functional Theory

Asadi, Ahmad[1]; Baizaee, Seyyed Mahdy[2]

[1] Department of Physics, Faculty of Science, Payame Noor University, P.O. Box 19395-3697, Tehran, Iran
[2] Department of Physics, Faculty of basic Science, Vali-e-Asr University, Rafsanjan, Iran

Abstract

In this paper, the structural, electronic and magnetic properties of full Heusler alloy Ir_2YSi in cubic phase have been studied. Calculations have been done using pwscf program from Quantum Espresso package. The results show that the alloy is quasi half-metal at equilibrium lattice constant, but under stress, by increasing the lattice constant by 4%, it becomes half-metal. By studying the magnetic properties, it was found the Ir_2YSi alloy was antiferromagnetic. Also, the total spin magnetic moment of alloy was found in accordance with the Slater-Pauling rule. So, it can be considered a good candidate for spintronics devices.

***Keywords**: Heusler alloy, Spintronics, Quantum espresso, Density functional theory*

PACS No.71

مقدمه

مطالعه خواص گوناگون آلیاژهای فرومغناطیس نیم‌فلز به دلیل کاربرد آن‌ها در صنعت اسپینترونیک مورد توجه پژوهشگران زیادی قرار گرفته است. از جمله این آلیاژها می‌توان به آلیاژهای هویسلر اشاره نمود که برخی از آن‌ها دارای خواص ساختاری، الکترونی و مغناطیسی ویژه‌ای می‌باشند و می‌توانند در قطعات اسپینترونیک و مقاومت مغناطیسی بزرگ و همچنین به عنوان آلیاژهای حافظه‌دار مورد استفاده قرار بگیرند [۳-۱]. قدمت تحقیق و پژوهش بر روی آلیاژهای هویسلر به بیش از صد سال پیش برمی‌گردد. نام ای‌ن آلیاژها از نام شیمی‌دان آلمانی فردریش هویسلر که اولین بار با کمک همکاران خواص آلیاژهای Cu_2MnAl و Cu_2MnSn را کشف نمودند، گرفته شده است [٤].

آلیاژهای هویسلر را می‌توان به دو دسته کلی آلیاژهای نیم‌هویسلر (با فرمول کلی XYZ) و آلیاژهای تمام هویسلر (با فرمول کلی X_2YZ

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

) تقسیم‌بندی نمود. در این فرمول‌های شیمیایی X و Y می‌توانند هر یک از عناصر واسطه ۳d، ٤d و ٥d باشند و Z یکی از عناصر sp غیرمغناطیسی می‌باشد. آلیاژهای تمام هویسلر دارای ساختار بلوری مکعبی هستند که شامل چهار زیرشبکه fcc در هم فرو رفته می‌باشند. این آلیاژها شامل چهار مختصه مکانی (۰و۰و۰)A، (۰/۲۵و۰/۲۵و۰/۲۵)B، (۰/۵و۰/۵و۰/۵)C و (۰/۷۵و۰/۷۵و۰/۷۵)D می‌باشند. اتم‌های X معمولاً در مختصه‌های A و C قرار می‌گیرند و مختصه‌های B و D توسط اتم‌های Y و Z اشغال می‌شوند [٥].

آلیاژهای هویسلر با خاصیت نیم‌فلزی دارای دو کانال اسپینی مجزا با دو رفتار متفاوت می‌باشند. به عبارت دیگر، یکی از کانال‌های اسپینی رفتار فلزی و کانال دیگر رفتار عایق از خود نشان می‌دهد. این نوع آلیاژها می‌توانند به دلیل داشتن قطبش اسپینی بالا (نزدیک ۱۰۰٪) در نزدیکی تراز فرمی، در قطعات اسپینترونیک مورد استفاده قرار بگیرند. آن‌ها می‌توانند جریان قطبیده اسپینی را به نیمرسانا تزریق کنند. همچنین این آلیاژها در ساخت الکترودهای ایده‌آل برای استفاده در پیوندگاه‌های تونلی مغناطیسی و قطعات مقاومت مغناطیسی بزرگ به کار گرفته می‌شوند. تحقیقات انجام گرفته تا به حال بیشتر جنبه تئوری داشته است.

در این مقاله با استفاده از محاسبات ابتدا به ساکن بر پایهٔ نظریهٔ تابعی چگالی، خواص ساختاری، الکترونی و مغناطیسی آلیاژ تمام هویسلر Ir_2YSi مورد بررسی قرار گرفته است. لازم به ذکر است که تا کنون هیچ مطالعه تئوری و تجربی بر روی این آلیاژ صورت نگرفته و نتایج تحقیق قابل مقایسه با مطالعات دیگران نیست.

روش محاسبه

در این مطالعه، محاسبات با استفاده از کد pwscf از بستهٔ نرم‌افزاری کوانتوم اسپرسو بر پایهٔ نظریهٔ تابعی چگالی انجام گرفته است. این کد از روش شبه پتانسیل استفاده می‌کند. لازم به ذکر است، چون بیشتر خواص مورد نظر مربوط به الکترون‌های ظرفیت است، می‌توان در نزدیکی هسته‌ها از شبه‌پتانسیل به جای پتانسیل واقعی استفاده نمود، زیرا در نزدیک هسته، به دلیل زیاد بودن انرژی جنبشی الکترون‌ها و جایگزیدگی توابع موج، افت و خیزها شدید می‌باشد که این امر به طور طبیعی حجم محاسبات را بالا می‌برد. در این روش برهم‌کنش میان هسته و الکترون‌های ظرفیت با یک شبه پتانسیل فوق نرم تقریب زده شده است تا حجم محاسبات کاهش یابد. همچنین از تقریب شیب تعمیم یافته برای برهم‌کنش تبادلی- همبستگی استفاده شده است [٦].

در ابتدای محاسبات، برخی از پارامترها مانند تعداد نقاط k، انرژی قطع و ثابت شبکه بهینه می‌شوند که مقادیر بهینه آن‌ها در جدول ۱ آورده شده است.

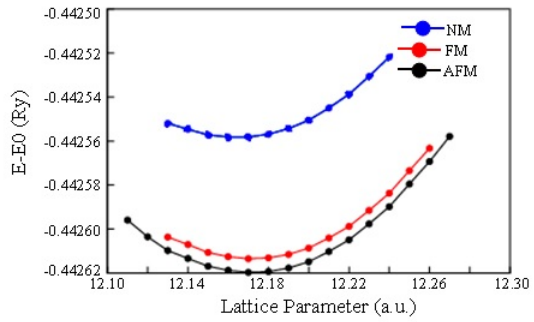
نتایج و بحث

آلیاژ تمام هویسلر Ir_2YSi با شانزده اتم در سلول واحد، شامل ۸ اتم Ir، ٤ اتم Y و ٤ اتم Si شبیه‌سازی شده است. در شکل ۱ ساختار هندسی این آلیاژ نشان داده شده است.



شکل ۱: ساختار هندسی آلیاژ تمام هویسلر Ir_2YSi

در ابتدای کار نمودار انرژی بر حسب ثابت شبکه برای سه حالت غیرمغناطیسی، فرومغناطیسی و پادفرومغناطیس رسم شد که در شکل ۲ نشان داده شده است.



شکل ۲: نمودار انرژی بر حسب ثابت شبکه برای آلیاژ Ir_2YSi در سه حالت غیرمغناطیسی، فرومغناطیس و پادفرومغناطیس

از روی نمودار دیده می‌شود که حالت پادفرومغناطیس دارای انرژی پایین‌تری نسبت به دو حالت دیگر است. بنابراین این آلیاژ پادفرومغناطیس است. می‌توان گفت که برهم‌کنش الکترون‌های ظرفیت اتم‌های مغناطیسی نقش مهمی در تعیین نظم مغناطیسی ایفا

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

می‌کنند. در ادامه کار از معادله حالت مورناگان برای بهینه‌سازی ساختار مورد نظر استفاده شد. این معادله به فرم

$$E(V) = E_0 + \frac{9V_0\beta_0}{16}\left\{\left[(\frac{V_0}{V})^{\frac{2}{3}}-1\right]^3\beta_0' + \left[(\frac{V_0}{V})^{\frac{2}{3}}-1\right]^2\left[6-4(\frac{V_0}{V})^{\frac{2}{3}}\right]\right\} \quad (۱)$$

است که در آن E_0، V_0، β_0 و β_0' به ترتیب کمینه انرژی کل در حجم تعادلی، حجم سلول واحد، مدول حجمی و مشتق مدول حجمی می‌باشند [۷]. مقادیر این پارامترها در جدول ۱ آورده شده است.

همچنین به منظور بررسی پایداری ساختار، می‌توان انرژی بستگی را از رابطه ۲ محاسبه نمود [۸].

$$E_{coh} = E_{tot} - (2E_{Ir} + E_Y + E_{Si}) \quad (۲)$$

که در این رابطه E_{coh} انرژی بستگی، E_{tot} انرژی کل ساختار و E_{Ir}، E_Y و E_{Si} به ترتیب انرژی اتم‌های منزوی Ir، Y و Si می‌باشند. با توجه به مقدار منفی به دست آمده برای انرژی بستگی می‌توان گفت که آلیاژ مورد نظر به لحاظ ساختاری پایدار است.

در جدول ۲ گشتاور مغناطیسی کل آلیاژ Ir_2YSi و گشتاور مغناطیسی تک‌تک اتم‌ها آورده شده است.

به وضوح دیده می‌شود که گشتاور مغناطیسی کل آلیاژ مذکور از قاعده اسلاتر- پائولی تبعیت می‌کند. بر طبق این قانون، گشتاور مغناطیسی کل آلیاژهای تمام هویسلر از رابطه $\mu_t = Z_t - 24$ به دست می‌آید که در این رابطه Z_t تعداد کل الکترون‌های ظرفیت و μ_t گشتاور مغناطیسی اسپینی کل بر سلول واحد است [۹]. در آلیاژ مذکور تعداد الکترون‌های ظرفیت ۲۵ عدد می‌باشند و از قانون اسلاتر- پائولی، گشتاور مغناطیسی کل آلیاژ $1\ \mu_B/f.u$ به دست می‌آید که با عدد به دست آمده از محاسبات تطابق دارد. نتایج به دست آمده در جدول ۲ نشان می‌دهند که اتم Ir بیشترین سهم را در گشتاور مغناطیسی اسپینی کل دارد.

در ادامه، با محاسبه چگالی کل حالت‌ها، خواص الکترونی آلیاژ Ir_2YSi مورد بررسی قرار گرفت. با توجه به نمودار شکل ۳ الف مربوط به چگالی حالت‌ها، می‌توان گفت که آلیاژ مذکور در ثابت شبکه تعادلی یک شبه نیم‌فلز است، زیرا در اطراف تراز فرمی برای هر دو جهت اسپین همپوشانی بین نوارهای ظرفیت و رسانش وجود دارد. در ادامه کار برای بررسی رفتار الکترونی آلیاژ مذکور تحت تنش، یک تا چهار درصد ثابت شبکه را به مقدار ثابت شبکه تعادلی، اضافه و کم نمودیم و محاسبات تکرار شد. بعد از انجام محاسبات مشاهده شد که آلیاژ Ir_2YSi تحت تنش در حالت افزایش ثابت شبکه تعادلی به اندازه چهار درصد ($a = a_0 + 4\%a_0$) به نیم فلز تبدیل شد.

جدول ۱: پارامترهای بهینه محاسبه شده آلیاژ Ir_2YSi

نام آلیاژ	Ir_2YSi
تعداد نقاط K (k-point)	۱۰×۱۰×۱۰
انرژی قطع (Ry)	۸۵
ثابت شبکه ($\mathring{A}$)	۱۲/۱۷
مدول حجمی (β) (Kbar)	٤۱۵
مشتق مدول حجمی (β')	۵/۳
انرژی بستگی (Ry)	-۳۸/۹٤۹

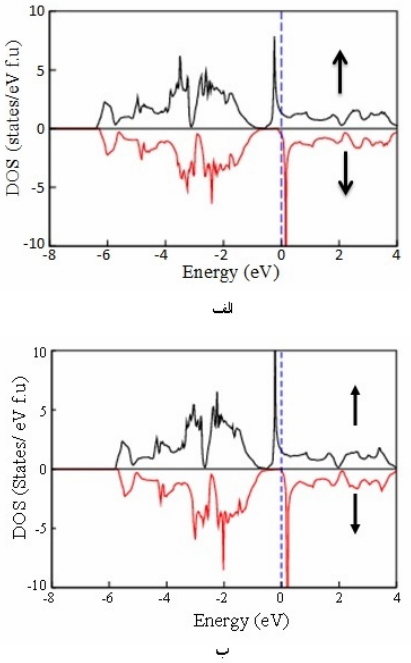
جدول ۲: گشتاور مغناطیسی کل آلیاژ Ir_2YSi و گشتاور مغناطیسی اتم‌های تشکیل دهنده آلیاژ

نام آلیاژ	$\mu_a(\mu_B/atom)$			$\mu_t(\mu_B/f.u)$
	Ir	Y	Si	
Ir_2YSi	۳/۰۲	-۱/۲۵	-۰/۸۱	۰/۹۶

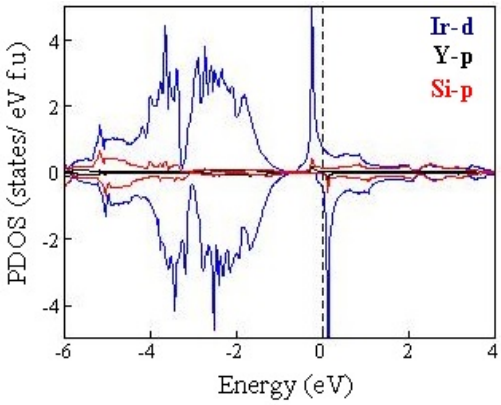
در شکل ۳ب نمودار چگالی حالت‌های کل آلیاژ تحت تنش نشان داده شده است.

برای بررسی دقیق‌تر خواص الکترونی آلیاژ Ir_2YSi، نمودار چگالی حالت‌های جزئی در شکل ٤ نشان داده شده است. با توجه به نمودار مذکور، مشاهده می‌شود که بیشترین سهم چگالی حالت‌های الکترونی اشغال شده در اطراف تراز فرمی مربوط به اوربیتال d اتم Ir است. همچنین یک هیبریداسیون قوی میان اوربیتال‌های d اتم Ir و اوربیتال‌های p اتم Si وجود دارد.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

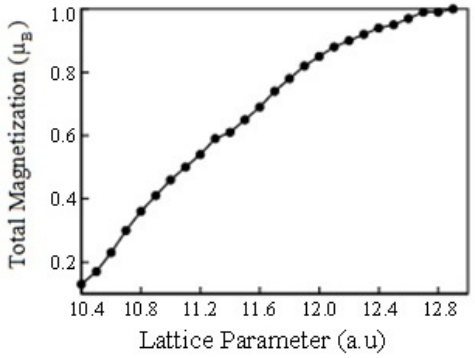


شکل ۳: نمودار چگالی حالت‌های الکترونی کل بر حسب انرژی برای آلیاژ Ir_2YSi الف- در ثابت شبکه تعادلی و ب- تحت تنش با افزایش ٤درصدی ثابت شبکه تعادلی (انرژی فرمی به صورت خط‌چین مشخص شده و بر صفر منطبق است.)



شکل ٤: نمودار چگالی حالت‌های جزئی آلیاژ Ir_2YSi نزدیک تراز فرمی بنابراین این احتمال وجود دارد که خاصیت نیم‌فلزی آلیاژ مذکور از هیبریداسیون میان اوربیتال‌های d اتم مغناطیسی Ir و اوربیتال‌های p اتم غیرمغناطیسی Si به وجود آمده باشد.

برای بررسی رفتار آلیاژ تحت تنش، نمودار گشتاور مغناطیسی کل ساختار بر حسب ثابت شبکه رسم شد که در شکل ۵ دیده می‌شود. با توجه به این‌که با افزایش ثابت شبکه، گشتاور مغناطیسی کل ساختار هم در حال افزایش است و به یک مقدار پایا نمی‌رسد، می‌توان نتیجه گرفت که آلیاژ مذکور تحت تنش خاصیت نیم‌فلزی خود را حفظ نمی‌کند، به عبارت دیگر فقط تحت تنش خاصی (افزایش ثابت شبکه به اندازه ٤ درصد)، خاصیت نیم‌فلزی دارد و برای تنش‌های دیگر خاصیت نیم‌فلزی ندارد.



شکل ۵: تغییرات ممان مغناطیسی کل بر حسب ثابت شبکه برای آلیاژ Ir_2YSi

جمع‌بندی

با استفاده از کد pwscf از نرم‌افزار کوانتوم اسپرسو، خواص ساختاری، الکترونی و مغناطیسی آلیاژ تمام هویسلر Ir_2YSi مورد مطالعه قرار گرفت. نتایج نشان دادند که این آلیاژ در ثابت شبکه تعادلی شبه نیم‌فلز است، اما تحت تنش با افزایش چهاردرصدی ثابت شبکه تعادلی به نیم‌فلز تبدیل می‌شود. و از لحاظ ساختاری با توجه به منفی شدن انرژی بستگی آن پایدار است. همچنین با مطالعه خواص مغناطیسی آلیاژ مذکور، مشاهده شد که این آلیاژ پادفرومغناطیس است.

مرجع‌ها

[۱] D. Rani, K.G. Suresh, A.K. Yadav, S.N. Jha, D. Bhattacharyya, M.R. Varma, A. Alam, *Phys. Rev. B.* **96** (2017) 184404.
[۲] Y.V. Kudryavtsev, N.V. Uvarov, V.N. Iermolenko, I.N. Glavatskyy, J. Dubowik, *Acta Mater*. **60** (2012) 4780.
[۳] G. Forozani, A.A.M. Abadi, S.M. Baizaee, A. Gharaati, "Structural, electronic and magnetic properties of CoZrIrSi quaternary Heusler alloy: First-principles study". *Journal of Alloys and Compounds*, **815**, p.152449.
[۴] F. Heusler; Verh. Dtsch. *Phys. Ges*. **5**, 219 (1903).
[۵] A. Amirabadizadeh, S.A. Emami, Z. Nourbakhsh, S.M. Sadr, S.M. Baizaee, "The effect of substitution of As for Ga on the topological phase and structural, electronic and magnetic properties of Mn2ZrGa Heusler alloy" *J. Super Nove Magn*. **30**, (2017).
[۶] J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* **80,** 891. (1998).
[۷] S. Idrissi, S. Ziti, H. Labrim, L. Bahmad, I. El Housni, R. Khalladi, S. Mtougui, and N. El Mekkaoui. "Half-metallic behavior and magnetic proprieties of the quaternary Heusler alloys YFeCrZ (Z= Al, Sb and Sn)." Journal of Alloys and Compounds **820** (2020): 153373.
[۸] G.Y.Gao, K.L. Lei Hu, "Large half-metallic gaps in the quaternary Heusler alloys CoFeCrZ (Z= Al, Si, Ga, Ge): A first-principles study." *Journal of alloys and compounds* **551** (2013): 539-543.
[۹] T. Graf, C. Felser, S.S. Parkin, " Simple rules for the understanding of Heusler compounds." *Progress in solid state chemistry*, **39** (2011) 1-50.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بررسی عبور موج الکترومغناطیسی از بلور فوتونی با لایه های متناوب سه تایی و لایه نقص پلاسما

کلهر، داود[۱]، شکاری فیروزجایی، علی[۲]

[۱]دانشکده فیزیک، دانشگاه دامغان، دامغان

[۲]دانشکده فیزیک دانشگاه شهید بهشتی، تهران

چکیده

در این مقاله عبور یک موج الکترومغناطیسی از ساختار بلور فوتونی با تناوب سه لایه ایی (سه تایی) به همراه یک لایه نقص پلاسما مطالعه می شود. در ابتدا انتشار موج از بلور فوتونی متشکل از تناوب های سه تایی بدون حضور لایه نقص شبیه سازی شده و سپس محدوده ی فرکانس گاف فوتونی تعیین می‌شود. سپس عبور موج در ساختار سه تایی با حضور یک لایه نقص پلاسمایی بررسی می شود. تأثیر پارامترهای پلاسمایی دما و چگالی روی مد نقص ارائه می‌شود. نشان داده می شود که دما و چگالی پلاسما تاثیر مهمی روی محل وقوع مد نقص دارد.

Investigation On The Transmission Of Electromagnetic Waves Of Ternary Plasma Photonic Crystal With A Plasma Defect Layer

Kalhor, Davood[1] ,Shekari firouzjaei, Ali[2]

[1] School of Physics, University of Damghan
[2]Department of Physics, University of Shahid Beheshti

Abstract

In this paper, the transmission of electromagnetic wave (EMW) from a ternary photonic crystal with a plasma defect layer is investigated. At first, the propagation of EMW in ternary photonic crystal without defect layer is simulated and the band gap frequency domain is determined. Then, the wave transmission through the ternary photonic crystal with plasma defect layer is investigated. The effect of plasma parameters including temperature and plasma density on the defect mode is presented. It is shown that the plasma density and temperature significantly affect the defect mode position.

PACS No. 68, 78

مقدمه

برهم کنش امواج الکترومغناطیس با بلورهای فوتونی سه لایه ایی از موضوعات بسیار مهم در حوزه فیزیک پلاسما است. با توجه به انعطاف پذیری پلاسما در مقابل عوامل خارجی، با قرار گرفتن یک نقص پلاسمایی در بلور فوتونی ویژگی های بلور فوتونی افزایش می یابد. مهمترین ویژگی بلور فوتونی سه تایی با نقص پلاسمایی کوک پذیر بودن شکاف نواری می باشد که در اپتوالکترونیک و مخابرات نوری کاربردهای فروانی دارد[۳-۱].

یک بلور فوتونی از کنار هم قرار گرفتن تناوبی چند لایه بوجود می آید. این تناوب ساختاری اغلب در یک بعد و یا دو بعد می باشد. همه این لایه ها را می توان دی الکتریک و یا اینکه دی الکتریک-فلز انتخاب کرد. ساختارهای دی الکتریک چند لایه ایی تناوبی،

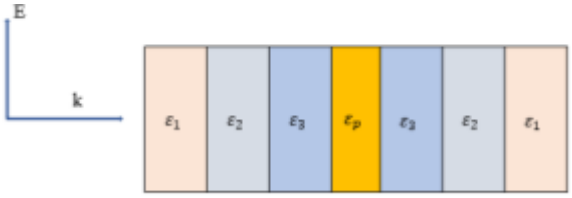
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بعنوان بلور فوتونی مصنوعی در سال های اخیر مورد توجه محقیق قرار گرفته است. علاقه به دستیابی به مواد جدید یا فرا ماده، بخاطر کاربردهای خاص آن فضای کاری گسترده ای را فراهم نموده است. از طرفی قابلیت بکارگیری پلاسما برای کنترل بعضی خواص بلورهای فوتونی، خصوصا در نوار های (باندهای) ممنوعه (گاف نوری کوک پذیر) توسط اعمال پرتو لیزر بعنوان میدانهای الکترومغناطیسی قوی، برخواص فیزیکی بعضی از لایه های بلور فوتونی را از جاذبه های مضاعف برای مطالعه این حوزه می توان نام برد (در باند ممنوعه امواج الکترومغناطیسی نمی تواند انتشار یابد) [۱-٤]. در این حوزه از جمله می‌توان به کاربردهای بلور فوتونی در ادوات اپتوالکترونیک و مخابرات نوری مانند آنتن‌های پلاسمایی، لنزهای پلاسمایی، حسگر نوری، هواپیماهای رادارگریز و سایر کاربردهای مشابه، می توان نام برد[۵-۱]. اخیراً بلور فوتونی سه تایی مورد توجه بسیاری از محققان قرار گرفته است. ثابت شده است که بلور فوتونی سه‌تایی می تواند به عنوان حسگر پارامترهای نامشخص یک ماده مورد استفاده قرار می‌گیرد.

در این مقاله ساختار نوار فوتونی یک بلور فوتونی سه لایه ایی (سه تایی) ارائه و همچنین اثر لایه نقص پلاسمایی مورد بررسی قرار می گیرد. تأثیر دما و چگالی پلاسما روی محل وقوع، مد نقص شبیه سازی شده و نتایج آن ارائه می‌شود. برای این کار از روش ماتریس انتقال به منظور محاسبه عبور موج از ساختار بلور فوتونی استفاده می شود. ساختار بلور فوتونی مورد نظر متشکل از سه لایه دی الکتریک و یک لایه نقص پلاسمای گرم برخوردی است.

مبانی نظری

همانطور که در مقدمه ذکر شد، بلور فوتونی مورد نظر از تکرار صفحات سه‌تایی دی الکتریک ساخته می‌شود. در این مقاله بلور فوتونی سه تایی به همراه یک لایه نقص که با پلاسما پر شده است بررسی می‌شود. در شکل ۱ طرحواره ایی از ساختار بلور فوتونی مورد نظر ارائه شده است.



شکل ۱ : ساختار بلور فوتونی یک بعدی هوا-دی الکتریک-دی الکتریک به همراه لایه نقص پلاسما.

برای بررسی ساختار نوار گاف در سیستم، از موج الکترومغناطیسی در مد TE که در راستای z به سیستم برخورد می‌کند، استفاده می‌شود. در این روش ساختار لایه‌ها به ترتیب پلاسما با ضخامت d و دی‌الکتریک اول (ε_1) با ضخامت a دی الکتریک دوم (ε_2) با ضخامت b و دی الکتریک سوم(ε_3) با ضخامت c قرار گرفته‌اند. رابطه‌ی ضریب دی‌الکتریک پلاسمای گرم برخوردی بصورت زیر

$$\varepsilon_p = \frac{[1-\frac{\omega_p^2}{\omega(\omega-i\upsilon_e)}]}{[1+\frac{\omega_p^2\omega}{(\omega-i\upsilon_e)^3\frac{T_e}{mc^2}}]} \qquad (۱)$$

است [۷]. در رابطه بالا ω فرکانس موج برخوردی است. پارامترهای پلاسمایی شامل فرکانس پلاسمایی $\omega_p = \sqrt{\frac{n_e e^2}{m\varepsilon_0}}$، فرکانس برخورد υ_e و انرژی گرمایی الکترونی پلاسما T_e است. از طرفی m جرم الکترون و c سرعت نور است. در این مقاله از پارامتر $\alpha = \frac{T_e}{mc^2}$ به عنوان اثر انرژی گرمایی (به عنوان نماینده دما) در محاسبات استفاده می‌شود.

پهنای سلول واحد $L = a + b + c$ است که a پهنای لایه دی‌الکتریک اول با ضخامت ۷ میلی‌متر و ضخامت لایه دی الکتریک دوم ۸ میلی متر و لایه دی الکتریک سوم ۸ میلی متر است. مطابق شکل ۱ موج تختی بصورت عمود و در راستای z بر سطح بلور فوتونی تابیده شود.

برای موج برخوردی مد TE در برخورد عمودی بدین ترتیب ماتریس انتقال برای لایه پلاسما با ضخامت d و برای لایه‌های دی الکتریک اول (ε_1)، لایه دی‌الکتریک دوم (ε_2) و لایه دی الکتریک سوم (ε_3) هر یک به ترتیب با ضخامت a ، b و c بصورت [۵-۷]

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

$$M_i = \begin{bmatrix} \cos(k_i z_i) & \frac{-i}{\eta_i}\sin(k_i z_i) \\ -i\eta_i \sin(k_i z_i) & \cos(k_i z_i) \end{bmatrix} \quad (۲)$$

است که پارامتر i مقادیر i=1,2,3 اختیار می کند.

همچنین در رابطه‌ی بالا k_p، k_1، k_2 و k_3 به ترتیب بردارهای موج در لایه‌ی پلاسما، لایه دی الکتریک اول و دی الکتریُک دوم و دی الکتریک سوم هستند و به صورت زیر تعریف می‌شوند

$$k_p = \frac{\omega}{c}\sqrt{\varepsilon_p}, \quad (۳)$$
$$k_i = \frac{\omega}{c}\sqrt{\varepsilon_i}$$

از طرفی پارامتر امپدانس موج برای هر محیط هم بصورت زیر تعریف می‌شود.

$$\eta_p = \sqrt{\frac{\varepsilon_p}{\mu_p}}\ ,\ \eta_i = \sqrt{\frac{\varepsilon_i}{\mu_i}} \quad (٤)$$

برای N سلول واحد به همراه لایه نقص ماتریس انتقال کل بصورت زیر بدست می‌آید[۸و۹]

$$M = (M_1M_2M_3)^N M_p (M_3M_2M_1)^N = \begin{bmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{bmatrix} \quad (۵)$$

با استفاده از رابطه ۵ ضرایب عبور و بازتاب بصورت زیر بدست خواهند آمد:

(٦)

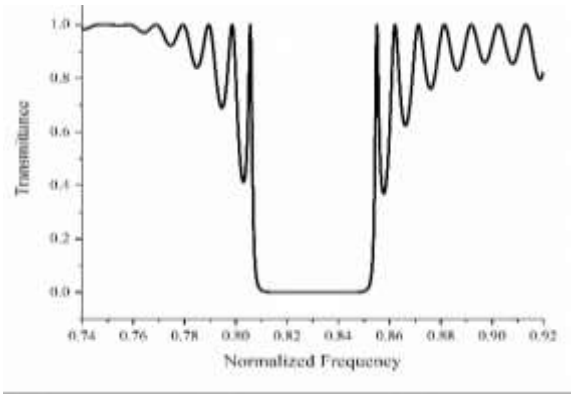
$$r = \frac{M_{11}\eta_0 + M_{12}\eta_0\eta_{n+1} - M_{21} - M_{22}\eta_0}{M_{11}\eta_0 + M_{12}\eta_0\eta_{n+1} + M_{21} + M_{22}\eta_0}$$

$$t = \frac{2\eta_0}{M_{11}\eta_0 + M_{12}\eta_0\eta_{n+1} + M_{21} + M_{22}\eta_0}$$

بدین ترتیب با استفاده از روابط بدست آمده در بالا به ارائه نتایج عددی پرداخته و ضریب عبور موج بر حسب فرکانس موج فرودی ارائه می‌شود.

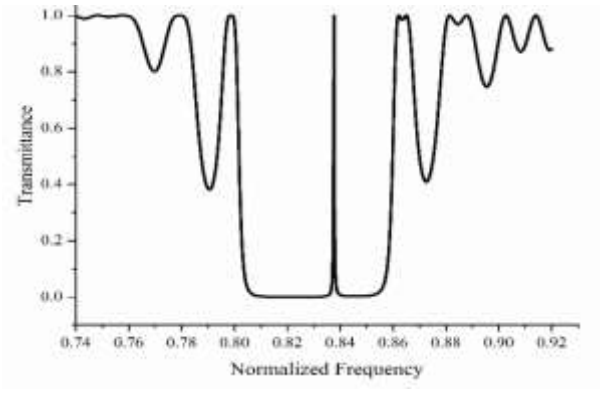
بحث و نتیجه‌گیری

در این بخش به ارائه نتایج عددی عبور موج از ساختار بلور فوتونی سه تایی پرداخته و اثر هر یک از پارامترهای پلاسمایی را روی محل وقوع فرکانس مد نقص بررسی می‌کنیم. در این مقاله منحنی عبور بر حسب فرکانس موج فرودی رسم می شود. فرکانس موج فرودی به عامل $\frac{\omega L}{2\pi c}$ بی‌بعد شده است و فاکتور α که نشان دهنده پارامتر دما است نسبت دمای الکترون بر حسب الکترون ولت به انرژی حالت سکون الکترون است.



شکل ۲ : منحنی عبور موج از بلور فوتونی سه تایی.

ابتدا با استفاده از معادله ٦ ساختار نوار گاف فوتونی را برای بلور فوتونی سه تایی بدون حضور لایه نقص در شکل ۲ بررسی می شود. تعداد تناوب $N = 6$ در نظر گرفته شده است. واضح است که بازه فرکانس نرمال ۰٫۸۱ الی ۰٫۸٤٥٥ مقدار ضریب عبور موج از ساختار صفر است. یعنی گاف فوتونی در این بازه فرکانسی قرار دارد.

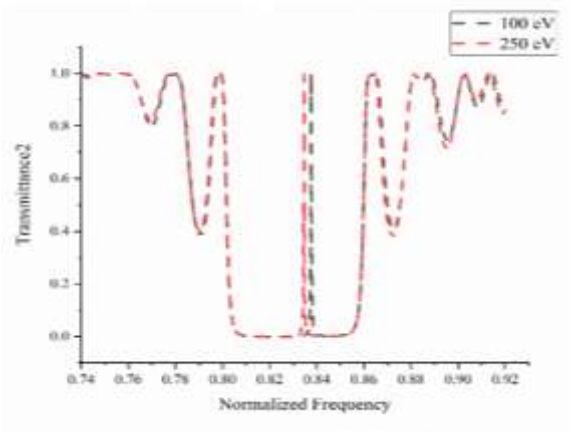


شکل ۳ : منحنی عبور موج از بلور فوتونی سه تایی با لایه نقص پلاسمایی.

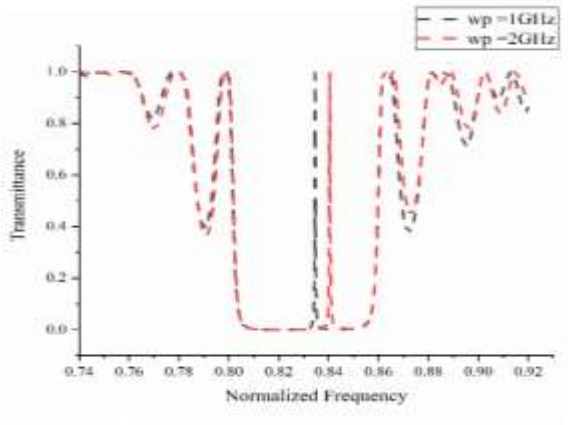
شکل ۳ اثر حضور لایه نقص را بررسی می شود. لایه نقص یک لایه پلاسمای گرم برخوردی است که فرکانس پلاسمایی ۱ گیگاهرتز ، فرکانس برخورد $\upsilon = 0.0005\omega$ و دمای الکترون ۲۵۰

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

الکترون ولت در نظر گرفته شده است. ضخامت لایه پلاسمایی ۵ میلی‌متر در نظر گرفته شده است. تعداد تناوب $N = 5$ در نظر گرفته شده است. همانطور که ملاحظه می‌شود، مد نقص در فرکانس نرمال ۰٫۸۳۸ ظاهر شده است. در ادامه به بررسی اثر تغییر دمای پلاسما و چگالی پلاسما روی محل وقوع مد نقص پرداخته می شود.



شکل ٤: منحنی عبور موج از بلور فوتونی سه تایی با لایه نقص پلاسمایی به ازای تغییر دما پلاسما.



شکل ۵: منحنی عبور موج از بلور فوتونی سه تایی با لایه نقص پلاسمایی به ازای تغییر فرکانس پلاسمایی.

در شکل ٤ اثر تغییر دمای پلاسما روی محل وقوع مد نقص بررسی می‌شود. به ازای دمای ۱۰۰ الکترون ولت و ۲۵۰ الکترون ولت منحنی عبور از بلور فوتونی ارائه شده است. همانطور که ملاحظه می‌شود با افزایش دمای پلاسما، فرکانس مد نقص به فرکانس‌های پایین تر جابجا می‌شود.

در شکل ۵ اثر افزایش فرکانس پلاسمایی روی نمودار عبور موج بخصوص محل مد نقص ارائه شده است. با افزایش فرکانس پلاسمایی از ۱ گیگاهرتز به ۲ گیگاهرتز مد نقص به فرکانس‌های بالاتر جابجا شده است.

نتیجه گیری

در این مقاله رفتار موج در عبور از بلور سه بعدی، بعد از حضور یک لایه نقص پلاسمایی محاسبه شد. لایه نقص یک لایه پلاسمای گرم برخوردی فرض شد که فرکانس با پلاسمایی ۱ گیگاهرتز، مد نقص در فرکانس نرمال ۰٫۸۳۸ به دست آمد. اثر تغییر دمای پلاسما روی محل وقوع مد به ازای دمای ۱۰۰ الکترون ولت فرکانس مد نقص به فرکانس‌های پایین تر جابجا شد. با افزایش پلاسمایی از ۱ گیگاهرتز به ۲ گیگاهرتز مد نقص به فرکانس‌های بالاتر جابجا شد. بدین ترتیب با فزایش دما، کاهش فرکانس مد نقص و با افزایش فرکانس پلاسمایی، افزایش فرکانس مد نقص بدست آمد. خاصیت تغییر هوشمند پارامترهای پلاسمایی و به دنبال آن تغییر فرکانس مد نقص این ساختار را با قابلیت کوک پذیری نشان می دهد.

مراجع

[1] H. Azarshab and A. Gharaati "A multichannel filter based on ternary nano metallo-dielectric photonic" Microelectronic Engineering, 198 (**2018**) 93–97

[2] L. Xiong et al. "Photonic crystal for graphene plasmons" Nature Communications https://doi.org /10.1038/s41467-019-12778-2.

[3] Guo, B. and X. Wang; "Power absorption of high-frequency electromagnetic waves in a partially ionized magnetized plasma." *Physics of Plasmas* **12** (8) **(2005)** 084506.

[4] Hojo, H. and A. Mase; "Dispersion relation of electromagnetic waves in one-dimensional plasma photonic crystals." *J. Plasma Fusion Res.* **80** (2) **(2004)** 89-90.

[5] Kong, X.-k., S.-b. Liu, et al.; "A novel tunable filter featuring defect mode of the TE wave from one-dimensional photonic crystals doped by magnetized plasma." *Physics of Plasmas* **17** (10) **(2010)** 103506.

[6] Guo, B.; "Photonic band gap structures of obliquely incident electromagnetic wave propagation in a one-dimension absorptive plasma photonic crystal" *Physics of Plasmas* **16** (4) **(2009)** 043508.

[7] Krall, N. A. and A. W. Trivelpiece;"Principles of plasma physics." *International Student Edition-International Series in Pure and Applied Physics, Tokyo: McGraw-Hill Kogakusha,* **1** (1973).

[8] Guo, B. and M. Gao; "*Optical properties of one-dimensional binary plasma dielectric photonic crystal*." *International Journal of Applied Physics and Mathematics* **1 (2011)** (1).

[9] Mitu, M., D. Toader, et al.; "A 1-D dusty plasma photonic crystal." *Journal of Applied Physics* **114** (11) **(2013)** 113305.

[10] J. C. Stephens et al. "Subterahe rtz Photonic Crystal Klystron Am plifier" Phys. Rev. Lett. 123, **(2019)** 244801.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بررسی خواص غیر خطی اکسیدگرافن با استفاده از روش روبش-Z

رحیمی حسین آبادی ، زهره[۱] ؛ کشاورز، علیرضا[۱]

[۱] گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه صنعتی شیراز

چکیده

چکیده- در این تحقیق ضریب شکست غیر خطی اکسید گرافن با استفاده از روش، روبش-Z تعیین گردیده است. آزمایش ها با استفاده از هارمونیک دوم لیزر پیوسته نئودیم-یاگ با طول موج ۵۳۲ نانو متر انجام شده است. همچنین شیوه‌ای کارآمد برای تهیه اکسید گرافن به صورت پودر و بر اساس روش هامرز اصلاح شده ارائه گردیده است. تغییرات ضریب شکست غیر خطی با دو توان ۱۰۰ میلی وات و ۸۰ میلی وات بررسی شده است.

واژه های کلیدی: گرافن، ضریب‌شکست غیرخطی، روش روبش-Z

Investigation of the nonlinear properties of graphene oxide using the z-scan method

Rahimi hoseyn abadi, Zohreh[1] ; Keshavarz, Alireza[1]

[1] physic Branch, Faculty of Basics science, Shiraz University of technology

Abstract

Abstract - In this study, the nonlinear refractive index of graphene oxide was determined using the method of Z-scan. The experiments were performed using the second Nd:YAG continuous laser harmonic with a wavelength of 532 nm. Effective methods for preparing graphene oxide in powder form have also been proposed based on the modified Hammers method. Changes in the nonlinear refractive index with two powers of 100 mW and 80 mW have been investigated.

***Keywords**: graphene, Nonlinear refraction index, Z-scan method*

PACS No. 81

۱- مقدمه

با کشف گرافن در سال ۲۰۰۴ با ویژگی های قابل توجه اش بسیار مورد توجه جامعه جهانی قرار گرفت. به طور خلاصه این ساختار بسیار محکم و نازک، بسیار سبک، تقریبا شفاف، هادی حرارتی و الکتریکی می باشد و این خواص برجسته، گرافن را به عنوان گزینه ای برتر در کاربرد های بسیاری نظیر صنایع حمل و نقل، هوا فضا، کامپوزیت و الکترونیک تبدیل کرده است. صفحات گرافن با کنار هم قرار گرفتن اتم های کربن تشکیل می‌شوند. در یک صفحه گرافن، هر اتم کربن با ۳ اتم کربن دیگر پیوند داده است این سه پیوند در یک صفحه قرار دارند و زوایای بین آن ها با یکدیگر مساوی می‌باشد. در این وضعیت اتم های کربن در حالتی قرار می‌گیرند که شبکه‌ای از شش ضلعی‌های منتظم را ایجاد می‌کنند[۵-۱]. روش روبش-Z روشی بسیار ساده و در عین حال حساس برای اندازه گیری ضریب جذب و ضریب شکست غیر خطی است که توسط شیخ بهایی و همکارانش در سال ۱۹۸۹ معرفی شد[۷-۶]. سادگی این روش و تفسیر داده‌ها به این روش باعث شد که این روش خیلی سریع مورد توجه پژوهشگران قرار بگیرد. با توجه به مطالب پیش گفته در این تحقیق گرافن با استفاده از روش هامرز اصلاح شده تولید، سپس با در نظر گرفتن دو غلظت و دو توان مختلف با استفاده از روش روبش-Z، ضریب شکست غیر خطی گرافن تعیین شده است.

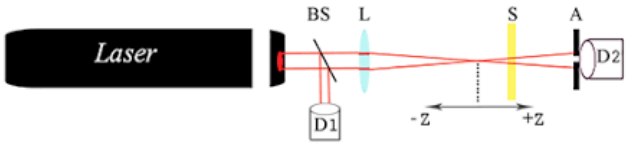
۲- چیدمان تجربی

روش‌های مختلفی برای تهیه گرافن از گرافیت و مشتقات آن وجود دارد. در این مقاله به منظور سنتز اکسید گرافن مطلوب از روش

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

هامرز اصلاح شده استفاده شده است. این روش مشابه روش هامرز می‌باشد با این تفاوت که در آن از اکسید کننده قوی تری مانند پتاسیم پرمنگنات به جای اسید نیتریک استفاده شده است .بدین منظور ابتدا یک ظرف شیشه‌ای درون حمام یخ قرار داده می‌شود. از ابتدای این مرحله با قرار دادن دماسنج درون حمام، دما باید زیر ۱۰ درجه سانتی گراد حفظ شود. مقدار ۴۶ میلی‌لیتر اسید سولفوریک ٪۹۸ درون ظرف ریخته و همراه همزدن مقدار ۲ گرم گرافیت خالص به ظرف اضافه و عمل همزدن به مدت ۱۵ دقیقه انجام می‌شود. سپس مقدار ۶ گرم پودر پتاسیم پرمنگنات به آرامی و همراه با همزدن شدید در مدت ۱ساعت به مخلوط اضافه و پس از اتمام، عمل اختلاط به مدت نیم ساعت ادامه می‌یابد. پس از پایداری دما، برای رقیق سازی مقدار ۱۰۰ میلی‌لیتر آب مقطر با احتیاط به ظرف اضافه شده و همزن خاموش می‌شود و ۳۰۰ میلی‌لیتر آب مقطر درون ظرف بزرگتری ریخته و محتوای ظرف اولیه به آرامی به ظرف بزرگتر انتقال می‌یابد و اختلاط به مدت نیم ساعت انجام می‌شود. بعد از رقیق سازی مخلوط با آب مقطر ۲۰میلی‌لیتر آب اکسیژنه ۳۰٪ به آرامی به ظرف اضافه و نیم ساعت اختلاط ادامه پیدا می‌کند. سپس شستشوی مخلوط به منظور حذف یون‌ها و افزایش PH توسط اسید کلریدریک ۱۰٪ و آب مقطر، با اضافه کردن به مخلوط و اختلاط به مدت یک ساعت انجام می‌گیرید. سپس ظرف، به مدت حدود ۴ ساعت در جای ساکن قرار می‌گیرد و مواد ته‌نشین شده صاف می‌گردد. سپس مخلوط در آون در دمای ۵۰ درجه سانتی‌گراد به مدت ۲ ساعت قرار داده می‌شود. پودر تشکیل شده اکسید گرافن می‌باشد[۸]. آزمایش‌های انجام شده در آزمایشگاه نانو فیزیک دانشگاه صنعتی شیراز انجام شده است.

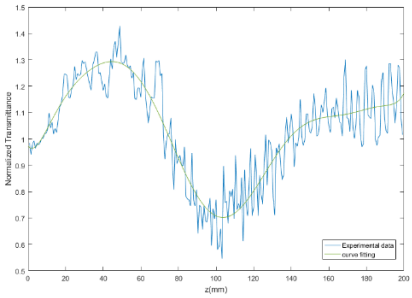
چیدمان روبش-Z که در شکل ۱ معرفی شده است روشی ساده و دقیق برای مشخص کردن ضریب شکست غیرخطی مرتبه سوم می باشد. لیزر به کار رفته یک لیزر Nd-YAG با طول موج ۵۳۲ نانو متر، فرکانس ۲۰۰ هرتز و پهنای باند ۱۰ نانو ثانیه است. در این روش پر تو لیزر توسط یک عدسی با فاصله کانونی مشخص (در این جا ۴ سانتی‌متر) متمرکز می‌شود و نمونه توسط یک جابجاگر با گام های مساوی و کوچک اطراف کانون جابجا می‌شود. شدت نور عبوری از نمونه در هر گام بر حسب موقعیت نمونه نسبت به کانون ثبت می‌گردد. از طریق این نمودار و روابط مربوط به روبش-Z که توسط دکتر شیخ بهایی بدست آمده است میتوان کمیت های غیرخطی نمونه را به دست آورد. روش روبش-Z از دو چیدمان تشکیل می‌شود. روش روبش-Z با دریچه بسته برای اندازه‌گیری ضریب شکست غیرخطی و روبش-Z با دریچه باز برای اندازه‌گیری ضریب‌جذب غیرخطی که آشکار ساز تمام توان خروجی از نمونه را جذب می‌کند. در این پژوهش پس از هم خط سازی و تنظیم المان‌های اپتیکی چیدمان آزمایش روبش-Z، آزمایش بر روی اکسید گرافن با دو غلظت مختلف، غلظت ۱ به ۱۰۰ میلی‌لیتر(۱۰۰ میلی‌لیتر آب) و ۱ به ۲۰۰ میلی‌لیتر(۲۰۰ میلی‌لیترآب) را برای دو توان ۱۰۰ و ۸۰ میلی وات انجام دادیم. پس از اضافه نمودن اکسید گرافن به آب، مخلوط به مدت ۲۰ دقیقه بوسیله همزن التراسونیک حمامی با فرکانس ۴۰ کیلوهرتز تحت امواج التراسونیک قرار می‌گیرد.



شکل ۱: چیدمان روش روبشz

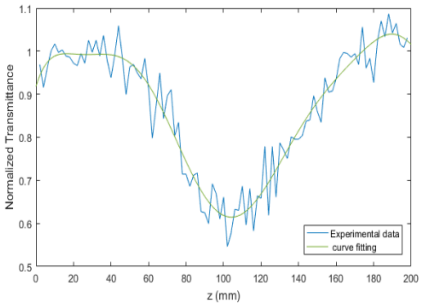
۳-نتایج و بحث

نمودار تراگسیلندگی بهنجار شده بر حسب Z برای حالت دریچه بسته در توان‌های ۸۰ و ۱۰۰ میلی وات برای هر دو غلظت نشان داده شده است.



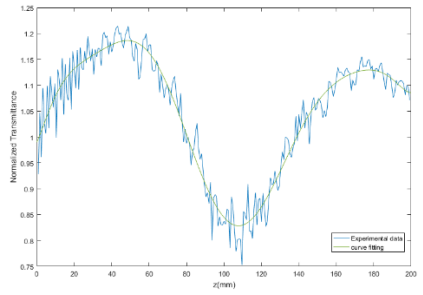
(الف)

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

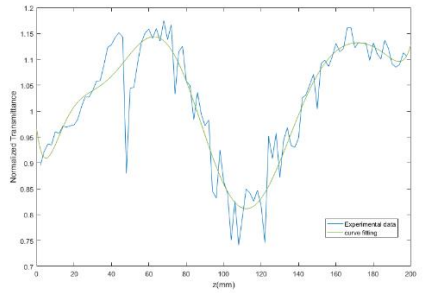


(ب)

شکل۲: نمودار روبش-Z دریچه بسته برای غلظت ۱ به ۱۰۰ میلی‌لیتر(الف) توان لیزری ۱۰۰ میلی وات (ب) توان لیزری ۸۰ میلی‌وات



(الف)



(ب)

شکل۳: نمودار روبش-Z دریچه بسته برای غلظت ۱ به ۲۰۰ میلی‌لیتر (الف) توان لیزری ۱۰۰ میلی وات (ب) توان لیزری ۸۰ میلی وات

برای محاسبه ضریب شکست غیر خطی از رابطه های(۱) و(۲) استفاده شده است.

$$\Delta T(p\text{-}v)=0.406(1-s)^{0.25}\ 2\pi/\lambda\ I_0\ L_{eff}\ n_2 \qquad (۱)$$

$$L_{eff}=(1-e^{(-\alpha_0\ l)})/\alpha_0 \qquad (۲)$$

l_{eff}ضخامت موثر نمونه، انداز sگذار خطی، λ طول موج نور فرودی می‌باشد. ω_0 شعاع کمر پرتو،$I_0=2P_0/(\pi\omega_0^2)$ P_0 توان پرتو، $\Delta T(p\text{-}v)$ اختلاف گذر دهی بهنجار شده قله و دره در شکل می‌باشد.

جدول۱: نتایج مربوط به آزمایش روبش-Z

غلظت	توان (mW)	n_2 cm^2/W
۱ به ۱۰۰ میلی‌لیتر	۱۰۰	۵.۳۷×10^{-7}
۱ به ۱۰۰ میلی‌لیتر	۸۰	۷.۲۱×10^{-7}
۱ به ۲۰۰ میلی‌لیتر	۱۰۰	۱.۲۹×10^{-8}
۱ به ۲۰۰ میلی‌لیتر	۸۰	۱.۸۷×10^{-8}

نتیجه‌گیری

فراوانی منابع گرافیت طبیعی، گرافن را به یک گزینه مناسب برای کاربردهای جدید تبدیل کرده است. در این مطالعه با استفاده از روش اصلاح شده هامرز پودر گرافیت به نانو صفحات اکسید گرافن تبدیل شد. ضریب شکست گرافن اکساید با استفاده از آزمایش روبش-Z در دو توان ۸۰ و۱۰۰ میلی وات برای دو غلظت بدست آمد و مشاهده شد که با افزایش توان لیزر ضریب شکست غیرخطی کاهش می یابد که این روند در تحقیق هانگ ژانگ و همکاران در سال ۲۰۱۲ نیز به چشم می‌خورد[۹].

مرجع‌ها

[۱] A. K. Geim, K. S. Novoselov," The rise of graphene", Nat. Mater., 6, 183, (2007)

[۲] R. Binder, "Optical properties of graphene", World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd.DOI: 10.1142-10255 (2017).

[۳] J. A. Baimova, E. A. Korznikova, S. V. Dmitriev, B. Liu, K. Zhou "Review on crumpled graphene: unique mechanical properties", Rev. Adv. Mater. S CI., 39, 69-83, (2014)

[۴] D. G. Papageorgiou, I. A. Kinloch, R. J. Young, "Mechanical properties of graphene and graphene-based nanocomposites", prog. Mater. Sci., 90, 75-127, (2017).

[۵] M. M. Heyhat; S. Kimiagar; N. Ghanbaryan Sani Gasem Abad; E. Feyzi, "Thermal conductivity of reduced graphene oxide by pulse laser in ethylene glycol", phys. Chem. Res., 4(3), 407-415, (2016).

[۶] M. Sheik-Bahae, A. A. Said, E. W. Van Styland", High-sensitivity, single-beam n2 measurements", Opt. Lett. 14, 955-957, (1989)

[۷] M. Sheikh-Bahae and A. A. Said, Wei, Tai-Huci, et al, IEE J. Quantum Electron. 26, 760-769, (1990).

[۸] Shao G., Lu Y., Wu F., Yang C., Zeng F. and Wu Q., "Graphene oxide:the mechanisms of oxidation and exfoliation" , J. Mater. Sci, 47, 4400-4409, (2012).

[۹] Han Zhang, S. Virally, Q. Bao, L.K. Ping, S. Massar, N. Godbout, P. Kockarcrt, Optics Letter, No.11, (2012).

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

اثر روش‌های تهیه روی ویژگی‌های ساختاری و ریخت‌شناسی نانوذرات پروسکایت $BiFeO_3$

آدینه، زهرا [۱]؛ قلی‌زاده، احمد [۱]

[۱] دانشکده فیزیک، دانشگاه دامغان، دامغان

چکیده

در این مقاله، نانوذرات چندفروئی ($BiFeO_3$ (BFO به دو روش هیدروترمال و سل ژل تهیه شده‌اند. ویژگی‌های ساختاری و مورفولوژی نمونه‌ها به‌وسیله پراش پرتو ایکس (XRD)، طیف‌سنجی تبدیل فوریه فروسرخ (FTIR) و میکروسکوپ الکترونی روبشی (SEM) در دمای اتاق بررسی شدند. بررسی ساختاری نشان می‌دهد که الگوهای XRD نمونه‌ها با یک ساختار لوزی‌رخ (گروه فضایی R3c) شاخص‌گذاری می‌شوند که به‌وسیله بررسی FTIR تایید می‌شود. همچنین بررسی XRD و تصاویر SEM نشان می‌دهند که نمونه تهیه شده با روش هیدروترمال یک فاز خالص با مقادیر اندازه بلورک و دانه کوچکتری را نسبت به نمونه‌های دیگر نشان می‌دهند.

واژه‌های کلیدی : *چند فروئی‌ها، فریت پروسکایت $BiFeO_3$*

Effect of preparation methods on structural and morphological properties of $BiFeO_3$ perovskite nanoparticles

Adineh, Zahra[1]; Gholizadeh, Ahmad[1]

[1] Department of Physics, University of Damghan, Damghan

Abstract

In this paper, $BiFeO_3$ (BFO) multiferroic nanoparticles were prepared using both hydrothermal and sol-gel methods. The samples were structurally and morphologically investigated by X-ray diffraction (XRD), scanning electron microscopy (SEM) and Fourier-transform infrared (FT-IR) spectroscopy at room temperature. The structural analysis showed that XRD patterns of the samples have been indexed by rhombohedral structure (R3c space group) which confirmed by FT-IR analysis. Also, XRD analysis and SEM images show that the sample prepared by hydrothermal method indicates a pure-phase BFO with smaller crystallite and particle sizes with respect to other samples.

Keywords: *Multiferroics; $BiFeO_3$; Sol-gel; Hydrothermal*
PACS No.(61)

مقدمه

امروزه بخش مهمی از فناوری جدید از ترکیب مواد الکترونیکی و مغناطیسی تشکیل شده است. در فناوری جدید روند کوچک‌سازی قطعات دنبال می‌شود و آن منجر به توجه و علاقه بیشتر به ترکیب خواص الکترونیکی و مغناطیسی و ساخت مواد چندفروئی شده است. مواد چندفروئی موادی هستند که در یک فاز بیش از یک نظم فروئی از خود نشان می‌دهند.از جمله پارامترهای مهم نظم فروئی می‌توان به فروالکتریک و فرومغناطیس اشاره کرد و از مهمترین کاربردهای این مواد استفاده از آنها در حسگرها، سوئیچ‌ها و دستگاه حافظه است [۱]. مهمترین ماده‌ای که در دمای اتاق ویژگی چندفروئی پیدا می‌کند فریت پروسکایت $BiFeO_3$ (BFO) است. این چندفروئی در فناوری‌هایی همچون ذخیره‌سازی داده‌ها، اسپینترونیک و دستگاه‌های اپتوالکترونیکی کاربرد دارد [۲]. BFO دارای دمای نیل پادفرومغناطیس $370^{\circ}C$ و دمای کوری فروالکتریک $830^{\circ}C$ است [۳]. این پروسکایت از مهمترین مواد چندفروئی تک فاز است که ویژگی مغناطیسی آن نتیجه برهمکنش تبادلی اسپینی اوربیتال نیمه پر d کاتیون Fe^{3+} است [۴]. در سال‌های اخیر از روش‌های متفاوتی همچون روش

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

سل-ژل و روش هیدروترمال برای ساخت نانوذرات پروسکایت تک فاز BFO استفاده شده است [۵]. از جمله مشکلات ساخت BFO در این روش‌ها تشکیل فازهای ثانویه‌ای همچون Fe_3O_4, $Bi_2Fe_4O_9$, Bi_2O_3, $Bi_{25}FeO_{40}$, $Bi_{24}Fe_2O_{39}$ است. در این پژوهش از دو روش سل‌ژل و هیدروترمال برای ساخت نانوذرات BFO استفاده شد و سعی شد تا علاوه بر مقایسه، در این دو نوع روش ساخت این مشکل را به حداقل برسانیم.

روش آزمایش

برای ساخت نانوذرات BFO به سه روش مختلف ابتدا هر کدام از از مواد اولیه نیترات بیسموت$Bi(NO_3)_3{\cdot}5H_2O$ و نیترات آهن $Fe(NO_3)_3{\cdot}9H_2O$ و باز هیدروکسید پتاسیم (KOH) و اسید سیتریک$(C_6H_8O_7)$ مطابق با نسبت‌های مولی جدول ۱ به طور جداگانه توسط همزن مغناطیسی در آب دو بار یونیزه شده حل شده و به عنوان مواد اولیه استفاده شدند.

برای ساخت نمونه BFO به روش سل-ژل مطابق با کارهای قبلی‌امان در ابتدا پارامترهای اولیه ساخت نظیر مقدار دمای گرمادهی و نسبت مولی سیترات به نیترات بهینه شدند و شرایط زیر انتخاب شدند. ازآنجایی که در ساخت نمونه‌های فریت بیسموت فاز ناخالصی اکسید بیسموت ظاهر می‌شود در ساخت ۰٫۵ گرم فریت بیسموت به روش اول سل-ژل $BFO\text{-}C6$، از محلول نمک نیترات بیسموت و نیترات آهن به نسبت ۰٫۶ مول و همچنین اسید سیتریک استفاده شد. همچنین در روش دوم سل-ژل $BFO\text{-}C10$، از محلول نمک نیترات بیسموت و نیترات آهن به نسبت یک مول و همچنین اسید سیتریک استفاده شد. محلول‌های بدست آمده به دو روش بالا را داخل حمام آب در دمای ۷۰ $^{\circ}C$ قرار داده و از همزن مغناطیسی تا زمانی استفاده کردیم که ژل تشکیل شود. سپس آن را به مدت ۱۰ ساعت در دمای ۱۸۰ $^{\circ}C$ داخل آون قرار دادیم و در نهایت برای تشکیل ساختار فریت بیسموت، پودر مورد نظر به مدت ۳ ساعت در دمای ۶۰۰ $^{\circ}C$ کلسینه شدند.

برای ساخت نمونه $BFO\text{-}H$ در روش هیدروترمال در ابتدا پارامترهای اولیه ساخت نظیر مقدار دما و زمان گرمادهی اتوکلاو و مول KOH بهینه شدند که در اینجا آورده نشده‌اند و شرط بهینه زیر انتخاب شد. مقدار معین نیترات بیسموت و نیترات آهن بر طبق جدول ۱ را با یکدیگر ترکیب کرده و و مقدار gr ۴۲ باز هیدروکسید پتاسیم را به این ترکیب به صورت قطره‌ای اضافه نموده و توسط همزن مغناطیسی آن را هم‌زدیم تا حل شدند. سپس آن را داخل اتوکلاو ریخته و به مدت ۶ ساعت در دمای ۱۸۰ $^{\circ}C$ داخل آون قرار دادیم. پس از آن ترکیب موردنظر را با آب دو بار یونیزه شده شستشو داده و صاف کرده و به مدت ۳ ساعت برای خشک شدن داخل آون در دمای ۱۱۰ $^{\circ}C$ قرار دادیم.

الگوهای پراش پرتو ایکس (XRD) نمونه‌ها با استفاده از پراش‌سنج $PAnalytical\ (Philips)$ مدل $X'Pert\ Pro\ PW\ 3040/60$ مجهز به منبع $Cu\text{-}K\alpha$ با تابش به طول‌موج ۱٫۵۴۳۸ Å و فیلتر نیکل در گستره‌ی زاویه 2θ = ۲۰-۸۰° و در دمای اتاق ثبت شد. طیف فروسرخ نمونه‌ها با دستگاه $FT\text{-}IR$ پرکین- المر مدل آر ایکس آی، در ناحیه عدد موجی ۱۰۰۰ - ۴۰۰ cm^{-1} از قرص تمام نمونه‌ها با افزودن مقدار کافی از نمونه به KBr و اعمال فشار ۱۰ تن توسط دستگاه پرس ثبت شد. تصاویر مربوط به ویژگی‌های سطحی و آنالیز عنصری نمونه‌های مورد مطالعه با استفاده از دستگاه میکروسکوپ الکترونی روبشی (SEM) شرکت $TESCAN$ واقع در آزمایشگاه علوم پزشکی مشهد تهیه شدند.

بحث و نتایج

شکل ۱ الگوهای XRD مربوط به (الف) $BFO\text{-}C6$، (ب) $BFO\text{-}C10$ و (پ) $BFO\text{-}H$ است که در هر سه روش، حضور قله‌های اصلی فاز فریت بیسموت با کد استاندارد $01\text{-}086\text{-}1518$ (قسمت ت) مطابقت دارند. همچنین با توجه به نتایج XRD نمونه‌ها مشاهده شد که در نمونه $BFO\text{-}H$ تهیه شده به روش هیدروترمال فاز خالص پروسکایت فریت بیسموت تشکیل شده است.

به‌طورکلی، رابطه بین فاصله صفحه‌ایی با شاخص‌های میلر (hkl) برای سیستم شش‌گوشی و شرایط براگ به شرح زیر است.

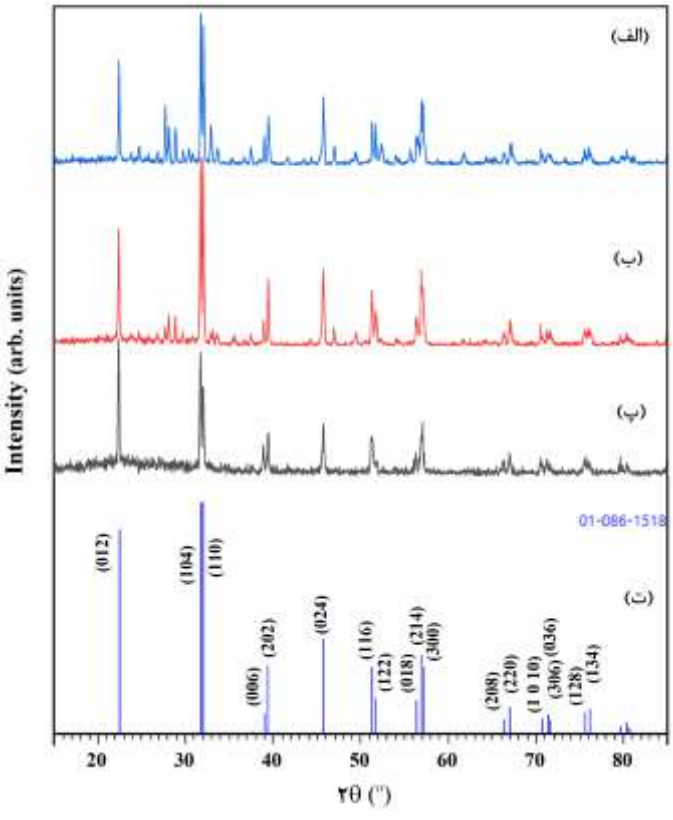
$$\frac{4Sin^2\theta}{\lambda^2}=\frac{1}{d^2}=\frac{4}{3}\frac{h^2+hk+k^2}{a^2}+\frac{l^2}{c^2} \qquad (1)$$

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

برای همه نمونه‌ها، پارامترهای شبکه a و c به ترتیب از مکان زاویه‌ای (θ) قلّه‌های پراشی (۱۱۰) و (۱۰۴) محاسبه شدند که مقادیر در جدول ۱ آورده شده‌اند.

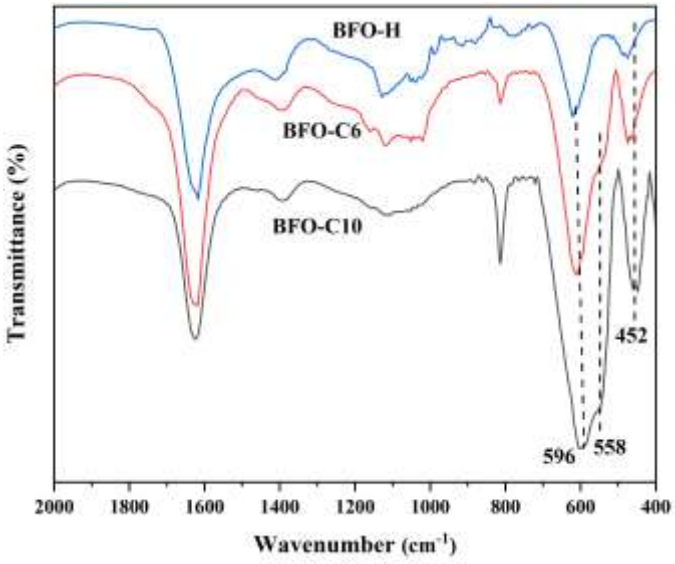
جدول ۱ مقادیر نسبت‌های مولی مواد اولیه برای ساخت نمونه‌ها، پارامترهای شبکه a و c شش‌گوشی و اندازه بلورک.

نمونه	*BFO-C6*	*BFO-C10*	*BFO-H*
$Bi(NO_3)_3{\cdot}5H_2O$	۰٫۰۰۱۹۲	۰٫۰۰۳۲	۰٫۰۰۵
$Fe(NO_3)_3{\cdot}9H_2O$	۰٫۰۰۳۲	۰٫۰۰۳۲	۰٫۰۰۵
KOH	---	---	۸
$C_6H_8O_7$	۰٫۰۰۶۴	۰٫۰۰۶۴	---
$a_H = b_H$ (Å)	۵٫۵۷۸۰	۵٫۵۷۸۴	۵٫۵۸۴۹
c_H (Å)	۱۳٫۸۶۴۲	۱۳٫۸۶۵۲	۱۳٫۸۷۹۱
اندازه بلورک *(nm)*	۷۰٫۵	۶۰٫۵	۴۹٫۸



شکل ۱ الگوی *XRD* (الف) *BFO-C6* (ب) *BFO-C10* (پ) *BFO-H* (ت) نمونه مرجع *01-086-1518* پروسکایت لوزی‌رخ *BFO*.

مقادیر اندازه بلورک‌های محاسبه شده از مکان ونیم‌پهنای قله‌های مشاهده شده در زاویه حوالی ^{o} ۲۲ با استفاده از رابطه شرر در جدول آورده شده‌اند. مشخص است که در روش هیدروترمال اندازه بلورک کوچکتری نسبت به روش سل ژل به دست می‌آید.

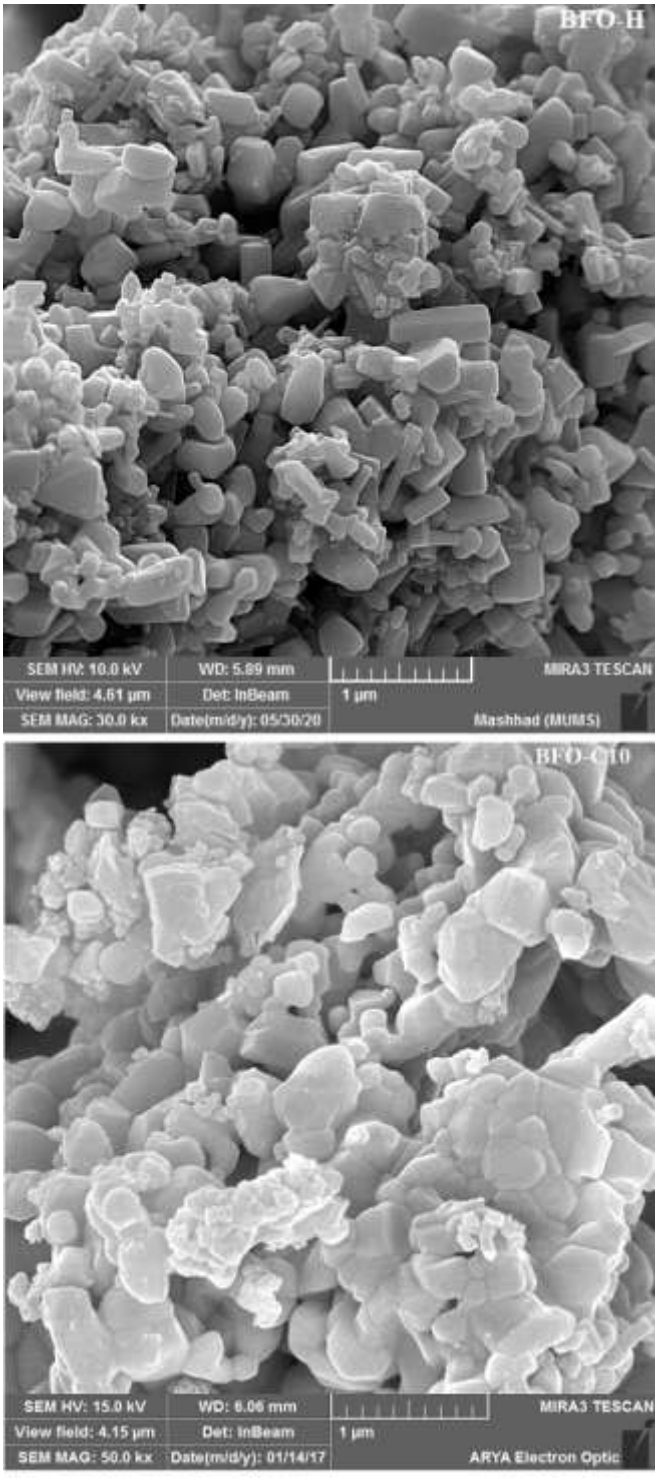


شکل ۲ طیف *FT-IR* نمونه‌ها.

در شکل ۲ طیف *FT-IR* مربوط به تمامی نمونه‌ها در گستره‌ی cm^{-1} ۲۰۰۰–۴۰۰ نشان داده شده است که با مرجع [۶] مطابقت دارد. قله جذب قوی در اطراف cm^{-1} ۵۹۶ مربوط به ارتعاشات کششی ذاتی اکسیژن–فلز در جایگاه هشت‌وجهی و قله جذبی ضعیف‌تر در حوالی عدد موج cm^{-1} ۴۵۲ متناظر با ارتعاشات خمشی نامتقارن آهن–اکسیژن که از ویژگی‌های هشت‌وجهی گروه FeO_6 در ساختار پروسکایت است وجود دارند. حضور این بسامدهای جذبی در تطابق با نتایج بدست آمده از بررسی‌های ساختاری، تشکیل ساختار فریت پروسکایت را تایید می‌کند. باید توجه داشت که قله جذبی ظاهرشده به‌صورت شانه در حوالی عدد موج cm^{-1} ۵۵۸ مربوط به ساختار لوزی‌رخ با تقارن پایین‌تر است که فقط در نمونه تهیه شده به روش هیدروترمال مشاهده نشده است. همچنین قلّه جذبی قوی دیگری در حوالی cm^{-1} ۱۶۱۸ نیز وجود دارد که مربوط به ارتعاشات CO_3^{-2} است.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

شکل ۳ تصاویر *SEM* دو نمونه *BFO-C10* و *BFO-H* را در مقیاس نانومتر نشان می‌دهد. همانطوری که از نتایج اندازه بلورک مشاهده کردیم روش هیدروترمال منجر به ساخت نانوذرات ریزتر *BFO* نسبت به روش سل–ژل می‌شود.



شکل ۲ تصویر *SEM* دو نمونه *BFO-C10* و *BFO-H* .

نتیجه‌گیری

در این پژوهش فریت پروسکایت $BiFeO_3$ با دو روش هیدروترمال و سل ژل و روش سل ژل نیز به ازای دو مقدار مول متفاوت بیسموت ساخته شده است. نتایج به دست آمده با استفاده از اندازه‌گیری‌های *XRD* و *FT-IR* صحت ساخت این ماده را تایید می‌کند. با استفاده از آنالیز *XRD* مشخص شده است که ساختار بلوری تمامی نمونه‌ها لوزی رخ با گروه فضایی *R3c* است. همچنین نتایج *XRD* و *SEM* نشان می‌دهد که تنها روش هیدروترمال منجر به ساخت فاز خالص *BFO* با نانوذرات ریزتر شده است.

مرجع‌ها

[۱] de Sousa, Rogerio, and Joel E. Moore. "Multiferroic materials for spin-based logic devices." *Journal of nanoelectronics and optoelectronics* 3.1 (2008): 77-81.

[۲] Zhu, Jingbin, et al. "Epitaxial integration of tetragonal BiFeO3 with silicon for nonvolatile memory applications." *Journal of Crystal Growth* 459 (2017): 178-184.

[۳] Catalan, Gustau, and James F. Scott. "Physics and applications of bismuth ferrite." *Advanced materials* 21.24 (2009): 2463-2485.

[۴] Wei, Wei, et al. "The magnetoelectric coupling in rhombohedral–tetragonal phases coexisted Bi0.84Ba0.20FeO3." *Physica B: Condensed Matter* 407.12 (2012): 2243-2246.

[۵] Mao, Weiwei, et al. "Combined experimental and theoretical investigation on modulation of multiferroic properties in BiFeO3 ceramics induced by Dy and transition metals co-doping." *Journal of Alloys and Compounds* 784 (2019): 117-124.

[۶] Biasotto, G., et al. "Microwave-hydrothermal synthesis of perovskite bismuth ferrite nanoparticles." *Materials Research Bulletin* 46.12 (2011): 2543-2547.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بررسی تغییرات ضرایب باری موثر چهار قطبی برای زنجیره های ایزوتوپی Gd و Dy

مختاری، فاطمه[۱] ؛ صبری، هادی[۲]

[۱] گروه فیزیک، دانشگاه پیام نور مرکز تحصیلات تکمیلی، تهران

[۲] دانشکده فیزیک، دانشگاه تبریز، تبریز

چکیده

وابستگی اساسی ضرایب باری موثر به ویژگی های ساختاری هسته های مختلف را می توان برای بررسی پدیده گذار فازی – شکلی هسته ای به کار برد. با استفاده از مدل برهمکنش بوزونی، احتمال های گذار چهار قطبی الکتریکی بین ترازهای مختلف هسته های دو زنجیره ایزوتوپی Gd و Dy، را محاسبه و در مقایسه با مقادیر تجربی متناظر، ضرایب باری موثر چهار قطبی تعیین گردید. نتایج حاصل مدل تئوری برای احتمال گذارهای مختلف، انطباق قابل قبولی را با مقادیر تجربی نشان می دهد. همچنین تغییرات ضرایب باری موثر برای هسته های ناحیه گذار فازی شکلی هسته ای قابل توجه تر می باشد.

واژه های کلیدی: *مدل بر همکنش بوزونی، گذار فازی – شکلی هسته ای، احتمال گذار چهار قطبی الکتریکی، ضرایب باری موثر.*

Investigation of quadruple effective boson charge for Gd and Dy isotopic chains

Mokhtari, Fatemeh[1]; Sabri, Hadi[2]

[1] Department of Physics, Payame Noor University, Tehran, Iran,
[2] Department of Physics, University of Tabriz, Tabriz, Iran

Abstract

The fundamental dependence of effective charge coefficients on the structural properties of different nuclei can be used to investigation shape-phase transition phenomena. Using the interacting boson model, the electric quadruple transition probabilities between the different levels of the Gd and Dy isotopic chains were calculated and compared to the corresponding experimental values, the quadruple effective charge coefficients were determined. the results of the theoretical model for the different transition probabilities show acceptable adjustment with experimental values. Also, the changes of effective charge coefficients for the phase-shape transition region nuclei are more significant.

***Keywords**: Interacting Boson Model (IBM), Quantum shape-phase transition (QPT), Electric quadruple transition rate, effective boson charge.*

PACS No. 21

مقدمه

پدیده گذار فازی-شکلی هسته ای[۱] که گذار فاز حالت پایه یا دمای صفر هم نامیده می‌شود، یکی از موضوعات قابل توجه در مطالعات سالیان اخیر بوده است. روش های مختلف برای بررسی این پدیده و همچنین رابطه آن با سایر مشاهده پذیرهای حساس به ساختار هسته معرفی شده است[۱-۲]. برای مطالعه این پدیده روش های مختلفیدر قالب مدل های هسته ای پیشنهاد شده است که مدل های منطبق بر روش‌های جبری کاربرد گسترده تری دارند. این روش ها همراه با تقارن‌های ریاضی خاص، تغییر شکل‌های هسته‌ای یا همان گذار بین حدود تقارنی مختلف را با تغییر پارامترهای ساده توصیف می نماید. مدل بر همکنش بوزونی[۲]، به عنوان یکی از پرکاربرد ترین مدل های جبری، توسط یاکلو و آریما در سال ۱۹۷۵ برای توصیف برانگیختگی‌های جمعی هسته‌های

[۱] Quantum phase transition (QPT)

[۲] Interacting boson model (IBM)

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

اتمی، ارائه شد. در این مدل نوکلئون ها در ایزوتوپ‌های زوج-زوج، به صورت یک هسته‌ی ساکن و تعداد زوجی از ذرات ظرفیتی در نظر گرفته می شود. ذرات بیرون لایه بسته، به صورت دو نوع بوزون، با تکانه‌های زاویه‌ای ۰ و ۲، به ترتیب s و d بوزون، فرض می‌شوند. عملگرهای خلق و فنای بوزونی تشکیل جبر U(6) با سه زنجیره‌ی زیرگروهی، منطبق با تقارن های U(5) ، SU(3) و SO(6) می‌دهند که جواب های هامیلتونین بوهر بوده و به ترتیب دارای شکل‌های کروی، تغییرشکل یافته‌ی محوری و گامای ناپایدار هستند[۳-۴].

گذارهای الکترومغناطیسی مراتب مختلف در هسته ها به دلیل اندرکنش های صورت گرفته بین میدان های الکترومغناطیسی هسته ای و گشتاور های ذاتی نوکلئون ها قابل بررسی می باشد. احتمال این گذارها با دقت قابل قبولی توسط روش های تجربی تعیین شده و لذا محاسبه این احتمالات در قالب مدل های مختلف، امکان ارزیابی توانایی مدل ها و همچنین عملگرهای متناظر را فراهم می سازد. گذارهای چهار قطبی الکتریکی، E2، معمول ترین گذار مورد مطالعه در ساختار سیستم های هسته ای می باشد که این مسئله ناشی از اطلاعات تجربی قابل توجه در خصوص این گذار می باشد. احتمالات گذار و سایر کمیات متناسب با نرخ گذار های مختلف همچون میزان تغییر شکل، نیمه عمر های موثر و غیره، کمیات حساس به ساختار هسته ها بوده و لذا می توان در ناحیه گذار فازی – شکلی هسته ای مورد ارزیابی قرار گیرند[۵-۶].

در این مطالعه، احتمال گذار چهار قطبی الکتریکی برای دو زنجیره ایزوتوپی Gd و Dy که در ناحیه گذار فازی – شکلی هسته ای بین حدود U(5) و SO(6) می باشند، تعیین شده است. تغییرات ضرایب باری موثر چهار قطبی برای این هسته ها بررسی شده و رابطه آن با پدیده گذار فازی- شکلی هسته ای ارزیابی شده است.

روش کار :

مدل بر همکنش بوزونی، پرکاربردترین مدل جبری برای بررسی ترازهای انرژی و همچنین نرخ گذارهای مراتب مختلف الکترومغناطیس سیستم های هسته ای در محدوده انرژی های پایین (≤ ۳ MeV) می باشد. در ساده ترین نوع این مدل، IBM-1، تفاوتی بین پروتون و نوترون قائل نشده و ذرات بیرون لایه بسته، به صورت دو نوع بوزون با تکانه‌های زاویه‌ای ۰ و ۲، به‌ترتیب s و d بوزون، فرض می‌شوند. فضای جبری این مدل با در نظر گرفتن زیر فضای دو عملگر بوزونی، U(6) می باشد. برای توصیف حالت های مختلف هر هسته بر اساس حد دینامیکی خاص، از مجموعه اعداد کوانتومی متناظر با گروه های تقارنی آن حد دینامیکی استفاده می شود.

مطالعات گسترده در سالیان اخیر نشان می دهد که قسمت عمده هسته های شناخته شده به طور کامل در یک حد دینامیکی قرار نگرفته و رفتار بینابینی از خود نشان می دهند. حد دینامیکی E(5) برای توصیف گذار بین دو حد U(5) و SO(6) و همچنین حد دینامیکی X(5) برای توصیف گذار بین دو حد U(5) و SU(3) مورد استفاده قرار می گیرند. تغییرات ترازهای انرژی و به تبع آن کمیات حساس به ترازها از جمله، نرخ گذارهای الکترومغناطیس را می توان برای تعیین پدیده گذار فازی – شکلی هسته ای مورد استفاده قرار داد. هر دو زنجیره ایزوتوپی Gd و Dy به دلیل قرار گرفتن در بین دو لایه بسته ۸۲ و ۵۰ = z ، نشانه هائی از گذار فازی – شکلی مرتبه دوم، یعنی متناسب با حد دینامیکی E(۵) را از خود نمایش می دهند (دلیل این امر را با تغییرات مقادیر نسبت ترازهای انرژی، $R_{4/2}=\frac{E\ 4_1^+}{E\ 2_1^+}$، می توان توجیه نمود [۱]).

احتمال های گذار الکتریکی، B(Eλ)، یا مغناطیسی B(Mλ)، کمیات حساس به ساختار هسته می باشند. با توجه به اطلاعات تجربی قابل قبول پیرامون این دسته از کمیات، مطالعه نرخ گذارهای مختلف بین ترازهای هسته ای، معیاری برای بررسی توانائی مدل های مختلف در پیش بینی ویژه حالات و همچنین عملگر گذار می باشد. گذارهای چهار قطبی الکتریکی به دلیل احتمال روی دادن بیشتر نسبت به سایر مدهای گذار و همچنین اطلاعات تجربی کامل تر، اولین گزینه برای بررسی می باشند.

عملگر گذار چهار قطبی الکتریکی در مدل بر همکنش بوزونی به صورت [۵]

$$\hat{T}_\mu^{(E2)}=\alpha_2\left([\hat{d}^\dagger\times\tilde{s}+\hat{s}^\dagger\times\tilde{d}]_\mu^{(2)}+\beta_2[\hat{d}^\dagger\times\tilde{d}]_\mu^{(2)}\right)\quad (۱)$$

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

تعریف می شود. که α ضریب بار موثر چهارقطبی وβ یک ضریب بدون بعد می‌باشد. همچنین $s^{\dagger}$ $d^{\dagger}$عملگرهای خلق بوزون $s(d)$ هستند. احتمال گذارچهارقطبی الکتریکی کاهش یافته بین حالات $I_i \to I_f$ با فرمول [۵-۶]

$$B(E2;I_i \to I_f) = \frac{\left|\langle I_f \| T(E2) \| I_i \rangle\right|^2}{2I_i + 1} \quad , \qquad (2)$$

تعیین می‌شود. در محاسبه این کمیت، ابتدا ویژه حالات مختلف هسته انتخابی با استفاده از اعداد کوانتومی زنجیره تقارنی برچسب خورده و سپس اثر عملگر گذار چهار قطبی الکتریکی، رابطه ۱، بر روی آن تعیین می شود. فرم ویژه تابع برای حدود تقارن دینامیکی U(5)، SU(3) و O(6) به ترتیب برابر $|N, n_d, \tau, L\rangle$، $|N, \sigma, \tau, n_\Delta, L\rangle$ و $|N, (\lambda,\mu), K, L\rangle$ می باشد. در این مقاله ما از معنای ترکیب هامیلتونین ها یا ترکیب دو حد تقارنی استفاده ننمودیم. در مقابل به دلیل مطالعه آن دسته از گذارهای صورت گرفته در]ن دسته از حالات سیستم با انرژی های پایین و انطباق ویژگی های تقارنی بر رفتار هسته های کروی در این انرژی ها، از حد دینامیکی U(5) برای برچسب زنی استفاده نمودیم [۱]. با تاثیر عملگرهای خلق و نابودی بوزون واقع در رابطه ۱، مقدار احتمال های گذار را به دست می آوریم. سپس این فرایند برای تمام گذارهای چهار قطبی الکتریکی که مقدار تجربی آن معلوم می باشد تکرار شده و در نهایت با استفاده از برنامه MATLAB و فرایند برازش، ثابت های α_2 و β_2 تعیین می شود.

نتایج :

در این مطالعه، زنجیره ایزوتوپی Gd و Dy در ناحیه گذار فازی – شکلی هسته ای بین حدود مورد بررسی قرار گرفت. هدف این مطالعه بررسی تغییرات ضریب موثر باری برای هسته های مختلف این دو زنجیره می باشد. بدین منظور ابتدا با استفاده از مفاهیم مدل بوزون برهمکنشی، تمام حالات دارای گذار چهار قطبی الکتریکی در این هسته ها، که مقدار تجربی نرخ گذار برای آنها گزارش شده است، بر اساس اعداد کوانتومی حد دینامیکی U(5) برچسب خورد. سپس با اثر عملگر گذار چهار قطبی الکتریکی، رابطه ۱، و همچنین قضیه ویگنر – اکارت، ویژه مقادیر اپراتورهای این گذار تعیین شد. سپس با مقایسه روابط حاصل و مقادیر تجربی موجود[۶]، ثابت های برازش، یعنی ضریب موثر باری چهار قطبی α_2 و همچنین ضریب بدون بعد β_2، تعیین شد. نتایج حاصل برای این دو ضریب در هسته های مختلف زنجیره های ایزوتوپی انتخابی در جدول های ۱ و ۲ فهرست شده است.

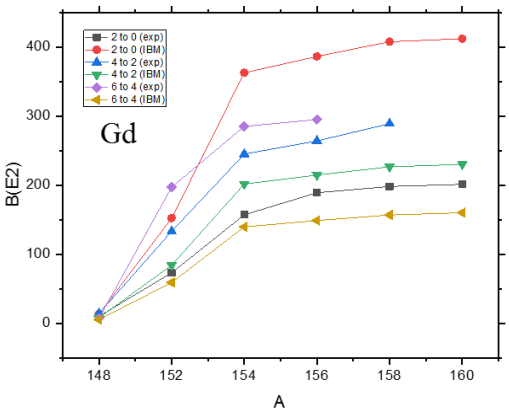
جدول شماره ۱. ضریب باری موثر چهار قطبیα_2 (بر حسب e^2b) و همچنین ضریب بدون بعد β_2 برای زنجیره ایزوتوپی Cd.

هسته	α_2	β_2
$^{148}_{64}Gd$	0.005	-0.301
$^{150}_{64}Gd$	–	–
$^{152}_{64}Gd$	0.04	-0.425
$^{154}_{64}Gd$	0.044	-0.706
$^{156}_{64}Gd$	0.163	-0.724
$^{158}_{64}Gd$	0.063	-0.592
$^{160}_{64}Gd$	0.065	-0.651

جدول شماره ۲. مشابه جدول ۱ برای زنجیره ایزوتوپی Dy.

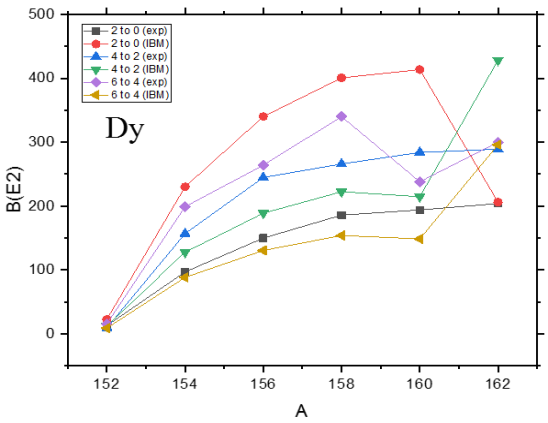
هسته	α_2	β_2
$^{152}_{66}Dy$	0.043	-0.739
$^{154}_{66}Dy$	0.001	-0.314
$^{156}_{66}Dy$	0.125	-0.833
$^{158}_{66}Dy$	0.046	-0.691
$^{160}_{66}Dy$	0.091	-0.541
$^{162}_{66}Dy$	0.103	-0.667

همچنین نتایج تئوری حاصل از مدل برهمکنش بوزونی با استفاده از این ضرایب برای احتمال گذارهای چهار قطبی الکتریکی مختلف و مقایسه آن با نتایج تجربی در شکل های ۱ و ۲ برای زنجیره های ایزوتوپی Gd و Dy ارائه شده است.



: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

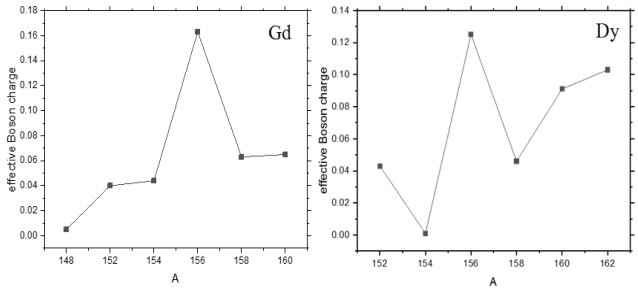
شکل ۱. مقایسه نتایج مدل IBM و مقادیر تجربی برای گذار های چهار قطبی الکتریکی مختلف زنجیره ایزوتوپی Gd. نتایج در واحد eb^2 بیان شده است.



شکل ۲. مقایسه نتایج مدل *IBM* و مقادیر تجربی برای گذار های چهار قطبی الکتریکی مختلف زنجیره ایزوتوپی Dy. نتایج در واحد eb^2 بیان شده است.

نتایج حاصل در شکل های ۱ و ۲ انطباق مناسبی را بین نتایج مدل انتخابی و مقادیر تجربی نمایش می دهد. این نتیجه علاوه بر تایید صحت فرایند برازش، انتخاب صحیح اعداد کوانتومی برای حالات مختلف را تایید می کند. علیرغم پارهای اختلافات در دسته ای از گذارهای مطالعه شده بخصوص گذار $4_1^+ \rightarrow 2_1^+$ در زنجیره ایزوتوپی Gd و همچنین گذارهای $2_1^+ \rightarrow 0_1^+$ در زنجیره ایزوتوپی Dy، تغییرات رفتاری در ایزوتوپ های مختلف در نتایج تئوری نیز دیده می شود. این اختلافات را می توان به عنوان نشانه ای از ترکیب تقارن ها و لزوم استفاده از هامیلتونین های ترکیبی ارزیابی نمود.

در ادامه و در شکل ۳، تغییرات ضرایب باری موثر چهار قطبی را برای هسته های مختلف این دو زنجیره نمایش داده ایم.



شکل۳. تغییرات ضرایب بار موثر چهار قطبی برای دو زنجیره ایزوتوپی Gd و Dy.

نتایج حاصل را میتوان بر پایه پدیده همزیستی شکلی و ترکیب تقارن ها در هسته های مختلف توصیف نمود. بر این اساس تغییرات قابل توجه برای آن دسته از هسته هائی هستند که ترکیب تقارن ها در ترازهای مختلف آنها گزارش شده است[۷-۸] .

نتیجه گیری

در این مطالعه تغییرات ضرایب باری موثر چهار قطبی برای زنجیره های ایزوتوپی Gd و Dy در ناحیه گذار فازی – شکلی هسته ای بررسی شده است. ضرایب باری موثر چهار قطبی هسته ها با استفاده از برچسب زنی حالت ها و محاسبه مقدار چشمداشتی در قالب مدل برهمکنش بوزونی محاسبه گردید. نتایج تئوری حاصل از مدل برهمکنش بوزونی با استفاده از این ضرایب انطباق قابل قبولی را با مقادیر تجربی نشان می دهد. تغییرات ضرایب باری موثر برای هسته های ناحیه گذار فازی شکلی هسته ای قابل توجه تر می باشد. وابستگی اساسی ضرایب باری موثر به ویژگی های ساختاری هسته های مختلف را می توان برای بررسی پدیده های مشابه و ترکیب تقارن ها به کار برد.

مرجع‌ها

[1] F. Iachello and A. Arima, The Interacting Boson Model (Cambridge University Press, Cambridge, England, ۱۹۸۷).

[2] J.P. Feng Pan, Draayer, New algebraic solutions for SO(6) ↔ U(5) transitional nuclei in the interacting boson model, Nucl.Phys. A. ۶۳۶, ۱۵۶ (۱۹۹۸).

[3] R.F. Casten, D.D. Warner, The interacting Boson Approximation, Rev. Mod. Phys. ۶۰, ۳۸۹ (۱۹۸۸).

[4] G L Long, W L Zhang, H Y Ji, J F Gao, Generalized Michailov plot analysis of in-band E2 transitions of deformed nuclei, J. Phys. G: Nucl. Part. Phys. ۲۴, ۲۱۳۳ (۱۹۹۸).

[5](http://www.nndc.bnl.gov/chart/reColor.jsp?newColor=dm).

[6] H. Sabri Z.Jahangiri, M.A.Mohammadi , Investigation of shape coexistence in 118–128Te isotopes, Nucl.Phys. A. 946, 11 (2016).

[7] V. Werner et al, Deformation crossing near the first order shape-phase transition in $^{152-156}$Gd, phys. rev. c, 78, 051303 (2008).

[8]. J. B. Gupta et al, Nuclear structure of 158, 160 Dy in the dynamic pairing-plus-quadrupole model and the shape phase transitions in $^{154-160}$Dy, Nucl. Phys. A, 542, 429 (1992).

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

برهم‌کنش لیزر KrF با غشاء متقارن و نامتقارن پلی‌اترسولفون: اثر لیزری روی مورفولوژی، شیمی و آبدوستی سطح

آرزو ترابی[۱]، محمود ملاباشی[۱]، صالحه بهشتی پور[۲]، محسن منتظرالقائم[۲]، هدیه پازکیان[۲]

[۱]دانشکده فیزیک، دانشگاه علم و صنعت ایران، تهران، ایران

[۲]پژوهشگاه علوم و فنون هسته ای، پژوهشکده فوتونیک و فناوری های کوانتومی، تهران، ایران

E-mail: hpazokian@aeoi.org.ir

چکیده

در این مقاله، به بررسی اثر لیزر KrF بر ساختار سطحی و مورفولوژی، شیمی و آبدوستی غشاء پلیمری پلی‌اترسولفون در دو ساختار نامتقارن و متقارن و در حضور ماده شیمیایی PVP و بدون حضور آن در شاریدگی زیر آستانه کندگی پرداخته شده است. نتایج بدست آمده نشان می‌دهد که با تغییر تعداد پالس‌های لیزری و نیز ساختار غشاء (متقارن و نامتقارن) و نیز مواد افزودنی همچون PVP، می‌توان حفره‌های کنترل‌شده و نانوساختار بر روی سطح ایجاد کرد. تغییرات به وجود آمده بر روی سطح غشاء، بر روی آبدوستی یا آبگریزی آن موثر هستند که می‌توان سطح غشاء را برای کاربردهایی چون میکروفیلتراسیون ذرات گوناگون، کشت انواع سلول‌های زیستی و خون‌سازگاری بهینه کرد.

کلیدواژه: آبدوستی، برهم‌کنش لیزر با غشاء پلی‌اترسولفون، لیزر کریپتون فلوراید، مورفولوژی

KrF Laser interaction with Symmetric and Asymmetric polyethersulfone Membrane: Effect of Laser on Morphology, Chemistry and Surface hydrophilicity

Arezou Torabi[1], Mahmoud Mollabashi[1], Saleheh Beheshtipour[2], Mohsen Montazeralghaem[2], Hedieh Pazokian[2]

[1] Department of Physics, Iran University of Science and Technology, Tehran
[2] Photonics and Quantum Technologies Research School, NSTRI, Tehran, Iran

Abstract

In this paper, effect of KrF laser irradiation on the morphology, chemistry and hydrophilicity of the asymmetric and symmetric polyethersulfone polymer membrane at the presence/absence of the chemical PVP at the laser fluence below the ablation threshold is investigated. The results show that by changing the number of laser pulses, the membrane structure (symmetric/asymmetric) as well as chemical additives such as PVP, well defined holes and nanostructures are formed on the surface. These changes affect the membrane hydrophilicity, which could be optimized for different applications such as microfiltration of various particles, culturing of biological cells, and Blood compatibility.

***Keywords**: Hydrophilicity, KrF Laser, polyethersulfone Membrane, Morphology*

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مقدمه

امروزه ایجاد و کنترل ساختارهای سطحی و تغییر در ویژگی‌های زیست‌سازگاری غشاءهای پلیمری با بهره‌گیری از پالس‌های لیزری، کاربردهای زیادی در حوزه‌های گوناگون دارد. اصلاح سطح غشاءهای پلیمری، باعث افزایش عملکرد غشاءها از جمله انتخاب‌پذیری و آبدوستی آن‌ها می‌شود. در این میان، غشاء پلی‌اترسولفون (PES) کاربردهای فراوانی در فیلترهای جداسازی در گازها، فیلترهای همودیالیز و کشت سلول دارد[۱] . برای بهبود آبدوستی این پلیمر، علاوه بر افزودن مواد شیمیایی همچون پلیمر پلی‌وینیل‌پیرولیدون(PVP)، می‌توان از تابش لیزر بهره گرفت. از آن‌جا که اندازه، تعداد و توزیع حفره‌های سطح غشاء پارامترهای مهمی در فرایند جداسازی به کمک فیلترهای مبتنی بر غشاهای پلیمری هستند[۲]، با تغییر پارامترهای تابش لیزری و همچنین تغییر در ساختار غشاء می‌توان شرایط کاملا کنترل شده‌ای برای تعیین اندازه و تعداد حفره‌های روی سطح ایجاد کرد. پژوهش‌های گوناگونی در این زمینه صورت گرفته است. اما در این میان تاکنون به بررسی همزمان تابش لیزر بر روی ساختارهای متقارن و نامتقارن غشاهای PES با وجود ماده افزودنی PVP و بدون آن، پرداخته نشده است. بدین منظور، در این پژوهش اثر لیزر KrF بر تغییرات مورفولوژی، شیمی و آبدوستی سطح ساختارهای متقارن و نامتقارن غشاء پلی‌اترسولفون در دو حالت بدون حضور PVP و با حضور آن (٦٪) و تعداد پالس‌های مختلف بررسی شده است.

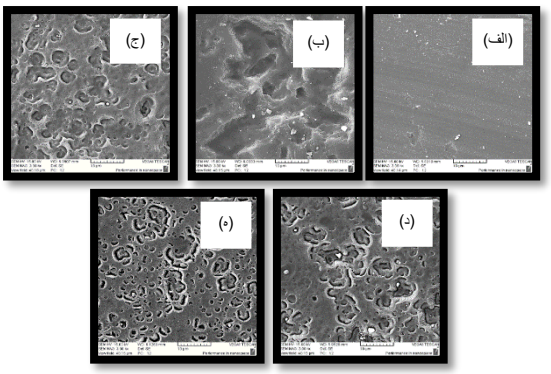
آزمایش

در این بررسی لیزر KrF با طول‌موج ۲۴۸ nm با پهنای پالس ۲۵ ns و نرخ تکرار ۵ Hz به عنوان منبع تابش مورد استفاده قرار گرفت. روزنه‌ای دایروی با قطر ۱ cm در خروجی لیزر قرار داده شد تا قسمت تقریبا یکنواخت از باریکه پرتو را جدا کند. انرژی لیزر در محل نمونه با استفاده از ژول‌متر اندازه‌گیری شد و شاریدگی آن، با تقسیم انرژی بر مساحت لکه بدست آمد. برای بررسی اثرات لیزر روی نمونه‌ها، شاریدگی زیر آستانه کندگی (در حدود $15\ mJ/cm^2$) انتخاب شد[۱]. تغییرات مورفولوژی ایجاد شده بر روی سطح نمونه‌ها و تغییرات شیمیایی پیآمد تابش‌دهی، به‌ترتیب با استفاده از میکروسکوپ الکترونی پویشی (SEM) و طیف‌سنج تبدیل فوریه‌ای (FTIR) مورد بررسی قرار گرفته‌اند. برای تعیین میزان تغییرات در آبدوستی نمونه‌ها نیز زوایای تماس قطره آب بر روی سطح نمونه‌ها به روش اندازه‌گیری زاویه تماس استاتیکی اندازه‌گیری شده است.

یافته‌ها

۱)بررسی تغییرات مورفولوژی غشاءهای بدون PVP بعد از تابش‌دهی

شکل (۱) تصاویر SEM نمونه متقارن را قبل و بعد از تابش‌دهی با تعداد ۱۰۰۰، ۲۰۰۰، ۳۰۰۰ و ۵۰۰۰ پالس و بدون حضور PVP نشان می‌دهد. تصاویر SEM نمونه نامتقارن نیز در همین شرایط کاری در مقاله قبلی[۳] آورده شده است.



شکل ۱: تصویر SEM سطح نمونه متقارن و بدون حضور PVP، الف) قبل از تابش‌دهی و نیز بعد از تابش‌دهی درتعداد پالس‌های ب) ۱۰۰۰ ج) ۲۰۰۰ د) ۳۰۰۰ ه) ۵۰۰۰ (مقیاس ۱۰ میکرون)

الف) غشاء نامتقارن: در این حالت، سطح نمونه قبل از تابش بدون تخلخل است. با افزایش تعداد پالس‌ها، تعداد حفره‌ها و ابعاد آن‌ها، به طور نسبی افزایش یافته و در تعداد پالس‌های بالا علاوه بر حفره، ساختار دانه‌ای (نانو ساختارها) نیز دیده شد. در این سری از نمونه‌ها حفره‌ها خوش تعریف و ابعاد آن‌ها از مرتبه طول‌موج (۲۵۰nm) است.

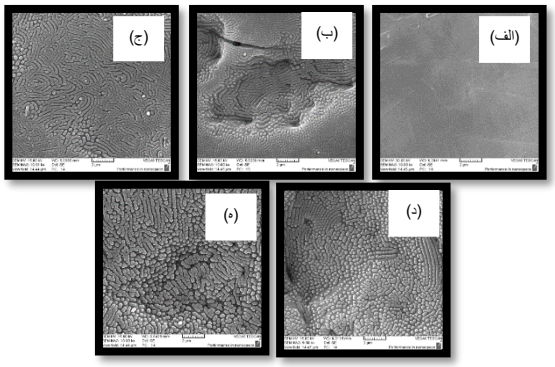
ب) غشاء متقارن: در این حالت با شروع تابش نانوساختارها بر روی سطح ایجاد می‌شود. در تعداد پالس‌های بالا یعنی از ۳۰۰۰، حفره بر روی سطح مشاهده شده و با افزایش تعداد پالس چگالی تعداد حفره‌ها و نانوساختارها افزایش می‌یابد. در مقایسه با نمونه نامتقارن، تخلخل‌ها شکل منظمی ندارند.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

۲)بررسی تغییرات مورفولوژی غشاءها با PVP ٪۶ بعد از تابش‌دهی

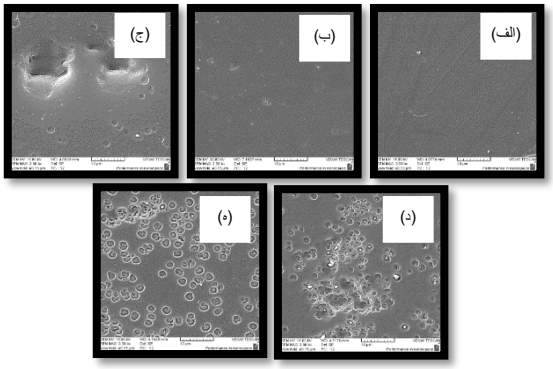
یکی از مواد افزودنی در ساخت غشاء بر پایه پلی‌اترسولفون، پلیمر آبدوست و حفره‌زای (PVP) است. بنابراین اثر این افزودنی در نحوه برهم‌کنش و تغییرات مورد بررسی قرار گرفت. شکل (۲) و (۳) به ترتیب تصاویر SEM نمونه نامتقارن و متقارن، قبل و بعد از تابش‌دهی با تعداد ۱۰۰۰، ۲۰۰۰، ۳۰۰۰ و ۵۰۰۰ پالس در حضور PVP را نشان می‌دهد.

الف) غشاء نامتقارن: در این سری از نمونه‌ها با افزودن PVP، فرورفتگی و نانوساختارهایی دیده شد که با افزایش تعداد پالس‌ها، چگالی تعداد آن‌ها افزایش یافته است و اندازه‌ی ساختارها تغییری نمی‌کند؛ زیرا در این حالت اندازه‌ی ساختار به طول موج لیزر بستگی دارد که در تعداد پالس‌های مختلف طول موج تغییری نکرده است[٤].



شکل۲: تصویر SEM الف) نمونه نامتقارن تابش داده نشده؛ نانوساختارهای ایجاد شده بر روی نمونه درحضور PVP، بعد از تابش‌دهی درتعداد پالس-های ب) ۱۰۰۰ ج) ۲۰۰۰ د) ۳۰۰۰ ه) ۵۰۰۰ (مقیاس ۲ میکرون)

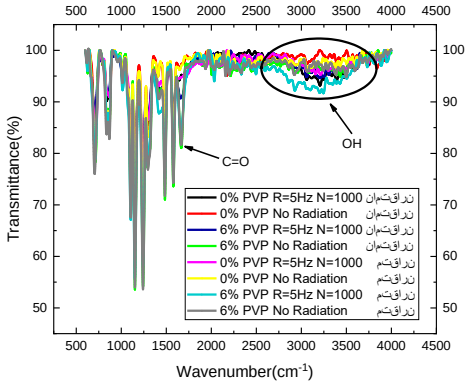
ب) غشاء متقارن: در این حالت تعداد حفره‌ها با افزایش تعداد پالس(در تعداد پالس‌های بالا ۳۰۰۰ و ۵۰۰۰) افزایش یافت. با توجه به تصاویر SEM افزودن PVP به غشاء در نمونه‌ی نامتقارن منجر به شکل‌گیری نانوساختارها شده و در نمونه‌ی متقارن در تعداد پالس‌های بالا تخلخل‌ها نسبتاً خوش تعریف شکل‌گرفته‌اند.



شکل۳: تصویر SEM سطح نمونه متقارن در حضور PVP، الف) قبل از تابش‌دهی. و بعد از تابش‌دهی درتعداد پالس‌های ب) ۱۰۰۰ ج) ۲۰۰۰ د) ۳۰۰۰ ه) ۵۰۰۰ (مقیاس ۱۰ میکرون)

۳) بررسی طیف مادون قرمز نمونه‌ها

تغییرات گروه‌های عاملی در طیف مادون قرمز (FTIR) نمونه‌ها بعد از تابش‌دهی لیزری، در دو حالت نمونه در حضور PVP و بدون آن در شکل (٤) نشان داده شده است.



شکل ٤: طیف FTIR غشاء متقارن و نامتقارن PES بدون حضور PVP و با حضور آن در ۱۰۰۰ پالس.

*نمونه نامتقارن در حضور PVP و بدون آن: در عدم حضور PVP با شروع تابش‌دهی، حلقه‌های بنزن موجود در غشاء و پیوندهای C-H شکسته می‌شوند و هیدروژن آزاد شده با اکسیژن موجود در اطراف سطح ترکیب شده و گروه قطبی OH در محدوده‌ی ۳۲۱۲ cm^{-1} دیده شد. با افزایش تعداد پالس شدت گروه OH نیز کاهش می‌یابد. در حضور PVP نیز، با شروع تابش‌دهی پیک جذبی در محدوده ۳۲۳۰ cm^{-1} دیده می‌شود که نشان‌دهنده گروه OH

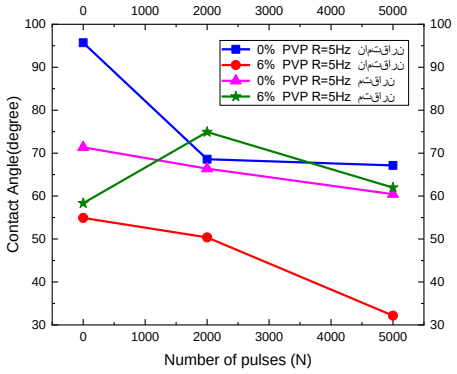
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

است. همچنین گروه عاملی C=O با طیف جذبی ۱۶۶۶ cm^{-1} دیده می‌شود که علت آن حضور PVP در سطح غشاء است. با افزایش تعداد پالس، شدت گروه C=O نیز کاهش می‌یابد.

*نمونه متقارن در حضور PVP و بدون آن: در عدم حضور PVP با شروع تابش‌دهی، گروه قطبی OH در ۳۲۰۰ cm^{-1} نمایان می‌شود. با افزایش تعداد پالس، شدت گروه OH نیز کاهش می‌یابد. در حضور PVP با شروع تابش‌دهی، پیک OH در ۳۱۶۲ cm^{-1} شکل می‌گیرد. همچنین پیک گروه عاملی C=O در ۱۶۶۶ cm^{-1} که مربوط به حضور PVP در ترکیب غشاء است، با افزایش تعداد پالس کاهش می‌یابد.

٤) بررسی میزان آبدوستی نمونه‌ها

شکل (۵)، نمودار زاویه تماس قطره‌ی آب روی سطح نمونه‌ها و تاثیر پارامترهای تابش و همچنین ساختار غشاء (ساختار متقارن و نامتقارن، افزودن PVP) را بر روی آبدوستی نمونه‌ها، نشان می‌دهد.



شکل ۵ : نمودار زاویه تماس قطره آب غشاءهای نامتقارن و متقارن PES بدون حضور PVP و در حضور PVP ٦٪

الف) غشاء نامتقارن: با توجه به شکل ۵ و مقایسه زاویه تماس برای دو حالت بدون PVP و با حضور آن قبل از تابش‌دهی دیده می‌شود که حتی قبل از تابش‌دهی و تنها با اضافه کردن PVP، زاویه تماس کاهش و آب‌دوستی سطح افزایش می‌یابد. در اثر تابش‌دهی زاویه تماس در هر دو حالت با PVP و بدون آن کاهش می‌یابد، که این کاهش در نمونه با PVP محسوس‌تر است. با افزودن PVP و نیز افزایش تعداد پالس‌های لیزری، کاهش قابل توجهی در زاویه تماس و به دنبال آن افزایش میزان آبدوستی دیده می‌شود.

ب) غشاء متقارن: با توجه به شکل ۵، در نمونه‌ی بدون PVP روند کاهش زاویه تماس با افزایش تعداد پالس دیده شد (با افزایش تعداد پالس بر تعداد حفره‌ها و نانوساختارها افزوده می‌شود). افزودن PVP منجر به کاهش زاویه تماس قبل از تابش‌دهی شد؛ از طرف دیگر با شروع تابش‌دهی زاویه تماس افزایش یافت اما با افزایش تعداد پالس به ۵۰۰۰ زاویه تماس کاهش یافت.

نتیجه‌گیری

تابش سطح غشاء پلیمر PES با لیزر KrF در شاریدگی زیر آستانه کندگی، منجر به ایجاد نانوساختارها و تخلخل بر روی سطح شده است؛ که با افزایش تعداد پالس، چگالی تعداد آن‌ها در هر دو نمونه نامتقارن و متقارن بیشتر می‌شود. با افزایش تعداد پالس، آستانه کندگی سطح کاهش یافته و پوسته (غشاء شامل دولایه است، لایه رویی پوسته و لایه پایه شامل حفره است) که در نقاط بالای حفره‌ها ضخامت کمتری هستند، برداشته شده و حفره‌ها با وجود تابش‌دهی با شاریدگی زیر آستانه کندگی نمایان می‌شوند.

همچنین با افزودن PVP، پوسته روی سطح نیز به شکل لایه‌ای ترکیبی از PVP و PES شکل می‌گیرد که دارای پیوندهای مقاوم است. با تحت تابش قرار دادن غشاء، پیوندها به هم متصل شده و منجر به ایجاد ساختار محکم‌تری می‌شود. زاویه تماس در هر دوسری از نمونه‌ها با اضافه کردن PVP قبل از تابش‌دهی کاهش یافت. همچنین روند افزایش آبدوستی با افزایش تعداد پالس بعد از تابش‌دهی دیده شد. در نمونه متقارن با PVP در ابتدای تابش‌دهی در مقایسه با ۵۰۰۰ پالس بر زاویه تماس افزوده شد. بنابراین برای نمونه متقارن با PVP روند خاصی در زاویه‌ی تماس و به دنبال آن میزان آبدوستی دیده نشد.

مراجع

[۱] ه. پازکیان، "برهم‌کنش لیزر با فیلم پلی‌اترسولفون"، رساله دکتری فیزیک اتمی مولکولی، دانشکده فیزیک، دانشگاه علم و صنعت ایران، ۱۳۹۰.

[۲] ج. برزین، "ساخت و ارزیابی غشاءهای همودیالیز بر پایه پلی‌اترسولفون"، رساله دکتری ۱۳۸۳.

[۳] آ.ترابی و همکاران، " بررسی تغییرات مورفولوژی سطح پلیمر پلی‌اترسولفون در برهم کنش با لیزر در شاریدگی زیر آستانه کندگی"، ۲۶th کنفرانس اپتیک و فوتونیک ایران و دوازدهمین کنفرانس مهندسی و فناوری فوتونیک ایران، ۱۳۹۸.

[4] Thomas Lippert, “Chemical and Spectroscopic Aspects of Polymer Ablation Special Features and Novel Directions”, (2003).

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بررسی تاثیر استفاده از غلاف FeCrAl در راکتور NuScale دارای سوخت حلقوی با قابلیت خنک شوندگی از داخل و خارج

زایرمحمدی ریشهری، حسین [۱]؛ زیدآبادی نژاد، مجید[۱]

[۱]دانشگاه تحصیلات تکمیلی صنعتی و فناوری پیشرفته کرمان، دانشکده علوم و فناوری‌های نوین، گروه مهندسی هسته‌ای، انتهای اتوبان هفت باغ علوی، کرمان

چکیده

در مبحث ایمنی راکتورهای هسته‌ای اولین و مهمترین سد مقابله با حادثه، غلاف میله سوخت است. به منظور بهبود تحمل حادثه در راکتورهای هسته‌ای آب سبک، غلاف با جنس آلیاژ FeCrAl از گزینه‌های مطرح برای جایگزین کردن آلیاژهای زیرکونیومی است. این آلیاژ مقاومت بسیار خوبی در برابر اکسیداسیون در محیط‌های دارای سیال با دمای بالا دارد. از مهمترین معایب آلیاژ FeCrAl سطح مقطع جذب نوترون بالا نسبت به آلیاژ زیرکونیومی است که در این پژوهش مشاهده شد که با استفاده از تکنیک سوخت حلقوی با قابلیت خنک شوندگی از داخل و خارج می توان افت ضریب تکثیر ناشی از جذب نوترون در این غلاف را با کند کنندگی بیشتر بدون تغییر جرم و غنای سوخت جبران کرد.

واژه های کلیدی: *غلاف سوخت، آلیاژ FeCrAl، ضریب تکثیر، راکتور NuScale، سوخت حلقوی*

Investigation of the FeCrAl clad effect on the NuScale reactor with dual cooled annular fuel

Zayermohammadi rishehri, Hossein[1]; Zaidabadi nejad, Majid[1]

[1] Graduate University of Advanced Technology, Faculty of Advanced Sciences and Technologies, Department of Nuclear Engineering, Haft Bagh highway, Kerman

Abstract

In the safety of nuclear reactors, the first and most important barrier to accident control is the fuel rod clad. In order to improve accident tolerance in the core of light water reactors, FeCrAl alloy clad is one of the options to replace zirconium alloys. This alloy has a very good resistance to oxidation in environments with high temperature fluid. One of the major disadvantages of FeCrAl alloy is its high neutron absorption cross section compared to zirconium alloy. In this study, it was observed that by using the dual cooled annular fuel, the decrease of the multiplication coefficient due to neutron absorption in this clad can be compensated by further slowing down without changing the mass and richness of fuel.

***Keywords**: fuel clad; FeCrAl alloy; multiplication coefficient; NuScale reactor; dual cooled annular fuel*

PACS No. 28

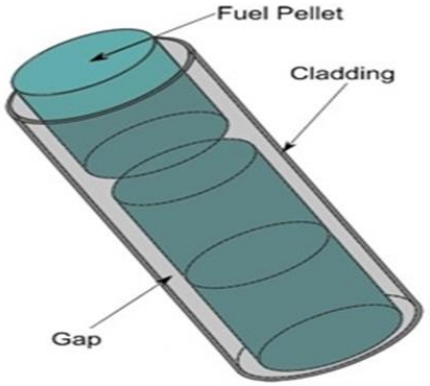
مقدمه

امروزه برای جلوگیری از گرم شدن کره زمین و انتشار گازهای های گلخانه ای نظیر CO_2، تمایل کشورها به استفاده از انرژی های پاک افزایش یافته است. از این رو، ایمنی نیروگاه های هسته‌ای به عنوان یک منبع انرژی پاک به فاکتور مهمی بدل شده است.

در حال حاضر سوخت اکثر راکتورهای هسته‌ای آب سبک (LWRs) در جهان براساس ترکیبی از قرص‌هایی از جنس اکسید

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

اورانیوم (UO_2) در یک غلاف از جنس زیرکونیم (Zr) تشکیل شده است [1,2]. در شکل شماره ۱ نمایی از یک میله سوخت تو پُر نشان داده شده است.



شکل ۱: شماتیکی از یک میله سوخت تو پُر

برای افزایش استحکام و بهبود عملکرد ترمومکانیکی غلاف در آلیاژهای زیرکونیم از فلزاتی مثل قلع (Sn)، نیوبیم (Nb)، آهن (Fe) و کروم (Cr) استفاده می‌شود. از آلیاژهایی که تاکنون تولید شده‌اند می‌توان به غلاف‌های M5، Zircaloy 4 و E110 اشاره کرد.

غلاف های زیرکونیومی با وجود مزایا زیاد که مهمترین آنها شفافیت در مقابل عبور نوترون های حرارتی است، معایبی نیز دارند که یکی از بارزترین آنها خوردگی این غلاف در دماهای بالا می باشد. در شرایطی مانند حادثه از دست رفتن خنک کننده (LOCA)، دمای قلب راکتور به شدت افزایش می‌یابد و باعث واکنش آلیاژ زیرکونیومی با سیال خنک کننده می‌شود که باعث اکسید شدن آلیاژ زیرکونیومی می‌شود. همچنین اگر این افزایش دما به ۱۲۰۰ درجه سانتی‌گراد یا بیشتر برسد می‌تواند باعث واکنش آلیاژ با بخار آب شده و مقدار قابل توجهی گاز قابل انفجار هیدروژن را تولید کند [3].

از این رو، پس از فاجعه هسته‌ای فوکوشیما که در سال ۲۰۱۱ رخ داد؛ تقاضا برای استفاده از آلیاژهایی که تحمل در برابر حادثه آن‌ها بیشتر باشد افزایش یافت [4]. سه روش بالقوه برای توسعه و بهبود تحمل سیستم‌های سوخت و غلاف در برابر حادثه پیشنهاد شده است [5,6]؛ که عبارتند از:

۱) بهبود ویژگی های قرص سوخت.

۲) استفاده از یک لایه پوششی بر روی غلاف‌های آلیاژ زیرکونیومی به منظور افزایش مقاومت در برابر اکسیداسیون.

۳) جایگزین کردن غلاف‌های زیرکونیومی با غلاف‌های مقاوم‌تر در مقابل اکسیداسیون در دماهای بالا.

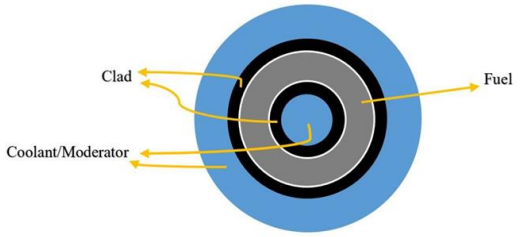
آلیاژ FeCrAl که مشخصات آن در جدول شماره ۱ آورده شده است از گزینه‌های مطرح برای جایگزین کردن آلیاژهای زیرکونیومی است. این آلیاژ مقاومت بسیار خوبی در برابر اکسیداسیون در محیط‌های دارای سیال با دمای بالا دارد. در آزمایش‌های اکسیداسیون انجام شده بر روی این آلیاژ، بین دمای ۹۰۰ درجه سانتی‌گراد تا ۱۳۰۰ درجه سانتی‌گراد در محیط‌های دارای سیال با دمای بالا، یک لایه محافظ آلومینا بر روی آن تشکیل می‌شود و مانع از اکسید شدن غلاف می گردد [7,8,9].

جدول ۱: ترکیبات آلیاژ FeCrAl [10]

آلیاژ	Al (wt.%)	Cr (wt.%)	Fe (wt.%)
FeCrAl	۵	۲۰	۷۵

آلیاژ FeCrAl نیز همانند سایر غلاف ها در کنار مزیت ها، معایبی نیز دارد. از مهمترین معایب آلیاژ FeCrAl سطح مقطع جذب نوترون بالاتر آن به نسبت آلیاژهای زیرکونیومی است که می توان با ایده استفاده از سوخت حلقوی بر این عیب غلبه نمود.

در سوخت های حلقوی خنک شونده از داخل و خارج بر خلاف سوخت های تو پُر متداول در راکتورهای هسته‌ای، سیال خنک کننده از دو طرف میله سوخت عبور می‌کند. در شکل شماره ۲ نمایی از یک سوخت حلقوی نشان داده شده است.



شکل ۲: شماتیکی از یک میله سوخت حلقوی خنک شونده از داخل و خارج

از این رو در این پژوهش به بررسی تاثیر استفاده همزمان از سوخت حلقوی با قابلیت خنک شوندگی از داخل و خارج و استفاده از غلاف FeCrAl در قلب یک راکتور ماژولار کوچک

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

پرداخته شده است. این تحقیق در راستای فعالیت‌های تحقیقاتی سازمان انرژی اتمی ایران می‌باشد.

روش کار

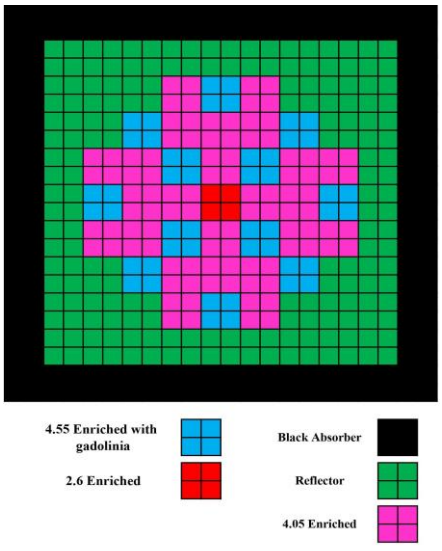
در این پژوهش به منظور ارزیابی همزمان اثر استفاده از غلاف FeCrAl و سوخت حلقوی با قابلیت خنک شوندگی از داخل و خارج در ابتدا قلب راکتورNuScale که یک راکتور ماژولار کوچک با غلاف M5 می باشد [11] و سپس قلب راکتور با سوخت حلقوی با قابلیت خنک شوندگی از داخل و خارج و غلاف FeCrAl با همان جرم و غنای سوخت شبیه سازی شده و ضریب تکثیر موثر هر کدام از قلب ها به دست آورده شده است. راکتور مورد بررسی در این پژوهش یکی از شاخص‌ترین راکتورهای ماژولار کوچک با سوخت تو پُر است که سوخت حلقوی نیز برای آن طراحی شده است[12]. مشخصات راکتور NuScale با سوخت تو پُر و سوخت حلقوی با قابلیت خنک شوندگی از داخل و خارج در جدول شماره ۲ آورده شده است.

جدول ۲: مشخصات راکتور NuScale با سوخت اصلی و سوخت حلقوی ارائه شده [11,12].

پارامتر	مقدار (سوخت حلقوی)	مقدار (سوخت توپُر)
توان حرارتی تولیدی قلب	۱۶۰ مگا وات	۱۶۰ مگا وات
طول گام	۱,۶۷۸ سانتی‌متر	۱,۲۵۹ سانتی‌متر
طول فعال میله سوخت	۲ متر	۲ متر
شعاع داخلی غلاف داخلی	۰,٤ سانتی‌متر	–
شعاع خارجی غلاف داخلی	۰,٤٦١ سانتی‌متر	–
شعاع داخلی قرص سوخت	۰,٤٦٩ سانتی‌متر	–
شعاع خارجی قرص سوخت	۰,٦٢٠٣ سانتی‌متر	۰,٤٠٥ سانتی‌متر
شعاع داخلی غلاف خارجی	۰,٦٢٨٣ سانتی‌متر	۰,٤١٤ سانتی‌متر
شعاع خارجی غلاف خارجی	۰,٦٨٩٣ سانتی‌متر	۰,٤٧٤ سانتی‌متر
جنس سوخت	دی‌اکسید اورانیوم (UO_2)	دی‌اکسید اورانیوم (UO_2)

برای تحقق این بررسی در ابتدا سوخت مورد نظر با غلاف اصلی خود که از جنس M5 می باشد و سپس با غلاف FeCrAl شبیه سازی شده است.

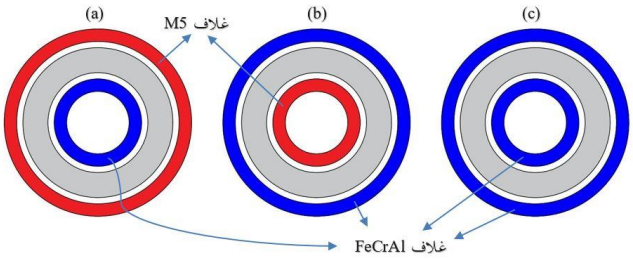
قلب راکتور NuScale از سه نوع مجتمع سوخت با غناهای ٤,٠٥٪، ٤,٥٥٪ و ٢,٦٪ تشکیل شده است که در ابتدا هر کدام از آن ها در کد محاسبات سلولی WIMS به صورت تو پر با غلاف M5 شبیه سازی شده‌اند. در این شبیه سازی به منظور محاسبه ضریب تکثیر موثر در شرایط قلب پاک و سرد (Cold and Clean)از مدل کلاستر استفاده شده که در این مدل تعدادی از سلول های پایه (بدون هیچگونه محدودیتی بر روی تعداد آنها) انتخاب می شوند و ثابت های گروهی برای کل سلول تولید می شود. برای محاسبه مجموعه ای از میله ها با ترکیبات مختلف که به هر نحو دلخواهی چیده شده باشند استفاده می‌شود. سوخت حلقوی و توپُر شامل سوخت، غلاف، خنک کننده و کندکننده تعریف گردیده است. پس از تعریف هندسته سوخت های مورد نظر در کد WIMS شرایط حالت قلب پاک و سرد به ورودی این کد اعمال گردید. قلب پاک و سرد به این معناست که دمای راکتور با دمای اتاق برابر است (حدود ۳۰۰ درجه کلوین) و سموم جاذب و پاره های شکافت در قلب حضور ندارند و در این حالت میتوان به ماکزیمم راکتیویته اضافی (ρ_{excess}) دست یافت. پس از انجام محاسبات سلولی با وارد کرد ثوابت گروهی بدست آمده از کد WIMS به ورودی کد CITIATION در کارت (۰۰۸) و تعریف ابعاد و چیدمان قلب راکتور در کد CITIATION ضریب تکثیر برای راکتور سوخت توپُر و غلاف M5 بدست آمد. در شکل شماره ۳ شماتیکی از قلب شبیه سازی شده در کد CITIATION نشان داده شده است که در راستای x و y هر کدام به دو بخش و در راستای z به ۱۰ بخش تبدیل شده است.



شکل ۳: شمای کلی قلب شبیه سازی شده راکتور NuScale

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

سپس با روش ذکر شده فوق به شبیه‌سازی سوخت حلقوی با غلاف FeCrAl پرداخته شده است. در ابتدا غلاف داخلی FeCrAl و غلاف خارجی M5 قرار داده شده سپس در شبیه سازی دیگر غلاف خارجی FeCrAl و غلاف داخلی را M5 قرار داده شده و در نهایت هر دو غلاف غلاف داخلی و خارجی FeCrAl در نظر گرفته شده است. در شکل ٤ سوخت های حلقوی با غلاف های متفاوت نشان داده شده است.



شکل ٤: شماتیکی ازمیله‌های سوخت با غلاف‌های FeCrAl و M5

نتایج

پس از انجام شبیه‌سازها با کد WIMSD5b و به دست آوردن ضرائب ماکروسکوپیک ($D, \sum_a, \sum_r, \nu\sum_f$) و اعمال آنها در ورودی کد محاسبات قلب CITIATION که معادله چند گروهی پخش نوترون را با روش اخلاف محدود حل می‌کند؛ قلب راکتور را با هر کدام از سوخت‌های بالا شبیه‌سازی کرده و ضریب تکثیر موثر قلب بدست آورده شده است.

جدول ۳: ضریب تکثیر موثر برای هر یک از میله‌های سوخت

نوع میله سوخت	ضریب تکثیر موثر
سوخت تو پر با غلاف M5	۱,۲۰۸۵
سوخت حلقوی با غلاف داخلی FeCrAl و غلاف خارجی M5	۱,۳۱۶۰
سوخت حلقوی با غلاف داخلی M5 و غلاف خارجی FeCrAl	۱,۲۷۱۳
سوخت حلقوی با غلاف داخلی و خارجی FeCrAl	۱,۱۹۸۳

بحث ونتیجه گیری

غلاف FeCrAl دارای خواص ترمومکانیکی و ترموهیدرولیکی خوبی است که حتی در دماهای بالا نیز اکسیداسیون بسیار کمی دارد اما خواص نوترونیکی آن از دیگر غلاف های رایج برای سوخت هسته ای به دلیل جذب نوترون نسبتا بالایی که دارد، پایین تر است. اغلب بر این باور هستند که در هنگام استفاده از غلاف FeCrAl می بایست از سوخت با غنای بیشتر استفاده شود. اما در این پژوهش مشاهده شد که استفاده از سوخت حلقوی با قابلیت خنک شوندگی از داخل و خارج می توان افت ضریب تکثیر ناشی از جذب نوترون در این غلاف را با کند کنندگی بیشتر جبران کند. نتایج نشان داد ضریب تکثیر راکتور NuScale با سوخت توپر و غلاف M5 با ضریب تکثیر راکتور NuScale که دارای سوخت حلقوی با قابلیت خنک شوندگی از داخل و خارج و غلاف FeCrAl می باشد، تقریبا یکسان است. لازم به ذکر است که جرم و غنای سوخت در هر دو راکتور یکسان می باشد.

مرجع‌ها

[1] Fuketa T, Sasajima H, Sugiyama T. Behavior of high-burnup PWR fuels with low-tin Zircaloy-4 cladding under reactivity-initiated-accident conditions. *Nuclear Technology*. 2001 Jan 1;133(1):50-62.
[2] Schanz G. Recommendations and supporting information on the choice of zirconium oxidation models in severe accident codes. *FZKA*; 2003 Mar 1.
[3] B.A. Pint, K.A. Terrani, M.P. Brady, T. Cheng, J.R. Keiser, High temperature oxidation of fuel cladding candidate materials in steam–hydrogen environments, *J. Nucl. Mater*. 440 (2013) 420–427 https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2013.05.047
[4] M.N. Gussev, E. Cakmak, K.G. Field, Impact of neutron irradiation on mechanical performance of FeCrAl alloy laser-beam weldments, *J. Nucl. Mater*. 504 (2018) 221e233.
[5] Ott, L.J., Robb, K., Wang, D., 2014. Preliminary assessment of accident-tolerant fuels on LWR performance during normal operation and under DB and BDB accident condition. *J. Nucl. Mater*. 448 (1), 520–533.
[6] Zinkle, S.J., Terrani, K.A., Gehin, J., Ott, L., Snead, L., 2014. Accident tolerant fuels for LWRs: a perspective. J. Nucl. Mater. 448 (1), 374–379.
[7] W.J. Quadakkers, A. Elschner, W. Speier, H. Nickel, Composition and growth mechanisms of alumina scales on FeCrAl-based alloys determined by SNMS, Appl. *Surf.Sci*. 52 (1991) 271–287 https://doi.org/10.1016/0169-4332(91)90069-V.
[8] C. Badini, F. Laurella, Oxidation of fecral alloy: influence of temperature and atmosphere on scale growth rate and mechanism, Surf. Coat. Technol. 135 (2001) 291–298 https://doi.org/10.1016/S0257-8972(00)00989-0.
[9] J.A. Nychka, D.R. Clarke, Quantification of aluminum outward diffusion during oxidation of FeCrAl alloys, Oxid. Met. 63 (2005) 325–352 https://doi.org/10.1007/ s11085-005-4391-4.
[10] Chen S, Ge Y, Zhong Y, Yuan C. Radial distributions of power and fuel temperature in annular U3Si2 fuel with FeCrAl cladding. *Annals of Nuclear Energy*. 2020 Jan 1; 135:106943.
[11] Power N. NuScale Standard Plant Design Certification Aplication. Chapter Four: Reactor. 2016 Dec.
[12] Nejad MZ, Ansarifar GR. Design of a Small Modular Nuclear Reactor with dual cooled annular fuel and investigation of the fuel inner radius effect on the power peaking factor and natural circulation parameters. *Annals of Nuclear Energy*. 2020 Apr 1; 138:107185.

نقش حلال‌های مختلف بر روی ساخت نانوکامپوزیت‌های اپوکسی- اکسید سرب و تعیین ضریب تضعیف جرمی نانوکامپوزیت‌ها

یزدانی دارکی، سپیده[1]؛ اسلامی کلانتری، محمد[1]؛ زارع، حکیمه[1]

[1] یزد، صفائیه، دانشکده فیزیک، دانشگاه یزد

چکیده

در این پژوهش، اثر حلال‌های مختلف همچون تولوئن، تینر ۲۱، کلروفرم و تتراهیدروفوران بر روی ساختار نانوکامپوزیت اپوکسی-اکسید سرب بررسی شد. نتایج تصاویر میکروسکوپ نوری نشان می‌دهد که استفاده از حلال تولوئن باعث توزیع یکنواخت‌تر نانومیله‌های اکسید سرب در پلیمر اپوکسی شده است. هم‌چنین از لحاظ چسبناکی نانوکامپوزیت به سطح، نانوکامپوزیت حاصل از حلال تولوئن فاقد هر گونه چسبندگی می‌باشد. ضریب تضعیف جرمی و درصد تضعیف تابش گاما در ضخامت‌های مختلف از نانوکامپوزیت‌های اپوکسی-اکسید سرب تهیه شده با حلال‌های مختلف اندازه‌گیری شد. نتایج حاصل از آزمایش‌ها نشان می‌دهد که میزان تضعیف نانوکامپوزیت تهیه شده با حلال تولوئن از سایر نانوکامپوزیت‌ها بهتر و ضریب تضعیف جرمی آن از همه بیشتر است.

واژه‌های کلیدی: *نانوکامپوزیت، تولوئن، تضعیف، ضریب تضعیف جرمی*

The roul of various solvents in synthesize of epoxy-lead oxide nanocomposites and determination of their mass attenuation coefficient

Yazdani Darki , Sepideh[1]; Eslami-Kalantari, Mohammad[1]; Zare, Hakimeh[1]

[1] *Department of Physics, Yazd University, Yazd, Iran*

Abstract

In this study, the effect of different solvents such as toluene, thinner 21, trichloromethane and tetrahydrofuran on the structure of lead epoxy-oxide nanocomposite was investigated. The results of optical microscopy images show that the use of toluene solvent has led to a uniform distribution of lead oxide nanomaterials in the epoxy polymer. Also, in terms of adhesion, nanocomposite made of toluene solvent does not have any adhesion. The coefficient of mass attenuation and the percentage of attenuation of gamma radiation at different thicknesses of epoxy-lead oxide nanocomposites were measured. The experimental results show that the attenuation value with toluene solvent is better than other solvents and its mass attenuation coefficient is the highest.

***Keywords**: Nanocomposite, Toluene, Attenuation, Mass attenuation coefficient*

PACS No. 20, 81

مقدمه

تشعشعات پرتوهای گاما و ایکس به دلیل قدرت نفوذ بالایشان به عنوان یک نگرانی جدی برای سلامتی انسان به حساب می‌آیند. دز انباشته شده از تشعشعات یونیزان مانند پرتوهای ایکس و گاما می‌تواند باعث سرطان، جهش ژنتیکی و عقیم‌سازی شود. با افزایش استفاده از مواد رادیواکتیو در پزشکی، صنعت و کشاورزی، محافظت از انسان و تجهیزات در اولویت قرار می‌گیرد [۱ و ۲]. نمونه‌ای از ماده محافظ پر کاربرد برای پرتوهای گاما و ایکس، سرب است. بسیاری از عناصر متراکم می‌توانند پرتوهای گاما و ایکس را کاهش دهند اما سرب در مقایسه با سایر عناصر متراکم‌تر و مانند تنگستن و توریم از لحاظ دسترسی و هزینه‌ی کم متمایز

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

می‌باشد. کامپوزیت‌های پلیمری گزینه مناسبی برای حل مشکلات حفاظ‌های سنتی است. افزودن نانوذرات اکسید سرب به داخل مواد پلیمری غنی از هیدروژن با کارایی بالا می‌تواند یک حفاظ تابشی برای استفاده در برابر اشعه گاما و ایکس و هم‌چنین ذرات ثانویه و تابش الکترومغناطیسی ناشی از واکنش‌های هسته‌ای باشد. هم‌چنین، کامپوزیت‌های پلیمری، سبک و در مقایسه با محافظ‌های فلزی خالص، تابش ثانویه کمتری تولید می‌کنند. با توجه به ویژگی‌های کامپوزیت‌های پلیمری، از آن‌ها برای حفاظ‌های صنایع فضایی، نیروگاه‌های هسته‌ای و ساخت حفاظ برای انسان و دستگاه‌ها در بیمارستان‌ها استفاده می‌شود [۳]. جدول ۱، پژوهش‌های انجام شده در زمینه‌ی تضعیف پرتوها با نانوکامپوزیت را نشان می‌دهد.

جدول۱: خلاصه‌ای از پژوهش‌های انجام شده در زمینه‌ی تضعیف پرتوها

ساختار ماده	چشمه پرتو	میزان تضعیف	مرجع
کامپوزیت اکسید گرافن- اپوکسی با پوشش‌دهی اکسید سرب	گاما	افزایش پرکننده با ۱۰ درصد وزنی با ضخامت ۶ mm بیشترین میزان تضعیف گزارش شد.	[۴]
کامپوزیت اپوکسی- تتراکسید سرب و اکسید سرب	ایکس	بیشترین تضعیف با ذرات ۵-۱۵ میکرومتری با بیش از ۵۰ درصد وزنی	[۵]
کامپوزیت اپوکسی- اکسید تنگستن	گاما	با افزایش نانوذرات در نانوکامپوزیت باعث افزایش ضریب جذب می‌شود.	[۶]

در این پژوهش، ابتدا به بررسی حلال‌های مختلف برای ساخت نانوکامپوزیت اپوکسی-اکسید سرب انعطاف‌پذیر پرداخته می‌شود. سپس میزان تضعیف نانوکامپوزیت‌های ساخته شده در برابر پرتوهای یونیزان با استفاده از چشمه رادیوم ۲۲۶ بررسی می‌شود.

بخش تجربی

مواد و تجهیزات

در این پژوهش ابتدا برای ساخت نانومیله‌های اکسید سرب از پیش‌ماده‌ی استات سرب تری‌هیدرید[1] به عنوان پیش‌ماده، سدیم هیدروکسید، آب مقطر و اتانول استفاده شد. رزین اپوکسی، سیکلوآلیفاتیک آمین[2]، تولوئن، تینر ۲۱، کلروفوم و تتراهیدروفوران[3] جهت ساخت نانوکامپوزیت مورد استفاده قرار گرفت. توزیع نانوذرات در پلیمر با کمک دوربین میکروسکوپ نوری انجام شد. اندازه و شکل نمونه حاصل با استفاده از میکروسکوپ الکترونی روبشی (SEM) انجام گرفت.

برای بررسی میزان تضعیف نانوکامپوزیت‌های حاصل، از آشکارساز پنجره‌ای گایگر-مولر، چشمه رادیوم ۲۲۶ (^{226}Ra)، استفاده گردید.

تمامی آزمایش‌ها در دانشگاه یزد، دانشکده فیزیک، آزمایشگاه‌های نانو و فیزیک هسته‌ای انجام شد.

ساخت نانوکامپوزیت نانومیله‌های اکسید سرب

نانومیله‌های اکسید سرب به روش هم رسوبی شیمیایی[4] ساخته شد [۷]. سپس به منظور ساخت نانوکامپوزیت، رزین اپوکسی (۱ گرم) به هاردنر آن سیکلو آلیفاتیک آمین (۱ گرم) اضافه شد. برای انحلال کامل به مدت ۳۰ دقیقه به آرامی همزده و حل شد. برای ساخت کامپوزیت ۴۰ درصد وزنی از نانومیله‌های اکسید سرب، به‌طور جداگانه با حلال‌های مختلف همچون تولوئن، تینر ۲۱، کلروفوم و تتراهیدروفوران مخلوط و به مدت ۳۰ دقیقه همزده شد. سپس مخلوط اپوکسی و مخلوط حاوی نانومیله اکسید سرب با هم مخلوط و به مدت ۱ ساعت تحت همزدن قرار گرفت.

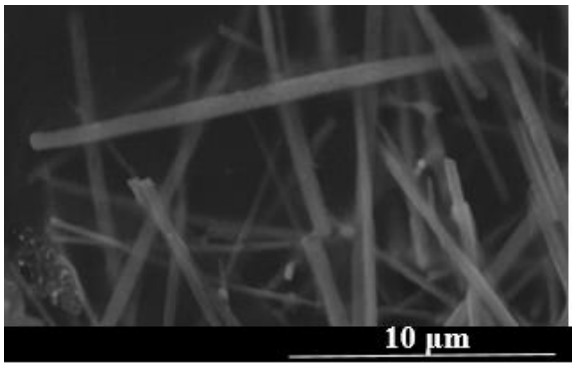
1 Lead(II) acetate trihydrate
2 Cycloaliphatic amin
3 Tetrahydrofuran
4 Chemical coprecipitation method

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

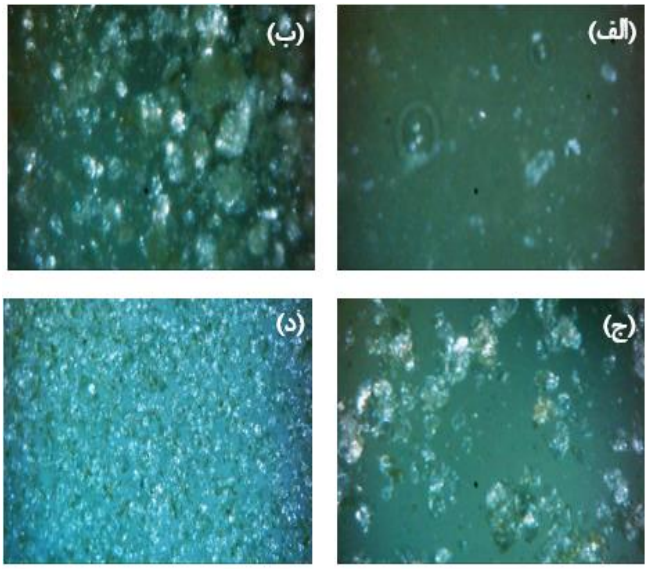
سپس مخلوط در یک قالب شیشه‌ای جهت حصول ضخامت مناسب کامپوزیت مورد نظر ریخته شد. نمونه‌ها پس از انجام قالب‌گیری و تبخیر کامل حلال جهت انجام آزمایش‌های تضعیف مورد استفاده قرار گرفت.

نتایج و بحث

در شکل ۱ تصویر میکروسکوپ الکترونی روبشی از نانومیله‌های اکسید سرب را نشان می‌دهد همانطور که از شکل مشخص است نانومیله‌های حاصل، نسبتا یکدست هستند و ساختار دیگری به غیر از نانومیله نگرفته است. اندازه‌ی قطرمتوسط نانومیله‌ها ۱۰۰ نانومتر است و آن‌ها دارای طولی به اندازه‌ی ۱۶ میکرومتر هستند. هدف از استفاده حلال‌های مختلف، رسیدن به یک نانوکامپوزیت یکنواخت و انعطاف‌پذیر است. شکل ۲، تصاویر میکروسکوپ نوری با بزرگنمایی ۴۰۰۰ برابر از نمونه‌های ساخته شده با حلال‌های مختلف را نشان می‌دهد. این تصاویر نشان می‌دهد نمونه‌هایی که با حلال‌های تینر ۲۱، کلروفرم و تتراهیدروفوران ساخته شده‌اند، دارای توزیع غیریکنواخت هستند. میزان چسبندگی نانوکامپوزیت حاصل از حلال تولوئن در مقایسه با سایر نانوکامپوزیت‌های حاصل از استفاده سه حلال دیگر بسیار ناچیز می‌باشد.



شکل ۱: تصویر SEM نانومیله‌های اکسید سرب



شکل ۲: تصاویر میکروسکوپ نوری نانوکامپوزیت‌های ساخته شده با حلال‌های مختلف (الف) تولوئن، (ب) تینر ۲۱، (ج) کلروفرم و (د) تتراهیدروفوران

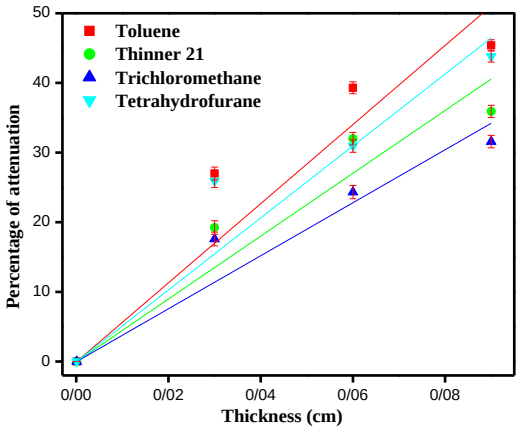
با طراحی چیدمانی از آشکارساز پنجره‌ای گایگر–مولر، چشمه رادیوم ۲۲۶ و شمارنده P، تضعیف پرتوهای ایکس و گامای حاصل از چشمه بررسی شد. همان‌طور که شکل ۳ نشان می‌دهد، در اثر افزایش ضخامت، میزان تضعیف افزایش یافته است. طبق نمودار شکل ۳ نانوکامپوزیت اپوکسی- اکسید سرب ساخته شده با استفاده از حلال تولوئن نسبت به نانوکامپوزیت‌های ساخته شده با استفاده از سایر حلال‌ها، دارای درصد تضعیف بیشتری از پرتوهای یونیزان است.

ضریب تضعیف جرمی ماده جاذب پرتو گاما، از رابطه‌ی زیر (رابطه‌ی ۱) محاسبه می‌شود [۸]:

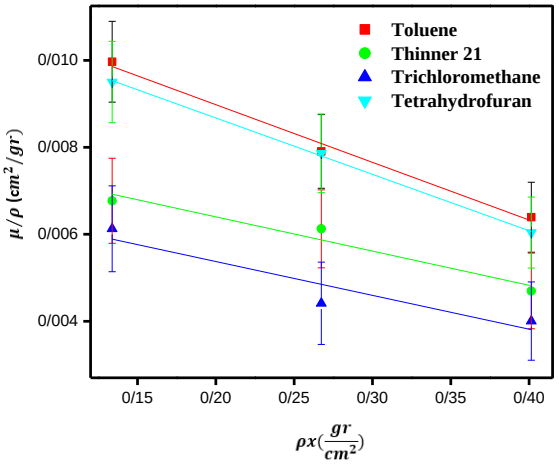
$$\mu/\rho=(1/x\rho)\ \mathrm{Ln}(I_0/I) \qquad (۱)$$

که x ضخامت نمونه، ρ چگالی نمونه، I_0 و I به ترتیب شدت باریکه‌های فوتون ورودی در آشکارساز بدون حضور جاذب و با حضور جاذب است. شکل ۴ نمودار μ/ρ بر حسب ضخامت را نشان می‌دهد.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



شکل ۳: درصد تضعیف نانوکامپوزیت اپوکسی-اکسید سرب با حلال‌های مختلف



شکل ۴: ضریب تضعیف جرمی نانوکامپوزیت اپوکسی-اکسید سرب با حلال‌های مختلف

نتیجه‌گیری

به دلیل افزایش کاربرد پرتوهای یونیزان در صنعت و پزشکی، استفاده از حفاظ می‌تواند آسیب‌های ناشی از پرتوها بر روی بافت‌های زنده و تجهیزات را کاهش دهد. در این پژوهش، ابتدا به بررسی حلال‌های مختلف برای ساخت نانوکامپوزیت اپوکسی-اکسید سرب پرداخته شد. تولوئن به دلیل توزیع یکنواخت نانومیله‌ها در پلیمر و نداشتن هیچ‌گونه چسبندگی به عنوان بهترین حلال انتخاب شد. پس از بررسی میزان تضعیف در نانوکامپوزیت‌ها، بیشترین میزان تضعیف در ضخامت‌های اولیه مشاهده شد، که نانوکامپوزیت ساخته شده با استفاده از حلال تولوئن میزان درصد تضعیف بیشتری نسبت به دیگر نانوکامپوزیت‌ها داشته و ضریب تضعیف جرمی آن نیز از سایر نانوکامپوزیت‌ها بیشتر است.

مرجع‌ها

[۱] V. P. Singh, S. P. Shirmardi, M. E. Medhat and N. M. Badiger; "Determination of mass attenuation coefficient for some polymers using Monte Carlo simulation"; Vacuum 119, (2015) 284-288.

[۲] O. Kilicoglu, H. O. Tekin and V. P. Singh; "Determination of mass attenuation coefficients of different types of concretes using Monte Carlo method"; Science and Technology, No. 15 (2019) 591-598.

[۳] S. Nambiar and J. T. W. Yeow; "Polymer-composite materials for radiation protection"; ACS applied materials and interfaces 4, No. 11 (2012) 5717-5726.

[۴] A. Abdollahifar, S. A. Hashemi, S. M. Mousavi, M. Rahsepar and A. M. Amani; "Fabrication of graphene oxide-lead oxide epoxy based composite with enhanced chemical resistance, hydrophobicity and thermos-mechanical properties"; Advances in polymer technology 37, No. 8 (2018) 3792-3803.

[۵] N. Z. N. Azman, S. A. Siddiqui, R. Hart and I. M. Low; "Microstructural design of lead oxide-epoxy composites for radiation shielding purposes"; Applied polymer science 128, No. 5 (2013) 3213-3219.

[۶] M. C. M. Higgins, N. A. Radcliffe, M. Toro-Gonzalez and J. V. Rojas; "Gamma ray attenuation of hafnium dioxide-and tungsten trioxide-epoxy resin composites"; Radioanalytical and nuclear chemistry 322, No. 2(2019) 707-716.

[۷] یزدانی دارکی، سپیده؛ اسلامی-کلانتری، محمد و زارع، حکیمه؛ «ساخت نانوکامپوزیت‌های پلی‌وینیل کلراید با نانومیله‌های اکسید سرب و تعیین ضریب تضعیف خطی آن‌ها» کنفرانس فیزیک ایران ۱۳۹۸: ۴۲۵-۴۲۲.

[۸] K. Singh, H. Singh, V. Sharma, R. Nathuram, A. Khanna, R. Kumar, S. S. Bhatti and H. S. Sahota; "Gamma-ray attenuation coefficients in bismuth borate glasses"; Nuclear instruments and methods in physics research B: Beam Interactions with materials and atoms 194, No. 1 (2002) 1-6.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

پیچیدگی زیرناحیه‌ای از دیدگاه هولوگرافی و گذار فاز QCD

لزگی، مهسا[۱] ؛ علی‌اکبری، محمد[۱]

[۱]دانشکده فیزیک دانشگاه شهید بهشتی، تهران

چکیده

با استفاده از پیچیدگی زیرناحیه‌ای از دیدگاه هولوگرافی تغییر فاز محبوس/عدم محبوس شدگی در نظریه‌های پیمانه‌ای شبه QCD ، مطالعه شده است. در مدل در نظر گرفته شده در این مقاله، ارتباطی بین انرژی پتانسیل مزون در حد کاوش و رفتار پیچیدگی‌اش مشاهده می‌شود. علاوه بر این در نزدیکی نقطه‌ی بحرانی یعنی جایی که تغییر فاز رخ می‌دهد، محاسبات عددی بیان‌گر این است که برای تعیین مزون در خلا غیر همدیس نسبت به تعیین آن در خلا همدیس، اطلاعات کم‌تری مورد نیاز است، علیرغم اینکه خلا غیر همدیس دارای انرژی بزرگ‌تری است.

واژه های کلیدی: *تغییر فاز محبوس/عدم محبوس شدگی، پیچیدگی*

Holographic Subregion Complexity and QCD Phase Transition

Lezgi, Mahsa[1]; Ali-Akbari, Mohammad[1]

[1] Department of Physics, University of Shahid Beheshti, Tehran

Abstract

Using holographic subregion complexity, we study the confinement-deconfinement phase transition of a QCD-like gauge theory, holographically. In the model we consider here, we observe a connection between the potential energy of probe meson and the behavior of its complexity. Moreover, near the critical point, at which the phase transition takes place, our numerical calculation indicate that we need less information to specify a meson in the non-conformal vacuum than in the conformal one, despite the fact the non-conformal vacuum has larger energy.

***Keywords**: confinement-deconfinement phase transition, complexity*

مقدمه

دوگانی پیمانه‌ای-گرانشی رهیافتی برای بررسی خواص گوناگون نظریه‌های غیر اختلالی فراهم می‌سازد. این دوگانی به تناظر یک نظریه‌ی میدان پیمانه‌ای با جفت‌شدگی قوی با یک نظریه‌ی گرانش کلاسیکی با جفت‌شدگی ضعیف در یک بعد بالاتر می‌پردازد. این ایده برای توصیف پدیده‌های مختلف از جمله بررسی حد انرژی پایین نظریه‌ی برهمکنش‌های قوی، کرومودینامیک کوانتومی، به کار رفته است[۱].

با معرفی نسخه‌ی ساده و هندسی برای توصیف آنتروپی درهم-تنیدگی به عنوان معیاری از همبستگی کوانتومی یک حالت خالص[۱] کوانتومی، مسیری برای ارتباط هرچه بیشتر نظریه‌ی اطلاعات کوانتومی با گرانش از طریق هولوگرافی باز شد[۲]. از کمیات مهم دیگر در نظریه‌ی اطلاعات کوانتومی، پیچیدگی کوانتومی، معیاری برای سنجش سختی در تبدیل یک حالت به حالت دیگر، است. توصیف هندسی این کمیت در پس‌زمینه‌ی گرانشی از منظر هولوگرافی در [۳] معرفی شد. در این مقاله برای مدل شبه-QCD به منظور بررسی تغییر فاز محبوس/عدم محبوس شدگی[۲]، پیچیدگی زیرناحیه‌ای محاسبه و به بررسی ارتباط با آن سایر کمیات پرداخته شده است.

مدل: در[۵] متریک پنج بعدی که آن را AdS_5 اصلاح شده (MAdS) می‌نامیم یعنی:

$$ds^2=\frac{R^2}{z^2}g(z)\left(-dt^2+d\vec{x}^2+dz^2\right) \qquad (۱)$$

[۱] Pure state

[۲] Confinement-deconfinement phase transition

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

و در [٦]، نسخه‌ی دما دار این متریک که آن را سیاهچاله‌ی اصلاح شده (MBH) می‌نامیم به صورت زیر:

$$ds^2=\frac{R^2}{z^2}g(z)\left(-f(z)dt^2+d\vec{x}^2+\frac{dz^2}{f(z)}\right) \qquad (۲)$$

که در آن‌ها، $g(z)=e^{\frac{c}{2}z^2}$ و $\vec{x}\equiv(x_1,x_2,x_3)$ و z به عنوان مختصه‌ی شعاعی، معرفی شده‌اند. $c\approx 0.9\ GeV^2$ پارامتر تعدیل کننده نامیده می‌شود. این پس‌زمینه‌های مجانبا AdS_5 با شعاع R با نظریه‌ی پیمانه‌ای شبه QCD در دمای صفر و دمای غیر صفر دوگان هستند. $f(z)=1-\frac{z^4}{z_h^4}$ و $T=\frac{1}{\pi z_h}$ دمای هاوکینگ و z_h محل افق سیاهچاله است. تغییر فاز محبوس/عدم محبوس شدگی در تصویر گرانشی با تغییر پس زمینه از (۱) به (۲) توصیف می‌شود[٦]. انرژی پتانسیل بین کوارک و پادکوارک در نظریه‌ی میدان کوانتومی از ارزیابی مقدار چشم داشتی عملگر غیرموضعی پیمانه ناوردا، حلقه‌ی ویلسون[۳] روی یک حلقه‌ی مستطیلی با دو ضلع زمان τ و فاصله r با $\tau\gg r$ که متناظر با یک پیکربندی برای زوج کوارک پادکوارک ایستا با فاصله‌ی r است به دست می‌آید. طبق دوگانی پیمانه‌ای-گرانشی، ریسمان بازی که تصویر جهان‌رویه[٤]ی آن روی مرز فضای AdS همان مسیر بسته‌ای باشد که مقدار چشم‌داشتی عملگر حلقه‌ی ویلسون روی آن محاسبه می‌شود با این عملگر متناظر است. مقدار چشم‌داشتی حلقه‌ی ویلسون متناظر با ارزیابی کنش ریسمان در پاسخ کلاسیکی خود است[۱]. بنابراین می‌توان با استفاده از این نسخه انرژی پتانسیل بین زوج کوارک پادکوارک را به عنوان مزون سنگین در حد کاوش[٥] محاسبه نمود. با محاسبه‌ی $z_c=\sqrt{\frac{2}{c}}$ (قطع کننده‌ی توده)، در پس‌زمینه‌ی (۱) رفتار خطی و رفتار $\frac{1}{r}$ مورد انتظار برای انرژی پتانسیل بین کوارک و پادکوارک در فواصل بلند و کوتاه به دست می‌آید[٥]. در واقع این پس‌زمینه توصیف‌گر QCD در انرژی پایین یعنی فاز محبوس شده است. همچنین می‌توان آنتروپی درهم‌تنیده از دیدگاه هولوگرافی را با در نظر گرفتن پیکربندی پیوسته و گسسته برای پس‌زمینه‌ی (۱) محاسبه و به کاوش تغییر فاز پرداخت. در نتیجه‌ی آن تغییر فاز در $l_c\approx 1\ fm$ (سازگار با اندازه‌ی هادرون‌ها) اتفاق می‌افتد یعنی با توجه به شکل ۱ در محدوده‌ای که رفتار خطی پتانسیل غالب است[۷].

آنتروپی درهم‌تنیدگی: یک سیستم کوانتومی نمایش داده شده با ماتریس چگالی خالص را می‌توان به دو زیرسیستم A و B که در هم تنیده هستند تقسیم کرد. نسخه‌ی آنتروپی درهم‌تنیدگی در رهیافت هولوگرافی به صورت زیر است [۲]:

$$S_A=\frac{Area(\gamma_A)}{4G_5} \qquad (۳)$$

γ_A سطح کمینه‌ی سه بعدی در پس‌زمینه‌ی مجانبا AdS_5 است که مرز آن، ∂A، همان مرز زیرسیستم A است. G_5 ثابت گرانش پنج بعدی است.

پیچیدگی و پیچیدگی زیرناحیه‌ای: پیچیدگی محاسباتی در نظریه‌ی اطلاعات کوانتومی کمترین تعداد عملیات مورد نیاز برای انجام یک عمل یا حل یک مسئله است. بعبارت دیگر پیچیدگی میزان سختی رسیدن به حالت نهایی از حالتی اولیه را بیان می‌کند. در نظریه‌ی میدان کوانتومی این عمل به طور مشخص آماده‌سازی یک حالت در نظریه‌ی میدان کوانتومی خواهد بود که بوسیله‌ی تبدیلی یکانی از یک حالت اولیه به دست می‌آید. به بیان دیگر پیچیدگی حالت نهایی به عنوان کم‌ترین تعداد عملگرهای یکانی مورد نیاز برای آماده‌سازی این حالت از حالت اولیه تعریف می‌شود. نسخه‌ی هولوگرافی پیچیدگی که این مقاله روی آن متمرکز است، نسخه ی پیچیدگی زیرناحیه‌ای است که تعمیمی طبیعی از نسخه‌ی هولوگرافی آنتروپی درهم‌تنیدگی است. برای یک زیرناحیه‌ی معین روی برش زمانی در مرز در ارتباط با حالت‌های آمیخته[٦]، این نسخه بیان می‌کند که پیچیدگی متناسب با حجم محصور شده توسط سطح کمینه‌ی γ_A است. یعنی پیچیدگی برای زیرناحیه‌ی A می‌شود[٤]:

$$C_A=\frac{V_{\gamma_A}}{8\pi RG_5} \qquad (۴)$$

نتایج عددی: با در نظر گرفتن سطح درهم‌تنیده‌ی مستطیلی A به طول l و پهنای $L\to\infty$، با $-l/2<x_1(\equiv x)<l/2$ و

۳ Wilson loop
٤ World-sheet
٥ Probe
٦ Mixed State

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

$x_2, x_3 \in (-\infty, \infty)$ در یک زمان مشخص، می‌توان آنتروپی درهم-تنیده پیوسته و گسسته را برای پس‌زمینه‌ی(۱) به دست آورد[۷]:

$$S_A^c = \frac{L^2}{2G_5}\int_0^{z_*} \frac{R^3 z^3 g(z)^3}{z_*^3\sqrt{z_*^6 g(z)^3 - z^6 g(z_*)^3}}dz \qquad (۵)$$

که در آن $z_* = z(x=0)$. با در نظر گرفتن پیکربندی گسسته که با دو سطح در $x = \pm\frac{l}{2}$ توصیف می‌شود، به دست می‌آید:

$$S_A^d = \frac{L^2}{2G_5}\int_0^{\sqrt{\frac{2}{c}}} \left(\frac{R^2 g(z)}{z^2}\right)^{\frac{3}{2}} dz \qquad (۶)$$

سپس برای تعیین تغییر فاز کمیت زیر را در نظر می‌گیریم[۷]:

$$\Delta S(l) \equiv \frac{2G_5}{L^2}\left(S_A^c - S_A^d\right) \qquad (۷)$$

برای به دست آوردن حجم درون سطح درهم‌تنیده، برای (۱)، با استفاده از مساحت سطح کمینه‌ی γ_A :

$$S = \frac{L^2}{4G_5}\int_{-\frac{l}{2}}^{\frac{l}{2}} \frac{R^3}{z^3} g(z)^{\frac{3}{2}}\sqrt{1+z'(x)^2}dx \qquad (۸)$$

و با استفاده از ثابت حرکت، نمایه[۷] سطح کمینه $z(x)$ و یا معادلا $x(z)$ بدست می‌آید. سپس در حالت ایستا حجم محصور با انتگرال‌گیری درون سطح کمینه به دست می‌آید:

$$V_{\gamma_A}(z_*) = 2L^2\int_0^{z_*} \frac{R^4}{z^4} g(z)^2 x(z) \qquad (۹)$$

و با تکرار محاسبات برای پس‌زمینه‌ی (۲) خواهیم داشت:

$$V_{\gamma_A}(z_*) = 2L^2\int_0^{z_*} \frac{R^4}{z^4}\frac{g(z)^2 x(z)}{\sqrt{f(z)}} \qquad (۱۰)$$

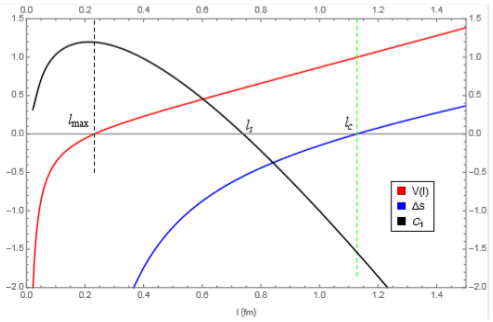
در تشابه با آنتروپی درهم‌تنیدگی، پیچیدگی زیرناحیه‌ای واگرا است و می‌توانیم حجم بهنجار شده را که آن را پیچیدگی نسبی می‌نامیم به صورت زیر تعریف کنیم:

$$C_1 \equiv \frac{C_{MAdS}}{C_{AdS}} - 1 \qquad (۱۱)$$

$$C_2 \equiv \frac{C_{MBH}}{C_{BH}} - 1 \qquad (۱۲)$$

که در آن به ترتیب C_{MAdS}،C_{AdS}،C_{MBH}و C_{BH} پیچیدگی زیرناحیه‌ای از دیدگاه هولوگرافی برای A در فضاهای MAdS، AdS، MBH و BH است. با در نظر گرفتن حالتی متناظر با یک پس‌زمینه در طرف گرانشی که با یک ریسمان کلاسیک (مزون در نظریه‌ی دوگان) کاوش می‌شود، با معادل گرفتن فاصله‌ی بین کوارک و پادکوارک یعنی r با طول زیرناحیه یعنی l، می‌توان $C_{MAdS}(C_{AdS})$ را به عنوان پیچیدگی مزون در حد کاوش در خلا غیرهمدیس (همدیس) تعبیر کرد.

دمای صفر: حالتی را در نظر می‌گیریم که متناظر با (۱) است و با یک ریسمان کلاسیک (مزون در نظریه‌ی دوگان) در طرف گرانشی کاوش می‌شود. در شکل 1 محور افقی فاصله‌ی بین کوارک و پادکوارک $r \equiv l$ است. با توجه به نمودار، تغییر فاز QCD در محدوده‌ی $C_1<0$ دقیقا در $l=l_c$ و $\Lambda_c=l_c^{-1}=175\ MeV$ اتفاق می‌افتد. برای محدوده‌ی مجاز l (محدوده‌ی $l>l_c$ که در آن باید پس-زمینه‌ی (۲) جایگزین (۱) شود، دیگر محدوده‌ی فیزیکی نیست)، و نزدیک به l_c ، در فاز محبوس شده، پیچیدگی مزون در خلا غیرهمدیس کمتر از آن در خلا همدیس است یا معادلا به اطلاعات کمتری برای آماده‌سازی مزون در خلا غیرهمدیس نیاز داریم. این به نظر معقول است چراکه (۱) فاز محبوس شده را توصیف و انرژی پتانسیل بین زوج را در توافق با شهود ما تولید می‌کند.



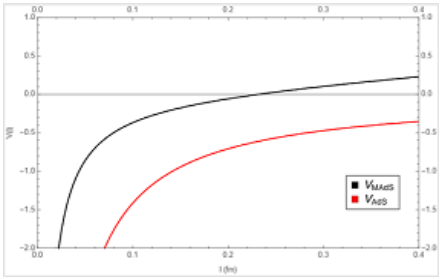
شکل 1 پتانسیل V(l)، ΔS و C_1 بر حسب l (fm) برای $c=0.94\ GeV^2$.

به بیان دیگر پیچیدگی زیرناحیه‌ای برای یافتن مقدار انرژی بحرانی تغییر فاز کمکی نمی‌کند اما بیان می‌کند که تعیین حالت مزون در خلا غیرهمدیس برای $\Lambda(=l^{-1}) \leq \Lambda_c$، تعیین حالت مزون در خلا غیرهمدیس آسان‌تر است. همچنین انرژی پتانسیل مزون در حدود l_{max} صفر می‌شود؛ یعنی در محلی که C_1 به مقدار بیشینه‌ی خود می‌رسد. در واقع در دمای صفر مادامی که جمله‌ی $\left(\frac{1}{r}\right)$ غالب است پیچیدگی نسبی کاهش (افزایش) می‌یابد. با توجه به شکل ۲ مزون در خلا غیر همدیس همیشه نسبت به خلا همدیس ناپایدارتر

[۷] Profile

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

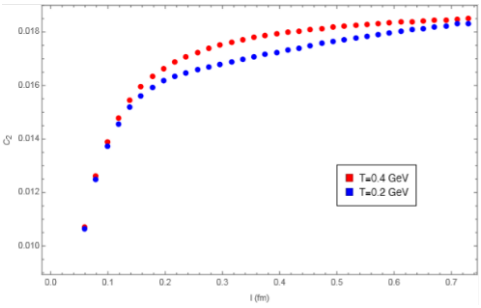
است. در نزدیکی نقطه‌ی بحرانی تغییر فاز یعنی 175MeV≤E≤270MeV مزون با پایداری کم‌تر نیاز به اطلاعات کم‌تری برای تعیین شدن دارد. بنابراین به نظر می‌رسد نزدیک نقطه‌ی بحرانی انتخاب بهتر مزون ناپایدارتر (در خلا غیرهمدیس) با اطلاعات مورد نیاز کمتر است. اما برای $l<l_c$ مزون با پایداری کم‌تر به اطلاعات بیشتری برای تعیین شدن نیاز دارد.



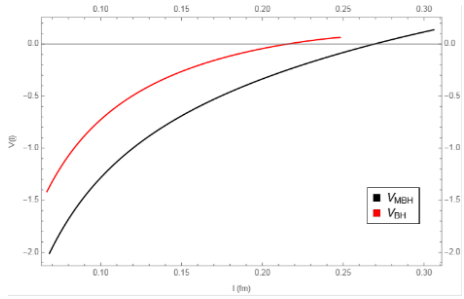
شکل۲. انرژی پتانسیل مزون در پس‌زمینه‌های AdS و M.

یعنی E>270 MeV محدوده‌ای‌ست که بوسیله‌ی خلا همدیس بهتر توصیف می‌شود. به نظر می‌رسد که غالب شدن جمله‌ی r پتانسیل در نزدیکی نقطه‌ی بحرانی باعث سازگاری نتیجه با شهود می‌گردد. از آنجاییکه پیچیدگی کمیتی برای طبقه‌بندی حالات کوانتومی بر اساس میزان سختی در تولیدشان است، این نتایج نشان می‌دهد که نزدیک انرژی تغییر فاز سختی در آماده سازی حالت مزون در خلا غیرهمدیس، دوگان با (۱)، کمتر از حالت همدیس است.

دمای محدود: در تشابه با حالت قبل، C_2 را بر حسب l در شکل ۳ رسم کرده‌ایم. تفاوت قابل ملاحظه ای برای دماهای مختلف وجود ندارد و همواره $C_{MBH}>C_{BH}$. بنابراین به منظور تعیین حالت مزون در خلا گرمایی اطلاعات کمتری مورد نیاز است نسبت به خلا گرمایی. برای یک مقدار مشخص l، زوج در خلا گرمایی کمتر مقید هستند (شکل ٤)، بنابراین حالت مقید در خلا غیرهمدیس گرمایی قوی‌تر است. به عبارتی استتار[۸] رنگی که از ایجاد تقید بین کوارک و پادکوارک در فاز محبوس‌شده جلوگیری می‌کند، در خلا گرمایی قوی‌تر است. در نتیجه برای تعیین حالت مقید در خلا غیرهمدیس گرمایی اطلاعات بیشتری نیاز داریم. انرژی پتانسیل در شکل ٤ خطی نیست و انتظار داریم، طبق نتایج بخش قبل، C_2 همواره با l افزایش یابد.

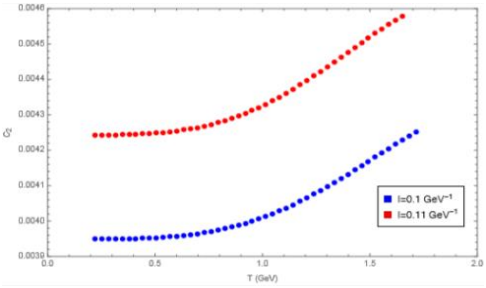


شکل۳. C_2 به عنوان تابعی از l (fm) برای $c=0.94\ GeV^2$.



شکل٤ . انرژی پتانسیل مزون برای BH و MBH برای T=200MeV.

در شکل ۵ C_2 بر حسب دما رسم شده است. استتار رنگی زمانی که دما یا فاصله l افزایش می‌یابد، قوی‌تر می‌شود. بنابراین استتار پتانسیل کوارک پادکوارک ایستا و C_2 با یکدیگر افزایش می‌یابند.



شکل۵. C_2 به عنوان تابعی از T برای $c=0.94\ GeV^2$.

مرجع‌ها

[1]. J. Casalderrey-Solana, H. Liu, D. Mateos, K. Rajagopal and U.A.Wiedemann,"Gauge/String Duality, Hot QCD and Heavy Ion Collisions",Cambridge University Press, 2014 [arXiv:1101.0618 [hep-th]].
[2]. T. Nishioka, S. Ryu and T. Takayanagi, "Holographic Entanglement Entropy: An Overview," J. Phys. A42. 504008 (2009), [arXiv:0905.0932 [hep-th]].
[3]. Leonard Susskind, "Entanglement is not enough," Fortsch.Phys. 64 (2016) 49-71 [arXiv:1411.0690].
[4]. Mohsen Alishahiha,"Holographic Complexity", Phys. Rev. D. 92, 126009 (2015),[arXiv:1509.06614].
[5]. O.Andreev and V.I. Zhakharov, "Heavy-quark potentials and AdS/QCD," Phys. Rev. D 74, 025023 (2006) [arXiv:0604204]
[6]. O.Andreev and V.I. Zhakharov,"Thr Spatial String Tension,Thermal Phase Transition, and AdS/QCD," Phys. Lett. B 645, 437 (2007) [arXiv:0607026]
[7] M.Ali-Akbari, M.Lezgi, "AdS/QCD, Entanglement Entropy and Critical Temperature," Phys. Rev. D 96, 086014 (2017) [arXiv:1706.04335]

[۸] Screening

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بارهای مرکزی نظریه‌ی دوگان گرانش جرمدار گسترش‌یافته از رهیافت ترمودینامیک

مهدویان یکتا، داود [۱] ؛ گلچین، حنیف [۲]

[۱] گروه فیزیک، دانشگاه حکیم سبزواری ، سبزوار

[۲] دانشکده فیزیک، دانشگاه شهید باهنر کرمان، کرمان

چکیده

از دیدگاه دوگانی گرانش-میدان، یک نظریه گرانشی می تواند دوگان با یک تئوری میدان همدیس که در یک بعد پایین‌تر زندگی می‌کند، باشد. از طرف دیگر، برای برخی از جواب‌های سیاهچاله‌ای در بعضی از نظریه‌های گرانشی که دارای افق‌های کوشی (داخلی) و رویداد (خارجی) می‌باشند، حاصلضرب آنتروپی آنها از جرم سیاهچاله مستقل است که به قانون جهانی حاصلضرب آنتروپی موسوم است و می‌توان بارهای مرکزی نظریه میدان همدیس دوگان آنها را از روی این حاصلضرب محاسبه کرد. در این مقاله می خواهیم این محاسبه را برای نظریه گرانش جرمدار جدید گسترش یافته در فضا-زمان سه بعدی انجام دهیم و بارهای مرکزی مربوط به جبر ویراسورو نظریه میدان همدیس دو بعدی را که در مرز آن زندگی می‌کند بدست آوریم. این محاسبات را برای سیاهچاله‌های BTZ و آنتی دوسیته تابدار به عنوان جواب‌های گرانش سه بعدی انجام می‌دهیم.

Central charges of dual theory of Extended massive gravity from Thermodynamics method

Mahdavian Yekta, Davood [1]; Golchin, Hanif [2]

[1] Department of Physics, Hakim Sabzevari University, Sabzevar
[2] Faculty of Physics, Shahid Bahonar University of Kerman, Kerman

Abstract

From the guage-gravity point of view, a gravitational theory may be dual to a conformal field theory (CFT) that lives in one lower dimension. On the other hand, for a number of black hole solutions of some gravitational theories which have Cauchy (inner) and event (outer) horizons, the product of entropies is independent of the black hole mass known as universal entropy product law and one can calculate the central charges of dual CFT from this product. In this paper, we compute the central charges of Virasoro algebras of 2-dimensional CFT which are dual to 3-dimensional extended new massive gravity theory. We consider this calculations for BTZ and warped AdS black holes.

PACS No. *(4,11)*

۱. مقدمه

اگرچه سیاهچاله‌ها در ابتدا به عنوان جواب‌های کلاسیکی نظریه نسبیت عام اینشتین پیشنهاد شدند اما بعد از معرفی قانون مساحت توسط بکنشتاین-هاوکینگ [۱و۲] برای آنتروپی سیاهچاله‌ها، جنبه-های کوانتومی آنها بیش از پیش در گرانش مورد توجه قرار گرفت. این نتیجه با محاسباتی که در نظریه ریسمان، به عنوان نامزد اصلی نظریه گرانش کوانتومی، بوسیله شمارش تعداد درجات آزادی میکروحالتهای سیاهچاله انجام شده است [۳] همخوانی دارد. دوگانی گرانش-میدان که به تناظر AdS/CFT نیز مشهور است یکی از موضوعات مورد علاقه پژوهشگران در حوزه فیزیک نظری است که در چارچوب نظریه‌ی ریسمان معرفی شده است. براساس این دوگانی، یک نظریه گرانشی با یک نظریه میدان همدیس کوانتومی که در یک بعد کمتر زندگی می‌کند، متناظر است [٤]. مدل‌های گرانش ۳ بعدی با توجه به حجم محاسبات می‌توانند

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

برای درک مفاهیم کوانتومی نسبیت عام از این رهیافت مفید واقع شوند.

از سوی دیگر، قوانین ترمودینامیکی سیاهچاله‌ها [۵] نیز راه را برای مطالعات کوانتومی هموارتر نموده‌اند. اخیراً مشاهده شده است که حاصلضرب آنتروپی افق‌های رویداد (بیرونی) و کوشی (داخلی)، $S^+S^- = 4\pi^2\left(N_L - N_R\right)$، برخی سیاهچاله‌ها مستقل از جرم و تابعی از بارهای کوانتیده است و نقش مهمی در توصیف هولوگرافیکی سیاهچاله‌ها ایفا می‌کند[٦] که بر اساس آن یک روش ترمودینامیکی برای تناظر سیاهچاله و نظریه میدان همدیس معرفی شد[۷]. مشخصه افق کوشی این است که چون در داخل ناحیه افق رویداد قرار گرفته است، بردار کیلینگ آن فضا-گونه می‌باشد. مطالعه پارامترهای ترمودینامیکی این افق می‌تواند به فهم بهتر نظریه گرانش کوانتومی کمک کند.

روش مرسوم محاسبه بار مرکزی نظریه میدان دوگان، گروه تقارنهای مجانبی است که مستلزم پیدا کردن حد نزدیک افق جواب‌ها و اعمال شرایط مرزی و انجام محاسبات نسبتا طولانی است. اما برخی از کمیت‌های نظریه دوگان همدیس را می‌توان با استفاده از کمیت‌های ترمودینامیکی افق‌های بیرونی و داخلی محاسبه و بازسازی کرد. در این روش حاصلضرب S^+S^- مستقل از جرم است اگر $T^+S^+ = T^-S^-$ که نتیجه آن در نظریه دوگان همدیس این است که بارهای مرکزی مدهای راستگرد و چپگرد باهم برابرند یعنی $c_L = c_R$ و می‌توان آنها را از رابطه زیر محاسبه کرد [۷]:

$$c_L = c_R = 6\frac{\partial}{\partial N}\left(\frac{S^+S^-}{4\pi^2}\right), \qquad (۱)$$

که N بار پایسته و کوانتیده سیاهچاله است.

در این مقاله می‌خواهیم قانون حاصلضرب آنتروپی‌ها را برای سیاهچاله‌های BTZ و آنتی دوسیته تابدار (WAdS) در نظریه گرانش جرمدار جدید گسترش یافته ۳ بعدی بررسی کنیم. همچنین بارهای مرکزی نظریه میدان همدیس ۲ بعدی دوگان به این گرانش را از رهیافت ترمودینامیکی (۱) محاسبه می‌کنیم و با استفاده از عبارت‌های بدست آمده کمیتهای دیگر نظریه دوگان را نیز استخراج می‌کنیم.

۲. گرانش جرمدار جدید گسترش‌یافته

گرانش جرمدار جدید یکی از مدل‌های گرانشی سه بعدی است که لاگرانژی آن شامل توان‌های مرتبه دوم تانسورهای ریچی بوده و از لحاظ پاریته تقارن زوج دارد [۸]. اگرچه نظریه شامل مشتقات مرتبه بالاتر از ۲ می‌باشد اما یک نظریه بازبهنجارپذیر و یکانی است که میدان غیر فیزیکی شبح (ghost) ندارد. تعمیمی از این مدل به مشتقات بالاتر وجود دارد که با نظریه هولوگرافی c نیز سازگار است [۹] و به گرانش جرمدار جدید گسترش یافته موسوم است[۱۰]. کنش این نظریه با رابطه زیر داده می‌شود:

$$I_{ENMG} = \int d^3x \frac{\sqrt{-g}}{16\pi G}\left\{R - 2\Lambda - \frac{1}{m^2}\left(R_{\mu\nu}R^{\mu\nu} - \frac{3}{8}R^2\right)\right. \qquad (۲)$$
$$\left. - \frac{2}{3m^4}\left(R_\mu{}^\nu R_{\nu\rho}R^{\rho\mu} - \frac{9}{8}R\,R_{\mu\nu}R^{\mu\nu} + \frac{17}{64}R^3\right)\right\},$$

که G و Λ به ترتیب ثابت گرانشی و ثابت کیهانشناسی ۳ بعدی و m یک پارامتر با بعد جرمی واحد هستند. $g_{\mu\nu}$ متریک فضا و $R_{\mu\nu}$ و R هم تانسورهای انحنای ریچی و اسکالرریچی هستند.

چون در فضای ۳ بعدی تانسور وایل صفر می‌شود، لذا تانسور ریمان از تانسورهای ریچی مستقل نمی‌باشد، برای همین لاگرانژی شامل توان‌های بالاتر تانسور ریمان شبیه نظریه گاوس-بونه نمی-باشد. با وردش از کنش (۲) معادلات حرکت این نظریه عبارتند از

$$R_{\mu\nu} - \frac{1}{2}g_{\mu\nu}R + \Lambda g_{\mu\nu} - K_{\mu\nu} = 0, \qquad (۳)$$

که با توجه به طولانی بودن عبارت $K_{\mu\nu}$ خواننده می‌تواند به [۹و۱۰] مراجعه نماید.

۳. سیاهچاله BTZ

عام‌ترین جواب معادلات حرکت (۲) سیاهچاله BTZ است[۱۱] که به طور موضعی AdS بوده و دارای تقارن محوری می‌باشد. برای عنصر طولی در فضا-زمان اطراف این سیاهچاله داریم:

$$ds^2 = -\frac{(r^2 - r_+^2)(r^2 - r_-^2)}{r^2l^2}dt^2 + r^2\left(d\phi - \frac{r_+r_-}{r^2l}dt\right)^2 \qquad (٤)$$
$$+ \frac{r^2l^2}{(r^2 - r_+^2)(r^2 - r_-^2)}dr^2 .$$

r_+ و r_- به ترتیب افق‌های رویداد و کوشی سیاهچاله و l شعاع فضای AdS هستند. متریک (٤) جواب معادلات حرکت (۳) است اگر داشته باشیم

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

$$\Lambda=-\frac{8m^4l^4+2m^2l^2+1}{8m^4l^6}. \quad (۵)$$

جرم و اندازه حرکت زاویه‌ای سیاهچاله با محاسبه بارهای پایسته و انتگرالگیری روی مسیر دایره‌ای بدست می‌آیند

$$M=\frac{r_+^2+r_-^2}{8l^2G}\left(1-\frac{1}{2m^2l^2}-\frac{1}{8m^4l^4}\right), \quad (۶)$$

$$J=\frac{r_+r_-}{4lG}\left(1-\frac{1}{2m^2l^2}-\frac{1}{8m^4l^4}\right). \quad (۷)$$

آنتروپی سیاهچاله در افق‌های رویداد و کوشی با استفاده از فرمول والد به صورت زیر بدست می‌آیند:

$$S^+=\frac{2\pi r_+}{4G_3}\left(1-\frac{1}{2m^2l^2}-\frac{1}{8m^4l^4}\right),$$
$$S^-=\frac{2\pi r_-}{4G_3}\left(1-\frac{1}{2m^2l^2}-\frac{1}{8m^4l^4}\right). \quad (۸)$$

کمیت‌های ترمودینامیکی دیگر سیاهچاله از قبیل دمای هاوکینگ و سرعت زاویه‌ای نیز برای افق‌های با روابط

$$T^\pm=\frac{r_+^2-r_-^2}{2\pi l^2 r_\pm}, \quad \Omega^\pm=\frac{r_\mp}{l\,r_\pm}. \quad (۹)$$

داده می‌شوند. چون جرم و اندازه حرکت زاویه ای کمیت‌هایی پایسته می‌باشند، بنابراین پارامترهای بدست آمده در رابطه های (۶)-(۹) قانون اول ترمودینامیک سیاهچاله‌ها و همچنین رابطه اسمار برای محاسبه جرم را به صورت زیر برآورده می‌کنند:

$$dM=\pm T^\pm dS^\pm+\Omega^\pm dJ,\ M=\pm\frac{1}{2}T^\pm S^\pm+\Omega^\pm J. \quad (۱۰)$$

٤. سیاهچاله آنتی دوسیته تابدار

دسته‌ای دیگر از پاسخ‌های چرخان معادلات (۲) سیاهچاله آنتی دوسیته تابدار (WAdS) می‌باشد [۱۲]. متریک این سیاهچاله با المان طولی زیر داده می‌شود:

$$\frac{ds^2}{l^2}=-N^2dt^2+\frac{dr^2}{4N^2K^2}+K^2\left(d\phi+N_\phi dt\right)^2, \quad (۱۱)$$

که توابع N^2، K^2 و N_ϕ عبارت هستند از

$$N^2=\frac{\left(v^2+3\right)\left(r-r_+\right)\left(r-r_-\right)}{4K^2},\ N_\phi=\frac{2vr-\sqrt{(v^2+3)r_+r_-}}{2K^2}, \quad (۱۲)$$
$$K^2=\frac{r}{4}\left[3\left(v^2-1\right)+\left(v^2+3\right)\left(r_++r_-\right)-4v\sqrt{(v^2+3)r_+r_-}\right].$$

پارامتر $v>1$ در عامل پیچش نقش تعیین کننده‌ای دارد و به ازای $v=1$ به سیاهچاله BTZ می‌رسیم. با جایگذاری متریک (۱۱) در معادلات (۲) پارامترهای v و Λ رابطه های زیر را برآورده می‌کنند:

$$v^2=\frac{6}{7}+\frac{10m^2l^2}{21}+\frac{1}{42}\sqrt{232m^4l^4+1188m^2l^2+729}, \quad (۱۳)$$
$$\Lambda=-\frac{8648m^6l^6+57132m^4l^4-12150m^2l^2-32805}{37044m^4l^6}$$
$$-\frac{592m^4l^4-540m^2l^2-1215}{37044m^4l^6}\sqrt{232m^4l^4+1188m^2l^2+729},$$

کمیت‌های جرم و اندازه حرکت زاویه‌ای سیاهچاله با رابطه‌های

$$M=A\left(r_++r_--\frac{1}{v}\sqrt{(v^2+3)r_+r_-}\right), \quad (۱٤)$$

$$J=\frac{vlA}{4}\left[\left(r_++r_--\frac{1}{v}\sqrt{(v^2+3)r_+r_-}\right)^2-\left(r_+-r_-\right)^2\right], \quad (۱۵)$$

داده می‌شوند که برای سادگی

$$A=\frac{2v^2(v^2+3)}{G}\frac{\left(16v^2+3-\sqrt{232v^4+168v^2-45}\right)}{\left(20v^2-3-\sqrt{232v^4+168v^2-45}\right)^2}. \quad (۱٦)$$

همچنین آنتروپی افق‌های رویداد و کوشی از فرمول والد عبارتند از

$$S^+=\frac{8\pi lA}{(v^2+3)}\left(2vr_+-\sqrt{(v^2+3)r_+r_-}\right),$$
$$S^-=\frac{8\pi lA}{(v^2+3)}\left(2vr_--\sqrt{(v^2+3)r_+r_-}\right), \quad (۱۷)$$

و دمای هاوکینگ و سرعت زاویه‌ای در این افق‌ها با عبارت‌های

$$T^\pm=\frac{(v^2+3)}{4\pi l}\frac{\left(r_+-r_-\right)}{\left(2vr_\pm-\sqrt{(v^2+3)r_+r_-}\right)},$$
$$\Omega^\pm=\frac{2}{\left(2vr_\pm-\sqrt{(v^2+3)r_+r_-}\right)l}, \quad (۱۸)$$

داده می‌شوند که همراه با رابطه‌های (۱٤)-(۱۸) قانون اول ترمودینامیک و فرمول اسمار را به شکل زیر برآورده می‌کنند:

$$M=\pm T^\pm S^\pm+2\Omega^\pm J,\quad dM=\pm T^\pm dS^\pm+\Omega^\pm dJ. \quad (۱۹)$$

۵. نظریه CFT دوگان از رهیافت ترمودینامیک

هندسه مجانبی سیاهچاله BTZ یک فضای AdS گونه با تقارن $SL(2,R)_L\times SL(2,R)_R$ است و با توجه به دوگانی گرانش-میدان یک نظریه میدان ۲ بعدی در مرز این هندسه وجود دارد که دارای دو نسخه جبر ویراسورو چپگرد و راستگرد می‌باشد. در این بخش با استفاده از رهیافت ترمودینامیکی، بار مرکزی نظریه میدان

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

دوگان را محاسبه می‌کنیم. شایان ذکر است که نویسندگان این مقاله در [۱۴] محاسبه مشابهی را برای تئوری‌های "گرانش جرمدار جدید (NMG)" و "ماکسول-بورن-اینفلد (MBI)" انجام داده‌اند و مقاله حاضر می تواند بعنوان تعمیمی برای [۱۴] تلقی گردد. از حاصلضرب آنتروپی‌های (۸) برای این سیاهچاله داریم

$$\frac{S^+S^-}{4\pi^2}=\frac{r_+r_-}{16G^2}\left(1-\frac{1}{2m^2l^2}-\frac{1}{8m^4l^4}\right)^2 =\frac{l}{4G}\left(1-\frac{1}{2m^2l^2}-\frac{1}{8m^4l^4}\right)J, \quad (۲۰)$$

که با توجه به (۷) تابع اندازه حرکت زاویه‌ای و مستقل از جرم سیاهچاله است. بنابراین از رابطه (۱) داریم

$$c_L=c_R=\frac{3l}{2G}\left(1-\frac{1}{2m^2l^2}-\frac{1}{8m^4l^4}\right). \quad (۲۱)$$

این مقادیر با نتایجی که از روش تقارن‌های مجانبی بدست آمده سازگاری کامل دارد [۱۵]. دماهای مربوط به نسخه‌های چپگرد و راستگرد نظریه دوگان که به صورت

$$T_L=\frac{r_++r_-}{2\pi l}\quad,\quad T_R=\frac{r_+-r_-}{2\pi l}, \quad (۲۲)$$

تعریف می‌شوند آنتروپی‌های محاسبه شده با فرمول والد در (۷) را با فرمول‌های کاردی زیر تولید می‌کنند:

$$S^{\pm}=\frac{\pi^2}{3}\left(c_LT_L\pm c_RT_R\right). \quad (۲۳)$$

همچنین انرژی‌های مدهای چپگرد و راستگرد نظریه کوانتومی دوگان بر اساس این بارها قابل محاسبه است

$$E_L=\frac{\pi^2}{6}c_LT_L^2=\frac{Ml+J}{2}\ ,\ E_R=\frac{\pi^2}{6}c_RT_R^2=\frac{Ml-J}{2}. \quad (۲۴)$$

در مورد سیاهچاله WAdS نیز ایزومتری هندسه فضا-زمان با حاصلضرب یک نسخه جبر ویراسورو در جبر کاک-مودی به شکل $U(1)_L\times SL(2,R)_R$ داده می‌شود که می‌توان $U(1)_L$ را با استفاده از فرمول‌بندی سوگاوارا [۱۶] به جبر ویراسورو تبدیل کرد. با توجه به رابطه‌های (۱۵) و (۱۷) حاصلضرب آنتروپی‌ها عبارتند از

$$\frac{S^+S^-}{4\pi^2}=\frac{16vlA}{G(v^2+3)^2}J, \quad (۲۵)$$

که مستقل از جرم است و با توجه به رهیافت ترمودینامیکی (۱) بارهای مرکزی نظریه دوگان عبارتند از

$$c_L=c_R=\frac{96vlA}{(v^2+3)^2G}. \quad (۲۶)$$

انرژی‌های چپگرد و راستگرد نیز با توجه به دماهای

$$T_R=\frac{(v^2+3)}{8\pi}\left[r_++r_--\frac{1}{v}\sqrt{(v^2+3)r_+r_-}\right], \quad (۲۷)$$
$$T_L=\frac{(v^2+3)}{8\pi}\left(r_+-r_-\right),$$

با روابط زیر داده می شوند

$$E_L=\frac{\pi^2}{6}c_LT_L^2=\frac{vl}{4}M^2,\ E_R=\frac{\pi^2}{6}c_RT_R^2=\frac{vl}{4}M^2-J. \quad (۲۸)$$

٦. نتیجه‌گیری

در این مقاله نشان دادیم که حاصلضرب آنتروپی افق‌های داخلی و خارجی سیاهچاله‌های BTZ و WAdS در نظریه گرانش جرمدار جدید گسترش‌یافته مستقل از جرم است و سپس با استفاده از رهیافت ترمودینامیکی، بارهای مرکزی CFT دوگان را برای این دو جواب بدست آوردیم. محاسبه بار مرکزی برای جواب WAdS برای نخستین بار صورت گرفته است. همچنین بار مرکزی سیاهچاله BTZ قبلا در [۱۵] به روش تقارن‌های مجانبی بدست آمده بود که جواب ما در توافق کامل با آن است و این موضوع بیانگر درستی رهیافت ترمودینامیکی در گرانش جرمدار جدید گسترش‌یافته است.

مرجع‌ها

[1] J. D. Bekenstein, *Lett. Nuovo Cim.* **4**, 737 (1972).
[2] S. W. Hawking, *Commun. Math. Phys*. **43**, 199 (1975).
[3] A. Strominger and C. Vafa, *Phys. Lett. B* **379**, 99 (1996).
[4] J. M. Maldacena, *Adv. Theor. Math. Phys. 2, 231 (1998).*
[5] J. M. Bardeen, B. Carter and S. W. Hawking, *Com. Math. Phys*. **31**, 161 (1973).
[6] M. Cvetic, G. Gibbons and C. Pope, *Phys.Rev.Lett.***106** (2011) 121301.
[7] B. Chen, Z. Xue, and J. Zhang, *JHEP* **03**, 102 (2013)
[8] E.A. Bergshoeff, O. Hohm and P.K. Townsend, *Phys. Rev. Lett.* **102** (2009).
[9] A. Sinha, *JHEP* **06** (2010) 061.
[10] I. Gullu, T.C. Sisman and B. Tekin, *Class. Quant. Grav.* **27** (2010) 162001.
[11] M. Banados, C. Teitelboim, and J. Zanelli, *Phys. Rev. Lett*. **69** (1992)1849.
[12] G. Cl´ement, *Class. Quant. Grav.* **26** (2009) 105015.
[13] J. D. Brown and M. Henneaux, *Com.Math.Phys*. **104** (1986).
[14] D. Mahdavian Yekta and H. Golchin, Eur.Phys.J.C **80** (2020) 5, 473
[15] A. Ghodsi and D. M. Yekta, *JHEP* **1206**, 131 (2012).
[16] H. Sugawara, *Phys. Rev*. **170**, 1659 (1968).

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بررسی اصطکاک در نوسانگر اصطکاکی

رکنی، رانا[۱] ؛ ابراهیمی، عقیله سادات[۲]

[۱]دبیرستان فرزانگان ۱، خیابان سرپرست، تهران

[۲]دانشکده فیزیک دانشگاه کاشان، راوند، کاشان

چکیده

در این تحقیق با مطالعه منابعی از تاریخچه اصطکاک و قوانین آن به طراحی دستگاه نوسانگر اصطکاکی پرداختیم که شامل دو استوانه موازی است که توسط موتوری در جهت مخالف هم می چرخند و میله‌ای استوانه‌ای شکل بر روی دو غلتک سوار شده و حرکت متناوب دارد. در آزمایش‌ها تاثیر متغیرهایی همچون طول میله، جنس میله و فاصله دو غلتک بر روی دوره تناوب میله مورد بررسی قرار گرفت. همچنین این آزمایش با نرم افزار متمتیکا نیز شبیه سازی شده است و نتایج شبیه سازی وآزمایش مورد بررسی قرار گرفته است که میزان اصطکاک و دوره تناوب با هم رابطه عکس داشته و با افزایش فاصله دو غلتک دوره تناوب نیز افزایش میابد. طول میله عاملی بی اثر بوده و فقط افتادن میله از روی غلتک‌ها را با افزایش گشتاور منجر می شود.

واژه های کلیدی: *اصطکاک جنبشی، نوسا نگر اصطکاکی ، حرکت متناوب*

Study on friction in friction oscillator

Rokni, Rana[1]; Ebrahimi, Aghileh S[2]

[1] Farzanegan1 high school, Sarparast Street, Tehran

[2] Department of Physics, University of Kashan, Ravand, Kashan

Abstract

In this research, by studying the laws of friction we present an easy-to-build and inexpensive experiment illustrating the laws of kinetic friction. Our setup contains an engine, *2 parallel horizontal cylinders (which rotate in opposite directions), and a cylindrical solid which has the periodic motion on the cylinders. We studied the impact of changing three variables during this research: the length of the solid, the material of the solid, the distance between the two horizontal cylinders. There is also a simulation on Mathematica which we used it as a theoretical pattern and we have compared it to the results of the experiments. The outcome of our work is by increasing the distance of 2 cylinders, the period of rotation will be increased, μk and the period of rotation have the opposite relation and the length of the solid is an ineffective variable.*

***Keywords**: laws of kinetic friction, periodic motion*

مقدمه

اصطکاک یکی از مفاهیم مهم فیزیکی در زندگی روزمره می‌باشد. اصطکاک زمانی به وجود می‌آید که دو جسم در تماس با هم قرار گرفته و نیرویی به یکی از این دو جسم وارد شود. نیروی اصطکاک اساسا برابر با مجموع برداری نیروهایی است که در میان اتم‌های سطحی یک جسم و اتم‌های سطحی جسم دیگر اثر کنند[۱]. به حداقل رساندن میزان اصطکاک دو جسمِ در تماس که در حرکت هستند، در صنعت اهمیت زیادی دارد زیرا از این طریق می توان از هدر رفت انرژی جلوگیری کرد. از این رو طراحی آزمایشی ساده که بتوان با استفاده از آن مفاهیم مربوط به اصطکاک و پارامترهای مربوط به آن را به صورت آزمایشگاهی مورد بررسی قرار داد، حائز اهمیت است.

هر چند که این موضوع از زمان‌های قبل از تاریخ مورد بحث بوده است، اولین تحقیق بر روی اصطکاک را می‌توان به لئوناردو داوینچی[1] نسبت داد که قوانین حاکم بر حرکت یک بلوک بر روی سطحی صاف را استنباط کرد. همچنین در قرن ۱۷ ام آمانتون[2] قوانین مربوط به اصطکاک را مورد مطالعه قرار داد[٤]. آمانتون قوانین مربوط به اصطکاک خود را در دو قانون شرح می‌دهد و کولمب[3] به آن قواعد، قانون سومی در قرن ۱۸ ام اضافه می‌کند. در ۲۰ سال گذشته با استفاده از روش‌های نوین آزمایشگاهی دیدی گسترده‌تر و با وضوح بیشتر در مورد اصطکاک در ابعاد مولکولی حاصل شد [۳].

در این تحقیق ما به طراحی دستگاه نوسانگر اصطکاکی‌ای پرداختیم که از دو غلتک که توسط موتوری در جهت مخالف یکدیگر می چرخند و میله‌ای استوانه که بر روی غلتک‌ها سوار شده و حرکت تناوبی دارد، تشکیل شده است. با استفاده از این

1 Leonardo da vinci

2 Guillaume Amontons

3 Charles-Augustin de Coulomb

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد

http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

دستگاه آزمایشی انجام داده و به بررسی تاثیر سه متغیر طول میله، جنس میله و فاصله دو غلتک از هم پرداخته، سپس نتایج به دست آمده از آزمایشات را با تئوری شبیه سازی شده در نرم افزار متمتیکا مقایسه کرده‌ایم.

فیزیک مسئله

تصویر کلی حاصل از نوسان جسم صلب، در شکل ۱ قابل مشاهده است. جسم صلبی با جرم m بر روی دو غلتک موازی که در جهت مخالف یکدیگر با سرعت‌های یکسان می چرخند، در حال نوسان است. هر غلتک درای سرعت زاویه ای ω، شعاعی معادل a است که با فاصله ℓ از یکدیگر جدا شده اند. در نتیجهٔ چرخش غلتک‌ها در جهت‌های مخالف، نیرویی حاصل از اصطکاک به جسم صلب وارد می شود که باعث برگشت جسم صلب به محور مرکزی نوسان می شود. سرعت چرخش غلتک‌ها باید به اندازه‌ای باشد که بتواند جسم صلب را به نوسان در بیاورد و جرم جسم صلب نباید به حدی زیاد باشد تا مانعی برای چرخش غلتک ها محسوب شود[۲]. همان طور که غلتک‌ها می چرخند، جسم صلب بر روی آن‌ها قرار گرفته و شروع به حرکت در راستای x می‌کند. همان طور که در شکل ۱ مشاهده می شود، نیروها در دو راستای x و y هستند. طبق قانون دوم نیوتون برای برایند نیروها در راستا y عبارت است از:

$$y: N_1 + N_2 - mg = 0 \qquad (۱)$$

همچنین در راستا x خواهیم داشت:

$$x: F_1 - F_2 + f_{2k} - f_{1k} = m\ddot{x} \qquad (۲)$$

که می توان نتیجه گرفت:

$$N_1 - N_2 = \frac{-m\ddot{x}}{\mu_k} \qquad (۳)$$

گشتاور نیروها در راستای z برابر صفر هستند بنابراین این رابطه استخراج می‌شود:

$$N_1 - N_2 = \frac{2mgx}{l} \qquad (٤)$$

اگر دو معادله (۳) و (٤) را معادل هم قرار دهیم خواهیم داشت:

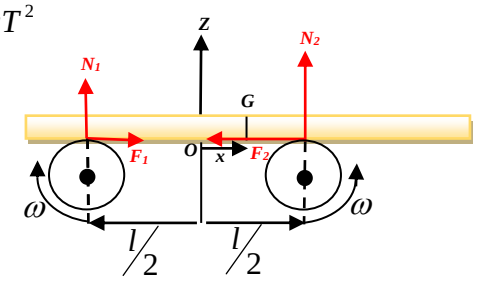
$$m\ddot{x} + \frac{2mgx\mu_k}{l} = 0 \qquad (٥)$$

و از این معادله رابطه دوره تناوب استخراج می‌شود:

$$T = \pi\sqrt{\frac{2l}{\mu_k g}} \qquad (٦)$$

که معادله ۵ با استفاده از نرم افزار متمتیکا به صورت عددی حل شده و مورد استفاده قرارگرفته است و معادله به دست آوردن مقدار اصطکاک از آن استخراج می شود:

$$\mu_k = \frac{2\pi^2 l}{gT^2} \qquad (٧)$$



شکل۱: تفکیک نیروهای وارد بر میله در حال نوسان در این شکل قابل مشاهده‌اند.

دستگاه آزمایش

با توجه به اینکه دستگاه آزمایش می‌بایست شامل دو غلتک می‌بود که در جهت مخالف یکدیگر چرخیده و دقیقا موازی همدیگر بودند تا خطایی ایجاد نشود، از دو نوع قرقره که به دو استوانه موازی با قابلیت جا به جا شدن متصل‌اند استفاده شد. این دو غلتک با استفاده از تسمه هایی ضربدری شکل که بر روی قرقره‌ها قرار دارند، مطابق شکل۲ با هم در ارتباط هستند، موتوری با سرعت ثابت برای به چرخش در آوردن غلتک ها، و صفحه‌ای برای کنار هم چیدن این موارد، استفاده شد. همچنین از میله‌های استوانه‌ای برای نوسان بر روی غلتک‌ها استفاده شده است. برای دقت بیشتر در دستگاه آزمایش، بدنه‌ای که غلتک‌ها درون آن قرار دارند، با استفاده از برش لیزر با دقت یک دهم میلیمتر تهیه شد.



شکل۲: طراحی و ساخت دستگاه نوسانگر اصطکاکی توسط قرقره، موتور و بدنه دستگاه قابل مشاهده است.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

در هر آزمایش میله یا جسم صلب بر روی غلتک با سرعت ثابت شروع به نوسان می کند. مرکز جرم میله علامت گذاری شده و جا به جایی نسبت به مرکز محورهای مختصات بر حسب زمان رسم شده است. همچنین از حل عددی معادله ۵ با استفاده از نرم افزار متمتیکا با احتساب شرایط اولیه که در برگیرنده مشخصات میله، شتاب گرانش، فاصله مراکز دو غلتک، مکان و شتاب حرکت میله در لحظه شروع حرکت است، به عنوان الگوی تئوری استفاده شد[۵]. آزمایشات به منظور بررسی کردن تاثیر سه متغیر طول میله، جنس میله و فاصله دو قرقره بر روی دوره تناوب نوسان میله انجام شدند، جدول های ۱، ۳ و ۵ نمایانگر خصوصیات هر یک از آزمایشات بوده و جدول‌های ۲، ٤، ٦ بیانگر شرایط اولیه هستند.

پارامترهای آزمایشات شامل مکان مرکز جرم میله بر حسب زمان، دوره تناوب نوسان میله، سرعت حرکت میله و اصطکاک بین میله و قرقره می‌باشد.

آزمایش اول: تغییر طول میله

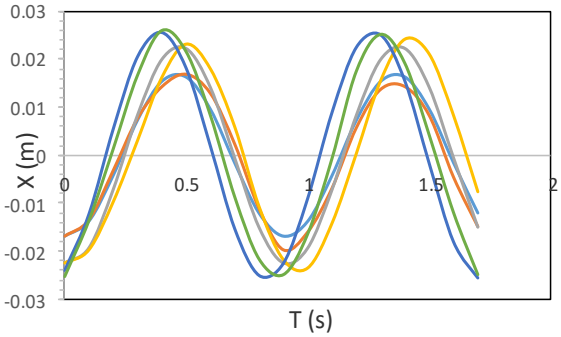
در طول این آزمایشات، طول میله تغییر کرده و تاثیر آن بر روی نوسان میله مشاهده شد. همان طور که شکل۳ نمایش می‌دهد، طول عاملی بی اثر بر روی دوره تناوب محسوب می شود که از معادله ۵ نیز قابل استخراج است. هر چند که با افزایش طول میله احتمال افتادن آن از روی دو غلتک بیشتر می‌شود زیرا که میله در حین نوسان دچار گشتاوری می‌شود که در مدل سازی فیزیکی به علت در نظر گرفتن کل جرم جسم در مرکز جرم آن، نادیده گرفته می‌شود. با افزایش طول میله به عنوان بازوی گشتاور، مقدار گشتاور نیز افزایش میابد.

جدول ۱: در این جدول مشخصات مربوط به آزمایش تغییر طول که با سه میله با طول‌های مختلف انجام شد، ذکر شده است.

مشخصات / میله	۱	۲	۳
طول (m)	۰/۲۸	۰/۲٤	۰/۲
جرم(kg)	۰/۰۲	۰/۰۱	۰/۰۱
قطر(m)	۰/۰۱	۰/۰۱	۰/۰۱
اصطکاک(N)	۳/۰	۳/۰	۳/۰
فاصله دو قرقره (m)	۰/۱۲	۰/۱۲	۰/۱۲

جدول ۲: شرایط اولیه این آزمایش در جدول زیر بیان شده است.

شرایط / میله	۱	۲	۳
مکان اولیه نسبت به مرکز محورهای مختصات(m)	-۰/۰۱	-۰/۰۲	-۰/۰۲
شتاب اولیه(m/s^2)	۰/۰۱	۰/۰۲	۰/۰۱



شکل۳: نمودار مکان–زمان آبی کمرنگ و نارنجی به ترتیب مربوط به تئوری و آزمایش میله ۱، طوسی و زرد مربوط به تئوری و آزمایش میله ۲ و نمودار آبی پررنگ و سبز مربوط به تئوری و آزمایش میله ۳ می‌باشد.

آزمایش دوم: تغییر جنس میله

در این سری از آزمایشات به بررسی تاثیر اصطکاک بر روی دوره تناوب نوسان میله پرداخته شد. طبق معادله ۷ که اصطکاک و دوره تناوب با هم رابطه عکس دارند و این امر در نمودارهای مربوط به این آزمایشات دیده می شود. همان طور که در شکل٤ دیده می-شود، نمودار تئوری و آزمایش میله ۱ مربوط به جنسی می‌شوند که اصطکاک بیشتری دارد و دوره تناوبی کمتر از نمودار تئوری و آزمایش میله ۲ دارند.

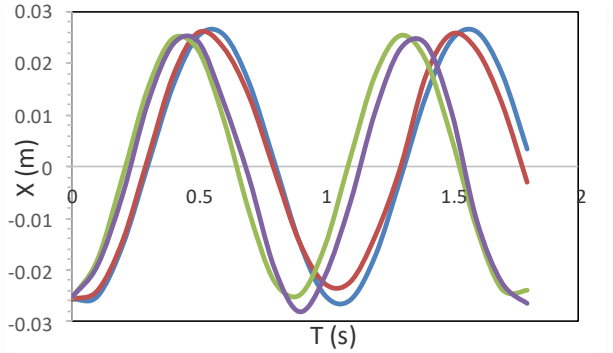
جدول ۳: دو میله با طول‌های برابر اما جنس‌های متفاوت برای آزمایش دوم که مربوط به تاثیر اصطکاک بر روی نوسان میله بود، در نظر گرفته شد.

مشخصات / میله	۱	۲
طول (m)	۰/۲۰	۰/۲۰
جرم(kg)	۰/۰۲	۰/۰۱
قطر (m)	۰/۰۱	۰/۰۱
اصطکاک (N)	۲/۰	۳/۰
فاصله دو قرقره (m)	۰/۱۲	۰/۱۲

جدول ٤: این آزمایش در شرایط اولیه زیر انجام شد.

شرایط / میله	۱	۲
مکان اولیه نسبت به مرکز محورهای مختصات(m)	-۰/۰۲	-۰/۰۲
شتاب اولیه(m/s^2)	۰/۰٤	۰/۰۱

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



شکل٤: نمودار مکان-زمان آبی و قرمز رنگ به ترتیب مربوط به تئوری و آزمایش میله ۱ با اصطکاک بیشتر و نمودار سبز و بنفش مربوط به تئوری و آزمایش میله ۲ با اصطکاک کمتر می‌باشند.

آزمایش سوم: تغییر فاصله دو قرقره

از معادله ۵ نتیجه گیری می‌شود که فاصله دو قرقره با مقدار دوره تناوب رابطه مستقیم دارد که این موضوع از نمودار آزمایشگاهی در شکل ۵ نیز استنباط می‌شود.

جدول ۵: در آزمایش سوم که مربوط به فاصله دو غلتک بود، دو فاصله متفاوت برای دو غلتک در نظر گرفته شد. آزمایشات با یک میله یکسان انجام شدند.

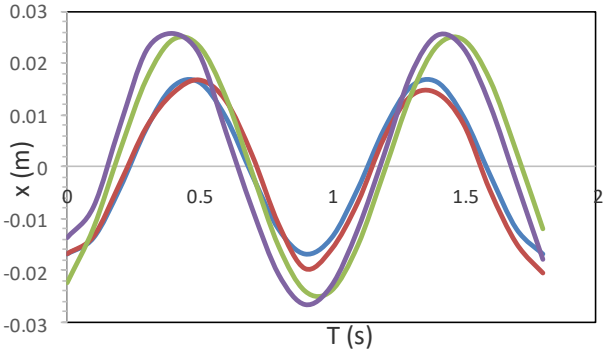
مشخصات / میله	۱	۲
طول (m)	۰/۲۸	۰/۲۸
جرم(kg)	۰/۰۲	۰/۰۲
قطر(m)	۰/۰۱	۰/۰۱
اصطکاک(N)	۳/۰	۳/۰
فاصله دو قرقره (m)	۰/۱۲	۰/۱۶

جدول ٦: این جدول بیانگر شرایط اولیه این آزمایش است.

شرایط/ میله	۱	۲
مکان اولیه نسبت به مرکز محورهای مختصات(m)	-۰/۰۱	-۰/۰۲
شتاب اولیه(m/s^2)	۰/۰۱	۰/۰۲

نتیجه گیری

در این تحقیق سعی شد تا با استفاده از دستگاهی ساده که در بردارنده دو غلتک موازی، موتوری برای به چرخش در آوردن غلتک ها و جسمی میله مانند به عنوان نوسان کننده، آزمایشی ساده طراحی کرده و تاثیر سه متغیر طول میله، جنس میله و فاصله مراکز دو قرقره بر روی دوره تناوب نوسان میله سنجیده شود.



شکل۵ نمودار مکان-زمان قرمز و آبی رنگ مربوط به تئوری و آزمایشی هستند که فاصله غلتک‌ها در آن بیشتر بودند و دوره تناوبش از دو نمودار سبز و بنفش که مربوط به تئوری و آزمایش میله ۲ می‌باشند، بیشتر است.

همان طور که در شکل۳ می‌بینیم، طول میله تاثیری بر روی دوره تناوب نوسان آن نگذاشته و عاملی بی اثر است، که این از تئوری مسئله نیز قابل استنباط می‌باشد. در شکل٤ تاثیر جنس میله بر روی دوره تناوب قابل مشاهده است. هر چه نیروی اصطکاک بیشتر باشد، دوره تناوب کمتر است و در نهایت می توان گفت اصطکاک و دوره تناوب رابطه عکس دارند. در شکل۵ تاثیر تغییر فاصله دو غلتک از هم مشاهده می‌شود، همان طور که انتظار می‌رفت، هر چه فاصله دو قرقره بیشتر باشد، دوره تناوب نیز بیشتر خواهد بود و به نوعی فاصله دو قرقره با دوره تناوب رابطه مستقیم دارد.

در نهایت می‌توان با توجه به نتایج آزمایشات فوق، به بهینه سازی ماشین‌های صنعتی و جلوگیری از هدر رفت انرژی کمک کرد.

مراجع

[۱] *مبانی فیزیک جلد اول – مکانیک*، دیوید هالیدی/ رابرت رزنیک/ جرل واکر، صفحات ۱۲۳ و ۱۲٤

[۲] Henaff R, Le Doudic G, Pilette B, Even C, Fischbach JM, Bouquet F, Bobroff J, Monteverde M, Marrache-Kikuchi CA. A study of kinetic friction: The Timoshenko oscillator. American Journal of Physics. 2018 Mar;86(3):174-9.

[۳]Ringlein, J. and Robbins, M.O., 2004. Understanding and illustrating the atomic origins of friction. *American Journal of Physics*, *72*(7), pp.884-891.

[٤] Krim, J. (1996). Friction at the atomic scale. *Scientific American*, *275*(4), 74-80.

[۵] "Wolfram Demonstrations Project by Enrique Zeleny,"<http://demonstrations.wolfram.com/TheFrictionOscillator/>.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

نقش کرنش در خواص گرمایی سیم کوانتومی

حسین‌پور، پریناز

دانشکده علوم پایه- دانشگاه صنعتی سهند تبریز

چکیده

عامل کرنش بخش اجتناب‌ناپذیر در فرایند رشد نانوساختارها می‌باشد. بدین دلیل، در این مقاله نقش کرنش در خواص گرمایی سیم کوانتومی مطالعه شده است. سیم کوانتومی با پتانسیل محبوس‌سازی سهمی‌وار در نظر گرفته شده است. در ابتدا تأثیر کرنش بر روی ترازهای انرژی سیم کوانتومی بررسی شده و سپس با استفاده از آنها انرژی داخلی و انرژی آزاد هلمهولتز محاسبه شدند. نتایج نشان داده‌اند که بادر نظر گرفتن عامل کرنش میزان انرژی داخلی و انرژی آزاد هلمهولتز افزایش می‌یابد.

واژه های کلیدی: *سیم کوانتومی، کرنش، انرژی داخلی، انرژی آزاد هلمهولتز*

The role of strain in the thermal properties of a quantum wire

Hosseinpour, Parinaz

Faculty of sciences, Sahand University of Technology, Tabriz, Iran

Abstract

The strain factor is an inevitable part of the growth process of nanostructures. For this reason, the role of strain in the thermal properties of quantum wire has been studied in this paper. The Quantum wire is considered to have the parabolic confinement potential. Firstly, the effect of strain on the energy levels of the quantum wire is investigated and then the internal energy and Helmholtz free energy is calculated by using the energy eigen-value. The results show that with Considering the strain factor, the value of internal energy and Helmholtz free energy increase.

***Keywords**: quantum wire, strain, internal energy, Helmholtz free energy*

PACS No. ۸۱ ،٦٨ ،٦١

مقدمه

تمایل صنعت به کوچک‌سازی باعث شد تا تمام فرایندهای تکنولوژی دهه گذشته بر این نیاز تمرکز داشته باشند و شاهد پیشرفتهای روزافزون در ساخت نانوساختارها باشیم. نانوساختارها، ساختارهایی هستند که حداقل یکی از ابعاد آنها در مقیاس نانو بوده و خواص فیزیکی و شیمیایی آنها تفاوت آشکاری با خواصشان در حالت کپه‌ای دارد [۱]. با پیشرفتهای سریعی که در تکنیکهای آزمایشگاهی بوجود آمد، محبوس‌سازی الکترونها در دو بعد و در نتیجه ساخت سیمهای کوانتومی امکانپذیر شد [۲]. هنگام رشد نانوساختارها، در فصل مشترک مواد با جنسهای مختلف، عامل کرنش اجتناب‌پذیر می‌باشد. در ابتدا، کرنش بعنوان یک نقص عامل کاهش بازده شناخته شده بود، تا اینکه در سال ۱۹۸۲ پیش‌بینی کردند که کاربردهای کرنش می‌تواند مهمتر از معایب آن باشد. بسیاری از فرایندها مانند انتشار، جذب و خواص گرمایی به ساختار نواری وابسته است و از آنجا که کرنش روی ساختار نواری تأثیر می‌گذارد، در نتیجه عملکرد دستگاههای اپتوالکترونیکی وابسته به کرنش خواهد بود [۳]. نظریه پتانسیل تغییر شکل برای توصیف تغییرات نوارهای انرژی توسط شاکلی در سال ۱۹۵۰ توسعه داده شد [٤، ٥].

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

در بین مطالعات انجام شده تأثیر کرنش بر روی خواص ترمودینامیکی نانوساختارها بررسی نشده است. به همین دلیل، در این مقاله اثر کرنش بر روی خواص گرمایی سیم کوانتومی از جمله انرژی داخلی و انرژی آزاد هلمهولتز مطالعه می‌شود. پتانسیل محبوس‌سازی سیم کوانتومی در یک بعد به صورت پتانسیل سهمی-وار و در بعد دیگر به صورت چاه بی‌نهایت درنظر گرفته شده و با استفاده از روش آنسامبل کانونی، خواص گرمایی آن بررسی می‌شود.

تئوری و روشهای محاسباتی

در اینجا، بعد آزاد سیم کوانتومی در جهت y فرض شده و پتانسیل محبوس‌سازی در جهت z به صورت چاه بی‌نهایت و در جهت x به صورت سهمی‌وار ($V_{con}(x)=\frac{1}{2}m^*\omega_0^2x^2$) درنظر گرفته شده است؛ که در آن $\hbar\omega_0$ قدرت پتانسیل محبوس‌سازی در جهت x و m^* جرم مؤثر الکترون می‌باشد. هامیلتونی کلی یک الکترون که در این سیم کوانتومی محبوس شده به صورت زیر داده می‌شود:

$$H=\frac{{p_x}^2}{2m^*}+\frac{\hbar^2{k_y}^2}{2m^*}+V_{con}(x)+V_{strain}, \qquad (۱)$$

که در آن دو جمله اول انرژی جنبشی و جمله چهارم پتانسیل مربوط به کرنش را نشان می‌دهد که برای نوار رسانش با رابطه زیر داده می‌شود [۶]:

$$V_{strain}=2a_c(\frac{C_{11}-C_{12}}{C_{11}})\epsilon, \qquad (۲)$$

که در آن a_c پتانسیل تغییر شکل هیدروستاتیکی برای نوار رسانش، $\epsilon=(a_{QD}-a_s)/a_s$ کرنش الاستیکی به سبب ناهمگونی ثابتهای شبکه، a_{QD} ثابت شبکه نقطه کوانتومی و a_s ثابت شبکه ماده زیرلایه هستند.

با حل معادله شرودینگر $H\Psi=E\Psi$، ویژه مقادیر انرژی بدست آمده و با استفاده از آنها تابع پارش کانونیک با استفاده از رابطه زیر محاسبه می‌شود [۷]:

$$Z=\sum_n e^{-\beta E_n}, \qquad (۳)$$

که در آن جمع بر روی تمام ترازهای انرژی گسسته (E_n) می‌باشد و $\beta=\frac{1}{k_BT}$ است که در آن k_B ثابت بولتزمن و T دمای نقطه کوانتومی را نشان می‌دهند. با بدست آوردن تابع پارش، می‌توان انرژی داخلی و انرژی آزاد هلمهولتز را با استفاده از روابط زیر پیدا کرد [۸]:

$$U=-\frac{\partial LnZ}{\partial\beta}, \qquad F_H=U-TS=-\frac{LnZ}{\beta}. \qquad (٤)$$

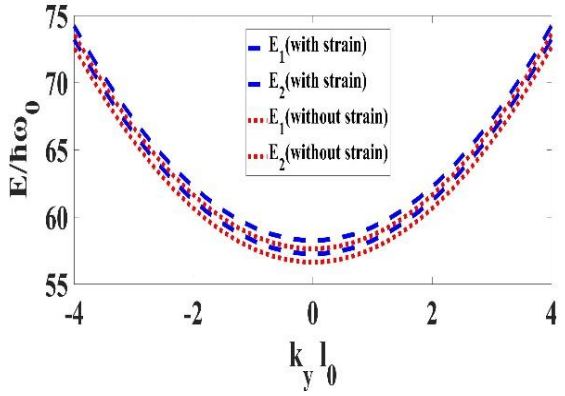
که در آن S انتروپی سیستم می‌باشد.

نتایج محاسبات

در این بخش، نتایج محاسبات عددی مربوط به سیم کوانتومی GaAs با پتانسیل محبوس‌سازی سهمی‌وار به قدرت $\hbar\omega_0=4$ meV در جهت x و چاه بی‌نهایت به طول 5 nm در جهت z که در فشار متعارف (P=1 bar) انجام شده، آورده شده است. پارامترهای استفاده شده در این محاسبات عبارتند از [۹]:

$a_s=$ $C_{12}=5.38$ dyn/cm², $C_{11}=11.8$ dyn/cm²
$a_c=a_{QD}=5.6535$ A°, 5.6549 A°
$m^*=0.067m_e$, -9.3 eV,

دو نوار انرژی سیم کوانتومی برای حالت بدون اثر کرنش و با در نظر گرفتن آن بر حسب عدد موج بدون بعد $(l_0=\sqrt{\frac{\hbar}{m^*\omega_0}})$ k_yl_0 در شکل (۱) رسم شده است. مشاهده می‌شود که کرنش باعث محدودیت بیشتر الکترون شده و در نتیجه موجب می‌شود که نوارهای انرژی در سطح بالاتری نسبت به حالت بدون کرنش قرار بگیرند.

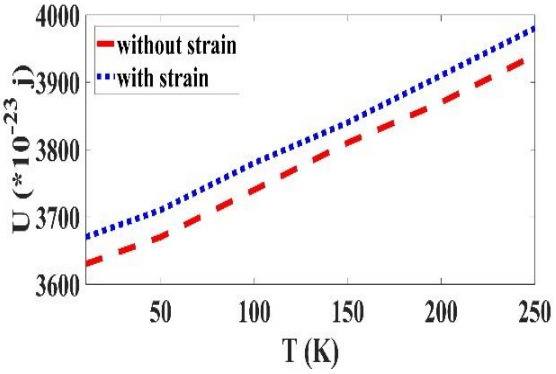


شکل ۱. دو نوار انرژی سیم کوانتومی با درنظر گرفتن اثر کرنش (---) و بدون آن (...).

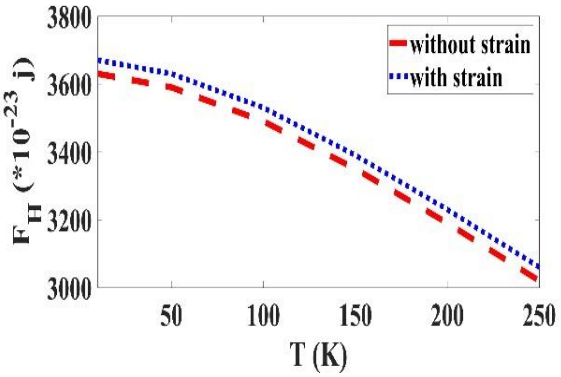
انرژی داخلی و انرژی آزاد هلمهولتز سیم کوانتومی برحسب دما به ترتیب در شکلهای (۲) و (۳) نشان داده شده‌اند. همانطور که انتظار

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

می‌رود با افزایش دما مقدار انرژی داخلی افزایش می‌یابد ولی با توجه به رابطه (٤) انرژی آزاد هلمهولتز کاهش می‌یابد. همچنین با درنظر گرفتن اثر کرنش، بخاطر اینکه میزان محبوس‌سازی الکترون افزایش می‌یابد، انرژی داخلی و انرژی آزاد هلمهولتز سیم کوانتومی نسبت به حالت بدون اثر کرنش افزایش می‌یابند.



شکل ۲. انرژی داخلی سیم کوانتومی تحت کرنش (....) و بدون آن (---) برحسب دما.



شکل ۳. انرژی آزاد هلمهولتز سیم کوانتومی تحت کرنش (....) و بدون آن (--) برحسب دما.

نتیجه‌گیری

در این مقاله، اثر کرنش بر روی نوارهای انرژی و خواص گرمایی سیم کوانتومی مطالعه شده است. وجود کرنش در نانوساختارها سبب افزایش محدودیت حاملین می‌شود و در نتیجه ویژه مقادیر انرژی افزایش خواهند یافت. با استفاده از تابع پارش، خواص ترمودینامیکی از جمله انرژی داخلی و انرژی آزاد هلمهولتز نیز بررسی شدند. نتایج نشان دادند که با احتساب اثر کرنش، مقدار انرژی داخلی و انرژی آزاد هلمهولتز افزایش می‌یابد. این نتایج نظری می‌توانند برای تعیین ذات واقعی سیمهای کوانتومی مورد استفاده قرار بگیرند.

مراجع

[۱] L. Jacak, A. Wojs, and P. Machnikowski*; "semiconductor Quantum dots"*; Encyclopedia of Nanoscience and Nanotechnology, **9** (2004) 719.

[۲] P. Harrison; *"Quantum wells, wires and dots"*; John Wiley, (2005).

[۳] H. Shen, Datta; "Optical properties and nonlinear effects in strain engineered semiconductor heterostructures"; *IEEE J. Quntum Electron* **2** (1996) 388.

[٤] W. Shockley, and J. Bardeen; "Deformation potentials and mobilities in non-polar crystals"; *Phys. Rev. B.* **80** (1950) 72.

[٥] J. Bardeen, and W. Shockley; "Energy Bands and Mobilities in Monatomic Semiconductors"; *Phys. Rev. B.* **77** (1950) 407.

[٦] D. A. B. Miller, D. S. Chemla, and T. C. Damen; "Band-edge electroabsorption in quantum well structures: the quantum-confined stark effect"; *Phys. Rev. Lett.* **53** (1984) 2173.

[۷] L. D. Landau, L. D. Lifshitz, E. M. *"Statistical Physics"*; Third ed., Pergamon International Library, New York, 1975.

[۸] W. Greiner, L. Neise, and H. Stocker; *"Thermodynamics and Statistical Mechanics"*; Springer, New York, 1995.

[۹] M. Califano, Harrison; "Presentation and experimental validation of a single band, constant potential model for self-assembled InAs/GaAs quantum dots"; *Phys. Rev. B.* **61** (2000) 10959.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بررسی کمی آمیختگی سیستم‌های همدوس اسپینی دو و سه جزئی با استفاده از سنجهٔ هندسی اختلاط

ساقی، زهرا[۱]؛ اشرف‌پور، مهرزاد[۲]

[۱و۲] گروه فیزیک، دانشگاه شهید چمران، اهواز

چکیده

سنجهٔ هندسی اختلاط یکی از سنجه‌های مفید برای اندازه‌گیری میزان آمیختگی آنسامبل‌های کوانتومی است. در این کار، برهم‌نهی‌هایی از حالت‌های همدوس اسپینی دو و سه‌کیوبیتی را تشکیل، و با محاسبه تحلیلی سنجهٔ هندسی اختلاط برای حالتهای معرفی شده در این کار، میزان آمیختگی حالت‌های مورد نظر بررسی می‌شود. در ادامه با رسم نمودارهای مناسب بر حسب پارامترهای تاثیرگذار در این حالت‌ها، بیشینه و کمینهٔ تغییرات سنجه هندسی اختلاط را بررسی می‌کنیم.

واژه های کلیدی: *سنجهٔ هندسی، حالت آمیخته، حالت همدوس اسپینی، کیوبیت، آنسامبل.*

A Quantitative Investigation of the Bipartite and Tripartite Mixed Spin Coherent Systems using the Geometric Measure of Mixing of Quantum States

Saghi, Zahra[1]; Ashrafpour, Mehrzad[2]

[1,2] Department of Physics, Shahid Chamran University of Ahvaz

Abstract

The geometric measure of mixing of quantum states is one of the useful measures to measure the mixed quantum ensembles. In this work, superpositions of spin coherent states composed of two and three qubits are formed and by calculating the geometric measure of mixing for the systems introduced in this work, the degree of mixedness of the studied states is investigated. In the following, by drawing the appropriate plots according to the influential parameters in these states, we examine the maximum and the minimum of the changes in the geometric measure of mixing.

***Keywords**: geometric measure, mixed state, spin coherent state, qubit, ensemble.*

PACS No. 2

مقدمه

حالت‌های خالص به خودی خود برای توصیف وضعیت‌های واقعی سیستم کوانتومی کافی نیستند و در این مواقع از حالت‌های آمیخته استفاده می‌شود [۱]. به بیان مکانیک آماری، سیستم در این وضعیت دارای چندین آنسامبل است و یک مخلوط آماری را تشکیل می‌دهد. برای اینکه تبدیل حالت‌های کوانتومی در حضور نوفه به یکدیگر، تبدیلی برگشت‌پذیر باشد، از گروهی از حالت‌های کوانتومی با بیشینهٔ آمیختگی استفاده می‌شود [۲]. همچنین، در مطالعهٔ پدیدهٔ واهمدوسی حالت‌های کوانتومی، تعیین درجهٔ اختلاط سیستم ضروری است [۳]. میزان آمیختگی سیستم‌های کوانتومی بر ویژگی-های عدم‌قطعیت در مدل هایزنبرگ تاثیرگذار است [٤]. گفتنی است که در مبحث ترابرد کوانتومی حالت‌های آمیخته، موفقیت در ترابرد حالت‌ها با میزان آمیختگی آن‌ها مستقیما ارتباط دارد [۵]. همچنین، با استفاده از نتایج بدست آمده از میزان آمیختگی سیستم‌های

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

کوانتومی می‌توان به نتایج بهتری در اندازه‌گیری میزان درهم‌تنیدگی آن حالت نیز دست یافت چرا که میزان درهم‌تنیدگی حالت آمیخته وابسته به نوع آنسامبل‌هایی از حالت‌های خالص است که آن را می‌سازند [٦]. بنابراین همواره به محاسبهٔ کمی میزان آمیختگی حالت‌های کوانتومی نیازمندیم. سنجهٔ هندسی اختلاط حالت کوانتومی یکی از مناسب‌ترین انتخاب‌ها برای اندازه‌گیری درجهٔ اختلاط حالت کوانتومی است که با توجه به هندسی بودن اساس تعریف آن، ساده و قابل درک می‌باشد. از اینرو از سنجهٔ هندسی اختلاط برای اندازه‌گیری میزان آمیختگی حالت‌ها استفاده می‌کنیم.

حالت‌های همدوس اسپینی از اهمیت بالایی در نظریهٔ اطلاعات کوانتومی برخوردارند [٨،٧]. این حالت‌های کوانتومی به‌دلیل داشتن کمینهٔ عدم‌قطعیت هایزنبرگ، شبیه‌ترین حالت‌ها به دنیای کلاسیکی هستند و با استفاده از تکانهٔ زاویه‌ای اسپینی و با توجه به شباهت به حالت‌های همدوس نوسانگر هماهنگ ایجاد می‌شوند [٩].

در این مقاله سعی می‌کنیم که سنجه‌ی هندسی اختلاط را برای حالت‌های همدوس اسپینی دو و سه‌کیوبیتی محاسبه کنیم و با رسم نمودارهای مناسب پارامترهای موثر در اختلاط این حالت‌ها را مورد بررسی قرار دهیم.

معرفی سنجهٔ هندسی اختلاط حالت کوانتومی

سنجش درجهٔ اختلاط حالت کوانتومی از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است. ایده‌های هندسی در مکانیک کوانتومی و نظریهٔ اطلاعات کوانتومی نقش ارزشمندی ایفا می‌کنند. از اینرو قصد داریم در ادامه با بهره‌گیری از این ایده‌ها سنجه‌ای برای اندازه‌گیری درجهٔ اختلاط حالت کوانتومی بیابیم. برای تعریف سنجهٔ هندسی درجهٔ اختلاط حالت کوانتومی به فاصلهٔ هیلبرت–اشمیت میان دو حالت آمیخته نیاز داریم. مربع فاصلهٔ هیلبرت–اشمیت به‌صورت زیر تعریف می‌شود [١٠]:

$$d^2(\hat{\rho}_1,\hat{\rho}_2) = Tr(\hat{\rho}_1-\hat{\rho}_2)^2 \qquad (١)$$

که در آن، $\hat{\rho}_1$ و $\hat{\rho}_2$ ماتریس‌های چگالی حالت‌های آمیختهٔ اول و دوم است. با استفاده از کمینهٔ مربع فاصلهٔ هیلبرت–اشمیت، سنجهٔ هندسی اختلاط حالت‌های کوانتومی را می‌توان به‌صورت زیر بیان نمود:

$$D = \min_{|\psi\rangle} Tr(\hat{\rho}-\hat{\rho}_{pure})^2 \qquad (٢)$$

که $\hat{\rho}$ ماتریس چگالی حالت‌های آمیختهٔ داده شده است. همچنین داریم:

$$\hat{\rho}_{pure} = |\psi\rangle\langle\psi| \qquad (٣)$$

ماتریس چگالی حالت خالص بیان شده توسط بردار حالت $|\psi\rangle$ است و کمینه‌سازی نیز روی همهٔ حالت‌های خالص ممکن انجام می‌گیرد. برای سنجهٔ هندسی اختلاط حالت‌های کوانتومی، رابطهٔ (٢) را به‌صورت زیر بازآرایی می‌کنیم:

$$D = \min_{|\psi\rangle}\left(Tr\hat{\rho}^2 + Tr\rho_{pure}^2 - 2\,Tr\hat{\rho}\hat{\rho}_{pure}\right) \qquad (٤)$$

هرکدام از سه جمله‌ای که در رابطهٔ (٤) وجود دارند را می‌توان جداگانه حساب کرد. در ادامه، با جایگذاری هر کدام از مقادیر به دست آمده برای عبارت‌های موجود در رابطهٔ (٤) خواهیم داشت [١١]:

$$D = \min_{|\psi\rangle}\left(\sum_i \lambda_i^2 + 1 - 2\,\langle\psi|\hat{\rho}|\psi\rangle\right) \qquad (٥)$$

که در آن λ_iها ویژه‌مقادیر ماتریس چگالی $\hat{\rho}$ هستند. هنگامی که $|\psi\rangle$ ویژه‌بردار ماتریس چگالی $\hat{\rho}$ با بیشترین ویژه‌مقدار باشد، عبارت بالا کمینه خواهد شد. در نهایت برای سنجهٔ هندسی اختلاط حالت کوانتومی داریم:

$$D = \sum_i \lambda_i^2 + 1 - 2\lambda_{max}$$
$$= (1-\lambda_{max})^2 + \sum_{\lambda_i<\lambda_{max}} \lambda_i^2 \qquad (٦)$$

برای حالت خالص بجز $\lambda_{max} = 1$، سایر ویژه‌مقادیر صفر هستند. از اینرو برای حالت خالص $D = 0$ به‌دست می‌آید که مطابق با انتظارمان است. جالب اینکه رابطهٔ (٦) مربع فاصلهٔ اقلیدسی میان حالت آمیخته با ویژه‌مقادیر ماتریس چگالی ... λ_i ... λ_{max} و حالت خالص با ویژه‌مقادیر صفر و یک است.

وقتی که همهٔ ویژه‌مقادیر ماتریس چگالی یکسان باشند: $\lambda_i = \frac{1}{n},\ i = 1,2,\dots,n$، که در این رابطه n ابعاد سیستم کوانتومی است، D بیشینه می‌شود. بنابراین بیشینهٔ مقدار سنجهٔ هندسی اختلاط حالت کوانتومی در این حالت برابر است با:

$$D = 1-\frac{1}{n} \qquad (٧)$$

و ماتریس چگالی نیز در این مورد خواهد شد:

$$\hat{\rho}_{max} = \frac{1}{n}\hat{1} \qquad (٨)$$

که به حالت با بیشترین آمیختگی بازمی‌گردد.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics٩٩

حالت‌های همدوس اسپینی

حالت همدوس اسپینی در شکل کلی آن مطابق زیر تعریف می‌شود [۸]:

$$|\alpha_i, j\rangle = \frac{1}{(1+|\alpha_i|^2)^j} \sum_{m=-j}^{j} \binom{2j}{m+j}^{\frac{1}{2}} \alpha_i^{j+m} |j, m\rangle \quad (۹)$$

که در آن، α_i پارامتر همدوسی و $|j,m\rangle$ها ویژه‌حالت‌های همزمان عملگرهای J^2 و J_z با ویژه‌مقادیر به ترتیب، $j(j+1)\hbar$ و $m\hbar$ است. با در نظر گرفتن اسپین الکترون و در نتیجهٔ آن $j=\frac{1}{2}$ و همچنین $\left|\frac{1}{2},\frac{-1}{2}\right\rangle = |0\rangle$ و $\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle = |1\rangle$ داریم:

$$\left|\alpha_i, \frac{1}{2}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{1+|\alpha_i|^2}} (|0\rangle + \alpha_i|1\rangle) = |\alpha_i\rangle \quad (۱۰)$$

در ادامه، برای سیستم‌های کوانتومی آمیختهٔ تشکیل شده از حالت‌های همدوس اسپینی دو وسه‌کیوبیتی، تغییرات سنجهٔ هندسی اختلاط را بررسی می‌کنیم.

سیستم آمیختهٔ تشکیل شده از حالت‌های همدوس اسپینی دوکیوبیتی

سیستم آمیختهٔ دو کیوبیتی زیر را که از حالت‌های همدوس اسپینی تشکیل شده است، به‌صورت زیر در نظر می‌گیریم:

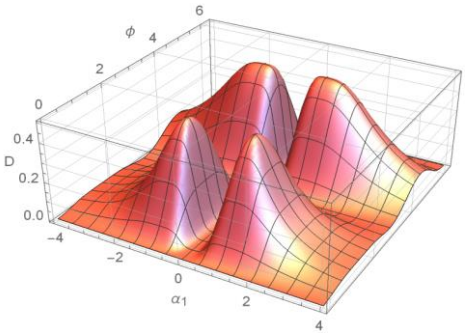
$$\rho(\alpha_1,\varphi) = \frac{1}{2}\sin\varphi\,|\alpha_1\alpha_1\rangle\langle\alpha_1\alpha_1| + \left(1-\frac{1}{2}\sin\varphi\right)|\alpha_2\alpha_2\rangle\langle\alpha_2\alpha_2| \quad (۱۱)$$

که در آن، حالت‌های $|\alpha_i\rangle$ها حالت‌های همدوس اسپینی هستند که مطابق با رابطهٔ (۱۰) تعریف می‌شوند. با جایگذاری رابطهٔ (۱۰) که در آن $\alpha_2 = -\alpha_1$ در رابطهٔ (۱۱) می‌توانیم سنجهٔ هندسی اختلاط را برای آنسامبل دو کیوبیتی معرفی شده در رابطهٔ (۱۱) بررسی کنیم. با به‌دست آوردن ویژه‌مقادیر ماتریس چگالی معرفی شده در رابطهٔ (۱۱) خواهیم داشت:

$$\lambda_1 = \lambda_{max} = \frac{1}{2(1+\alpha_1^2)^2}\{1+2\alpha_1^2+\alpha_1^4 + (1+\alpha_1^2(8-4Cos\,2\varphi-16Sin\,\varphi) + 6\alpha_1^4 + \alpha_1^6(8-4Cos\,2\varphi-16Sin\,\varphi) + \alpha_1^8)^{\frac{1}{2}}\}$$

$$\lambda_2 = \frac{1}{2(1+\alpha_1^2)^2}\{1+2\alpha_1^2+\alpha_1^4 - (1+\alpha_1^2(8-4Cos\,2\varphi-16Sin\,\varphi) + 6\alpha_1^4 + \alpha_1^6(8-4Cos\,2\varphi-16Sin\,\varphi) + \alpha_1^8)^{\frac{1}{2}}\}$$

با قرار دادن ویژه‌مقادیر به‌دست آمده در رابطهٔ (٦)، سنجهٔ هندسی اختلاط به‌دست می‌آید. در شکل (۱)، تغییرات D بر حسب پارامترهای α_1 و φ رسم شده است. همانطور که ملاحظه می‌گردد، سنجهٔ هندسی اختلاط حالت کوانتومی به ازای $\alpha_1 = \pm 1$ و $\varphi = \frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2}$، ۰/۵ است که بیشینه مقداری است که می‌توان برای آمیختگی حالت دو کیوبیتی به‌دست آورد. لازم به ذکر است که سنجهٔ هندسی اختلاط هنگامیکه $\alpha_1 = 0$ باشد، به ازای تمامی مقادیر φ و نیز وقتی که $\varphi = 0, \pi, 2\pi$ باشد به ازای تمامی مقادیر α_1، صفر است چرا که در این حالت با ماتریس چگالی حالت خالص رو به رو خواهیم شد.



شکل۱: تغییرات سنجهٔ هندسی اختلاط بر حسب α_1 و φ برای آنسامبل متشکل از حالت‌های همدوس اسپینی دوکیوبیتی.

سیستم آمیختهٔ تشکیل شده از حالت‌های همدوس اسپینی سه‌کیوبیتی

سیستم آمیختهٔ سه کیوبیتی را در نظر می‌گیریم که از حالت‌های همدوس اسپینی به‌صورت زیر تشکیل شده باشد:

$$\rho = \frac{1}{\sqrt{3}}\sin\varphi\,|\alpha_1\alpha_1\alpha_1\rangle\langle\alpha_1\alpha_1\alpha_1| + \left(1-\frac{1}{\sqrt{3}}sin\,\varphi\right)|\alpha_2\alpha_2\alpha_1\rangle\langle\alpha_2\alpha_2\alpha_1| \quad (۱۲)$$

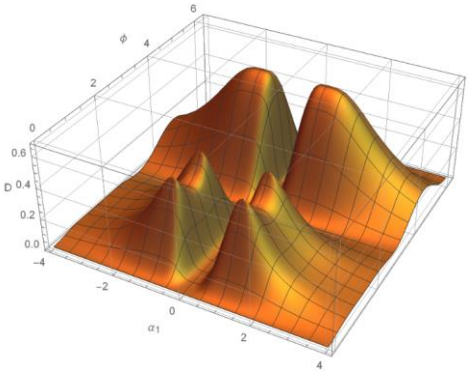
اکنون سنجهٔ هندسی اختلاط را برای آنسامبل سه کیوبیتی معرفی شده در رابطهٔ (۱۲) بررسی می‌کنیم. با به‌دست آوردن ویژه‌مقادیر ماتریس چگالی معرفی شده در رابطهٔ (۱۲) خواهیم داشت:

$$\lambda_1 = \lambda_{max} = \frac{1}{6(1+\alpha_1^2)^3}\{3+9\alpha_1^2+9\alpha_1^4+3\alpha_1^6+\sqrt{3}\,(3+34\alpha_1^2+77\alpha_1^4+92\alpha_1^6+77\alpha_1^8+34\alpha_1^{10}+3\alpha_1^{12} - 16(\alpha_1^2+2\alpha_1^4+2\alpha_1^6+2\alpha_1^8+\alpha_1^{10})Cos\,2\varphi - 32\sqrt{3}(\alpha_1^2+2\alpha_1^4+2\alpha_1^6+2\alpha_1^8+\alpha_1^{10})Sin\,\varphi)^{\frac{1}{2}}\}$$

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

$$\lambda_2 = \frac{1}{6(1+\alpha_1^2)^3}\{3+9\alpha_1^2+9\alpha_1^4+3\alpha_1^6-\sqrt{3}(3+34\alpha_1^2 +77\alpha_1^4+92\alpha_1^6+77\alpha_1^8+34\alpha_1^{10}+3\alpha_1^{12} -16(\alpha_1^2+2\alpha_1^4+2\alpha_1^6+2\alpha_1^8 +\alpha_1^{10})Cos\,2\varphi -32\sqrt{3}(\alpha_1^2+2\alpha_1^4+2\alpha_1^6 +2\alpha_1^8+\alpha_1^{10})Sin\,\varphi)^{\frac{1}{2}}\}$$

با قرار دادن ویژه‌مقادیر به‌دست آمدهٔ بالا در رابطهٔ (٦)، سنجهٔ هندسی اختلاط به‌دست می‌آید. در شکل (۲)، تغییرات D بر حسب پارامترهای α_1 و φ رسم شده است. همانطور که ملاحظه می‌گردد، سنجهٔ هندسی اختلاط حالت کوانتومی تنها به ازای $\alpha_1 = \pm 1$ و $\varphi = \frac{3\pi}{2}$، ۰/٦٦ است که بیشینه مقداری است که می‌توان برای آمیختگی حالت سه کیوبیتی انتظار داشت. لازم به ذکر است که سنجهٔ هندسی اختلاط هنگامیکه $\alpha_1 = 0$ باشد، به ازای تمامی مقادیر φ و نیز وقتی که $\varphi = 0, \pi, 2\pi$ باشد به ازای تمامی مقادیر α_1، صفر است چرا که در این حالت با ماتریس چگالی حالت خالص رو به رو خواهیم شد.



شکل۲: تغییرات سنجهٔ هندسی اختلاط بر حسب α_1 و φ برای آنسامبل متشکل از حالت‌های همدوس اسپینی سه‌کیوبیتی.

نتیجه‌گیری

در این کار، روشی کارآمد برای بررسی کمی آمیختگی سیستم-های کوانتومی بررسی شد و همچنین نتایج آن برای آنسامبل‌های آمیختهٔ مهمی نظیر سیستم کوانتومی آمیختهٔ تشکیل شده از حالت-های همدوس اسپینی دو و سه‌کیوبیتی به طور کامل مورد بحث و بررسی قرار گرفت و با استفاده از نمودارها نیز نشان دادیم که برای حالت با بیشترین آمیختگی، سنجهٔ هندسی اختلاط بیشینه است اما هنگامی که تغییر پارامترها بر خالص بودن حالت دلالت داشته باشد، سنجهٔ هندسی اختلاط کمینه یعنی صفر می‌باشد. همچنین بیشینهٔ آمیختگی آنسامبل‌های دو و سه‌کیوبیتی مورد مطالعه برای α_1های بزرگتر از ± 1 به تدریج کاهش می‌یابد تا در α_1های بزرگ مقدار اختلاط حالت کوانتومی ناچیز و در حد خالص باشد. لازم به ذکر است که در مورد آنسامبل سه‌کیوبیتی مورد نظر، برای $\alpha_1 = \pm 1$ (α_1های بیشینه‌کننده) میزان آمیختگی آنسامبل در $\varphi = \frac{\pi}{2}$ با $\varphi = \frac{3\pi}{2}$، متفاوت است و آمیختگی سیستم در $\varphi = \frac{3\pi}{2}$، به بیشینه مقدار خود یعنی ۰/٦٦ می‌رسد به طوری که نقطهٔ $\varphi = \frac{\pi}{2}$، مینیمم نسبی تابع محسوب می‌شود و در $\varphi = \frac{\pi}{3}, \frac{2\pi}{3}$ آمیختگی آنسامبل ۰/۵ خواهد بود. همچنین به‌ازای α_1های بیشینه‌کننده برای آنسامبل دوکیوبیتی مورد مطالعه، در $\varphi = \frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2}$ بیشینه مقدار آمیختگی برای سیستم‌های دوکیوبیتی یعنی ۰/۵ به‌دست می‌آید. امید است که این نتایج، افق‌های جدیدی را در بررسی آمیختگی و نیز درهم‌تنیدگی سیستم‌های کوانتومی چندجزئی فراروی پژوهشگران بگشاید.

مرجع‌ها

[1] A. Gabriel; "Detection and Characterisation of Multipartite Quantum Entanglement"; faculty of physics, university of Vienna, Austria, (2013).
[2] M and P. Horodecki and J. Oppenheim; **"**Reversible Transformations from Pure to Mixed States and the Unique Measure of Information"; *Physical Review A* **67,** 062104 (2003).
[3] U. Singh and M. N. Bera and H. S. Dhar and A. K. Pati; **"**Maximally Coherent Mixed States: Complementarity between Maximal Coherence and Mixedness"; *Physical Review A* **91,** 052115 (2015).
[4] X. Zheng and G-F. Zhang; "The Effects of Mixedness and Entanglement on the Properties of the Entropic Uncertainty in Heisenberg Model with Dzyaloshinski–Moriya Interaction"; *Quantum Information Processing* **16**, No. 1 (2017).
[5] K. G. Paulson and S. V. M. Satyanarayana; "Bounds on Mixedness and Entanglement of Quantum Teleportation Resources"; *Physics Letters A*, **381** (2017) 1134-1137.
[6] D. Sarkar; "On Measures of Quantum Entanglement"; *Quantum Information* **14**, No. 3 (2016).
[7] E. S. G. Sudarshan; "Equivalence of Semiclassical and Quantum Mechanical Descriptions of Statistical Light Beams"; *Physical Review Letters* **10**, (1963) 277-279.
[8] J. M. Radcliffe; "Some Properties of Coherent Spin States"; *Journal of Physics A: General Physics* **4**, (1971).
[9] J. J. Sakurai; "*Modern Quantum Mechanics*"; Addison-Wesley Press, (2011).
[10] V. V. Dodonov, O. V. Manko, V. I. Manko and A. Wunsche; "Hilbert-Schmidt Distance and Non-Classicality of States in Quantum Optics"; *Journal of Modern Optics* **47**, No. 04, 633-654 (2000).
[11] H. P. Laba and Tkachuk; "Geometric Measure of Mixing of Quantum State"; *Condensed Matter Physics* **21**, No. 3, 33003 (2014) 1-4.

طراحی حفاظ نانوکامپوزیتی برای تیروئید در تصویربرداری‌های دندانی

ارزبکی، علیرضا؛ رسولی، فاطمه‌سادات؛ صالح‌کوتاهی، سید محسن

گروه فیزیک هسته‌ای، دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی، تهران، ایران

چکیده

تیروئید یکی از مهم‌ترین غدد بدن و در عین‌حال یکی از آسیب‌پذیرترین اعضای بدن در برابر تابش پرتوهای یونساز است. این تابش‌ها می‌توانند در حین پرتودرمانی در ناحیه سر و گردن و یا تصویربرداری‌های پرتوی در ناحیه دهان و دندان به این غده نفوذ کرده و منجر به آسیب جدی به آن شوند. از اینرو طراحی حفاظ برای این شرایط از اهمیت فراوانی برخوردار است. در سال‌های اخیر، با توجه به سنگینی و عدم انعطاف‌پذیری سرب، در برخی از فرآیندهای مبتنی بر تابش، حفاظ‌های سربی جای خود را به نانوکامپوزیت‌ها داده‌اند. هدف این پژوهش طراحی حفاظ بهینه از جنس نانوکامپوزیت پلیمری (پلی آنیلین/نانو سرب ۵۰٪) برای غده تیروئید و بررسی برخی از قابلیت‌های آن در حین تصویربرداری سی‌تی (CT) دندان است. این مطالعه از طریق شبیه‌سازی با استفاده از کد مونت‌کارلوی MCNPX و با در نظرگرفتن رایج‌ترین تنظیمات تصویربرداری سی‌تی انجام گرفته است.

واژه‌های کلیدی: *تیروئید، حفاظ‌سازی، نانوکامپوزیت پلیمری، شبیه‌سازی مونت‌کارلو، تصویربرداری دندانی*

Designing of a polymer nanocomposite shield for thyroid during the dental CT

Arazbaki, Alireza; Rasouli, Fatemeh S.; Salehkoutahi, S. Mohsen

Department of Physics, KN Toosi University of Technology, Tehran, Iran

Abstract

Thyroid is one of the most important glands in body and also one of the most vulnerable body organs to ionizing radiations. The radiations can penetrate this gland during the head and neck radiotherapies or mouth and dental radiographies and lead to considerable damages. Therefore, designing a shield for this organ is a high importance issue. Recently, in some of the radiation-based processes, taking into account the heaviness and inflexibility of lead, it has been substituted with nanocomposites. This work aims to design an optimized polymer nanocomposite (Polyaniline/Nano-Lead 50%) radiation shield for thyroid gland, and to examine some of its capabilities during the dental CT scan. This simulation-based study has been performed using MCNPX Monte Carlo code by considering the most common CT scanning facilities.

PACS No. 87

مقدمه

امروزه پیش‌نیاز هر درمان دندانی‌ای، تصویربرداری از دندان است. عموماً این تصویربرداری‌ها با بکارگیری پرتوهای ایکس (گاما) انجام می‌شوند. از آنجا که پرتوهای یونیزان بـا تأثیر بر DNA و غشاء سلولی موجب آسیب بـه سـلول و در نتیجه مرگ آن و یا تکثیر بی‌رویه‌ی سلول می‌شوند، تلاش‌های زیادی برای تضعیف این پرتوها و جلوگیری از برخورد آن‌ها با بافت‌هایی که هدف تشخیص یا درمان نیستند، صورت می‌گیرد. یکی از این اعضا تیروئید است که علیرغم نقش مهم آن در بدن، در پرتودرمانی‌های ناحیه سر و گردن و یا تصویربرداری‌های دندانی مورد تابش ناخواسته قرار می‌گیرد. مؤثرترین اقدام برای حفاظت از بافت‌های غیرهدف، حفاظ‌گذاری است. اگرچه سرب به‌دلیل ویژگی‌های مطلوب، بیش از هر ماده‌ی دیگری در حفاظ‌گذاری پرتوهای گاما مورد استفاده قرار می‌گیرد، با

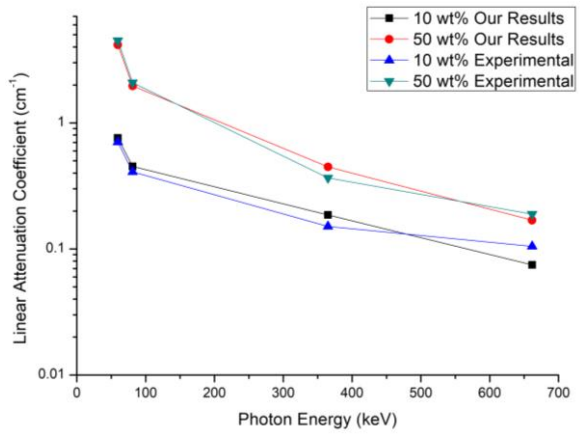
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

این حال وزن بالا و عدم انعطاف‌پذیری از بزرگ‌ترین معایب آن است. از اینرو همواره بکارگیری جایگزینی برای آن مدنظر بوده است. با ورود نانوکامپوزیت‌ها به دنیای مواد، بررسی‌ها برای بکارگیری این مواد به‌عنوان جایگزینی مناسب برای سرب آغاز شد. از جمله این مواد می‌توان به پلی‌آنیلین- نانو سرب اشاره کرد که توسط حسینی و همکاران مورد مطالعه قرار گرفته است [۱].

هدف از پژوهش حاضر طراحی و بررسی حفاظ نانوکامپوزیتی برای غده‌ی تیروئید به‌منظور حفاظت از آن در برابر پرتوهای تابشی در تصویربرداری سی‌تی دندان با استفاده از کد مونت‌کارلوی MCNPX 2.6 و فانتوم بدن انسان است. تیروئید از اندام‌هایی است که در تصویربرداری سی‌تی دندان در معرض پرتوی ایکس قرار گرفته و در صورت دریافت دز بیش از حد مجاز، دچار آسیب جدی منجر به سرطان خواهد شد. این غده یک عضو H شکل است که از دو لوب و یک ایسموس برای اتصال آن دو به هم ساخته شده است و دقیقاً زیر غضروف‌های حنجره قرار گرفته است. جرم طبیعی تیروئید تقریباً ۱۵ تا ۲۵ g است و هر لوب ٤ تا ٦ cm طول و ۱٫۳ تا ۱٫۸ cm ضخامت دارد. بخشی که لوب‌ها را به هم وصل می‌کند (ایسموس) کم‌تر از ٤ تا ۵ mm است [۲]. تیروئید دو نوع هورمون (T4 و T3) تولید می‌کند که وظیفه آنها تنظیم چگونگی مصرف و ذخیره انرژی در بدن (تنظیم سوخت و ساز بدن) است. ماده‌ی مورد استفاده برای طراحی این حفاظ پلی‌آنیلین به‌همراه نانوذرات سرب با کسر وزنی ۵۰٪ است و ضخامت‌های مختلف آن برای دستیابی به کم‌ترین آسیب تیروئید در حین تابش مورد بررسی قرار گرفته است.

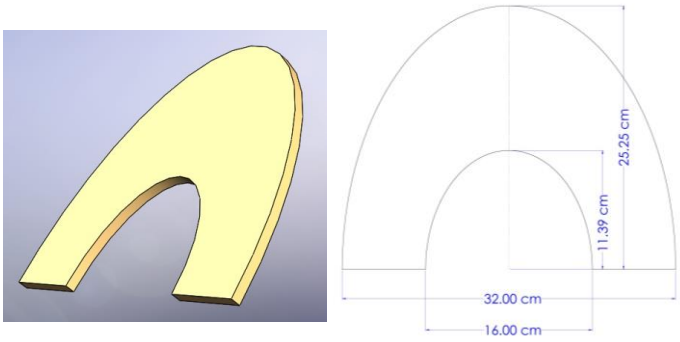
روش کار

برای انتخاب نانوکامپوزیت بهینه، مواد مختلفی مورد بررسی قرار گرفتند و توانایی ضخامت‌های مختلف آنها در کاهش شار فوتون-های فرودی به‌عنوان معیار درنظر گرفته شد. با توجه به این نتایج، پلی‌آنیلین به همراه نانوذرات سرب با کسر وزنی ۵۰٪ به‌عنوان ماده مناسب برای حفاظ انتخاب شد. در آغاز برای بررسی صحت کار، شبیه‌سازی‌ای با استفاده از چیدمان بکاررفته در مرجع [۳] صورت گرفت و نتایج مربوط به محاسبه ضریب تضعیف خطی فوتون‌ها در نانوکامپوزیت HDPE/PbO با نتایج این مقاله مقایسه گردید. شکل (۱) کارایی مناسب کد MCNP را در شبیه‌سازی تأیید می‌کند.



شکل ۱: مقایسه‌ی نتایج شبیه‌سازی در پژوهش حاضر با نتایج تجربی برای نانوکامپوزیت HDPE/PbO برای دو کسر وزنی ۱۰٪ و ۵۰٪.

پس از انتخاب ماده، حفاظ تیروئید شامل دو بخش پلی‌آنیلین (ماتریس) و نانوسرب (پرکننده) شبیه‌سازی شد. چگالی سرب و پلی‌آنیلین (Emeraldine) به‌ترتیب ۱۱٫۳۵ [٤] و ۱٫۳۲۹ $g.cm^{-3}$ [۵] است. همچنین کسر وزنی نانو سرب در این ماده، ۵۰٪ درنظر گرفته شد. هندسه حفاظ بر اساس مدل حفاظ سربی ۰/۵ میلی‌متری شرکت Hager & Werken (با عنوان Protectoray) شبیه‌سازی شد [٦]؛ با این تفاوت هندسی که جای قرارگیری گردن نسبت به مدل این شرکت بیضوی‌تر شده و برای گردن‌های قطور هم مناسب است. به‌طورکلی حفاظ از ابعاد جدیدی پیروی می‌کند که جزئیات و همچنین نمای سه‌بعدی آن در شکل (۲) نمایش داده شده است.



شکل ۲: نمایش دوبعدی هندسه و ابعاد حفاظ تیروئید طراحی شده (راست) و نمایش سه‌بعدی حفاظ تیروئید طراحی شده به ضخامت ۱ سانتی‌متر (چپ).

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

برای شبیه‌سازی تابش، چشمه‌ای همسانگرد با انرژی ۱۲۰ keV در فاصله ٤٩/٥٤ cm از دهان و روبه‌روی آن قرار داده شد [۷]. همچنین پرتوهای چشمه با استفاده از موازی‌سازی به ابعاد ۰/٦٢٥×١٦ mm^2 [۸] و ضخامت ۱۰ cm از جنس سرب [۷] محدود گردیدند.

به‌منظور بررسی مقدار دوز رسیده به اندام‌های مختلف ناحیه سر و گردن، از جمله تیروئید، از فانتوم بدن انسان مدل Revised ORNL (Adult) استفاده شد. فانتوم بدن، حفاظ تیروئید، چشمه و موازی‌ساز در محفظه‌ای از هوا به چگالی ۰/۰۰۱۲۰۵ $g.cm^{-3}$ قرار دارند. نمایی از نحوه قرارگیری حفاظ درکنار فانتوم بدن، موقعیت چشمه و موازی‌ساز در شکل (۳) نمایش داده شده است. پس از قرار دادن حفاظ نانوکامپوزیتی در زیر فک، اندازه‌گیری دوز در تیروئید و سایر اعضای سر و گردن انجام شد. با توجه به اینکه فرآیند تصویربرداری از مجموعه‌ی دندان‌ها و کل دهان ۹ تا ۲۰ ثانیه زمان می‌برد [۹]، مقدار دوز مؤثر برای هر دو زمان و با استفاده از رابطه‌ی (۱) محاسبه شد:

$$E = w_T.H \qquad (۱)$$

که در آن w_T عامل وزنی بافت و H دوز معادل است. مقدار w_T برای تیروئید برابر ۰/۰٤ است [۱۰] و مقدار H از رابطه‌ی (۲) محاسبه می‌شود:

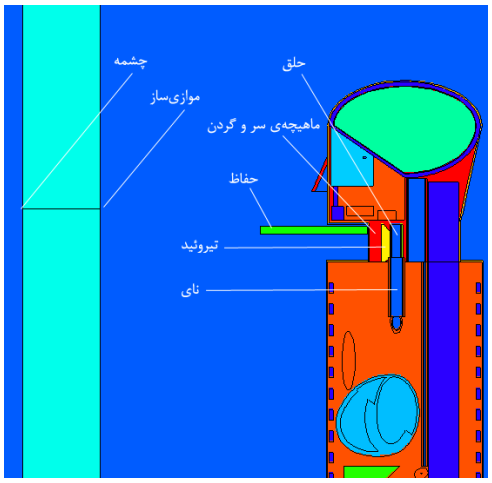
$$H = w_R.D \qquad (۲)$$

که در آن w_R عامل وزنی تابش و D دوز جذبی است. مقدار w_R برای پرتوی گاما و الکترون برابر ۱ است [۱۰]. رایج‌ترین دستگاه‌های تصویربرداری سی‌تی دارای توان ۱۰۰ کیلووات و بیشتر هستند [۱۱]. در این پژوهش توان ۱۰۰ کیلووات در نظر گرفته شد.

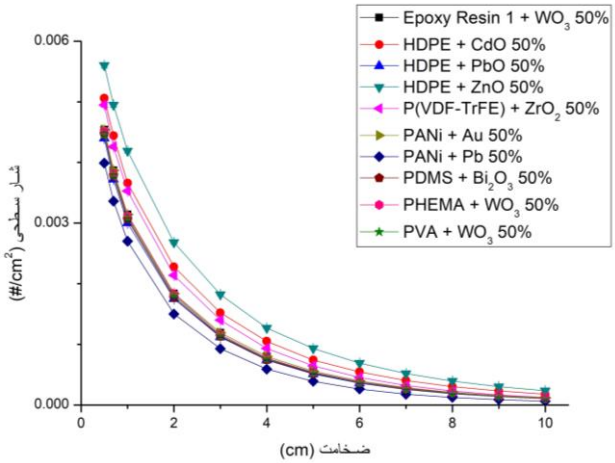
نتایج

مقایسه بین شار عبوری از مواد با ضخامت‌های مختلف به‌عنوان حفاظ در شکل (٤) نمایش داده شده است. با توجه به این شکل، پلی‌آنیلین به همراه نانوذرات سرب با کسر وزنی ۵۰٪ منجر به بیشترین کاهش شار شده است. ویژگی مناسب دیگر این ماده، سبک بودن آن نسبت به سرب است (شکل ۵ را ببینید).

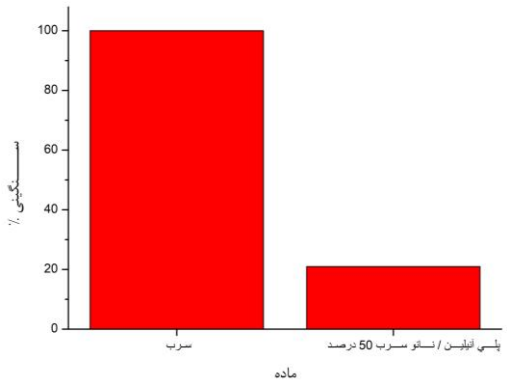
برای هندسه طراحی شده به‌عنوان حفاظ (شکل‌های ۲ و ۳)، ضخامت‌های مختلف شبیه‌سازی شد و مقدار دوز رسیده به تیروئید در هر حالت محاسبه شد. نتایج مربوط به اختلاف نسبی بین داده‌های مربوط به ضخامت‌های مختلف حفاظ و داده مربوط به عدم حضور حفاظ در شکل (٦) نمایش داده شده است. چنان‌که مشاهده می‌شود، با افزایش ضخامت، اختلاف نسبی بین حالت‌ها افزایش یافته است.



شکل ۳: نمایش موقعیت حفاظ (به ضخامت ۱ cm)، چشمه و فانتوم بدن.



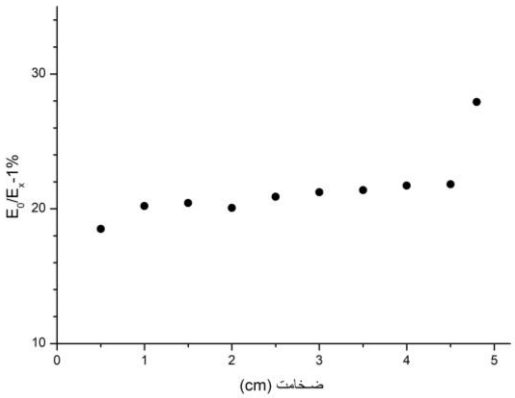
شکل ٤: شار سطحی برای پرتوهای گذرنده از حفاظ‌های نانوکامپوزیتی در جنس‌ها و ضخامت‌های مختلف.



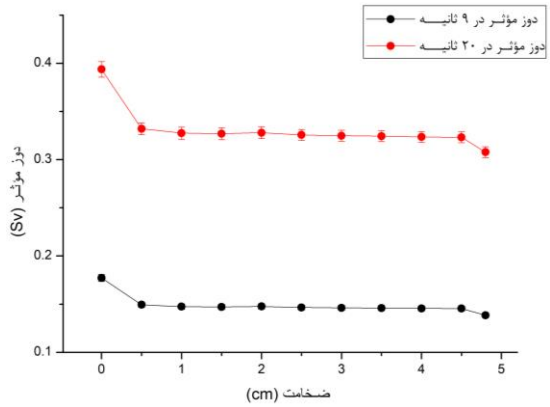
شکل ۵: مقایسه سنگینی سرب و ماده حفاظ (پلی‌آنیلین/نانو سرب ۵۰٪).

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

آنچه در انتخاب ضخامت بهینه اهمیت دارد، مقدار دوز رسیده به تیروئید به‌عنوان بافت غیرهدف در طی مدت تابش و مقایسه آن با حد دوز مجاز سالیانه برای این بافت است. نتایج مربوط به محاسبات برای دو بازه زمانی مرسوم ۹ و ۲۰ ثانیه در تصویربرداری‌های دندانی در شکل (۷) نمایش داده شده است. چنان‌که مشاهده می‌شود، برای حفاظ با حداقل ضخامت ۰/۵ cm و زمان تابش ۹ s، دوز دریافتی توسط تیروئید به کم‌تر از حد دوز مجاز سالیانه (۱۵۰ mSv [۱۲]) می‌رسد. این مقدار در ضخامت‌های بیشتر، کمتر خواهد شد.



شکل ٦: اختلاف نسبی (درصد) مقدار دوز مؤثر تیروئید در ضخامت‌های مختلف نسبت به حالتی که از حفاظ استفاده نشده است.



شکل ۷: دوز مؤثر تیروئید پس از تصویربرداری سی‌تی به مدت ۹ و ۲۰ ثانیه.

جدول ۱: دوز دریافتی برخی از اندام‌های سر و گردن در حین تصویربرداری دندانی (mSv) برای دو ضخامت انتخابی از حفاظ.

ضخامت / اندام	۰/۵ cm	۱ cm
نای	۲٦۲/۰۱ ± ۱۱/٤۱	۲٤۷/۹٥ ± ۱۱/۲۷
حلق	۱۳۹٦/۹۹٥ ± ۳۳/۸۸	۱۳۸٦/۲٤۳ ± ۳٤/۲٦
ماهیچه‌ی سر و گردن	٤٤۲/۳۳۱ ± ۱/۷۷	٤٤۱/۰۸۳ ± ۱/۷٦
تیروئید	۱٤۹/٤۰٤ ± ۲/۷٥	۱٤۷/۳۹۱ ± ۲/۷۷

علاوه بر این، دوز رسیده به سایر اندام‌های سر و گردن در طی این درمان نیز محاسبه شد. داده‌های مربوط به برخی از آنها برای زمان درمان ۹ s در جدول ۱ گزارش شده است.

نتیجه‌گیری

در این مطالعه به انتخاب و بهینه‌سازی ماده مناسب به‌عنوان حفاظ تیروئید، که علیرغم بافت هدف نبودن، در پرتودرمانی‌های سر و گردن و یا تصویربرداری‌های دندانی تابش دریافت می‌کند، پرداخته شد. با بررسی‌های انجام شده و درنظر گرفتن جنبه‌های مختلف، نانوکامپوزیت پلیمری (پلی‌آنیلین/نانو سرب ۵۰٪) به‌عنوان جایگزینی برای سرب انتخاب شد. هندسه‌ی این حفاظ با الهام گرفتن از هندسه‌های مرسوم و با تغییر در ابعاد و مناسب‌سازی آن طراحی شد. نتایج مربوط به بکارگیری فانتوم کامل بدن انسان در معرض تابش پرتوی تصویربرداری دندانی نشان داد درصورت استفاده از حفاظ ضخامت ۰/۵ cm و با انتخاب زمان تابش ۹ s، دوز دریافتی تیروئید از حد مجاز توصیه شده سالیانه تجاوز نکرده و از اینرو آسیب غیرقابل ترمیمی به آن وارد نمی‌کند. همچنین محاسبه دوز دریافتی توسط سایر اندام‌های بافت سر و گردن نشان داد با بکارگیری این حفاظ، از آسیب در برابر تابش مصون خواهند بود.

مرجع‌ها

[1] Hosseini, Seyed Hossein, M. Askari, and S. Noushin Ezzati. "X-ray attenuating nanocomposite based on polyaniline using Pb nanoparticles." Synthetic metals **196** (2014): 68-75.
[2] www.med-ed.virginia.edu (Last Check: 5/16/2020)
[3] Mahmoud, Mohamed E., et al. "Fabrication, characterization and gamma rays shielding properties of nano and micro lead oxide-dispersed-high density polyethylene composites." Radiation Physics and Chemistry **145** (2018): 160-173.
[4] McConn, Ronald J., Christopher J. Gesh, Richard T. Pagh, Robert A. Rucker, and Robert Williams III. Compendium of material composition data for radiation transport modeling. No. PNNL-15870 Rev. 1. Pacific Northwest National Lab.(PNNL), Richland, WA (United States), 2011.
[5] Shao, Lin, Ju-Won Jeon, and Jodie L. Lutkenhaus. "Polyaniline nanofiber/vanadium pentoxide sprayed layer-by-layer electrodes for energy storage." Journal of Materials Chemistry A 2, no. **35** (2014): 14421-14428.
[6] www.hagerwerken.de (Last Check: 5/16/2020)
[7] Flohr, Thomas. "CT systems." Current Radiology Reports 1, **1** (2013): 52-63.
[8] Yang, Ching-Ching. "Characterization of scattered X-ray photons in dental cone-beam computed tomography." PloS one 11, no. **3** (2016).
[9] https://mobindentalclinic.com (Last Check: 5/28/2020)
[10] Valentin, Jack. The 2007 recommendations of the international commission on radiological protection. 37, no. **2-4**. Oxford: Elsevier, 2007.
[11] Lell, Michael M., Joachim E. Wildberger, Hatem Alkadhi, John Damilakis, and Marc Kachelriess. "Evolution in computed tomography: the battle for speed and dose." Investigative Radiology 50, **9** (2015): 629-644.
[12] Kesavachandran, Chandrasekharan Nair, Frank Haamann, and Albert Nienhaus. "Radiation exposure of eyes, thyroid gland and hands in orthopaedic staff: a systematic review." European journal of medical research 17, no. **1** (2012): 28.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بررسی عددی تأثیر طول تصادفی همبسته بر لیزر تصادفی فیبری توری براگ

تقی پور، فاطمه؛ گلشنی قریه‌علی، مجتبی؛ روح‌الامینی نژاد، حسین

دانشکده فیزیک دانشگاه شهید باهنر کرمان، کرمان، ایران

چکیده

در این پژوهش، با استفاده از روش ماتریس انتقال، به بررسی لیزر تصادفی فیبر نوری آغشته به اربیوم با توری‌های براگ در فواصل تصادفی می‌پردازیم. بنابراین، با شبیه‌سازی لیزر تصادفی فیبری توری براگ، طول موج لیزدهی و شدت دمش آستانه‌ی مدهای مختلف محاسبه می‌گردد. سپس، با درنظرگرفتن توری‌های براگ در فواصل تصادفی همبسته، تاثیر توان همبستگی بر توان آستانه و فرکانس لیزدهی مورد بررسی قرار گرفته است.

واژه های کلیدی: *لیزر تصادفی، فیبر نوری، روش ماتریس انتقال، اعدادتصادفی همبسته*

Numerical analysis of the effect of correlated random length in fiber Bragg grating random laser

Taghipoor, Fatemeh; Golshani Gharyeh Ali, Mojtaba; Roohoalamini Nejad, Hossein

Physics Department, Shahid Bahonar University of Kerman, Kerman, Iran

Abstract

In this study, using the transfer matrix method, we investigate the Erbium doped random fiber laser with Bragg grating at random distances. Therefore, by simulating fiber Bragg grating random laser, the wavelength of lasing and the pumping threshold intensity of different modes are calculated. Then, by considering Bragg gratings at correlated random distances, the effect of correlation power on threshold power and lasing frequency is examined.

***Keywords**: Random laser, Optical fiber, transfer matrix method, correlated random number*

PACS No. 40, 41

مقدمه

استفاده از فناوری‌های میکرو و نانو در حوزه‌ی اپتیک و فوتونیک، منجر به تولید ساختارهای اپتیکی مفیدی در این حوزه شده است. یکی از این ساختارها لیزرهای تصادفی[1] (RL) هستند[۱]. سیستم لیزرهای تصادفی شبیه به لیزرهای معمولی است، با این تفاوت که کاواک این نوع لیزر بوسیله‌ی پراکندگی چندگانه داخلی در سیستم فراهم می‌شود[۲]. بنابراین این لیزرها به کاواک خارجی نیاز نداشته و به همین دلیل ساخت این لیزرها ساده و ارزان است و همچنین می‌توان از آن‌ها برای ساخت لیزرهای با فرکانس بالا استفاده کرد.

یکی از معایب لیزرهای تصادفی این است که با توجه به وجود پراکننده‌ها نور خروجی از آن‌ها از ویژگی جهتمندی لیزرهای معمولی برخوردار نیست. مشکل دیگر آن‌ها این است که موج پمپ نیز دچار پراکندگی چندگانه شده و این امر موجب می‌شود که دمش کل سیستم لیزر تصادفی به صورت یکنواخت صورت نگیرد. برای رفع مشکل اول در سال ۲۰۰۷ یک لیزر تصادفی فیبری بر اساس بلور فوتونی فیبری ساخته شد[۳]. سازندگان این لیزر تصادفی فیبری نشان دادند که بازدهی لیزر آن‌ها به اندازه‌ی دو

[1] Random Laser

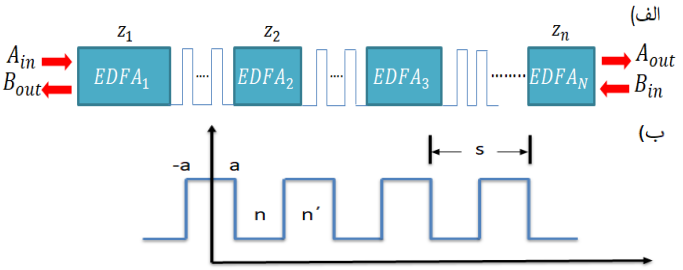
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مرتبه‌ی بزرگی بهتر از لیزرهای تصادفی توده‌ای است. برای رفع مشکل دوم نیز در سال ۲۰۰۹ لیزاراگا[2] و همکارانش با استفاده از یک فیبر آغشته به اربیوم تک مد با توری براگ با فواصل تصادفی نوع جدیدی از لیزرهای تصادفی را پیشنهاد دادند[۴]. در این نوع لیزر توری براگ نقش کاواک لیزری و اربیوم نقش محیط تقویت‌کننده را بر عهده دارد. از ویژگی‌های منحصربفرد این نوع لیزرتصادفی این است که کل سیستم لیزر بطور یکنواخت پمپ شده و این موضوع باعث افزایش بازدهی لیزر می‌شود، زیرا در لیزرهای تصادفی قبلی، پراکندگی فوتون‌های دمش باعث افزایش آستانه‌ی لیزر تصادفی شده بود.

لیزاراگا و همکارانش از روش ماتریس انتقال[3] (TM) برای بدست آوردن فرکانس تشدید لیزر تصادفی مبتنی بر توری براگ فیبری[4] (FBGRL) استفاده کردند و آن‌ها هیچ بحثی درباره‌ی نرخ دمش آستانه‌ی مدهای مختلف و تأثیرات اشباع و رقابت مدی نداشتند. در حقیقت آن‌ها فرض کردند مدهای لیزر مستقل از یکدیگرند. در سال ۲۰۱۲ آقای قاسم‌پور و همکارانش یک مدل بر اساس روش ماتریس انتقال برای بررسی لیزر تصادفی فیبری توری براگ که اثر اشباع و رقابت مد را شامل می‌شود، معرفی کردند[۵]. در همه این پژوهش‌ها، فواصل تصادفی بین توری‌های براگ اعداد تصادفی غیرهمبسته درنظر گرفته شده است. از آنجایی‌که تداخل نقش کلیدی در لیزرهای تصادفی با پسخوراند همدوس دارد، و نشان داده شده است که همبستگی می‌تواند بر ویژگی‌های تداخلی سیستم‌های نامنظم تاثیر بگذارد[۶]، در این مقاله، با درنظرگرفتن فواصل تصادفی همبسته بلندبرد بین توری‌های براگ، به بررسی اثر توان همبستگی بر مشخصات لیزر تصادفی فیبری توری براگ خواهیم پرداخت.

مدل نظری

لیزر فیبری توری براگ مورد نظر مطابق شکل ۱-الف شامل توری‌های براگ است که با فاصله‌ی تصادفی نسبت به یکدیگر قرار گرفته‌اند و بین آن‌ها فیبر آغشته به اربیوم قرار داده شده‌است.



شکل ۱ : الف) مقطع طولی لیزر تصادفی فیبری توری براگ [۵]

ب) توری براگ با دوره تناوب s [۸]

در این مدل فرض شده که مدهای لیزر مستقل از یکدیگرند و از اثر اشباع و رقابت مدی صرفنظر شده‌است (از آنجایی‌که در این پژوهش تنها مشخصات مربوط به مد اول بررسی شده است، این فرض محدودیتی برای مسئله مورد بررسی ایجاد نمی‌کند). برای شبیه‌سازی سیستم از روش ماتریس انتقال استفاده شده‌است[۷]. به این ترتیب که اگر ماتریس انتقال در توری براگ (شکل ۱-ب) را با A_{Fn} نشان دهیم[۸]، با بکارگیری شرایط مرزی و پیوستگی مؤلفه‌های مماسی میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی در مرزها ماتریس انتقال T_1 از خروجی اولین محیط بهره به ورودی اولین توری براگ و ماتریس انتقال T_2 از خروجی اولین توری براگ به ورودی دومین محیط بهره به صورت زیر بدست می‌آیند[۵]:

$$T_1=\begin{pmatrix}\frac{K_{g1}+K}{2K_{g1}}e^{ik(a-s)} & \frac{K_{g1}-K}{2K_{g1}}e^{-ik(a-s)}\\ \frac{K_{g1}-K}{2K_{g1}}e^{ik(a-s)} & \frac{K_{g1}+K}{2K_{g1}}e^{-ik(a-s)}\end{pmatrix} \qquad (۱)$$

$$T_2=\begin{pmatrix}\frac{K+K_{g2}}{2K}e^{ika} & \frac{K-K_{g2}}{2K}e^{ika}\\ \frac{K-K_{g2}}{2K}e^{-ika} & \frac{K+K_{g2}}{2K}e^{-ika}\end{pmatrix} \qquad (۲)$$

و سپس ماتریس M_n که ماتریس انتقال از ابتدای اولین محیط بهره به دومین محیط بهره است به صورت زیر محاسبه می‌شود[۵]:

$$T=T_1A_{Fn}T_2 \qquad (۳)$$

$$M_n=\begin{pmatrix}T_{11}e^{-i(K_{gn}z_n)} & T_{12}e^{-i(K_{gn}z_n)}\\ T_{21}e^{i(K_{gn}z_n)} & T_{22}e^{i(K_{gn}z_n)}\end{pmatrix} \qquad (۴)$$

[2] Lizarraga
[3] Transfer Matrix
[4] Fiber Bragg Grating Random Laser

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بردار موج در محیط بهره‌ی mام به صورت $K_{gm}=\sqrt{\varepsilon_m}$ و $\varepsilon_m=\varepsilon'_m-i\,\varepsilon''_m$ ثابت دی‌الکتریک نسبی محیط بهره است که در آن قسمت‌های حقیقی و موهومی به صورت زیر می‌باشند[۵]:

(۵)

$$\varepsilon'_m=(n')^2,\varepsilon''_m=\frac{(N_2-N_1)_m e^2}{2\omega_0 M_e \varepsilon_0}\times\frac{\gamma}{(\omega-\omega_0)^2+\gamma^2}$$

e و M_e بار و جرم الکترون، ω_0 فرکانس مرکزی خط بهره و γ نیم‌پهنای خط بهره است. در رابطه‌ی ۵ وارونی جمعیت به صورت زیر قابل محاسبه است[۵]:

$$N_2-N_1=\frac{\mathrm{P}_r-1/\tau_2}{\mathrm{P}_r+1/\tau_2}N_{Er} \qquad (۶)$$

در این رابطه، P_r آهنگ پمپاژ، τ_2 طول عمر تراز بالایی لیزر و N_{Er} جمعیت اربیوم است؛ همچنین در این رابطه از اثر اشباع و رقابت مدی صرفنظر شده‌است.

در رابطه‌ی ۴، z_n ها طول محیط بهره‌ی nام و اعدادی تصادفی با همبستگی بلند برد است، که از رابطه زیر محاسبه می‌شوند[۹]:

(۷)

$$\xi'_n=\sum_{m=1}^{N/2}\left[m^{-\alpha}\left(\frac{2\pi}{N}\right)^{1-\alpha}\right]^{1/2}\cos\left(\frac{2\pi nm}{N}+\phi_m\right)$$

در این رابطه ϕ_m ها اعدادی تصادفی با توزیع یکنواخت در بازه صفر تا 2π، N تعداد اعداد تصادفی که می‌خواهیم تولید کنیم که در اینجا همان تعداد محیط‌های بهره است و α نیز توان همبستگی است. با بهنجار کردن اعداد تصادفی فوق به صورت:

$$\xi_n=\frac{\xi'_n-\bar{\xi}'_n}{\Delta} \qquad (۸)$$

که Δ انحراف‌معیار ξ'_nها و $\bar{\xi}'_n$ میانگین ξ'_nهاست، در نهایت فواصل تصادفی همبسته به صورت زیر قابل محاسبه هستند:

$$z_n=z_0+\Delta z\,\xi_n \qquad (۹)$$

با جایگزینی اعداد تصادفی همبسته در رابطه‌ی ۴ و سپس ضرب کردن همه‌ی M_nها برای ماتریس انتقال کل سیستم لیزر داریم[۵]:

$$M=\prod_{n=1}^{N}M_n \qquad (۱۰)$$

که در آن N تعداد محیط‌های بهره[5] (EDFA) است. بنابراین می‌توان با استفاده از این ماتریس، ورودی‌ها و خروجی‌های سیستم لیزر را (شکل۱-الف) به صورت زیر به یکدیگر مربوط کرد:

$$\begin{pmatrix}A_{in}\\B_{in}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}M_{11}&M_{12}\\M_{21}&M_{22}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}A_{out}\\B_{out}\end{pmatrix} \qquad (۸)$$

همانطور که می‌دانیم شرط لیزردهی در سیستم این است که بدون ورودی سیگنال به سیستم خروجی داشته‌باشیم، با اعمال این شرط در رابطه‌ی ۸ به این معادله می‌رسیم:

$$M_{11}=0 \qquad (۹)$$

و با حل قسمت های حقیقی و موهومی این معادله می‌توان فرکانس لیزردهی و شدت دمش آستانه‌ی مدهای مختلف را محاسبه نمود.

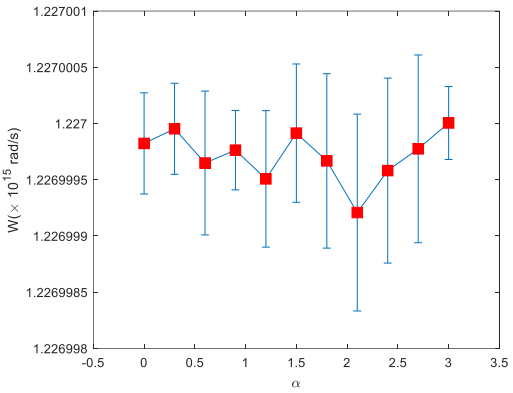
محاسبات عددی

همانطور که گفته شد شبیه‌سازی سیستم FBGRL به صورت عددی انجام گرفته است. برای این منظور از توری براگ با 10^4 دوره، ضرایب شکست $n=1.46040$ و $n'=n+5\times10^{-5}$ و دوره تناوب $s=525.79nm$ استفاده شده است. مقادیر پارامترهای مورد استفاده در شبیه‌سازی محیط فعال نیز به صورت $\lambda=1535nm$، $\gamma=3.2\times10^{12}Hz$، $N_{Er}=2\times10^{21}m^{-3}$، $N=30$ و $\tau_2=10ms$ می‌باشند. همچنین برای ایجاد اعداد تصادفی همبسته $z_0=\Delta z=5mm$ انتخاب شده است.

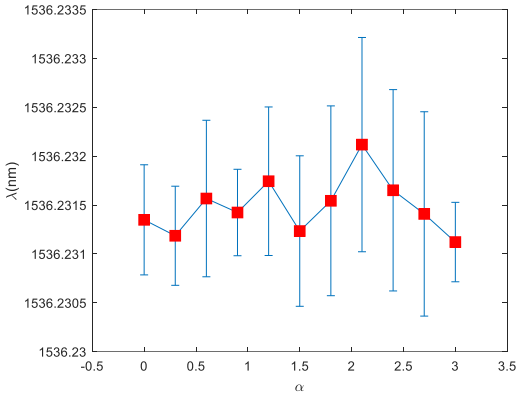
به منظور بررسی تأثیر توان همبستگی بر مشخصات لیزر تصادفی، فرکانس، طول موج و شدت دمش آستانه‌ی مد اول لیزر به ازای توان‌های همبستگی متفاوت (α در رابطه‌ی ۷) محاسبه گردید. از آنجایی‌که سیستم تصادفی است، به منظور درنظر گرفتن خاصیت آماری سیستم، کلیه محاسبات برای بیش از صد نمونه از اعداد تصادفی همبسته مختلف محاسبه و مقدار میانگین و انحراف معیار مربوط به آن‌ها بدست آمده است. شکل‌های ۲، ۳ و ۴ به ترتیب نحوه تغییر فرکانس، طول‌موج و توان آستانه مد اول برحسب توان همبستگی را نشان می‌دهند.

[5] Erbium Doped Fiber Amplifier

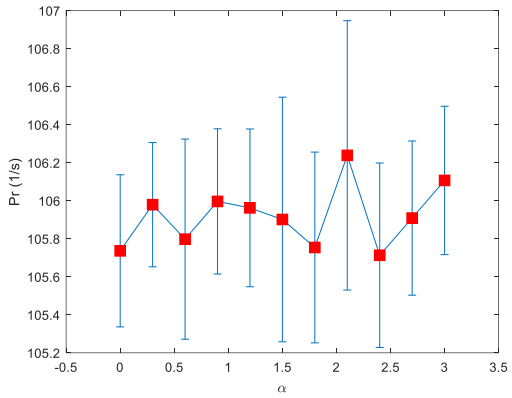
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



شکل۲: نمودار فرکانس لیزردهی نسبت به توان همبستگی



شکل۳: نمودار طول موج لیزردهی نسبت به توان همبستگی



شکل ۴: نمودار دمش آستانه‌ی مد اول نسبت به توان همبستگی

همانطور که این نمودارها نشان می‌دهد، بیشترین طول‌موج متوسط (کمترین فرکانس متوسط) و بیشترین توان آستانه متوسط مربوط به نمای همبستگی $\alpha=2$ است. با این وجود، برخلاف محیط‌های بدون بهره (غیرفعال[۶])، که همبستگی نقش مهمی در نحوه‌ی انتشار امواج دارد[۸]، در لیزر تصادفی فیبر نوری، فرکانس، طول-موج و دمش آستانه حساسیت زیاد و مشخصی به توان همبستگی نشان نمی‌دهند. در محیط‌های نامنظم، امواج پراکنده شده از ناکاملی‌ها مختلف با یکدیگر تداخل کرده، الگوی شدت داخل سیستم را تعیین می‌کنند. در این شرایط، تداخل سازنده امواج پراکنده شده باعث جایگزیدگی نور و ایجاد کاواک‌های موضعی در سیستم می‌گردد. بنابراین، افزودن همبستگی، باعث ایجاد همبستگی بین فاز امواج پراکنده شده گردیده، می‌تواند بر الگوی انتشار نور داخل سیستم تاثیر گذارد. در لیزرتصادفی، علاوه بر پس‌خوراند ناشی از کاواک‌های موضعی، بهره محیط و طیف مربوط به آن نیز بر مشخصات لیزردهی سیستم موثر است. نتایج حاصل از این پژوهش نشان می‌دهد که، وجود بهره باعث کاهش تاثیر مستقیم همبستگی بر ویژگی‌های تداخلی سیستم شده است.

نتیجه‌گیری

در این مقاله با استفاده از روش ماتریس انتقال، به بررسی اثر همبستگی بلندبرد بر مشخصات لیزر تصادفی فیبری توری براگ پرداختیم. نتایج عددی نشان می‌دهد که برخلاف نتایج مربوط به محیط‌های غیرفعال، به دلیل وجود بهره، همبستگی بلندبرد تأثیر قابل‌ملاحظه و مشخصی بر فرکانس، طول‌موج و توان آستانه مد اول لیزر تصادفی فیبری توری براگ ندارد.

مراجع

[1] S. Feng, “Correlations and Fluctuations of Coherent Wave Transmission through Disordered Media”, *Phys. Rev. Lett*, **61**(7), 834 (1988).

[2] H. Cao, “Lasing with Resonant Feedback in Random Media”, *Physica B*, **338**, 215-218 (2003).

[3] L. M. C. de Matos, A. Brito-Silva, M. Martinez-Games, A. Gomes and C. de Araujo, “Random fiber laser”, *Phys. Rev. Lett*., **99**, 153903-153906 (2007).

[4] N. Lizarraga, NP. Puente, EI. Chaikina, TA Leskova, ER Mendez, “Single-mode Er-doped fiber random laser with distributed Bragg grating feedback”, *Optics Express*, **17**(2), 395–404 (2009).

[5] A. Ghasempour Ardakani, M. Golshani Gharyeh Ali, S. M. Mahdavi, A. R. Bahrampour. “Mode analysis of fiber Bragg grating random lasers in the presence of mode competition”. *Optics & Laser Technology*, **44**, 969–975 (2012).

[6] F. M. Izrailev, A. A. Krokhin and N. M. Makarov, “Anomalous localization in low-dimensional systems with correlated disorder”, Physics Reports **512** (3), 125-254 (2012).

[7] Wu X, Andreasen J, Cao H, Yamilov A. “Effect of local pumping on random laser modes in one dimension”. *Journal of Optical Society of America B* ;**24** ;26–33 (2007)

[8] H. Tai, “Theory of fiber optical Bragg grating-revisited”. *Proceedings of the SPIE*, **5178**, 131-138 (2004).

[9] M. Khazaei Nezhad, S. M. Mahdavi, A. R. Bahrampour, M. Golshani, “Effect of long-range correlated disorder on the transverse localization of light in 1D array of optical waveguides”, *Optics Communications*,**307**,39-45 (2013)

[6] Passive

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

محاسبات اصول اولیه برای پروسکایت‌های دوگانه بدون سرب مبتنی بربیسموت: Cs_2ABiX_6 (A=Ag,Cu X=Br,Cl)

مرادی، اسما ؛ مختاری، علی

گروه فیزیک دانشگاه شهرکرد، شهرکرد

چکیده

کشف پروسکایت‌های دوگانه تماما معدنی بدون سرب در سال‌های اخیر به موفقیت‌های چشمگیری برای کاربرد در دستگاه‌های فتوولتاییک منجر شده است. این ترکیبات به دلیل تنوع ساختاری وشیمیایی و کاربردهای مختلف از اهمیت بالایی برخوردار هستند. پروسکایت‌های دوگانه بدون سرب مبتنی بر بیسموت با فرمول کلی Cs_2ABiX_6 (A=Ag,Cu X=Br,Cl) یکی از انواع مهم بلورهایی هستند که به علت پایداری بالا نسبت به هوا و رطوبت، سادگی ساختاری و انعطاف پذیری و همچنین روش‌های ساخت آسان و کم هزینه نسبت به همتایان آلی خود ارجحیت دارند. در این خانواده جدید از نیمرساناها دو پروسکایت $Cs_2AgBiBr_6$ و $Cs_2AgBiCl_6$ ترکیبات پایدار بلوری می باشند. در کار حاضر ما به بررسی خواص ساختاری و الکترونی پروسکایت‌های دوگانه بدون سرب مبتنی بر بیسموت با استفاده از اصول اولیه و روش ابتدا به ساکن پرداخته‌ایم.

واژه های کلیدی: *پروسکایت های دوگانه بدون سرب، گاف نواری غیرمستقیم، سلول خورشیدی.*

First Principles Calculations for the Lead-Free Bismuth- based Double Perovskites: Cs_2ABiX_6 (A=Ag,Cu X=Br,Cl)

Moradi, Asma;Mokhtari, Ali

Department of Physics, University of Shahrekord, Shahrekord,

Abstract

Discovering the lead-free full-inorganic double perovskites has been leading to remarkable successes in application in the photovoltaic devices. These compounds have high importance because of the structural and chemical diversity and also different applications. Lead free double perovskites based on bismuth with the general formula Cs_2ABiX_6 (A=Ag,Cu X=Br,Cl) are one of the important crystals the have priority respect to their organic counterparts because of the high stability to air and moisture, structural simplicity and flexibility as well as easy and low cost manufacturing methods. In this new family of semiconductors, $Cs_2AgBiBr_6$ and $Cs_2AgBiCl_6$ are stable crystalline compounds. In the present work, we have investigated the structural and electronic properties of the lead- free double perovskites based on bismuth using first principles and ab-initio methods.

***Keywords**: Lead-Free Double Perovskites,Indirect Band Gap,Solar cell.*

PACS No. 70

مقدمه

پروسکایت‌های هالید سرب در دهه‌های گذشته یکی از مهم‌ترین وسایل اپتوالکترونیک بوده‌اند. سلول‌های خورشیدی سرب یدید آلی معدنی از زمان گزارش اولیه در سال ۲۰۰۹ که بازدهی ۳/۸٪ داشته اند، رشد سریعی را تجربه کرده اند و در سال ۲۰۱۶ بازدهی به ۲۳/۳٪ رسیده است. پیشرفت این دسته از پروسکایت‌ها به دلیل گاف نواری بهینه و قابل تنظیم در محدوده‌ی نور مرئی ، طول انتشار حامل بلند و طول عمر قابل توجه و جرم‌های موثر کم بوده

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

است[۱]. با وجود پیشرفت سریع پروسکایت‌های هالید سرب، دو مانع مهم تجاری سازی برای آنها وجود دارد: تخریب سریع در شرایط عملی طبیعی به دلیل دما و رطوبت و هچنین سمی بودن عنصر سرب، دو چالش عمده برای این دسته از ترکیبات محسوب می شود[۲].

برای یافتن جایگزین مناسب به جای عنصر سرب (Pb^{2+}) در ترکیبات حاوی این عنصر، عناصر مختلفی پیشنهاد شده است. از جمله جایگزینی عناصر تک ظرفیتی به جای سرب منجر به تغییرات ساختاری قابل توجه و تشکیل ترکیبات غیرپروسکایتی می‌شود. همچنین جایگزینی عناصر دو ظرفیتی باعث ایجاد پروسکایت‌های ناپایدار یا نیمرساناهایی با گاف نواری بزرگ می‌شود. برای نمونه جایگزینی Sn^{2+} به جای Pb^{2+} به علت اکسیداسیون Sn^{2+} به Sn^{4+} باعث ایجاد یک ترکیب ناپایدار جدید می شود. بهترین جایگزین برای عنصر سمی سرب ، بکار بردن فلزاتی با بار +۱ و+۳ است. دسته مهمی از این نوع ترکیبات با بکار بردن کاتیونهای مد نظر، پروسکایت‌های دوگانه را تشکیل می‌دهند. این گروه از پروسکایت‌ها شامل فزات نجیب و عناصر گروه ۱۵ جدول تناوبی می‌باشند. در این کار پروسکایت‌های دوگانه متشکل از عنصر Bi^{3+} و عناصر Ag^{1+} و Cu^{1+} بررسی خواهند شد. از طرفی از بکار بردن عنصر Au^{1+} به دلیل تمایل زیاد برای تجزیه شدن در مقابل نور خورشید و عنصر Sb^{3+} به دلیل شعاع یونی کوچک وناپایداری ترکیب شامل این عنصر، صرفنظر شده است [۳و۱].

در این مقاله به بررسی پروسکایت‌های دوگانه بدون سرب با فرمول Cs_2XBiY_6 (X=Ag, Cu and Y=Cl, Br) می‌پردازیم. پایداری دو ترکیب $Cs_2AgBiBr_6$ و $Cs_2AgBiCl_6$ توسط Mc Clure و همکارانش با سنتز کردن آنها مورد بررسی قرار گرفته است[۵]. هنگامی نمونه‌ها برای مدت زمان طولانی در تاریکی قرار گرفتند نسبت به زمانی که در معرض نور بودند هیچ تغییری نداشتند. همچنین هر دو ترکیب جذب نور در مناطق زرد و قرمز طیف نور مرئی دارند که پتانسیل بالایی برای جذب‌کننده‌های نوری دارند و در برابر تجزیه پایدارند. ارزیابی پیش از سنتز $Cs_2AgBiBr_6$ نشان می‌دهد که ضریب تحمل و ضریب اوکتاهدرال در محدوده‌ی مناسبی قرار دارند و ترکیب مد نظر دارای پایداری بلوری است. بررسی تغییرات آنتالپی برای این ترکیب نشان می دهد کمترین آشفتگی و تجزیه پذیری در مقابل دما را دارد[۴]. دو ترکیب $Cs_2AgBiBr_6$ و $Cs_2AgBiCl_6$ تاکنون به روش‌های برهمکنش حالت جامد و پردازش کننده اشباع سنتز شده اند[۶].

روش‌های محاسباتی(خواص ساختاری و الکترونی)

در کار حاضر بهینه سازی و تجزیه و تحلیل ساختار الکترونی تمام ترکیبات با استفاده از بسته محاسباتی کوانتوم اسپرسو[۷] و به روش نظریه تابعی چگالی انجام شده است. ما تابعی همبستگی_ تبادلی با استفاده از تقریب GGA و نوع PBE [۸] در نظر گرفته شده است. طبق محاسبات اصول اولیه و به روش ابتدا به ساکن هر ۴ ترکیب $Cs_2AgBiBr_6$ ، $Cs_2AgBiCl_6$ ، $Cs_2CuBiBr_6$ و $Cs_2CuBiCl_6$ در گروه فضایی $FM\bar{3}M$ و بصورت شبکه براوه FCC پایدارند و دارای گاف نواری غیرمستقیم هستند. بهینه‌سازی و محاسبات با کوانتوم اسپرسو برای هریک از ترکیبات با استفاده از روش ابتدا به ساکن منجر به نتایج زیر شده است. در جدول (۱) و (۲) قسمتی از نتایج محاسبات کار حاضر آمده است.

جدول۱ : مقادیر بهینه پارامتر شبکه، تعداد نقاط k در منطقه اول بریلوئن، انرژی قطع

	a (A °)	kpoint	ecut	ecutrho	a Exp
Cs2AgBiBr6	۱۱.۳۵۳	۴×۴×۴	۶۰	۲۴۰	۱۱.۲۷۱
Cs2AgBiCl6	۱۰.۷۹۹	۴×۴×۴	۷۰	۲۸۰	۱۰.۹۷۷
Cs2CuBiBr6	۱۱.۰۰۲	۳×۳×۳	۶۰	۲۴۰	-
Cs2CuBiCl6	۱۰.۴۸۸	۳×۳×۳	۶۵	۲۶۰	-

جدول۲ : مقدار انرژی و حجم کمینه ، بالک مدول ، مشتق بالک مدول

	E_0(Ry)	V_0(a.u)^3	K_0(Kbar)	dk_0
Cs2AgBiBr6	-۲۹۷.۳۰۹۴۰	۲۴۶۹.۱۹	۲۱۵	۴.۲۶
Cs2AgBiCl6	-۳۱۶.۰۳۰۵۵	۲۱۲۵.۶۱	۲۵۴	۵.۸۷
Cs2CuBiBr6	-۳۱۲.۹۱۱۱۷	۲۲۵۶.۶۴	۲۶۰	۵.۶۲
Cs2CuBiCl6	-۳۳۱.۶۹۸۶۲	۱۹۲۲.۹۳	۳۱۴	۵.۳۹

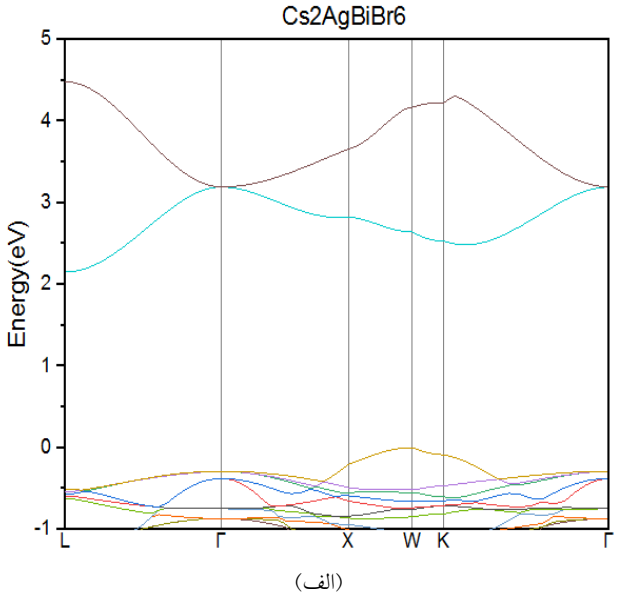
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

با مشاهده نتایج جدول(۱)، مشخص می‌شود ترکیب $Cs_2CuBiCl_6$ دارای بزرگترین مقدار بالک مدول است بنابراین نسبت به سه ترکیب دیگر سخت‌تر وفشرده‌تر می‌باشد[۹].

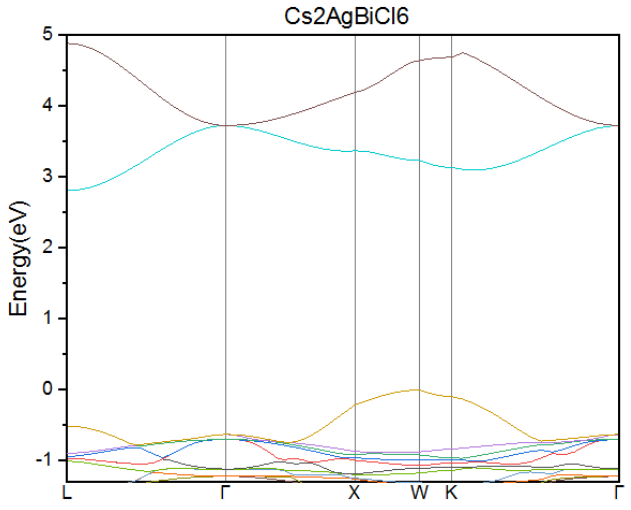
علاوه بر تقریب GGA، برای دست‌یابی به گاف نواری بهتر، محاسبات در تقریب LDA+U با پارامتر هابارد U= ۱۰ انجام شده است[۱۰]. نتایج طبق جدول (۳) نشان می‌دهد که به‌دلیل وجود الکترون‌های جایگزیده اوربیتال‌های d و f فلزات واسطه حاضر در ترکیبات مورد بررسی، تقریبLDA+U با در نظر گرفتن برهمکنش الکترون_الکترون، گاف نواری بهتری را می‌دهد که در توافق بسیار خوبی با مقادیر آزمایشگاهی می‌باشد[۵].

منحنی های ساختار نواری و چگالی حالت کل و چگالی حالات جزئی الکترونی به ترتیب در شکل های (۱) و(۲) نشان داده شده است.

نمودارها، نتایج و استدلال‌های دوترکیب$Cs_2CuBiBr_6$ و $Cs_2CuBiCl_6$ مشابه نمودارهای حاضر برای $Cs_2AgBiBr_6$ و $Cs_2AgBiCl_6$ می‌باشد و برای جلوگیری از تکرار از آوردن آنها صرفنظر شده است.



(الف)



(ب)

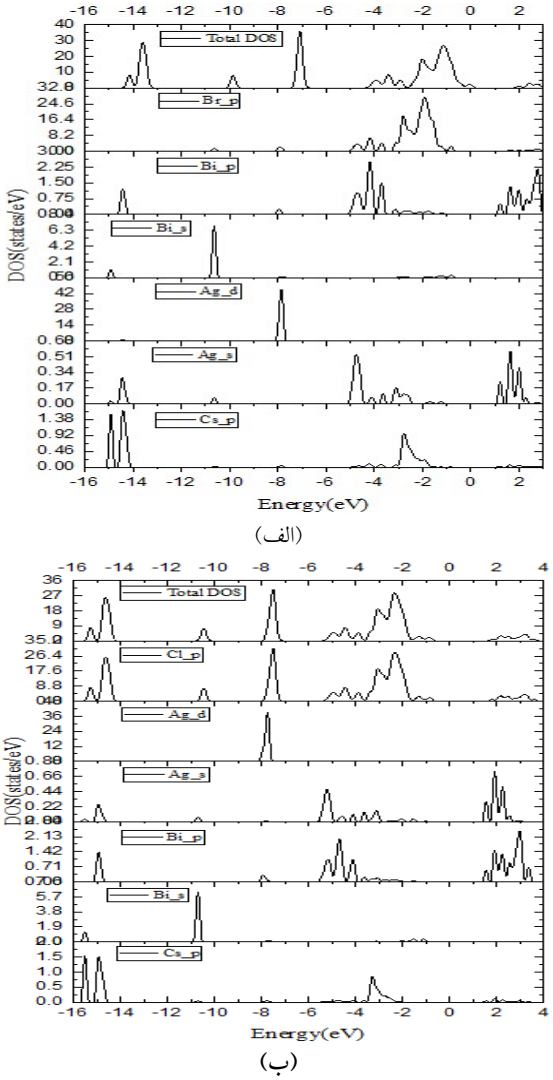
شکل(۱) : ساختار نواری در تقریب LDA+U برای برای الف) $Cs_2AgBiBr_6$ ب) $Cs_2AgBiCl_6$ [۱۱]

منحنی ساختار نواری ترکیبات مد نظر نشان می‌دهد که که گذار از بیشینه نوار ظرفیت در نقطه W به کمینه نوار رسانش درنقطه L و بصورت غیرمستقیم می‌باشد. محاسبات اصول اولیه نشان می‌دهد علت اصلی گاف نواری غیر مستقیم در این دسته از پروسکایت‌های دوگانه ویژگی ضدپیوندی پایین‌ترین نوار رسانش Bi-6p و اوربیتال‌های 4pو3p هالوژن‌ها و اوربیتال‌های ضدپیوندی بالاترین نوار والانسAg-4d (Cu-3d) و 4pو3p هالوژن‌ها است[۱۲]. مسئول گاف نواری غیرمستقیم بصورت کاملا موثر Ag-4d (Cu-3d) می‌باشد[۹]. طبق منحنی ساختار نواری مقدار گاف نواری در تقریب LDA+U نسبت به تقریب GGA برای همه ترکیبات مدنظر، دقیق‌تر تخمین زده شده است.

جدول ۳ : مقادیر گاف نواری محاسبه شده در تقریب‌های متفاوت و مقایسه آنها با داده‌های آزمایشگاهی

E_g(eV)	Cs2Ag BiBr6	Cs2Ag BiCl6	Cs2Cu BiBr6	Cs2Cu BiCl6
GGA	۱/۸۶	۲/۰۴	۰/۸۷۲	۱/۱۸۲
LDA+U	۲/۱۷۲	۲/۵۰۲	۱/۶۶۲	۲/۲۸۰
EXP	۲/۱۹ [۵]	۲/۷۷ [۵]	-	-

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



شکل(۴) : چگالی حالات کل و چگالی حالات جزئی اوربیتالی در تقریب LDA+U برای الف) $Cs_2AgBiBr_6$ ب) $Cs_2AgBiCl_6$. **انرژی فرمی برابر با صفر است.**

با توجه به منحنی‌های چگالی بدست آمده بیشترین سهم چگالی قبل از انرژی فرمی مربوط به اوربیتال‌هایBi-p، Ag-d و اوربیتال‌هایBr-p (Cl-p) است. برای بعد از انرژی فرمی بیشترین سهم چگالی مربوط به اوربیتال‌هایBi-p و Ag-s می‌باشد. از طرفی تقارن در توزیع چگالی حالات الکترونی با اسپین بالا و پائین نشان‌دهنده عدم وجود خاصیت مغناطیسی در این مواد است. محاسبات نشان می‌دهد گاف نواری ازCl به Br کاهش می‌یابد و ترکیبات شامل نقره گاف نواری بیشتری نسبت به ترکیبات حاوی مس دارند. زیرا گاف نواری وابستگی قوی به پارامترهای شبکه و الکترونگاتیوی دارد[۹].

همه پروسکایت‌های دوگانه بدون سرب در کار حاضر دارای گاف نواری غیرمستقیم هستند. محدوده‌ی گاف نواری همه آنها نشان می‌دهد این پروسکایت‌ها، نیمرسانا بوده وگاف نواری نزدیک به گاف نواری بهینه مورد نیاز برای ساخت سلول‌های خورشیدی را دارند. به طور خاص ترکیب$Cs_2AgBiBr_6$ به دلیل گاف نواری مناسب و سنتز آسان و پایدار و مقرون به صرفه به عنوان بهترین پروسکایت دوگانه بدون سرب برای دستگاه‌های فتوولتایئک شناخته می‌شود. همچنین با توجه مقادیر آزمایشگاهی، تقریب GGA تقریب انتخابی مناسبی برای محاسبات بوده است.

مرجع‌ها

[۱] M. R. Filip, X. Liu, A. Miglio, G. Hautier, et al, "*Phase Diagrams and Stability of Lead-Free Halide Double Perovskites* $Cs_2BB'X_6$ *, B = Sb, Bi, B' = Cu, Ag, Au and X = Cl, Br, I*", *J. Phys. Chem*, **122, 158**, (2017).

[۲] A. Tayaa , P. Rani, Manish K. Kashyap, "*Structural, Electronic and Optical studies of Pb-Free Halide Double Perovskite* $Cs_2BiAgBr_6$*; an mBJLDA approach*", *AIP. Conf. Proc*, **2093 , 020028**, (2019).

[۳] O.A. Lozhkina, A.A. Murashkina, M.S. Elizarov, V.V. Shilovskikh, "*Microstructural analysis and optical properties of the halide double perovskite* $Cs_2BiAgBr_6$ *single crystals*", *Chem. Phys. Lett*, **694, 18,** (2018).

[۴] E. Meyer, D. Mutukwa , N. Zingwe, R. Taziwa, "*Lead-Free Halide Double Perovskites: A Review of the Structural, Optical, and Stability Properties as Well as Their Viability to Replace Lead Halide Perovskites*", *Metals*, **8, 667**, (2018).

[۵] McClure, E. T.; Ball, M. R.; Windl, W.; Woodward, P. M. " Cs2AgBiX6 (X = Br, Cl) New Visible Light Absorbing, Lead-Free Halide Perovskite Semiconductors" , *Chem. Mater*, **28, 1348–1354**, (2016).

[۶] M. R. Filip, S. Hillman, A. A. Haghighirad, H. J. Snaith, "*Band Gaps of the Lead-Free Halide Double Perovskites* $Cs_2BiAgCl_6$ *and* $Cs_2BiAgBr_6$ *from Theory and Experiment*", *J. Phys. Chem. Lett*, **7, 2579**, (2016).

[۷] P. Giannozzi, S. Baroni, N. Bonini, M. Calandra, et al, "*QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials*", *J. Phys. Condens. Matter*, **21, 395502**, (2009).

[۸] J. P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, "Generalized Gradient Approximation Made Simple", *Physical reviewletter*s, **18**, (1996).

[۹] N. R. Kumar, R. Radhakrishnan, "*Electronic, Optical and Mechanical Properties of Lead-Free Halide Double Perovskites using First-Principles Density Functional Theory*"**,** *J. mater.lett*, **227, 289**, (2018).

[۱۰] G. Volonakis, A.Haghighirad, R. L. Milot, W. H. Sio,M. R. Filip, " Cs2InAgCl6: A new lead-free halide double perovskite with direct band gap", *J.Phys.Chem. Lett* **, 8, 4, 772–778**, (2017).

[۱۱] W. Setyawan, S. Curtarolo, "High-throughput electronic band structure calculations: Challenges and tools",*Computational Materials Science*, **49**,**299-312**, (2010).

[۱۲] F. Giustino, H. J. Snaith, "*Toward Lead-Free Perovskite Solar Cells*", *ACS. Energy. Lett*, **1, 1233**, (2016).

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بررسی جابه‌جایی ایزوتوپی شعاع بار در ایزوتوپ‌های زوج-زوج $^{110-130}Sn$ با استفاده از مدل میدان میانگین نسبیتی

یغمایی، بامداد[1] ؛ دهقانی، وحید ؛ مهمان دوست خواجه‌داد، علی‌اکبر

[1] گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه سیستان و بلوچستان، زاهدان، ایران

چکیده

با استفاده از معادلات مدل میدان میانگین نسبیتی و سه مجموعه از پارامترهای این مدل(NL1، NL3، NLSH)، انرژی بستگی و شعاع بار ایزوتوپ‌های زوج – زوج $^{110-130}Sn$ و جابه‌جایی ایزوتوپی مربوط به آن محاسبه و نتایج حاصل از مدل با داده‌های تجربی مقایسه شده است. میان نتایج به دست آمده از مدل میانگین نسبیتی و داده‌های تجربی همخوانی بسیار خوبی مشاهده می‌شود و به نظر می رسد استفاده ار مجموعه پارامترهای NL3 برای ایزوتوپ‌های گفته شده نتایج بهتری نسبت به دو مجموعه دیگر دارد.

واژه‌های کلیدی: *مدل میدان میانگین نسبیتی، ایزوتوپ‌های قلع، شیفت ایزوتوپی.*

Evaluation of charge radius isotope shift in even-even isotopes of $^{110-130}Sn$, using the Relativistic Mean Field Model

Yaghmaei, Bamdad[1]; Dehghani, Vahid; Mehmandoost-Khajeh-Dad, Ali Akbar

[1]Physics Department, Faculty of Science, University of Sistan and Baluchestan, Zahedan, Iran

Abstract

Using the equations of the relativistic mean field model and three sets of parameters of the model (NL1, NL3, NLSH), the binding energy and charge radius of even-even isotopes of $^{110-130}Sn$ as well as the isotope shifts are calculated and the results of the model are compared with the experimental data. There is a very good agreement between the results obtained from the relativistic mean field model and the experimental data. Using a set of NL3 parameters leads to isotope shifts that are more consistent with the experimental results.

Keywords: *Relativistic Mean Field Model, Tin isotopes, Isotope shift.*

PACS 21.

مقدمه

یکی از مدل‌های موفق در توصیف برخی از خواص هسته‌ها از جمله، انرژی بستگی، شعاع هسته‌ای و تغییر شکل‌های حالت پایه مدل میدان میانگین نسبیتی است. در این نظریه که توصیفی پدیده شناختی از مساله بس ذره‌ای هسته‌ای ارائه می‌دهد، نوکلئون‌ها به صورت اسپینورهای دیراک که در میدان‌های میانگین مزونی قرار دارند در نظر گرفته می‌شوند و بر هم کنش میان آن‌ها از طریق میدان‌های مزونی صورت می‌گیرد. در انتخاب نوع و تعداد مزون‌ها، همخوانی مدل با داده‌های تجربی و سادگی و سرعت محاسبات مورد توجه واقع می‌شود. در بیشتر موارد، مزون‌های σ، ω، ρ و فوتون در نظر گرفته می‌شوند. نیروی جاذبه میان نوکلئون‌ها توسط مزون σ ، نیروی دافعه میان نوکلئون‌ها از طریق مزون ω و تفاوت میان پروتون-ها و نوترون‌ها با مزون ρ در مدل گنجانده می‌شود. فوتون نیروی دافعه کولنی را تامین می‌کند.معادله حاکم بر رفتار این مزون‌ها، معادله کلاین-گوردن است و رفتار نوکلئون‌ها که به صورت ذراتی مستقل و بی بعد تصور می‌شوند با معادله دیراک بیان می‌شود. اثر پاد ذرات با تنظیم پارامترها در مدل لحاظ می‌شود و پارامترها خود از برازش به داده‌های ماده هسته‌ای تعیین می‌شوند.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

دراین مقاله با استفاده از مدل میدان میانگین نسبیتی و سه مجموعه از پارامترهای این مدل جابجایی ایزوتوپی شعاع بار و انرژی بستگی ایزوتوپ های زوج-زوج $^{110\text{-}130}Sn$ محاسبه و با داده‌های تجربی مقایسه شده است.

مدل میدان میانگین نسبیتی

نقطه شروع مدل تبادل مزونی لاگرانژی زیر است[۱]،

$$\begin{aligned}\mathcal{L} &= \bar{\Psi}\left(i\gamma_\mu\partial^\mu - M\right)\Psi + \frac{1}{2}\left(\partial_\mu\sigma\partial^\mu\sigma - m_\sigma^2\sigma^2\right)\\ &-\frac{1}{3}g_2\sigma^3 - \frac{1}{4}g_3\sigma^4 - \frac{1}{4}\Omega_{\mu\nu}\Omega^{\mu\nu} + \frac{1}{2}m_\omega^2\omega_\mu\omega^\mu\\ &-\frac{1}{4}\vec{R}_{\mu\nu}\vec{R}^{\mu\nu} + \frac{1}{2}m_\rho^2\vec{\rho}_\mu\vec{\rho}^\mu - \frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} - g_\sigma\bar{\Psi}\sigma\Psi\\ &-g_\omega\bar{\Psi}\gamma_\mu\omega^\mu\Psi - g_\rho\bar{\Psi}\gamma_\mu\vec{\tau}\vec{\rho}^\mu\Psi - e\bar{\Psi}\gamma_\mu A^\mu\Psi \qquad (۱)\end{aligned}$$

در رابطه (۱) M جرم نوکلئون، m_σ، m_ω و m_ρ جرم مزون‌ها، g_σ، g_ω، g_ρ و e جفت شدگی مزون ها و فوتون با نوکلئون‌ها، وg_2 و g_3 خود جفت شدگی‌های میدان σ هستند. جمله‌های شامل σ^3 و σ^4 برای توصیف بهتر اثرات سطحی و تراکم ناپذیری به لاگرانژی اضافه شده‌اند. در حالت کلی تانسورهای میدان‌های مزونی و فوتون را به صورت $\chi^{\mu\nu}$ نشان می‌دهیم،

$$\chi^{\mu\nu} = \partial^\mu\chi^\nu - \partial^\nu\chi^\mu \qquad (۲)$$

کاربرد معادله اویلر – لاگرانژ، به معادلات کلاین-گوردن برای مزون‌ها و معادله دیراک برای نوکلئون‌ها می‌انجامد. هسته‌های بررسی شده در این تحقیق هسته‌های زوج-زوج با تقارن کروی هستند. برای چنین هسته‌هایی جریان‌ها وجود ندارند و ناوردایی تحت تبدیل وارونی زمان برقرار است، با این شرایط، برای میدان های مزونی همه مولفه‌های فضایی صفر می‌شوند و با فرض ثابت بودن تعداد پروتون‌ها و نوترون‌ها، تنها مولفه سوم ایزوبردار میدان مزونی باقی می‌ماند. اعمال شرایط یاد شده معادلات دیراک و کلاین-گوردون را به شکل ساده‌تری تبدیل می‌کند. معادله دیراک به دستگاه معادلات جفت شده مرتبه اول زیر تبدیل می شود.

$$\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{k_i+1}{r}\right)f_i + \left(M^* - V + \varepsilon_i\right)g_i = 0 \qquad (۳)$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial r} - \frac{k_i-1}{r}\right)g_i + \left(M^* + V - \varepsilon_i\right)f_i = 0 \qquad (۴)$$

در اینجا،M^* جرم موثر و V پتانسیل برداری است و از روابط زیر به دست می‌آیند

$$M^* = M + g_\sigma\sigma \qquad (۵)$$

$$V = g_\omega\omega + g_\rho\tau_3\rho + e\frac{1-\tau_3}{2}A \qquad (۶)$$

f_i و g_i بیانگر بخش فضایی اسپینور چهار مولفه ای دیراک هستند که به صورت زیر نوشته می‌شود.

$$\Psi_i = \begin{pmatrix} f_i(r)\varphi_{ljm} \\ ig_i(r)\varphi_{\bar{l}jm}\end{pmatrix}\xi_t \qquad (۷)$$

و τ_3 مولفه سوم ایزواسپین را نشان می‌دهد که برای نوترون 1+ و برای پروتون 1- است. معادلات کلاین – گوردن برای میدان‌های مزونی به صورت کلی زیر نوشته می‌شوند.

$$\left[-\partial_r^2 - \frac{2}{r}\partial_r + m_\Phi^2\right]\Phi(r) = S_\Phi \qquad (۸)$$

در رابطه بالا $\Phi(r)$ میدان‌های σ، ω، ρ یا A را نشان می‌دهد. چشمه $S_\Phi(r)$ ثابت‌های جفت شدگی و چگالی مربوط به هر میدان را درخود دارد. چگالی‌ها ρ_σ، ρ_v، ρ_3 و ρ_c هستند که به ترتیب چگالی اسکالر، چگالی باریونی، چگالی ایزوبردار و چگالی بار نامیده می‌شوند و از روابط زیر به دست می‌آیند.

$$\rho_\sigma = (4\pi)^{-1}\sum_i (2j_i+1)n_i\left(|f_i|^2 - |g_i|^2\right) \qquad (۹)$$

$$\rho_v = (4\pi)^{-1}\sum_i (2j_i+1)n_i\left(|f_i|^2 + |g_i|^2\right) \qquad (۱۰)$$

$$\rho_3 = (4\pi)^{-1}\sum_i (2j_i+1)n_i\tau_3\left(|f_i|^2 + |g_i|^2\right) \qquad (۱۱)$$

$$\rho_c = (8\pi)^{-1}\sum_i (2j_i+1)n_i(1-\tau_3)\left(|f_i|^2 + |g_i|^2\right) \qquad (۱۲)$$

برای به دست آوردن مشخصات هسته‌ها، روابط (۶)-(۳)، معادلات کلاین-گوردن (۸) و روابط (۱۲)-(۹) باید به صورت خودسازگار حل شوند. به این منظور ابتدا با پاسخ‌های حدسی مناسب برای پتانسیل‌های اسکالر و برداری، معادلات جفت شده دیراک را حل می‌کنیم. به این ترتیب قسمت‌های شعاعی اسپینور (f_i و g_i) و انرژی تک ذره مربوط به آن حالت (ε_i) به دست می‌آید. این کار را برای همه حالت‌های اشغال شده انجام می‌دهیم. عدد اشغال این حالت‌ها (n_i) از تئوری BCS به دست می‌آید.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

$$n_i = \frac{1}{2}\left[1-(\varepsilon_i-\lambda)\left((\varepsilon_i-\lambda)^2+\Delta^2\right)^{-\frac{1}{2}}\right] \quad (۱۳)$$

در رابطه بالا Δ گپ زوجیت در دمای صفر و λ پتانسیل شیمیایی است که با رابطه زیر معین می‌شود،

$$\sum_i (2j_i+1)n_i = Z(N) \quad (۱۴)$$

در اینجا j_i تکانه زاویه کل حالت iام را نشان می‌دهد و Z و N به ترتیب عدد اتمی و عدد نوترونی هستند.

اکنون با داشتن f_i ها، g_i ها و n_i ها چگالی‌ها به دست می‌آیند. با مشخص شدن چگالی‌ها می‌توانیم معادلات کلاین-گوردن را حل کنیم و از پاسخ‌های به دست آمده برای میدان‌های مزونی، پتانسیل-های اسکالر و برداری جدیدی را برای دور بعدی محاسبات بسازیم. این کار تا رسیدن جواب‌ها به همگرایی مناسب مورد نظر انجام می‌شود. با داشتن چگالی‌ها، میدان‌های مزونی و انرژی‌های تک ذره و با استفاده از روابط[۲] انرژی بستگی و شعاع پروتونی را برای هسته محاسبه می‌کنیم و شعاع بار را از رابطه زیر به دست می‌آوریم،

$$r_c = \sqrt{r_p^2 + 0.64} \quad (۱۵)$$

که در آن r_p و r_c به ترتیب شعاع پروتونی و شعاع بار هستند. سپس جابه‌جایی ایزوتوپی شعاع بار را از رابطه

$$\delta r^2 = r_c^2(A) - r_c^2(ref) \quad (۱۶)$$

محاسبه می‌کنیم. در رابطه بالا $r_c(A)$ شعاع بار ایزوتوپی با عدد جرمی A و $r_c(ref)$ شعاع بار ایزوتوپی است که به عنوان مرجع انتخاب شده است.

نتیجه‌گیری

با کدی که برای مدل میدان میانگین نسبیتی در حالت کروی نوشته-ایم، معادله دیراک و معادلات کلاین-گوردن را از روش بسط در پایه جواب‌های نوسانگر هارمونیک کروی[۱] حل کردیم. تعداد پوسته‌ها را برای حل معادله دیراک N_F=16 و برای حل معادلات کلاین-گوردن N_B=20 در نظر گرفتیم. برای محاسبه پارامتر گپ زوجیت در دمای صفر از تفاوت جرم پنج هسته زوج-فرد مجاور [۳] استفاده کردیم. تعداد ترازهای تک ذره استفاده شده در محاسبات از شرط[۱]

$$\varepsilon_i - \lambda \le 2\left(41A^{-1/3}\right) \quad (۱۷)$$

تعیین شده است که در آن A عدد جرمی را نشان می‌دهد. شرایط همگرایی به گونه‌ای انتخاب شده‌اند که چگالی‌ها تا شش رقم اعشار و پتانسیل شیمیایی، انرژی بستگی و شعاع تا چهار رقم اعشار همگرا شوند. این رهیافت برای مجموعه پارامترهای NL1، NL3 و NLSH که در جدول۱ آمده‌اند تکرار شده و انرژی بستگی و شعاع بار ایزوتوپ‌های $^{110\text{-}130}Sn$ محاسبه شده است. سپس جابه‌جایی ایزوتوپی از رابطه (۱۶) برای این ایزوتوپ‌ها تعیین شده است. در این مقاله ^{110}Sn را ایزوتوپ مرجع در نظر گرفته‌ایم.

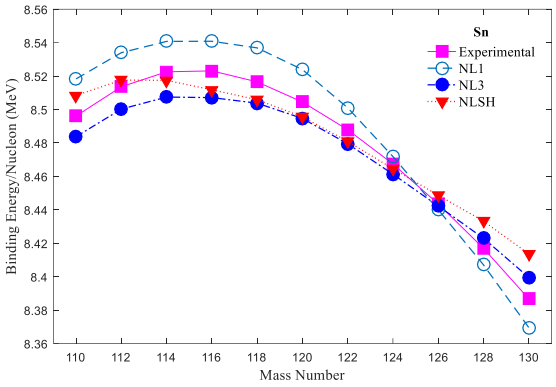
جدول ۱: مجموعه پارامترها استفاده شده در محاسبات[۱, ۲].

	NL1	NL3	NLSH
$M_{Nucleon}$ (MeV)	938.0	939.0	939.0
m_σ (MeV)	492.250	508.194	526.059
m_ω (MeV)	795.359	782.501	783.0
m_ρ (MeV)	763.0	763.0	763.0
g_σ	10.138	10.217	10.443
g_ω	13.285	12.868	12.945
g_ρ	4.975	4.474	4.382
g_2 (fm^{-1})	-12.172	-10.431	-6.909
g_3	-36.265	-28.885	-15.833

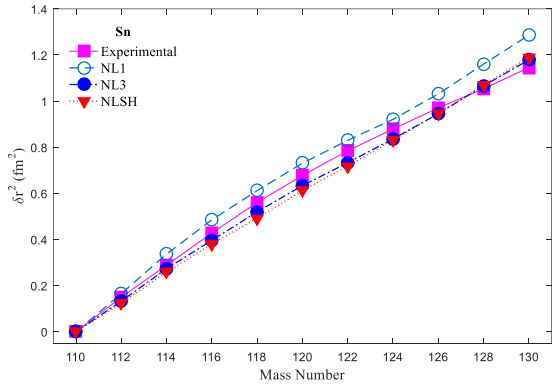
در شکل۱ انرژی بستگی بر نوکلئون برای ایزوتوپ‌های قلع از A=110 تا A=130 برحسب عدد جرمی نشان داده شده. اگر جذر مجموع مربعات تفاوت‌های مقادیر به دست آمده از مدل و مقادیر تجربی را برای انرژی بستگی واحد نوکلئون با δB نشان دهیم، $\delta B_{NL1} = 0.0542$، $\delta B_{NL3} = 0.0371$ و $\delta B_{NLSH} = 0.0397$ را بر حسب (MeV) به دست می‌آوریم که نشان می‌دهد انرژی بستگی ایزوتوپ‌های زوج-زوج قلع در محدوده گفته شده به خوبی با مدل میدان میانگین نسبیتی قابل محاسبه است و در بین مجموعه پارامترهای مورد بررسی، از مجموعه پارامترهای NL3 نتایج بهتری حاصل می‌شود. همچنین مشاهده می‌شود که در میان ایزوتوپ‌های مورد مطالعه برای A=126 و برای هر سه مجموعه بهترین همخوانی مدل با داده تجربی وجود دارد. در شکل۲ نمودارهای جابه‌جایی ایزوتوپی شعاع بار برای داده‌های تجربی و نتایج مدل میدان میانگین

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

نسبیتی آورده شده است. در اینجا نیز همخوانی مدل میدان میانگین نسبیتی برای هر سه مجموعه پارامتر ، با داده‌های تجربی مشاهده می‌شود همچنین به وضوح دیده می‌شود که از مجموعه پارامترهای NL3 نتیجه مطلوب‌تری به دست می‌آید.



شکل ۱: انرژی بستگی برای ایزوتوپ‌های زوج-زوج قلع. مربع‌ها داده‌های تجربی [۴] ، دایره‌های خالی نتایج NL1، دایره‌های پر نتایج NL3 و مثلث‌ها نتایج NLSH را نشان می‌هند.



شکل۲: جابه‌جایی ایزوتوپی شعاع بار برای ایزوتوپ‌های زوج-زوج قلع. مربع‌ها با استفاده از داده‌های تجربی [۵] به دست آمده‌اند. دایره‌های خالی نتایج NL1، دایره‌های پر نتایج NL3 و مثلث‌ها نتایج NLSH را نشان می‌هند.

مرجع‌ها

[۱] Y. Gambhir, P. Ring, A. Thimet," Relativistic mean field theory for finite nuclei", *Annals of Physics* **198** (1990) 132-179.

[۲] P. Ring, Y. Gambhir, G. Lalazissis, "Computer program for the relativistic mean field description of the ground state properties of even-even axially deformed nuclei", *Computer physics communications* **105** (1997) 77-97.

[۳] R. Razavi, A.R. Mohassel, A. Rahmatinejad, A. Jabarpour, "Systematic of critical temperature of nuclear pairing transition", *Nuclear Physics A* **976** (2018) 61-69.

[۴] G. Audi, W. AH, K. FG, M. MacCormick, X. Xu, B. Pfeiffer, "The AME2012 atomic mass evaluation (II). Tables, graphs and references", *Chinese Physics C* **36** (2012) 1603-2014.

[۵] I. Angeli, K.P. Marinova, "Table of experimental nuclear ground state charge radii :An update", *Atomic Data and Nuclear Data Tables* **99** (2013) 69-95.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مطالعه سیستم مقید دو نوکلئونی روی شبکه به روش نظریه میدان موثر

احمدی، معصومه[1]؛ هادی زاده، محمدرضا[2]؛ رادین، مهدی[3]؛ بایگان، شهریار[1]

[1] دانشکده فیزیک دانشگاه تهران

[2] دپارتمان فیزیک و نجوم دانشگاه اوهایو، ایالات متحده

[3] دانشکده فیزیک دانشگاه خواجه نصیرالدین طوسی، تهران

چکیده

در این مقاله با استفاده از نظریه میدان مؤثر تا مرتبه NLO به مطالعه سیستم مقید دو نوکلئونی روی شبکه می‌پردازیم که منجر به فرمول بندی معادله لیپمن-شوئینگر روی شبکه و در فضای تکانه می‌شود. در ادامه با استفاده از تکنیک لنکزوس به محاسبه ی انرژی بستگی و تابع موج دوترون بر روی شبکه‌ای مکعبی با تعداد ۲۰ گره در هر بعد و فاصله ی شبکه ۱/۹۷ فرمی (متناظر با شبکه‌ای به طول تقریبا ۴۰ فرمی در هر بعد) می‌پردازیم.

واژه‌های کلیدی: نظریه میدان مؤثر روی شبکه، معادله لیپمن-شوئینگر، دوترون.

Simulation of two-nucleon bound state on a lattice with effective field theory

Ahmadi, Masoumeh[1]; Hadizadeh, Mohammadreza[2]; Radin, Mahdi[3]; Bayegan, Shahriar[1]

[1]University of Tehran, Department of Physics

[2]Ohio University, Department of Physics & Astronomy, USA

[3]K. N. Toosi University of Technology, Department of Physics, Tehran

Abstract

We study the bound state of two nucleons on a lattice using an effective field theory (EFT) framework up to next-to-leading order (NLO). This leads to formulating the Lippmann-Schwinger equation on a cubic lattice and in momentum space. Lanczos technique is utilized for the calculation of deuteron binding energy and wave function on a lattice with a lattice spacing of 1.9 fm and 20 nodes in each spatial direction.

Keywords: *Effective field theory, Lippmann-Schwinger equation, Lattice Simulation, Deuteron*

PACS No. 20

مقدمه

روش نظریه میدان مؤثر بر روی شبکه به عنوان روشی مستقل از مدل برای مطالعه حالت‌های مقید و پراکندگی سیستم‌های چند ذره ای و بس ذره‌ای در فیزیک هسته‌ای با موفقیت استفاده شده است [1]. اولین تلاش‌ها در این راستا برای مطالعه ویژگی‌های ماده هسته ای و با روش مونته کارلو انجام شده است بگونه‌ای که نتایج شبیه سازی روی شبکه با دقت بالایی نتایج حالت پیوسته را بازتولید می کند[۲،۳]. در ادامه مطالعات متعددی برای شبیه‌سازی ویژگی‌های هسته‌های سبک، میانی و ماده هسته‌ای با استفاده از ترکیب روش های میدان مؤثر و مونته کارلو روی شبکه انجام شده است. در این مقاله به مطالعه سیستم مقید دونوکلئونی روی شبکه و با استفاده از نظریه میدان مؤثر بدون پایون می پردازیم. بدین منظور معادله شرودینگر را روی شبکه فرمول‌بندی کرده و به حل دقیق آن برای محاسبه انرژی بستگی و تابع موج می‌پردازیم.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

نظریه میدان مؤثر روی شبکه برای سیستم مقید دو نوکلئونی

در نظریه میدان موثر و در انرژی‌های پایین، تکانه نوکلئون‌ها بسیار کوچکتر از جرم پایون تبادلی می‌باشد، یعنی $Q \ll m_\pi$. در این ناحیه از انرژی لاگرانژی غیرنسبیتی سیستم مقید دو نوکلئونی، با توجه به تقارن آیزواسپینی $SU(2)$ تا مرتبه NLO توسط رابطه زیر داده می شود:

$$\mathcal{L} = N^\dagger\left(i\partial_0 + \frac{\nabla^2}{2M}\right)N - C_0\left(N^T P^k N\right)^\dagger\left(N^T P^k N\right) + C_2\left[\left(N^T P^k N\right)^\dagger\left(N^T P^k \overleftrightarrow{\nabla}^2 N\right) + h.c.\right], \quad (1)$$

که در آن N میدان غیرنسبیتی نوکلئونی، M جرم نوکلئون، C_0 و C_2 ثابت های برهمکنش دو نوکلئونی در انرژی های پایین و $P^k = \frac{1}{\sqrt{8}}\sigma_2\sigma^k\tau_2$ می باشد. $\overleftrightarrow{\nabla}^2 = \overleftarrow{\nabla}\cdot\overleftarrow{\nabla} - 2\overleftarrow{\nabla}\cdot\vec{\nabla} + \vec{\nabla}\cdot\vec{\nabla}$ با اندیس‌های برداری $k = 1,2,3$ عملگر تصویر می‌باشد که توسط ماتریس‌های پاولی روی فضای اسپینی و ایزواسپینی اثر می‌کند. هامیلتونی متناظر با لاگرانژی (1) بصورت زیر است[4]:

$$\mathcal{H} = \int d^3x\, N^\dagger\left(-\frac{\nabla^2}{2M}\right)N + C_0\left(N^T P^k N\right)^\dagger\left(N^T P^k N\right) - C_2\left[\left(N^T P^k N\right)^\dagger\left(N^T P^k \overleftrightarrow{\nabla}^2 N\right) + h.c.\right]. \quad (2)$$

برای مطالعه سیستم مقید دو نوکلئونی روی شبکه، شبکه‌ای مکعبی را در نظر می‌گیریم که هر بعد آن طولی برابر با L با تعداد گره‌های N_s و با فاصله a از همدیگر هستند، بطوریکه $L = N_s a$ باشد. با توجه به شرایط مرزی دوره‌ای شبکه و جایگزین نمودن متغیرهای پیوسته با متغیرهای گسسته طبق روابط زیر

$$N(\mathbf{x}) \to N_{\mathbf{n}} a^{-\frac{3}{2}}, \mathbf{x} \to \mathbf{n}a, \int d^3x \to a^3\sum_{\mathbf{n}}$$
$$\mathcal{H} \to \mathcal{H}_L a^{-1}, M \to M_L a^{-1}, C_0 \to C_0^L a^2,$$
$$C_2 \to C_2^L a^4, \quad (3)$$

هامیلتونی معادله (2) را به صورت زیر می‌نویسیم[4]:

$$\mathcal{H}_L = \sum_{\mathbf{n}} N_{\mathbf{n}}^\dagger\left(\frac{-\nabla_L^2}{2M_L}\right)N_{\mathbf{n}} + C_0^L\left(N_{\mathbf{n}}^T P^k N_{\mathbf{n}}\right)^\dagger\left(N_{\mathbf{n}}^T P^k N_{\mathbf{n}}\right) - C_0^L\left[\left(N_{\mathbf{n}}^T P^k N_{\mathbf{n}}\right)^\dagger\left(N_{\mathbf{n}}^T P^k \overleftrightarrow{\nabla}_L^2 N_{\mathbf{n}}\right) + h.c.\right], \quad (4)$$

که در آن $n \equiv (n_1, n_2, n_3)$ برداری با مؤلفه‌های $n_i = 1,2,3$ و C_0^L، C_2^L، M_L و $\mathcal{H}_L$ پارامترهای بدون بعد متناظر با C_0، C_2، M و $\mathcal{H}$ می باشند. ∇_L^2 و $\overleftrightarrow{\nabla}_L^2$ نمایش گسسته و بدون بعد متناظر با عملگر لاپلاسی هستند. با تعریف $N_{\mathbf{n}}$ برحسب بصورت:

$$N_{\mathbf{n}} = \frac{1}{N_s^{3/2}}\sum_{\mathbf{p}_L} e^{i\mathbf{p}_L\cdot\mathbf{n}}\, a_{\mathbf{p}_L} \quad (5)$$

هامیلتونی معادله (٤) را برحسب عملگرهای خلق و فنا بصورت زیر بازنویسی می‌نماییم:

$$\mathcal{H}_L = \sum_{\mathbf{p}_L}\frac{\mathcal{P}_L}{2M_L}a_{\mathbf{p}_L}^\dagger + \frac{1}{N_s^3}\sum_{\mathbf{p}_L,\mathbf{p}_L'}\left(C_0^L + 4C_2^L(\mathcal{P}_L + \mathcal{P}_L')\right) \times \left(a_{\mathbf{p}_L}^\dagger P^k a_{-\mathbf{p}_L}^\dagger\right)\left(a_{\mathbf{p}_L} P^k a_{-\mathbf{p}_L'}\right), \quad (6)$$

که تکانه شبکه $\mathcal{P}_L$ تا تصحیح مرتبه $\mathcal{O}(a^4)$ توسط رابطه زیر داده می‌شود[1]:

$$\mathcal{P}_L \equiv 2\sum_{i=1}^{3}(\omega_0 - \omega_1\cos(\hat{p}_i) + \omega_2\cos(2\hat{p}_i) - \omega_3\cos(3\hat{p}_i) \quad (7)$$

پارامترهای ω_i مربوط به تصحیحات مرتبه‌های مختلف در جدول شماره (۱) داده شده‌اند. تکانه شبکه $\mathbf{p}_L \equiv (p_1, p_2, p_3)$ با توجه به شرایط مرزی دوره ای شبکه بصورت زیر می‌باشد:

$$p_i = \frac{2\pi}{N_s}\hat{p}_i, \quad -\frac{N_s}{2} < \hat{p}_i \le \frac{N_s}{2}, \quad i = 1,2,3 \quad (8)$$

با توجه به هامیلتونی شبکه در معادله (٦)، معادله لیپمن–شوئینگر در شبکه را برای حالت مقید دونوکلئونی و در کانال S بصورت زیر می نویسیم:

$$\psi(\mathbf{p}_L) = \frac{1}{E_L - \frac{\mathcal{P}_L}{2M_L}}\frac{1}{N_s^3}\sum_{\mathbf{p}_L'}\left(C_0^L + 4C_2^L(\mathcal{P}_L + \mathcal{P}_L')\right)\psi(\mathbf{p}_L') \quad (9)$$

که $\psi\left(\mathbf{p}_L\right)$ تابع موج دوترون روی شبکه می‌باشد.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

جدول 1 :مقادیر مربوط به پارامترهای ω_i تا تصحیح مرتبه $\mathcal{O}(a^4)$

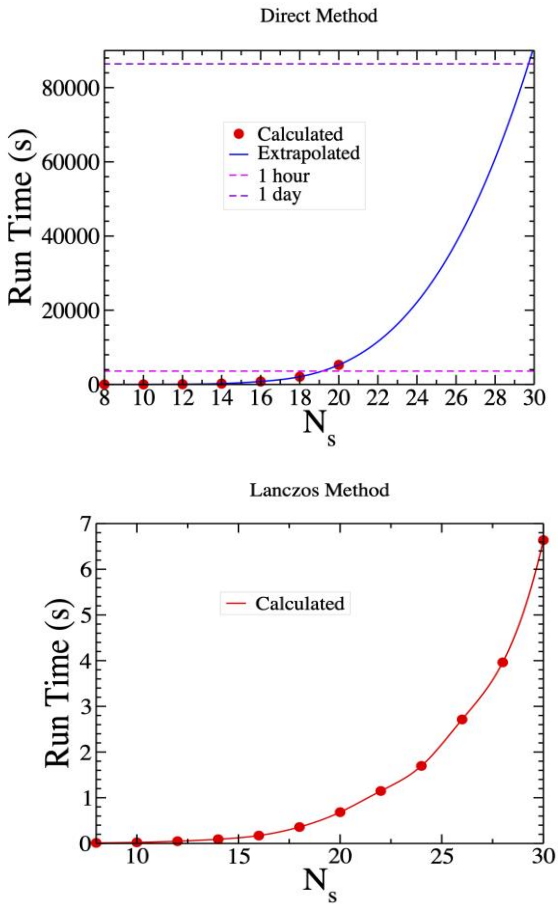
	$\mathcal{O}(a^0)$	$\mathcal{O}(a^2)$	$\mathcal{O}(a^4)$
ω_0	1	5/4	49/36
ω_1	1	4/3	3/2
ω_2	0	1/12	3/20
ω_3	0	0	1/90

حل عددی و نتایج

برای محاسبه انرژی بستگی و تابع موج دوترون، معادله لیپمن-شوئینگر (۹) را به ازای پارامتر شبکه $a = 1.97\ fm$ و مقادیر مختلف گره‌های شبکه، یعنی N_s، حل می‌نماییم. برای این منظور از دو روش کاملا متفاوت مستقیم و لنکزوس استفاده می‌نماییم. در روش مستقیم با قطری کردن انتگرالده می توان انرژی بستگی و تابع موج دوترون رو به دست آورد، در حالی که در روش لنکزوس با استفاده از فرایند تکرار و با یک تابع حدس اولیه، تابع موج دوترون را بر روی پایه‌های متعامد و نرمالیزه گرام-اشمیت بسط می دهیم. برای این منظور می‌توان معادله (۹) را همانند یک معادله ویژه مقداری به صورت $\mathcal{K}(E_L)\psi = \lambda\psi$ در نظر گرفت که در آن ویژه مقدار λ برابر با یک می‌باشد.

در شکل (۱) زمان شبیه‌سازی سیستم مقید دو نوکلئونی بر روی شبکه برای محاسبه انرژی بستگی و تابع موج دوترون را با استفاده از دو روش مستقیم و لنکزوس و برای مقادیر مختلف تعداد گره های شبکه، یعنی N_s، نمایش داده‌ایم. همان طور که دیده می‌شود زمان محاسبات برای شبیه‌سازی روی شبکه در روش مستقیم با افزایش تعداد گره‌های شبکه به صورت نمایی افزایش می‌یابد، بطوریکه برای تعداد گره‌های شبکه $N_s = 20$ زمان محاسبات در روش مستقیم چیزی در حدود ۹۰ دقیقه می‌باشد در حالی که در روش لنکزوس این زمان کمتر از یک ثانیه می‌باشد. با توجه به سرعت بسیار بالای شبیه‌سازی شبکه با روش لنکزوس، در ادامه محاسبات را با این روش انجام داده‌ایم.

تحلیل نتایج عددی نشان می‌دهد که انرژی بستگی به دست آمده



شکل (۱): سرعت اجرای شبیه سازی سیستم مقید دو نوکلئونی بر روی شبکه با حل معادله (۹) به روش مستقیم (شکل بالا) و روش لنکزوس (شکل پایین) و برای مقادیر مختلف گره‌های شبکه N_s.

از حل معادله (۹) با دقت بسیار بالایی در $N_s = 20$ همگرا می‌گردد. برای مطالعه سیستم مقید دو نوکلئونی بر روی شبکه نیاز به استخراج ثابت‌های برهمکنش دو نوکلئونی C_0^L و C_2^L می‌باشد. بدین منظور معادله ویژه مقداری (۹) را برای طیف گسترده‌ای از مقادیر C_0^L و C_2^L حل کرده و در نهایت این دو ثابت را همزمان به انرژی بستگی تجربی دوترون، $E_d = -2.224575$ MeV و ضریب بهنجارش مجانبی $\mathrm{ANC} = 0.249424\ \mathrm{fm}^{-0.5}$ برازش می دهیم. این جستجو تا برآورده شدن دقت $|1-\lambda| \le 10^{-6}$ ادامه می‌یابد. مراحل فوق را برای تصحیحات مرتبه‌های مختلف تکانه شبکه، که در معادله (۷) ارائه شده، انجام می‌دهیم.

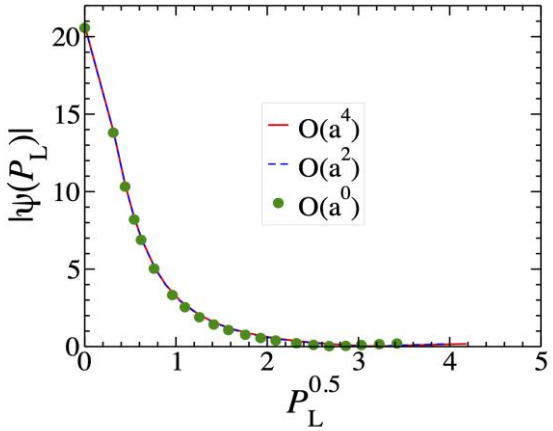
نتایج مربوط به این محاسبات و ضرایب استخراج شده C_0^L و C_2^L

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

در جدول شماره (۲) نشان داده شده است. همان طور که دیده می شود در حالی که ضرایب C_0^L مقادیر منفی دارند، ضرایب C_2^L مثبت بوده و از نظر بزرگی تقریبا پنجاه برابر کوچکتر از ضرایب C_0^L می باشند. اثر تصحیحات مرتبه های بالاتر $\mathcal{O}(a^2)$ و $\mathcal{O}(a^4)$ روی ثابت های برهمکنش نسبت به حالت بدون تصحیحات، یعنی $\mathcal{O}(a^0)$، کاملا مشهود می‌باشد.

جدول ۲ : ضرایب C_0^L و C_2^L استخراج شده در تصحیحات مختلف تکانه شبکه و مقادیر مربوط به انرژی بستگی دوترون و ضریب بهنجارش مجانبی.

	C_0^L	$C_2^L \times 10^{-2}$	E_d(MeV)	ANC(fm$^{-0.5}$)
$\mathcal{O}(a^0)$	-1.49576	3.711484	−2.224574	0.249423
$\mathcal{O}(a^2)$	-1.56064	3.173400	−2.224575	0.249425
$\mathcal{O}(a^4)$	-1.57907	3.0453214	−2.224575	0.249425



شکل (۲): تابع موج دوترون محاسبه شده روی شبکه به صورت تابعی از تکانه شبکه معرفی شده در معادله (۷).

همان طور که دیده می‌شود ضرایب استخراج شده C_0^L و C_2^L با دقت بسیار بالایی انرژی بستگی دوترون و ضریب بهنجارش مجانبی را بازتولید می‌نمایند. در شکل (۲) تابع موج دوترون روی شبکه به صورت تابعی از تکانه شبکه و با استفاده از ضرایب برهمکنش دونوکلئونی C_0^L و C_2^L، ارائه شده در جدول (۲)، نمایش داده شده است. همان طور که دیده می‌شود اگرچه ضرائب برهمکنش در مرتبه های مختلف تصحیح، تفاوت آشکاری با همدیگر دارند، تابع موج دوترون حاصل همپوشانی زیادی روی همدیگر دارند.

نتیجه‌گیری

در این مقاله سیستم مقید دو نوکلئونی روی شبکه مطالعه شده است. بدین منظور معادله شرودینگر را در فرم معادله همگن لیپمن–شوئینگر در فضای تکانه و به صورت گسسته فرمول بندی نموده ایم. برهمکنش بین نوکلئون‌ها با استفاده از نظریه میدان مؤثر بدون پایون و تا بعد از پایین‌ترین مرتبه (NLO) در نظر گرفته شده است. تکانه‌های شبکه تا تصحیحات مرتبه $\mathcal{O}(a^4)$ در نظر گرفته شده است. معادله لیپمن–شوئینگر با دو روش متفاوت مستقیم و لنکزوس حل شده است به این صورت که در روش مستقیم انتگرالده معادله انتگرالی قطری شده و در روش لنکزوس با استفاده از فرآیند تکرار، تابع موج دوترون بر روی پایه‌های گرام اشمیت متعامد نرمالیزه بسط داده شده است. محاسبات نشان می‌دهد که هر دو روش با دقت بسیار بالایی نتایج یکسانی برای انرژی بستگی و تابع موج دوترون روی شبکه به دست می‌دهند. محاسبات ما برای شبکه‌ای مکعبی و با تعداد ۲۰ گره در هر بعد و با فاصله شبکه ۱/۹۷ فرمی انجام شده است. این تعداد نقاط و فاصله شبکه متناظر با شبکه‌ای به طول تقریبا ٤٠ فرمی و تکانه قطعی برابر با ٣١٤ MeV می‌باشد. نتایج محاسبات برای انرژی بستگی و تابع موج دوترون برای تصحیحات مرتبه‌های مختلف در تکانه‌های شبکه ارائه شده است.

مرجع‌ها

[1] D. Lee, Prog. Part. *Nucl. Phys*. **63**, 117 (2009).

[2] B. Borasoy, E. Epelbaum, H. Krebs, D. Lee, and U.-G. Mei_ner, ,The *European Physical Journal A* **35**, 343 (2008).

[3] B. Borasoy, E. Epelbaum, H. Krebs, D. Lee and U. -G. Meißner, , *Eur. Phys. J.* A **31**, 105 (2007).

[4] K. Harada, S. Sasabe, and M. Yahiro,*Physical Review C* **94**, 024004 (2016).

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

پوشش نوری کارآمدانرژی برای شیشه مسطح

عباسی، لیلا[۱] ؛ سیفی، مجید[۲]

[۱] دانشکده فیزیک دانشگاه گیلان

[۲] گروه فیزیک، دانشگاه گیلان

چکیده

در این مطالعه، روندهای اخیر برای پوشش‌های نوری در صنایع شیشه‌ای برای انواع کاربردهای وابسته به آب‌وهوا مورد بررسی قرار گرفته است. لعاب‌های مختلف روکش‌شده با خصوصیات نوری و حرارتی آن‌ها ارائه شده است، تجزیه‌وتحلیل مقایسه‌ای بین انواع محصولات روکش‌دار نیز انجام می شود. مشاهده شده است: برای آب و هوای گرم لازم است که در نزدیکی بخش مادون‌قرمز نور خورشید مسدود شود تا گرمای خورشید از طریق ویندوز کاهش یابد. از طرف دیگر برای آب و هوای سرد لازم است که با کل بخشیدن به نور اجازه دهد که تابش آفتاب جذب و به داخل خانه منتقل شود. برای افزایش انتقال مرئی لایه دی‌الکتریک با ضریب شکست بالا لازم است. در اینجا انواع لایه‌های دیالکتریک مورد مطالعه قرار گرفته‌است. سرانجام برای رسیدن به هدف ساختمان‌های کم‌مصرف در هر دو آب و هوای گرم و سرد پوشش‌های نوری مناسب برای شیشه‌های مسطح معماری توصیه شده است.

واژه های کلیدی: *بازتاب-انتقال-ضریب شکست-دی الکتریک*

Energy efficient optical coating for flat glass

Abbasi, Leyla[1]; Seyfi, Majid[2]

[1] Department of Physics, University of Guilan, Rasht
[2] Department of Physics, University of Guilan, Rasht

Abstract

In this study recent trends for optical coating in glass industries for a variety of climate related applications have been investigated. various coated glazes are provided with their optical and thermal properties. comparative analysis is also performed between different types of coated products for hot weather it is necessary to close the infrared part of the sun near the sun to reduce the heat of the sun through windows on the other hand for cold weather it is necessary to allow the light to absorb the sunlight and transfer it into the house.it is necessary to increase the visual transmission of the dielectric layer with high refractive index. finally to achieve the goal of low consumption buildings in both hot and cold climates suitable optical coatings are recommended for flat architeatural glass.

***Keywords**: Reflection, Transmition, Refractive index, Dielectric*

مقدمه

روند بی‌امان جهانی در جهت کاهش مصرف انرژی نیاز به تنوع اقدامات صرفه‌جویی در انرژی برای جهان سبز آینده دارد، انرژی خورشید یک منبع انرژی غیر قابل توصیف است که به شکل امواج الکترو مغناطیسی به زمین می رسد، با توجه به رهبری در طراحی انرژی و محیط زیست، انتخاب شیشه در طراحی سبز یا پایدار ساختمان،به عنصر اصلی این معادله

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

تبدیل می‌شود تا در دستیابی به یک ساختمان سبز سهم داشته باشد.

در طول ۴۰ سال گذشته، معرفی و توسعه استفاده از روکش‌های فیلم نازک برای تقویت عملکرد حرارتی پنجره و به نمایش گذاشتن ابعاد جدید در جنبه‌های زیبایی شناختی طراحی ساختمان پیش از این اتفاق افتاده است که تولیدکنندگان شیشه پیشرفت‌های قابل توجهی در جهت بهبود عملگرد حرارتی از طریق توسعه ایجاد کرده‌اند.

پارامترهای کلیدی عملکرد برای هر محصول فن آوری بهره وری با انرژی ضریب افزایش گرمای خورشیدی(SHGC)، ضریب انتقال(U-value) و انتقال نو مرئی (T) هستند.

مقدارU اندازه مقدار عایق‌بندی یک پنجره است هرچه مقدار کمتر باشد عایق بهتر می‌شود. در آب‌وهوای تحت کنترل خنک کننده، افزایش گرمای خورشیدی مهم‌ترین پارامتر است. هرچه SHGC کمتر باشد، میزان گرمای خورشیدی که از طریق پنجره منتقل می‌شود کمتر است و بنابراین هزینه‌های خنک‌کننده را پایین می‌آورد.

در آب‌وهوای گرم یک پنجره شیشه‌ای با کارایی انرژی باید دارای پوشش‌های انتخابی طیفی باشد به گونه‌ای که تقریبا تمام انرژی موجود در ناحیه مرئی را منتقل کند و تمام انرژی موجود در مادون قرمز را منعکس کند. به‌عبارت‌دیگر یک پنجره با کارایی انرژی دستگاهی است که قادراست نور و آسایش حرارتی را با حداقل تقاضای انرژی پرداخت شده فراهم کند.

آنالیز نظری

هنگامی که نور به سطح مشترک دو ماده برخورد می‌کند بخشی از آن توسط سطح داخلی بازتاب داده می‌شود و بخش دیگر عبور می‌کند. برای بررسی مشخصه‌های انتقال و بازتاب از یک سطح مشخص به ضرایب فرنل نیاز است. این ضرایب به ضریب شکست دو ماده وابستگی مستقیم دارند.

برای بررسی نظری مقادیر بازتاب و انعکاس در فیلم‌های نازک نوری از ماتریس مشخصه استفاده می‌شود. به این صورت که ابتدا ماتریس مشخصه برای فیلم مورد نظر محاسبه می‌شود و سپس با استفاده از فرمول‌هایی که در ادامه ذکر شده است، ضرایب فرنل محاسبه می‌شود. از آنجا که کمیت مهم برای محققان شدت تابشی است، در انتها با استفاده از ضرایب فرنل، شدت محاسبه می‌شود.

ماتریس مشخصه برای یک فیلم به صورت روبه‌رو می‌باشد:

$$M=\begin{bmatrix} \cos(\frac{2\pi}{\lambda}nd) & -\frac{i}{n}\sin\left(\frac{2\pi}{\lambda}nd\right) \\ -in\sin\left(\frac{2\pi}{\lambda}nd\right) & \cos(\frac{2\pi}{\lambda}nd) \end{bmatrix}$$

که درآن λ طول موج تابشی، n ضریب شکست فیلم و d ضخامت فیلم مورد نظر می باشد.

سپس با استفاده از معادله‌ی زیر، عناصر ماتریس با ضرایب فرنل مرتبط می‌شود:

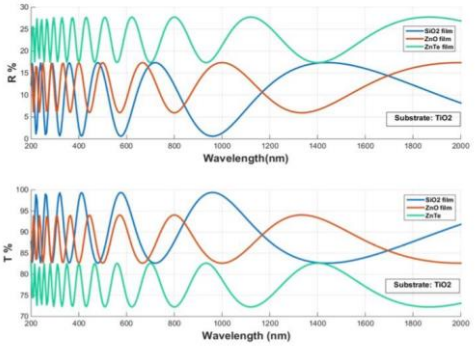
$$r=\frac{(m11+m12*ns)n0-(m21+m22*ns)}{(m11+m12*ns)n0-m21+m22*ns}$$

$$t=\frac{2n0}{(m11+m12*ns)n0+m21+m22*ns}$$

که t و r به ترتیب ضریب انتقال و بازتاب فرنل، m ها عناصر ماتریس و n_0 ضریب شکست محیطی که نور ابتدا از آن تابیده می‌شود و n_s ضریب شکست بستر می‌باشد. در نهایت مقادیر ضریب شدت بازتاب و انتقال بدست می‌آید.

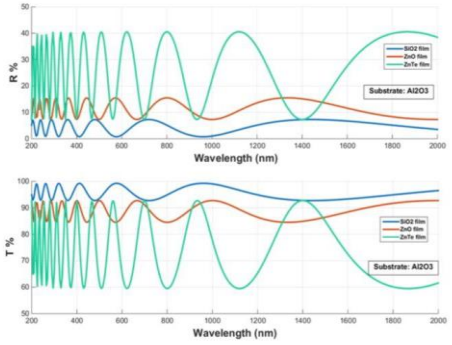
فیلم‌های Sio_2، Zno و Znte به طور مجزا روی دو بستر Al_2O_3 و TiO_2 فیلم نشانی شده‌اند. محیط اولیه که نور در آن می‌تابد را هوا در نظر گرفتیم. نمودار بازتاب برای هر دو بستر در شکل ۱ و شکل ۲ بر حسب درصد رسم شده است.

شکل ۱:نمودار الف)بازتاب وب)عبور برای سه فیلم Sio_2وZnoوZnte روی بستر Al_2O_3



: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

شکل ۲:نمودار الف)بازتاب وب)عبور برای سه فیلم Sio_2وZnoو$Znte$ روی بستر TiO_2



در شکل های ۱و۲ مشاهده می‌شود که برای سه فیلم تفاوت با تغییر طول موج، مقادیر متناوبی برای بازتاب و عبور به‌دست می‌آید که این پدیده به دلیل تداخل سازنده و ویرانگر امواج بازتابی و عبوری از فیلم اتفاق می‌افتد. این در حالی است که نمودارهای منحصربه‌فردی برای هر یک از این سه فیلم به‌دست آمده‌است که وابستگی بازتاب و عبور به ضریب شکست هر ماده می‌باشد.

همچنین برای فیلم‌های Sio_2 روی بستر Al_2O_3 درصد بازتاب بین ۰/۷ و ۷/۳ درصد در حال تغییر است. این مقادیر کم برای بازتاب و همچنین تغییرات اندک آن بین دو مقدار کمینه و بیشینه، باعث کارآمدی این پوشش برای مواردی که بازتاب کم مطلوب است، می‌شود با تغییر بستر به TiO_2 خواص جالب‌تری مشاهده شده‌است بدین‌صورت که برای ماده Sio_2 در برخی از طول موج‌های خاص، بازتاب و عبور به ترتیب نزدیک به صفر و صد درصد بوده‌است. چنین نتیجه‌ای بیانگر آن است که می‌توان از فیلم‌های نازکSio_2 روی بستر TiO_2به عنوان پوششی ضد بازتاب استفاده کرد. پوشش ضد بازتاب در صنایعی مانند سلول‌های خورشیدی مورد استفاده قرار می‌گیرد اما این بار تغییرات نسبت به حالت اول بیشتر شده‌است که این نتیجه برای این ماده ضعف حساب می‌شود چرا که در اکثر مواقع ما به پوششی احتیاج داریم که همه‌ی طول موج ها را عبور دهد یا آن را بازتاب کند.

نتیجه گیری

فیلم‌های نازک کاربردهای متفاوتی در زمینه صنعت دارند. برای استفاده مطلوب از این فیلم‌ها باید راجع به وابستگی آن‌ها به متغیرهایی مانند جنس فیلم، جنس بستر، طول موج و ضخامت فیلم اطلاعات درستی به‌دست آورد. با استفاده از معادلات ماتریس مشخصه، وابستگی شدید این فیلم‌ها به جنس ماده فیلم و بسترها مشخص گردید. همچنین دیدیم که بازتاب و عبور به صور نوسانی در طول موج‌های مختلف تغییر می‌کنند. در مورد مواد بازتاب دهنده یک نقص وجودداشت و آن هم این است که فقط در بعضی طول موج‌های خاص بازتابشان به صفر میل می‌کند و در باقی طول موج‌ها متناوب است که پیشنهاد می‌شود در تحقیقات آینده از تعداد فیلم‌های بیشتر استفاده می‌شود تا این نقص تاحدودی بر طرف گردد.

مرجع‌ها

1. sultan M, sultana N. Analysis of reflectance and transmittance characteristics of optical thin film for various film materials, thicknesses and substrates. Journal of Electrical & Electronics. 2015 Jul 1;4(3):1.
2. Reitz, J. R., Milford, F. J., & Christy, R, W. (2008). Foundations of electromagnetic theory. Addison-Wesley Publishing Company.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

استریلیزاسیون پسته با استفاده از پلاسمای غیر حرارتی در فشار پایین

جمالی ، اعظم[۱] ؛ محمد حسینی، بابک[۱] ؛ خانی، محمدرضا[۲]

[۱] گروه فیزیک، دانشگاه بین المللی امام خمینی (ره)، قزوین

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

چکیده

در این پژوهش، به منظور معرفی جاگزینی مناسب نسبت به سایر روش های استریلیزاسیون مواد غذایی به ویژه خشکبار در صنعت غذایی از پلاسمای غیر حرارتی در فشار پایین(در محدوده میلی تور)، برای تیمار مغز پسته استفاده گردیده است. در این روش، پلاسمای یکنواخت با استفاده از اعمال اختلاف پتانسیل در فشار پایین ایجاد گشته و نمونه های مغز پسته در طی زمان ها و توان های مختلف تحت تابش قرار گرفته اند. تأثیر پلاسمای غیر حرارتی کم فشار بر میزان کل میکروارگانیسم ها و همچنین تأثیر آن بر رنگ مغز پسته، به عنوان یکی از فاکتورهای غذایی، مورد آزمایش قرار گرفته است؛ نتایج حاصل نشان دهنده کاهش چشمگیری در میزان میکروارگانیسم های پسته نمونه در کنار عدم تغییر فیزیکی قابل ملاحظه در مشخصه های ظاهری و رنگ پسته می باشد.

واژه های کلیدی: پلاسمای غیر حرارتی در فشار پایین، استریلیزاسیون، کاهش میروارکانیسم ها، مغزپسته.

The sterilization of pistachio use of non-thermal plasma at low pressure

Jamali, azam[1]; Mohammad Hosseini, Babak[1] ; Khani, Mohammad Reza[2]

[1] Department of Physics, Imam Khomeini Iinternational University, Qazvin
[2] Department of Physics, Shahid Beheshti University, Tehran

Abstract

In this study, in order to introduce a suitable replacement for other methods of food sterilization, especially nuts in the food industry, non-thermal plasma at low pressure (within the millisecond range) has been used to treat pistachio kernels. In this method, a uniform plasma was created using the potential difference in low pressure and the pistachio kernel samples have been irradiated over different times and powers. The effect of low pressure non-thermal plasma on the total amount of microorganisms and its effect on pistachio kernel color has been tested as one of the food factors. The results show a significant decrease in the amount of pistachio microorganisms in the sample, along with a significant physical change in the appearance and color of pistachios.

Keywords: Non-Thermal Plasma at Low Pressure, Sterilization, Decrease of Microorganisms, Pistachio Kernel

PACS No. (52)

مقدمه

در بسیاری از کشور های پیشرفته و در حال توسعه، صادرات محور اصلی توسعه بوده و اهمیت بسزایی در افزایش مقدار درآمد ناخالص ملی آن کشور داشته است. خشکبار صادراتی کشور ایران به خصوص پسته، به عنوان یکی از ارز آور ترین محصولات صادراتی شناخته می شود. با توجه به گزارشات منتشر شده از مؤسسه انجمن آجیل درختی و میوه خشک شده، کشور های ممتاز در عرصه تولید پسته در سال ۲۰۱۸ به ترتیب آمریکا، ایران، ترکیه و... می باشند[۱]. با توجه به اهمیت و ارزش غذایی پسته، کنترل کیفی آن به جهت دسترسی اقشار مختلف جامعه و اهداف صادرتی

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

ضروری می باشد. خشکبار باید عاری ازهر گونه علائم آلودگی، حشرات، کپک ها و... باشد. روش های متعددی جهت فرآوری و استریلیزاسیون در صنایع غذایی وجود دارد که بسیاری از آن ها با تکیه بر اعمال حرارت از قبیل پاستوریزاسیون، اتوکلاو کردن و ... صورت می پذیرند که دارای اثرات منفی بر ویژگی های فیزیکی و خواص تغذیه ای پسته می باشند. از این رو روش های غیر حرارتی از قبیل فشار هیدرواستاتیک بالا[۲]، پالس الکتروفیلد[۳]، پرتو دهی[۴]، پلاسما[۵]و ...به عنوان روش های جایگزین در سال های اخیر ابداع شده است. روش فشار هیدرواستاتیک در دمای اتاق به فشاری حدود ۱۰۰۰ تا۶۰۰۰ برابر فشار سطح دریا نیاز دارد، که تجهیزات خاص خود را می طلبد. مطالعات زیادی بر روی روش پالس الکترو فیلد انجام شده است، اما همچنان کارآمدی آن، از جمله مکانیزم غیرفعال سازی میکروارگانیسم ها توسط آن، در هاله ای از ابهام قرار دارد. روش پرتو دهی که در چند سال اخیر برای سالم سازی و افزایش مدت نگهداری مواد غذایی ابداع شد، با قرار دادن مواد غذایی در معرض مقدار دقیق و معینی از پرتو های یونندهمانند فرابنفش، گاما و پرتو های الکترونی سبب نابودی میگروارگانیسم های مواد غذایی گردیده اند. از جمله ایرادات این روش می توان به تغییر مزه بعد از پرتودهی و همچنین مناسب نبودن آهنگ دز ایجاد شده در مقایسه با سایر روش ها اشاره کرد. فناوری پلاسما، یکی از فناوری های نوینی است که امروزه کاربردهای بسیاری در صنایع غذایی دارد. نتایج تحقیقات صورت گرفته در سال های اخیر توانایی بالقوه پلاسما در مهار یا غیر فعالسازی میکروارگانیسم ها را اثبات کرده است. Brendan بر روی تأثیر پلاسمای سرد DBD بر کاهش میزان باکتری سالمونلا و اشرشیاکلی در بادام تحقیق نموده و نتایج حاصل حاکی از کاهش قابل توجه ای از باکتری های مذکور بر اثر پالس های کوتاهی از پلاسمای سرد می باشند [۶]. همچنین خلیلی به بررسی اثر پلاسمای گلایدینگ آرک بر میکروب زدایی بادام پرداخته است؛ نتایج بدست آمده نشان دهنده کاهش چشمگیری در میزان باکتری اشرشیاکلی بادام می باشد [۷]. Siciliano و همکاران بر روی اثر پلاسمای سرد اتمسفری در حذف سم آفلاتوکسین از فندق آزمایشاتی انجام داده اند، نتایج آنان بیانگر کاهش ۷۰ درصدی سم آفلاتوکسین از نمونه های فندق است[۸]. Basaran و همکارانش به بررسی حذف قارچ آسپرژیلوس از سطح آجیل توسط پلاسمای سرد کم فشار پرداخته و شاهد کاهش ۵۰ درصدی میزان قارچ آسپرژیلوس از سطح آجیل بوده اند [۹]. با توجه به ارزش غذایی و اقتصادی پسته، بر آن شدیم تا در این اثر به مطالعه روشی نوین بر پایه پلاسمای سرد برای استریلیزاسیون آن بپردازیم تا شاید راهکاری مؤثر و بهینه تر را به منظور جایگزین روش های مرسوم ارائه دهیم.

ساختار تولید پلاسمای غیر حرارتی در فشار پایین

سامانه پلاسما کلینر از جمله سامانه های پر کاربرد در بین سامانه های مورد استفاده در زمینه پلاسماهای غیر حرارتی به منظور استریلیزاسیون سطوح و مواد به شمار می رود(شکل۱). در این سیستم در فشار پایین(در محدوده میلی تور) با اعمال اختلاف پتانسیل الکتریکی، محیط فعال پلاسما تشکیل می گردد. الکترون های موجود در محیط پلاسما اقدام به تولید الکترون های دیگر، یون ها، رادیکال ها و گونه های فعال می کنند که میتوانند سطح مورد نظر را پردازش نمایند. این دستگاه، شامل محفظه خلأ استوانه به حجم ۳ لیتر از جنس کوارتز، منبع تغذیه با فرکانس ۲۰ KHz ، فشار سنج در محدوده میلی تور، دقت کنترل گاز با نرخ ۰/۱ سی سی بر دقیقه و نیز قابلیت تنظیم ۳۰ نوع گاز با نرخ تزریق ۰ تا ۵۰۰ سی سی می باشد.



شکل ۱ : نمای جلویی سامانه پلاسما کلینر.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

تیمار نمونه ها با پلاسمای غیر حرارتی

در این تحقیق، پسته رقم قزوینی همراه با پوسته دوم آن فراهم شده و تحت شرایط یکسان تا پایان آزمایشات نگهداری گردیده است. به منظور آماده سازی پسته جهت انجام فرایند استریلیزاسیون، مغز پسته تحت شرایط استریل از پوسته دوم آن جداسازی گشته، سپس به پلیت استریل انتقال داده شده و در نهایت در محفظه دستگاه قرار داده شده است. برای تمام نمونه ها، نرخ تزریق گاز ورودی (هوا) بر روی ۲ سی سی بر دقیقه و فشار اولیه نیز بر روی ۴۰۰ میلی تور تنظیم شده است. تنها تفاوت در نمونه های تیمار شده در میزان توان و مدت زمان پردازش آن ها می باشد.

آنالیز میکروبی و آزمون رنگ سنجی

پس از تیمار نمونه ها با استفاده از پلاسمای غیرحرارتی، نمونه ها به آزمایشگاه میکروبیولوژی جهت شمارش بار میکروبی انتقال داده شده اند. تمام مراحل اندازه گیری بار میکروبی مطابق با استاندارد ملی ایران شماره ۸۹۲۳ صورت پذیرفته است. در نهایت کلیه داده های حاصل از آنالیز میکروبی بصورت لگاریتم محاسبه گردیده اند. لازم به ذکر است که حداکثر میزان مجاز بار میکروبی برای مغز پسته، طبق استاندارد مذکور، مقدار 10^5 واحد بار کلنی می باشد. یکی از اهداف ما در این اثر، کاهش مقدار آلودگی به کمتر از مقدار استاندارد آن، یعنی پایین تر از ۱۰۰۰ واحد کلنی بوده است.

در آزمون رنگ سنجی از دستگاه هانترلب و مدل رنگ سنجی LAB جهت انجام آنالیز رنگ سنجی استفاده گردید. در این مدل دامنه مقادیر مؤلفه روشنایی (lightness) L، از ۰ تا ۱۰۰ و دو مؤلفه a و b اغلب دامنه ای از ۱۲۰- تا ۱۲۰+ را دربرگرفته اند، بطوریکه a، طیف رنگی سبز تا قرمز و b، طیف رنگی آبی تا زرد را داراست. میزان اختلاف رنگ کلی بین نمونه ها بر طبق فرمول شماره (۱) محاسبه گردیده است.

$$\Delta E=\left[\left(l_{standard}-l_{sample}\right)^2+\left(a_{standard}-a_{sample}\right)^2+\left(b_{standard}-b_{sample}\right)^2\right]^{\frac{1}{2}} \qquad (1)$$

نتایج و بحث

در ابتدای امر، به منظور تعیین توان و زمان پایه برای انجام آزمایشات و رسیدن به نتیجه مطلوب، توان دستگاه، ۵۰ وات، زمان پرتودهی، ۲۰ دقیقه و تکرار آزمایش به تعداد سه مرتبه انتخاب شده است. نتایج حاصل، نشان دهنده کاهش چشمگیر بار میکروبی پسته از ۴۶۰۰۰ واحد کلنی(نمونه شاهد) به ۷۰۰۰ واحد کلنی(نمونه شماره ۱) می باشد. با احتمال اینکه با افزایش مدت زمان اعمال پلاسما بر روی مغز پسته تأثیر بهتر و بیشتری را شاهد باشیم، مدت زمان اعمالی را دو برابر نموده و به مدت ۴۰ دقیقه افزایش دادیم. نتیجه این افزایش، صحت روند مذکور را تأیید و بار میکروبی از ۴۶۰۰۰ واحد کلنی(نمونه شاهد) به ۱۰۰۰ واحد کلنی(نمونه شماره ۲) کاهش یافت.

در گام بعدی آزمایشات، پس از بررسی و تأیید تأثیر مدت زمان پرتودهی بر کاهش بار میکروبی، تصمیم به تغییر سایر پارامترهای مؤثر بر تشکیل پلاسما همچون تغییر در مقدار توان ورودی گرفته شد. با افزایش ۲۰ وات به مقدار توان اولیه(۵۰ وات)، نمونه شماره ۴ را با توان ۷۰ وات و مدت زمان ۲۰ دقیقه تیمار نمودیم. نتیجه بدست آمده، کاهش بار میکروبی از ۴۶۰۰۰ واحد کلنی(نمونه شاهد) به ۴۰۰۰ واحد کلنی(نمونه شماره ۴) را نشان می داد که در مقایسه با مدت زمان مشابه (۲۰ دقیقه)، کاهش قابل ملاحظه ای از بار میکروبی را به همراه داشته است.

به دنبال بررسی های بیشتر در میزان اثر گذاری تغییرات مقدار توان بر روی کاهش بار میکروبی، مقدار توان های ورودی را از ۷۰ وات به ۹۰ وات و در ادامه به ۱۰۰ وات در مدت زمان های ۲۰، ۴۰ و ۶۰ دقیقه افزایش داده که نتایج حاصل از آزمایشات در جدول شماره ۱ آورده شده است.

جدول ۱ : نتایج حاصل از تابش پلاسمای غیر حرارتی تحت خلأ بر روی مغز پسته

نمونه ها	توان (وات)	زمان (دقیقه)	بار میکروبی(**واحد کلنی**)	Log CFU/g
شاهد	–	–	۴۶۰۰۰	۴/۶۶
شماره۱	۵۰	۲۰	۷۰۰۰	۳/۸۴
شماره ۲	۵۰	۴۰	۱۰۰۰	۳

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

شماره ۳	۵۰	۶۰	۲۰۰۰	۳/۳
شماره ۴	۷۰	۲۰	۴۰۰۰	۳/۶
شماره ۵	۷۰	۴۰	۱۲۰۰	۳/۰۷
شماره ۶	۷۰	۶۰	۴۰۰	۲/۶۱
شماره ۷	۹۰	۲۰	۵۰۰۰	۳/۶۹
شماره ۸	۹۰	۴۰	۴۰۰	۲/۶۱
شماره ۹	۹۰	۶۰	۲۰۰	۲/۳۱
شماره ۱۰	۱۰۰	۲۰	۲۱۰۰	۳/۳۲
شماره ۱۱	۱۰۰	۴۰	۱۱۰۰	۳/۰۴
شماره ۱۲	۱۰۰	۶۰	۱۰۰۰	۳

با توجه به نتایج بدست آمده و پارامترهایی که مورد آزمون قرار گرفته اند، بهینه ترین زمان و توان بدست آمده مربوط به توان ۷۰ وات و زمان ۶۰ دقیقه می باشد، که در آن، مناسب ترین کاهش بار میکروبی نسبت به سایر زمان ها و توان ها دیده شده است.

در این مطالعه، همچنین، آنالیز رنگ سنجی مغز پسته در نقطه بهینه با نمونه شاهد مقایسه گردیده و نتایج آن در جدول شماره ۲ قابل مشاهده است. معیار تعیین و ارزیابی نتایج جدول شماره ۲، استاندارد ایران به شماره ۲۰۷۴۷ می باشد. بر طبق این استاندارد:

در صورتیکه ΔE < ۱/۵ باشد، اختلاف رنگ کوچک است.

در صورتیکه ۱/۵ < ΔE < ۳ باشد، تغییر رنگ متفاوت است.

در صورتیکه ΔE > ۳ باشد، تغییر رنگ بسیار متفاوت است.

جدول ۲ : نتایج حاصل از آزمون رنگ سنجی نمونه شاهد و نمونه بهینه

نمونه	l*	a*	b*	ΔE
شاهد	۳۹/۶۳	۱۰/۴۸	۱۶/۳۲	۰
بهینه	۴۱/۸۰	۱۱/۲۹	۱۶/۸۶	۲/۲۷

با توجه به اینکه ΔE در این آزمایش، کمتر از ۳ و بیشتر از ۱/۵ می باشد، می توان نتیجه گرفت که نمونه پلاسما داده شده تحت تغییر رنگ متفاوتی قرار گرفته است؛ البته این تغییر رنگ با چشم غیر مسلح قابل مشاهده نمی باشد.

نتیجه گیری

در این پژوهش که به منظور کاهش بار میکروبی مغز پسته انجام شده است، نمونه ها در زمان های ۲۰، ۴۰ و ۶۰ دقیقه و توان های ۵۰، ۷۰، ۹۰ و ۱۰۰ وات تیمار شده است. با بررسی داده های موجود، نقطه بهینه برای کاهش بار میکروبی مغز پسته با سامانه پلاسما کلینر، توان ۷۰ وات و زمان ۶۰ دقیقه می باشد.

بطور کلی نتایج بدست آمده نشان می دهند که پلاسما توانسته اثر کاهشی معناداری را بر روی میزان کل بار میکروبی نمونه ها داشته باشد. با افزایش زمان تابش پلاسما به نمونه ها، به دلیل افزایش گونه های فعال واکنشی و سایر عوامل تولید شده در پلاسما، آلودگی زدایی سطحی افزایش می یابد. بنابراین موفقیت سیستم پلاسمای غیر حرارتی تحت خلأ در کاهش میزان قابل قبولی از میکروارگانیسم های سطح مغز پسته ثابت شده و این ابزار در کنار سایر روش های استریلیزاسیون مواد غذایی کارایی خود را نشان داده است. همچنین علی رغم تغییر رنگ پسته به دلیل پرتودهی، به دلیل عدم تشخیص این رویداد توسط چشم غیر مسلح، جنبه مثبت عملکرد پلاسما بر روی پسته قابل قبول بوده و به عنوان یک روش مفید و مؤثر به صنعت مواد غذایی پیشنهاد می شود.

مرجع‌ها

[۱] Anon; "Nuts and Dired Fruits"; *statistical yearbook*.(2018) 42.

[۲] M.Hugas, M.Garriga and J.Monfort; "New Mild Technologies in Meat Processing: High Pressure as a Model Technology"; *Meat Sience* **62**, No. 3 (2002) 359-371

[۳] S.Toepfl, V.Heniz and D.Knorr; "High Intensity Pulsed Electric Fields Applied for Food Prerservation Chemical Engineering and Processing"; *Process Intensification* **46**, No. 6 (2007) 537-546

[۴] رفیعی، سیدجلال. غلامی، یاسمن. افتخاری زاده، احسان؛«افزایش ایمنی و ماندگاری مواد غذایی با استفاده از پرتو دهی گاما»؛ *کنفرانس های دستاوردهای نوین در صنایع غذایی و تغذیه سالم، مرداد ۱۳۹۵*

[۵] M.Moreau, N.Orange and M.Feuilloleg;"Non-Thermal Plasma Technologies: New Tools for Biodecontamination"; *Biotechnology Advances* **26**, No. 6 (2013)610-617

[۶] B.Niemira;"Cold Plasma Reduction of Salmonella and Escherichia Coli O 157:H7 on Almonds Using Ambient Pressure Gases "; *Food Microbiology & Safety* **77**, No. 3 (2012) 171-175

[۷] خلیلی،فاطمه؛«بررسی اثر پلاسمای غیر حرارتی گلایدینگ آرک در میکروب زدایی بادام»؛*رساله کارشناسی ارشد فیزیک اتمی*؛ دانشگاه شهید بهشتی.

[۸] I. Siciliano, D.Spadaro, A.Prelle, D.Vallauri and A.Garibaldi;"Use of Cold Atmospheric Plasma to Detoxify Hazelnuts from Aflatoxins"; *Toxins***125**, No. 8 (2016)

[۹] P.Basaran, N.Basaran and L.Oksuz"Elimination of Aspergillus Parasititicus from Nut Surface with Low Pressure Cold Plasma Treatmant"; *Food Microbiology***25** (2008) 626-632

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

وابستگی زمانی شار برافزایشی پهن رفت غالب با یک میدان مغناطیسی چنبره ای اطراف یک جسم فشرده دوار

حبیبی ، فهیمه[1]

[1] دانشکده علوم، دانشگاه بیرجند، بیرجند

چکیده

در این تحقیق تحول زمانی شار برافزایشی پهن رفت غالب در حضور یک میدان مغناطیسی چنبره ای در حالتی مورد بررسی قرار می‌گیرد که از اثرات نسبیتی صرف نظر شده و انتقال تکانه از طریق وشکسانی در نظر گرفته شده است. به منظور حل معادلات حاکم بر رفتار قرص روش خود-مشابهی زمانی مورد استفاده قرار گرفته است. نتایج نشان می‌دهند که رفتار دینامیکی کمیت‌های فیزیکی متفاوت از حالت ایستا و مستقل از زمان می‌باشد. جواب‌ها همچنین وابستگی کمیت‌های فیزیکی را به پارامتر دوران قرص نشان می‌دهند.

واژه های کلیدی: *برافزایش، قرص برافزایشی، جسم فشرده در حال چرخش*

Time Dependence of Advection Dominated Accretion Flow with a Magnetic Field around rotating compact object

Habibi, Fahimeh[1]

[1] *Department of Physics, University of Birjand, Birjand*

Abstract

The present study examines evolution of advection-dominated accretion flow (ADAF) around a rotating compact object. In this research, it is assumed that angular momentum transport is due to viscous turbulence. The general relativistic effects are neglected. In order to solve the integrated equations that govern the dynamical behavior of the accretion flow, we have used a self-similar solution. The solutions show that the behavior of the physical quantities in a dynamical ADAF is different from that for a steady accretion flow. Our results indicate that physical quantities of disc are dependent of rotation parameter of central compact object.

***Keywords**: accretion , accretion disc, rotating compact object*

PACS No. 98

مقدمه

منابع هسته‌ای ستارگان برای توجیه انرژی درخشان‌ترین اجرام عالم، بسیار ناکافی است. برافزایش به اجرام فشرده، ساز و کار مناسبی برای تولید انرژی در چنین اجرامی می‌باشد. از آنجا که فرآیند جدایی تکانه زاویه‌ای ماده سقوط کننده با مقیاس زمانی کوتاهتری در مقایسه با زمان سقوط آزاد انجام می‌شود، گاز فرو ریزشی با تکانه زاویه‌ای به حد کافی زیاد، یک ساختار قرصی شکل اطراف جسم گرانشی مرکزی ایجاد می‌نماید که بسته به شکل هندسی آن می‌تواند نازک یا ضخیم باشد. الگوی استاندارد قرص‌های برافزایشی اولین بار در ۱۹۷۳ توسط شاکورا و سانیو ارائه شد [٦]. یکی از فرضیات مهم این الگو آن است که گرمای تولید شده از طریق فرآیندهای وشکسانی بلافاصله تابش می‌شود. بعلاوه آنها وشکسانی را عامل انتقال تکانه زاویه‌ای به سمت خارج

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

معرفی کردند. این الگو که برای یک قرص از لحاظ هندسی نازک و از لحاظ اپتیکی ضخیم در نظر گرفته شده است. طیف تابشی آن مشابه با طیف جسم سیاه در دماهای مختلف می‌باشد که تابش x ،فرابنفش ،اپتیکی و فروسرخ را شامل می‌شود. الگوی استاندارد توانست مشاهدات رصدی مربوط به اشیاء اختر فیزیکی انرژی بالا را به خوبی پیش‌بینی کند. با این حال، الگوی قرص نازک در بعضی اشیاء با روشنایی پایین (مثل دوتایی های تابش x با جرم کم و هسته‌های کهکشانی با روشنایی پایین) که در آن فشار گاز قابل توجه نیست معتبر نمی‌باشد.

در طول سال‌های اخیر الگوهای دیگری ورای الگوی استاندارد ارائه شده است. یکی از این الگوها شارهای برافزایشی پهن‌رفت غالب است که در آن انرژی آزاد شده از طریق فرآیندهای وشکسانی در قرص باقی مانده و بلافاصله تابش نمی‌شود. این مدل هم برای سیستم‌های با روشنایی کم و هم برای سیستم‌های با روشنایی بسیار زیاد قابل استفاده است. طیف بدست آمده از این الگو توافق خوبی با داده‌های رصدی دارد. در الگوهای اولیه اثرات میدان مغناطیسی در نظر گرفته نشده‌اند. در اینجا دینامیک یک قرص پهن‌رفت غالب را در حضور یک میدان مغناطیسی چنبره‌ای اطراف یک جسم فشرده دوار و با استفاده از روش خود- مشابهی زمانی مورد بررسی قرار می‌دهیم.

معادلات اساسی

یک قرص گازی دوار در اطراف یک جسم فشرده در حال چرخش با جرم M در نظر می گیریم. از اثرات خودگرانشی و نسبیت عام چشم پوشی کرده و از قانون گرانش نیوتون استفاده می نماییم. به دلیل چرخش جسم مرکزی، معادلات حاکم بر رفتار قرص را با شامل کردن نیروی کوریولی و نیروی مرکزگرا در یک چارچوب مرجع دورانی به دست می آوریم. بعلاوه، یک میدان مغناطیسی چنبره ای را در راستای φ در نظر می گیریم. بنابراین، معادلات قرص عبارتند از:

معادله پیوستگی:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t}+\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\rho v_r)=0, \qquad (1)$$

معادله نیروی شعاعی:

$$\frac{\partial v_r}{\partial t}+v_r\frac{\partial v_r}{\partial r}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial r}+\frac{GM}{r^2}=2\omega\Omega r+\omega^2 r+r\Omega^2-\frac{B_\varphi}{4\pi r\rho}\frac{\partial}{\partial r}(rB_\varphi), \qquad (2)$$

معادله نیروی سمتی:

$$\frac{\partial}{\partial t}(r^2\Omega)+v_r\frac{\partial}{\partial r}(r^2\Omega)=\frac{1}{\rho r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left[\nu\rho r^4\frac{\partial\Omega}{\partial r}\right]-2\omega r v_r, \qquad (3)$$

معادله انرژی:

$$\frac{1}{\gamma-1}\left[\frac{\partial p}{\partial t}+v_r\frac{\partial p}{\partial r}\right]+\frac{\gamma}{\gamma-1}\frac{p}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2v_r)=f\nu\rho r^2(\frac{\partial\Omega}{\partial r})^2. \qquad (4)$$

و معادله میدان مغناطیسی:

$$\frac{\partial}{\partial t}B_\varphi+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(rV_rB_\varphi)=0 \qquad (5)$$

در روابط بالا Ω سرعت زاویه‌ای قرص، ω سرعت زاویه‌ای جسم مرکزی ، γ نسبت ظرفیت گرماهای ویژه، ρ چگالی حجمی و f پارامتر پهن رفت می‌باشد که مقداری ثابت است. در اینجا برای سادگی ما فرض می‌کنیم که سرعت زاویه‌ای جسم مرکزی متناسب با سرعت زاویه‌ای قرص باشد، یعنی $\omega=a\Omega$ که در آن a پارامتر دوران نامیده می‌شود. بر این اساس معادلات (۲) و (۳) می توانند به صورت زیر بازنویسی شوند.

$$\frac{\partial v_r}{\partial t}+v_r\frac{\partial v_r}{\partial r}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial r}+\frac{GM}{r^2}=r(a+1)^2\Omega^2, \qquad (7)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(r^2\Omega)+v_r\frac{\partial}{\partial r}(r^2\Omega)=\frac{1}{\rho r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left[\alpha\frac{p}{\sqrt{GM}}r^{11/2}\frac{\partial\Omega}{\partial r}\right]$$

$$-2ar\Omega v_r. \qquad (8)$$

بنابراین، معادلات اساسی حاکم بر تحول زمانی قرص عبارتند از معادلات (۱)، (۷)، (۸)، (٤) و (٥). واضح است که این معادلات غیرخطی هستند و نمی‌توانیم آنها را به صورت تحلیلی حل کنیم. در این موارد روش خود-مشابهی بسیار مفید بوده و به صورت گسترده مورد استفاده قرار می‌گیرد. جواب‌های خود-مشابه در حالت کلی به دو فرم خود-مشابه مکانی و خود-مشابه زمانی تقسیم می‌شوند. در اینجا به دلیل وابستگی به زمان معادلات قرص، ما از روش خود-مشابه زمانی برای حل این معادلات استفاده می-کنیم.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

جواب‌های خود-مشابه

خود-مشابه زمانی برای یک سیستم به این معنی است که رفتار سیستم در یک زمان مشابه رفتار آن در زمان های بعد است [۳]. در این روش ابتدا یک متغییر بدون بعد از ترکیب شعاع r و زمان t به صورت زیر معرفی می‌کنیم:

$$\zeta = \frac{r}{at^n}, \qquad (9)$$

سپس کلیه‌ی پارامترهای فیزیکی سیستم را به صورت تابعی از این متغییر بی‌بعد ζ، یک تابع توانی از زمان t و یک ضریب بعددار در نظر می‌گیریم:

$$\rho(r,t) = R_0 t^{\epsilon_\rho} R(\zeta), \qquad (10)$$

$$p(r,t) = P_0 t^{\epsilon_p} P(\zeta), \qquad (11)$$

$$v_r(r,t) = V_0 t^{\epsilon_v} V(\zeta), \qquad (12)$$

$$\Omega(r,t) = W_0 t^{\epsilon_w} W(\zeta). \qquad (13)$$

$$B_r(r,t) = B_0 t^{\epsilon_b} B(\zeta), \qquad (14)$$

سپس با تغییر متغییر (r,t) به (ζ,t) مشتقات به صورت زیر تبدیل می‌شوند:

$$\frac{\partial}{\partial r} \to \frac{\zeta}{r}\frac{\partial}{\partial \zeta}, \qquad \frac{\partial}{\partial t} \to \frac{\partial}{\partial t} - n\frac{\zeta}{t}\frac{\partial}{\partial \zeta}.$$

با جایگزین کردن این توابع و مشتقات در معادلات حاکم بر رفتار سیستم می‌توان توان‌های زمانی و ثابت‌های بعددار را از طریق برآورده شدن معادلات به صورت زیر به دست آورد:

$$n = \frac{2}{3}, \epsilon_v = -\frac{1}{3}, \epsilon_w = -1, \epsilon_p = \epsilon_\rho - n, 2\epsilon_b = \epsilon_\rho - n, \quad (15)$$

و

$$V_0 = \sqrt{\frac{GM}{a}}, W_0 = \sqrt{\frac{GM}{a^3}}, P_0 = \frac{GM}{a}R_0, a = (GM)^{1/3}. \quad (16)$$

نتایج بالا نشان می‌دهند که با تحول قرص، هر کمیت فیزیکی شکل فضایی خود را حفظ می‌کند. وابستگی زمانی سرعت شعاعی متناسب با $t^{-1/3}$ است یعنی با گذشت زمان سرعت کاهش می‌یابد. همچنین سرعت زاویه‌ای قرص متناسب با t^{-1} می‌باشد. بعلاوه رفتار زمانی میدان مغناطیسی و فشار گاز وابسته به رفتار زمانی چگالی است. نتایج ما در توافق با نتایج به دست آمده از رفتار زمانی قرص‌های برافزایشی در تحقیقات مشابه می‌باشد [۱،٤،٥].

برای تعیین رفتار زمانی چگالی و در نتیجه فشار و میدان مغناطیسی، آهنگ برافزایش جرم را به صورت زیر معرفی می‌کنیم:

$$\dot{M} = -4\pi r^2 \rho v_r. \qquad (17)$$

مشابه با سایر کمیت‌ها، آهنگ برافزایش جرم در فضای خود-مشابهی عبارت است از:

$$\dot{M}(r,t) = M_0 t^{\epsilon_M} M(\zeta) \qquad (18)$$

همچنین آهنگ برافزایش جرم می‌تواند با کمک تبدیلات خود-مشابه مربوط به شعاع، چگالی و سرعت شعاعی به صورت زیر نیز در نظر گرفته شود:

$$\dot{M}(r,t) = \Big(a^3 R0\Big) t^{2n+\epsilon_\rho - 1/3}\Big(-4\pi\zeta^2 R(\zeta)V(\zeta)\Big). \quad (19)$$

با مساوی قرار دادن دو رابطه بالا برای آهنگ برافزایش، نتایج زیر حاصل می‌شود:

$$M_0 = a^3 R0, \epsilon_M = 2n + \epsilon_\rho - 1/3, M(\zeta) = -4\pi\zeta^2 R(\zeta)V(\zeta). \quad (20)$$

در اینجا حالتی را دنبال می‌کنیم که آهنگ برافزایش مستقل از زمان باشد. بنابراین وابستگی زمانی چگالی و ضریب بعد دار آن به دست می‌آیند:

$$R_0 = \frac{M_0}{GM}, \epsilon_\rho = -1. \qquad (21)$$

حالا با کمک این نتایج معادلات سیستم به یک مجموعه معادلات دیفرانسیلی نسبتا ساده و تابع متغییر بی‌بعد ζ تبدیل می‌شوند:

$$-R + \Big(V - \frac{2}{3}\zeta\Big)\frac{dR}{d\zeta} + \frac{R}{\zeta^2}\frac{d}{d\zeta}(\zeta^2 V) = 0, \qquad (22)$$

$$-\frac{1}{3}V + \Big(V - \frac{2}{3}\zeta\Big)\frac{dV}{d\zeta} + \frac{1}{R}\frac{dP}{d\zeta} + \frac{1}{\zeta^2} = (a+1)^2\zeta W^2 - \frac{2B}{\zeta R}\frac{\zeta B)}{d\zeta}, \quad (23)$$

$$\frac{1}{3}(\zeta^2 W) + \Big(V - \frac{2}{3}\zeta\Big)\frac{d}{d\zeta}(\zeta^2 W) = \frac{\alpha}{R\zeta^2}\frac{d}{d\zeta}\Big[P\zeta^{11/2}\frac{dW}{d\zeta}\Big] - 2a\zeta WV, \qquad (24)$$

$$\frac{1}{\gamma - 1}\Big[-\frac{5}{3}P + \Big(V - \frac{2}{3}\zeta\Big)\frac{dP}{d\zeta}\Big] + \frac{\gamma}{\gamma - 1}\frac{P}{\zeta^2}\frac{d}{d\zeta}(\zeta^2 V) = \alpha f P\zeta^{7/2}\Big(\frac{dW}{d\zeta}\Big)^2, \qquad (25)$$

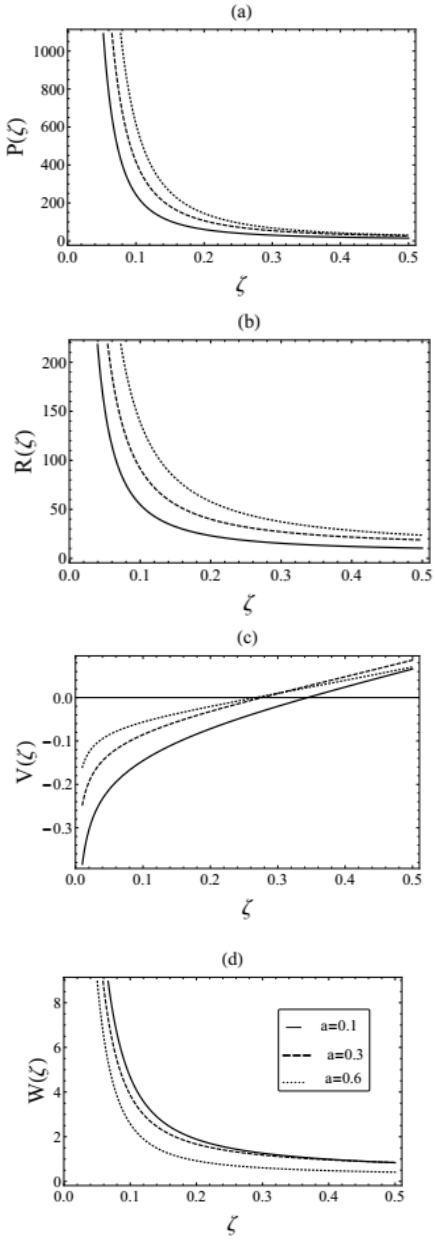
$$-\frac{5}{4} + (V - \frac{2\zeta}{3})\frac{dB}{d\zeta} + \frac{B}{\zeta}\frac{d}{d\zeta}(\zeta V) = 0 \qquad (26)$$

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

با انتخاب پارامترهای ثابت سیستم و با استفاده از شرایط مرزی مناسب، مجموعه معادلات سیستم به کمک روش‌های عددی قابل حل هستند. جواب‌های به دست آمده و نتایج حاصل از آنها در بخش بعد مورد بررسی قرار می‌گیرد.

نمودارها و نتایج:

نتایج به دست آمده از حل معادلات سیستم در شکل ۱ رسم شده-اند. در اینجا ما علاقمند هستیم تا اثر پارامتر دوران a را بر روی



شکل۱ : جواب‌های خود-مشابهی وابسته به زمان به صورت تابعی از متغییر بدون بعد ζ و برای مقادیر مختلف پارامتر دوران a.

کمیت‌های فیزیکی قرص بررسی کنیم. بنابراین سایر پارامترها در شکل ۱ ثابت فرض شده‌اند. همان طور که این نمودارها نشان می‌دهند، با افزایش پارامتر دوران a فشار و چگالی کاهش یافته ولی هر دو مولفه‌های سرعت زیاد می‌شوند. این نتایج از لحاظ کیفی با یافته‌های حاصل شده در مطالعات قبلی در توافق می‌باشند [۲]. بعلاوه، بر اساس شکل (c)، سرعت شعاعی شار در یک ناحیه مثبت و در ناحیه‌ی دیگری منفی است. سرعت منفی نشان‌دهنده‌ی برافزایش جرم است و سرعت مثبت ناحیه‌ای که در آن جرم به سمت خارج حرکت می‌کند را نشان می‌دهد. نتایج ما همچنین مشخص می کند که با افزایش پارامتر دوران برافزایش در ناحیه‌ی بزرگ‌تری رخ می‌دهد.

نتیجه گیری

در این مقاله با استفاده از روش خود-مشابهی به حل معادلات وابسته به زمان برای یک قرص پهن رفت غالب با یک میدان مغناطیسی چنبره ای در اطراف یک جسم فشرده دوار پرداختیم. اثر دوران بر روی ساختار قرص مورد بررسی قرار گرفت. نتایج نشان داد که با افزایش پارامتر دوران فشار و چگالی کاهش یافته و سرعت ها تندتر می‌شوند.

مرجع‌ها

[1] A. Khesali and K. Faghei , "Time dependence of advection-dominated accretion flow with a toroidal magnetic field ", MNRAS **398,** (2009) 1361-1367.
[2] A. R. Prasanna and B. Mukhopadhyay , "Effect of Coriolis Force on Accretion Flows Around Rotating compact Object ", IJMPD **12**, (2003) 157.
[3] Barenblatt G. I., "Similarity, Self-Similarity, and Intermediate Asymptotics". Consultants Bureau, New York (1979).
[4] F. Habibi, R. Pazhouhesh, M. Shaghaghian, "Self-similar evolutionary solutions for an accreting magneto-fluid around a compact object with finite electrical conductivity", AN **336** (2015a) 84.
[5] F. Habibi, M.Shaghaghian., R. Pazhouhesh , "Time evolution of accreting magnetofluid around a compact object-Newtonian analysis", IJMPD **24,** (2015b) 10.
[6] Shakura N. I , Sunyae R. A, " Black holes in binary systems. Observational appearance", A&A **24**(1973) 337.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بررسی تاثیر دمای بازپخت بر ویژگی‌های نانوبلورهای $LaVO_4$ با ناخالصی Dy

چمن زاده، زهره[۱]

[۱]دانشکده فیزیک، دانشگاه دامغان، دامغان

چکیده

در این پژوهش، نانوبلورهای $LaVO_4$ آلائیده با ناخالصی Dy با استفاده از روش هیدروترمال با کمک لانتانیوم استات به عنوان منبع لانتانیوم در حضور اولئیک اسید به عنوان سورفکتانت ساخته شدند. محصولات با استفاده از طیف سنجی پراش پرتو ایکس (XRD)، میکروسکوپ الکترونی روبشی (SEM)، طیف تفرق اشعه α (EDAX)، طیف‌سنج فوتولومینسانس (PL) مورد مطالعه قرار گرفتند. تصاویر SEM نانوبلورهای $LaVO_4$:Dy نشان می‌دهند که نمونه‌های بدست آمده به طور عمده ریخت‌شناسی صفحه‌ای دارند. به علاوه، بهینه‌سازی دمای بازپخت که بر ساختار بلوری و ویژگی‌های نانوبلورهای تولید شده موثر است، مورد بررسی قرار گرفت. مطالعات فوتولومینسانس نانوبلورهای $LaVO_4$:Dy نشان می‌دهد که با افزایش دمای بازپخت تا ۵۰۰ درجه سانتی گراد، شدت طیف گسیلی به شدت افزایش می‌یابد. همچنین، با بازپخت در دماهای ۷۰۰ درجه سانتی گراد و ۹۰۰ درجه سانتی گراد، ساختار شبکه از تتراگونال به مونوکلینیک با ساختار مونازیت تبدیل می‌شود و شدت طیف گسیلی کاهش می‌یابد.

Investigation of the effect of annealing temperature on Dy doped $LaVO_4$ nanocrystals properties

Chamanzadeh, zohreh[1]

[1] *School of Physics, Damghan University, Damghan*

Abstract

In this research, Dy doped $LaVO_4$ nanostructures were synthesized using the hydrothermal method with the aid of $La(CH_3CO_2)_3$ as lanthanum source in presence of oleic acid as surfactant. The products were characterized by X-ray diffraction (XRD), scanning electron microscopy (SEM), Spectra Energy Displacement of X-ray (EDAX), photoluminescence (PL) spectroscopy. SEM images of $LaVO_4$: Dy nanocrystals show that as prepared samples are mainly having sheet-like morphology. Besides, the optimized annealing temperature affects on the crystal structure and other properties of produced nanostructures were investigated. The photoluminescence studies of the $LaVO_4$:Dy nanocrystals revealed a strong enhancement in emission intensity, when annealing temperature increased up to 500 °C. Also, the lattice structure can be transferred from tetragonal to monoclinic with monazite structure after annealing at 700 and 900 °C and the PL intensity decreases.

***Keywords**: nanocrystals, luminescent, LaVO4, annealing*

PACS No. 61, 81

مقدمه

در سال‌های اخیر، نانومواد به دلیل خصوصیات منحصر بفردشان و قابلیت کاربرد آن‌ها در کاتالیست و دستگاه‌های اپتوالکترونیکی به شدت مورد توجه قرار گرفته‌اند (۱). مواد نورافشان با ناخالصی عناصر کمیاب خاکی، بعلت استفاده‌ی وسیع آن‌ها در زمینه‌های مختلف مانند فسفرها (۲)، کاربردهای بیوپزشکی (۳)، مواد میزبان لیزرها (٤)، توجه دانشمندان بسیاری را به خود جلب کرده‌اند. علاوه بر این، مواد نورافشان می‌توانند به

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

عنوان ماده‌ی اصلاح‌گر طیف، به منظور اصلاح طیف خورشید برای افزایش بازده سلول خورشیدی مورد استفاده قرار گیرند. این اصلاح طیف می‌تواند از طریق تبدیل فوتون‌های با انرژی بالا به انرژی‌های پایین‌تر (DC) و یا با تبدیل فوتون‌های با انرژی کم به انرژی‌های بالاتر (UC) انجام شود (۵).

اورتووانادات‌های لانتانید مانند $LaVO_4$، بعلت ساختار الکترونیکی منحصربفرد و حالت‌های گذار پوسته‌ی 4f یون‌های کمیاب خاکی آن‌ها، یکی از خانواده‌های نورافشان کمیاب خاکی مهم هستند. بطور کلی اورتووانادات‌های لانتانید در دو ساختار مونوکلینیک و تتراگونال بلورینه می‌شوند (٦). $LaVO_4$ با فاز مونوکلینیک به عنوان ماده‌ی میزبان نورافشان مناسب نیست ولی در مورد فاز تتراگونال آن انتظار می‌رود که خواص فوق‌العاده‌ای داشته باشد (۷). بعلاوه، یون‌های Dy یک فعال‌کننده‌ی بسیار خوب است و $LaVO_4$ با ناخالصی Dy یک فسفر سفید بالقوه خواهد بود.

در این پژوهش، لانتانیوم استات به عنوان منبع لانتانیوم برای ساخت نانوبلورهای $LaVO_4$ با ناخالصی Dy با استفاده از روش هیدروترمال، استفاده شد و سپس تاثیر دمای بازپخت بر ویژگی های ساختاری و اپتیکی مورد مطالعه قرار گرفت. مشخصه‌یابی نانوبلورهای ساخته شده توسط دستگاه‌های XRD، EDAX، SEM و PL انجام شد.

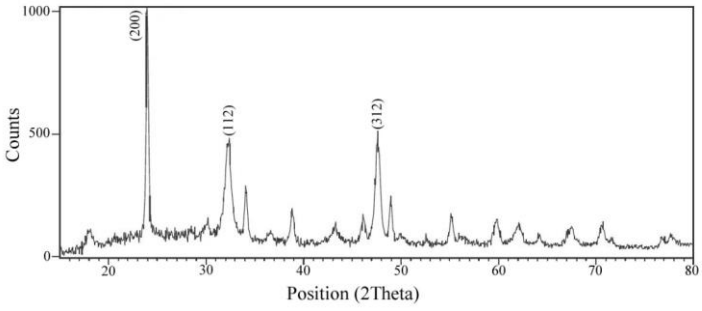
بخش تجربی

برای ساخت نانوبلورهای $LaVO_4$ به همراه ناخالصی دیسپرسیوم (Dy) از روش هیدروترمال استفاده شد. ابتدا ۰/۳ gr از سدیم هیدروکسید، ۰/۰۳ gr از آمونیوم متاوانادات در ۲/۵ mL آب یون زدایی شده در بشر ۵۰ mL حل شدند. سپس مخلوطی از ۵ mL اولئیک اسید و ۵ mL اتانول، تحت چرخش به محلول اول اضافه شد. پس از آن ناخالصی Dy به نسبت مولی ۰/۰۸: ۰/۹۲ (دیسپرسیوم نیترات هیدرات: لانتانیوم استات هیدرات) با حل کردن ۰/۰۰۴۳ gr دیسپرسیوم نیترات هیدرات به همراه ۰/۱۶۳۵ gr لانتانیوم استات هیدرات (با درصد خلوص ۹۹/۹) در ۱ mL آب یون زدایی شده، به واکنش اضافه شد. پس از هم خوردن محلول نهایی به مدت ۱۵ دقیقه، بشر محتوی واکنشگرها درون اتوکلاو قرار گرفت. اتوکلاو در دمای ۱٤۰ درجه به مدت ٤ ساعت نگهداری و سپس در دمای اتاق به طور طبیعی سرد شد. سپس رسوب سفید رنگ تولید شده توسط دستگاه سانتریفوژ جداسازی و جهت حذف ناخالصی‌ها، چندین بار با سیکلوهگزان و اتانول شستشو داده شد. سرانجام رسوب در آون در دمای ۵۰ درجه به مدت ۲ ساعت خشک شد. سپس نمونه های ساخته شده در دماهای ۳۰۰، ۵۰۰، ۷۰۰ و ۹۰۰ درجه سانتی گراد به مدت ۱ ساعت در هوا بازپخت شدند.

درنهایت، به مشخصه‌یابی محصولات بدست آمده پرداخته شد.

نتایج و بحث

طیف سنجی پراش اشعه X (XRD) نانوبلورهای $LaVO_4$:Dy ساخته شده، در شکل ۱ نشان داده شده است.



شکل ۱: الگوی XRD نانوبلورهای $LaVO_4$:Dy

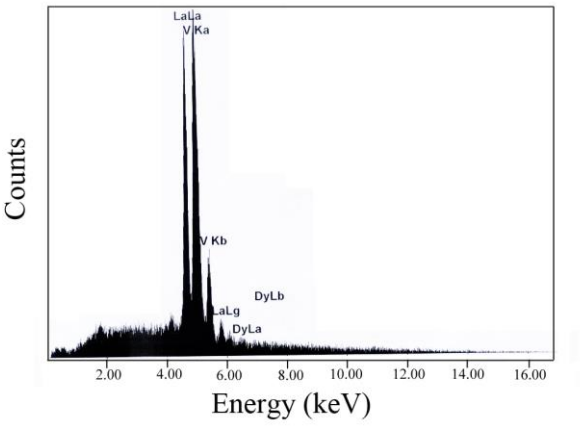
الگوی XRD نشان می‌دهد که نمونه‌ی ساخته شده به خوبی بلورینه شده و تمامی قله‌ها به خوبی با فاز تتراگونال $LaVO_4$ با ساختار زیرکون با گروه فضایی I41/amd و ثوابت شبکه a=b= 7.49 ^{0}A و c= 6.59 ^{0}A منطبق هستند (JCPDS No. 32-0504). به علاوه، هیچ قله‌ی اضافه‌ای در الگوها دیده نمی‌شود، که نشان دهنده‌ی یک فاز خالص تتراگونال است. از اطلاعات XRD، قطر بلوری (D_c) نانوبلورها با استفاده از معادله‌ی شرر محاسبه شد:

$$D_c=K\lambda/\beta\cos\theta$$

بطوریکه β پهنای قله در نصف شدت بیشینه‌ی آن است، K ضریب شکل نامیده می‌شود که معمولا مقدار آن در حدود ۰/۹

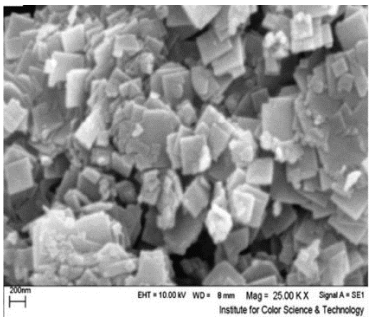
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

است و λ طول موج پرتو X استفاده شده در XRD است. اندازه‌ی بلوری تخمین زده شده از دبای شرر حدود ۱۲ نانومتر به‌دست آمد، که متناظر با عرض نانوصفحات در تصویر SEM می‌باشد.
به هر حال مقدار ناخالصی Dy بسیار کم است، بطوریکه در XRD حضور ناخالصی قابل مشاهده نیست. بنابراین، بررسی‌های EDAX به منظور تشخیص حضور دیسپرسیوم در نمونه انجام شد. شکل ۲ طیف EDAX نمونه $LaVO_4$:Dy را نشان می‌دهد که حضور تمامی عناصر La، V، Dy را مشخص می‌کند.



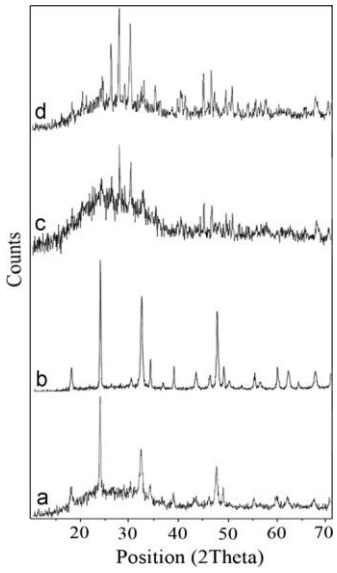
شکل۲: طیف EDAX نانوبلورهای $LaVO_4$:Dy

ریخت‌شناسی نانوبلورهای $LaVO_4$:Dy توسط میکروسکوپ الکترونی روبشی (SEM) بررسی شد. تصویر SEM این نانوبلور-ها در شکل ۳ نشان داده شده است. این شکل نشان می دهد که نمونه های ساخته شده به طور عمده به صورت نانوصفحات رشد کرده‌اند.



شکل ۳: تصویر SEM نانوبلورهای $LaVO_4$:Dy ساخته شده

شکل ٤ الگوهای XRD نانوبلورهای بازپخت شده در دماهای ۳۰۰، ۵۰۰، ۷۰۰ و ۹۰۰ درجه سانتی گراد را نشان می‌دهد. شکل ٤a و ٤b فاز تتراگونال نانوبلورها را نشان می‌دهند و با افزایش دما از ۳۳۰ به ۵۰۰ درجه سانتی گراد، شدت قله‌ها بیشتر می‌شود. بنابراین با این افزایش دما بلورینگی افزایش می‌یابد. شکل ٤c و ٤d فاز مونوکلینیک $LaVO_4$ را نشان می دهند و با ساختار مونازیت، به ترتیب با شماره کارت های ۰٤۲۷-۲۵ و ۰۳۲٤-۲۳ با ثوابت شبکه a= 7.07 ^{0}A، b= 7.29 ^{0}A و c= 6.77 ^{0}A و a= 7.05 ^{0}A، b= 7.26 ^{0}A و c= 6.75 ^{0}A منطبق هستند. بنابراین، سلول واحد کاهش می‌یابد و بلورینگی در فاز مونوکلینیک بهبود می یابد. به هرحال با افزایش دمای بازپخت، فاز تتراگونال به فاز مونوکلینیک تبدیل می‌شود. بنابراین نانوبلورهای $LaVO_4$:Dy حالت پایدار ترمودینامیکی را انتخاب می کنند.

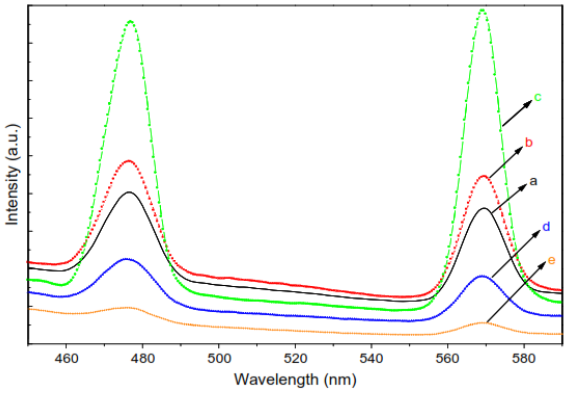


شکل ٤: الگوهایی XRD نمونه های بازپخت شده در دماهای: a) ۳۰۰، b) ۵۰۰، c) ۷۰۰ و d) ۹۰۰ درجه سانتی گراد

ویژگی‌های اپتیکی نانوبلورها توسط طیف‌سنجی فوتو لومینسانس بررسی شد. طیف فوتولومینسانس نانوبلورهای $LaVO_4$:Dy اندازه‌گیری شده در دمای اتاق، تحت برانگیختگی ۲۹۰ نانومتر در حلال سیگلوهگزان در شکل ۵ نشان داده شده است. این نانوبلور-ها گسیلی در محدوده‌ی طول موجی ٤۵۰ تا ٦۰۰ نانومتر دارند. قوی‌ترین قله‌ها در حدود ٤۷۷ نانومتر و ۵٦۹ نانومتر قرار می‌گیرد.

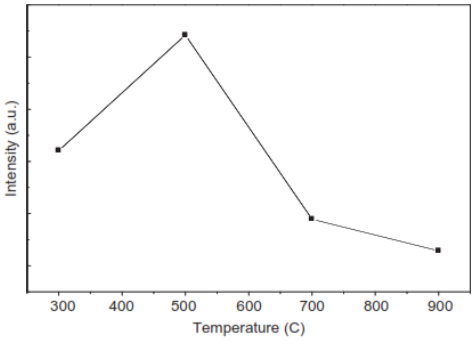
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

قله‌های طیف متناظر با گذارهای $^4F_{9/2}$-$^6H_{15/2}$ و $^4F_{9/2}$-$^6H_{13/2}$ از یون‌های Dy می‌باشد که نشان‌دهنده‌ی گذارهای انتقال بار در باند V-O می‌باشد.



شکل ۵: طیف گسیل نانوبلورهای $LaVO_4$:Dy: a) بدون بازپخت، بازپخت شده در دماهای: b) ۳۰۰، c) ۵۰۰، d) ۷۰۰، و e) ۹۰۰ درجه سانتی گراد

همان‌طور که در شکل ٦ نشان داده شده است، با افزایش دمای بازپخت از ۳۰۰ به ۵۰۰ درجه سانتی گراد شدت طیف گسیلی افزایش می‌یابد که می‌تواند نتیجه‌ای از بلورینگی بهتر و کاهش نقایص شبکه بلوری باشد.



شکل ٦: شدت طیف گسیل نانوبلورهای $LaVO_4$:Dy به عنوان تابعی از دمای بازپخت

با افزایش دما بازپخت در ۷۰۰ و ۹۰۰ درجه سانتی گراد شدت طیف گسیلی کاهش می‌یابد. زیرا در این دماها فاز تتراگونال نمونه به فاز مونوکلینیک تبدیل می‌شود. بنابراین، ساختار ماده میزبان و محل قرارگیری یون‌های Dy در بازده گسیل بسیار اهمیت دارد. شدت گسیل $LaVO_4$:Dy با فاز تتراگونال خیلی بیشتر از مونازیت است. زیرا ساختار زیرکون $LaVO_4$ تقارن معکوس خیلی کمی دارد. بنابراین گذار دوقطبی الکتریکی بیشتری را در مقایسه با ساختار مونازیت می‌دهد. شکاف طیفی زیرکون و مونازیت، به علت اثر استارک میدان‌های بلوری مختلف، کاملا متفاوت است.

نتیجه گیری

بطور خلاصه، نانوبلورهای $LaVO_4$:Dy با موفقیت توسط روش آسان هیدروترمال ساخته شدند. در این مقاله به بررسی اثر دمای بازپخت بر ساختار بلوری و خواص فوتولومینسانس نانوبلورهای $LaVO_4$:Dy پرداخته شد. نمونه‌های ساخته شده با استفاده از دستگاه‌های XRD، EDAX، SEM، و PL مشخصه-یابی شدند. نتایج نشان می‌دهد که بلورینگی و شدت طیف گسیلی در نانوبلورهای $LaVO_4$:Dy بازپخت شده در دمای ۵۰۰ درجه سانتی گراد بهبود می یابد.

مرجع‌ها

[1] T. Mishra, "Anion supported TiO_2–ZrO_2 nanomaterial synthesized by reverse microemulsion technique as an efficient catalyst for solvent free nitration of halobenzene" ; *Catal. Commun*. **9** (2008) 21-26.
[2] T. Higuchi, Y. Hotta, Y. Hikita, S. Maruyama, Y. Hayamizu, H. Akiyama, H. Wadati, D. G. Hawthorn, T. Z. Regier, R. I. R. Blyth, G. A. Sawatzky, H. Y. Hwang, "$LaVO_4$:EuLaVO4:Eu Phosphor films with enhanced Eu solubility"; *Appl. Phys. Lett.* **98** (2011) 071902.
[3] M. Wang, G. Abbineni, A. Clevenger, C. Mao, S. Xu, " Upconversion nanoparticles: synthesis, surface modification and biological applications"; *Nanomedicine*. **7** (2011) 710-729.
[4] A. B. Seddon, Z. Tang, D. Furniss, S. Sujecki, T. M. Benson, " Progress in rare-earth-doped mid-infrared fiber lasers"; *Opt. Express.* **18** (2010) 26704-26719.
[5] C. Strumpel, M. Mccann, G. Beaucarne, V. Arkhipov, A. Slaoui, V. Svrcek, C. Delcanizo, I. Tobias, " Modifying the solar spectrum to enhance silicon solar cell efficiency—An overview of available materials"; *Sol. Energ. Mat. Sol. Cel.* **91** (2007) 238-249.
[6] S. W. Park, H. K. Yang, J. W. Chung, Y. Chen, B. K. Moon, B. C. Choi, J. H. Jeong, J. H. Kim, " Photoluminescent properties of $LaVO_4$:Eu^{3+} by structural transformation"; *Phys B.* **405** (2010) 4040-4044.
[7] U. Rambabu, D. P. Amalnerkar, B. B. Kale, S. Buddhudu, "Fluorescence spectra of Eu^{3+}-doped $LnVO_4$ (Ln = La and Y) powder phosphors"; *Mater. Res. Bull.* **35** (2000) 929-936.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

پروسکایت‌های دوگانه$Cs_2XInY_6(X=Ag, Cu; Y=Cl, Br)$: خواص ساختاری و الکترونی

نگهداری، فاطمه؛ مختاری، علی

گروه فیزیک، دانشگاه شهرکرد، بلوار رهبر ، شهرکرد

چکیده

پروسکایت‌های هالید به‌علت تنوع شیمیایی، سنتز آسان‌تر، خواص اپتوالکترونیک مناسب و راندمان بالا انقلابی در زمینه سلول‌های خورشیدی ایجاد کردند. در این پژوهش، خواص ساختاری و الکترونی پروسکایت‌های معدنی دوگانه $Cs_2XInY_6(X=Ag, Cu; Y=Cl, Br)$ بر پایه ایندیوم، به کمک روش های ابتدا به ساکن مبتنی بر روش شبه پتانسیل و در چارچوب نظریه تابعی چگالی(DFT) با استفاده از بسته محاسباتی QUANTUM ESSPRESSO انجام شده است. ابتدا بهینه سازی ساختاری انجام و ثابت شبکه، مدول حجمی، مشتق مدول حجمی بدست آمد و سپس خواص الکترونی ترکیبات با استفاده از تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) و هم‌چنین تصحیح هم‌بستگی قوی (LDA+U) با مقدار مناسب U انجام شد. و در نهایت مقدار انرژی گاف، ساختار نواری و چگالی حالت‌های الکترونی محاسبه و با داده‌های دیگران مقایسه شد.

واژه های کلیدی: *پروسکایت، سلول‌های خورشیدی، راندمان بالا، نظریه تابعی چگالی*

Cs_2XInY_6(X=Ag, Cu and Y=Cl, Br) Double Perovskites: The Structural and Electronic properties

Negahdari, Fatemeh; Mokhtari, Ali

Department of Physics, University of Shahrekord, Shahrekord.

Abstract

Halide perovskite revolutionized the field of process capability solar cells due to their chemical diversity, easier synthesis, good optoelectronic properties, and high efficiency. In this study, the structural and electronic properties of the Cs_2XInY_6 , Indium-based inorganic double perovskites,are studied by the ab initio methods that are based on the pseudo-potential method within the framework of density functional theory using QUANTUM ESSPRESSO code. At first, the optimized structure is obtained and then the lattice constants, bulk modulus and it's pressure derivative are calculated, and also the electronic properties of the compounds are investigated using generalized-gradient approximation (GGA) and LDA+U method (with proper value for U). Finally, the density of states (DOS) and band structures are obtained and compared with the available results.

***Keywords**: Perovskite, Solar Cells, High Efficiency, Density Functional Theory*

PACS No.70

مقدمه

استفاده از پروسکایت در ساخت سلول خورشیدی برای اولین بار در سال ۲۰۰۹ توسط میاساکا گزارش شد[۱]. سلول خورشیدی آمونیوم سرب یدید ($CH_3NH_3PbI_3$) با راندمان ۲۵/۲٪ و هزینه ساخت بسیار کم، این کلاس از مواد را برسر زبان‌ها انداخته است. با توجه به سمی بودن عنصر سرب و اثرات مخرب آن بر محیط‌زیست، دانشمندان پروسکایت هالید معدنی را بعنوان برترین گزینه برای جایگزینی معرفی کردند[۲].

در این میان پروسکایت‌های دوگانه بدون سرب با فرمول عمومی $A_2B\,B'X_6$ که در آن B و B' کاتیون فلزی هستند، با داشتن گاف‌نواری مطلوب و عموما مستقیم(گاف نواری به‌عنوان یک معیار انتخاب ماده مناسب برای استفاده در دستگاه‌های اپتوالکترونیک و به‌ویژه سلول‌های خورشیدی ضروری است)،

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد

http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

ویژگی‌های اپتیکی قابل تنظیم، پایداری بیشتر و مزایای برتر تجاری مثل تهیه و پالایش آسان و ارزان در جهت تولید انبوه فصل تازه‌ای را در این عرصه ایجاد کرده‌است[۳].

در این مقاله ما ترکیبات Cs_2XInY_6 (X=Ag, Cu; Y=Cl, Br) دارای ساختار مکعبی FCC و گروه فضایی ۲۲۵ را مورد مطالعه قرار دادیم و مقدار گاف نواری، خواص ساختاری و الکترونی ترکیبات محاسبه و مقایسه کرده ایم.

روش محاسبات

محاسبات بر پایهٔ نظریهٔ تابعی چگالی [٤] و بااستفاده از بسته محاسباتی کوانتوم اسپرسو[٥] انجام شده است. برهم‌کنش الکترون‌های ظرفیت با استفاده ازتابعی هم‌بستگی در تقریب شیب تعمیم یافته و با استفاده از شبه پتانسیل PAW انجام شده است. پس از بهینه‌سازی ساختاری، خواص الکترونی در هر دو تقریب GGA و LDA+U مورد مطالعه قرار گرفت[٦]. مقدار پیشنهادی پارامتر هابارد[٧]، U=10 الکترون ولت، برای عنصرهای نقره و مس اعمال و میزان گاف بدست آمده با تجربه مقایسه گردید. دقت هم‌گرایی انرژی 10^{-8} الکترون ولت و حداکثر نیروی وارد بر اتم‌ها از مرتبه $10^{-3}\ Ry/a.u.$ لحاظ شده است.

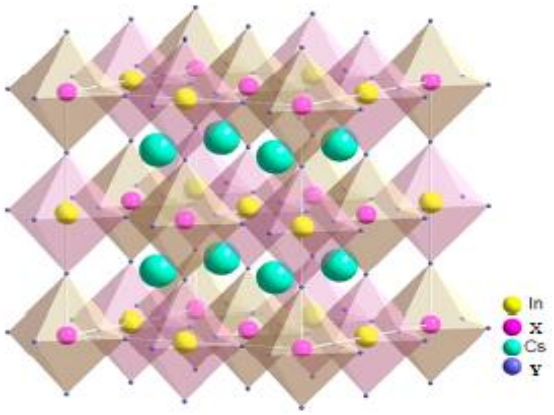
نتایج و بحث

خواص ساختاری

در ترکیبات Cs_2XInY_6 (X=Ag, Cu; Y=Cl, Br) با ساختار پروسکایت دوگانه شبکه FCC و گروه فضایی $Fm\bar{3}m$ ، Cs در جایگاه (۰/۲۵ ۰/۲۵ ۰/۲۵) 8c ، عناصر X (۰/۵ ۰/۵ ۰/۵) ٤b ، In (۰ ۰ ۰) ٤a و عناصر Y در (۰ ۰/۲۵ ۰) ۲٤e قرار دارند[۸]. شکل (۱) طرحواره ای از این ساختار را نشان می‌دهد.

در جدول (۱) مقادیر بهینه سازی ساختاری با مقادیر تجربی موجود مقایسه شده اند. اندازه پارامتر ثابت شبکه بر حسب آنگستروم حدود ۲ درصد کمتر یا بیشتر از مقادیر تجربی بدست آمده و در تطابق خوبی با نتایج تجربی است[۷و۱۰و۹]. هم‌چنین انرژی همدوستی در واحد مولکول، مشخصه ای از قدرت پیوند در جامدات، در جدول ذکر شده است و نشان می‌دهد ترکیبات دارای Cl از قدرت پیوند بیشتری برخوردار هستند. مدول حجمی و مشتق آن بعنوان معیاری برای ارزیابی نحوه مقاومت مواد در برابر فشردگی یا تراکم محاسبه شده است. اندازه گیری این کمیت‌ها برای کاربردهای صنعتی بسیار اهمییت دارد.

داده‌های بدست آمده از تقریب GGA و مقایسه آن با داده‌های تجربی نشان می‌دهند که استفاده از این تقریب برای خواص ساختاری قابل اعتماد و مفید است، در ادامه خواهیم دید که این تقریب مقادیر گاف نواری را کمتر از مقادیر تجربی نشان می‌دهد.



شکل۱ : ساختار پروسکایت دوگانه با گروه فضایی ۲۲۵

جدول۱ : مقادیر بهینه ساختاری و مقایسه با داده های تجربی

	$Cs_2AgInBr_6$	$Cs_2AgInCl_6$	$Cs_2CuInBr_6$	$Cs_2CuInCl_6$
acell	۱۱/۰۷۳۵	۱۰/٤۹٥	۱۰/۷٦۳	۱۰/۲۳۹
acell (exp)	۱۱/۰۲۱	۱۰/٤٦۷	-	۱۰/۱۹۲
K_0 GPa	۲٤/۱	۳۰/۲	۲۹/۰	۳۷/٤
dK_0	٥/۸۲	٥/۱٦	٥/٦٤	٥/٥۹
$E_c \frac{Ry}{mol}$	۱/٦۷	-۱/۹۳	-۱/۷۸	-۲/۰۸

خواص الکترونی

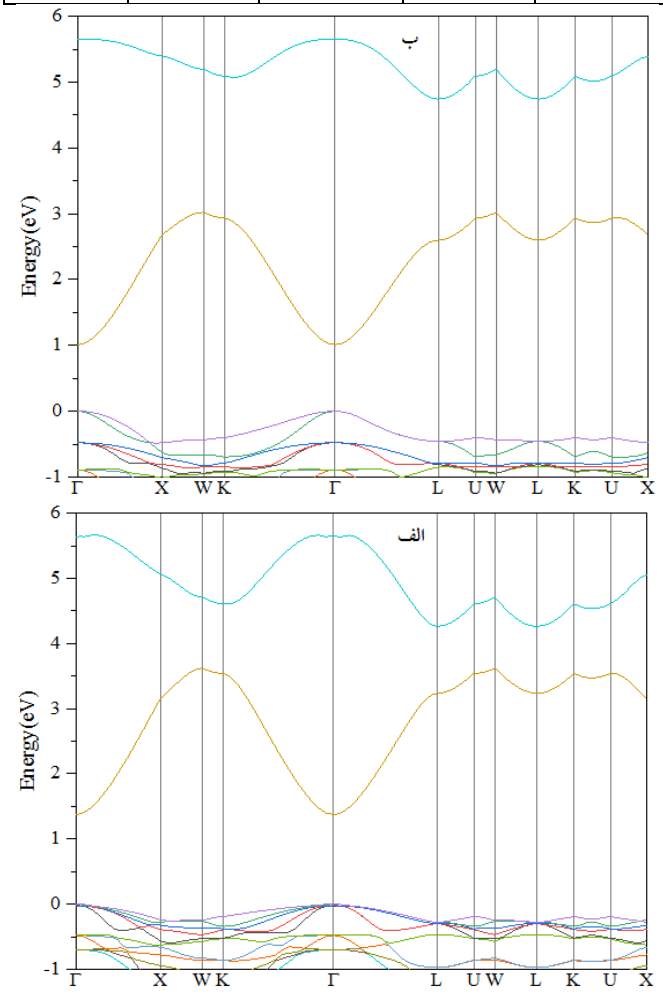
ساختار نواری یک ترکیب حالت جامد، اطلاعات مربوط به رسانش الکتریکی، حرارتی و اسپینی را توضیح میدهد. از آن‌جا که ساختارها مشابه هستند، نمودارها مشابه است و از تکرار پرهیز شده است. شکل (۲) ساختار نواری ترکیب $Cs_2AgInBr_6$ و $Cs_2CuInCl_6$ را نشان می‌دهد. این ساختارها با در نظر گرفتن ۱۰٦ نقطه در منطقه اول بریلوین رسم شده است [۱۱]. مقادیر گاف با استفاده از تقریب GGA و LDA+U محاسبه و در جدول (۲) ذکر و با داده های تجربی مقایسه شده است. گاف نواری هر ٤ ترکیب در هر دو تقریب، مستقیم و در نقطه Γ است.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

گاف مناسب برای استفاده از مواد در سلول‌های خورشیدی بازه یک تا سه الکترون ولت است که تمام مواد مورد بررسی در این محدوده می‌باشند. از آن‌جا که فلزات واسطه در ترکیبات مورد بررسی حضور دارند و الکترون های جایگزیده اوربیتال‌های d و f داریم تقریب LDA+U با یک جمله اضافه وابسته به برهم‌کنش الکترون_الکترون جایگاهی، گاف نواری را بهتر تخمین می‌زند.

جدول ۲ : مقادیر گاف انرژی و مقایسه با داده‌های آزمایشگاهی

E_{gap} (eV)	$Cs_2AgInBr_6$	$Cs_2AgInCl_6$	$Cs_2CuInBr_6$	$Cs_2CuInCl_6$
GGA	۱/۳۳۲	۱/۹۹۵	۰/۳۱۷	۰/۳۵۲
LDA+U	۱/۸۳۷	۲/٦٤٨	۰/٦١٦	۱/۱٤۰
EXP	۲/۱	۳/۳	–	۱/٤
m^*_e/m_e	۰/۳۱	۰/۲۹	۰/۳۱	۰/۳۰
m^*_h/m_e	۰/۲۹	۰/۲۸	۰/۲۹	۰/۲۸



شکل۲ : ساختار نواری الف) $Cs_2AgInBr_6$ ب) $Cs_2CuInCl_6$ در تقریب LDA+U با U=10eV. انرژی بالاترین حالت پر برابر صفر قرار داده شده است.

جرم موثر الکترون و حفره نیز در جدول (۲) گزارش شده است. جرم موثر تقریبا مشابه در این مواد سبب می‌شود که تحرک‌پذیری بالاتری داشته و در نهایت سلول‌های خورشیدی با راندمان بالاتر داشته باشیم[۱۲].

شکل (۳) چگالی حالت‌های الکترونی کلی و جزیی را نشان می‌دهد. نمودارهای سایر ترکیبات نیز مشابه می‌باشد و استدلال ها برای آن‌ها نیز مشابه است. با توجه به شکل نوار ظرفیت در ترکیب $Cs_2AgInBr_6$ عمدتا از اوربیتال‌های Ag_d و Br_p و نوار رسانش از In_s، In_p و Ag_s و در مورد $Cs_2CuInCl_6$ نوار ظرفیت از اوربیتال‌هایCu_d و Cl_p و نوار رسانش از In_s، In_p و Cu_s تشکیل شده است. نزدیکی اوربیتال ٤d نقره و ۳d مس به تراز فرمی و نوار ظرفیت سبب می‌شود که تقریب GGA ناکارآمد و مقدار گاف را خیلی کمتر از مقدار تجربی برآورد کند اما با اعمال تقریب LDA+U اوربیتال‌های خالی نوار رسانش به سمت انرژی های بزرگتر و نوار رسانش به سمت انرژی‌های کوچکتر حرکت می‌کند و گاف انرژی را افزایش می‌دهند. در این جا اگر گاف اپتیکی را گذار از اوربیتال p نوار ظرفیت به حالت‌های اوربیتال s نوار رسانش تعریف کنیم، گاف اپتیکی در این مواد با گاف اصلی برابر است.

در نواحی دور از انرژی فرمی، محدوده ١٦- تا ١٢- بیشترین سهم مربوط به حالت‌های Cs_p و In_p می‌باشد.

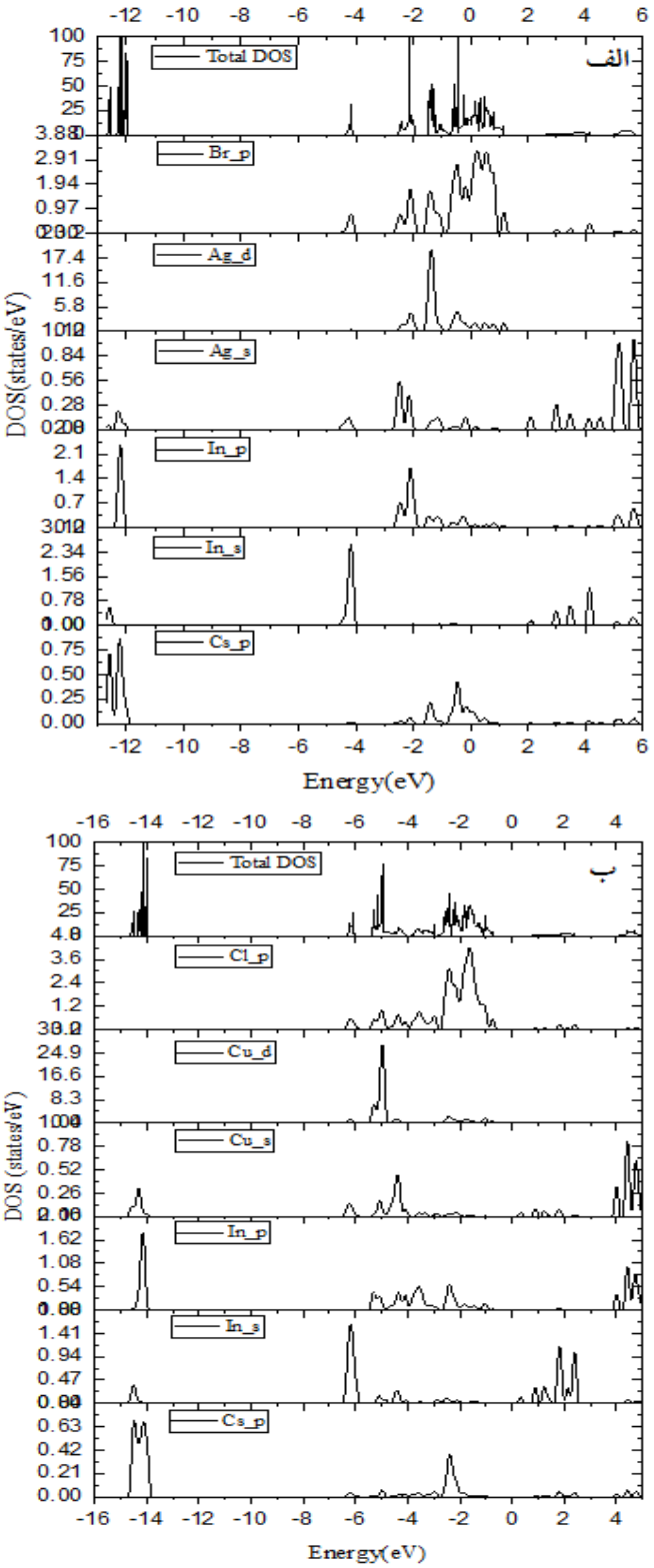
هم‌چنین تقارن در توزیع چگالی حالت‌های الکترونی با اسپین بالا و پایین حاکی از عدم وجود خاصیت مغناطیسی در این مواد است.

نتیجه گیری

در این پژوهش، ٤ ترکیب پروسکایت دوگانه با ساختار FCC مورد بررسی قرار گرفت. در ابتدا بهینه سازی ساختاری با استفاده از تقریب GGA بدست آمد که سازگاری خوبی با داده‌های تجربی داشت.سپس با داده‌های بهینه و با دو تقریب GGA و LDA+U ، ساختار نواری و چگالی حالات الکترونی محاسبه شد. مقدار گاف نواری توسط تقریب LDA+U (U=10eV) بهتر تخمین زده می‌شود. این مواد نیم‌رسانا با دارا بودن گاف نواری مستقیم و مطلوب، داشتن جرم موثر الکترون/حفره کم گزینه های

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مناسبی برای استفاده در وسایل اپتوالکترونیک و بویژه سلول‌های خورشیدی هستند.



شکل۳ : چگالی حالات کلی و جزیی تقریب LDA+U. مقدار انرژی فرمی برابر صفر می‌باشد. الف) $Cs_2AgInBr_6$ ب) $Cs_2CuInCl_6$

مرجع‌ها

[۱] J. Gabriel and S. Xie; "Candidate replacements for lead in CH3NH3PbI3 from first principles calculations"; Comput. Mater. Sci ,155 (2018) 69_73.

[۲] A. Castro-Mendez and J. Hidalgo; "The Role of Grain Boundaries in Perovskite Solar Cells. Advanced Energy Materials"; Adv. Energy Mater, 1901489 (2019) 1_10.

[۳] B. Lotsch; "New Light on an Old Story: Perovskites Go Solar"; Angew. Chem. Int. Ed., 53(2014) 637_647.

[٤] E. Engel and R. Dreizler; "Theoretical and Mathematical Physics: Density Functional Theory (An Advanced Course) ";Springer,(2011).

[٥] P. Giannozzi and O. Andreussi; "Advanced capabilities for materials modelling with QUANTUM ESPRESSO"; J. Phys. Condens. Matter, 29.46 (2017) 465-901.

[٦] A. Shick and A. I. Liechtenstein**;** **"**Implementation of the LDA+U method using the full-potential linearized augmented plane-wave basis"; Phys. Rev. B ., 60 (1999) 10763-10769.

[٧] G. Volonakis and A. A. Haghighirad**;** **"** $Cs_2InAgCl_6$: A New Lead-Free Halide Double Perovskite with Direct Band Gap"; Phys. Chem. Lett.,8.4 (2017) 772–778.

[٨] J. Kangsabanik and V. Sugathan**;** **"** Double perovskites overtaking the single perovskites: A set of new solar harvesting materials with much higher stability and efficiency" ; Phys. Rev. Materials 2, 055401(2018) 1-14.

[٩] F. Igbari and Z. K. Wang**;** **"** Progress of Lead-Free Halide Double Perovskites" ; Adv. Energy Mater., 1803150 (2019) 1-32.

[١٠] H. Q. Pham and R. J. Holmes**;** **"** Lead-free double perovskites Cs2InCuCl6 and (CH3NH3)2InCuCl6: electronic, optical, and electrical properties";Nanoscale, 11(2019) 11173_11182.

[١١] W.Setyawan and S.Curtarolo**;** **"** High-throughput electronic band structure calculations: Challenges and tools"; Computational Materials Science 49 (2010) 299–312.

[١٢] H. J. Feng and W. Deng; "Double Perovskite Cs2BBiX6 (B=Ag, Cu; X=Br, Cl)/TiO2 Heterojunction: An Efficient Pb-Free Perovskite Interface for Charge Extraction"; J. Phys. Chem. C, 7b00138 (2017) 1_24

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بررسی خواص الکترونیکی کادمیوم سولفید و روی سولفید بر پایهٔ نظریهٔ تابعی چگالی

شجاعی، سید حمید رضا؛ یوسف پور نوینی ، نسیم ؛ علیپور کامران، پریسا

گروه فیزیک ، دانشکده علوم ، دانشگاه صنعتی سهند ، تبریز ، ایران

چکیده

در این مقاله به مطالعه خواص الکترونیکی، ساختار نواری انرژی و چگالی حالت‌های الکترونی، توده کادمیوم سولفید و روی سولفید در فاز مکعبی آنها و با استفاده از نظریهٔ تابعی چگالی با تقریب شیب تعمیم یافته برای پتانسیل همبستگی تبادلی می‌پردازیم که با استفاده از بستهٔ محاسباتی کوانتوم اسپرسو انجام گرفته است. نتایج محاسبات ما نشان می‌دهد که هر دو ترکیب دارای گاف مستقیم بوده که برای CdS در نقطه Γ و برای ZnS در نقطه G و بترتیب ۲/۳۹ و ۳/٤ الکترون ولت می باشند که با مقادیر تجربی گزارش شده مطابقت می کند.

واژه های کلیدی: *خواص الکترونیکی ، نظریهٔ تابعی چگالی،تقریب شیب تعمیم یافته*

A DFT Study on Electronic Properties of CdS and ZnS

Shojaei, S.H. Reza; Yousefpour Navini, Nasim; Alipour-Kamran, Parisa

Department of Physics, Sahand University of Technology, Tabriz, Iran

Abstract

In this paper, we study the electronic properties, energy band structure and density of electronic states, of the CdS and ZnS bulks, in their cubic form, using Density Functional Theory along with Generalized Gradient Approximation (GGA) for the exchange correlation potential using quantum espresso. Our results confirm that these compounds are direct band gap semiconductors. The calculated energy gaps for CdS (Γ symmetry point) and ZnS (G symmetry point) are 2.39 and 3.4 eV respectively و which are confirmed by reported experimental values.

***Keywords**: electronic properties, Density Functional Theory, Generalized Gradient Approximation*

مقدمه

در سال‌های اخیر نانومواد به دلیل خاصیت شیمیایی و فیزیکی منحصر به فردشان مورد توجه محققان قرار گرفته است و همچنین اهمیت نیمرساناهای گروه II-VI به دلیل خاصیت الکتریکی و اپتیکی بی نظیر آنها بر کسی پوشیده نیست. مطالعات نانو ذرات نیمرسانا بیش از دو دهه است که یک زمینه جالب پژوهشی است. چون که این مواد فرصتی را برای مطالعه خواص فیزیکی در ابعاد پایین را ایجاد می‌کند و همچنین به بررسی کاربرد گسترده آن‌ها در اپتوالکترونیک و دستگاه‌های الکترونی منجر می‌شود. کارایی این دستگاه‌ها به ساختار و خواص الکترونیکی مواد مورد استفاده بستگی زیادی دارند[1]. سولفید کادمیوم (CdS) یکی از مهم‌ترین نیمرساناهای گروه II-VI با داشتن گاف نواری مستقیم و نسبتاً پهن (۲/٤۲ الکترون ولت) است. این ماده کاربردهای مهمی در سلول‌های خورشیدی، اپتوالکترونیک و دستگاه‌های الکترونیکی دارد [2] و همچنین سولفید روی (ZnS) با دارا بودن گاف نسبتا بزرگ (۳/۷ الکترون ولت) و طیف کاربردی وسیعی نمایشگرهای الکترولومینسانس، لیزرهای تزریقی، پنجره‌های فروسروخ توجه بسیاری را به عنوان یک ماده نیمرسانای مهم جلب کرده است [3-6]. هر دو این ترکیبات، دو شکل بلوری دارند، ساختار پایدار

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

شش ضلعی و ساختار مکعبی. در سال۲۰۱۵، Rahman و همکاران [7] تأثیر آلایش اسکاندیوم بر خواص الکترونیکی و اپتیکی لایه‌های نازک CdS را، به وسیله نظریهٔ تابعی چگالی مورد بررسی قرار دادند. Laporta و همکاران [8] به استفاده از نظریهٔ تابعی چگالی به مطالعه ساختار و خواص الکترونیکی ZnS و اثر فشار بر تغییر فاز آن پرداخته است. Tsegaye [9] خواص الکترونیکی و نوری ZnS آلیاژ شده با منگنز و کروم را با کمک نظریهٔ تابعی چگالی مورد بررسی قرار داد. از بین تمام روش‌های محاسباتی تعیین شده نظریهٔ تابعی چگالی (DFT) به دلیل حفظ تعادل بین عملکرد محاسباتی و کارآیی مشهور است همچنین به طور گسترده‌ای برای مطالعه جنبه‌های مختلف سامانه‌های مولکولی یعنی ساختاری، فرکانس ارتعاش و انتقال الکترونیکی برای گونه-های مختلف از هسته‌ها، اتم‌ها، مولکول‌ها مواد جامد استفاده می-شود[7].

در این مطالعه، با استفاده از نظریهٔ تابعی چگالی هر دو ترکیب CdS, ZnS در فاز مکعبی و شکل توده‌ای آنها را مورد محاسبه قرار دادیم. پس از بدست آوردن پارامترهای هندسی سلول واحد ریلکس شده، ساختار نواری، چگالی حالت‌های کلی و جزیی و به تبع آن سهم اوربیتال‌های مختلف از چگالی حالت‌ها را در بازه‌های مختلف انرژی بررسی می‌کنیم.

روش محاسبات

ما در این تحقیق نظریه تابعی چگالی(DFT) را در قالب تقریب شیب تعمیم یافته(GGA) و با استفاده از نرم افزار کوانتوم اسپرسو بکار بستیم که معادلات کوهن–شام را در قالب تقریب شبه پتانسیل حل می‌کند. شبه پتانسیل استفاده شده از نوع نرم کانسروینگ norm-conserving [10] و بر مبنای متد مارتینز–ترولیر Martins-Troullier انتخاب گردیده است.

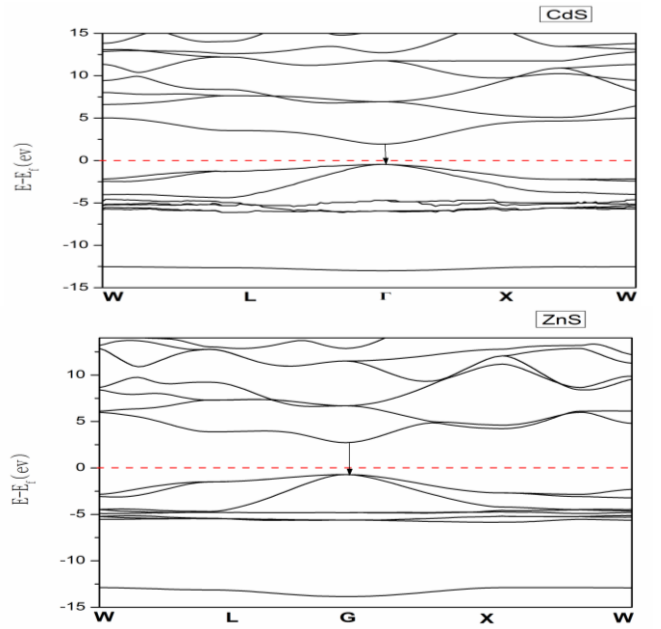
پس از یافتن مقادیر همگرایی K-point ها مقدار بهینه شده انرژی قطع (cutoff) برای CdS و ZnS بترتیب ۳۰ و ۶۰ الکترون ولت بدست آمد. بعد از بهینه کردن ساختار، ثابت شبکه بهینه شده CdS و ZnS بترتیب ۵/۹۲ و ۵/٤٤ آنگستروم تعیین شده و ساختار باند برای CdS در مسیر W-L-Γ-X-W و برای ZnS در مسیر W-L-G-X-W رسم شده است و همچنین به بررسی خواص الکترونی از جمله ساختار نواری، چگالی حالت-های کلی و جزئی و گاف انرژی پرداختیم.

بحث و بررسی نتایج

ساختار نوار انرژی

چگالی حالت‌ها و ساختار نواری از حل معادلات کوهن شم و محاسبهٔ ویژه مقادیر انرژی در نقاطی از منطقه اول بریلوئن به دست می‌آیند که درشکل ۱ رسم شده است.

همان طور که از شکل مشخص است هر دو ماده دارای گاف مستقیم هستند و مقادیر آن برای CdS و ZnS به ترتیب ۲,۳۹ و۳,٤ الکترون ولت در نقاط و مسیرهای متفاوت G و Γ محاسبه شده است، همچنین مقادیر تجربی گزارش شده برای CdS ۲,٤ الکترون ولت و برای ZnS، ۳,۸ الکترون ولت [12-13] می-باشند، از طرفی چون نوارهای انرژی باند رسانش تراز فرمی را قطع نکرده‌اند و این نشان می‌دهد هر دو ماده نیمرسانا است. مطابقت این نمودار با منحنی چگالی حالت‌ها شکل ۲ می‌تواند دلیل بر درستی محاسبات انجام شده باشد و ساختار نواری به دست آمده با روش شبه پتانسیل سازگاری خوبی با دیگر نتایج دارد [11]

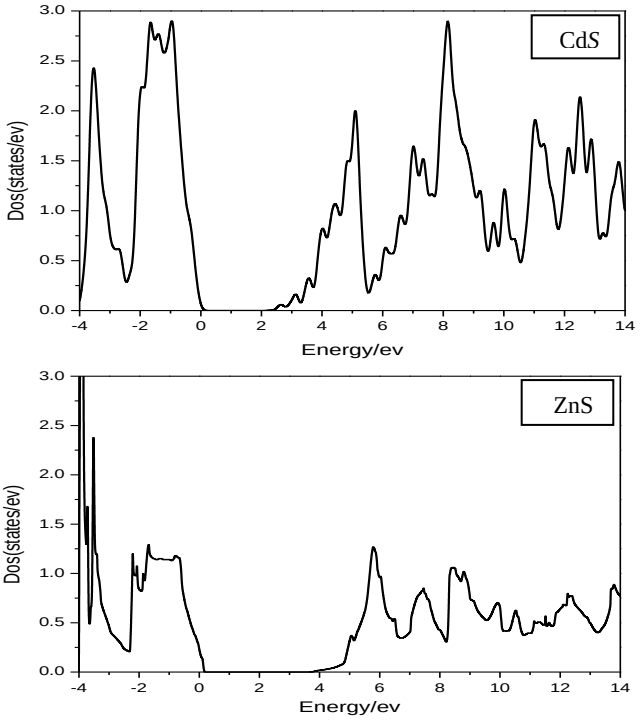


شکل ۱: نمودار ساختار نواری مولکول

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

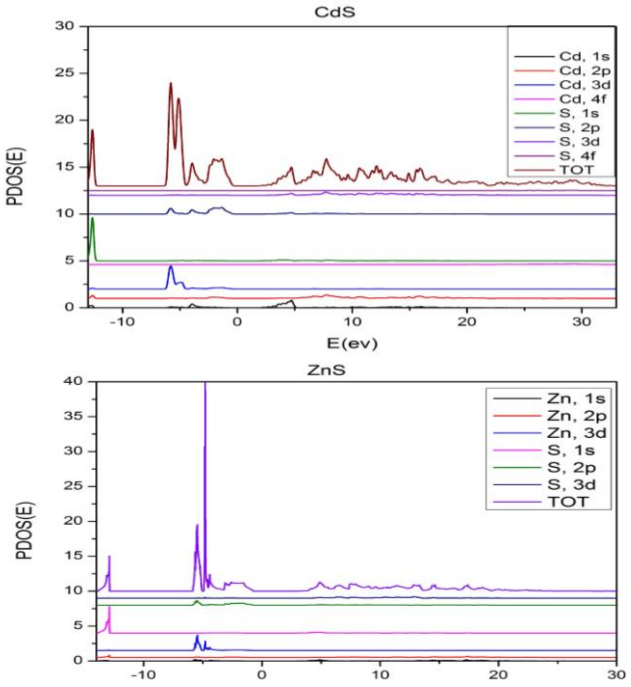
چگالی حالت‌ها

برای تعیین خصوصیات الکترونیکی، بررسی چگالی حالت‌ها در اطراف انرژی فرمی ضروری است و همچنین توزیع الکترون در طیف انرژی توسط چگالی حالت‌ها توصیف می‌شود. طیف چگالی حالت‌های کل CdS و ZnS بر حسب انرژی در گستره ٤- و١٤ الکترون ولت در شکل ۲ رسم شده است . گاف نواری یکی از مهم‌ترین پارامترهایی است که از نمودار چگالی حالت‌های کلی استنباط می شود. در نمودار ، انرژی صفر نشان دهنده تراز فرمی می‌باشد که نوار ظرفیت زیر تراز فرمی و نوار رسانش بالای تراز فرمی قرار دارد. وجود فاصله و مقدار گاف در تراز فرمی بیانگر خاصیت نیمرسانای این دو ماده CdS و ZnS است.



شکل ۲: نمودار چگالی حالت‌های کلی

جهت بررسی نحوه‌ی مشارکت اوربیتال‌های اتم‌های مختلف CdS و ZnS چگالی حالت‌های جزئی را محاسبه و رسم نموده‌ایم که در شکل ۳ آمده است. با توجه به شکل ۳، مشاهده می‌کنیم که مشارکت عمده‌ی اوربیتال 2p مربوط به اتم سولفید در بالای نوار ظرفیت و اوربیتال 1s مربوط به اتم سولفید و اوربیتال 3d مربوط به اتم کادمیوم در نوار ظرفیت می‌باشد که چگالی حالت آنها ۱و ٤ و ۲,۵ الکترن ولت در یاخته‌ی قراردادی است. اوربیتال‌های 3d مربوط به اتم سولفید و 2p مربوط به اتم کادمیوم و 1s مربوط به اتم کادمیوم مشارکت عمده در ته نوار رسانش دارند. که چگالی حالت آن‌ها به ترتیب حدود ۰,۵و ۰,۵و۱ حالت بر الکترون ولت در یاخته‌ی قراردادی است. حال به بررسی ZnS می‌پردازیم که مشارکت عمده اوربیتال 1sمربوط به اتم سولفید در بالای نوار ظرفیت و اوربیتال 2p مربوط به اتم سولفید واوربیتال 3d مربوط به اتم روی با چگالی حالت‌های ۳,۵ و ۰,۵و۰,۵ حالت بر الکترون ولت در یاخته قرار دادی است. اوربیتال 3s مربوط به اتم روی مشارکت عمده در نوار رسانش دارد. که چگالی حالت آن حدود ۱حالت بر الکترون ولت در یاخته‌ی قراردادی است. با توجه به نتایج مشاهده می‌شود مشارکت‌های اوربیتالی این دو نیمرسانا به هم نزدیک است.



شکل۳: چگالی حالت‌های جزیی مولکول

نتیجه‌گیری

خواص الکترونیکی CdS و ZnS در فاز مکعبی با گروه فضایی F-٤٣ مورد بررسی قرار گرفت. اندازه گاف محاسبه شده در مورد CdS تطابق بسیار خوبی با مقادیر تجربی دارد ولی گاف انرژی بدست آمده در ترکیب ZnS پایین‌تر از مقدار تجربی گزارش شده است.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

منابع

[1] W. Dong, C. Zhu, "Optical properties of surface-modified CdO nanoparticles", *Optic. Mater*, vol. 22 (2003).

[2] T. Vossmeyer, L. Katsikas, M. Giersig, IG. Popovic, Kj. Diesner, A. Chemseddine, A Eychmüller, H. Weller, "CdS Nanoclusters: Synthesis, Characterization, Size Dependent Oscillator Strength, Temperature Shift of the Excitionic Transition Energy, and Reversible Absorbance Shift", *J. Phys. Chem*, vol. 98 (1994).

[3] Early, K. T. Nesbitt, D. J. "Size-Dependent Photoionizationin Single CdSe/ZnS" Nanocrystals. *Nano Lett*, vol. 13 (2013).

[4] Fang, X. Zhai, T. Gautam, U.K. Li, L. Wu, L. Bando, Y. Golberg, D. "ZnS nanoparticles: From Synthesis to Applications". *Prog. Mater. Sci*, vol. 56 (2011).

[5] Yang, J. Wang, B. Cao, J. Han, D. Feng, B. Wei, M. Fan, L. Kou, C. Liu, Q. Wang, T. "Controllable Photoluminescent-Magnetic Dual-encoded Wurtzite ZnS: Cu2+Mn2+ Nanowires Modulated by Cu2+ and Mn2+ Ions". *J. Al loys Compd*, Vol. 574 (2013).

[6] La. Porta, F. A. Ferrer, M. M. Santana, Y. V. B. Raubach, C. W. Longo, V. M. Sambrano, J. R. Longo, E. Andrés, J. Li, M. S. Varela, J. A. "Synthesis of Wurtzite ZnS Nanoparticles Using the Microwave Assisted Solvothermal Method". *J. Al loys Compd*. Vol. 555 (2013).

[7] SH. UR Rehman, A. Majid, N. Hasaan, A. Shakoor, G. Murtaza, S. Khan. "A DFT Study of the Effects of Sc Doping on Electronic and Optical Properties of CdS Nanoparticles", *Materials Science-Poland*, vol. 33 (2015).

[8] F. A. La Porta, L. Gracia, J. Andrés, J. R. Sambrano, J. A. Varela, and E. Longo, "A DFT Study of Structural and Electronic Properties of ZnS Polymorphs and its Pressure-Induced Phase Transitions", *American Ceramic Society*, vol. 97 (2014).

[9] Tsegaye, Z. Assefa, "Density Functional Theory Studies of Electronic and Optical Properties of ZnS Alloyed with Mn and Cr", (2012).

[10] M. J. van Setten, M. Giantomassi, E. Bousquet, M. J. Verstraete, D. R. Hamann, X. Gonze, G. Rignanese, "The PseudoDojo: Training and grading a 85 element optimized norm-conserving pseudopotential table", *Computer Physics Communications*, vol. 226 (2018).

[11] A. L. Ivanovskii, R. F. Sabriyanov, A. N. Skazkin, V. Zhukovskii, and G. P. Shvekin, "Effects of Various Parameters on Structural and Optical Properties of CBD-Grown ZnS Thin Films", *Inorganic. Mater*, vol. 36 (2000).

[12] T. Sinha, D. Lilhare, A. Khare, "Chemical Bath Deposition of Crystalline ZnS Thin Films", *Journal of Electronic Materials*, (2017).

[13] F. Antar; "Efffect of Gamma – Ray on Structural and Optical Properties of Cadimum Sulfide (Cds) Thin Films", *International Journal of Application or Innovation in Engineering and Management*, vol. 3 (2014)

این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد :
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بررسی قابلیت استفاده از خوشه خرما برای ساخت الکترود ابرخازن

محمودی میمند، فرزانه[۱] ؛ بیضایی، سید مهدی[۲] ؛ ملک حسینی، سید محمد باقر[۳]

[۱و۲و۳] گروه فیزیک ، دانشکده علوم پایه دانشگاه ولی عصر(عج) رفسنجان

چکیده

در این پژوهش، در گام نخست، خوشه خرما(به دست آمده از منطقه کرمان) کربونیزه و سپس توسط پتاسیم هیدروکسید KOH فعال‌سازی شد. از کربن فعال به دست آمده برای ساخت الکترود ابرخازن استفاده شد. اندازه‌گیری‌های ظرفیت نشان داد که ماده به دست آمده دارای مساحت ویژه ۱۳۶۱٫۳ متر مربع بر گرم و ظرفیت ویژه ۸۴ فاراد بر گرم می‌باشد.

واژه های کلیدی: *کربن فعال، خوشه خرما، الکترود ابرخازن، شبه‌خازن.*

Investigate the ability to use clusters of palm to build supercapacitor electrods

Mahmoudi Mymand, Farzane [1]; Baizaee, Seyyed Mahdy[2]; Malek Hosseini, Seyyed Mohammad Bagher

[1] Department of physics, Vali-e-Asr University of Rafsanjan,

Abstract

In this study, in the first step, the palm cluster (obtained from Kerman region) was carbonized and then activated by potassium hydroxide KOH. The resulting activated carbon was used to make the supercapacitor electrode. Capacity measurements showed that the material obtained has a special area of 1361.3 square meters per gram and a special capacity of 84 farad per gram.

Keywords: *Activated carbon, cluster palm, Supercapacitors electrod, PSeudo-supercapacitor.*

PACS No.81

مقدمه

کربن فعال از حرارت دهی مواد گیاهی دارای کربن تولید می‌شود. کربن فعال یک جامد کاملاً بیشکل با تخلخل بسیار بالا است. که دارای خاصیت جذب بسیار بالایی بوده و قابلیت احیای بسیار خوبی از خود نشان می‌دهد. کربن فعال به علت مساحت ویژه بالا و رسانندگی الکتریکی نسبتاً خوب به عنوان الکترود در ابرخازن‌ها مورد استفاده قرار می‌گیرد. در مواد متخلخل معمولی غیر کربنی تمام سطح در دسترس الکترولیت قرار نمی‌گیرد و بنابراین با وجود این که مساحت سطح بزرگی دارند ولی دارای ظرفیت کمتری نسبت به مواد کربنی می‌باشند [۱].

ابرخازن‌ها به سه دسته کلی تقسیم می‌شوند:

۱- ابرخازن‌های دو لایه‌ی الکتروشیمیایی
۲- شبه ابرخازن‌ها
۳- ابرخازن‌های هیبریدی

هر کدام از این خازن‌ها خود انواع مختلفی دارند که سازوکار ذخیره بار در انها متفاوت است. در ابرخازن‌های دو لایه‌ی الکتروشیمیایی، بار الکتریکی در فصل مشترک الکترود - الکترولیت ذخیره می‌شود و انتقال باری بین الکترولیت و الکترود رخ نمی‌دهد بنابراین دارای ذخیره بار

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

غیرفارادیک می‌باشند، شبه ابرخازن‌ها دارای ذخیره بار فارادیک و ابرخازن‌های هیبریدی دارای سازوکار ترکیبی فارادیک و غیرفارادیک برای ذخیره بار هستند. در خازن‌ها بار الکتریکی بر روی صفحات ذخیره می‌شوند، در ابرخازن‌ها بار الکتریکی به صورت جذب سطحی یون بر روی سطح الکترودها ذخیره می‌شوند. در واقع در ابرخازن، دو لایه درون الکترولیت تشکیل شده و به صورت دو صفحه رسانا دیده می‌شوند [۲].

روش آزمایش

مواد مورد استفاده در این پژوهش

۱) هیدروکلریک اسید (HCL)
۲) پتاسیم هیدروکسید (KOH)
۳) پلی تترا فلوئورواتیلن (PTFE)
۴) سولفات سدیم ($NaSO_4$)
۵) اتانول تجاری
۶) کپسول حاوی گاز آرگون
۷) خوشه خرما
۸) پودر گرافیت
۹) استیلن سیاه
۱۰) استون

در این پژوهش خوشه های خرما جمع‌آوری شده به آزمایشگاه انتقال داده شد و فرآیندهای آماده سازی روی آن انجام گرفت. فرآیند کار به این صورت است که ابتدا مقداری از خوشه خرما خرد شده سپس درون محفظه کوره از جنس کوارتز، قرار گرفت و در جو آرگون در دمای ۷۰۰ درجه سلسیوس به مدت ۶۰ دقیقه فرایند کربنی شدن انجام شد. سپس برای تولید کربن فعال، این نمونه با محلول پتاسیم هیدروکسید ۶ مولار مخلوط شده و به مدت ۸ ساعت در دمای ۸۰ درجه سلسیوس رفلاکس گردید. سپس خوشه خرما رفلاکس شده درون آون خشک شده و سپس درون کوره به مدت ۱۵۰ دقیقه در جو آرگون در دمای ۸۰۰ درجه سلسیوس فرآیند فعال سازی انجام شد. نمونه نهایتا تا رسیدن به دمای محیط به آرامی سرد شد.

تهیه و آزمایش الکترودها

برای آزمایش‌های الکتروشیمیایی سلول ازمون به این صورت ساخته شد که ابتدا کربن فعال با استیلن سیاه، گرافیت، پلی‌تترافلوئورواتیلن (PTFE) و افزودن چند قطره اتانول برای تشکیل خمیر مخلوط شدند و سپس با پرس به سطح توری فشرده شدند. سپس سطح توری را تراشیده تا تنها موادی که درون سوراخ‌های توری می‌باشد باقی بماند. استفاده از مواد افزودنی از جمله PTFE یا پودر تفلون به این دلیل است که کربن فعال به تنهایی هیچ چسبندگی نسبت به توری‌های فلزی ندارند و برای افزایش چسبندگی مورد استفاده قرار می‌گیرند.

همچنین از استیلن سیاه و گرافیت برای افزایش رسانندگی نیز استفاده می‌شود [۳ و ٤].

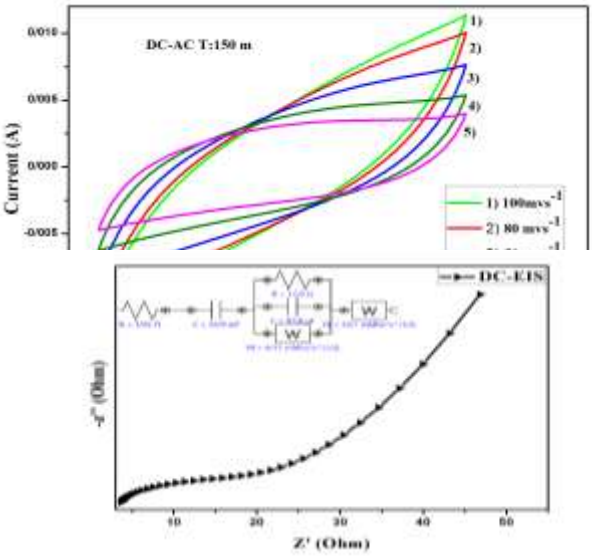
بحث و نتایج

آزمایش‌های الکتروشیمیایی

با توجه به این‌که هدف از ساخت کربن فعال با استفاده از مواد کربنی موجود در طبیعت استفاده از آن‌ها برای ساخت الکترود ابرخازن بود بنابراین نیاز است که از آن‌ها آزمایش‌های الکتروشیمیایی گرفته شود. ولتامتری چرخه‌ای الکترودهای ساخته شده از کربن فعال در الکترولیت سولفات سدیم ($NaSO_4$) با غلظت ۳ مولار با مقادیر مختلف اسکن و بازه پتانسیلی از ۰٫۶- تا ۰٫۸ ولت اندازه‌گیری شده است. شکل‌های این ولتامتری‌ها که مستطیل شکل و تقریباً متقارن هستند بیانگر رفتار خازنی ایده‌آل در نمونه‌های تهیه شده است

در شکل ۱ ولتامتری چرخه‌ای خوشه خرما فعال با عامل فعال‌ساز KOH مشاهده می‌شود.

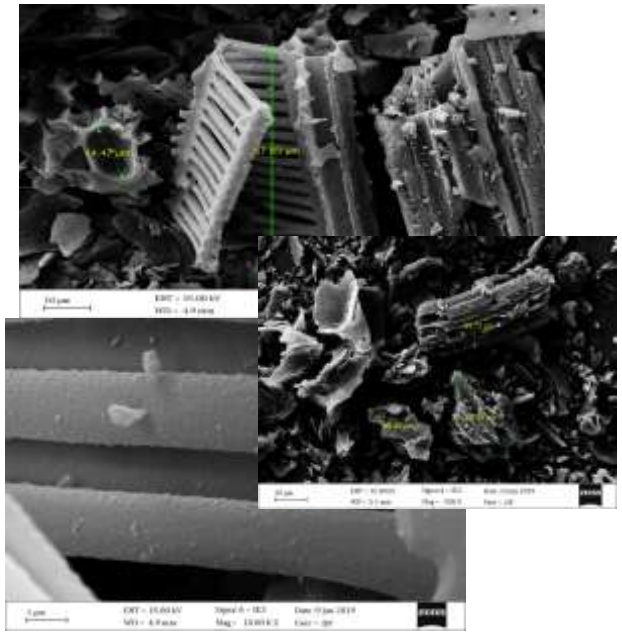
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



شکل ۱: منحنی ولتامتری چرخه‌ای (CV) نمونه خوشه خرما فعال.

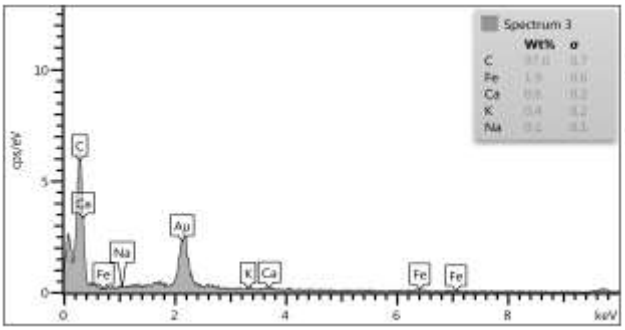
شکل ۲: طیف‌سنجی امپدانس الکتروشیمیایی نمونه خوشه خرما.

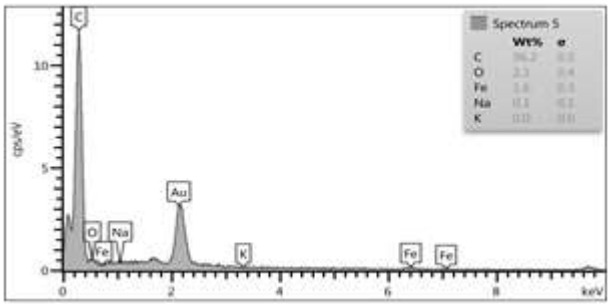
در شکل ۳ با توجه به تصاویر FE-SEM در دو نمونه کربنی، غیرفعال و فعال نمونه‌ها به دلیل ترک خوردگی و فعال شدن در طی فرآیند کربنی شدن، ذرات داری محدوده وسیعی از اندازه‌ها هستند و بسیاری از منافذ به طور منظم بر روی سطح نمونه افزایش یافته است. با در نظر گرفتن اندازه منافذ نمونه‌های کربنی بعد از فعال‌سازی مشخص می‌شود سایز حفرات افزایش یافته است و دارای ساختار متخلخل بسیار زیادی می‌باشد.



شکل ۳: آنالیز FE-SEM نمونه خوشه خرما قبل و بعد از فعال سازی.

همان‌طور که در شکل ۴ مشاهده می‌کنید





شکل ۴: آنالیز EDS برای قبل و بعد از فعالسازی.

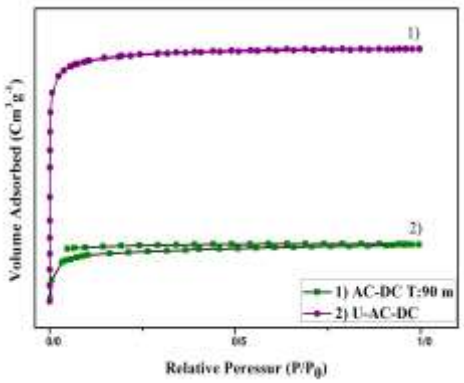
در نمونه، عنصر کربن به طور کامل قابل مشاهده است. در نمونه خوشه خرما عنصر آهن را مشاهده می‌کنید که نه تنها منجر به افزایش واکنش‌های اکسایش–کاهش، بلکه باعث افزایش رسانندگی می‌شود. همچنین مشاهده درصدی از اکسیژن نمونه در ارتباط با گروه‌های عاملی اکسیژن تشکیل شده در طول فرآیندهای فعال‌سازی و رفلاکس با KOH است [۵].

اندازه‌گیری سطح ویژه

برای به دست آوردن سطح ویژه و مشخصات تخلخل کربن فعال تولید شده از جذب سطحی و واجذب نیتروژن مایع در دمای ۷۷ درجه کلوین از روش BET استفاده شد. از مزایای آنالیز BET می‌توان به اندازه‌گیری دقیق مساحت سطح و حفرات، تعیین میزان تخلخل و اندازه‌گیری سطح ویژه اشاره کرد. آنالیز هم دمای جذب و واجذب نیتروژن برای نمونه کربن فعال در شکل ۵ نشان داده شده است. نتایج نشان داد نمونه فعال شده دارای مساحت سطح ویژه بالایی نسبت به نمونه غیرفعال دارد که مساحت سطح بالا

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

نشان دهنده‌ی اثر بخشی فعال KOH است. نمونه‌های فعال شده دارای قطر متوسط ۱٫۲۲ nm هستند که نشان می‌دهد ساختار متخلخل می‌باشد. یا به عبارتی دیگر جذب نیتروژن بر روی سطح کربن به این معنی است که تمام نمونه دارای ساختار متخلخل است. نتایج تجزیه و تحلیل BET نمونه‌های غیرفعال و فعال در جدول ۱-۱ مشاهده می‌شود.



شکل ۵: آنالیز BET هم دمای جذب و واجذب نیتروژن نمونه خوشه خرما فعال و غیرفعال.

جدول ۱-۱ نتایج تجزیه و تحلیل BET نمونه‌های غیرفعال و فعال

نوع ماده	مساحت سطح BET (m^2/g)	حجم حفرات (cm^3/g)	اندازه حفرات (nm)
خوشه خرما غیرفعال	۳۳۲٫۵۷	۰٫۱۴۹۴	۱/۷۹۶۶
خوشه خرما فعال	۱۳۶۱/۳	۱/۵۳۸	۱/۵۸۰۹

نتیجه گیری

در ساختار خوشه خرما به طور طبیعی یون‌های آهن وجود داشت که این یون ها باعث ایجاد ظرفیت شبه خازنی شده‌اند. همچنین انواع زیست توده‌های کربنی موجود در طبیعت از جمله پسماندهای کشاورزی گزینه مناسبی برای ساخت الکترود ابرخازن محسوب می‌شوند. با فعال شدن مواد کربنی موجود هر کدام دارای ظرفیت های ابرخازنی متفاوت می‌باشند.

مرجع ها

[1] E. Frackowiak; "Carbon materials for supercapacitor application"; *Phys. Chem. Chem. Phys* **9**, (2007) 1774-1778.
[۲] Y. Zhang, H. Feng, X. Wu, L. Wang, A. Zhang, T. Xia, H. Dong, X. Li, and L. Zhang; "Progress of electrochemical capacitor electrode materials: A review"; *Int. J. Hydrog. Energy* **34**, (2009) 4889-4899.
[۳] L. L. Zhang, and X. S. Zhao; "Carbon-based materials as supercapacitor electrodes"; *Chem. Soc. Rev* **38**, (2009) 2520-2531.
[۴] D. Lozano-Castello, D. Cazorla-Amoros, A. Linares-Solano, S. Shiraishi, H. Kurihara, and A. Oya; "Influence of pore structure and surface chemistry on electric double layer capacitance in non-aqueous electrolyte"; *Carbon* **41**, (2003) 1765-1775.
[۵] S. E. M. Pourhosseini, O. Norouzi, P. Salimi, and H. R. Naderi; "Synthesis of a Novel Interconnected 3D Pore Network Algal Biochar Constituting Iron Nanoparticles Derived from a Harmful Marine Biomass as High Performance Asymmetric Supercapacitor Electrodes"; *ACS Sustainable Chem. Eng* **6**, (2018) 4746-4758.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مطالعه خواص تراگسیلی بلورهای فوتونی یک بعدی حاوی مواد نانوکامپوزیت کایرال ساختاری

شیرین ، سیمین[۱] ؛ مدنی، امیر[۱] ؛ روشن انتظار، صمد[۲]

[۱] گروه مهندسی اپتیک و لیزر ، دانشگاه بناب ، بناب، آذربایجان شرقی

[۲] دانشکده فیزیک ، دانشگاه تبریز ، تبریز

چکیده

در این مقاله خواص تراگسیلی و بازتابی بلورهای فوتونی یک بعدی حاوی مواد نانوکامپوزیت کایرال ساختاری (NSCM) و دی الکتریک تحت تابش قائم با استفاده از روش ماتریس انتقال مورد مطالعه قرار گرفته است. با بدست آوردن طیف بازتاب و تراگسیل هم قطبش و قطبش متقاطع ساختار، نشان داده‌ایم که سه نوع گاف باند فوتونی می‌تواند در این ساختار یافت شود. همچنین به دلیل حضور نانوذرات فلزی و کایرالیتی، ساختار شامل یک گاف باند جدید و گاف براگ دایروی علاوه بر گاف براگ معمولی است. علاوه بر این تاثیر زاویه خمش را بر طیف بازتاب و عبور نور هم قطبش و قطبش متقاطع بررسی کرده‌ایم.

واژه های کلیدی: *بلور فوتونی- مواد نانوکامپوزیت کایرال ساختاری –براگ دایروی-نانوذرات.*

Study of the transmission properties of one-dimensional photonic crystals containing nanocomposite structurally chiral material

Shirin, Simin[1]; Madani, Amir[1] ; Roshan Entezar, Samad[2]

[1] *Department of Laser and Optical Engineering, University of Bonab, Bonab*
[2] *Faculty of Physics, University of Tabriz, Tabriz*

Abstract

In this paper the transmission and reflection properties of a one-dimensional photonic crystal containing a nanocomposite structurally chiral material (NSCM) and dielectric have been investigated at normal incidence using the transfer matrix method. By obtaining the co-polarized and cross polarized reflection and transmission spectra of the structure, we show that three kinds of the optical band gaps can be found in this structure. Also, due to the presence of metallic nanoparticles and chirality, this structure contains a new bandgap and circular Bragg gap in addition to the conventional Bragg gap. Furthermore, we consider the effects of the tilt angle on the co-polarized and cross polarized reflection and transmission spectra of the structure.

***Keywords**: photonic crystal - nanocomposite structurally chiral materials- circular Bragg –nanoparticle.*

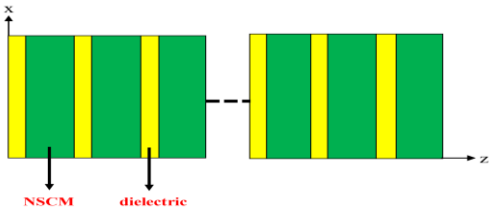
PACS No. 42

مقدمه

بلورهای فوتونی ساختارهای مصنوعی با ثابت دی‌الکتریک متناوب هستند که به دلیل توانایی منحصر به فرد خود در دستکاری نور توجه زیادی را توسط محققان به خود جلب کرده‌اند. در یک بلور فوتونی، به دلیل پراکندگی براگ، امکان انتشار نور در یک ناحیه فرکانسی خاصی وجود ندارد که بعنوان گاف فوتونی نامیده می‌شود. این مشخصه کنترل و دستکاری نور کاربردهای متنوعی در ابزارهای اپتیکی دارد. بسیاری از ابزارهای اپتیکی بر پایه بلورهای فوتونی، از مواد دی الکتریک معمولی ساخته شده‌اند. با این حال در سالهای اخیر، مواد غیر معمول متنوعی نیز جهت ساخت بلورهای فوتونی مانند بلورهای مایع و موادی با ضریب شکست منفی و غیره بکاربرده‌شده‌است که ویژگی‌های منحصر به‌فرد از خود نشان می‌دهند [۱-۲]. اخیراً محیط‌های کایرال‌ساختاری، که محیط‌های پیوستار و ناهمگن با تغییرات مارپیچی دی‌الکتریک ناهمسانگرد در طول یک محور ثابت هستند توجه بسیاری به خود جلب کرده‌اند.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

چنین محیطهایی شامل بلورهای مایع کلستریک، الاستومرها و فیلم‌های نازک مجسمه‌سازی شده‌می‌باشند [۳-٤]. مشخصه بسیار مهم این ساختارها پدیده براگ دایروی می‌باشد[۵] که در آن موج تخت قطبیده دایروی موافق با دستوارگی ساختار کایرال در یک طول موج خاص بشدت بازتاب می‌شود در حالی‌که یک موج مشابه با دستوارگی مخالف بشدت عبور می‌کند. تنظیم و سوئیچینگ مشخصه‌های اپتیکی چنین ساختارهایی از طریق آلائیدن آنها با نانو ذرات فلزی برای اولین بارتوسط مندوزا و همکاران معرفی شد[٦]. در ادامه بازتاب و عبور از این ساختارها و اثر پاکلز درآنها بررسی شده است[۷-۸]. در یک مقاله اخیر نیز ما به بررسی جابجایی جانبی پرتوهای بازتابیده در این ساختارها پرداخته ایم[۹]. در این مقاله نیز طیف تراگسیل و بازتاب بلورهای فوتونی یک‌بعدی حاوی دی‌الکتریک همسانگرد و ماده نانوکامپوزیت کایرال ساختاری با استفاده از روش ماتریس انتقال بررسی می‌شود.



شکل ۱ : ساختار پریودیک شامل دی‌الکتریک-نانوکامپوزیت کایرال‌ساختاری

مدل و محاسبات تئوری

ساختار مورد مطالعه همانطور که در شکل ۱ نشان داده شده‌است یک بلور فوتونی یک بعدی با آرایش $(AB)^N$ است که در محیط آزاد قرار گرفته‌است. لایه اول ، یک ماده دی‌الکتریک همسانگرد و غیرمغناطیسی با $\varepsilon_A = 5$ و ضخامت $d_A = 0.4\times p$ می‌باشد. لایه‌ی دیگر یک محیط نانوکامپوزیت کایرال‌ساختاری با ضخامت $d_B = 2\times p$ است که نانو ذرات نقره به طور کاتوره ای در ماده کایرال ساختاری توزیع شده‌است و $p = 270\,nm$ پیچ ماده کایرال می‌باشد. همچنین تعداد لایه‌های بلور فوتونی N=20 فرض شده است که به موازات صفحه x-y بوده و محور z عمود بر لایه‌ها می‌باشد. علاوه بر این جهت x را جهت دوره‌ای و ناهمگنی ساختار کایرال در نظر گرفته‌ایم. معادلات ماکسول برای ماده نانوکامپوزیت کایرال ساختاری در فضای آزاد به صورت زیر بیان شده‌است[٦]:

$$\nabla\times E(x,y,z) = i\omega\mu_0 H(x,y,z),$$
$$\nabla\times H(x,y,z) = -i\omega\varepsilon_0\varepsilon_{NSCM}(x).E(x,y,z) \quad (۱)$$

که می توان آنها را به فرم دیفرانسیلی مرتبه اول زیر بیان کرد[٦]

$$\frac{\partial\psi(x)}{\partial x} = ik_0 A(x)\psi(x) \quad (۲)$$

$\psi(x) = (e_y(x), e_z(x), h_y(x), h_z(x))$ مولفه های عرضی بردار میدان الکتریکی و مغناطیسی و $A(x)$ ماتریس 4×4 به صورت زیر می‌باشد[۱۰]

$$A(x) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ \frac{\varepsilon_{zx}(x)\varepsilon_{xy}(x)}{\varepsilon_{xx}(x)} - \varepsilon_{zy}(x) & \frac{\varepsilon_{zx}(x)\varepsilon_{xz}(x)}{\varepsilon_{xx}(x)} - \varepsilon_{zz}(x) & 0 & 0 \\ \varepsilon_{yy}(x) - \frac{\varepsilon_{yx}(x)\varepsilon_{xy}(x)}{\varepsilon_{xx}(x)} & \varepsilon_{yz}(x) - \frac{\varepsilon_{yx}(x)\varepsilon_{xz}(x)}{\varepsilon_{xx}(x)} & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (۳)$$

در عبارت بالا $\varepsilon_{i,j}(x)\,(i,j=x,y,z)$ عناصر تانسور دی الکتریک $NSCM$ با دراید‌های زیر می‌باشد که $q = 2\pi/p$ است.

$$\varepsilon_{xx} = \varepsilon_1\cos^2(\chi) + \varepsilon_3\sin^2(\chi),$$
$$\varepsilon_{yy} = \varepsilon_1\cos^2(qx) + \sin^2(qx)[\varepsilon_1\sin^2(\chi) + \varepsilon_3\cos^2(\chi)],$$
$$\varepsilon_{zz} = \varepsilon_1\sin^2(qx) + \cos^2(qx)[\varepsilon_1\sin^2(\chi) + \varepsilon_3\cos^2(\chi)],$$
$$\varepsilon_{xy} = \varepsilon_{yx} = (\varepsilon_1 - \varepsilon_3)\sin(qx)\sin(2\chi)/2,$$
$$\varepsilon_{xz} = \varepsilon_{zx} = -(\varepsilon_1 - \varepsilon_3)\cos(qx)\sin(2\chi)/2,$$
$$\varepsilon_{yz} = \varepsilon_{zy} = (\varepsilon_1 - \varepsilon_3)\sin(2qx)\cos^2(\chi)/2 \quad (٤)$$

دو گذردهی موثر برای این ساختار با فرض تک محوری بودن ماده کایرال ساختاری و آلائیدن نانوذرات در ماده کایرال ساختاری با اعمال معادله ماکسول گارنت تعمیم یافته[۱۱]عبارت است از :

$$\varepsilon_1^e(\omega) = \varepsilon_1\left[1 + \frac{f}{\varepsilon_1/(\varepsilon_m(\omega) - \varepsilon_1) + (1-f)/3}\right],$$
$$\varepsilon_3^e(\omega) = \varepsilon_1\left[1 + \frac{f}{\varepsilon_3/(\varepsilon_m(\omega) - \varepsilon_3) + (1-f)/3}\right] \quad (۵)$$

در این رابطه $\varepsilon_m(\omega)$ گذردهی ذرات فلزی از مدل درود $\varepsilon_m = \varepsilon_0 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma)}$ و f فاکتور پرکنندگی نانوذرات می‌باشد. با استفاده از روش ماتریس انتقال، ماتریس انتشار یک تک سلول شامل نانوکامپوزیت کایرال‌ساختاری و دی‌الکتریک $M = M_{NSCM}.M_{dielectric}$ است که M_{NSCM} ماتریس انتشار نانوکامپوزیت کایرال‌ساختاری و $M_{dielectric}$ ماتریس انتشار دی الکتریک است. با اعمال شرایط مرزی و با بهره گیری از روش ماتریس انتقال [۱۲] و محاسبات عددی ضرایب بازتاب و تراگسیل با فرم ماتریسی زیر بدست آمده‌است:

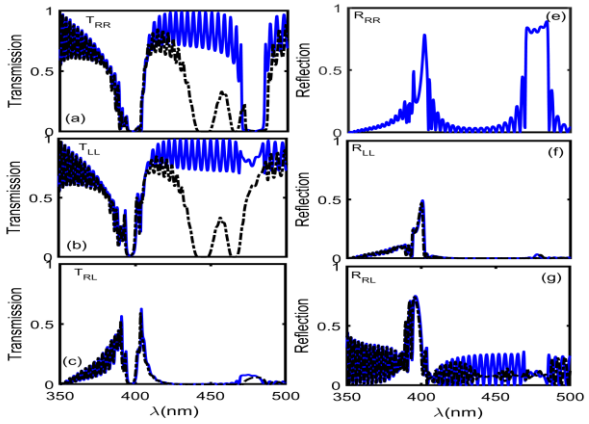
$$\begin{pmatrix} t_R \\ t_L \\ r_R \\ r_L \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t_{RR} & t_{RL} \\ t_{LR} & t_{LL} \\ r_{RR} & r_{RL} \\ r_{LR} & r_{LL} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_R \\ a_L \end{pmatrix} \quad (٦)$$

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

که a_R ، r_R و t_R به ترتیب دامنه‌های نور تابشی، بازتابی و تراگسیلی با قطبش راستگرد و a_L ، r_L و t_L به ترتیب دامنه‌های نور تابشی، بازتابی و تراگسیل با قطبش چپگرد می‌باشند. همچنین t_{RR} و t_{LL} ضرایب تراگسیل نور هم‌قطبش و t_{RL} ، t_{LR} ضرایب تراگسیلی نور با قطبش متقاطع هستند. برای نور بازتابی نیز به روش مشابه نمادگذاری می‌شود.

نتایج عددی و بحث

در محاسبات عددی، ماده کایرال‌ساختاری تک محوری با مشخصه‌های $\varepsilon_1=\varepsilon_2=2.7$ ، $\varepsilon_3=3.2$ همچنین نانوذرات نقره با مشخصه‌های $\varepsilon_0=5$, $\omega_p=1.367\times10^{16}\ Hz$ و $\gamma=3.03\times10^{13}\ Hz$ در نظر گرفته شده‌است. طیف تراگسیل و بازتاب ساختار تحت فرود عمود به صورت تابعی از طول موج برای $\chi=45$ در غیاب نانوذرات(خط‌ممتد) $f=0$ و در حضور نانوذرات(خط‌چین) $f=0.0005$ در شکل ۲ رسم شده‌است. در شکل(۲a)دو گاف فوتونی کاملا متفاوت درغیاب نانوذرات و در ناحیه طول موج اپتیکی برای نور با قطبش راستگرد مشاهده می‌شود. در حالیکه برای نور با قطبش چپگرد تنها یک گاف فوتونی قابل مشاهده‌است(شکل۲b). با مقایسه این دو شکل ملاحظه می‌شود که گاف فوتونی در ناحیه طول موجی $nm(400-390)$ یک گاف براگ عادی وابسته به قطبش نور است که پهنای آن برای نور با قطبش راستگرد بیشتر از نوری با قطبش چپگرد است و گاف فوتونی دیگر در محدوده طول موجی $nm(485-470)$ تنها برای نور با قطبش راستگرد ایجاد شده‌است. این گاف فوتونی جدید، گاف براگ دایروی نامیده می‌شود که به شدت وابسته به کایرالیتی ساختار است. این شکل در حضور نانوذرات برای $f=0.0005$ ظهور گاف باندهای جدیدی در طیف تراگسیلی را در نزدیکی طول‌موج‌های تشدیدی $nm(465-445)$ نشان می‌دهد که به علت جذب وابسته به تشدید پلاسمون‌های سطحی ایجاد شده و مستقل از قطبش نور می‌باشد. علاوه‌براین شکلهای (c-g)۲ بیانگر تزویج قطبش نور و ناهمسانگردی سیستم است که به دلیل تقارن‌های محیط $R_{RL}=R_{LR}$ و $T_{RL}=T_{LR}$ است و ما تنها حالات تزویجی R_{RL} و T_{RL} را در اینجا رسم نموده‌ایم . شکل‌های ۲(e-g-f) نمودارهای بازتاب متناظر را نشان می دهد که بیانگر بیشترین مقدار بازتاب نور راستگرد در ناحیه طول موجی براگ دایروی و بازتاب جزئی در ناحیه طول موجی براگ عادی می‌باشد. علاوه بر این بازتاب بسیارجزئی برای نور چپگرد در ناحیه براگ عادی قابل مشاهده است.

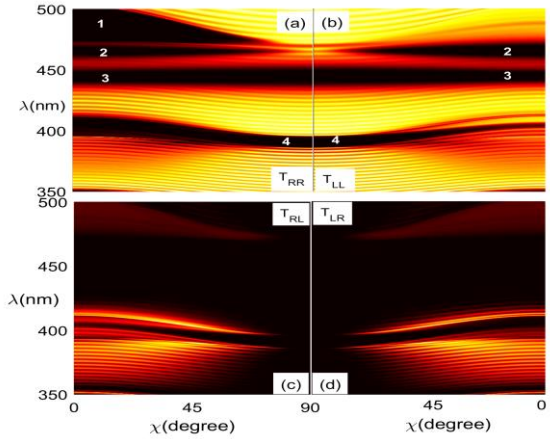


شکل۲ : تراگسیل و بازتاب بلورفوتونی متشکل از مواد نانوکامپوزیت کایرال ساختاری و دی الکتریک برای $f=0$ (خط ممتد) و $f=0.0005$ (خط چین)در فرود عمود($\theta=0$) و $\chi=45$ برای تمامی حالات قطبش دایروی.

در شکل ۳ و٤ به ترتیب تراگسیل و بازتاب نور به صورت تابعی از χ تحت تابش قائم در حضور نانوذرات با فاکتور پرکنندگی $f=0.0005$ رسم شده‌است. گافهای فوتونی در شکل ۳ با رنگ تیره مشخص شده‌است. گاف براگ عادی با شماره ۱، گاف فوتونی ناشی از جذب پلاسمون سطحی در حوالی طول موج تشدیدی $445nm$ با شماره۲و در حوالی طول موج تشدیدی $465nm$ با شماره۳ و گاف براگ دایروی نیز با شماره٤ نمایش داده شده است. همانطور که از شکل ۳a قابل مشاهده است در زاویه خمش $\chi=0$ گاف براگ دایروی برای T_{RR} بیشترین پهنا را دارد و با افزایش زاویه خمش پهنای این گاف فوتونی کاهش می‌یابد و به سمت طول‌موج‌های کوتاهتر جابجا می‌شود این گاف فوتونی در $\chi=90$ ناپدید می‌شود(گاف۱). پهنای گاف ناشی از جذب پلاسمون‌های سطحی در نزدیکی طول موج تشدیدی بزرگتر(گاف۲) با افزایش زاویه خمش کاهش می‌یابد و به سمت طول موج های بزرگتر جابجا می‌شود و در $\chi=90$ ناپدید می‌شود و پهنای گاف ناشی از جذب در حوالی طول موج تشدیدی کوتاهتر(گاف۳) تقریبا مستقل از χ بوده و حتی در $\chi=90$ نیز کماکان بدون تغییر پهنا باقی می‌ماند که شاهدی بر رفتار شبه همسانگردی سیستم است. پهنای گاف براگ عادی(گاف٤) نیز با

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

افزایش زاویه خمش کاهش یافته و به سمت طول موج‌های کوتاهتر جابجا می‌شود. این گاف فوتونی در $\chi = 90$ نیز وجود دارد. شکلهای ۳(c-g) نیز تزویج قطبش و ناهمسانگردی سیستم را در زوایای خمش کوچکتر نشان می‌دهد. لازم به ذکر است که $\chi = 90$ حالت شبه همسانگرد می‌باشد، هیچ تزویجی بین تراگسیل نورهای راستگرد و چپگرد وجود ندارد و همچنین امکان جداسازی تراگسیل نور با قطبش راستگرد و چپگرد نیز در تابش قائم وجود ندارد.

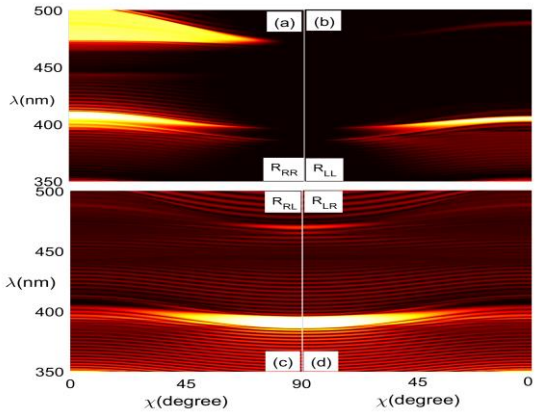


شکل۳ : تراگسیل بلورفوتونی متشکل از مواد نانوکامپوزیت کایرال ساختاری و دی الکتریک برای f=0.0005در فرود عمود $(\theta = 0)$

شکل ٤ برای $\chi \geq 45$ ماکزیمم طیف بازتاب را برای قطبش‌های متقاطع نورهای راستگرد و چپگرد در تابش قائم نشان می‌دهد بطوریکه در $\chi = 90$ هیچ بازتابی از نورهای هم‌قطبش در بلور فوتونی متشکل از نانوکامپوزیت‌های کایرال ساختاری قابل مشاهده نیست و بازتاب تنها برای قطبش‌های متقاطع به صورت ماکزیمم مقدار قابل مشاهده‌است. همچنین بازتابی از نور هم‌قطبش راستگرد در $\chi \leq 70$ در ناحیه طول موجی مربوط به براگ دایروی وجود دارد که پهنای آن با کاهش زاویه خمش، افزایش یافته و به سمت طول موج‌های بزرگتر جابجا می‌شود در حالی که چنین بازتابی برای نور چپگرد وجود ندارد. در ناحیه طول موجی براگ عادی نیز با کاهش زاویه خمش پهنای طول موجی بازتاب برای هر دو قطبش راستگرد و چپگرد افزایش می‌یابد و در $\chi = 0$ به بیشترین مقدار خود می‌رسد. این در حالی هست که برای قطبش متقاطع چنین بازتابی قابل مشاهده نیست.

نتیجه گیری

در این مقاله خواص تراگسیل و بازتاب یک ساختار پریودیک دی الکتریک–نانوکامپوزیت کایرال ساختاری تحت تابش قائم نور با قطبش دایروی مورد مطالعه قرار گرفته‌است. نتایج بیانگر ظهور سه نوع گاف فوتونی متفاوت در ساختار است. به طوریکه علاوه بر گاف فوتونی براگ عادی ، گاف براگ دایروی و گاف ناشی از جذب پلاسمون‌های سطحی در طیف تراگسیل قابل مشاهده‌است. تاثیر زاویه خمش بر هر یک از این گاف‌ها در یک بلور فوتونی حاوی نانوکامپوزیت کایرال ساختاری با $f = 0.0005$ مورد مطالعه قرارگرفته‌است.



شکل٤ : بازتاب بلورفوتونی متشکل از مواد نانوکامپوزیت کایرال ساختاری و دی الکتریک برای $f = 0.0005$ در فرود عمود $(\theta = 0)$

مرجع‌ها

[۱] Mohamed MS, Hameed MF, El-Okr MM and Obayya SS.; "Characterization of one dimensional liquid crystal photonic crystal structure"; *Optik*;127,(2016)8774-81.

[۲] Brandão ER, Vasconcelos MS and Anselmo DH.; "Octonacci photonic crystals with negative refraction index materials"; *Optical Materials*. 62, (2016) 584-92.

[۳] M. Warner and E. M. Terentjev, Liquid Crystal Elastomers (Clarendon, 2003).

[۴] A. Lakhtakia and R. Messier, Sculptured Thin Films: Nanoengineered Morphology and Optics (SPIE, 2005).

[۵] M. Faryad and A. Lakhtakia, "The circular Bragg phenomenon," Adv.Opt. Photon. 6, (2014) 225–292.

[۶] J. Mendoza, J. A. Reyes, and C. G. Avendaño, "Optical band gap in a nanocomposite structurally chiral medium," Phys.Rev. A 94, (2016) 053839.

[۷] C. Avendaño and L. Palomares. "Omnidirectional narrow optical filters for circularly polarized light in a nanocomposite structurally chiral medium," Appl. Optic. 57(2018) 3119–3125.

[۸] M. Franco-Ortiz, A. Corella-Madueno, R. Rosas-Burgos, J. Reyes, C. Avendano, "Electrically tuned optical reflection band for an artificial helicoidal structure" J. Mod. Optic. 65 (2018) 1994–2005.

[۹] S. Shirin, A. Madani, and S. R .Entezar. "Tunable lateral shift of the reflected optical beams from a nanocomposite structurally chiral medium. Optical Materials," 107, (2020).110026.

[۱۰] C. G. Avendano, I. Molina, and J. A. Reyes, Liq. Cryst. 40, 172 (2013).

[۱۱] A. Lakhtakia, B. Michel, and W. S Weiglhofer, J. Phys. D: Appl. Phys. 30, (1997) 230.

[۱۲] D.W. Berreman, "Optics in smoothly varying anisotropic planar structures: application to liquid-crystal twist cells," J. Opt. Soc. Am. 63 (1973) 1374–1380.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بررسی اصول اولیه ویژگی‌های الکترونی و اپتیکی نیمرسانای InN در فاز Pnma

مجیدیان سرمزده ، مسعود[۱] ؛ ولی، رشید[۱]

[۱]دانشکده فیزیک، دانشگاه دامغان، دامغان، ایران

چکیده

در این مقاله برخی ویژگی‌های الکترونی (چگالی حالت‌ها، ساختار نواری) و اپتیکی (تابع دی‌الکتریک، ضریب شکست، تابع اتلاف انرژی و بازتابش اپتیکی) نیمرسانای InN در فاز اورتورومبیک جدیداً پیش بینی شده با گروه فضایی Pnma مورد بررسی قرار گرفته است. محاسبات به روش امواج تخت تقویت شده خطی با پتانسیل کامل (FP-LAPW) در چهارچوب نظریه تابعی چگالی(DFT) انجام شده است. نتایج الکترونی نشان می‌دهد که InN در این فاز یک نیمرسانا با گاف انرژی مستقیم در حدود ۰,۹۶eV است که از فاز وورتزایت آن اندکی بزرگتر است. نتایج اپتیکی نشان می‌دهد که ثابت دی‌الکتریک استاتیک، انرژی‌های پلاسمونی، ضریب شکست و ناهمسانگردی در فاز Pnma از فاز وورتزایت InN تفاوت قابل ملاحظه‌ای دارد. برای InN در فاز Pnma دو انرژی پلاسمونی به دست آمده است. میزان بازتابش اپتیکی در این فاز در اکثر بازه‌های انرژی کمتر از فاز وورتزایت است.

واژه های کلیدی: *نظریه تابعی چگالی، InN، ویژگی‌های الکترونی، ویژگی‌های اپتیکی، فاز Pnma*

First principles investigation of the electronic and optical properties of InN semiconductor in the Pnma phase

Majidiyan Sarmazdeh, Masoud[1]; Vali, Rashid[1]

[1] School of Physics, Damghan University, Damghan, Iran

Abstract

In this paper, some electronic (density of states, band structure) and optical properties (dielectric function, refractive index, energy loss function, and optical reflectivity) of InN, in new predicted orthorhombic phase with Pnma space group, have been investigated. The calculations are performed with the full-potential linearized augmented plane waves (FP-LAPW) in the density functional theory framework. The electronic results show that InN in the Pnma phase is a semiconductor with a direct band gap of 0.96eV which is larger than its Wurtzite phase. The optical results reveal that the static dielectric constant, plasmon energy, refractive index, and anisotropy in the Pnma phase are different in compare its Wurtzite phase. Two plasmon energies have been obtained for InN in the Pnma phase. The optical reflectivity of InN in this phase is less than its Wurtzite phase at most energy intervals.

***Keywords**: Density functional theory, InN, Electronic properties, Optical properties, Pnma phase*

PACS No. 71, 78

مقدمه

نمونه‌ای از مواد برای نیمرساناهای نسل سوم، نیمرساناهای گروه III-N هستند. نیمرساناهای این گروه مانند AlN، GaN و InN در فاز وورتزایت با گروه فضایی $P6_3mc$ متبلور می‌شوند و کاربردهای گوناگونی در صنعت میکروالکترونیک دارند [۱]. علاوه بر فاز معمول وورتزایت، این نیمرساناها فازهای شبه پایدار دیگری دارند. اخیراً پژوهش‌های زیادی بر روی چند شکلی‌های این نیمرساناها انجام شده است و نتایج نشان می‌دهد که ویژگی‌های فیزیکی فازهای پایدار به دست آمده، از فازهای معمول آنها متفاوت و گاهی بهتر است [۲-۴]. به عنوان مثال در مورد AlN مشخص شده است که گاف نواری فازهای پیشبینی شده $Pnm2_1$، Pbam، Pbca و Cmcm از گاف نواری فاز وورتزایت آن کوچکتر است [۲]. اخیراً در سال ۲۰۱۸، Q.Fan و همکارانش یک فاز جدید اورتورومبیک با گروه فضایی Pnma برای نیمرساناهای

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

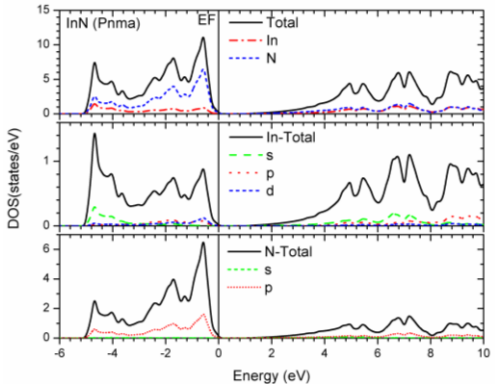
InN، AlN و GaN پیشبینی می‌کنند و نشان می‌دهند که این نیمرساناها در این فاز از لحاظ مکانیکی و دینامیکی پایدار هستند [۵]. آنها برخی از خواص الکترونی، ترمودینامیکی و مکانیکی این ترکیبات را بررسی کردند. از آنجایی که InN در اپتیک کاربرد دارد، در این مقاله سعی شده است که با استفاده از نظریه تابعی چگالی و روش‌های محاسباتی، علاوه بر ویژگی‌های الکترونی، برخی از کمیت‌های اپتیکی ترکیب InN در فاز Pnma محاسبه و با فاز معمول وورتزایت آن مقایسه شود.

روش انجام محاسبات

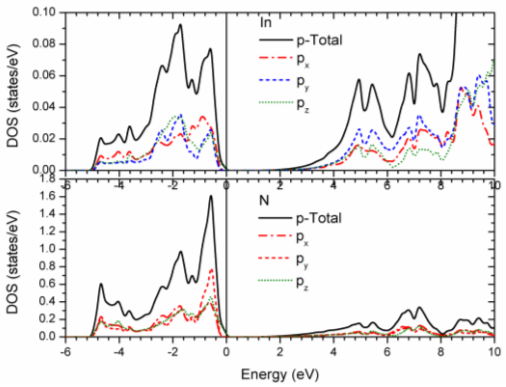
محاسبات به روش امواج تخت تقویت شده خطی با پتانسیل کامل (FP-LAPW) در چهارچوب نظریه تابعی چگالی و با استفاده از بسته محاسباتی WIEN2k انجام شده است [۶]. برای بررسی دقیقتر خواص الکترونی و اپتیکی برای جمله پتانسیل همبستگی-تبادلی، از پتانسیل بک-جانسون اصلاح شده (TB-mBJ-GGA) استفاده شده است [۷و۸]. مقدار انرژی جدایی بین حالت‌های مغزی و ظرفیت، ۶/۵Ry-، مقدار مناسب پارامتر $R_{MT}\times k_{max}$ برابر ۷/۰ (در اینجا R_{MT} کوچکترین شعاع کره مافین-تین و k_{max} طول بردار موج قطع است) و تعداد نقاط k در اولین منطقه بریلوئن برابر ۵۰۰۰ نقطه (معادل ۵۸۸ نقطه در منطقه کاهش ناپذیر بریلوئن) در نظر گرفته شده است. برای حل معادلات کوهن-شام از روش خود-سازگار استفاده شده است. معیار همگرایی برای خودسازگاری به گونه‌ای انتخاب شده که اگر تفاضل انتگرال چگالی بار بین دو چرخه متوالی کمتر از e ۰/۰۰۰۱ و اختلاف انرژی Ry ۰/۰۰۰۰۱ باشد، چرخه متوقف می‌شود. تمامی محاسبات بر روی ساختار بهینه شده InN در فاز Pnma انجام شده است. محاسبات اپتیکی در تقریب فاز تصادفی (RPA) انجام شده است.

بحث و نتایج

در بررسی خواص الکترونی ترکیب InN در فاز Pnma، چگالی حالت‌های الکترونی و ساختار نواری بررسی شده است. شکل ۱ چگالی حالت‌های کلی و جزئی InN، در فاز Pnma در بازه انرژی ۶eV- تا ۱۰eV را نشان می‌دهد. انرژی فرمی بر روی صفر انرژی تنظیم و با خط توپر مشخص شده است. در زیر تراز فرمی کاملاً مشخص است که عمده حالت‌های الکترونی مربوط به اربیتال‌های $2p^3$ اتم N است. اما از حدود ۴ eV- تا انتهای ناحیه ظرفیت (حدود ۶ eV-) اتم‌های In نیز سهم قابل ملاحظه‌ای نسبت به اتم‌های N دارند. این سهم بر اساس چگالی حالت‌های جزئی، مربوط به اربیتال‌های $5s^2$ اتم In است. بین ناحیه ظرفیت و ناحیه هدایت در یک فاصله انرژی در حدود ۰/۹۶ eV هیچ حالتی دیده نمی‌شود. در ناحیه هدایت تقریباً هر دو اتم In و N سهم‌های قابل مقایسه‌ای با هم دارند که عمدتاً از اربیتال‌های p آنها نشات می‌گیرد.



شکل ۱: چگالی حالت‌های کلی و جزئی InN در فاز Pnma.

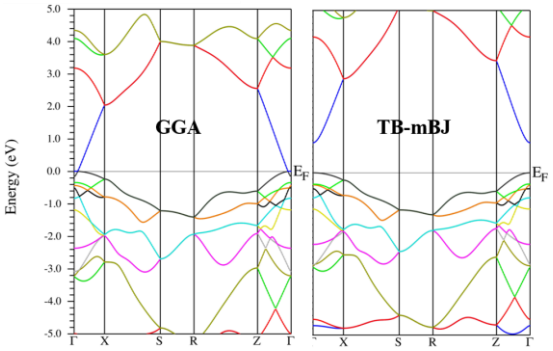


شکل ۲: چگالی حالت‌های اربیتال p در اتم‌های In و N

نکته قابل توجه در فاز Pnma در چگالی حالت‌ها، در مورد تبهگنی اربیتال‌های p اتم‌های In و N است. در شکل ۲ چگالی حالت‌های اربیتال‌های p نشان داده شده است. همان طور که دیده می‌شود در فاز Pnma تبهگنی اربیتال‌های p کاملاً از هم جدا شده‌اند. این در حالی است که در فاز وورتزایت تنها تبهگنی p_z مجزا است. بنابراین به نظر می‌رسد در فاز Pnma به دلیل جهتگیری جدید اتم‌ها در ساختار و تغییر میدان‌های الکترواستاتیکی، میدان

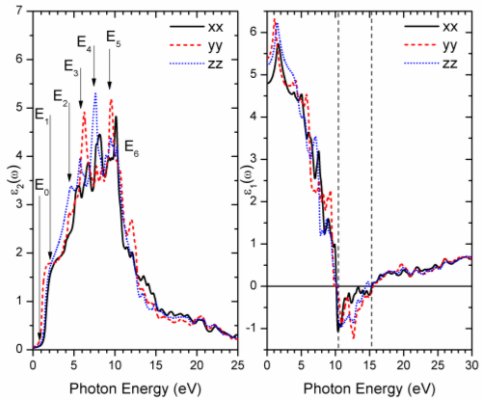
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بلوری ایجاد شده قدرت این را دارد تا تبهگنی اربیتال‌های p را از بین ببرد. ساختار نوارهای انرژی InN در فاز Pnma با دو تقریب GGA و TB-mBJ در شکل ۳ نشان داده شده است. با استفاده از GGA برای این ساختار گاف بسیار کوچک و بسته‌ای دیده می‌شود. چنین رفتاری به صورت نظری، در مورد فاز وورتزایت نیز دیده شده است [۹]. اما با استفاده از پتانسیل TB-mBJ گاف باز و در سیستم یک گاف انرژی مستقیم در حدود ۰/۹۶eV مشاهده می‌شود. این مقدار گاف از گاف نواری فاز وورتزایت InN اندکی بزرگتر است ولی همانند فاز وورتزایت نوع گاف مستقیم است. مقدار گاف انرژی تجربی برای فاز وورتزایت InN بین ۰/۷ eV تا ۰/۹ eV گزارش شده است [۱۰].



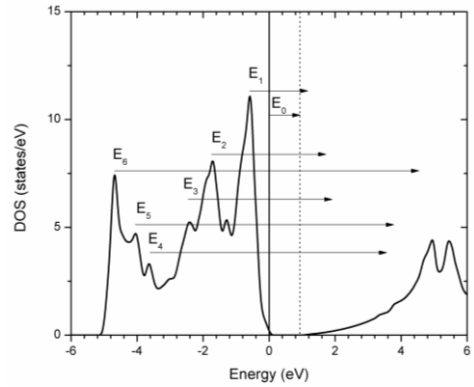
شکل ۳: ساختار نوارهای انرژی با تقریب GGA و TB-mBJ

تغییرات قسمت حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک InN در فاز Pnma بر حسب انرژی فوتون فرودی در شکل ۴ نشان داده شده است. همان طور که می‌دانیم مقدار تابع دی‌الکتریک در انرژی‌های بیسار پایین، تابع دی‌الکتریک استاتیک (الکترونی) را مشخص می‌کند. این کمیت در محاسبه برخی کمیت‌های مهم دیگر مانند ثابت استتار بار از اهمیت برخوردار است. تابع دی‌الکتریک استاتیک در جدول ۱ خلاصه شده‌اند. مشاهده می‌شود که اولاً این مقادیر در سه راستا متفاوت هستند و تفاوت آنها قابل توجه است و ثانیاً مقدار تابع دی‌الکتریک استاتیک در جهت y از جهات دیگر بیشتر است. مقادیر به دست آمده نسبت به مقادیر حدود۵/۸ فاز وورتزایت کوچکتر است [۱۱]. علاوه بر تابع دی‌الکتریک استاتیک، ریشه‌های قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک مفهوم فیزیکی دارند. این ریشه‌ها از طرفی به انرژی‌های پلاسمونی در ساختار مربوط می‌شوند و از طرف دیگر بازه ممنوعه برای انتشار امواج الکترومغناطیس را معین می‌کنند.



شکل ۴: تغییرات قسمت حقیقی (راست) و موهومی (چپ) تابع دی‌الکتریک بر حسب انرژی فوتون فرودی

محاسبات ما نشان می‌دهد که برای راستاهای x و y یک جفت ریشه وجود دارد که یک بازه انرژی ۵/۲۲eV و ۵/۳۴ eV را به ترتیب در راستای x و y ایجاد می‌کنند. در حالی که برای راستای z دو جفت ریشه وجود دارد که بازه ممنوعه انرژی ۴/۳۰eV و ۰/۲۲ eV را در بر دارد. همان طور که می‌دانیم قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک به فرایندهای جذب و انتقال‌های اپتیکی مربوط می‌شود. محدوده قله‌های برجسته در این تابع در شکل ۴ مشخص شده‌اند.



شکل ۵: انتقال‌های محتمل الکترونی بر اساس چگالی حالت‌ها

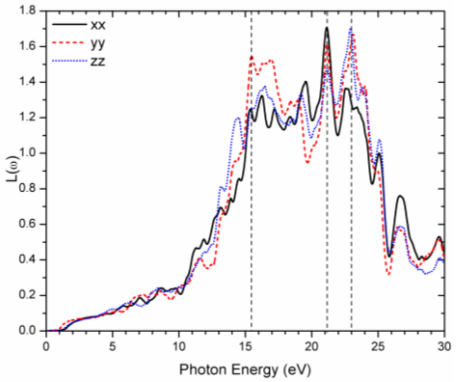
بر اساس ساختار نواری و چگالی حالت‌ها، حالت‌های محتمل برای انتقلات اپتیکی در شکل ۵ مشخص شده‌اند. انرژی E_0 به انتقال اپتیکی از بالاترین حالت پر در نوار ظرفیت که عمدتاً از حالت‌های N-p تشکیل شده‌اند به پایین‌ترین حالت خالی در نوار هدایت که شامل اربیتال‌های s اتم‌های نیتروژن و ایندیوم است، مربوط می‌شود. اکثر قله‌های مشخص شده از انتقال‌هایی از اربیتال‌های p اتم نیتروژن نشات می‌گیرند به غیر از قله‌های E_5 و E_6 که بیشتر به حالت‌های s اتم ایندیوم در انتهای ناحیه ظرفیت به درون

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

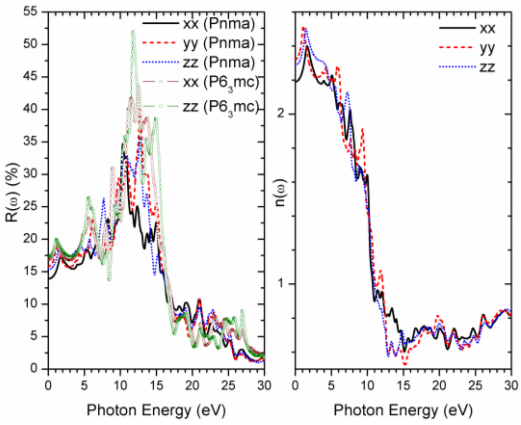
ناحیه هدایت مربوط هستند. تابع اتلاف انرژی InN در فاز Pnma در شکل ۶ نشان داده شده است. مشاهده می‌شود که یک قله برجسته در حدود ۱۵/۵۰eV برای سه راستا دیده می‌شود که به ریشه محاسبه شده برای قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک نزدیک است. علاوه بر این بزرگترین قله‌ها در تابع اتلاف نیز انرژی پلاسمون‌های حجمی در ترکیب را مشخص می‌کنند که در اینجا در بالای ۲۱eV دیده می‌شوند. بنابراین برای این ساختار دو انرژی پلاسمونی وجود دارد. مقادیر دقیق انرژی‌های پلاسمونی در جدول ۱ آورده شده است.

جدول ۱: تابع دی‌الکتریک استاتیک، ضریب شکست استاتیک، بیشینه ضریب شکست، انرژی‌های پلاسمونی و حد انرژی پایین بازتابش InN در فاز Pnma

جهت	ε_o	n_o	$n(\omega)_{max}$	$\hbar\omega_p^1$ (eV)	$\hbar\omega_p^2$ (eV)	R_o (%)
x	۴/۸۰	۲/۱۹	۲/۴۰@۱/۶۲eV	۱۵/۳۹	۲۱/۱۳eV	۱۳/۹۲
y	۵/۳۹	۲/۳۲	۲/۵۲@۱/۱۰eV	۱۵/۴۷	۲۳/۱۲eV	۱۵/۸۴
z	۵/۲۳	۲/۲۹	۲/۵۰@۱/۴۸eV	۱۵/۴۷	۲۲/۹۲eV	۱۵/۳۳



شکل ۶: تابع اتلاف انرژی InN در فاز Pnma



شکل ۷: ضریب شکست و بازتابش اپتیکی InN در فاز Pnma

تغییرات ضریب شکست و بازتابش اپتیکی ترکیب InN در فاز Pnma بر حسب انرژی فوتون فرودی در شکل ۷ آورده شده است. مقدار ضریب شکست استاتیک در فاز Pnma در سه راستای مختلف با یکدیگر تفاوت قابل ملاحظه‌ای دارد و رفتار ناهمسانگردی آن بالا است. مقدار ضریب شکست استاتیک برای فاز وورتزایت InN در راستای x و z به ترتیب ۲/۳۹ و ۲/۴۲ است که از مقادیر فاز Pnma بزرگتر هستند. در نمودار بازتابش مشاهده می‌شود که حد انرژی پایین بازتابش اپتیکی برای فاز Pnma نسبت به فاز وورتزایت کمتر و زیر ۱۶ درصد است. در مقایسه با بازتابندگی فاز وورتزایت، تقریباً در اکثر بازه‌های انرژی میزان بازتابش اپتیکی فاز Pnma کمتر است. بنابراین به نظر می‌رسد که شفافیت فاز Pnma نسبت به فاز وورتزایت بیشتر باشد.

نتیجه‌گیری

بر اساس نظریه تابعی چگالی و روش‌های محاسباتی برخی از ویژگی‌های الکترونی و اپتیکی InN در فاز جدیداً پیشبینی شده‌ی اورتورومبیک با گروه فضایی Pnma محاسبه شد. نتایج الکترونی نشان داد که InN در این فاز یک نیمرسانا با گاف مستقیمی در حدود ۰/۹۶eV است که اندکی از فاز وورتزایت آن بیشتر است. مشخص شد که میدان بلوری در این فاز توانایی از بین بردن تبهگنی اربیتال‌های p اتم‌های In و N را دارد. مقادیر تابع دی-الکتریک استاتیک نسبت به فاز وورتزایت کمتر است. در این فاز بازه ممنوعه انرژی برای امواج الکترومغناطیس در حدود ۵/۴eV است. انتقال‌های اپتیکی محتمل بر اساس قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک و چگالی حالت‌ها بررسی شد. مشخص شد در این ساختار دو انرژی پلاسمونی وجود دارد. همچنین میزان بازتابندگی این فاز نسبت به فاز وورتزایت در اکثر بازه‌های انرژی کمتر است.

مرجع‌ها

[1] H. Yue et al., *Journal of Semiconductors* **33**, No. 8 (2012) 081001.
[2] R. Yang et al., *Journal of Physics and Chemistry of Solids* **104** (2017) 68-78.
[3] S. Louhibi-Fasla et al., *Physics Procedia* **55** (2014) 324-328.
[4] C. Liu et al., *Computational Materials Science* **117** (2016) 496-501.
[5] Q. Fan et al., *Chemistry–A European Journal* **24**, No. 65 (2018) 17280-17287.
[6] W. Kohn et al., *The Journal of Physical Chemistry* **100**, No.31 (1996) 12974-12980.
[7] P. Blaha et al., *Computer Physics Communications* **147** (2002) 71-76.
[8] F. Tran et al., *Physical review letters* **102**, No.22 (2009) 226401.
[9] J. A. Camargo-Martinez and R. Baquero, *Rev. Mex. Fis.* **59**, (2013) 453.
[10] L. F. Jiang et al., *Appl. Phys. A* **78** (2004) 89–93.
[11] M. Alevli et al., *Appl. Phys. Lett.* **89** (2006) 112119.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بلوکه‌شدن فوتون در یک سامانه متشکل از دو کاواک اپتومکانیک

حسنی ندیکی ، مرضیه ؛ توسلی، محمدکاظم

گروه اپتیک و لیزر، دانشکده فیزیک، دانشگاه یزد

چکیده

در این مقاله به بررسی اثر بلوکه‌شدن فوتون در یک سامانه که شامل دو کاواک اپتومکانیک است می‌پردازیم. هر کاواک دارای یک آینه متحرک است و دو کاواک با ثابت جفت‌شدگی ξ به یکدیگر مرتبط شده‌اند. به منظور مطالعه آمار فوتون‌ها، تابع همبستگی تک‌زمانه مرتبه دوم $g^{(2)}(0)$ را برای میدان تابشی کاواک به صورت تحلیلی مورد مطالعه قرار می‌دهیم. اثر اتلاف کاواک اپتیکی را نیز به صورت پدیده‌شناسی به هامیلتونی سامانه اضافه می‌کنیم. با فرض ضعیف بودن شدت لیزر دمش، بررسی خود را به ویژه‌حالت‌هایی در فضای هیلبرت با دو برانگیختگی فوتونی محدود کرده‌ایم. نتایج نشان می‌دهند که با تنظیم میزان جفت‌شدگی اپتومکانیکی دو کاواک، می‌توان بلوکه‌شدن فوتون را در بسامدهای مختلفی مشاهده کرد.

واژه های کلیدی: *بلوکه شدن فوتون، کاواک اپتومکانیک، تابع همبستگی مرتبه دوم.*

Photon blockade in a system consisting of two optomechanical cavity

Hassani Nadiki, Marziyeh; Tavassoly, Mohammad Kazem

Optic and Laser Group, Faculty of Physics, Yazd University

Abstract

In this paper we investigate the blockade of photons in a system that includes two optomechanical cavities. Each cavity has a movable mirror connected to each other by a coupling constant ξ. In order to study the photon statistics, we analyze the one-time second-order correlation function for the cavity radiation field, analytically. We consider the effect of optical cavity loss to the Hamiltonian system phenomenologically. Due to the low intensity of pump laser, the study is limited to the states of Hilbert space with two-photon excitations. The results show that by tuning the degree of optomechanical coupling of the two cavities, photon blockade can be observed at some frequencies.

***Keywords**: Photon blockade, Cavity optomechanic, Second order correlation function.*

PACS No.

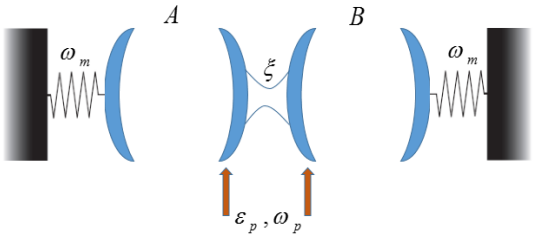
مقدمه

بلوکه‌شدن فوتون و فونون در حال حاضر یک موضوع تحقیقاتی مهم است و برای بسیاری از مطالعات اساسی و کاربردهای عملی حائز اهمیت است [۱]. اثر بلوکه‌شدن فوتون با اندازه‌گیری تابع همبستگی مرتبه دوم در زمان تأخیر صفر قابل تشخیص است. وجود غیرخطیت‌های قوی در یک سامانه کوانتومی که توسط یک میدان همدوس خارجی دمیده می‌شود، باعث بلوکه‌شدن فوتون و مانع از جفت‌شدگی فوتون‌های بعدی خواهد شد [۲]. نکته اصلی برای منابع تک‌فوتون با کیفیت بالا، تحقق بلوکه‌شدن فوتون قوی است. بنابراین، برای دست‌یابی به بلوکه‌شدن هر چه بهتر فوتون، تحقیقات قابل‌توجهی در انواع سامانه‌های کوانتومی از جمله کاواک اپتومکانیک انجام شده است [۳]. سامانه‌های اپتومکانیکی یکی از موضوعات جذاب در اپتیک کوانتومی به شمار می‌روند که در سال‌های اخیر مورد توجه قرار گرفته‌اند [٤]. در این پژوهش، اثر بلوکه‌شدن فوتون در یک سامانه که شامل دو کاواک اپتومکانیک است را مطالعه و مورد بررسی قرار می‌دهیم.

مدل فیزیکی

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

سامانه‌ای اپتومکانیکی مانند شکل ۱ را در نظر می‌گیریم. این سامانه متشکل از دو کاواک اپتومکانیک جفت‌شده با ثابت جفت‌شدگی ξ است. هر کاواک دارای یک آینه متحرک در یک انتها می‌باشد که همانند یک نوسانگر هماهنگ کوانتومی با جرم مؤثر m و بسامد ω_m رفتار می‌کند. هر دو کاواک توسط یک میدان پمپ ضعیف با بسامد ω_p و دامنه ε_p مورد دمش قرار می‌گیرند.



شکل ۱: طرح شماتیک برای یک سامانه شامل دو کاواک اپتومکانیک

هامیلتونی کل سامانه را در تقریب موج چرخان می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{2}\omega_c \hat{a}_i^{\dagger}\hat{a}_i + \sum_{i=1}^{2}\omega_m \hat{b}_i^{\dagger}\hat{b}_i - g_0\sum_{i=1}^{2}\hat{a}_i^{\dagger}\hat{a}_i(\hat{b}_i + \hat{b}_i^{\dagger}) - \xi(\hat{a}_1^{\dagger}\hat{a}_2 + \hat{a}_2^{\dagger}\hat{a}_1) + i\,\varepsilon_p\sum_{i=1}^{2}(\hat{a}_i^{\dagger}e^{-i\omega_p t} - \hat{a}_i e^{i\omega_p t}) \quad (۱)$$

که در آن، $\hat{a}_j^{\dagger})\hat{a}_j$ عمگر فوتونی نابودی (آفرینش) مد jام میدان با بسامد ω_c، $\hat{b}_j^{\dagger})\hat{b}_j$ عمگر فونونی نابودی (آفرینش) مربوط به حرکت نوسانی آینه‌ها با بسامد ω_m، g_0 قدرت جفت‌شدگی بین هر دو مد میدان و آینه مربوطه در همان کاواک، ξ ثابت جفت‌شدگی بین میدان‌های دو کاواک و ε_p قدرت جفت‌شدگی بین میدان دمش و میدان داخل هر کاواک را نشان می‌دهد.

در ادامه، برای تفسیر فیزیکی پدیده بلوکه‌شدن فوتون، قصد داریم نامیزانی در ترازهای انرژی را نشان دهیم. با اعمال تبدیل یکانی پلارون به صورت [۵]

$$\hat{U} = \exp[-\frac{g_0}{\omega_m}\hat{a}_1^{\dagger}\hat{a}_1(\hat{b}_1^{\dagger} - \hat{b}_1)]\exp[-\frac{g_0}{\omega_m}\hat{a}_2^{\dagger}\hat{a}_2(\hat{b}_2^{\dagger} - \hat{b}_2)] \quad (۲)$$

بر هامیلتونی (۱) در حد $\varepsilon_p \to 0$ به هامیلتونی زیر می‌رسیم:

$$\hat{H}_{eff} = \hat{U}\hat{H}\hat{U}^{\dagger} = \sum_{i=1}^{2}\omega_c \hat{a}_i^{\dagger}\hat{a}_i + \sum_{i=1}^{2}\omega_m \hat{b}_i^{\dagger}\hat{b}_i - \frac{g_0^{\,2}}{\omega_m}\sum_{i=1}^{2}(\hat{a}_i^{\dagger}\hat{a}_i)^2 - \xi(\hat{a}_1^{\dagger}\hat{a}_2 e^{-\frac{g_0}{\omega_m}(\hat{b}_1^{\dagger} - \hat{b}_1)} e^{\frac{g_0}{\omega_m}(\hat{b}_2^{\dagger} - \hat{b}_2)} - \hat{a}_2^{\dagger}\hat{a}_1 e^{\frac{g_0}{\omega_m}(\hat{b}_1^{\dagger} - \hat{b}_1)} e^{-\frac{g_0}{\omega_m}(\hat{b}_2^{\dagger} - \hat{b}_2)}). \quad (۳)$$

از هامیلتونی $\hat{H}_{eff}$ به‌دست آمده پیداست که یک برهم‌کنش نوع کرمانند بین فوتون‌ها با قدرت $\Delta_g = \frac{g_0^{\,2}}{\omega_m}$ مشاهده می‌شود. در حد $\varepsilon_p, \xi \to 0$ هامیلتونی $\hat{H}_{eff}$ قطری می‌شود و رابطه ویژه-مقداری زیر را برآورده می‌کند:

$$\hat{H}_{eff}\,|n_1, n_2, m_1, m_2\rangle = E_{n_1,n_2,m_1,m_2}\,|n_1, n_2, m_1, m_2\rangle. \quad (۴)$$

ویژه‌مقادیر متناظر با ویژه‌حالت‌های $|n_1, n_2, m_1, m_2\rangle$ به صورت زیر به‌دست می‌آیند:

$$E_{n_1,n_2,m_1,m_2} = \omega_c(n_1 + n_2) + \omega_m(m_1 + m_2) - \Delta_g(n_1^2 + n_2^2), \quad (۵)$$

که در این رابطه $n_1(n_2)$ تعداد فوتون‌های کاواک A(B) و $m_1(m_2)$ تعداد فونون‌های تشدیدگر مکانیکی را نشان می‌دهد. با جایگذاری $\hat{H}_{eff} = \hat{U}\hat{H}\hat{U}^{\dagger}$ در معادله ویژه‌مقداری به رابطه زیر می‌رسیم:

$$\hat{H}\,|n_1, n_2, \tilde{m}_1(n_1), \tilde{m}_2(n_2)\rangle = E_{n_1,n_2,m_1,m_2}\,|n_1, n_2, \tilde{m}_1(n_1), \tilde{m}_2(n_2)\rangle,$$

که در آن، حالت تعداد جابجا شده وابسته به فوتون به صورت $|\tilde{m}_1(n_1), \tilde{m}_2(n_2)\rangle = \hat{U}^{\dagger}|m_1, m_2\rangle$ تعریف شده است. برای حذف عامل وابسته به زمان، هامیلتونی (۱) در چارچوب چرخان توسط عملگر یکانی $\hat{R}(t) = \exp[-i\,\omega_c t\,(\hat{a}_1^{\dagger}\hat{a}_1 + \hat{a}_2^{\dagger}\hat{a}_2)]$ به صورت زیر به‌دست می‌آید:

$$\tilde{\hat{H}} = \sum_{i=1}^{2}\Delta_c \hat{a}_i^{\dagger}\hat{a}_i + \sum_{i=1}^{2}\omega_m \hat{b}_i^{\dagger}\hat{b}_i - g_0\sum_{i=1}^{2}\hat{a}_i^{\dagger}\hat{a}_i(\hat{b}_i + \hat{b}_i^{\dagger}) - \xi(\hat{a}_1^{\dagger}\hat{a}_2 + \hat{a}_2^{\dagger}\hat{a}_1) + i\,\varepsilon_p\sum_{i=1}^{2}(\hat{a}_i^{\dagger} - \hat{a}_i), \quad (۷)$$

که در آن $\Delta_c = \omega_c - \omega_p$ نامیزانی بسامدهای میدان‌های کاواک از میدان دمش را نشان می‌دهد. همان‌طور که از رابطه (۵) پیداست، به علت برهم‌کنش اپتومکانیکی، نامیزانی به اندازه $\Delta_g(n_1^2 + n_2^2)$ در ترازهای انرژی سامانه به‌وجود می‌آید که منشا وقوع پدیده بلوکه‌شدن فوتون است. اگر میدان دمش ضعیف اعمالی، شرط گذار تشدید تک‌فوتون $\Delta_c - \Delta_g = 0$ را برآورده کند، فوتون دوم به واسطه غیرتشدیدی بودن نمی‌تواند برانگیخته شود. احتمال گذارهای مختلف در سامانه را می‌توان با در نظر گرفتن دمش لیزری به عنوان یک جمله اختلالی به‌دست آورد. به این پدیده که در آن، حضور برانگیختگی اول در سامانه، مانع برانگیخته شدن سایر فوتون‌ها در سامانه می‌شود، بلوکه‌شدن فوتون گفته می‌شود.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

دینامیک بردار حالت سامانه

فرض کنید که دو مد کاواک ابتدا به حالت پایه سردسازی شده‌اند. برای میدان دمش به اندازه کافی ضعیف، این دمش می‌تواند به عنوان یک اختلال لحاظ شود، بنابراین تنها تعداد کمی فوتون در مد کاواک می‌توانند برانگیخته شوند. از این رو می‌توان بررسی خود را به زیرفضای محدودی از فضای هیلبرت میدان‌های کاواک محدود کرد. بنابراین، بردار حالت کلی سامانه در زیرفضای چندفوتونی به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$\left|\psi(t)\right\rangle=\sum_{n_1+n_2=0}^{2}\sum_{m_1,m_2=0}^{\infty}C_{n_1,n_2,m_1,m_2}(t)\left|n_1,n_2\right\rangle\left|\tilde{m}_1(n_1),\tilde{m}_2(n_2)\right\rangle, \qquad (۸)$$

که در این رابطه، $C_{n_1,n_2,m_1,m_2}(t)$ ضرایب دامنه احتمال برای حضور n_1 و n_2 برانگیختگی فوتونی و m_1 و m_2 برانگیختگی فونونی است که شرط بهنجارش را برآورده می‌کنند. رابطه (۸) را می‌توان به صورت زیر بازنویسی کرد:

$$\begin{aligned}\left|\psi(t)\right\rangle=\sum_{m_1,m_2=0}^{\infty}\{&C_{0,0,m_1,m_2}(t)\left|0,0,\tilde{m}_1(0),\tilde{m}_2(0)\right\rangle+C_{0,1,m_1,m_2}(t)\left|0,1,\tilde{m}_1(0),\tilde{m}_2(1)\right\rangle\\&+C_{1,0,m_1,m_2}(t)\left|1,0,\tilde{m}_1(1),\tilde{m}_2(0)\right\rangle+C_{1,1,m_1,m_2}(t)\left|1,1,\tilde{m}_1(1),\tilde{m}_2(1)\right\rangle\\&+C_{2,0,m_1,m_2}(t)\left|2,0,\tilde{m}_1(2),\tilde{m}_2(0)\right\rangle+C_{0,2,m_1,m_2}(t)\left|0,2,\tilde{m}_1(0),\tilde{m}_2(2)\right\rangle\}\end{aligned} \qquad (۹)$$

به منظور محاسبه تحلیلی تابع همدوسی تک‌زمانه مرتبه دوم میدان اپتیکی، اثر اتلاف کاواک را به صورت پدیده‌شناسی به هامیلتونی (۷) اضافه می‌کنیم. بنابراین هامیلتونی سامانه اپتومکانیکی به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$\tilde{\hat{H}}_{eff}=\tilde{\hat{H}}-i\frac{\kappa}{2}\sum_{i=1}^{2}\hat{a}_i^{\dagger}\hat{a}_i. \qquad (۱۰)$$

هدف ما در اینجا به‌دست آوردن ضرایب دامنه احتمال است. با استفاده از معادله شرودینگر وابسته به زمان $i\left|\dot{\psi}(t)\right\rangle=\tilde{\hat{H}}_{eff}\left|\psi(t)\right\rangle$، شش معادله دیفرانسیل جفت‌شده برای ضرایب $C_{n_1,n_2,m_1,m_2}(t)$ به صورت زیر به دست می‌آید:

$$\begin{aligned}\dot{C}_{0,0,m_1,m_2}=&-i\,E_{0,0,m_1,m_2}C_{0,0,m_1,m_2}-\varepsilon\sum_{l_1,l_2=0}^{\infty}C_{1,0,l_1,l_2}\left\langle\tilde{m}_1(0),\tilde{m}_2(0)\right|l_1(1),l_2(0)\rangle\\&-\varepsilon\sum_{l_1,l_2=0}^{\infty}C_{0,1,l_1,l_2}\left\langle\tilde{m}_1(0),\tilde{m}_2(0)\right|l_1(0),l_2(1)\rangle,\\\dot{C}_{0,1,m_1,m_2}=&-i\,E_{0,1,m_1,m_2}C_{0,1,m_1,m_2}+i\,\xi\sum_{l_1,l_2=0}^{\infty}C_{1,0,l_1,l_2}\left\langle\tilde{m}_1(0),\tilde{m}_2(1)\right|l_1(1),l_2(0)\rangle\\&-\varepsilon\sum_{l_1,l_2=0}^{\infty}C_{1,1,l_1,l_2}\left\langle\tilde{m}_1(0),\tilde{m}_2(1)\right|l_1(1),l_2(1)\rangle\\&-\varepsilon\sum_{l_1,l_2=0}^{\infty}C_{0,0,l_1,l_2}\left\langle\tilde{m}_1(0),\tilde{m}_2(1)\right|l_1(0),l_2(0)\rangle\\&-\sqrt{2}\,\varepsilon\sum_{l_1,l_2=0}^{\infty}C_{0,2,l_1,l_2}\left\langle\tilde{m}_1(0),\tilde{m}_2(1)\right|l_1(0),l_2(2)\rangle-\frac{\kappa}{2}C_{0,1,m_1,m_2},\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\dot{C}_{1,0,m_1,m_2}=&-i\,E_{1,0,m_1,m_2}C_{1,0,m_1,m_2}+i\,\xi\sum_{l_1,l_2=0}^{\infty}C_{0,1,l_1,l_2}\left\langle\tilde{m}_1(1),\tilde{m}_2(0)\right|l_1(0),l_2(1)\rangle\\&-\varepsilon\sum_{l_1,l_2=0}^{\infty}C_{1,1,l_1,l_2}\left\langle\tilde{m}_1(1),\tilde{m}_2(0)\right|l_1(1),l_2(1)\rangle\\&-\varepsilon\sum_{l_1,l_2=0}^{\infty}C_{0,0,l_1,l_2}\left\langle\tilde{m}_1(1),\tilde{m}_2(0)\right|l_1(0),l_2(0)\rangle\\&-\sqrt{2}\,\varepsilon\sum_{l_1,l_2=0}^{\infty}C_{2,0,l_1,l_2}\left\langle\tilde{m}_1(1),\tilde{m}_2(0)\right|l_1(2),l_2(0)\rangle-\frac{\kappa}{2}C_{1,0,m_1,m_2},\\\dot{C}_{1,1,m_1,m_2}=&-i\,E_{1,1,m_1,m_2}C_{1,1,m_1,m_2}+i\,\sqrt{2}\,\xi\sum_{l_1,l_2=0}^{\infty}C_{0,2,l_1,l_2}\left\langle\tilde{m}_1(1),\tilde{m}_2(1)\right|l_1(0),l_2(2)\rangle\\&+i\,\sqrt{2}\,\xi\sum_{l_1,l_2=0}^{\infty}C_{2,0,l_1,l_2}\left\langle\tilde{m}_1(1),\tilde{m}_2(1)\right|l_1(2),l_2(0)\rangle\\&-\varepsilon\sum_{l_1,l_2=0}^{\infty}C_{0,1,l_1,l_2}\left\langle\tilde{m}_1(1),\tilde{m}_2(1)\right|l_1(0),l_2(1)\rangle\\&-\varepsilon\sum_{l_1,l_2=0}^{\infty}C_{1,0,l_1,l_2}\left\langle\tilde{m}_1(1),\tilde{m}_2(1)\right|l_1(1),l_2(0)\rangle-\frac{\kappa}{2}C_{1,1,m_1,m_2}-\frac{\kappa}{2}C_{0,1,m_1,m_2},\\\dot{C}_{2,0,m_1,m_2}=&-i\,E_{2,0,m_1,m_2}C_{2,0,m_1,m_2}+i\,\sqrt{2}\,\xi\sum_{l_1,l_2=0}^{\infty}C_{1,1,l_1,l_2}\left\langle\tilde{m}_1(2),\tilde{m}_2(0)\right|l_1(1),l_2(1)\rangle\\&-\sqrt{2}\,\varepsilon\sum_{l_1,l_2=0}^{\infty}C_{1,0,l_1,l_2}\left\langle\tilde{m}_1(2),\tilde{m}_2(0)\right|l_1(1),l_2(0)\rangle-\kappa C_{2,0,m_1,m_2},\\\dot{C}_{0,2,m_1,m_2}=&-i\,E_{0,2,m_1,m_2}C_{0,2,m_1,m_2}+i\,\sqrt{2}\,\xi\sum_{l_1,l_2=0}^{\infty}C_{1,1,l_1,l_2}\left\langle\tilde{m}_1(0),\tilde{m}_2(2)\right|\tilde{l}_1(1),\tilde{l}_2(1)\rangle\\&-\sqrt{2}\,\varepsilon\sum_{l_1,l_2=0}^{\infty}C_{0,1,l_1,l_2}\left\langle\tilde{m}_1(0),\tilde{m}_2(2)\right|l_1(0),l_2(1)\rangle-\kappa C_{0,2,m_1,m_2},\end{aligned} \qquad (۱۱)$$

در حالی که رابطه زیر نیز برقرار است:

$$\begin{aligned}&\left\langle\tilde{m}_1(n_1'),\tilde{m}_2(n_2')\right|\tilde{l}_1(n_1),\tilde{l}_2(n_2)\rangle=\\&\left\langle m_1,m_2\right|e^{\frac{g_0}{\omega_m}(n_1-n_1')(\hat{b}_1^{\dagger}-\hat{b}_1)}e^{\frac{g_0}{\omega_m}(n_2-n_2')(\hat{b}_2^{\dagger}-\hat{b}_2)}\left|l_1,l_2\right\rangle.\end{aligned} \qquad (۱۲)$$

همان‌طور که بیان شد در رژیم دمش ضعیف، فقط تعداد کمی از فوتون‌ها برانگیخته می‌شوند. در حد $\varepsilon_p\to 0$ دو مد کاواک در حالت پایه باقی می‌مانند. بنابراین $C_{0,1,m_1,m_2}$ و $C_{1,0,m_1,m_2}$ از مرتبه ε_p و $C_{1,1,m_1,m_2}$، $C_{0,2,m_1,m_2}$ و $C_{2,0,m_1,m_2}$ از مرتبه ε_p^2 هستند و مرتبه‌های بالاتر ε_p در رژیم دمش ضعیف کنار گذاشته می‌شوند. این روش به طور گسترده در سامانه‌های اپتومکانیکی برای مطالعه آمار فوتونی مورد استفاده قرار گرفته است [۶]. با این فرض و با استفاده از رابطه (۱۲)، معادلات دیفرانسیل رابطه (۱۱) را بازنویسی می‌کنیم و جواب آنها را در حالت پایا به صورت زیر به دست می‌آوریم:

$$\begin{aligned}&C_{0,0,0,0}(t)=1,\\&C_{0,1,0,0}(t)=C_{1,0,0,0}(t)=-\frac{2\,\varepsilon_p\,e^{\frac{1}{2}(\frac{g_0}{\omega_m})^2}}{e^{(\frac{g_0}{\omega_m})^2}\left[2i\,(\Delta_c-\Delta_g)+\kappa\right]-2i\,\xi},\end{aligned} \qquad (۱۵)$$

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

$$C_{1,1,0,0}(t)=-\frac{2\,\varepsilon_p e^{\left(\frac{g_0}{\omega_m}\right)^2}\left(4\,\varepsilon_p e^{\left(\frac{g_0}{\omega_m}\right)^2}\left(2i\,(\Delta_c-2\Delta_g)+\kappa\right)+e^{\frac{3}{2}\left(\frac{g_0}{\omega_m}\right)^2}\kappa\left(2i\,(\Delta_c-2\Delta_g)+\kappa\right)+8i\,\varepsilon_p\xi\right)}{\left(e^{\left(\frac{g_0}{\omega_m}\right)^2}\left(2(\Delta_c-\Delta_g)-i\kappa\right)-2\xi\right)\left(e^{2\left(\frac{g_0}{\omega_m}\right)^2}\left(2(\Delta_c-2\Delta_g)-i\kappa\right)\left(4i\,(\Delta_c-\Delta_g)+\kappa\right)-8i\,\xi^2\right)},$$

$$C_{2,0,0,0}(t)=C_{0,2,0,0}(t)=\frac{2\sqrt{2}\,\varepsilon_p e^{\left(\frac{g_0}{\omega_m}\right)^2}\left(\varepsilon_p e^{\left(\frac{g_0}{\omega_m}\right)^2}\left(4(\Delta_c-\Delta_g)-i\kappa\right)+4\varepsilon_p\xi+e^{\frac{1}{2}\left(\frac{g_0}{\omega_m}\right)^2}\kappa\xi\right)}{\left(e^{\left(\frac{g_0}{\omega_m}\right)^2}\left(2(\Delta_c-\Delta_g)-i\kappa\right)-2\xi\right)\left(e^{2\left(\frac{g_0}{\omega_m}\right)^2}\left(2i\,(\Delta_c-2\Delta_g)+\kappa\right)\left(4i\,(\Delta_c-\Delta_g)+\kappa\right)+8\xi^2\right)},$$

محاسبه تحلیلی تابع همبستگی تک زمانه مرتبه دوم

آمار فوتونی مد اپتیکی با عملگر نابودی $\hat{a}$ توسط تابع همبستگی تک‌زمانه مرتبه دوم به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$g^{(2)}(0)=\frac{\langle\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}\rangle}{\langle\hat{a}^\dagger\hat{a}\rangle^2}, \qquad (۱۶)$$

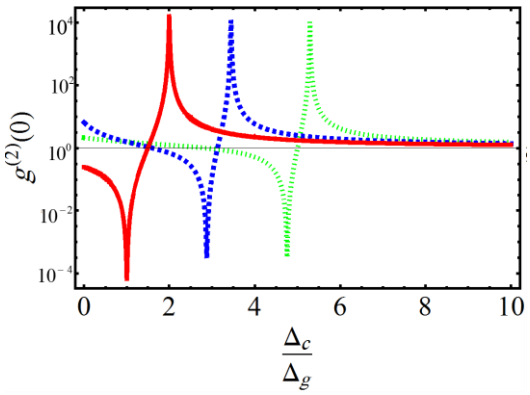
که در آن $g^{(2)}(0)<1$ معادل آمار زیرپواسونی فوتون‌ها و حد $g^{(2)}(0)\to 0$ بلوکه‌شدن فوتون را نشان می‌دهد به‌طوری‌که فقط یک فوتون در مد اپتیکی می‌تواند برانگیخته شود. برای سامانه مورد مطالعه، تابع همبستگی مرتبه دوم برای مد اپتیکی $\hat{a}_1$ به صورت زیر به‌دست می‌آید:

$$g^{(2)}(0)=\frac{\langle\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_1\hat{a}_1\rangle}{\langle\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_1\rangle^2}=\frac{2\left|C_{2,0,0,0}\right|^2}{\left(\left|C_{1,0,0,0}\right|^2+\left|C_{1,1,0,0}\right|^2+\left|C_{2,0,0,0}\right|^2\right)^2}, \qquad (۱۷)$$

در رژیم دمش ضعیف می‌توان فرض کرد که $C_{0,0,0,0}\gg C_{1,0,0,0},C_{0,1,0,0}\gg C_{2,0,0,0},C_{1,1,0,0},C_{0,2,0,0}$، در این صورت رابطه بالا به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$g^{(2)}(0)\approx\frac{2\left|C_{2,0,0,0}\right|^2}{\left(\left|C_{1,0,0,0}\right|^2\right)^2}. \qquad (۱۸)$$

با استفاده از روابط (۱۵) و (۱۸) جواب تابع همبستگی تک‌زمانه مرتبه دوم به صورت تحلیلی به‌دست می‌آید. در شکل ۲ تابع همبستگی مرتبه دوم میدان اپتیکی داخل کاواک بر حسب $\frac{\Delta_c}{\Delta_g}$ برای پارامترهای $\xi=0,\frac{g_0}{2},g_0$ رسم شده است. همان‌طور که بیان شد ویژه‌مقادیر انرژی در حد $\xi\to 0$ از رابطه (۵) به‌دست می‌آید. اگر میدان دمش در شرط گذار تشدید تک‌فوتونی یعنی $\Delta_c=\Delta_g$ تنظیم شود نشان‌دهنده بلوکه‌شدن فوتون دوم است.



شکل ۲: تابع همبستگی تک‌زمانه مرتبه دوم میدان تابشی کاواک در یک سامانه اپتومکانیکی. نمودارهای پیوسته (قرمزرنگ) برای $\xi=0$، خط‌چین آبی‌رنگ برای $\xi=\frac{g_0}{2}$ و نقطه‌چین سبزرنگ برای $\xi=g_0$ رسم شده‌اند. دیگر پارامترهای در نظر گرفته شده عبارتند از $\frac{g_0}{\omega_m}=\frac{1}{4}$، $\kappa=\frac{g_0}{250}$، $\varepsilon_p=\frac{g_0}{250}$.

از نمودار پیوسته شکل ۲ کاملا پیداست که در حد $\Delta_c=\Delta_g$ برای تابع همبستگی تک‌زمانه مرتبه دوم داریم: $g^{(2)}(0)<1$، که تاییدی بر جواب تحلیلی به دست آمده است و برانگیختگی فوتون اول مانع از برانگیختگی سایر فوتون‌ها می‌شود و بلوکه‌شدن فوتون رخ می‌دهد. اگر میدان دمش در گذار تشدید دوفوتونی تنظیم شود یعنی $\Delta_c=2\Delta_g$، آنگاه $g^{(2)}(0)>1$ است که نشان‌دهنده این است که مد اپتیکی تمایل دارد در حالت دوفوتونی باشد. از نمودارهای نقطه‌چین و خط‌چین این شکل مشاهده می‌شود که با تغییر میزان جفت‌شدگی اپتومکانیکی دو کاواک (تغییر ξ)، شرط وقوع بلوکه‌شدن تک‌فوتون تغییر می‌کند و به این ترتیب می‌توان با تنظیم پارامتر ξ این اثر را در بسامدهای متفاوتی مشاهده کرد.

مرجع‌ها

[۱] X. Wang, A. Miranowicz, H. R. Li and F. Nori; *"Method for observing robust and tunable phonon blockade in a nanomechanical resonator coupled to a charge qubit"*; Phys. Rev. A **93** (2016) 063861.

[۲] H. Q. Shi, X. Xun-Wei and N. H. Liu; "*Phonon blockade in a nanomechanical resonator quadratically coupled to a two-level system*"; Sci. Rep. **9** (2019) 1-7.

[۳] P. Rabl; *"Photon blockade effect in optomechanical systems"*; Phys. Rev. Lett. **107** (2011) 06360.

[٤] M. Hassani Nadiki and M.K. Tavassoly; "*The amplitude of the cavity pump field and dissipation effects on the entanglement dynamics and statistical properties of an optomechanical system*"; Opt. Comm. **452** (2019) 31.

[٥] W. P. Bowen and G. J. Milburn.; *"Quantum Optomechanics"*; Taylor & Francis, (2015) 381.

[٦] J. Q. Liao and F. Nori; *"Photon blockade in quadratically coupled optomechanical systems"*; Phys. Rev. A **88** (2013) 023853.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

ویژگی‌های دی‌الکتریک و مشخصه‌یابی فونونی نیمرسانای InN در فاز جدید اورتورومبیک با گروه فضایی Pnma

مجیدیان سرمزده، مسعود[۱]؛ ولی، رشید[۱]

[۱]دانشکده فیزیک، دانشگاه دامغان، دامغان، ایران

چکیده

اخیراً بر اساس محاسبات نظری، فاز جدیدی برای نیمرسانای InN با ساختار اورتورومبیک و گروه فضایی Pnma پیش‌بینی شده است که از لحاظ ترمودینامیکی، مکانیکی و دینامیکی پایدار است. در این مقاله با استفاده از نظریه تابعی چگالی اختلالی (DFPT)، برخی ویژگی‌های دی‌الکتریک و فونونی InN-Pnma بررسی شده است. نتایج ما نشان می‌دهد که رفتار ناهمسانگردی در تابع دی‌الکتریک وجود دارد و متوسط تابع دی‌الکتریک استاتیک از فاز وورتزایت InN کوچکتر است در صورتی که متوسط سهم الکترونی تابع دی‌الکتریک استاتیک از فاز وورتزایت InN بزرگتر است. همچنین بازتابندگی IR و تابع دی‌الکتریک وابسته به فرکانس به همراه پاشندگی فونونی و چگالی حالت‌های فونونی بررسی شد. نتایج ما نشان می‌دهد که ویژگی‌های فونونی و دی‌الکتریک این ساختار می‌تواند در استفاده آن در سلول‌های خورشیدی حامل داغ کاربرد داشته باشد.

Dielectric properties and phonon characterization of InN semiconductor in the novel orthorhombic phase with Pnma space group

Majidiyan Sarmazdeh, Masoud[1]; Vali, Rashid[1]

[1] School of Physics, Damghan University, Damghan, Iran

Abstract

Recently, the novel phase of InN semiconductor with an orthorhombic structure and Pnma space group has been predicted by theoretical calculations which is thermodynamically, mechanically and dynamically stable. In this paper, some dielectric and phononic properties of the InN-Pnma are investigated using the density functional perturbed theory (DFPT). Our results show that the dielectric behavior is anisotropic and the average of the static dielectric function is smaller than that InN wurtzite phase while the average of the electronic contribution of the static dielectric function is larger than InN wurtzite phase. Also, the IR-reflectivity and frequency-dependent dielectric function and phonon dispersion with phonon density of states of the InN-Pnma are studied. The results indicate that dielectric and phononic properties of InN-Pnma can be used in the hot-carrier solar cells application.

PACS No. 63, 78

مقدمه

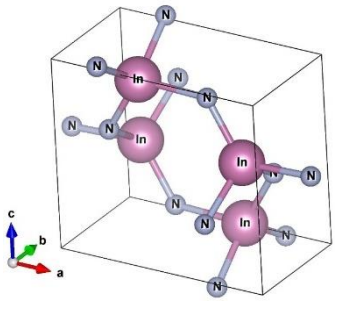
در میان نیمرساناهای نیترایدی، InN به دلیل باریکترین گاف نواری، تحرک‌پذیری بالای الکترونی و ضریب جذب نسبی بالا، توجه زیادی را به خود معطوف کرده است [۱و۲]. از لحاظ بلورشناسی، InN در شرایط محیطی، در ساختار ششگوشی وورتزایت متبلور می‌شود. هر چند که این ترکیب در فاز زینک-بلند نیز سنتز شده است و بررسی‌ها نشان می‌دهد که با افزایش فشار، InN به فاز شبه پایدار راک-سالت نیز گذار می‌کند [۳-۶]. علاوه بر این فازها، تلاش‌های زیادی برای بررسی امکان چندریختی‌های دیگر از InN، مانند نانولوله و نانوورقه و حالت‌های حجمی دیگر انجام شده است [۷و۸]. در سال ۲۰۱۸، Q. Fan و همکارانش، به صورت نظری یک فاز جدید اورتورومبیک برای InN پیش بینی

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

می‌کنند که دارای گروه فضایی Pnma است و نشان می‌دهند که این فاز از لحاظ ترمودینامیکی، مکانیکی و دینامیکی پایدار است [۸]. بررسی این گروه بیشتر بر روی خواص الکترونی و مکانیکی بوده است. از آنجایی که برخی کاربردهای InN به خواص فونونی و دی‌الکتریکی آن وابسته است، در این مقاله علاوه بر ویژگی‌های دی‌الکتریک، ویژگی‌های فونونی این ساختار جدید مشخصه‌یابی شده است.

روش انجام محاسبات

برای محاسبه ویژگی‌های فونونی و دی‌الکتریک از نظریه تابعی چگالی اختلالی به روش امواج تخت در بسته محاسباتی ABINIT استفاده شده است [۹]. پتانسیل الکترونی برای اتم‌های In و N با یک شبه پتانسیل نرم-پایسته جایگزین شده است به گونه‌ای که برای In الکترون‌های اربیتال‌های 4d، 5s و 5p و برای N، الکترون‌های 2s و 2p به عنوان الکترون‌های ظرفیت و بقیه پیکربندی الکترونی به صورت مغزه در نظر گرفته شده است. برای جمله همبستگی-تبادلی از تقریب چگالی موضعی (LDA) استفاده شده است. برای محاسبه ویژگی‌های فونونی و دی‌الکتریک یک شبکه مونخرست-پک ۶×۱۵×۷ در نظر گرفته شد. مقداری انرژی قطع برای بسط امواج تخت ۶۰ Ha انتخاب شد. تمامی محاسبات بر روی ساختار کاملاً واهلش یافته انجام شده است. مقادیر بهینه شده ثوابت شبکه a، b و c به ترتیب ۶،۶۱۰، ۳،۶۰۷ و ۵،۹۰۲ انگستروم به دست آمده است. ساختار بلوری بهینه شده InN در فاز اورتورومبیک و گروه فضایی Pnma در شکل ۱ نشان داده شده است. جزئیات روش محاسبات و روابط در مرجع [۱۰] آورده شده است.



شکل ۱: ساختار بلوری InN-Pnma

بحث و نتایج

ساختار اورتورومبیک InN، دارای ۴ اتم In و ۴ اتم N است، بنابراین در این ساختار ۲۴ مد فونونی وجود دارد که ۳ مد آن آکوستیکی (صوتی) و ۲۱ مد دیگر اپتیکی (نوری) هستند. بر اساس نظریه گروه، برای گروه فضایی Pnma، نمایش کاهش‌ناپذیر مدهای ارتعاشی در نقطه گاما به صورت زیر است:

$$\Gamma = 4A_g +2B_{1g}+4B_{2g}+2B_{3g}+2A_u +4B_{1u}+2B_{2u}+4B_{3u}$$

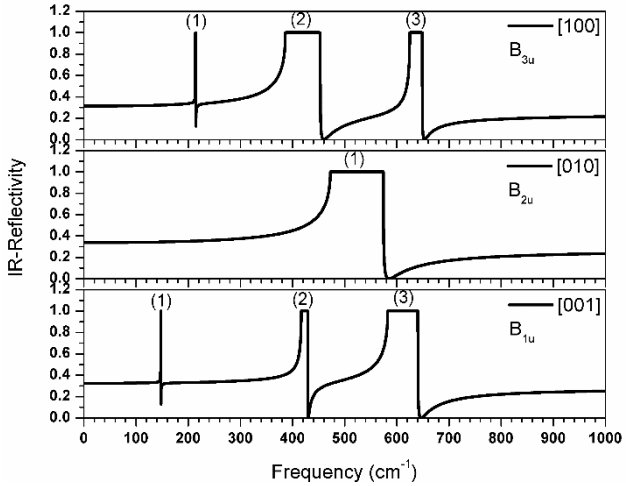
که مدهای B_{1u}، B_{2u} و B_{3u} مدهای ارتعاشی IR و مدهای A_g و B_{1g} و B_{2g} مدهای فعال رامان و A_u مد ساکت است. همه مدها غیر تبهگن هستند. فرکانس مدهای ارتعاشی در جدول ۱ آورده شده است.

جدول ۱: نمایش کاهش‌ناپذیر مدها، فرکانس مدها (بر حسب cm^{-1})، نوع مد و فرکانس‌های طولی (TO) و عرضی (LO) (بر حسب cm^{-1}) و سهم هر مد فعال IR در تابع دی‌الکتریک ε_m

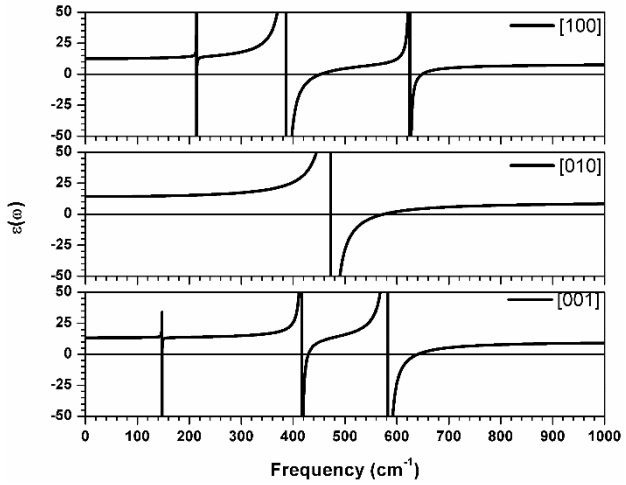
Irrep.	ω	mode	ω_{TO}	ω_{LO}	ε_m
A_g	۵۰،۵۵۷	R	–	–	–
A_u	۷۴،۳۲۶	Silent	–	–	–
B_{3g}	۱۱۳،۵۴۸	R	–	–	–
B_{1g}	۱۲۵،۵۰۰	R	–	–	–
B_{2g}	۱۳۳،۹۹۹	R	–	–	–
B_{1u}	۱۴۷،۱۵۵	IR	۱۴۷،۱۵۵	۱۴۷،۴۳۰	۰،۰۵۰
A_g	۱۶۲،۰۳۳	R	–	–	–
B_{3u}	۲۱۳،۷۰۲	IR	۲۱۳،۷۰۲	۲۱۴،۱۴۰	۰،۰۵۷
B_{2g}	۲۴۶،۲۵۸	R	–	–	–
A_g	۳۳۵،۸۷۲	R	–	–	–
B_{3u}	۳۸۵،۶۲۷	IR	۳۸۵،۶۲۷	۴۵۲،۰۱۹	۳،۵۱۹
B_{1u}	۴۱۵،۷۸۴	IR	۴۱۵،۷۸۴	۴۲۸،۴۹۳	۰،۹۱۵
B_{2g}	۴۳۲،۵۱۲	R	–	–	–
B_{2u}	۴۷۱،۳۳۶	IR	۴۷۱،۳۳۶	۵۷۲،۹۴۲	۴،۵۸۷
B_{3g}	۴۹۹،۴۰۴	R	–	–	–
A_u	۵۰۷،۴۶۵	Silent	–	–	–
B_{1g}	۵۳۹،۵۶۸	R	–	–	–
B_{1u}	۸۵۱،۰۲۱	IR	۵۸۱،۰۲۱	۶۳۸،۸۵۰	۲،۰۰۹
B_{3u}	۶۲۳،۳۹۶	IR	۶۲۳،۳۹۶	۶۴۷،۲۵۴	۰،۵۰۱
A_g	۶۳۸،۲۵۱	R	–	–	–
B_{2g}	۶۶۵،۸۱۲	R	–	–	–

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

تانسور دی‌الکتریک استاتیک از دو سهم یونی و سهم الکترونی تشکیل می‌شود. همان طور که می‌دانیم، ثابت دی‌الکتریک یک ویژگی مهم برای تشریح اثر استتار در نیمرساناها در ارتباط با نقایص، آلایش‌ها و دیگر اختلالات ساختاری در جامدات است. مقدار ثابت دی‌الکتریک استاتیک برای InN-Pnma به ترتیب در راستای x، y و z، ۱۲,۴۴۸، ۱۴,۱۹۱ و ۱۳,۲۵۸ و مقدار ثابت دی‌الکتریک الکترونی، ۸,۷۳۰، ۹,۶۰۴ و ۱۰,۲۸۷ به دست آمده است. همان طور که از مقادیر پیداست، ناهمسانگردی در تابع دی‌الکتریک وجود دارد. متوسط تابع دی‌الکتریک استاتیک ۱۳,۲۲۹ است که از مقدار ۱۵,۳ برای فاز وورتزایت InN کوچکتر است هر چند که مقادیر ۸,۱ و ۱۴,۶۱ نیز برای فاز وورتزایت گزارش شده است. این در حالی است که سهم الکترونی تابع دی‌الکتریک InN-Pnma از فاز وورتزایت InN (با مقادیر بین ۵,۳-۹,۱) بزرگتر است [۱۱و۱۲]. تفاوت تابع دی‌الکتریک استاتیک و بخش الکترونی، سهم یونی را در تابع دی-الکتریک به دست می‌دهد. سهم یونی در تابع دی‌الکتریک مربوط به مدهای فعال IR و بار موثر بورن و به عبارت دیگر به تانسور قدرت نوسانگرها بستگی دارد. تانسور بار موثر بورن در واقع معیاری از بار دینامیکی به ازای هر اتم است. متوسط تریس (رد) تانسور بار موثر بورن برای اتم‌های In و N به ترتیب ۲,۷۳e و ۲,۷۳e- به دست آمده است که اندکی از بار موثر اسمی ۳e این اتم‌ها کوچکتر است. همان طور که می‌دانیم ماتریس ثوابت نیرو از یک بخش تحلیلی و یک بخش غیرتحلیلی تشکیل می‌شود که بخش غیرتحلیلی به برهمکنش‌های بلند برد کولنی (دوقطبی-دوقطبی) بستگی دارد که مستقیماً با تانسور بار موثر بورن مرتبط است و باعث شکافتگی بین مدهای اپتیکی طولی (TO) و عرضی (LO) می‌شود. مقادیر فرکانس‌های LO و TO به ازای مدهای فعال IR به همراه سهم هر مد در تابع دی‌الکتریک یونی در جدول ۱ خلاصه شده است. بیشترین سهم یونی در تابع دی‌الکتریک در راستای x، y و z به ترتیب مربوط به مدهای $B_{3u}^{(2)}$، $B_{2u}^{(1)}$ و $B_{1u}^{(3)}$ است. تغییرات بازتابش IR و تابع دی‌الکتریک (بدون میرایی) بر حسب فرکانس در شکل‌های ۲ و ۳ نشان داده شده است.



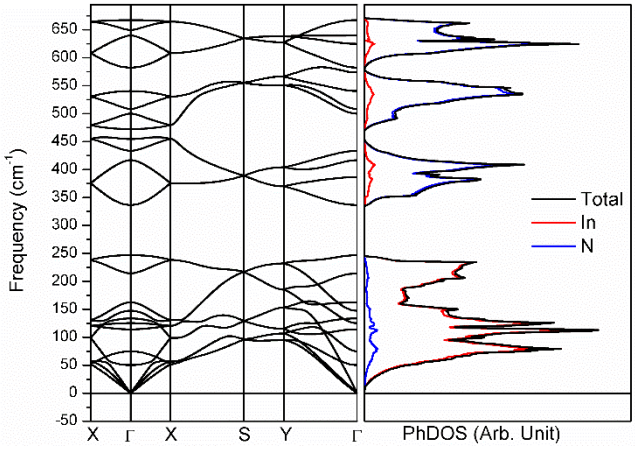
شکل ۲: تغییرات بازتابش-IR بر حسب فرکانس در سه راستای x، y و z برای مدهای فعال IR



شکل ۳: تغییرات تابع دی‌الکتریک بر حسب فرکانس در سه راستای x، y و z برای مدهای فعال IR

تغییرات بازتابش IR و تابع دی‌الکتریک کاملاً در فرکانس‌های TO و LO مشهود است. بر این اساس در راستای x بازتابش IR، ۳ قله وجود دارد که در آن بازتابندگی صددرصد است. پهنای قله‌های بازتابندگی به میزان شکافتگی TO-LO بستگی دارد. در راستای y تنها یک قله وجود دارد که نسبت به دو راستای دیگر بیشترین پهنا را به خود اختصاص داده است. همان طور که از شکل ۳ پیدا است، به ازای فرکانس‌های TO تابع دی‌الکتریک به سمت بی‌نهایت میل می‌کند و در فرکانس‌های LO تابع دی‌الکتریک صفر می‌شود. پاشندگی فونونی ساختار InN-Pnma در راستای نقاط پر تقارن در اولین منطقه بریلوئن به همراه چگالی حالت‌های فونونی در شکل ۴ نشان داده شده است.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



شکل۴: ساختار نواری فونونی InN-Pnma به همراه چگالی حالت‌های فونونی

در این نمودار مشخص است که اولاً هیچ شاخه موهومی (فرکانس منفی) وجود ندارد که نشان می‌دهد که ساختار از لحاظ دینامیکی پایدار است. ثانیاً یک گاف انرژی فونونی بین فرکانس ۲۴۷ cm^{-1} تا ۳۳۵ cm^{-1} وجود دارد. این گاف نسبتاً بزرگ عمدتاً به دلیل اختلاف جرم بین اتم‌های In و N است. بر اساس یک مدل ساده زنجیره دو اتمی که در آن جرم اتم سنگین‌تر M (In) و جرم اتم کوچکتر m (N) است، پهنای نسبی نوار فونون‌های اپتیکی به نسبت m/M بستگی دارد [۱۳]. بنابراین ما یک پهنای نواری فونونی اپتیکی باریکی را برای InN-Pnma انتظار داریم. این ویژگی پهنای نواری فونون اپتیکی و گاف نواری فونونی نسبتاً بزرگ، می‌تواند برای کاربرد InN-Pnma در سلول‌های خورشیدی حامل داغ استفاده شود [۱۴]. چگالی حالت‌های فونونی مشخص می‌کند که در دامنه فرکانسی صفر تا ۲۴۷ cm^{-1}، سهم ارتعاشی ناشی از اتم‌های In است در حالی که بالای ۳۳۵ cm^{-1} اکثر حالت‌های ارتعاشی مربوط به اتم‌های سبکتر N است.

نتیجه‌گیری

در این مقاله بر اساس نظریه تابعی چگالی اختلالی، برخی ویژگی‌های دی‌الکتریک و فونونی ساختار نیمرسانای InN در فاز اورتورومبیک با گروه فضایی Pnma بررسی شد. مشخص شد که تابع دی‌الکتریک استاتیک این ساختار ناهمسانگرد است و متوسط تابع دی‌الکتریک استاتیک از فاز وورتزایت InN کوچکتر ولی متوسط سهم الکترونی تابع دی‌الکتریک استاتیک از فاز وورتزایت InN بزرگتر است. مدهای فعال IR و رامان این ساختار و فرکانس‌های فونون‌های اپتیکی طولی و عرضی و میزان شکافتگی TO-LO مشخص شد. نتایج نشان می‌دهد که مدهای B_{1u} و B_{2u} و B_{3u} نقش مهمی در خواص دی‌الکتریک و بازتابندگی فروسرخ ساختار InN-Pnma دارند. پاشندگی فونونی به همراه چگالی حالت‌های فونونی بررسی شد و مشخص شد که این ساختار از لحاظ دینامیکی پایدار است. علاوه بر این نشان داده شد که اتم‌های In در فرکانس‌های زیر ۲۴۷ cm^{-1} و اتم‌های N در فرکانس‌های بالای ۳۳۵ cm^{-1} سهم عمده را در اتعاشات به خود اختصاص می‌دهند. همچنین مشخص شد که این ساختار یک گاف فونونی نسبتاً بزرگی دارد که به همراه پهنای نوار فونون‌های اپتیکی باریک می‌تواند در کاربرد این فاز از InN در سلول‌های خورشیدی حامل‌های داغ مهم باشد.

مرجع‌ها

[1] S.K. O'Leary et al., "Steady-state and transient electron transport within bulk wurtzite indium nitride: An updated semiclassical three-valley Monte Carlo simulation analysis.", *Applied Physics Letters* **87**, No. 22 (2005) 222103.

[2]V.Y. Davydov et al., "Band Gap of InN and In-Rich $In_xGa_{1-x}N$ alloys (0.36< x< 1).", *physica status solidi (b)* **230**, No. 2 (2002) R4-R6.

[3] W.S Jung et al., "Characterization of wurtzite indium nitride synthesized from indium oxide by In-115 MAS NMR spectroscopy.", *Materials Letters* **61**, No. 16 (2007) 3413-3415.

[4] A. Miura at al., "Synthesis of wurtzite-type InN crystals by low-temperature nitridation of $LiInO_2$ using $NaNH_2$ flux." *Crystal Growth & Design* **12**, No. 9 (2012) 4545-4547.

[5] A.K. Dick et al, "Control of III–V nanowire crystal structure by growth parameter tuning.", *Semiconductor Science and Technology* **25**, No. 2 (2010) 024009.

[6] F. Peng at al., "Phase transition, and elastic and thermodynamic properties of InN derived from first-principles and the quasi-harmonic Debye model.", *physica status solidi (b)* **245**, No. 12 (2008) 2743-2748.

[7] V. Kumar at al., "Structure, bonding, stability, electronic, thermodynamic and thermoelectric properties of six different phases of indium nitride.", *Journal of materials science* **53**, No. 11 (2018) 8302-8313.

[8] Q. Fan et al., "III-Nitride Polymorphs: XN (X= Al, Ga, In) in the Pnma Phase.", *Chemistry–A European Journal* **24**, No. 65 (2018) 17280-17287.

[9] X. Gonze et al., "First-principles computation of material properties: the ABINIT software project." *Computational Materials Science* **25**, No. 3 (2002) 478-492.

[10] X. Gonze and C. Lee., "Dynamical matrices, Born effective charges, dielectric permittivity tensors, and interatomic force constants from density-functional perturbation theory." *Physical Review B* **55**, No. 16 (1997) 10355.

[11] M. Henini and M. Razeghi. *Optoelectronic Devices: III Nitrides*. Elsevier, 2004.

[12] O. Madelung, U. Rössler, and M. Schulz. *"Group IV Elements, IV-IV and III-V Compounds. Part b-Electronic, Transport, Optical and Other Properties."* Semiconductors, Springer, Berlin, 2001.

[13] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, 8th ed. Wiley, New York, 2004

[14] J.Wu, "When group-III nitrides go infrared: New properties and perspectives." *Journal of applied physics* **106**, No. 1 (2009) 5.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

ساخت نانوفیبر توخالی ZnO/SnO_2 ولایه نشانی روی شیشه

روسم نژاد، الهه[۱]؛ قلمبردزفولی، عبدالمحمد[۱،۲]

[۱]گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شهید چمران، اهواز،ایران

۲مرکزتحقیقات لیزر و پلاسما، دانشگاه شهید چمران، اهواز، ایران

چکیده

امروزه با توجه به رشد روز افزون فناوری نانو، شناخت فرآیندهای ساخت، و تأثیر پارامترهای مختلف در تشکیل نانوساختارها از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است. در این میان نانوساختارهای توخالی از جمله نانوالیاف توخالی به دلیل نسبت سطح به حجم بالا کاربردهای زیادتری پیدا می‌کنند. در این مقاله، ابتدا ساخت نانوالیاف توخالی یک بعدی ZnO/SnO_2 به روش الکتروریسی گزارش می‌شود، سپس لایه نشانی مستقیم روی زیرلایه به روش الکتروریسی و روش دکتر بلید با هم مقایسه می‌گردد. بعلاوه، در این تحقیق ساختار کریستالی و ریخت شناسی نمونه ها با استفاده از دستگاه پراش اشعه ایکس (XRD) و میکروسکوپ الکترونی روبشی (SEM) مورد بررسی قرار می‌گیرد .

واژه‌های کلیدی: *نانوالیاف توخالی، اکسیدروی، دی‌اکسیدقلع، الکتروریسی*

Fabrication of hollow ZnO / SnO_2 nanofibers and deposition on glass surface

Rosamnezhad, Elahe[1]; Galambor Dezfuli, AbdolMohammad[1,2]

[1]*Department of Physics, Faculty of science, Shahid Chamran University Of Ahvaz, Ahvaz-Iran*
[2]Center for Research on Laser and Plasma, Shahid Chamran University of Ahvaz, Ahvaz, Iran

Abstract

Nowadays, owing to the increasing growth of nanotechnology, identifying the processes of nanostructure fabrications, and the effects of different parameters in such fabrications have special importance. In the meantime, hollow nanostructures, such as hollow nanofibers, have more applications due to their high surface-to-volume ratio. In this paper, first, one-dimensional hollow ZnO / SnO2 nanofibers are fabricated by electrospinning method, then the direct deposition of electrospunned nanofibers on the substrate is compared with Dr Blade's method. In addition, in this research using X-Ray Diffraction (XRD) and scanning electron microscope (SEM) methods the crystalline structure and morphology of samples are investigated.

***Keywords** : Hollow nanofibers, zinc oxide, tin oxide, electrospinning*

مقدمه

روش‌های متعددی برای تولید نانو مواد یک‌بعدی وجود دارد که از میان این روش‌ها، الکتروریسی به دلیل سادگی، کم هزینه بودن و کارایی بالا برای تولید نانوالیاف بسیار مورد توجه قرار گرفته است [۱]. در این میان نانوالیاف‌های تولیدی توسط روش الکتروریسی دارای ساختار بسیار متخلخل هستند که باعث افزایش نسبت سطح به حجم بالا در آن‌ها می‌شود [۲]. حال اگر این الیاف به صورت توخالی ساخته شوند، سطح ویژهٔ بالاتری در مقایسه با سایر نانوالیاف‌ها خواهند داشت که این امر تأثیر به‌سزایی در بهبود خواص وابسته به سطح نظیر پراکندگی بیشتر نور، خواص فوتوکاتالیستی[۱] و حسگری آن‌ها دارد [۳].

اخیرا ساختارهای گوناگونی از ZnO و SnO_2 بصورت نانوذره، نانوسیم، نانولوله و نانوفیبر که به روش‌های مختلفی تولید می‌گردند، در سلول‌های فوتوولتائیک مورد توجه قرار گرفته‌اند. این اکسیدهای فلزی به‌دلیل داشتن پهنای گاف انرژی زیاد، همچنین خواص

[۱]Photocatalytic

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

الکتروکرومیک[۲] (تغییر رنگ در اثر جریان و یا اختلاف پتانسیل الکتریکی به طور بازگشت پذیر) و فوتوکرومیک[۳] (تغییر رنگ در برابر نور یا اشعهٔ الکترومغناطیسی) به عنوان یکی از گروه‌های شاخص نیم‌رسانا توجه زیادی را به خود جلب کرده اند[۴].

اکسیدروی (ZnO) یک نیم‌رسانای نوع n با گاف انرژی مستقیم ۳٫۳۷eV (در دمای ۳۰۰ کلوین) و انرژی برانگیختگی بالای ۶۰ mV (در دمای اتاق) است[۵]. دی اکسید قلع (SnO_2) نیز یک نیم‌رسانای نوع n با گاف انرژی مستقیم (۶٫۳ eV در دمای ۳۰۰ کلوین) رسانش الکتریکی بالا، شفافیت نوری و پایداری شیمیایی مناسب است. نتایج پژوهش‌های مختلف نشان می‌دهند که جفت شدن انواع اکسید نیم‌رسانا و تولید نانو کامپوزیت باعث بهبود بیشتر جدایش الکترون–حفره ودرنتیجه کارایی بهتر این مواد در پیل‌های شیمیایی می‌شود[۶]. این جفت شدگی اکسیدهای نیم‌رسانا باعث همراه شدن ویژگی‌های هر دو اکسید و دستیابی به موادی با خواص جدید می‌شود[۷].

گاف انرژی SnO_2 از گاف انرژی ZnO بیشتر و نوار رسانش (CB) SnO_2 از نوار رسانش ZnO پایین‌تر می‌باشد؛ یعنی در ساختار ZnO/SnO2 نوار ظرفیت ZnO (VB) بین نوار ظرفیت و نوار رسانش SnO2 و نوار رسانش آن بالای آن‌ها قرار دارد. این امر موجب می‌شود با تحت تابش قرار دادن ساختار کامپوزیتی ZnO/SnO_2 توسط نور فرابنفش یا مساوی پهنای انرژی هر دو ساختار، فوتوالکترون تولیدی بتواند به نوار رسانش SnO_2 و حفره به نوار ظرفیت ZnO برود[۸]. این فرآیند موجب بهبود برخی از خواص نظیر خواص فوتوکاتالیستی در مقایسه با ZnO و SnO_2 خالص خواهد شد[۹].

شرح آزمایش

هدف در این پژوهش ساخت نانوالیاف توخالی ZnO/SnO_2 ومقایسه دو روش لایه نشانی روی شیشه(FTO) می‌باشد. بدین منظور در این تحقیق از استات روی دوآبه ($Zn(CH_3COO).2H_2O$) و $SnCl_2.2H_2O$ به عنوان پیش‌ماده، اتانول (C_2H_5OH) و دی متیل فرم‌آمید (DMF) به عنوان حلال و پلیمر سنگین PVP با وزن مولکولی ۱۳۰۰۰۰۰ استفاده گردید. برای ساخت نانوالیاف توخالی نخست مواد پلیمر، اتانول و DMF با نسبت یکسان مخلوط و تحت همزن مغناطیسی به مدت ۳۰ دقیقه در دمای اتاق قرار داده شد. پس از حل شدن کامل پلیمر در حلال‌ها و رسیدن به یک محلول کاملاً همگن پیش‌ماده استات روی و قلع کلرید را هرکدام به مقدار g ۰/۲ به محلول اضافه کرده و دوباره به مدت ۱۰ ساعت تحت همزن مغناطیسی قرار گرفت.

در مرحله بعد آماده سازی شیشه صورت می‌گیرد بدین صورت که ابتدا شیشه به قطعه‌های مورد نیاز برش زده می‌شود. قبل از انجام لایه نشانی نانوفیبرها بر روی زیرلایه، می‌بایست برای رفع هرگونه آلودگی زیرلایه‌ها پس از برشکاری به خوبی شستشو شوند. برای انجام این کار، شیشه‌ها را به همراه محلول آب و صابون رقیق شده درون بشر قرار داده و سپس درون دستگاه آلتراسونیک می‌گذاریم. پس از گذشت ۶ دقیقه، ظرف را از دستگاه خارج کرده، محلول موجود در بشر را دور می‌ریزیم و از محلول اتانول و اسید کلریدریک ۰/۱ مولار جهت شستشو استفاده می‌کنیم. فرآیند قبل، مجددا تکرار می‌شود. سپس در مراحل بعدی، به ترتیب با اتانول و در نهایت استون فرآیند شستشو صورت می‌پذیرد.

برای لایه نشانی روی شیشه ابتدا روش الکتروریسی روی شیشه انجام شد، بدین صورت که شیشه روی صفحه آلومینیومی که به عنوان صفحهٔ جمع کننده در روش الکتروریسی به کار می‌رود، چسبانده شد و در ادامه محلول را در سرنگ ریخته و در پمپ‌سرنگی قرار دادیم. در نهایت فرآیند الکتروریسی با در نظر گرفتن فاصله ۱۵ سانتی‌متری سرنگ از صفحه جمع‌کنندهٔ متصل شده به زمین، نرخ سرعت ۰٫۵ میلی لیتر بر ساعت، و ولتاژ ۲۳ کیلوولت انجام گردید.

پس از اتمام الکتروریسی شیشه در کوره تحت دمای ۶۰۰ °C در مدت ۲ ساعت عملیات پخت صورت گرفت.

Ĕlectro chromic

P̆hoto chromic

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

در روش دکتر بلید از پودر بدست آمده از پخت نانوفیبرها خمیری تهیه شد و روی لایه نشانده شد. برای تهیهٔ خمیر به اندازه ی ۰/۰۱ گرم از پودر نانوفیبری پس از پخت را در اتانول مخلوط می‌کنیم. سپس میزان ۰/۱ گرم اتیل سلولز را در اتانول حل کرده و به پودر نانوفیبر حل شده در اتانول اضافه کرده و روی هم‌زن مغناطیسی قرار می‌دهیم سپس به مخلوط در حال هم‌خوردن قطره قطره ترپینئول اضافه کردیم. در نهایت این ترکیب را درون حمام روغن قرار داده تا اتانول موجود در ترکیب حذف شود و خمیر آماده شود. در نهایت به کمک میله شیشه ای خمیر آماده شده بر روی زیر لایه قرار داده و به آرامی پخش کردیم. در نهایت لایهٔ پوشانده شده با خمیر را به منظور پخت و حذف مواد زائد از آن مشابه مراحل پخت گفته شده تحت عملیات حرارتی قرار می‌دهیم.

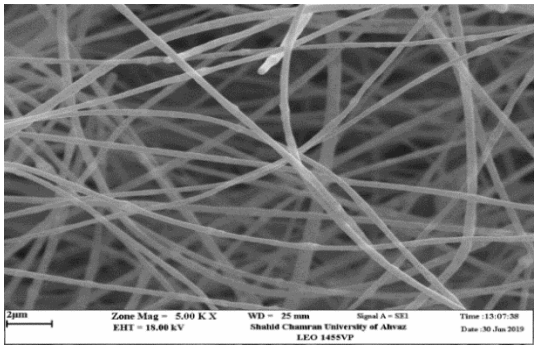
نتایج

از فیبرهای قبل و بعد از پخت ریخت شناسی SEM تهیه شد تا ساختارهای توخالی فیبرها مورد بررسی قرار گیرد(شکل ۱و۲).

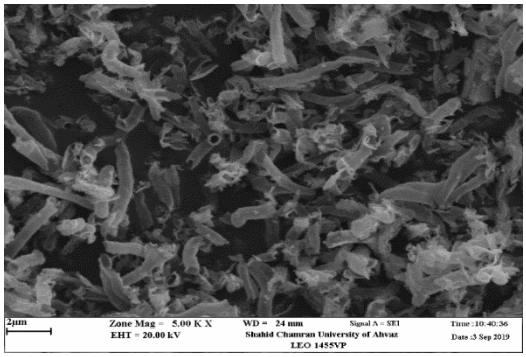
مطابق تصاویر تهیه شده مشاهده شد، در روش لایه نشانی به صورت الکتروریسی، به دلیل کم بودن چسبندگی شیشه و لایه فیبرهای کمی روی شیشه لایه نشانی شدند(شکل ۴)، اما در روش دکتر بلید به دلیل تهیه خمیر چسبندگی لایه و زیر لایه افزایش می‌یابد و فیبرهای بیشتری روی شیشه لایه نشانی شده است(شکل ۵).

برای اطمینان از حذف مواد زائد افزوده شده جهت ساخت خمیر نانوفیبری در روش دکتر بلید، زیر لایه FTO و زیر لایهٔ FTO بعد از لایه نشانی توسط الگوی پراش پرتوایکس (XRD)، تحت آنالیز ساختاری قرار گرفت(شکل ۶ و ۷)، قله‌های برجستهٔ این طیف‌ها متعلق به صفحات پراش بلورهای SnO_2 و ZnO می‌باشند که به خوبی با کارت استانداردهای با شمارهٔ (۱۴۴۵-۴۱-۰۰) و (۰۰-۳۶-۱۴۵۱) مطابقت دارد. برای ثبت تصاویر SEM و آنالیز XRD به ترتیب از دستگاه SEM مدل VP۱۴۵۵ محصول شرکت لیو، ساخت کشور آلمان و از دستگاه XRD مـــدل pw-۱۸۴۰ ساخت شرکت فیلیپس، واقع در گروه فیزیک دانشگاه شهید چمران اهواز استفاده شده است.

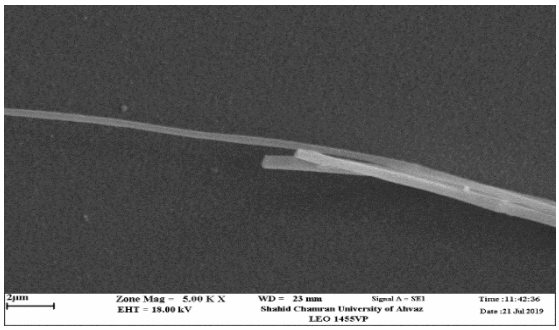
افزایش قله Sn در شکل ۷ به علت وجود Sn در زیر لایه FTO است.



شکل ۱: تصویر SEM فیبر توخالی ZnO/SnO_2 قبل از پخت.

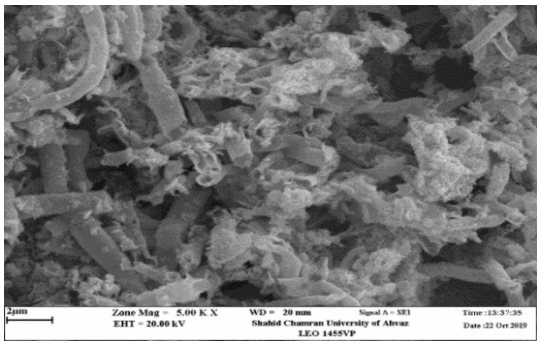


شکل۲: تصویر SEM فیبر توخالی ZnO/SnO_2 بعد از پخت.

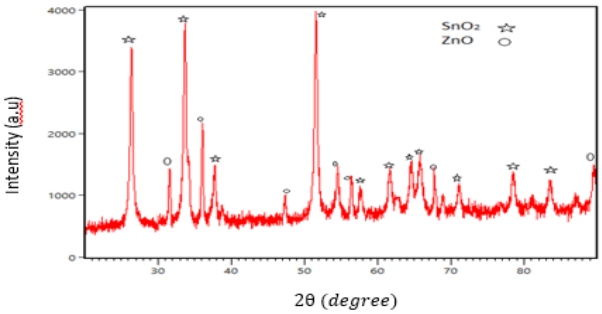


: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

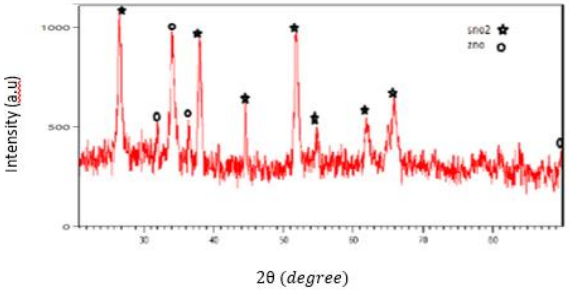
شکل۳: تصویر SEM بعد از پخت فیبر توخالی ZnO/SnO_2 لایه نشانی روی شیشه به روش الکتروریسی.



شکل ۴: تصویر SEM بعد از پخت فیبر توخالی ZnO/SnO_2 لایه نشانی روی شیشه به روش دکتر بلید.



شکل۵ : الگو XRD فیبر توخالی ZnO/SnO_2 پس از پخت.



شکل ۶: الگو XRD فیبر توخالی پس از پخت ZnO/SnO_2 لایه نشانی به روش دکتر بلید.

نتیجه‌گیری نهایی

در این پژوهش ضمن ساخت نانوفیبرهای توخالی کامپوزیتی ZnO/SnO_2 و بدست آوردن شرایط حاکم بر ساخت نانوالیاف کامپوزیتی دوجزئی توخالی، چسبندگی آنها بر روی زیر لایه از جنس شیشه و FTO جهت کاربرد بطور مثال در سلول‌های خورشیدی به روش مستقیم و دکتر بلید مورد مقایسه قرار گرفته است و در نهایت روش دکتر بلید به دلیل چسبندگی بالای نانوفیبرها به زیر لایه مناسب تر بود. همچنین، ساختار بلوری و ریخت شناسی نمونه‌ها با استفاده از XRD و SEM مورد مطالعه قرار گرفته است.

تشکر و قدردانی

بدین وسیله از دانشگاه شهیدچمران‌اهواز به خاطر حمایت از تمامی مراحل تحقیق انجام شده، تشکر و قدردانی می‌شود.

مرجع ها

[1]H. A. Khoram, M. K . Rad, and M. R. Vaezi,"synthesis of SnO2 /ZnO sensing properties,"Appl. surf. Sci. 257(18), 7988-7992 (2011).

[2]D. Lin, H. Wu and W. Pan,"photoswsitche, and memories A ssembled by Electrospinning Aluminum – Doped Zinc Oxide single nanowires,"Adv. Mater. 19,3968-3972 (2007).

[3]Y. Zhang, J. Li, G. An, and X. He,"Highly Porous SnO2 Fibers by Electrospinning and Oxygen Plasma Ethanol-Sensing. Properties,"Sens. Actuators B 144, 43–48 (2010).

[4]X. Song, Z. Wang, Y. Liu, Ce. W, and L. Li,"A highly sensitive ethanol sensor based on mesoporous ZnO–SnO2 nanofibers,"Nanotechnology 18, 20-27 (2009).

[5]X. Sui, C. Shao, and, Y. Liu,"Photoluminescence of polyethylene oxide-ZnO composite electrospun fibers,"Polym. Commun. 48, 1459-1463 (2007).

[6]H. Y. Wang, Y. Yang, X. Li, L. J .Li, and C. Wang,"Preparation and characterization of porous TiO2 /ZnO composite nanofibers via. electrospinning,"Chin. Chem. Lett. 21,1119-1123 (2010).

[7]A. K. Moghe, and B.S.Gupta,"Co – axial Electrospinning for Nanofiber. J.

T. McCann, D. Li, and Y. Xia,"Electrospinning of nanofibers whit core-sheath, hollow or porous struactures,"J. Mater. Chem. 15,735-738 (2005).

[8]Z. Zhang, X. Li, C. Wang, L. Wei, Y. Liu and C. Shao,"ZnO Hollow Nanofibers: Fabrication from Facile Single Capillary Electrospinning and Applications in Gas Sensors,"J. Phys. Chem. C 113, 19397–19403 (2009).

[9]M. T. Uddin, Y. Nicolas, C. Olivier, T. Toupance, L. Servant, M. M. Müller, H. J. Kleebe, J. Ziegler, and W. Jaegermann,"Nanostructured SnO2−ZnO Heterojunction Photocatalysts Showing Enhanced Photocatalytic Activity for the Degradation of Organic Dyes,"Inorganic Chemistry 51, 7764−7773 (2012).

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

شبیه‌سازی و طراحی هدف دوتریومی با قابلیت خنک شونده برای مولد نوترون صنعتی ۴۰۰ وات

قپانوری، مریم [(۱)]؛ صداقت‌موحد، مرتضی[(۱)]؛ باقری،علی[(۱)]؛ رضایی،عماد[(۱)]؛ اصل‌زعیم، علیرضا[(۱)]؛ کارگریان، آمنه *[(۱)]

[۱]سازمان انرژی اتمی، پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، پژوهشکده پلاسما و گداخت هسته ای، تهران، ایران

چکیده

در طراحی هدفهای جامد برای مولدهای نوترون، انتخاب لایه و زیرلایه هدف، انتقال حرارت، و خنک کاری دارای اهمیت اساسی می‌باشند. در این مقاله ، ما اقدام به شبیه‌سازی و طراحی هدف های دوتریومی با قابلیت خنک شوندگی کردیم. ابتدا، به طراحی مجموعه هدف شامل لایه و زیرلایه پرداخته، سپس از آنجایی‌که در این مولدها، ذرات نوترونی که از همجوشی دو اتم دوتریوم یا تریتیوم حاصل می‌شوند به طور مداوم هدف را بمباران کرده و موجب بالا رفتن دمای هدف می‌شوند، برای نگه‌داری هدف و ذوب نشدن آن نیاز به پایین نگه داشتن دما و نیاز به خنک‌کاری هدف می‌باشد که در ادامه با استفاده از نرم‌افزار کامسول به بررسی مسئله خنک-کاری هدف پرداختیم.

واژه های کلیدی: *مولد نوترون گداخت، هدف جامد، تیتانیوم.*

Simulation and Design of deuterium Target with cooling capability for 400W Industrial neutron generator

Maryam Ghapanvari[1], Morteza Sedaghat Movahed[1], Ali Bagheri[1], Emad Rezaei[1], Alireza Asl Zaeem[1], Amene Kargaryan[1*]

[1]Plasma and Nuclear Fusion Research School, Nuclear Science and Technology Research Institute, Tehran, Iran

Abstract

In designing of solid targets for neutron generators, the selection of target layer and sub-layer, heat transfer, and cooling are of crucial importance. In this paper, we simulated and designed the deuterium targets with cooling capability. First, we designed the target set including the layer and the sub-layer, and then, since in these generators, neutron particles resulting from the fusion of two deuterium or tritium atoms continuously bombard the target, raising the target temperature, so, in order to maintain the target and not melt it, it is necessary to keep the temperature low and the target to be cooled that in the following it is investigated the problem of the target cooling using the COMSOL software.

Keywords: *Fusion neutron generator, Solid target, Titanium*
PACS No. 28

مقدمه

مولدهای نوترون به عنوان منابع نوترون‌های سریع، اپیترمال و حرارتی در یک تنوعی از کاربردها مانند کارهای تحقیقاتی، صنعتی و پزشکی مورد استفاده قرار می‌گیرند. مولدهای نوترون معمولا" از ۳ جز اصلی منبع یون، شتابدهنده الکتروستاتیک و هدف ساخته می‌شود. یکی از اجزای مهم مولد نوترون هدف می‌باشد که پرتوی یون‌های هیدروژن به آن برخورد می‌کند. چون هدف های گازی نیازمند پنجره نازک بوده و هدف های یخ D_2O نیز به راحتی تبخیر می‌شود، معمولا از ایزوتوپ‌های هیدروژن در فلزات به عنوان هدف برای تولید نوترون استفاده می‌گردد. همچنین با توجه به اینکه گاز تریتیوم به راحتی در دسترس نیست و کار کردن با گاز تریتیوم ملاحظات ایمنی خاص خود را دارد هدف دوترویمی برای تولید نوترون انتخاب می‌گردد[۲-۱]. هدف از انجام این کار شبیه-سازی و طراحی هدف های دوتریومی با قابلیت خنک شوندگی به منظور استفاده در ساخت مولد نوترون صنعتی ۴۰۰ وات می باشد. بنابراین ابتدا به طراحی مجموعه هدف شامل زیرلایه، لایه پرداخته، سپس چون در این مولدها، ذرات نوترون از همجوشی دو اتم

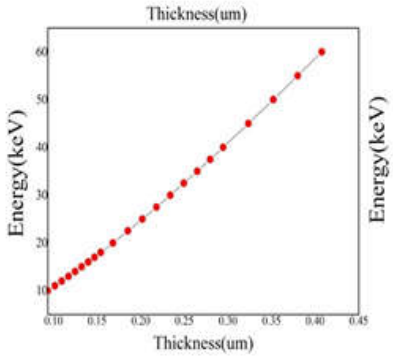
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

دوتریوم یا تریتیوم حاصل می‌شوند و در واقع هدف به طور مداوم با ذرات دوتریوم یا تریتیوم بمباران می‌شود که نتیجه آن بالا رفتن دمای هدف می‌باشد. لذا برای نگه‌داری هدف و از بین نرفتن و ذوب نشدن آن نیاز به پایین نگه داشتن دما و نیاز به خنک‌کاری هدف می‌باشد که با استفاده از نرم‌افزار کامسول به شبیه‌سازی خنک‌کاری هدف پرداختیم. لازم به ذکر است که در تمامی محاسبات و شبیه‌سازیهای انجام شده، توان مولد نوترون برابر با W ۴۰۰ در نظر گرفته شده است که بطور یکنواخت بر روی هدف توزیع شده است. این توان برای مولد نوترونی با انرژی باریکهٔ KeV ۴۰ و جریان یونی mA ۱۰ در نظر گرفته شده است.

روش کار

الف) طراحی مجموعه هدف (تعیین مشخصات لایه و زیر لایه و مواد انتخابی)

هدف‌هایی که برای استفاده درمولدهای نوترونی که شار بالایی از نوترون تولید می‌کنند معمولا" شامل یک لایه فلزی با ضریب جذب زیاد برای هیدروژن است که روی یک لایه حامل که از یک فلز با ضریب جذب و انتشار پایین برای هیدروژن و ضریب بالایی از هدایت حرارتی است قرار می‌گیرد و همچنین می‌توان یک لایه میانی که از جنس فلز از نوع دیگری که دارای ضریب هدایت حرارتی بالا و ضریب کند و پاش پایین باشد را بین فلز و لایه حامل قرار داد. زیرلایه به عنوان نگهدارنده لایه و انتقال‌دهنده حرارت هدف عمل می‌کند. در میان فلزات، طلا و نقره از هدایت گرمایی بالایی برخوردارند. اما به دلیل هزینه زیاد آن‌ها استفاده از مس در جاهایی که انتقال حرارت اهمیت می‌یابد بسیار مرسوم‌تر است[۳-۲-۱]. بنابراین فلز مس را برای زیرلایه انتخاب نمودیم. قطر زیرلایه با توجه به ابعاد نگهدارنده هدف باید انتخاب شود. ضخامت زیرلایه باید به اندازه‌ای باشد که از استحکام لازم برای تحمل تغییر فشار که ناشی از خلا و فشار هوا در دو طرف سطح آن است برخودار باشد. کم بودن ضخامت زیرلایه باعث تغییر شکل آن شده و سبب نشت هوا و مایع خنک‌کننده به درون خط انتقال باریکه می‌شود و کلا به سیستم خلا و همچنین اجزای الکتریکی و ولتاژ بالا آسیب رسانده و خسارت جدی وارد می‌کند. بیشترین فشار خلاء کاری در دستگاه طراحی شده که ما برای تست نمونه هدف انتخاب کردیم از مرتبه 10^{-5} mbar می‌باشد. برای تعیین ضخامت مورد نیاز جهت تحمل این مقدار خلاء، زیرلایه با ضخامت ۳ میلی‌متر انتخاب کردیم. فلز تیتانیوم به دلیل قابلیت جذب هیدروژن و کم بودن سطح مقطع توقف و در نتیجه دارا بودن بهره نوترونی بالاتر نسبت به دیگر فلزات ذکر شده، به عنوان لایه هدف برای تولید نوترون استفاده بیشتری دارد. بنابراین جنس لایه را تیتانیوم انتخاب نمودیم. به منظور انتخاب ضخامت لایه، دانستن برد دوتریوم در تیتانیوم اهمیت دارد. برای محاسبه برد دوترون با انرژی E در تیتانیوم از نرم‌افزار SRIM استفاده شد. محاسبات برای عمق نفوذ در مواد و ایزوتوپ‌های مختلف برای یون‌های مختلف توسط روش مونت کارلو در نرم افزارهایی مانند SRIM قابل محاسبه هستند. برای یون‌های دوتریوم و هدف از جنس تیتانیوم این محاسبات بر حسب انرژی ذره فرودی محاسبه شده است. شکل (۱) نمودار میزان تغییر انرژی دوترون را برحسب ضخامت تیتانیوم نشان می‌دهد. لایه تیتانیوم نسبتاً سریع در محل بالاترین چگالی یون دچار کند و پاش شود و زیرلایه پس از مدت کوتاهی در معرض دید قرار می‌گیرد. این عامل باعث می‌شود بازده نوترون بسیار سریع کاهش یابد و این خطر وجود دارد که پرتوهای یونی بتوانند سوراخی را از طریق زیرلایه به درون سیستم خنک‌کننده ایجاد کنند.

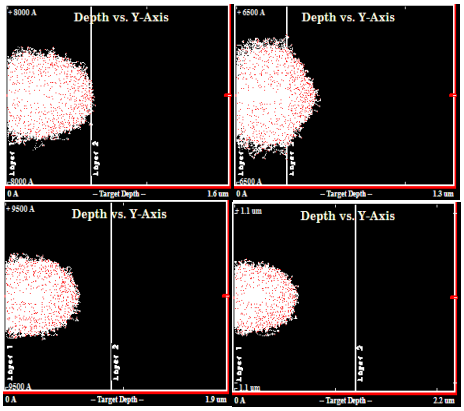


شکل(۱): عمق نفوذ یون‌های دوتریوم بر حسب آنگستروم در هدف تیتانیومی بر حسب انرژی یون‌های فرودی.

به منظور جلوگیری از این مشکل، تعیین ضخامت بهینه و مناسب لایه امری ضروری است که همچنین موجب افزایش طول عمر هدف نیز می‌شود. با توجه به اینکه برد دوتریوم در تیتانیوم تقریبا ۰,۳ میکرومتر است ما ضخامت های ۰,۳، ۰,۶، ۰,۹ و ۱,۲

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

میکرومتر را برای ضخامت لایه انتخاب کردیم. با استفاده از نرم-افزار SRIM به شبیه‌سازی نحوه عمق نفوذ پرتوهای یون دوترون در ضخامت‌های مختلف لایه پرداختیم. شکل (۲) نحوه نفوذ یون-های دوتریوم را در این ضخامت‌ها نشان می‌دهد. همانطور که مشخص است در ضخامت‌های ۰,۳ و ۰,٦ میکرومتر پرتوهای دوتریوم در زیرلایه نفوذ می‌کند بنابراین مناسب نیستند. اما در ضخامت‌های ۰,۹ و ۱,۲ میکرمتر هیچ نفوذی صورت نمی‌گیرد. لذا ضخامت حدود ۱ میکرومتر برای لایه تیتانیوم مناسب تشخیص داده می‌شود.

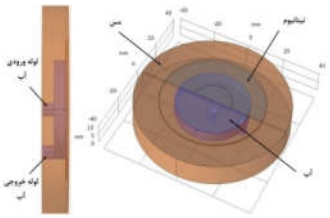


شکل(۲). نحوه ورود باریکه دوترون در تیتانیوم برحسب ضخامت، محاسبه شده توسط نرم‌افزار SRIM

پس در نهایت با توجه به اینکه جذب دوتریوم و تریتیوم در تیتانیوم از عناصر دیگر بیشتر و نیز دمای ذوب آن بالا و در حدود ۱٦٦۸ °C می باشد، هدف از جنس تیتانیوم با ضخامت ۱ میکرومترانتخاب شده و از آنجایی که تیتانیوم دارای رسانندگی گرمایی بالایی نمی‌باشد، از مس با ضخامت ۳ میلی متر به عنوان زیر لایه، به عنوان استحکام بخشی به لایهٔ تیتانیومی، بعنوان مجموعه هدف مناسب می‌باشد.

ب) طراحی سیستم خنک کننده

یکی از نکات فنی مهم در طراحی هدف‌های جامد برای مولدهای نوترون، مساله انتقال حرارت و خنک‌کاری آن می‌باشد. در این بخش به طراحی و شبیه سازی پارامترهای مهم در هدف جامد مولد نوترون خواهیم پرداخت.طراحی و شبیه‌سازی هدف جامد مورد استفاده در مولد نوترون صنعتی با استفاده از نرم افزار کامسول انجام شده است. با توجه به اینکه ظرفیت گرمایی آب بالا و در حدود J/Kg.K ٤۱۸۷ است، جهت خنک‌کاری هدف از آب دیونیزه به عنوان سیال خنک‌کننده استفاده شده است[٤-۳].

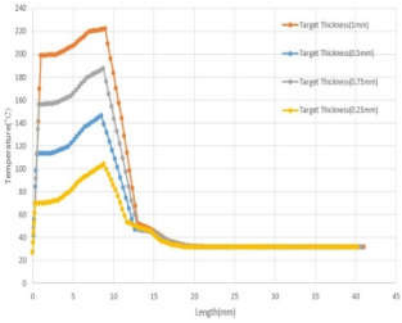


شکل(۳): نمایی از هدف طراحی شده.

شکل (۳) نمایی از هدف طراحی شده توسط نرم افزار کامسول را نشان می‌دهد. هدف با قطر mm ۸۰ و ضخامت mm ۱۱ در نظر گرفته شده است. آب دیونیزه در تماس مستقیم با آب جهت خنک‌کاری بهتر در نظر گرفته شده است. قطر محفظهٔ آب، mm ۳۸ و ضخامت آن mm ۵ در نظر گرفته شده است. محل قرارگیری لوله‌های ورودی و خروجی آب در شکل (۳) نشان داده شده است. لولهٔ ورودی آب طوری طراحی شده است که آب را در ابتدای ورود به محفظه در وسط هدف و باریکهٔ یون قرار دهد. این عمل باعث خنک‌کاری بهتر مرکز هدف خواهد شد. قطر لوله‌های آب ورودی و خروجی mm ۵ انتخاب شده است. دمای ورودی آب °C ۲۵ در شبیه‌سازی در نظر گرفته شده است. برای بررسی نحوهٔ انتقال حرارت و خنک کاری هدف، در شبیه‌سازی از هدف-هایی با ضخامت‌های mm ۱ ، mm ۰/۷۵، mm ۰/۵ و mm ۰/۲۵ استفاده شده است. قطر هدف تیتانیومی برابر با mm ٥٤ می‌باشد. قطر باریکه یونی ورودی بر روی هدف mm ۲۰ است. برای شبیه-سازی انتقال حرارت از ماژول‌هایHeat Transfer و Laminar Flow در نرم‌افزار که به صورت کوپل شده قرار داده شدند، استفاده شده است. برای عدم انتشار و بازپس دهی یون‌های باریکهٔ ورودی که خود منجر به کاهش بهرهٔ نوترونی مولد نوترون خواهد شد، بایستی دمای هدف را کمتر از °C۲۰۰ نگه داری کرد. لذا بایستی سرعت ورودی آب و ضخامت هدف را طوری تنظیم کرد که دمای هدف کمتر از دمای ذکر شده باشد. در ابتدا لازم است رفتار و تغییرات دمای سطح هدف در ضخامت‌های مختلف برای یک سرعت مشخص ورودی که آن را برابر $1m/s$ در نظر گرفته-ایم، مورد بررسی قرار گیرد. شکل (٤) تغییرات دمای سطح هدف در امتداد قطر آن را نشان می‌دهد. همانطور که در نمودار نمایان

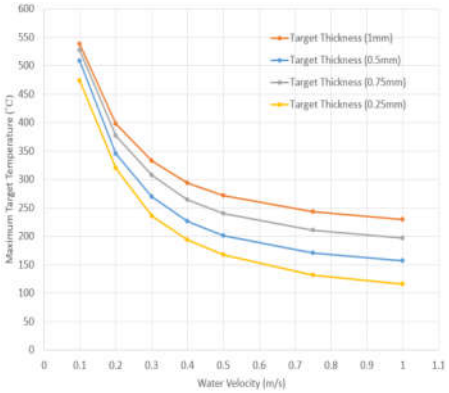
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

است، در اطراف مرکز هدف به دلیل هم راستا بودن با آب ورودی، دما در سطح پایینی قرار دارد. مقداری که از مرکز دور می‌شویم دما افزایش می‌یابد.



شکل(٤): تغییرات دمای سطح هدف در امتداد طول آن و در ضخامت‌های مختلف.

همانطور که در نمودار نمایان است، در اطراف مرکز هدف به دلیل هم راستا بودن با آب ورودی، دما در سطح پایینی قرار دارد. مقداری که از مرکز دور می‌شویم دما افزایش می‌یابد. شعاع لولهٔ ورودی آب $۲/۵mm$ در نظر گرفته شده است که با نگاهی به نمودار می‌توان دریافت که با دور شدن از طول $۲/۵mm$، دمای هدف تا طول تقریبی $۱۰mm$، که شعاع باریکهٔ یونی ورودی است، دوباره افزایش می‌یابد. به طور تقریبی بعد از اتمام شعاع باریکهٔ ورودی، دما کاهش یافته و بعد از طول $۱۹mm$ از مرکز هدف و در جایی که تماس آب با هدف تمام می‌شود، دما به عدد ثابتی می‌رسد. از شکل (٤) می‌توان دریافت که با ضخامت $۱mm$ دمای هدف بیشتر از ۲۰۰°C خواهد شد که این مقدار مطلوب نمی‌باشد. این نمودار نشان می‌دهد که هرچه ضخامت هدف کمتر باشد دمای سطح هدف پایین‌تر خواهد بود. برای یافتن حد سرعت آب ورودی، به گونه‌ای که دمای هدف بیشتر از ۲۰۰°C نشود، نمودار دمای ماکزیمم سطح هدف برای سرعت‌های مختلف آب در شکل (۵) رسم شده است. این نمودار نشان می‌دهد که با افزایش سرعت آب دمای سطح هدف کاهش می‌یابد. با توجه به نمودار می‌توان دریافت که برای اینکه هدف در دمای کمتر از ۲۰۰°C باقی بماند بایستی برای ضخامت‌های ۰/۲۵ mm ، $۰/۵mm$ و $۰/۷۵mm$ به ترتیب سرعت‌های آب ورودی برابر ۳/۷۵ m/s ، ۰/۵ m/s و ۰/۹۵ m/s باشد. برای ضخامت ۱ mm بایستی سرعت آب به بیش از ۱ m/s برسد.



شکل (۵): تغییرات دمای ماکزیمم هدف برحسب سرعت آب ورودی.

نتیجه گیری

برای ساخت هدف جامد مولد نوترون ٤۰۰ W، هرچه ضخامت هدف کمتر باشد دمای هدف از ۲۰۰°C کمتر خواهد شد و دمای بیشینهٔ هدف کاهش پیدا می‌کند. اما از طرفی کاهش ضخامت هدف، منجر به ازدیاد دمای آب به بیش از ۱۰۰ °C خواهد شد. همچنین به دلیل آنکه هدف در تماس مستقیم با آب قرار دارد بایستی ضخامت هدف را طوری در نظر گرفت که فشار آب تاثیری بر اعوجاج و خمیدگی بر روی سطح هدف نداشته باشد. لذا با توجه به مقادیر بدست آمده برای ماکزیمم دمای هدف و آب می‌توان نتیجه گیری کرد که ضخامت هدفی برابر با $۰/۷۵mm$ که در آن سرعت آب ورودی برابر با $۰/۹۵m/s$ در نظر گرفته شده باشد، بهترین گزینه برای خنک‌کاری هدف می‌باشد. لازم به ذکر است که این نتایج در صورتی که از روش لایه نشانی تیتانیوم بر روی مس استفاده شود (که در آن ضخامت تیتانیوم در حدود µ۱m می‌باشد) نیز معتبر خواهد بود. چرا که رسانندگی گرمایی مس بسیار بیشتر از تیتانیوم می‌باشد و لذا گرما بهتر به آب منتقل خواهد شد.

مرجع‌ها

[۱] پونه طیبی، پایان‌نامه کارشناسی ارشد" طراحی و ساخت هدف دوتریومی برای تولید نوترون" دانشگاه شهید بهشتی، ۱۳۸۸.

[2] J. Reijonen *et al.*, "D-D neutron generator development at LBNL," (eng), Applied radiation and isotopes : including data, instrumentation and methods for use in agriculture, industry and medicine, vol. 63, no. 5-6, pp. 757–763, 2005.

[3] J. Kim, "Neutron sources using DT mixed beams driven into solid target," Nucl. Instrum. Methods 145, (9-17) 1977.

[4] https://www.uswatersystems.com/deionized-water-vs-distilled-water.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

اثر افزایش چگالی در موج عقبه تولید شده در برهمکنش پالس قوی لیزر با گاز

خلیل زاده ، الناز؛ جعفری، محمد جعفر؛ دهقانی، زهره*؛ رضائی، سمیه

سازمان انرژی اتمی، پژوهشگاه علوم و فنون هسته ای، پژوهشکده پلاسما و گداخت هسته ای

چکیده

در این مقاله، اثر افزایش چگالی روی تولید موج عقبه در برهمکنش پالس قوی لیزر با گاز، با استفاده از نتایج کد شبیه سازی بررسی شده و با حالتی که پالس لیزر در پلاسمای پیش فرض منتشر می‌شود، مقایسه گردیده است. نتایج نشان می دهد که بزرگی میدان عقبه تولید شده در حالت انتشار پالس لیزر در گاز نسبت به انتشار پالس لیزر در پلاسمای پیش فرض به شدت به چگالی وابسته است. طوریکه برای چگالی $n = 0.02\ n_{cr}$ (n_{cr} چگالی بحرانی می باشد) میدان عقبه تولید شده در گاز بزرگتر بوده و برای چگالی $n = 0.03\ n_{cr}$، شکست موج به دلیل متغیر بودن ضریب شکست محیط گازی در حالت یونیزاسیون، از افزایش میدان عقبه جلوگیری کرده و در محیط پلاسما موج بزرگتری تولید می شود.

واژه های کلیدی: *موج عقبه، چگالی، گاز*

The effect of increasing density on wake-field generation in the interaction of intense laser pulse in the gas

E. KHalilzadeh, M. J. Jafari, Z.Dehghany*, S. Rezaei,

Plasma and Fusion Research School, Nuclear Science and Technology Research Institute, AEOI, P.O.BOX: 14395-836, Tehran, Iran

Abstract

In this paper, by using the simulation results of the PIC code, the effect of increasing density on the production of wake-field in the interaction of strong laser pulse with gas has been investigated and compared with the case which laser pulse is propagated in the default plasma. The results show that the magnitude of the wake-field produced in the gas medium compared to the plasma medium is highly dependent on the density. As for the density $n = 0.02\ n_{cr}$ ($n = 0.02\ n_{cr}$ is the critical density), the wake-field produced in the gas medium was larger and for density $n = 0.03\ n_{cr}$, the wave breaking due to the variability of the refractive index, prevents the increase of the wake-field and produces a larger wave in the plasma medium.

***Keywords**: Wake-field, Density, Gas*

PACS No. 52

مقدمه

پیشرفت های زیادی که در یک دهه گذشته، در زمینه ساخت پالس‌های لیزری فمتو ثانیه صورت گرفته، باعث شده است انتشار این پالس‌ها در گازها، کاربردهای مختلفی در بسیاری از حوزه ها از جمله شتابدهنده‌های پلاسمایی داشته باشد. یکی از چندین روشی که برای شتابدهی به ذرات استفاده می‌شود، شتابدهی با

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد

http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

استفاده از میدان عقبه لیزر[1] در اثرخود مدوله شدن پالس لیزر (SM-LWFA[2]) است که در آن، پالس لیزر طولانی در آن (در مقایسه با طول موج پلاسما) مدوله شده و موج پلاسما با دامنه بزرگ (میدان عقبه) و با سرعت فاز نزدیک به سرعت نور تولید می‌کند [۱]. این پالس می‌تواند برای سرعت دادن به ذرات باردار تا انرژی‌های بالا نیز مورد استفاده قرار گیرد. با انتشار پالس لیزر در گاز، میدان‌های پالس می‌توانند از طریق تونل‌زنی کوانتومی الکترون‌ها، اتم‌های خنثی را یونیزه کنند، که این امر، می تواند دینامیک میدان عقبه پلاسما را تا حدودی تغییر دهد.

ویژگی میدان‌های عقبه، که توسط پالس‌های لیزر در پلاسماهای یونیزه شده با میدان لیزر، تولید شده‌اند، به صورت تحلیلی و عددی در کارهای قبلی مورد بررسی قرار گرفته است[۲-۵]. در یکی از این کارها، نشان داده شده است که هنگام انتشار پالس لیزر در گاز، به دلیل یونیزاسیون، خاصیت دی الکتریک محیط ثابت نبوده و به زمان وابسته هست [۲]. در کار دیگری با کمک مدل‌های تحلیلی و شبیه‌سازی عددی یک بعدی، نتیجه گرفتند که وقتی لیزر محیط گازی را یونیزه می‌کند، نیروی پاندرموتیوو میدان عقبه طولی در این محیط، بسیار قوی‌تر از نیروهای موجود در پلاسمای از پیش آماده شده می‌باشند [۳]. همچنین تحریک امواج پلاسما به دلیل نیروی پاندرموتیو، ناشی از وابستگی زمانی خاصیت دی الکتریکی محیط و نیروی ناشی از ایجاد شیب تند در شدت پالس را مورد بررسی قرار داده است [٤]. در تحقیقی دیگر نشان داده شد که با در نظر گرفتن یونیزاسیون، دامنه میدان عقبه در حدود ۵۰٪ بالاتراز زمانی که پلاسما در نظر گرفته می شود، بدست می‌آید [۵].

در این مقاله، سعی شده است با استفاده از نتایج کد شبیه سازی PIC که شامل یونیزاسیون میدانی نیز می‌باشد، اثر افزایش چگالی گاز روی تشکیل میدان عقبه، هنگام انتشار پالس لیزر درون هیدروژن گازی، بررسی گردد.

تئوری مساله

امروزه از پالس‌های لیزری قوی برای کاربردهای متنوع انتشار پالس لیزر در گاز، استفاده می‌شود. به طور دقیق، سازوکار یونیزاسیون، به شدت، وابسته است. سازوکار واقعی یونیزاسیون با پارامتر γ که پارامتر کلدیش نامیده می‌شود، تعیین می‌گردد [٦]:

$$\gamma = \frac{\omega_L \sqrt{2I_p}}{E}, \qquad (۱)$$

که در آن I_p ، ω_L و E به ترتیب، پتانسیل یونیزاسیون اتمی، فرکانس و دامنه میدان لیزر می‌باشند. هنگامی که مقدار پارامتر کلدیش بزرگ باشد، $\gamma >> 1$، سازوکار یونیزاسیونی که بر فرآیند چیره است، یونیزاسیون چند فوتونی است، در حالی که، برای $\gamma << 1$، یونیزاسیون میدان اپتیکی (OFI) می‌باشد. این یونیزاسیون میدان اپتیکی می‌تواند در دو سازوکار مختلف یونیزاسیون حذف سد (BSI) و یونیزاسیون تونل زنی (TI) رخ دهد [٦]. در توضیح این نوع یونیزاسیون باید گفت که الکترون در داخل چاه پتانسیل اتمی غیر اختلالی و بر روی سطح انرژی I_p قرار می‌گیرد. با توجه به اینکه فرکانس گذار اتمی، بسیار کمتر از فرکانس لیزر است، میدان الکتریکی لیزر، به طور معمول ثابت می‌ماند. میدان لیزر اعمالی، پتانسیل اتمی چاه را از شکل طبیعی خارج کرده و سد پتانسیلی که الکترون در اتم یا یون می‌بیند، را پایین می‌آورد. در نتیجه الکترون از ساختار اتمی خارج می‌شود. وقتی میدان به اندازه کافی قوی باشد، سد پتانسیل، زیر سطح انرژی الکترون قرار گرفته و الکترون را آزاد می‌کند. در شرایطی که افت سد پتانسیل کولنی امکان پذیر نباشد، برای آزاد کردن الکترون، احتمال تونل‌زنی کوانتومی وجود دارد. این فرآیند تونل‌زنی یونیزاسیون نامیده می‌شود. تاکنون بررسی‌های مختلفی برای محاسبه احتمال یونیزاسیون انجام شده است. اما تئوری که به صورت تجربی و به صورت گسترده مورد بررسی قرار گرفته، کار آموسوسف، دلون و کرینف، که به عنوان نظریه ADK شناخته می‌شوند [۷]. با در نظر گرفتن میدان خارجی به فرم

$$E = E_0 \cos(\omega t) \qquad (۳)$$

احتمال تونل‌زنی الکترونی که در پتانسیل کولنی مجموعه‌ای از اتم / یون، با مدل ADK داده می‌شود، به شرح زیر است:

[1] Wake field
[2] Self-modulated laser wake field accelerator

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

$$W = C^2_{n^*l} f(l,m) I_p \left(\frac{3E}{\pi(2I_p)^{3/2}}\right)^{1/2} \left[\frac{2}{E}(2I_p)^{3/2}\right]^{2n^*-|m|-1} \exp\left(-\frac{2}{3E}(2I_p)^{3/2}\right)$$

$$f(l,m) = \frac{(2l+1)(l+|m|)!}{2^{|m|}(|m|)!(l-|m|)!} \qquad (٤)$$

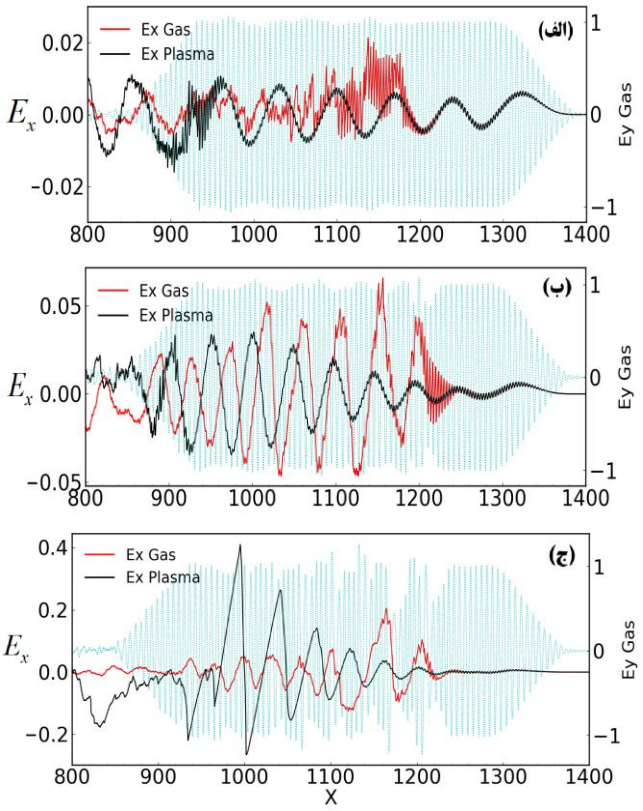
$$C_{n^*l} = \left(\frac{2e}{n^*}\right)^{n^*} \frac{1}{(2\pi n^*)^{1/2}}$$

در این روابط، n^* ، عدد کوانتومی اصلی موثر است و l، m و e به ترتیب عددهای کوانتومی مداری، مغناطیسی و عدد اویلر می‌باشند.

شبیه سازی مساله و نتایج آن :

برای جلوگیری از تکرار شدن پارامترهای شبیه‌سازی در تمام این بخش، این پارامترها قبل از ارائه نتایج شبیه‌سازی بیان می‌شوند. شبیه‌سازی‌ها با استفاده از کد شبیه‌سازی اسمایلی[۳] [۸] که تک بعدی در مکان و سه بعدی در سرعت می‌باشد، انجام شده است. پالس لیزر دارای طول موج $\lambda = 1\mu m$ و دامنه میدان الکتریکی بی‌بعد شده $a_0 = 1$ است که $a_0^2 = I\lambda_\mu^2 / 1.37\times10^{18}$ می‌باشد. برای تمامی نتایج شبیه‌سازی، پلاسما با پروفایل اولیه پله‌ای در محدوده $x = [200-1400]\mu m$ در نظرگرفته شده است. برای داشتن وضوح و دقت قابل قبول در شبیه‌سازی، در هر طول موج لیزر، ۲۷۰۰۰ سلول شبیه‌سازی که داخل هرکدام ٤٨ ابر ذره وجود دارد قرار دارد. طول مکانی هر سلول شبیه‌سازی در حدود $DX / \lambda_D \approx 0.01$ می‌باشد. علاوه بر آن طول زمانی هر سلول شبیه سازی نیز در حدود $DT / \lambda_D \approx 0.008$ است. در تمام این کار، مقادیر، موقعیت (x) و میدان الکتریکی طولی (E_x) به ترتیب به λ و $\omega_0 m_e c/q_e$ نرمالیزه شده اند (q_e و ω_0 به ترتیب، بار الکترونی و فرکانس لیزر می‌باشد). شرایط مرزی در این کار، بازتابی در نظر گرفته شده است.

برای نشان دادن اثر افزایش چگالی گاز در چگونگی تشکیل میدان عقبه، یک پالس لیزر با طول ۳۰۰ فمتو ثانیه و زمان خیزش ٦٠ فمتو ثانیه به صورت نمونه انتخاب می کنیم. نتایج شبیه سازی در شکل ۱ به ترتیب برای چگالی (الف) $n = 0.01\ n_{cr}$ (ب) $n = 0.02\ n_{cr}$ و (ج) $n = 0.03\ n_{cr}$ در زمان ۷۰۰ فمتو ثانیه نشان داده شده است. این شکل ها، میدان عقبه تولید شده در گاز (منحنی با رنگ قرمز) و پلاسما (منحنی با رنگ مشکی) را به همراه میدان الکتریکی لیزر در گاز (منحنی با رنگ آبی) نشان می‌دهند. همانطور که مشاهده می‌شود، تفاوت های مشخص در نحوه تشکیل موج عقبه و مقدار و



شکل ۱: میدان عقبه تولید شده در گاز و پلاسما و میدان لیزر برای چگالی (الف) $n = 0.01\ n_{cr}$ (ب) $n = 0.02\ n_{cr}$ و (ج) $n = 0.03\ n_{cr}$ در زمان ۷۰۰ فمتو ثانیه

رفتار آن در چگالی های مختلف مشاهده می شود. در توصیف نتایج بدست آمده، باید به این نکته نیز توجه داشت که زمانی که مسئله انتشار پالس لیزر، به صورت ۱ بعدی در نظرگرفته می‌شود و از پدیده‌هایی چون خودتمرکزی و رشته رشته شدن صرف نظر می‌گردد، ناپایداری رامان رو به جلو، نقش اساسی در خود مدوله شدن پالس لیزر و تشکیل موج پلاسمایی با دامنه بلند دارد [٤] . از طرفی، ناپایداری‌های پارامتری از جمله رامان،

[3] Smilei

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

معمولاً در اثر نوسانات در پوش لیزر و چگالی ایجاد می‌گردند [۲]. دو سازوکار مختلف، که در آن‌ها یونیزاسیون باعث نوسان چگالی می گردد، نیز وجود دارد. سازوکار اول تولید نیروی پاندرموتیو به دلیل وابسته به زمان بودن خاصیت دی الکتریک محیط (به هنگام یونیزاسیون به دلیل تغییر چگالی، خاصیت دی الکتریک محیط ثابت نمی باشد) و دومی، نیروی ناشی از تغییرات شیب، ناشی از یونیزاسیون است. در ادامه سعی می شود سه شکل با جزئیات بیشتری بررسی شود. همانطور که در شکل ۱(الف) نشان داده شده است، برای چگالی $n = 0.01\ n_{cr}$، در حقیقت، در این حالت، تابش پراکندگی رامان رو به عقب در زمان‌های اولیه، می تواند شرایط مندونکا برای رخ دادن آشوب را فراهم کند (تحت شرایط مندونکا، اگر دامنه پتانسیل‌های برداری نرمالیزه شده برای دو موج در حال انتشار، در جهت‌های مخالف، رابطه $a_1 a_2 \geq 1/16$ را برآورده کند، آشوب رخ می‌دهد)[۹]. نکته قابل توجه این است که با در نظر گرفتن یونیزاسیون، این سازوکار سریعتر شروع شده است. به نظر می‌رسد که با توجه به نوسانات چگالی، پراکندگی رامان رو به عقب افزایش یافته و معیار مندونکا [۱۰] زودتر برآورده می‌شود. با افزایش چگالی به $n = 0.02\ n_{cr}$، همان طور که در شکل ۱(ب) مشاهده می شود شاهد رخ دادن آشوب نیستیم. در واقع با افزایش چگالی به نظر می رسد ماهیت تابشهای پراکنشی تغییر کرده و تابشهای رو به عقب نتوانسته اند معیار مندونکا را برآورده سازند. بنابراین میدان عقبه تولید شده افزایش می یابد. علاوه بر این در این حالت مشخص است که میدان عقبه تولید شده در گاز بزرگتر از حالتی است که پالس در پلاسما منتشر می گردد. با افزایش چگالی پلاسما به $n = 0.03\ n_{cr}$ در شکل ۱(ج) اتفاق جالبتری رخ داده است. در این حالت بیشینه میدان عقبه تولیدی، در حالت پلاسما بیشتر می باشد. نکته جالب توجه، شکست سریع موج است که در شکل نیز کاملا مشهود می‌باشد و می‌تواند به دلیل کاهش سرعت فاز باشد [۵]. سرعت فاز با رابطه $v_\phi = c/\eta_r$ داده می شود که در آن c و η_r به ترتیب سرعت نور و ضریب شکست محیط هستند. مقدار ضریب شکست در حالت یونیزاسیون، به دلیل نوسانات چگالی، بیشتر است و همین امر، باعث کاهش سرعت فاز در حالت انتشار پالس لیزر در گاز، نسبت به پلاسما شده و شکست سریع‌تر موج را به همراه دارد. این به آن دلیل است که سرعت الکترون‌ها، سریعتر به سرعت فاز پالس لیزر می‌رسد.

نتیجه‌گیری

در این مقاله، با استفاده از نتایج کد شبیه سازی PIC که شامل یونیزاسیون می شود اثر افزایش چگالی روی تولید موج عقبه در برهمکنش پالس قوی لیزر با گاز، بررسی شده است. به عنوان نتیجه مهم، نشان داده می شود که بزرگی میدان عقبه تولید شده در محیط گاز نسبت به محیط پلاسما به شدت به چگالی وابسته است. در این زمینه، برای چگالی $n = 0.01\ n_{cr}$، رخ دادن آشوب به دلیل تابشهای پراکننده رو به عقب از افزایش زیاد موج عقبه در محیط گازی جلوگیری می کند. برای چگالی $n = 0.02\ n_{cr}$ میدان عقبه تولید شده در گاز بزرگتر بوده و برای چگالی $n = 0.03\ n_{cr}$، شکست موج از افزایش میدان عقبه در محیط گازی جلوگیری کرده و در محیط پلاسما موج بزرگتری تولید می شود.

مرجع‌ها

[1] C. I. Moore, A. Ting, K. Krushelnick, E. Esarey, R. F. Hubbard, B. Hafizi, H. R. Burris, C. Manka, and P. Sprangle, Phys. Rev. Lett. 79, 3909 (1997).
[2] W. B. Mori and T. Katsouleas, Phys. Rev. Lett. 69, 3495 (1992).
[3] N. E. Andreev, M. E. Veisman, M. G. Cadjan, and M. V. Chegotov, Plasma Phys. Rep. 26, 947–959 (2000).
[4] D. F. Gordon, B. Hafizi, P. Sprangle, R. F. Hubbard, J. R. Pen ano3 and W. B. Mori, Phy. Rev. E, 64, 046404 (2001).
[5] Prabhat Kumar, Kwangmin Yu, Rafal Zgadzaj, L_ıgia Diana Amorim, M. C. Downer, James Welch, Phys. Plasmas 26, 083106 (2019).
[6] L.V. Keldysh, Eksp. Teor. Fiz. 47, 1945 (1964).
[7] M. V. Ammosov, N. 8. Delone, and V. P. Kraino, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 91, 2008 (1986).
[8] Derouillat, J., Beck, A., Pérez, F. et al. Comput. Phys. Commun. 222, 351-373 (2018).
[9] J. Yazdanpanah, *Plasma Phys. Control. Fusion* 61, 085021 (2019).
[10] J. T. Mendonca and F. Doveil, J. Plasma Phys. 28, 485 (1982).

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

خودآرایشی ذرات در یک میکرو کانال مستقیم

قهرمانی ، سمیه ؛ کدیور، عرفان

دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی شیراز ، بلوار مدرس، شیراز

چکیده

در این مطالعه، خود آرایش دوره ای زیگزاگ شکل ذرات یکنواخت در یک کانال ریزسیالی مسطح، به صورت عددی مورد بررسی قرار گرفت. بر اساس روش المان مرزی (BEM) دریافتیم که ذرات دارای آرایش زیگزاگ تمایل دارند به خط وسط کانال حرکت کنند. نتایج عددی نشان می دهد که ذرات توسط یک مؤلفه سرعت افقی ثابت که با سرعت جریان فاز پیوسته کنترل می‌شود، کشیده می شوند. با این حال، این وضعیت برای اجزای سرعت عمودی ذرات کاملاً متفاوت است. ما دریافتیم که چگونه مولفه عمودی سرعت ذرات به سمت خط مرکزی کانال به پارامترهای کنترل مانند اندازه ذره، فاصله ذرات، پیکربندی اولیه، جهت گیری نسبی ذرات و عدد مویینگی بستگی دارد. این وابستگی نقش مهمی در برآورد زمان لازم برای دستیابی به خود آرایشی بازی می کند.

واژه های کلیدی: *مهاجرت قطره؛ قطرات تغییرشکل پذیر؛ ذرات جامد؛ ریزسیال‌شناسی؛ روش المان مرزی*

Self-assembly of Droplets in a Straight Microchannel

Ghahremani, Somayeh; Kadivar, Erfan

Department of Physics, Shiraz University of Technology, Shiraz,

Abstract

In this work, self-assembly of periodic zigzag arrangement of monodisperse droplets through a flat microfluidic channel is numerically investigated. Our numerical technique is based on the boundary element method (BEM). It is found that droplets having zigzag arrangement tend to travel to channel centerline. Our numerical results illustrate that droplets are dragged by a constant horizontal velocity component which is governed by the continuous phase flow rate. However, this situation is completely different for the vertical velocity component of droplets. We report how the vertical velocity component of droplet towards the channel centerline depends on control parameters such as droplet size, droplet distance, initial configuration, relative orientation of droplets, and capillary number. This dependency plays an important role in estimating necessary time to reach self-assembly.

***Keywords**: Droplet migration · Deformable droplets · Solid particles · Microfluidics · Boundary element method*
PACS No. 47

مقدمه

ریزسیال‌شناسی[۱]، علمی است که به کنترل وهدایت دقیق سیالات در دستگاه‌هایی می‌پردازد که به لحاظ هندسی در مقیاس میکرومتر قرار دارند. امروزه مطالعه دقیق حرکت ذرات در سامانه-های ریزسیال مورد توجه محققان قرارگرفته‌است. بسیاری از رشته ها مانند فیزیک، شیمی، و رشته های مختلف مهندسی به اهمیت و کاربرد ریزسیالات پی‌برده و در مطالعات تحقیقاتی خود بهره برده-اند. طیف گسترده ای از روش های آزمایشی برای تولید یک یا دو رده الگوی زیگزاگ از ذرات در میکروکانال‌ها استفاده شده‌است [۱-٤]. انتقال بین بسته بندی های یک ردیف و دو ردیفی [۵-۷] ، و همچنین حالت های جمعی از ذرات یکپارچه مورد مطالعه قرار گرفته‌است [۸ ، ۹]. مطالعات نظری و تجربی در مورد انتقال ذرات به سمت خط اصلی جریان، حاکی از پراکندگی ناشی از برش و برهمکنش ذره-ذره است[۱۰،۱۱]. برهمکنش ذره-ذره نقش مهمی در ایجاد توزیع حالت پایدار دارد[۱۲-۱٤]. مشاهدات تجربی نشان می‌دهد که آشفتگی جانبی اولیه منجر به ناپایداری ذرات می‌شود [۸]. با این حال، ذرات صلب و ذرات تغییر شکل‌پذیر دینامیک جمعی مختلفی را نشان می‌دهند. ذرات تغییر شکل‌پذیر به دلیل تمایل به تراز در جهت جریان، در آرایه های ذره تثبیت می‌شوند [۱۳] در حالی که یک آرایه خطی از ذرات صلب، ذرات جفت کننده ناپایداری در جهت جریان را نشان می‌دهند. برهم‌کنش‌های هیدرودینامیکی دوقطبی، پدیده‌های ماکروسکوپی را تحت تأثیر اندازه ذرات و تغییر شکل پذیری قرار می‌دهند. جریان برشی که

۱ Microfluidic

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

توسط دیواره کانال صورت می‌گیرد، ذرات را هدایت می‌کند تا به سمت خط مرکزی کانال حرکت کنند.

در این تحقیق، یک مطالعه عددی درباره خودهمبستگی آرایش دو ردیف ذرات یکنواخت دو بعدی (ذرات قرصی‌مانند[۱]) که از طریق یک کانال ریزسیالی مسطح جریان می‌یابند، ارائه میشود.

مدل فیزیکی

در این مطالعه، دینامیک ذرات امولسیون یکنواخت جاری در کانال ریزسیالی تخت را، به صورت عددی بررسی می کنیم. یک آرایه متناوب از ذرات را که در بالا و پایین خط مرکزی کانال ریزسیالی تخت جریان می‌یابند، در نظر می‌گیریم. فاز ذره و فاز پیوسته به ترتیب با درجه d و c برچسب گذاری می‌شوند. فرض می شود که ارتفاع کانال H ، بسیار کمتر از عرض کانال W و شعاع ذرات R_d است. نتایج نظریه به‌دست آمده از نمایه سرعت برای یک سامانه سه بعدی نشان می‌دهد که با افزایش نسبت ابعاد عرض کانال به ارتفاع کانال، نمایه سرعت محاسبه‌شده از معادله استوکس سه بعدی به رفتار دو بعدی نزدیک می‌شود. بنابراین، به جای حل معادله سه بعدی استوکس، می‌توان از روش حل میانگیری عمق که یک مساله دوبعدی است، بهره گرفت. . با صرف نظر کردن از نیروهای گرانشی، میدان سرعت درون و بیرون قطره از معادلات پیوستگی[۱۵]:

$$\nabla.u_i = 0 \ \text{ on } \ \Omega_i \ \text{ with } \ \mathrm{i} \in \{c,d\}, \qquad (۱)$$

و معادله دارسی [۱۵] پیروی می‌کند:

$$U_i = -\alpha_i \nabla P_i \quad \text{on} \quad \Omega_i \quad \text{with} \, \mathrm{i} \in \{c,d\}, \quad (۲)$$

که در آن $p(x,y)$، عملگر لاپلاس در دو بعد، $\nabla = (\partial_x, \partial_y)$ فشار، μ وشکسانی، $\mathbf{U}$ سرعت و $\alpha_i = \frac{H^2}{12\mu_i}$ تحرک‌پذیری مایع است. اصل بقا جرم در مرز مشترک دو سیال ایجاب می‌کند که مولفه عمودی سرعت در این مرز پیوسته باشد:

$$n.u_c = n.u_d \neq 0 \quad \text{on} \ \Gamma_{cd} \qquad (۳)$$

شرط مرزی دیگر، ناپیوستگی فشار طبیعی به دلیل تنش سطحی γ و انحنا است. میانگین انحنای K_m ، فصل مشترک دوسیال به شرح زیر است [۱۶]:

$$K_m = K_\perp + \upsilon K_{||} \qquad (٤)$$

که در آن انحنای خارج از صفحه فصل مشترک دو سیال $K_\perp$ را می‌توان با $2/H$ و انحنای سطحی قطره را با $K_{||} = 1/R_d$ تقریب داد. رابطه بین میانگین انحنای موضعی و تنش بین سطحی دو سیال با استفاده از قانون لاپلاس به شرح زیر است[۱۷]:

$$P_c - P_d = \frac{\pi}{4}\gamma K_m \qquad (۵)$$

در دیواره های کانال ، به دلیل عدم نفوذ پذیری دیوارهای جانبی کانال Γ_w داریم:

$$n_w.\nabla P_c = 0 \qquad \text{on} \ \ \Gamma_w \qquad (٦)$$

با استفاده از معادله پیوستگی ، فشار در فاز قطره و سیال معادله لاپلاس را برآورده می کند:

$$\nabla^2 P_i = 0 \qquad \text{on } \Omega_i \quad \text{with } \mathrm{i} \in \{c,d\} \quad (۷)$$

راه‌حل معادله (۷) برای شرایط مرزی مناسب (۳)، (۵) و (٦) به همراه معادله دارسی (۲) می‌تواند میدان سرعت سیال را برای فاز پیوسته و قطره توصیف کند. در این روش باید اطلاعات مرزی مربوط به میدان سرعت را بدست آوریم. به این منظور باید معادله انتگرال خودسازگار زیر را محاسبه کرد[۱۸،۱۹]:

(۸)

$$P_c(r_0) = \int_{\Gamma_w} P_c n_w.\nabla G(r,r_0)dl - \int_{\Gamma_w} G(r,r_0) n_w.\nabla P_c dl$$

$$-\int_{\Gamma_{cd}} \left\{ \frac{\pi}{4}\alpha_r \gamma K_m n.\nabla G(r,r_0) - (1-\alpha_r) P_c n.\nabla G(r,r_0) \right\} dl,$$

که در آن $r = (x,y)$ نقطه میدان و $r_0 = (x_0, y_0)$ نقطه تکینگی بر روی مرز $\Gamma_{cd} \cap \Gamma_w$ فاز پیوسته و $\alpha_r = \frac{\alpha_d}{\alpha_c}$ نسبت تحرک‌پذیری فاز قطره به فاز پیوسته است. تابع گرین دوره‌ای در فضای آزاد نیز توسط رابطه زیر نشان داده می‌شود[۱۸]:

۱ Disk like droplets

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

(۹)

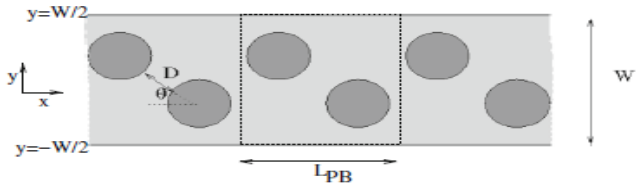
$$G(r,r_0)=-\frac{1}{4\pi}\ln\left[2\left\{\cosh\left[k(y-y_0)\right]-\cos\left[k(x-x_0)\right]\right\}\right],$$

که در آن $k=2\pi/L_{PB}$ عددموج و L_{PB} طول دوره‌ای می‌باشد. ضمنا قبل از حل معادله، لازم است کلیه متغیرهای فیزیکی بکار رفته شده را بدون بعد سازیم.در این راستا از عدد بدون بعد مویینگی $C_a=\frac{\mu_c v_0}{\gamma}$ استفاده می‌کنیم.

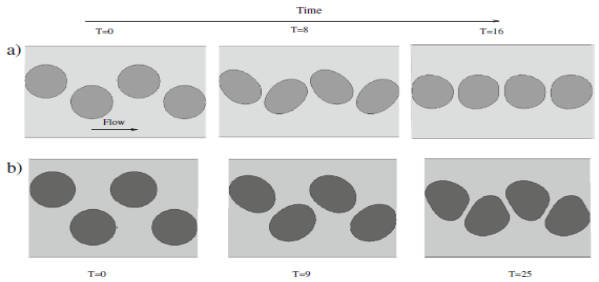
نتایج

در این مطالعه، مکانیسم اساسی حرکت ذرات و وابستگی به سرعت و هم‌چنین محدودیت‌های آنها را در کاربردهای عملی بررسی می‌کنیم. به این ترتیب، پیکربندی اولیه آرایش زیگزاگ دو ردیفی ذرات قرصی‌شکل را که از طریق کانال ریزسیالی جریان می‌یابد در نظر می‌گیریم(شکل ۱). همانطور که در شکل ۱ نشان داده شده‌است، فاصله جدایی فصل‌مشترک با D، و جهت‌گیری نسبی ذرات با θ نشان داده می‌شود که زاویه‌ای بین D و محور X است. طبق تنظیم عددی ما، θ = 0 مربوط به حالتی است که همه ذرات در خط مرکزی کانال قرار دارند، در حالی که θ = 90 نشان می دهد که ذرات دقیقا در بالای یکدیگر قرار دارند. شکل۲ عکسهای لحظه‌ای از قطار قطرات آرایش زیگزاگی دو ردیفی در کانال ریزسیالی مسطح را نشان می‌دهد. نتایج عددی نشان می دهد که وقتی فاصله جدایی فصل‌مشترک نسبت به قطر ذره خیلی بزرگ باشد، ذرات به خط مرکزی کانال می‌رسند و سرانجام در آن حرکت می‌کنند. شکل۲a، انتقال پیوسته بین ساختار زیگزاگ دو ردیف به ساختار یک ردیف را نشان می‌دهد. همانطور که در شکل ۲aمشاهده می‌شود، با گذشت زمان، ذرات به صورت طبیعی به دیواره کانال منتقل می‌شوند و سرانجام در خط مرکزی کانال جریان می‌یابند. رژیم دیگری در شبیه سازی عددی مشاهده شده است که با گذشت زمان، ذرات به خط مرکزی کانال مهاجرت می کنند، اما آنها نمی‌توانند به خط‌مرکزی برسند و آرایش نهایی دو پیکربندی زیگزاگ است(شکل۲b را ببینید). مشاهدات عددی نشان می دهد که آرایش نهایی به اندازه ذره a، فاصله ذرات فصل-مشترک D و جهت گیری نسبی ذرات θ بستگی دارد.

یافته‌های محاسباتی نشان می‌دهد که مکانیسم مهاجرت ذره به



شکل۱: نمای بالا از آرایش زیگزاکی دوردیفی ذرات پنکیکی شکل جاری در کانال ریزسیال مسطح. برای داشتن الگوی متقارن، مبدا مختصات را در مرکز کانال انتخاب می‌کنیم. L_{PB} طول جعبه واحد دوره‌ای است و واضح است که به اندازه ذره وپیکربندی آن بستگی دارد.



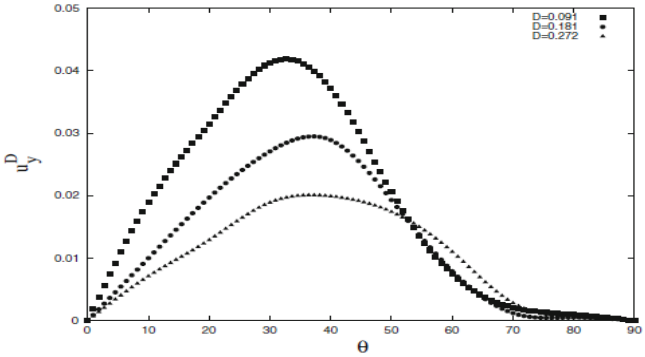
شکل۲: عکس‌هایی از قطار ذرات در کانال‌های ریزسیالی مسطح با گذشت زمان.پارامترهای عددی(a):a=0.103، D=0.901، $\theta=30^\circ$ و Ca=0.23

پارامترهای عددی(b):a=0.103، D=0.136 و $\theta=55^\circ$ و Ca=0.23

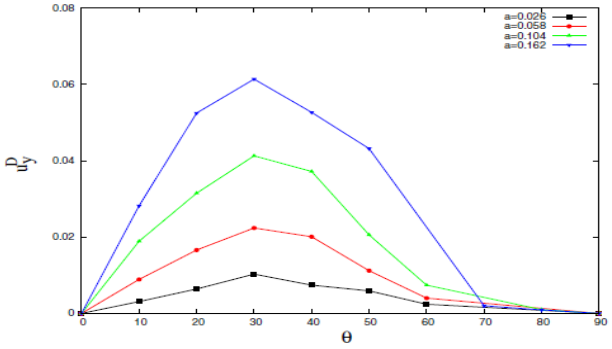
سمت مرکز کانال به پیکربندی اولیه ذرات، اندازه ذره، نسبت وشکسانی و عددموییینگی بستگی دارد. در این مطالعه، تاثیرجهت-گیری‌نسبی ذرات، اندازه ذرات، نسبت وشکسانی و عددموییینگی را بر اجزای سرعت سوقی ذرات طبیعی به خط مرکزی کانال مورد بحث و بررسی قرار می‌گیرد. شکل ۳ مؤلفه عمودی سرعت ذره را به عنوان تابعی از جهت‌گیری نسبی ذرات برای اندازه ذرات داده شده نشان می‌دهد. نتایج عددی نشان می‌دهد که u_y^D ابتدا به صورت یکنواخت از صفر (حالتی که ذرات در خط مرکزی کانال جریان دارند) افزایش می یابد تا به حداکثر مقدار خود θ_m برسد. در θ_m، تغییر سرعت آنقدر تحت تأثیر قرار نمی‌گیرد. بالاتر از مقدار θ_m، با پایین آمدن u_y^D شیب دار می‌شود. علاوه بر این، مشخص است که، با مقدار داده شده θ ، ذرات نزدیکتر دارای شیب تندتری در u_y^D هستند. بنابراین، سرعت عمودی ذرات بستگی به جهت گیری نسبی اولیه ذرات و فاصله ذره دارد. حداکثر مقدار نیز به شدت بستگی به فاصله ذرات و اندازه ذرات دارد. شکل٤ رفتار سرعت عمودی را برای اندازه ذرات مختلف در مقدار معین از فاصله ذرات ارائه می‌دهد. نتایج عددی نشان می‌دهد که مؤلفه عمودی سرعت به شدت به اندازه ذرات و θ بستگی دارد.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

این نتیجه از این واقعیت فیزیکی ناشی می‌شود که حرکت ذرات در جعبه تناوبی، جریان فاز پیوسته را مختل می‌کند. این آشفتگی تابعی از اندازه ذرات است. با ثابت نگه داشتن فاصله ذرات، با افزایش اندازه ذرات، مولفه عمودی سرعت ذرات افزایش می‌یابد. حرکت ذرات منجر به شکست جریان متقارن و ایجاد میدان جریان دو قطبی می‌شود که تعامل هیدرودینامیکی $1/r^2$ را بین ذرات ایجاد می‌کند[۱۳،۱٤]. بنابراین، تعامل دو قطبی هیدرودینامیکی طولانی‌مدت ذرات را به یکدیگر جذب کرده و آنها را در امتداد خط مرکزی قرار می‌دهد. این منجر می‌شود که الگوی زیگزاگ به ذرات موجود در یک خط مرکزی مستقیم تبدیل شود.



شکل۳ : مولفه عمودی سرعت قطره که تابعی از θ است برای فاصله جداسازی-های مختلف قطره و اندازه قطره مشخص a=0.103



شکل٤: مولفه yسرعت قطره. u_y^D تابعی از θ برای اندازه قطره‌های مختلف a وفاصله قطره مشخص D=0.091

نتیجه‌گیری

در این مطالعه، وابستگی به سرعت یک آرایش زیگزاگ دوره-ای از ذرات قرص‌مانند یکنواخت در یک کانال ریزسیالی مسطح مورد مطالعه قرار گرفته‌است. نتایج نشان می‌دهد که ذراتی تمایل دارند به مرکز کانال حرکت کنند که حداقل فشار توسط فاز پیوسته ایجاد شود در حالی که فشار در لبه‌ها حداکثر می باشد. مؤلفه عمودی سرعت ذرات به شدت به پارامترهای کنترل مانند اندازه ذرات، فاصله ذرات، پیکربندی اولیه، جهت‌گیری نسبی ذرات و عددمویینگی بستگی دارد. نتایج نشان می دهد که سرعت عمودی ذرات به صورت یکنواخت از صفر جایی که در آن همه ذرات در خط مرکزی کانال جریان دارند به حداکثر مقدار خود افزایش می-یابد. با افزایش عددمویینگی، ذرات تغییر شکل پذیر بیشتر به مرکز کانال که در آن فشار حداکثر است نزدیک می شوند. مؤلفه سرعت عمودی ذرات به اندازه ذره بستگی دارد و با افزایش آن افزایش می یابد.

مرجع‌ها

[1] M. Seo, Z. Nie, S. Xu, P.C. Lewis, E. Kumacheva," Microfluidics: from dynamic lattices to periodic arrays of polymer disks," *Langmuir* **21**, 4773 (2005)

[2] J.P. Raven, P. Marmottant, "Periodic microfluidic bubbling oscillator: insight into the stability of two-phase microflows." *Phys. Rev. Lett*. **97**, 154501 (2006)

[3] R. Mehrotra, N. Jing, J. Kameoka, "Monodispersed polygonal water droplets in microchannel," *Appl. Phys. Lett*. **92**, 213109 (2008)

[4] P. Marmottant, J.P. Raven, "Microfluidics with foams," *Soft Matter* **5**, 3385 (2009)

[5] N. Kern, D. Weaire, A. Martin, S. Hutzler, S.J. Cox, "Two dimensional viscous froth model for foam dynamics," *Phys. Rev*.E**70**, 041411 (2004)

[6] P. Garstecki, "White sides GM Tessellation of a stripe," *Phys. Rev*. E**73**, 031603 (2006)

[7] E. Kadivar, "Quasistatic packings of droplets in flat microfluidic Channels," *Phys. A* **443**, 486 (2016)

[8] T. Beatus, T. Tlusty, R.B. Ziv, "Phonons in a one-dimensional microfluidic crystal," *Nat. Phys*. **2**, 743 (2006)

[9] T. Beatus, T. Tlusty, R.B. Ziv, "Burgers shock waves and sound in a 2d microfluidic droplets ensemble," *Phys. Rev. Lett*. **103**, 114502 (2009)

[10] M. Loewenberg, E.J. Hinch, "Collision of two deformable drops in shear flow," *J. Fluid Mech*. **338**, 299 (1997)

[11] K.G. Hollingsworth, M.L. Johns, "Droplet migration in emulsion systems measured using MR methods," *J. Colloid Interface Sci*. **296**, 700 (2006)

[12] X. Li, H. Zhou, C. Pozrikidis, "A numerical study of the shearing motion of emulsions and foams," *J. Fluid Mech*. **286**, 379404 (1995)

[13] P.J.A. Janssen, M.D. Baron, P.D. Anderson, J. Blawzdziewicz, M.Loewenberg, E. Wajnryb, "Collective dynamics of confined rigid spheres and deformable drops," *Soft Matter* **8**, 7495 (2012)

[14] J.B. Fleury, U.D. Schiller, S. Thutupalli, G. Gompper, R. Seemann, "Mode coupling of phonons in a dense one-dimensional microfluidic crystal," *New J. Phys*. **16**, 063029 (2014)

[15] K.V. McCloud, J.V. Maher, "Experimental perturbations to Saffman-Taylor flow," *Phys. Rep*. **260**, 139 (1995)

[16] C.W. Park, M. Homsy, "Two-phase displacement in hele shaw cells: theory," *J. Fluid Mech.* **139**, 291 (1984)

[17] C.W. Park, M. Homsy, "Two-phase displacement in hele shaw cells: theory" *J. Fluid Mech.* **139**, 291 (1984)

[18] C. Pozrikids, *A Practical Guide to Boundary Element Methods* (CRC Press, Florida, 2002)

[19] E. Kadivar, S. Herminghaus, M. Brinkmann, "Droplet sorting in a loop of flat microfluidic channels," *J. Phys. Condens. Matter* **25**, 285102 (2013)

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مقایسه تأثیر ویگلرهای افقی و تخت باریک‌شونده بر روی شتاب الکترون توسط موج پلاسمایی در مکانیسم معکوس لیزر الکترون آزاد

کارگریان، آمنه

پژوهشکده پلاسما و گداخت هسته‌ای، پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، تهران، ایران

چکیده

در مکانیسم معکوس لیزر الکترون آزاد (IFEL)، بیم الکترونی و لیزر هم‌زمان از طریق یک ساختار مغناطیسی که ویگلر نامیده می‌شود عبور می‌کنند. در این مکانیسم، برعکس لیزر الکترون آزاد، انرژی از بیم لیزر به الکترون‌ها منتقل می‌شود. در این مقاله، شتاب الکترون در این مکانیسم در حضور یک موج پلاسمایی و با در نظر گرفتن دو ساختار ویگلری متفاوت بررسی می‌شود. نتایج نشان می‌دهد در فواصل طولی حدود 0.5 میلی‌متر در راستای انتشار موج پلاسمایی، حضور ویگلرهای متفاوت تأثیر چندانی بر روی شتاب الکترون نخواهند داشت. اما در فواصل طولانی‌تر که الکترون به انرژی لازم برای اندرکنش با موج پلاسمایی می‌رسد، نقش ویگلرها در افزایش شتاب الکترون بسیار قابل توجه می‌باشد. در حضور ویگلر تخت باریک‌شونده، الکترون‌ها در فاصله طولی حدود 2 میلی‌متر، به انرژی حدود 250 MeV می‌رسند. در حالیکه، در حضور یک ویگلر افقی، با همان دامنه میدان مغناطیسی، به انرژی حدود 300 MeV می‌رسند. این روند افزایشی در فواصل طولانی‌تر بیش‌تر قابل مشاهده می‌باشد. نتایج این مقاله می‌تواند در طراحی و ساخت شتابدهنده‌های ذرات بر مبنای IFEL حائز اهمیت باشند.

واژه های کلیدی: *مکانیسمIFEL ، ویگلر افقی، ویگلرتخت باریک‌شونده، کانال یونی.*

Comparison of the longitudinal and tapered planar wiggler effects on the electron acceleration in IFEL

Ameneh, Kargarian

Plasma and fusion Research School, Nuclear Science and Technology Research Institute, Tehran, Iran

Abstract

In IFEL the laser and electron beam co-propagate through a magnetic configuration named wiggler. In this mechanism, in contrast to the FEL, energy transfers from laser to the electron. In this paper, the electron acceleration is investigated in presence of a plasma wave by considering two wigglers. The results show in distance of 0.5 mm, in the wave propagation direction, the wigglers have no any effect on the electron acceleration. But, in longer distances, they have a significant role. In the presence of a tapered planner wiggler, electrons gain energy about 250MeV, in distance of 2mm. while, in presence of a longitudinal wiggler with the same magnitude, the electron energy gain is 300MeV. The results of this paper are of significance in the design and construction of the accelerators in the IFEL mechanism.

***Keywords**: IFEL mechanism, longitudinal wiggler, tapered planer wiggler, ion channel.*
PACS No. 52

مقدمه

مکانیسم معکوس لیزر الکترون آزاد (IFEL)، به‌عنوان یک مکانیسم شتاب ذرات، برای اولین بار در سال 1972 پیشنهاد شد[1]. آزمایشات مربوط به این مکانیسم نیز اولین بار با استفاده از لیزر CO2 در دهه 1990 انجام شد [2]. در IFEL، پرتو الکترونی و بیم لیزری هر دو از طریق یک آرایه مغناطیسی به نام ویگلر با هم منتشر می‌شوند. در این مکانیسم، برخلاف لیزر الکترون آزاد (FEL)، انرژی از پرتو لیزر به الکترون‌ها منتقل می‌شود. تولید

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

پرتوهای الکترونی همدوس و با کیفیت بالا در IFEL، آن را برای منابع نوری پیشرفته، برخورد کننده‌های خطی، و کاربردهای زیست-پزشکی مناسب می‌کند. اما یکی از اشکالات عمده این مکانیسم شتاب‌دهی، کاهش هم‌فازی الکترون و موج الکترومغناطیسی است که ممکن است در همان مراحل اولیه شتاب اتفاق بیفتد. از طرفی، پراکندگی پالس لیزر نیز یک عامل محدود کننده است. یکی از راه‌های جلوگیری از این اشکالات، استفاده از پالس لیزری چرپ‌شده [3] یا تغییر دوره ویگلر [4] می‌باشد. روش دیگر که موضوع این مقاله می‌باشد استفاده از موج پلاسمایی تولید شده توسط لیزر برای شتاب الکترون در این مکانیسم می‌باشد.

یک موج پلاسمای نسبیتی، قادر به شتاب ذرات تا انرژی‌های بسیار بالا می‌باشد [5]. در واقع، میدان الکتریکی متناظر با موج پلاسمایی عامل اصلی شتاب ذرات است. چنین موجی را می‌توان با برهم-کنش یک پالس لیزری و یا بیم ذرات پرانرژی با پلاسما ایجاد کرد. یک پالس لیزری با توان بالا و از مرتبه فمتوثانیه در اثر برهم-کنش با محیط یونیزه پلاسما، میدان‌های قوی برای شتاب‌دهی الکترون را ایجاد می‌کند که می‌تواند از $100\ \mathrm{GV/m}$ نیز بیش‌تر باشد که سه مرتبه بیشتر از بیشینه میدان شتاب دهنده‌های رادیو فرکانسی معمولی است. شتاب ذرات توسط موج پلاسما، یک رهیافت در حال توسعه برای شتاب الکترون است که با شتاب رادیو فرکانسی معمولی تفاوت‌های قابل توجهی دارد. از جمله اینکه این رهیافت قادر به شتاب الکترون‌ها تا انرژی‌های بسیار بالا و در مسافت‌های کوتاه می‌باشد. طی ده سال گذشته، توسعه شتابدهنده‌ها بر مبنای موج پلاسمایی، به چندین نقطه عطف مهم رسیده است. این نقاط قوت، به عنوان مثال، مشاهده اولین باریکه-های تک انرژی ، تولید باریکه‌های قابل کنترل و با ثبات بیش‌تر می‌باشد. علاوه بر اندازه کوچک این شتابدهنده‌ها، آن‌ها می‌توانند باریکه‌هایی با طول کوتاه، اندازه کوچک عرضی و شدت بالا تولید کنند [6].

در این مقاله، ما از مکانیسم IFEL برای مطالعه شتاب الکترون با استفاده از موج پلاسمای نسبیتی استفاده می‌کنیم. دلیل استفاده از موج پلاسمایی، غلبه بر نقاط ضعف لیزر در IFEL، مانند پراکندگی، کاهش رزونانس، و کاهش هم‌فازی است. علاوه بر این، تأثیر حضور میدان‌های ویگلری متفاوت در این مکانیسم شتابدهی را نیز مورد بررسی قرار داده‌ایم. در بخش دوم این مقاله به بررسی آنالیز نسبیتی شتاب الکترون در مکانیسم IFEL پرداخته‌ایم. بخش سوم به بیان نتایج عددی اختصاص داده شده است و در بخش آخر، خلاصه و نتیجه‌گیری بیان شده است.

آنالیز نسبیتی شتاب الکترون در مکانیسم IFEL

در رژیم برهم‌کنش پالس لیزر با پلاسما، موج پلاسمایی با میدان قوی هنگامی ایجاد می‌شود که دوره پالس لیزری با دوره موج پلاسمایی قابل مقایسه باشد. از طرف دیگر، هنگامی که الکترون‌ها تحت تأثیر نیروی پاندرمتیو لیزری از مرکز دور می-شوند، یک کانال یونی اطراف محور لیزر ایجاد می‌شود که میدان بار فضایی این کانال می‌تواند بر روی شتاب و مسیر حرکت الکترون مؤثر باشد. میدان الکتریکی موج پلاسما که در اثر برهم-کنش لیزر با پلاسما ایجاد شده را به صورت زیر در نظر می‌گیریم [7-10]:

$$\mathbf{E} = \hat{x}A\exp(-(x^2)/r_p^2)\frac{2x}{kr_p^2}\sin(\omega t - kz + \theta \qquad (1)$$
$$+\hat{z}A\exp(-(x^2)/r_p^2)\cos(\omega t - kz + \theta)$$

در اینجا A دامنه موج پلاسمایی، θ فاز اولیه، و r_p شعاع موج پلاسمایی می‌باشد. در اینجا، $\hat{z}$ راستای طولی است که در جهت انتشار لیزر می‌باشد. پتانسیل بار فضایی نیز به‌صورت $\varphi = \varphi_0(1-(x^2+y^2)/r_0^2)$ در نظر گرفته شده است که r_0 شعاع اولیه کانال یونی می‌باشد. معادلات حاکم بر حرکت الکترون نسبیتی در کانال یونی ایجاد شده به‌صورت زیر می‌باشند.

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = \frac{dm\gamma\mathbf{v}}{dt} = -e\mathbf{E} + e\nabla\varphi + \frac{\mathbf{V}\times\mathbf{B}}{C} \qquad (2)$$

$$\frac{d\gamma}{dt} = \frac{-e}{m_0C^2}(\mathbf{E} - \nabla\varphi).\mathbf{V} \qquad (3)$$

در این روابط، B میدان مغناطیسی ویگلری می‌باشد که شکل آن برای ویگلر افقی به‌صورت $\mathbf{B}_l = \mathrm{B}_l\cos(2\pi z/\lambda_l)\hat{z}$ و برای ویگلر تخت باریک‌شونده به‌صورت $\mathbf{B}_p = \mathrm{B}_p(\sin(2\pi z/\lambda_p(1+\delta z))\hat{x})$ می‌باشد که در اینجا δ پارامتر باریک‌شوندگی است. فاکتور نسبیتی لورنتس به‌صورت

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

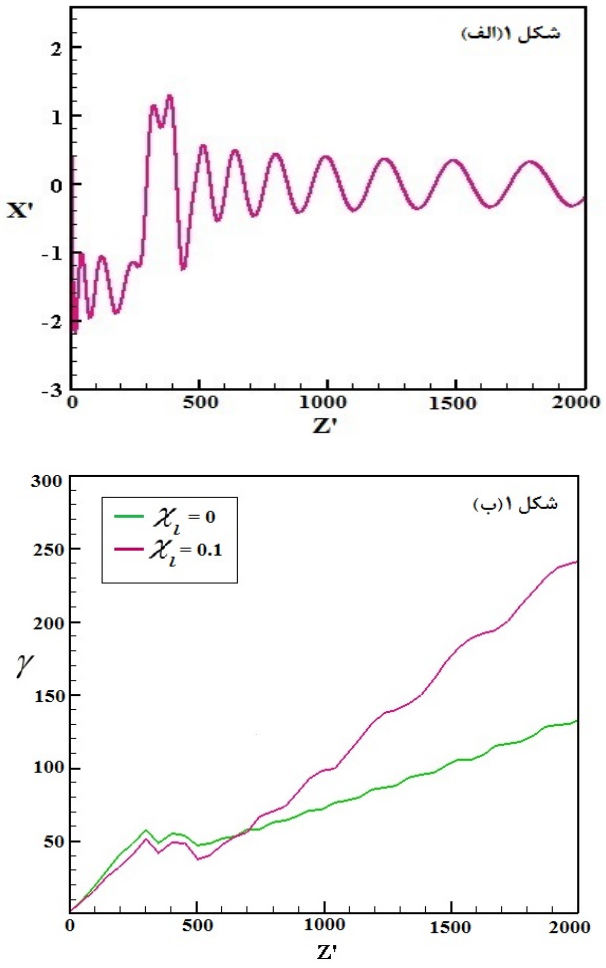
$(\gamma = (1+\mathbf{p}^2/m^2c^2)$ که در آن $\mathbf{p} = m\gamma\mathbf{v}$ می‌باشد. با جایگذاری میدان ویگلر، میدان بار فضایی یون و میدان الکتریکی موج پلاسمایی در روابط (2) و (3) معادلات حاکم بر حرکت الکترون در این مکانیسم به‌دست خواهند آمد. معادلات حاصل، روابط کوپل شده غیرخطی خواهند بود که با استفاده از روش‌های عددی قابل تحلیل خواهند بود. در این مقاله، از روش عددی رانگ-گوتای مرتبه چهارم به همراه یک کد شبیه‌سازی نسبیتی تک-ذره‌ای، استفاده شده است. پارامترهای استفاده شده در بخش نتایج به‌صورت زیر بی‌بعد شده‌اند:

$$x' = kx,\ t' = \omega t,\ k' = kc/\omega,\ a_p = eA/m_0\omega c,\ z' = kz,$$
$$r_1^2 = k^2 r_0^2,\ r_2^2 = k^2 r_p^2,\ \varphi'_0 = e\varphi_0/m_0c^2, \delta' = \delta z,$$
$$\chi_p = eB_p/m_0\omega c,\ \chi_l = eB_l/m_0\omega c,\ \mathbf{p}' = \mathbf{p}/mc.$$

با استفاده از روابط به‌دست‌آمده در این بخش، شتاب الکترون توسط موج پلاسمایی تحت تأثیر میدان‌های ویگلری متفاوت و همچنین میدان بار فضایی یون را مورد بررسی قرار می‌دهیم.

نتایج عددی

در این بخش، با استفاده از روابط بخش 2 و پارامترهای اولیه به‌صورت $a_p = 4$، $\varphi_0 = 0.6$، $k = 1.7$، $\theta = 0$، $r_1 = 2$، $r_2 = 4$، $\gamma_0 = 3.34$ $(v_x = 0.3c,\ v_y = 0.1c,\ v_z = 0.9c)$، مسیر حرکت الکترون در کانال یونی تحت تأثیر موج پلاسمایی و در مکانیسم IFEL مورد بررسی قرار گرفته است. شکل 1 (الف) مسیر حرکت الکترون و شکل 1(ب) انرژی الکترون را غیاب میدان ویگلری (منحنی سبزرنگ) و در حضور میدان ویگلری تخت باریک‌شونده با پارامتر باریک‌شونده $\delta' = 0.005$ و دامنه $\chi_p = 0.1$ (منحنی قرمزرنگ) نشان می‌دهد. حرکت نوسانی الکترون در حضور میدان ویگلری تخت باریک‌شونده حول مسیر انتشار لیزر (محور z)، بخوبی قابل مشاهده می‌باشد. میدان ویگلر باعث باقی ماندن و حفظ الکترون در ناحیه شتاب می‌شود. شکل 1(ب) افزایش انرژی قابل توجه الکترون در راستای انتشار لیزر در مسافت‌های طولانی را نشان می‌دهد. همانگونه که دیده می‌شود در فواصل کوتاه، حدود 0.5 میلی‌متر، افزایش انرژی محسوس نمی‌باشد اما در فاصله 2 میلی‌متری الکترون به انرژی حدود MeV 250 می‌رسد. یعنی بیش از دو برابر انرژی الکترون افزایش یافته است

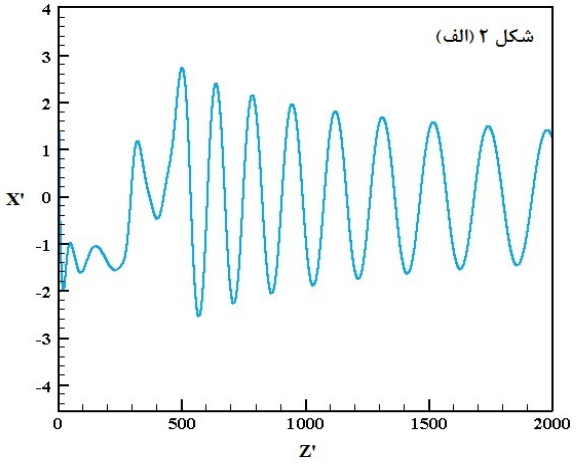


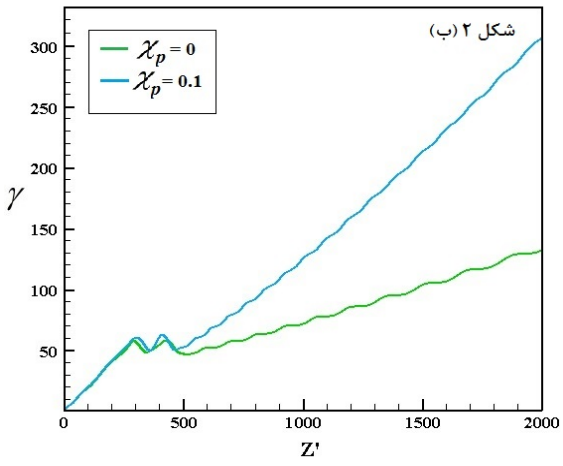
شکل 1: (الف) مسیر حرکت الکترون و (ب) انرژی آن در غیاب ویگلر (منحنی سبزرنگ) و در حضور ویگلر تخت باریک‌شونده با پارامتر باریک‌شونده $\delta' = 0.005$ و دامنه $\chi_p = 0.1$ (منحنی قرمزرنگ).

شکل 2 (الف) مسیر حرکت الکترون در کانال یونی تحت تأثیر موج پلاسما را در حضور میدان ویگلری افقی را نشان می‌دهد. و شکل 1(ب) نیز نمودار انرژی الکترون را در غیاب ویگلر (منحنی سبزرنگ) و در حضور میدان ویگلری افقی با دامنه $\chi_p = 0.1$ (منحنی آبی‌رنگ) نشان می‌دهد. الکترون با کسب انرژی از موج پلاسمایی ایجاد شده توسط لیزر، با حرکت نوسانی در میدان ویگلری افقی، حول مسیر انتشار لیزر حرکت می‌کند. میدان

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

ویگلری موجب می‌شود الکترون بتواند در مسافت‌های طولانی‌تر با موج برهم‌کنش کرده و از آن انرژی کسب نماید. در واقع، ویگلر باعث افزایش حضور الکترون در فاز شتاب موج پلاسمایی می‌شود. شکل 2(ب) به‌خوبی افزایش انرژی الکترون در راستای انتشار لیزر در مسافت‌های طولانی را نشان می‌دهد. همانگونه که دیده می‌شود در فواصل کوتاه که هنوز الکترون به انرژی کافی برای تبادل انرژی با موج نرسیده است، اافزایش انرژی قابل‌توجه نمی‌باشد اما در فواصل طولانی‌تر، افزایش انرژی الکترون قابل مشاهده است. به عنوان‌مثال، در فاصله 2 میلی‌متری، الکترون به انرژی حدود 300 MeV می‌رسد. این بدان معنی است که انرژی الکترون سه برابر افزایش یافته است.





شکل 2: (الف) مسیر حرکت الکترون و (ب) انرژی آن در غیاب ویگلر (منحنی سبزرنگ) و در حضور ویگلر افقی با دامنه $\chi_l = 0.1$ (منحنی آبی‌رنگ).

نتیجه گیری

در این مقاله، شتاب الکترون در اثر یک موج پلاسمایی در مکانیسم IFEL با در نظر گرفتن دو ساختار ویگلری متفاوت بررسی می‌شود. نتایج نشان می‌دهد در فواصل طولانی در مسیر انتشار موج، حضور ویگلرها در افزایش انرژی الکترون بسیار قابل توجه می‌باشد. در حضور ویگلر تخت باریک‌شونده، انرژی الکترون‌ها در فاصله طولی حدود 2 میلی‌متر، به حدود 250 MeV می‌رسد. در حالیکه، در حضور یک ویگلر افقی، با همان دامنه میدان مغناطیسی، به انرژی حدود 300 MeV می‌رسد. این افزایش در فواصل طولانی‌تر بیش‌تر قابل مشاهده می‌باشد بدلیل اینکه حضور ویگلر باعث می‌شود که الکترون بتواند در مسافت‌های طولانی‌تر با موج برهم‌کنش کرده و در فاز شتاب موج پلاسمایی بماند. نتایج این مقاله می‌تواند در طراحی و ساخت شتابدهنده‌های ذرات بر مبنای IFEL قابل‌توجه باشند.

مرجع‌ها

[1] B. Palmer, “Interaction of relativistic particles and free electromagnetic waves in the presence of a static helical magnet,” J. Appl. Phy vol. **43**, no. 7, (1992) 3014–3022.
[2] A. V. Steenbergen and J. C. Gallardo, “Inverse free electron laser accel-erator development,” in Proc. PAC, Vancouver, BC, Canada, May (1997) 616–620.
[3] S. Kumar and M. Yoon, “Electron acceleration by a chirped circularly polarized laser pulse in vacuum in the presence of a planar magnetic wiggler,” Phys. Scripta, vol. **77**, no. 2, (2008) 025404.
[4] K. P. Singh and V. K. Tripathi, “Laser induced electron acceleration in a tapered magnetic wiggler,” Phys. Plasmas, **11**, no. 2, (2004)743–746.
[5] Mangles, S. P, et al., "Monoenergetic beams of relativistic electrons from intense laser–plasma interactions." *Nature* **431**, (2004) 535-538.
[6] Leemans, W. P, "GeV electron beams from a centimetre-scale accelerator." *Nature physics* **2**, no. 10 (2006) 696-699.
[7] N. Kumar, and V. K. Tripathi. "Effect of betatron resonance on plasma wave acceleration of electrons in an ion channel." *EPL (Europhysics Letters)* **75**, no. 2 (2006) 260-266.
[8] D. N. Gupta, et al "Space-charge field assisted electron acceleration by plasma wave in magnetic plasma channel." *IEEE Transactions on Plasma Science* **44**, no. 11 (2016) 2867-2873.
[9] H. Mehdian, et al., Numerical study of electron acceleration by plasma wave in an ion channel under obliquely applied magnetic field." *Optik* **126**, no. 21 (2015) 3299-3302.
[10] K. P. Singh, et al. "Electron acceleration by a plasma wave in a sheared magnetic field." *Physics of Plasmas* **10**, no. 5 (2003) 1493-1499.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مطالعهٔ محاسباتی خواص هندسی و نوری ساختارهای دوبعدی CrB و CrBS

یعقوبی نوتاش، مینا[۱]؛ راستکار ابراهیم‌زاده، علیرضا[۱]؛ جهانبین سردرودی، جابر[۲]

[۱] آزمایشگاه شبیه‌سازی مولکولی، گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه شهید مدنی آذربایجان ، تبریز

[۲] آزمایشگاه شبیه‌سازی مولکولی، گروه شیمی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه شهید مدنی آذربایجان ، تبریز

چکیده

در این کار تحقیقاتی خواص هندسی و نوری نانوساختارهای CrB خالص و همچنین عامل‌دار شده با اتم‌های S به‌صورت CrBS به عنوان نانوساختارهایی از MBene ها با روش نظریهٔ تابعی چگالی مورد مطالعه قرار گرفته‌است. سلول واحد این ساختارهای دو بعدی و موقعیت اتم‌ها در داخل سلول واحد، به طور کامل بهینه سازی شده‌است. برای مطالعهٔ خواص نوری این دو ساختار، قسمت حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک، محاسبه شده و نتایج به صورت نمودار ارائه شده است. نمودارها نشان می‌دهند که پاسخ این ساختارها به راستاهای مختلف قطبش نور متفاوت است و عامل‌دار شدن سطح CrB با اتم‌های S باعث به وجود آمدن تغییراتی، به خصوص در انرژی‌های پایین، در خواص نوری می‌گردد.

واژه های کلیدی: نظریهٔ تابعی چگالی، CrB،خواص نوری، تابع دی‌الکتریک

Theoretical study of structural and optical properties of two dimensional CrB and CrBS

Yaghoobi Notash, Mina[1]; Rastkar Ebrahimzadeh, Alireza[1]; Jahanbin Sardroodi, Jaber [2]

[1] *Molecular Simulation Laboratory, Department of Physics, Azarbaijan Shahid Madani University, Tabriz*
[2] *Molecular Simulation Laboratory, Department of Chemistry, Azarbaijan Shahid Madani University, Tabriz*

Abstract

In this research work, the structural and optical properties of two-dimensional CrB MBene, and S functionalized of this structure, CrBS, are studied using density functional theory calculations. The unit cell of these structures and their atomic positions are fully optimized. To study the optical properties of these structures, the real part and imaginary part of dielectric function are calculated and the results are analyzed on the graphs. The results show these structures have different responses to various polarization of light and the functionalization of CrB with S atoms changes the optical properties, especially in low energies.

Keywords: *Density functional theory, CrB, Optical properties, Dielectric function*

PACS No. *80, 81*

مقدمه

بوریدهای فلزات واسطه معروف به MBene ها، جدیدترین ساختارهای دوبعدی هستند که از طریق لایه برداری از فاز MAB بدست می‌آیند. فازهای MAB، کریستال‌های اورتورومبیک با فرمول‌های شیمیایی MAlB، M_2AlB_2، $M_3Al_2B_2$، M_3AlB_4 و M_4AlB_6 هستند که در آنها، M، فلز واسطه می‌باشد[۱،۲]. اخیرا ساختارهای دوبعدی CrB و MoB با استفاده از روش‌های لایه‌برداری از فاز MAB (MoAlB و Cr_2ALB_2) سنتز شده‌اند [۳-۵]. مطالعات تجربی و نظری بر روی این ساختارها و توجه به خواص و کاربردهای آنها به سرعت در حال رشد می‌باشد.در این

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مقاله، با استفاده از روش نظریهٔ تابعی چگالی (DFT)، برخی خواص هندسی و نوری CrB به عنوان یک ساختار دو بعدی از MBene ها و CrB عامل‌دار شده با اتم‌های S با فرمول شیمیایی CrBS، مورد مطالعه قرار گرفته است.

.

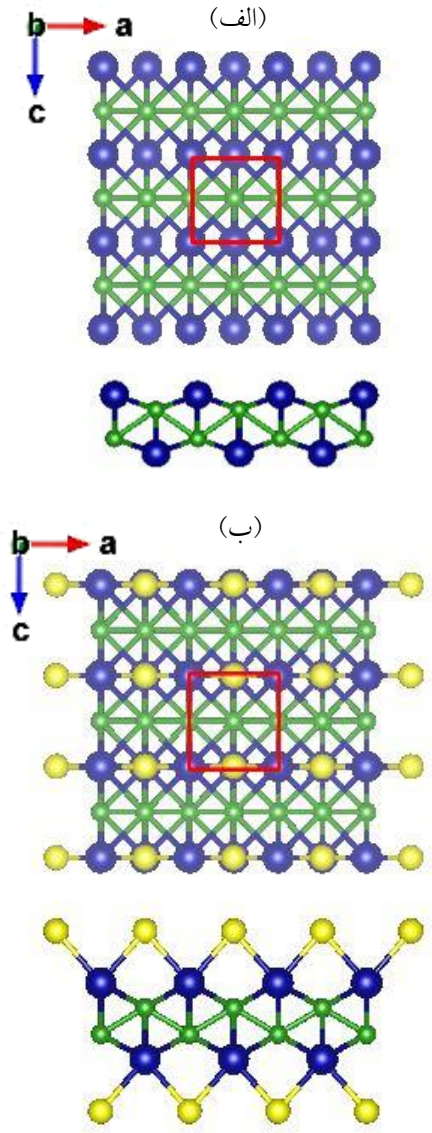
روش انجام محاسبات

تمام محاسبات DFT با استفاده از بستهٔ نرم افزاری VASP انجام شده است [٦]. از تقریب گرادیان تعمیم یافته (GGA) و پارامتر های PBE برای تابعی تبادلی-همبستگی استفاده شده است [٧]. این دو ساختار در صفحهٔ x-z قرار گرفته و مش‌بندی منخورست-پک برای نمونه‌برداری ازمنطقهٔ بریلوئن با نقاط ۱۲×۱×۱۲ برای سلول واحد انتخاب شده است [٨]. همچنین فضای خالی بزرگتر از۲۰ آنگستروم در راستای عمود بر صفحهٔ CrB برای جلوگیری از اندرکنش میان صفحات در سلولهای مجاور در نظر گرفته شده است. شرط همگرایی برای نیرو کمتر از ۰,۰۰۵ الکترون ولت بر آنگستروم در بهینه‌سازی هندسی و برای انرژی کمتر از 10^{-7}الکترون ولت در نظر گفته شده است.

نتایج

ساختار هندسی

ساختار اولیهٔ صفحهٔ دوبعدی CrB از حذف اتم های Al از فاز MAB با فرمول Cr_2AlB_2 بدست آمده و موقعیت اتم‌ها و سلول واحد آن به طور کامل بهینه‌سازی شده است. سپس اتم‌های S برای عامل‌دار کردن سطح در امتداد اتم‌های Cr، روی سطح قرار گرفته و دوباره ساختار جدید بدست آمده بهینه‌سازی هندسی شده است. اتم‌های S پس از بهینه‌سازی جابجا شده و در فاصلهٔ بین دو اتم Cr و به فاصلهٔ عمودی ۱,۸۵ Å ازصفحه قرار گرفته است. شکل ۱ ساختار هندسی CrB و CrBS را به همراه سلول واحد آنها نشان می دهد. ابعاد سلول واحد و طول پیوند بین اتم‌ها برای هر دو ساختار در جدول ۱ آمده‌است.



شکل۱ : (الف) ساختار هندسی CrB و (ب) ساختار هندسی CrBS از نماهای مختلف به همراه سلول واحد آن‌ها. اتم‌های Cr، B و S به ترتیب با رنگ‌های آبی، سبز و زرد نمایش داده شده‌اند.

جدول۱ : ابعاد سلول واحد و طول پیوند بین اتم‌های ساختار CrB و CrBS برحسب آنگستروم.

	CrB	CrBS
ابعاد سلول واحد	a=۲,۸۹ c=۲,۸۸	a=۲,۸۸ c=۲,۹۵
طول پیوند B-B	۱,۷۹	۱,۶۸
طول پیوند Cr-B	۲,۱۵	۲,۲۱
طول پیوند Cr-S	.....	۲,۲۲

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

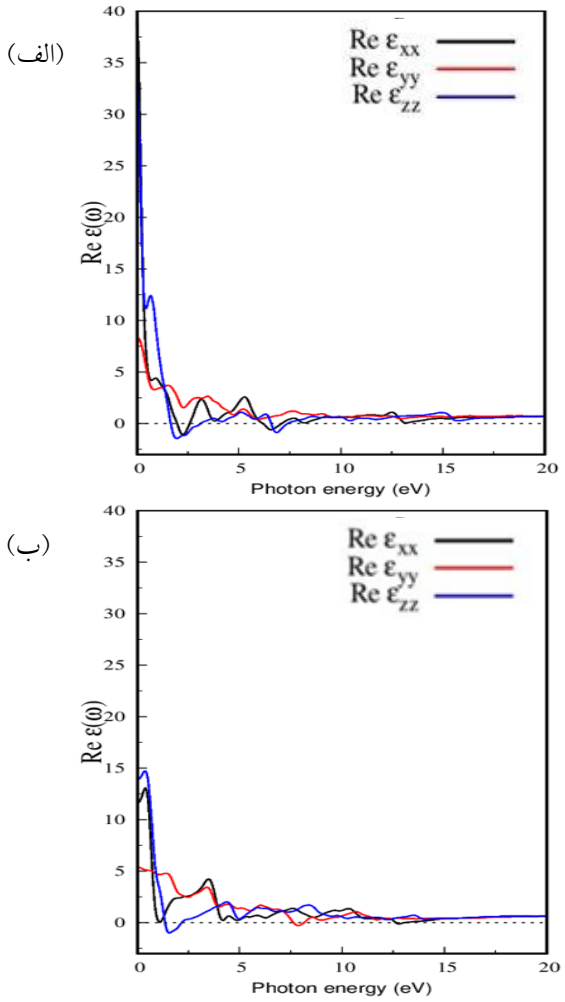
تابع دی‌الکتریک

خواص نوری، یکی ازمهمترین ویژگی‌های ماده است، که باید مورد مطالعه قرار بگیرد و بیانگر پاسخ ماده به تابش‌های الکترومغناطیسی به ویژه نور مرئی می‌باشد و می تواند با استفاده از تابع دی‌الکتریک در بازهٔ پاسخ خطی تعیین شود. تابع دی‌الکتریک یک تابع مختلط وابسته به فرکانس است و به صورت زیر بیان می-شود:

$$\varepsilon(\omega) = \mathrm{Re}\,\varepsilon(\omega) + i\,\mathrm{Im}\,\varepsilon(\omega) \qquad (۱)$$

که $\mathrm{Re}\,\varepsilon(\omega)$ و $\mathrm{Im}\,\varepsilon(\omega)$ به ترتیب بخش‌های حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک می‌باشند. قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک بر اساس تبدیلات کرامرز-کرونیک از تغییرات قسمت موهومی بدست می آید [۹]. خواص اپتیکی نظیر ضریب شکست، ضریب خاموشی، ضریب جذب و ضریب انعکاس براساس قسمت جقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک محاسبه می‌شوند [۱۰].

سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک برای CrB و CrBS در شکل ۲ (الف) و (ب) نشان داده شده است. با توجه به شکل مشاهده می-شود که این ساختارها از نظر نوری رفتارهای ناهمسانگردی در راستاهای مختلف از خود نشان می‌دهند . در این شکل اندیس‌های xx، yy و zz راستای قطبش میدان الکتریکی را نشان می‌دهد. قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک در انرژی صفر، ثابت دی‌الکتریک استاتیک را بدست می‌دهد که مقدار آن در راستای x وz بسیار بیشتر از راستای عمود بر صفحه، y ، می‌باشد. با افزایش انرژی فوتون، $\mathrm{Re}\,\varepsilon(\omega)$ در هر سه راستا کاهش می‌یابد. مقدار $\mathrm{Re}\,\varepsilon_{xx}$ در بازه انرژی ۲ تا ۲,۵ و ٦,۲ تا ۷,۱ الکترون‌ولت کمتر از صفر می‌شود. همچنین مقدار $\mathrm{Re}\,\varepsilon_{zz}$ در بازهٔ انرژی ۱,٦ تا ۳,۱ و ٦,٦ تا ۷,٤ الکترون‌ولت منفی می‌شود. این نشان می‌دهد که نور در این بازهٔ انرژی نمی‌تواند در محیط منتشر شود و CrB در راستای x و z و در بازه‌های انرژی ذکر شده، رفتار فلزی از خود نشان می‌دهد. مقدار $\mathrm{Re}\,\varepsilon(\omega)$ در راستای y همواره بزرگتر از صفر می‌باشد. با توجه به شکل۳-ب، با عامل دار کردن سطح CrB با اتمهای S رفتار اپتیکی آن تغییر می‌کند. ثابت دی‌الکتریک استاتیک در هر سه راستا کاهش می‌یابد و $\mathrm{Re}\,\varepsilon_{xx}$ و $\mathrm{Re}\,\varepsilon_{zz}$ در انرژی‌های خیلی پایین، با افزایش انرژی افزایش می‌یابند و در انرژی ۰,٤ الکترون‌ولت به مقدار بیشینه خود می‌رسند و پس از آن به شدت افت می‌کنند. در انرژی های ۲ و ٤ الکترون‌ولت، مقدار $\mathrm{Re}\,\varepsilon_{xx}$ به صفر نزدیک می‌شود و پس از آن با افزایش انرژی فوتون، همچنان با مقادیر مثبت افت‌وخیز می‌کند. با این وجود مقدار $\mathrm{Re}\,\varepsilon_{zz}$ در بازه انرژی ۱,۳ تا ۲,۲ الکترون‌ولت، منفی شده و ساختار CrBS رفتار فلزی در این بازه و در راستای z از خود نشان می‌دهد. همچنین مقدار $\mathrm{Re}\,\varepsilon_{yy}$ با افزایش انرژی از مقدار صفر، با افت‌وخیزهای کوچک کاهش می‌یابد و در بازهٔ کوچک ۷,٦ تا ۸,۱ الکترون‌ولت، منفی می‌شود.



شکل۲ : (الف) قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک CrB و (ب) قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک CrBS.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک نمایانگر گذار الکترونهاست که شامل گذارهای درون‌نواری و بین‌نواری می‌باشند. چنانچه در شکل ۳ (الف) مشاهده می‌شود برای ساختار CrB، $\mathrm{Im}\ \varepsilon_{xx}$ و $\mathrm{Im}\ \varepsilon_{yy}$ دارای پیک‌های نسبتا بزرگی درانرژی‌های پایین می‌باشند که نمایانگر گذار بین‌نواری هستند که با افزایش انرژی مقادیر آنها کاهش می‌یابد. در راستای y افت‌وخیزها نسباتا کم و یکنواخت بوده و در واقع در این راستا، گذارهای درون‌نواری رخ می‌دهد. در ناحیه انرژی‌های بالاتر از ۱۵ الکترون‌ولت (ناحیه فرابنفش) مقدار $\mathrm{Im}\ \varepsilon(\omega)$ در هر سه راستا به صفر نزدیک می‌شود و ثابت می‌ماند و در نتیجه ساختار CrB نسبت به این ناحیه از طیف شفاف می‌باشد. در ساختار CrBS، $\mathrm{Im}\ \varepsilon_{xx}$ و $\mathrm{Im}\ \varepsilon_{yy}$ در انرژی‌های کمتر از ۲ الکترون‌ولت دارای پیک کوچکتری می‌باشند و با افزایش انرژی فوتون افت‌وخیزها کمتر می‌شوند و در انرژی‌های بالاتر از ۱۵ الکترون‌ولت به صفر می‌رسند.

نتیجه گیری

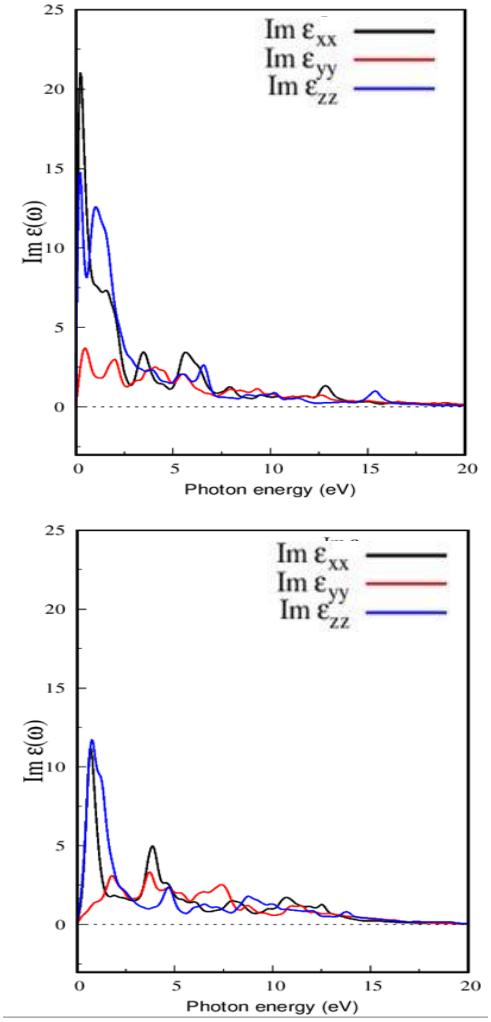
در این مقاله با استفاده از روش نظریهٔ تابعی چگالی و با تقریب GGA ساختار هندسی و خواص نوری CrB و CrBS مورد مطالعه قرار گرفته است. تابع دی الکتریک محاسبه شده نشان می‌دهد که این ساختار ها در مقابل راستاهای مختلف قطبش نور رفتار ناهمسانگردی از خود نشان می‌دهند. با عامل دار کردن سطح CrB با اتم های S، رفتار نوری به خصوص در انرژی‌های کمتر از ۷ الکترون‌ولت تحت تاثیر قرار می‌گیرد. به عنوان مثال $\mathrm{Re}\ \varepsilon_{xx}$ برای CrB در بازهٔ ۲ تا ۲,۵ و ۶,۲ تا ۷,۱ الکترون‌ولت منفی می‌شود که نشان دهندهٔ رفتار فلزی در این بازه‌ها می باشد در حالیکه برای CrBS این کمیت همواره مثبت می‌باشد. همچنین محل پیک های $\mathrm{Im}\ \varepsilon(\omega)$ و مقدار آنها با عامل دار کردن سطح CrB تغییر کرده است و برای انرژی های کمتر از ۳ الکترون‌ولت به سمت انرژی‌های بالاتر در هر سه راستا جابجا شده است.

سپاسگزاری

این کار با پشتیبانی صندوق حمایت ازپژوهشگران و فناوران کشور (INSF) با شماره طرح ۹۷۰۰۹۴۰۸ انجام شده است.

(الف)

(ب)



شکل۳ : (الف) قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک CrB و (ب) قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک CrBS.

مرجع‌ها

[۱] M. Ade and H. Hillebrecht, *Inorganic Chemistry* **54**, 6122 (2015)

[۲] S. Kota et al., *Scientific Reports* **6**, 30339 (2016)

[۳] L. T. Alameda, C. F. Holder, J. L. Fenton, and R. E. Schaak, *Chemistry of Materials* **29**, 8953 (2017)

[٤] L. T. Alameda, P. Moradifar, Z. P. Metzger, N. Alem, and R. E. Schaak, *Journal of the American Chemical Society* **140**, 8833 (2018)

[٥] F.-Z. D. Haiming Zhang, Huimin Xiang, Xiaohui Wang, Zhili Zhang, Yanchun Zhou, *J. Mater. Sci. Technol.* **35**, 1593 (2019)

[٦] G. Kresse and J. Furthmüller, *Physical Review B* **54**, 11169 (1996)

[٧] J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, *Physical Review Letters* **77**, 3865 (1996)

[٨] H. J. Monkhorst and J. D. Pack, *Physical Review B* **13**, 5188 (1976)

[٩] D. Ter Haar, *Nature* **178**, 337 (1956)

[۱۰] S. Saha, T. P. Sinha, and A. Mookerjee, *Physical Review B* **62**, 8828 (2000)

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بررسی تحول زمانی بلند مدت فضای فاز ذرات و مدهای تحریکی در سیستم برهم‌کنش لیزر – پلاسما با استفاده از کد 2DXOOPIC

کارگریان ، آمنه[۱]؛ حاجی‌شریفی، کمال[۲]

[۱]پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، پژوهشکده پلاسما و گداخت هسته‌ای، تهران، ایران

[۲] پژوهشگاه پلاسما، دانشگاه خوارزمی، تهران، ایران

چکیده

در این مقاله، به بررسی تحول فضایی ذرات پلاسما و مدهای برانگیخته شده در بازه‌های زمانی طولانی در سیستم برهم‌کنش پالس لیزری فمتو ثانیه با پلاسما می‌پردازیم. بدین منظور، از کد شبیه‌سازی ذره‌ای الکترومغناطیسی 2DXOOPIC که قابلیت شبیه‌سازی دقیق محیط پلاسما با ابعاد بزرگ و در زمان‌های طولانی را دارد استفاده می‌کنیم و تغییرات فضای فاز ذرات در راستای عمود و موازی با انتشار پالس لیزری را مورد بررسی قرار می‌دهیم. نتایج شبیه سازی نشان می‌دهند در زمان‌های اولیه تنها مدهای متناظر با امواج الکترومغناطیسی پراکنده شده در خلاف جهت انتشار پالس لیزری در محیط ایجاد شده و موجب شتاب‌دهی ذرات می‌شوند در حالیکه در زمان‌های طولانی‌تر مدهای متناظر با امواج پراکنده شده در راستای انتشار لیزر موجب شتاب‌دهی ذرات در نواحی مرکزی و انتهای محیط پلاسما می‌شوند.

واژه های کلیدی: *کد 2DXOOPIC ، شبیه سازی ذره‌ای، فضای فاز ذرات، انتشار امواج الکترومغناطیسی.*

Investigation of long-term evolution of particle phase-space and stimulated modes in laser-plasma interaction system using 2DXOOPIC code

Kargarian, Ameneh[1]; Hajisharifi, Kamal[2]

[1] Plasma and fusion Research School, Nuclear Science and Technology Research Institute, Tehran, Iran

[2] Plasma Research Institute, Kharazmi University, Tehran, Iran

Abstract

In this paper, the long-term evolution of particle phase-space and stimulated modes in the laser-plasma interaction system have been investigated. For this purpose, we used of electromagnetic PIC simulation code which is able to simulate precisely the large-scale plasmas over long times and investigated the evolution of particle phase-space in the perpendicular and parallel to the laser pulse propagation direction. The simulation results show that in early times the only modes corresponding to the scattered electromagnetic waves in the opposite direction of laser propagation are excited and cause the particles to accelerate. While, in longer times, the modes corresponding to the scattered waves in the laser propagation direction accelerate the particles in the central region and at the end of the plasma environment.

***Keywords**: 30*

PACS No. 2DXOOPIC code, PIC simulation, particles phase-space, electromagnetic waves propagation.

مقدمه

امروزه در دنیای شتابگرهای ذرات، شتابدهنده‌های الکترونی، بر مبنای عبور پالس لیزری از محیط پلاسما، بسیار مورد توجه قرار گرفته‌اند [۱-۳]. با عبور پالس لیزری با شدت بالا از درون پلاسما، مدهای نوسانی طولی در راستای انتشار لیزر ایجاد می‌شوند. در پلاسماهای رقیق، این نوسانات طولی ایجاد شده و یا امواج الکتروستاتیکی در امتداد مسیر پالس لیزری نقش مهمی بر روی شتاب‌گیری ذرات دارند [٤-٥]. علاوه بر شتاب‌گیری مستقیم

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

ذرات، پالس لیزر ورودی به محیط پلاسما توسط اختلالات چگالی‌الکترون‌های‌محیط پلاسماپراکنده‌می‌شود که پراکندگی رامان نامیده می‌شود[٦]. دراین‌حالت مدهای جدیدی که امواج پلاسمای-الکترونی‌می‌باشند در اثر برهم‌نهی امواج‌الکترومغناطیسی ورودی به محیط پلاسما و امواج الکترومغناطیسی پراکنده‌شده دراین محیط، به‌وجود می‌آیند. موج پلاسمای الکترونی با گیراندازی الکترون‌های محیط باعث افزایش سرعت این ذرات در دو مرحله گردد [۷]. یک مرحله شتاب مربوط به امواج پلاسمای الکترونی در رامان پس‌رو و مرحله دیگر هنگامی که پالس‌لیزر بطور کامل وارد محیط پلاسما شده و در قسمت‌های مرکزی و انتهایی محیط پلاسما در اثر پراکندگی رامان پیش‌رو، امواج پلاسمای الکترونی با سرعت فاز بالا تولید می‌کند که می‌تواند ذرات با انرژیهای به مراتب بالاتر را تولید کند.

نسبت ضرایب رشد مربوط به دو حالت پراکندگی رامان را می‌توان بر طبق معادله زیر بیان نمود[۸]:

$$\frac{\gamma_0^B}{\gamma_0^F} \approx \sqrt{2}\left(\frac{n_e}{n_c}\right)^{-\frac{3}{4}} \qquad (1)$$

علامت B و F به ترتیب مربوط به پراکندگی رامان پس‌رو و پیش-رو می‌باشند. این معادله به خوبی بیان می‌کند که ضریب رشد مربوط به پراکندگی رامان پس‌رو در حالت پلاسمای با چگالی کمتر از n_c (چگالی بحرانی پلاسما) از ضریب رشد مربوط به پراکندگی رامان پیش‌رو بیشتر می‌باشد. هرچه چگالی محیط کمتر شود، ضریب رشد پراکندگی رامان پس‌رو در مقایسه با پراکندگی رامان‌پیش‌رو بیشتر خواهد شد.

در این مقاله با استفاده از کد ذره‌ای پیشرفته 2DXOOPIC که یک کد شبیه‌سازی دو بعدی الکترومغناطیسی و نسبیتی می‌باشد [۹]، به بررسی پدیده شتاب‌گیری الکترون‌ها در محیط پلاسما می-پردازیم.

شبیه‌سازی ذره‌ای دو بعدی پلاسما

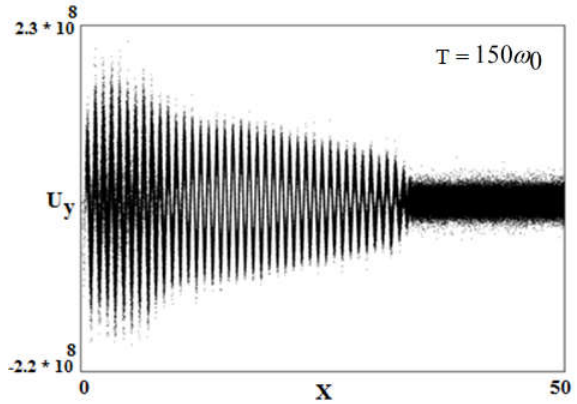
کد شبیه‌سازی ذره‌ای XOOPIC، یک کد جنبشی در مختصات دکارتی و استوانه‌ای می‌باشد که بصورت دو بعدی نوشته شده و کاملاً نسبیتی می‌باشد و هر سه مؤلفه سرعت را در بر دارد. در این کد هر سه مؤلفه میدان الکتریکی و مغناطیسی نیز قابل دسترس می‌باشد. این کد قابلیت ایجاد سلول‌های متعامد غیریکنواخت را در انجام محاسبات دارا بوده و علاوه بر این می‌توان شرایط مرزی متنوعی را نیز بر روی مرز این سلول‌ها اعمال نمود [۹]. در شبیه-سازی صورت گرفته دراین مقاله، پالس لیزر از خارج به محیط پلاسما تابانده می‌شود. پالس لیزر به‌کار رفته در این شبیه‌سازی در راستای x به داخل محیط پلاسما تابانده شده و بنابراین در این راستا منتشر می‌گردد. این پالس گوسی شکل، دارای قطبش خطی در جهت محور y بوده وطول موج آن $\lambda = 1\mu m$ می‌باشد. دوره تناوب مربوط به پالس‌لیزر برابر با $\tau = 10fs$ و شدت آن $I = 10^{18} W/cm^2$ می‌باشد. محیط پلاسمای به کار رفته در شبیه‌سازی دارای چگالی $n = 0.1 n_c$ می‌باشد. در این شبیه‌سازی طول هر سلول شبیه سازی برابر با $\Delta x = 0.01\lambda$ و گام زمانی به-کار رفته در این شبیه‌سازی $\Delta t = 0.02fs$ می‌باشد. محیط پلاسما دارای طول $50\mu m$ و عرض $20\mu m$ می‌باشد

نتایج شبیه‌سازی

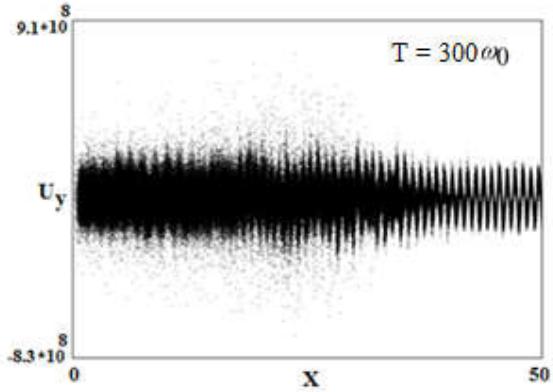
در این بخش انتشار پالس لیزری از محیط پلاسماو رفتار ذرات پلاسما در اثر اندرکنش با آن، با استفاده از پارامترهای در نظر گرفته شده در بخش قبل، مورد ارزیابی قرار گرفته است. فضای سرعت عرضی الکترون‌ها (u_y) را برحسب مکانشان (در جهت محور x) در شکل‌های ۱ و ۲ مورد بررسی قرار گرفته است. شکل‌های ۱ و ۲ به ترتیب نشان‌دهنده‌ی فضای سرعت عرضی(در جهت محور y) الکترون‌ها در گام‌های زمانی $150\omega_0$ و $300\omega_0$ می‌باشد. برای پالس لیزر ورودی به محیط پلاسما قطبشی خطی در جهت محور y در نظر گرفته شده است. بنابراین میدان الکتریکی این موج در جهت محور y قرار دارد و می‌تواند با الکترون‌های محیط در جهت این محور برهم‌کنش انجام دهد. این برهم‌کنش در شکل ۱ قابل مشاهده می‌باشد. با کمی توجه بیشتر به شکل ۱ می-توان وجود دو موج با دامنه‌های کوچک را میان پالس لیزر شناسایی نمود. این امواج نیز با الکترون‌های محیط در جهت محور y برهم‌کنش داشته و بنابراین در فضای سرعت عرضی الکترون‌ها آشکار می‌گردند. همان‌گونه که در شکل ۲ مشاهده می‌شود فرکانس موج تولید شده در ناحیه نزدیک‌تر به مرکز پلاسما کمتر از

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

فرکانس پالس لیزر تابانده شده به محیط می‌باشد و این همان چیزی است که برای موج الکترومغناطیسی پراکنده شده در رامان پیش‌رو انتظار می‌رفت. موج تولید شده در قسمت انتهای چپ محیط پلاسما دارای فرکانسی تقریبا برابر با فرکانس پالس‌لیزر ورودی بوده و می‌تواند بیانگر قسمت بازتابیده‌ی پالس لیزر از محیط پلاسما به‌شمار آید.

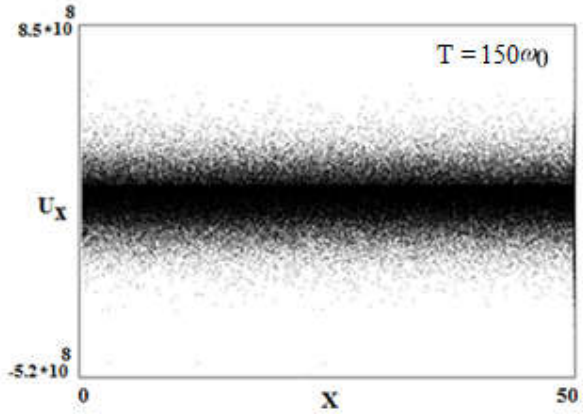


شکل ۱: نمودار فضای فاز الکترون در راستای عرضی در زمان $150\omega_0$

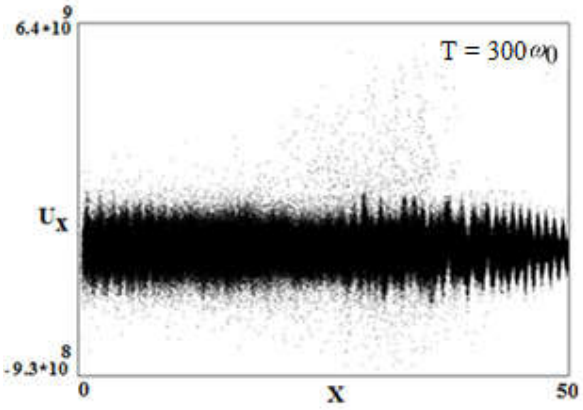


شکل ۲: نمودار فضای فاز الکترون در راستای عرضی در زمان $300\omega_0$

فضای سرعت طولی الکترون‌ها (u_x) برحسب مکان در دو زمان $150\omega_0$ و $300\omega_0$ به‌ترتیب در شکل‌های ۳ و ٤ نشان داده شده است. در شکل ۳، موج پلاسمای الکترونی با گیراندازی الکترون-های محیط باعث افزایش سرعت این ذرات می‌گردد. از آنجایی که سرعت فاز مربوط به مدها در پراکندگی در خلاف جهت لیزر کوچک است بنابراین نمی‌توان انتظار افزایش سرعت بالایی برای الکترون‌ها را داشت. با گذشت زمان پالس‌لیزر بطور کامل وارد محیط پلاسما شده و در قسمت‌های مرکزی و انتهایی محیط پلاسما در اثر پراکندگی در جهت لیزر، مدهایی با سرعت فاز بالا تولید می‌کند که سبب افزایش انرژی این ذرات می‌گردند. این افزایش انرژی در فضای فاز نشان‌داده شده در شکل ٤ قابل مشاهده می‌باشد.



شکل ۳: نمودار فضای فاز الکترون در راستای طولی در زمان $150\omega_0$

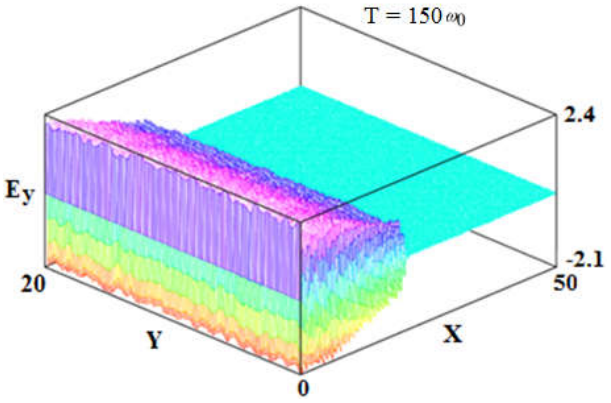


شکل ٤: نمودار فضای فاز الکترون در راستای طولی در زمان $300\omega_0$

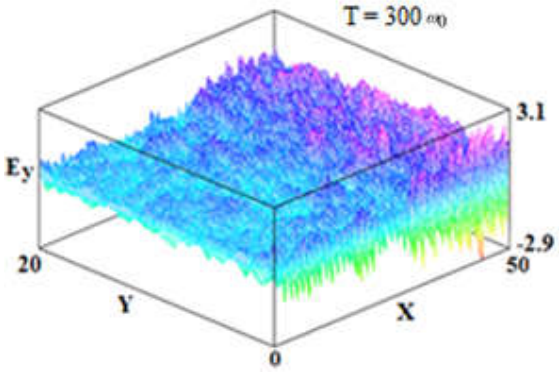
به منظور درک بهتر میرایی پالس لیزر ورودی و برانگیختگی امواج الکترومغناطیسی پراکنده، انتشار امواج الکترومغناطیسی عرضی در محیط پلاسما را مورد بررسی قرار می‌دهیم. شکل‌های ۵ و ٦ به-ترتیب نشان‌دهنده‌ی امواج الکترومغناطیسی عرضی درحال انتشار در جهت انتشار پالس لیزر ورودی در زمانهای $150\omega_0$ و $300\omega_0$ می‌باشند. در شکل ۵ هنوز پالس لیزری به‌طور کامل وارد محیط

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

پلاسما نشده است. در شکل ٦ پالس لیزر به‌طور کامل وارد محیط پلاسما شده است و به قسمت‌های انتهایی محیط پلاسما نیز رسیده است. با توجه به حالت میرایی پالس لیزر مشاهده شده در شکل ٥ و دامنه بزرگ موج تشکیل‌شده در قسمت انتهایی راست محیط پلاسما در شکل ٦، این موج نمی‌تواند بیانگر پالس لیزر ورودی باشد. بنابراین همان‌گونه که انتظار داشتیم این قله بیانگر موج الکترومغناطیسی پراکنده‌شده می‌باشد که در جهت پالس لیزر ورودی در حال انتشار می‌باشد.



شکل ٥: انتشار میدان عرضی لیزر در زمان $150\omega_0$



شکل ٦: انتشار میدان عرضی لیزر در زمان $300\omega_0$

نتیجه گیری

در این مقاله به بررسی تحول فضای فاز ذرات پلاسما و تولید مدهای نسبیتی در اثر اندرکنش یک پالس لیزری پرانرژی با پلاسمای رقیق در زمانهای طولانی پرداخته‌ایم. بدین منظور، از کد شبیه سازی پیشرفته 2DXOOPIC، برای شبیه‌سازی فضای فاز ذرات در راستای عرضی و طولی نسبت به انتشار پالس لیزری، استفاده کرده‌ایم. نتایج شبیه سازی مدهای جدید تولید شده در اثر برهم‌نهی موج الکترومغناطیسی ورودی به محیط پلاسما و امواج الکترومغناطیسی پراکنده‌شده را نشان می‌دهد. در زمان‌های اولیه ذرات پلاسما توسط مدهای متناطر با پراکندگی در خلاف جهت لیزر، شتاب داده می‌شوند و در زمان‌های طولانی‌تر بدلیل ایجاد پراکندگی‌ها در جهت انتشار پالس لیزری، مدهای نسبیتی جدید با سرعت فاز بالا در محیط ایجاد می‌شوند و سبب افزایش انرژی قابل توجه ذرات می‌شوند.

مرجع‌ها

[1] Esarey, E., at al. Synchrotron radiation from electron beams in plasma-focusing channels. *Physical Review E*, **65**, (2002)056505.

[2] Litos, M.,et al., High-efficiency acceleration of an electron beam in a plasma wakefield accelerator. *Nature,* **515**, (2014) 92.

[3] Kargarian, A., et al., "Laser-driven electron acceleration in hydrogen pair-ion plasma containing electron impurities." *Laser and Particle Beams* **36**, (2018) 203-209.

[4] Arefiev, et al., Enhancement of laser-driven electron acceleration in an ion channel. *Physics of Plasmas*, **21**, (2014)033104.

[5] Kumar, S., Yoon, M. Electron acceleration in a warm magnetized plasma-filled cylindrical waveguide. *Journal of Applied Physics*, **104** (2008) 073303.

[6] Jha, P., et al.,Relativistic and ponderomotive effects on stimulated Raman scattering of intense laser radiation in plasma. IEEE transactions on plasma science, **34**, (2006) 922-926.

[7] Walsh, C. J., et al., Electron plasma-wave production by stimulated Raman scattering: Competition with stimulated Brillouin scattering. *Physical review letters,* **53** (1984) 1445.

[8] Lihua, C., C. Tieqiang, L. Zhanjun and Z. Chunyang "Simulations of Stimulated Raman Scattering in Low-Density Plasmas." *Plasma Sci. Technol.* **9**(2007) 422-426.

[9] Usui, H.,et al. Development of 1d object-oriented particle-in-cell code (XOOPIC). *IEICE Transactions on Electronics,* **83**, (2000)989-992.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics٩٩

بررسی حضور نقاط کوانتومی در لایه‌های مختلف یک دیود نورگسیل آلی

قریشی، سید محمدباقر[۱]؛ حیدری، ندا[۲]؛ فتح‌اللهی، محمدرضا[۳]

[۱] دانشکده فیزیک دانشگاه کاشان، بلوار قطب راوندی، کاشان

[۲] پژوهشکده نانو، دانشگاه کاشان، کاشان

[۳] دانشکده برق و کامپیوتر، دانشگاه صنعتی قم، قم

چکیده

در این مقاله ساختار یک دیود نورگسیل آلی معکوس با حضور نقاط کوانتومی در لایه‌های مختلف آن بررسی و نشان داده شد که قرار گرفتن نقاط کوانتومی در لایه انتقال‌دهنده حفره سبب بهبود بیشتر خواص الکتریکی و اپتیکی دیود نورگسیل آلی خواهد شد. ویژگی‌هایی مانند راندمان لومینسانس، غلظت هر یک از حامل‌ها، مشخصه جریان-ولتاژ و ... مورد بررسی و مقایسه قرار گرفت. به‌منظور بهینه‌سازی ساختار دیود نورگسیل آلی شبیه‌سازی بر اساس روش تفاضل محدود حوزه‌ی زمان (FDTD) انجام شده است. نقاط کوانتومی در سه لایه TCTA، TPBi و Bphen به‌صورت یک ردیف قرار گرفت و نشان داده شد وقتی نقاط کوانتومی در لایه TCTA قرار می‌گیرند نتایج بهتری حاصل می‌گردد.

واژه های کلیدی: *دیود نورگسیل آلی، نقاط کوانتومی، لایه انتقال‌دهنده حفره.*

The Investigation of the Existence of Quantum Dots in Different Layer of Light Emitting Diode

Ghorashi, Seyed Mohammad Bagher[1]; Heydari, Neda [2]; Fathollahi, Mohammadreza [3]

[1] *Department of Physics, Faculty of Physics, University of Kashan, Kashan*
[2] *Institute of Nanoscience and Nanotechnology, University of Kashan, Kashan*
[3] *Factulty of Electrical and Computer Engineering, Qom University of Technology (QUT), Qom*

Abstract

In this paper, the structure of an inverted organic light-emitting diode with the presence of quantum dots in its different layers was investigated and it was shown that the placement of quantum dots in the hole transport layer will further improve the electrical and optical specificity of the organic light-emitting diode. Features such as luminescence efficiency, concentration of each carrier, current-voltage characteristic, etc. were examined and compared. In order to optimize the structure of the organic light emitting diode, the simulation was performed based on the finite time domain difference method (FDTD). Quantum dots were placed in three layers of TCTA, TPBi, and Bphen in a single row, and it was shown that better results were obtained when quantum dots were placed in the TCTA layer.

***Keywords**: Light Emitting Diode, Quantum Dots, Hole Transport Layer.*

PACS No. 207

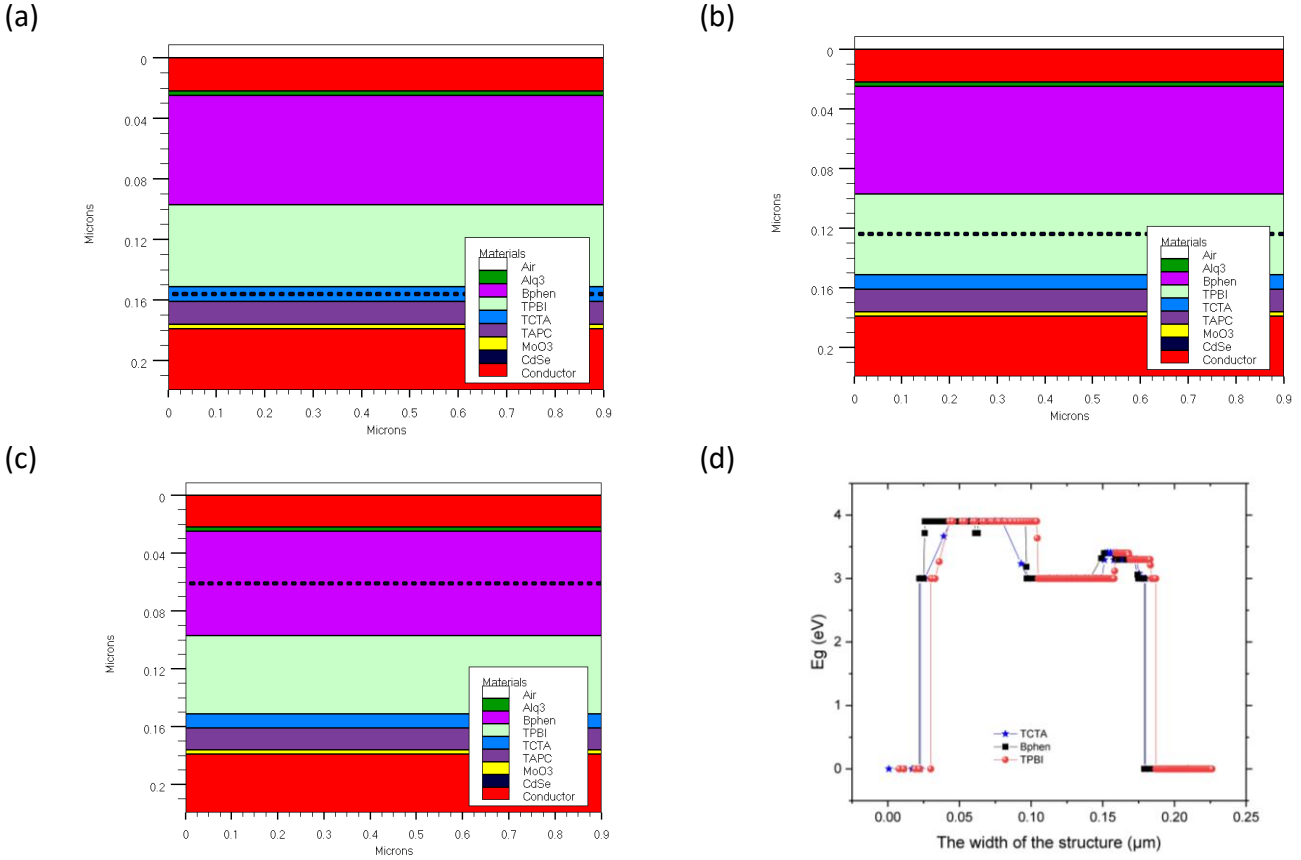
مقدمه

از زمانی که تنگ و وان اولین گزارش در مورد الکترولومینسانس فیلم‌های نازک ارگانیک را منتشر کردند، دیودهای نورگسیل آلی یکی از فناوری‌های پیشگام در این زمینه بوده‌اند [۱]. اخیراً تحقیقات در مورد دیودهای نورگسیل آلی بر پایه نقاط کوانتومی (QD-LED) به لطف مزیت‌های آن‌ها نسبت به

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

دیگر انواع دیودهای نور گسیل، توجه قابل‌توجهی را به خود جلب کرده‌اند. نقاط کوانتومی (QDs) می‌توانند به‌راحتی در حلال‌های آلی / آبی پراکنده شوند و با استفاده از تکنیک‌های ساخت مقرون‌به‌صرفه در ساختار دیودهای نورگسیل آلی به‌کاربرده شوند. علاوه بر این، طیف انتشار دیودهای نورگسیل آلی برپایه نقاط کوانتومی را می‌توان به‌راحتی با تغییر اندازه نقاط کوانتومی آن‌ها تنظیم کرد. این ویژگی پتانسیل عظیمی را برای برنامه‌های آتی در صنعت نمایشگرها در آینده نشان می‌دهد.

خصوصیات ساختارهای نانو و میکرو در دیودهای نورگسیل آلی (OLEDs) توسط فینا و همکارانش موردبررسی قرار گرفت [2]. نتایج حاکی از بهبود استخراج نور و تزریق حامل‌ها در این ساختارها بود. همچنین در سال ۱۹۹٤، اولین ساختار QDOLED، متشکل از نقاط کوانتومی CdSe معرفی شد و سپس توسط محققان دیگر بسیار مورد استقبال قرار گرفت [3].به‌عنوان‌مثال، شدت تابش نور دیود نورگسیل آلی قرمز با تیمار اکسیژن بر روی سطح لایه اکسید قلع ایندیم (ITO) اتفاق افتاد [4].



شکل ۱ : نمایش شماتیک ساختار و سطح انرژیشان. ساختاری که نقاط کوانتومی در لایه (a) TCTA، (b) TPBi، (c)Bphen و (d) انرژی شکاف باند ساختارها.

مدل‌سازی و شبیه‌سازی دیودهای نور گسیل آلی برای پیش‌بینی و بهینه‌سازی پارامترهای دستگاه قبل از ساخت بسیار مهم است. این امر سبب صرفه‌جویی زیادی در هزینه‌های آزمایش و همچنین صرفه‌جویی در زمان خواهد شد؛ بنابراین، اخیراً دانشمندان علاقه‌مند به شبیه‌سازی دیودهای نور گسیل‌شده‌اند [5 و ٦].

به‌عنوان‌مثال، دیموک و همکاران. انتقال بار را برای دیودهای نورگسیل آلی برپایه نقاط کوانتومی موردبررسی عددی قرار دادند [۷].

در اینجا بهبود عملکرد ساختاری که در آن نقاط کوانتومی در لایه انتقال‌دهنده حفره (HTL) قرار دارد، به دست آمد که پیشرفت

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

چشمگیری از طریق بهینه‌سازی ساختار بود. تجزیه‌وتحلیل توزیع حامل‌ها و اکسایتون در ساختار موردبررسی قرار گرفت و نشان داده شد که انتقال انرژی از لایه آلی به نقاط کوانتومی بهبود می‌یابد که این بهبود به‌طور عمده از تعادل بار بهینه ناشی می‌شود. در این مقاله از برنامه سیلواکو برای شبیه سازی استفاده شده است.

آنیکیوا و همکارانش در سال ۲۰۰۸، انواع مختلفی از ساختار QDLED را مورد بررسی قرار دادند و به این نتیجه رسیدند که برای بهبود عملکرد دستگاهها باید نقاط کوانتومی در فاصله HTL≤10nm قرار بگیرند [۸] که کاملاً مطابق با نتایج این مقاله است.

معرفی ساختار

در این مطالعه، حضور نقاط کوانتومی در لایه‌های مختلف یک ساختار معکوس از دیود نورگسیل آلی موردبررسی قرارگرفته است.

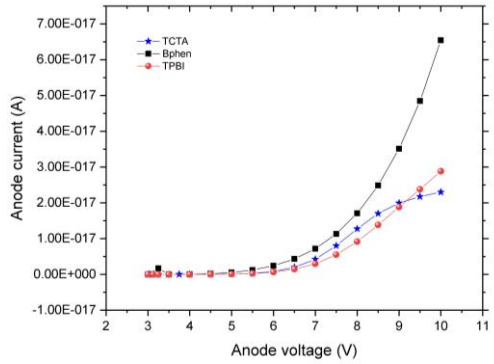
در این ساختار از ITO به‌عنوان یک لایه کاتدی و Alq_3 به‌عنوان یک لایه انتقال الکترونی (ETL) استفاده شده است. تصاویر این ساختار در شکل ۱ نشان داده‌شده‌اند.

بالاترین اوربیتال اشغال‌شده (HOMO) ماده TAPC 5.3 الکترون‌ولت است که نزدیک به تابع کار آند Ag / MoO است. این امر سبب انتقال بهتر حفره از آند به لایه QD با قابلیت انتشار می‌شود. همان‌طور که در شکل مشخص است نقاط کوانتومی در سه لایه TCTA، TPBi و Bphen به‌صورت یک ردیف قرارگرفته‌اند. این نقاط کوانتومی در اندازه ۱ میکرون در ۱ میکرون در نظر گرفته‌شده‌اند.

در این ساختار همچنین لایه‌های اضافی HTL و ETL برای بهبود عملکرد دیود استفاده شده است. اضافه کردن HTL در سمت الکترون، الکترون‌های اضافی را که به لایه نقاط کوانتومی تزریق می‌شوند، محدود می‌کند، درنتیجه تعادل بار بهتری می‌یابد.

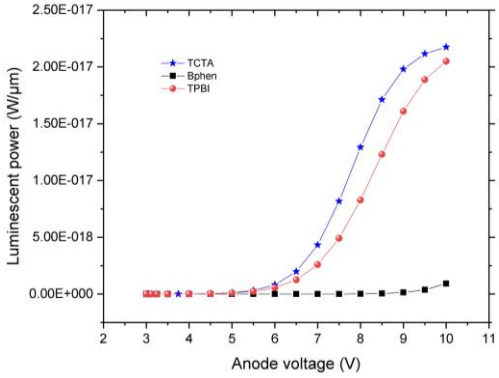
نتایج

در این بخش نتایج شبیه‌سازی برای هر سه نوع LED ارائه‌شده و سپس نتایج مقایسه می‌شوند. در شکل ۲ جریان آند QDOLED برحسب ولتاژ اعمال‌شده (I-V) ترسیم شده است.



شکل۲ : نمودار ولتاژ–جریان

همان‌طور که شکل ۲ نشان می‌دهد، ولتاژ آستانه در سه ساختار تقریباً مشابه است. در ولتاژهای بالاتر از ۸، ساختار با نقاط کوانتومی که در لایه TPBi مقدار بالاتر جریان آند را در هر ولتاژ مربوطه فراهم می‌کند.



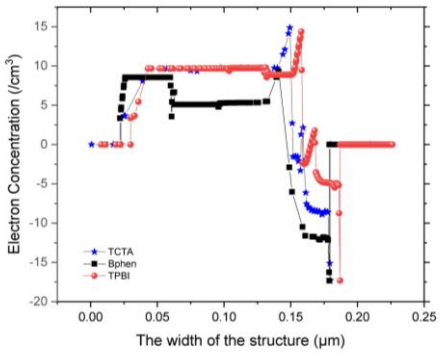
شکل۳ : نمودار لومینسانس برحسب ولتاژ

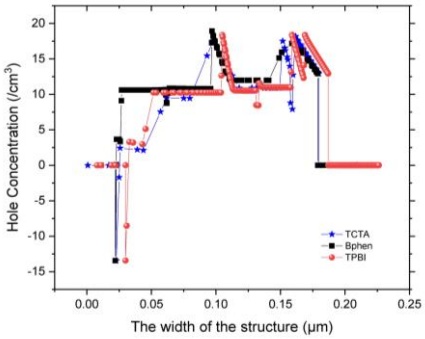
شکل ۳ منحنی ولتاژ لومینسانس برحسب ولتاژ ساختار را نشان می‌دهد. همان‌طور که از شکل مشخص است، در حضور نقاط کوانتومی در لایه TCTA لومینسانس بهتری از ساختار مشاهده می‌شود.

علاوه بر این، از مقایسه شکل 4 (a) و (b) مشخص است که حامل‌ها دارای تعادل نسبتاً بهتری در ساختاری با حضور نقاط کوانتومی در لایه TCTA هستند. جفت الکترون و حفره یک اکسایتون را تشکیل می‌دهد.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

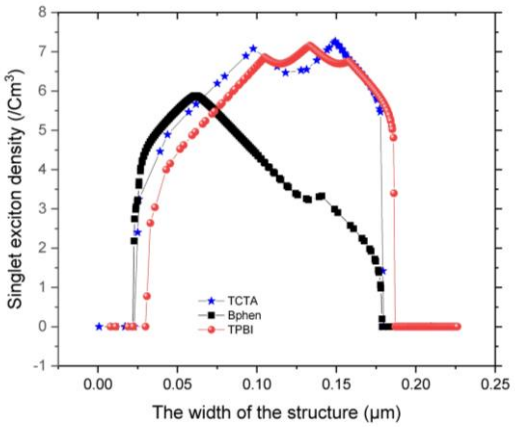
(a) (b)





شکل٤ : (a) چگالی الکترون‌ها و (b) چگالی حفره‌ها

اکسایتون های یگانه یا سه‌گانه با مقدار اسپین کل صفر یا یک مشخص می‌شوند. اکسایتون های سه‌گانه معمولاً بازترکیبی غیر تابشی دارند. در حقیقت، تنها اکسایتون های یگانه می‌توانند در نور ساطع‌شده نقش داشته باشند.



شکل5 : نمودار چگالی اکسایتون یگانه برحسب عرض ساختار

شکل 5 چگالی اکسایتون های یگانه را در سه ساختار مقایسه می‌کند که نشان می‌دهد این مشخصه برای ساختار اول بیشتر است.

نتیجه‌گیری

در این مقاله یک دیود نورگسیل آلی معکوس در نظر گرفته شد و نقاط کوانتومی در سه لایه TCTA، TPBi و Bphen به‌صورت یک ردیف قرار گرفت و نشان داده شد وقتی نقاط کوانتومی در لایه TCTA قرار می‌گیرد نتایج بهتری حاصل می‌گردد. نتیجه گرفته شد هرچه نقاط کوانتومی به لایه انتقال حفره نزدیک‌تر باشد نتیجه بهتری به دست خواهد آمد. این نتیجه با استفاده از مکانیسم‌های انتقال بار توضیح داده شد.

مرجع‌ها

[1] C.W. Tang, A. Steven VanSlyke; “Organic electroluminescent diodes”; *Appl. P hys. Lett.* **51** (1987) 913–915.

[۲] M. Fina, D. Liu, L. Ren, S.S. Mao; “Improving organic light-emitting diode performance with patterned structures”; *Appl. Phys. A* **105** (2011) 323–327.

[۳] V.L. Colvin, M.C. Schlamp, A.P. Alivisatos; “Light-emit ting diodes made from cadmium selenide nanocrystals and a semiconducting polymer”; *Nature* **370** (1994) 354–357.

[٤] N.K. Cho, J.W. Yu, Y.H. Kim, S.J. Kang; “Effect of oxygen plasma treatment on CdSe/ CdZnS quantum-dot light-emitting diodes”; *Jpn. J. Appl. Phys.* **53** (2014) 032101.

[٥] J.S. Park, J.W. Lee, D.J. Park, J.H. Ko; “Correlation between the size of microlenses and the outcoupling efficiency of organic light emitting diodes studied by finite-difference time-domain simulation”; *J. Korean Phys. Soc.* **74** (2019) 885–891.

[٦] I. Sohn, I. Seo, S. Lee, S. Jeong; “Improved modeling of material deposition during OLED manufacturing using direct simulation montecarlo method on GPU architecture”; *Int. J. P re cis. Eng. Manuf. Tech nol.* (2019) 1–13.

[۷] J.A.R. Dim mock, E.A. Board man, T.M. Smeeton; “A calibrated simulation of electroluminescent QD-LEDs”; *SID Symposium Digest of Technical Papers.* **50**, 2019, pp. 648–651.

[۸] P. O. Anikeeva, C. F. Madigan, J. E. Halpert, M. G. Bawendi, and V. Bulović; “Electronic and excitonic processes in light-emitting devices based on organic materials and colloidal quantum dots”; *Physical Review B*, **78**, 2008, pp.085434.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

انتشار باریکه لیزر چیرپ شده در پلاسمای کوانتومی با جذب خطی

سمیه زارع

پژوهشکده فوتونیک و فناوری‌های کوانتومی، پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای سازمان انرژی اتمی، انتهای خیابان کارگر شمالی ، تهران

چکیده

در این مقاله انتشار باریکه لیزر چیرپ شده در پلاسمای کوانتومی برخوردی بررسی می‌شود. با فرض پالس چیرپ، فرکانس باریکه در راستای انتشار افزایش می-یابد، در نتیجه خودکانونی با دامنه نوسان کوچکتر و آهنگ نوسان بزرگتر رخ خواهد داد. هر چه پارامتر چیرپ بزرگتر باشد، پهنای باریکه با دامنه کوچکتر و فرکانس بیشتری نوسان خواهد کرد. بعلاوه با افزایش چگالی پلاسما، کمینه پهنای باریکه، دامنه نوسان و طول خودکانونی کاهش و آهنگ نوسان افزایش می‌یابد. همچنین ناشی از افزایش نیروی پاندرماتیو، باریکه لیزر با شدت بزرگتر، خودکانونی قوی‌تری را نتیجه خواهد داد.

واژه های کلیدی: *پدیده خودکانونی، پارامتر پهنای باریکه، پلاسمای کوانتومی برخوردی، باریکه لیزر چیرپ شده.*

Propagation of chirped laser pulses in quantum plasmas with linear absorption

Somaye Zare

Photonics and Quantum Technology Research School, Nuclear Science and Technology Research Institute, AEOI, Tehran, Iran

Abstract

The propagation of chirped laser pulses has been investigated in collisional quantum plasmas. Due to enhancement of the laser frequency along the propagation direction, the beam-width oscillates with higher frequency and less amplitude. The greater chirped parameters result the earlier laser self-focusing with smaller oscillation amplitude and more oscillation rate. Moreover, it is found that in denser plasmas, the self-focusing length and the minimum beam-width reduce. Besides, for the higher laser intensities due to increase of the ponderomotive force, the self-focusing effect becomes stronger.

***Keywords**: Self-focusing effect, beam-width parameter, collisional quantum plasma, chirped laser pulse.*

PACS No. 32,41,52.

مقدمه

یکی از راهکارهای بهبود برهمکنش لیزر با پلاسما، خودکانونی باریکه لیزر است، زیرا با کانونی شدن باریکه لیزر، شدت در ناحیه کانونی افزایش می‌یابد. با عبور پالس لیزر پرشدت در پلاسما، جرم الکترون‌ها و در نتیجه ضریب شکست پلاسما، متناسب با موقعیت شعاعی الکترون‌ها، بیشتر می‌شود و پلاسما مانند یک عدسی همگرا، پهنای پالس لیزر را کاهش می‌دهد [۱]. این اثر، خودکانونی نسبیتی است که در سال ۱۹۷۵ معرفی شد [۲] و تاکنون توسط محققان بسیاری در پلاسماهای کلاسیکی بررسی شده است. در فیزیک کلاسیک، پلاسما با دمای بالا و چگالی پایین مشخص می-شود، اما با کاهش دمای پلاسما و یا افزایش چگالی آن، پدیده‌های کوانتومی مشهودتر خواهند شد [۴،۳]. اگر دمای پلاسما مساوی یا کوچکتر از دمای فرمی الکترون‌ها، $T_F = \frac{\hbar^2}{2mk_B}(3\pi^2 n_e)^{2/3}$ باشد، آنگاه پلاسما کوانتومی خواهد بود. همچنین لزوم لحاظ کردن برخورد میان الکترون‌ها و یون‌ها در پلاسمای کوانتومی توسط پارامتر کوپل‌شدگی، $g_Q = 2e^2 m_e / \left((3\pi^2)^{2/3}\hbar^2 \varepsilon n_e^{1/3}\right)$ تعیین می-شود. اگر $g_Q \geq 1$ باشد، برخوردها در پلاسما باید در نظر گرفته شوند و به عبارت دیگر پلاسمای کوانتومی، برخوردی است. در این معادلات، n_e، $\hbar$، ε و m_e به ترتیب چگالی الکترونی، ثابت پلانک، ثابت دی‌الکتریک و جرم الکترون‌هاست. در این مقاله

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

پارامترهای دما و چگالی پلاسما چنان انتخاب می‌شوند تا شرط کوانتومی و برخوردی بودن پلاسما برقرار باشد.

پالس‌های چیرپ شده، راهکار دیگری جهت بهبود برهمکنش لیزر با پلاسما هستند. شتاب‌دهی الکترون‌ها و پروتون‌ها با استفاده از برهمکنش پالس‌های چیرپ با پلاسما به صورت تئوری و تجربی مطالعه شده است[٦،٧]. خودکانونی پالس لیزر غیرچیرپ در پلاسماهای کلاسیکی و کوانتومی با فرض برخوردی یا بی-برخورد بودن پلاسما در مقالات زیادی گزارش شده است [٥،٨]. در این مقاله انتشار پالس لیزر چیرپ شده در پلاسمای کوانتومی برخوردی و تاثیر پارامتر چیرپ، چگالی پلاسما و شدت باریکه لیزر در خودکانونی باریکه لیزر بررسی خواهد شد.

تئوری

معادله انتشار باریکه در راستای محور z در مختصات استوانه‌ای برابر است با،

$$\frac{\partial^2 E}{\partial z^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial E}{\partial r}\right)+\frac{\omega^2}{c^2}\varepsilon E=0 \qquad (١)$$

c سرعت نور و $\omega=\omega_0(1+b(t-z/c))$ بسامد زاویه‌ای لیزر چیرپ شده خطی است. ω_0، b، t و z به ترتیب فرکانس زاویه‌ای اولیه لیزر، پارامتر بی‌بعد چیرپ، زمان و مختصات در راستای انتشار است. میدان الکتریکی، $E=A\exp\left(i\omega t-i\int_0^z k\,dz\right)$ در معادله(١) جایگذاری می‌شود و با فرض تقریب *WKB*،

$$2ik\frac{\partial A}{\partial z}[b\tau(1+b\tau)\sqrt{\varepsilon_0}+\varepsilon_0(1+b\tau)^2+\frac{bzk(\sqrt{\varepsilon_0}-1)}{\sqrt{\varepsilon_0}}]=$$
$$-A(b\tau+\frac{bzk(\varepsilon_0-\sqrt{\varepsilon_0})}{(1+b\tau)\varepsilon_0\sqrt{\varepsilon_0}})^2+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial A}{\partial r}\right)(1+b\tau)^2\varepsilon_0+$$
$$k^2(1+b\tau)^2(\varepsilon A+ik^2A(2b\sqrt{\varepsilon_0}+\frac{b^2kz(1-\varepsilon_0)}{\varepsilon_0(1+b\tau)^2}) \qquad (٢)$$

k بردار انتشار است. دامنه میدان الکتریکی، A، در پلاسمای برخوردی برابر است با [٩]،

$$A=A_0\exp(-ikS_r+S_i) \qquad (٣)$$

با جایگذاری معادله(٣) در معادله(٢)،

$$\frac{\partial^2 A_0}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial A_0}{\partial r}-k^2\varepsilon_0A_0(1+b\tau)^2(\frac{\partial S}{\partial r})^2-2k^2A_0\frac{\partial S}{\partial z}$$
$$[b\tau(1+b\tau)\sqrt{\varepsilon_0}+\varepsilon_0(1+b\tau)^2+\frac{bzk(\sqrt{\varepsilon_0}-1)}{\sqrt{\varepsilon_0}}]+$$
$$k^2(1+b\tau)^2(\varepsilon)A_0-A_0[b\tau+\frac{bzk(\varepsilon_0-\sqrt{\varepsilon_0})}{(1+b\tau)\varepsilon_0\sqrt{\varepsilon_0}}]^2=0 \qquad (٤)$$

$S=\varphi_r+\frac{r^2}{2f}\frac{df}{dz}+i(\varphi+\frac{r^2}{2}\beta_i)$ تابع ایکونال است که φ_r و φ_i به ترتیب توابع فاز محوری و اتلاف و همچنین f پارامتر بی‌بعد پهنای باریکه لیزر هستند. با جایگذاری معادله ایکونال در معادله(٤) و مساوی صفر قرار دادن قسمت حقیقی و موهومی آن، نتیجه می-شود،

$$-2k^2A_0\frac{\partial S_r}{\partial z}[b\tau(1+b\tau)\sqrt{\varepsilon_0}+\varepsilon_0(1+b\tau)^2+\frac{bzk(\sqrt{\varepsilon_0}-1)}{\sqrt{\varepsilon_0}}]$$
$$+\varepsilon_0(1+b\tau)^2[\frac{\partial^2A_0}{\partial r^2}+2k\frac{\partial S_i}{\partial r}\frac{\partial A_0}{\partial r}+kA_0\frac{\partial^2S_i}{\partial r^2}+$$
$$k^2A_0(\frac{\partial S_i}{\partial r})^2-k^2A_0(\frac{\partial S_r}{\partial r})^2+\frac{1}{r}\frac{\partial A_0}{\partial r}+\frac{kA_0}{r}\frac{\partial S_i}{\partial r}]+$$
$$k^2(1+b\tau)^2\varepsilon A_0-A_0[b\tau+\frac{bzk(\varepsilon_0-\sqrt{\varepsilon_0})}{(1+b\tau)\varepsilon_0\sqrt{\varepsilon_0}}]^2=0 \qquad (٥)$$

$$-2k(\frac{\partial A_0}{\partial z}+kA_0\frac{\partial S_i}{\partial z})[b\tau(1+b\tau)\sqrt{\varepsilon_0}+\varepsilon_0(1+b\tau)^2+$$
$$\frac{bzk(\sqrt{\varepsilon_0}-1)}{\sqrt{\varepsilon_0}}]+\varepsilon_0(1+b\tau)^2[-k\frac{\partial A_0}{\partial r}\frac{\partial S_r}{\partial r}-kA_0\frac{\partial^2S_r}{\partial r^2}$$
$$-k\frac{\partial S_r}{\partial r}\frac{\partial A_0}{\partial r}-k^2A_0\frac{\partial S_r}{\partial r}\frac{\partial S_i}{\partial r}-k^2A_0(\frac{\partial S_i}{\partial r})^2-\frac{kA_0}{r}\frac{\partial S_r}{\partial r}]+$$
$$k^2A_0[2\sqrt{\varepsilon_0}+\frac{b^2zk(\varepsilon-\varepsilon_0)}{(1+b\tau)^2\varepsilon_0}]^2=0 \qquad (٦)$$

تابع توزیع شدت پالس لیزر، $A_0=\frac{A_{00}}{f}\exp\left(\frac{-r^2}{2r_0^2f^2}\right)$ در معادلات (٥) و (٦) جایگذاری می‌شود،

$$\frac{-1}{f}\frac{\partial^2 f}{\partial z^2}[1+\frac{b\tau}{(1+b\tau)\sqrt{\varepsilon_0}}+\frac{bk^2r_0^2\xi(\sqrt{\varepsilon_0}-1)}{(1+b\tau)\varepsilon_0\sqrt{\varepsilon_0}}]$$
$$+(\frac{1}{f}\frac{\partial f}{\partial z})^2[\frac{b\tau}{(1+b\tau)\sqrt{\varepsilon_0}}+\frac{bk^2r_0^2\xi(\sqrt{\varepsilon_0}-1)}{(1+b\tau)\varepsilon_0\sqrt{\varepsilon_0}}]+$$
$$k^2\beta_i^2-\frac{2k\beta_i}{r_0^2f^2}+k^2\frac{\varepsilon}{\varepsilon_0}=0 \qquad (٧)$$

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics٩٩

$$-2k(\frac{1}{r_0^2 f^3}\frac{\partial f}{\partial z}+\frac{\partial \beta}{2\partial z})[b\tau(1+b\tau)\sqrt{\varepsilon_0}+(1+b\tau)\varepsilon_0$$
$$+\frac{bkz(\sqrt{\varepsilon_0}-1)}{\sqrt{\varepsilon_0}}]+\varepsilon(1+b\tau)^2[\frac{2k}{r_0^2 f^3}\frac{\partial f}{\partial z}-$$
$$k^2\beta_i\frac{1}{f}\frac{\partial f}{\partial z}-k^2\beta_i]=0 \qquad (۸)$$

r_0 و A_{00} معرف پهنای اولیه باریکه و دامنه اولیه میدان الکتریکی لیزر هستند. برای حل معادلات فوق، تابع دی الکتریک پلاسمای کوانتومی برخوردی گزارش شده توسط لاتیشف استفاده می‌شود. وی این ثابت دی‌الکتریک را با استفاده از معادلات جنبشی کوانتومی و انتگرال برخوردی BGK در فضای اندازه حرکت محاسبه کرده است[۸]. ثابت دی‌الکتریک پلاسمای برخوردی، شامل دو بخش حقیقی و موهومی است که در ادامه به ترتیب با ε_r و ε_i مشخص خواهند شد. بهتر است معادلات بر اساس متغیرهای بی‌بعد، $\xi=z/(r_0^2k)$ و $\beta=\beta_i/(r_0^2k)$ بازنویسی شوند. در نتیجه،

$$\frac{\partial^2 f}{\partial \xi^2}[1+\frac{b\tau}{(1+b\tau)\sqrt{\varepsilon_0}}+\frac{bk^2r_0^2\xi(\sqrt{\varepsilon_0}-1)}{(1+b\tau)\varepsilon_0\sqrt{\varepsilon_0}}]=$$
$$\frac{1}{f}(\frac{\partial f}{\partial \xi})^2[\frac{b\tau}{(1+b\tau)\sqrt{\varepsilon_0}}+\frac{bk^2r_0^2\xi(\sqrt{\varepsilon_0}-1)}{(1+b\tau)\varepsilon_0\sqrt{\varepsilon_0}}]$$
$$+f(\beta-\frac{1}{f^2})^2+\rho_0^2\frac{P_0}{2f^3}\varepsilon_r(1+\frac{P_0}{f^2})^{-3/2} \qquad (۹)$$

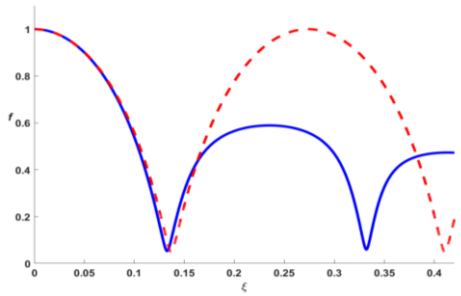
$$\frac{\partial \beta}{\partial \xi}[1+\frac{b\tau}{(1+b\tau)\sqrt{\varepsilon_0}}+\frac{bk^2r_0^2\xi(\sqrt{\varepsilon_0}-1)}{(1+b\tau)\varepsilon_0\sqrt{\varepsilon_0}}]=\frac{-2}{f^3}\frac{\partial f}{\partial \xi}$$
$$[\frac{b\tau}{(1+b\tau)\sqrt{\varepsilon_0}}+\frac{bk^2r_0^2\xi(\sqrt{\varepsilon_0}-1)}{(1+b\tau)\varepsilon_0\sqrt{\varepsilon_0}}]-\frac{2\beta}{f}\frac{\partial f}{\partial \xi}$$
$$+\rho_0^2\frac{P_0}{2f^4}\varepsilon_i(1+\frac{P_0}{f^2})^{-3/2} \qquad (۱۰)$$

کمیت بی‌بعد متناسب با توان $p_0=e^2A_{00}^2/m_0^2\omega^2c^2$ باریکه لیزر است. شرایط مرزی حل معادلات، $f=1$، $\frac{df}{d\xi}=0$ و $\beta=0$ در شروع برهمکنش هستند.

محاسبات

معادلات (۹) و (۱۰) با روش رانجکوتا مرتبه چهار به صورت عددی با فرض شرایط مرزی بیان شده، حل می‌شوند. شرایط کوانتومی برای ثابت دی‌الکتریک زمانی که طول موج لیزر بسیار کوتاه باشد برقرار می‌شود. بنابراین انتشار باریکه ایکس در پلاسما بررسی خواهد شد[۴،۸]. باریکه‌ای با قطر r_0=۲۰ μm، فرکانس ω=۱/۸×۱۰^{۲۰}s^{-1} و شدت p_0=۰/۰۵ در پلاسمایی با چگالی n_{e0}=۴×۱۰^{۱۹}cm^{-3} و فرکانس برخورد $\nu=0.01\omega_p$ منتشر می‌شود. هرگاه پالس لیزر پرشدت در پلاسما منتشر می‌شود، به علت پدیده خودکانونی، پهنای باریکه در راستای انتشار کاهش می‌یابد. با کاهش پهنای باریکه، اثرات پراش تقویت خواهند شد، تا اینکه درکمینه‌ی پهنا، اثرهای واگرایی بر خودکانونی غالب شده و پهنای باریکه دوباره افزایش می‌یابد. با زیاد شدن پهنای باریکه، واگرایی تضعیف شده و خودکانونی تقویت می‌شود تا جایی که در بیشینه‌ی پهنا، خودکانونی بر پراش غالب شده و باریکه دوباره متمرکز می‌شود. بنابراین باریکه در راستای انتشار رفتاری نوسانی خواهد داشت. در ادامه انتشار پالس لیزر چیرپ شده، در پلاسمای کوانتومی برخوردی مطالعه خواهد شد.

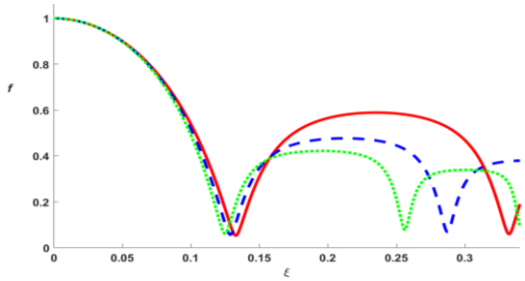
در شکل۱ مقایسه انتشار پالس غیرچیرپ (خط ممتد) و پالس چیرپ با پارامتر چیرپ b=۰/۰۰۲ (نقطه‌چین) در پلاسما دیده می‌شود. دو پالس ابتدا رفتار یکسانی دارند، اما در پالس چیرپ شده، فرکانس باریکه با زمان و فاصله تغییر می‌کند و طول برهمکنش الکترون‌ها با پالس لیزر بیشتر می‌شود. بنابراین باریکه چیرپ باعث بهبود برهمکنش لیزر با پلاسما خواهد شد. ناشی از افزایش فرکانس باریکه، ضریب دی الکتریک کاهش می‌یابد، پس دامنه نوسان باریکه کمتر خواهد شد، به عبارتی باریکه نزدیک‌تر به محور نوسان خواهد کرد. از طرفی افزایش فرکانس، باعث کاهش اثرات واگرایی باریکه می‌شود. بنابراین باریکه چیرپ شده، خودکانونی باریکه را افزایش خواهد داد. در شکل دیده می‌شود که اندازه دامنه نوسان پهنای باریکه چیرپ شده در دومین نوسان به ۵۵٪ مقدار اولیه کاهش یافته است.



شکل۱: انتشار پالس غیرچیرپ(خط ممتد) و پالس چیرپ با ۰/۰۰۲ =b(خط‌چین) در پلاسما با چگالی n_{e0}=۴×۱۰^{۱۹}cm^{-3}.

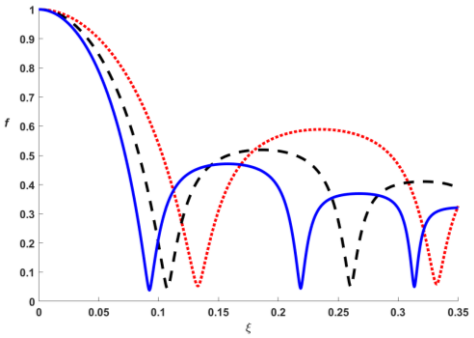
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

شکل۲، خودکانونی باریکه‌ها با پارامتر چیرپ متفاوت، b=۰/۰۰۲ (خط ممتد)، b=۰/۰۰٤ (خط‌چین) و b=۰/۰۰٦ (نقطه-چین) را در پلاسمایی مشابه شکل۱ نشان می‌دهد. همانگونه که انتظار می‌رفت، پارامتر چیرپ بزرگتر، دامنه نوسان کوچکتر و آهنگ نوسان بزرگتری را نتیجه خواهد داد.



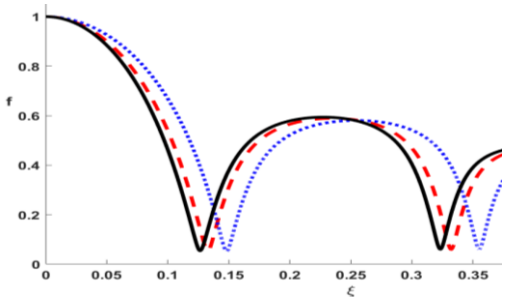
شکل۲: انتشار پالس لیزر چیرپ شده با پارامتر چیرپ b=۰/۰۰۲ (خط ممتد)، b=۰/۰۰٤ (خط‌چین) و b=۰/۰۰٦ (نقطه‌چین).

شکل۳ وابستگی خودکانونی به چگالی پلاسما را نشان می‌دهد. باریکه‌ای با پارامتر چیرپ b=۰/۰۰۲ در پلاسماهایی با چگالی cm^{-3} $n_{e0}=٤\times١٠^{١٩.3}$ (خط‌ممتد)، $n_{e0}=٦\times١٠^{١٩}cm^{-3}$ (خط‌چین) و cm^{-3} $n_{e0}=٤\times١٠^{١٩.3}$ (نقطه‌چین) منتشر می‌شود. با انتشار پالس لیزر پرشدت در پلاسما، یک میدان مغناطیسی ایستایی تولید می‌شود که به الکترون‌ها شتاب می‌دهد. با افزایش چگالی پلاسما، میدان مغناطیسی بزرگتری ایجاد خواهد شد و درنتیجه جریان الکترونی قوی‌تری را تولید می‌کند. این جریان الکترونی، اثر خودکانونی را افزایش خواهد داد. پس دامنه نوسان و حداقل کمینه‌ی پهنای باریکه کاهش و فرکانس نوسان پهنا افزایش می‌یابد.



شکل۳: خودکانونی باریکه در پلاسما با چگالی $n_{e0}=٤\times١٠^{١٩}cm^{-3}$ (خط ممتد)، $n_{e0}=٦\times١٠^{١٩}cm^{-3}$ (خط‌چین) و $n_{e0}=٨\times١٠^{١٩}cm^{-3}$ (نقطه‌چین).

همچنین با افزایش شدت باریکه لیزر، نیروی پاندرماتیو در پلاسما بیشتر می‌شود. این نیرو الکترون‌های بیشتری را از محدوده پالس لیزر می‌راند. در نتیجه پلاسما مانند عدسی قوی‌تری، باریکه لیزر را همگرا خواهد کرد. این وابستگی در شکل٤ نشان داده شده است.



شکل٤: انتشار پالس لیزر با پارامتر شدت p_0=۰/۰۷ (خط ممتد)، p_0=۰/۰۵ (خط‌چین) و p_0=۰/۰۳ (نقطه‌چین) با پارامتر چیرپ b=۰/۰۰۲.

نتیجه‌گیری

پالس لیزر چیرپ شده در مقایسه با پالس غیرچیرپ، خودکانونی قوی‌تری را تجربه می‌کند. هرچه پارامتر چیرپ بزرگتر شود، دامنه نوسان پهنای باریکه کوچکتر و فرکانس نوسان بزرگتر خواهد بود. همچنین در پلاسمای چگال‌تر علاوه بر کاهش دامنه نوسان، کمینه پهنای باریکه نیز کاهش می‌یابد. بعلاوه افزایش شدت لیزر، خودکانونی قوی‌تری را نتیجه داد.

مرجع‌ها

[۱] H. Hora;" The transient electrodynamic forces at laser-plasma interaction"; *Phys. Fluids* **28** (1985) 3705.

[۲] H. Hora;" Theory of relativistic self-focusing of laser radiation in plasmas"; *J. Opt. Soc. Am.* **65** (1975) 882.

[۳] S. Ali, W. M. Moslem, I. Kourakis, P. K. Shukla;" Parametric study of nonlinear electrostatic waves in two-dimensional quantum dusty plasmas"; *New J. Phys.* **10** (2008) 023007.

[٤] S. Zare, E. Yazdani, S. Rezaee, A. Anvari, R. Sadighi-Bonabi;" Relativistic self-focusing of intense laser beam in thermal collisionless quantum plasma with ramped density profile"; *Physical Rev. Special Topics- Accelerators and Beams* **18** (2015) 041301.

[٥] G. Manfredi;" How to Model Quantum Plasmas"; *Fields Inst. Commun.* **46** (2005) 263.

[٦] P. Jha, A. Malviya, A. K. Upadhyay;'' Propagation of chirped laser pulses in a plasma channel "; Phys.Plasmas 16 (2009)063106.

[۷] S. Afhami, E. Eslami;" Effect of nonlinear chirped Gaussian laser pulse on plasma wake field generation"; *AIP Advances* **4** (2014) 087142.

[۸] S. Zare, S. Rezaee, E. Yazdani, A. Anvari, R. Sadighi-Bonabi;" Relativistic Gaussian laser beam self-focusing in collisional quantum plasmas"; *Laser Part. Beams* **33** (2015) 397.

[۹] M. S. Sodha, A. K. Ghatak, V. K. Tripathi;" V Self Focusing of Laser Beams in Plasmas and Semiconductors"; *Progress in Optics. 13 (1976) 169.*

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بررسی آستانه رخ دادن آشوب در برهمکنش پالس قوی لیزر با گاز

خلیل زاده، الناز *; جعفری، محمد جعفر

سازمان انرژی اتمی، پژوهشگاه علوم و فنون هسته ای، پژوهشکده پلاسما و گداخت هسته ای

چکیده

در این مقاله، با استفاده از نتایج کد شبیه سازی PIC که شامل یونیزاسیون می شود، آستانه رخ دادن آشوب برای حالتی که پالس لیزر در محیط گازی منتشر می شود بررسی شده است. در واقع با در نظر گرفتن میدانهای تابش های تولید شده در پلاسما به عنوان موج دوم الکترومغناطیسی، آشوب در مساله بررسی می شود. به عنوان نتیجه اصلی، نشان داده می شود با در نظر گرفتن یونیزاسیون که همراه با نوسانات چگالی می باشد آستانه رخ دادن آشوب تغییر می کند. در واقع با در نظر گرفتن نوسانات چگالی، ناپایداری های پارامتریک از جمله رامان رشد داشته و دامنه میدان های پراکنشی تولید شده سریعتر شرایط لازم برای رخ دادن آشوب را فراهم می کنند.

Investigating the chaos threshold in the interaction of an intense laser pulse with a gas

Khalilzadeh, Elnaz*; Jafari, Mohammad Jafar

The Plasma Physics and Fusion Research School, Nuclear Science and Technology Research Institute, Tehran, Iran

Abstract

In this paper, using the results of the PIC simulation code which includes ionization, chaos threshold for the state in which the laser pulse is propagated in the gas medium is investigated. In fact, by considering the radiation fields produced in plasma as the second wave of electromagnetism, chaos is considered. As a main result, it is shown that by considering the ionization, which is accompanied by density fluctuations, the threshold of chaos changes. In fact, by considering the density fluctuations, parametric instabilities, including Raman, grow, and the scattered fields produced more quickly provide the conditions for occurrence the chaos.

PACS No. (50)

مقدمه

پیشرفت‌هایی که امروزه در تولید پالس‌های پر شدت لیزری انجام گرفته، باعث شده تا موضوع برهمکنش لیزر با پلاسما یکی از مسائل اصلی در علم فیزیک بررسی شود. در همین زمینه، مساله شتابدهی و انرژی الکترون‌ها به دلیل کاربرد فراوان آنها در حوزه‌های مختلف از جمله گداخت لیزری، پزشکی و شتابدهنده‌های پلاسمایی بسیار مورد توجه می‌باشد. در همین زمینه، مکانیسم‌های مختلف شتابدهی برای الکترون‌ها در نظر گرفته شده که مهمترین آنها شتاب از طریق تشکیل موج رد پا[1] [۱]، شتاب مستقیم[2] [۲] و شتاب بواسطه حرکت آشوبناک[3] [۳و٤]می-باشد. می دانیم حرکت تک الکترون در میدان موج الکترومغناطیسی کاملا مشخص و انتگرالپذیر می‌باشد. حال اگر یک اختلال که می-

1 Laser wakefield acceleration
2 Direct laser acceleration
3 Chaotic motion

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

تواند یک موج الکترومغناطیسی دیگر، یک میدان الکتریکی یا مغناطیسی ثابت باشد هامیلتونی الکترون دیگر انتگرالپذیر نیست[۵-۸]. در این صورت حرکت الکترون می تواند تحت شرایطی آشوبناک شده و به شتاب و انرژی‌های بالا برسد. در بسیاری از مطالعات مربوط به برهم کنش پالس قوی لیزر (پالس-های کوتاه نانو و پیکو ثانیه) با پلاسما، به دلیل اینکه در ابتدای پالس لیزر[۴] و قبل از رسیدن بخش اصلی پالس[۵] یونیزاسیون اتفاق می‌افتد، مرحله یونیزاسیون و تشکیل پلاسما بواسطه برخورد لیزر با ماده جامد یا گاز در نظر گرفته نمی‌شود. در حالی که در این بررسی‌ها، نشان داده شده است که اثرات پیش پالس و انرژی که صرف یونیزاسیون میدانی[۶] می‌شود، نیز می‌تواند بر روی شدت انتشار پالس اصلی، تاثیرگذار باشد. در این مقاله قصد داریم با در نظر گرفتن یونیزاسیون و تشکیل پلاسما در اثر انتشار پالس در محیط گازی، آستانه رخ دادن آشوب را بررسی کنیم. نتایج شبیه سازی ها نشان می دهند با در نظر گرفتن یونیزاسیون آستانه رخ دادن آشوب به صورت محسوسی تغییر می کند.

تئوری مساله

لاگرانژی یک الکترون در میدان دو موج الکترومغناطیسی ($A_1(x,t)$ و $A_2(x,t$) که خلاف جهت هم، در جهت x منتشر می‌شوند به صورت زیر می‌باشد [۹]:

$$L_0 = m_e c^2 \sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}} + \frac{q}{c}[V.(A_1(x,t)+A_2(x,t))], \quad (۱)$$

که در آن، m_e ، c ، V ، q و φ به ترتیب جرم الکترون، سرعت نور، سرعت الکترون، بار الکتریکی الکترون و پتانسیل عددی می‌باشند. در این حالت، به شرط اینکه شرایط Mednoca ($a_1 a_2 = 1/16$) برای دامنه‌های بی بعد پتانسیل برداری برقرار باشد حرکت ذره آشوبناک می‌شود [۸]. حال می‌خواهیم بدانیم این لاگرانژی در محیط پلاسما به چه صورت می‌باشد. می-دانیم میدان‌های خودسازگار در پلاسما می‌توانند میدان‌های الکتروستاتیکی و مغناطیسی جدید تولید کنند. در این حالت می توان لاگرانژی را در فضایی دور از مرز پلاسما و خلا به صورت زیر نوشت:

$$L = m_e c^2 \sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}} + \frac{q}{c}(V.\mathrm{A}(x,t)) - q\varphi_w(x,t), \quad (۲)$$

به عنوان نکته مهم باید گفت که $\boldsymbol{A}(x,t) = \sum_i \boldsymbol{A}_i(x,t)$ که در آن $\boldsymbol{A}_i(x,t)$ مولفه های تابش الکترومغناطیسی شامل پالس اصلی و تمامی میدان‌های پراکنشی تولید شده در پلاسما می باشد. هرگاه مشخصات پالس لیزر و پلاسما به گونه‌ای باشد که جمله سوم در مقایسه با جمله دوم دارای مقادیر کوچک باشد در این صورت میدان‌های پراکنشی تولید شده در پلاسما به شرطی که به یک مقدار آستانه مشخص شده که توسط مندونکا[۷] [۸] محاسبه شده است برسند می‌توانند باعث ایجاد آشوب شوند. حال سوال اساسی که مطرح می باشد این مساله است که اگر پلاسما پیش فرض در نظر گرفته نشود و اجازه داده شود با ورود پالس قوی لیزر به گاز، پلاسمای واقعی تشکیل شود در این صورت مکانیسم آشوب چه تغییری خواهد کرد. مشخص است که میدان‌های پراکنشی تولید شده در پلاسما (جمله سوم رابطه (۲))، در این صورت به دلیل نوسانات چگالی تغییر خواهند کرد. زمانی که مسئله انتشار پالس لیزر، به صورت ۱ بعدی در نظرگرفته می‌شود و از پدیده‌هایی چون خودتمرکزی و رشته رشته شدن صرف نظر گردد، ناپایداری رامان رو به جلو نقش اساسی در خود مدوله شدن پالس لیزر و تشکیل موج پلاسمایی با دامنه بلند دارد [۱۰]. از طرفی میزان افزایش پراکنش های تولید شده و تکامل و تغییر در پالس لیزر، به شدت، به منشا نویزی که باعث راه اندازی ناپایداری رامان می‌شود، بستگی دارد. ناپایداری‌های پارامتری از جمله رامان، معمولاً در اثر نوسانات در پوش لیزر و چگالی ایجاد می‌گردند [۱۱]. از طرفی دو سازوکار مختلف، که در آن‌ها یونیزاسیون باعث نوسان چگالی می‌شود، نیز وجود دارد. سازوکار اول تولید نیروی پاندرموتیو به دلیل وابسته به زمان بودن خاصیت دی الکتریک محیط (به هنگام یونیزاسیون به دلیل تغییر چگالی،

[۴] Pre-pulse
[۵] Main pulse
[۶] Field- ionization
[۷] Mendonca

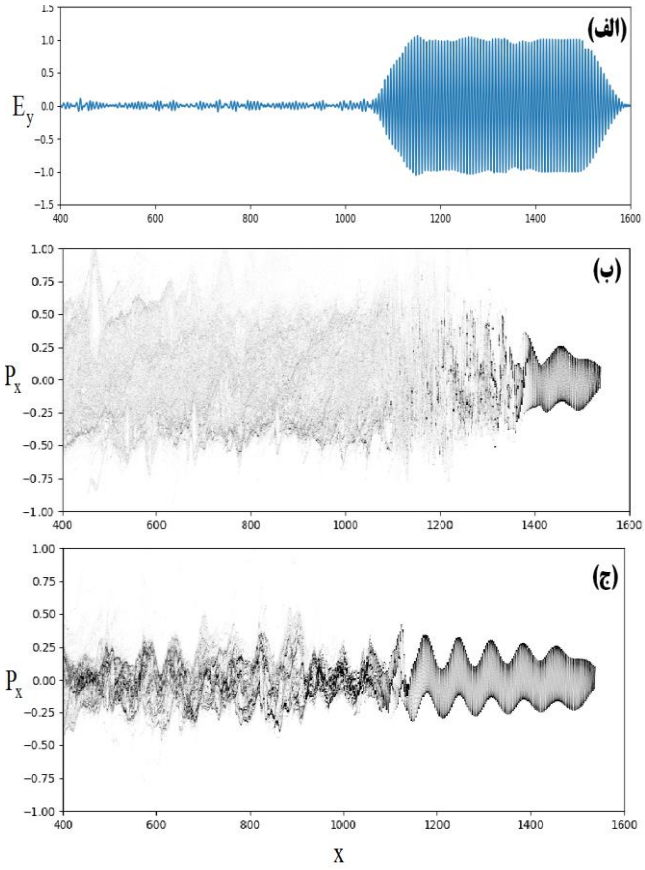
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

خاصیت دی الکتریک محیط ثابت نمی باشد) و دومی، نیروی ناشی از تغییرات شیب ناشی از یونیزاسیون است. با توجه به مطالب بیان شده انتظار می رود با در نظر گرفتن یونیزاسیون، شاهد تغییر در آستانه شروع آشوب در مساله باشیم که در بخش بعدی با داشتن نتایج شبیه سازی خواهیم پرداخت..

شبیه‌سازی مساله و نتایج آن :

برای جلوگیری از تکرار شدن پارامترهای شبیه‌سازی در تمام این بخش، این پارامترها قبل از ارائه نتایج شبیه‌سازی بیان می‌شوند. شبیه‌سازی‌ها با استفاده از کد شبیه‌سازی اسمایلی[۸][۱۲] که تک بعدی در مکان و سه بعدی در سرعت می‌باشد، انجام شده است. پالس لیزر دارای طول موج $\lambda = 1\mu m$ و دامنه میدان الکتریکی بی‌بعد شده $a_0 = 1$ است که $a_0^2 \simeq I\,\lambda_\mu^2 / 1.37\times10^{18}$ می‌باشد. برای تمامی نتایج شبیه‌سازی، پلاسما با پروفایل اولیه پله‌ای و چگالی $n = 0.01\ n_{cr}$ در محدوده $x = [200-1400]\mu m$ در نظرگرفته شده است. برای داشتن وضوح و دقت قابل قبول در شبیه‌سازی، در هر طول موج لیزر، ۲۷۰۰۰ سلول شبیه‌سازی که داخل هرکدام ٤٨ ابر ذره وجود دارد قرار دارد. طول مکانی هر سلول شبیه‌سازی در حدود $DX / \lambda_D \approx 0.01$ می‌باشد. شکل پالس لیزر به صورت ذوزنقه‌ای بوده که تابعیت سینوسی دارد. در واقع پالس از سه قسمت خیزش، مسطح و نزول تشکیل شده است. این پالس‌ها به گونه‌ای انتخاب شده‌اند که طول آنها بزرگتر از طول موج پلاسمای تشکیل شده باشد تا بتوانند نوسانات کامل پلاسما را تحت پوشش قرار دهند. در تمام این کار، مقادیر، موقعیت (x)، اندازه حرکت های طولی (P_x) ، میدان الکتریکی طولی (E_x) و پتانسیل برداری عرضی (a_y) به ترتیب به $m_e c$ ،λ ،$\omega_0 m_e c/q_e$ ،$q_e/m_e c^2$ و $m_e c^2$ نرمالیزه می‌شوند (q_e و ω_0 به ترتیب، بار الکترونی و فرکانس لیزر می‌باشد).

برای نشان دادن چگونگی تغییر آستانه رخ دادن آشوب و به هم ریختگی فضای فاز، دو پالس با طول ۳۰۰ فمتو ثانیه و

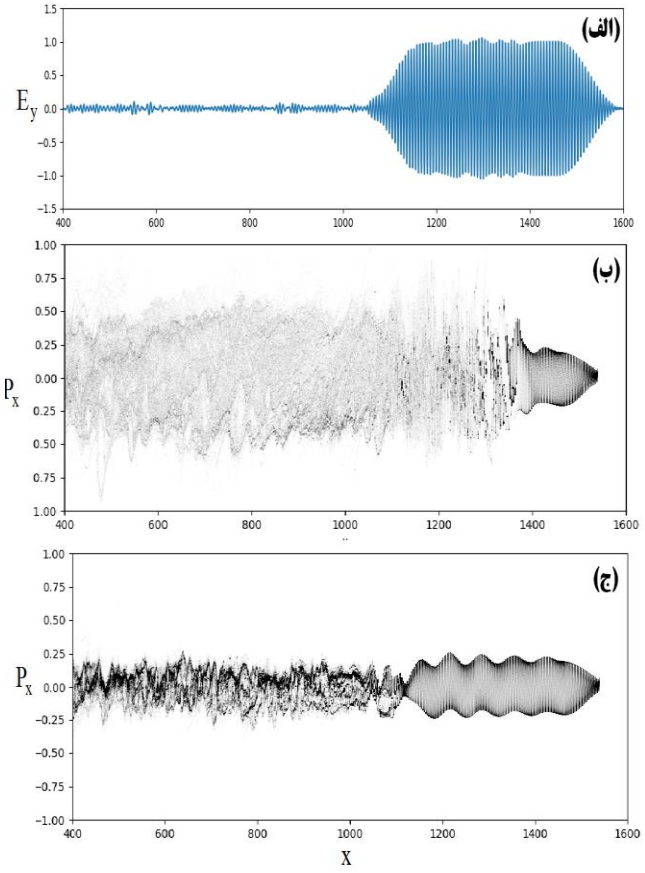


شکل ۱: (الف) میدان الکتریکی لیزر E_y، (ب) فضای فاز در حالتی که گاز در نظر گرفته شود، و (ج) فضای فاز در پلاسمای پیش فرض در زمان ۸۰۰ فمتو ثانیه، برای ترتیب برای پالس های (٦٠، ١٨٠، ٦٠) فمتو ثانیه.

زمان‌های خیزش متفاوت انتخاب می‌گردند. نتایج شبیه سازی در شکل ۱ و ۲ به ترتیب برای پالس های (٦٠، ١٨٠، ٦٠) فمتو ثانیه، و (٧٥، ١٥٠، ٧٥) فمتو ثانیه، در زمان ۸۰۰ فمتو ثانیه نشان داده شده است. هر شکل، از سه منحنی تشکیل شده است: (الف) میدان الکتریکی لیزر E_y، (ب) فضای فاز در حالتی که گاز در نظر گرفته شود، و (ج) فضای فاز در پلاسمای پیش فرض. با توجه به شکل ۱، مشخص است که رفتار تکانه برای دو حالت گاز و پلاسما متفاوت می‌باشد. بدیهی است که هم در پلاسما و هم در گاز الگوی آشوب و به هم ریختگی در فضای فاز در دو شکل ۱(ب) و ۱(ج)، قابل مشاهده می‌باشد. در حقیقت، در این حالت، تابش پراکندگی رامان رو به عقب در زمان‌های اولیه، می تواند

[۸] Smilei

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



شکل ۱: (الف) میدان الکتریکی لیزر E_y، (ب) فضای فاز در حالتی که گاز در نظر گرفته شود، و (ج) فضای فاز در پلاسمای پیش فرض در زمان ۸۰۰ فمتو ثانیه، برای پالس (۷۵، ۱۵۰، ۷۵) فمتو ثانیه.

شرایط مندونکا برای رخ دادن آشوب را فراهم کند[۱۳و ۱٤] (تحت شرایط مندونکا، اگر دامنه پتانسیل‌های برداری نرمالیزه شده برای دو موج در حال انتشار، در جهت‌های مخالف، رابطه $a_1a_2 \geq 1/16$ را برآورده کند، آشفتگی رخ می‌دهد). نکته قابل توجه این است که با در نظر گرفتن یونیزاسیون، سازوکار تصادفی می‌تواند سریعتر شروع شود. به نظر می‌رسد که با توجه به نوسانات چگالی، پراکندگی رامان رو به عقب افزایش یافته و معیار مندونکا [۸] زودتر برآورده می‌شود. همانطور که در شکل ۲ نیز مشهود است، سازوکار مشابهی برای پالس لیزر با زمان خیزش ۷۵ فمتو ثانیه رخ داده است.

نتیجه گیری

در این مقاله، فرایند رخ دادن آشوب و آستانه آن برای حالتی که پالس لیزر در محیط گازی منتشر می شود بررسی شده است. این کار با استفاده از نتایج کد شبیه سازی PIC که شامل یونیزاسیون می شود انجام شده است. . با در نظر گرفتن میدانهای پراکنشی تولید شده در پلاسما به عنوان موج دوم الکترومغناطیسی، آشوب در مساله بررسی شده است. نتایج بدست آمده نشان دادند که با در نظر گرفتن یونیزاسیون آستانه رخ دادن آشوب تغییر می کند. در واقع با در نظر گرفتن یونیزاسیون، نوسانات چگالی باعث رشد و تغییر ناپایداری‌های پارامتریک از جمله رامان شده و در نتیجه دامنه میدان‌های پراکنشی تولید شده سریعتر شرط مندونکا برای رخ دادن آشوب را فراهم می کنند. نتایج این مقاله جدید بوده و تا کنون گزارش نشده است و در تمامی حوزه‌هایی که انرژی ذرات در برهمکنش لیزر با پلاسما مهم می‌باشند از جمله گداخت لیزری و پرتو درمانی دارای کاربرد می-باشد.

مرجع‌ها

[1] J. Vieira, Y. Fang, W. B. Mori, L. O. Silva and P. Muggli, Phys. Plasmas **19**, 063105 (2012).
[2] V. Marceau, C. Varin, T. Brabec, and M. Piché, Phys. Rev. Lett. **111**, 224801 (2013).
[3] Z. M. Sheng, K. Mima, Y. Sentoku, M. S. Jovanovic, T. Taguchi, J. Zhang and J. Meyer-ter-Vehn, Phys. Rev. Lett. **88**, 055004 (2002).
[4] E.khalilzadeh, J.Yazdanpanah, J. Jahanpanah, A.chakhmachi, and E.Yazdani, Phys. Plasmas **22**, 113115 (2015).
[5] G.R. Smith and A.N. Kaufman, Phys. Rev. Lett. **34**, 1613 (1975).
[6] D.F. Escande and F. Doveil, Phys. Lett. A **83**, 307 (1981).
[7] A.J. Lichtenberg and M.A. Lieberman, *Regular and Stochastic Motion* (Springer-Verlag, New York, 1981).
[8] J. T. Mendonca and F. Doveil, J. Plasma Phys. **28**, 485 (1982).
[9] J. D. Jackson, Class*ical Electrodynamics*, Third Edition, (John Wiley & Sons Ltd. 1962).
[10] D. F. Gordon, B. Hafizi, P. Sprangle, R. F. Hubbard, J. R. Pen ano3 and W. B. Mori, Phy. Rev. E, 64, 046404 (2001).
[11] W. B. Mori and T. Katsouleas, Phys. Rev. Lett. 69, 3495 (1992).
[12] Derouillat, J., Beck, A., Pérez, F. et al. Comput. Phys. Commun. 222, 351-373 (2018).
[13] J. Yazdanpanah and A. Anvary, Phys. Plasmas **19**, 033110 (2012).
[14] E. khalilzadeh, A. chakhmachi and J. Yazdanpanah, *Plasma Phys. Control. Fusion* 59, 125004 (2017).

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بررسی و مطالعه جذب الکترومغاطیسی کامل همدوس(CPA) در یک جاذب تیغه‌ای شکل شامل تک لایه گرافن

بالایی ، محسن[۱] ؛ ناصری، طیبه[۲*]

[۱] دانشکده فیزیک دانشگاه شهید بهشتی ، تهران

[۲] گروه فیزیک، دانشگاه رازی، کرمانشاه

چکیده

در این تحقیق به بررسی و مطالعه جذب نور در نواحی مختلف طیف الکترومغناطیسی به وسیله یک ساختار چندلایه شامل یک لایه گرافن پرداخته شده است . به این منظور با به کار گیری معادلات موج ماکسول و اعمال شرایط مرزی مناسب ابتدا میدان های الکتریکی و مغناطیسی در تمام نواحی این ساختار به دست آمده و سپس با توجه به ارتباط مولفه مماسی میدان الکتریکی بر روی سطح فلز(تک لایه گرافن) و شدت اپتیکی جذب شده، رابطه‌ای کلی بین میزان جذب اپتیکی و پارامترهای هندسی و اپتیکی مربوط به ساختار جاذب ونور تابشی به دست آورده شده است. در پایان نیز مجموعه ای از پارامترهایی که موجب جذب کامل همدوس (CPA) در طول موج‌های مختلف می‌شوند نیز با روش‌های بهینه سازی مشخص شده اند. در این تحقیق توانسته‌ایم پارامترهای مربوط به جاذبی را پیدا کنیم که به طور همزمان میتواند در چندین طول موج مختلف جذب کامل همدوس داشته باشد.

واژه های کلیدی: *جذب الکترومغناطیسی کامل همدوس، تک لایه گرافن*

Investigation and study of electromagnetic coherent perfect absorption(CPA) in slab-shape structure contain a monolayer of graphene

Balaei, Mohsen[1]; Naseri, Tayebeh[2*]

[1]Department of Physics, Shaid Beheshti University, Tehran
[2] Department of Physics, Razi University, Kermanshah, Iran

Abstract

In this research, the light absorption in different region of electromagnetic spectrum by a multi-layered structure consisting of monolayer graphene was studied. For this aim, by using Maxwell equations and applying the boundary conditions, the electric and magnetic fields were obtained in all areas of this absorber, then by considering the relationship between tangential component of electric field on the conductor surface (Graphene) and absorbed optical intensity, total absorption was expressed as a function of geometric and optical parameters of absorbent and incident light. Finally, a set of the parameters that lead to coherent perfect absorption (CPA) at different wavelengths were obtained by optimization methods. In this paper, the set of parameters were found that the coherent perfect absorption (CPA) occurs in several wavelengths simultaneously.

***Keywords**: coherent perfect absorption, monolayer of graphene*

PACS No. (32)

مقدمه

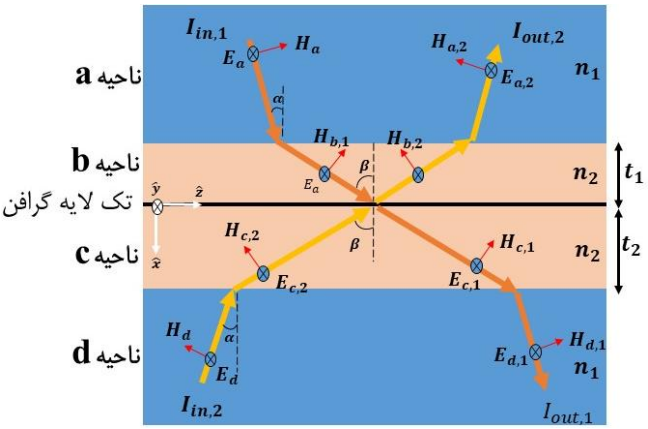
گرافن با ساختار تک لایه‌ای کاربردهای فراوانی در زمینه نور و اپتیک دارد از جمله در فوتودتکتورها[۱] با توانایی درصد جذب بالا. برای این منظور می‌توان تک لایه‌ی گرافن در ساختار میزبان مناسب با ثابت های اپتیکی و شکل هندسی مناسب قرار بگیرد تا بتواند در طول موج خاصی تمام نور تابیده شده به دتکتور را جذب

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

کند. یکی از تکنیک‌هایی که امروزه توجه زیادی را به خود جلب کرده، جذب کامل همدوس(CPA) است[۲]. سازوکار این روش درنقطه مقابل سازوکار لیزر قرار دارد. در این پدیده نور از دو منبع همدوس به دو طرف جاذب تابانده می‌شود، اگر ضریب شکست و دیگر پارامترهای هندسی و اپتیکی لایه‌های مختلف به کار برده شده در این جاذب به طور مناسب انتخاب شوند، هردو باریکه همدوس به طور کامل جذب خواهند شد. نتیجه این جذب می‌تواند به صورت ایجاد جریان الکتریکی یا ظاهر شدن گرما باشد[۳]. برای اولین بار در سال ۲۰۱۰ این پدیده به صورت تئوری بیان شد[٤] و پس از آن جاذب هایی به صورت تجربی ساخته شد. طبق مطالعات گزارش شده معمولا جذب کامل همدوس یا به اختصار CPA فقط در یک طول موج خاص برای جاذب میتواند اتفاق افتد[۵].

روش محاسباتی

مطابق شکل۱ جاذب از چهارناحیه مختلف و یک لایه گرافن در مرکز ایجاد شده است. در محاسبات و گرافن را به صورت یک لایه‌ی نازک فلزی در نظر گرفته‌ایم[٦]. دو باریکه I_{in1} و I_{in2} به جاذب تابیده می‌شود. میدان الکتریکی این دو باریکه با هم اختلاف فازی به اندازه‌ی φ دارند. معادلات مربوط به میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی مطابق مجموعه معادلات ۱و۲ بیان می‌شوند[٦].



شکل ۱ :طرحواری از جاذب و میدان‌های‌الکتریکی و مغناطیسی در نواحی مختلف.

$$\begin{cases} E_{a.y} = \left(E_a e^{ik_{x.a}x} + E_{a.2} e^{-ik_{x.a}x}\right) e^{ik_{z.a}z} \\ E_{b.y} = \left(E_{b.1} e^{ik_{x.b}x} + E_{b.2} e^{-ik_{x.b}x}\right) e^{ik_{z.b}z} \\ E_{c.y} = \left(E_{c.1} e^{ik_{x.c}x} + E_{c.2} e^{-ik_{x.a}x}\right) e^{ik_{z.c}z} \\ E_{d.y} = \left(E_{d.1} e^{ik_{x.d}x} + E_d e^{-ik_{x.a}x+i\varphi}\right) e^{ik_{z.a}z} \end{cases} \quad (۱)$$

با توجه به رابطه‌ی $\vec{H} = \frac{\hat{R}\times\vec{E}}{\upsilon\mu_0}$ می‌توان میدان مغناطیسی را در نواحی مختلف به دست آورد. دراین رابطه ν سرعت نور در محیط است و $\hat{R}$ بردار انتشار موج است. بنابراین بردار $\vec{H}$ را میتوان به صورت معادلات زیر بیان کرد:

$$\begin{cases} H_{a.z} = \sqrt{\frac{\varepsilon_0\varepsilon_a}{\mu_a}} \cos\alpha \left(E_a e^{ik_{x.a}x} - E_{a.2} e^{-ik_{x.a}x}\right) e^{ik_{z.a}z} \\ H_{b.z} = \sqrt{\frac{\varepsilon_0\varepsilon_b}{\mu_b}} \cos\beta \left(E_{b.1} e^{ik_{x.b}x} - E_{b.2} e^{-ik_{x.a}x}\right) e^{ik_{z.b}z} \\ H_{c.z} = \sqrt{\frac{\varepsilon_0\varepsilon_c}{\mu_c}} \cos\beta \left(E_{c.1} e^{ik_{x.c}x} - E_{c.2} e^{-ik_{x.c}x}\right) e^{ik_{z.c}z} \\ H_{d.z} = \sqrt{\frac{\varepsilon_0\varepsilon_d}{\mu_d}} \cos\alpha \left(E_{d.1} e^{ik_{x.d}x} - E_d e^{-ik_{x.d}x+i\varphi}\right) e^{ik_{z.a}z} \end{cases} \quad (۲)$$

مجموعه معادلا ت۱ و۲ در واقع مولفه‌های مماسی میدان‌ها هستند. در این جاذب فرض بر این است که تمام لایه‌ها آثار مغناطیسی چشمگیری ندارند، بنابراین:

$$\sqrt{\frac{\varepsilon_0\varepsilon}{\mu}} = \sqrt{\frac{\varepsilon_0\varepsilon}{\mu_0}} = \frac{n}{Z_0}$$

در این رابطه n ضریب شکست اپتیکی و Z_0 امپدانس موج در خلاء می‌باشد که مقدارتقریبی آن برابر $۳۷۷\ \Omega$ می‌باشد.

برای میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی مجموعه شرایط مرزی وجود دارد که طبق معدلات ۳ و ٤ بیان میشوند:

$$\begin{cases} E^{\parallel}_{a.x=-t_1} = E^{\parallel}_{b.x=-t_1} \\ E^{\parallel}_{b.x=0} = E^{\parallel}_{c.x=0} \\ E^{\parallel}_{c.x=t_2} = E^{\parallel}_{d.x=t_2} \end{cases} \quad (۳)$$

$$\begin{cases} \hat{x}\times(\vec{H}_b - \vec{H}_a)_{x=-t_1} = \vec{0} \\ \hat{x}\times(\vec{H}_c - \vec{H}_b)_{x=0} = \vec{J} \\ \hat{x}\times(\vec{H}_d - \vec{H}_c)_{x=-t_1} = \vec{0} \end{cases} \quad (٤)$$

در معادله دوم از مجموعه معادلات٤، $\vec{J}$ بردار چگالی جریان در سطح تک لایه گرافن است. با توجه به رابطه‌ی بین بردار چگالی جریان ،رسانندگی الکتریکی گرافن($\sigma\sim6{,}08\times10^{-5}\Omega^{-1}$) [۷]

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

و مولفه‌ی مماسی میدان الکتریکی در ناحیه b و یا ناحیهc ، این بردار را میتوان به صورت زیر نوشت:

$$\vec{J} = \sigma E^{\parallel}_{b.x=0} = \sigma E^{\parallel}_{c.x=0} \qquad (۵)$$

شدت اپتیکی جذب شده ناشی از تک لایه گرافن، طبق رابطه‌ی زیر به دست بیان می‌شود[٦] :

$$I_{abs} = \frac{1}{2}\sigma\left|E^{\parallel}_{b.x=0}\right|^2 = \frac{1}{2}\sigma|E_{b.1} + E_{b.2}|^2 \qquad (٦)$$

بنابراین برای به دست آوردن شدت اپتیکی جذب شده(I_{abs}) باید مجموعه معادلات۳و٤ به منظور به دست آوردن $E_{b.1}$ و $E_{b.2}$ برحسب میدان‌های تابشی E_a و E_d حل کرد. با فرض اینکه دامنه میدان‌ها برابر باشد($E_a = E_b = E_0$) حل همزمان معادلات۳، ٤ و ٥ به نتایج منجر می‌شود:

$$\begin{cases} E_{b.1} = \frac{\xi}{\eta} \\ E_{b.2} = \frac{\zeta}{\eta} \end{cases} \qquad (۷)$$

به طوری که :

$$\begin{cases} \xi = 2n_1 \cos\alpha E_0 \{(1+\gamma)\Sigma e^{ikt_2\Delta} - \gamma\Delta e^{ikt_2\Sigma} - \Delta e^{i(\varphi+kt_1\Sigma)}\} \\ \zeta = 2n_1 \cos\alpha E_0 \{\Sigma e^{i(\varphi+kt_1\Delta)} + (\gamma-1)\Delta e^{ikt_2\Sigma} - \gamma\Sigma e^{ikt_2\Delta}\} \\ \eta = (1+\gamma)\Sigma^2 e^{ik(t_1+t_2)\Delta} + (\gamma-1)\Delta^2 e^{ik(t_1+t_2)\Sigma} - \\ \gamma\Delta\Sigma e^{ik(\Delta+\Sigma)(t_1+t_2)} \end{cases}$$

همچنین:

$$\begin{cases} \Sigma = n_1\cos\alpha + n_2\cos\beta \\ \Delta = n_1\cos\alpha - n_2\cos\beta \\ \gamma = \dfrac{\sigma z_0}{2n_2\cos\beta} \end{cases}$$

با جایگذاری متغیرهای فوق در معادله٦ مقدار I_{abs} به دست خواهد آمد. جذب کل توسط جاذب برابر است با نسبت I_{abs} به کل شدت ورودی به جاذب(I_{in}). با توجه به زاویه تابش باریکه های ورودی به جاذب، I_{in} را به شکل زیر می‌توان نوشت :

$$I_{in} = I_{in.1} + I_{in.2} = \frac{\cos\alpha}{2Z_0}\left(E_a^2 + E_b^2\right) = \frac{\cos\alpha}{Z_0}E_0^2$$

بنابراین میزان جذب کل برابر خواهد بود با :

$$A = \frac{\sigma z_0}{2n_1 E_0^2}\frac{|\zeta+\xi|^2}{|\eta|^2} \qquad (۸)$$

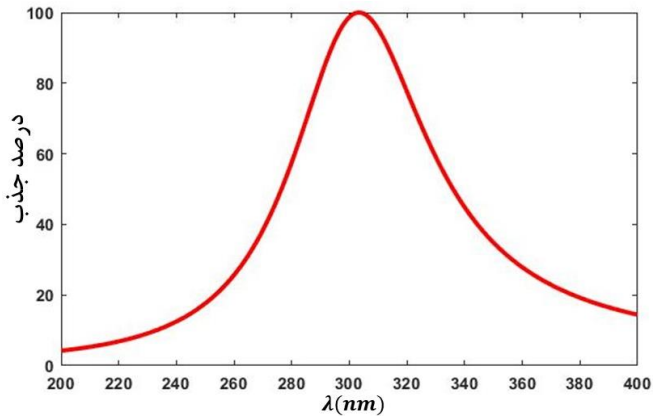
نتایج محاسباتی و بحث

با استفاده از معادله۸ تابعیت جذب کل نسبت به پارامترهای هندسی و اپتیکی جاذب مشخص شده است. با استفاده از روش های بهینه سازی می‌توان پارامترهای موجود در این معادله را به نحوی انتخاب کرد که مقدار جذب به ۱۰۰٪ برسد. در چنین حالتی جذب کامل همدوس(CPA) رخ خواهد داد. ما با استفاده از نرم‌افزار متلب توانستیم مجموعه‌ای از پارامتر هایی که منجر به رخ دادن حالت CPA می‌شود را پیدا کنیم. برای این کار از دستور fmincon در نرم افزار متلب استفاده شد. در هنگام بهینه سازی معادله۸ با استفاده از دستور fmincon میتوان دامنه‌ی تغییرات متغیرهای مستقل(n_1، n_2 و...) را به یک بازه‌ی خاص محدود کرد که از نظر فیزیکی در دسترس باشند. چند مجموعه از نقاطی که موجب جذب ۱۰۰٪ در معادله۸ میشوند در جدول۱ ارایه شده‌اند.

جدول۱: چند مجموعه پارامتر که در آن جذب کامل رخ می‌دهد.

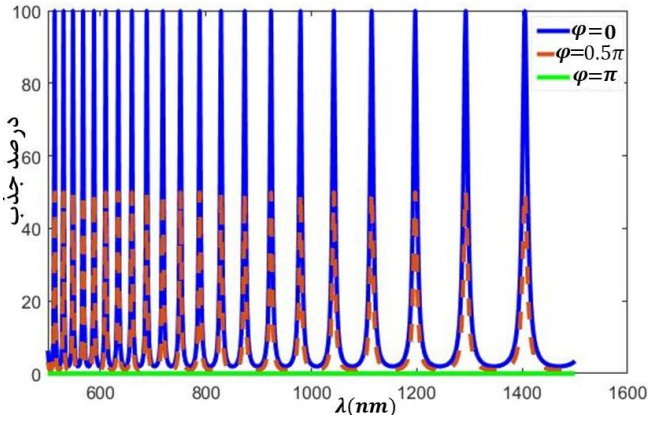
n_1	n_2	$t_1(\mu m)$	$t_2(\mu m)$	α	$\lambda(nm)$	جذب(٪)
۲/٥	۱	۰/۸	۰/۸	۲۳/۲٥	٥۱٦/۹	۱۰۰
۲/٥	۱/٥	۱	٤	۳٦/۸۰	۸۸٥/٤	۹۹/۹٥
۲/٥	۱/٥	۰/٥	۰/٥	۳٦/٦٥	۳۰۳/۳	۱۰۰
۲/٥	۱	٥	٥	۲۳/۲٥	۱۱۱٤	۱۰۰

همچنین میتوان پارامترهای جاذب را به نوعی انتخاب کرد که در چندیدن طول موج مختلف به صورت همزمان CPA رخ دهد در شکل۳ یک نمونه از این حالت نشان داده شده است.



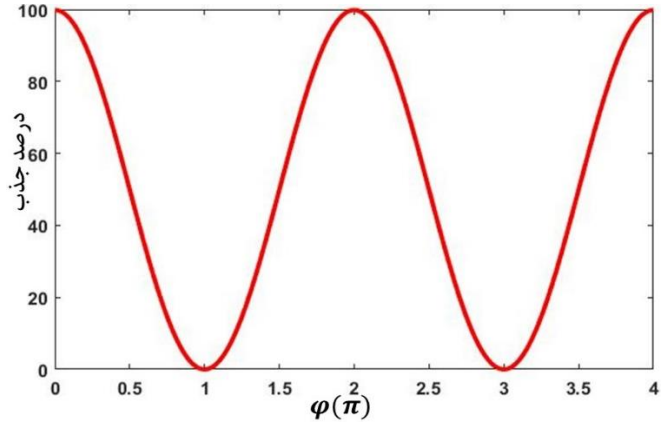
شکل۲ : جذب CPA در طول موج ۳۰۳,٥ نانومتر. پارامترهای جاذب عبارتند از:$n_1 = 2.5$ ، $n_2 = 1.5$ ، $t_1 = t_2 = 500\text{nm}$ ، $\alpha = 36.65^\circ$ و $\varphi = 0$.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



شکل۳ : جذب CPA در طول موج‌های مرئی وIR. پارامترهای جاذب عبارتند از: $\alpha = 23.25$ ، $t_1 = t_2 = 50\mu m$ ، $n_1 = ۱$، $n_1 = 2.5$

همان طور که در شکل۳ و شکل٤ مشخص است، با تغییر مقدار اختلاف فاز نسبی بین دو باریکه میتوان درصد جذب را بین صفر تا صد تغییر داد.



شکل٤ : جذب CPA بر حسب فاز نسبی بین دو باریکه نسبی. پارامترهای جاذب عبارتند از: $\alpha = 23.22°$ ، $t_1 = t_2 = 900\mu m$ ، $n_1 = 1$، $n_1 = 2.5$ در طول موج 1064nm.

نتیجه گیری

در این مطالعه، با استفاده از معادلات ماکسول و شرایط مرزی مناسب میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی در تمام نواحی یک جاذب که به صورت چهار تیغه موازی و یک لایه گرافن طراحی شده است، به دست آمد. با استفاده از میدان های محاسبه شده، میزان جذب اپتیکی به وسیله ی تک لایه‌ی گرافن به دست آمد، سپس با استفاده از بهینه سازی، مجموعه‌ای از پارامترهای هندسی و اپتیکی مربوط به جاذب و نور تابشی به دست آمد که موجب شد جاذب، نور تابشی را به صورت کامل جذب کند و جذب کامل همدوس (CPA) رخ دهد.

در این تحقیق توانسنیم پارامترهای بهینه‌ای پیدا کنیم که باعث می-شود جاذب بتواند به طور همزمان در طول‌موج های مختلفی از طیف الکترومغناطیسی جذب کامل همدوس(CPA) رخ دهد.

مرجع‌ها

[.۱] Liu, Chang-Hua, et al. "Graphene photodetectors with ultra-broadband and high responsivity at room temperature." *Nature nanotechnology* 9.4 (2014): 273-278.
[.۲] Zhang, Jianfa, et al. "Coherent perfect absorption and transparency in a nanostructured graphene film." *Optics Express* 22.10 (2014): 12524-12532.
[.۳] Wan W, Chong Y, Ge L, Noh H, Stone A D and Cao H 2011 *Science* 331 889–92.
[.٤] Chong, Y. D., et al. "Coherent perfect absorbers: time-reversed lasers." *Physical review letters* 105.5 (2010): 053901.
[.٥] S.M. Rao, J.J.F. Heitz, T. Roger, N. Westerberg, D. Faccio, Coherent control of light interaction with graphene. *Opt. Lett*. 39(18), 5345–5347 (2014)
[٦] F. Xiong, J. Zhou, W. Xu, Z. Zhu, X. Yuan, J. Zhang, S. Qin, Visible to near-infrared coherent perfect absorption in monolayer graphene. *J. Opt.* 20(9), 095401 (2018).
[7] Feng, Xiong, et al. "Coherent perfect absorption and asymmetric interferometric light-light control in graphene with resonant dielectric nanostructures." *Optics Express* 26.22 (2018): 29183-29191.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بررسی خواص ساختاری و اپتیکی نانو فسفر $CaZrO_3$ با افزودنی Eu^{3+}

کریمی ، لیلا[۱،*] ؛ جعفری فشارکی ، مرجانه[۱] ؛ جلالی ، محمدرضا[۱] ؛ صادقی ، احسان[۲]

[۱] گروه فیزیک، دانشگاه پیام نور، تهران، ایران

[۲] گروه فیزیک، دانشگاه کاشان، کاشان، ایران

چکیده

در این پژوهش نانو فسفر $Ca_{1-x}ZrO_3:Eu_x$ (x=۱ ،۲ ،۳ ،٤ ،٥ mol %) به روش سل-ژل خود احتراقی با سوخت اسید سیتریک در دمای پایین تهیه شد. نتایج آنالیز پراش پرتو ایکس (XRD) حاکی از تشکیل فاز نمونه در دمای ۳۵۰ ^oC با ساختار پروسکایت بود. همچنین نتایج XRD نشان داد دمای بهینه جهت تشکیل نمونهٔ تک فاز و بلوری نانو فسفر $CaZrO_3:Eu^{3+}$، ۷۰۰ ^oC می‌باشد. متوسط اندازهٔ بلورک‌ها نیز برای قله مشهود (۱۲۱) با استفاده از فرمول شرر، ٤٤nm تخمین زده شد. مورفولوژی نمونه‌ها با استفاده از میکروسکوپ الکترونی روبشی گسیل میدانی (FE-SEM) انجام شد. جهت بررسی آنالیز کمی از میزان عناصر موجود از آنالیز تفکیک انرژی پرتو ایکس (EDAX) متصل به دستگاه SEM استفاده شد. به وضوح طیف سنجی تبدیل فوریه مادون قرمز (FTIR) افزایش جذب و خصوصیات انتقال را نشان می دهد. به منظور بررسی خواص ترمولومینسانس (TL)، ابتدا نمونه‌ها را به مدت یک ساعت در دمای ۵۰۰ ^oC تابکاری کرده و سپس با پرتو UV با طول موج ۲٥٤nm در بازهٔ زمانی ۳۰ ثانیه تا ۱۵ دقیقه پرتودهی شدند. نتایج TL نشان می‌دهد نمونهٔ $CaZrO_3:Eu^{3+}$ دارای منحنی تابشی خوب با تغییرغلظت ناخالصی (۱-۵ mol%) در UV ثابت (۱۵ min) و تغییر مدت زمان UV تابشی (۳۰ s – ۱۵ min) در غلظت ثابت در نمونهٔ ($CaZrO_3:Eu^{3+}$ (۲ mol % با دمای بیشینهٔ ۱۹۵ ^oC می‌باشد که آن را برای دزیمتری TL مناسب نشان می‌دهد.

واژه های کلیدی: *خواص ساختاری، اپتیکی، نانو فسفر $CaZrO_3$، ترمولومینسانس.*

Structural and Optical Properties on Eu^{3+} Doped $CaZrO_3$ Nanophosphore

Karimi, Leila[1,*]; Jafari Fesharaki, Marjaneh[1]; Jalali, Mohammad Reza[1]; Sadeghi, Ehsan[2]

[1] *Department of Physics, Payame Noor University, Tehran, Iran*

[2] *Department of Physics, Kashan University, Kashan, Iran*

Abstract

In this study, nanophosphorus $Ca_{1-x}ZrO_3:Eu_x$ (x=1,2,3,4,5 mol%) was prepared by self-combustion sol-gel method with citric acid fuel at low temperature. The results of X-ray diffraction (XRD) analysis indicated the formation of sample phase at 350 ºC with perovskite structure. XRD results also showed that the optimum temperature for the formation of single phase and crystalline nanophosphours sample of $CaZrO_3:Eu^{3+}$ is 700 ºC. The average crystal size for the visible peak (121) was estimated 44nm using the Debye Scherer formula. Surface morphology of the samples were characterized by field emission electron microscopy (FESEM). In order to evaluate the quantitative analysis of available elements of the X-ray energy separation analysis (EDAX) connected to the SEM device was used. Fourier transform infrared (FTIR) clearly indicates the enhanced absorption and transmittance characteristics. In order to investigate the thermoluminescence (TL) properties, at first anneal the samples at 500 ºC for 1 hour and then irradiated with UV rays with a wavelength of 254 nm over a period of 30 seconds to 15 minutes. The TL results show the sample of $CaZrO_3:Eu^{3+}$ having a good radiant peak with a change in impurity concentration (1 – 5 mol%) in constant UV (15 min) with the variation of concentration of Eu^{3+} (1-5mol%) at fixed UV exposure and the variation of UV exposure time (30 s- 15 min) at fixed concentration for the sample $CaZrO_3:Eu^{3+}$ (2mol%) with a maximum temperature of 195 ºC, which makes it suitable for TL dosimetry.

Keywords: *Structural and optical properties, Nano phosphor $CaZrO_3$,Termoluminescence .*

PACS No. (78)

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد

http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مقدمه:

زیرکنات‌های قلیایی خاکی زیرمجموعه‌ای از خانواده‌ی اکسیدها با فرمول عمومی $A^{2+}B^{4+}O_3$ هستند که در آن A و B به ترتیب می‌توانند A=Ca,Ba,Sr,Pb,Sn,Fe و B=Zr,HF,Ti,Si باشند [۱-٤]. این اکسیدها دارای ساختار بلوری نوع پروسکایت هستند که به دلیل کاربرد آنها در سلول‌های خورشیدی، مادهٔ آند در سلول سوخت اکسید جامد، فوتوکاتالیست‌ها، مواد دی‌الکتریک در میکروموج‌ها، کاتالیزور، حسگرهای هیدروکربن (به دلیل داشتن رسانایی پروتون در دمای بالا) و از همه مهمتر شبکه ی میزبان برای ماده‌های فسفرسانس می‌باشند[۵-٦]. در سال‌های اخیر $CaZrO_3$ آلاییده شده با یون‌های خاکی کمیاب، به واسطه شاخصه‌های مهم شان (که در بالا اشاره شده است) آنها را برای تحقیقات اساسی ویژه کرده است و به دلیل داشتن گاف انرژی زیاد، آنها را برای کاربردهای نوری مناسب کرده است. افزودن ناخالصی یوروپیوم به $CaZrO_3$خواص فوتولومینسانس و ترمولومینسانس جالبی را ایجاد می‌کند[۷-۸]. ترمولومینسانس تخلیه‌ی انرژی ذخیره شده با تحریک گرمایی به شکل نور است [۹-۱۰]. پژوهش حاضر منحنی تابش ترمولومینسانس Eu^{3+} اضافه شده به ترکیب $CaZrO_3$ را نشان می-دهد. نمونه به روش سل-ژل خوداحتراقی دمای پایین با سوخت اسید سیتریک تهیه شده است و ساختار بلوری و مورفولوژی سطحی آن به ترتیب با آنالیز XRD و FE-SEM صورت گرفته است. منحنی تابش ترمولومینسانس با غلظت‌های مختلف Eu^{3+} اضافه شده در دز ثابت پرتو UV تابشی و همچنین دزهای مختلف تابش UV در غلظت ثابت Eu^{3+} که پاسخ خطی نسبت به دز دارد، بررسی شده است.

مراحل آزمایش:

مواد به کار گرفته شده جهت تهیه نانو فسفر $CaZrO_3$:Eu عبارتند از: $Ca(NO_3)_2$، $Zr(NO_3)_2$ و $Eu(NO_3)_3$ با درجهٔ خلوص بالا. جهت تهیهٔ ۲g (۵ mol %، ٤، ۳، ۲، ۱=x) $Ca_{1-x}ZrO_3:Eu_x$، با توزین مواد بر اساس استوکیومتری مشخص، درصدهای وزنی مشخصی از این مواد توزین و به طور جداگانه در آب مقطر دیونیزه شده حل و به مدت بیست دقیقه روی همزن مغناطیسی در دمای ^oC ۵۰ قرار می‌دهیم و سپس حجم مشخصی اسید سیتریک را به عنوان سوخت به آن اضافه می‌کنیم و ترکیب حاصل را به آرامی هم می‌زنیم تا محلول یکنواختی به دست آید. جهت تنظیم pH، محلول آمونیوم به صورت قطره قطره به محلول اضافه می‌شود تا pH آن به ۷ برسد. محلول را به مدت ۵ دقیقه داخل کوره الکتریکی در دمای ^oC ۳۵۰ قرار می‌دهیم تا عمل احتراق صورت گیرد. در نهایت پودر خاکستری نرمی به دست می‌آید. سپس پودر حاصل را جهت تشکیل فازهای نهایی و زدوده شدن کربن‌های موجود به مدت سه ساعت در دمای ^oC ۷۰۰ داخل کوره الکتریکی برنامه‌ریزی شده قرار می‌دهیم. پس از اتمام عملیات حرارت‌دهی پودرهای حاصل را به مدت ۱۰ دقیقه درون هاون دستی آسیاب کردیم. بررسی ساختاری و تشکیل فاز نمونه‌ها توسط الگوی پراش اشعه‌ی ایکس (XRD) با پرتو Cu-Kα انجام شد. مورفولوژی نمونه‌ها نیز توسط میکروسکوپ الکترونی روبشی گسیل-میدانی (FE-SEM) انجام شد. آنالیز عنصری نمونه‌ها نیز توسط طیف سنج تفکیک انرژی پرتو ایکس (EDAX) انجام شد. منحنی فوتولومینسانس نمونه‌ها نیز توسط TLD reder مدل Harsha 4500 در دمای اتاق انجام شد.

بحث و نتایج:

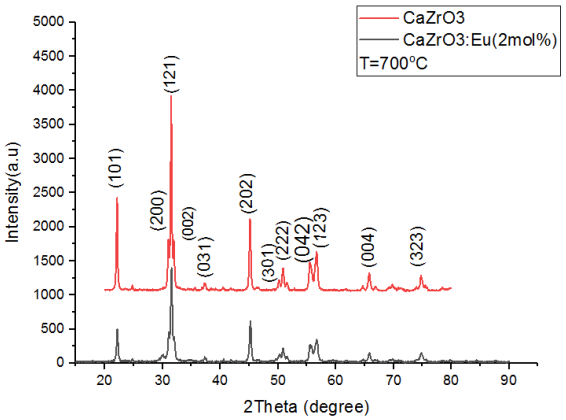
الگوی XRD نمونه $CaZrO_3$ و $Ca_{0.98}Eu_{0.02}ZrO_3$ تهیه شده در دمای ^oC ۳۵۰ و کلسینه شده در ^oC ۷۰۰ در شکل ۱ نشان داده شده است. از آنجایی که شعاع یونی Eu^{3+}، ۰/۰۹۵ nm است که قابل قیاس با شعاع یونی Ca^{2+}، ۰/۰۹۹ nm است و شعاع یونی Zr^{4+}، ۰/۰۷۲ nm است، لذا Eu^{3+} جایگزین Ca^{2+} می‌شود. قله های مشخص شده متناظر با ساختار پروسکایت اورتورومبیک $CaZrO_3$ با PDF کارت شماره ۰۷۹۰-۳۵ و گروه فضایی Pnma در دمای ^oC ۷۰۰ دارد. هیچ گونه قله اضافی که دلالت بر وجود فازهای اضافی در ترکیب باشد در الگوی XRD مشاهده نشده است. اندازه بلورک‌ها نیز با استفاده از فرمول شرر [۱۱]:

$$D = \frac{0.9\lambda}{\cos\theta} \quad (1)$$

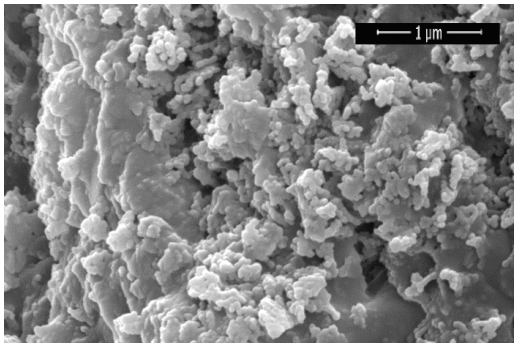
محاسبه شده است که در آن λ طول موج اشعه ایکس (۰/۱٥٤ nm)، β (FWHM) پهنا در نصف بیشینه و θ زاویه پراش می‌باشد که با

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

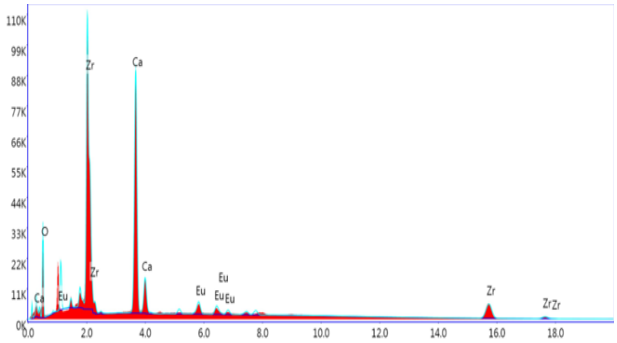
استفاده از داده‌های XRD قابل محاسبه است. مورفولوژی سطحی نمونه‌ها و همچنین تخمین اندازه ذرات نیز با استفاده از FE-SEM انجام شده است که نتایج آن در شکل ۲ نشان داده شده است. در این تصویر متوسط اندازه ذرات با نتایج به دست آمده از نمودار XRD در توافق است و نانو ذرات از همگنی مناسبی برخوردار است. البته همان طور که در شکل هم مشهود است ذرات آلگومره شده‌اند که معمولاً در روش خوداحتراقی امری بدیهی است [۱۲].



شکل ۱: الگوی XRD نمونه $CaZrO_3$ و $Ca_{0.98}Eu_{0.02}ZrO_3$ کلسینه شده در دمای ۷۰۰°C

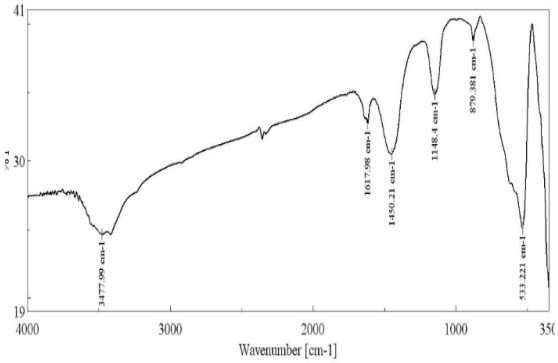


شکل ۲: تصویر FE-SEM نمونه $Ca_{0.98}Eu_{0.02}ZrO_3$



شکل ۳: نمودار EDAX نمونه $Ca_{0.98}Eu_{0.02}ZrO_3$

همان طور که در شکل ۳ هم مشهود است طیف فلورسانس پرتو x حاصل از روش EDX نمونه $Ca_{0.98}Eu_{0.02}ZrO_3$ حاکی از ترکیبات Ca، Zr و O و Eu بدون حضور C و N در ترکیب می باشد. همین طور درصدهای اتمی گزارش شده در ترکیب در شکل ۳ در توافق خوبی با مقادیر تئوری می‌باشند. طیف سنجی تبدیل فوریهٔ مادون قرمز یک ابزار آنالیز قوی که اساسا برای مطالعه ساختار مولکولی سنتز شده به کار می رود. اساس FTIR شامل بازتابش مواد سنتز شده با تابش مادون قرمز است. جذب تابش IR نتیجه‌ی برانگیختگی مولکول‌ها به یک حالت ارتعاشی بالاتر است. اختلاف انرژی بین حالت‌های پایه و برانگیخته ارتعاشی مطابق با طول موج جذب شده تابش است [۱۳]. طیف FTIR، قله‌های جذب نمونه را که مربوط به فرکانس ارتعاشات بین پیوندهای اتم های سازنده است، کشش پیوند اتم ها نسبت به کشش و خمش متقارن و پادمتقارن آنها را نشان می دهد[۱٤]. طیف FTIR عدم وجود واسطه‌های آلی در نمونه را تایید می‌کند. طیف IR با یک محدوده پهن از cm^{-1} ۱٦۱۷– ۳۵۰ مطابق با ارتعاشات اکسیژن – زیرکونیوم است . حضور قله جذب در cm^{-1} ۳٤۷۸ مربوط به ارتعاشات اکسیژن –یوروپیوم است [۱۵].



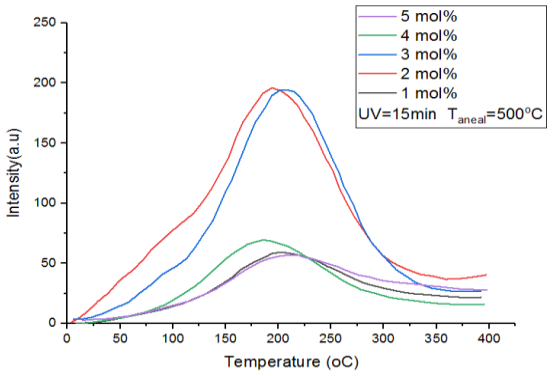
شکل ٤: طیف FTIR نمونه $Ca_{0.98}Eu_{0.02}ZrO_3$

منحنی تابش ترمولومینسانس:

نمونه $Ca_{0.98}Eu_{0.02}ZrO_3$ به مدت یک ساعت در دمای ۵۰۰ °C حرارت دهی شد، سپس با غلظت‌های متفاوت به مدت ۱۵ دقیقه در معرض لامپ UV قرار گرفت و سپس بعد از پرتودهی پاسخ ترمولومینسانس نانو ماده توسط آشکار ساز (Harshaw Model 4500 computer based reader) قرائت شد. نمونه با نرخ گرمایی ۲ °C/s از دمای اتاق تا دمای ٤۰۰ °C

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

گرم می‌شود. نتایج آن در شکل ۵ نشان می‌دهد بیشترین شدت در غلظت x=۲ mol% رخ می‌دهد. با تغییر غلظت ناخالصی در شبکه‌ی میزبان، در شکل منحنی تغییری ایجاد نمی‌شود و تنها شدت آن تغییر می‌کند.

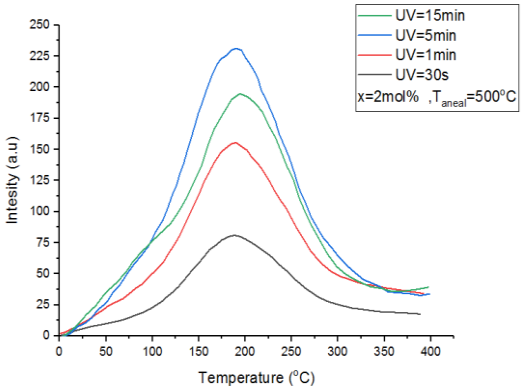


شکل ۵: منحنی تابش TL برای $Ca_{1-x}ZrO_3:Eu_x$ در غلظت‌های مختلف

نمونه $Ca_{0.98}Eu_{0.02}ZrO_3$ یک قله تابشی منفرد در دمای ۱۹۵ ^oC نشان می‌دهد. این قله منفرد به واسطه‌ی تشکیل یک نمونه مرکز لومینسانس است که ناشی از تابش UV در نمونه می‌باشد. این حدس زده می‌شود که مرکز باز ترکیب همراه با تابش در فواصل دما از وجود جفت‌های آزاد شده نشأت می‌گیرد که نتیجه‌ی آزاد شدن گرمایی الکترون –حفره از انواع مختلف گیرانداز و باز ترکیب در مراکز است. نمونه‌ی $Ca_{0.98}Eu_{0.02}ZrO_3$ در زمان‌های مختلف با UV پرتودهی شد و نتایج آن در شکل ٦ آورده شده است. همان طور که در شکل ٦ مشهود است، با تغییر زمان پرتودهی، شکل منحنی تغییر نمی‌کند و تنها شدت آن به طور خطی تغییر می‌کند. شدت از زمان ۳۰ ثانیه تا ۵ دقیقه زیاد می‌شود و سپس در ۱۵ دقیقه کاهش می‌یابد.

نتیجه گیری

در این پژوهش با استفاده از روش سل-ژل خوداحتراقی برای ساخت نانوفسفر $Ca_{1-x}ZrO_3:Eu_x$ (x=۱، ۲، ۳، ٤، ۵ mol %)، استفاده شد. الگوی XRD نشان می‌دهد نانو ذرات در دمای پایین ۳۵۰ ^oC تشکیل می‌شود و در دمای ۷۰۰ ^oC تک فاز می‌شود. مورفولوژی سطحی نمونه‌ها با استفاده از FESEM نشان می‌دهد نانو ذرات از همگنی مناسبی برخوردار است. بهترین منحنی ترمولومینسانس برای نمونه $Ca_{0.98}Eu_{0.02}ZrO_3$ مشاهده شده است که دارای یک قله منفرد در بیشینه دمایی ۱۹۵ ^oC است و یک پاسخ فوق خطی با زمان پرتودهی تابش UV نشان می‌دهد که در ابتدا شدت منحنی با دز UV افزایش و سپس روند کاهشی دارد.



شکل ٦: منحنی تابش TL نمونه $Ca_{0.98}Eu_{0.02}ZrO_3$ در زمان‌های مختلف پرتودهی UV

مرجع‌ها

[1] W.Y. Jia, W.L. Xu, I. Rivera, A. Perez, F. Fernandez, Solid State Commun.2003; 126: 153.
[2] Z.G. Lu, L.M. Chen, Y.G. Tang, Y.D. Li, J.Alloys Compd.2005;387 : L1.
[3] R. Parra, R. Savu, L.A. Ramajo, M.A. Ponce, J.A. Varela, M.S. Castro, P.R. Bueno, E. Joanni, J. Solid State Chem.2010; 183 : 1209.
[4] N. Pal, M. Paul, A. Bhaumik,, Appl. Catal.A.2011; 393 :153.
[5] Miru Noh, Y.S. Lee,Journal of Nanoscience and Nanotechnology.2015; 15:8267-8270.
[6] Q. Guo, L. Liaon, L. Mei, H. Liu, Y. Hai J. Solid State Chem.2015; 225 : 149-154.
[7] Ho.Zhang, Xi Fu,Sh Niu, Q. Xin,journal of Alloys and Compounds. 2008; 459:103-106.
[8] I.P. Sahu, D.P.Bisen, R.K. Tamrakar, K.V.R Murthy, J. Of S. Advanced Materials and Devices, 2017;69-78
[9] Randall, J.T.; Wilkins, M.H.F. *Proc. R. Soc. A Math. Phys. Eng. Sci.* 1945; *184*: 390–407.
[10] Randall, J.; Wilkins, M. *Proc. R. Soc. A Math. Phys. Eng. Sci.* 1945; *184*: 366–389.
[11] X.Q. Zeng, G.Y. Hong, H.P. You, X.Y. Wu, Chin. J. Lumin., 2001; *22*:58.
[12] Neha Tiwari,R.K. Kuraria, S.R Kuraria, Optik.2015; 126:3488-3491.
[13] Sanoujam Dhiren Meetei, Shougaijam Dorendrajit Singh,
Journal of Alloys and Compounds 587 (2014) 143–147.
[14] D. Prakashbabu , R. Hari Krishna , B.M. N , H.Nagabhushana , C. Shivakumara R.P.S. Chakradar , H.B. Ramalingam , S.C. Sharma , R. Chandramohan,
Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy122 (2014) 216–222.
[15] S. Dhiren Meetei, Sh. D. Singh, Journal of Luminescence147(2014)328–335.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

آماده سازی قرص‌های TLD100 از طریق تعیین بهترین آهنگ گرمادهی جهت دزیمتری تابش‌های به میزان کم پرتوX

بیک خورمیزی، فاطمه [1]؛ شفائی، محمدعلی [1]

[1] بخش هسته‌ای، دانشکده فیزیک دانشگاه یزد، چهار راه پژوهش، صفائیه، یزد

چکیده

دزسنج‌های گرمالیانی (TLD) یک نوع دزیمتری است که برای تعیین دزجذبی حاصل از پرتودهی گاما، باریکه الکترون و تا حدودی نوترون استفاده می‌شود. دزسنج گرمالیان از نوع TLD100 یکی از پرکاربردترین آنها است که در پرتودرمانی‌ها هم مورد استفاده قرار می‌گیرد[1] . هدف این پژوهش این است که برنامه حرارت‌دهی مناسبی برای قرص‌های TLD100 تعیین شود، تا به توان از آنها جهت تعیین دز جذبی پرتو X با مقادیرکم نیز استفاده کرد. در این پژوهش قرص‌ها تحت تابش پرتو X با انرژی 30 کیلوولت به مدت 60 ثانیه با دز دریافتی به میزان 100 میکروگری قرار داده شدند. برای آماده سازی قرص‌ها برای دزیمتری، سعی شده منحنی در خشندگی‌هایی متقارن با شدت نسبی مناسب، که قله‌های درخشندگی‌شان حوالی 250-200 درجه‌سانتی‌گراد داشته باشند را با تغییرآهنگ گرما دهی بدست آورد. با توجه به تجزیه تحلیل منحنی‌های درخشندگی بدست آمده از قرص‌های که تحت پرتودهی یکسان اشعه X بوده‌اند، آهنگ گرمادهی3 درجه‌سانتیگراد بر ثانیه مناسب برای تعیین دز جذبی قرص‌های TLD100 انتخاب شد.

واژه های کلیدی: *منحنی درخشندگی، آهنگ گرمادهی، دزجذبی، پرتوX ، دزسنج گرمالیانی، TLD100،*

کد عنوان. 29

Preparation of TLD100 chips using determining the best heating rate for the low dose of X-rays

Shafaei, Mohammadali[1];Beyk Khormizei, Fatemeh[1]

[1] *Department of Physics, Yazd University, Yazd*

Abstract

Tthermoluminescent dosimeter (TLD) is a type of dosimeter used to determine the dose of gamma radiation, electron beams, and to some extent neutrons. The TLD100 is one of the most widely used dosimetry in radiation therapy [1]. The aim of this study is to determine a suitable heating rate program for TLD100 chips, that they can be used to determine the absorption dose of X beam with low values. This project the chips were irradiated with X-ray energy of 30 kV for 60 Sec. at a dose of 100 µGy For preparation of the chips to the dosimetry, an attempt to achieve into made curve the symmetrical glow curve, appropriate relative intensity, and their temperature maximum of glow peaks at about 200-250 °C, using the changing of the heating rate. According to the analysis of the glow curves obtained from the chips under the same X-ray radiation, the best of heating rate of 3°C/S was selected to the determination of absorption dose of the TLD100 chips.

.

***Keywords**: Glow curve, Heating rate, Glow peak, X ray, Tthermoluminescent dosimetery,TLD100*

PACS No.29

مقدمه

TLD100 یک ماده گرمالیان (Theroluminescence) از نوع LiF باناخالصی LiF, Mg است که امروزه در دزیمتری و پرتونگاری به صورت گسترده‌ای مورد استفاده قرار می‌گیرند [2]. اساس کار مواد گرمالیان بدین صورت است، چنانچه این مواد تحت پرتو دهی قرار گیرند انرژی حاصل را درخود ذخیره کرده و با حرارت دهی بصورت انتشار نور آن انرژی را گسیل می‌کنند. میزان گسیل نور با مقدار جذب اشعه در اکثر موارد رابطه خطی

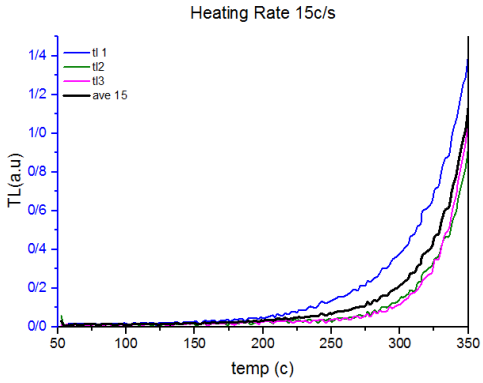
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

دارد. از شدت نور گسیل شده از ماده گرمیانی نسبت به دما منحنی درخشندگی حاصل می‌گردد، که با افزایش انرژی منحنی درخشندگی به سمت دماهای بالاتر انتقال می‌یابند. عوامل موثر در تجزیه تحلیل منحنی درخشندگی شامل آهنگ گرم کردن‌های مختلف ، دز تابشی متفاوت، دماهای پخت و یا نحوه آماده‌سازی ماده گرمالیانی برای پرتو دهی بعدی می‌باشد. با توجه به تئوری و نتایج تجربی منتشر شده از مواد گرمالیان در زمینه دزسنجی، و از طرفی اغلب ازTLD100 برای دزیمتری پرتو گاما استفاده می‌شود [3-1]، در این پژوهش تصمیم گرفته شد برنامه حرارتی مناسب دزیمتری پرتو X بامقادیر دز جذبی کم برای TLD100 تعیین کرد. برای قرص‌های TLD100 که تحت تابش پرتو X در شرایط یکسان قرار گرفته بودند، سعی شده منحنی درخشندگی متقارن که قله دمایی آن حوالی 200-250 $^{\circ}$C باشد و از شدت نسبتا خوبی برخوردار باشد، را با تغییر آهنگ گرما دهی متفاوت به نتیجه دلخواه برسیم[3-2] . شکل ایده‌آل برای منحنی درخشندگی پیشنهاد می‌شود بهتر است بصورت تابع گاوسی متقارن که قله آن حوالی200-250 $^{\circ}$C درجه‌سانتی‌گراد باشد. در پرتو درمانی‌ها برای کاهش خطا در محاسبه دز جذبی بیمار سعی می‌شود برنامه حرارتی و بازپخت را برای TLDها تعیین کنند تا خطائی دز محاسباتی کمتر از 3 درصد باشد[4=7].

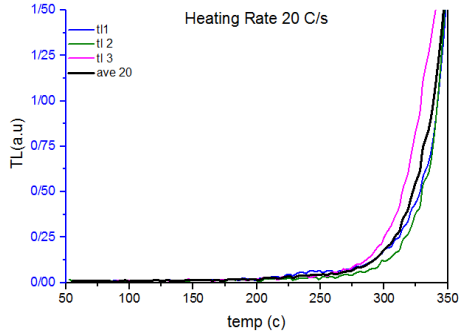
مواد و روشها

ابتدا قرص‌ها را توسط دستگاه پرتو ایکس به مدت 60 ثانیه تحت پرتو X با انرژی 30 KV و دز تقریبی 100 µGy (یا دز 1mSv) قرار گرفتند، و سپس برنامه حرارتی یکسان برای تمام قرصها انجام شد. حاصل هر بار خوانش در دستگاه متصل به سیستم رایانه، یک منحنی درخشندگی به همراه یک فایل اکسل از داده‌ها می‌باشد. هر فایل اکسل خروجی شامل چند ستون می‌باشد که بیانگر دما ($^{\circ}$C) و تعداد پرتو شمارش شده یا گرمالیان (TL) دریافتی (با واحد دلخواه) هستند. برای هر آهنگ گرمادهی پروفایل ورودی نرم‌افزار را باید جداگانه تنظیم شود، چیزی که برای همه آن‌ها مشترک است بازده دمایی از 50°C تا 350°C بود. لازم به ذکر است که منحنی درخشندگی که سیستم TLD خوان ارائه می‌دهد برحسب زمان می‌باشد، ولی ما منحنی درخشندگی را بر حسب دما به طور جداگانه با داده ذخیر شده در اکسل رسم کردیم. تمامی قرص‌ها برای یک آهنگ گرمادهی مشخص (در اینجا 2 ^{o}C/s) در دستگاه خوانش قرار داده و با تعریف پروفایل دلخواه، منحنی درخشندگی آن‌ها رسم شد.

با مقایسه شکل منحنی‌های درخشندگی توانستیم قرص‌های با رفتار مشابه را جدا کرده و از این به بعد فقط از آن‌ها استفاده شد تا خطای آزمایش کاهش یابد. قرص‌های انتخاب شده را ابتدا در برنامه حرارتی بازپخت کوره‌ای قرار داده و سپس آن‌ها را دوباره به مدت 60 ثانیه تحت پرتو X با انرژی 30 KV پرتو دهی شدند. قرص‌ها براساس منحنی‌های درخشندگی بدست آمده در دسته 3 تایی گروه بندی شدند. نخست آهنگ گرمادهی TLD100 را که دردزیمتری بیمارستان بکار برده می‌شود[4-7]، برای بدست آوردن منحنی درخشندگی استفاده شد.



شکل1 : منحنی درخشندگی حاصل از قرص‌هایی که با آهنگ $^{\circ}$C/s 15گرمادهی شده‌اند.



شکل2 : منحنی درخشندگی حاصل از قرص‌هایی که با آهنگ $^{\circ}$C/s 20 گرمادهی شده‌اند.

شکلهای 1 و 2 منحنی درخشندگی سه قرص TLD100 و میانگین آنها را با آهنگ گرما دهی $^{\circ}$C/s 15 و $^{\circ}$C/s 20 نشان می‌دهد. همانطور که در شکل‌ها دیده می‌شود منحنی درخشندگی

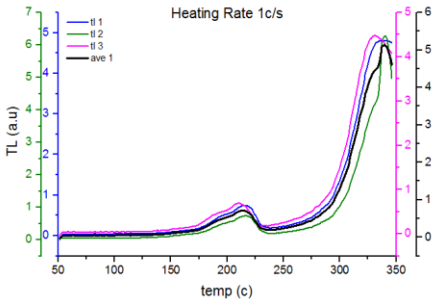
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

در حوالی دما 200°C دیده نمی‌شود افزایش شدت گسیل نوری از 300°C به بعد شروع شده است که آن هم ممکن است از تابش فروسرخ صفحه گرم کن دستگا خوانش باشد.

طبق شکل‌های بالا منحنی درخشندگی قله‌ای ندارد، طبیعتا اگر بخواهیم قرص‌های TLD100 را برای دزهای جذبی با مقادیر کم استفاده کنیم تابش های فرو سرخ هم با تابش گرمالیانی قرص مخلوط شده است و این خطا را در کالیبره کردن و محاسبه دز جذبی را افزایش می‌دهد، درنتیجه پیشنهاد می‌شود آهنگ گرما دهی را از 1 تا 10 درجه‌سانتی‌گرادبرثانیه به قرص‌های TLD100 داده شود و منحنی درخشندگی آنها را بررسی کنیم.

یافته‌های تجربی

برای هرآهنگ گرمادهی منحنی‌های درخشندگی را با داده های اکسل بدست آمده رسم شدند و سپس در بازه زمانی 50°C تا 350°C از TLهای شمارش شده در هردما، میانگین گرفته شد. در شکل‌های زیر(8-3) منحنی‌های درخشندگی و میانگین آن‌ها به ازای هر آهنگ گرمادهی نشان داده شده است. این منحنی‌ها در محیط نرم‌افزار اوریجین[1] رسم شده‌اند.

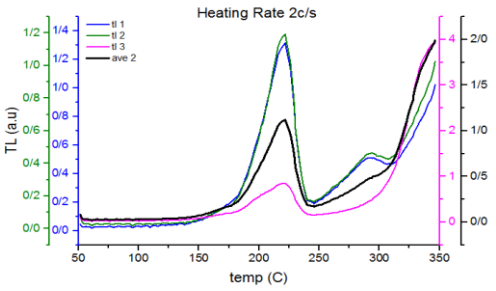


شکل 3 : منحنی‌های درخشندگی حاصل از قرص‌هایی که با آهنگ 1 °C/s گرمادهی شدند.

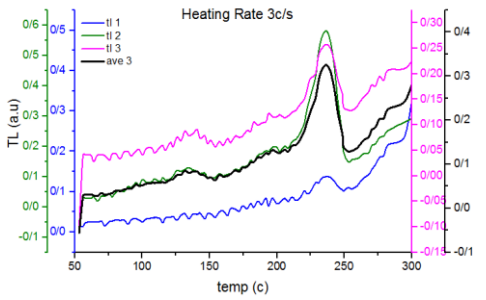
همانطورکه‌در شکلهای9-3 دیده می‌شود آهنگ گرما دهی کوچک امکان گسیل نور به TLDها در دمای کمتر از300°C را می‌دهد و با افزایش آهنگ گرما دهی از1 °C/s به بالاتر منحنی درخشنگی حوالی200-250°C متقارن‌تر و شدت آن هم بیشتر می‌شود.

تجزیه تحلیل داده

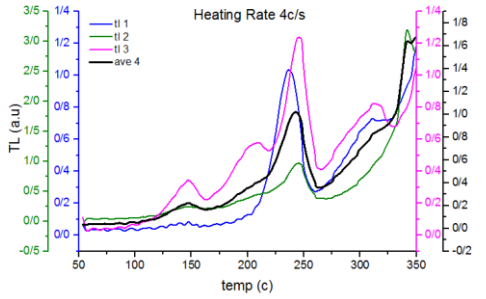
برای آهنگ گرمادهی1°C/s همانطورکه درشکل3دیده می‌شود منحنی درخشندگی و ارتفاع قله درخشندگی هر 3 قرص شبیه و نزدیک بهم است، و یک قله کوچک حوالی200-250°C هم در منحنی درخشندگی آنها مشاهده می‌شود.



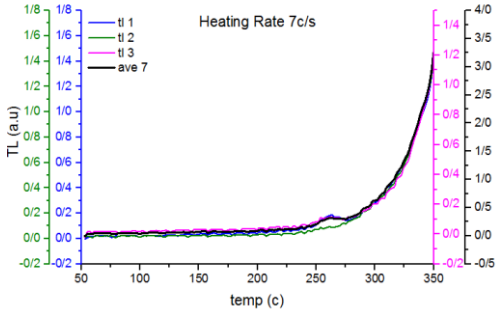
شکل4 : منحنی‌های درخشندگی حاصل از قرص‌هایی که با آهنگ 2 °C/s گرمادهی شدند.



شکل 5 : منحنی‌های درخشندگی حاصل از قرص‌هایی که با آهنگ 3 °C/s گرمادهی شدند.



شکل 6: منحنی‌های درخشندگی حاصل از قرص‌هایی که با آهنگ 4 °C/s گرمادهی شدند.

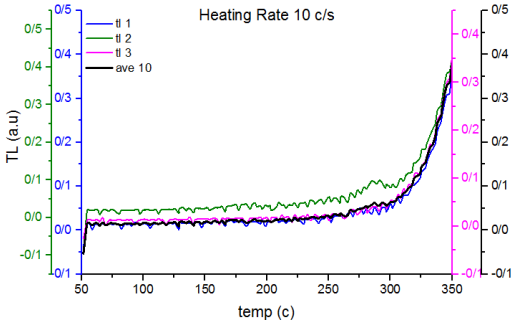


شکل7 : منحنی‌های درخشندگی حاصل از قرص‌هایی که با آهنگ 7 °C/s گرمادهی شدند.

[1] Origin Pro

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

شکل 4 منحنی درخشندگی قرص‌های که با آهنگ گرما دهی $2^{o}C/s$ حرارت دهی شده‌اند را نشان میدهد. ارتفاع یا سطح زیرمنحنی درخشندگی آنها حوالی $200-250^{o}C$ افزایش پیدا کرده و نکته مثبت بعدی قله درخشندگی آنها در این گستره دمایی متقارن است، ولی یکی از قرص‌ها شدت درخشندگی‌اش خیلی کوچکتر از بقیه است. شکل 5 منحنی درخشندگی با آهنگ گرما دهی $3^{o}C/s$ رانشان می‌دهد، در این شکل قرص‌ها منحنی درخشندگی متقارن نزدیک به دمای $250^{o}C$ را نشان می‌دهد و مشکل تفاوت زیاد شدت درخشندگی یکی از قرص‌ها همچنان باقی است.



شکل 8 : منحنی‌های درخشندگی حاصل از قرص‌هایی که با آهنگ $10\ ^{o}C/s$ گرمادهی شدند.

در شکل 6 (آهنگ گرمادهی $4^{o}C/s$) قله درخشندگی در گستره دمایی $200-250^{o}C$ مشاهده می‌شود، تعداد قله‌های درخشندگی زیاد شده که این مطلوب دزیمتری نیست [3-1]. شکل‌های7و 8 که آهنگ گرمادهی 5 و10 درجه‌سانتی‌گراد برثانیه را نشان می‌دهد، همانطور که مشاهده می‌شود با افزایش آهنگ گرمادهی ارتفاع قله منحنی درخشندگی قرص‌ها کاهش پیدا می‌کند و دیگرمناسب برای دزیمتری نمی‌باشند.

نتیجه‌گیری وپیشنهادات

در مرحله خوانش برای به دست آوردن منحنی درخشندگی مطلوب اگر آنها را با آهنگ گرمادهی معمول(که برای دزهای بالا به کار می‌روند) خوانش انجام شود به نتیجه مطلوب نخواهیم رسید، راه‌حل این است که با آهنگ گرمادهی کم به منحنی درخشندگی قابل مدرج کردن برحسب دز جذبی دست یافته که معتبر و قابل استفاده می‌باشد. پس برای مراکز عکس‌برداری و رادیولوژی که با پرتوهای یونیزان با دز کمتر از 100mSv سروکار دارند، می‌توان علاوه بر فیلم بج از قرص TLD-100 هم استفاده کرد. بین آهنگ‌های گرمادهی $1\ ^{o}C/s$ تا $10\ ^{o}C/s$ قله درخشش مربوط به آهنگ گرمادهی $3^{o}C/s$ دارای تقارن بهتری بوده و پیشنهاد ما این است که فقط با همین آهنگ گرمادهی کار شود. البته برای برطرف کردن مشکل کاهش شدید شدت درخشندگی بعضی قرص‌ها نسبت به سایر اعضاء گروهشان می‌توان ضریب تصحیح پاسخ به دز را برای هرقرص TLD-100 بدست آورد، و قرص‌های با ضریب تصحیح یکسان را در یک گروه دزسنجی قرار داد. از طرفی برای کاهش این اختلاف می‌توان بروی تاثیر دما و زمان بازپخت برروی شدت و محل قله دمایی منحنی درخشندگی قرص‌ها تحقیق کرد.

مرجع‌ها

[1] شفائی،م.ع.؛ « *ساخت قرص TLD با استفاده از LiF جهت استفاده در پرتودرمانی*» دانشگاه فردوسی مشهد، دانشکده فیزیک، کارشناسی ارشد1375

[2] تاتاری.م. ؛ «*ارزیابی پاسخ منحنی های درخشش* LiF ناشی از پرتوهای گاما و الکترون به منظور استفاده به عنوان یک دزیمتر گرمالیانی (TLD-100)» دانشگاه یزد، دانشکده فیزیک،پایان‌نامه کارشناسی ارشد.1385.

[3] معینی.ع: «*ارزیابی پاسخ منحنی های درخشش CaSo4 تابش شده توسط پرتوهای گاما و الکترون به منظور استفاده به عنوان یک دزسنج گرمالیانی*» دانشگاه یزد، دانشکده فیزیک،پایان‌نامه کارشناسی ارشد.1385.

[4] مومنی،س. ؛ «*ساخت نانودزیمتر گرمالیانی از نوع لیتیوم فلوراید*» دانشگاه یزد، دانشکده فیزیک، کارشناسی ارشد1392

[5] مرادی،ص.؛ « *بررسی تنش‌های حرارتی بر روی انرژی تله‌ها و چگالی حفره‌ها در پودر LiF در دماهای نزدیک نقطه ذوب*» .دانشگاه یزد،دانشکده فیزیک، کارشناسی ارشد1393

[6] صادقی،ن.؛ « *تعیین دز جذبی قفسه سینه بعد از ماستکتومی به وسیله TLD*» گروه فیزیک هسته‌ای، دانشگاه یزد،1393

[7] شیریزدی،ا. ؛ « *اندازه‌گیری دز اندام‌های غیردرگیر در پرتودرمانی سرطان پستان با استفاده از دزیمتر گرمالیانی(TLD)* » دانشگاه یزد، دانشکده فیزیک، کارشناسی ارشد 1396.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بررسی خواص اپتیکی نمونه های مایع مفصلی(سینوویال) انسانی بدون کریستال

ضیائی ، سعید[1] ؛ مهاجر مازندرانی ، سلمان[1،2]؛ مجلس آرا، محمد حسین[1،2]

[1] آزمایشگاه بیوفوتونیک، دانشکده فیزیک، دانشگاه خوارزمی، کرج

[2] پژوهشکده علوم کاربردی، دانشگاه خوارزمی، کرج

چکیده

بررسی مایع مفصلی در تجزیه و تحلیل وضعیت بالینی بیمار و ادامه روند درمان مهم می‌باشد. در این پژوهش خواص اپتیکی نمونه های مایع مفصلی گزارش شده است. ابتدا پس از گرفتن نمونه مایع مفصلی از بیماران مشکوک به نقرس و تشخیص بدون کریستال بودن آن توسط میکروسکوپ نور قطبیده، مقدار مشخصی از نمونه برای اندازه‌گیری تابع توزیع زاویه‌ای بهنجار شدت نور پراکنده شده، اندازه‌گیری جذب خطی و ضریب شکست غیر خطی با کمک چیدمان جاروب محوری انجام شد. مقادیر پارامترهای پراکندگی، β و Φ به ترتیب در محدوده 6/56 تا 7/78 و 0/62 تا 1/33 بوده و مرتبه توانی ضریب شکست غیر خطی $10^{-6}\frac{cm^2}{W}$ است.

واژه های کلیدی: *مایع مفصلی، جذب خطی، ضریب شکست غیر خطی، پراکندگی*

Investigation optical properties of human synovial fluid non-crystalline samples

Ziaee, Saeed[1] ; Mohajer Mazandarani, Salman[1,2]; Majles Ara, MohammadHosein[1,2]

[1] Biophotonics laboratory, Physics department, Kharazmi University, Karaj
[2]Applied Science Research Center, Kharazmi University, Karaj

Abstract

It is important to evaluate the synovial fluid in the analysis of the patient's clinical condition and continue the course of treatment. In this study, the optical properties of synovial fluid samples have been reported. First, after taking a synovial fluid sample from patients suspected of having gout and diagnosing that it is non-crystalline by a polarized light microscope, a certain amount of sample was performed to measure the normalized angular distribution of the intensity of light scattered , linear absorption measurement and nonlinear refractive index by z-scan setup. The values of scattering parameters, β and Φ are in the range of 6.56 to 7.78 and 0.62 to 1.33, respectively and the power order of the nonlinear refractive index is $10^{-6}\frac{cm^2}{W}$.

***Keywords**: synovial fluid, nonlinear refractive index, linear absorption, Scattering*

PACS No. 42

مقدمه

بررسی مایع مفصلی (سینوویال) در تعیین وضعیت بالینی بیمار و ادامه روند درمان مهم می‌باشد[1]. این مایع حاوی پروتئین‌های بدست آمده از پلاسمای خون و پروتئین‌هایی است که توسط سلول-های درون بافت مفصل تولید می‌شود. همچنین این بافت استریل بوده و از بافت پیوندی عروقی تشکیل شده است. نقش اصلی مایع مفصلی در کاهش اصطکاک بین غضروف‌ها در مفاصل سینوویال به هنگام حرکت است[2][3]. به طور کلی چهار نوع کلاس مایع مفصلی داریم که توسط بررسی ناخالصی، (تعداد کل یا افتراقی گلبول های سفید و وجود یا عدم وجود خون) تعیین می‌شود[4]. تنوع زیاد مایع مفصلی (با توجه به چهار کلاس) با شناسایی خاص بیماری‌های التهابی (نقرس حاد، آرتروز روماتوئید، آرتروز

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

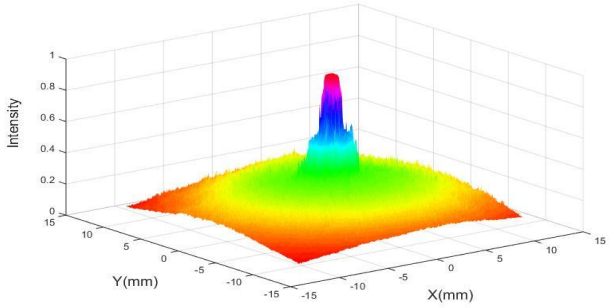
پسوریازیس و...)، غیر التهابی (آمیلوئیدوز، آکرومگلی، نقرس مزمن، اسکلرودرما و...) و عفونی (آرتروز سپتیک، اسکروی، نئوپلاسم و...) و خونی مرتبط است. بطور کلی تعداد گلبول های سفید کدر بودن مایع مفصلی التهابی را مشخص می‌کند[4]. در این پژوهش باتوجه به معرفی این مایع و اهمیت آن در شناسایی بیماری‌های مفصلی، نمونه‌ها (5 نمونه، شامل سه زن و دو مرد) با استفاده از چیدمان مشخصی برای اندازه‌گیری پراکندگی نور و چیدمان‌های جداگانه‌ای برای اندازه گیری ضریب جذب خطی و اندازه گیری ضریب شکست غیرخطی بررسی شده‌اند. با استفاده از تکنیک جاروب محوری که اولین بار توسط شیخ بهایی ابداع شد، اندازه گیری ویژگی‌های غیرخطی مواد (در این پژوهش مایع مفصلی) صورت می‌گیرد. این روش شامل دو نوع چیدمان است: 1-روزنه باز 2- روزنه بسته که به ترتیب ضریب جذب و ضریب شکست غیرخطی مواد را بررسی می‌کند[5].

تئوری

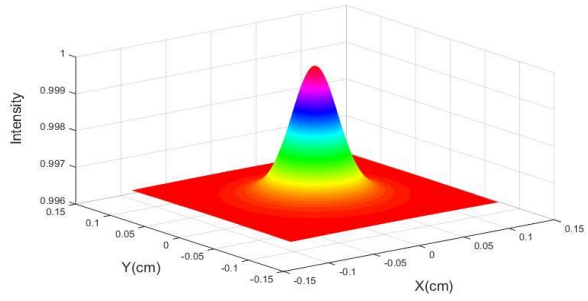
برای محاسبه پراکندگی از رابطه زیر که تابع توزیع زاویه ای بهنجار شدت نور پراکنده شده از نمونه‌ها می‌باشد، استفاده می‌کنیم.

$$F(\theta)=\beta\Sigma_j P_j\left(\frac{\pi R_j^2}{\lambda z}\right)^2\left[\frac{J_1\left(\frac{2\pi R_j\theta}{\lambda}\right)}{\frac{\pi R_j\theta}{\lambda}}\right]^2+\Phi \qquad (1)$$

در واقع از نمونه‌ها توسط CCD تصویر برداری و توزیع شدت بر اساس این تصاویر برای هر نمونه اندازه گرفته شده است. در این رابطه، z فاصله نمونه از صفحه مشاهده و β و Φ ثابت‌های بدون بعد هستند. β نسبت شدت در زاویه θ به شدت ورودی و Φ به نوع تصویر برداری مرتبط است. به این صورت که به شدت پس زمینه تصویر گرفته شده از نمونه بستگی دارد. افزایش یا کاهش این دو پارامتر به ترتیب بیانگر افزایش یا کاهش نسبت شدت در زاویه θ به شدت ورودی و شدت پس زمینه تصویر گرفته شده می‌باشد[6]. $J_1(x)$ تابع بسل نوع اول، θ زاویه پراکندگی و همچنین R شعاع تخمینی ذرات تشکیل دهنده نمونه و λ طول موج نور برهم کنش کننده و p_j تابع توزیع است. در ادامه ضرایب β و Φ برای نمونه‌ها بر حسب الگوهای پراکندگی بدست آمده، محاسبه شد. برای این کار تابع توزیع p_j را که یک تابع تصادفی بین $0-1 \times 10^{-6}$ است به شعاع متوسط اضافه کرده و مقدار $F(\theta)$ متناسب با تعداد پیکسل‌های تصویر الگوی پراکندگی مطابق شکل 1 و 2، برای 5 نمونه با استفاده از نرم‌افزار متلب محاسبه و برازش شد. در نهایت از مقادیر β و Φ میانگین گرفته و در جدول 1 گزارش شده است. ضمنا ضخامت جزء پارامترهایی هست که به احتمال زیاد روی پارامترهای β و Φ تاثیر می‌گذارد اما در این کار با توجه به این که رابطه استفاده شده بهنجار شده است، بستگی به آن بررسی نشده است.



شکل 1 . تابع توزیع شدت پراکندگی بهنجار شده



شکل 2 . تابع برازش شده روی شدت پراکندگی

جدول1 : مقادیر پارامترهای تابع برازش شده بر شدت پراکندگی

	نمونه اول	نمونه دوم	نمونه سوم	نمونه چهارم	نمونه پنجم
جنسیت/ سن	مرد/ 63	زن/ 62	زن/ 64	زن/ 45	مرد/ 38
β ($\times10^{-6}$)	7.41 ±0.01	7.74 ±0.01	6.78 ±0.01	6.56 ±0.01	7.60 ±0.01
Φ	0.62 ±0.01	0.81 ±0.01	1.33 ±0.01	0.95 ±0.01	0.65 ±0.01

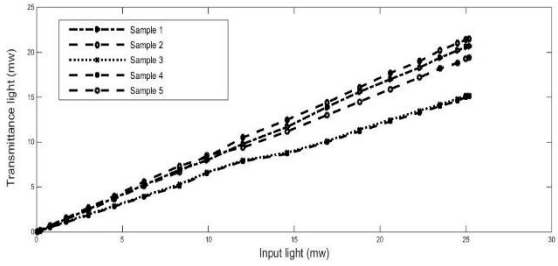
میزان خطای ذکر شده به خطای اندازه‌گیری توان آشکارساز، خطای اندازه‌گیری ضخامت نمونه و خطای اندازه‌گیری طول موج وابسته است.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

برای اندازه گیری جذب خطی با استفاده از قانون بیر-لامبرت رابطه بین شدت نور ورودی و جذب شده در ماده بیان می‌شود.

$$Ln\frac{I_0}{I} = \alpha L \qquad (2)$$

با توجه به شیب نمودارهای شکل 3، مقدار I_0/I را برای هر کدام بدست آورده و از روی لگاریتم آن مقدار ضریب جذب α مربوط به هر نمونه را محاسبه می‌کنیم که در جدول 2 مشاهده می‌شود.



شکل 3 . منحنی‌های توان عبوری برحسب توان ورودی در محدوده خطی

با استفاده از روابط تغییر فاز و شدت عبوری بهنجار شده، ضریب شکست غیرخطی نمونه‌ها را در حالت روزنه بسته بدست می‌آوریم که با توجه به شکل 4 و مقدار α بدست آمده از جذب خطی در جدول 2 گزارش شده است.

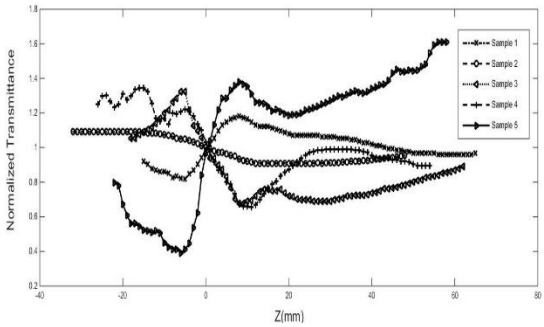
$$n_2 = \frac{\lambda\Delta T_{Pv}}{(2\pi I_0 L_{eff}(0.406)(1-s)^{0.25})} \qquad (2)$$

. [7]

در این رابطه L_{eff} طول موثر است که از رابطه زیر بدست می‌آید:

$$L_{eff} = \frac{(1-e^{-\alpha L})}{\alpha} \qquad (3)$$

در معادله 2، I_0 شدت بیشینه در کانون است که از رابطه $I_0 = \frac{2P_0}{\pi w_0^2}$ بدست می‌آید. در این رابطه P_0 توان ورودی، s شدت نور عبوری از روزنه به شدت کل نور رسیده به صفحه روزنه و w_0 شعاع کمره پرتو (40 میکرومتر) است. همچنین ΔT را از نمودار برازش شده روی داده‌ها با محاسبه اختلاف نقطه بیشینه و کمینه بدست می‌آوریم.



شکل4 . منحنی‌های شدت بهنجار شده جاروب محوری روزنه بسته

جدول 2: مقادیر پارامترهای بدست آمده از برازش بر تابع شدت عبوری

	نمونه اول	نمونه دوم	نمونه سوم	نمونه چهارم	نمونه پنجم
جنسیت/ سن	مرد/ 63	زن/ 62	زن/ 64	زن/ 45	مرد/ 38
n_2 ($\times 10^{-6}\frac{cm^2}{W}$)	+ 3/96	− 2/18	− 8/79	− 7/33	+ 0/12
α (m^{-1})	198.45	162.51	510.82	527.63	274.43

با توجه به نمودارهای شکل 4، نمودارهایی که در ابتدا دارای قله می‌باشند، دارای علامت ضریب شکست غیرخطی منفی بوده و نمودارهایی که در ابتدا دارای دره می‌باشند، دارای ضریب شکست غیرخطی مثبت که به ترتیب خود واکانونی و خود کانونی را در نمونه ایجاد می‌کنند. درباره تکرار پذیر بودن علامت آن‌ها ادعایی نشده است. اما مرتبه توانی ضرایب شکست نمونه‌های تست شده تکرار پذیر می‌باشد.

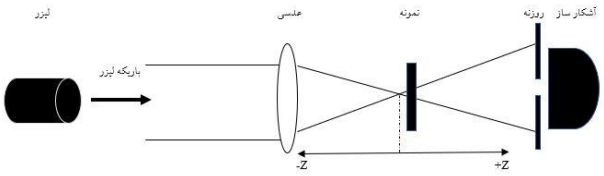
مواد و روش آزمایش

نمونه‌های مایع مفصلی تعدادی از بیماران از آزمایشگاه پویش کیلینیک فوق تخصصی روماتولوژی کرج، تهیه شد. سرنگ های حاوی مایع مفصلی که در یخچال نگه داری می‌شوند را بیرون آورده و مقدار یک سی‌سی را بر روی لام ریخته تا بطور یکنواخت و همگن پخش شود (این کار را می‌توان با کشیدن لامل بر روی لام که نمونه روی آن ریخته شده است، انجام داد). سپس توسط اسپری ثابت کننده یا گذاشتن لام در یک محیط عادی به دور از گرد و غبار تا نمونه خشک شود، می‌توان آن را ثابت (فیکس) کنیم. برای بررسی و محاسبه پراکندگی نمونه‌های مورد نظر از یک لیزر هلیوم نئون با طول موج 633 نانومتر، یک قطبشگر، یک لنز با فاصله کانونی 1 میلی‌متر و لنز دوم با فاصله کانونی 5 سانتی‌متر و دور روزنه استفاده شده است. قطر نور لیزر بعد از عبور از روزنه 1.8 میلی‌متر در نظر گرفته شده است. نور فرودی بعد از عبور از نمونه بر روی صفحه تصویر که در محدوده میدان دور قرار گرفته بود طرح پراکندگی را تشکیل داد.

برای اندازه گیری جذب خطی باید توجه داشت که برای رساندن پراکندگی به حداقل مقدار ممکن باید آشکار ساز در کمترین فاصله-ی ممکن تا نمونه قرار بگیرد. همانطور که در شکل 3 نشان داده

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

شده است، با افزایش توان نور ورودی، توان نور عبوری بصورت خطی افزایش می‌یابد و با توجه به شیب نمودار، میزان جذب خطی نمونه از قانون بیر-لامبرت محاسبه می‌شود. در چیدمان جاروب محوری همان‌گونه که در شکل 5 مشاهده می‌شود، برای اندازه گیری ضریب شکست غیر خطی از منبع نور لیزر Nd:YAG (طول موج 532 نانومتر و بیشینه توان 50 میلی‌وات) استفاده شده است و فاصله نقطه کانونی تا روزنه 82.1 سانتی‌متر می‌باشد. در چیدمان جاروب محوری همچنین از یک لنز همگرا با فاصله کانونی 8 سانتی‌متر برای افزایش شدت بر نمونه استفاده شده و نور در راستای محور ریل به نمونه تابیده می‌شود. در اینجا با توجه به فواصل اجزای چیدمان، قطر دهانه روزنه 5 میلی‌متر در نظر گرفته شده است.



شکل 5 . چیدمان جاروب محوری

نتیجه گیری

مرتبه توانی ضریب شکست غیر خطی همه نمونه‌های اندازه گیری شده $10^{-6}\frac{cm^2}{W}$ بوده و میزان تغییرات از 0/12 تا 8/79 می‌باشد. و با توجه به شکل 4 دو نمونه دارای ضریب شکست غیرخطی مثبت و سه نمونه دارای ضریب شکست غیرخطی منفی می‌باشند. با توجه به جدول 1 محدوده تغییرات β نیز از 6/56 تا 7/78 بوده و هیچ رابطه‌ای بین این مقادیر با مثبت یا منفی بودن ضریب شکست غیرخطی دیده نمی‌شود اما در مورد Φ با توجه به محدوده تغییرات آن از 0/62 تا 1/33 می‌توان نتیجه گرفت که هرچه مقدار آن بیشتر شود ضریب شکست غیرخطی به سمت منفی شدن میل پیدا می‌کند. همچنین مقادیر Φ برای مردان، مقدار تقریبا ثابت و کمتری نسبت به زنان دارد. با مشاهده جدول 2 نیز می‌توان گفت که با توجه به نمونه‌های تست شده که پنج نمونه شامل سه زن و دو مرد می‌باشند، ضریب شکست غیرخطی مستقل از سن بوده ولی به جنسیت بستگی دارد. بدین صورت که مردان دارای ضریب شکست غیرخطی مثبت و زنان دارای ضریب شکست غیرخطی منفی بودند. اما برای تایید این نتیجه‌گیری در حالت کلی، نیاز به تکرار آزمایش با نمونه‌های بیشتری هست.

سپاسگزاری

از همکاری آزمایشگاه پویش کلینیک تخصصی روماتولوژی کرج صمیمانه تشکر می‌کنیم.

mohajer@khu.ac.ir

مرجع‌ها

[1] S. R. Brannan and D. A. Jerrard, "Synovial fluid analysis," *J. Emerg. Med.*, vol. 30, no. 3, pp. 331–339, Apr. 2006.

[2] K. Gaffney, R. B. Williams, V. A. Jolliffe, and D. R. Blake, "Intra-articular pressure changes in rheumatoid and normal peripheral joints.," *Ann. Rheum. Dis.*, vol. 54, no. 8, pp. 670–673, Aug. 1995.

[3] T. Bennike *et al.*, "A Normative Study of the Synovial Fluid Proteome from Healthy Porcine Knee Joints," *J. Proteome Res.*, vol. 13, no. 10, pp. 4377–4387, Oct. 2014.

[4] E. Pascual and V. Jovaní, "Synovial fluid analysis," *Best Pract. Res. Clin. Rheumatol.*, vol. 19, no. 3, pp. 371–386, Jun. 2005.

[5] M. Sheik-Bahae, A. A. Said, T.-H. Wei, D. J. Hagan, and E. W. Van Stryland, "Sensitive measurement of optical nonlinearities using a single beam," *IEEE J. Quantum Electron.*, vol. 26, no. 4, pp. 760–769, Apr. 1990.

[6] Y. S. Yurchuk, V. D. Ustinov, S. Y. Nikitin, and A. V Priezzhev, "Scattering of a laser beam on a wet blood smear and measurement of red cell size distribution," *Quantum Electron.*, vol. 46, no. 6, pp. 515–520, Jun. 2016.

[7] P. B. Chapple, J. Staromlynska, J. A. Hermann, T. J. Mckay, and R. G. Mcduff, "Single-Beam Z-Scan: Measurement Techniques and Analysis," *J. Nonlinear Opt. Phys. Mater.*, vol. 06, no. 03, pp. 251–293, Sep. 1997.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

ارزیابی تابش گسیل‌شده از الکترون در حین عبور از یک ویگلر مارپیچ همراه با کانال یونی راهنما در حضور میدان مغناطیسی محوری

حاجی‌کریمی، فائزه[۱]؛ طاهرپرور، پیوند[۲]؛ جعفری، ساعد[۳]

[۱] گروه فیزیک، دانشگاه گیلان، گیلان

[۲] گروه فیزیک، دانشگاه گیلان، گیلان

[۳] گروه فیزیک، دانشگاه گیلان، گیلان

چکیده

لیزر الکترون آزاد وسیله‌ای است که با عبور باریکه‌ی الکترونی از میان ویگلرهای مختلف تابش‌های همدوس تولید می‌کند. در این مقاله، از یک لیزر الکترون آزاد با ویگلر مارپیچ در حضور پلاسما و میدان مغناطیسی محوری برای عبور تک الکترون استفاده می‌شود. برهمکنش تک الکترونی با تابش الکترومغناطیسی در عبور از میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی این لیزر سبب ایجاد دو گروه از مدارهای الکترونی می‌شود. در ادامه، با دراختیار داشتن مختصات موقعیت، سرعت و شتاب الکترون در لحظه‌ی گسیل تابش، میدان الکتریکی و بردار پوئین‌تینگ دریافت‌شده توسط ناظر مورد توجه قرار گرفته‌است. اندازه‌ی این میدان الکتریکی و بردار پوئین‌تینگ برحسب تابعی از زاویه‌ی فضایی و زاویه‌ی سمتی مورد بررسی قرار می‌گیرد.

واژه‌های کلیدی: *لیزر الکترون آزاد، ویگلر مارپیچ، کانال یونی، میدان مغناطیسی محوری، بردار پوئین‌تینگ.*

Evaluation of Emitted Radiation from an Electron Passing through Helical Wiggler with Guide Ion-Channel in Presence of Axial Magnetic Field

Hajikarimi, Faezeh[1]; Taherparvar, Payvand[2]; Jafari, saed[3]

[1] *Department of Physics, University of Guilan, Guilan*
[2] *Department of Physics, University of Guilan, Guilan*
[3] *Department of Pysics, University of Guilan, Guilan*

Abstract

A free electron laser is a device that produces coherent radiation by passing electron beam through various wigglers. In this paper, the configuration of a free electron laser with the helical wiggler in the presence of a plasma and axial magnetic field is used to pass an electron. The interaction of the electron with electromagnetic wave in the electric and magnetic fields of this laser cause the formation of two groups of electron orbits. In the following, having the coordinate of position, velocity and acceleration of electron at the moment of emission of radiation, electric field and Poynting vector of the pointer received by observer have been considered. The size of the electric field and Poynting vector are examined as a function of the polar angle and azimuthal angle.

***Keywords**: Free Electron Laser, Helical Wiggler, Ion-Channel, Axial Magnetic Field, Poynting Vector.*

مقدمه

لیزر الکترون آزاد متشکل از باریکه‌ی الکترون‌های نسبیتی است که از میان یک ویگلر به‌منظور تقویت تابش الکترومغناطیسی عبور می‌کنند. این لیزر توسعه یافته منبعی مهم برای تولید تابش همدوس با توان بالا در سراسر طیف الکترومغناطیسی محسوب می‌شود که کاربردهای گسترده‌ای در زمینه‌های متفاوتی از علوم را فراهم می‌کند [۱]. نظریه‌ی لیزر الکترون آزاد در ابتدا شامل باریکه-ی الکترون نسبیتی در حین عبور از میدان مغناطیسی پیچشی پمپ-

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

شده توسط برنشتاین و هیرشفیلد مورد مطالعه قرار گرفته‌است [۲]. به‌منظور توسعه‌ی لیزر الکترون آزاد، اولین بار تاکایاما و هیرماستو پیشنهاد افزودن یک کانال یونی راهنما به‌عنوان راهنمای تناوبی در لیزر الکترون آزاد را پیشنهاد کردند که از میدان‌های مغناطیسی چهارقطبی و سلونوئیدی برای دستیابی به آن استفاده می‌شد [۳]. بعدها کانال یونی راهنما به‌عنوان یک روش تاثیرگذار برای همگرایی الکترون‌ها در خلاف نیروهای خودمیدان در لیزر الکترون آزاد مورد استفاده قرار می‌گرفت. حضور کانال یونی راهنما (پلاسما) باعث می‌شود تا جریان‌های بالاتری از الکترون‌ها نسبت به حالت خلا در لیزر الکترون آزاد قرار بگیرد [٤،٥]. امروزه و در طراحی‌های انجام گرفته از میدان میدان مغناطیسی محوری در یک پیکربندی با ویگلر پیچشی به‌کار می‌رود، که این امر سبب می‌گردد همگرایی باریکه‌ی الکترونی افزایش یابد. در برخی از موارد، تاثیر ترکیب ویگلر و میدان مغناطیسی محوری پیامدهای مهمی را برای مسیر الکترون و تداخل‌ها در پی دارد و هیچگاه میدان مغناطیسی محوری به تنهایی با ویگلر خطی مورد استفاده قرار نمی‌گیرد، زیرا این امر سبب واگرایی باریکه می‌گردد.

در مقاله‌ی حاضر، به ارزیابی تابش گسیل‌شده از الکترون در لیزر الکترون آزاد با ویگلر مارپیچ که با کانال یونی راهنما پمپ شده در حضور میدان مغناطیسی محوری [٦] پرداخته‌ایم و برخلاف مطالعات پیشین، ارزیابی‌ها را از دید تابش دریافت‌شده توسط ناظر مورد مطالعه قرار داده‌ایم [۷].

مسیر حرکت الکترون

یک پیکربندی از عبور تک الکترون (با بار $-|e|$، جرم m و انرژی γmc^2) با سرعت $v(=\beta c)$ که از یک میدان مغناطیسی مارپیچ و میدان مغناطیسی محوری (که به‌ترتیب به‌کمک روابط (۱) و (۲) تشریح می‌شود) عبور می‌کند را ابتدا در نظر می‌گیریم.

$$\vec{B}_w = B_{w0}\left(Cos(k_w z)\hat{e}_x + Sin(k_w z)\hat{e}_y\right) \quad (۱)$$

$$\vec{B}_0 = \pm B_0 \hat{e}_z \quad (۲)$$

$B_{w0,0}$ به‌ترتیب اندازه‌ی میدان مغناطیسی ویگلر و میدان مغناطیسی محوری را نشان می‌دهد. $k_w = 2\pi/\lambda_w$ نیز عددموج ویگلر است. میدان الکترواستاتیک عرضی که به‌وسیله‌ی پلاسما تولید می‌شود، با توجه به رابطه‌ی $\nabla\cdot E = 4\pi\rho$ که $\rho = +en_i$ و n_i چگالی یون‌های مثبت است، به‌صورت رابطه‌ی زیر خواهد بود.

$$\vec{E}_{ion} = 2\pi e n_i\left(x\hat{e}_x + y\hat{e}_y\right) \quad (۳)$$

معادلات حرکت الکترون در حضور میدان‌های یاد شده از روابط زیر به‌دست می‌آید.

$$\frac{d\beta_x}{d\tau} = -\omega_i^2 X_1 + \Omega_w\beta_z Sin(k_w z) - \Omega_0\beta_y \quad (٤)$$

$$\frac{d\beta_y}{d\tau} = -\omega_i^2 X_2 - \Omega_w\beta_z Cos(k_w z) + \Omega_0\beta_x \quad (٥)$$

$$\frac{d\beta_z}{d\tau} = -\Omega_w\left(\beta_x Sin(k_w z) - \beta_y Cos(k_w z)\right) \quad (٦)$$

در معادلات بالا $\tau = k_w c^2 t$ ، $\omega_i^2 = 2\pi e^2 n_i / k_w^2 mc^2\gamma$ ، $X_i = k_w x_i$ ، $\Omega_w = eB_w/\gamma mc^2 k_w$ و $\Omega_0 = \pm eB_0/\gamma mc^2 k_w$ هستند. با حل حالت پایا، مولفه‌های جابه‌جایی بهنجار حاصل می‌شود. حل معادلات فوق به کمک مشتق‌گیری از مولفه‌های جابه‌جایی و سرعت بهنجار الکترون و محاسبات ریاضی به‌دست می‌آید.

$$X_1 = ASin(X_3) \quad (۷)$$

$$X_2 = -ACos(X_3) \quad (۸)$$

$$\beta_x = A\beta_z Cos(X_3) \quad (۹)$$

$$\beta_y = A\beta_z Sin(X_3) \quad (۱۰)$$

$$\dot{\beta}_x = -A\beta_z^2 Sin(X_3) \quad (۱۱)$$

$$\dot{\beta}_y = A\beta_z^2 Cos(X_3) \quad (۱۲)$$

که در معادلات (۷) تا (۱۲) مقدار A به‌صورت رابطه‌ی زیر است.

$$A = \frac{\Omega_w\beta_z}{\left(\omega_i^2 - \beta_z^2 \pm \Omega_0\beta_z\right)} \quad (۱۳)$$

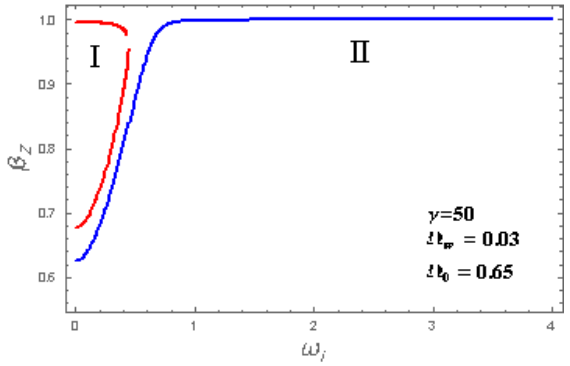
با قرار دادن معادلات (۹) و (۱۰) در معادله‌ی قانون بقای انرژی $\gamma = \left(1-\beta^2\right)^{-1/2}$ خواهیم داشت.

$$\beta_z = 1 - \frac{1}{2\gamma^2} - \frac{\Omega_w^2\beta_z^4}{\left(\omega_i^2 - \beta_z^2 \pm \Omega_0\beta_z\right)^2} \quad (١٤)$$

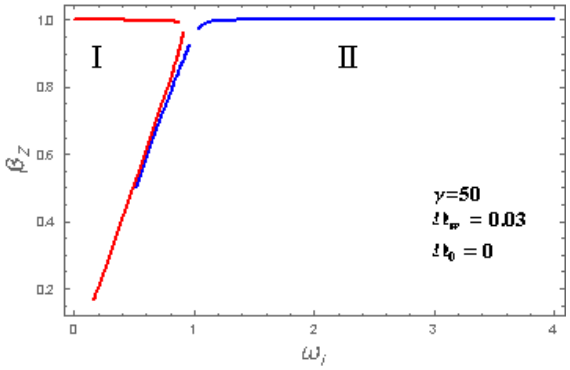
از آنجایی که حرکت الکترون در جهت $+z$ در نظر گرفته می‌شود از پاسخ‌های مربوط به معادله‌ی (١٤)، تنها مواردی که $\beta_z \succ 0$ است، قابل قبول خواهد بود. شکل(۱) سرعت محوری بهنجار براساس فرکانس بهنجار کانال یونی راهنما در حضور میدان

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

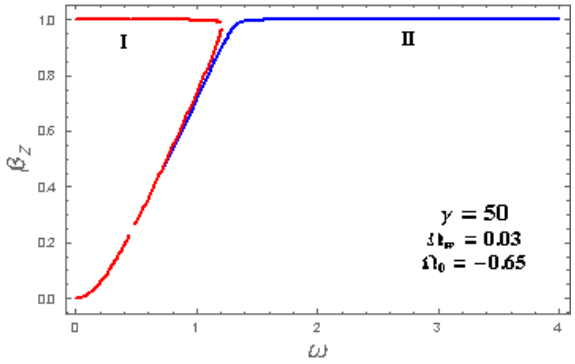
مغناطیسی محوری ($\Omega_0 = 0.65$) را نشان می‌دهد که مطابق با یافته‌های آقای حسینی و همکاران در مرجع [٦] است. شکل (۲) سرعت محوری بهنجار برحسب فرکانس بهنجار کانال یونی راهنما در غیاب میدان مغناطیسی محوری ($\Omega_0 = 0$) است و شکل (۳) نمودار سرعت محوری بهنجار را برحسب فرکانس بهنجار کانال یونی راهنما در حضور عکس میدان مغناطیسی محوری ($\Omega_0 = -0.65$) نشان می‌دهد. از نمودارها مشخص است که در هر سه شکل مدارها به دو گروه تقسیم شده‌اند. در نمودار اول شکاف بین دو نمودار در نزدیکی $\omega_i \approx 0.2$ اتفاق می‌افتد، در نمودار دوم این شکاف در نزدیکی $\omega_i \approx 1$ است و در نمودار سوم این شکاف در نزدیکی $\omega_i \approx 1.2$ مشاهده می‌شود. تفاوت مهم در این سه نمودار بازه‌ی β_z است. در حضور میدان مغناطیسی محوری β_z از 0.6 تا نزدیک یک افزایش می‌یابد، در غیاب این میدان $0.275 \prec \beta_z \prec 1$ قرار دارد و در حضور عکس میدان مغناطیسی محوری β_z از نزدیکی صفر تا یک مشاهده می‌شود.



شکل (۱): نمودار سرعت محوری بهنجار برحسب فرکانس بهنجار کانال یونی راهنما در حضور میدان مغناطیسی محوری.



شکل (۲): نمودار سرعت محوری بهنجار برحسب فرکانس بهنجار کانال یونی راهنما در غیاب میدان مغناطیسی محوری.



شکل (۳): نمودار سرعت محوری بهنجار برحسب فرکانس بهنجار کانال یونی راهنما در حضور عکس میدان مغناطیسی محوری.

میدان الکتریکی و بردار پوئین‌تینگ

اگر یک الکترون که از داخل یک لیزر الکترون آزاد با شرایط یاد شده عبور پیدا کند در لحظه‌ی τ از خود تابشی گسیل کند، این تابش در زمان $\tau_p = \tau + r(\tau)/c$ (زمان تاخیری) توسط ناظری که در فاصله‌ی r_p از مبدا قرار دارد، دریافت می‌شود، که $r(\tau)$ فاصله‌ی بین تک الکترون در لحظه‌ی گسیل تابش و ناظر است.

$$\vec{R}(\tau) + \vec{r}(\tau) = \vec{r}_p \qquad (۱۵)$$

$$\vec{r}_p = r_p[Sin\theta Cos\phi, Sin\theta Sin\phi, Cos\theta] \qquad (۱۶)$$

$R(\tau)$ فاصله‌ی الکترون از مبدا در لحظه‌ی گسیل تابش است.

میدان الکتریکی که توسط ناظر در زمان τ_p دریافت می‌شود از رابطه‌ی زیر قابل محاسبه خواهد بود.

$$\vec{E} = \frac{e}{4\pi\varepsilon_0}\left\{\frac{n\times\left((n-\beta)\times\dot{\beta}\right)}{cr_p(1-n\cdot\beta)^3}\right\} \qquad (۱۷)$$

$$\hat{n} = \frac{|r_p|}{\vec{r}_p} \approx \frac{|r(\tau)|}{\vec{r}(\tau)} \qquad (۱۸)$$

با قرار دادن معادلات (۹) تا (۱۲) در معادله‌ی (۱۷) میدان الکتریکی به‌صورت زیر به‌دست می‌آید.

$$\vec{E} = \frac{e}{4\pi\varepsilon_0 r_p(1-\beta_z Cos\theta)^3}$$

$$\begin{bmatrix} -A\beta_z^2 Sin(X_3)Cos\theta(Cos\theta-\beta_z\tau)- \\ A^2\beta_z^2 Cos(X_3)Sin(X_3)(Sin\theta)^2 Sin\phi(Cos\phi-Sin\phi) \\ , A\beta_z^2 Cos(X_3)Cos\theta(Cos\theta-\beta_z\tau)+ \\ A^2\beta_z^2 Cos(X_3)Sin(X_3)(Sin\theta)^2 Sin\phi(Cos\phi-Sin\phi), \\ -A\beta_z^2 Sin\theta(Cos\theta-\beta_z\tau) \\ (Cos\phi Sin(X_3)+Sin\phi Cos(X_3)) \end{bmatrix} \qquad (۱۹)$$

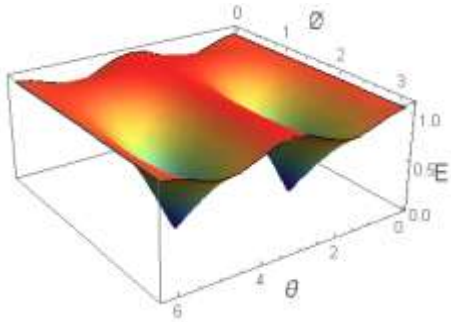
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

با قرار دادن معادله‌ی (۱۹) در معادله‌ی بردار پوئین‌تینگ می‌توان $S = E^2\hat{n}/\mu_0 c$ را محاسبه کرد.

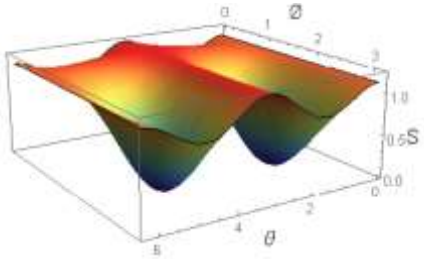
$$S = \frac{e}{16\pi^2\varepsilon_0^2\mu_0 r_p^2(1-\beta_z Cos\theta)^6}$$
$$\left[\begin{array}{l}(-A\beta_z^2 Sin(X_3)Cos\theta(Cos\theta-\beta_z\tau)- \\ A^2\beta_z^2 Cos(X_3)Sin(X_3)(Sin\theta)^2 Sin\phi(Cos\phi-Sin\phi))^2 \\ +(A\beta_z^2 Cos(X_3)Cos\theta(Cos\theta-\beta_z\tau)+ \\ A^2\beta_z^2 Cos(X_3)Sin(X_3)(Sin\theta)^2 Sin\phi(Cos\phi-Sin\phi))^2+ \\ (-A\beta_z^2 Sin\theta(Cos\theta-\beta_z\tau) \\ (Cos\phi Sin(X_3)+Sin\phi Cos(X_3)))^2\end{array}\right] \quad (۲۰)$$

شکل (٤) نمودار اندازه‌ی میدان الکتریکی بهنجار (که در زمان τ_p به ناظری که در نقطه‌ی r_p قرار دارد، می‌رسد) را به‌صورت تابعی از زاویه‌ی سمتی ϕ و زاویه‌ی قطبی θ نشان می‌دهد. همان‌طور که از شکل مشخص است دو فرورفتگی در نمودار وجود دارد که این فرورفتگی‌ها به‌دلیل مولفه‌ی سوم میدان الکتریکی است و در دو نقطه در نزدیکی ($\phi=2.8\pi, \theta=1.3\pi$) و ($\phi=2.8\pi, \theta=6.4\pi$) اتفاق می‌افتد.

شکل (۵) نموداری از بردار پوئین‌تینگ بهنجار برحسب تابعی از زاویه‌ی سمتی ϕ و زاویه‌ی قطبی θ را نشان می‌دهد که در زمان τ_p به ناظری که در نقطه‌ی r_p قرار دارد، می‌رسد. به‌دلیل اینکه بردار پوئین‌تینگ با مجذور میدان الکتریکی متناسب است، همان‌طور که در اندازه‌ی میدان الکتریکی بهنجار دو فرورفتگی مشاهده شد، در نمودار بردار S نیز دو دره در همان دو نقطه (که فرورفتگی مشاهده شد) مشاهده می‌گردد.



شکل(٤): نموداری از اندازه‌ی میدان الکتریکی بهنجار به‌صورت تابعی از زاویه‌ی قطبی و زاویه‌ی سمتی.



شکل (۵): نمودار بردار پوئین‌تینگ بهنجار به‌صورت تابعی از زاویه‌ی قطبی و زاویه‌ی سمتی.

نتیجه‌گیری

در این مقاله، با عبور یک تک الکترون از میان لیزر الکترون آزاد با ویگلر مارپیچ در حضور کانال یونی مغناطیده، مدارهای الکترونی به دو گروه تقسیم می‌شوند. در حضور میدان مغناطیسی محوری، گروه اول تقریبا به‌ازای $\omega_i \prec 0.2$ و گروه دوم به‌ازای $\omega_i \succ 0.2$ اتفاق می‌افتد و بازه‌ی تغییرات سرعت محوری بهنجار از نزدیک ۰٫٦ تا نزیک یک افزایش می‌یابد. در غیاب میدان مغناطیسی محوری، گروه اول به‌ازای $\omega_i \prec 1$ و گروه دوم به‌ازای $\omega_i \succ 1$ اتفاق می‌افتد و بازه‌ی تغییرات β_z از نزدیک ۰٫۲۷۵ تا نزدیک یک است. در حضور عکس میدان مغناطیسی محوری، گروه اول به‌ازای $\omega_i \prec 1.2$ و گروه دوم به‌ازای $\omega_i \succ 1.2$ اتفاق می‌افتد و همچنین سرعت محوری بهنجار از نزدیک صفر تا یک افزایش می‌یابد. با داشتن مختصات موقعیت، سرعت و شتاب الکترون در لحظه‌ی گسیل تابش، میدان الکتریکی و بردار پوئین‌تینگ تابشی که توسط ناظر دریافت می‌شود، محاسبه می‌گردد.

مرجع‌ها

[1] K. C. Prince, E. Allaria, C. Callegari, R. Cucini, G. De Ninno, S. Di Mitri, B. Diviacco; "Coherent control with a short-wavelength free-electron laser"; *Nature Photonics* **10**, No. 3 (2016) 176-179.
[2] I. B. Bernstein and J. L. Hirshfield; "Amplification on a relativistic electron beam in a spatially periodic transverse magnetic field"; *Physical Review* **20**, No. 4 (1979) 1661.
[3] K. Takayama and S. Hiramatsu; "Ion-channel guiding in a steady-state free-electron laser"; *Physical Review* **37**, No. 1 (1988) 173.
[4] H. E. Amri, and T. Mohsenpour; "Effects of electromagnetic wiggler and ion channel guiding on equilibrium orbits and waves propagation in a free electron laser" *Physics of Plasmas* **23**, No. 2 (2016) 022101.
[5] M. Pourali, A. Hasanbeigi, and H. Mehdian; "Nonlinear simulation of free electron laser in a rectangular waveguide and ion-channel guiding" *Physics of Plasmas* **25**, No. 12 (2018) 123108.
[6] M. Hosseini, E. Salehi, and B. Maraghechi. "Dynamical stability of electron trajectories in a free-electron laser with quadrupole wiggler"; *Indian Journal of Physics* **93**, No. 10 (2019) 1259-1264.
[7] A. Hofmann; "The physics of synchrotron radiation"; *Cambridge University Press* 20, (2004).

بررسی ترشوندگی سطوح گیاهی

ملک زاده ، ریحانه[۱] ؛ مهاجر مازندرانی ، سلمان[۱و۲]

[۱] آزمایشگاه فوتونیک، دانشکده ی فیزیک، دانشگاه خوارزمی ، انتهای خیابان شهید بهشتی ، کرج

[۲] پژوهشکده علوم کاربردی دانشگاه خوارزمی، کرج

چکیده

در این مقاله میزان ترشوندگی برگ چند نمونه ی گیاهی مختلف با هدف یافتن رابطه ای بین بافت سطح و خاصیت ترشوندگی آن ها بررسی شد و علاوه بر این با الهام گرفتن از شکل بافت های گیاهی و ساختار سطح برگ ها تعدادی پلکسی گلس طراحی و روی سطح هر کدام نقش های مختلفی توسط لیزر حک شد و به این طریق ارتباط بین بافت سطح و خاصیت ترشوندگی مورد بررسی قرار گرفت.

واژه های کلیدی: ترشوندگی، زاویه تماس، سطوح گیاهی

Investigation the Wettability of Plant Surfaces

Malekzadeh , Reyhaneh[1] ; Mohajer Mazandarani, Salman[1,2]

[1]Department of Physics, Kharazmi University, Karaj[2]Applied Science Research Center, Kharazmi University, Karaj

Abstract

In this work we studied the contact angle of Plants to find the connection between the configuration of their surface groove's and wettability of them. also we made some Plexiglasses (methyl methacrylate) with special surface's texture by inspiration of plant's surfaces and we studied the contact angle of them too.

Keywords: Wettability, Contact angle, Plant Surfaces

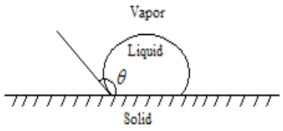
۱.مقدمه

در دنیای امروز اهمیت آب و منابع آبی بر هیچکس پوشیده نیست. استفاده ی بی رویه از منابع آب و آلودگی آب ها باعث شده است که انسان مدرن در جستجوی راهی برای بهینه سازی مصرب آب بگردد. در بسیاری از مواقع یافتن راهی برای کنترل میزان ترشوندگی سطح یک ماده تبدیل به یک مساله ی حیاتی می شود. اگر بتوانیم موادی بسازیم که به مقدار مشخصی آب دوست یا آب گریز باشند در واقع یک گام بزرگ در راستای بهینه سازی مصرف آب برداشته ایم. به عنوان مثال، جنس و نوع پارچه ی به کار رفته در ساختن لباس آتش نشان ها تاثیر مستقیمی برجلوگیری و یا کاهش آسیب ناشی از سوختن با آتش دارد. اگر بتوان پارچه هایی طراحی کرد که بخار آب موجود در محیط را به خود جذب کنند و آب دوستی بیشتری در تماس با قطره های آب از خود نشان دهند می توانیم تاثیر زیادی در حفظ جان و سلامتی افرادی که چنین مشاغل خطرناکی دارند داشته باشیم. در صنعت برق نیز لازم است کابل های انتقال برق به گونه ای ساخته شوند که ترشوندگی بسیار ناچیزی در تماس با آب داشته باشند.[۱]

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

۲. مبانی نظری ترشوندگی :

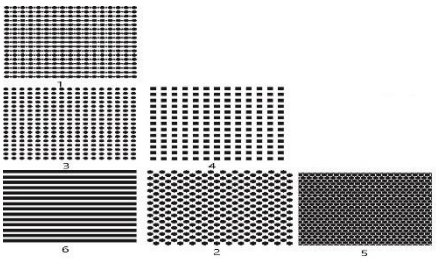
ترشوندگی توانایی یک مایع در برقراری تماس با سطح جامد و در واقع به معنی تمایل به کسب حداکثر سطح تماس برای یک مایع با یک سطح جامد است. همانطور که در شکل ۱ می بینید زاویه ی تماس در تعیین میزان ترشوندگی موثر است هر چه زاویه ی تماس کوچک تر باشد ترشوندگی سطح بیشتر خواهد بود.[۳][۲]



شکل ۱ : زاویه تماس قطره ی آب .

۳. آزمایش :

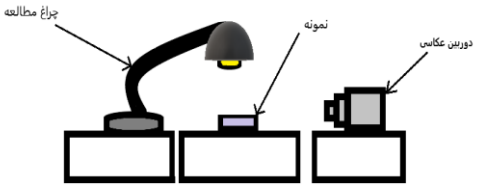
هفت شکل هندسی مجزا با نرم افزار "کورل دراو" رسم و توسط لیزر بر روی قطعات پلکسی گلس حک شد. هر پلکسی گلس مربعی به ضلع ۵ سانتی متر بود. طرح شماره ی ۱ زنجیره ای از دایره های بزرگ و کوچک است که کنار هم قرار گرفته اند و قطر آن ها به ترتیب ۲ میلی متر و ۱ میلی متر است. طرح ۲ شامل تعدادی شش ضلعی منتظم به ضلع۱ میلی متر است



شکل ۲ : نقش های حک شده بر روی پلکسی گلس ها.

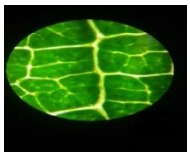
شماره ی مربوط به هر پلکسی گلس در زیر آن آورده شد.

که با فاصله از هم قرار گرفته اند؛ طرح۳ شامل تعدادی دایره به قطر ۱,۵ میلی متر است . طرح ٤ از مربع هایی به ضلع ۲ میلی متر تشکیل شده که فاصله ی هر مربع با دیگری نیز ۲ میلی متر بوده و طرح ۵ شش ضلعی های نامنتظمی است که به طور فشرده و نزدیک به هم قرار گرفته اند. طرح ٦ از تعدادی خطوط موازی تشکیل شده که عرض هر کدام از خط ها ۲ میلی متر بوده و به فاصله ی ۱,۵ میلی متر از یکدیگر قرار گرفته اند.

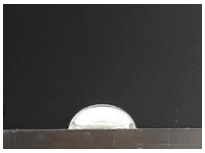


شکل ۳ : طرح کلی از چیدمان آزمایش. این طرح شامل یک دوربین عکاسی، یک چراغ مطالعه جهت تنظیم کردن نور، نمونه و نگهدارنده ی آن است.

روی هر نمونه تعداد مشخصی قطره ی آب قرار دادیم و به وسیله ی قطره چکان حجم قطره های آب را کنترل کردیم به طوری که همه ی آن ها از نظر حجم و اندازه یکسان باشند. یک چیدمان اپتیکی طراحی و از نمونه ها عکس برداری کردیم. شکل ۵ یکی از این عکس ها را نشان می دهد. چیدمان اپتیکی ذکر شده به گونه ای طراحی شده بود که قابلیت تنظیم مقدار نور و جابه جا کردن دوربین عکاسی را به ما می داد.



شکل ٤ :عکس میکروسکوپی از برگ انجیر.



شکل ۵ : عکس سه قطره آب بر روی پلکسی گلس .

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

عکس ها را با نرم افزار متلب تحلیل کرده و زاویه تماس قطره های آب را دست آوردیم. همین آزمایش را برای برگ تعدادی از گیاهان انجام دادیم. همه ی زاویه ها حداقل سه بار اندازه گیری شدند که مقدار میانگین آن ها در جدول ۱ و ۲ گزارش شده است.

لازم به ذکر است که تعدادی از گیاهان بررسی شده مانند انجیر، شمعدانی و حسن یوسف سطح کدر و کُرک دار داشتند و تعدادی دیگر مانند مگنولیا، گلابی و خرمالو سطح براق و بدون کُرک داشتند.



(الف) (ب)

شکل٦ : الف) سه قطره آب بر روی برگ شمعدانی. کُرک های سطح برگ در عکس دیده می شوند. ب) سه قطره آب بر روی برگ مگنولیای سفید. براق بودن برگ و عدم وجود کُرک روی سطح برگ در عکس مشخص است.

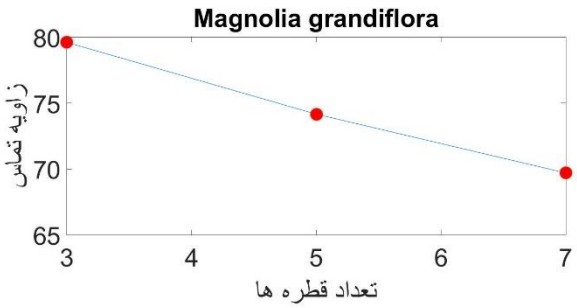
شماره ی نمونه	تعداد قطره ها	زاویه تماس
1	3	66.10
1	5	63.43
1	7	62.24
2	3	69.78
2	5	66.78
2	7	63.63
3	3	71.09
3	5	58.20
3	7	57.29
4	3	77.62
4	5	61.84
4	7	58.39
5	3	75.20
5	5	64.47
5	7	62.63
6	3	89.27
6	5	76.46
6	7	69.07

جدول ۱ : زاویه تماس قطره های آب در پلکسی گلس‌ها.

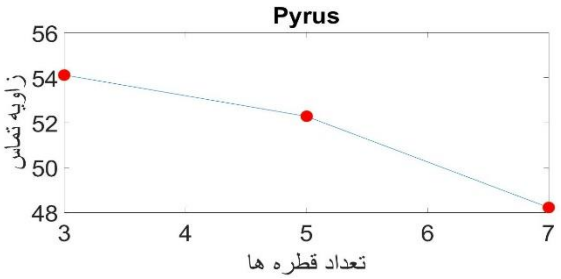
نام گیاه	تعداد قطره ها	زاویه تماس
مگنولیای سفید Magnolia grandiflora	3	79.61
	5	74.16
	7	69.70
گلابی Pyrus	3	54.12
	5	52.28
	7	48.22
خرمالو Ebenaceae	3	66.56
	5	62.34
	7	60.68
انجیر Ficus carica	3	51.86
	5	58.55
	7	61.28
شمعدانی Pelargonium	3	65.32
	5	71.39
	7	76.55
حسن یوسف Solenostemon	3	34.78
	5	41.95
	7	46.50

جدول ۲ : زاویه تماس قطره های آب در گیاهان. نام علمی هر گیاه به زبان انگلیسی نوشته شده است.

٤. نمودار ها :

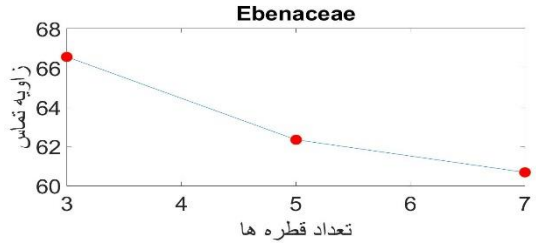


شکل ۷ : نمودار تغییرات زاویه تماس گیاه مگنولیای سفید.

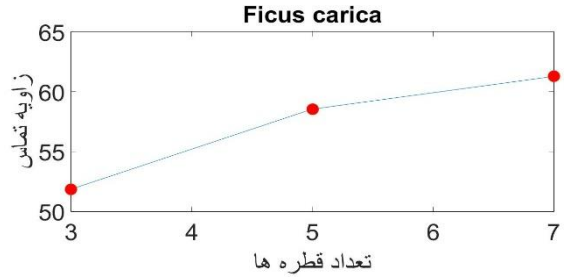


شکل ۸ : نمودار تغییرات زاویه تماس گیاه گلابی.

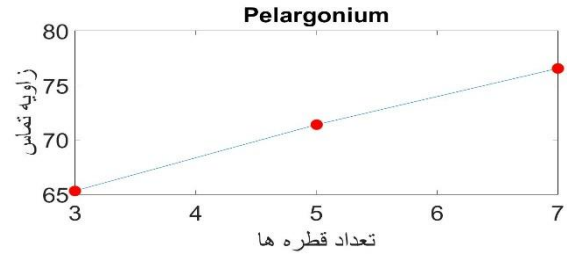
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



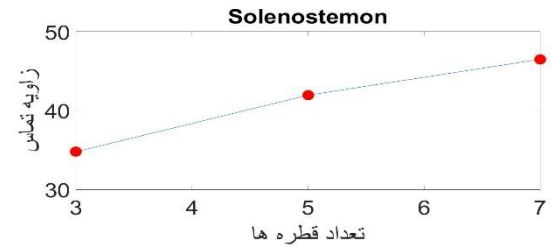
شکل ۹ : نمودار تغییرات زاویه تماس گیاه خرمالو.



شکل ۱۰ : نمودار تغییرات زاویه تماس گیاه انجیر.



شکل ۱۱ : نمودار تغییرات زاویه تماس گیاه شمعدانی.



شکل ۱۲ : نمودار تغییرات زاویه تماس گیاه حسن یوسف.

۵. نتایج :

با توجه به این که نمونه ها ی مختلف دارای زاویه تماس متفاوت بودند نتیجه می گیریم که شکل و بافت سطح بر ترشوندگی اثر می گذارد. با توجه به زاویه های گزارش شده، پلکسی گلس های ۱، ۲، ۳، ۵ و ٤ به ترتیب بیشترین ترشوندگی را برای سه قطره آب و پلکسی گلس های ۳ ، ٤، ۱، ۵ و ۲ به ترتیب بیشترین ترشوندگی را برای پنج و هفت قطره آب داشته اند. همچنین می توان با قاطعیت گفت که پلکسی گلس شماره ی ٦ کمترین میزان ترشوندگی برای هر سه و پنج و هفت قطره داشته است. برای پلکسی گلس ها در همه ی موارد ترشوندگی سطح با افزایش تعداد قطره ها افزایش یافت اما برای گیاهان نتایج متفاوتی به دست آمد به این صورت که در گیاهانی که سطح کدر و کُرک دار داشتند مانند انجیر، شمعدانی و حسن یوسف با افزایش حجم قطره ترشوندگی آن ها کاهش و گیاهانی که سطح براق و بدون کُرک داشتند مانند مگنولیا، گلابی و خرمالو با افزایش حجم قطره ترشوندگی آن ها افزایش یافت.

٦. مراجع:

[1] E. C. Donaldson and W. Alam, *Wettability*. Elsevier, 2013.

[2] S. Mohajerani, " The Measurement of the Contact Angle of Water Droplets on Soda-Lime Glass Surface by Mirau Interferometeric Microscope," in *21th conference of Optics and Photonics*, 2015, no. January, pp. 765–768.

[3] L. C. PIERRI, "Motion of water droplet on graphite-based surfaces by molecular dynamics simulations," FEDERAL UNIVERSITY OF SANTA CATARINA, 2009.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

ساخت نانوذرات فریت کبالت خالص و آلایش یافته با ایتربیوم و بررسی خواص ساختاری و مغناطیسی آنها

قربانی ، حمزه [۱] ؛ اشراقی ، مهین [۱] ؛ کاملی ، پرویز [۲]

[۱] دانشکده فیزیک دانشگاه پیام نور ، بلوار ارتش (مینی سیتی) ، تهران

[۲] گروه فیزیک، دانشگاه صنعتی اصفهان ، اصفهان

چکیده

بزرگی ناهمسانگردی مغناطیسی عناصر گروه خاکی های نادر ، عاملی است برای ترغیب دانشمندان نسبت به آلایش فریتهای مغناطیسی با این عناصر ، به منظور بدست آوردن میدان وادارندگی بالاتر . در این تحقیق با کمک روش هیدروترمال ، Fe^{+3} در فریت کبالت را با Yb^{+3} (یک عنصر خاکی نادر) با مقادیر ۰ و ۰.۰۵ و ۰.۱ ، جایگزین کردیم . با انجام آنالیز XRD و تایید ساختار اسپینلی آن ، اندازه دانه های نانوذرات در محدوده ۳۱ تا ٤٥ نانومتر بدست آمد و برای ثابت شبکه نیز محدوده ۸.۳ تا ۸.۳٦ نانومتر را داشتیم . انجام آزمایش FTIR روی نانوذرات تهیه شده ، باند جذب v_1 را در محدوده 584 تا Cm^{-1} 594 مشخص کرد. با ترسیم حلقه پسماند (با کمک آنالیز VSM) ، مغناطش اشباع(Ms) در محدوده ٦۲ تا ۷٤ Emu/gr و میدان وادارندگی (Hc) در محدوده ۱۱۰ تا ۱۰۵۰ Oe بدست آمد.

واژه های کلیدی: نانوذرات ، فریت کبالت ، جایگذاری ایتربیوم ، هیدروترمال.

synthesis of pure and contaminated ferrite cobalt nanoparticles with ytterbium and study of their structural and magnetic properties

Ghorbany , hamzeh [1] ; eshraghi , mahin [1] ; kameli , parviz [2]

[1] *Department of Physics, payyam noor University, Tehran*
[2] *Department of Physics, Isfahan University of Technology,Isfahan*

Abstract

The magnitude of the magnetocrystalline anisotropy of the elements of the rare earth group is a factor in encouraging scientists to contaminate magnetic ferrites with these elements in order to obtain a higher coercivity field . In this research , using the hydrothermal method, Fe^{+3} in cobalt ferrite substituted with Yb^{+3} (a rare earth element) with values of 0 , 0.05 and 0.1 . By analyzing XRD and confirming it's spinel structure, the size of nanoparticles was obtained in the range of 31 to 45 nm and for lattice parameter we had a range of 8.30 to 8.36 nm. The FTIR analysis on the prepared nanoparticles determined the v_1 absorption band in the range 584 to 594 Cm^{-1}. By Drawing the hystersis loop,Ms had a range 62 to74 emu/gr and Hc ranged 110 to 1050 Oe.

***Keywords**: ytterbium substituted, cobalt-ferrite, nanoparticles, hydrothermal.*

PACS No. 61,63,75

مقدمه

علم مغناطیس نیز همانند سایر علوم ، در دهه های اخیر پیشرفت های بزرگی را تجربه کرده است . یکی از زمینه های بسیار قابل توجه ، پیشرفت در تنوع ترکیبات فریتهای مغناطیسی و همچنین در بهینه سازی پارامترهای مغناطیسی آنها می باشد . همانطور که می دانیم امروزه از فریتها در علوم و صنایع مختلف (از جمله علوم نظامی ، علوم کامپیوتر و ارتباطات ، صنایع الکتریک و الکترونیک ، علوم پزشکی و ...) استفاده های بسیار زیادی می شود ، که در این بین فریت کبالت(که یک مغناطیس سخت با میدان ناهمسانگردی مغناطیسی بسیار بزرگ و پایداری

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

شیمیایی و سختی مکانیکی بالا می باشد) به دلیل خواص متنوع و ویژگیهای کاربردی فراوانی که دارد ، بیشتر مورد توجه محققان قرار گرفته است . این امر به دلیل توانایی توزیع کاتیونی آن در بین زیر شبکه های موجود در محل های تتراهدرال و اکتاهدرال می باشد [1,2] .به دلیل کاربردهای متنوع این ماده ، محققان درصدد بهینه سازی خواص آن به روشهای گوناگون از جمله آلایش این ماده با عناصر مختلف برآمده اند . یکی از گزینه های جذاب برای آلایش دادن به فریت کبالت ، عناصر گروه خاکی های کمیاب می باشند .در این عناصر به دلیل اینکه لایه الکترونی درونی 4f در حال پر شدن می باشد ، میزان تکانه زاویه ای بیشتر شده و برهمکنش اسپین–مدار بزرگتری اتفاق می افتد ، که درنتیجه آن این عناصر دارای ناهمسانگردی مغناطوبلوری بالایی هستند. لذا اگر این عناصر به فریت ها آلایش داده شوند ، باعث افزایش میدان وادارندگی خواهند شد [3]. این پدیده در تحقیقات متنوعی نشان داده شده است .(Almessiere و همکاران (جایگذاری عنصر Tm به جای آهن در فریت کبالت)[4] ، Routray و همکاران (جانشین کردن La به جای آهن در فریت کبالت) [5] ، Bulai و همکاران (آلایش ۸ عنصر از جدول خاکی های نادر در فریت کبالت) [3] .در این تحقیق ما قصد داریم که عنصر Yb را در فریت کبالت جانشین Fe کرده و سپس تاثیر این آلایش را بررسی کنیم . بدین منظور پس از ساخت نمونه های $CoFe_{1-x}Yb_xO_4$ با مقادیر X=0 , 0.05 , 0.1 به روش هیدروترمال ، مشخصات ساختاری و مغناطیسی نمونه ها را بررسی خواهیم کرد.

روش آزمایش

برای ساخت نمونه های مورد نظر ، مواد زیر به عنوان مواد اولیه استفاده شدند : $CoCl_2$- $6H_2O$(merck) , $FeCl_3$-$6H_2O$(merck) , $YbCl_3$-$6H_2O$(merck) , NaOH(merck) . پس از محاسبه و توزین مقادیر استوکیومتری نمکهای فلزی ، مقادیر مشخص شده در ۳۰ میلی لیتر آب دی یونیزه حل شدند . سپس یک محلول ۰.۵ مولار هیدروکسید سدیم تهیه کردیم و قطره قطره به محلول نمکهای فلزی اضافه کردیم . اجازه دادیم به مدت ۳۰ دقیقه روی همزن مغناطیسی مخلوط شود تا یک محلول همگن بدست آید . پس از اینکه پیش ماده همگن و تیره رنگ بدست آمد ، آنرا داخل اتوکلاو ریختیم و در دمای ۲۵۰ درجه سانتی گراد به مدت ۲ ساعت قرار دادیم . (آهنگ افزایش دما را نیز ۲.۳ درجه سانتی گراد بر دقیقه تنظیم کرده بودیم) . بعد از اینکه اتوکلاو سرد شد ، ماده حاصل را با آب و اتانول شسته و روی هیتر دردمای ۷۰ درجه سانتی گراد به مدت ۳ ساعت خشک کردیم. سپس نمونه های بدست آمده را تحت آنالیزهای XRD ، SEM ، FTIR و VSM قرار دادیم .

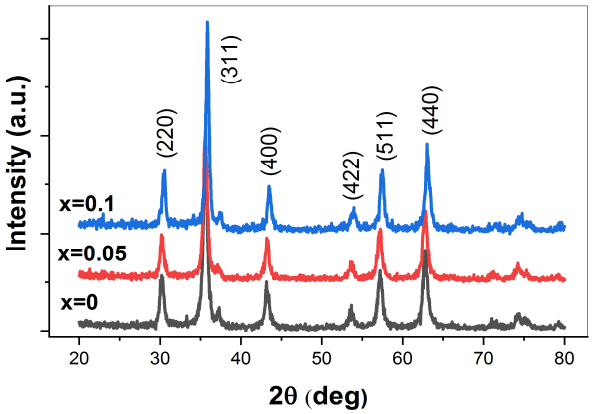
نتایج و بحث

الگوی پراش اشعه ایکس نمونه های تهیه شده (توسط دستگاه XRD دانشگاه صنعتی اصفهان) را میتوان در شکل ۱ مشاهده کرد . پس از تطبیق الگوی بدست آمده از نمونه ها با کارت استاندارد فریت کبالت (شماره ۰۸٦٤-۰۳) ، مشاهده شد که تمام ویژگی های پیک های ساختار کریستالی اسپینل در الگوی پراش وجود داشت و بازتاب های اساسی از صفحات (۲۲۰) ، (۳۳۱) ، (٤۰۰) ، (٤۲۲) ، (۵۱۱) و (٤٤۰) که مشخصه ساختار های اسپینل مکعبی است ، مشاهده شد و نشان داد که ترکیب های فریت سنتز شده دارای ساختار اسپینلی مکعبی تک فاز هستند . برای محاسبه اندازه ذرات از رابطه دبای–شرر ($D = k\lambda/\beta\cos\theta$) استفاده کردیم (نتایج در جدول ۱ آورده شده است) ، در این رابطه K فاکتور شکل و تقریبا برابر با ۰/۹ ، λ طول موج آند مربوط به دستگاه XRD و تقریبا برابر با ۱/۵٤۰٦ نانومتر ، β پهنای پیک در نیم ارتفاع قله (برحسب رادیان) و θ مکان پیک می باشد . (برای به حداقل رساندن خطا محاسبات را برای همه قله ها انجام دادیم و میانگین گیری کردیم). همچنین ثابت شبکه با کمک رابطه $a = d_{hkl}(h^2+k^2+l^2)^{1/2}$ محاسبه شد ، که در آن d فاصله بین صفحات و hkl اندیس های میلر هستند. نتیجه را در جدول۱ مشاهده می کنید .

از مشاهده تصاویری که با استفاده از آنالیز FE-SEM (دانشگاه صنعتی اصفهان) گرفته شد (شکل ۳) ، به این نتیجه رسیدیم که نانو ذرات فریت کبالت بدست آمده کاملا کروی و همشکل هستند . ما با کمک این تصاویر اندازه ذرات را با استفاده از نرم افزار

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

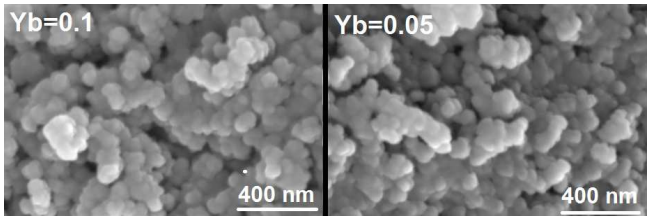
ImageJ بدست آوردیم و با توجه به اینکه ذرات انتخاب شده برای اندازه گیری ابعاد به صورت تصادفی انتخاب شده بودند ، دیدیم که توافق خوبی با نتایج حاصل از رابطه دبای–شرر دارد .



شکل ۱ : الگوی پراش اشعه ایکس نمونه ها

جدول ۱ : پارامترهای ساختاری نمونه ها

	x=0	x=0.05	x=0.1
D (nm)	31.7	39.6	44.3
a (nm)	8.37	8.36	8.30
v_1 (Cm^{-1})	584	588	594



شکل ۳ : تصاویر FE-SEM نمونه ها

برای بررسی حالتهای ارتعاشی پیوندهای موجود در ساختار اسپینل نمونه ها ، آنالیز FT-IR (دانشگاه اصفهان) از نمونه ها در دمای اتاق و در طول موج $400\text{-}4000\ cm^{-1}$ گرفته شد ، که نتیجه در شکل ٤ نشان داده شده است . نوع کاتیونهای موجود در ترکیب و همچنین نحوه توزیع آنها در جایگاه های چهاروجهی و هشت وجهی ، ماهیت باندهای جذب در طیف مادون قرمز را مشخص می کند [6] . در ساختارهای اسپینلی معمولا قوی ترین باند جذب طیف ها که در محدوده $550\text{-}650\ Cm^{-1}$ می باشد و نشان دهنده ساختار اسپینلی نمونه ها است ، مربوط به ارتعاشات عنصر فلزی موجود در مکان های چهاروجهی می باشد [7]) .

همچنین یک باند جذب قوی دیگر در طول موج های پایینتر (در محدوده $400\ Cm^{-1}$) مشاهده می شود ، که مربوط به ارتعاشات عنصر فلزی موجود در مکان های هشت وجهی است[7] . همانطور که در شکل می بینیم برای نمونه های ساخته شده ، باند جذب v1 در محدوده 570 تا $610\ Cm^{-1}$ می باشد و با افزایش آلایش ییتربیوم به سمت طول موج های بلندتر حرکت می کند . با توجه به اندازه جرم و شعاع اتمی عناصر آهن و ایتربیوم ، و در نظر گرفتن این نکته که این عوامل بر روی طول پیوند یون فلزی با اکسیژن و در نتیجه ارتعاشات عناصر به خصوص در جایگاه های چهار وجهی تاثیر می گذارد ، می توان این موضوع را نشان داد .

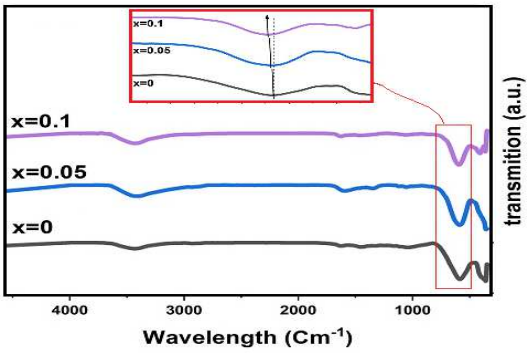
با استفاده از مغناطیس سنج نمونه ارتعاشی(VSM) (دانشگاه کاشان) در دمای اتاق و در بیشینه میدان اعمال شده 120KOe ، حلقه پسماند و درنتیجه خواص مغناطیسی نمونه ها بدست آمد . نمودارهای مربوطه در شکل ۵ و داده های آن در جدول ۲ آورده شده است . بر اساس نظریه Stoner–Wohlfarth (S–W) مغناطیس اشباع از برون یابی نمودار M نسبت به $1/H^2$ بدست می آید [8-10] ، ولی میتوان بیشینه مغناطش بدست آمده از نمودار M/H را (با چشم پوشی از یک خطای ناچیز) مغناطش اشباع در نظر گرفت . همانطور که از داده های جدول ۳ پیداست ، میدان وادارندگی ، با افزایش مقدار ایتربیوم ، یک روند کلی افزایشی دارد. این رفتار را می توان اینگونه توجیه کرد که با توجه به اینکه ایتربیوم جزء گروه عناصر خاکی های نادر است و عناصر این گروه همگی در حال پرشدن لایه اوربیتالی 4f هستند (که یک لایه داخلی تر نسبت به لایه اوربیتالی 5d می باشد) و در این عناصر میزان برهمکنش اسپین مدار بیشتر می باشد (به دلیل بالاتر بودن مقدار تکانه زاویه ای که در اثر وجود الکترون های لایه ظرفیت در اوربیتال 4f می باشد) ، لذا ناهمسانگردی مغناطوبلوری این گروه از عناصر بسیار زیاد می باشد[11] . پس با افزایش میزان آلایش ایتربیوم ، ناهمسانگردی مغناطیسی و درنتیجه میدان وادارنگی افزایش می یابد. رابطه بین ممان مغناطیسی و مغناطش اشباع ($n_B^{obs}=(M_wM_s/5585)$ ، به عنوان ممان مغناطیسی مشاهده شده شناخته می شود .که در آن Mw وزن مولکولی نمونه ها و Ms مقدار مغناطش اشباع است (جدول ۳ را ببینید) .

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

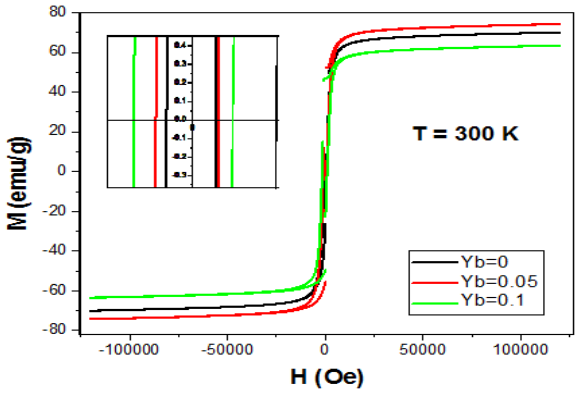
این در حالی است که بر اساس نظریه نیل ممان مغناطیسی محاسباتی با رابطه $n_B^{cal} = M_B - M_A$ داده می شود ، که در آن MA و MB ممان های مغناطیسی زیر شبکه A و سایت B هستند که ازممان مغناطیسی هر عنصر در μB (Bohr magneton) تخمین زده می شوند (برای Fe^{+3} ، Co^{+2} و Yb^{+3} به ترتیب۵ ، ۳ ، ۱). (نتایج در جدول ۳ ارائه شده است). همچنین ما نسبت مغناطش اشباع به مغناطش باقیمانده (R=Mr/Ms) را که در مقالات از آن به عنوان نسبت بقایایی یاد شده است را محاسبه کردیم [4,5] .

جدول ۲ : پارامترهای مغناطیسی نمونه ها

	x=0	x=0.05	x=0.1
Ms (emu/g)	71	74	62
Hc (Oe)	110	550	1050
Mr (emu/g)	36	23	23
n_B^{obs} (μ_B)	2.98	3.19	2.73
n_B^{cal} (μ_B)	3	2.8	2.6
R (Mr/Ms)	0.5	0.31	0.37



شکل ٤ : طیف FTIR نمونه ها



شکل ٥ : منحنی مغناطش نمونه ها

بر اساس نظریه (S-W) اگر مقدار R در حدود ۰/۸۳ باشد ، مربوط به ناهمسانگردی مکعبی و اگر در حدود ۰/۵ باشد مربوط به ناهمسانگردی تک محوره می باشد . همانطور که از داده های جدول مشاهده می شود ، برای نانوذرات تولید شده ، مقدار R در محدوده R<=0.5 است که یعنی نمونه های ما مغناطیس های تک دامنه با ناهمسانگردی تک محوره می باشند .

نتیجه گیری

نمونه های $CoFe_{1-x}Yb_xO_4$ با x=0,0.05,0.1 به روش هیدروترمال ساخته شدند. با انجام آنالیز XRD ساختار اسپینلی نمونه ها تایید شد و پس از اندازه گیری ، ابعاد اندازه ذرات و ثابت شبکه در محدوده نانو بدست آمد . با بررسی حلقه پسماند متوجه شدیم که Hc همزمان با افزایش آلایش ، بیشتر شده است.

مرجع ها

[1] Nalla.Somaiah,T anjoreV . J ayaraman,P . A. J oy,Dibakar Das, "Magnetic and magnetoelastic properties of Zndoped cobalt-ferrites CoFe2−xZnxO4(x= 0, 0.1,0.2, and 0.3)" , *J.Mechanical & Materials EngineeringFaculty Publications* ,**7**-1-2012.

[2] Vaidyanthana,G.Sendhilnathan, "Characterization nanoparticles synthesized by co-precipitation method" , *J.Physica B: Condensed Matter*,**403**,(2008),2157-2167.

[3] G. Bulai , L.Diamandescu , I.Dumitru , S.Gurlui , M.Feder , O.F.Caltun , " Effect of rare earth substitution in cobalt ferrite bulk materials" , *J. Magnetism and Magnetic Materials* , **390**(2015) 123–131 .

[4] M.A. Almessiere , Y. Slimani , A.D. Korkmaz , S. Guner , M. Sertkol , Sagar E. Shirsath , A. Baykal , "Structural, optical and magnetic properties of Tm^{+3} substituted cobalt spinel ferrites synthesized via sonochemical approach" , *J. Ultrasonics - Sonochemistry* **54** (2019) 1–10.

[5] K. L. Routray , S. Saha , D. Behera , "Rare-earth (La^{+3}) substitution induced changes in the structural,dielectric and magnetic properties of nano-CoFe2O4 for high-frequency and magneto-recording devices" , *J.Applied Physics A* (2019) 125:328 .

[6] S.P.Dalawai , T.J.Shinde , A.B.Gadkarai , P.N.Vasambekar , "Structural properties of Cd–Co ferrites" , *J.Indian Academy of Sciences* , **36** (2013) 919-922 .

[7] A.B. Kulkarni, S.N. Mathad , "Variation in structural and mechanical properties of Cd-doped Co-Zn ferrites" , *J.Materials Science for Energy Technologies* , S2589-2991(2019)30016-3.

[8] E.C. Stoner, E.P. Wohlfarth, "A mechanism of magnetic hysteresis in heterogeneous alloys" , *J.Philos. Trans. Royal Soc.* A **240** (1948) 599–642.

[9] M.A. Almessiere, A. Demir Korkmaz, Y. Slimani, M. Nawaz, S. Ali, A. Baykal, "Magneto-optical properties of rare earth metals substituted Co-Zn spinel nanoferrites" ,*J.Ceram. Int.* **45** (2019) 3449–3458.

[10] M.A. Almessiere, Y. Slimani, H.S. El Sayed, A. Baykal, Ca^{+2} and Mg2+ incorporatedbarium hexaferrites: structural and magnetic properties, *J. Sol-Gel Sci. Technol.* **88** (2018) 628–638.

[11] R.A. Layfield , M.Murugesu , "Lanthunides and Actinides in Molecular Magnetism" , *Wiley-VCH* , 2015 .

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

SURA-4؛ مجموعه اول تجزیه و تحلیل داده های تجربی

سبوحی، محمد[۱] ؛ رستگارزاده، گوهر[۱]

[۱] دانشکده فیزیک ، دانشگاه سمنان ، سمنان

چکیده

SURA-4 به عنوان نمونه اولیه آرایه رادیویی دانشگاه سمنان ، فعالیت خود را آغاز نموده است. این آرایه در تلاش است تا با استفاده از آشکارسازی سیگنال های رادیویی به بررسی مشخصات پرتو های کیهانی بپردازند. در این پژوهش به بررسی اولین مجموعه از داده هایی که به صورت خودکار و با توجه به مکانیزم های تعیین شده، توسط آرایه رادیویی ثبت شده اند ، خواهیم پرداخت. بررسی تعداد رخدادهای ثبت شده در طول شبانه روز و تعیین زوایای سمتی و سرسویی و همچنین بررسی توزیع زاویه ای بهمن های هوایی آشکارسازی شده از موارد مورد مطالعه در این پژوهش می باشد. داده های حاصل نشان می دهند که تطابق قابل قبولی میان نتایج مورد انتظار و رخداد های ثبت شده وجود دارد.

واژه های کلیدی: *آرایه رادیویی دانشگاه سمنان (SURA) ، پرتو های کیهانی ، آشکارسازی رادیویی*

SURA-4; First set of experimental data analysis

Sabouhi, Mohammad[1]; Rastegarzadeh, Gohar [1]

[1] *Physics Faculty, Semnan University, Semnan*

Abstract

SURA-4 as the first prototype of Semnan University Radio Array has started its operation. This array tries to investigate cosmic rays with an investigation on the radio signal properties. In this study, we investigate the first set of experimental data which has been recorded in a self-trigger mode with predefined conditions. It includes an investigation of the recorded number of events per day and measuring the zenith and azimuth angles of the detected events as well as investigating the angular distribution of detected extensive air showers. The results show good agreements with what we expect from such an experiment.

***Keywords**: Semnan University Radio Array (SURA), Cosmic Rays, Radio Detection*
PACS No. 90.95

مقدمه

آشکارسازی پرتو های کیهانی در سطح زمین به روش های مختلف امکان پذیر است. یکی از این روش که در سال های گذشته توجه بسیاری را به خود جلب کرده است ، آشکارسازی رادیویی پرتو های کیهانی است [۱]. این روش دارای مزیت هایی همچون امکان فعالیت در شرایط مختلف جوی و در تمام مدت شبانه روز ، هزینه تمام شده کم تر نسبت به سایر روش ها ، امکان فعالیت به صورت همزمان با سایر روش های آشکارسازی و همچنین امکان تعیین پارامتر های اصلی یک پرتو کیهانی همچون نوع ذره و انرژی اولیه آن می باشد[۲]. به همین دلیل طی سالیان گذشته آزمایشگاه های مختلفی، تجهیزات رادیویی را نیز در کنار سایر روش های آشکار سازی مورد استفاده قرار داده اند. آرایه رادیویی دانشگاه سمنان کار خود را با هدف آشکارسازی رادیویی پرتو های کیهانی آغاز نموده است. این آرایه در حال حاضر با بهره گیری از ۵ آنتن

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

رادیویی که بر روی پشت بام دانشکده فیزیک استقرار یافته اند ، سعی در تحلیل داده های رادیویی و معرفی کاندیداهای احتمالی رخدادهایی دارد که در نتیجه ورود یک پرتو کیهانی به جو زمین پدید آمده اند[۳]. این آرایه در مرحله فعلی به صورت نمونه راه اندازی شده و در حالت خودکار اقدام به تحلیل و ثبت رخداد های احتمالی می نماید. توضیحات مربوط به مباحث فنی و ویژگی های این مرحله از آزمایش در [٤] و [٥] به تفصیل مورد بحث قرار گرفته است. در نتیجه اقدامات صورت گرفته روزانه تعداد قابل توجهی رخداد متحمل توسط آرایه به صورت خودکار شناسایی و در رایانه ذخیره می شوند. همچنین پرونده های حاوی اطلاعات مربوط به رخداد های به ثبت رسیده به صورت خودکار بر روی وب سایت آرایه رادیویی دانشگاه سمنان به نشانی www.sura.semnan.ac.ir نیز بار گذاری می شوند تا هر یک اعضاء آزمایشگاه در هر زمان امکان دسترسی و استفاده از داده های به دست آمده را داشته باشند.

تحلیل داده های آزمایش

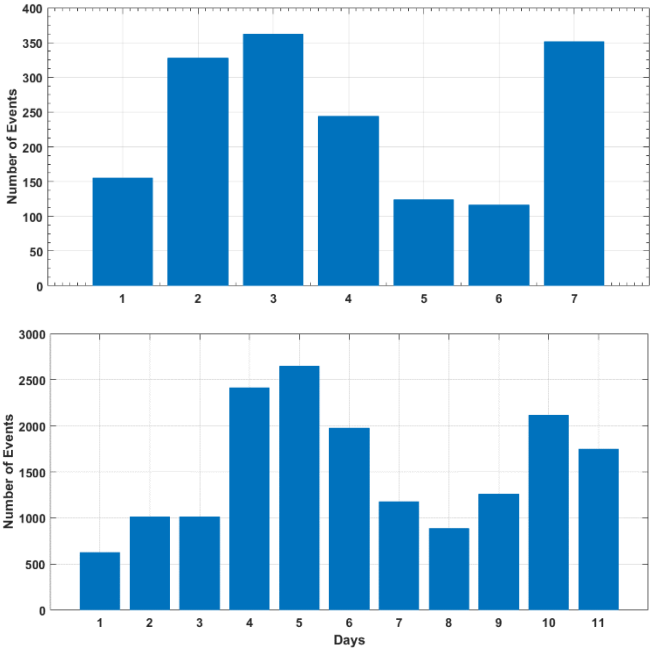
داده های مورد بررسی در این پژوهش یک بازه زمانی ۱۸ روزه را شامل می شوند که بدون وقفه قابل توجه در طول مدت شبانه روز به صورت خودکار شناسایی و ثبت شده اند. در مجموع تعداد ۱۸۵٤٤ رویداد در این پژوهش مورد بررسی قرار گرفته اند. ذکر این نکته ضروری است که پارامتر های ابتدایی تعیین شده توسط کاربر، نقشی مهم در تعداد و مشخصات رخداد های ثبت شده خواهند داشتند. از جمله این مقادیر می توان به بازه زمانی تعیین شده برای بررسی همزمانی سیگنال های دریافتی توسط آنتن های مختلف اشاره نمود. اندازه این پنجره زمانی با توجه به هندسه آرایه مورد مطالعه تعیین می گردد. به طور مثال در صورتی که یک رخداد کاملا مایل (افقی) به یکی از آنتن های آرایه برسد ، با توجه به سرعت تقریبی انتشار امواج الکترومغناطیسی در هوا و با در نظر حداکثر فاصله موجود ما بین آنتن های آرایه SURA-4 مدت زمانی تقریبا برابر با ۱٦۰ نانو ثانیه طول خواهد کشید تا آنتن دورتر نیز پالس رادیویی را دریافت نماید. البته این امر در صورت برابر بودن طول کابل های مورد استفاده برای انتقال داده های رادیویی از هر آنتن به مرکز دریافت صحیح می باشد. در حال حاضر با تغییرات صورت گرفته و استقرار تجهیزات الکترونیکی آرایه SURA-4 بر روی پشت بام دانشکده فیزیک از طول کابل های کاملا مساوی برای همه آنتن های رادیویی استفاده شده است.

پارامتر دوم ، میزان نویز زمینه در زمان ثبت داده های رادیویی است. برنامه توسعه داده شده SURA-4 در حال حاضر تنها در صورتی اقدام به ثبت یک رخداد می نماید که هر چهار آنتن به طور همزمان (در یک بازه تعریف شده) پالسی با دامنه بالاتر از میزان نویز زمینه دریافت نمایند. شکل ۱ تعداد رخداد های ثبت شده در طول روز برای دو بازه زمانی مختلف را نشان می دهد.

در بازه زمانی روز اول تا هشتم پنجره زمانی برابر با ۱۲۵ نانو ثانیه و حد آستانه نویز زمینه برابر با ٤۰۰ میکرو ولت در نظر گرفته شده است. به طور متوسط در این حالت روزانه حدود ۲٤۰ رخداد توسط سیستم به ثبت رسیده است. در مجموع تعداد ۱٦۸۰ رخداد در این حالت ذخیره شده است. در حالت دوم و در بازه زمانی روزهای هشتم تا هجدهم ، پنجره زمانی برابر با ۳۷۵ نانو ثانیه و حد آستانه نویز زمینه برابر با ۳٦٦ میکرو ولت در نظر گرفته شده است که به دلیل پایین تر بودن حد آستانه ی دامنه پالس دریافتی برای شناسایی رخداد های احتمالی و همچنین باز تر شدن پنجره زمانی ، تعداد رخداد های به ثبت رسیده به طور قابل ملاحظه ای افزایش یافته است.

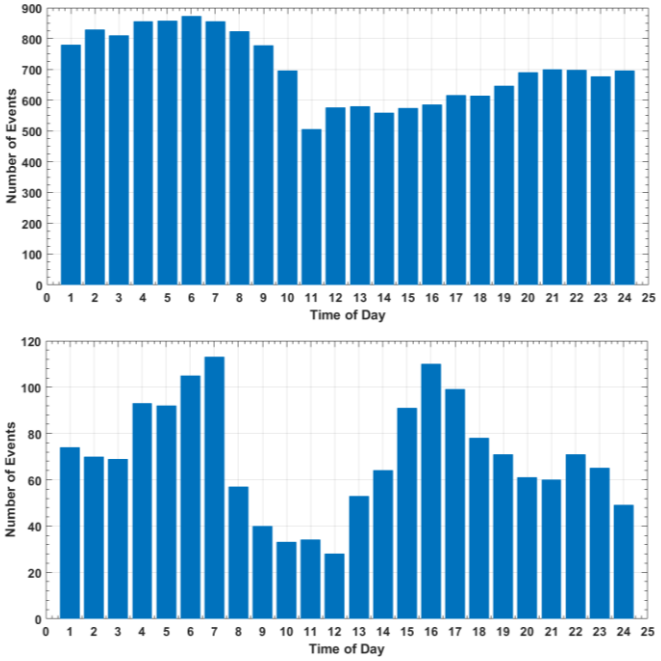
تعداد کل رخداد های ذخیره شده در این حالت برابر با ۱٦۸٦٤ عدد می باشد. از این تعداد ، ۹۰۷ رخداد ثبت شده به دلیل مشکلات فنی حاوی تمام نمونه های مورد انتظار نبوده و به همین دلیل از مجموع داده های حاصل حذف شده اند. نکته قابل توجه افت و خیز های مشاهده شده در تعداد رخداد های به ثبت رسیده در هر دو حالت می باشد که در شکل ۱ نیز مشاهده می شود. دلیل این موضوع نیاز به انجام تحلیل های بیشتر و افزایش تعداد داده های آزمایش پیش از انجام هرگونه جمع بندی نهایی دارد. همان گونه که در شکل ۲ ترسیم شده است، با وجود برابری نسبی رخداد های ثبت شده در طول شبانه روز ، تعداد رخداد هایی که در بازه زمانی نیمه شب تا ۷ صبح توسط سیستم به ثبت رسیده است اندکی بیشتر از تعداد رویداد های ذخیره شده در ساعت های دیگر شبانه روز می باشد.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



شکل۱ : تعداد رخداد های ثبت شده در دو پنجره زمانی متفاوت که یک بازه زمانی ۱۸ روزه را تشکیل می دهند. شکل بالا دوره اول و شکل پایین دوره دوم را نشان می دهد.

یکی از مؤلفه های مهم در آشکارسازی پرتو های کیهانی ، بازسازی جهت ورود این پرتو ها به جو زمین می باشد. در حالتی که ذره اولیه دارای انرژی بسیار بالا باشد این پارامتر می توانند منجر به تعیین منابع احتمالی تولید و انتشار پرتو های کیهانی گردد. به همین جهت و با بهره گیری از یک برنامه اختصاصی برای آرایه رادیویی دانشگاه سمنان توسعه داده شده است و با توجه به اختلاف زمانی پالس های دریافت شده توسط آنتن های مختلف و همچنین با در نظر گرفتن هندسه آرایه ، جهت زوایای سرسویی و سمتی رخداد های به ثبت رسیده نیز محاسبه شده است. شکل ۳ توزیع زوایای سرسویی رخداد های آشکارسازی شده را نشان می دهد. همان گونه که انتظار می رود و در آزمایش های دیگر نیز نشان داده شده است [٦]، در هر دو بازه مورد مطالعه ، تعداد رخداد های به ثبت رسیده در یک بازه مشخص بیشتر از سایر زوایا می باشد. البته در بازه زمانی دوم شاهد دو بیشینه ی حداکثری در نمودار هستیم که دلیل این امر در دست بررسی می باشد. با توجه به مکانیزم تولید سیگنال های رادیویی ناشی از ورود یک پرتو کیهانی به جو زمین ، انتظار می رود تا در جهت هایی خاص از زوایای سمتی نیز، تعداد بیشتری رخداد آشکارسازی گردد [٧].



شکل۲ : توزیع زمانی رخداد های ثبت شده در بازه زمانی ۱۸ روز ؛ شکل بالا دوره اول و شکل پایین دوره دوم داده گیری را نشان می دهند.

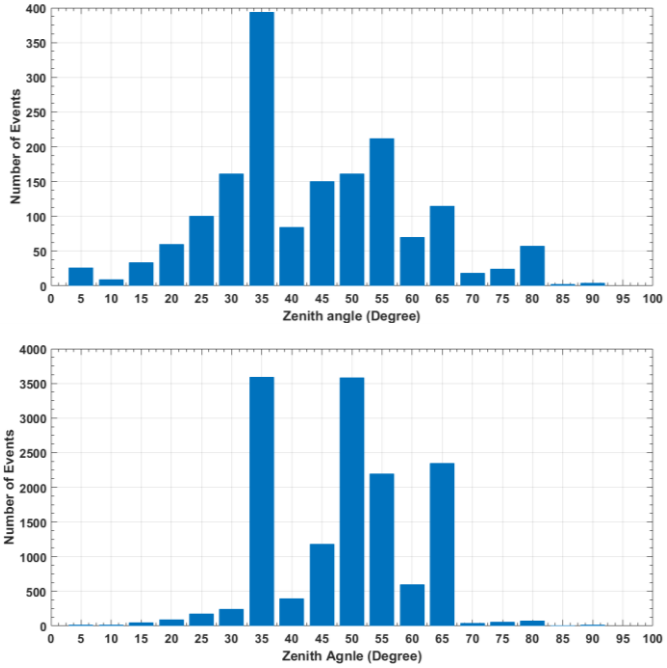
میدان مغناطیسی زمین به عنوان اصلی ترین مؤلفه در تولید و انتشار سیگنال های رادیویی از ذرات ثانویه موجود در یک بهمن گسترده هوایی نقش مهمی در این امر دارد.

جهت بردار این مؤلفه در محل آزمایش SURA-4 به صورت $\theta_b = 36^\circ$ و $\varphi_b = 176^\circ$ می باشد. بنابراین با در نظر گرفتن جهت این مؤلفه انتظار می رود که رخداد هایی با منشاء ژئومغانطیسی به طبع این پارامتر در جهت هایی خاص قادر باشند تا به صورت موثرتری در سیستم خودکار SURA-4 آشکارسازی شوند. این مورد به خوبی در شکل ٤ مشاهده می شود.

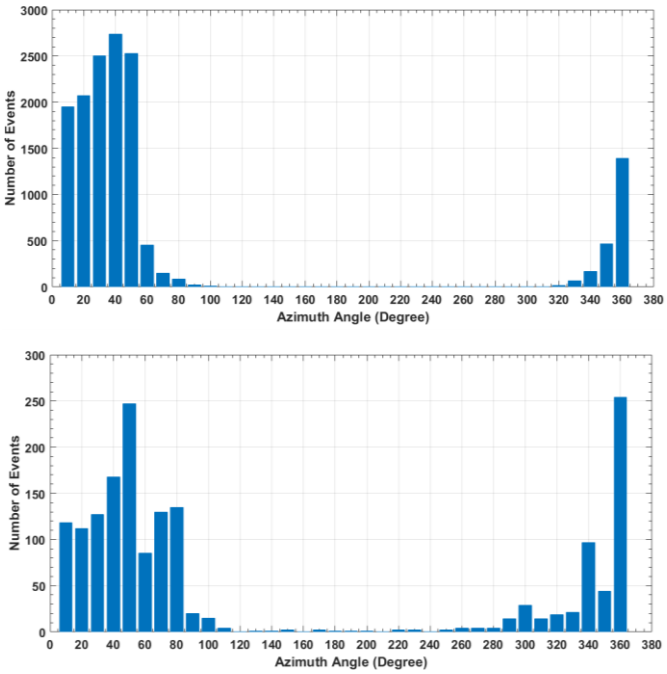
در هر دو بازه مورد مطالعه ، تعداد رخداد های ثبت شده که با زوایای سمتی کوچک و بسیار بزرگ به سیستم رسیده اند بسیار بیشتر از رخدادهایی است که تقریبا به صورت موازی با بردار میدان مغناطیسی زمین از سمت جنوب انتشار یافته اند. این مورد نیز در تطابق با نتایجی است که پیشتر نیز در آزمایشگاه های دیگر مشاهده شده است و خود نشانگر ماهیت رخداد های ثبت شده و تاثیر پذیری

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

سیگنال های رادیویی ناشی از یک بهمن گسترده هوایی به حضور و جهت گیری میدان مغناطیسی زمین است.



شکل۳ : توزیع زوایای سرسویی رخداد های ثبت شده در بازه زمانی ۱۸ روز ؛ شکل بالا دوره اول و شکل پایین دوره زمانی دوم داده گیری را نشان می دهند.



شکل٤ : توزیع زوایای سمتی رخداد های ثبت شده در بازه زمانی ۱۸ روز ؛ شکل بالا دوره اول و شکل پایین دوره زمانی دوم داده گیری را نشان می دهند.

نتیجه گیری

در این پژوهش نخستین دسته از رخداد هایی که به صورت کاملا خودکار توسط نمونه اولیه آرایه رادیویی دانشگاه سمنان ثبت شده بود مورد بررسی قرار گرفت. داده های حاصل، نتیجه فعالیت مستمر آرایه در یک بازه ۱۸ روزه می باشد که در نتیجه آن در مجموع تعداد ۱۸۵٤٤ رخداد در دو پنجره زمانی با شرایط اولیه متفاوت به ثبت رسیده است. در هر دو حالت نوساناتی در تعداد رخداد های ثبت شده در روز های مختلف مشاهده شده است که جمع بندی در خصوص دلایل آن نیازمند انجام بررسی های بیشتری است. به علاوه تعداد رخداد های ثبت شده در طول شب اندکی بیشتر از رویداد های به ثبت رسیده در طول روز می باشد. همچنین بررسی های انجام گرفته بر روی زوایای سمتی و سرسویی رویدادهای به ثبت رسیده نشان از منشاء ژئومغانطیسی رخدادهای ثبت شده دارد و در تطابق با نتایج مورد انتظار است.

مرجع ها

[1] Falcke, H., Gorham, P., Protheroe R. J.: “Prospects for radio detection of ultra-high energy cosmic rays and neutrinos. ” ***New Astronomy Reviews***. **48**, Issue 11-12, 1487 (2004)

[2] Bezyazeekov, P. A., et al.: “Reconstruction of cosmic ray air showers with Tunka-Rex data using template fitting of radio pulses. ” *Phys. Rev.* **D 97** , 122004 (2018)

[3] Rastegarzadeh, G., and M. Sabouhi. "SURA: Semnan University Radio Array." *Experimental Astronomy* 49.1 (2020): 21-41.

[4] Rastegarzadeh, Gohar; Sabouhi, Mohammad; Mostafavi, Maryam; Meghdadi, Hamid. SURA 4 ; “First prototype of Semnan University Radio Array” In: *Proceedings of Iranian Annual Physics Conference* , Tabriz , Iran, 2019, **P1289**.

[5] Sabouhi, Mohammad; Rastegarzadeh, Gohar; Meghdadi, Hamid; Mostafavi, Maryam. “An investigation of SURA-4 technical specifications” In: *Proceedings of Iranian Annual Physics Conference* , Tabriz , Iran, 2019, **P1316**.

[6] Apel, W. D., et al. “Lateral distribution of the radio signal in extensive air showers measured with LOPES. ” *Astroparticle Physics* **32.6** (2010): 294-303.

[7] Falcke, H., et al. “Detection and imaging of atmospheric radio flashes from cosmic ray air showers." *Nature* **435**.7040 (2005): 313.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

توابع توزیع پارتونی و تابع ساختار هستک‌های مقیّد در چارچوب مدل کوارکِ ولونِ تبادلی

محمّد راستی [۱]، مهران یادگاری [۱]

[۱] گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه رازی، کرمانشاه

چکیده

هدف از محاسبات حاضر ارائه‌ی مدلی برای محاسبه چگالی توزیع پارتون‌های درون هستک‌های(نوکلئون‌ها) هسته‌های سبک از جمله هسته‌ی هلیوم۳ و تریتیم است که محاسبه‌ی آن‌ها نسبت به استخراج توابع توزیع پارتونی درون هستک‌های آزاد به ویژه برای بررسی نسبت EMC دارای اهمیت است. مدل کوارک تبادلی هُدبوی-جَفی یکی از مدل‌های اولیه برای محاسبه توابع ساختار هستک‌های مقیّد است که البته به صورت فراوان برای محاسبه‌ی توابع توزیع پارتونی هسته‌ای مورد استفاده قرار گرفته است. برای اینکه کوارک‌های دریا و گلئون‌ها در این مدل در نظر گرفته شوند از مدل ولون استفاده شده است. در فرمول‌بندی مدل ولون توزیع پارتون‌های متفاوت درونِ کوارک‌های سازنده که خود دارای ساختار هستند، به کمک برازش با داده‌های تجربی در دسترس با دقت بالا استخراج می‌شوند. در این مقاله-کنفرانس با استفاده از مدل کوارکِ ولون، چگالی پارتون‌های متفاوت درون هستک مقیّد درون هسته‌های سبک مانند هلیوم ۳ و تریتیم محاسبه شده و سپس با استفاده از توابع توزیع پارتون‌ها، تابع ساختار هستک‌های مقیّد محاسبه می‌شوند.

واژه های کلیدی: توابع توزیع پارتونی، مدل کوارک تبادلی، مدل کوارک ولون، تابع ساختار هستک مقیّد.

Parton density and bound nucleon structure function in the valon quark exchange model

Rasti, Mohammad[1], Yadegari, Mehran[1]

[1] *Department of Physics, Razi University, Kermanshah*

Abstract

In the present calculation, to obtain the bounded parton distribution function a model has been presented. The quark-exchange formalism model which had been presented by Hoodboy and Jaffe several year ago considered to obtain the distribution of the valon quarks inside the bounded nucleon. On the other hand, the valon model which suggested by Hwa to explain the structure function of the hadrons, are applied to calculate the partonic distributions inside the valons itself. In the valon model, it assumes that the nucleons are consist of three valons, where each valon contains a valence quark of the same flavor as the valon itself and a sea of the partons like, quark-antiquarks pairs and gluons. has its own structure function that obtained from next-to-leading order calculations. The combing model which we call the valon-quark exchange model, have been used to extract the different parton distributions inside the nucleus targets. Finally, by using the obtained densities, the structure functions of the bounded nucleons are calculated.

***Keywords**: parton distribution function, quark exchange model, valon quark model, bounded nucleon structure*
PACS No. 3.10.21

مقدمه

بررسی توابع ساختار هستک‌های مقیّد به دلیل اهمیتی که از آن می‌توان به مطالعه اثر EMC پرداخت دارای اهمیت زیادی است. این بررسی وقتی بیشتر مهم شد که در آزمایش اُبرت و همکارانش در سِرن دیده شد که در آزمایش‌های پراکندگی برای هسته‌های سنگین، وقتی هدف هسته‌ای به جای دوترون به هسته‌های سنگین‌تر مانند آهن تعویض شود، نسبت توابع ساختار نوکلئون‌های مقیّد به نوکلئون‌های آزاد فرق دارد و به پارامتر x بیورکن که معیاری از میزان تکانه حمل شده توسط پارتون‌ها است، بستگی دارد. این اثر به افتخار گروه همکاری موئون به صورت مخفف به اثر EMC معروف شد [۱]. با نگاه کردن به نتایج این بررسی‌ها می‌توان دید که نوکلئون‌های مقیّد درون هسته‌ها دارای ویژگی‌های متفاوت‌تری نسبت به نوکلئون‌های آزاد هستند به گونه‌ای که نسبت این دو تابع ساختار در گستره‌ی x تغییر کرده و از مقدار یک انحراف دارد. در

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مطالعه‌ی هسته‌ها می‌دانیم که آن‌ها از اجزای فرمیونی تشکیل شده‌اند و بنابراین تابعِ موج چنین هسته‌هایی که از پارتون‌های فرمیونی تشکیل شده است باید پادمتقارن باشد. ایده‌ی اصلی هُدبوی و جفی این بود که در اثر مبادله شدن کوارک‌های نوکلئون‌های مقیّد دورن هسته‌ها، سهم تبادلِ کوارکی برای هستک‌های مقیّد اندرون هسته به تغییر در توزیع تکانه کوارک‌های ظرفیّت منجر شده و این امر هم به نوبه خود در نسبت EMC تاثیر دارد [۲]. درهیافت اولیه‌ی مدل تبادل کوارکی هُدبوی و جَفی سهم‌های مربوط به کوارک‌های دریا و همچنین سهم گلئون‌ها حذف شده بود که در واقع دلیل آن پیچیده شدن فرمول‌بندی تبادل کوارکی است. در این مقاله-کنفرانس سعی بر آن است که به منظور در نظر گرفتن سهم چنین درجه‌های آزادی جدید و بنابراین تعمیم دادن فرمول‌بندی مدل کوارک تبادلی از مدل کوارکِ ولون هُووا استفاده کرد [۳]. با در نظر گرفتن مدل تبادل کوارکی به همراه فرمول‌بندی رهیافت کوارکِ سازنده‌ی ولون، علاوه بر اینکه هر نوکلئون از سه کوارک سازنده‌یِ دارای ساختار شکل گرفته، خود این کوارک‌های سازنده هم، به عنوان موجوداتی دارای ساختار در نظر گرفته می‌شوند. اندرونه‌ی این ولون‌ها شامل یک کوارک ظرفیّت از نوع خودِ کوارک ولون و کوارک‌ها و پادکوارک-های دیگر و همچنین گلئون‌ها است. از این رو برای این کوارک‌های ولون درون هادرون‌ها هم توابع ساختار معرفی کرده که این توابع براساس رهیافت کرومودینامیک کوانتومی (QCD) و مدل پارتون-کوارک در چارچوب کرومودینامیک کوانتومی مورد مطالعه قرار گرفته و شکل دقیق تابعی آنها از حل معادله‌های جفت‌شده‌ی دِگلپ (DGLAP) در فضای ملین و به کمک داده‌های تجربی، پارامترهای به کار رفته در مدل استخراج می‌شوند.

مدل کوارکِ ولونِ هووا

تابع توزیع ولون اندرون هسته‌ها را با تابع $G_{valon/N}(y)$ نشان داده و همچنین $F^N(x,Q^2)$ به عنوان تابع ساختار هستک‌ها در نظر گرفته می‌شود. تابع ساختار این کوارک‌های ولون با $\psi_{p/valon}(z,Q^2)$ نشان مشخص می‌شود. این توابع تعیین‌کننده‌ی تعداد پارتون‌های نقطه‌ای نوع p درون کوارکِ ولون نوع U یا D است که کسر z از تکانه کل کوارکِ ولون را در مقیاس تکانه انتقالی معین Q^2 با خود حمل می‌کنند. این توابع $\psi_{p/valon}(z,Q^2)$ را تابع ساختار کوارکِ ولون می‌نامند. این دو تابع ساختار، یعنی تابع ساختار کوارک‌های ولونِ اندرون هستک، $G_{valon/N}(y)$ ، و تابع ساختار خودِ ولون‌ها، $\psi_{p/valon}(z,Q^2)$، را می‌توان به کمک نظریه انتگرال پیچش به همدیگر مرتبط نمود:

$$q(x,Q^2)=\int_x^1\frac{dz}{z}\left[\psi_{p/U-valon}(z,Q^2)G_{U-valon/N}(y)+\psi_{p/D-valon}(z,Q^2)G_{D-valon/N}(y)\right] \quad (۱)$$

در این معادله q معرف پارتون‌های نقطه ای مختلف درون هادرون h در مقیاس Q^2 است. توابع توزیع ولون‌ها به کمک نتایج پایین‌ترین مرتبه‌ی محاسبات توصیف به دست می‌آیندو همچنین گشتاورهای آن به صورت کامل برحسب پارامتر تحول $S=\ln[\ln(Q^2/\Lambda^2)/\ln(Q_0^2/\Lambda^2)]$ قابل بسط است. این توابع توزیع پارتونی ناقطبیده در مدل ولون یعنی $\psi_{p/valon}(z,Q^2)$، از حل معادله‌های دِگلپ با شرایط اولیه‌ی مناسب به‌دست می‌آیند. پارتون‌های متفاوت به صورت عناصر تشکیل‌دهنده‌ی کوارک‌های سازنده در نظر گرفته می‌شوند و از این رو می‌توان برای کوارکِ سازنده‌ی نوع بالا و نوع پایین، تابع ساختار آن را به صورت زیر نوشت:

$$F_2^U(z,Q^2)=\frac{4}{9}z\left(\psi_{u/U}+\psi_{\bar{u}/U}\right)+\frac{1}{9}z\left(\psi_{d/U}+\psi_{\bar{d}/U}+\psi_{s/U}+\psi_{\bar{s}/U}\right) \quad (۲)$$

که همه‌ی توابع در سمت راست در واقع بیان‌گر توابع احتمال برای کوارک‌ها هستند که کسر تکانه z از تکانه کوارک‌های سازنده را حمل می‌کنند.در فضای گشتاورها یا همان فضای ملین، تبدیل ملین این توابع توزیع به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$M_i(n,Q^2)=\int_0^1 x^{n-1}\psi_i(x,Q^2)\,dx \quad (۳)$$

معادله‌های دِگلپ در فضای گشتاورهای ملین با عبارت‌هایی به صورت زیر نوشته می‌شوند [۴]:

$$M_{NS}(n,Q^2)=1+\frac{\alpha_s(Q^2)-\alpha_s(Q_0^2)}{2\pi}\left(\frac{-2}{\beta_0}\right)\left(P_{NS}^{(1)}(n)-\frac{\beta_1}{\beta_0}P_{qq}^{(0)}(n)\right)L^{\frac{-2}{\beta_0}P_{qq}^{(0)}(n)}M_{NS}(n,Q_0^2)$$

$$\begin{pmatrix}M_N(n,Q^2)\\M_g(n,Q^2)\end{pmatrix}=L^{\frac{-2}{\beta_0}P_{qq}^{(0)}(n)}+\frac{\alpha_s(Q^2)}{2\pi}\hat{U}L^{\frac{-2}{\beta_0}P_{qq}^{(0)}(n)}-\frac{\alpha_s(Q_0^2)}{2\pi}L^{\frac{-2}{\beta_0}P_{qq}^{(0)}(n)}\hat{U}\begin{pmatrix}M_N(n,Q_0^2)\\M_g(n,Q_0^2)\end{pmatrix} \quad (5)$$

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

که مقادیر پارامترهای این رابطه در مرجع [۴] داده شده است. در این رابطه‌ها $q_{NS}=q-\bar{q}$ به عنوان توابع توزیع کوارک‌ها نایکتا و برای توزیع کوارک‌های ظرفیتی است و همچنین توزیع کوارک‌های یکتا به صورت $q_S=\Sigma_q q+\bar{q}$ تعریف می‌شود که در آن بجز توزیع کوارک‌های ظرفیتی در آن توزیع کوارک‌های دریا هم گنجانده شده است. بنابراین گشتاورهای توزیع کوارک‌های ظرفیت و کوارک‌های دریا درون کوارک‌های سازنده از گشتاورهای مربوط به توزیع‌های یکتا و نایکتا به صورت زیر به دست می‌آید:

$$M_{valence/CQ}(n,Q^2)=M_{NS}(n,Q^2) \qquad (۶)$$

$$M_{sea/CQ}(n,Q^2)=1/2f\big(M_S(n,Q^2)-M_{NS}(n,Q^2)\big) \qquad (۷)$$

که در آن f معرف تعداد طعم کوارک‌های فعال است. از این رو به کمک حل معادلات دِگلپ در فضای ملین می‌توان به توزیع گشتاورهای توزیع‌های یکتا و نایکتا $M_{NS}(n,Q^2)$ و $M_N(n,Q^2)$ در هر Q^2 دسترسی داشت. به کمک تبدیل ملین وارون و به‌کاربردن فُرم توزیع‌های استاندارد زیر برای توزیع کوارک‌های ظرفیت، دریا و گلئون، چگالی پارتون‌ها درون کوارک‌های سازنده استخراج می‌شود:

$$z\psi_{val/valon}(z,Q^2)=az^b\,(1-z)^c$$

$$z\psi_{sea/valon}(z,Q^2)=\alpha z^{\beta}\,(1-z)^{\gamma}\,(1+\eta z+\xi z^{0.5})^{\lambda} \qquad (۸)$$

پارامترهای داده شده در این توزیع‌ها تابعی از مقیاس انرژی Q^2 هستند. برای توزیع گلئونی درون کوارک‌های سازنده هم معادله‌ای به فرم توزیع‌های دریا در نظر گرفته می‌شود. این پارامترها در مرجع [۴] داده شده‌اند. در این مدل مقادیر مربوط به ثابت‌ها به صورت $Q_0^2=0.283\ GeV^2$ و $\Lambda_{QCD}^2=0.22\ GeV^2$ هستند. با داشتن این توابع توزیع و همچنین توابع کوارک‌های ولون اندرون هستک‌های مقیّد یعنی، $G_{U/N}(y)$ و $G_{D/N}(y)$ که از مدل کوارک تبادلی هُدبوی محاسبه شده‌اند می‌توان به تابع توزیع پارتون‌های مختلف درون هستک‌ها و همچنین توابع ساختار هستک‌ها دست یافت.

مدل کوارکِ تبادلی هُدبوی و جَفی

در این مدل حالت هسته‌ی سه هستکی با استفاده از عملگرخلق هستک که روی خلاء اثر می‌کند، تولید می‌شوند [۲]:

$$|A_i=3\rangle=(3!)^{-\frac{1}{2}}\chi^{\alpha_1\alpha_2\alpha_3}\mathcal{N}^{\alpha_1\dagger}\mathcal{N}^{\alpha_2\dagger}\mathcal{N}^{\alpha_3\dagger}|0\rangle \qquad (۹)$$

که در آن $\chi^{\alpha_1\alpha_2\alpha_3}$ تابع موج هسته‌ای کاملا پادمتقارن هسته‌ای است. توزیع تکانه برای کوارک‌ها به صورت زیر است:

$$\rho_{\overline{\mu}}(\vec{k};A_i=3)=\frac{\langle A_i=3|q_{\overline{\mu}}^{\dagger}q_{\overline{\mu}}|A_i=3\rangle}{\langle A_i=3|A_i=3\rangle} \qquad (۱۰)$$

ازحل این معادله چگالی توزیع کوارک‌هایِ ولون سازنده‌ی نوع بالا، $\boldsymbol{U}$ ، و نوع پائین، $\boldsymbol{D}$ ، اندرون نوکلئون‌های مقیّد در چارچوب مدل کوارکِ تبادلی هُدبوی و جَفی به صورت هستند [۵]:

$$\rho^{CQ=U}(k)=\Big[2A(k)+\frac{2}{9}B(k)-\frac{16}{27}C(k)+\frac{28}{27}D(k)\Big]\Big[1+\frac{9}{8}I\Big]^{-1} \qquad (۱۱)$$

$$\rho^{CQ=D}(k)=\Big[A(k)+\frac{1}{9}B(k)-\frac{20}{27}C(k)+\frac{26}{27}D(k)\Big]\Big[1+\frac{9}{8}I\Big]^{-1} \qquad (۱۲)$$

که عبارت‌های $\boldsymbol{A(k)}$ و $\boldsymbol{B(k)}$ و $\boldsymbol{C(k)}$ و $\boldsymbol{D(k)}$ و $\boldsymbol{\varepsilon}$ در مرجع [۵] داده شده‌اند. به کمک این توزیع تکانه‌ها توابع توزیع کوارک‌های سازنده‌یِ اندرون هستک‌هایِ مقیّد به صورت زیر محاسبه می‌شوند:

$$G_{\frac{CQ}{N}}(x,Q_0^2;A_i)=2\pi M\int_{k_{min}^{CQ}}^{\infty}\rho^{CQ}(k;A_i)kdk, \qquad (۱۳)$$

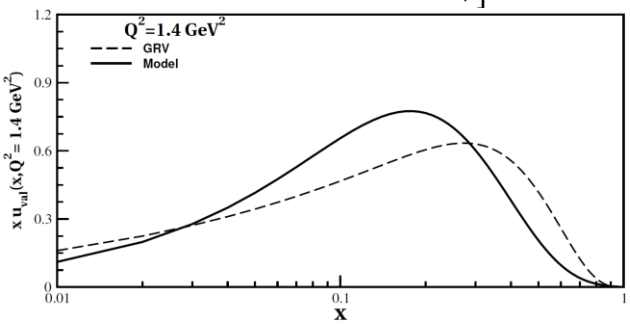
$$k_{min}^{CQ}(x)=\frac{(xM+\varepsilon_0^{CQ})^2-m_{CQ}^2}{2\left(xM+\varepsilon_0^{CQ}\right)} \qquad (۱۴)$$

که در آن m_{CQ} و ε_o^{CQ} به ترتیب بیان‌گر جرم و انرژی بستگی کوارکِ سازنده و M هم جرم نوکلئون مقیّد است.

نتایج محاسبات برای توزیع‌های پارتونی و تابع ساختار هستک‌ها:

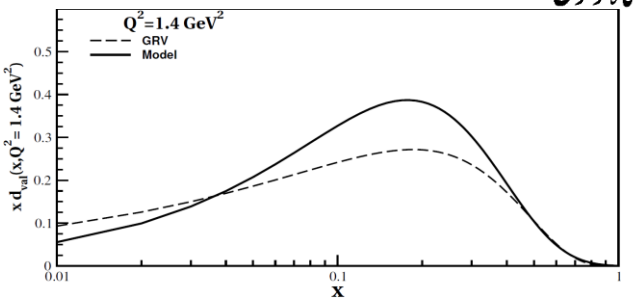
تابع ساختار هستک‌های مقیّد به صورت زیر نوشته می‌شود [۵] :

$$F_2^N(x,Q^2)=x\sum_{a=u,d,s}Q_a^2\Big[\Big(q_j^a(x,Q^2;A_i=3)+\overline{q}_j^a(x,Q^2;A_i=3)\Big)+\frac{\alpha_s(Q^2)}{2\pi}\Big(q_j^a(x,Q^2;A_i=3)+\overline{q}_j^a(x,Q^2;A_i=3)+2g_j^a(x,Q^2;A_i=3)\Big)\Big] \qquad (۱۵)$$

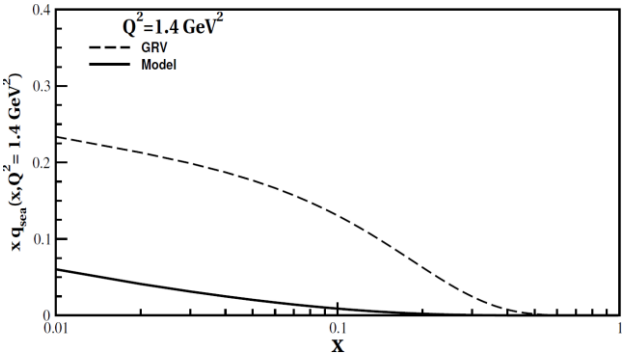


شکل ۱: توزیع کوارک‌های ظرفیتِ بالا در هستک مقیّد درون هسته هلیوم۳ .

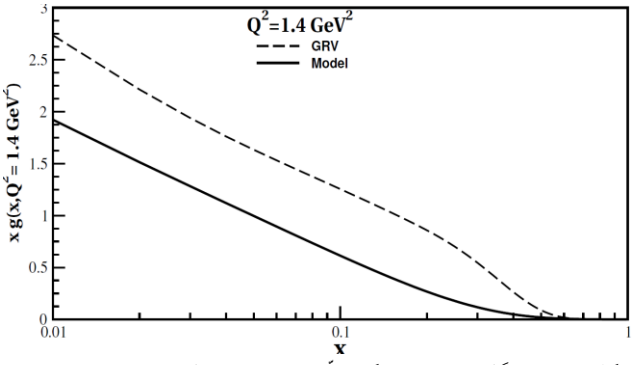
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



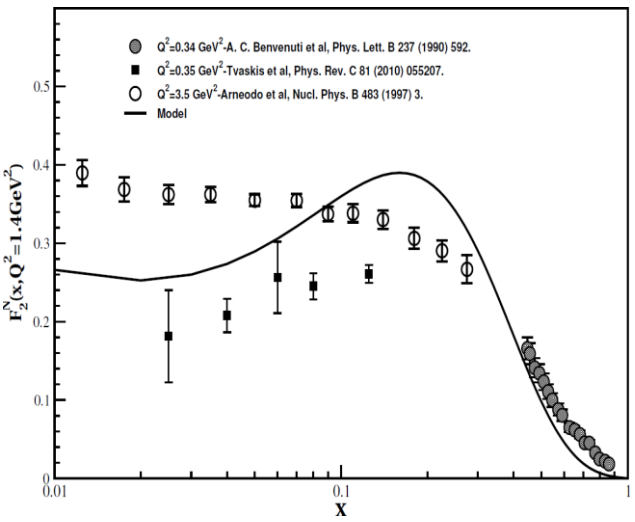
شکل ۲: توزیع کوارک‌های ظرفیتِ پایین در هستک مقیّد درون هسته هلیوم۳.



شکل ۳: توزیع کوارک‌های دریا در هستک مقیّد درون هسته هلیوم۳ .



شکل ۴: توزیع گلئون‌ها در هستک مقیّد درون هسته هلیوم۳.



شکل۵: تابع ساختار هستک مقیّد درون هسته‌ی هلیوم۳ که با داده‌ها تجربی در دسترس مقایسه شده‌اند.

در شکل‌های ۱ تا ۴ توابع توزیع پارتون‌های متفاوت درون هستکِ مقیّدِ هسته‌ی هلیوم۳ در $Q^2 = 1.4\ GeV^2$ نشان داده شده‌اند که با توزیع‌های هستکِ آزاد مربوط به گروه جی.آر.وی (GRV) در همین مقیاس انرژی مقایسه شده‌اند. باید خاطر نشان کرد که دلیل تفاوت در توزیع‌ها این است که، توزیع‌های محاسبه‌شده در مدل پدیده‌شناسانه برای هستک‌های مقیّد هستند در حالی‌که توزیع‌های گروه جی.آر.وی برای نوکلئون‌های آزاد هستند و باید هم متفاوت باشند. در شکل ۵ تابع ساختار هستکِ مقیّد در همین مقیاس انرژی ترسیم شده است و با داده‌های تجربی در دسترس مقایسه شده‌اند. مشاهده می‌شود که مدل کوارک تبادلی در چارچوب رهیافت مدل کوارک سازنده می‌تواند به خوبی تابع ساختار هستک‌های مقیّد را توضیح داده و بنابراین می‌توان از آن به عنوان یک مدل قابل اعتماد در محاسبه‌های مربوط به توابع توزیع هسته‌ای استفاده کرد.

نتیجه گیری

همان‌طور که بیان شد در مدل تبادلی، سهم کوارک‌های دریا و گلئون‌ها در محاسبه‌ها وارد نشده بود. در این مقاله با استفاده از مدل کوارکِ سازنده‌ی ولونِ هُووا که برای خودِ کوارکِ سازنده‌ی درون هستک‌ها ساختار در نظر گرفته می‌شود، این نقص برطرف شد و توزیع کوارک‌های نقطه‌ای ظرفیّت بالا و پائین و کوارک‌های نقطه‌ای دریا و گلئون‌های نقطه‌ای و هم‌چنین تابع ساختار هستک‌های مقیّد محاسبه شدند.

مرجع‌ها:

[1] J. J. Aubert, et al., *Phys. Lett. B* **105**, 403 (1983).
[2] P. Hoodbhoy, R. L. Jaffe, *Phys. Rev. D* **35**, 113 (1987).
[3] R. C. Hwa and M. S. Zahir, *Phys. Rev. D* **23**, 2539 (1981).
[4] F. Arash and A. N. Khoramian, *Phys. Rev. C* **63**, 045201 (2003).
[5] M. Modarres and F. Zolfagharpour, *Nucl. Phys. A* **765**, 112 (2006).

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مقاله نامه کنفرانس فیزیک ایران ۱-۴شهریورماه ۱۳۹۹، دانشگاه رازی، کرمانشاه

توزیع‌های پارتونی و تابع ساختار هستک‌های مقیّد درون هسته هلیوم ۴ در فرمول‌بندی مدل کوارکِ کایرالِ تبادلی

راستی، محمّد [۱]؛ بس‌خواسته، ساناز [۱]

[۱] گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه رازی، کرمانشاه

چکیده

محاسبه تابع ساختار هسته‌های سبک به دلیل اینکه باید در گام اوّل تابع توزیع کوارک‌های درون هستک‌های مقیّد محاسبه شوند دارای دشواری‌های خاص و بیشتری نسبت به توابع ساختار هستک‌های آزاد هستند. در تحقیق پیش‌رو این محاسبه‌ها برای هستک‌های هسته هلیوم ۴ مورد مطالعه قرار گرفته است. برای به دست آوردن توابع ساختار هستک‌های مقیّد مدل کوارک تبادلی هُدبوی-جَفی مورد استفاده قرار گرفته و برای محاسبه‌ی توابع توزیع کوارک‌های دریا و توزیع‌های گلئونی از مدل پدیده‌شناسانه‌ی کوارکِ کایرال منوهار-جورجی استفاده شده که در آن هستک‌ها به صورت سامانه‌ی مقیّدی از کوارک‌های برهنه پنداشته می‌شوند که خودِ این کوارک‌ها توسط ابری از بوزون‌های گلدستون و گلئون‌ها پوشیده شده‌اند. بنابراین از مدل کوارک کایرال ، چگالی پارتون‌های متفاوت درون پروتون و توزیع کوارک‌های شگفت و پادشگفت و همچنین توزیع گلئون‌ها برای $Q_0^2=0.34GeV^2$ استخراج شده و سپس با استفاده از این چگالی‌ها توابع ساختار هستک‌های مقیّد درون هسته‌ی هلیوم۴ محاسبه شده‌اند.

واژه های کلیدی: توابع توزیع پارتونی، تابع ساختار هستکِ مقیّد، مدل کوارک تبادلی، مدل کوارک کایرال تعمیم‌یافته.

The structure function of bounded nucleon in Helium 4 nucleus by using the modified chiral quark-exchange model

Rasti, Mohammad[1], Baskhasteh, Sanaz[1]
[1] *Department of Physics, Razi University, Kermanshah*

Abstract

In order to study the bounded nucleon structure function, it is essential that the model should have been proposed to extract the momentum densities of the partons inside the bounded nucleons in which the nuclear correction effects have been considered. The structure functions of the free nucleons frequently calculated and also available through the theoretical calculations as well as from the experimental data. In the present paper, the quark exchange model in the context of the modified chiral quark model formalism have been used to extract the various parton distribution functions inside the helium 4 as well as by using these densities the structure function of the bounded proton and neutron which are inside the helium 4 have been obtained.

***Keywords**: parton distribution function, bounced nucleon structure function, quark exchange model, modified chiral quark model*

PACS No. 3.10.21

مقدمه

توابع توزیع هسته‌ای در بررسی‌های زیادی و در چارچوب‌های نظری متعددی همانند مدل خوشه‌ای، مدل فزونی پیونی، مدل بازمقیاس‌بندی X، مدل سایه‌افکنی و پادسایه‌افکنی و مدل کوارک تبادلی مورد مطالعه قرار گرفته‌اند. در بررسی پیش‌رو از بین مدل‌های یاد شده، از مدل کوارک تبادلی استفاده شده است که این مدل در بررسی‌ها و کارهای فراوانی مورد استفاده قرار گرفته است [۱]. ایده‌ی اصلی هُدبوی و جفی برای مطالعه‌ی هسته‌ها این بود که هسته‌ها از اجزای فرمیونی تشکیل شده‌اند از این رو تابعِ موج چنین سامانه‌هایی باید بر اساس این پارتون‌های تشکیل دهنده‌ی آن، پادمتقارن باشد. بنابراین می‌توان دید که در اثر مبادله شدن کوارک‌های

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

نوکلئون‌های مقیّد دورن هسته‌ها، سهم تبادل کوارکی برای نوکلئون-های مقیّد اندرون هسته به تغییر در توزیع تکانه کوارک‌های ظرفیّت منجر شده و این امر هم به نوبه خود باعث تاثیر در نسبت ای.ام.سی (EMC) می‌شود [۲].فرض اساسی مدل این است که کوارک‌های ظرفیّت بین نوکلئون‌های مقیّد و اندرون هسته‌ها مبادله شده و بنابراین می‌توان تابع ساختار کوارکی چنین هسته‌هایی را بر حسب این کوارک‌های مبادله شده محاسبه کرده و همچنین چگالی توزیع تکانه کوارک‌ها برای سامانه‌های چند نوکلئونی قابل محاسبه باشد. امّا در مدل تبادل کوارکی برای اینکه محاسبه‌ها ساده‌تر شود از سهم کوارک‌های دریا (جفت‌های کوارک-پادکوارک) و همچنین سهم گلئون‌ها صرف‌نظر شده بود. بنابراین برای وارد نمودن سهم کوارک-های دریا و گلئون به محاسبات کوارک تبادلی از مدل کوارک کایرال استفاده شده است که هستک‌ها را به صورت حالت مقیّدی از کوارک‌های برهنه در نظر می‌گیرد که توسط ابرهایی از بوزون‌های گلدستون و همچنین ابرهای گلئونی در برگرفته شده و حالتی پوششی برای آن ایجاد شده است [۳].

مدل کوارک کایرال تعمیم‌یافته

در بررسی دو نوع برهم‌کنش مؤثر کوارک- مزون و کوارک-گلئون سهم گلئون‌ها و بوزون‌های گلدستون در تابع توزیع پارتون به صورت انتگرال پیچش از تابع توزیع کوارک برهنه $q_{0.i}$ به‌صورت زیر داده می‌شود [۴]:

$$q_j(x) = P \otimes q_{0.i} = \int_x^1 \frac{dy}{y} P_{j\beta/i}(y) q_{0.i}\left(\frac{x}{y}\right) \quad (۱)$$

$$q_j(x) = \int_x^1 \frac{dy}{y} P_{jg/i}(y)\, q_{0.i}\left(\frac{x}{y}\right) \quad (۲)$$

برای محاسبه‌ی $q_{0.i}\left(\frac{x}{y}\right)$ باید از مدل کوارک تبادلی استفاده کنیم. توابع انشعاب کوارک‌های ظرفیت با رابطه زیر تعریف می‌شوند:

$$P_{j\beta/i}(y) = \frac{1}{8\pi^2} \int \left(\frac{g_A \bar{m}}{f}\right)^2 \frac{(m_j - m_i y)^2 + k_\perp^2}{y^2(1-y)\left(m_i^2 - M_{j\beta}^2\right)^2} dk_\perp^2 \quad (۳)$$

و تابع انشعاب گلئون با رابطه زیر:

$$P_{gj/i}(y) = \quad (۴)$$

$$\int C_f \frac{\alpha_s(Q^2)}{4\pi^2} \frac{1}{y(1-y)} G_{gj/i}^2 \frac{\left((1-y)m_i - m_j\right)^2 + k_\perp^2}{(1-y)\left(m_i^2 - M_{j\beta}^2\right)^2} dk_\perp^2$$

همچنین در صورتی که تکانه انتقالی فوتون مجازی خیلی بزرگ باشد مزون تولیدی دوباره تبدیل به یک جفت کوارک-پادکوارک شده و در نتیجه تابع توزیع کوارک q_k در هستک به صورت رابطه‌ی زیر نوشته می‌شود [۴]:

$$q_k(x) = V \otimes p \otimes q_0 = \int \frac{dy_1}{y_1}\frac{dy_2}{y_2} V_{k/\beta}\left(\frac{x}{y_1}\right) P_{\beta j/i}\left(\frac{y_1}{y_2}\right) q_{0.i}(y_2) \quad (۵)$$

به همین ترتیب برای گلئون نیز، تابع توزیع q_k به صورت زیر به‌دست می‌آید:

$$q_k(x) = \int \frac{dy_1}{y_1}\frac{dy_2}{y_2} \mathcal{P}_{kg}\left(\frac{x}{y_1}\right) P_{gj/i}\left(\frac{y_1}{y_2}\right) q_{0.i}(y_2) \quad (۶)$$

که $\mathcal{P}_{kg}$ احتمال تولید جفت کوارک-پادکوارک ازگلئون است و به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\mathcal{P}_{kg}\left(\frac{x}{y1}\right) = \frac{1}{2}\left[\left(\frac{x}{y1}\right)^2 + \left(1 - \frac{x}{y1}\right)^2\right]. \quad (۷)$$

که در این روابط $V_{k/\beta}$ تابع توزیع کوارک ظرفیت در مزون β است و مقادیرشان به صورت روابط زیرمی‌باشد:

$$V_{u/\pi^+} = 0.9535 + 0.2664x - 0.2074x^2 - 0.1046x^3 - 0.190x^4 + 0.0400x^5 - 0.0133x^6 \quad (۸)$$

$$V_{u/k^+} = 1.1039 + 1.8071x - 1.0739x^2 - 16.2227x^3 + 33.1781x^4 - 25.5372x^5 + 7.187x^6 \quad (۹)$$

$$V_{\bar{s}/k^+} = 0.4425 + 0.8593x + 1.7623x^2 - 4.8611x^3 + 13.229x^4 - 17.585x^5 + 7.1872x^6 \quad (۱۰)$$

در نهایت توابع توزیع کوارک در هستک، در مدل کوارک کایرال تعمیم‌یافته به فرم زیر نوشته می‌شود:

$$u(x) = \mathcal{Z}_u\, u_0(x) + P_{u\pi^+/d} \otimes d_0 + V_{u/\pi^+} \otimes P_{\pi^+ d/u} \otimes u_0 + \frac{1}{2} P_{u\pi^0/u} \otimes u_0 + V_{u/k^+} \otimes P_{k^+ s/u} \otimes u_0 \quad (۱۱)$$

$$d(x) = \mathcal{Z}_d\, d_0(x) + P_{d\pi^+/d} \otimes u_0 + V_{d/\pi^-} \otimes P_{\pi^- u/d} \otimes d_0 + \frac{1}{2} P_{d\pi^0/d} \otimes d_0 + V_{d/k^0} \otimes P_{k^0 s/d} \otimes d_0 + \frac{1}{4} V_{d/\pi^0} \otimes \left(P_{\pi^0 u/u} \otimes u_0 + P_{\pi^+ d/d} \otimes d_0\right) + P_{dg/d} \otimes d_0 + \frac{1}{3} \mathcal{P}_{dg} \otimes (P_{gu/u} \otimes u_0 + P_{gd/d} \otimes d_0) \quad (۱۲)$$

$$s(x) = P_{sk^+/u} \otimes u_0 + P_{k^0 s/d} \otimes d_0 + \frac{1}{3} \mathcal{P}_{sg} \otimes (P_{gu/u} \otimes u_0 + P_{gd/d} \otimes d_0) \quad (۱۳)$$

و برای پادکوارک‌ها هم می‌توان روابط زیر را نوشت:

$$\bar{u}(x) = V_{\bar{u}/\pi^-} \otimes P_{\pi^- u/d} \otimes d_0 + \frac{1}{4} V_{\bar{u}/\pi^0} \otimes \left(P_{\pi^0 u/u} \otimes u_0 + P_{\pi^0 d/d} \otimes d_0\right) + \frac{1}{3} \mathcal{P}_{\bar{u}g} \otimes (P_{gu/u} \otimes u_0 + P_{gd/d} \otimes d_0) \quad (۱۴)$$

$$\bar{d}(x) = V_{\bar{d}/\pi^+} \otimes P_{\pi^+ d/u} \otimes u_0 + \frac{1}{4} V_{\bar{d}/\pi^0} \otimes \left(P_{\pi^0 u/u} \otimes u_0 + P_{\pi^0 d/d} \otimes d_0\right) + \frac{1}{3} \mathcal{P}_{\bar{d}g} \otimes (P_{gu/u} \otimes u_0 + P_{gd/d} \otimes d_0) \quad (۱۵)$$

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

$$\bar{s}(x) = V_{\bar{s}/k^+} \otimes P_{k^+s/u} \otimes u_0 + V_{\bar{s}/k^0} \otimes P_{k^0s/d} \otimes d_0 + \frac{1}{3}\mathcal{P}_{\bar{s}g} \otimes (P_{gu/u} \otimes u_0 + P_{gd/d} \otimes d_0) \quad (۱۶)$$

و همچنین توزیع گلئون توسط رابطه زیر محاسبه می‌شود:

$$g(x) = P_{ug/u} \otimes u_0 + P_{dg/d} \otimes d_0 \quad (۱۷)$$

مدل کوارکِ تبادلی هُدبوی و جَفی برای هسته‌ی هلیوم۴

فرض ما بر این است که حالت کوانتومی یک هستک از سه کوارک سازنده و برهنه به صورت زیر ساخته شده است [۵]:

$$|\alpha> = N^{\alpha^\dagger}|0> = \frac{1}{\sqrt{3!}} N^{\alpha}_{\mu_1\mu_2\mu_3} q^\dagger_{\mu_1} q^\dagger_{\mu_2} q^\dagger_{\mu_3}|0\rangle \quad (۱۸)$$

در این رابطه شاخص α (μ_i) توصیف‌کننده‌ی حالت هستک (کوارک) یعنی $\{\vec{P}, M_s, M_T\}$، $\{\vec{k}, m_s, m_t, c\}$ و $M_T(m_t)=+\frac{1}{2}$ برای پروتون(کوارک بالا) و $M_T(m_t)=-\frac{1}{2}$ برای نوترون(کوارک پایین) است.همچنین در این رابطه $q^\dagger_\mu\left(N^{\alpha^\dagger}\right)$ نیز معرف عملگرهای خلق برای کوارک‌ها (نوکلئون‌ها) با حالت یا شاخص μ(α) است.

$N^{\alpha}_{\mu_1,\mu_2,\mu_3}$ تابع موج نوکلئون کاملاً پادمتقارن است و به‌صورت زیر تعریف می‌شود:

$$N^{\alpha}_{\mu_1\mu_2\mu_3} = D(\mu_1,\mu_2,\mu_3;\alpha_i) \times \delta(\vec{k_1}+\vec{k_2}+\vec{k_3}-\vec{P})\varphi(\vec{k_1},\vec{k_2},\vec{k_3},\vec{P}) \quad (۱۹)$$

در اینجا تابع موج نوکلئون $\phi(\vec{k_1},\vec{k_2},\vec{k_3},\vec{P})$ برای کوارک ظرفیت است و به صورت تقریب گاوسی در نظر گرفته می‌شود. در این مدل حالت هسته‌ی هلیوم۴ را به کمک عملگرهای خلق هستک‌ها می‌توان به صورت زیر نوشت [۵]:

$$|A_i = 4 \geq \frac{1}{\sqrt{4!}} \chi^{\alpha_1\alpha_2\alpha_3\alpha_4} N^{\alpha_1^\dagger} N^{\alpha_2^\dagger} N^{\alpha_3^\dagger} N^{\alpha_4^\dagger}|0> \quad (۲۰)$$

که $\chi^{\alpha_1\alpha_2\alpha_3\alpha_4}$ تابع موج هسته‌ای کاملاً پادمتقارن است.

. توزیع تکانه کوارک سازنده برای سامانه‌های چهار هسته‌ای به‌صورت زیر نوشته می‌شود:

$$\rho^{M_T}_{m_t}(\vec{k}, A_i) = \frac{\langle A_i = 4|q^\dagger_{\hat{\mu}}\, q_\mu|A_i = 4\rangle}{\langle A_i = 4|A_i = 4\rangle} \quad (۲۰)$$

در اینجا $\hat{\mu}$ به عنوان همان شاخص μ ولی بدون جمع روی m_t و انتگرال روی شاخص $\vec{k}$ است که بعد از ساده‌شدن خواهیم داشت [۵]:

$$\rho(k) = \frac{\rho_{dir}(k)+\rho_{exch}(k)}{\left[1+\frac{9}{4}I\right]} \quad (۲۱)$$

که در اینجا

$$\rho^{(k)}_{dir} = 6A(k) \quad (۲۲)$$

$$\rho_{exch}(k) = 2B(k) + \frac{4}{3}C(k) + \frac{2}{3}D(k) \quad (۲۳)$$

در رابطه‌های (۲۲)-(۲۳)، عبارت‌های $A(k)$ و $B(k)$ و $C(k)$ و $D(k)$ و ε در مرجع [۵] محاسبه شده‌اند. به کمک این توزیع تکانه‌ها و با استفاده از رابطه‌ی زیر توابع توزیع کوارک‌های سازنده‌ی اندرون هستک‌های مقیّد برای هسته‌ی هلیوم۴ به دست می‌آید [۵]:

$$q_{0,CQ}(x, Q_0^2; A_i) = 2\pi M \int_{k^{CQ}_{min}}^{\infty} \rho^{CQ}(k; A_i) k dk, \quad (۲۴)$$

$$k^{CQ}_{min}(x) = \frac{(xM+\varepsilon_0^{CQ})^2 - m^2_{CQ}}{2(xM+\varepsilon_0^{CQ})} \quad (۲۵)$$

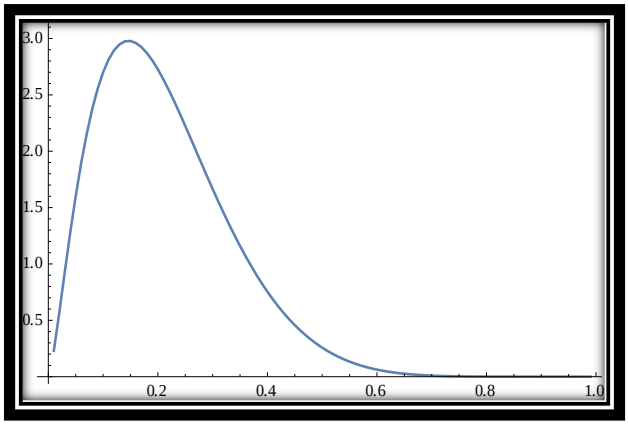
که در آن m_{CQ} و ε_o^{CQ} به ترتیب بیانگر جرم و انرژی بستگی کوارکِ برهنه نوع U یا D بوده و M هم معرّف جرم هستک مقیّد است. مقادیر پارامترهای $(m_{CQ}, \varepsilon_o^{CQ})$ برای کوارکِ نوع بالا، $(320MeV, 120MeV)$ و برای کوارکِ نوع پائین مقادیر $(313MeV, 180MeV)$ انتخاب شده‌اند و همچنین $I = 0.053$.

نتایج محاسبات برای توزیع پارتون‌هاو تابع ساختار

تابع ساختار هستک‌ها اندرون هسته‌ی هلیوم۴ برحسب توابع توزیع کوارک‌های ظرفیّت با طعم‌های بالا و پائین ، کوارک‌های دریای و همچنین‌گلئون‌های به صورت زیر نوشته می‌شود [۵] :

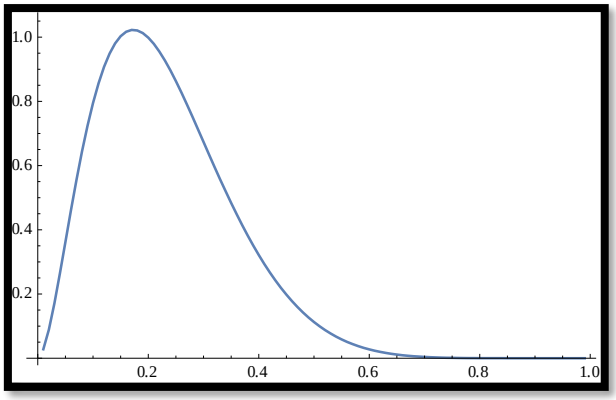
$$F_2^N(x, Q^2) = x\sum_{a=u,d,s} Q_a^2 \left[\left(q_j^a(x, Q^2; {}^4H) + \overline{q}_j^a(x, Q^2;; {}^4H)\right) + \frac{\alpha_s(Q^2)}{2\pi}\left(q_j^a(x, Q^2;; {}^4H) + \overline{q}_j^a(x, Q^2;; {}^4H) + 2g_j^a(x, Q^2;; {}^4H)\right)\right] \quad (۲۶)$$

در شکل‌های ۱تا ۶ توزیع پارتون‌های متفاوت اندرون هستک‌های مقید درون هلیوم ۴ ترسیم شده‌اند.

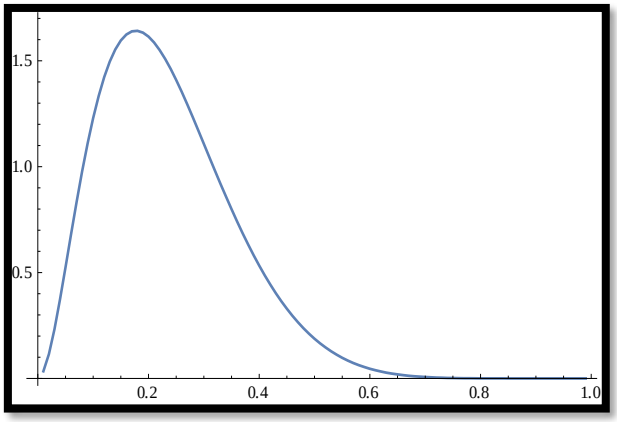


شکل ۱: توزیع کوارک‌های ظرفیتِ بالا برای هلیوم۴.

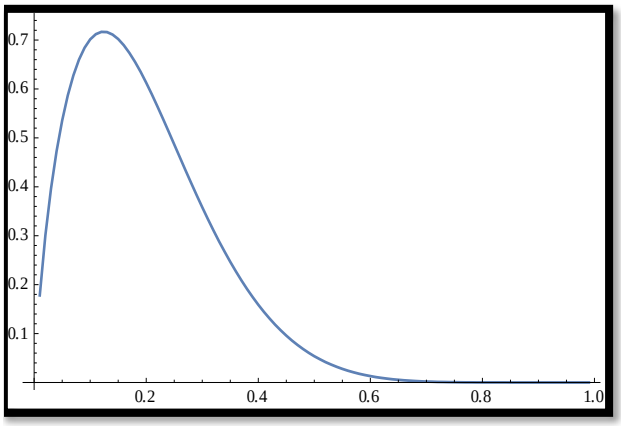
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



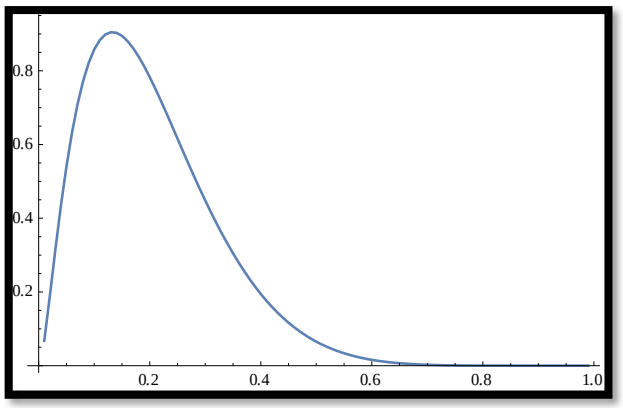
شکل ۲: توزیع کوارک‌های ظرفیتِ پایین برای هلیوم۴.



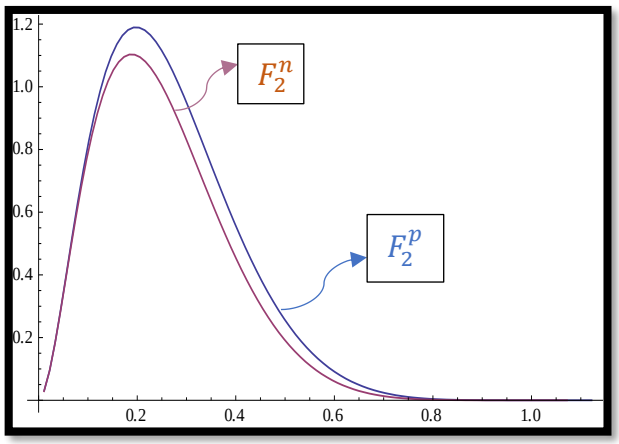
شکل ۳: توزیع کوارک‌های دریا درون هلیوم۴،



شکل ۴: توزیع کوارک‌های شگفت و پادشگفت درون هسته هلیوم۴.



شکل ۵: توزیع گلئون‌ها درون هسته هلیوم۴.



شکل ۶: نمودار تابع ساختار پروتون و نوترون مقیّد درون هسته‌ی هلیوم۴ با استفاده از مدل کوارک کایرال تبادلی.

در شکل ۶ نمودار تابع ساختار پروتون و نوترون مقیّد در مقیاس $Q_0^2 = 0.34\ GeV^2$ درون هسته‌ی هلیوم ۴ نمایش داده شده است. تفاوت مطالعه حاضر نسبت به محاسبات [۳] در آن است که در آن مطالعه نتایج و گزارش‌های اعلام شده تنها سهم کوارک‌های ظرفیّت بالا و پائین در نظر گرفته شده و در آن‌ها از سهم کوارک‌ها و پادکوارک‌های دریا و همچنین گلئون‌ها صرف‌نظر شده است.

مرجع‌ها:

[1] W. Melnitchouck, A. W. Thomas, *Phys. Lett. B* **377**, 11 (1996) .
[2] P. Hoodbhoy, R. L. Jaffe, *Phys. Rev. D* **35**, 113 (1987).
[3] A. Manohar and H. Georgi, *Nucl. Phys. B* **234**, 189 (1984).
[4] N. Nematollahi and M. M. Yazdanpanah, *Phys. Rev. C* **92**, 015209 (2015).
[5]M. M. Modarres and A. Hadian, *Eur. Phys. J. A* **54,** 236 (2018).

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بررسی منحنی تابش ترمولومینسانس شیشه تلفن همراه در بازه دز جذبی ۱۰ تا ۲۰۰ گری

مریم ، نجاتی[۱]؛ رضاییان، پیمان[۲] ؛ صبوری دودران، امیرعباس[۱]

[۱] گروه فیزیک، دانشگاه پیام نور ، صندوق پستی ۳۶۹۷-۱۹۳۹۵ تهران، ایران

[۲] پژوهشکده کاربرد پرتوها، پژوهشگاه علوم و فنون هسته ای، سازمان انرژی اتمی ایران، انتهای خیابان کارگر شمالی، تهران

چکیده

در این مقاله منحنی تابش ترمولومینسانس شیشه تلفن همراه در بازه دز جذبی ۱۰ تا ۲۰۰ گری مورد بررسی قرار گرفته است. بدین منظور شیشه تلفن همراه ابتدا در استون قرار داده شدند و لایه پلیمری روی سطح آن جدا شد. سپس نمونه ها در کوره و تا دمای ۳۰۰ درجه سانتیگراد گرم شدند. در مرحله بعد با استفاده از سیستم پرتودهی گاماسل-۲۲۰ نمونه های شیشه با دز های جذبی ۱۰تا ۲۰۰ گری پرتودهی شدند. جداسازی منحنی تابش نمونه های شیشه نشان داد که درمنحنی تابش از سه قله در دماهای ۵۰۰، ۵۷۴ و ۶۴۰ تشکیل شده است. همچنین سطح زیر منحنی تابش ترمولومینسانس شیشه های تلفن همراه متناسب با دز جذبی می باشد. بنابراین می توان از شیشه های تلفن همراه در تخمین دز جذبی در سوانح پرتویی استفاده کرد.

واژه های کلیدی: *شیشه تلفن همراه، دز جذبی، منحنی تابش ترمولومینسانس، سوانح پرتویی، جداسازی منحنی تابش*

Investigation of Thermoluminescence Glow Curve of Mobile Glass in the Absorbed Dose Interval of the 10 to 200 Gy

Nejati, Maryam[1]; Rezaeian, Peiman[2]; Sabouri Dodran; Amir Abbas

[1] Department of Physics,Payame Noor university(PNU),P.O.Box19395-3697,Tehran,Iran
[2] Radiation Applications Research School, Nuclear Science and Technology Research Institute, Atomic Energy Organization of Iran, Tehran

Abstract

In this paper the Thermoluminescence glow curve of a mobile glass in the absorbed dose interval of 10 to 200 Gy was investigated. Thus, the mobile glass firstly was placed in acetone and the polymer layer on its surface was removed. Subsequently, the samples were put in oven and annealed up to 300°C. In next step, glass samples were irradiated in absorbed dose of 10 to 200 Gy using Gamma-Cell 220 irradiator. Deconvolution of glass samples showed that glow curve consists of three peaks in temperature of 500,574 and 640 K. Also, the area under the glow curve is proportional to absorbed dose. So, glass of the mobiles can be used to estimate the absorbed dose in radiation accidents.

***Keywords**: Mobile Glass, Absorbed Dose, Thermoluminescence Glow Curve, Radiation Accidents, Glow Curve Deconvolution*

PACS No. 28

مقدمه

ویژگی ترمولومینسانس در بیشتر مواد نیمه رسانا، مشاهده می شود. در یک فرآیند ترمولومینسانس در اثر پرتودهی بلور با پرتوهای یونساز، جفت های الکترون و حفره در نوار ظرفیت تولید می شود. الکترون‌های تولید شده در مراکز گیرانداز و حفره‌ها در مراکز بازترکیب قرار می گیرند. با گرم کردن بلور الکترون ها از مراکز گیرانداز خارج و ابتدا وارد نوار رسانش می شوند ، سپس با حفره

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

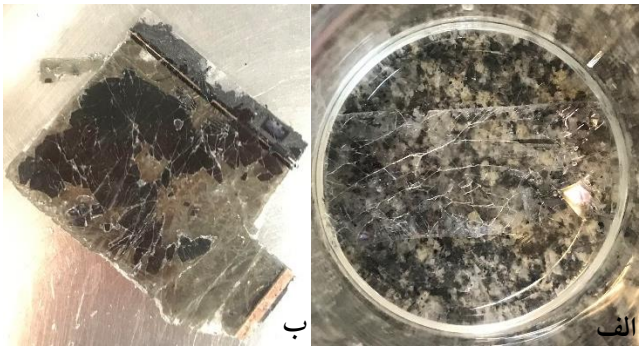
ها(در مراکز بازترکیب) بازترکیب می شوند. نتیجه این فرآیند گسیل یک فوتون است. تعداد فوتون‌های گسیل شده از ماده متناسب با دز جذبی نمونه می باشد و بنابراین از این ویژگی به منظور دزیمتری می توان استفاده کرد [۱]. بطور کلی پدیده ترمولومینسانس دارای کاربردهای بسیار متنوع و وسیعی می باشد[۲]. مهمترین کاربرد پدیده ترمولومینسانس در دزیمتری پرتوهای یونساز است. بدین صورت که از بلورهایی با خاصیت ترمولومینسانس برای تعیین دز جذبی پرتوهای مختلف استفاده می شود[۴-۳] . در کنار این کاربرد استفاده از فرآیند ترمولومینسانس به منظور سالیابی و دزیمتری گذشته نگر نیز از کاربردهای مهم این پدیده است[۶-۵]. در سالیابی با استفاده از منحنی تابش نمونه های باستانی دست ساز مانند کوزه های سفالی می توان زمان تقریبی ساخت این کوزه ها را تخمین زد. در کنار این کاربردها، یکی از زمینه های مورد استفاده فرآیند ترمولومینسانس در دزیمتری گذشته نگر و دزیمتری تصادفی می باشد.

معمولا پرسنل مراکزی که با پرتوهای یونساز سرکار دارند مجهز به ابزار پایش فردی و محیطی هستند و در صورت بروز حوادث میزان دز دریافتی افراد قابل محاسبه می باشد اما این موضوع در خصوص افراد عادی صدق نمی کند. در حالیکه اطلاع داشتن از میزان دز جذبی افراد در یک سانحه پرتویی از اهمیت بالایی برخوردار است. بر این اساس به منظور آمادگی در خصوص حوادث پرتویی داشتن اطلاعات از وسایل شخصی افراد با قابلیت استفاده به صورت دزیمتر، دارای اهمیت است. یکی از این ابزار و وسایل شخصی که امروزه تقریبا تمامی افراد به آن دسترسی دارند گوشی های تلفن همراه است. این گوشی از بخش های مختلف تشکیل شده که هر یک از آنها بصورت بالقوه می توانند خواص یک دزیمتر را داشته باشند[۸-۷]. یکی از بخش های این گوشی ها شیشه های آنها می باشد.

در این مقاله خاصیت ترمولومینسانس شیشه یک نوع گوشی تلفن همراه (HTC) بررسی شده است. نمونه های شیشه پس از آماده سازی پرتودهی و منحنی تابش ترمولومینسانس آن ها ثبت و مورد بررسی قرار گرفته است. بررسی پاسخ ترمولومینسانس شیشه ی تلفن همراه برحسب دز جذبی نشان می دهد پاسخ دارای یک رفتار خطی است. بر این اساس می توان این گونه نتیجه گیری کرد که شیشه تلفن همراه می تواند به عنوان یک ابزار در تخمین میزان دز جذبی مورد استفاده قرار گیرد.

مواد و روش ها:

در آماده سازی نمونه ها، ابتدا شیشه ی تلفن همراه ، از سایر بخش های تلفن همراه جدا شد. در مرحله بعد به منظور حذف لایه هایی که بر روی شیشه قرار گرفته نمونه ها در استون قرار داده شد و لایه ها به صورت فیزیکی از روی سطح شیشه جدا شدند . در شکل ۱ تصویر شیشه موبایل قبل و بعد از جدا کردن لایه پلیمری روی آن نشان داده شده است.



شکل ۱: الف – نمونه اولیه شیشه موبایل. ب: شیشه موبایل پس از حذف لایه پلیمری روی آن.

همانگونه که در این شکل نشان داده شده است، شیشه ها در ابتدا حالت تیره دارند که با جدا گردن لایه پلیمری روی سطح آن حالت شفاف پیدا می کند. لازم به ذکر است که این لایه در اثر گرم کردن شیشه به منظور قرائت می سوزند و سبب اشکال در قرائت می شوند. پس از آماده سازی ، نمونه ها به مدت ۱۰ دقیقه به منظور تخلیه ترازها در دمای ۳۰۰ درجه سانتیگراد قرار گرفتند.

پس از این مرحله نمونه ها با استفاده از پرتو دهنده گاماسل ۲۲۰ با دزهای ۱۰، ۳۰،۴۰، ۵۰ و ۲۰۰ گری پرتودهی شدند. به منظور ثبت منحنی ترمولومینسانس این بلورها از دستگاه خوانشگر Harshaw-4500 استفاده شد. برای ثبت منحنی نمونه ها با آهنگ گرمای ۱۰ درجه بر ثانیه تا دمای ۴۰۰درجه سانتیگراد گرم شدند. پس از ثبت منحنی ها به منظور بدست آوردن اطلاعاتی از ساختار قله ها،

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

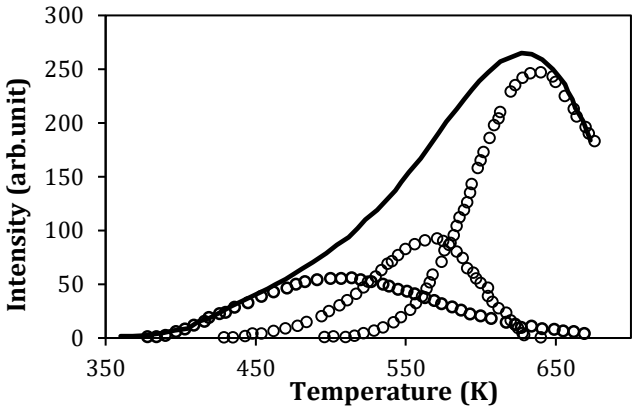
جداسازی منحنی تابش با استفاده از کد TLAnal صورت گرفت [۹]. برای جداسازی منحنی ها از تقریب عام استفاده شد. در این مدل تغییرات تعداد الکترون‌ها در نوار گیرانداز به صورت زیر نوشته می شود[۱۰]:

$$\frac{dn}{dt} = -\frac{sn^2 e^{-\frac{E}{KT}}}{n+R(N-n)} \qquad (۱)$$

در این رابطه n، s، E، K، Tبه ترتیب تعداد الکترون ها در تراز گیرانداز، فاکتور فرکانس، انرژی فعالسازی، ثابت بولتزمان و دما می باشند. همچنین R آهنگ بازترکیب و N تعداد جایگاه‌های در دسترس در تراز گیرانداز است. این مدل در نهایت منجر به یک رابطه‌ی تحلیلی برای منحنی تابش ترمولومینسانس نخواهد شد و بر اساس حل عددی معادلات دیفرانسیل توصیف کننده تعداد الکترون ها در ترازهای مختلف منجر به محاسبه عددی برای منحنی تابش خواهد شد.

نتایج:

منحنی تابش ترمولومینسانس نمونه شیشه پرتودهی شده با دز جذبی ۱۰ گری در شکل (۲) نشان داده شده است.



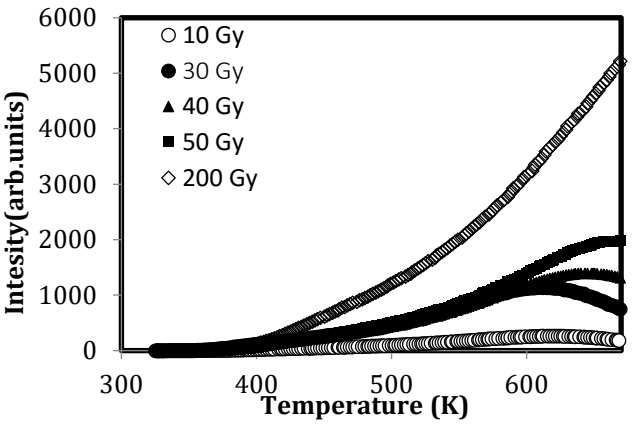
شکل ۲: منحنی تابش ترمولومینسانس شیشه تلفن همراه پرتودهی شده با دز جذبی ۱۰ گری.

همانگونه که در شکل ۲، مشاهده می شود منحنی تابش ترمولومینسانس نمونه مورد بررسی متشکل از سه قله می باشد. پارامترهای s، E و R بدست آمده از برازش به همراه F.O.M که نشان دهنده کیفیت برازش می باشد در جدول ۲ نشان داده شده است.

جدول۱-پارامتر های سینتیک و دمای ماکزیمم مربوط به منحنی تابش ترمولومینسانس شیشه تلفن همراه

	قله اول	قله دوم	قله سوم
E(eV)	1.48	1.84	2.09
$S(s^{-1})$	۱,۰۸×۱۰^۱۸	۱,۰٦×۱۰^۲۰	۱,۲٤×۱۰^۱۷
R	1.00	0.49	1.00
T_m(K)	500	574	640
F.O.M			**0.98%**

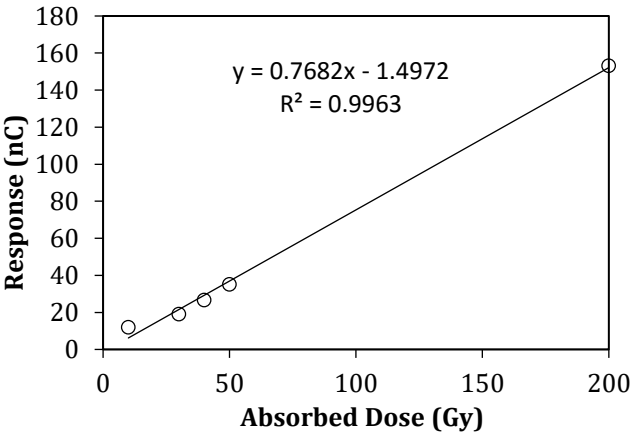
مقدار F.O.M نشان می دهد که برازش صورت گرفته قابل قبول است. بر اساس دادهای برازش مشاهده می شود که این نوع شیشه در حدود دماهای ۵۰۰ و ۵۷۴ و ۶۴۰ کلوین دارای سه قله است. قله سوم مربوط به ترازهای گیرانداز عمیق می باشد که البته در ثبت این منحنی تابش ناحیه مادون قرمز نیز نقش خواهد داشت. به منظور بررسی تاثیر میزان دز جذبی بر منحنی تابش ترمولومینسانس منحنی ثبت شده در دزهای جذبی متفاوت ثبت شدند. در شکل ۳ منحنی تابش در دزهای جذبی مختلف نشان شده است.



شکل ۳: منحنی تابش ترمولومینسانس نمونه شیشه تلفن همراه در دزهای مختلف.

همانگونه که در شکل ۳ مشاهده می شود با افزایش میزان دز جذبی مقدار سطح زیر منحنی تابش نیز افزایش می یابد.به منظور بررسی کمی تر رفتار پاسخ، سطح زیر منحنی ، بار جمع آوری شده در هر قرائت بر حسب دز جذبی در شکل ۴ رسم شد.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



شکل ۴: پاسخ ترمولومینسانس نمونه شیشه تلفن همراه بر حسب دز جذبی.

همانگونه که در شکل ۴ مشاهده می شود رفتار سطح زیر منحنی بر حسب میزان دز جذبی حالت خطی دارد. از این رو این نمونه خاص را می توان در محدوده‌ی دز ۱۰ تا ۲۰۰ گری برای تعیین دز جذبی در حوادث پرتویی بکار برد.

نتیجه گیری:

در مواد سوانح پرتویی ، نیاز به دانستن میزان دز جذبی است، در حالیکه این احتمال وجود دارد که در محل هایی از وقوع سانحه پرتویی در هنگام وقوع سانحه دزیمتر یا ابزار پایش محیطی وجود نداشته باشد. از این رو استفاده از ویژگی ترمولومینسانس ابزار و وسایلی که در محل سانحه وجود دارد می تواند بسیار مفید باشد. با توجه به گستردگی استفاده از تلفن های همراه توسط افراد، یکی از ابزاری که می تواند به منظور تخمین دز مورد استفاده قرار گیرد بخش های مختلف تلفن همراه نظیر مدارات الکترونیکی یا شیشه نمایشگر آن است. در این تحقیق منحنی تابش ترمولومینسانس شیشه یک نوع تلفن همراه مورد بررسی قرار گرفت.

نتایج این بررسی نشان داد که منحنی تابش ترمولومینسانس این گوشی متشکل از سه قله است و سطح زیر منحنی تابش ترمولومینسانس در ناحیه ۱۰ تا ۲۰۰ گری متناسب با دز جذبی می باشد. این تحقیق را می توان در سایر نواحی دز جذبی برای مدل های متفاوت گوشی تلفن همراه انجام داد و بر اساس آن شیوه نامه های اجرایی جهت تخمین دز توسط شیشه های گوشی های تلفن همراه در حوادث پرتویی را تدوین کرد.

مرجع ها

[1] Rcuven Chen, Stephen W.S.McKeever, "Theory of thermolominescence and related phenomena", (1997), 535.356-dc21

[2] A.A.Pradhan, "Thermolominescence Dosimetry and its Applications", ***Radiation Protectio Dosimetry***,Volume1,Issue3,1 July 1981,Pages 153-167

[3]Wen-Chyi Tsai, "Measurement of gamma-ray dose and neutron activation in BNCT beams using TLD-200", *Applied Radiation and Isotopes*,Volume 162, August 2020, 109146

[4]Marco DArienzo, "Absorbed dose measurements from a ^{90}Y radionuclide liquid solution using Lif:Mg,Cu,P thermoluminescent dosimeters*", Physica Medica*, Volume 69,January 2020, Pages 127-133

[5] M.J.Aitken,"Thermoluminescence dating:Past progress and future trends", *Nuclear Tracks and Radiation Measurements* (1982), Volume 10,Issues **1-2**, 1985, Pages 3-6

[6] Sabina Yasmin, "Thermoluminescence *features of commercial glass and retrospective accident dosimetry", Radiation Physics and Chemistry*, Volume 168, March 2020, 108528

[7] M.Disscher, C.Woda. "Thermoluminescence of glass display from mobile phones for retrospective and accident dosimetry", *Radiation Measurements*, Volumes 53-54, June-July 2013, Pages 12-21

[8] J.I.Lee et al, "On the use of new generation mobile phone (smart phone) for retrospective accident dosimetry", *Radiation Physics and Chemistry*, Volume 116, November 2015, Pages 151-154

[9] Ki Soo Chung,"A computer program for the deconvolution of Thermoluminescence glow curves", *Radiation Protection Dosimetry*, (2005), Vol.115, No**. 1-4**.pp.345-349

[10]K.S.Chung, "Anew method for the numerical analysis of thermoluminescence glow curve", *Radiation Measurements*, Volume 42, Issues **4-5**, April-May 2007, Pages 731-734.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

تعیین توابع ترکش باریونهای Σ^+ و $\Sigma^+(1385)$

اوسطی، توفیق[1]؛یادگاری ، مهران[2]

[1و2]دانشکده علوم دانشگاه رازی، سرخه لیژه، کرمانشاه

چکیده

در مقاله پیشرو با استفاده از داده های گرد آوردی شده برای سطح مقطع غیر انحصاری تولید باریونهای $\Sigma^+(1385)$ و Σ^+ در نابودی الکترون-پوزیترون ، توابع ترکش کوارکهای سازنده و کوارکهای دریا این باریونها در اولین مرتبه ی اختلال تعیین شده است. سپس با استفاده از توابع ترکش تعیین شده، احتمالهای کل ترکش و پارامتر متوسط ترکش محاسبه شده است.

واژه های کلیدی: *ترکش، سطح مقطع، باریون.*

Determination of fragmentation functions of Σ^+ and $\Sigma^+(1385)$

Osati,Tawfigh[1]; Yadehgari, Mehran[2]

[1,2]Department of Physics, University of Razi, Kermanshah

Abstract

In the present paper, using data collected for the inclusive cross-section production of Σ^+ and $\Sigma^+(1385)$ baryons in electron-positron annihilation, the fragmentation functions of the constituent quarks and sea quarks of these baryons are determined in the first order of the PQCD. Then, using these functions, the fragmentation probabilities and the average fragmentation parameter are calculated.

***Keywords**: fragmentation, cross section, baryon*

PACS No.10

مقدمه

باریونهای سیگما(Σ) شامل کوارک شگفت و جفت های uu ، dd و ud می باشند. و بر اساس بارالکتریکی شان بصورت Σ^-، Σ^0 و Σ^+ از هم تشخیص داده می شوند[1]. در آزمایشهای DELPHI ، ALEPH و OPAL سطح مقطع غیر انحصاری تولید این باریونهای حول قطب Z^0 در نابودی الکترون - پوزیترون اندازه گیری شده است[2-6]. در این آزمایشها از نابودی الکترون- پوزیترون بوزون های پیمانه ای خلق می شوند. فوتون مجازی ویابوزونZ^0 میتوانند به جفت کوارک پادکوارک واپاشی کند.پس ازآن کوارک وپادکوارک از طریق تابش گلئون انرژی خود را از دست می دهندوگلئون‌ها نیزازطریق فرآیندتولیدزوج جفت‌های کوارک- پادکوارک های ثانویه راخلق میکنند. زمانیکه انرژی کوارک- پادکوارک اولیه بهم رز $1GeV$ برسد نیروی قوی غلبه کرده وهادرون شکل می گیرد که این مرحله را هادرونیزاسیون می نامند.در این مقاله با استفاده از داده های اندازه گیری شده برای سطح مقطع غیر انحصاری باریونهای سیگما(Σ)، توابع ترکش باریونها Σ^+ و $\Sigma^+(1385)$ تعیین می کنیم.

تولید هادرون در نابودی الکترون-پوزیترون

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

سطح مقطع برای تولید غیر انحصاری هادرون H با انرژی E_H در نابودی غیر انحصاری منفرد[1]، در چارچوب مرکز جرم و در مقیاس انرژی Q^2 می تواند بصورت زیر نوشته می شود[8و7]

$$\frac{1}{\sigma_{tot}}\frac{d\sigma^H}{dx_E}=\frac{1}{\sum_q e_q^2}[2F_1^H(x_E,Q^2)+F_L^H(x_E,Q^2)] \quad (1)$$

که در آن $x_E=\frac{2p_H.q}{Q^2}=\frac{2E_H}{\sqrt{s}}$ می باشد و q تکانه بوزون پیمانه ای می باشد. همچنین سطح مقطع کل هادرونی σ_{tot} تا اولین مرتبه ی اختلال بصورت زیر داده می شود.

$$\sigma_{tot}=\sum_q \hat{e}_q^2\frac{4\pi\alpha^2(Q^2)}{s}[1+\frac{\alpha_s(Q^2)}{\pi}] \quad (2)$$

در رابطه های (1) و (2) جمع بر روی n تعداد طعم های فعال کوارک بسته شده است.

در رابطه ی(1) با صرف نظر کردن از بخش هایی که شامل $\frac{\alpha_s(Q^2)}{2\pi}$ است سطح مقطع غیر انحصاری تولید هادرون در نابودی الکترون-پوزیترون در مرتبه ی LO را می توان بصورت زیر نوشت:

$$\frac{1}{\sigma_{tot}}\frac{d\sigma^H}{dx_E}=\frac{1}{\sum_q \hat{e}_q^2}\sum_q \hat{e}_q^2\{D_q^H(x_E,Q^2)+D_{\bar{q}}^H(x_E,Q^2)\} \quad (3)$$

در رابطه ی (3)، D_q^H و $D_{\bar{q}}^H$ به ترتیب تابع ترکش کوارک و پاد کوارک به هادرون می باشد.

تعیین تابع ترکش

مطابق رابطه (3)، سطح مقطع غیرانحصاری تولید هادرون در اولین مرتبه ی اختلال QCD به توابع ترکش وابسته می باشد. برای تابع ترکش پارتونی در مقیاس اولیه ی ترکش μ_0، شکل های تابعی مختلفی داده شده است. دراین مقاله از شکل چند جمله ای ی $N_i^h z^{\alpha_i^h}(1-z)^{\beta_i^h}$ استفاده شده است.درمورد کوارک های سبک d,u وs مقیاس μ_0 را برابر $1GeV$ودر مورد کوارک های سنگین b و cمقیاس μ_0را به ترتیب برابر m_b^2 و m_c^2در نظر گرفته می شود.

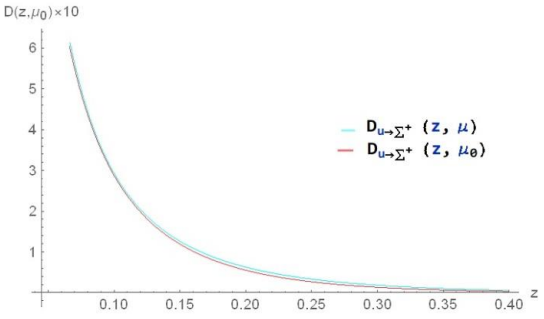
توابع ترکش برای Σ^+

باریون Σ^+ اسپین $\frac{1}{2}$ دارد. در جدول (1) پارامترهای مربوط به تابع ترکش Σ^+ که از طریق برازش بدست آمده اند، داده شده است.

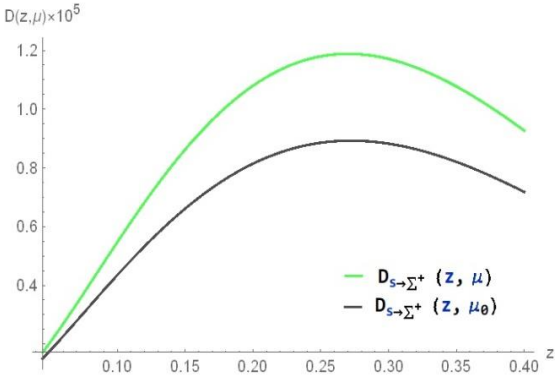
جدول (1): پارامترهای مربوط به تابع ترکش Σ^+

quark	N	α	β
u	0.044442986	−1.146592	7.3186052
s	0.0003161629	1.6586851	4.4344942
sea	0.2690007	1.4936466	5.186338

در شکلهای (1) تا (3) رفتار این توابع بر حسب z داده شده است.



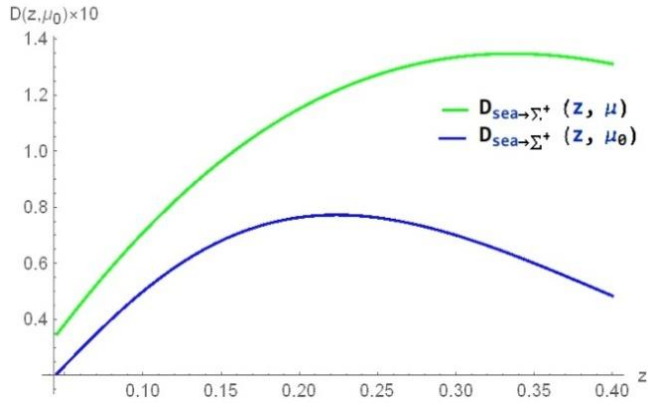
شکل(1): تابع ترکش کوارک سازنده u به Σ^+



شکل(2): تابع ترکش کوارک سازنده S به Σ^+

[1] Single- Inclusive Annihilation

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



شکل(3): تابع ترکش کوارکهای دریا به Σ^+

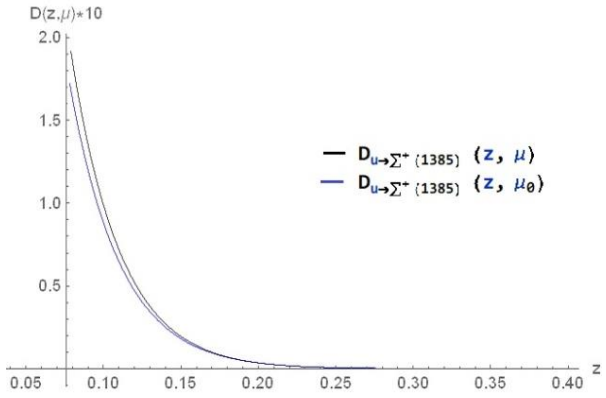
توابع ترکش برای Σ^+ (1385)

باریون Σ^+ (1385) اسپین $\frac{3}{2}$ دارد داده های سطح مقطع غیرانحصاری برای این باریون در نابودی الکترون-پوزیترون در آزمایشهای *LEP* گرد آوری شده است. در روشی مشابه با آنچه که در مورد باریون Σ^+ اعمال کردیم توابع ترکش مربوط به این باریون را از طریق برازش بدست آوردیم در جدول (2) پارامترهای مربوط به این توابع ترکش دده شد است.

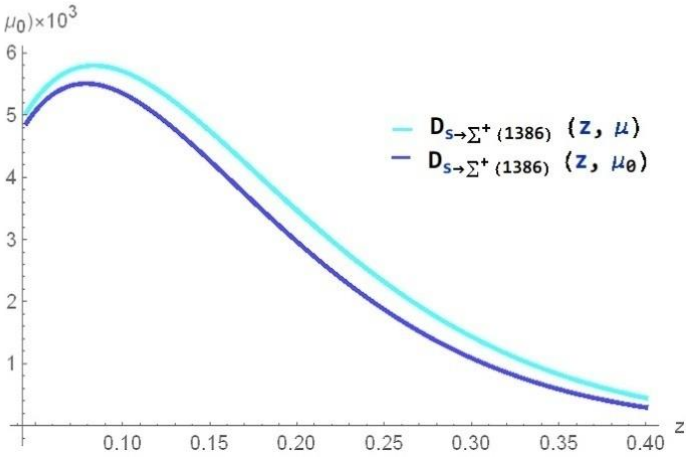
جدول (2): پارامترهای مربوط به تابع ترکش Σ^+ (1385)

quark	N	α	β
u	1.2053521	−0.0981998	26.974862
s	1.166498	0.8734586	10.158262
sea	0.24466011	0.7450697	10.604256

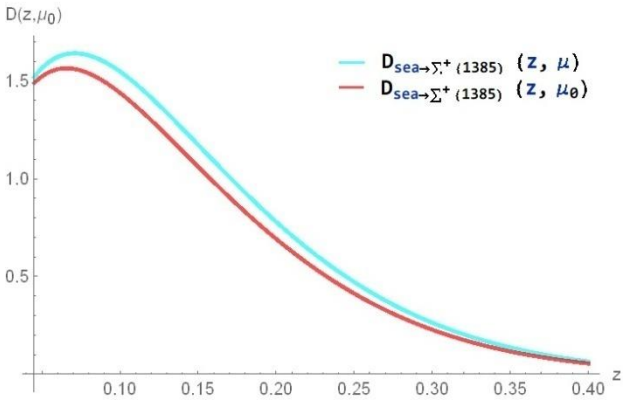
همچنین رفتار توابع ترکش بر حسب z شکلهای (4-6) داده شده است.



شکل(4): تابع ترکش u به Σ^+ (1385)



شکل(5): تابع ترکش s به Σ^+ (1385)



شکل(5): تابع ترکش sea به Σ^+ (1385)

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

احتمال کل ترکش (FP) و پارامتر متوسط ترکش برای هریک فرآیندهای ترکشی که منجر به تولید باریونهای Σ^+و $\Sigma^+(1385)$ می شود با استفاده از روابط

$$f.p=\int_0^1 D(z,\mu_0)dz \qquad (4)$$

$$\prec Z \succ = \frac{\int_0^1 ZD(z,\mu_0)dz}{\int_0^1 D(z,\mu_0)dz} \qquad (5)$$

محاسبه کرده ایم و نتایج حاصل در جدولهای (3) و (4) داده شده است.

جدول(3): احتمال کل ترکش و پارامتر متوسط ترکش برای Σ^+

quark	F.P	<z>
u	0.048776	0.100012
s	0.000002	0.246421
sea	0.0022126	0.231413

جدول(4): احتمال کل ترکش و پارامتر متوسط ترکش برای $\Sigma^+(1385)$

Sigma(3/2)+	F.P	<z>
u	0.01166085	0.085716
s	0.009729164	0.154731
sea	0.0024579234	0.1462207

بحث و نتیجه گیری

باریون Σ^+ و $\Sigma^+(1385)$ دارای ساختار کوارکی uus هستند. باریون Σ^+ اسپین $\frac{1}{2}$ و $\Sigma^+(1385)$ اسپین $\frac{3}{2}$ دارد. در این مقاله ما برای اولین بار توابع ترکش این باریونها را با استفاده از داده های تجربی تعیین کرده ایم .نتایج بدست آمده نشان می دهد که احتمال ترکش کوارک سازنده u به این باریونها در مقایسه با کوارک سازنده s بیشتر است. احتمال ترکش کوارکهای دریا به باریونهای Σ^+ و $\Sigma^+(1385)$ تقریبا یکسان می باشد. رفتار توابع ترکش در شکلهای (1) تا (6) داده شده اند که تقریبا در هر دو دو حالت رفتار مشابهی دارند یعنی در z برابر صفر و z برابر یک احتمال ترکش صفر می شوند. که نشان دهنده ی آن است که این توابع به روش صحیحی محاسبه شده اند.

مرجع‌ها

[1] M. Tanabashi, et al." Particle Data Group", Phys. Rev. D 98, (2018) 1030001.

[2] G. Alexander, et al., Z. Phys. C 73 (1997) 587–599.

[3] G. Alexander, et al., Z. Phys. C 73 (1997) 585–569.

[4] P. Abreu, et al., Z. Phys. C 67 (1995) 543-553.

[5] P. Acton, et al., Phys. Lett B 291 (1192) 503-518.

[6] Koya Abe, et al., Phys. Rev D **69** (2004) 072003.

[7] M. Hirai, et al., Phys. Rev D **75** (2007) 094009.

[8] S. Kretzer, Phys. Rev D **62** (2000) 054001.

[9] M. Soleymaninia, M. Goharipour. and H. Khanpour, http://arxiv.org/abs/1805.04847v1

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بررسی اثر ناهمگنی در فانتوم سر بر میزان دز جذبی

تیموری خندان ، لیلا[۱] ؛ ترابی، هانیه[۲]؛ رضائیان، پیمان[۳]؛ کاشیان، صدیقه[۳]؛ بیگی، منیژه[٤]

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

[۲] دانشکده علوم پایه، دانشگاه آزاد اسلامی واحد تهران مرکزی، تهران

[۳] پژوهشکده کاربرد پرتوها، پژوهشگاه علوم و فنون هسته ای ایران، تهران

[٤] فیزیک رادیوتراپی، بیمارستان هفتم تیر،دانشگاه علوم پزشکی ایران، تهران

چکیده

هدف از این مطالعه بررسی اثر ناهمگنی روی مقدار دز جذبی در نقاط مختلف از سر است. به این منظور دو فانتوم ناهمگن سر با چشمه کبالت-۶۰ پرتودهی شدند و در چند نقطه مهم و مشترک در هر دو فانتوم مقدار بار تولید شده، قرائت و میزان دز جذبی محاسبه شد. در نهایت، اختلاف نسبی بین مقادیر دز جذبی در هر نقطه از دو فانتوم محاسبه و مورد بررسی قرار گرفت. مقایسه نتایج نشان داد که بیشترین اختلاف برای پشت چشم‌ها و همچنین کمترین مقدار اختلاف برای پشت گوش است. بنابراین می توان نتیجه گرفت، فانتوم همگن آب، نمی‌تواند جایگزین مناسبی برای همه ارگان‌های بدن انسان باشد.

واژه های کلیدی: *ناهمگنی، فانتوم سر، دز جذبی ، اختلاف نسبی*

Investigation of the Heterogeneity Effect on the Absorbed Dose in the Head Phantom

Teimoori Khandan, Leila[1]; Torabi, Hanieh[2];Rezaeian, Peiman[3]; Kashian, Sedigheh[3]; Beigi, Manijeh[4]

[1] Department of Physics, Faculty of Science, Islamic Azad University Hamadan Branch, Hamada, Iran.

[2] Faculty of Science, Islamic Azad University Tehran Central Branch, Iran.

[3] Radiation Applications Research School, Nuclear Science and Technology Research Institute(NSTRI), Tehran, Iran.

[4] Department of Medical Physics, Haft Tir Hospital, Iran University of Medical Science, Tehran, Iran.

Abstract

This study aims to investigate the heterogeneity effect on the absorbed dose in some different points in the head. For this purpose, two heterogeneous head phantoms were irradiated in the radiation field of cobalt-60 source, in some points of both phantoms, charges generated during irradiation were readout and absorbed dose was determined. Finally, relative difference was evaluated and discussed at each point between phantoms. The results reveals that the maximum difference of absorbed dose was occurred in the point of behind eyes. Also, the minimum difference is happened in the point of behind ears. It can be concluded that homogeneous water phantom cannot be a suitable substitute for all organs of human body.

***Keywords**: heterogeneities, head phantom, absorbed dose, relative difference*
PACS No. 28

مقدمه

مهمترین هدف در پرتودرمانی، بررسی و تطبیق دز برنامه‌ریزی شده که از برنامه سیستم طراحی درمان حاصل می‌شود با دز تحویل شده به بافت هدف و همچنین کمینه کردن مقدار دز تابشی رسیده به بافت‌های سالم و حساس به پرتو، در اطراف بافت هدف است[۱]. از آنجاییکه امکان اندازه گیری دز دریافتی بیمار در حین درمان وجود ندارد، این مقدار باید با روش های صحیح پیش از شروع درمان تعیین گردد[۲و۳]. بدن انسان یک ترکیب ناهمگن شامل انواع مختلفی از بافت‌ها و ناهمگنی‌ها با ویژگی‌های فیزیکی و پرتویی متفاوتی است. در این بین بافت‌ها و حفره‌هایی که

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

چگالی متفاوتی با آب دارند مانند ریه، حفره‌های دهانی، سینوس‌ها و استخوان در پرتودرمانی از اهمیت ویژه‌ای برخوردار هستند. این ناهمگنی‌ها در دزیمتری تابشی از اهمیت ویژه‌ای برخوردار هستند، زیرا توزیع دز توسط این بافت‌های ناهمگن تحت تاثیر قرار می-گیرد. برای بهینه سازی درمان نیاز به بررسی، محاسبه و ارزیابی توزیع دز در بافت‌های تحت تابش، برای بیشینه کردن دز جذبی در بافت هدف و کمینه کردن تابش رسیده به ارگان‌های در خطر است. کمیته بین‌المللی واحدها و اندازه‌گیری تابشICRU شماره ۲٤ با توجه به اطلاعات بالینی، عدم قطعیت کلی ۵٪ را در فرایند تحویل دز به بیمار ضروری می‌داند [٤]، که این مقدار حاصل مجموع عدم قطعیت در گام‌های مختلف پرتودرمانی از جمله قرار گیری بیمار بر روی تخت بیمار، کالیبراسیون شتابدهنده درمانی و محاسبات دزیمتری است [۵]. برای ارزیابی دقیق توزیع دز در بافت هدف و ارگان‌های در خطر به منظور افزایش کیفیت درمان، نیاز به تعیین توزیع فضایی دز در فانتوم‌های همگن و ناهمگن است. از طرفی ارزیابی برنامه ریزی درمان، برنامه‌های کنترل کیفیت و تکرارپذیری پرتوگیری، لزوم تعیین توزیع دز در فانتومهای همگن و ناهمگن را ضروری می‌کند.

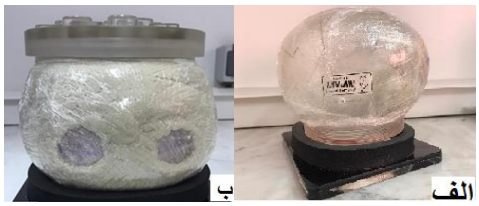
سر به دلیل حضور ناهمگنی‌های متعدد با هندسه‌های پیچیده و چگالی‌های متفاوت، ساختاری چالش برانگیز برای پرتودرمانی است. سر دربرگیرنده ارگان‌های مهمی از بدن از جمله مغز است. بنابراین تعیین دقیق دز جذبی تومور و بافت‌های سالم، حین پرتودهی در مغز از اهمیت بالایی برخوردار است. به گونه‌ای که افزایش دز جذبی بافت‌های سالم بیش از حد مجاز سبب ایجاد آسیب‌های جبران ناپذیر به کل بدن و در نتیجه باعث اختلال در روند درمان می‌شود. [٦و٧]. بر این اساس، در این پژوهش تاثیر ناهمگنی بر میزان دز جذبی در سر مورد بررسی قرار گرفته است.

بدین منظور دو فانتوم ناهمگن سر که از نظر ناهمگنی متفاوت بودند، تحت پرتودهی با چشمه کبالت-٦۰ قرار گرفتند. فانتوم اول، پوسته بیضی‌گون ساخته شده بر مبنای فانتوم نرم‌افزاری اشنایدر از جنس PMMA در پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای بود و فانتوم دوم با استفاده از فانتوم اول و ایجاد ناهمگنی‌های استخوان جمجمه، چشم و سیسنوس‌های ماگزیلاری تهیه شده بود. همینطور از آب بعنوان ماده جایگزین بافت مغز در هر دو فانتوم استفاده شد.

مواد و روش‌ها

فانتوم‌ها

در این تحقیق از دو فانتوم سر برای بررسی اثرات ناهمگنی بر روی دز جذبی در نقاط مختلف مغز استفاده شد. فانتوم اول، یک پوسته بیضی‌گون از جنس پلی اتیلن با شعاع‌های داخلی ٦، ٦/۵و ۹ سانتی‌متر ساخته شده در پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای بر مبنای فانتوم نرم‌افزاری اشنایدر بود که با آب به‌عنوان ماده جایگزین بافت مغز پر شده بود، چگالی آب برابر ۱ و چگالی ماده بافت مغز برابر ۱/۰۳ است (شکل ۱-الف).به منظور بررسی اثر سایر ناهمگنی‌ها در ساختار سر، فانتوم دوم با استفاده از فانتوم اول و ایجاد ناهمگنی‌های استخوان جمجمه، چشم و سیسنوس‌های ماگزیلاری تهیه شد. بنابراین، سطح فانتوم با یک لایه استخوان به ضخامت ۷ میلی‌متر (تقریبا معادل با ضخامت جمجمه انسان) پوشانده شد، از نیمکره‌ها و کره های پلاستیکی به شعاع ۲سانتی‌متر که با خمیر استخوان پوشیده شده بودند، برای جایگزینی چشم‌ها و سینوس-های ماگزیلاری استفاده شدند و در نهایت فانتوم ناهمگن شماره ۲ نیز با آب بعنوان ماده جایگزین بافت مغز پرشد. (شکل۱-ب)



شکل۱: الف) فانتوم ناهمگن شماره۱ب)فانتوم ناهمگن شماره۲

همچنین درپوشی برای فانتوم مورد نظر ساخته شد. این درپوش، حاوی چندین جایگاه برای اندازه‌گیری با اتاقک یونش بود که با استفاده از کپ‌های ساخته شده با ارتفاع‌های مختلف، اندازه‌گیری دز جذبی در نقاط مهمی از سر از جمله پشت گوش‌ها، پشت چشم‌ها، پشت سر و مرکز سر را امکان‌پذیر می‌کرد (شکل۲).

پرتودهی با چشمه کبالت-٦۰ و خوانش بار

به منظور ارزیابی میزان دز جذبی در نقاط مختلف در دو فانتوم، هر دو فانتوم شماره ۱ و ناهمگن شماره ۲ در میدان پرتویی کبالت-٦۰

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

پرتودهی شدند. در این اندازه‌گیری‌ها از سیستم پرتودهی Picker V9 Tele therapy Unit، موجـود در آزمایشـگاه دزیمتـری استاندارد ثانویه پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای استفاده شد.



شکل۲: درپوش فانتوم و کپ‌های ساخته شده برای جایگذاری اتاقک یونش در هنگام اندازه‌گیری

در پنج جایگاه مشترک از هر دو فانتوم و در هر جایگاه در دو عمق مختلف (با استفاده از دو کپ با ارتفاع‌های مختلف)، اندازه-گیری‌های دزیمتری انجام شد. برای همه اندازه‌گیری‌های دزیمتری، میدان ۲۵×۲۵ سانتی‌متر مربع روی سطح فانتوم انتخاب شد، همینطور فاصله چشمه تا سطح فانتوم نیز برابر ۸۰ سانتی‌متر در نظر گرفته شد. در هر اندازه‌گیری، فانتوم به مدت ۱۵ ثانیه مورد پرتودهی قرار گرفت و بار جمع‌آوری شده در حجم حساس اتاقک یونش فارمر PTW-3001 با استفاده از الکترومتر PTW UNIDOSE 1002 خوانش شد. تصویری از فانتوم، اتاقک یونش و همچنین سیستم پرتودهی در شکل۳ آورده شده است.



شکل۳: پرتودهی فانتوم ناهمگن ۲ تحت چشمه کبالت-۶۰

محاسبات

پنج جایگاه مختلف برای پرتودهی و اندازه‌گیری دز برجای مانده، انتخاب شد. در هر جایگاه با استفاده از دو کپ با ارتفاع‌های مختلف، در در دو عمق متفاوت خوانش بار صورت پذیرفت. جایگاه‌های موردنظر مطابق با شکل ۳ انتخاب شده‌اند، جایگاه شماره ۱ متناظر با پشت گوش، جایگاه شماره ۳ متناظر با پشت سر، جایگاه شماره ۵ متناظر با پشت گوش، جایگاه شماره ۷ متناظر با مرکز و جایگاه شماره ۸ متناظر با پشت چشم‌ها بودند.

برای محاسبه دز جذبی، مقدار بار خوانش شده در مدت زمان ۱ دقیقه لحاظ شد و با بکار بردن رابطه زیر که برگرفته از TRS 398 [۸] می‌باشد، دز جذبی در هر جایگاه محاسبه شد:

$$D_W = M_Q \times N_{D,W} \times K_{TP} \qquad (۱)$$

که در این رابطه M_Q متوسط بار خوانش شده در مدت زمان یک دقیقه است. $N_{D,W}$ ضریب کالیبراسیون اتاقک یونش مورد استفاده است، از آنجاییکه در این تحقیق از آب به‌عنوان ماده جایگزین مغز استفاده شده است و تمام اندازه‌گیری‌ها در آب صورت گرفته است، بنابراین برای محاسبات دز جذبی از ضریب کالیبراسیون در آب استفاده شده است که در شرایط استاندارد محاسبه شده است و مقدار آن برابر با ۵۲/۱۲ میلی گری بر نانوکولن در آژانس بین المللی انرژی اتمی اندازه گیری شد.

همچنین K_{TP} ضریب تصحیح فشار و دمای محیط می‌باشد که با استفاده از رابطه ۳ برگرفته از TRS 398 [۸]، با اندازه گیری فشار و دمای محیط قابل محاسبه است.

$$k_{TP} = \frac{(273.2 + T)}{(273.2 + T_0)} \frac{P_0}{P} \qquad (۲)$$

T و P دما و فشار محیط در هنگام اندازه‌گیری بودند که برابر ۱۸ درجه سانتیگراد و ۸۴۷/۵ میلی بار ثبت شدند.

نتایج

نتایج اندازه‌گیری در هر دو فانتوم در پنج نقطه شایع برای بروز تومور، در جدول ۱ ارائه شده است.

جدول۱:مقادیر دز جذبی (میلی گری) در دو فانتوم در جایگاه‌های مختلف

	کپ ۱ فانتوم ۱	کپ ۱ فانتوم ۲	کپ ۲ فانتوم ۱	کپ ۲ فانتوم ۲
جایگاه ۱	۱۳۷/۷۸	۱۲۷/۵٤	۱۳۷/۲۸	۱۲۵/۱۲
جایگاه ۳	۱٤۸/۹۳	۱۵۸/۹۲	۱۵۰/۲۳	۱۵۹/۲۳
جایگاه ۵	۲۱۹/۸٦	۲۱۷/۷۸	۲۲۳/۱۵	۲۱۸/۰۹
جایگاه ۷	۱۷۵/۲۵	۱٦۷/۹۳	۱۷۵/۳۳	۱٦۵/٦۹
جایگاه ۸	۱۸۳/٤۲	۱٦۸/۲٤	۱۸۵/۲٤	۱٦٦/۵۵

به منظور تعیین اثر ناهمگنی بر دز جذبی، اختلاف ناشی از دز جذبی در کپ های مختلف محاسبه شده و نتایج آن در جدول ۲ نشان داده شده است.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

جدول۲: مقادیر اختلاف نسبی دزجذبی در هرجایگاه بین دو فانتوم

موقعیت‌های اندازه‌گیری	کپ شماره (۱)	کپ شماره (۲)
جایگاه ۱ پشت گوش	٪۷	٪۹
جایگاه ۳ پشت سر	-٪۷	-٪٦
جایگاه ۵ پشت گوش	٪۱	٪۲
جایگاه ۷ مرکز سر	٪٤	٪٦
جایگاه ۸ پشت چشم‌ها	٪۹	۱۰٪

بحث

در این اندازه‌گیری‌ها انتظار می‌رفت که میزان دز جذبی در فانتوم شماره ۲، در همه جایگاه‌ها، به‌دلیل ناهمگنی‌های لحاظ شده برای این فانتوم و تضعیف بیشتر پرتو توسط استخوان، کمتر از میزان دز جذبی در فانتوم شماره ۱ باشد. با مقایسه اندازه گیری‌های انجام شده در جایگاه‌های متفاوت، تفاوت در مقادیر اندازه گیری شده دز جذبی، در دو فانتوم مشاهده شد که این موضوع به دلیل حضور استخوان و حفره‌های چشم و سینوس در فانتوم شماره ۲ است. با مقایسه مقادیر اختلاف نسبی ثبت شده برای دو فانتوم، می‌توان استنباط کرد که مقدار این اختلاف با افزایش فاصله از سطح فانتوم افزایش می‌یابد به گونه‌ای که میزان این اختلاف، در جایگاه شماره ۵ متناظر با پشت گوش چپ که کمترین فاصله را با سطح فانتوم دارد، کمینه مقدار خود را دارد و با افزایش فاصله در جایگاه شماره ۷ که متناظر با مرکز سر است، مقدار این اختلاف افزایش یافته است و در جایگاه شماره ۱ که متناظر با پشت گوش راست در نظر گرفته شده است، مقادیر اختلاف نسبی بازهم بیشتر افزایش می‌یابد. همچنین با افزایش ناهمگنی، مقدار اختلاف نسبی افزایش یافته است، به گونه‌ای که در جایگاه شماره ۸ که درست پشت چشم‌ها قرار گرفته است، اختلاف نسبی بیشنه مقدار خود را در بین جایگاه‌های مورد اندازه‌گیری دارد. نکته دیگری که در این اندازه‌گیری قابل توجه بود، مقدار منفی اختلاف نسبی برای جایگاه شماره ۳ بود، به این مفهوم که مقدار دز جذبی اندازه‌گیری شده برای فانتوم شماره ۲ بیشتر از مقدار دز جذبی اندازه‌گیری شده برای فانتوم شماره ۱ است که این افزایش مقدار دز می‌تواند به دلیل افزایش تابش‌های پراکنده رسیده به این ناحیه باشد، در حالیکه درست در ناحیه روبروی آن که چشم‌ها و سینوس‌ها قرار گرفته‌اند، به دلیل حضور ناهمگنی میزان دز روند کاهشی به خود گرفته است

نتیجه‌گیری

از نتایج حاصل شده از این تحقیق استنباط می‌شود که فانتوم همگن آب، نمی‌تواند جایگزین مناسبی برای همه ارگان‌های بدن انسان باشد و می‌تواند خطای بین دز جذبی محاسبه شده و دز جذبی تحویل شده به بیمار را به میزان قابل توجهی افزایش دهد. از آنجاییکه خطای محاسباتی مربوط به الگوریتم های بکار گرفته شده، مخاطرات ناشی از پرتودرمانی و همچنین عدم دستیابی به نتایج مورد نظر را به همراه دارد، بنابراین، برای ارتقای دقت و صحت فرایند پرتودرمانی نیاز به ساخت فانتوم‌هایی با ساختار و هندسه‌ای مشابه با ارگان هدف است، همچنین مواد مورد استفاده برای ساخت فانتوم‌ها، باید چگالی و ویژگی‌های دزیمتری مشابه با بافت‌های تشکیل دهنده ارگان موردنظر را داشته باشند.

سپاسگزاری

بر خود لازم می‌دانم از محضر خانم عالی پور کارشناس محترم دستگاه پرتودهی کبالت-٦٠ و همچنین دکتر کاسه‌ساز بابت همراهی و همکاری ایشان، نهایت تشکر را داشته باشم.

مراجع

[1] Don Robinson, Inhomogeneity correction and the analytic anisotropic algorithm. *J Appl Clini Med Phy*, **9:112-122**, (2008).
[2] Suit, H, D. Phil, D. Miralbell, R. Potential impact of improvements in radiation therapy on the quality of life and survival, *Int J Radiation Oncol Biol Phys*, **16, 891-895**, 1989.
[3] Gregory, M. Videtic, M. Neil, M. Woody. Handbook of Treatment Planning in Radiation Oncology, Second Edition, ISBN **978-1-61705-197-5** (e-book), *Demos Medical Publishing, LLC*
[4] ICRU-24, Determination of Absorbed Dose in a Patient Irradiated by Beams of X or Gamma Rays In- 1976 EDITION - CURRENT
[5] Brahme, A. Chavaudra, J. Landberg, T. *Accuracy requirements and quality assurance of external beam therapy with photons and electrons*. Acta Oncol, (Suppl 1): **1-76**, (1988).
[6] Darzy, K, H. Shalet, S. M. Hypopituitarism after cranial irradiation, *J. Endocrinol Invest*, **28: 78-87**, (2005)
[7] Agha, A. Sherlock, M. Brennan, S. *The Journal of Clinical Endocrinology & Metabolism*, **90(12)**, (2004)
[8] IAEA, TECHNICAL REPORTS SERIES(TRS) No. 398, *ABSORBED DOSE DETERMINATION IN EXTERNAL BEAM RADIOTHERAPY*, Vienna 2000.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

افزایش ناهمسانگردی دی الکتریکی و ولتاژ آستانه پایین بلور مایع نماتیک آلائیده به نقاط کوانتومی هسته/ پوسته Ni:ZnCdS/ZnS

صیدالی لیر ، زهرا*[۱و۲]؛ صبائیان، محمد[۱و۲]؛ سهیلی، احسان[۳]؛ صحرایی، رضا[۴]

[۱] گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شهید چمران، اهواز، ایران

[۲] مرکزتحقیقات لیزر و پلاسما، دانشگاه شهید چمران، اهواز، ایران

[۳] گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه ایلام،۵۱۶-۶۵۳۱۵، ایلام، ایران

[۴] گروه شیمی، دانشکده علوم، دانشگاه ایلام،۵۱۶-۶۵۳۱۵، ایلام، ایران

چکیده

اثرات نقاط‌کوانتومی هسته/ پوسته Ni: ZnCdS/ZnS بر خواص الکترو-اپتیکی سیستم بلور مایع نماتیک مطالعه گردید. گذردهی دی الکتریکی نمونه های بلور مایع نماتیک در دماهای مختلف اندازه گیری شد. ناهمسانگردی دی الکتریکی بلور مایع آلائیده به نقاط کوانتومی در مقایسه با بلور مایع خالص، افزایش یافت. نتایج دی الکتریک نشان داده است که بلور مایع نماتیک، خودمرتب شدگی را در نقاط کوانتومی القاء می کند و باعث می شود در راستای بردار راهنمای بلور مایع آرایه های یک بعدی را تشکیل دهند. نقاط کوانتومی در بلور مایع، ناخالصی های یونی را جذب کرده و ولتاژ آستانه را کاهش داده اند.

واژه های کلیدی: *بلور مایع، نقاط کوانتومی، خواص الکترو-اپتیکی.*

Enhanced dielectric anisotropy and low threshold voltage of nematic liquid crystal doped with Ni:ZnCdS/ZnS core/shell quantum dots

Seidalilir, Zahra*[1, 2]; Sabaeian, Mohammad[1, 2]; Soheyli, Ehsan[3]; Sahraei[4], Reza

[1] *Department of Physics, Faculty of Science, Shahid Chamran University of Ahvaz, Ahvaz, Iran.*

[2] *Center for Research on Laser and Plasma, Shahid Chamran University of Ahvaz, Ahvaz, Iran.*

[3] *Department of Physics, Faculty of Science, Ilam University, 65315-516, Ilam, Iran*

[4] *Department of Chemistry, Faculty of Science, Ilam University, 65315-516, Ilam, Iran.*

Abstract

The effects of doping of Ni: ZnCdS/ZnS core/shell quantum dots (QDs) on the electro-optical properties of a nematic liquid crystal (LC) system were studied. Dielectric permittivity of nematic LC samples was measured at varied temperatures. The dielectric anisotropy of doped liquid crystal increased compared to pure liquid crystal. The dielectric results indicated that the nematic phase LC induced self-assembly on QDs to form one-dimensional arrays along the nematic director. QDs dispersed in the LC mixture trapped ionic impurities and decreased the threshold voltage of the nematic liquid crystal.

***Keywords**: Liquid crystal, Quantum dots, electro-optical properties.*

PACS No

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد

http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مقدمه

بلورهای مایع دسته ای از مواد هستند که دارای فازی مابین جامدات و مایعات می‌باشند [۱]. یکی از مهم‌ترین کاربردهای این مواد، استفاده در صنعت نمایشگرها می‌باشد [۲]. در میان انواع بلورهای مایع، بلورهای مایع نماتیک، ویژگی‌های نوری خطی و غیرخطی متمایزی از خود نشان داده‌اند. حضور ناخالصی های یونی در سلول‌های بلور مایع منجر به مشکلات زیادی از جمله افزایش ولتاژ آستانه، کندی پاسخ دستگاه و کاهش کیفیت تصویر در نماشگرها شده است. این ناخالصی ها می تواند طی فرایند سنتز بلورمایع و یا هنگام بستن سلول بلورمایع وارد سیستم شود [۳].

سنتز بلورهای مایع جدید با ناخالصی‌های یونی کم و استفاده از نانوساختارها، دو روش مورد توجه برای رفع این مشکل بوده‌است. استفاده از نانوذرات برای کاهش میزان ناخالصی ها و نیز ایجاد خواص جدید در بلورهای مایع، به دلیل مقرون به‌صرفه‌بودن، مورد توجه بسیاری از محققان قرار گرفت [۴ و ۵]. در میان انواع ساختارهای نانوذرات، نقاط کوانتومی دارای ویژگی های منحصر به‌فرد فیزیکی و نوری می باشند و بنابراین گرایش زیادی برای استفاده از این ساختارها در میان محققان وجود دارد [۶ و ۷].

در این تحقیق به بررسی خواص دی الکتریکی و الکترواپتیکی بلور مایع نماتیک E7 حاوی نقاط‌کوانتومی Ni:ZnCdS/ZnS (بعنوان یک ساختار هسته/پوسته‌ی آلاییده شده با یون‌های نیکل) می پردازیم.

شرح آزمایش

روش سنتز و مشخصه یابی الکتریکی و نوری نقاط‌کوانتومی Ni:ZnCdS/ZnS هسته/ پوسته، پیش از این گزارش شده‌است [۸]. نقاط‌کوانتومی سنتز شده در یک حلال با نقطه جوش پایین (در این تحقیق کلروفورم) پخش و در دستگاه آلتراسونیک به مدت ۵ ساعت قرار داده شده است. سپس مقداری از محلول نقاط-کوانتومی تهیه‌شده به بلور مایع اضافه شده و این ترکیب به مدت ۶ ساعت تحت شرایط گرما در دستگاه آلتراسونیک قرار گرفته است. سپس حلال استفاده شده جهت پخش نقاط‌کوانتومی، در محفظه خلاء و تحت دمای ۹۰ درجه سانتی گراد تبخیر شده است. در این تحقیق، بلور مایع حاوی نقاط‌کوانتومی با غلظت ۰٫۷۵ درصد وزنی تهیه شده‌است. سلول‌های بلور مایع شامل دو زیرلایه شیشه ای پوشش داده شده با ITO با ابعاد $1.5 \times 1\ cm^2$ می باشد. زیرلایه های ITO با استفاده از ترکیب اتانول، استون و آب دیونیزه به مدت ۱۰ دقیقه به خوبی شسته می‌شوند و نهایتاً با گاز N_2 کاملاً خشک می‌شوند. برای ایجاد جهت‌گیری هموژن فاز نماتیک، سطح زیرلایه های ITO با لایه‌ای از پلی‌وینیل‌الکل پوشیده و با استفاده از یک پارچه پرزدار مالش داده می‌شود تا شیارهایی در حد میکروسکوپی روی زیرلایه‌ها ایجاد گردد. برای ایجاد جهت‌گیری هموتروپیک، یک لایه لسیتین روی زیرلایه های ITO قرار داده می شود. سپس دو لایه ITO از طرفی که جهت دار شده‌اند با قرار دادن یک لایه (به ضخامت ۲۵ میکرومتر) به صورت ساندویچی روی هم قرار داده می شوند. سپس بلور مایع گرم شده با استفاده از اثر مویینگی درون سلول های ساخته شده قرار داده می‌شود و در نهایت اطراف سلول تهیه شده با چسب کاملاً پوشانده می‌شود. خواص دی الکتریکی بلورهای مایع با استفاده از دستگاه LCR متر مدل Instek LCR-8110G در فرکانس ۱۰ kHz اندازه گیری شده است. گذردهی دی الکتریکی سلول های بلور مایع با استفاده از روابط زیر بدست می آید:

$$\varepsilon_{\parallel} = \frac{C_{\perp}}{C_0} \qquad \varepsilon_{\perp} = \frac{C_{\parallel}}{C_0} \quad (۱)$$

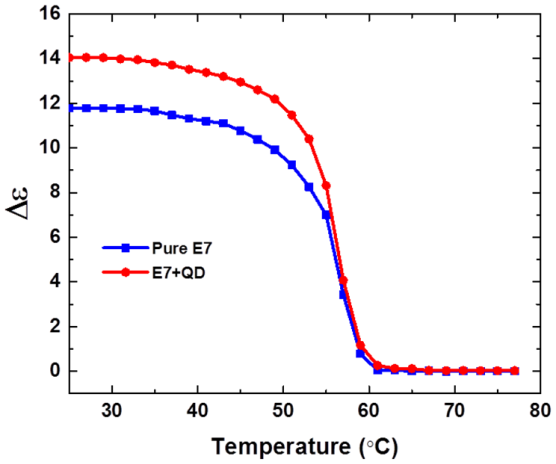
که در آن، $C_{\parallel}$ ظرفیت سلول هموتروپیک، $C_{\perp}$ ظرفیت سل هموژن و C_0 ظرفیت سل خالی می باشد. ناهمسانگردی دی الکتریکی به صورت $\Delta\varepsilon = \varepsilon_{\parallel} - \varepsilon_{\perp}$ تعریف می‌شود. برای بررسی خواص الکترواپتیکی از چیدمان لیزری که شامل یک لیزر Nd:YAG با طول موج ۵۳۲ نانومتر، دو پلاریزور عمود برهم در دو طرف سلول بلور مایع و یک آشکارساز نوری است، استفاده شده‌است. برای بدست آوردن طیف عبوری از دستگاه Specord S600 استفاده شده است .

نتایج و بحث

شکل ۱ وابستگی دمایی ناهمسانگردی دی الکتریکی را برای بلور مایع خالص و بلور مایع حاوی نقاط‌کوانتومی با غلظت ۰٫۷۵

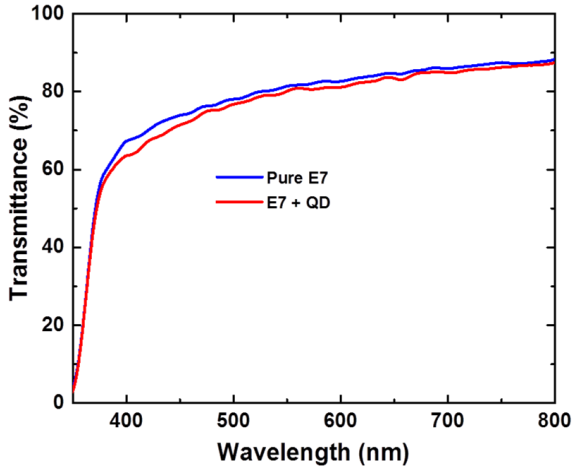
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

درصد وزنی را نشان می دهد. دمای انتقال فاز بلور مایع E7، °C ۶۱ می باشد [۹]. نمودار گذردهی را می توان به دو بخش نماتیک و همسانگرد تقسیم نمود. در دماهای پایین، نمونه ها در فاز نماتیک و در دمای بالای °C ۶۱، در فاز مایع همسانگرد قرار دارند. با توجه به اینکه در حالت مایع، هیچ جهت گیری منظمی وجود ندارد، ناهمسانگردی به صفر می رسد. در فاز نماتیک (T = 25 °C)، نتایج نشان می دهد که ناهمسانگردی در بلور مایع حاوی نقاط‌کوانتومی با غلظت ۰٫۷۵ درصد وزنی نسبت به بلور مایع خالص افزایش داشته است.



شکل ۱: وابستگی دمایی ناهمسانگردی دی الکتریکی برای نمونه های بلور مایع.

$\Delta\varepsilon$ برای بلور مایع خالص و حاوی نقاط کوانتومی به ترتیب ۱۱٫۷۷ و ۱۴٫۰۴ می باشد. $\Delta\varepsilon$ متناسب با پارامتر نظم می باشد [۱۰] و این بدین معنی است که در بلور مایع حاوی نقاط‌کوانتومی با غلظت ۰٫۷۵ درصد وزنی نسبت به بلور مایع خالص پارامتر نظم افزایش یافته است. نقاط کوانتومی استفاده شده کاملا کروی می باشند، بنابراین این افزایش ناهمسانگردی نشان می دهد نقاط کوانتومی درون بلور مایع به شکل یک بعدی و در راستای بردار راهنمای بلور منظم می شوند. پیش از این نیز در رابطه با خود مرتب شدن نقاط کوانتومی درون سلول های بلور مایع، گزارش شده است [۱۱]. جهت اطمینان از شفاف بودن سل هموژن در ناحیه طول موج مرئی، طیف عبور این سل ها در ناحیه فرابنفش-مرئی اندازه گیری شده و در شکل ۲ نمایش داده شده است. مطابق شکل، سلها در بازه ۴۲۰ nm تا ۸۰۰ nm کاملا شفاف هستند. و در طول موج ۵۳۲ nm میزان عبور حدود ۷۹ درصد بوده است. شکل ۳، نمودار عبور نرمال شده بر حسب ولتاژ نمونه های بلور مایع هموژن را نشان می دهد. زمانی که ولتاژ اعمالی، صفر است تمامی مولکولها در جهت سطح منظم می شوند و بنابراین بیشترین میزان عبور نور را می توان دید. با افزایش میدان الکتریکی مولکول های بلور مایع شروع به چرخش می کنند و در ولتاژهای به اندازه کافی بیشتر مولکولها با میدان الکتریکی هم جهت می شوند و در نتیجه توان عبوری کاهش می یابد و در نهایت به صفر نزدیک می شود. طبق تعریف، ولتاژ آستانه ولتاژی است که میزان عبور به ۹۰ درصد عبور بیشینه برسد [۳].



شکل۲: طیف عبور نمونه های بلور مایع در ناحیه فرابنفش-مرئی.

با توجه به این تعریف، ولتاژ آستانه در بلور مایع خالص و بلور مایع حاوی نقاط کوانتومی به ترتیب ۲٫۸۵ و ۲٫۵۲ ولت می باشد. بنابراین حضور نقاط کوانتومی باعث کاهش ولتاژ آستانه شده است. این کاهش ولتاژ می تواند به دو دلیل باشد: ۱- افزایش نظم و ناهمسانگردی دی الکتریکی، ۲- کاهش ناخالصی های یونی. در حقیقت ناخالصی های یونی تحت میدان الکتریکی به سمت زیرلایه های ITO حرکت می کنند و پوششی را ایجاد نموده و میدان موثر درون سل را کاهش می دهند [۳]. در حضور نقاط کوانتومی، ناخالصی‌های یونی در حضور میدان الکتریکی جذب دوقطبی‌های القاء شده در نقاط کوانتومی می شوند و بنابراین میدان

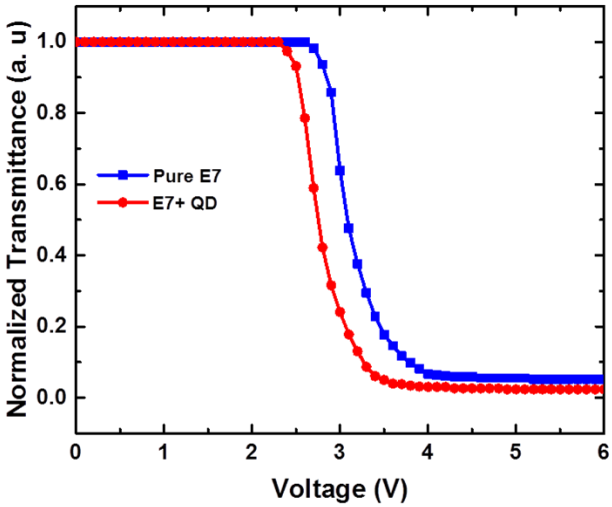
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

داخلی تقویت شده و ولتاژ آستانه کاهش می یابد. این کاهش ولتاژ آستانه از نظر کابردی بسیار مهم است.

ولتاژ آستانه کمتر به این معنی است که برای سویچ کردن مولکول های بلور مایع به ولتاژ کمتری نیاز داریم و این امر برای صنعت نمایشگر ها بسیار مهم است [۱۲]. با استفاده از رابطه زیر می توان ثابت الاستیک (K_{11}) نمونه های بلور مایع را بدست آود [۱۳]:

$$V_{th} = \pi \sqrt{\frac{K_{11}}{\varepsilon_0 \Delta\varepsilon}} \qquad (۲)$$

که در آن، ε_0 و V_{th} به ترتیب گذردهی خلا و ولتاژ آستانه می باشند. ثابت الاستیک برای نمونه های بلور مایع خالص و حاوی نقاط کوانتومی به ترتیب 8.58×10^{-11} و 8×10^{-11} نیوتن می باشد.



شکل ۳: نمودار عبور بر حسب ولتاژ نمونه های بلور مایع در دمای ۲۵ °C.

نتیجه گیری

خواص الکترو-اپتیکی بلور مایع نماتیک حاوی نقاط‌کوانتومی هسته/ پوسته Ni: ZnCdS/ZnS مورد مطالعه قرار گرفته است. با استفاده از تست دی الکتریکی، ناهمسانگردی دی الکتریکی نمونه ها در دماهای مختلف اندازه گیری شد. ناهمسانگردی دی الکتریکی بلور مایع آلائیده با نقاط کوانتومی در مقایسه با بلور مایع خالص، افزایش یافت. این نتایج نشان می دهد نقاط کوانتومی در راستای بردار راهنمای بلور مایع منظم می شوند. همچنین، نقاط کوانتومی باعث کاهش ولتاژ آستانه بلور مایع شدند. این کاهش ولتاژ آستانه به دلیل کاهش ناخالصی های یونی در محیط بلور مایع می باشد.

مرجع‌ها

[1] L. D. Rodrigues, D. Sunil, D. Chaithra and P. Bhagavath, "1,2,3/1,2,4-Triazole containing liquid crystalline materials: An up-to-date review of their synthetic design and mesomorphic behavior", *Journal of Molecular Liquids* **297**, (2020) 111909.
[2] J. Mather, L. P. Jones, P. Gass, A. Imai,T. Takatani and K. Yabuta, "Potential improvements for dual directional view displays", *Applied Optics* **53**, NO. 4 (2014) 769–776.
[3] C. W. Oh, E. G. Park and H. G. Park, "Enhanced electro-optical properties in titanium silicon oxide nanoparticle doped nematic liquid crystal system", *Surface & Coatings Technology* **360**, (2019) 50–55.
[4] W. T. Chen, P. S. Chen and C. Y. Chao, "Effect of Doped Insulating Nanoparticles on the Electro-Optical Characteristics of Nematic Liquid Crystals", *Japanese Journal of Applied Physics* **48**, (2009) 015006.
[5] C. Y. Huang, P. Selvaraj, G. Senguttuvan and C. J. Hsu, "Electro-optical and dielectric properties of TiO_2 nanoparticles in nematic liquid crystals with high dielectric anisotropy", *Journal of Molecular Liquids* **286**, (2019) 110902.
[6] S. K. Gupta, D. P. Singh, R. Manohar and S. Kumar, "Tuning phase retardation behaviour of nematic liquid crystal using quantum dot", *Current Applied Physics* **16**, (2016) 79–82.
[7] N. Dalir, S. Javadian, J. Kakemam and S. M. Sadrpoor, "Enhance the electrical conductivity and charge storage of nematic phase by doping 0D photoluminescent graphene was prepared with small organic molecule as a new array quantum dot liquid crystal displays", *Journal of Molecular Liquids* **276**, (2019) 290–295.
[8] R. Sahraei, E. Soheyli, Z. Faraji and M. S. Beigi, "Facile, one-pot and scalable synthesis of highly emissive aqueous-based Ag,Ni:ZnCdS/ZnS core/shell quantum dots with high chemical and optical stability", *Nanotechnology* **28**, NO. 47 (2017) 475604.
[9] M. S. Zakerhamidi, S. Shoarinejad and S. Mohammadpour, "Fe_3O_4 nanoparticle effect on dielectric and ordering behavior of nematic liquid crystal host", *Journal of Molecular Liquids* **191**, (2014) 16–19.
[10] R. Basu, A. Garvey and D. Kinnamon, "Effects of graphene on electro-optic response and ion-transport in a nematic liquid crystal", *Journal of Applied Physics* **117**, (2015) 074301.
[11] R. Basu and G. S. Iannacchione, "Evidence for directed self-assembly of quantum dots in a nematic liquid crystal", *Physical Review E* **80**, (2009) 010701.
[12] T. Zhang, C. Zhongand J. Xu, "CdS-Nanoparticle-Doped Liquid Crystal Displays Showing Low Threshold Voltage", *Japanese Journal of Applied Physics* **48**, (2009) 055002.
[13] M. Schadt, "Liquid crystal materials and liquid crystal displays", *Annual Review of Materials Science* **27**, (1997) 305.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

افزایش هدایت پذیری الکتریکی و ظرفیت بار بلور مایع نماتیک آلاییده به نقاط‌کوانتومی هسته/پوسته Ni:ZnCdS/ZnS

صیدالی لیر ، زهرا*[۱و۲]؛ صبائیان، محمد[۱و۲]؛ سهیلی، احسان[۳]؛ صحرایی، رضا[۴]

[۱] گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شهید چمران، اهواز، ایران

[۲] مرکزتحقیقات لیزر و پلاسما، دانشگاه شهید چمران، اهواز، ایران

[۳] گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه ایلام،۵۱۶-۶۵۳۱۵، ایلام، ایران

[۴] گروه شیمی، دانشکده علوم، دانشگاه ایلام،۵۱۶-۶۵۳۱۵، ایلام، ایران

چکیده

اثر نقاط کوانتومی هسته/ پوسته ZnCdS/ZnS آلائیده شده با نیکل (Ni: ZnCdS/ZnS) بر خواص الکتروشیمیایی سیستم بلور مایع نماتیک مورد مطالعه قرار گرفت. پاسخ امپدانس بلورهای مایع خالص و حاوی نقاط کوانتومی در بازه فرکانسی ۰٫۱ Hz تا ۱۰۰ kHz مطالعه شد. با فیت کردن یک مدار الکتریکی معادل مناسب با داده های تجربی، پارامترهای مختلفی چون هدایت پذیری الکتریکی، تحرک پذیری، چسبندگی، ضریب نفوذ و ضخامت لایه نفوذ نرنست بدست آمد. اضافه نمودن نقاط کوانتومی به طور قابل توجهی هدایت پذیری الکتریکی و ظرفیت بار بلور مایع نماتیک را افزایش می دهد.

واژه های کلیدی: *بلور مایع، نقاط کوانتومی، امپدانس الکتروشیمیایی.*

Enhancement of electrical conductivity and charge-capacitance of nematic liquid crystal doped with Ni:ZnCdS/ZnS core/shell quantum dots

Seidalilir, Zahra*[1, 2]; Sabaeian, Mohammad[1, 2]; Soheyli, Ehsan[3]; Sahraei[4], Reza

[1] *Department of Physics, Faculty of Science, Shahid Chamran University of Ahvaz, Ahvaz, Iran.*

[2] *Center for Research on Laser and Plasma, Shahid Chamran University of Ahvaz, Ahvaz, Iran.*

[3] *Department of Physics, Faculty of Science, Ilam University, 65315-516, Ilam, Iran*

[4] *Department of Chemistry, Faculty of Science, Ilam University, 65315-516, Ilam, Iran.*

Abstract

The doping effects of Ni-doped ZnCdS/ZnS (Ni: ZnCdS/ZnS) core/shell quantum dots (QDs) on the electrochemical properties of a nematic liquid crystal (LC) system were investigated. The impedance response of pure and QD-dispersed nematic LCs was investigated in the frequency range of 0.1 Hz–100 kHz. By fitting a suitable equivalent electric circuit model to the experimental data, various parameters such as electrical conductivity, mobility, viscosity, diffusion coefficient, and Nernst layer thickness were obtained. The QD-doping significantly increases the electrical conductivity and charge-capacitance of nematic LC.

***Keywords**: Liquid crystal, Quantum dots, electrochemical impedance.*
PACS No. 85

مقدمه

درسال های اخیر، بلورهای مایع به دلیل کابردهای گسترده در ادوات مختلف از جمله صفحات نمایشگرها[۱]، حسگرهای نوری [۲] و بلورهای فوتونیکی [۳] مورد توجه بسیاری از محققان قرار گرفته‌است. بلورهای مایع موادی ناهمسانگرد و دارای فازی بین جامدات و مایعات هستند به‌طوری که دارای رفتار مکانیکی

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مایعات و خواص اپتیکی و فیزیکی بلورها می‌باشند [۴]. به‌دلیل داشتن ویژگی‌های خطی و غیرخطی متمایز بلورهای مایع نماتیک، این نوع از بلورهای مایع نسبت به سایر انواع بلورهای مایع مورد توجه بسیاری قرارگرفته است.

در سالهای اخیر جهت بهبود خواص بلورهای مایع و نیز دسترسی به ترکیباتی با خواص جدید، تحقیقات زیادی بر روی ترکیب بلورهای مایع با نانوذرات (NPs[1]) انجام شده‌است [۵ و ۶]. این ترکیبات می تواند بسیار مقرون به صرفه‌تر از ساخت بلورهای مایع جدید باشد. نقاط کوانتومی، نسبت به سایر نانوساختارها، به دلیل اثرات محدودیت کوانتومی، ویژگی‌های نوری و الکتریکی متمایزی از خود نشان‌داده‌اند. از طرفی، به‌دلیل ویژگی تبادل بار بالا، برهم‌کنش بسیار بالای میان مولکول‌های بلور مایع و نقطه کوانتومی گزارش شده‌است [۷]. گزارش‌شده است که استفاده از نقاط کوانتومی CdS باعث کاهش ولتاژ آستانه سلول بلور مایع نماتیک می‌شود [۸]. دلیر و همکاران نشان‌دادند که استفاده از نقاط کوانتومی گرافن منجر به کاهش ولتاژ آستانه و افزایش ظرفیت سلول بلور مایع نماتیک می‌شود [۹].

هدف از انجام این تحقیق استفاده از نقاط کوانتومی Ni:ZnCdS/ZnS (بعنوان یک ساختار هسته/پوسته‌ی آلاییده شده با یون‌های نیکل) در بلور مایع نماتیک E7 و مشخصه یابی الکتروشیمیایی ترکیب تشکیل‌شده، می‌باشد. اثرات این نقاط کوانتومی بر روی ظرفیت، هدایت پذیری الکتریکی، چسبندگی و نفوذپذیری یونی مورد مطالعه قرارگرفته‌است.

شرح آزمایش

جزئیات کامل سنتز و مشخصات الکتریکی و نوری نقاط کوانتومی Ni:ZnCdS/ZnS هسته/ پوسته، قبلاً گزارش‌شده‌است [۱۰]. نقاط کوانتومی سنتز شده را به حلال کلروفورم اضافه می‌کنیم و در دستگاه آلتراسونیک به مدت ۵ ساعت قرار می‌دهیم. سپس مقداری از محلول حاوی نقاط کوانتومی تهیه‌شده را به بلور مایع اضافه می کنیم تا بلور مایع آلائیده شده با نقاط کوانتومی بدست آید. ترکیب حاصل شده را به مدت ۶ ساعت تحت گرما در دستگاه آلتراسونیک قرارمی‌دهیم. در مرحله آخر، حلال استفاده شده جهت پخش نقاط کوانتومی، در محفظه خلا و تحت دمای ۹۰ درجه سانتی گراد تبخیر می شود. در این تحقیق، بلور مایع حاوی نقاط کوانتومی با غلظت ۰٫۷۵ درصد وزنی تهیه شده‌است. سلول‌های بلور مایع شامل دو زیرلایه شیشه ای پوشش داده شده با ITO می باشد ($1.5 \times 1\ cm^2$). زیرلایه های ITO با استفاده از ترکیب اتانول، استون و آب دیونیزه به مدت ۱۰ دقیقه شسته می‌شوند و نهایتاً با گاز N_2 کاملاً خشک می‌شوند. برای ایجاد جهت‌گیری هموژن فاز نماتیک سطح زیرلایه های ITO با لایه‌ای پلی‌وینیل‌الکل پوشیده و با استفاده از یک پارچه پرزدار مالش داده می‌شود تا شیارهایی در حد میکروسکوپی روی زیرلایه‌ها ایجاد گردد. سپس دو لایه ITO از طرفی که شیاردار شده‌اند با قرار دادن یک لایه (به ضخامت ۲۵ میکرومتر) به صورت ساندویچی روی هم قرار داده می شوند. سپس بلور مایع را گرم کرده و با استفاده از اثر مویینگی درون سلول های ساخته شده قرار داده می‌شود و اطراف سلول تهیه شده با چسب کاملاً پوشانده می‌شود. ظرفیت، هدایت پذیری الکتریکی و ضریب نفوذپذیری یونی با استفاده از طیف سنجی امپدانس الکتروشیمیایی[2] (EIS) با استفاده از سیستم الکتروشیمیایی Autolab PGSTAT302N اندازه‌گیری شده‌است. اندازه‌گیری‌ها در بازه فرکانسی ۱۰۰ mHz تا ۱۰۰ kHz انجام شده است.

نتایج و بحث

طیف‌سنجی امپدانس روشی بسیار مهم برای مطالعه دینامیک حامل های بار در داخل محیط بلور مایع و مناطق سطحی[3] می باشد. اندازه امپدانس کلی[4] (OI) و تانژانت اتلاف دی‌الکتریک به ترتیب به صورت زیر تعریف‌می شود [۱۱]:

$$|Z| = \sqrt{Z_r^2 + Z_i^2} \qquad (۱)$$

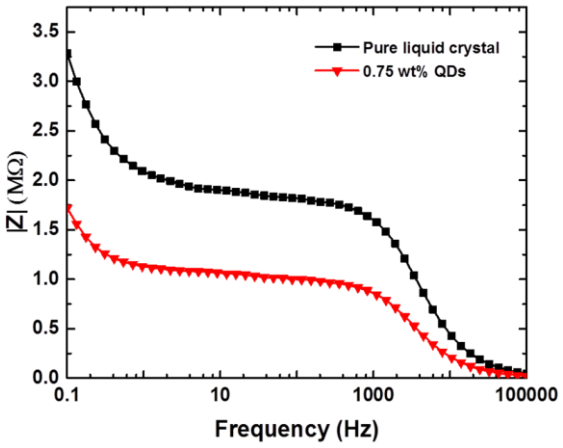
$$\tan(\varphi) = \frac{Z_r}{Z_i} \qquad (۲)$$

[1] nano particles

[2] electrochemical impedance spectroscopy
[3] interfacial regions
[4] overall impedance

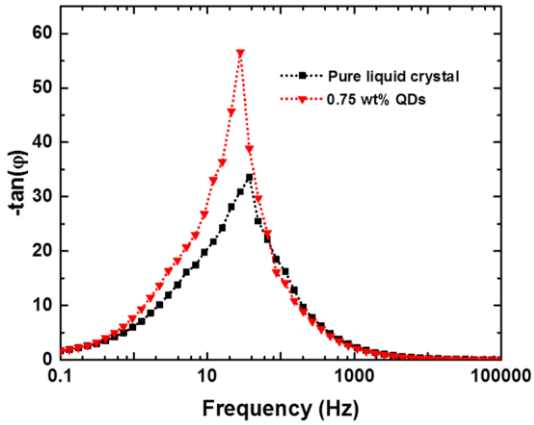
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

که در آن Z_r و Z_i به ترتیب نمایش‌دهنده بخش‌های حقیقی و موهومی امپدانس می‌باشند. شکل ۱ امپدانس کلی بلور مایع خالص و بلور مایع حاوی نقاط کوانتومی با غلظت ۰٫۷۵ درصد وزنی را نشان می دهد. همانطور که گزارش شده است [۱۲]، برهم کنش میان مولکول های بلور مایع روی سطح در بازه فرکانسی Hz ۰٫۱ تا ۱۰ Hz اتفاق می افتد و در بازه ۱۰ Hz تا ۱۰ MHz ممان دوقطبی های مولکول های بلورمایع درون بالک با میدان الکتریکی برهمکنش می کنند. مطابق شکل ۱، در بازه ۰٫۱ تا ۴ Hz، OI بلور مایع خالص و بلور مایع حاوی نقاط کوانتومی با افزایش فرکانس کاهش می‌یابد و پس از آن در بازه فرکانسی ۴ تا ۲۰۲ Hz تقریباً ثابت باقی می‌ماند.



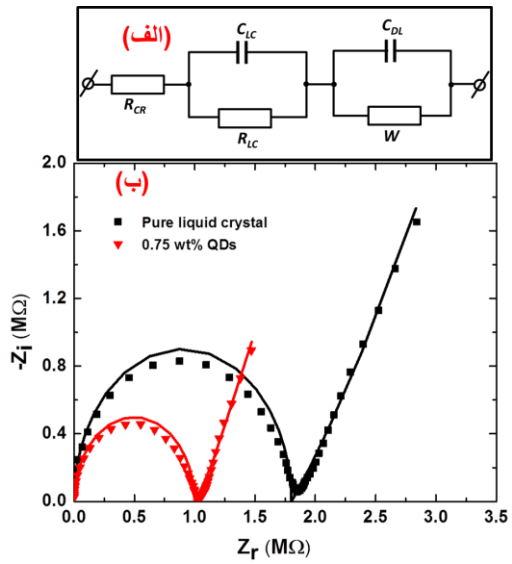
شکل۱: امپدانس کلی بلورمایع خالص و بلورمایع حاوی نقاط کوانتومی با غلظت ۰٫۷۵ درصد وزنی.

با افزایش بیشتر فرکانس، مقدار OI کاهش یافته و به خط مجانب افقی میل می کند. از طرف دیگر، مقدار OI برای بلور مایع حاوی نقاط کوانتومی در مقایسه با بلور مایع خالص، کاهش یافته است. شکل ۲ وابستگی فرکانسی $tan(\varphi)$ را نشان می دهد. قدر مطلق $tan(\varphi)$ با افزایش فرکانس به طور خطی افزایش می یابد و به یک مقدار بیشینه می‌رسد. $tan(\varphi)$ برای بلور مایع حاوی نقاط کوانتومی به سمت فرکانس های کمتر کشیده می‌شود. شکل ۳ منحنی منفی قسمت موهومی $-Z_i$ بر حسب قسمت حقیقی Z_r را برای نمونه ها نمایش می‌دهد.



شکل ۲: تانژانت اتلاف دی الکتریک بلورمایع خالص و بلورمایع حاوی نقاط کوانتومی با غلظت ۰٫۷۵ درصد وزنی.

هر منحنی شامل یک نیم دایره در ناحیه فرکانس های بالا، و یک خط مستقیم در ناحیه فرکانس های پایین است.



شکل ۳: الف) مدار معادل و ب) منحنی های امپدانس موهومی بر حسب حقیقی نمونه های بلور مایع.

برای توصیف رفتار الکتروشیمیایی سلول‌های بلور مایع مدارهای الکتریکی معادل[5] (EEC) متفاوتی گزارش شده‌است [۹ و۱۲]. در این تحقیق از مدار نشان داده شده در شکل ۴ الف استفاده شده-است. در این مدار، R_{CR}، مقاومت الکترودها، R_{LC}، مقاومت بلور مایع، C_{LC} ظرفیت خازنی بلور مایع، C_{DL}، ظرفیت خازنی لایه دوگانه و W، عنصر واربورگ سلول می‌باشد. در شکل ۳ ب، نقاط

[5] equivalent electrical circuits

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

نقطه‌ها نشان دهنده داده های آزمایشگاهی و خطوط پر نشان دهنده نتایج فیت شده با استفاده از مدل EEC می‌باشد. اجزاء مختلف مدار مربوط به بلورهای مایع، بدست آمده بر اساس مدل EEC معرفی شده در شکل ۳ الف، در جدول ۱ ارائه شده‌است. C_{LC} و C_{DL} در بلور مایع حاوی نقاط کوانتومی افزایش یافته‌است در حالی که تغییرات R_{LC} و W کاهشی بوده‌است. با توجه به افزایش گذردهی در بلور مایع حاوی نقاط کوانتومی، افزایش C_{LC} قابل توجیه است. از طرفی افزایش C_{DL} نشان‌دهنده افزایش برهم‌کنش میان مولکول‌های بلور مایع و نقطه کوانتوم می‌باشد. کمیت‌های مختلف فیزیکی که می‌توان بر اساس این اجزاء بدست آورد شامل هدایت پذیری الکتریکی (σ)، تحرک پذیری (μ)، چسبندگی (η)، ضریب نفوذ (D) و ضخامت لایه نفوذ نرنست[6] (δ_N) در جدول ۲ خلاصه شده است.

جدول ۱: عناصر مدار EEC بلورهای مایع.

sample	R_{LC} (MΩ)	C_{LC} (pF)	C_{DL} (μF)	W (MΩ $s^{-0.5}$)
E7	1.80	35.61	0.19	15.04
E7+QD	0.99	72.88	0.67	2.49

جدول۲: کمیت های فیزیکی مختلف بدست آمده با استفاده از طیف EIS

sample	σ (10^{-9} S cm^{-1})	μ (10^{-10} m^2 s^{-1} V^{-1})	D (10^{-12} m^2 s^{-1})	η (mPa s)	δ_N (μm)
E7	1.54	8.73	22.29	4.42	15.10
E7+QD	2.80	3.83	9.78	10.08	6.26

طبق جدول ۱، هدایت پذیری در بلور مایع حاوی نقاط‌کوانتومی افزایش یافته است.

نتیجه گیری

در این تحقیق خواص الکتروشیمیایی سلول بلور مایع نماتیک خالص و حاوی نقاط کوانتومی هسته/ پوسته ZnCdS/ZnS آلائیده شده با نیکل (Ni: ZnCdS/ZnS) مورد مطالعه قرار گرفت. طیف امپدانس الکتروشیمیایی نمونه‌ها در بازه فرکانسی ۰٫۱ Hz تا ۱۰۰ kHz مورد مطالعه قرارگرفت. پارامترهای مختلفی چون هدایت‌پذیری الکتریکی، تحرک‌پذیری، چسبندگی، ضریب نفوذ و ضخامت لایه نفوذ نرنست، با فیت کردن یک مدار الکتریکی معادل مناسب با داده های تجربی بدست آمده است. نقاط کوانتومی باعث افزایش چشمگیری در هدایت‌پذیری الکتریکی و ظرفیت بار بلور مایع نماتیک شده‌اند.

مرجع ها

[1] J. Mather, L. P. Jones, P. Gass, A. Imai,T. Takatani and K. Yabuta, "Potential improvements for dual directional view displays", *Applied Optics* **53**, NO. 4 (2014) 769–776.
[2] L. Wang, "Self-activating liquid crystal devices for smart laser protection", *Liquid Crystals* **43**, NO. 13 (2016) 2062–2078.
[3] S. H. Ryu, M. J. Gim, W. Lee, S. W. Choi and D. K. Yoon, "Switchable photonic crystals using one-dimensional confined liquid crystals for photonic device application", *ACS Applied Materials & Interfaces* **9**, NO. 3 (2017) 3186–3191.
[4] L. D. Rodrigues, D. Sunil, D. Chaithra and P. Bhagavath, "1,2,3/1,2,4-Triazole containing liquid crystalline materials: An up-to-date review of their synthetic design and mesomorphic behavior", *Journal of Molecular Liquids* **297**, (2020) 111909.
[5] J. Prakash, S. Khan, S. Chauhan and A. M. Biradar, "Metal oxide-nanoparticles and liquid crystal composites: A review of recent progress", *Journal of Molecular Liquids* **297**, (2020) 112052.
[6] D. Jayoti, P. Malik, S. K. Prasad, "Effect of ZnO nanoparticles on the morphology, dielectric, electro-optic and photo luminescence properties of a confined ferroelectric liquid crystal material", *Journal of Molecular Liquids* **250**, (2018) 381–387.
[7] S. K. Gupta, D. P. Singh, R. Manohar and S. Kumar, "Tuning phase retardation behaviour of nematic liquid crystal using quantum dot", *Current Applied Physics* **16**, (2016) 79–82.
[8] T. Zhang, C. Zhong and J. Xu, "CdS-Nanoparticle-Doped Liquid Crystal Displays Showing Low Threshold Voltage", *Japanese Journal of Applied Physics* **48**, NO. 5 (2009) 055002.
[9] N. Dalir, S. Javadian, J. Kakemam and S. M. Sadrpoor, "Enhance the electrical conductivity and charge storage of nematic phase by doping 0D photoluminescent graphene was prepared with small organic molecule as a new array quantum dot liquid crystal displays", *Journal of Molecular Liquids* **276**, (2019) 290–295.
[10] R. Sahraei, E. Soheyli, Z. Faraji and M. S. Beigi, "Facile, one-pot and scalable synthesis of highly emissive aqueous-based Ag,Ni:ZnCdS/ZnS core/shell quantum dots with high chemical and optical stability", *Nanotechnology* **28**, NO. 47 (2017) 475604.
[11] B. Belyaev and N. A. Drokin, "Impedance spectroscopy investigation of electrophysical characteristics of the electrode-liquid crystal interface", *Physics of the Solid State* **57**, NO. 1 (2015) 181–187.
[12] N. Dalir, S. Javadian, J. Kakemam and A. Yousefi, "Evolution of electro-chemical and electro-optical properties of nematic liquid crystal doped with graphene oxide", *Journal of Molecular Liquids* **265**, (2018) 398–407.

[6] Nernst diffusion layer thickness

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

تخمین دز دریافتی ارگانهای حساس در اسکن قلب (MIBI) با استفاده از تصاویر اسپکت

فیروزبخت ، مهسا ؛ صنیعی، الهام؛ صالحی باروق، مهدی

گروه مهندسی هسته ای-مهندسی پرتو پزشکی،واحد تهران مرکزی، دانشگاه آزاد اسلامی، تهران، ایران

چکیده

*اسکن قلب یکی از اسکن های متداول در مراکز پزشکی هسته ای به منظور تشخیص بیماری های قلبی وتشخیص گرفتگی عروق کرونر می باشد. هدف از انجام این مطالعه محاسبه دز جذبی در ارگان های کبد،قلب و تیروئید در سنتی‌گرافی قلب با رادیوداروی ^{99m}TC-MIBI می باشد. به این صورت که ابتدا رادیو داروی ^{99m}TC-MIBI به بیمار در مرحله استرس ورست تزریق شد و سپس تصویربرداری توسط دوربین گاما در زمان های ۱۵، ۳۰، ۶۰، ۱۵۰دقیقه بعد از تزریق رادیودارو در هر دو مرحله صورت پذیرفت. سپس با روش تلفیق نماها مقدار اکتیویته محاسبه شد و در نهایت توسط روش MIRD مقدار دز جذبی محاسبه شد. در نهایت مقادیر دز جذبی به ازای اکتیویته تجویزی برای ارگان های قلب ،کبدو تیروئید در مرحله استرس به ترتیب ۴.۴و۶.۷۴ و۰.۹۹ **mrad/mCi** ودر مرحله رست به ترتیب ۳.۴و۷.۶و ۱.۰۱ **mrad/mCi** بدست آمد. مطابق این مطالعه کبد بیشینه دز جذبی وتیروئید کمینه دز جذبی را دریافت کردند.*

واژه های کلیدی: *دز جذبی، روش تلفیق نماها، MIRD ، سنتی‌گرافی*

Estimation of Absorbed Dose of Organs in Cardiac Scan [MIBI] using SPECT

Firuzbakht, Mahsa; Saniei, Elham;Salehi Borough, mehdi;

Department of Medical Radiation engineering, Central Tehran Branch, Islamic Azad University, Tehran

Abstract

Cardiac scans are one of the most common scans in nuclear medicine centers to diagnose heart disease and diagnose coronary artery disease. The aim of this study was to calculate the absorption dose of the liver, heart and thyroid organs in traditional heart cardiography with MIBI-TC[99m] and dosimetry [MIRD] method on patients who completed stress and rest phase in two different days. In this study patients referring to the nuclear medicine department were conducted in stress and rest challenge in two different days [the rest phase in the first day and stress phase in the second day], In each phase, 20 mCi MIBI was injected to patient. And then the uptake activity in studied organs was measured by conjugate view method. And finally the absorbed dose of organs was calculated using MIRD dosimetry. Obtained measures of the mean absorbed dose for heart, liver, and thyroid respectively were the same in the stress phase: a. heart: 4.4 mrad/mCi, 74.6 mrad/mCi, 2.1 mrad/mCi. And in the rest phase they were respectively: a. heart: 3.41 mrad/mCi; b. liver: 7.6 mrad/mCi,; c. thyroid: 1.01 mrad/mCi. Generally, the results of this research showed that the absorbed dose of the thyroid was less than heart and liver and absorbed dose of the liver was more than the others.

Keywords: absorbed dose, MIRD, conjugate view method

PACS No. ۲۸

مقدمه

یکی از کاربرد های مواد پرتوزا، تشخیص و درمان بیماری هاست که در پزشکی هسته ای تشخیص و درمان بیماری ها توسط رادیودارو انجام می شود.تصاویر پزشکی هسته ای به علت در برداشتن داده های فیزیولوژیکی از ارزش بسیار برخوردار هستند.[۱]

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد

http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

رادیودارویی که در این پژوهش مورد بررسی قرار گرفت، ^{99m}TC-MIBI[1] بود. ^{99m}TC-MIBI به صورت داخل وریدی تزریق میشودوحجم توزیع بالایی دارد.[۲] این رادیو دارو سبب ایجاد دز داخلی در بدن بیمار می شود.[۳] در واقع روش های متعددی برای اندازه گیری دز داخلی مواد پرتوزا در پزشکی هسته ای وجود دارد. در این مطالعه روش MIRD را که یکی از معتبرترین روشهای دزیمتری داخلی در پزشکی هسته ای است، استفاده شده است. هدف از انجام این مطالعه اندازه گیری دز جذبی ارگان های کبد،تیروئیدو قلب بعد از تزریق رادیوداروی ^{99m}TC- MIBI در مرحله استرس با استفاده از تصاویر اسپکت است.

مواد و روش ها

این مطالعه روی ۲۰ بیمار که به بخش پزشکی هسته ای بیمارستان بعثت استان تهران مراجعه کردند، انجام شد. در این مطالعه، مرحله رست در یک روز و مرحله استرس در روز بعد انجام شد و در هر مرحله ۲۰ میلی کوری رادیو داروی ^{99m}TC-MIBI به بیمار تزریق شد.

روش انجام اسکن

دوربین گاما [Dual-Head] روی قله kev ۱۴۰ با عرض پنجره ی ۲۰ ٪ ± برای ^{99m}TC جهت اسکن از بیماران تنظیم شد. سپس از هر یک از بیماران خواسته شد که به روی تخت دوربین گاما قرار بگیرند و سپس موازی ساز[2] های دوربین گاما در فاصله ی مناسب از بیمار تنظیم شد. سپس رادیوداروی ^{99m}TC-MIBI به بیمار تزریق شد و ۱۵ دقیقه بعد تصویر برداری در ناحیه قدامی و خلفی آغاز شد و سپس تصاویر در زمان های۳۰، ۶۰ و ۱۸۰ دقیقه از هریک از بیماران در مدت زمان یک دقیقه در نمای قدامی[3] و خلفی[4] بدست آمدند. سپس مقدار اکتیویته جذب شده در هریک از ارگان ها در مدت زمان های متفاوت ۲، ۳۰، ۶۰، ۱۸۰ دقیقه بعد از تزریق از رابطه‌ی ۱ بدست آمد[۴].

$$A = \sqrt{\frac{I_A \times I_p}{e^{-\mu t}}} \times \frac{f}{c} \qquad (۱)$$

که در آن t ضخامت بدن بیمار در ناحیه ارگان های موردمطالعه در این پژوهش بر حسب cm بود، که از طریق تصاویر جانبی که از بیماران بدست آمد، محاسبه شد. μeضریب تصحیح خطی[5] است . C فاکتور کالیبراسیون[6] سیستم است که طبق مطالعات برای مقدار اکتیویته مشخص در همان شرایط تصویر برداری از بیمار در هوا توسط شمارش اکتیویته برای ^{99m}TC به دست آمد.I_A و I_p به ترتیب مقدار شمارش در دقیقه در نمای قدامی وخلفی بودند و به این ترتیب محاسبه شدند، که در ابتدا با استفاده از تصاویر اسکن حاصل شده روی مانیتور دوربین گاما در زمان های۱۵ ، ۳۰، ۶۰، ۱۵۰ دقیقه در هریک از نماهای قدامی و خلفی روی هریک از ارگان ها در ناحیه آناتومی ارگان به صورت دستی یک ROI کشیده شد که میزان شمارش در دقیقه و همچنین تعداد پیکسل[7] ناحیه مطلوب توسط نرم افزار دوربین گاما در ناحیه مورد نظر محاسبه شد. و سپس درخارج از ناحیه آناتومیکی هر یک از ارگان ها در حاشیه کناری برای بدست آوردن شمارش زمینه روی تصاویر حاصل از اسکن ناحیه مورد نظر رسم شد. باید توجه داشت که در اینجا برای بدست آوردن شمارش زمینه نباید در ناحیه مربوط به ارگان دیگر که در آن ناحیه میزان شمارش بالا است رسم شود. برای شمارش زمینه[8] نیز میزان شمارش بر دقیقه و همچنین تعداد پیکسل توسط نرم افزار برای ناحیه رسم شده محاسبه شد. و در نهایت طبق رابطه ۲ میزان شمارش در دقیقه I_A و I_p به ترتیب در ناحیه قدامی و خلفی با اعمال تصحیح زمینه محاسبه شدند(رابطه۲)[۵].

$$I_A = I_{ROI\ Source} - I_{ROI\ background} \times S_{sorce} \qquad (۲)$$
$$I_p = I_{ROI\ Source} - I_{ROI\ background} \times S_{sorce}$$

[1] Methoxy Isobutyl Isonitrile
[2] Collimator
[3] Anterior
[4] Posterior
[5] Linear attenuation correction
[6] Calibration factor
[7] Pixel
[8] Background

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بعد از محاسبه اکتیویته برای هر یک از ارگان های کبد، قلب و تیروئید در زمانهای متفاوت ۱۵ ،۳۰ ،۶۰ ،۱۵۰ دقیقه منحنی اکتیویته بر حسب زمان رسم شد، و سپس با محاسبه مساحت زیر نمودار مقدار اکتیویته تجمعی[9] محاسبه شد و در نهایت طبق رابطه (۳) میزان دز جذبی محاسبه شد.

$$D = \tilde{A} \times S \qquad (۳)$$

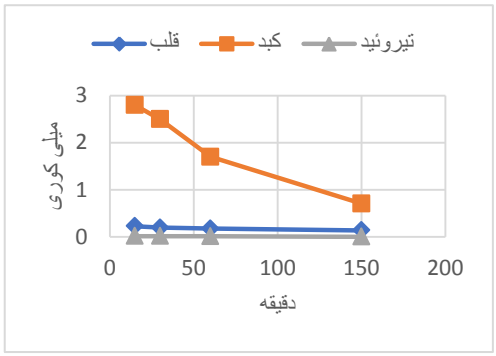
که در این رابطه $\tilde{A}$ اکتیویته تجمعی ارگان هدف،Sدز جذبی در ارگان است.که با استفاده از رابطه ۴ محاسبه می شود.

$$S = \Phi \times \frac{\Delta}{m} \qquad (۴)$$

که در آن Φکسر انرژی گسیل شده از ارگان چشمه که در ارگان هدف جذب میشودو Δ ثابت دز تعادل است که برا ی مجموعه پرتوهای ساطع شده از تکنسیوم برابر۰/۲۵۶ برحسب گرم راد بر میکرو کوری در ساعت درنظر گرفته شده است. [۶]

نتیجه گیری

با رسم ROI بر هریک از ارگان ها در زمان های مورد مطالعه در این پژوهش و محاسبه شمارش در واحد زمان اکتیویته در هر یک از ارگان ها و همچنین محاسبه اکتیویته با استفاده از روش تلفیق نما ها و در نهایت وارد کردن داده ها به نرم افزار اکسل میانگین اکتیویته برای هریک از ارگان ها بدست آمد. بعد از محاسبات مربوط به اکتیویته نمودار میانگین اکتیویته بر حسب زمان برای هریک از ارگان ها رسم شد که نتایج مربوط به میانگین کبد، قلب و تیروئید در مرحله استرس و رست بترتیب در شکل ۱ و ۲ نشان داده شده است.



شکل ۱: نمودار میانگین اکتیویته بر حسب زمان برای ارگان های قلب و کبد،تیروئید در مرحله استرس



شکل ۲: نمودار میانگین اکتیویته بر حسب زمان در مرحله رست در قلب و کبد و تیروئید

همانطور که در شکل ۲ دیده می شود کبد، قلب وتیروئید نمودار نزولی دارند. در کل با گذشت زمان به دلیل گذشت نیمه عمر فیزیکی و بیولوژیکی شاهد کاهش اکتیویته در هر سه ارگان می باشیم. کبد به دلیل اندازه بزرگتر و حجم خون بیشتری که دارد ونیز به دلیل اینکه منشا دفع رادیو داروی MIBI از طریق دفع کبدی می باشد بیشتر از دو عضو دیگر رادیو دارو را دریافت و در نتیجه اکتیویته بیشتری نسبت به قلب وتیروئید دارد بعد از آن قلب

[9] Cumulated Activity

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

و تیروئید به ترتیب مقداربیشتری از رادیوداروی تجویزی را دریافت می کنند. بعد از این مرحله با محاسبه مساحت زیر نمودار اکتیویته لحظه ای مقدار اکتیویته تجمعی برای هر یک از ارگان ها بدست آمد و در پایان دز جذبی محاسبه شد. نتایج مربوط به دز جذبی ارگان‌های کبد، قلب و تیروئیدرا در مرحله استرس و رست در جدول ۱ آورده شده است.

جدول 1 :مقدار میانگین دز جذبی بر حسب راد بر میکرو کوری برای ارگان های کبد،قلب و تیروئید در مرحله استرس و رست

دز جذبی ارگان ها	مرحله استرس	مرحله رست
قلب	۰.۰۰۴۴	۰.۰۰۳۴
کبد	۰.۰۰۶۷	۰.۰۰۷۶
تیروئید	۰.۰۰۰۹۹	۰.۰۰۱

در این مطالعه دیده شد که در دقایق اولیه بعد از تزریق رادیو داروی MIBI ،اکتیویته رادیوداروی تزریقی در ارگانهای قلب وکبد و تیروئید به حداکثر میزان خود رسید و با گذشت زمان کاهش پیدا کرد.[۷]در مورد دز جذبی در مرحله استرس و رست دز جذبی کبد از همه بیشتر و دز جذبی تیروئید از همه کمتر می باشد.افزایش دز جذبی در کبد همانگونه که گفته شدبه دلیل افزایش اکتیویته تجمعی در این ارگان به دلیل بیشتر بودن حجم آن و نیز به دلیل اینکه منشا اصلی دفع رادیو داروی MIBI می باشد اتفاق می افتد. در این مطالعه قلب ارگان هدف می باشد و در مرحله استرس به دلیل افزایش خون رسانی به قلب از طریق ورزش یا داروی دیپریدامول دز جذبی درقلب بیشتر از دز جذبی در قلب مرحله رست می باشد اما در مرحله رست به دلیل کاهش حجم خونی که به سمت قلب می رود میزان بیشتری از اکتیویته به سمت کبد و تیروئید می رود یعنی دز جذبی کبد در مرحله ی رست بیشتر از مرحله استرس است و برای تیروئید هم به همین ترتیب می باشد.

نتایج بدست آمده در این تحقیق تطابق خوبی را با نتایج گزارش شده درگزارش استابین و همکارانش [۸] نشان دادند. ومقاله دیگری توسط دکترزائدی و همکارانش در ۲۰۱۵مقدار دز جزبی را به هر واحد اکتیویته تجویزی گزارش کردند[۹].که این تطابق گویای این است این روش، می تواند روشی مناسب برای محاسبه ی دز جذبی ارگان ها در مراکز پزشکی هسته ای باشد و همچنین با توجه به این که این روش نیازی به تجهیزات خاصی ندارد می تواند به عنوان روشی ساده به متخصصین این بخش به منظور محاسبه دز جذبی پیشنهاد شود.

مرجع‌ها

[۱].Gupta TK. Instrumentation and Its Applications in Nuclear Medicine. Radiation, Ionization, and Detection in Nuclear Medicine: Springer; 2013. p. 451-94.

[۲]. Verbruggen AM ND, Van Nerom CG, Bormans GM, Adriaens PJ, De Roo MJ. . Technetium-99m-L, L-ethylenedicysteine: a renal imaging agent. I. Labeling and evaluation in animals. Journal of nuclear medicine: official publication. Society of Nuclear Medicine 1992; ;33[4]:551-7.

[۳]. Prvulovich EM BJ, Waddington WA, Rudrasingham P, Verbruggen AM, Ell PJ. . Clinical evaluation of technetium-99m-L, L-ethylenedicysteine in patients with chronic renal failure. Journal of nuclear medicine: official publication, Society of Nuclear Medicine. 1997;;38[5]:809-14.

[۴]. McParland BJ. Nuclear medicine radiation dosimetry: advanced theoretical principles: Springer Science & Business Media; 2010.

[۵]. Pereira J ,Stabin M, Lima F, Guimarães M, Forrester J. Image quantification for radiation dose calculations–limitations and uncertainties. Health physics. 2010;99[5]:688.

[۶]. Weber DA, Makler PT, Watson EE, Coffey JL, Thomas SR, London J. Radiation absorbed dose from technetium-99m-labeled bone imaging agents. Journal of Nuclear Medicine. 1989;30[6]:1117-22.

[۷].James H.Thrall.Harvey A.Ziessman.Nuclear Medicine The Requisites.1996

[۸]. Stabin MG. Fundamentals of nuclear medicine dosimetry: Springer; 2008

[۹] 54. Tianwu Xie, Choonsik Lee, Wesley E Bolch, Habib Zaidi, Assessment of radiation dose in nuclear cardiovascular imaging using realistic computational models. Med Phys 42 june 2015

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بررسی اثرات اکسیتونی در ویژگی‌های اپتیکی MXeneهای نیم‌رسانای بر پایه‌ی اسکاندیوم و هافنیوم

مؤمنی فیلی، راضیه ؛ دادستانی، مهرداد ؛ نجاتی‌پور، ریحان

گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه لرستان، خرم آباد، لرستان

چکیده

در این مطالعه، خواص اپتیکی MXeneهای نیم‌رسانای Sc_2CT_2 (T= F, OH, O) و Hf_2CO_2، شامل قسمت‌های حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک و تابع اتلاف انرژی را با حل معادله بث- سالپیتر (BSE) و با استفاده از روش امواج تخت بهساخته خطی با پتانسیل کامل (FPLAPW) محاسبه و تفسیر می‌گردد. در این ترکیبات، ساختارهای اکسیتونی زیر گاف‌های نواری محاسبه شده ظاهر شده‌اند. ترکیبات Sc_2CO_2 و Sc_2CF_2 سه ساختار اکسیتونی و $Sc_2C(OH)_2$ و Hf_2CO_2 دو ساختار اکسیتونی را نمایش می‌دهند. انرژی پیوندی محاسبه شده‌ی اکسیتون‌ها در Sc_2CO_2 نسبت به سایر ترکیبات دیگر بزرگتر است. ویژگی‌های طیفی در توابع اتلاف انرژی در نزدیکی ناحیه گاف نواری به ساختارهای اکسیتونی مربوطه در قسمت موهومی تابع دی الکتریک نسبت داده می‌شوند.

واژه های کلیدی: *MXenes ، خواص اپتیکی، اثرات اکسیتونی، BSE.*

Investigation of excitonic effects in the optical properties of scandium and hafnium MXene semiconductors

Momeni Feili, Razieh; Dadsetani, Mehrdad; Nejatipour, Reihan

Department of Physics, Faculty of Basic Sciences, University of Lorestan, Khoramabad, Lorestan

Abstract

In this study, the optical properties of Sc_2CT_2(T=O,F,OH) and Hf_2CO_2 MXene semiconductors, including real and imaginary parts of dielectric as well as energy loss functions, using the solving of the Bethe-Salpeter equation (BSE) and the full potential linearized augmented plane wave (FPLAPW) method are calculated and interpreted. In these compounds, the excitonic structures have appeared below the calculated band gaps. Sc_2CO_2 and Sc_2CF_2 have three excitonic features whereas $Sc_2C(OH)_2$ and Hf_2CO_2 show two. The calculated binding energies of excitons in Sc_2co_2 are larger than the ones in the other compounds. Spectral features in the energy loss functions near the band gap region were attributed to corresponding excitonic structures in the imaginary part of the dielectric function.

***Keywords**: MXenes, optical properties, excitonic effects, Bethe–Salpeter equation.*
PACS No. 70, 73, 78

مقدمه

پس از کشف گرافن به عنوان اولین ماده‌ی دوبعدی، خواص غیرمعمول الکترونی، مکانیکی و اپتیکی آنها منجر به مطالعات گسترده بر روی آنها در دهه گذشته شده است. پیشرفت‌های اخیر در فناوری نانو امکان ایجاد مواد جدید دوبعدی و تعیین ویژگی‌های آنها در شرایط مختلف را فراهم کرده است و می‌توانیم در مورد مواد دوبعدی فراتر از گرافن بحث کنیم. در میان این مواد جدید، MXene ها که از لایه‌برداری ساختارهای انبوهه در فاز MAX با فرمول شیمیایی $M_{n+1}AX_n$ (M فلز واسطه، A یک عنصر از گروه های ۱۶-۱۳ در جدول تناوبی و X کربن یا نیتروژن است)

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

حاصل می‌شوند، توجه زیادی را به خود جلب کرده است. پیوندهای شیمیایی بین عناصر A-M در فاز MAX ضعیف‌تر از پیوندهای M-X-M هستند بنابراین با استفاده از اسید هیدروفلوئوریک عنصر A از جامدات سه‌بعدی حذف می‌شود و سطوح حاصل $M_{n+1}X_n$ دوبعدی، سریعاً به عناصر گروه T=O, OH, F متصل می‌شوند. با توجه به هندسه و پیکربندی فوق‌العاده MXene ها، خواص زیادی برای کاربردهایی از قبیل ترانزیستورهای اثرمیدانی، ابررایانه‌ها، باتری‌های لیتیوم/سدیم/پتاسیم یون، حفاظت تداخل الکترومغناطیسی، پرکننده‌ها در کامپوزیت‌های پلیمری، نانوکامپوزیت‌های هیبرید، تصفیه‌کننده‌ها، کاتالیزورها، فوتوکاتالیست‌ها برای تولید هیدروژن، تبدیل انرژی در ابزار ترموالکتریکی، ذخیره انرژی و ... فراهم کرده است [۱]. اگرچه مطالعات بسیاری در مورد ویژگی‌های ساختاری و الکترونی این ترکیبات وجود دارد اما با وجود اهمیت مطالعات اپتیکی در فراهم آوردن اطلاعات مفید برای کاربردهای آنها در صنایع اپتیکی و اپتوالکتریکی، به صورت محدودی به آن پرداخته شده است. در این مطالعات ویژگی‌های اپتیکی با محاسبه قسمت های حقیقی و موهومی تابع الکتریک، طیف اتلاف انرژی الکترون و ضریب جذب با استفاده از تقریب فاز تصادفی (RPA) و در چارچوب نظریه تابعی چگالی (DFT) بررسی شده است [۲، ۳]. برای بهره‌برداری کامل از کاربردهای الکتریکی و اپتوالکتریکی این ترکیبات همچون پدیده‌های نورگسیل، دستگاه‌های فوتوولتایی، دیودهای نور گسیل ارگانیک و سلول‌های خورشیدی ارگانیک، روش‌های پیشرفته‌تری مانند نظریه اختلال بس ذره‌ای (MBPT) مورد نیاز است [٤]. MBPT به عنوان یک روش قدرتمند برای مطالعه‌ی خواص الکترونی و اپتیکی گستره‌ای از ترکیبات شناخته شده است. در چارچوب این نظریه می‌توان اثر در نظر گرفتن جفت‌شدگی الکترون‌ها و حفره‌های به جامانده از گذارهای الکترون به عبارتی " اثرات اکسیتونی" را لحاظ کرد، در حالی که این امکان در DFT و RPA وجود ندارد. برای این منظور، در مطالعه‌ی حاضر از حل معادله حرکت تابع گرین دوذره‌ای، معادله Bethe- Salpeter [BSE] [۵] استفاده شده است. بنابراین در این مطالعه برای اولین بار خواص اپتیکی MXeneهای نیم‌رسانای Sc_2CT_2 (T= F, OH, O) و Hf_2CO_2، که شامل قسمت‌های حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک و تابع اتلاف انرژی است با حل معادله BSE محاسبه و تفسیر می‌شود. با مقایسه‌ی نتایج حاصل از BSE و RPA می‌توان اطلاعات مفیدی را برای آینده‌ی کاربردهای MXeneها در اپتوالکتریک و علم مواد بدست آورد.

روش محاسبات

محاسبات ساختاری و الکترونی با استفاده از روش امواج تخت بهساخته خطی با پتانسیل کامل (FP-LAPW) در چارچوب نظریه تابعی چگالی (DFT) انجام شده است. مقادیر $R_{MT}K_{Max}$= ٤ و l_{Max} = ١٠ برای $Sc_2C(OH)_2$ و برای بقیه ترکیبات $R_{MT}K_{Max}$ = ٨ استفاده شده است. تعداد نقاط **k** در ناحیه کاهش‌ناپذیر بریلوئن برابر (١×١٤×١٤) ٢٤ است. برای محاسبهٔ پتانسیل تبادلی–همبستگی از تقریب‌های شیب تعمیم یافته با تابعی پردو و همکاران (PBE-GGA)[٦] و همچنین تابعی اصلاح شده بک–جانسون (mBJ-GGA)[٧] استفاده کرده‌ایم. ساختارهای بلوری و موقعیت‌های اتمی به گونه‌ای بهینه شدند که هر مؤلفه‌ی نیرو وارد بر هر اتم به کمتر از ١ mRy/a.u. برسد و همچنین به منظور جلوگیری از برهم‌کنش بین لایه‌ها، به اندازه ٢٠ Å خلاء در نظر گرفته شده است. با وجود پیشرفت‌های اخیر، هنوز هم در استفاده از نظریه تابعی چگالی برای توصیف درست گاف‌های نواری دقیق و همچنین برهم کنش‌های بین مولکولی بویژه در حالت‌های گذار، مشکلاتی وجود دارد. در RPA گذارهای مستقیم از نوارهای ظرفیت تک‌ذره به نوارهای رسانش خالی در نظر گرفته می‌شود و جفت‌شدگی الکترون– حفره (e-h) و تشکیل جفت e-h های مقید را دربرنمی گیرد. در برخی موارد، علاوه بر ایجاد ساختارهای اکسیتونی در ناحیه گاف انرژی، جفت‌های e-h قدرت نوسانگر را در کل طیف‌های اپتیکی بازتوزیع می‌کنند. این امر باعث می‌شود که RPA قدرت‌های نوسانگر در طیف‌های جذب اپتیکی را به درستی نشان ندهد. بنابراین، استفاده ازMBPT، به‌ویژه برای رژیم پاسخ خطی سیستم‌های نامتناهی که در آنها مقایسه پاسخ خطی با داده‌های تجربی بسیار مفید است، قابل توجیه است. برای محاسبه‌ی خواص اپتیکی در کد exciting [٨]

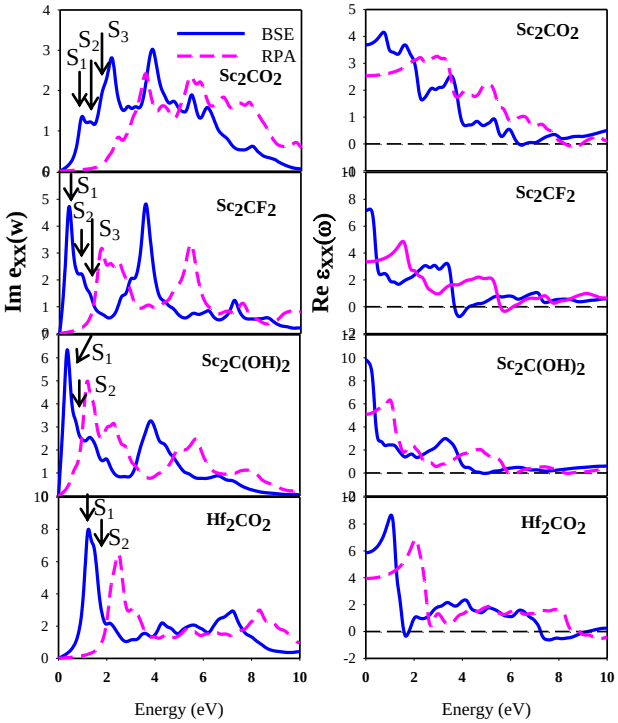
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

معادله BSE براساس روش FPLAPW حل گردید. در محاسبات حالت برانگیخته مقادیر بهینه‌ی $R_{MT}K_{Max}$= ۲/۵ برای $Sc_2C(OH)_2$ و برای بقیه ترکیبات $R_{MT}K_{Max}$ = ۵ استفاده شده است. اثرات اکسیتونی در تابع دی‌الکتریک MXeneهای Sc_2CF_2، Sc_2CO_2، $Sc_2C(OH)_2$ و Hf_2CO_2 به ترتیب با احتساب حالت‌های ظرفیت (رسانش) ۲۰ (۲۰) ، ۱۶ (۱۹) ، ۱۴ (۲۳) و ۱۸ (۱۷) همگرا شده‌اند. تعداد نوار همگرایی مورد استفاده برای محاسبه برهم‌کنش استتاری ۱۲۰ نوار شده است.

نتایج و بحث

ترکیبات MXene دارای ساختار شش‌گوشی با گروه فضایی $P6_3$ / mmc هستند. یک سیستم M_2X شامل سه لایه است، که در آن لایه‌ی C بین دو لایه‌ی فلزهای واسطه M ساندویچ شده است. اتم‌های M در مکان‌های (z، ۱/۲،۲/۳) و اتم C در موقعیت (۰ ، ۰ ، ۰) و گروه‌های T در چهار حالت ممکن قرار دارند [۱]. محاسبات ساختار نواری نشان می‌دهد که MXeneهای مورد مطالعه همگی نیم‌رسانا هستند. با تابعی mBJ-GGA، گاف انرژی برای MXeneهای Sc_2CO_2، Sc_2CF_2، $Sc_2C(OH)_2$ و Hf_2CO_2 به ترتیب ۱/۹۴۹، ۱/۵۲۷، ۰/۹۴۷ و ۱/۱۷۸ eV به دست آمده است که با نتایج محاسبه شده قبلی، در توافق خوبی هستند. همچنین محاسبات ساختار نواری نشان می‌دهد که به جز $Sc_2C(OH)_2$، نیم‌رساناهای دیگر دارای گاف نواری غیرمستقیم هستند. حالتهای انرژی در اطراف تراز فرمی عمدتاً از اوربیتال‌های d فلز واسطه تشکیل شده‌اند، در حالی که هیبریداسیون قوی بین اوربیتال‌های d اتم M و p اتم C در سطح زیر فرمی قابل توجه است.

شکل ۱ قسمت‌های حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک، Re ε(ω) و Im ε(ω)، برای ترکیبات Sc_2CT_2(T= O, F, OH) و Hf_2CO_2 با و بدون درنظر گرفتن اثرات اکسیتونی در محاسبات BSE و RPA در بازه‌ی انرژی نزدیک به گاف نواری را نشان می‌دهد. ترکیبات دارای گاف نواری هستند، بنابراین اثرات استتار در انتقالات اپتیکی نسبتاً ضعیف بوده و درنتیجه وجود اکسیتون‌های با انرژی پیوندی بزرگ در ناحیه گاف نواری بسیار محتمل است.

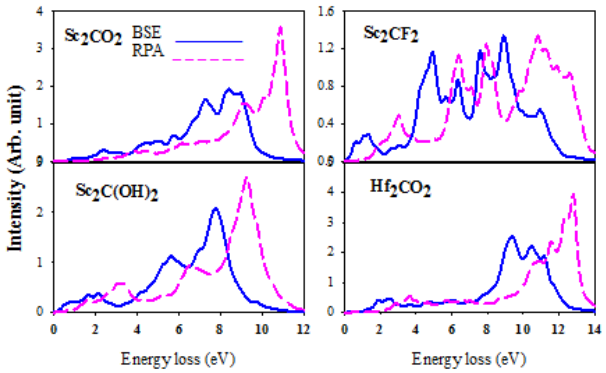


شکل ۱: مؤلفه‌های xx قسمت‌های حقیقی (سمت راست) و موهومی (سمت چپ) تابع دی‌الکتریک Sc_2CT_2 (T=O,F, OH) و Hf_2CO_2 در تقریب‌های RPA و BSE.

براساس تقارن بلوری، تانسور دی‌الکتریک ساختار شش گوشی دو مؤلفه‌ی مستقل (xx و zz) دارد و از آنجا که MXeneهای مورد مطالعه لایه‌های دوبعدی هستند تنها مؤلفه xx حائز اهمیت است. همان‌طور که شکل ۱ نشان می‌دهد، شکل‌های کلی تابع دی‌الکتریک به دست آمده با استفاده از رویکردهای BSE و RPA خیلی متفاوت هستند. هنگام استفاده از RPA، گرچه برخی از ویژگی‌های اصلی طیف در انرژی‌های بالاتر بازتولید می‌شوند، هم شدت و هم شکل کلی طیف مطابق با نتایج BSE نیستند. این نشان می‌دهد که احتساب اثرات اکسیتونی و حل BSE یک اصلاح بر طیف‌های اپتیکی حاصل از تقریب ذره مستقل از طریق جابه‌جا کردن قدرت نوسانگر اپتیکی از انرژی‌های بیشتر به انرژی‌های کمتر اعمال می‌کند و منجر به بازتولید ساختارهای اکسیتونی می‌شود. ترکیبات Sc_2CO_2 و Sc_2CF_2 سه ساختار اکسیتونی و $Sc_2C(OH)_2$ و Hf_2CO_2 دو ساختار اکسیتونی در ناحیه‌ی زیر گاف انرژی نمایش می‌دهند. این ساختارها را با S_1، S_2 و S_3 نشان‌گذاری کرده‌ایم. ساختارهای اکسیتونی S_1 و S_2 در Sc_2CO_2

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

به ترتیب در انرژی‌های ۰/۹۱ و ۱/۲۳ eV واقع شده‌اند و سومین ساختار اکسیتونی، S_3، که دارای شدت بیشتری است در انرژی ۱/۸۵ eV قرار گرفته است. در Sc_2CF_2 ساختارهای اکسیتونی در انرژی‌های ۰/۳۹، ۰/۸۸ و ۱/۲۵ eV واقع شده‌اند، که به ترتیب متناظر با ساختارهای S_1، S_2 و S_3 هستند. اکسیتون‌های S_1 و S_2 در $Sc_2C(OH)_2$ (Hf_2CO_2) به ترتیب در (۱/۲۳) ۰/۳۵ و (۱/۴۱) ۰/۶۱ eV بازتولید شده‌اند. آستانه‌ی جذب در RPA متناظر با مقدار گاف نواری محاسباتی است. انرژی پیوندی اکسیتون S_1 برای Sc_2CO_2، Sc_2CF_2، $Sc_2C(OH)_2$ و Hf_2CO_2 به ترتیب برابر ۱/۵۱، ۱/۳۶، ۰/۸۴ و ۱/۲۵ eV است. این کمیت به صورت اختلاف انرژی بین بیشینه‌ی RPA و انرژی انتقالی ساختار اکسیتونی تعریف می‌شود. بنابراین به نظر می‌رسد که می‌توان ساختار اکسیتونی S_1 را به یک اکسیتون قویاً مقید نسبت داد. به دلیل گاف انرژی بزرگتر Sc_2CO_2، استتار برهم‌کنش مستقیم الکترون و حفره ضعیف‌تر از سایر ترکیبات است. بنابراین انتظار می‌رود که انرژی پیوندی اکسیتون‌ها در Sc_2CO_2 بزرگتر باشد و براساس همین تحلیل $Sc_2C(OH)_2$ که دارای کمترین گاف است، انرژی پیوندی اکسیتون‌ها در آن کمتر است. سهم‌های قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک در RPA و BSE جنبه‌های جالبی را به نمایش می‌گذارند. همچنان که طیف‌های سمت راست شکل ۱ نشان می‌دهند، علاوه بر اینکه ثابت‌های دی‌الکتریک در BSE و RPA پاشندگی‌های مجزایی دارند، ثابت‌های دی‌الکتریک حاصل از BSE بزرگتر از ثابت‌های حاصل از RPA هستند. کمیت ثابت دی‌الکتریک استاتیک در BSE برای Sc_2CO_2، Sc_2CF_2، $Sc_2C(OH)_2$ و Hf_2CO_2 به ترتیب برابر با ۳/۷۱، ۷/۲۵، ۹/۸۶ و ۵/۸۸ است، در حالی که در RPA برابر با ۲/۵۸، ۳/۳۷، ۵/۱۵ و ۴/۰۴ می‌باشد. به‌علاوه، $\mathrm{Re}\,\varepsilon_{xx}$ حاصل از حل BSE در Sc_2CO_2 و $Sc_2C(OH)_2$ به ترتیب در بازه‌های انرژی ۶/۶۱ تا ۷/۱۸ eV و ۴/۵۴ تا ۵/۲۳ eV صفر است. بنابراین، در این بازه‌های انرژی، ضریب بازتاب برابر واحد است. همچنین $\mathrm{Re}\,\varepsilon_{xx}$ در برخی از بازه‌های انرژی ترکیبات Sc_2CF_2 و Hf_2CO_2 دارای مقادیر منفی است. در ادامه و برای تکمیل بحث، تابع اتلاف انرژی که شامل اثرات اکسیتونی است، برای ترکیبات مورد مطالعه در شکل ۲ نشان داده شده است. ساختار اول در تابع اتلاف برای $Sc_2CO_2(Sc_2CF_2, Sc_2C(OH)_2, Hf_2CO_2)$ که در انرژی‌های (۱/۷۸، ۰/۴۳، ۰/۵۱) ۰/۹۲ eV بازتولید شده‌اند، به ترتیب نشانه‌ی انتقالات اکسیتونی حاضر در $\mathrm{Im}\,\varepsilon(\omega)$ در انرژی‌های (۱/۲۳، ۰/۳۵، ۰/۳۹) ۰/۹۱ eV هستند و همان‌گونه که انتظار می‌رود در انرژی‌های بالاتر نسبت به طیف جذب واقع شده‌اند.



شکل ۲: تابع اتلاف انرژی Sc_2CT_2 (T=O,F, OH) و Hf_2CO_2 در تقریب‌های RPA و BSE.

نتیجه گیری

ساختارهای اکسیتونی را در Sc_2CT_2 (T=O,F, OH) و Hf_2CO_2 با حل BSE برای تابع گرین دو ذره‌ای مطالعه کردیم. نتایج ما تأیید می‌کند که اثرات اکسیتونی نقش مهمی در خصوصیات اپتیکی ترکیبات مورد مطالعه دارند. در مقایسه با RPA، نتایج BSE منجر به جابه‌جا کردن قدرت نوسانگر اپتیکی از انرژی‌های بیشتر به انرژی‌های کمتر در طیف‌های اپتیکی می‌شود.

مرجع‌ها

[۱] M. Khazaei, M. Arai, T. Sasaki, C. Y. Chung, N. S. Venkataramanan, M. Estili, Y. Sakka and Y. Kawazoe, *Adv. Funct. Mater* **23**, (2013) 2185.
[۲] Sh. Wang, Y. L. Du, W. H. Liao, *Chin. Phys. B.* **26**, (2017) 017806.
[۳] H. Zhang, G. Yang, X. Zuo, H. Tang, Q. Yanga, G. Lia, *J. Name.* **00**, (2013), 1-3.
[۴] A. L. Fetter H. D. Walecka, *Quantum Theory of Many- Particle Systems* (New York: McGraw-Hill) (1917).
[۵] E.E. Salpeter and H.A. Bethe, *Phys. Rev.* **84**, (1951) 1232.
[۶] J. P. Perdew, K. Burke and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* **77**, (1996) 18.
[۷] F. Tran and P. Blaha, *Phys. Rev. Lett.* **102**, (2009) 226401.
[۸] A. Gulans, S. Kontur, C. Meisenbichler, D. Nabok, P. Pavone, S. Rigamonti, S. Sagmeister, U. Werner and C. Draxl, *J. Phys.: Condens. Matter* **26**, (2014) 363202.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

تنظیم‌پذیری طول‌موج‌های تشدید و برانگیختگی مدها در تشدیدگرهای حلقوی پلاسمونی با چند شکاف متقارن

میربخشی، خدیجه ؛ قادی، امین

گروه فیزیک اتمی و مولکولی ،دانشکده علوم پایه، دانشگاه مازندران، بابلسر

چکیده

در این مقاله یک تشدیدگر حلقوی پلاسمونی با دو موجبر فلز-دی الکتریک-فلز در ابعاد نانو بررسی شده است. طول‌موج‌های تشدید و مدهای برانگیخته‌ی این تشدیدگر حلقوی با ایجاد یک، دو و سه شکاف به روش تفاضل محدود حوزه زمان شبیه‌سازی شده است. با تغییر زاویه‌ی شکاف، مدهای تشدید می‌توانند تقویت، تضعیف و قطع شوند. این پدیده ناشی از قطبش میدان الکتریکی در منطقه شکاف است. مدهای زوج زمانی که میدان الکتریکی موازی با شکاف قطبیده شده‌اند و مدهای فرد در حالتی که میدان الکتریکی عمود بر شکاف باشند، مشاهده می‌شوند. این نتایج پتانسیل گسترده‌ای در فیلترهای چندکاناله تنظیم‌پذیر و نانو حسگرهای زیستی در نانو اپتیک مجتمع ایجاد می‌کند.

واژه‌های کلیدی: *پلاسمون سطحی، پلاسمون حجمی، تشدیدگر پلاسمونی، تشدیدگر حلقوی شکاف دار*

Tunable Resonances and Excitation of Modes in the Plasmonic Symmetrical multi-Split Ring Resonator

Mirbakhshi, Khadijeh ; Ghadi, Amin

Department of Physics, University of Mazandaran, Babolsar,

Abstract

In this paper, a plasmonic ring resonator with two MIM waveguides in nanoscale is investigated. The wavelengths of the resonances and the excited modes of this ring resonator are simulated by creating one, two and three splits using the FDTD. By changing the angle of split, the resonance modes can be amplified, attenuated and disconnected. This phenomenon is due to the polarization of the electric field in the split region. Even modes are seen when the electric field is polarized parallel to the split, and the odd modes are observed when the electric field is perpendicular to the split. These results create extensive potential in tunable multichannel filters and biological biosensors in integrated nanoparticles.

***Keywords**: surface plasmon, split-ring resonator, multi-split ring resonator, FDTD*

PACS No. *41*

مقدمه

علم پلاسمونیک توانایی محصور کردن امواج الکترومغناطیس در ابعادی بسیار کوچکتر از طول‌موج تابشی است. این فرآیند براساس برهم‌کنش امواج الکترومغناطیسی تابشی به سطح فلز و الکترون‌های رسانش آن رخ می‌دهد.پلاسمون سطحی، امواج الکترومغناطیسی تحریک شده‌ای هستند که در سطح تماس فلز و دی‌الکتریک منتشر می‌شوند و در جهت عمود بر سطح یعنی نفوذ به درون فلز و دی‌الکتریک به صورت ناپایدار و میرا شونده هستند. پلاسمون‌های سطحی به دو دسته‌ی پلاریتون پلاسمون سطحی و پلاسمون سطحی متمرکز شده تقسیم می‌شوند[۱]. با استفاده از

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

خاصیت محصورسازی امواج الکترومغناطیس به وسیله‌ی ساختارهای پلاسمونی، تشدیدگرهای پلاسمونی در ابعاد نانومتر و زیر حد پراکندگی افق جدیدی را در ساختارهای نانو فوتونیکی ایجاد کرده است. به وسیله‌ی تحریک تشدید پلاسمون‌های سطحی در نانو ساختارهای فلزی حد پراکندگی می‌تواند پیشی بگیرد و این پدیده به هندسه و اطراف محیط ساختار بستگی دارد. ساختارهای پلاسمونی به دو دسته‌ی فلز-دی الکتریک-فلزو دی الکتریک-فلز-دی الکتریک تقسیم می‌شوند[۲]. یکی از مهم‌ترین قطعه‌ها در مدارهای مجتمع فوتونیکی، تشدیدگر حلقوی پلاسمونی است. فرکانس‌های تشدید به وسیله‌ی تنظیم پارامترهای هندسی حلقه قابل تنظیم هستند[۳] . به‌جای تغییر پارامترهای ساختاری سیستم کل می‌توان با ایجاد یک یا چند شکاف و تغییر زاویه‌ی آن طیف وسیعی از طول‌موج‌های تشدید را بدست آورد؛ در مقاله[۵] یک تشدیدگر حلقوی تک شکاف بررسی شده است. در این مقاله طیف توان عبوری و مدهای برانگیخته تشدیدگر حلقوی با دو و سه شکاف متقارن شبیه سازی و با ساختار تک شکاف مقایسه می‌شود. همچنین شکاف تشدیدگر حلقوی می‌تواند از تشدیدهای چندقطبی پلاسمونی پشتیبانی کند که در ساخت فیلترهای چندکاناله کاربرد دارد[٤].

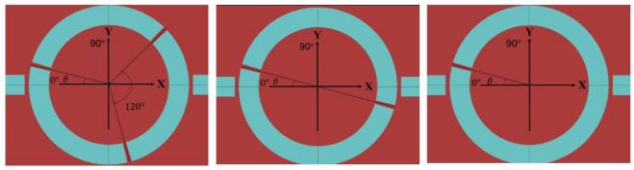
نظریه و شبیه‌سازی مسئله

معادلات اساسی حاکم بر پاسخ‌های الکترومغناطیس محیط یا همان برهم‌کنش امواج الکترومغناطیس و ماده در ابعاد ماکروسکوپیک توسط معادلات ماکسول توصیف می‌شود. بالای یک ناحیه‌ی فرکانسی، ویژگی نوری فلزات به‌وسیله مدل پلاسما توضیح داده می‌شود که نتیجه‌ی معادلات ماکسول است. الکترون‌ها در پاسخ به میدان الکترومغناطیسی اعمال شده نوسان می‌کنند و حرکتشان با برخوردهایی با فرکانس $\upsilon=1/\tau$ اتفاق می‌افتد، میرا می‌شود. (τ زمان آرامش گاز الکترون آزاد)

در مدل الکترون آزاد در فرکانس‌های خیلی بزرگ‌تر از فرکانس پلاسما تابع دی‌الکتریک به سمت صفر میل می‌کند. برای فلزات نجیب (مثل طلا، نقره، مس) تعمیم این مدل در ناحیه‌ی فرکانسی بزرگ‌تر از فرکانس پلاسما (جایی که در پاسخ الکترون‌های آزاد غلبه دارند) چون نوار نزدیک به سطح فرمی پرشده است باعث یک محیط بسیار قطبی می‌شود. این اثر با یک ثابت دی‌الکتریک ε_∞ توصیف می‌شود و به این ترتیب مدل درود برای فلزات واقعی به رابطه‌ی زیر بازنویسی می‌گردد: [۱]

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty - \omega_p^2/\omega^2+i\gamma\omega\ ,\ 1<\varepsilon_\infty<10 \qquad (۱)$$

تشدیدگرهای حلقوی به دلیل فشردگی، فاکتور کیفیت بالا و پشتیبانی از تشدیدهای چندقطبی مؤلفه‌ی مهمی در ساخت مدارهای مجتمع فوتونیکی می‌باشند. در این مقاله یک تشدیدگر حلقوی شکاف دار با دو موجبر (فلز- دی الکتریک-فلز) از جنس هوا در یک لایه‌ی نقره با تنظیم‌پذیری زاویه، اندازه و تعداد شکاف معرفی شده است. وابستگی فرکانسی و تراکم‌پذیری نسبی نقره با استفاده از مدل درود مشخص می‌شود که در این ساختار نقره با فرکانس پلاسمای ۹,۱ الکترون‌ولت، فرکانس میرایی نوسانات ۰,۰۱۸ الکترون‌ولت و ثابت دی‌الکتریک در فرکانس بی‌نهایت ۳,۷ استفاده شده است [۵]. در شکل ۱ سه ساختار تشدیدگر حلقوی با تک شکاف، دو و سه شکاف متقارن نشان داده شده که شعاع داخلی و خارجی حلقه‌ها به ترتیب ۱۵۰ و ۲۰۰ نانومتر، اندازه شکاف ۱۰ نانومتر، فاصله‌ی موجبرهای طرفین تا تشدیدگر ۱۰ نانومتر و پهنای موجبرها ۵۰ نانومتر است. زاویه شکاف‌ها مطابق شکل در جهت ساعتگرد از صفر تا ۹۰ درجه تغییر می‌کند. یک موج تخت با قطبش TM از موجبر سمت چپ در راستای مثبت محور X منتشر می‌شود. برای اندازه‌گیری طیف عبوری و توزیع اندازه میدان مغناطیسی عمود بر صفحه‌ی تشدیدگر روش تفاضل محدود حوزه زمان و جهت جلوگیری از بازتاب‌ها در انتهای خروجی ساختار از روش لایه‌های کامل انطباق‌دهنده استفاده شده است.



(ج) (ب) (الف)

شکل۱: ساختار تشدیدگر حلقوی شکافدار با دو موجبر در طرفین، رنگ قرمز زمینه ی نقره و رنگ آبی هوا را نشان می دهد. الف) تشدیدگر حلقوی تک شکاف ، ب) تشدیدگر حلقوی دو شکاف ، ج) تشدیدگر حلقوی سه شکاف

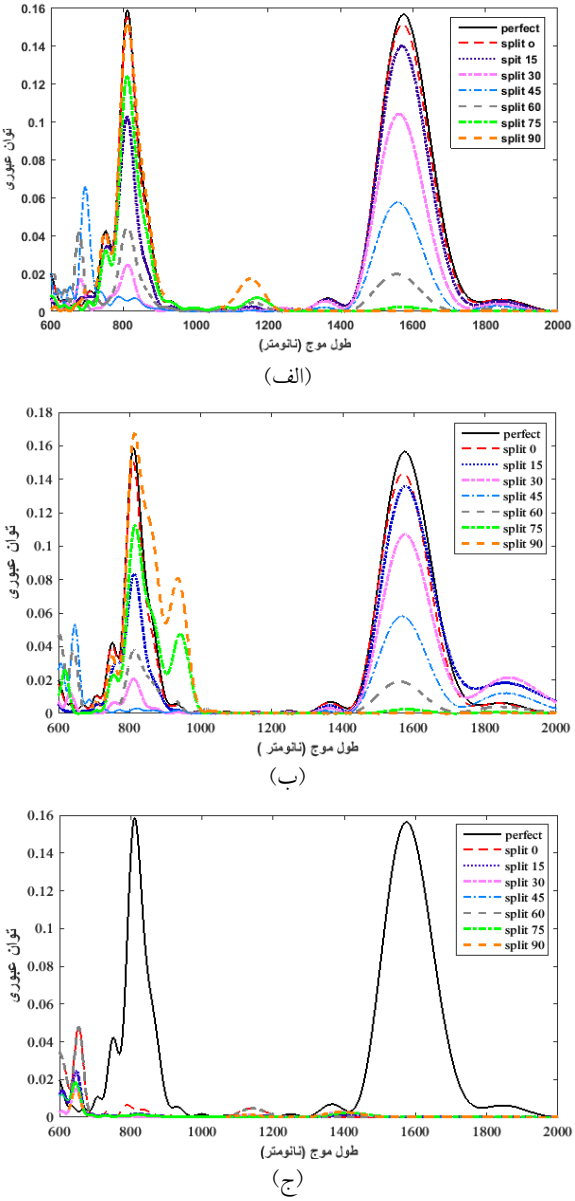
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

تحلیل خروجی شبیه سازی

نمودارهای طیف توان عبوری تشدیدگر حلقوی تک شکاف، دو شکاف و سه شکاف برای زوایای ۰ الی ۹۰ درجه به ترتیب در شکل ۲ قسمت‌های الف، ب و ج نشان داده شده است. تشدیدگر حلقوی تک شکاف در طول‌موج‌های ۱۵٦٤,۷۲، ۱۱۵٤,۸۵، ۸۱۱,٤۳ و ٦۸٦,۲٤ نانومتر دارای بیشینه‌ی توان عبوری است. در طول‌موج ۱۵٦٤,۷۲ نانومتر با افزایش زاویه‌ی شکاف توان عبوری تضعیف می‌شود. در طول‌موج ۸۱۱,٤۳ نانومتر، با افزایش زاویه شکاف از ۰ الی ٤۵ درجه بیشینه توان تضعیف و با افزایش زاویه از ٤۵ الی ۹۰ درجه بیشینه توان تقویت می‌شود. رفتار توان عبوری در دو طول‌موج تشدید دیگر پیچیده‌تر هستند.

تشدیدگر حلقوی دو شکاف در طول‌موج‌های ۱۵٦۷,۵۵، ۸۱۲,٦ و ٦٤٤,۳ نانومتر دارای بیشینه توان عبوری است. ساختار دو شکاف در طول‌موج ۱۵٦۷,۵۵ رفتاری مشابه با ساختار تک شکاف در همین محدوده‌ی فرکانسی دارد. ساختار دو شکاف در طول‌موج ۸۱۲,٦ نانومتر از روند منظمی پیروی نمی‌کند، بیشینه توان مربوط به زاویه‌ی ۹۰ درجه و کمینه توان مربوط به زاویه‌ی ٤۵ درجه است.

تشدیدگر حلقوی سه شکاف در طول‌موج‌های ۱٤۰۳، ۱۱۳٦,٤٤، ۷۹۰,۸۰۸ و ٦۵۰ نانومتر دارای بیشینه توان عبوری است. در طول‌موج‌های تشدید ۱٤۰۳، ۱۱۳٦,٤٤ و ۷۹۰,۸۰۸ نانومتر توان عبوری ضعیف و در طول‌موج ٦۵۰ نانومتر توان عبوری دارای مقدار قابل توجهی است که از زاویه‌ی ۰ درجه با بیشینه‌ی ی توان عبوری به زاویه ۱۵، ٤۵ و ۳۰ درجه به ترتیب کاهشی است. طیف توان عبوری در تشدیدگر حلقوی سه شکاف برای زوایای شکاف ۰، ۳۰ و ٤۵ درجه به ترتیب با ٦۰، ۹۰ و ۷۵ درجه یکسان هستند. دلیل این اتفاق تقارن ساختار تشدیدگر در این دو حالت است. طول موج های تشدید ساختار های دو و سه شکاف به دلیل تغییر هندسه‌ی ساختار، جابه‌جا شده‌اند.



شکل۲: طیف توان عبوری برحسب طول‌موج الف) تشدیدگر حلقوی تک شکاف ب) تشدیدگر حلقوی دو شکاف ج) تشدیدگر حلقوی سه شکاف

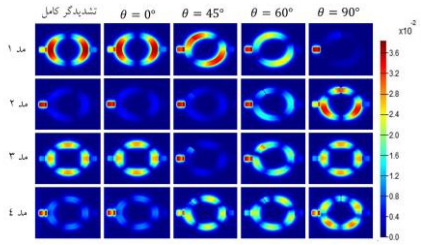
برای هر یک از سه ساختار تشدیدگر حلقوی پروفایل اندازه توزیع میدان مغناطیسی عمود بر صفحه‌ی تشدیدگر (Hz) در هر یک از طول‌موج‌های تشدید و زوایای شکاف شبیه‌سازی شده است. با استفاده از لکه‌های روشن یا گره‌ها در پروفایل توزیع میدان مرتبه‌ی مدهای برانگیخته شده مشخص می‌شود. (مرتبه مد = ۱- تعداد گره‌ها)

در تشدیدگر حلقوی تک شکاف طول‌موج تشدید ۱۵٦٤,۷۵ نانومتر مربوط به مد ا با دو گره است که در زوایای شکاف ۰، ٤۵

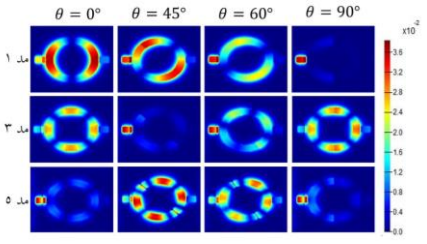
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

و ٦٠ درجه برانگیخته می‌شوند و در زاویه‌ی ۹۰ درجه لکه‌های روشن خاموش می‌شوند. در طول‌موج ۱۱٥٤,۸٥ نانومتر سه لکه روشن یا گره مشاهده می‌شود که مربوط برانگیختگی مد ۲ است. مد ۲ در زوایای ۰ و ٤٥ درجه خاموش و در زوایای ٦٠ و ۹۰ درجه برانگیخته شده است. در تشدیدگر حلقوی دو شکاف طول‌موج ۱٥٦۷,٥٥ نانومتر مربوط به مد ۱ است که در زوایای ۰ الی ٦٠ درجه برانگیخته و در زاویه‌ی ۹۰ درجه خاموش می‌شود. طول‌موج تشدید ۸۱۲,٦ نانومتر مربوط به برانگیختگی مد ۳ در زوایای ۰، ٦٠ و ۹۰ درجه است. طول‌موج تشدید ٦٤٤,۳ نانومتر برانگیختگی مد ٥ را با ٦ لکه‌ی روشن در زوایای ٤٥ و ٦٠ درجه نشان می‌دهد. پروفایل توزیع میدان در تشدیدگر حلقوی با سه شکاف در طول‌موج تشدید ۱٤۰۳ و ۷۹۰,۸۰۸ نانومتر در همه‌ی زوایا دارای لکه‌های خاموش است. طول‌موج تشدید ۱۱۳٦,٤۸ نانومتر مربوط به برانگیختگی مد ۲ و طول‌موج ٦٥۰ نانومتر مربوط به برانگیختگی مد ٥ در همه‌ی زوایا می‌شود.ارتباط بین مرتبه مدهای برانگیخته با زاویه‌ی شکاف با جهت قطبش میدان الکتریکی برانگیخته در منطقه شکاف توجیه می‌شود. با توجه به اصل بابینت و ساختار فلز- دی‌الکتریک – فلز تشدیدگر اگر جهت قطبش میدان الکتریکی موازی شکاف باشد مدهای زوج و اگر عمود بر شکاف باشد مدهای فرد برانگیخته می‌شوند.

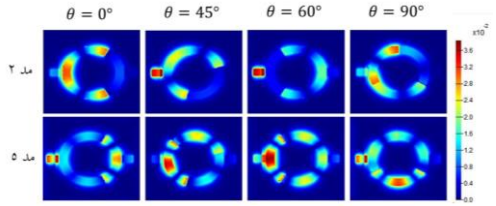
با افزایش تعداد شکاف در هندسه‌ی ساختار، تعداد و مرتبه‌ی مدهای برانگیخته تغییر کرده است.



(الف)



(ب)



(ج)

شکل۳: توزیع اندازه میدان مغناطیسی عمود بر صفحه‌ی تشدیدگر الف) ساختار تک شکاف ب) ساختار دو شکاف ج) ساختار سه شکاف

نتیجه‌گیری

در این مقاله با افزایش تعداد شکاف و تقارن آن‌ها، طول موج‌های تشدید جدید و مدهای مرتبه بالاتر بدست آمد. تشدیدگر حلقوی کامل (بدون شکاف) مدهای ۱ و ۳ را برانگیخته می‌کنند. تشدیدگر حلقوی شکاف دار با زاویه‌ی شکاف ۰ درجه رفتاری مشابه با تشدیدگر حلقوی کامل دارد. زمانی که زاویه‌ی شکاف از ۰ تا ٤٥ در جه تغییر می‌کند مد ۳ خاموش و مد ٤ برانگیخته می‌شود. شکاف با موقعیت ٦٠ و ۹۰ در جه مد ۲ را برانگیخته می‌کنند. اگر ساختار تشدیدگر دارای دو شکاف متقارن باشد مد ۲ و ٤ به صورت کلی خاموش و مد ٥ در زاویه‌ی شکاف ٤٥ و ٦٠ برانگیخته می‌شود. در تشدیدگر حلقوی با سه شکاف متقارن مد ۱ و ۳ و ٤ به صورت کلی خاموش و مد ۲ و ٥ در تمامی زاویه‌ها برانگیخته می‌شوند. این تشدیدگرهای حلقوی در طراحی فیلترهای چند کاناله کاربرد دارند.

مرجع‌ها

[۱] Maier, S.A.: *Plasmonics Fundamentals and Applications*. Springer, Bath (2007)

[۲] I.Zand, M.Bahramipanah, M.S.Abrishamian, and J.M.Liu, BMetal-insulator-metal nanoscale loop-stub structures, *IEEE Photon*. J.,vol.**4,** no.6, pp.2136-2142,Dec. 2012

[۳] T.wang, X. Wen, C.Yin, and H. Wang, The transmission characteristics of surface plasmon polariton in ring resonator, *Opt. Exp.*, vol.**17** , no.26, pp. 24096-24101,Dec.2009

[٤] A.W. Clark, A.K. Sheridan, .Glidle, D.R.S. Cumming, and J.M. Cooper, Tunable visible resonance in crescent shaped nano-split-ring resonators, *Appl.Phys. Lett.*, vol.**91**, no.9, pp. 093109-1-093109-3, Aug.2007.

[٥] Chen, J., et al.: Tunable resonances in the plasmonic split-ring resonator. *IEEE Photonics* J. **6**, 1–6 (2014)

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

اثر پردازش پلاسمای غیرحرارتی در تخریب ترکیب دارویی آموکسی‌سیلین محلول در آب

بختیاری رمضانی، مهدیه[۱]؛ نوحه‌خوان، مجتبی[۱]؛ رفیعی سرمزده، زهرا[۲]؛ رضازاده آذری، فهیمه[۱]؛ رضایی فرد، بهزاد[۱]؛ ایزدی، امیرحسام[۳]؛ بیگ‌محمدی، نرگس[۱]؛ عبداللهی قهی، نیره[۱]؛ عبدالهی درگاه، مهناز[۱]

[۱] پژوهشکده پلاسما و گداخت هسته‌ای، پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، سازمان انرژی اتمی ایران، تهران

[۲] پژوهشکده کاربرد پرتوها، پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، سازمان انرژی اتمی ایران، تهران

[۳] دانشکده فیزیک، دانشگاه علم و صنعت ایران، تهران

چکیده

در این مقاله، تجزیه داروی آنتی بیوتیک آموکسی‌سیلین در محلول آبی با استفاده از سامانه تخلیه سد دی الکتریک با هندسه استوانه‌ای مورد بررسی قرار گرفته شده است. در این سامانه، پلاسمای هوا از تخیله الکتریکی AC، در دمای اتاق و فشار اتمسفر ایجاد می‌شود. محلول آبی آموکسی‌سیلین با غلظت ۱۰۰ میلی‌گرم در لیتر به‌صورت لایه‌ای نازک بر روی سطح الکترود داخلی راکتور پلاسما جریان می‌یابد. پردازش پلاسما بر روی ۳ لیتر محلول و در زمان‌های مختلف از ۵ تا ۱۲۰دقیقه انجام شد. آنالیز فرآیند تخریب با استفاده از طیف‌سنجی کروماتوگرافی مایع، HPLC، انجام شده است. نتایج نشان دادند که پس از ۱۲۰ دقیقه پردازش، حدود ۸۸ درصد آموکسی‌سیلین اکسید شده است.

واژه های کلیدی: *پلاسمای غیرحرارتی، تخلیه سد دی الکتریک، آموکسی‌سیلین، HPLC*

Effect of Non-Thermal Plasma in Degradation Pharmaceutical Amoxicillin in Aqueous Solution

Bakhtiyari Ramezani, Mahdiyeh[1]; Nohekhan, Mojtaba[1]; Naeim Abadi, Aboutorab[2]; Rafiei-Sarmazdeh, Zahra[3]; Rezazadeh Azari, Fahimeh[1]; Rezaei Fard, Behzad[1]; Izadi, Amirhesam[4]; Beigmohammadi, Narges[1]; Abdollahi Ghahi, Nayereh[1]; Abdollahi Dargah, Mahnaz[1]

[1] *Plasma and Nuclear Fusion Research Institute, Nuclear Science and Technology Research Institute, Tehran*

[2] *Department of Physics, Amirkabir University* of *Technology, Tehran*

[3] *Radiation Application Research Institute, Nuclear Science and Technology Research Institute, Tehran*

[4] *Department of Physics, University of Science and Technology, Tehran*

Abstract

In this paper, the decomposition of amoxicillin antibiotic in aqueous solution was investigated using a dielectric barrier discharge in cylindrical configuration. In this system, air plasma is generated with AC electrical discharge, at room temperature and atmospheric pressure. The Amoxicillin in Aqueous with 100 mg/L concentration flow as a film over the surface of the inner electrode of the plasma reactor. Plasma treatment was performed on 3 Liters solution at different times from 5 to 12 minutes. The analysis of the degradation process was performed using liquid chromatography spectroscopy, HPLC. The results showed that after 120 min treatment, about 88% of amoxicillin was oxidized.

***Keywords**: Non-thermal plasma, Dielectric barrier discharge, Amoxicillin, HPLC*
PACS No. 50.52

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مقدمه

با توجه به بحران کمبود آب سالم در جهان یکی از راه‌کارهای عملیاتی، تصفیه‌ی پساب و فاضلاب و بازگرداندن آن به چرخه‌ی طبیعت است. ترکیبات دارویی دسته‌ای از آلودگی‌های آلی آب هستند که به سبب تنوع زیادشان و مصرف بالای آن در سال‌های اخیر و نیز ماندگاری آنها در محیط، بسیار مهم هستند. نگرانی عمده در مواد دارویی بر روی آنتی‌بیوتیک‌ها متمرکز شده است که سبب افزایش مقاومت در برابر جمعیت‌های باکتری‌های طبیعی می‌شود [۱].

روش‌های مختلفی برای تصفیه‌ی آب و فاضلاب وجود دارد از جمله جذب توسط کربن فعال، اسمز معکوس، عریان‌سازی هوا و روش‌های بیولوژیکی. از آن‌جا که پسماند حاصل از روش‌های متداول تصفیه‌ی پساب دارویی دربردارنده غلظت بالاتری از ترکیبات دارویی است که زیست‌تخریب‌پذیر نیستند، خود تشدیدکننده‌ی آلودگی‌های ترکیبات دارویی در محیط زیست هستند. به‌همین دلیل انواع روش‌های تصفیه که درنهایت به فیلتراسیون تجمعی نیاز است برای تصفیه‌ی پساب دارویی مناسب نیستند [۲].

امروزه فن‌آوری‌های پیشرفته‌ی اکسیداسیون (AOP) یکی از روش‌های در حال توسعه و مورد توجه در تصفیه‌ی فاضلاب و پساب هستند، زیرا منجر به تخریب ماکرومولکول‌های آلی از پساب دارویی می‌شوند. روش‌های AOP را می‌توان به ۵ گروه تقسیم کرد [۳]: ۱) برپایه ازن، ۲) برپایه UV، ۳) الکتروشیمیایی، ٤) اکسیداسیون با استفاده از کاتالیست و ۵) اکسیداسیون با روش‌های فیزیکی. در هر گروه هم روش‌های متعددی وجود دارد. در میان آنها از گروه ینجم (اکسیداسیون با روش‌های فیزیکی) روش پلاسمای غیرحرارتی به‌دلیل سرعت واکنش بالا و مصرف انرژی کم، مزایای ویژه‌ای را داراست [٤]. مزیت اصلی فرایند اکسیداسیون پیشرفته توسط پلاسمای غیرحرارتی توانایی تولید اشعه UV، ازن و رادیکال‌های هیدروکسیل، بدون افزودن مواد شیمیایی و یا استفاده از لامپ‌های UV است. عمر رادیکال‌های آزاد از مرتبه چند دقیقه است بجز ازن که نیمه عمر آن به دمای محیط بستگی دارد. نیمه عمر ازن در آب ۲۵ درجه سانتی‌گراد، ۳ روز است [۵]. مسئله‌ی مهمی که دانش پلاسما را متمایز کرده، نتایج مشترک حاصل از بررسی مطالعات، تحقیقات، گزارشات و نتایج فعالیت‌ها در حوزه‌ها و صنایع مختلف است که نشان داده:

• پلاسما به‌عنوان یک فن‌آوری سبز شناخته شده است، زیرا در هر حوزه‌ای که وارد می‌شود زیست‌سازگار و دوست‌دار محیط زیست معرفی می‌گردد.

• دوم آن‌که دراکثر حوزه‌ها به‌کارگیری این روش در کل فرآیند، اقتصادی و مقرون به‌صرفه است. لازم به ذکر است قطعات و تجهیزات موردنیاز برای تولید چشمه‌ی پلاسمای سرد در داخل کشور موجود و قابل خریداری است.

در این مقاله، با طراحی و ساخت سامانه‌ی پلاسمای سرد اثر پردازش آن را در حذف آلودگی‌های پساب دارویی، به‌طور خاص آموکسی‌سیلین را از میان آنتی‌بیوتیک‌ها بررسی می‌کنیم.

طراحی و ساخت راکتور پلاسمای سرد اتمسفری برای تصفیه‌ی پساب دارویی

طراحی موردنظر ما بر اساس راکتور از نوع تخلیه‌ی سد دی‌الکتریک انتخاب شده است. مزیت اصلی این نوع راکتورها این است که طول عمر الکترودها بالاست که در مقیاس صنعتی اهمیت زیادی دارد. نکته‌ی قابل توجه دیگر این‌که سامانه‌ی پلاسمای سرد برای مرحله‌ی نهایی تصفیه‌ی پساب دارویی در نظر گرفته می‌شود. درواقع، مرحله‌ای که پساب فاقد مواد جامد و سوسپانسیون‌های کلوئیدی باشد.

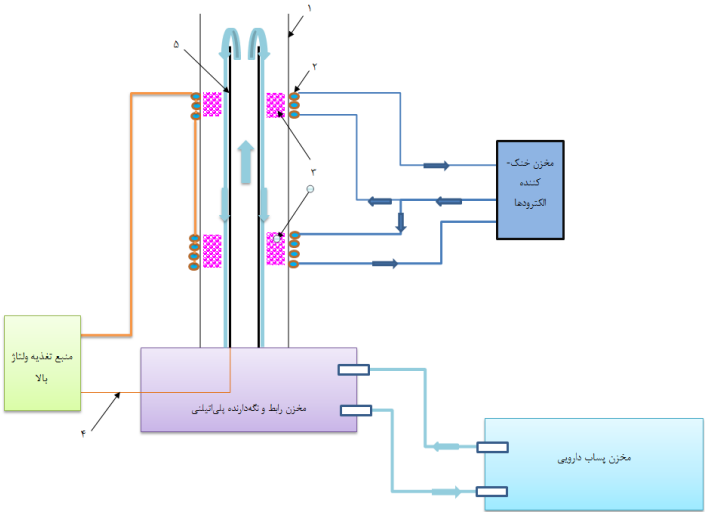
هندسه‌ی طرح، استوانه‌ای درنظر گرفته شد. طرح‌واره‌ی آن در شکل ۱ نشان داده شده است. در این طرح، الکترود داخلی استوانه‌ای از جنس استنلس استیل ۳۱٦ به قطر داخلی ۱٦ *mm* قطر خارجی ۲۰ *mm* و الکترود ولتاژ بالا لوله‌های مسی با قطر خارجی ۵ *mm* و قطر داخلی ۳ *mm* انتخاب شده است. در این سامانه از دو پمپ آب با بیشینه دبی ۲۰۰۰ *lit/h* و ۳۰۰ *lit/h* استفاده شده است که اولی برای چرخش محلول از مخزن پساب به سامانه و دومی برای خنک کردن الکترودهای ولتاژ بالا استفاده می‌شود.

مزایای این طرح عبارت است از:

- حداکثر سطح مقطع تماس آب با پلاسما

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

- امکان تزریق گازهای مختلف
- امکان طیف سنجی مستقیم از پلاسمای تولید شده
- امکان تغییر پارامترهای دستگاه نظیر: تعداد الکترودها، فاصله‌ی الکترودها و توان دستگاه
- امکان ساخت دستگاه در مقیاس بزرگ و صنعتی

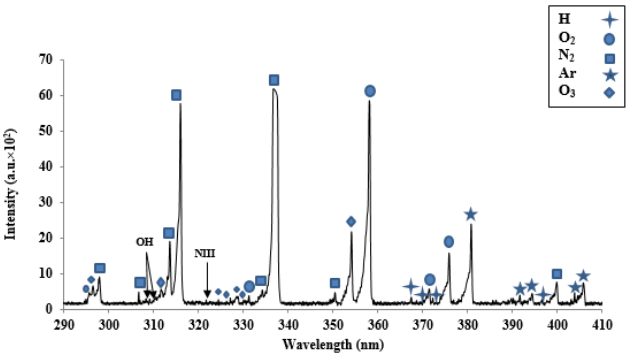


شکل ۱: طرح سامانه‌ی پلاسمای سرد استوانه‌ای با هندسه‌ی استوانه‌ای. ۱- استوانه کوراتز، ۲- الکترود ولتاژ بالا از جنس مس، ۳- محل تشکیل پلاسما، ٤- اتصال زمین، ٥- استوانه استنلس استیل ۳۱٦.

مشخصه‌های تخلیه الکتریکی و طیف‌سنجی پلاسما

در تخلیه الکتریکی از منبع تغذیه ولتاژ بالای ۱۵ kV، نوع جریان سینوسی و با فرکانس ۵۰ kHz استفاده شده است. توان مصرفی ۱۳۰ W است.

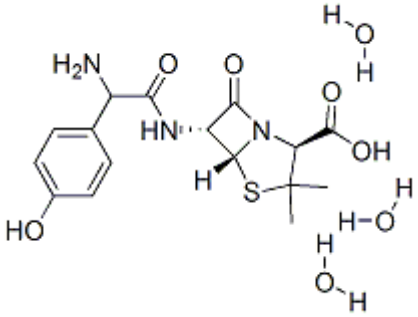
در پلاسماهای غیرحرارتی، انرژی متوسط الکترون از ۱ تا ۵ eV است. ابتدا الکترون‌ها انرژی را از میدان الکتریکی دریافت می‌کنند و سپس آن را بین دیگر اجزای پلاسما و درجه آزادی ویژه سیستم توزیع می‌کنند. برای پلاسمای هوا خطوط نشری مشاهده شده در طیف‌ها عمدتاً شامل نمونه‌های اصلی فعال شامل ازن، گونه‌های اکسیژن و نیتروژن، رادیکال‌های OH و هیدروژن است. از طیف مشخص است که نشر بیشتر در ناحیه نزدیک فرابنفش، ۴۲۰-۲۸۰ نانومتر اتفاق می‌افتد. نشر از گونه‌های N_2 دارای پیک‌هایی نزدیک به این ناحیه است. تشخیص نیتروژن در طیف‌ها به‌دلیل پخش هوای محیط داخل پلاسما است. نشر گونه‌های اکسیژن در ناحیه طول موجی ۳۸۰-۳۵۰ نانومتر در طیف مشخص است. در شکل ۲ طیف نشری پلاسمای هوا در بازه طول موجی ۲۹۰ تا ٤۱۰ نانومتر نشان داده شده است که در آن انواع گونه‌های موجود در پلاسمای هوا بر اساس تغییر طول موج و شدت پیک‌ها مشخص است.



شکل ۲: طیف خطوط نشری پلاسمای هوا در بازه طول موجی ۲۹۰ تا ٤۱۰ نانومتر.

معرفی ماده و روش آنالیز

ترکیب دارویی مورد نظر آموکسی‌سیلین سه آبه با فرمول شیمیایی $C_{16}H_{25}N_3O_8S$ و جرم مولی ٤۱۹/٤٦ g/m است که از شرکت آنتی‌بیوتیک‌سازی ساری تهیه شده است. ساختار شیمیایی آن در شکل ۳ نشان داده شده است.



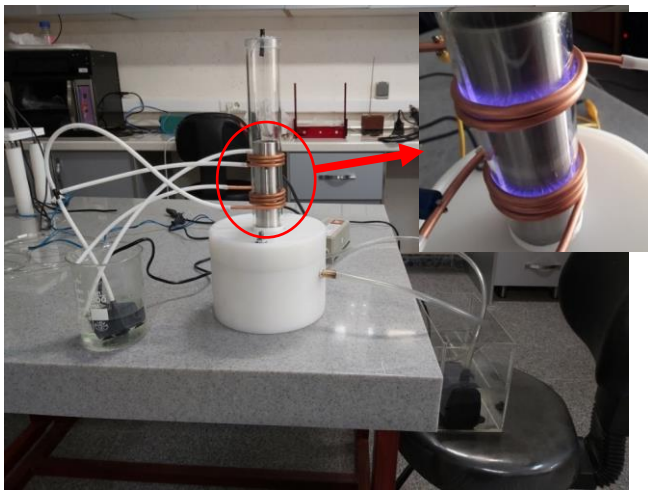
شکل ۳: آموکسی‌سیلین سه‌آبه [٦].

این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد :
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

آنالیز با استفاده از دستگاه HPLC مجهز به آشکارساز UV-Vis انجام شد که محصول شرکت Agilent مدل 1100 از کشور آمریکاست. ستون این دستگاه، Eclipse pluse C18 از شرکت Zorbax با مشخصات ۵ μm, ۴/۶ mm×۲۵۰ mmاست. همه مواد شیمیایی و حلال‌های مورد استفاده دارای گرید A.R. و HPLC بوده است.

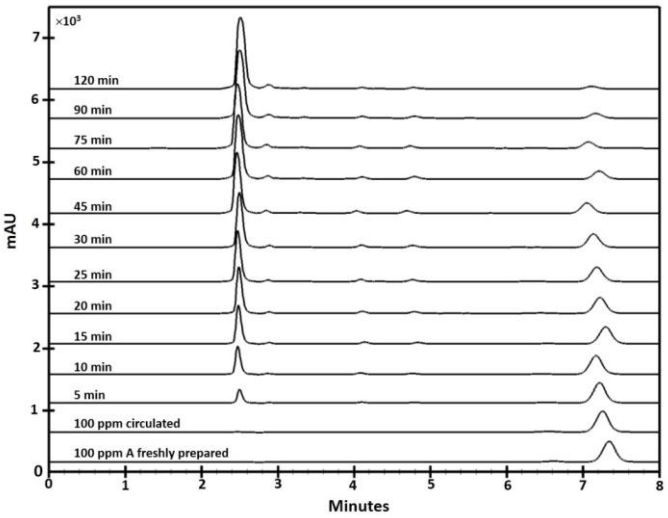
آزمایش و نتایج

۳ لیتر محلول حاوی آموکسی‌سیلین را با غلظت ppm ۱۰۰ تهیه کرده و آن را در زمان‌های مختلف تحت پردازش پلاسما قرار دادیم. در شکل ٤ نمایی از سامانه‌ی پلاسمای سرد مورد استفاده در پردازش محلول آموکسی‌سیلین نشان داده شده است. فلوی آب را روی lit/min ۲ تنظیم کردیم.



شکل ٤: سامانه‌ی پلاسمای سرد مورد برای تصفیه پساب دارویی

کروماتوگرام حاصل از آنالیز HPLC محلول اولیه آموکسی‌سیلین با غلظت اولیه ppm ۱۰۰ و نتایج حاصل از پردازش پلاسمایی آن در مدت زمان‌های مختلف در شکل ۵ نشان داده شده است. در این آنالیز زمان خروج پیک مربوط به آموکسی‌سیلین حدود ۷/۳ است. با قرار گرفتن محلول آموکسی‌سیلین در برابر پلاسما به‌تدریج این پیک حذف شده و پیک جدیدی در دقیقه‌ی ۲/٤ ظاهر می‌شود و با افزایش زمان پردازش، سطح زیر پیک مربوط به آن افزایش می‌یابد. این نشان می‌دهد ماکرومولکول آموکسی‌سیلین مسیر تخریب را طی می‌کند و پیک جدید ماده حاصل از تخریب است.



شکل ۵: کروماتوگرام محلول اولیه آموکسی‌سیلین با غلظت اولیه ppm ۱۰۰ و محلول تحت پردازش پلاسما در مدت زمان‌های مختلف ۵ تا ۱۲۰ دقیقه.

نتیجه‌گیری

در این‌جا سامانه پلاسمای سرد اتمسفری به‌منظور تصفیه پساب دارویی طراحی و ساخته شد. از این سامانه برای اکسیداسیون ۳ لیتر پساب حاوی ppm ۱۰۰ آموکسی‌سیلین استفاده شد. آنالیز محلول پس از پردازش پلاسمایی نشان دادند که بعد از min ۱۲۰، حدود ۸۸ درصد از آموکسی‌سیلین تخریب شده است. بنابراین، الکترون‌های پرانرژی و گونه‌های اکسنده به‌خوبی باعث تخریب ترکیبات دارویی می‌شوند. پیش‌بینی می‌شود با این روش می‌توان محیط را عاری از ترکیبات دارویی نمود، بدون آن‌که لازم باشد از کاتالیست‌ها و یا مواد مصرفی دیگری استفاده کرد.

مرجع‌ها

[۱] World Health Organization (WHO), Pharmaceuticals in drinking water, WHO, Geneva, (2011) & (2012).

[۲] http://www.enviroalternatives.com/watermethods.html

[۳] D. B. Miklos, C. Remy, M. Jekel, K. G. Linden, J. E. Drewes, & U. Hübner; "Evaluation of advanced oxidation processes for water and wastewater treatment–A critical review". *Water research*, **139**, (2018) 118-131.

[٤] M. Lavarioti, D. Mantzavinos, D. Kassinos; "Removal of residual pharmaceuticals from aqueous systems by advanced oxidation processes"; *Environ Int.* **35**, No. 2 (2009) 402–417.

[٥]lenntech.com/library/ozone/decomposition/ozone-decomposition.html

[٦] chemicalbook.com/ChemicalProductProperty_EN_cb6690306.html

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بررسی خواص الکترونیکی نانونوار فسفرین دسته صندلی در مجاورت اتم مس

بهزادی ، فهیمه[۱] ؛ جمال زاده خیرآبادی، شریعه[۲]

[۱] گروه فیزیک دانشگاه فسا، میدان بهمن‌بیگی ، فسا

[۲] گروه مهندسی برق، واحد شیراز ، دانشگاه آزاد اسلامی ، شیراز

چکیده

در این مقاله، خواص الکترونیکی نانونوار فسفرین با لبه دسته صندلی که از یک طرف با اکسیژن و از طرفی دیگر با هیدروژن غیرفعال شده است، مورد مطالعه قرار گرفته است. این ساختار یک نیمه‌رسانا با گاف انرژی غیرمستقیم با مقدار ۰/۴۹ eV است که در حضور اتم مس به رسانا تبدیل می گردد. نه مکان مختلف برای قراردادن اتم مس نزدیک نانونوار درنظر گرفته شد. با محاسبه انرژی جذب هر حالت، پایدارترین حالت مشخص شد. برای حالت پایدار، نمودار جریان بر حسب ولتاژ ترسیم و با نمودار مربوط به نانوریبون بدون حضور مس مقایسه شد. از محاسبات یافت شد که در ولتاژ ۱/۱ V بیشترین مقدار حساسیت به حضور اتم مس وجود دارد.

واژه های کلیدی: *نانونوار فسفرین، دسته صندلی، مس، خواص الکترونیکی.*

Investigation on electronic properties of the armchair phosphorene nanoribbon near the copper atom

Behzadi, Fahimeh[1]; Jamalzadeh Kheirabadi, Sharieh[2]

[1] Department of Physics, University of Fasa, Fasa
[2] Department of Electrical Engineering, Shiraz Branch, Islamic Azad University, Shiraz, Iran.

Abstract

In this paper, the electronic properties of the armchair phosphorene nanoribbon which is passivized by oxygen atoms at one side and hydrogen at another side. This structure is a semiconductor with indirect band gap with the value 0.49 eV that it is transit to the metal in the presence of copper atom. Nine different locations were considered to put copper atoms. By calculating the absorption energy of each case, the stable case is found. For the stable case, the current versus voltage curve of the stable case is plotted and compared with the curve of the nanoribbon without the presence of the copper atom. It is found from calculation that there is a high sensitivity to the presence of copper atom at voltage 1.1 V.

***Keywords**: phosphorene nanoribbon, armchair, copper, electronic properties.*

PACS No.

مقدمه

موضوع مواد دوبعدی توجه بسیاری از دانشمندان را به خود جلب کرده است. اولین ماده دوبعدی گرافن است که در سال ۲۰۰٤ بطور تجربی ساخته شد [۱]. از جمله مواد دو بعدی دیگر فسفرین است که به دلیل خواص ویژه آن، پتانسیل خوبی در نانوالکترونیک دارد [۲-٤]. در سال ۲۰۱٦، داس و همکارانش [۵] روشی برای ساخت نانونوار فسفرین ارایه دادند. نانونوار فسفرین با توجه به جهت برش از تک لایه آن، به دو دسته زیگزاگی (ZPNR) و دسته صندلی (APNR) تقسیم می شود. خواص این دسته مواد، با عامل دار کردن لبه ها [٦و۷]، پهنای نوار [۸]، دوپ

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

کردن [۹] و اضافه کردن اتم روی نانونوار فسفرین [۱۰] تغییر می کند.

در این مقاله تاثیر اتم مس در نزدیکی نانونوار فسفرین با لبه های دسته صندلی بررسی می شود که لبه‌های آن از یک طرف با هیدروژن و از طرف دیگر با اکسیژن غیرفعال شده است. در این تحقیق حالت دسته صندلی غیرفعال شده به این دلیل انتخاب شد که دارای گاف انرژی است که در حالت زیگزاگی آن، گاف انرژی صفر است.

روش محاسباتی

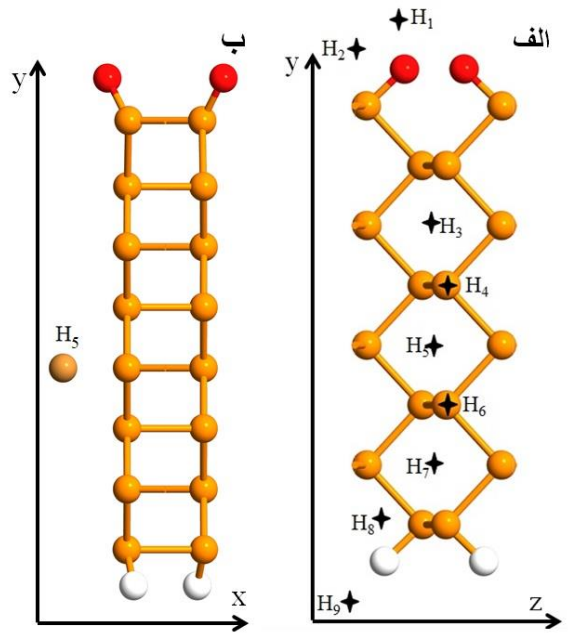
محاسبات با توجه به نظریه تابعی چگالی کوانتومی با بسته محاسباتی سایستا [۱۱] انجام شده است. در این محاسبات، از تابع همبستگی تبادلی که توسط پردو-بورک-ارنزرهوف (PBE) [۱۲] با تقریب شیب کلی (GGA)، در حل معادله کوهن-شم استفاده شده است. تابع موج برای تمام اتمها بر پایه قطبش دوگانه زتا (DZP) بسط داده شده است. تمام ساختارها بگونه‌ای بهینه شده‌اند که نیروی وارد بر هر اتم کمتر از ۰/۰۱ eV/Å باشد. انرژی قطع ۷۵ هارتری، دمای الکترون‌ها ۳۰۰ K و تعداد نقاط نمونه گیری k در فضای بریلوین ۲۱×۱×۱ درنظر گرفته شده است. برای محاسبات خودسازگار حد مجاز محاسبات عددی 10^{-4} هارتری فرض شده است. جهت ساخت نوار در راستاهای x و y حداقل ۱۲ Å لایه خلاء، لحاظ شده است. جریان با مدول ترنسایستا، با توجه به فرمول لاندر [۱۳] محاسبه شده است:

$$I(V_b)=\frac{e}{h}\int T(E,V_b)[f_L(E,V_b)-f_R(E,V_b)]dE$$

که در آن e بار الکترون، h ثابت پلانک، V_b ولتاژ بایاس، $T(E,V_b)$ احتمال عبور الکترون از دستگاه، $f_L(E,V_b)$ و $f_R(E,V_b)$ تابع توزیع فرمی-دیراک به ترتیب برای الکترودهای چپ و راست است.

نتایج

در این تحقیق، نانونوار فسفرین با لبه دسته صندلی درنظر گرفته شده‌است، که لبه بالایی با اتم O (اتم‌های قرمز رنگ) و لبه پایینی با اتم H (اتم‌های سفید رنگ) غیرفعال شده است. همانطور که در شکل ۱ دیده می‌شود، هشت ردیف اتم فسفرین درنظر گرفته شده‌است که در راستای محور z تکرار می‌شود. اتم مس در ۹ مکان متفاوت در نزدیکی نانوریبون، قرار داده شده‌است. اتم مس از دسته فلزهای واسطه است که به دلیل آرایش اتمی‌اش به صورت $3d^{10}4s^{1}$، خواص جالبی از خود نشان می دهد و با قرارگرفتن در نزدیکی نانونوار فسفرین، خواص الکترونیکی نانونوار را تغییر می‌دهد. پس از قرارگیری اتم مس در هر مکان، انرژی جذب هر کدام از ساختارهای جدید با فرمول $E_a=E-E_1-E_{Cu}$ محاسبه گردید؛ که در آن E انرژی کل نانونوار غیرفعال شده به همراه مس، E_1 انرژی کل نانونوار غیرفعال شده بدون مس و E_{Cu} انرژی کل مس بدون در نظرگرفتن نانونوار غیرفعال شده‌است.



شکل ۱: ساختار اتمی نانونوار فسفرین که با O و H غیرفعال شده است. الف) H_iها مکانهای مختلف قرارگرفتن اتم مس است. ب) بطور مثال، محل قرارگیری H_5 از زاویه دید دیگر نشان داده شده است.

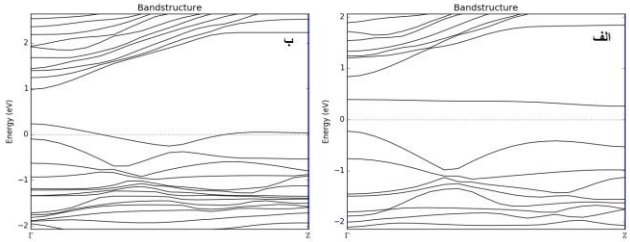
مطابق با جدول ۱، کمترین مقدار انرژی مربوط به حالتی است که اتم مس در نزدیکی اتم اکسیژن (H_3) قرار گرفته‌است و برابر با ۴/۰۸ eV- است. به عبارتی دیگر این ساختار، پایدارترین ساختار بین همه ساختارهای مشخص شده‌است.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

جدول۱ : انرژی جذب برای حالتهای مختلف که مس در نزدیکی نانونوار فسفرین غیرفعال شده قرار گرفته است..

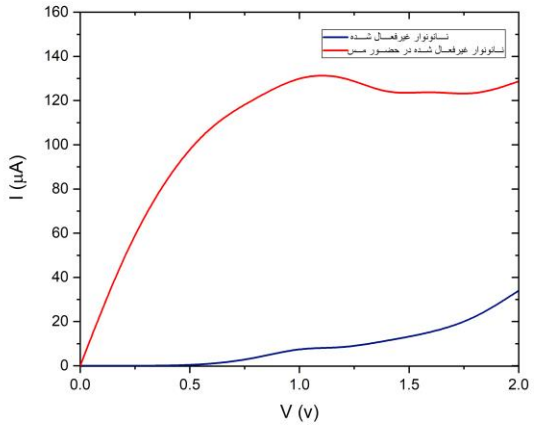
مکان اتم مس	E_a (eV)	مکان اتم مس	E_a (eV)
H_1	-٤/٠٨	H_6	-٣/٤٦
H_2	-٣/٦٤	H_7	-٢/٩٤
H_3	-٣/٣٥	H_8	-٢/٥٩
H_4	-٣/٠٨	H_9	-٣/٤٢
H_5	-٣/٠١		

با توجه به شکل ۲الف، این ساختار نیمه رسانا است و گاف انرژی آن، غیرمستقیم با مقدار ۰/٤۹ eV محاسبه گردید. اما همانطور که از شکل ۲ب دیده می‌شود، با قرارگرفتن اتم مس در نزدیکی آن، ساختار به رسانا تبدیل می‌شود. شکل ۲ب مربوط به پایدارترین حالت است.



شکل ۲: الف) نوارهای انرژی نانونوار فسفرین در حالتی که اتم مس الف) حضور ندارد، ب) حضور دارد. شکل ب مربوط به حالتی است که اتم مس در پایدارترین حالت خود یعنی در مکان H_1 قرار دارد.

برای رسم نمودار جریان برحسب ولتاژ یک ناحیه مرکزی با طول ۱۹/۲ Å و دو الکترود با طول ٦/۲ Å درنظر گرفته‌ایم. نمودار جریان برحسب ولتاژ برای دو حالت نانونوار فسفرین غیرفعال شده بدون مس و ساختاری که اتم مس در H_1 قرار دارد، در شکل ۳ آمده است. همانطور که مشاهده می شود حضور اتم مس باعث افزایش رسانندگی در ساختار شده است و با توجه به اختلاف بین جریانها، می‌توان حضور اتم مس در کنار نانونوارفسفرین را تشخیص داد. بیشترین تفاوت در جریانها در ولتاژ ۱/۱ V اتفاق می‌افتد.



شکل۳ : نمودار جریان برحسب ولتاژ برای دو حالت نانونوار غیرفعال شده در حضور و عدم حضور اتم مس.

نتیجه گیری

در این پژوهش، خواص الکترونیکی نانونوار فسفرین با لبه دسته صندلی که از یک طرف با اکسیژن و از طرفی دیگر با هیدروژن غیرفعال شده است، مورد بررسی قرار گرفت. با توجه به محاسبات انجام شده، این ساختار یک نیمه‌رسانا با گاف انرژی غیرمستقیم با مقدار ۰/٤۹ eV است. با قرار دادن اتم مس در نزدیکی نانوریبون خواص الکترونیکی آن عوض می شود و به رسانا تبدیل می‌گردد. نه مکان مختلف برای قراردادن اتم مس نزدیک نانونوار درنظر گرفته شد. با محاسبه انرژی جذب هر حالت و مشخص کردن کمینه انرژی، پایدارترین حالت مربوط به حالتی است که اتم مس در نزدیکی اتم اکسیژن (H_1) قرار گرفته است. برای دو حالت نانونوار بدون حضور اتم مس و حالت پایدار نانونوار در حضور مس، نمودار جریان بر حسب ولتاژ رسم و مقایسه شد. با توجه به نمودار، در ولتاژ ۱/۱ V بیشترین مقدار حساسیت به حضور اتم مس وجود دارد.

مرجع‌ها

[۱] K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S.V. Dubonos, I.V. Grigorieva, A.A. Firsov; "*Electric field effect in atomically thin carbon films*"; Science **306** (2004) 666–669.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

[۲] L. Li, Y. Yu, G.-J. Ye, Q. Ge, X. Qu, H. Wu, D. Feng, X.-H. Chen, Y. Zhong; "*Black phosphorus field-effect transistors*"; *Nature Nanotech* **9** (2014) 372–377.

[۳] L. Li, J. Kim, C. Jin, et al.; "Direct observation of the layer-dependent electronic structure in phosphorene"; *Nature Nanotech*. **12** (2017) 21-25.

[٤] C. Guo, T. Wang, C. Xia, et al.; "Modulation of electronic transport properties in armchair phosphorene nanoribbons by doping and edge passivation"; *Sci. Rep*. **7** (2017) 12799.

[٥] P. M. Das, G. Danda, A. Cupo, W. Parkin, L. Liang, , N. Kharche, X. Ling, S. Huang, M. S. Dresselhaus, V. Meunier, M. Drndic; "Controlled sculpture of black phosphorus nanoribbons"; ACS Nano. 10 (2016)5687–5695.

[٦] Y. Ren, F. Cheng, Z. H. Zhang, G. Zhou; "Half metal phase in the zigzag phosphorene nanoribbon"; *Scientific Reports*, **8** (2018) 2932.

[٧] L. Sun, Z. H. Zhong, H. Wang, M. Li; "Electronic and transport properties of zigzag phosphorene nanoribbons with nonmetallic atom terminations"; *RSC Adv*. **10** (2020) 1400.

[٨] Q. Wu, L. Shen, M. Yang, et al.; "Electronic and transport properties of phosphorene nanoribbons"; *PHYSICAL REVIEW B* **92** (2015) 035436.

[٩] C. Guo, T. Wang, C. Xia, and Y. Liu; "Modulation of electronic transport properties in armchair phosphorene nanoribbons by doping and edge passivation"; *Sci. Rep.* **7** (2017) 12799.

[۱۰] Y.-Ch. Rao, P. Zhang, Sh.-F. Li, X.-M. Duan, S.-H. Wei; "Modulation of electronic and magnetic properties in edge hydrogenated armchair phosphorene nanoribbons by transition metal adsorption"; *Phys. Chem. Chem. Phys.* **20** (2018) 12916-12922.

[۱۱] J. M. Soler, E. Artacho, J. D. Gale, A. García, J. Junquera, P. Ordejón, D. Sánchez-Portal; "The SIESTA method forab initioorder-Nmaterials simulation"; *J. Phys.: Condensed Matter* **14** (2002) 2745–2779.

[۱۲] J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof; "Generalized gradient approximation made simple"; *Phys. Rev. Lett*. **77** (1996) 3865–3868.

[۱۳] S. Datta; "*Quantum Transport*"; Cambridge University Press, Cambridge University Press (2005).

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد

http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بررسی اثرات همبستگی الکترونی در سطح مقطع جزئی کامل یونیزاسیون یگانه اتم هلیوم در برخورد با پروتون

امیری بیدوری، سعیده و فتحی، رضا

دانشکده فیزیک دانشگاه شهید باهنر کرمان، کرمان، ایران

چکیده

در کار حاضر سطح مقطع جزئی‌کامل برای یونیزاسیون یگانه اتم هلیوم در برخورد با پروتون‌های سریع مورد بررسی قرار گرفته است. به منظور بررسی اثرات همبستگی الکترونی، محاسبات با استفاده از فرمول‌بندی تقریب مرتبه‌ی اول بورن به دو صورت سه‌جسمی و چهارجسمی انجام شده است. با توجه به نوع فرمول‌بندی تقریب مرتبه‌ی اول بورن تنها همبستگی استاتیکی در محاسبات ظاهر گردیده است. مقایسه نتایج حاصل از فرمول‌بندی سه جسمی و چهارجسمی در توزیع‌های زاویه‌ای قطبی و سمتی الکترون یونیزه شده با نتایج تجربی در دسترس نشان می‌دهد که در انرژی مورد بحث اثرات همبستگی الکترونی به ویژه همبستگی استاتیکی از اهمیت بالایی برخوردار است.

Investigation of electronic correlation effects on the fully differential cross-section for single ionization of atomic helium by proton impact

Amiri Bidvari, Saeideh and Fathi, Reza

Faculty of Physics, Shahid Bahonar University of Kerman, Kerman, Iran.

Abstract

In the present work, fully differential cross section for single ionization of helium atoms by fast protons impact have been investigated. In order to investigate the electron correlation effects, three and four body first Born approximation have been used. According to the first Born approximation formalism, only the static correlation has been appeared here. Comparison the results as three and four-body in polar and azimuthal distributions of ejected electron with available experimental results shows that the effects of electron correlation, especially static correlation, are considerable in high impact energies.

PACS No. 034

مقدمه

بررسی فرآیندهای رایج در نظریه‌ی برخورد یون-اتم در فیزیک اتمی و مولکولی از جمله فرآیندهای تهییج، انتقال بار و یونش به این علت که می تواند دینامیک سیستم های چند ذره‌ای را در سطح بنیادی بررسی کند حائز اهمیت است. فهم جزئیات فرآیندهای پراکندگی در بسیاری از شاخه‌های فیزیک از جمله تعیین طول عمر پرتوهای یونی در شتاب دهنده‌ها، طیف سنجی اتمی، پدیده‌های نجومی و پلاسما نقش مهمی را ایفا می‌کند[۱و۲]. از این رو روش‌های تجربی و نظری بسیاری برای بررسی چنین فرآیندهایی در نواحی مختلف انرژی پیشنهاد شده است.

در سال‌های اخیر مطالعه یونش یگانه اتمی توسط یون‌های سریع به دلیل افزایش قابلیت‌های تجربی برای تعیین انحراف پرتابه،

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

به‌سرعت گسترش یافته است. به‌طور خاص اندازه‌گیری سطح مقطع‌های جزئی کامل در برخورد یون-اتم با دقت بسیار خوبی امکان پذیر شده است. مقایسه‌ی این داده‌های جدید با مدل‌های نظری به بینش‌های جدیدی در مورد دینامیک حاکم بر فرآیند یونیزاسیون منجر خواهد شد. بنابراین مدل‌های سه جسمی و چهارجسمی بسیاری برای توصیف فرآیند یونش در نواحی مختلف انرژی باز نویسی و یا مطرح گردیده است.

با این حال اختلافات بسیاری بین نتایج محاسبات نظری با نتایج تجربی وجود دارد. این اختلافات را می‌توان به عوامل مختلفی از جمله حساسیت سطح مقطع‌ها به برهم‌کنش‌های بین هسته‌ای و بین الکترونی، توابع موج اولیه و نهایی انتخاب شده و یا عدم قطعیت در توزیع انرژی اولیه نسبت داد[۳].

یکی از مسائل مهم که در فرآیندهای پراکندگی سیستم‌های چندالکترونی وجود دارد مربوط به اثرات برهم‌کنش الکترون-الکترون می‌باشد. اتم هلیوم به‌عنوان ساده‌ترین هدف چندالکترونی به‌خوبی می‌تواند اهمیت همبستگی‌های الکترونی را که در فرآیندهای چهارجسمی ظاهر می گردد ارزیابی نماید.

در برخورد یون-اتم برهم‌کنش‌های الکترونی را می‌توان به صورت همبستگی‌های استاتیکی و دینامیکی عنوان نمود. همبستگی‌های استاتیکی در توابع موج حالت مقید چندالکترونی ظاهر می‌شوند و همبستگی‌های دینامیکی توصیف کننده‌ی برهم‌کنش‌های بین دو الکترون در کانال خروجی هستند.

در کار حاضر یونش اتم هلیوم در برخورد با پروتون‌های پر انرژی مورد بررسی قرار گرفته است. در این محاسبات از تقریب مرتبه‌ی اول بورن در محدوده‌ی انرژی‌های بالا استفاده شده است. به منظور بررسی اثرات همبستگی دینامیکی و استاتیکی، تقریب مرتبه‌ی اول بورن ابتدا به‌صورت سه جسمی و با در نظر گرفتن مدل الکترون فعال و سپس با در نظر گرفتن برهم‌کنش کامل و استفاده از تابع موج دو الکترونی به‌صورت چهارجسمی فرمول‌بندی شده است.

نتایج حاصل از دو فرمول‌بندی با نتایج تجربی در دسترس مقایسه گردیده و نشان می‌دهد که در محدوده‌ی انرژی‌های بالا برهم‌کنش‌های استاتیکی از اهمیت ویژه‌ای در محاسبه‌ی سطح مقطع‌های کامل یونش برخوردار است.

تئوری

فرمول‌بندی سه جسمی:

در برخورد پروتون با اتم هلیوم با در نظرگرفتن مدل الکترون فعال فرآیند یونش یگانه

$$Z_p+(Z_T^*+e)\rightarrow Z_p+Z_T^*+e \qquad (۱)$$

مورد بررسی قرار می‌گیرد. سطح مقطع جزئی کامل از رابطه‌ی

$$\frac{d^3\sigma}{d\Omega_s d\Omega_e dE_e}=\frac{m_p^2}{(2\pi)^5}\frac{k_s k_e}{k_i}|f|^2 \qquad (۲)$$

محاسبه می‌گردد. mp جرم پرتابه، $E_e=\frac{k_e^2}{2}$ انرژی الکترون یونیزه شده، $\vec{k}_e$ بردار موج الکترون آزاد شده و $\vec{k}_i$ و $\vec{k}_s$ به ترتیب بردار موج ذره‌ی فرودی در کانال اولیه و نهایی می‌باشند. دامنه‌ی تقریب مرتبه ی اول بورن در فرمول‌بندی سه جسمی از رابطه‌ی

$$f^{3B}=\left\langle \psi_{k_e}^{(-)}(\vec{r})e^{i\vec{k}_s\cdot\vec{R}}\left|V^{3B}(\vec{r},\vec{R})\right|\varphi_i(\vec{r})e^{i\vec{k}_i\cdot\vec{R}}\right\rangle \qquad (۳)$$

محاسبه می‌شود[٤]. φ_i تابع موج اتم هیدروژن در حالت پایه

$$\varphi_i(\vec{r})=\frac{C_T}{\sqrt{\pi}}e^{-\xi_T r},C_T=\xi_T^{3/2},\xi_T=1.6875 \qquad (٤)$$

و $\psi_{k_e}^{(-)}$ تابع موج الکترون آزاد شده در حالت نهایی به‌صورت تابع موج کولنی

$$\psi_{k_e}^{(-)}(\vec{r})=N(k_e)e^{i\vec{k}_e\cdot\vec{r}}\,{}_1F_1\left(i\alpha,1,-i(\mathrm{k}_e r+\vec{k}_e\cdot\vec{r})\right) \qquad (٥)$$

$$N(\mathrm{k}_e)=e^{-\frac{\pi}{2}}\Gamma(1-i\alpha),\quad \alpha=-\frac{1}{k_e} \qquad (٦)$$

در نظر گرفته شده است. پتانسیل برهم‌کنش در فرمول‌بندی سه‌جسمی به شکل

$$V^{3B}(\vec{r},\vec{R})=-\frac{Z_p}{|\vec{R}-\vec{r}|}+\frac{Z_p Z_T^*}{R} \qquad (۷)$$

در محاسبات وارد گردیده است. $\vec{r}$ فاصله‌ی الکترون هدف و $\vec{R}$ فاصله‌ی پرتابه نسبت به هسته‌ی هدف می‌باشد

فرمول‌بندی چهار جسمی:

در فرمول‌بندی چهارجسمی، یونش یگانه از اتم هلیوم به‌صورت

$$Z_p+(Z_T+e_1+e_2)\rightarrow Z_p+(Z_T+e_1)+e_2 \qquad (۸)$$

در نظر گرفته می‌شود. قوانین پایستگی انرژی و پایستگی اندازه‌حرکت به صورت

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

$$\vec{Q} = \vec{k_i} - \vec{k_s} = \vec{k_e} + \vec{K}_{ion} \quad (۹)$$

$$\frac{k_i^2}{2m_p} + \varepsilon_0^{He} = \frac{(\vec{k}_i - \vec{Q})^2}{2m_p} + \varepsilon_0^{He+} + \frac{k_e^2}{2} + \frac{k_{ion}^2}{2(m_N+1)} \quad (۱۰)$$

نوشته می‌شود. k_{ion} اندازه‌حرکت یون باقی مانده و $m_N \approx 4mp$ می‌باشد. در محاسبات حاضر و در محدوده‌ی انرژی‌های بالای پرتابه از سرعت یون باقی‌مانده $\frac{k_{ion}}{(m_N+1)}$ صرفنظر می‌گردد. همبستگی الکترونی استاتیکی در فرمول‌بندی چهارجسمی با در نظرگرفتن تابع موج دو الکترونی تک پارامتری[۵] برای اتم هلیوم در حالت پایه در محاسبات وارد می‌گردد.

$$\varphi_i^{He}(\vec{r_1},\vec{r_2}) = \varphi(r_1)\varphi(r_2), \quad \varphi(r) = \sqrt{\frac{Z_h^3}{\pi}} e^{-Z_h r}, Z_h = 27.16 \quad (۱۱)$$

تابع موج یون هلیوم در حالت نهایی به‌صورت هیدروژن‌گونه ($\varphi_f(\vec{r_1})$) در نظر گرفته شده و دامنه‌ی پراکندگی از رابطه‌ی

$$f^{4B} = \left\langle \psi_{k_e}^{(-)}(\vec{r_2}) e^{i\vec{k}_s\cdot\vec{R}} \varphi_f(\vec{r_1}) \middle| V^{4B}(\vec{r_1},\vec{r_2},\vec{R}) \middle| \varphi_i(\vec{r_1},\vec{r_2}) e^{i\vec{k}_i\cdot\vec{R}} \right\rangle \quad (۱۲)$$

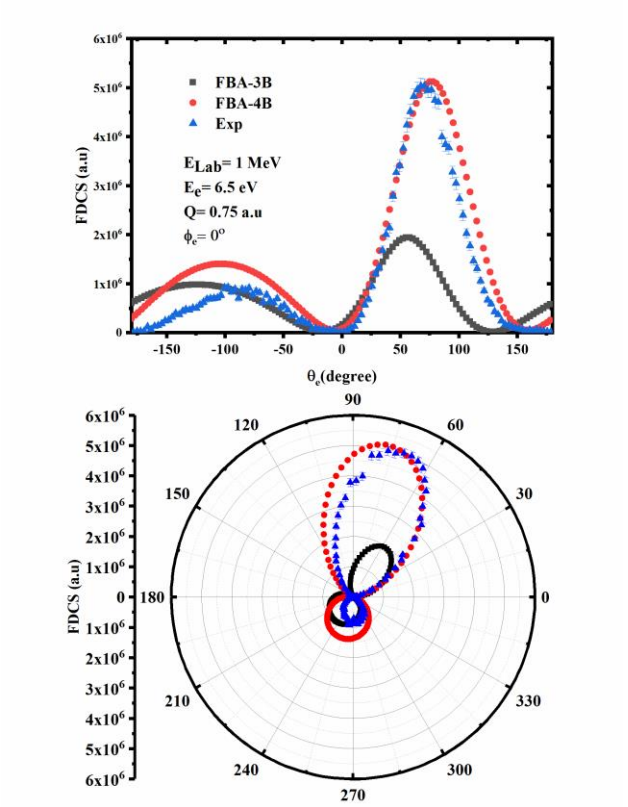
محاسبه می‌شود. پتانسیل برهم‌کنش کامل فرآیند چهارجسمی به‌صورت

$$V^{4B}(\vec{r},\vec{R}) = -\frac{Z_p}{|\vec{R}-\vec{r_1}|} - \frac{Z_p}{|\vec{R}-\vec{r_2}|} + \frac{Z_p Z_T}{R} + \frac{1}{|\vec{r_2}-\vec{r_1}|} \quad (۱۳)$$

در نظر گرفته شده است. جمله‌ی آخر در رابطه‌ی (۱۳) همبستگی دینامیکی را وارد مسأله می‌کند که در فرمول‌بندی حاضر ظاهر نمی گردد و جمله‌ی مربوط به آن به دلیل تعامد صفر محاسبه می‌شود. در نهایت با جایگذاری رابطه‌ی (۱۲) در رابطه‌ی (۲) سطح مقطع کامل یونش چهارجسمی محاسبه می‌گردد.

نتیجه‌گیری

در این بخش نتایج سطح مقطع کامل حاصل از محاسبات انجام شده در برخورد اتم هلیوم با پروتون با نتایج تجربی[۶] در دسترس مقایسه شده است. شکل (۱) نمودار سطح مقطع کامل یونش اتم هلیوم در برخورد با پروتون با انرژی ۱ مگا الکترون ولت بر حسب زاویه‌ی الکترون یونیزه شده در محدوده‌ی زاویه‌ای ۱۸۰- تا ۱۸۰ درجه را در صفحه پراکندگی نشان می‌دهد. انرژی الکترون یونیزه شده ۶،۵ الکترون ولت و اندازه حرکت انتقال یافته در واحد اتمی ۰،۷۵ در نظر گرفته شده است. در مقایسه با نتایج تجربی مشاهده می‌شود که هر دو فرمول‌بندی سه جسمی و چهارجسمی وجود پیک‌های رو به جلو و پس زنی را پیش‌بینی می‌نمایند. موفقیت بسیار خوب نتایج فرمول‌بندی چهارجسمی در پیش‌بینی محل و اندازه پیک روبه جلو اهمیت همبستگی‌های استاتیکی ظاهر شده در فرمول‌بندی چهارجسمی را نتیجه می‌دهد. همچنین به‌نظر می‌رسد وجود همبستگی‌های دینامیکی برای بررسی صحیح پیک‌های پس‌زنی اهمیت بیشتری دارد که متأسفانه در فرمول‌بندی حاضر ظاهر نشده است.

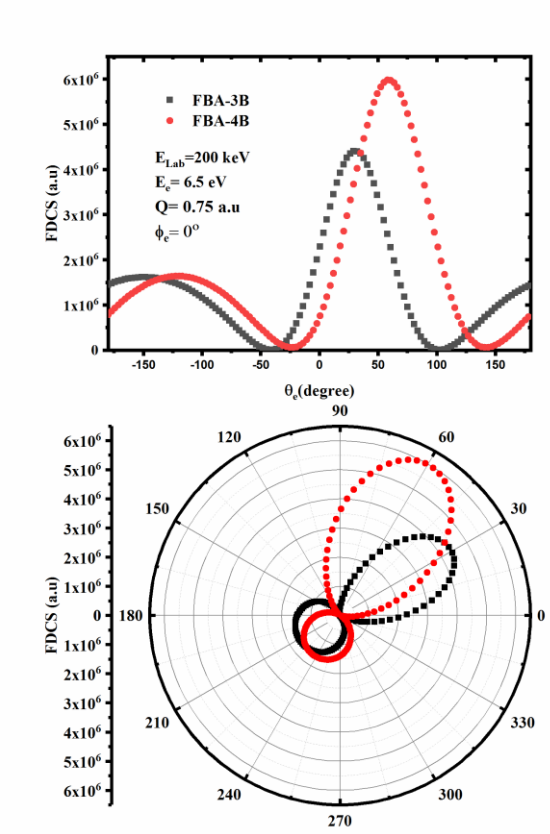


شکل(۱) مقایسه نتایج سطح مقطع کامل فرمول‌بندی سه جسمی و چهارجسمی با نتایج تجربی[۶] برای یونش هلیوم در برخورد با پروتون با انرژی فرودی ۱ مگا الکترون ولت، انرژی الکترون یونیزه شده‌ی۶،۵ الکترون ولت و اندازه حرکت انتقال یافته ۰،۷۵ در واحد اتمی.

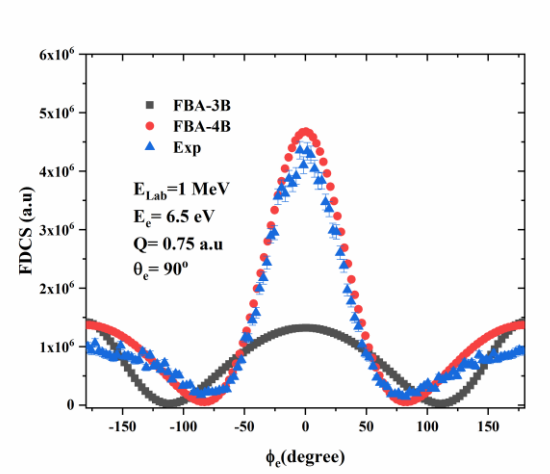
در شکل (۲) مقایسه نتایج سطح مقطع‌های کامل فرمول‌بندی سه‌جسمی و چهارجسمی برای انرژی فرودی ۲۰۰ کیلو الکترون ولت، انرژی الکترون یونیزه شده ۶،۵ الکترون ولت و اندازه حرکت انتقال یافته ۰،۷۵ در واحد اتمی ارائه گردیده است. از اختلاف کمتر ظاهر شده بین نتایج دو فرمول‌بندی به نظر می‌رسد که اثرات

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

همبستگی استاتیکی در یک اندازه حرکت انتقال یافته ثابت با کاهش انرژی فرودی کاهش می‌یابد.



شکل (۲): مقایسه سطح مقطع کامل فرمول‌بندی سه جسمی و چهار جسمی برای یونش هلیوم در برخورد با پروتون با انرژی فرودی ۱ مگا الکترون ولت، انرژی الکترون یونیزه شده‌ی ٦,٥ الکترون ولت و اندازه حرکت انتقال یافته ۰,۷۵ در واحد اتمی.



شکل (۳) مقایسه نتایج سطح مقطع کامل فرمول‌بندی سه جسمی و چهارجسمی با نتایج تجربی[٦] در صفحه سمتی (عمود بر صفحه پراکندگی) برای یونش هلیوم در برخورد با پروتون با انرژی فرودی ۱ مگا الکترون ولت، انرژی الکترون یونیزه شده‌ی ٦,٥ الکترون ولت و اندازه حرکت انتقال یافته ۰,۷۵ در واحد اتمی.

مقایسه نتایج سطح مقطع کامل در صفحه عمود بر صفحه پراکندگی برحسب زاویه‌ی سمتی در محدوده‌ی ۱۸۰- تا ۱۸۰درجه با نتایج تجربی در شکل (۳) نشان داده شده است. هم‌خوانی بسیار خوب نتایج فرمول‌بندی چهارجسمی در انرژی فرودی ۱ مگا الکترون ولت و انرژی الکترون یونیزه شده‌ی ٦,٥ الکترون ولت و اندازه حرکت انتقال یافته ۰,۷۵ در واحد اتمی به خوبی قابل مشاهده می باشد.

در نهایت لازم به ذکر است که هم‌بستگی‌های الکترونی که در کار حاضر به‌طور خلاصه مورد بررسی قرار گرفت، فقط یکی از عوامل موثر در اختلاف بین نتایج تجربی و نظری در فرمول‌بندی‌های مختلف می باشد و در کار حاضر فقط همبستگی استاتیکی وارد محاسبات شده است. با این حال به نظر می رسد در محدوده‌ی انرژی مورد بحث در نظر گرفتن این عامل به تنهایی باعث بهبود قابل توجهی در نتایج سطح مقطع کامل خواهد شد. اما بررسی کامل‌تر و محاسبات دقیق‌تر زمانی انجام خواهد شد که سایر عوامل مانند اثرات ناشی از یونش دوگانه و اثرات ناشی از عدم قطعیت در تعیین زوایا، اندازه حرکت وانرژی های فرودی نیز مورد بررسی قرار گیرد.

مرجع‌ها

[1] J. S. Yoon and et al, *Plasma screening effects on electron-impact single ionization of helium-like ions in dense plasmas*, Phys. Soc., **46** (2005) 855.

[2] S. Rajagopalan, D. B. Cline and Pisin Chen, *Application of a Plasma lens to e γ colliders*, Nucl. Instr. And Meth, in Phys. Res. A **357** (1995) 1.

[3] J .Fiol and R. E. Olson, *Three- and four-body dynamics in fast heavy ion–atom ionization*, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **37** (2004) 3947.

[4] S. amiri Bidvari and R. Fathi, *Triple and double differential cross sections for ionization of atomic hydrogen by positive-bare ions impact*, Eur. Phys. J. D. **75**: 55 (2020) 1.

[5] I. Mancev, N. Milojevic and Dz. Belkic, *Boundary-corrected four-body continuum-intermediate-state method*, Phys. Rev. A. **91** (2015) 062705. (E. Hylleraas, Z. Phys. **54** (1929) 347).

[6] H. Gassert and et al, *Agreement of experiment and theory on the single ionization of helium by fast proton impact*, PRL. **116** (2016) 073201.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بررسی ویژگی‌های الکترونی و اپتیکی دی سولفید مولیبدن در حالت انبوهه توسط نظریه تابعی چگالی

منصوری، معصومه ؛ قلمبر دزفولی، عبدالمحمد

گروه فیزیک، دانشگاه شهید چمران، اهواز

چکیده

در این مقاله ویژگی‌های الکترونی و اپتیکی ساختار انبوهه دی سولفید مولیبدن در چارچوب نظریه تابعی چگالی و با استفاده از بسته محاسباتی کوانتوم اسپرسو مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج با مقادیر نظری حاصل از کارهای پیشین مطابقت خوبی دارند.

واژه های کلیدی: ساختار نواری، چگالی حالت‌ها، تابع دی الکتریک.

Study of the Electronic and Optical properties of Bulk $2H\text{-}MoS_2$ by Density Functional Theory

Mansouri, Masoome; Ghalambor Dezfuli, Abdol-Mohammad

Department of Physics, Shahid Chamran University, Ahwaz

Abstract

In this article, the electronic and optical properties of bulk MoS_2 were investigated using Quantum-Espresso/PWSCF computational package in the framework of density functional theory. The results are in good agreement with the theoretical values obtained from previous works.

***Keywords**: Band structure, Density of states, Dielectric function.*

PACS No. 31

مقدمه

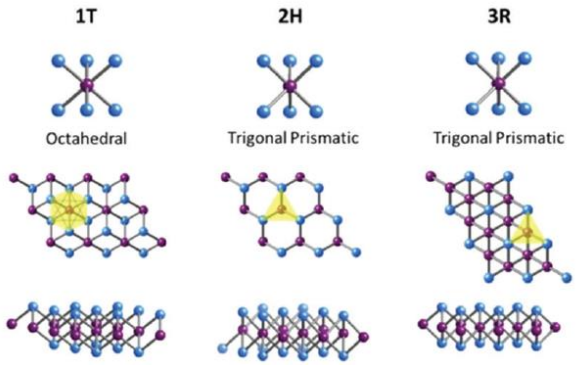
دی کالکوژن ها عناصر واسطه (TMDC)[۱] از دسته نانو مواد دو بعدی می‌باشند که به خاطر خواص‌شان کاربردهای گسترده‌ای در وسایل نانوالکتریکی دارند[۱]. فاکتور مهم دیگر که می‌توان به آن اشاره کرد این نانو مواد توسط روش‌هایی نظیر بخار شیمیایی (CVD)[۲] و مکانیکی به آسانی لایه نشانی می‌شوند زیرا لایه‌های مجاور در ساختار حجمی با نیروی ضعیف واندروالس به یکدیگر متصل هستند[۲]. فرمول خانواده ترکیبات TMDC به صورت MX_2 هستند که M فلز واسطه و X کالکوژن می‌باشد در این ترکیبات اتم های درون یک لایه با نیروهای قوی کوالانسی به یکدیگر متصل هستند که منجر به پایداری شیمیایی و گرمایی آنها می‌شود. از میان TMDCهای مختلف دی سولفید مولیبدن(MoS_2) به دلیل فراوانی زیاد در طبیعت، پایداری در معرض هوا و در دمای اتاق و نقطه ذوب بالا، از لحاظ نظری و تجربی بیش از سایر اعضای این گروه مورد توجه محققین قرار گرفته است[۱]. در اکثر ترکیبات TMDC همچون MoS_2 هم در تجربه و هم در تئوری مشاهده شده که در گذار حالت انبوهه به نانولایه گاف غیر مستقیم به گاف مستقیم تبدیل می‌شود و این خاصیت و دیگر خواص مکانیکی، اپتیکی و الکترونیکی این دسته مواد کاربردشان را در اپتیک و

[۱] Transition metal dichalcogenides

[۲] Chmical Vapor Deposition

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

الکترونیک افزایش می‌دهد[۳]. TMDCها از لحاظ توالی انبوهه[۳] و مختصات اتم فلزی به سه نوع 2H، 3R و 1T تقسیم می‌شوند[٤].



شکل۱ : TMDCها از لحاظ مرتبه توالی انبوهه[٤].

فازهای 2H و 3R دی‌سولفید مولیبدن، نیم‌رسانا، پایدار و دیامغناطیس هستند، در صورتیکه فاز 1T آن فلز، نیمه پایدار و پارامغناطیس می‌باشد. فاز 2H نسبت به دو فاز دیگر پایدارتر و در طبیعت دارای فراوانی بیشتری است[۱]. بنابراین فاز $2H-MoS_2$ را مورد مطالعه قرار دادیم.

با استفاده از روش بستگی قوی می‌توان سهم اوربیتال‌های اتمی و در نتیجه دو قطبی گذار را تعیین کرد. اگر با استفاده از نظریه تابعی چگالی بتوان سهم اوربیتال‌های اتمی را بدست آورد، از این روش نیز می‌توان برای تعیین دو قطبی گذار استفاده کرد. بنابراین لازم است خواص الکتریکی و اپتیکی دی سولفید مولیبدن را مورد بررسی قرار دهیم.

روش انجام محاسبات:

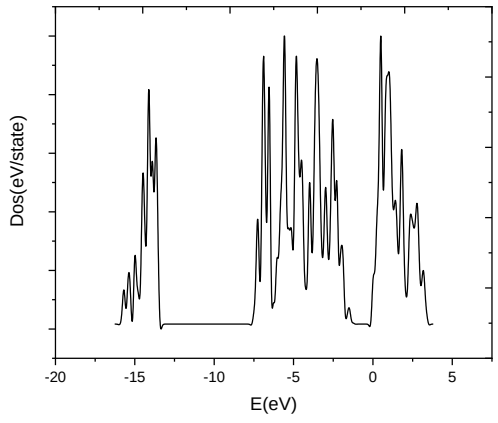
تمامی محاسبات مربوط به انبوهه دی سولفید مولیبدن در چارچوب نظریه تابعی چگالی (DFT) و با استفاده از بسته محاسباتی کوانتوم اسپرسو[۵].انجام شده است. در این بسته محاسباتی معادلات تک ذره کوهن-شم با استفاده از روش شبه پتانسیل و بسط توابع موج الکترون‌های ظرفیت بر اساس امواج تخت حل می‌شود. پس از حل معادلات کوهن-شم، خواص ساختاری و الکترونی از طریق محاسبه پارامترهای فیزیکی نظیر انرژی، نیرو، تنش و ... تعیین می‌شود. پس از انجام آزمایش‌های همگرایی، انرژی قطع بسط تابع موج تخت ۷۰ ریدبرگ و مش یکنواخت ٤*۸*۸ نقطه در فضای وارون به منظور انتگرال‌گیری در ناحیه اول بریلوئن انبوهه انتخاب شد.

محاسبات انجام شده	مرجع[٦]	*
۳/۱۴	۳/۱۹	ثابت شبکه (انگستروم)
۳/۸۸	۳/۸۶	نسبت c/a

جدول۱ : پارامترهای محاسبه شده از انبوهه دی سولفید مولیبدن.

چگالی حالتها:

سطح زیر منحنی چگالی حالت‌ها بیانگر تعداد حالتهای مجاز الکترونی در بازه مشخصی از انرژی است. هنگامی که اتم در بلور واقع شود، شکل اوربیتال‌ها و نحوه توزیع تعدادی از اوربیتال‌های الکترونی نسبت به ساختاری که اتم منزوی باشد تغییر می‌کند. اوربیتال‌هایی که در پیوند شرکت می‌کنند، تغییر شکل می‌دهند و اصطلاحا هیبرید می‌شوند. شرکت الکترون‌ها در پیوند باعث پهن شدگی منحنی چگالی حالت‌ها می‌شود چگالی حالت های الکترونی کلی در محدوده ۱۵- تا ۵ الکترون ولت در شکل ۲ رسم شده است و تراز فرمی بر صفر منطبق است.



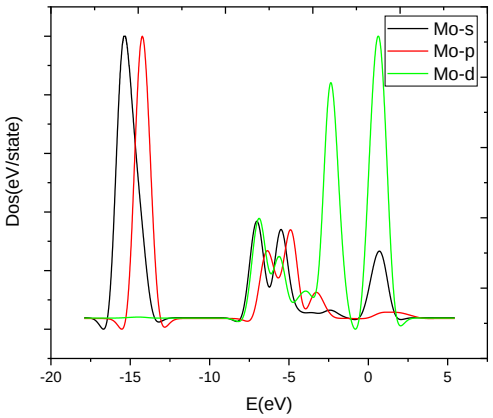
شکل۲ : چگالی حالت‌های کلی انبوهه دی سولفید مولیبدن.

قله‌های موجود در این شکل بیانگر مشارکت اربیتال‌ها در ساختار نواری است. برای بررسی چگونگی مشارکت اوربیتالهای مختلف در نوار رسانش و ظرفیت و نیز قله های موجود در نمودار چگالی

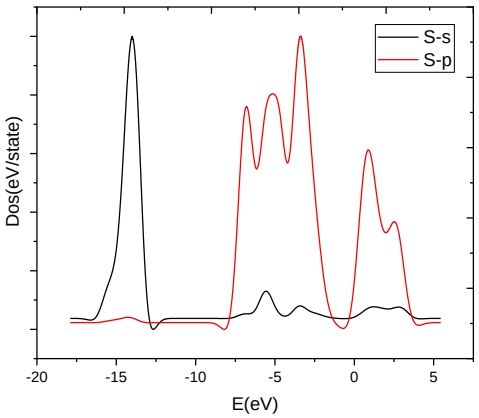
[۳] Stacking sequence

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

حالتهای کلی، نمودار چگالی حالت های جزئی مربوط به اوربیتالهای s، p، d اتم های مولیبدن و s و p اتم گوگرد در شکل‌های ۳ و ٤ آورده شده و تراز فرمی بر انرژی صفر قرار داده شده است. این نمودارها بیانگر این هستند که اوربیتالهای d اتم مولیبدن و p اتم گوگرد نقش عمده‌ای را در ایجاد نوارهای انرژی در اطراف تراز فرمی ایفا می‌کنند.



شکل۳ : چگالی حالت‌های جزئی اتم مولیبدن.

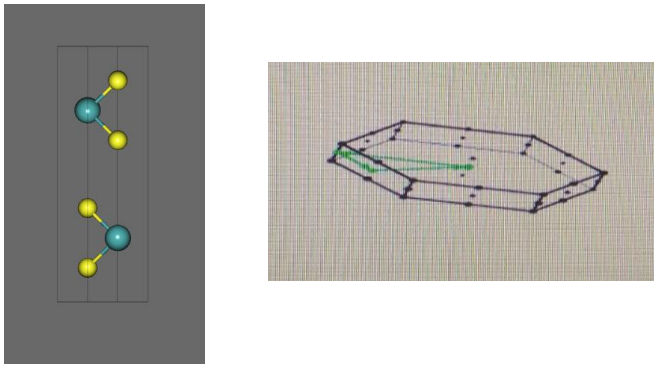


شکل٤ : چگالی حالت‌های جزئی اتم گوگرد.

در نمودارهای Dos هر چه ارتفاع قله‌ها بیشتر باشد، نشان‌دهنده این است که در این محدوده‌ی انرژی سطوح بیشتری برای اشغال در دسترس می‌باشد.

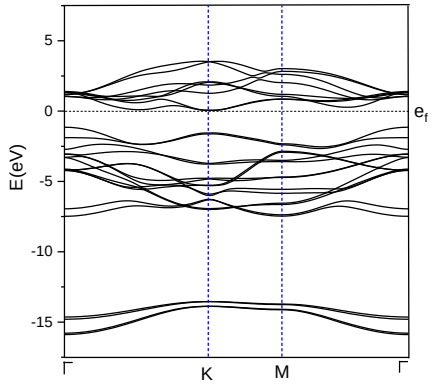
ساختار نواری:

در اتم های آزاد سطوح انرژی مجزا وجود دارند، اما در مواد جامد انرژی‌های قابل دسترس به قدری به هم نزدیک می‌شوند که تشکیل نوار را می‌دهند. الکترون‌های درون بلورها در نوارهای انرژی مرتب می‌شوند. گاف نواری به عنوان اختلاف میان بالاترین نوار اشغال شده (نوار ظرفیت) و پایین ترین نوار اشغال شده (نوار رسانش) تعریف می‌شود. گاف نواری از این جهت که مشخص کننده نوع ماده است، حائز اهمیت است.



شکل۵ : ساختار $2H-MoS_2$ و منطقه اول بریلوئن.

شکل ٦ ساختار نواری ترکیب را نمایش می‌دهد. تراز فرمی بر انرژی صفر قرار داده شده است.



شکل٦ : ساختار نواری انبوهه دی سولفید مولیبدن.

فاز $2H-MoS_2$ در حالت توده، نیم‌رسانایی با گاف نواری غیر مستقیم است. در ساختار نواری $2H-MoS_2$ توده‌ای، بیشینه نوار ظرفیت در نقطه Γ (مرکز منطقه اول بریلوئن) و کمینه نوار هدایت بین نقاط Γ و K (رئوس منطقه اول بریلوئن) قرار می‌گیرد[۱].

در بررسی منحنی چگالی حالتها و ساختار نواری، چنین استنباط می‌شود که یک دسته از نوارهای انرژی که حول انرژی ۱٤ ev- قرار دارند غالبا از اوربیتال‌های 3s اتم گوگرد تشکیل شده‌اند. دسته دوم نوارها، با فاصله بسیار زیادی نسبت به دسته اول، پایین

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

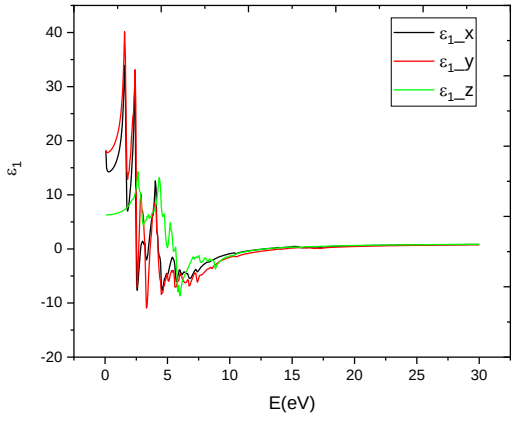
تراز فرمی قرار گرفته‌اند (نوارهای ظرفیت). دسته سوم نوارهای انرژی بالای تراز فرمی و به فاصله گاف نواری از دسته دوم نوارها قرار گرفته‌اند (نوارهای هدایت).

خواص اپتیکی:

گاف نواری اکثر نیم رساناها در محدوده انرژی صفر تا ٤ الکترون ولت است. فوتون‌هایی با انرژی کافی می‌توانند منجر به تحریک الکترونها از نوار ظرفیت پر به نوار رسانش خالی شوند این خواص مبنای بسیاری از کاربردهای نیم رساناها از قبیل لیزرها، دیودهای گسیل نور و آشکارسازهای نوری هستند. تابع دی الکتریک یک تابع مختلط است که بیان کننده پاسخ ماده **به** میدان الکترومغناطیس اعمال شده به آن می‌باشد. تابع دی الکتریک دارای دو سهم درون نواری و بین نواری است که سهم درون نواری برای فلزات به کار می‌رود. این تابع به صورت[۷]

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

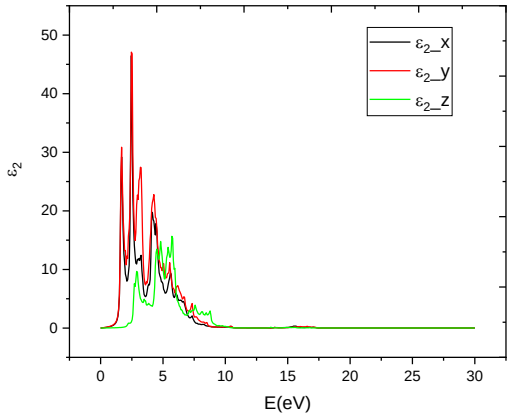
نشان داده می‌شود. در اینجا قسمت حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک به صورت مجزا رسم شده است.



شکل۷ : سهم حقیقی تابع دی الکتریک استاتیک انبوهه دی سولفید مولیبدن.

ثابت دی الکتریک استاتیک در فرکانس حدود صفر با توجه به شکل ۷ در راستاهای x، y و z به ترتیب دارای مقادیر ۱۹/۷۵، ۱۹/۶۱و ٦/۱۳ می‌باشد.

لازم به یادآوری است که تمام کمیت‌های اپتیکی از سهم موهـومی تابع دی‌الکتریک به دست می‌آید.



شکل۸ : سهم موهومی تابع دی الکتریک استاتیک انبوهه دی سولفید مولیبدن.

با توجه به شکل ۸ گاف اپتیکی در راستای x و y به ترتیـب ۱/۰۹ و۱/۰۷ بدست آمده است.

نتیجه‌گیری:

در این مقاله بر اساس محاسبات تابعی چگالی، با استفاده از نرم افزار quantum-espresso تحلیلی از خواص الکترونیکی و اپتیکی دی سولفید مولیبدن ارائه شد. ساختار نواری نشاندهنده گاف غیر مستقیم که با نتایج تجربی پیشین مطابقت دارد.

سپاسگزاری

مراتب تقدیر و تشکر صمیمانه خود را جهت استفاده از امکانات پردازشی مرکز پردازش‌های سریع دانشگاه شهید چمران اهواز اعلام می‌نماییم.

مرجع‌ها

[۱] بیرانوند، خدیجه؛ "محاسبه برخی خواص الکترونی و نوری تک لایه دی سولفید مولیبدن با مدل k.p".

[۲] C.T. Pan, R.R. Nair, U. Bangert, Q. Ramasse, R. Jalil, R. Zan, C.R. Seabourne, A.J. Scott, Nanoscale electron diffraction and plasmon spectroscopy of single- and few-layer boron nitride, *Physical Review B:Condens. Matter* 85 (2012).

[۳] K.F. Mak, C. Lee, J. Hone, J. Shan, T.F. Heinz, Atomically thin MoS2: a new directgap semiconductor, *Physical Review Letters*, 10 (2010).

[٤] R. Jun, T.Zdene,˘k Sofer, J.Luxa, D. Sedmidubsky´ and M.Pumera, ,3R phase of MoS2 and WS2 outperforms the corresponding 2H phase for hydrogen evolution(2017).

[٥] www.quantum espresso.org

[٦] S. Ahmad1, S. Mukherjee ; Properties of Bulk MoS2 and Its Monolayer Using DFT Technique: Application of Mechanical Strain on MoS2 Monolayer,(2014).

[۷] P. Ravindran, A. Delin, R. Ahuja, and B. Johansson, S. Auluck, J. M. Wills, O. Eriksson, Optical properties of monoclinic SnI2 from relativistic first-principles theory, *Physical Review B* 56 (1997) .

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بررسی تجربی اثر پلاسمای تخلیه الکتریکی بر خواص فیزیکی و شیمیایی آب آلوده به سم آفت-کش فنیتروتیون ($C_9H_{12}NO_5PS$)

موسی پور فهیمه [1] ؛ گنجویی علیرضا[1]؛ تراز مجید[2] ؛ مقصودی شهاب[3]؛ کریمیان سعید[2] ؛ میرزایی ایمان[1] ؛ جلالی الهام[3] ؛

پژوهشکده فوتونیک، دانشگاه تحصیلات تکمیلی صنعتی پیشرفته کرمان[1]

گروه فیزیک، دانشگاه شهید باهنر کرمان[2]

گروه شیمی، دانشگاه شهید باهنر کرمان[3]

چکیده

در این پژوهش، اثر پلاسما تخلیه الکتریکی فشار اتمسفری را بر خواص فیزیکی و شیمیایی آب آلوده با سم آفت کش فنیتروتیون ($C_9H_{12}NO_5PS$)مورد بررسی قرار گرفت. برای انجام آزمایش 5 نمونه از محلول سم فنیتروتیون با غلظت متفاوت و در بازه های زمانی 5 تا 25 دقیقه در معرض پلاسما تخلیه الکتریکی فشار اتمسفری قرار گرفت و مقادیر PH , TDS و رسانندگی محلول قبل و بعد از اثر پلاسما مورد بررسی قرار گرفت. پردازش آب با پلاسما و تغییر مشخصه‌های ساختاری آب می تواند کاربرد های مختلف زیستی و کشاورزی داشته باشد.

واژه های کلیدی: *پلاسما، تخلیه الکتریکی ، ترکیبات آلی ، پردازش آب*

Experimental study of the effect of electric discharge plasma on the physical and chemical properties of water contaminated with pesticide phenytoin ($C_9H_{12}NO_5PS$)

Fahimeh, Moosapour [1] ; Ganjavi , Alireza [1] Taraz , mjid[2] ; Maghsoudi , Shahab[3] ; Karimian , Saeed[2] ; Mirzaei , Iman [1]; Jalali , Elham[3] ;

Photonics institute of Graduate University of Advanced Technology, Kerman [1]
Department of Physics, Shahid Bahonar University of Kerman [2]
Department of Chemistry, Shahid Bahonar University of Kerman [3]

Abstract

In this study, the effect of plasma electrical discharge of atmospheric pressure on the physical and chemical properties of contaminated water with phenytoin pesticide ($C_9H_{12}NO_5PS$) was investigated. To perform the experiment, 5 samples of phenytoin toxin solution with different concentrations and at intervals of 5 to 25 minutes were exposed to plasma, electrical discharge, atmospheric pressure, and pH, TDS and solution delivery before and after the plasma effect were investigated. Plasma water treatment and structural changes in water can have a variety of biological and agricultural applications.

***Keywords**: Plasma, Personal Imagination, Organic Guidance, Water Processing*

PACS No. 52

مقدمه

امروزه اهمیت استفاده از پلاسمای تخلیه الکتریکی به دلیل سازگار بودن با محیط زیست و صرفه اقتصادی بالا در بسیاری از برنامه‌های(تصفیه خانه‌ها، تهیه آب آشامیدنی) حوزه محیط‌زیست استفاده می‌شود. در تخلیه الکتریکی با ولتاژ قوی (حدود چند ده کیلو ولت) بین الکترودها می‌توان پلاسمای سرد اتمسفری تولید کرد. ولتاژ اعمالی باعث یونیزاسیون هوا و پیدایش گونه‌های شیمیایی فعال از قبیل رادیکال‌های آزاد اکسیژن، هیدروژن، هیدروکسیل و گونه‌های مولکولی هیدروژن پراکسید، هیدروژن، اکسیژن و ازن می‌شود. موج شوک و نور UV از دیگر تولیدات پلاسماست، که به تولید این گونه‌ها کمک می‌کند.این گونه‌های

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

شیمیایی و شرایط فیزیکی در مرز مشترک آب و هوا می‌تواند باعث تغییر در ساختار پساب شود، بنابراین بررسی تغییر ساختار آب آلوده به ترکیبات آلی بعد از تصفیه با پلاسما مهم است.

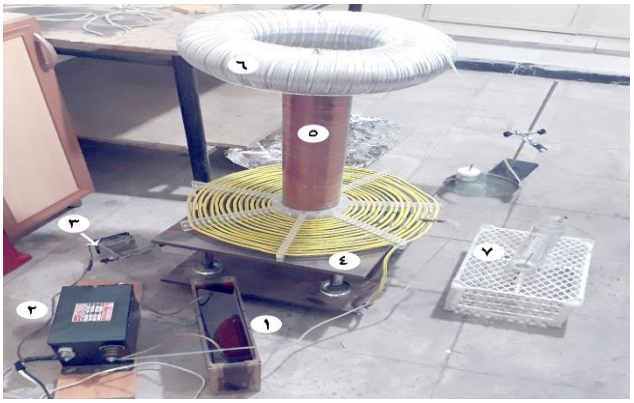
هنگامی که محلول آلوده با ترکیبات آلی در معرض این محیط فعال قرار می‌گیرد، یک سری واکنش‌های شیمیایی رخ می‌دهد و حاصل این‌اندرکنش تولید غلظت نسبتاً بالایی از نیترات، نیتریت، سوپراکسید و نیتروژن پراکسید می‌شود[1]. تولید این محصولات باعث تغییر در خواص فیزیکی و شیمیایی آب می‌شود، که می‌تواند کاربردهای‌مختلفی در زمینه‌های کشاورزی، پزشکی و... داشته‌باشد.

پلاسمای سرد فشار اتمسفری هوا به دلیل سادگی فرایند تولید آن ، قابلیت دردسترس بودن و عدم نیاز به سیستم‌های پرهزینه خلا، بیشتر مورد توجه است.هم‌چنین استفاده از پلاسمای سرد فشار اتمسفری به دلیل دور بودن از مواد شیمیایی یک رویکرد جدید و سازگار با محیط زیست شناخته می‌شود.

سیستم‌های پلاسما مایع را می‌توان براساس روش تولید یا ساختار طبقه‌بندی کرد.از جمله تخیله مستقیم در فاز مایع، پلاسمای فاز گازی واثرش بر مایع، تخلیه جفت‌شده بدون تماس الکتریکی مستقیم با مایع، تخلیه با تماس الکتریکی مستقیم با مایع (الکترود مایع)،پلاسما در فاز میانی مایع تخلیه الکتریکی سطحی، پلاسمای چند فازی و پلاسمای فاز گازی با فاز مایع اسپره شده در آن را می توان نام برد[2].از مهمترین مشخصات فیزیکی و شیمیایی یک محلول برای برآورد میزان تاثیر پلاسما بر فعالسازی آن می‌توان بهPH ، تعداد ذرات جامد موجوددر محلول(TDS) و رسانندگی الکتریکی محلول (Cond) اشاره کرد.

چیدمان آزمایش

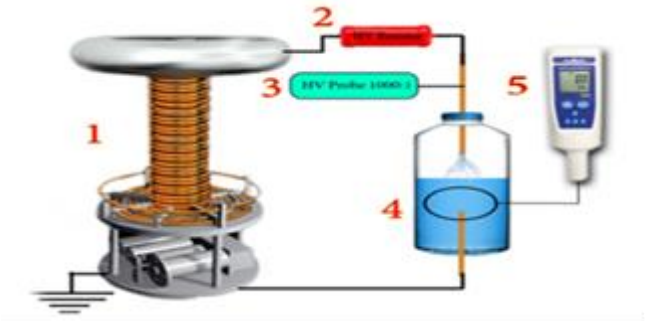
هندسه مورد استفاده برای تولید پلاسما نقطه به صفحه است. که یک سیم مسی به قطر 3 میلی‌متردر فاز گازی برای تولید جرقه و تخلیه الکتریکی و یک ورقه آلومینیومی به مساحت 4*4 سانتی-مترمربع در کف ظرف حاوی محلول سم فنیتروتیون به عنوان الکترود دوم عمل می‌کند. شمایل کلی چیدمان آزمایش در شکل 1 آمده است.



شکل 1 : نمونه کامل شده سیستم تسلا کویل به همراه مخزن آب. 1: خازن، 2: ترانس ولتاژ بالا، 3: شکاف جرقه، 4: سیم پیچ اولیه، 5: سیم پیچ ثانویه، 6: الکترود فلزی و 7: مخزن آب.

روش آزمایش

مطابق شکل 2 برای سنجش TDS , PH و رسانندگی‌الکتریکی محلول از دستگاه EC متر مدل8200 استفاده می‌شود. که در دمای اتاق (25°C) قبل و بعداز پلاسمادهی مقادیررسانندگی الکتریکی، PH و TDSرا اندازه‌گیری می‌کنیم.



شکل 2: 1: مولد ولتاژ بالای AC. 2: مقاومت ولتاژ بالا. 3: پروب ولتاژ بالا. 4:محفظه آب. 5: دستگاه سنجش خواص آب

به منظور طراحی و بهینه‌سازی شرایط آزمایش و در نهایت بررسی تغییرات از نرم افزار DesignExpert11 استفاده شد و با استفاده از آن تعداد متغیرها و حدود بیشینه و کمینه برای هر متغیر مشخص شد. بدین ترتیب ماتریس آزمایش غلظت محلول با

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

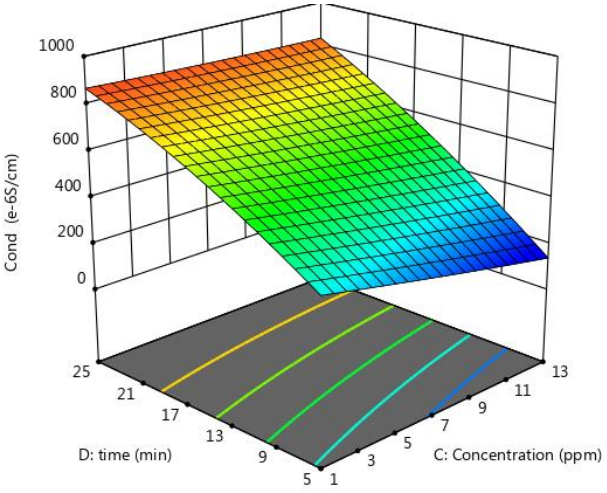
بازه‌ی 1ppm تا 13ppm ، زمان با بازه‌ی 5 دقیقه تا 25 دقیقه در نظر گرفته شد.

Run	Factor 1 A:Concentr... ppm	Factor 2 B:time min	Response 1 Cond	Response 2 PH	Response 3 TDS	Response 4 Salt
1	10	20	360	3.75	234	177
2	10	20	677	3.22	438	329
3	4	10	242	3.75	159	120
4	10	20	400	3.5	256	193
5	7	15	405	3.5	264	198

شکل3: قسمتی از ماتریس شرایط آزمایش و نتایج خروجی

تحلیل نتایج

نمودار تغیرات رسانندگی الکتریکی (Conductivity) برحسب دو متغیر زمان اثر پلاسما و غلظت محلول در شکل 4 آمده است.

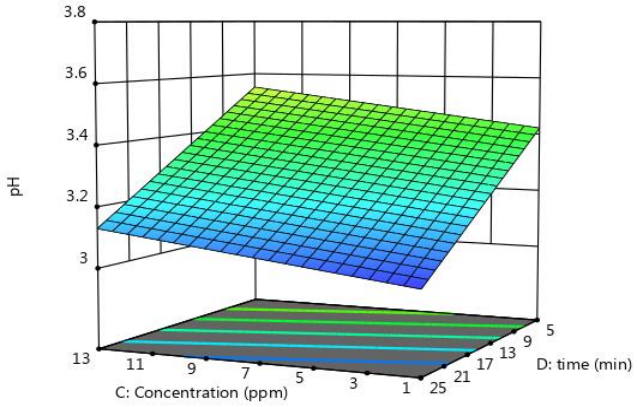


شکل 4: تغییرات رسانندگی(µS/cm) –زمان(Min) وغلظت محلول (ppm)

با توجه به شکل 4 مشخص می‌شود با افزایش زمان اثردهی پلاسما رسانندگی الکتریکی افزایش می‌یابد،علت افزایش رسانندگی زیاد شدن غلظت یون‌های محلول در آب است. مشاهدات نشان می‌دهد افزایش رسانندگی با کاهش قطر کانال پلاسمایی همراه است.

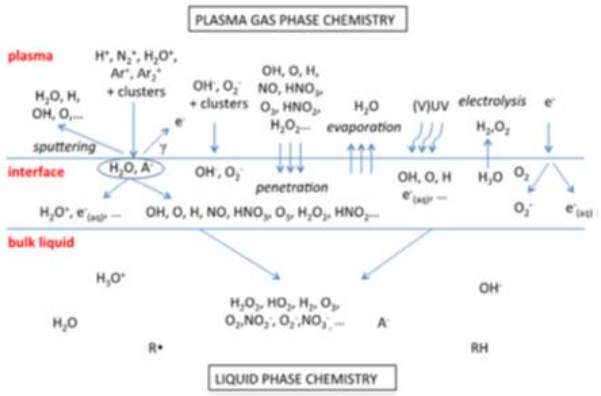
هم‌چنین دیده می‌شود،افزایش غلظت سم فنیتروتیون مانع از تولید یون‌های محلول در آب می‌شود درنتیجه با افزایش غلظت سم میزان رسانندگی الکتریکی کاهش می‌یابد.این نتایج بامقاله آقای پیتر براگمن و همکارانش در سال 2008 نیز مطابقت دارد[3] .

شکل 5 نمودار تغییرات PH برحسب دو متغیر غلظت و زمان اثر را نشان می‌دهد.



شکل5: تغییرات PH برحسب غلظت محلول (ppm) و زمان (Min)

شکل 6 زنجیره‌ای از واکنش ها که با یونیزاسیون هوا شروع و منجر به انتقال گونه‌های فعال به آب می‌شود را نشان می دهد.



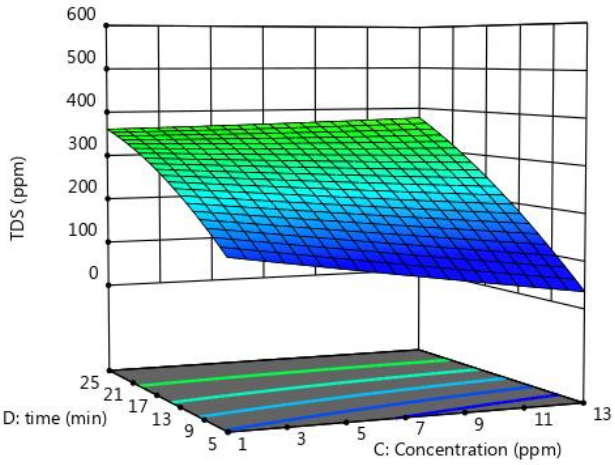
شکل 6: زنجیره واکنش‌های پلاسمادهی آب

با توجه به شکل 6، متوجه می‌شویم پلاسمادهی محلول موجب تشکیل یون‌های N_2O، NO^+ ، $H3O$، NO_3^-، NO_2^- و H^+ در فاز مایع می‌شود، که باعث اسیدی شدن و کاهش PH محلول خواهدشد.حال با افزایش زمان اثردهی پلاسما غلظت یون‌هاافزایش می‌یابد درنتیجه محیط اسیدی‌تر می‌شود [4].

همانطور که پیش‌تر نیز توضیح داده شد افزایش غلظت سم فنیتروتیون محلول در آب مانع از تولید یون‌ها می‌شود پس در غلظت‌های پایین سم فنیتروتیون میزان تولید گونه‌های فعال بیشتر است درنتیجه،محیطی اسیدی‌تر خواهیم داشت [3].

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

نمودار تغییرات ذرات جامد موجود در محلول TDS (ppm) برحسب زمان اثردهی و غلظت محلول در شکل 7 آمده است.



شکل 7: تغییرات TDS برحسب غلظت محلول و زمان

با دقت در نمودار7، متوجه می‌شویم مقدارذرات جامد محلول (TDS) با افزایش زمان پلاسمادهی زیادتر می‌شود، که کاملا قابل انتظار است، زیرا همانطور که قبلا گفتیم با افزایش زمان اثر پلاسما غلظت یون‌ها و گونه‌های تشکیل شده افزایش میابد. همچنین با افزایش غلظت سم فنیتروتیون مقدار تولید گونه‌ها کاهش میاید، در نتیجه مقدار TDS نیز با غلظت سم رابطه عکس دارد[5, 6].

نتیجه گیری

تغییرات مشخصات ساختاری محلول , TDS PH و رسانندگی الکتریکی به مدت زمان پلاسمادهی و غلظت محلول وابسته است. مقادیر pH با افزایش زمان اثردهی و افزایش تولید گونه ها کاهش پیداکرد و محیط اسیدی‌تر شد. هم‌چنین با افزایش غلظت سم مقدار PH افزایش میابد.

رسانندگی الکتریکی و TDS نیز با افزایش زمان پلاسمادهی به دلیل افزایش غلظت یون‌ها افزایش میابد. هرچه غلظت محلول سم فنیتروتیون افزایش یابد مقدار رسانندگی الکتریکی و TDS کاهش میابد.بررسی این تغییرات در پساب‌ها از اهمیت بالایی برخوردار است، زیرا امروزه استفاده از فناوری پلاسما در زمینه تصفیه آب رویکردی نوآورانه و رو به رشد است، پس بررسی مشخصات ساختاری آب خروجی از این فرآیند بسیار حائز اهمیت است.

مرجع‌ها

.1 Locke, B., et al., *Electrohydraulic discharge and nonthermal plasma for water treatment.* Industrial & engineering chemistry research, 2006. **45**(3): p. 882-905.

.2 Bruggeman, P.J., et al., *Plasma–liquid interactions: a review and roadmap.* Plasma sources science and technology, 2016. **25**(5): p. 053002.

.3 Bruggeman, P., et al., *Characteristics of atmospheric pressure air discharges with a liquid cathode and a metal anode.* Plasma Sources Science and Technology, 2008. **17**(2): p. 025012.

.4 Nguyen, D.V., et al ,.*Treatment of surface water using cold plasma for domestic water supply.* Environmental Engineering Research, 2018. **24**(3): p. 412-417.

.5 Bruggeman, P., et al., *Dc excited glow discharges in atmospheric pressure air in pin-to-water electrode systems.* Journal of Physics D: Applied Physics, 2008. **41**(21): p. 215201.

.6 Khadgi, A., et al., *Treatment of waste water by ozone produced in a dielectric barrier discharge.* Journal of science and Technology in the Tropics, 2012. **8**: p. 141-153.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مطالعه اثر نورگرمایی در نانوکامپوزیت MoS_2/Au

هوشیار، محبوبه؛ ابارشی، افسانه

دانشکده فیزیک،دانشگاه شهید بهشتی، تهران

چکیده

در این پژوهش، نانومیله‌های طلا پوشانده شده با نانوورقه‌های مولیبدن دی‌سولفید (MoS_2–Au) سنتز و خواص ساختاری، اپتیکی و نورگرمایی آن مورد مطالعه قرار گرفت. مشخصه‌یابی این نمونه توسط دستگاه‌های XRD، UV-Vis، TEM مورد بررسی قرار گرفت. داده‌های حاصل از XRD، UV-Vis و TEM نشان دادند که نانو ذرات طلا به خوبی در بین نانو ورقه‌های MoS_2 قرار گرفته‌اند و نیز مطالعه نتایج نورگرمایی نمونه‌ها نشان داد که نانوکامپوزیت‌های MoS_2-Au خاصیت نورگرمایی بسیار بالایی از خود نشان می‌دهد و همچنین این مطالعات نشان داد که با افزایش غلظت طلا در نانوکامپوزیت MoS_2-Au، گرمای بیشتری بدست می‌آید.

واژه های کلیدی: *نانو کامپوزیت MoS_2–Au، نورگرمایی، درمان سرطان.*

Study of Photothermal Effect in MoS_2/Au Nanocomposite

Mahboubeh Houshiar, Afsaneh Abareshi

Department of Physics, Shahid Beheshti University, Evin, Tehran, Iran

Abstract

In this study, gold nanorods decorated with molybdenum disulfide (MoS_2–Au) was fabricated then optical property and morphology of all sample was characterized by X-ray diffraction (XRD), transmission electron microscopy (TEM), and Ultraviolet-visible (UV-Vis) spectroscopies. Data obtained from XRD, UV-Viz and ATM showed that Au nanorods have been palaced well between MoS_2 nanosheets and also study of photothermal results of the samples showed that by increasing Au concentrations in MoS_2/Au nanocomposite, more heat can be achieved.

***Keywords**: MoS_2-Au nanocomposite, photothermal, cancer therapy.*

PACS No. 68

مقدمه

مولیبدن دی سولفید (MoS_2) از جمله موادی است که دارای ساختار لایه‌ای S-Mo-S می‌باشد که در هر لایه آن، اتم Mo در بین دو لایه از اتم‌های S توسط نیروی کوالانسی قرار گرفته‌اند ولی لایه‌های مجاور تحت نیروی واندروالسی ضعیفی باهم پیوند می-خورند[۵-۱]. تحقیقات نشان داده است که MoS_2 درحالت لایه-ای، ویژگی‌های جالبی از قبیل: میزان جذب بالا در ناحیه نزدیک مادون قرمز، زیست سازگاری خوب و نسبت سطح به حجم بالایی را از خود نشان می‌دهد که سبب شده است این ماده به عنوان یک

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

کاندید مناسب در درمان به روش نورگرمایی و نیز به عنوان یک بستر مناسب جهت تحویل دارو به‌کار رود[۶-۹].

نانومیله‌های‌طلا عبارتند از نوعی نانوذرات طلا که در یک جهت کشیده شده‌اند و دارای دو نوار تشدید پلاسمونیک سطحی طولی و عرضی می‌باشند[۱۰]. همچنین نانومیله‌های‌طلا زیست سازگاری خوب، روش سنتز آسان، پایداری بالا، جذب قوی و پراکندگی خوب در ناحیه نزدیک مادون قرمز از خود نشان میدهند بنابراین میتوانند در زمینه درمان سرطان به روش نورگرمایی مورد استفاده قرار گیرند[۱۱-۱۵]. در سالهای اخیر برای درمان سریعتر سلول سرطانی، نانوتکنولوژی به دنبال کامپوزیتی از نانوساختارهای لایه-ای با دیگر مواد می‌باشد. که در این تحقیق ما از کامپوزیتی از MoS_2 با نانومیله‌های‌طلا استفاده کردیم تا میزان گرمای ایجاد شده پس از تابش لیزر را افزایش و نابودی سلول سرطانی سریعتر اتفاق بیفتد.

بخش تجربی

برای تهیه نانوورقه‌های MoS_2، ابتدا پلی اتیلن گلیکول ۴۰۰ (۲ گرم) و آمونیوم مولیبدیت تتراهیدرات (۰.۷ گرم) را در ۸۰ میلی‌لیتر آب مقطر دوبار تقطیر حل کرده می‌شود. سپس ۴۰ میلی‌لیتر محلول تیواستامید ۲ میلی‌مول به محلول بالا اضافه می‌شود تا محلول شفافی حاصل شود. سپس محلول به‌دست آمده را داخل اتوکلاو استیل ریخته و به مدت ۱۸ ساعت در دمای ۲۱۰ درجه قرار داده می‌شود. ماده به‌دست آمده چندین بار با آب دوبار تقطیر سانتریفیوژ شده و برای مدت ۲۴ ساعت فریزدرایر می‌شود [۱۶].

برای تهیه نانومیله‌های‌طلا از روش محلول دانه‌ای استفاده شده است. که در تهیه آن از موادی از جمله CTAB، $HAuCl_4.3H_2O$، $NaBH_4$، $AgNO_3$، hydroquinone استفاده شده است [۱۵].

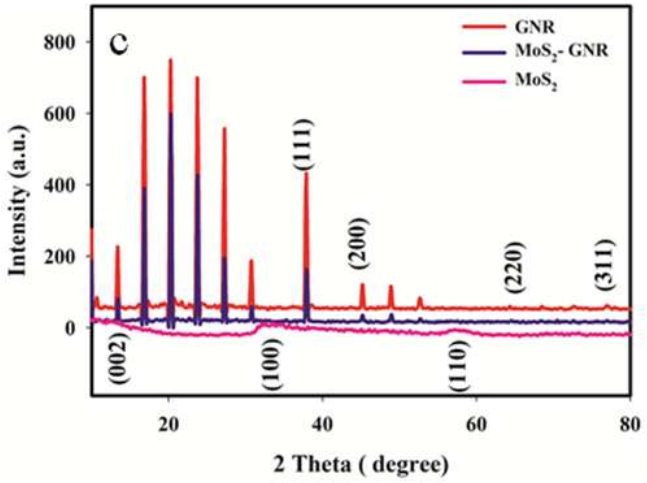
در نهایت برای تهیه نانوکامپوزیت MoS_2-Au، ۰/۰۰۴ گرم از پودر MoS_2 را داخل حمام آلتراسونیک به مدت نیم ساعت قرار داده و در همین هنگام محلول نانوراد طلا را به آن اضافه میکنیم.

مشخصات ساختاری

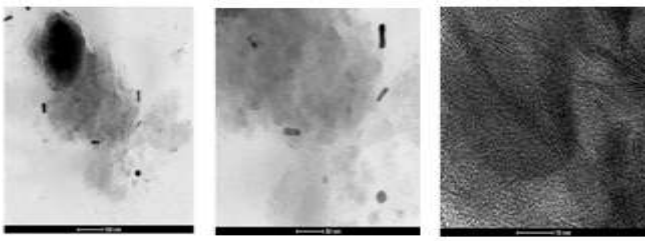
شکل ۱ طیف XRD نانو ورقه‌های MoS_2 ، نانومیله‌های‌طلا و MoS_2-Au را نشان می‌دهد. همانطور که در طیف پراش کریستالی MoS_2 مشاهده می‌شود پیک‌های پراش در زوایای ۱۴/۱، ۳۳/۳، ۳۹/۳، ۴۹/۲ و ۵۹/۳ منطبق بر بازتاب از صفحات کریستالی (۰۰۲)، (۱۰۰) ، (۱۰۳)، (۱۰۵) و (۱۱۰) می‌باشند که فاز هگزاگونال برای ورقه‌های MoS_2 (با کارت استاندارد ۰۰۹۷-۰۰۶-۰۰) را مشخص می‌کند [۱۶]. پیک‌های پراش در زوایای ۳۷.۹۸، ۴۵.۰۹، ۶۴.۵۰ و ۷۷.۲۵ منطبق بر بازتاب از صفحات کریستالی (۱۱۱)، (۲۰۰) ، (۲۲۰) و (۳۱۱) می‌باشد که مربوط به نانومیله‌های‌طلا می‌باشد [۱۷]. از آنجا که هفت پیک ذکرشده در طیف مربوط به MoS_2-Au وجود دارند بنابراین تأیید میکند که نانومیله‌های‌طلا در بین نانو ورقه‌های MoS_2 قرار گرفته‌اند. با استفاده از این هفت قله پراش مذکور، میانگین ثابت شبکه 4.078 Å و اندازه بلوری 34.1 nm در این نمونه MoS_2-Au با استفاده از اندیس‌های میلر و رابطه دبای شرر محاسبه شد.

شکل ۲ تصاویر TEM از نمونه MoS_2-Au را نشان میدهد. همانگونه که در این شکلها مشاهده میشود ابعاد نانوورقه‌های سنتز شده بین ۱۴۰ تا ۱۶۰ نانومتر و فاصله بین صفحات شبکه حدود ۰/۳ نانومتر اندازه گیری شد که با نتایج سایرین مطابقت نشان می دهد [۱۶]. همچنین مشاهده شد که نانومیله‌های طلای سنتز شده طولی حدود ۳۳ نانومتر و قطر حدود 11.3 نانومتر دارند و همچنین فاصله بین صفحات آن حدود ۰.۲ نانومتر می‌باشد که با سایر نتایج همخوانی خوبی دارد [۱۸] و نیز این تصاویر تأیید میکند که نانومیله‌های طلا در بین نانوورقه‌های MoS_2 قرار گرفته-اند.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

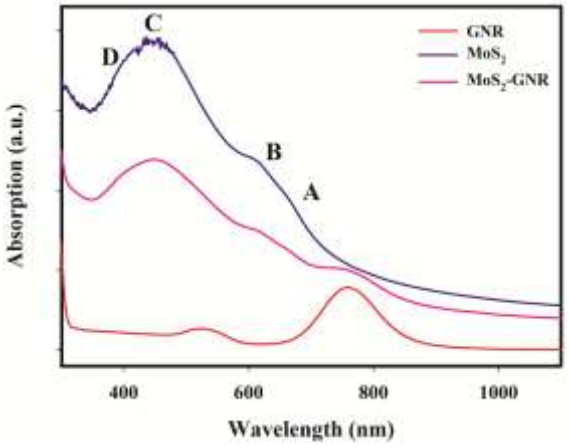


شکل ۱. طیف XRD نانومیله‌های‌طلا، MoS_2 و نانوکامپوزیت MoS_2–Au.



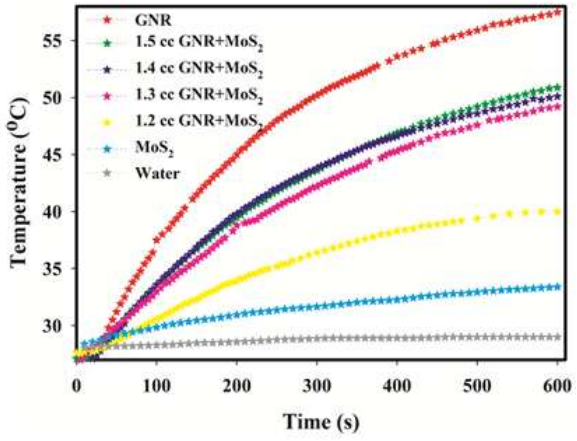
شکل۲. تصاویر TEM نانوکامپوزیت MoS_2–Au در مقیاسهای 100، 50 و 10 نانومتر.

شکل ۳ طیف UV–Vis نمونه های نانومیله های طلاُ، نمونه MoS_2 و نانوکامپوزیت MoS_2–Au را نشان می دهد. تکنیک UV–Vis برای مشخصه‌یابی نوری نانوکامپوزیت MoS_2 -Au بکار گرفته شده است. در این طیف قله‌های A و B در بازه طول-موجی ۶۰۰ تا ۷۰۰ نانومتر و نیز قله جذبی پهنی در ناحیه ۳۵۰ تا ۴۵۰ نانومتر (نقاط C و D) مربوط به MoS_2 ایجاد شده‌اند که موقعیت قله A ضخامت لایه را حدود ۶۷۵ نانومتر تعیین مینماید و معادل با انرژی 1.87 ev است. این مطلب نشان می‌دهد که نانو ورقه‌های MoS_2 کمتر از ۴ لایه می‌باشند که با سایر گزارشات همخوانی دارد [۱۶]. همچنین دو قله ۷۶۰ و ۵۲۵ نانومتر که مربوط به تشدید پلاسمون سطحی طولی و عرضی در نانومیله‌های طلا می‌باشد در این طیف مشاهده می گردد که تأیید دیگری بر حضور نانومیله‌های طلا در بین نانوورقه‌های MoS_2 می‌باشد [۸-۱۰].



شکل۳. طیف UV–Vis نمونه های نانومیله‌های طلا، MoS_2 و MoS_2–Au.

جهت بررسی اثر نورگرمایی در نمونه MoS_2–Au، غلظت های متفاوت از طلا (۱.۱، ۱.۲، ۱.۳، ۱.۴و ۱.۵) در مقدار ۲ میلی لیتر از محلول MoS_2 ریخته شد که نسبت وزنی نانومیله طلا به MoS_2، ۱.۱/۲، ۱.۲/۲، ۱.۳/۲، ۱.۴/۲، ۱.۵/۲ که در شکل ۴ به ترتیب با رنگهای آبی، زرد، قرمز، سیاه، سبز و نارنجی نشان داده شده، در نظر گرفته شد که تحت تابش یک لیزر پیوسته با طول موج ۸۰۸ نانومتر و چگالی توان $1\ W/cm^2$ به مدت ۱۰ دقیقه قرار گرفتند (شکل ۴). در این شکل مشاهده میشود که با افزایش غلظت طلا در کامپوزیت، گرمای بیشتری تولید می‌شود به طوریکه در نمونه با غلظت 1.5 cc پس از مدت ۱۰ دقیقه دمای کامپوزیت از ۲۸ درجه سانتی‌گراد به ۵۱.۳ درجه سانتی‌گراد می‌رسد. از آنجا که سلول‌های سرطانی بسیار به دما حساس هستند بنابراین این کامپوزیت می‌تواند کاندید بسیار مناسبی در زمینه درمان سرطان به روش نورگرمایی باشد.



: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

شکل۴. تصویر نورگرمایی محلول نانومیله‌های‌طلا، MoS_2 و MoS_2–Au.

نتیجه گیری

در این تحقیق، نانومیله‌های‌طلا، نانوورقه های MoS_2 و نانوکامپوزیت MoS_2–Au سنتز و سپس ویژگی‌های ساختاری، اپتیکی و نورگرمایی نمونه‌ها مورد بررسی قرار گرفت. نتایج XRD، TEM , Uv-Vis نشان دادند که نانو ذرات طلا به خوبی در بین نانو ورقه‌های MoS_2 قرار گرفته‌اند و نیز نتایج نورگرمایی نشان داد که نانوکامپوزیت خاصیت نورگرمایی بسیار خوبی از خود نشان می‌دهد و با افزایش غلظت طلا در نانوکامپوزیت، گرمای بیشتری حاصل میگردد. بنابراین این کامپوزیت می‌تواند کاندید بسیار مناسبی جهت درمان سرطان به روش نورگرمایی باشد.

مراجع:

[1]. Y. Wang, J. Zhen Ou, S. Balendhran, A F. Chrimes, M. Mortazavi, D D. Yao, M R. Field, K. Latham, V. Bansal, J R. Friend, S. Zhuiykov, N V. Medhekar, M S. Strano and K. Kalantarzadeh, ACS Nano.7 (2013) 10083–10093.

[2]. R. Yan, J.R. Simpson, S. Bertolazzi, J. Brivio, M. Watson, X. Wu, A. Kis, T. Luo, A.R. Hight Walker and H. Grace Xing, ACS Nano.8 (2014) 986–993.

[3]. A. Molina-Sanchez and L. Wirtz, Phys. Rev. B. 84 (2011) 155413.

[4]. Ch. Lee, H. Yan, L.E. Brus, T.F. Heinz, J. Hone, S. Ryu , ACS Nano.4 (2010) 2695–2700.

[5]. H. Li, Q. Zhang, Ch. Chong Ray Yap, B. Kang Tay, T. Hang Tong Edwin, A. Olivier, D. Baillargeat, Adv. Funct. Mater.22 (2012) 1385-1390.

[6]. G. Eda, H. Yamaguchi, D. Voiry, T. Fujita, M. Chenand M. Chhowalla, Nano Lett. 11 (2011) 5111–5116.

[7]. X. Huang, P. K. Jain, I. H. El-Sayed, M. A. El-Sayed, Lasers Med Sci. 23 (2008) 217-228.

[8] Ma, X., Tao, H., Yang, K., Feng, L., Cheng, L.;Shi, X.;Li, Y.;Guo, L., Liu, Z, Nano Res. (2012), 5, 199-212.

[9]. Yang, K., Zhang, S., Zhang, G., Sun, X., Lee, S.-T., Liu, Z, Nano let, (2010), 10, 3318-3323.

[10]. G. Terentyuk, E. Panfilova, V. Khanadeev, D. Chumakov, E. Genina,A. Bashkatov, V. Tuchin, A. Bucharskaya, G. Maslyakova, N.Khlebtsov and B. Khlebtsov, *Nano Research*

[11]. Dreaden, E. C., Alkilany, M. A., Huang, X., Murphy, C. J., El-Sayed, M. A.*Chem. Soc. Rev.* **2012**, *41*, 2740–2779.

[12] Van de Broek, B.; Devoogdt, N.; D'Hollander, A.; Gijs, H.-L.; Jans, K.; Lagae, L.; Muyldermans, S.; Maes, G.; Borghs, G. *ACS Nano*, **2011**, *5*, 4319–4328.

[13]. Huang, P.; Bao, L.; Zhang, C.; Lin, J.; Luo, T.; Yang, D.; He, M.; Li, Z.; Gao, G.; Gao, B.; Fu, S. and Cui, D., *Biomaterials*, **2011**, *32*, 9796–9809.

[14]. W. Choi, A. Sahu,Y. H. Kim, G. Tae, ,,*Annals of Biomedical Engineering*, 40 (2012) 534.

[15]. S. Picciolini, D. Mehn, I. Ojea-Jiménez, F. Gramatica, C. Morasso, *J. Vis. Exp.* 114 (2016) e54319.

[16]. A. Abareshi, M. Arshadi Pirlar and M. Houshiar, *Mat. Res. Exp*, 6(2019) 1.

[17]. V. Sebastián, S. Lee, C. Zhou, M. F. Kraus, J. G. Fujimoto and K. F. Jensen,Chem Commun, 48 (2012) 6654.

[18]. Yumin Leng, et al., *High-yield synthesis and fine-tuning aspect ratio of* RSC Adv., 2017. **7**: p. 25469-25474.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد :
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مقایسه خواص الکترونیکی ابرشبکه لانه‌زنبوری متشکل از نقاط کوانتومی InAs/GaAs وگرافن طبیعی

عزیز آغچه قلعه ، ویگن[۱]؛ منصوری، مریم[۲]

[۱] گروه فیزیک، دانشگاه صنعتی ارومیه ، ابتدای جاده بند، ارومیه

[۲] گروه فیزیک، دانشگاه صنعتی ارومیه ، ابتدای جاده بند، ارومیه

چکیده

گرافن به خودی خود گاف نواری را که یک ویژگی حیاتی برای کاربردهای الکترونیکی است ندارد و نمی‌تواند رسانایی الکتریکی را متوقف و خاموش کند بنابراین نمی‌توان از آن به عنوان سوییچ استفاده کرد. در یک ساختار گرافن دو بعدی با قرار دادن نقاط کوانتومی کروی یا بیضوی ساخته شده از مواد نیمه‌رسانا به جای اتم-های کربن می‌توان یک ساختار گرافن مصنوعی ساخت و به این طریق می‌توان گاف نواری مطلوب (با انتخاب نوع موادی که نقاط کوانتومی از آن‌ها ساخته شده است) ایجاد کرد. و بدین طریق با انتخاب نوع مواد و تغییر ساختار هندسی می‌توان مطالعات نظری روی خواص الکتریکی و نوری این‌گونه ساختارها انجام داد و تاثیر عوامل مختلف خارجی را نیز به حساب آورد.

واژه های کلیدی: گرافن، شبکه لانه زنبوری، ابر شبکه، نقاط کوانتومی

Comparison of electronic characteristics of honeycomb superlattice constructed InAs/GaAs quantum dots and natural graphene

AzizAghchegala, Vigen[1]; Mansoury, Maryam[2]

[1] Department of Physics, Urmia University of Technology, Iran
[2] Department of Physics, Urmia University of Technology, Iran

Abstract

Graphene does not have a bandgap, which is a vital feature for electronic applications, and it cannot stop and turn off electrical conduction, so it cannot be used as a switch. In a two-dimensional graphene structure, by placing spherical or elliptical quantum dots made of semiconductor materials instead of carbon atoms, an artificial graphene structure can be constructed, and thus the desired bandgap can be created (by selecting the type of material). Which created quantum dots. Thus, by selecting the type of material and changing the geometric structure, theoretical studies on the electrical and optical properties of such structures can be presented and the effect of various external factors can be considered.

***Keywords**:Graphene, Honeycomb lattice, Superlattice, Quantum dot*

مقدمه

به دلیل نقش اساسی کربن در سیستم‌های بیولوژیکی، مطالعه‌ی خواص فیزیکی آلوتروپ‌های آن مورد توجه بسیاری قرار گرفته است. یکی از ساختارهای تشکیل شده از اتم کربن گرافن است. گرافن یک شبکه تک لایه است که اتم‌های کربن در یک شبکه دوبعدی لانه زنبوری قرار گرفته اند. در سال ۲۰۰۴ مطالعات

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

آزمایشگاهی روی گرافن انجام شد و این آغازی برای بررسی فواص حاملین بار در گرافن بود[۱]. ویژگی منحصر به فرد گرافن نشان داد که نوارهای رسانش و ظرفیت در نقاط ویژه‌ای از فضای k به هم می‌رسند. در اطراف این نقاط پاشندگی انرژی-تکانه به صورت خطی است. در چنین شرایطی معادله شرودینگر برای توصیف رفتار حاملین بار موفق نیست و به جای آن از معادلات دیراک استفاده می‌شود زیرا حاملین بار در گرافن رفتاری شبیه فرمیون‌های بدون جرم دیراک دارند. در اطراف نقاط دیراک الکترون‌ها دارای سرعت گروه معادل با $v_g \simeq 10^6\, m/s$ هستند[۲]. فرمیون‌های بدون جرم دیراک که نتیجه تقارن خاص شبکه هستند در ساختارهایی با هندسه‌ی شش گوشی حاصل می‌شوند. رفتار خارق العاده حاملین بار در گرافن منجر به ساخت انواع مختلفی از گرافن مصنوعی شده است[۳]. سیستم‌های گرافن مصنوعی به دلیل تقارن لانه زنبوری دارای خواص الکترونیکی منحصر به فردی هستند. گرافن‌های مولکولی با استفاده از قرار گرفتن مولکول‌ها روی سطح زیرلایه ساخته می‌شوند[۴]. گازهای فوق سرد در شبکه‌های اپتیکی به دلیل هندسه و برهمکنش بین ذره‌ای قابل تنظیم گزینه‌های مناسبی برای شبکه‌های لانه زنبوری هستند. مطالعات بسیاری وجود نقاط دیراک را در این سیستم‌ها پیش‌بینی می‌کنند. این اثرات اخیرا در سیستم متشکل از گاز فرمی فوق سرد دیده شده است. وجود ترازهای غیر مسطح برای اتم‌ها سرد پیش‌بینی شد و برای پلاریتون‌ها به صورت آزمایشگاهی دیده شد. در مرجع [۵] یک روش کلی برای ساخت شبکه‌های مصنوعی تشکیل شده از انم‌های سرد پیشنهاد شده است. این شبکه لانه زنبوری اپتیکی در معرض یک پتانسیل متناوب قرار گرفته است. این پتانسیل متناوب با استفاده از نقاط پراکننده ود گره‌های شبکه اپتیکی لانه زنبوری حاصل می‌شود. این سیستم گرافن مصنوعی اتمی نامیده می‌شود و برخلاف سیستم اتم‌های فوق سرد پتانسیل احساس شده یک پتانسیل اپتیکی پیوسته نیست بلکه از اتم‌های نوع دوم ساختار ایجاد شده است که که در حالت‌های پایه‌ی مرتعش شبکه پارابولیک به دام افتاده‌اند. در این مقاله برای مقادیر متفات شدت برهمکنش بین اتم‌های نمونه A و نمونه B پاشندگی ترازهای انرژی و چگالی حالت‌ها بررسی شده است و این نتیجه حاصل شده است که با تغییر شدت برهمکنشی پاشندگی نوارهای انرژی تحت تاثیر قرار می‌گیرند و نقاط دیراک جابجا می‌شوند[۶].

تئوری

در این مقاله با در نظر گرفتن یک ابرشبکه لانه زنبوری با نوشتن هامیلتونین و با استفاده از بسط فوریه و تقریب قطری سازی دقیق[۷] نمودارهای مربوط به پاشندگی انرژی و چگالی حالت‌ها را در نرم افزار متمتیکا۱۱ رسم نموده و یک گاف انرژی خیلی کوچک را مشاهده خواهیم کرد.

در فضای وارون بردار شبکه G را بر اساس پایه‌ها به صورت زیر تعریف می‌کنیم

$$\begin{cases} \vec{G} = n_1\vec{g_1} + n_2\vec{g_2} \\ \vec{g_1} = 2\pi/3a\,(1\,;\sqrt{3}) \\ \vec{g_2} = 2\pi/3a\,(1\,;-\sqrt{3}) \end{cases} \qquad (۱)$$

دینامیک الکترون می‌تواند با استفاده از هامیلتونی زیر تعریف شود:

$$\hat{H} = \hat{P}\frac{1}{2m(\vec{r})}\hat{P} + V(\vec{r}) \qquad (۲)$$

پتانسیل ابرشبکه $\vec{v}_0(\vec{r})$ پتانسیل شبکه را در غیاب کشش تعریف می‌کند. $\hat{P}$ عملگر اندازه حرکت و $2m(\vec{r})$ عمگر جرم موثر است. رسانش در GaAs است.تابع موج $\psi(\vec{r})$ و جرم معکوس و پتانسیل ابرشبکه را می‌توان برحسب سری فوریه بسط داد[۷].

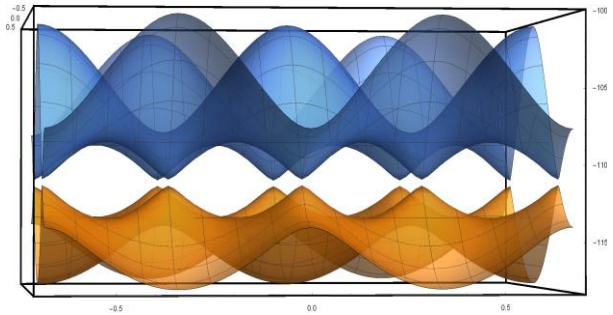
$$\begin{cases} \psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}.\vec{r}}\,U_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} \tilde{U}_{n\vec{k}}(\vec{G})\,e^{i(\vec{k}+\vec{G}).\vec{r}} \\ V(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} \tilde{V}(\vec{G})\,e^{i\vec{G}.\vec{r}} \\ \frac{1}{m(\vec{r})} = \sum_{\vec{G}} \tilde{m}(\vec{G})\,e^{i\vec{G}.\vec{r}} \end{cases} \qquad (۳)$$

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

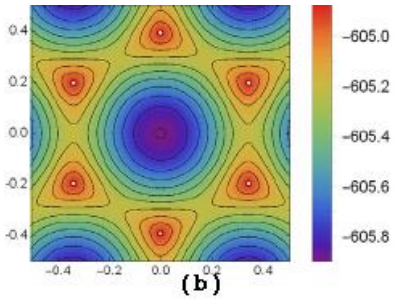
در این روابط $V(\vec{G})$ و $U_{n\vec{k}}(\vec{G})$ ،$m(\vec{G})$ مولفه‌های فوریه تابع بلوخ در n امین نوار هستند. با قرار دادن این روابط در هامیلتونین رابطه(۱) می‌توان ویژه مقادیر انرژی را برای هر مقدار ثابت بردار موج $\vec{k}$ با یک روش قطری سازی دقیق بدست آورد. در محاسبات عددی از مقادیر زیر برای جرم موثر الکترون بر حسب جرم الکترون آزاد استفاده می‌کنیم[۷]:

$$m_1 = 0.067m_0 \text{ و } m_2 = 0.023m_0$$

برای یک ساختار بدون کشش دقیقا مانند یک ساختار با کشش همسانگرد سطح مقطع پراکندگی می‌تواند با استفاده از تقریب بستگی قوی بدست آید که برای گرافن هم به همین صورت است. انحراف انرژهای بدست آمده با استفاده از روش قطری سازی دقیق و محاسبات بستگی قوی برای ساختارهای لانه زنبوری بدون کشش کمتر از ۲٪ درصد است. شکل (۱) پاشندگی الکتریکی دوتا از پایین ترین ترازها را برای ابر شبکه بدون کشش نشان می‌دهد. و شکل(۲) چگالی پاشندگی انرژی را برای دو تا از پایین ترین ترازها نشان می‌دهد.

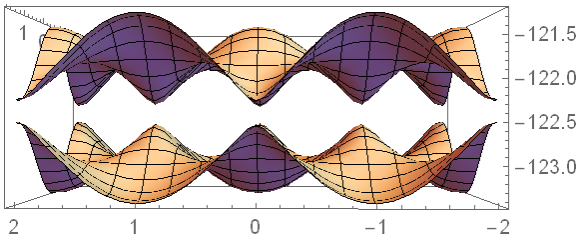


شکل(۱). پاشندگی نوارهای انرژی برای پایین‌ترین نوارهای باریک شماره یک و دو.

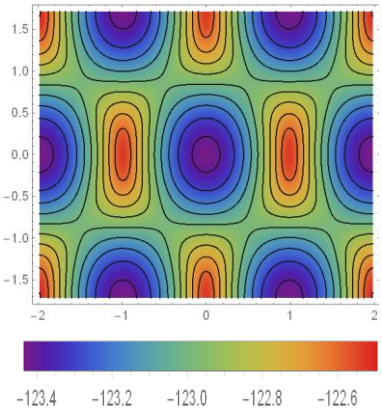


شکل(۲). برش مقطعی از چگالی انرژی اولین نوار باریک

همانگونه که از شکل‌ها مشخص است یک گاف انرژی بسیار کوچک در منحنی پاشندگی انرژی ظاهر شده است در شکل (۳) با ایجاد تغییراتی در هندسه شبکه و تغییر در ترکیب به کار رفته در ابرشبکه می‌توان گاف بزرگتری ایجاد کرد و در این صورت می‌توان گفت که نقاط دیراک از بین رفته‌اند.



شکل(۳). پاشندگی نوارهای انرژی برای پایین‌ترین نوارهای باریک شماره یک و دو در ابر شبکه لانه زنبوری متشکل از نقاط کوانتومی غیر استوانه‌ای.



شکل (۴). برش مقطعی از چگالی انرژی اولین نوار باریک

در مرحله بعدی چگالی حالت‌ها را در سیستم ذکر شده و گرافن طبیعی مقایسه می‌کنیم.

همانگونه که می‌دانیم منحنی چگالی حالت‌ها در گرافن دارای دو پیک متقارن است و در نقاط مرسوم به نقاط دیراک مقدار آن صفر می‌شود. در نزدیکی نقاط دیراک رفتار چگالی حالت‌ها به صورت یک رابطه‌ی خطی با انرژی خواهد بود که این رفتار به صورت کاملا مشابه با گرافن طبیعی در سیستم پیشنهادی در این مقاله دیده

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

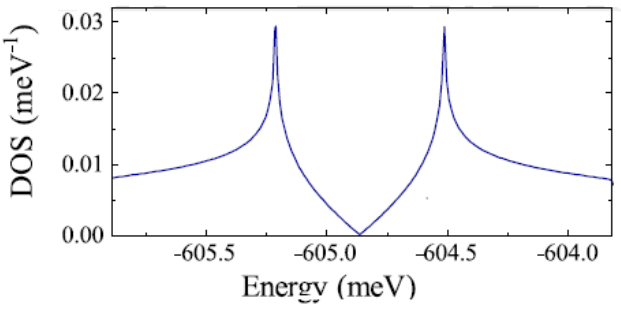
می‌شود. رابطه‌ی چگالی حالت‌های انرژی به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$\rho(E)=\frac{1}{s}\sum_i \delta(E-E_i) \qquad (۴)$$

در حالت طیف انرژی شبه پیوسته علامت جمع را به انتگرال تغییر داده و تابع لورنتزین را جایگزین تابع دلتای دیراک می‌کنیم:

$$\rho(E)=\frac{1}{4(2\pi)^2}\left(\begin{array}{l}\iint \Gamma(E-E_1(k_x,k_y))\ dk_x\,dk_y + \\ \iint \Gamma(E-E_1(k_x,k_y))\ dk_x\,dk_y\end{array}\right) \qquad (۵)$$

انتگرال‌گیری روی منطقه اول بریلیوئن انجام می‌شود و $E_1(E_2)$ بیانگر ویژه مقادیر انرژی اولین (دومین) نوار باریک هستند. پهنای انرژی در تابع لورنتزین خیلی کوچک در حد $l=10^{-3}mev$ در نظر گرفته شده است.



شکل(۵). منحنی چگالی حالت‌ها در ابرشبکه لانه زنبوری IaAs/GaAs

نتیجه گیری

در این مقاله مروری ابتدا به بررسی گرافن و مشکلات پیش رو جهت استفاده از گرافت در برخی زمینه‌ها از جمله استفاده به عنوانن سوییچ پرداخته شد. برای رفع این محدودیت‌ها گرافن مصنوعی پیشنها داده شد و به بررسی اجمالی این ساختار دوبعدی پرداختیم. پاشندگی نوارهای انرژی را برای پایین‌ترین نوارهای باریک رسم کرده و دیده شد که یک گاف بسیار کوچک در محدوده‌ی mev ایجاد شد. اما این گاف به اندازه‌ی نیست که این ساختار را از گرافن طبیعی کاملا مجزا کند به همین دلیل در منحنی چگالی حالت‌ها دیده می‌شود که رفتاری منطبق با منحنی چگالی حالت‌ها در گرافن طبیعی داریم. در کارهای بعدی با تغییر ویژگی-های ساختاری ابرشبکه و تغییر هندسه ساختار، گاف انرژی در مقیاس بزرگتری ایجاد شده و می‌توان این ادعا را داشت که نقاط دیراک ازبین رفته است. منحنی چگالی حالت‌ها برای مطالعات بعدی تایید کننده‌ی این ادعا است.

مرجع‌ها

[1] K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang, M.I. Katsnelson, I.V. Grigorieva, S.V. Dubonos, A.A. Firsov, Nature 438 (2005) 197.
[2] M.O. Goerbig, J.N. Fuchs, G. Montambaux, F. Piéchon, Phys. Rev. B 78 (2008) 045415.
[3] Marco Polini, Francisco Guinea, Maciej Lewenstein, Hari C. Manoharan, Vittorio Pellegrini, Nat. Nanotechnol. 8 (2013) 625.
[4] Yan, L., Hua, M., Zhang, Q., Ngai, T. U., Guo, Z., Wu, T. C& Lin, N. (2019). Symmetry breaking in molecular artificial graphene. *New Journal of Physics*, *21*(8), 083005.
[5] Bartolo, N., & Antezza, M. (2014). Matter waves in atomic artificial graphene. *EPL (Europhysics Letters)*, *107*(3), 30006.
[6] Wang, S., Scarabelli, D., Kuznetsova, Y. Y., Wind, S. J., Pinczuk, A., Pellegrini, V& West, K. W. (2016). Observation of electron states of small period artificial graphene in nano-patterned GaAs quantum wells. *Applied Physics Letters*, *109*(11), 113101.
[7] Mughnetsyan, V., & Kirakosyan, A. (2019). Effect of anisotropic strain on the electronic characteristics of an InAs/GaAs honeycomb superlattice. *Superlattices and Microstructures*, *128*, 243-251.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

شبیه سازی تحریک پلاسمون تام در داخل یک موجبر

باقر، فرزانه؛ چگل، رعد؛ رضوانی جلال، مسعود

گروه فیزیک و فوتونیک، دانشگاه ملایر، ملایر

چکیده

در این مقاله به مطالعه پلاسمون سطحی تام در داخل یک موجبر به صورت نظری و محاسباتی پرداخته می شود. از یک موجبر مستطیلی با دیواره های رسانای کامل، که مدهای TE و TM آن شناخته شده هستند، استفاده می گردد. ابتدا، ضرایب بازتاب و عبور این دو نوع قطبش در داخل موجبر به دست می آیند و از آنها ماتریس های انتقال ساخته می شوند. سپس، یک آینه براگ که روی آن لایه نازکی از طلا نشانده شده است در داخل موجبر قرار می گیرد. ضرایب بازتاب و عبور این ترکیب لایه ای از طریق ماتریس انتقال کل پیدا می شوند. نمودار ضریب بازتاب طیفی، تحریک پلاسمون تام در هر دو مُد موجبری را تایید می کند. محاسبات نشان می دهند که فرکانس پلاسمون تام در داخل موجبر بالاتر از مورد فضای آزاد می باشد.

واژه های کلیدی: *پلاسمون تام، مدهای TE و TM، موجبر مستطیلی.*

Simulation of Tamm Plasmon Excitation within a Waveguide

Bagher, Farzaneh; Chegel, Raad; Rezvani Jalal, Masoud

Department of Physics and Photonics, Malayer University, Malayer

Abstract

In this paper, Tamm surface plasmon within a waveguide is studied both theoretically and computationally. A rectangular waveguide with ideal conducing walls, which whose TE and TM modes are known, is used. First, reflection and transmission coefficients of these two polarizations within the waveguide are obtained and transfer matrices are constructed by them. Then, a Bragg mirror coated with a thin layer of gold is placed in the waveguide. Reflection and transmission of this layer stack are found via total transfer matrix. Plot of spectral reflection confirms excitation of the Tamm plasmon for both waveguide modes. Calculations show that frequency of Tamm plasmon in the waveguide is higher than that of free space.

***Keywords**: Tamm plasmon, TE and TM modes, Rectangular waveguide.*

PACS No. 41, 68, 81.

مقدمه

پلاسمون سطحی به نوسان دسته جمعی الکترون ها در سطح مشترک یک ماده پلاسمونی و یک دی الکتریک گفته می شود که تحت شرایط خاصی قابل تحریک می باشد [۱]. منظور از ماده پلاسمونی، محیطی است که قسمت حقیقی تابع دی الکتریک آن منفی باشد مثل فلزات نجیبی مانند طلا و نقره که در ناحیه مرئی دارای چنین ویژگی هستند. البته باید مدّ نظر داشت که صرفاً با تاباندن نور به سطح مشترک فلز-دی الکتریک نمی توان پلاسمون سطحی را تحریک کرد و باید، اولاً، نور فرودی دارای قطبش "مغناطیسی عرضی" یا *TM* باشد و ثانیاً، از چیدمان های مناسبی که شرط تطبیق فازی را برآورده می کنند استفاده کرد مانند پیکربندی آتو، یا کرشمان، یا استفاد از توری پراش [۱].

در سال ۲۰۰۷ چیدمان جدیدی برای تحریک پلاسمون سطحی بر اساس حالت های اپتیکی"تام" پیشنهاد گردید [۲]. در این روش بسیار بدیع از یک بلور فوتونی (در واقع یک آینه براگ) برای تحریک پلاسمون سطحی استفاده می شود. خیلی جالب است که

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

در این پیکربندی شرط تطبیق فازی خود به خود برآورده می شود و با هر دو قطبش TE و TM نیز قابل اجرا می باشد. از زمان ارائه این روش جدید، مقالات زیادی برای تکمیل و نیز به کارگیری آن مخصوصاً در ساخت حسگرها به چاپ رسیده است [۵-۳]. با این حال، فرمول بندی که برای این نوع برانگیزش ارائه شده است برای فضای آزاد بوده و علی رغم تعدّد مقالات، هیچ گزارشی مبنی بر تحریک پلاسمون تام در داخل فضاهای نیمه بسته (موجبرها) و بسته (مشددها) در مراجع دیده نمی شود. از آنجا که اپتیک فضاهای محدود به خاطر شرایط مرزی که از طرف دیواره ها اعمال می شود متفاوت از فضای آزاد است این امر می تواند روی شرایط و خواص تشدید پلاسمون تام تأثیر داشته باشد.

در مقاله حاضر، به مطالعه و بررسی تحریک پلاسمون سطحی تام در داخل یک موجبر پرداخته می شود و با نتایج فضای آزاد مورد مقایسه قرار می گیرد.

فرمول بندی

برای سادگی کار از یک موجبر مستطیلی به اضلاع L_x و L_y استفاده می شود. مد TE در این موجبر به صورت زیر است [۶]:

$$B_z = B_0 Cos(\frac{n_x\pi}{L_x}x)Cos(\frac{n_y\pi}{L_y}y)e^{ik_z z}$$

$$\vec{E}_t = \frac{-i\omega}{(n\omega_c/c)^2}\hat{z}\times\vec{\nabla}_t B_z$$

$$\vec{B}_t = \frac{ik_z}{(n\omega_c/c)^2}\vec{\nabla}_t B_z$$

$$\omega_c = \frac{c}{n}\sqrt{(\frac{n_x\pi}{L_x})^2+(\frac{n_y\pi}{L_y})^2}\ ,\ n_x, n_y = 0, 1, 2, ... \qquad (۱)$$

مد TM نیز بدین شکل می باشد:

$$E_z = E_0 Sin(\frac{n_x\pi}{L_x}x)Sin(\frac{n_y\pi}{L_y}y)e^{ik_z z}$$

$$\vec{E}_t = \frac{ik_z}{(n\omega_c/c)^2}\vec{\nabla}_t E_z \qquad (۲)$$

$$\vec{B}_t = \frac{i\mu_0\varepsilon_0 n^2\omega}{(n\omega_c/c)^2}\hat{z}\times\vec{\nabla}_t E_z$$

$$\omega_c = \frac{c}{n}\sqrt{(\frac{n_x\pi}{L_x})^2+(\frac{n_y\pi}{L_y})^2}\ ,\ n_x, n_y = 1, 2, ...$$

که در آنها منظور از t مولفه عرضی میدان و ω_c هم فرکانس قطع موجبر و k_z نیز عدد موج محوری با رابطه زیر می باشد:

$$k_z = \frac{c}{n}\sqrt{\omega^2-\omega_c^2} \qquad (۳)$$

با این میدان ها و اعمال شرایط مرزی، ضرایب بازتاب و عبور در فرود نور از محیطی با ضریب شکست n_1 به محیط با ضریب شکست n_2 برای مدهای TE و TM به شکل زیر پیدا می شوند:

$$r_{TE,12} = \frac{k_{z1}-k_{z2}}{k_{z1}+k_{z2}} \quad , \quad r_{TM,12} = \frac{k_{z1}n_2^2-k_{z2}n_1^2}{k_{z1}n_2^2+k_{z2}n_1^2}$$
$$t_{TE,12} = \frac{2k_{z1}}{k_{z1}+k_{z2}} \quad , \quad t_{TM,12} = \frac{2k_{z1}n_1^2}{k_{z1}n_2^2+k_{z2}n_1^2} \qquad (۴)$$

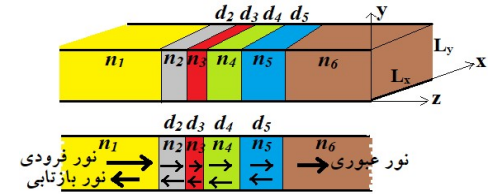
با استفاده از این ضرایب به راحتی ماتریس انتقال گذر از محیط n_1 به محیط n_2 در داخل موجبر به صورت زیر به دست می آید:

$$A_{TE,1\to2} = \frac{1}{2k_{z2}}\begin{bmatrix} k_{z2}+k_{z1} & k_{z2}-k_{z1} \\ k_{z2}-k_{z1} & k_{z2}+k_{z1}\end{bmatrix}$$
$$A_{TM,1\to2} = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} \frac{n_1^2}{n_2^2}+\frac{k_{z1}}{k_{z2}} & \frac{n_1^2}{n_2^2}-\frac{k_{z1}}{k_{z2}} \\ \frac{n_1^2}{n_2^2}-\frac{k_{z1}}{k_{z2}} & \frac{n_1^2}{n_2^2}+\frac{k_{z1}}{k_{z2}}\end{bmatrix} \qquad (۵)$$

ماتریس انتقال مربوط به انتشار در محیط n به اندازه d نیز به شکل زیر است [۷]:

$$A_{n,d} = \begin{bmatrix} e^{ik_z d} & 0 \\ 0 & e^{-ik_z d}\end{bmatrix} \qquad (۶)$$

با داشتن ماتریس انتقال مربوط به گذر از سطح مشترک ها و انتشار در لایه ها به راحتی می توان ماتریس انتقال کل را به دست آورد. برای مثال موجبری که شامل چهار لایه به ضرایب شکست n_2، n_3، n_4 و n_5 و ضخامت های d_2، d_3، d_4 و d_5 بین محیط های نیمه نامحدود n_1 و n_6 باشد را لحاظ کنید (شکل ۱):



شکل ۱: نمایی سه بعدی (بالا) و دو بعدی (پایین) از یک موجبر مستطیلی با چهار لایه واقع در آن. محیط فرود n_1 و محیط عبوری n_6 است.

ماتریس انتقال شکل ۱ شامل ماتریس گذر از محیط ۱ به ۲ (A_{12})، انتشار در محیط ۲ ($A_{n2,d2}$)، گذر از محیط ۲ به ۳ (A_{23})، انتشار در محیط ۳ ($A_{n3,d3}$)، گذر از ۳ به ٤ (A_{34})، انتشار در ٤ ($A_{n4,d4}$)، گذر از ٤ به ۵ (A_{45})، انتشار در ۵ ($A_{n5,d5}$) و در نهایت گذار از ۵ به ٦ (A_{56}) می باشد. ماتریس انتقال کل هم از حاصل ضرب این ماترس ها به ترتیب از آخر به اول ساخته می شود:

$$A = A_{56}A_{n5,d5}A_{45}A_{n4,d4}A_{34}A_{n3,d3}A_{23}A_{n2,d2}A_{12} \qquad (۷)$$

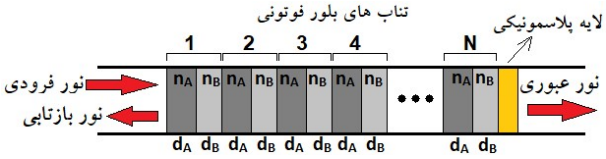
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

ضرایب عبور و بازتاب کل نیز از رابطه زیر به دست می آیند [۷]:

$$\begin{bmatrix} t(\omega) \\ 0 \end{bmatrix} = A \begin{bmatrix} 1 \\ r(\omega) \end{bmatrix} \quad (۸)$$

این روند را می توان برای هر تعداد دلخواهی از لایه ها انجام داد. برنامه ای توسط نویسندگان مقاله در محیط *Mathematica* نوشته شده است که تعداد و مشخصات لایه ها و نیز اطلاعات موجبر را دریافت کرده و ماتریس انتقال کل را پیدا می کند و ضرایب بازتاب و عبور مدهای *TE* و *TM* را به دست می دهد.

همانطور که گفته شد در این مقاله به مطالعه پلاسمون سطحی تام در داخل یک موجبر پرداخته می شود. بدین منظور چیدمان شبیه سازی به صورت شکل ۲ در نظر گرفته می شود. طبق این نقشه، لایه ای از یک ماده پلاسمونی لحاظ می شود که روی یک آینه براگ N–تناوبی (که در حقیقت یک بلور فوتونی یک بعدی است) نشانده شده و در داخل موجبر قرار می گیرد. نوری (یا همان مُد موجبری) از سمت راست به این پُشته لایه ای فرود می آید. قسمتی از آن از بلور فوتونی عبور کرده و به لایه پلاسمونی می رسد. هنگامی که فرکانس نور با تشدید پلاسمونی برابر باشد پلاسمون سطحی تام تحریک می شود.



شکل ۲: چیدمان شبیه سازی تحریک پلاسمون سطحی تام در یک لایه پلاسمونی واقع در یک موجبر با استفاده از N تناوب یک آینه براگ دو لایه ای با لایه های n_A و n_B به ضخامت های d_A و d_B.

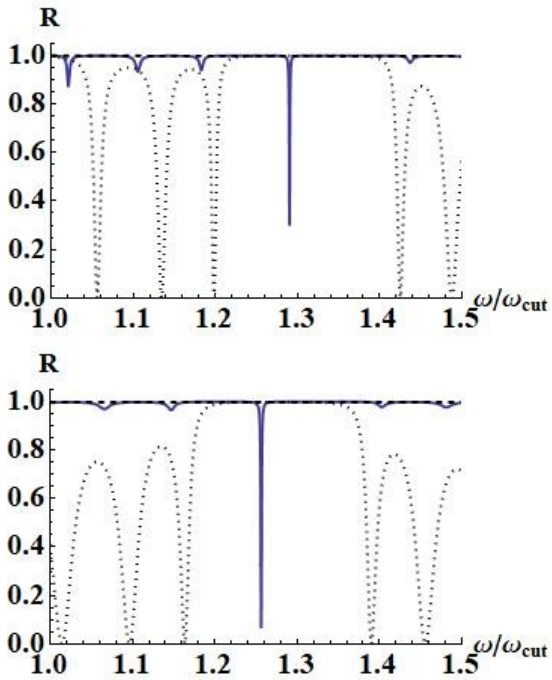
برای حل این مسئله، ضرایب بازتاب و عبور با کد مذکور به دست می آیند و از آنها امکان وقوع تشدید پلاسمونی تام مورد بررسی قرار می گیرد. در ادامه به ذکر نتایج محاسبات پرداخته می شود.

نتایج محاسبات

در انجام محاسبات از طلا به عنوان ماده پلاسمونی با تابع دی الکتریک زیر (طبق مدل درود) استفاده می شود:

$$\varepsilon_{Au}(\omega) = \varepsilon_b\left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma)}\right) \quad (۹)$$

که در آن ε_b=۶٫۱۵۱ ،ω_p=۲٫۱۵۲×۱۰^{۱۵} *Hz* و γ=۶٫۵۲۹×۱۰^{۱۲} *Hz* می باشد [۲و۸]. برای آینه براگ هم لایه های تناوبی از *GaAs* با ضریب شکست n_A=۳٫۷ و ضخامت d_A=۱ μ*m* و *AlAs* با ضریب شکست n_B=۳ و ضخامت d_B=۱٫۱ μ*m* با تعداد تناوب ۱٤ انتخاب می گردد [۲]. این ساختار در داخل یک موجبر مستطیلی با اضلاع اختیاری L_x=۱۰ μ*m* و L_y=۲۰ μ*m* قرار می گیرد. محاسبات مربوط به ضرایب عبور و بازتاب برای هر دو مد *TE* و *TM* توسط برنامه مذکور انجام می شود. در شکل ۳ ضریب بازتاب مد *TE* بر حسب فرکانس (بهنجار شده به فرکانس قطع اولین مد موجبر) برای لایه طلا به ضخامت t=۱ μ*m* نشان داده شده است. ضریب بازتاب ساختار مذکور برای وقتی که در فضای آزاد واقع باشد نیز جهت مقایسه در شکل ۳-پایین آورده شده است.



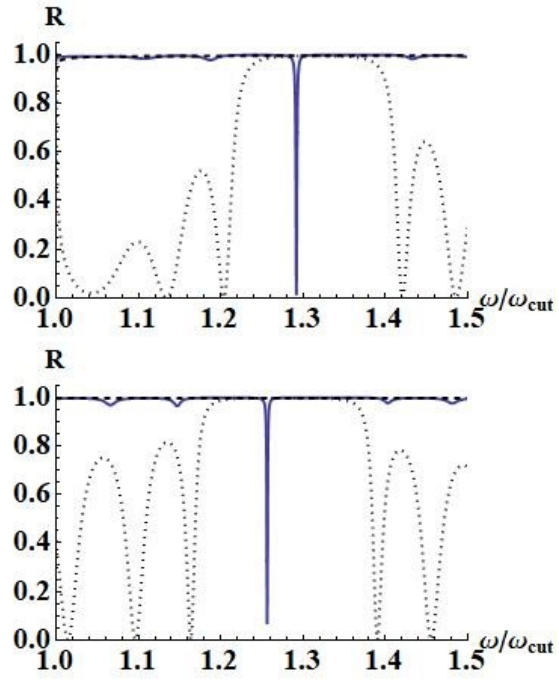
شکل ۳: (بالا) ضریب بازتاب مد *TE* از یک تک لایه طلا به ضخامت t=۱ μ*m* (نمودار خط چین)؛ ۱٤ تناوب بلور فوتونی (نمودار نقطه چین)؛ و لایه طلای چسبیده به بلور فوتونی (نمودار توپُر) واقع در داخل موجبر. (پایین) ضریب بازتاب فرود قائم به تک لایه طلا (خط چین)؛ بلور فوتونی (نقطه چین)؛ و لایه طلا به همراه بلور فوتونی (نمودار توپُر) واقع در فضای آزاد.

از این نمودارها اطلاعات ارزشمندی قابل استخراج است: اول اینکه در هر دوی آنها (درون موجبر و فضای آزاد) برانگیزش پلاسمون سطحی تام به شکل یک عبور باریک و تیز به طور کاملاً واضح قابل مشاهده است. توجه داشته باشید که در بازه فرکانسی $1.2\omega_c < \omega < 1.4\omega_c$ هم بلور فوتونی و هم لایه طلا به صورت

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

انفرادی کاملاً بازتابنده هستند ولی وقتی که با هم باشند آنگاه همکاری آنها به یک تشدید پلاسمونی منجر می شود که به صورت یک عبور تیز در این بازه می باشد. نکته دوم این است که تحریک پلاسمونی در مد *TE* رخ داده است و این از خاصیت بلور فوتونی و پلاسمون تام است که با قطبش *TE* نیز قابل برانگیزش می باشد. نکته دیگر اینکه از مقایسه تشدید پلاسمونی درون موجبر (شکل ۳-بالا) با فضای آزاد (شکل ۳-پایین) مشخص است که فرکانس پلاسمونی تام در حضور موجبر به سمت فرکانس های بالاتر کشیده شده است. این یافته برای اولین بار است که گزارش می شود و تا جایی که نویسندگان مقاله اطلاع دارند هیچ گزارشی از آن در مراجع وجود ندارد.

برای مقایسه بیشتر، بازتاب مد *TM* نیز در شکل ٤ ترسیم شده است. شکل های ۳-پایین و ٤-پایین کاملاً مشابه هستند زیرا برای فرود قائم در فضای آزاد هچ فرقی بین مد *TE* و *TM* نیست.



شکل ٤: مشابه شکل ۳ ولی برای مد *TM*.

از شکل ٤ نیز به روشنی مشخص است که تشدید پلاسمون تام در مد *TM* هم اتفاق می افتد. برای این مد نیز حضور موجبر باعث گردیده که فرکانس تشدید افزایش پیدا کند. جالب اینجاست که پلاسمون تام با مد *TM* دارای تشدید قوی تری در مقایسه با مد *TE* می باشد. این بدان معناست که علی رغم تحریک پذیر بودن پلاسمون تام با مدهای *TE* و *TM*، همچنان مد *TM* توان بیشتری در تحریک پلاسمونی دارد.

نتیجه گیری

در این مقاله با استفاده از روش ماتریس انتقال، مسئله تحریک پلاسمون تام در داخل یک موجبر برای اولین بار مورد مطالعه نظری و شبیه سازی قرار گرفت. محاسبات نشان داد که تحریک پلاسمون تام که در حقیقت به استفاده از آینه براگ برای تسهیل برانگیزش پلاسمون در سطح ماده پلاسمونی مرتبط است در داخل فضای موجبر نیز به راحتی هم برای مد *TE* و هم *TM* قابل اجرا می باشد. فرکانس تشدیدی در داخل موجبر نسبت به فضای آزاد دارای جابجایی آبی بود به این معنی که به سمت فرکانس های بالاتر کشیده می شد. این یافته جدید می تواند در کوک پذیری و تنظیم فرکانسی مربوط به تشدید پلاسمونی بسیار مفید باشد. از طرف دیگر، طراحی و پیاده سازی آزمایشگاهی پلاسمون تام در داخل موجبرها و مخصوصاً فیبرهای نوری می تواند کاربردهای حسگری بسیار زیادی داشته باشد. انجام این کار جزء کارهای آتی نویسندگان مقاله می باشد.

سپاسگزاری

از دانشگاه ملایر به خاطر حمایت از این کار پژوهشی تشکر می شود.

مرجع ها

[۱] Y. Zhao et al; "Current status of optical fiber biosensor based on surface plasmon resonance"; *Biosensors and Bioelectronics* **142** (2019) 1-12.

[۲] M. Kaliteevski et al; "Tamm plasmon-polaritons: Possible electromagnetic states at the interface of a metal and a dielectric Bragg mirror"; *Physical Review B* **76**, 165415 (2007) 1-5.

[۳] M. E. Sasin et al; "Tamm plasmon polaritons: Slow and spatially compact light", *Applied Physics Letters* **92**, 251112 (2008) 1-3.

[۴] P. S. Maji and R. Das; "Hybrid-Tamm-Plasmon-Polariton Based Self-Reference Temperature Sensor"; *Journal of Lightwave Technology* **35**, No. 14 (2017) 2833-2839.

[۵] J. Hu et al; "Strong longitudinal coupling of Tamm plasmon polaritons in graphene/DBR/Ag hybrid structure"; *Optics Express* **27**, No. 13 (2019) 18642-18652.

[٦] J. David Jackson, *Classical Electrodynamics*, John Wiley and Sons Inc., (1998) p. 359.

[۷] صالح، بهاء؛ *مبانی فوتونیک*، ترجمه: محمدصادق ابریشمیان، دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی، ۱۳۹۳.

[۸] D. Barchiesi and T. Grosges; "Fitting the optical constants of gold, silver, chromium, titanium, and aluminum in the visible bandwidth"; *Journal of Nanophotonics* **8** 083097 (2014) 1-16.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

ساخت و مشخصه یابی سلول خورشیدی پروسکایت ($CH_3NH_3PbI_3$) با HTM آلاییده به لیتیم(Li)

بهبود ، اسلام[۱]

[۱]دانشکده فیزیک دانشگاه بین المللی امام خمینی (ره) قزوین

چکیده

در این پژوهش باتوجه به اهمیت لایه انتقال دهنده حفره در سلول های خورشیدی پروسکایت به بررسی اثر حضور دوپند های نمک لیتیم در کنار اسپایرو روی رسانندگی این لایه پرداخته ایم. نشان داده ایم که در حضور دوپند جریان در سلول افزایش پیدا کرده است که می تواند ناشی از بالارفتن تحرک حامل ها در لایه انتقال دهنده حفره اسپایرو ناشی از حضور نمک لیتیم باشد.

واژه های کلیدی: *سلول خورشیدی پروسکایت، نمک لیتیم، لایه انتقال دهنده حفره، اسپایرو.*

Production and characterization of perovskite solar cell ($CH_3NH_3PbI_3$) Lithium (Li) doped with HTM

Behboud, eslam[۱]\

[۱] *Department of Physics, Imam Khomeini International University, Qazvin*

Abstract

In this study, due to the importance of the cavity transfer layer in perovskite solar cells, we have investigated the effect of the presence of lithium salts in addition to spiro on the conductivity of this layer. We have shown that in the presence of bipods, the flow in the cell is increased, which can be due to the increase in the mobility of the carriers in the transfer layer of the spiro cavity caused by the presence of lithium salt.

***Keywords**: perovskite solar cell, lithium salt, hole transfer layer, spiro.*

مقدمه

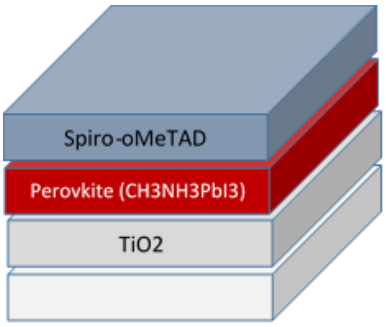
انرژی خورشیدی یکی از انرژی های ارزان و پاک می باشد که در طبیعت وجود دارد. در تکنولوژی های پیشرفته تلاش شده است تا انرژی های مورد نیازشان را از خورشید تامین کنند[۱]. یکی از این تلاشها سلول های خورشیدی است. سلول های خورشیدی لایه نازک یکی از پرطرفدارترین شاخه های مورد مطالعه در حال حاضر می باشد. در دهه اخیر از ماده ای به نام پروسکایت در سلول های خورشیدی لایه نازک استفاده می شود[٤]. این ماده باعث انقلاب بزرگی در بازده سلول های خورشیدی شده است به طوری که در این مدت زمان کوتاه پس از ساخت اولین سلول بازده آن به٪۲۰/۱ رسیده است. ماده پروسکایت از یک بخش هیبریدی آلی و یک بخش معدنی تشکیل شده است[۳]. این ماده چون از ترکیب مواد آلی و معدنی بدست می آید باعث کاهش هزینه سلول های خورشیدی می شود. خواص ماده ی پروسکایت مانند ساختار بلورین، مورفولوژی سطح، گاف انرژی، خلوص ماده و بلوری شدن پروسکایت به نوع سنتز بستگی دارد[۲].مواد پروسکایتی تقریبا همه ی مشخصات یک نیمه هادی خوب را دارا می باشد که می توان از این مشخصات به گافانرژی کم؛ ضریب خاموشی بالا؛ تحرک پذیری بالا و طول پخش زیاد اشاره کرد[٤]. سلول های خورشیدی پروسکایتی را به

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

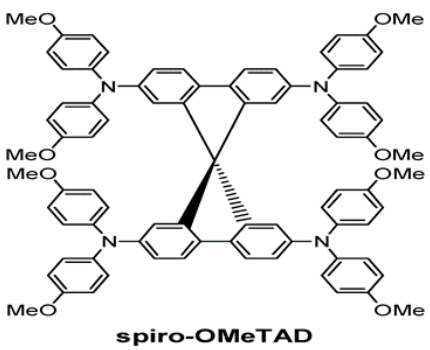
دو دسته تقسیم میکنند. ۱) پلنرها که از لایه های کاتد و آند وانتقال دهنده الکترون و حفره و پروسکایت تشکیل شده است .

۲) مزوپروس که از لایه های کاتد وآند و لایه های انتقال دهنده الکترون و حفره و لایه مخلوط پروسکایت مزوپروس تشکیل شده است. تاکنون از مواد مختلفی برای لایه انتقال دهنده حفره استفاده کرده اند یکی از مهمترین آنها ماده Spiro-oMeTADمی باشد، که خواص الکترونیکی مناسبی از خود نشان داده است. اما این ماده نشان داده است که بدون استفاده از دوپند هایی مانند نمک لیتیم با نمک کبالت خواص بالایی نداشته است.[۵].

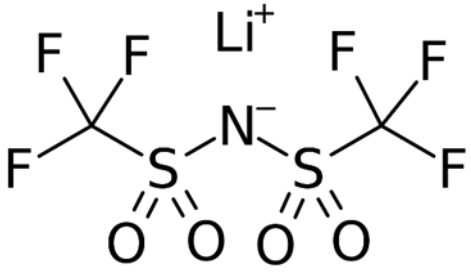
در این کار سلول های خورشیدی پروسکایتی با لایه انتقال دهنده حفره Spiro-oMeTAD ساخت شده اند و بازده آنها در مقایسه با حالت بدون دوپند های لایه انتقال دهنده حفره مورد بررسی قرار گرفت.



شکل (۱– ۱): ساختار سلول خورشیدی پروسکایت

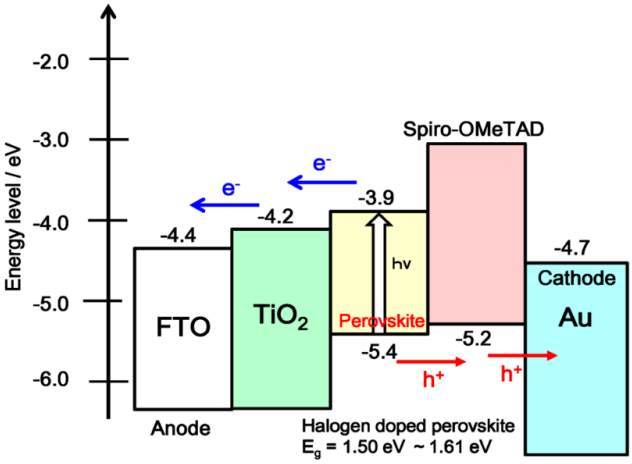


شکل (۱– ۲): ساختار ماده لایه انتقال دهنده حفره و دوپند استفاده شده ماده spiro-oMeTAD



شکل ۱–۱–۲ ساختار ماده لایه انتقال دهنده حفره و دوپند استفاده شده نمک لیتیم

بخش تجربی



شکل (۱– ۳):ساختار نواری سلول خورشیدی ساخته شده

مواد اولیه: متیل آمونیوم یدید(CH_3NH_3I)، سرب یدید(PbI_2)، تیتانیوم ایزوپروپکساید(TTIP)، اسپایرو (Spiro-oMeTAD)، ترت بوتیل بی پیریدین (TBP)، نمک لیتیم (LITFSI)، حلال های دی متیل فرمامید و دی متیل سولفوکسید، اتانول، استونیتریل، کلروبنزن.

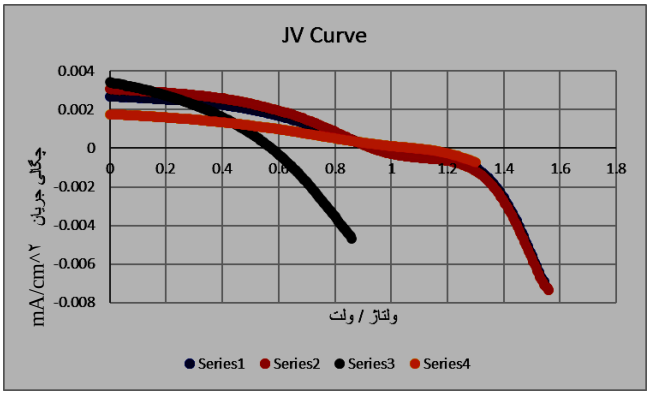
روش ساخت: ابتدا زیر لایه های FTO با استفاده از پودر روی و اسید دو مولار اچ شده و سپس در ۳ مرحله با استفاده از محلول آب و صابون، استون و اتانول در دستگاه التراسونیک شستشو شده اند. زیر لایه های شسته شده بعد از خشک شدن برای لایه نشانی لایه بلاک تیتانیا مورد استفاده قرار می گیرند. محلول تیتانیا برای لایه نشانی لایه بلاک بصورت ترکیبی از تیتانیوم ایزوپروپکساید و اتانول (۱.۱٤ و ۱۰.۱۲) و اسید هیدروکلریدریک و اتانول (۰.۱٤ و ۱۰.۱۲) می باشد که با استفاده از دستگاه لایه نشانی چرخشی با

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

سرعت ۲۰۰۰ دور بر دقیقه و ۳۰ ثانیه لایه نشانی شد. و سپس در دمای ٤٥٠ درجه سانتیگراد به مدت نیم ساعت بازپخت انجام شد.
در مرحله بعد لایه پروس تیتانیا با استفاده ازخمیر نانوذرات تیتانیا ۲۰ نانو متری لایه نشانی شد.
محلول پروسکایت رابصورت ترکیبی از یدید سرب و متیل آمونیوم یدید در حلال dmf/dmso(٤/١) به مدت ۲ ساعت در دمای ۱۰۰درجه حل می کنیم. سپس محلول با استفاده از دستگاه لایه نشانی چرخشی با برنامه ۱۰۰۰ دور بر دقیقه به مدت ۱۰ ثانیه و ٦۰۰۰ دور بر دقیقه به مدت ۳۰ ثانیه لایه نشانی می شود ضد حلال کلروبنزن در ثانیه ۱۵ از مرحله دوم تزریق می شود. سپس لایه در دمای ۱۰۰ درجه به مدت ۱ ساعت بازپخت می شود.
محلول اسپایرو برای دوحالت بدون استفاده از دوپند و در حضور نمک لیتیم بصوریت زیر ساخته شده. در غیاب نمک های لیتیم فقط پودر اسپایرو در کلرو بنزن با مقدار ۷۰ میلی گرم در میلی لیتر حل می شود و برای حضور نمک های لیتیم به همین مقدار ۲۳ میکرولیتر محلول نمک لیتیم حل شده در استونیتریل با غلظت ۵۲۰ میلی گرم در میلی لیتر به همراه ۱۷ میلی لیتر ترت بوتیل پیرین اضافه می شود. سپس محلول نهایی روی لایه پروسکایت با دور ٤۰۰۰ و به مدت ۳۰ ثانیه اسپین کوت می شود.
در نهایت الکترود طلا با استفاده از روش تبخیر حرارتی لایه نشانی می شود.

مشخصه یابی:

نمودار جریان ولتاژ سلول ساخته شده برای دو حالت در حضور دوپند ها و عدم حضور دوپند ها بصورت زیر اندازه گیری شده است. همانطور که در نمودار مشاهده می کندی برای حالتی که دوپند های حضور ندارند جریان کمتر از حالتی است که دوپند ها حضور دارند که این نشان دهنده این است که نمک های دوپند باعث افزایش تحرک و چگالی حاملهای و در نتیجه افزایش رسانندگی شده است.

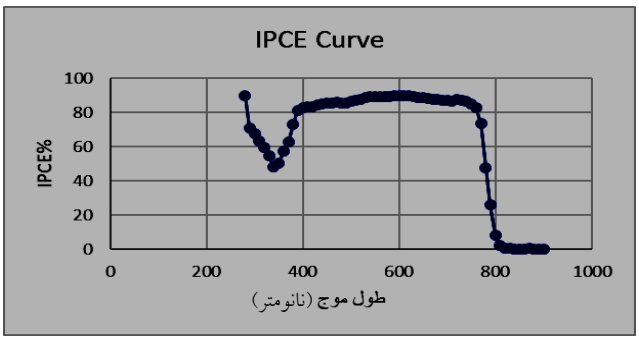


شکل (۱- ٤): نمودار جریان ولتاژ سلول ساخته شده

	V_{oc}	J_{sc}	FF%	PCE%
در حضور دوپندها	۰.۹۵	۱٦.۸۳	٤۰	٦.۳۸
در حضور دوپندها	۰.۹۳	۱۹.۱٦	٤۱	۷.۳۲
در حضور دوپندها	۰.۵۷	۲۰	۳٤	٤.۲۷
عدم حضور دوپند	۰.۵۵	۱۱.۰۲	۳۱	۳.٦۸

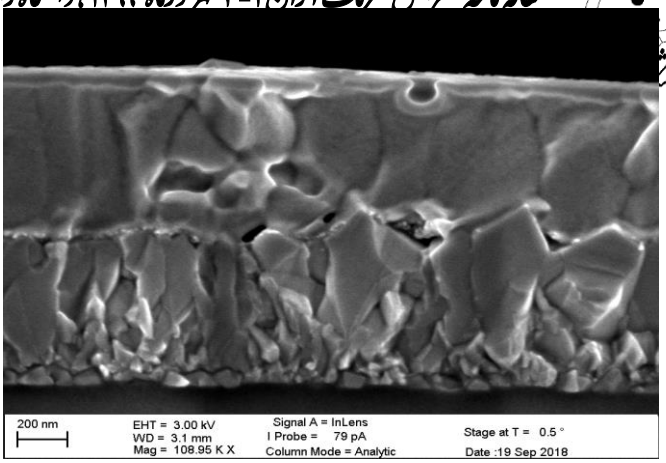
جدول (۱- ۱): محاسبه بازده سلول خورشیدی

جدول (۱-۱) نشان می دهد که در حضور دوپندها علاوه براینکه جریان افزایش پیدا کرده ولتاژ اتصال کوتاه نیز افزایش داشته است.
در زیر نمودار بازده کوانتومی خارجی از سلول با بهترین بازده آورده شده است. همانطور که مشاهده می کنید درصد تبدیل برای این سلول مناسب می باشد.



شکل (۱- ۵): نمودار IPCE برای سلول با بالاتری بازده

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



شکل (۱ – ۳): تصویر FESEM از یکی مقطع از سلول ساخته شده

مرجع‌ها

[1] Kesari, Y., & Athawale, A. (2015). Ultrasound assisted bulk synthesis of CH 3 NH 3 PbI 3 perovskite at room temperature. Materials Letters, 159, 87-89.
[2]Amalie . Dualeh, Nicolas Tétreault, ThomasMoehl, PengGao, MohammadKhaja, Nazeeruddin, Michael Grätze l,Adv.Funct .Mater.24(2014)3250–3258.
[3] Jiang, Z., Chen, X., Lin, X., Jia, X., Wang, J., Pan, L., ... & Sun, Z. (2016). Amazing stable open-circuit voltage in perovskite solar cells using AgAl alloy electrode. Solar Energy Materials and Solar Cells, ۱٤٦, ۳٥-٤۳.
[4] Sfyri, G., Kumar, C. V., Raptis, D., Dracopoulos, V., & Lianos, P. (2015). Study of perovskite solar cells synthesized under ambient conditions and of the performance of small cell modules. Solar Energy Materials and Solar Cells, 134, 60-63.
[5] Cui, J., Yuan, H., Li, J., Xu, X., Shen, Y., Lin, H., & Wang, M. (2016). Recent progress in efficient hybrid lead halide perovskite solar cells. Science and Technology of Advanced Materials.

[6] Cui, X. P., Jiang, K. J., Huang, J. H., Zhou, X. Q., Su, M. J., Li, S. G., ... & Song, Y. L. (2015). Electrodeposition of PbO and its in situ conversion to CH 3 NH 3 PbI_3 for mesoscopic perovskite solar cells. Chemical Communications, 51(8), 1457-1460.
[7] Liu, J., Wu, Y., Qin, C., Yang, X., Yasuda, T., Islam, A., ... & Han, L. (2014). A dopant-free holetransporting material for efficient and stable perovskite solar cells. Energy & Environmental Science, 7(9), 2963-2967.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بررسی اثر تغییرفرکانس تشدید پلاسما بر روی مشخصات تشعشعی آنتن پلاسمای دوقطبی تاشده

دهقانی، زهره* ؛ خلیل زاده ، الناز

[1] پژوهشکده پلاسما و گداخت هسته ای، پژوهشگاه علوم و فنون هسته ای انتهای خیابان کارگر شمالی ، تهران

چکیده

در این مقاله، آنتن پلاسمای دو قطبی و آنتن دوقطبی تاشده مورد تحلیل و بررسی قرار می گیرد. مشخصات آنتن پلاسمایی دو قطبی و آنتن پلاسمایی دوقطبی تا شده با استفاده از نرم افزار کامسول بدست آمده و سپس تاثیر فرکانس تشدید پلاسما بر روی مشخصات تشعشعی آنتن پلاسما با استفاده از نرم افزار CST بررسی می گردد. نتایج بدست آمده با استفاده از این نرم افزار برای آنتن پلاسمای دوقطبی با نتایج بدست آمده برای آنتن پلاسمای دوقطبی تاشده مقایسه شده و نتایج هر دو آنتن با یک آنتن فلزی با ابعاد مشابه مقایسه گردیده است.

واژه های کلیدی: *آنتن پلاسمایی، تخلیه الکتریکی، نرم افزار CST*

Investigation of the effect of plasma resonance frequency on characteristics of folded bipolar plasma antenna

Dehghany, Z*; KHalilzadeh, E

[1] *Plasma and Fusion Research School, NSTRI, AEOI,,*

Abstract

In this paper, the bipolar plasma antenna and the folded bipolar antenna has been investigated by using both CST software. Return loss and radiation patterns were also simulated by this software for a dipole and folded dipole plasma antennas. The results show that the folded dipole plasma antenna has better directivity and higher gain than simple dipole plasma antenna.

***Keywords**: Plasma Antenna, Electric discharge, CST STUDIO software*

PACS No. 52

مقدمه

آنتن‌های پلاسمایی اخیرا با توجه به به ویژگی‌های منحصر به فردشان برای جایگزینی آنتن‌های فلزی مورد توجه بسیار قرار گرفته اند. . گاز مورد استفاده در آن ها به صورت کم‌فشار امکان ایجاد محیط پلاسمایی را داراست. این پلاسما توسط روش های تخلیه مختلف مانند روش های تخلیه تابناک و تخلیه با استفاده از موج فرکانس رادیویی محیط پلاسما تولید می گردد. از مهمترین مزیت های این آنتن می توان به امکان تغییر ویژگی‌های تشعشعی آن از جمله فرکانس رزونانس و پهنای باند با تغییر پارامترهای فیزیکی آن اشاره کرد. آزمایش ها و تحلیل ها نشان می دهند که چنین آنتن هایی راندمان تا بیش از ۵۰٪ دارند و می توانند نویز کمی در باندهای فرکانسی HF و VHF تولید کنند. علاوه بر آن تغییر فرکانس تشدید پلاسما روشی کارآمد برای کنترل دینامیکی فرکانس کاری این آنتن ها به شمار می آید. همچنین تنظیم صحیح فرکانس برخورد در پلاسماست که خود به نوع گاز، فشار و دمای الکترونی بستگی دارد. با تنظیم پارامترهای پلاسما برای یک فرکانس و راندمان مطلوب می‌توان در لحظات خاموشی آنتن یا همان لحظاتی که داده‌ای ارسال نمی‌شود آنتن را از دید رادارهای دشمن مخفی نگاه داشت [۱-٤].

در این مقاله تاثیر پارامترهای پلاسما بر روی مشخصات تشعشعی آنتن پلاسما با استفاده از نرم افزار CST بررسی می گردد و مقادیر

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بدست آمده برای این دو آنتن با یک آنتن فلزی با ابعاد مشابه مقایسه گردیده است.

تئوری آنتن پلاسما:

در اثر برخورد موج الکترومغناطیسی با ذرات باردار پلاسما، این ذرات تحت تاثیر نیروی لورنتس قرار می‌گیرند، اگر میان الکترون‌ها و سایر ذرات پلاسما اعم از خنثی و یون هیچ برخوردی وجود نداشته باشد، قابلیت هدایت الکتریکی محیط برابرست با:

$$\sigma = -\frac{j}{\omega}\frac{Ne^2}{m_e} \qquad (۱)$$

که در آن e و me به ترتیب بار الکترون و جرم الکترون می باشند. N همان چگالی الکترون‌ها در واحد حجم است که نقش کلیدی در تعیین فرکانس تشدید پلاسما دارد.این رابطه نشان می‌دهد که در حالت بدون برخورد هدایت الکتریکی پلاسما با فرکانس کار میدان الکتریکی رابطه معکوس دارد. چنانچه بین الکترون‌ها و سایر ذرات پلاسما برخوردی وجود نداشته باشد، هیچ تلفات انرژی در محیط وجود ندارد. اما در عمل برخوردها باعث می‌شوند که در عبارت هدایت، یک مقدار حقیقی نیز وارد شود که در این حالت محیط نیز انرژی جذب می‌کند.

با استفاده از قابلیت هدایت الکتریکی پلاسما، قابلیت گذردهی الکتریکی آن را می‌توان محاسبه کرد و مقدار آن برابرست با:

$$\varepsilon_r = 1 - \frac{\omega_p^{\,2}}{\omega(\omega - j\nu)} \qquad (۲)$$

$$k_p = \omega\sqrt{\left(\mu_0\varepsilon_0\left(1 - \frac{\omega_p^{\,2}}{\omega(\omega - j\nu)}\right)\right)} \qquad (۳)$$

همانطور که مشاهده می کنید، ثابت انتشار بستگی به رابطه بین فرکانس تشدید پلاسما و فرکانس موج دارد. بنابراین، برای انتشار موج الکترومغناطیسی در محیط پلاسما در صورتی که $\omega > \omega_p$ باشد، ثابت انتشار حقیقی است و موج در پلاسما منتشر می‌شود.در چنین حالتی، محیط پلاسما خاصیت دی‌الکتریکی دارد که به صورت الکتریکی قابل کنترل است. حال اگر $\omega < \omega_p$ باشد، ثابت انتشار موهومی است و در نتیجه موج درون محیط پلاسما ناپایدار است. موج در چنین حالتی بسته به فرکانس برخورد الکترون می‌تواند جذب یا منعکس گردد.

در رابطه های بدست آمده در بالا دیده شد که هدایت الکتریکی در محیط پلاسما عمدتا به فرکانس برخورد الکترون بستگی دارد. چنانچه فرکانس برخورد بالا باشد، مقدار حقیقی قابلیت هدایت کاهش و بخش موهومی ثابت انتشار افزایش می‌یابد، در نتیجه پلاسما با فرکانس برخورد بالا به عنوان یک محیط پرتلفات رفتار می‌کند[۵-۷].

شبیه سازی و نتایج

۱- روش کار

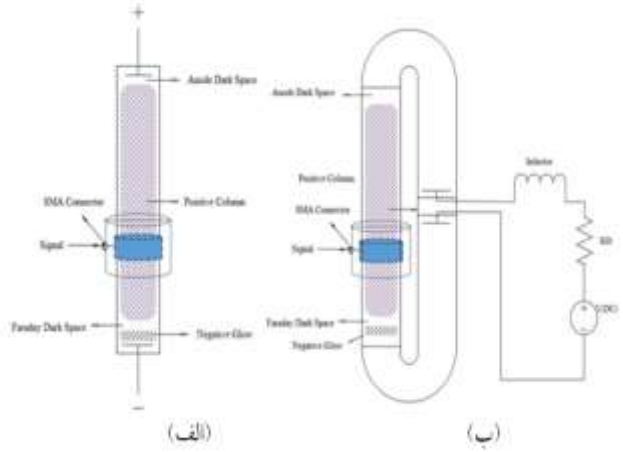
در این کار، نتایج حاصل از شبیه‌سازی‌های آنتن پلاسما با دو نرم‌افزار کامسول (COMSOL Multiphysics) و CST با استفاده از مدل درود-لورنتس آورده شده است. در شبیه سازی آنتن ها، ابتدا تاثیر پارامترهای پلاسما بر روی مشخصات تشعشعی دو آنتن دوقطبی و دوقطبی تاشده پلاسمایی بررسی می گردد و سپس به مقایسه این دو آنتن با هم و با یک آنتن فلزی با ابعاد مشابه پرداخته می‌شود. با استفاده از نرم‌افزار کامسول پارامترهای مهمی نظیر چگالی الکترون‌ها و فرکانس برخورد آن‌ها بدست آورده شده است و با کمک نرم افزار CST مشخصات تشعشعی آنتن ها محاسبه گردید.

برای شبیه سازی تخلیه DC یک تیوپ پلاسمایی به طول ۸۰ سانتی متر و شعاع ۱ سانتی متر با فشار گاز آرگون ۲ تور تحت ولتاژ مستقیم ۱۰۰۰ ولت با استفاده از نرم افزار کامسول شبیه سازی شد و مقادیر بدست آمده از این نرم افزار در ادامه کار مورد استفاده قرار گرفت.

پس از روشن کردن ستون پلاسما، با گذر زمان گاز آرگون رفته رفته به صورت یکنواخت‌تری در طول ستون پلاسما توزیع می‌گردد و عملا پس از طی زمان نسبتا کوتاهی می‌توان چگالی الکترون‌ها را با تقریب خوبی در طول ستون، یکسان در نظر گرفت. تنها در لحظات ابتدایی کل ولتاژ ۱۰۰۰ ولت دو سر ستون

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

پلاسما می‌افتد و باعث شروع تخلیه می‌گردد و نهایتا ولتاژ دوسر ستون بعد از ۱ ثانیه به ۱۱۰ ولت افت می‌کند و این مقدار برای زمان‌های بعدی نیز ثابت می‌ماند. از آنجایی که طبق روابط بالا فرکانس پلاسما با چگالی در ارتباط است، با استفاده از نتایج بدست آمده برای چگالی الکترون می توان، فرکانس پلاسما را بدست آورد. از آنجایی که آنتن پلاسمایی دوقطبی تا شده از لحاظ طول و قطر ستون تخلیه مشابه آنتن پلاسمای دوقطبی است، در شبیه سازی این آنتن از نتایج بدست آمده برای آنتن دوقطبی استفاده شده است. در شکل ۱ (الف و ب) دیاگرام کلی آنتن پلاسمای دو قطبی و آنتن پلاسمای دو قطبی تاشده آورده شده است.

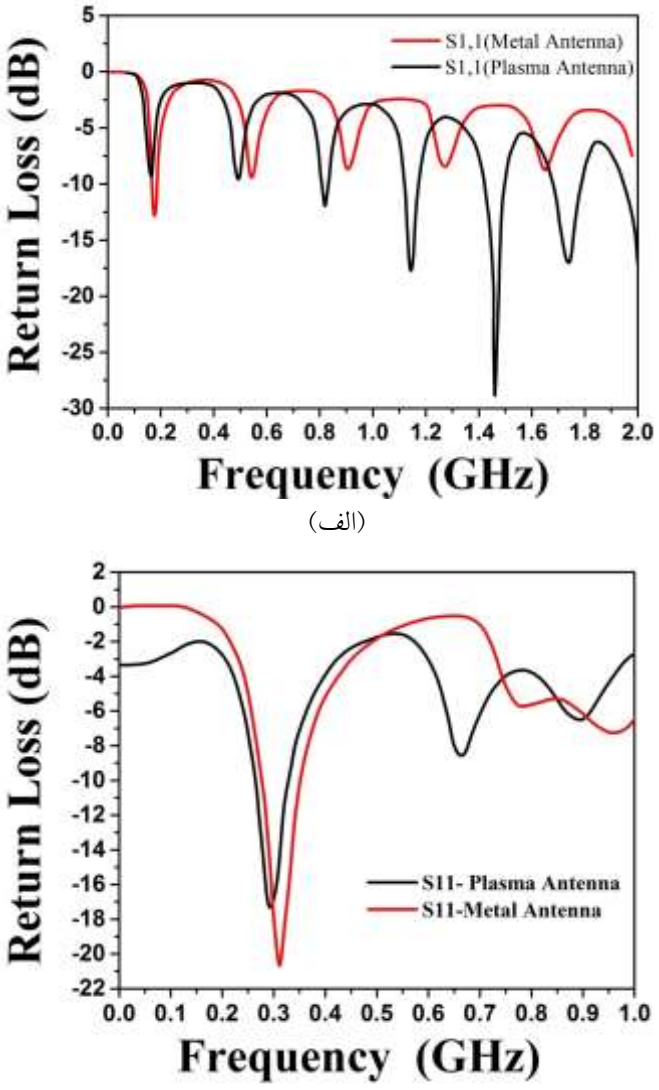


شکل ۱: شماتیک کلی (الف) –آنتن دوقطبی پلاسمایی و (ب)– آنتن دوقطبی تاشده پلاسمایی.

۲- توان اتلافی بازگشتی و الگوی تشعشعی آنتن پلاسمای دوقطبی و دوقطبی تاشده

با توجه به نتایج بدست آمده با نرم افزار کامسول، در شبیه سازی پارامترهای آنتن با استفاده از نرم افزار CST، فرکانس رزونانس آنتن پلاسما با فرکانس تشدید و فرکانس برخورد در نظر گرفته شده است.

در شکل ۲(الف و ب)، توان اتلافی برگشتی آنتن پلاسمای دوقطبی و آنتن پلاسمای دوقطبی تاشده و همتای فلزی آن ها آورده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌گردد هر دو آنتن پلاسما در فرکانس‌های پایین تقریبا مشابه همتای فلزی خود عمل می‌کنند درحالی‌که در فرکانس‌های عملکردبالاتر، به دلیل خواص پاشندگی محیط پلاسما، آنتن پلاسما می‌تواند در باندهای فرکانسی خاصی، بهتر از آنتن فلزی مشابه خود عمل کند.



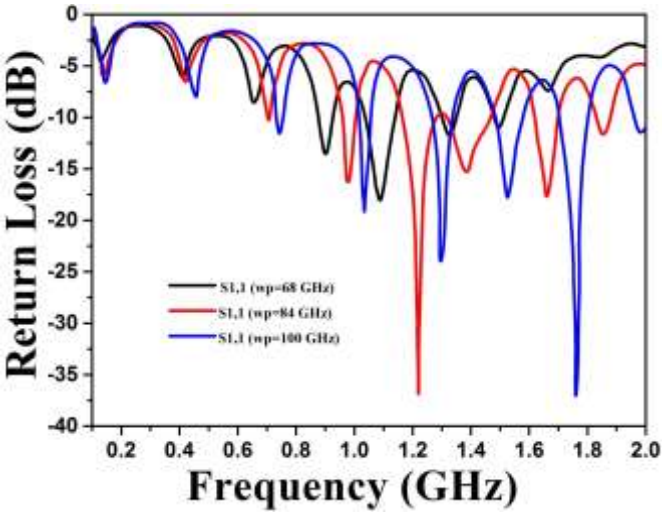
شکل۲: (الف) پارامتر **S11** مربوط به آنتن پلاسمای دوقطبی و همتای فلزی آن. (ب) پارامتر S11 مربوط به آنتن پلاسمای دوقطبی تاشده و همتای فلزی آن.

۳- تاثیر فرکانس تشدید پلاسما

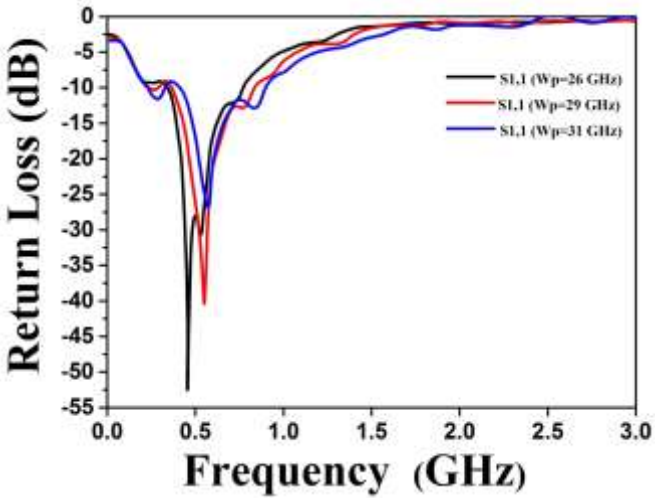
تغییر فرکانس تشدید پلاسما می‌تواند باعث تغییر هدایت الکتریکی و در نتیجه تغییر توزیع جریان روی سطح آنتن گردد، توزیع متفاوت جریان نیز باعث متفاوت بودن توان تابشی از آنتن و در نتیجه تغییر امپدانس ورودی آنتن می گردد. در نتیجه می‌توان انتظار داشت که فرکانس تطبیق (رزونانس) آنتن پلاسما را بتوان با تغییر

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

این پارامتر جابه‌جا کرد. در شکل ۳ نتایج حاصل از تاثیر روی توان اتلافی بازگشتی برای آنتنی به طول ۸۰ سانتی‌متر و قطر ستون پلاسمای ۱۰ میلی‌متر و در شکل ٤ نتایج حاصل از تاثیر روی توان اتلافی بازگشتی برای آنتن دوقطبی تاشده پلاسما طول هر بازوی٤٠ سانتی‌متر (طول کلی ۸۰ سانتی‌متر) و قطر ستون پلاسمای ۱۰ میلی‌متر رسم شده است. با تنظیم فشار گاز درون ستون پلاسما و افزایش دادن فرکانس پلاسما، رفته‌رفته عملکرد آنتن مشابه همتای فلزی‌اش می‌گردد. از نظر معادلات نوسانگر آزاد درود–لورنتس، در حقیقت فلزات حالت خاصی از پلاسما هستند که فرکانس تشدید بسیار بالا و فرکانس برخورد به نسبت کمی دارند.



شکل ۳: مقایسه توان اتلافی برگشتی به ازای فرکانس‌های تشدید مختلف پلاسما برای یک آنتن واحد.



شکل ٤: مقایسه توان اتلافی برگشتی به ازای فرکانس‌های تشدید مختلف پلاسما برای یک آنتن پلاسمای دوقطبی تاشده واحد.

نتیجه گیری :

در این مقاله به بررسی پارامترهای پلاسمای مورد استفاده در یک آنتن پلاسما پرداخته شده است. با استفاده از نرم‌افزار کامسول مقادیر فرکانس برخورد و چگالی الکترون مربوط به یک ستون پلاسما با طول ۸۰ سانتی‌متر و هم چنین، ولتاژ و جریان راه اندازی این ستون بدست آمده است. پارامترهای بدست آمده برای شبیه‌سازی آنتن پلاسمای دوقطبی و آنتن پلاسمای دوقطبی تاشده در نرم‌افزار CST مورد استفاده قرار گرفتند و مشاهده گردید که به ازای تغییرات فرکانس تشدید (که ناشی از شرایط مختلف تحریک نظیر فشار یا ولتاژ اعمالی متفاوت است) می‌توان فرکانس رزونانس آنتن پلاسما را در رنج مشخصی تغییر داد.

مراجع :

1- Alexeff, I., et al. (2006). IEEE Transactions on Plasma Science **34**(2): 166.
2- Alexeff, I., et al. (1998). IEEE Conference Record-Abstracts. 1998 IEEE International on, IEEE.
3- Baille, P., et al. (1981). Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics **14**(9): 1485.
4- Bonde, S., et al. (2014), Fourth International Conference on, IEEE.
5- Borg, G. G., et al. (1999). Applied physics letters **74**(22): 3272-3274.
6- Cerri, G., et al. (2008). Instrumentation and Measurement, IEEE Transactions on **57**(2): 242-247.
7- Chung, M., et al. (2008)., 2008. ICMMT 2008. International Conference on, IEEE.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

رفتار تومورهای سرطانی در آنتروپی‌های سالیس و رنیی

رستگار سدهی ، حمیدرضا[1]

[1] گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه جهرم، جهرم

چکیده

در این پژوهش سعی می کنیم که رشد تومورهای سرطانی را با استفاده از مکانیک آماری قبل و بعد از تزریق دارو بررسی کنیم. استفاده از مکانیک آماری به عنوان یک ابزار برای بررسی این پدیده می تواند بسیار کارآمد باشد. در ابتدا روابط مربوط به رشد تومورها برای دو آنتروپی نافزونور سالیس و رنیی را به دست می آوریم و سپس به منظور تاثیر دارو، یک جمله کشنده ی- سلول را به روابط قبل اضافه می کنیم. آنگاه به کمک معادلات بدست آمده، نمودار مربوط به تعداد سلولهای توموری باقیمانده را بر حسب زمان برای ثابتهای مختلف رسم کرده و با یکدیگر مقایسه می نماییم. نتایج نشان می دهند که هر دو آنتروپی می توانند به طور نظری رشد و افت تومورها را قبل و بعد از تزریق دارو به طور کیفی توصیف کنند. همچنین، از نتایج اینگونه بدست می‌آید که پارامتر نافرونور، نوع آنتروپی و تابع کشنده- ی- سلول فاکتورهای مهم در مدلسازی رشد توموری و رفتار آن هستند.

Study of cancer tumor using Tsallis and Renyi entropies

Rastegar Sedehi, Hamidreza[1]

[1] *Department of Physics, College of Sciences, Jahrom University, Jahrom*

Abstract

In this work, we have tried to study cancer tumors growth using the statistical mechanics before and after drug dose. Application of the statistical mechanics is powerful tool to study the cancer tumors. First, we have obtained an evolution equation for tumor growth using both Tsallis and Renyi non-extensive entropies. Then, we have added a cell-kill term to the evolution this equation to represent the effect of treatment. Using the obtained equations, we have plotted the resting tumor cells as a function of time for different parameters. The results show that both Tsallis and Renyi entropies fairly predict growth and falling of cancer tumors. Also, it is found that the nonextensive parameter q, type of entropy, and cell-kill function are important factors for modeling the cancer growth and its treatment.

مقدمه

تاکنون از مکانیک آماری در بررسی و مطالعه سیستم هایی نظیر انبوهی از پرندگان در حال حرکت، تعداد حروف در کلمات، روابط پیچیده شبکه های اینترنتی، شبکه های عصبی، بررسی ژن ها و تومورها و غیره استفاده شده است [۳-۱]. در بسیاری از مطالعات انجام شده، بررسی های مکانیک آماری نافزونور در سیستم های گوناگون با مفهوم آنتروپی آن سیستم آغاز می شود. آنتروپی یک سیستم فیزیکی با اندازه گیری اطلاعات از دست رفته آن سیستم ارتباط پیدا می کند. به غیر از آنتروپی شانون، آنتروپی های تعمیم یافته دیگری همچون سالیس، رنیی و لندزبرگ- ودرال معرفی شده اند [۵و۴].

استفاده از مکانیک آماری نافزونور در سیستم های عصبی، فرآیند یادگیری، پیش بینی رشد تومورهای سرطانی به عنوان یکی از مسایل مهم در فیزیک به شمار می آید و توجه بسیاری از پژوهشگران را به خود جلب کرده است. سرطان یک پدیده پیچیده شامل تعداد زیادی سلول معیوب در یک بافت طبیعی است که این

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

سلول ها به طور فزاینده ای رشد می کنند. به همین منظور، معادلات و مدل هایی هم برای رشد تومورها پیشنهاد شده و مورد ارزیابی قرار گرفته است. در ابتدا این معادلات توسط آنتروپی بولتزمن- گیبس بررسی شد و سپس به کمک آنتروپی های تعمیم یافته نافزونور دیگر نیز انجام شده است[۲].

آنتروپی های نافزونور

می توان گفت که معروف ترین و پرکاربردترین آنتروپی در مکانیک آماری، آنتروپی شانون است که به صورت زیر می باشد:

$$S = -k \sum_{i=1}^{W} p_i \ln p_i \qquad (۱)$$

که در این رابطه p_i احتمال اشغال حالت i ام می باشد و k ثابت بولتزمن است. آنتروپی شانون را می توان به یک کمک پارامتر q به چندین آنتروپی تعمیم یافته تبدیل نمود.

آنتروپی سالیس به شکل زیر نوشته می شود [۴-۶]:

$$S_q^{(T)} = \frac{k}{q-1}\left(1 - \sum_{i=1}^{W} p_i^q\right) \qquad (۲)$$

و آنتروپی رنیی به صورت زیر است [۴-۶]:

$$S_q^{(R)} = \frac{k}{1-q} \ln \sum_{i=1}^{W} p_i^q \qquad q > 0 \qquad (۳)$$

نکته مهم در مورد این آنتروپی ها این است که وقتی پارامتر q به سمت عدد یک میل می کند، آنها به آنتروپی شانون میل می کنند.

معادلات رشد توموری

در مورد رشد تومورهای سرطانی، روابط متنوعی پیشنهاد شده است که باعث به وجود آمدن معادلاتی شده است. مطالعات گذشته نشان می دهند که رشد تومورها قبل از تزریق دارو به صورت خطی افزایش می یابد و پس از استفاده از داروها، این رشد متوقف و سپس شروع به کاهش یافتن می کند. یکی از معادلاتی که این رفتار را نمایش می دهد، معادله گومپرتز[۱] می باشد که برای آنتروپی بولتزمن- گیبس به صورت زیر بیان می شود[۷و۸]:

$$\frac{dN}{dt} = -\kappa N \ln\left(\frac{N}{N_\infty}\right) \qquad (۴)$$

که در این رابطه N تعداد سلولهای توموری باقیمانده در یک زمان خاص، N_∞ تعداد سلولهای توموری در حد $t \to 0$ می باشد و κ یک مقدار ثابت است.

برای هر آنتروپی نافزونور مشخص، باید از ابتدا رابطه ای شبیه رابطه (۴) به دست آید. به عنوان مثال، برای آنتروپی سالیس در مقاله [۹] رابطه مربوط به رشد تومور به صورت زیر به دست آمده است:

$$\frac{dN}{dt} = \frac{\kappa N_\infty}{q-1}\left[1 - \left(\frac{N}{N_\infty}\right)^q - \left(1 - \frac{N}{N_\infty}\right)^q\right] \qquad (۵)$$

در این مقاله، با استفاده از رابطه (۳) و مشابه با روشی که برای آنتروپی سالیس انجام شده است، معادله رشد تومور برای آنتروپی رنیی به صورت زیر به دست می آید:

$$\frac{dN}{dt} = \frac{\kappa N_\infty}{q-1} \ln\left[\left(\frac{N}{N_\infty}\right)^q + \left(1 - \frac{N}{N_\infty}\right)^q\right] \qquad (۶)$$

رشد تومورها قبل از تزریق دارو

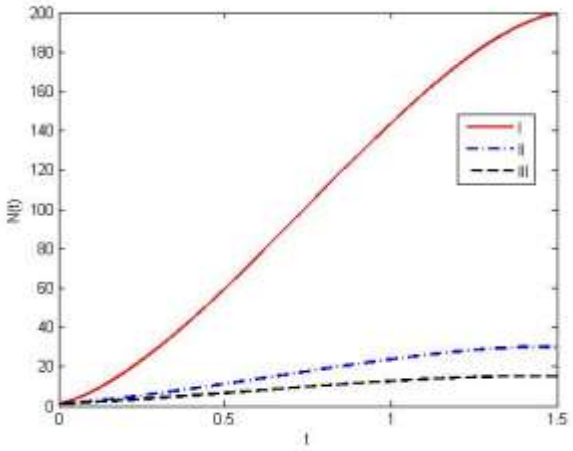
اکنون می توان برای مقایسه میان آنتروپی های مشخص شده، مقدار کمیت $N(t)$ را بر حسب زمان برای پارامترهای مختلف رسم می کنیم. با کمک نمودارها، می توان میزان رشد و همچنین میزان اثربخشی درمانهای انجام شده و کاهش تعداد سلولهای تومور را بررسی نمود. در ابتدا قبل از اینکه دارو به بیمار منتقل شود یعنی هنگامی که رشد سلولها به صورت افزایشی ادامه دارد رفتار معادلات (۵) و (۶) مربوط به آنتروپی های تعمیم یافته در شکلهای ۱ و ۲ رسم شده است.

بررسی شکلهای ۱ (الف) و (ب) نشان می دهد که پارامتر q در میزان تطابق دو آنتروپی نقشی اساسی دارد، به این ترتیب که وقتی این پارامتر کمتر از یک است، با کاهش N_∞ میزان تطبیق دو آنتروپی کاهش می یابد؛ در صورتیکه وقتی پارامتر q بزرگتر از یک است در تمام مقادیر N_∞ این تطابق وجود دارد. شکل ۲ نشان می دهد که زمانهای نزدیک صفر و نیز وقتیکه زمان به ۲ نزدیک

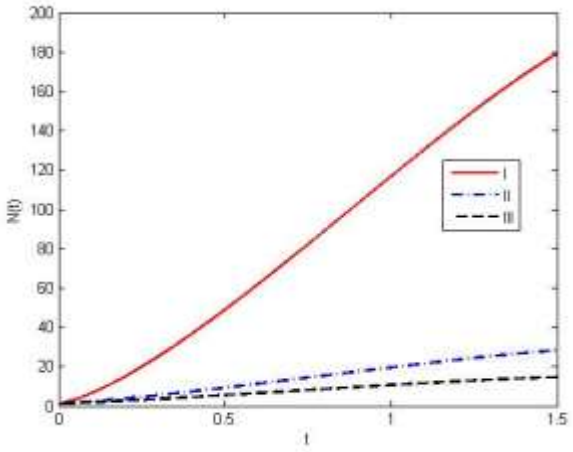
[۱] Gompertz

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

میشود تطابق میان دو آنتروپی بوجود می آید، در حالیکه در زمان های میانی، این دو آنتروپی از یکدیگر فاصله می گیرند.

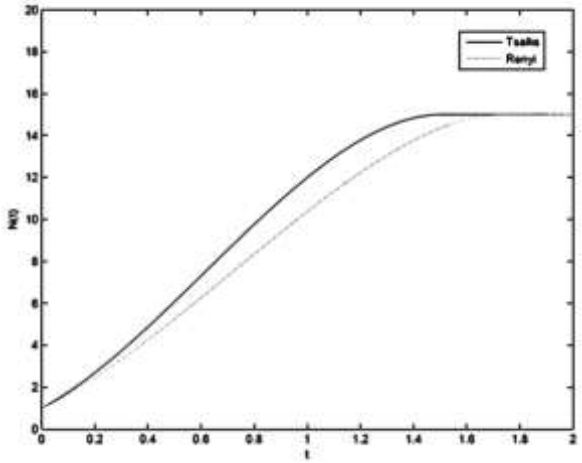


(الف)



(ب)

شکل ۱: رفتار جوابهای معادلات (۵) و (۶) یعنی $N^{(R)}(t), N^{(T)}(t)$ بر حسب زمان برای مقادیر ثابت $q = 0.4$ و $\kappa = 1$ ؛ $N_\infty = 200$ برای (I)؛ $N_\infty = 30$ برای (II)؛ $N_\infty = 15$ برای (III). نمودار(الف) و (ب) به ترتیب مربوط به آنتروپی سالیس و رنیی است.



شکل ۲: رفتار جوابهای معادلات (۵) و (۶) یعنی $N^{(R)}(t), N^{(T)}(t)$ بر حسب زمان برای مقادیر ثابت $q = 0.5$ و $\kappa = 1$ ؛ $N_\infty = 15$؛

بررسی تومور پس از تزریق دارو

پس از اینکه دارو به بدن بیمار تزریق شود، در روابط (۵) و (۶) جمله ای که مربوط به از بین رفتن سلولها یا به عبارتی دیگر کشنده ی- سلول[۲] است، اضافه می شود و در نتیجه روابط (۷) و (۸) برای حالت $0 < q < 1$ به ترتیب برای آنتروپی سالیس و رنیی حاصل می گردند:

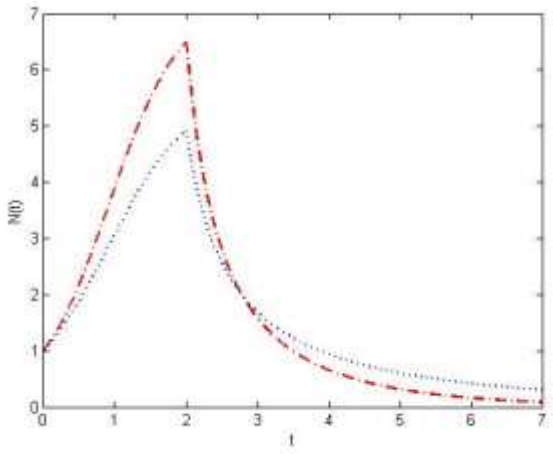
$$\frac{dN}{dt} = \frac{\kappa N_\infty}{q-1}\left[1 - \left(\frac{N}{N_\infty}\right)^q - \left(1 - \frac{N}{N_\infty}\right)^q\right] - C(t)N \qquad (۷)$$

$$\frac{dN}{dt} = \frac{\kappa N_\infty}{q-1}\ln\left[\left(\frac{N}{N_\infty}\right)^q + \left(1 - \frac{N}{N_\infty}\right)^q\right] - C(t)N \qquad (۸)$$

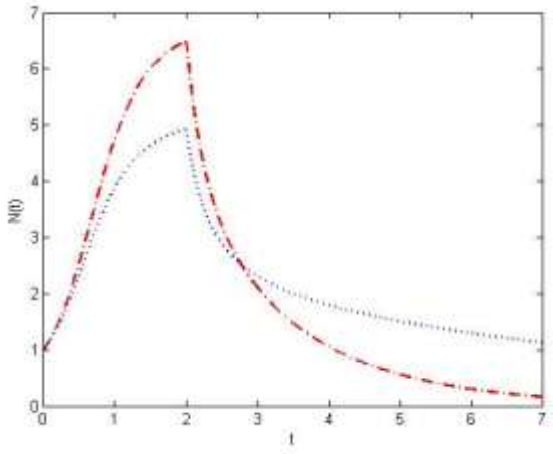
در این مقاله از یک جمله ثابت $C(t)$ به عنوان کشنده ی-سلول استفاده کرده ایم. پس از حل معادلات فوق، نمودار ۴ را رسم می کنیم. با توجه به شکل ۳ به راحتی می توان دید که وقتی از یک مقدار ثابت به عنوان کشنده ی- سلول استفاده می شود، تفاوت اندکی میان دو آنتروپی دیده می شود. با توجه به شکل می توان دید که سرعت کاهش تومورهای سرطانی در آنتروپی رنیی کمتر است و تعداد تومورها دیرتر به صفر می رسند. همچنین برای هر دو آنتروپی، پارامتر q در کاهش تعداد سلول های سرطانی نقش مهمی دارند.

[۲] Cell-kill

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



(الف)



(ب)

شکل ۳: رفتار جوابهای معادلات (۷) و (۸) بر حسب زمان برای یک جمله کشنده ی- سلول ثابت. منحنی خط قرمز و آبی مربوط به q=2 و q=2.5 است. نمودار(الف) و (ب) به ترتیب مربوط به آنتروپی سالیس و رنیی است.

نتیجه گیری

در این مقاله، رفتار تومورهای سرطانی برای دو آنتروپی نافزونور سالیس و رنیی بررسی شده است و نمودار تغییرات تعداد سلولهای باقیمانده بر حسب زمان در حالت قبل از تزریق دارو و نیز پس از تزریق دارو با ثابتهای مشخصی رسم گردیده است. رفتار آنتروپی های سالیس و رنیی در موارد گوناگونی بررسی شده و در برخی موارد این رفتار شباهت فراوانی به یکدیگر دارند. تغییر پارامترها می تواند در زمان به صفر میل کردن سلولهای توموری باقیمانده در یک زمان خاص نقش داشته باشد. لازم به ذکر است که هر دو آنتروپی رشد تومورها قبل از تزریق دارو و افت تومورها پس از تزریق دارو را به خوبی نشان می دهند. این نتایج بیان کننده این است که می توان با کمک مکانیک آماری برخی از پدیده های پزشکی را مورد مطالعه قرار داد.

وقتی که پارامتر q بین صفر و یک باشد می توان با تغییر مناسب جمله کشنده ی- سلول زمان صفر شدن سلولهای توموری باقیمانده را به میزان قابل توجهی کاهش داد.

مرجع‌ها

[۱] L. Norton, *Cancer Res*. **48** (1988) 7067.
[۲] S. Lawrence and C. L. Giles, *Nature* **400** (1999) 107.
[۳] M. Ruth and B. Hannon, *Modeling Dynamic systems,* Springer-Verlag, 1997.
[۴] C. Beck, *J. Contemporary Phys.* **50** (2009) 495.
[۵] C. Tsallis, *J. Stat. Phys.* **52** (1988) 479.
[۶] A. Renyi, *Probability Theory*, North Holland, Amsterdam, 1970.
[۷] D. Hart, E. Schochat and Z. Agur, *Brit. J. Cancer* **78** (1998) 382.
[۸] C. P. Calderon and T. A. Kwenbe, *Math. Biosci*. **103** (1991) 97.
[۹] J. A. Gonzalez and I. Rondon, *Physica A* **369** (2006) 645.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بررسی خواص ترمودینامیکی گرافن به کمک آنتروپی شانون

حمیدرضا رستگار سدهی

استادیار گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه جهرم
h.rastegar83@yahoo.com

چکیده

در این مقاله، از انرژیی که برای یک گرافن تک‌لایه بدست آمده است، در محاسبه ترمودینامیک این ماده استفاده می‌گردد. ما از آنتروپی کلاسیک شانون برای بررسی خواص ترمودینامیکی گرافن از جمله آنتروپی، انرژی درونی و گرمای ویژه استفاده می‌کنیم. نتایج نشان می‌دهند که آنتروپی و انرژی درونی با زیاد شدن دما، افزایش پیدا می‌کنند.

کلید واژه ها : گرافن، آنتروپی شانون، گرمای ویژه.

Investigation of the thermodynamics properties of Graphene by Shannon entropy

Rastegar Sedehi, Hamid-Reza[1];

[1] Department of Physics, University of Jahrom, Jahrom

Abstract

In this work, we use calculated expression for energy spectrum of ideal single layer graphene to investigate classical thermodynamics of this material. We have used Shannon entropy for investigating the entropy, internal energy and specific heat of this system. The obtained results show that the entropy and internal energy increase with enhancing the temperature.

مقدمه

گرافن[۱] ورقه‌ای از اتم‌های کربن است که واحدهای شش-گوشی دارد و میزان ضخامت آن به اندازه یک اتم است. از سال ۲۰۰٤ به صورت آزمایشگاهی ساخته شده و امروزه یکی از مهمترین مباحث در تحقیقات نظری و عملی فیزیک ماده چگال و دیگر زمینه‌های علوم مختلف است. این حوزه تحقیقاتی نوین در سالهای آینده می‌تواند نقش بسیار ویژه‌ای را در پیشرفت علم و تکنولوژی ایفا کند. پتانسیل‌های گوناگون این ماده در زمینه‌های نانوتکنولوژی، الکترونیک، پدیده‌های فیزیکی انرژی بالا در حالت جامد و نیز بسیاری از صنایع و علوم دیگر، آنرا به یکی از منحصر بفردترین مواد در دست بشر تبدیل نموده که تحقیقات بسیار متنوعی در تمام زمینه‌ها بر روی آن در حال انجام است. نتایج این تحقیقات می‌تواند به درک مفاهیم فیزیک مواد دو بعدی و ماده چگال کمک قابل توجهی کرده و زمینه را برای استفاده هر چه بیشتر از گرافن در صنعت فراهم می‌آورد [۳-۱].

اگرچه تحقیقات گسترده‌ای بر روی این ماده انجام شده بود اما بعد از سال ۲۰۱۰ که جایزه نوبل فیزیک به دو دانشمند روسی که بر روی گرافن کار می‌کردند اعطا گردید، اهمیت آن و تحقیق در

[۱] Graphene

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مورد ویژگی‌هایش، شتاب بسیار زیادی گرفته و خواص الکتریکی، مکانیکی، گرمایی و ترمودینامیکی آن در شکلها و ابعاد مختلف بررسی گردیده است. تحقیقات ویژه‌ای بر گرافن‌های تک لایه‌ای، دولایه‌ای و چند لایه‌ای آغاز گردیده و بسیاری از این تحقیقات به ثمر نشسته و از نتایج آنها در صنایع گوناگون استفاده شده است. در سالهای اخیر تحقیقات بسیار گسترده‌ای بر روی جنبه‌های نظری و تجربی ویژگی‌های گرافن انجام گرفته است. مرور همگی خواص گرافین به عنوان زمینه‌ای علمی که با چنین سرعت شگفت انگیزی در حال پیشرفت است و هر روزه مقالات متعددی در مورد آن به چاپ می‌رسد، بسیار دشوار است. اما این نکته قابل توجه است که محاسبات ریاضی در سالهای اخیر نقش مهمی در بررسی ویژگیهای الکتریکی، اپتیکی، گرمایی و ترمودینامیکی این ماده داشته است[٦-٤].

از سوی دیگر، مکانیک آماری به عنوان ابزاری بسیار قوی در بررسی سیستمهای فیزیکی در سالهای اخیر اهمیت ویژه‌ای پیدا کرده و هر روزه شاهد هستیم که اهمیت این ابزار کارآمد و ویژه افزایش چشم‌گیری پیدا می‌کند. در مکانیک آماری بررسی کمیتهایی همچون آنتروپی، انرژی درونی و ظرفیت گرمایی می‌تواند ویژگیهای ترمودینامیکی سیستم را مشخص نماید. آنتروپی یک سیستم فیزیکی با اندازه‌گیری اطلاعات از دست رفته آن سیستم ارتباط دارد. بسیاری از سیستمها به کمک آنتروپی کلاسیک بولتزمن-گیبس بررسی شده‌اند. این آنتروپی که به عبارتی آنتروپی شانون هم نامیده می‌شود، از سالها قبل مورد استفاده فراوانی قرار گرفته و توانسته است بسیاری از سیستمها را به خوبی مورد واکاوی قرار دهد. حتی بعد از اینکه در سالهای اخیر آنتروپی‌های نافزونور از جمله آنتروپی سالیس[۲]، آنتروپی رنای[۳]، آنتروپی آبه[۴]، آنتروپی لندزبرگ- ودرال[۵] و ... معرفی گردیده‌اند[۱۰-۷]، این آنتروپی همچنان در بررسی سیستمهای متنوعی به کار گرفته می-شود.

آنتروپی شانون

آنتروپی کلاسیک که برای بررسی ترمودینامیک سیستم‌ها به کار رفته، آنتروپی شانون نام دارد که به سادگی می‌توان آنرا به صورت زیر تعریف کرد:

$$S = -k_B \sum_{i=1}^{w} p_i \ln p_i \qquad (۱)$$

که در این رابطه k_B ثابت بولتزمن است و احتمال اشغال حالت iام که p_i نام دارد به صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$p_i = \frac{e^{-\beta\varepsilon_i}}{Z} \qquad (۲)$$

که در آن $\beta = 1/(k_B T)$ است و تابع پارش به صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$Z = \sum_{i=1}^{w} e^{-\beta\varepsilon_i} \qquad (۳)$$

انرژی گرافن تک‌لایه

کربن ششمین عنصر در جدول تناوبی عناصر و دارای دو ایزوتروپ پایدار است. هنگامی که این شش اتم تشکیل مولکول و جامد را می‌دهند، انرژی کل کاهش یافته و موجب همپوشانی توابع موج الکترونی در مکان‌های مختلف اربیتالهای مولکولی یا نوار انرژی جامدات می‌گردد.

با در نظر گرفتن تقریب نزدیک‌ترین همسایه و با توجه به پارامتر جهش t حالات پایه الکترون شامل دو حالت πمتعلق به اتم‌هایی از زیر شبکه‌های Aو Bمی‌باشد. در این تقریب، فرآیند جهش درون زیر شبکه‌ها روی نداده بلکه فقط میان آنها رخ می-دهد. به این ترتیب هامیلتونی تنگ-بست به وسیله ماتریس ۲×۲ زیر بیان می‌گردد:

$$\mathrm{H}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} 0 & t\, S(\mathbf{k}) \\ t\, S^{*}(\mathbf{k}) & 0 \end{pmatrix} \qquad (٤)$$

که در آن $\mathbf{k}$ بردار موج است و

$$S(\mathbf{k}) = \exp\left(\frac{ik_x a}{2}\right)\cos\left(\frac{k_y a\sqrt{3}}{2}\right) + \exp\left(-ik_x a\right). \qquad (٥)$$

به این ترتیب طیف انرژی به صورت زیر حاصل می‌گردد:

$$E(\mathbf{k}) = \pm t\left|S(\mathbf{k})\right| = \pm t\sqrt{3 + f(\mathbf{k})} \qquad (٦)$$

[۲] Tsallis
[۳] Renyi
[۴] Abe
[۵] Landsberg-Vedral

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

که در آن

$$f(\mathbf{k}) = 2\cos\left(\sqrt{3}k_y a\right) + 4\cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y a\right)\cos\left(\frac{3}{2}k_x a\right) \quad (۷)$$

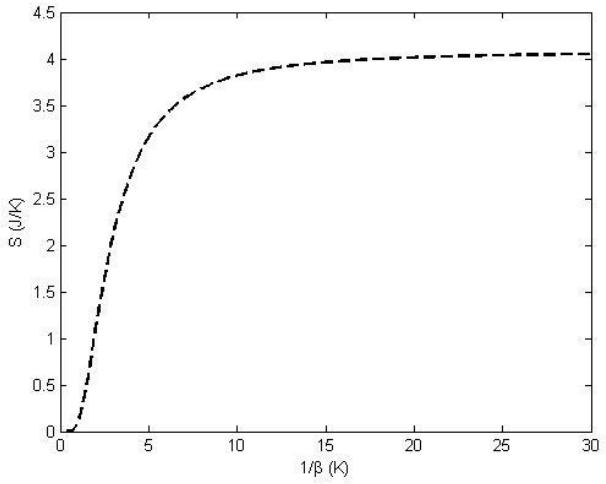
می‌باشد.

ترمودینامیک گرافن تک لایه در آنتروپی شانون

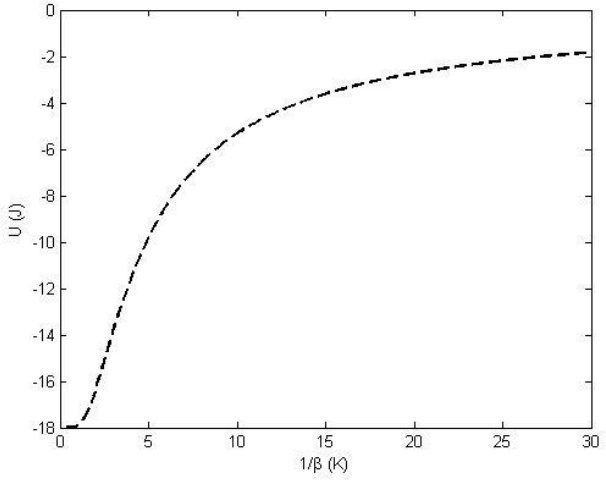
در این قسمت، با استفاده از آنتروپی شانون، ترمودینامیک گرافن تک لایه‌ای را مورد بررسی قرار می‌دهیم. شکل (۱) نمایش-دهنده‌ی تغییرات آنتروپی شانون بر حسب دما است. همانگونه که از شکل واضح است مقدار این آنتروپی با افزایش دما به سرعت افزایش پیدا می‌کند و سپس در دمای میانی رفتار یکنواختی را از خود بروز داده و به مقدار ثابتی می‌رسد. به عبارت دیگر کمیت آنتروپی سیستم که نشان‌دهنده میزان بی‌نظمی آن است، با بالا رفتن دما به سرعت زیاد می‌شود اما بعد از گذر از دمایی مشخص هر چه که میزان دما اضافه گردد، بی نظمی سیستم تغییر محسوسی نمی‌کند.

در شکل (۲) تغییرات انرژی درونی برای آنتروپی شانون بر حسب دما رسم شده است. آنچه در این شکل دیده می‌شود این است که مقدار انرژی درونی با بالا رفتن دما، زیاد می‌شود. به عبارتی دیگر، میزان انرژی درونی که در دمای صفر بدلیل جنب و جوش اندک در این دما تقریبا صفر است، با افزایش دما به نحو کاملا واضحی افزایش می‌یابد. دلیل این امر آن است که سیستم با گرفتن گرما به سرعت انرژی خود را افزایش می‌دهد و منحنی صعودی را در این شکل ایجاد می‌کند.

شکل (۳) رفتار گرمای ویژه در آنتروپی شانون بر حسب مقادیر مختلف دما را به نمایش گذاشته است. نشان می‌دهد. در این شکل واضح است که ابتدا به ازای افزایش دما، شاهد بالا رفتن مقدار گرمای ویژه هستیم و آنگاه پس از رسیدن به نقطه بیشینه، نمودارها شروع به کاهش یافتن کرده و وقتی دما به اندازه کافی بالا می‌رود، مقدار آنها به سمت صفر میل می‌کند. همچنین عرض این انحنا نمایش دهنده گاف نواری مربوط به گرافن است و مشخص است که بالا رفتن دما باعث می‌گردد که میزان گرمای ویژه که به میزان قابل توجهی رسیده، کاهش پیدا کند.

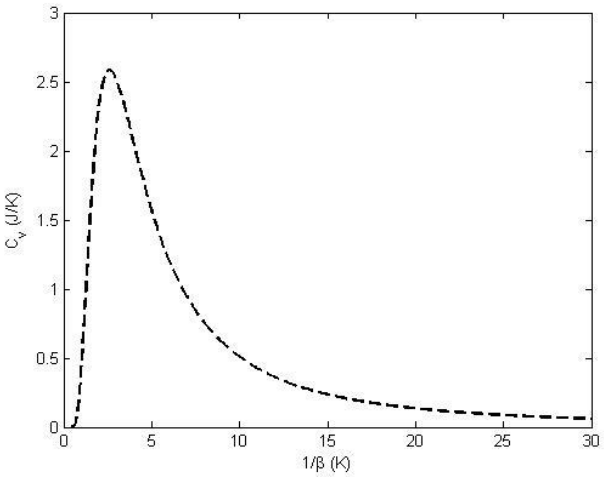


شکل۱ : تغییرات آنتروپی شانون بر حسب دما.



شکل۲ : رفتار انرژی درونی در آنتروپی شانون بر حسب دما.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



شکل۳ : رفتار گرمای ویژه در آنتروپی شانون بر حسب دما.

نتیجه گیری

در این مقاله، با استفاده از آنتروپی شانون خواص ترمودینامیکی گرافن تک‌لایه مورد بررسی قرار گرفت. این خواص که شامل آنتروپی، انرژی درونی و گرمای ویژه گرافن هستند، نمایان کننده ویژگیهای ترمودینامیکی آن هستند.

نمودارهای مربوط به این خواص بر حسب دما رسم شده‌اند و نشان می‌دهند که آنتروپی سیستم که نشان‌دهنده میزان بی‌نظمی سیستم است، با افزایش دما به سرعت افزایش می‌یابد و آنگاه به مقدار ثابتی می‌رسد. همچنین انرژی درونی سیستم با بالا رفتن دما به میزان قابل ملاحظه‌ای زیاد می‌شود. در انتها با رسم نمودار گرمای ویژه بر حسب دما مشخص است که این خصوصیت همانگونه که انتظار می‌رود، پس از رسیدن به مقدار بیشینه‌ای، کاهش پیدا میکند که این مقدار بیشینه با گاف نواری سیستم متناسب است.

مرجع‌ها

[۱] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, M. Katsnelson, I. V. Grigorieva, S. V. Dubonos, and A. A. Firsov, Nature 438, (2005) 197.

[۲] Q. Zhao, M. B. Nardelli, J. Bernholc, Phys. Rev. B 65 (2002) 144105.

[۳] A. K. Geim, K. S. Novoselov, Nat. Mater. 6 (2007) 183.

[٤] A.R. Wright, J. Liu, Z. Ma, Z. Zeng, W. Xu, C. Zhang, Microelectron. J. 40 (2008) 716.

[٥] R. Nasir, M.A. Khan, M. Tahir, K. Sabeeh, J. Phys.: Condens. Matter 22 (2010) 25503.

[٦] F. Molitor, J. Gttinger, C. Stampfer, S. Drscher, A. Jacobsen, T. Ihn, and K. Ensslin, J. Phys. Condens. Matter. 23 (2011) 243201.

[۷] C. Beck, Contemp. Phys. 50 (2009) 495.

[۸] C. Tsallis, J. Stat. Phys. 52 (1988) 479.

[۹] S. Abe, C. Beck, E.G.D. Cohen, Phys. Rev. E 76 (2007) 031102.

[۱۰] R. Khordad, H. R. Rastegar Sedehi, Eur. Phys. J. Plus, 134 (2019) 133.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بررسی انتشار امواج الکترومغناطیسی در مواد کایرال آلاییده شده با نانوذرات فلزی بر مبنای تغییرات گام ساختار

قرآنی ، نادیا[۱] ؛ عباس وند کشتیبان، مصطفی[۲]؛شیرین، سیمین[۱]؛ مدنی، امیر[۱]

گروه مهندسی اپتیک و لیزر ، دانشگاه بناب ،بناب ، آذربایجان شرقی

[۲] گروه فوتونیک،دانشکده فیزیک، دانشگاه تبریز، تبریز

چکیده

در این مقاله انتشار امواج الکترومغناطیسی در طول نانوکامپوزیت کایرال ساختاری با تقارن گروه نقطه ای 42m بر مبنای تغییرات گام در طول ساختار بررسی شده است. این محیط حاوی نانوذرات فلزی است که به صورت نامنظم درون ساختار قرار گرفته اند. نتایج نشان می دهد به ازای تغییرات گام در طول ساختار برای انتشار محوری امواج الکترومغناطیسی ویژگی های طیفی تغییر می کند و محل گاف باند جا به جا می شود و همچنین افزودن و تغییر نوع نانوذره فلزی تاثیر متفاوتی روی طیف های بازتابی و عبوری دارد.

واژه های کلیدی: نانوکامپوزیت کایرال ساختاری، گام، نانوذرات فلزی.

Investigation of electromagnetic wave propagation in chiral materials doped with metal nanoparticles based on structural pitch changes

Ghorani, Nadia[1]; Abbasvand kashtiban, Mostafa[2], Shirin , Simin[1] ; Madani , Amir[1]

[1] Department of Laser and Optical Engineering, University of Bonab, Bonab

[2] Department of Physics, Tabriz University, Tabriz

Abstract

In this paper, propagating of electromagnetic waves throughout a nanocomposite structurally chiral medium with 42m point group symmetry based on pitch changes during the structure have been investigated. This medium contains metal nanoparticles that are irregularly embedded in the structure. The results show for pitch changes during the structure for axially propagating electromagnetic waves, Spectral properties changes and band gapes moved. Also, changing the type of metal nanoparticles has a different effect on the reflection and transmission spectra.

***Keywords**: Nanocomposite structurally chiral medium, Pitch , Metal nanoparticles*

PACS No. 42

مقدمه

گاف باند نوری یک محدوده فرکانسی خاص است که انتشار امواج الکترومغناطیسی در آن ممنوع می باشد. همین پدیده باعث بروز تغییر در خواص مواد می شود. این پدیده در ساختارهایی که ضریب شکست آن ها به صورت متناوب تغییر می کند مانند بلور فوتونی قابل مشاهده است. یک نوع از محیط هایی با تناوب در یک بعد، بلور فوتونی یک بعدی است. انواع خاصی از این محیط ها می توان به بلورهای مایع کلستریک[2-1] ، محیط های کایرال ساختاری و الاستومرهای فوتونی کلستریک اشاره کرد که تناوب آن ها از کایرال ساختاریشان ناشی می شود[2] . این مواد ناهمگن پیوسته با تغییرات مارپیچی ناهمسانگرد در طول یک محور ثابت هستند که یک موج تخت دایروی با دستوارگی خاص و بازتابش قائم در یک محدوده طول موجی خاص شدیدا منعکس می شود در حالی که یک موج مشابه با دستوارگی مخالف، شدیدا عبور می کند[3] . این مشخصه فیلتر سازی قطبش که از این نوع ساختارها نشان داده می شود، تحت عنوان پدیده براگ دایروی شناخته می شود. در این ساختارها با افزودن نانوذرات به آنها باعث تشکیل گاف باندهای جدید می شود که طیف قطبشی آن ها را تحت تاثیر قرار می دهد[6-4] . از این پدیده می توان در طراحی و ساخت ادوات کنترل پذیر نوری استفاده کرد[5] . در این مقاله گاف باند

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد

http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

نوری مواد کایرال که با نانوذرات آلاییده شده ، برای نور با قطبش دایروی راستگرد و چپگرد بر اساس تغییرات گام ساختار مورد بررسی قرار گرفته شده است (شکل ۱). ساختار دارای تقارن گروه نقطه ای 42m است. با توجه به اینکه بخشی از معیار ما جهت انجام محاسبات گام ساختار است، وقتی که ساختار مارپیچ حول محور اصلی یک دور کامل(2π) انجام می دهد، برای ما یک گام تلقی می گردد که طول ساختار بر اساس آن تعریف شده و مبنای محاسبات ما می باشد. نماد گذاری نور عبوری هم قطبش راستگرد TRR و TLR برای نور عبوری با قطبش متقاطع راستگرد به کار برده شده که از یک نور فرودی قطبیده راستگرد، نور عبوری با قطبش چپگرد ایجاد شده است و سایر مولفه ها نیز به همین شکل هستند.

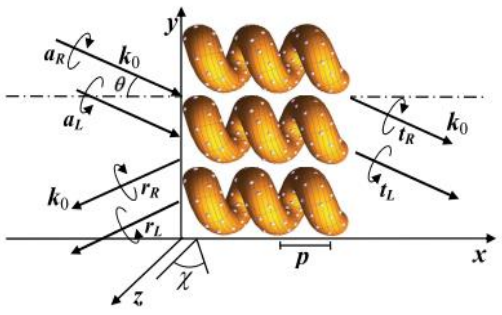
فرمول بندی و تئوری مسئله

ساختار کایرال شامل نانوذرات فلزی که به صورت رندوم درون آن قرار دارند، در شکل(۱) نشان داده شده است. که در آن p گام سیستم مارپیچی و χ زاویه خمش ساختار است. در اینجا جهت x جهت تناوب و ناهمگنی ساختار است. موج الکترومغناطیسی به صورت محوری وارد ساختار می شود. ساختار بین x=0 تا x=L قرار گرفته شده است.

شکل ماتریسی معادلات ماکسول در یک محیط غیر مغناطیسی با تعریف ٤ مولفه $\varphi(x)=(e_y,e_z,h_y,h_z)$ به شکل زیر است[7,8]:

$$\frac{d\varphi(x)}{dx}=ik_0A(x)\varphi_0(x), \qquad (۱)$$

در ساختار k_0 بردار موج در فضای آزاد و در آن ماتریس A عبارتست از:



شکل ۱: شماتیک ساختار مورد مطالعه

(۲)

$$\mathbf{A}(x)=\begin{pmatrix} -\frac{k_y\varepsilon_{xy}(x)}{k_0\varepsilon_{xx}(x)} & -\frac{k_y\varepsilon_{xz}(x)}{k_0\varepsilon_{xx}(x)} & 0 & -\frac{k_y^2}{k_0^2\varepsilon_{xx}(x)} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\varepsilon_{zy}(x) & \frac{k_y^2}{k_0^2}-\varepsilon_{zz}(x) & 0 & \frac{k_y\varepsilon_{zx}(x)}{k_0\varepsilon_{xx}(x)} \\ \varepsilon_{yy}(x) & \varepsilon_{yz}(x) & 0 & -\frac{k_y\varepsilon_{yx}(x)}{k_0\varepsilon_{xx}(x)} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ \frac{\varepsilon_{zx}(x)\varepsilon_{xy}(x)}{\varepsilon_{xx}(x)} & \frac{\varepsilon_{zx}(x)\varepsilon_{xz}(x)}{\varepsilon_{xx}(x)} & 0 & 0 \\ -\frac{\varepsilon_{yx}(x)\varepsilon_{xy}(x)}{\varepsilon_{xx}(x)} & -\frac{\varepsilon_{yx}(x)\varepsilon_{xz}(x)}{\varepsilon_{xx}(x)} & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$\varepsilon_{i.j}(x)=(i,j=x,y,z)$ عناصر تانسور دی الکتریک ساختار هستند ودو ضریب گذردهی ماده همسانگرد که با ماده دیگری آلاییده شده است با توجه به معادله ماکسول گارنت تعمیم یافته به شکل زیر است:

(۳)

$$\varepsilon_1^e(\omega)=\varepsilon_1\left[1+\frac{f}{\frac{\varepsilon_1}{(\varepsilon_m(\omega)-\varepsilon_1)+\left(1-f/3\right)}}\right]$$

(٤)

$$\varepsilon_3^e(\omega)=\varepsilon_1\left[1+\frac{f}{\frac{\varepsilon_3}{(\varepsilon_m(\omega)-\varepsilon_3)+\left(1-f/3\right)}}\right]$$

در این جا $\varepsilon_m(\omega)=\varepsilon_0-\frac{\omega_p^2}{\omega(\omega+i\gamma)}$ مربوط به نانو ذره فلزی است که از مدل درود تبعیت می کند. f فاکتور پراکندگی یا کسر پرشدگی نانوذرات در محیط میزبان می باشد. با استفاده از شرایط مرزی و بهره گیری از روش ماتریس انتقال ضرایب بازتاب و عبور به شکل زیر هستند:

(۵)

$$\begin{bmatrix} t_R \\ t_L \\ r_R \\ r_L \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} t_{RR} & t_{RL} \\ t_{LR} & t_{LL} \\ r_{RR} & r_{RL} \\ r_{LR} & r_{LL} \end{bmatrix}\begin{pmatrix} a_R \\ a_L \end{pmatrix}$$

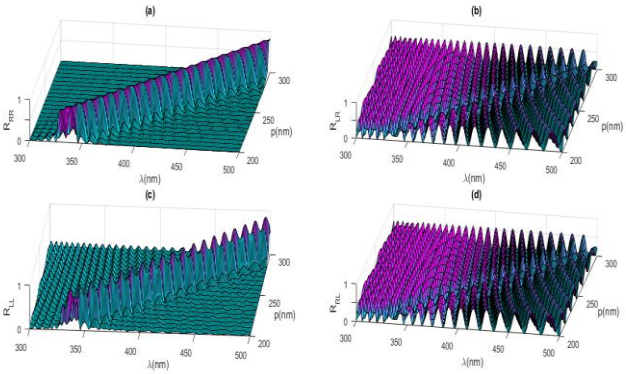
نتایج و بحث

در محاسبات عددی برای ساختار مورد مطالعه ماده کایرال میزبان با ضریب گذردهی دی الکتریک $\varepsilon_1=2.7$، $\varepsilon_3=3.2$ و $\frac{L}{p}=20$ در نظر گرفته شده است که در اینجا L طول ساختار است. در ابتدا طیف بازتاب و عبور به ازای تغییرات گام ساختار در غیاب نانوذرات فلزی یعنی $f=0$ محاسبه شده است.

همانطور که در شکل(۲) ، (a) و (c) مشاهده می کنیم در غیاب نانوذرات برای موج هم قطبش دایروی راستگرد و چپگرد با

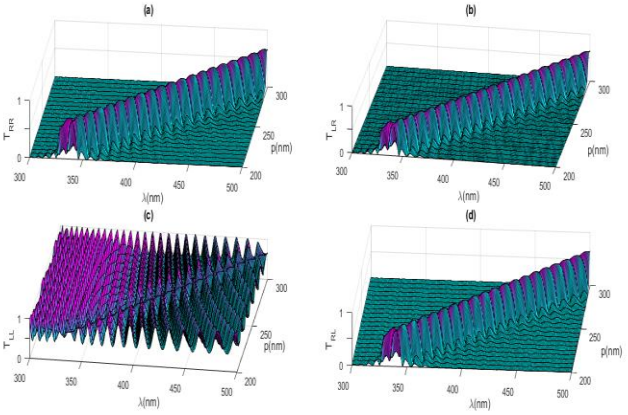
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

تغییرات گام ساختار که منجر به تغییر طول ساختار می گردد، حداکثر میزان بازتاب از ساختار کایرال مورد مطالعه، مشاهده می شود، که نمایانگر پدیده براگ دایروی است. برای سایر مولفه ها این امر ناچیز است. در نواحی مختلف طول موجی شاهد تشکیل گاف باند هستیم. بازه طول موجی که با تغییرات گام ساختار باعث ایجاد گاف باند می شود که در حدود $\Delta\lambda = 30nm$ است. تغییرات طولی ساختار با جابجایی گاف باند همراه است که با افزایش گام ساختار، گاف باند به سمت طول موج های بلندتر می رود.



شکل۲: طیف بازتاب به عنوان تابعی از طول موج و گام ساختار برای $f = 0$ و $\chi = \frac{\pi}{4}$ و $\theta = 0$ برای تمامی حالات ممکن قطبش دایروی

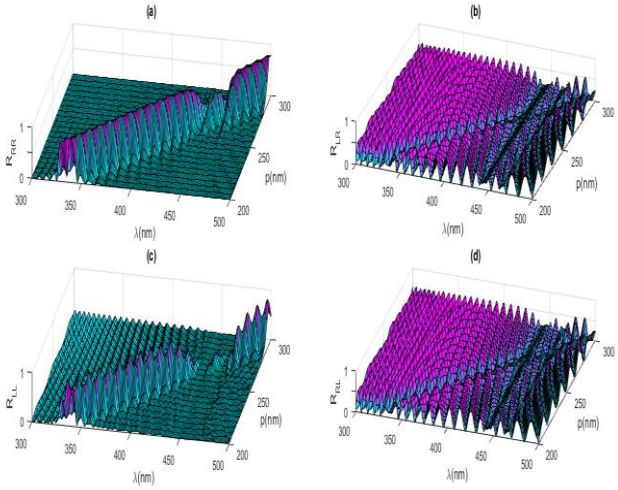
شکل(۳) ، ساختار در غیاب نانوذرات است، حداقل میزان عبور نور به ازای موج چپگرد هم قطبش در نمودار (c) قابل مشاهده می باشد که نمایانگر ناحیه گاف باند براگ است. تغییرات طول موج به ازای تغییرات گام ساختار نیز در حدود $\Delta\lambda = 18nm$ می باشد.



شکل۳: طیف عبور به عنوان تابعی از طول موج و گام ساختار برای $f = 0$ و $\chi = \frac{\pi}{4}$ و $\theta = 0$ برای تمامی حالات ممکن قطبش دایروی

درواقع با تغییرات طول ساختار که ناشی از تغییرات گام ساختار است، بازه طول موجی گاف باند تغییر می کند و لبه های باند با تغییر گام و با پهنای مشخصی جا بجا می شوند.

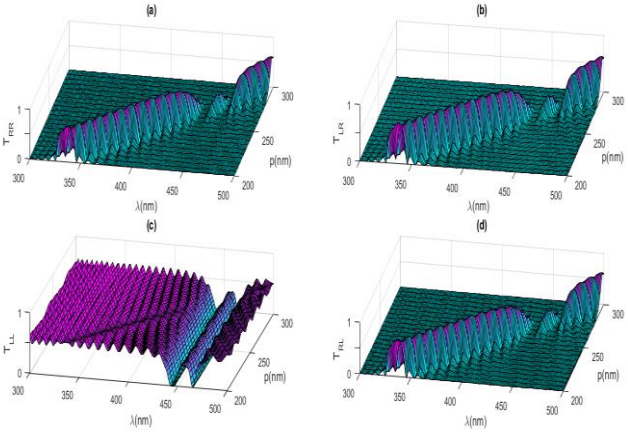
اکنون با افزودن نانوذرات فلزی و وابستگی آن ها به طول موج، شاهد تغییراتی در طیف های بازتابی و عبوری هستیم. مشاهده می شود که به ازای نانوذرات نقره با ثابت گذردهی $\varepsilon_0 = 5$ و فرکانس پلاسمایی $\omega_p = 1.367\times10^{16}\,HZ$ و ثابت میرایی $\gamma_0 = 3.03\times10^{13}\,HZ$ با کسر پرکنندگی $f = 0.0005$ گاف باندهای جدیدی در طیف های بازتابی و عبوری ایجاد شده است که با جذب تشدید پلاسمون های سطحی نانوذرات در ارتباط است.



شکل٤: طیف بازتاب به عنوان تابعی از طول موج و گام ساختار برای $f = 0.0005$ و $\chi = \frac{\pi}{4}$ و $\theta = 0$ برای تمامی حالات ممکن قطبش دایروی

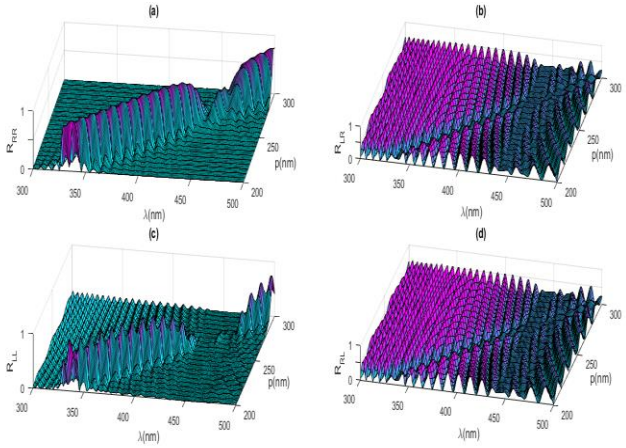
تجمع نانوذرات دو تشدید نوری جدید را به طیف های بازتابی و عبوری اضافه کرده و ویژگی های گاف باند را تغییر داده است. در شکل (٤) و (٥)، طیف بازتابی و عبوری طول موج های تشدیدی جدید در بازه های $\lambda = 444nm$ تا $\lambda = 465nm$ نیز قابل رویت است. گاف باندهای موجود در طیف های بازتابش و عبور ناشی از کایرالیتی ساختار در غیاب نانوذرات و دیگری به دلیل جذب وابسته به تشدید پلاسمون های سطحی نانوذرات است که با افزودن آن ها ایجاد می گردد. اندازه نانوذرات کمتر از ۱۰۰نانومتر است. برای نانوذرات با اندازه بزرگتر باید از تئوری مای(Mie) استفاده کرد.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



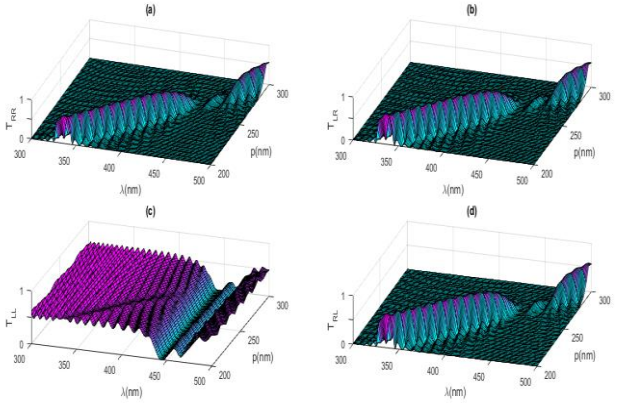
شکل۵: طیف عبور به عنوان تابعی از طول موج و گام ساختار برای $f = 0.0005$ و $\chi = \frac{\pi}{4}$ و $\theta = 0$ برای تمامی حالات ممکن قطبش دایروی

با تغییر نوع نانوذره از نقره به طلا یا مشخصات ثابت گذردهی $\varepsilon_0 = 5$ و فرکانس پلاسمایی $\omega_p = 1.367\times10^{16} HZ$ و ثابت میرایی $\gamma_0 = 7.14\times10^{13} HZ$ با کسر پرکنندگی $f = 0.0005$ میبینیم که بازه طول موجی تشدیدی کمی پهن تر شده است.



شکل ٦: طیف بازتاب به عنوان تابعی از طول موج و گام ساختار برای $f = 0.0005$ و $\chi = \frac{\pi}{4}$ و $\theta = 0$ برای تمامی حالات ممکن قطبش دایروی

در طیف بازتابی و عبوری در شکل های (٦) و (٧)، طول موج های تشدیدی جدید در بازه های $\lambda = 439nm$ تا $\lambda = 470nm$ قابل مشاهده است. ویژگی های گاف باند، تاثیر شدیدی به حضور نانوذرات در ساختار دارد. با توجه به تغییرات محیط مورد بررسی از جمله افزودن نانوذرات فلزی که باعث تشکیل گاف باندهایی در محدوده طول موج تشدید نانوذرات می شود، محل و پهنای این گاف باندها با توجه به نوع نانوذره تغییراتی را با خود به همراه دارد.



شکل۷: طیف عبور به عنوان تابعی از طول موج و گام ساختار برای $f = 0.0005$ و $\chi = \frac{\pi}{4}$ و $\theta = 0$ برای تمامی حالات ممکن قطبش دایروی

نتیجه گیری

در این مقاله طیف بازتاب و عبور به ازای انتشار محوری امواج الکترومغناطیسی در طول یک ساختار کایرال اپتیکی مورد بررسی قرار گرفت. مطالعات نشان داد با افزایش گام در طول ساختار، گاف باند نیز تغییر می کند و به سمت طول موج های بالاتر میرود. با تجمع نانوذرات فلزی در محیط کایرال چند گاف باند جدید در طیف بازتاب و عبور در نواحی مختلف طول موجی مشاهده شد که ناشی از ویژگی های تشدیدی نانوذرات است. دلیل انتخاب این پارامترها این است که امکان ساخت آن ها فراهم باشد و طول موج های تشدید به ازای کسر پرشدگی نانوذرات یعنی $f\rangle 0$ ، درون باند گاف ساختار کایرال بدون حضور نانوذرات قرار گیرد. با استفاده از این ویژگی ها میتوان وسیله اپتیکی طراحی کنیم که در ناحیه مرئی امواج الکترومغناطیسی کار کند.

مراجع

[1] A. Lakhtakia and R. Messier, Sculptured Thin Films:Nanoengineered Morphology and Optics (SPIE, 2005).

[2] J. L. Fergason, “Cholesteric structure-1 optical properties,” Mol. Cryst. *1*, 293–307 (1966).

[3] C. G. Avendaño, S. Ponti, J. A. Reyes, and C. Oldano, “Multiplet structure of the defect modes in 1D helical photonic crystals with twist defects,” J. Phys. A: Math. Gen. *38*, 8821–8840 (2005).

[4] T. Espinosa-Ortega and J. A. Reyes, “Mechanically controlled bandgap in cholesteric elastomers,” Opt. Commun. *281*, 5830–5837 (2008).

[5] J. Mendoza, J. A. Reyes, and C. G. Avendaño,“Optical band gap in a nanocomposite structurally chiral medium,” Phys. Rev. A 94, 053839 (2016).

[6] J. A. Reyes and A. Lakhtakia, “Electrically controlled optical bandgap in a structurally chiral material,” Opt. Commun. *259*, 164–173 (2006).

[7] J. D. Jackson, Classical Electromagnetics (Wiley, New York, 1999)

[8] C. G. Avendaño and D. Martínez, “Tunable omni-directional mirror based on one-dimensional photonic structure using twisted nematic liquid crystal: the anchoring effects,” Appl. Opt. *53*, 4683–4690(2014).

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

خواص الکترونیکی اکسید نقره، یک مطالعه‌ی تابعی چگالی

فخری میرزانق ، شیدا؛ علیپور کامران، پریسا ؛ شجاعی، سید حمید رضا

گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه صنعتی سهند، تبریز، ایران

چکیده

در این مقاله، محاسبات نظریه تابعی چگالی بر روی خواص الکترونی Ag_2O و Ag_2O_3 در ساختار بلوری مکعبی آن‌ها با استفاده از روش امواج تخت با شبیه پتانسیل بسیار نرم انجام شد. بنابر نتایج بدست آمده، یک همپوشانی بین باند رسانش و ظرفیت دیده می‌شود که ماهیت فلزی آن ترکیبات را درساختار بلوری مورد بررسی، تأیید می‌کند.

واژه های کلیدی: *نظریه تابعی چگالی، خواص الکترونی، ساختار بلوری مکعبی، همپوشانی.*

Electronic properties of silver oxide, a density functional study

Fakhri-Mirzanagh, Sheida; Alipour-Kamran, Parisa ; Shojaei, Seyed Hamid Reza

Department of Physics, Faculty of Science, Sahand University of Technology, Tabriz, Iran,

Abstract

In this paper, the density functional theory calculations on the electronic properties of Ag_2o and Ag_2O_3 in their cubic crystallographic form by using ultrasoft pseudopotential plane wave method are carried out. According to our results, an overlap between the conduction and valance bands is seen, which confirms the metallic character of those compounds in the studied form.

.***Keywords**: Density Functional Theory, Electronic properties, cubic crystallographic form, overlap*

مقدمه

اکسیدهای فلزی در ترکیبات شیمیایی نقش مهمی در حوزه‌ی علمی و مهندسی ایفا می‌کنند. اکسیدهای فلزی کاربردهای زیادی در ساختارهای الکترونیکی دارند که می‌توانند دی‌الکتریک و نیمه رسانا باشند. مواد اکسیدی در زمینه‌های تکنولوژی کاربردهای گسترده ای دارند و از آن‌ها در تولید مدارهای میکروالکترونیکی، حسگرها، سلول‌های سوختی، روکش‌های لایه خارجی برای جلوگیری از زنگ زدگی و به عنوان کاتالیزور استفاده می‌شود[۱-٤]. نقره با دو یون نقره (I) و نقره (III) شناخته شده است و باعث ایجاد ساختارهای مختلف می‌شوند. در سیستم اکسیژن - نقره، نقره(I) با Ag_2O و نقره سه گانه (III) با Ag_2O_3 شناخته شده هستند، همچنین اکسیدهایی با ظرفیت مخلوط نیز گزارش شده اند که به AgO و Ag_3O_4 منجر شده‌اند[۵و٦]. در کل، این ماده با ترکیبات مختلفی از جمله Ag_2O، AgO، Ag_3O_4، Ag_4O_3، Ag_2O_3 وAg_4O_4 وجود دارد. در بین این اکسیدها، Ag_2O از نظر ترمودینامیکی پایداراست. ترکیب Ag_2O دارای یک ساختار مکعبی ساده در دمای اتاق است[۷]. اکسید نقره کاربردهای فراوانی در تکنولوژی دارد. AgO و Ag_2O در فناوری ساخت باتری‌ها و خواص آنتی باکتریالی موثر هستند[۸و۹]. Ag_2O به تنهایی در ساخت حسگرهای مولکولی[۱۰]، کارت‌های حافظه نوری و غیره بسیار پرکاربرد

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

است[۱۱]. Ag_2O_3 نسبت به Ag_2O کمتر مورد توجه بوده است، و دلیل آن به احتمال زیاد پایداری پایین آن است[٦]. چگالی حالت‌های محاسبه شده برایAg_2O_3 ، گاف نواری را در حدود ۹٦/. الکترون ولت بدست آورده است[۱۲]. همچنین محاسبات انجام شده به روش نظریه تابعی چگالی روی ساختار Ag_2O گاف نواری در حدود ۰/۰٤ الکترون ولت را پیش بینی کرده است[۱۳]، هر چند که اندازه گیری های تجربی به روش طیف جذبی از لایه های نازک Ag_2O، شکاف باندی در حدود ۲/۲۵ الکترون ولت را نشان می‌دهد[۱٤]. اثبات شده که روش نظریه تابعی چگالی نسبت به سایر روش‌های محاسباتی، نتایج بهتری در بررسی خواص الکتریکی اکسید نقره دارد[۱۲]. نظریه تابعی چگالی (DFT) به عنوان گزینه ای برای محاسبه، درک و پیش بینی خواص احتمالی مواد از اصول اولیه استفاده می‌کند. رویکرد توسعه یافته توسط نظریه کوهن شم(Kohn-Sham) با یک چارچوب محاسباتی، خواص مربوط به حالت پایه سیستم‌ها را با روش‌های مقرون به صرفه محاسبه می‌کند. این روش هنوز هم به طور گسترده برای بررسی ویژگی‌های ساختار الکترونیکی در مواد جامد و سطوح با ضخامت میکرو به بالا مورد استفاده قرار می‌گیرد، که در اکثر موارد قادر به ارائه حداقل یک تصویر کیفی است[۱۵و۱٦].

در این پژوهش با استفاده از نظریه تابعی چگالی و نرم افزار شبیه سازی اسپرسو به بررسی خواص ساختاری، ساختار انرژی باند و چگالی حالت‌های اکسید نقره در دو ساختار Ag_2O و Ag_2O_3 پرداخته شده است. به دلیل کاربرد فراوان این ماده در صنعت و تاثیر ساختار باند در تغییر خواص ماده، ساختار باند مطالعه شده است.

روش محاسباتی

نظریه تابعی چگالی روشی شناخته شده برای بررسی سیستم‌های بس ذره‌ای است. در نظریه تابعی چگالی از تقریب‌های چگالی موضعی LDA و شیب تعمیم یافته GGA برای بدست آوردن پتانسیل همبستگی-تبادلی استفاده می‌شود. ساختار هندسی بهینه شده‌ی فاز مکعبی دو مولکول Ag_2O و Ag_2O_3 و خواص الکترونیکی آن‌ها با استفاده از نظریه‌ی تابعی چگالی و شبه پتانسیل نرم (pbe-n-kjpaw_psl.1.0.0) محاسبه شده‌اند. مقادیر K-point‌ها همگرا شده و مقدار بهینه شده‌ی انرژی قطع (cutoff) برای Ag_2O ٤۰۰ و برای Ag_2O_3 ۸۰۰ الکترون ولت بدست آمد. بعد از بهینه کردن موقعیت اتمی و ثابت‌های شبکه، ساختار باند در مسیر Γ-M-X-Γ-R-M-X-R رسم شده است و چگالی حالت-ها و چگالی حالت‌های جزیی محاسبه شده اند.

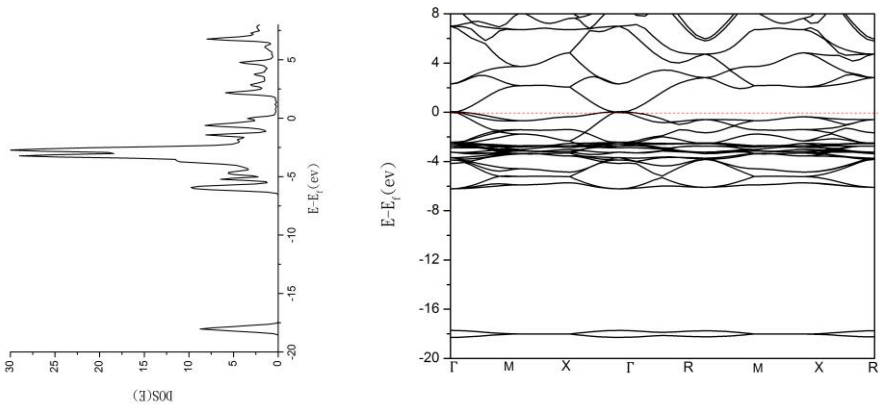
بحث و نتیجه گیری

خواص نواری به ساختار باند و گذار نواری بین دو باند مربوط می‌شود. بنابراین، توجه به تجزیه و تحلیل ساختار الکترونیکی مورد اهمیت است. در شکل ۱ ساختار نواری Ag_2O دیده می-شود. محاسبه نشان می دهد که گاف نواری صفر است و در حول تراز فرمی(خط چین قرمز) دیده می‌شود، در نتیجه باعث همپوشانی بین بالاترین باند ظرفیت و کمترین باند هدایت می‌شود، هر چند محاسبات انجام شده گاف نواری در حدود ۰/۰۸ الکترون ولت بدست آمده است[۱۷] همچنین با محاسبات تجربی مقدار ۱/۳۰ الکترون ولت حاصل شده است[۱۸].

شکل ۱ قسمت ب چگالی حالت‌های کل را برای Ag_2O نشان می‌دهد. دقیقا در مکان گاف نواری چگالی حالت‌ها باید صفر باشد که به نشانه‌ی عدم حضور الکترون در آن منطقه است. گاف نواری مستقیم برای Ag_2O بسیار کم بوده و نواحی به خوبی دیده نمی-شوند. در Ag_2O_3 گاف نواری به روش نظریه تابعی چگالی و نرم افزار اسپرسو در حدود ۰ الکترون ولت بدست آمده است.

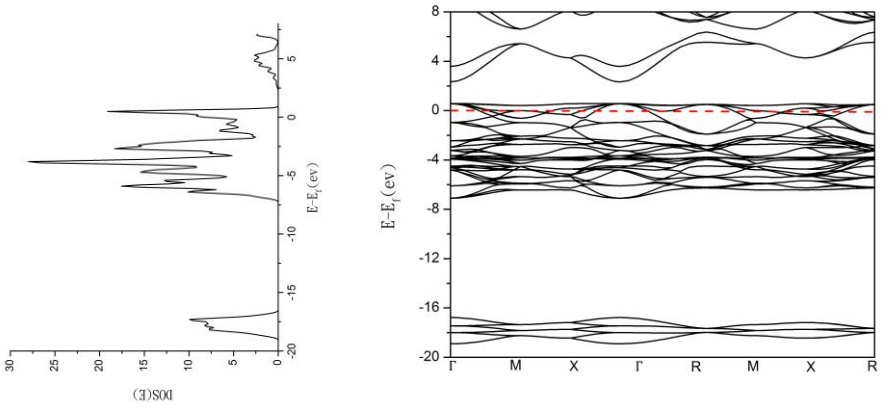
ساختار نواری مربوط به این ماده در شکل ۲ الف به نمایش گذاشته شده است. همانطور که در شکل ۲ ب دیده می‌شود در تراز فرمی($E-E_{f=0}$) چگالی الکترون وجود دارند و همین امر گاف را صفر نشان می‌دهد. گاف نواری برای Ag_2O_3 با روش-های محاسباتی تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) و HSE06 به ترتیب در حدود ۰/۵ و ۱/۹ الکترون ولت محاسبه شده است[۱۲].

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



الف ب

شکل۱: نمودار ساختار نواری و چگالی حالت‌های Ag_2O



الف ب

شکل۲: نمودار ساختار نواری و چگالی حالت‌های Ag_2O_3

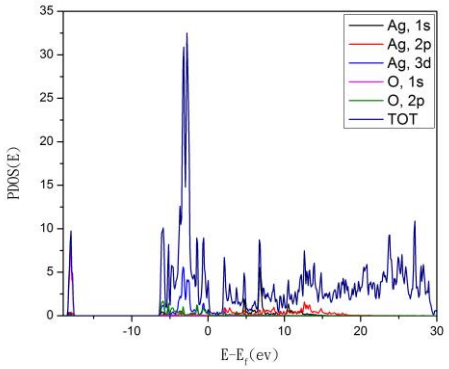
چگالی حالت‌های جزیی مربوط به اکسید نقره در شکل‌های ۳ و ٤ نشان داده شده‌اند. در شکل ۳ چگالی حالت‌های جزیی مربوط به Ag_2O با چگالی حالت‌های کلی مقایسه شده است. همانطور که دیده می‌شود اوربیتال‌های درگیر در باند ظرفیت و رسانش با هم، همپوشانی دارند.

در شکل ٤ چگالی حالت‌های جزیی مربوط به Ag_2O_3 با چگالی حالت‌های کلی مقایسه شده است. همانطور که دیده می‌شود مقدار گاف نواری صفر است و باند رسانش بر باند ظرفیت منطبق است.

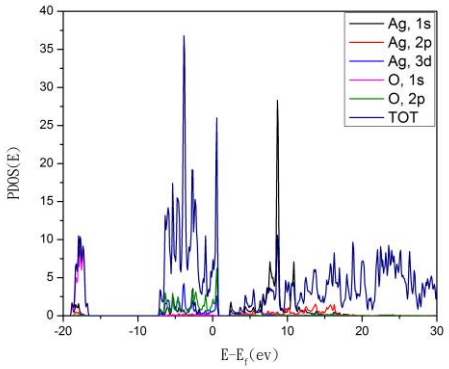
نتیجه گیری

ساختار الکترونیکی اکسید نقره با ساختار شبکه‌ای مکعبی در دو

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



شکل۳: چگالی حالت‌های جزیی مولکولAg_2O



شکل٤: چگالی حالت‌های جزیی مولکولAg_2O_3

ساختار Ag_2O_3 و Ag_2O با روش نظریه تابعی چگالی مورد مطالعه قرار گرفته است. نتایج بدست آمده حکایت از گاف نواری صفر برای هر دو ساختار را دارد زیرا در اطراف تراز فرمی سهمی از چگالی الکترونی وجود دارد که سطح انرژی فرمی را قطع کرده است. چگالی حالات الکترونی بدست آمده، ساختار نواری را تایید می‌کند و همچنین چگالی جزیی و نتایج حاصل شده باهم در تطابق هستند.

منابع

1. JA., Rodriguez, A. ,Maiti ; "Adsorption and Decomposition of H2S on MgO(100), NiMgO(100), and ZnO(0001) Surfaces: A First-Principles Density Functional Study". *J Phys Chem B. 104*(2000)3630

2. JA.,Rodriguez. T,Jirsak. S, Chaturvedi ; "Reaction of H_2S with MgO(100) and Cu/MgO(100) surfaces: Band-gap size and chemical reactivity". *J Chem Phys, 111*(1999)8077. https://doi.org/ 10.1063/1.480141

3. T, Bredow. E,Apra. M, Catti. G,Pacchioni" Cluster and periodic ab-initio calculations on K/TiO_2(110). *Surf Sci 418* (1998) 150.

4. M,Casarin. C,Maccato. A, Vittadini. ; "An LCAO-LDF study of the chemisorption of H_2O and H_2S on ZnO(0001) and ZnO(10$\bar{1}$0)". *Surf Sci, 377–379* (1997) 587.

5. P. Norby, R. Dinnebier, and A. N. Fitch, ; "Decomposition of Silver Carbonate; the Crystal Structure of Two High-Temperature Modifications of Ag_2CO_3". *Inorg. Chem. 41* (2002)3628.

6 .B. Standke and M. Jansen; "Ag_2O_3, a Novel Binary Silver Oxide". *Angew. Chem. 97*(1985).114

7. Z.S. Hu, F.Y. Hung, K.J. Chen, S.J. Chang, W.K. Hsieh, T.Y. Liao and T.P. Chen; "Recovery of thermal degraded ZnO photodetector by embedding nanosilver oxide nanoparticles". *Applied Surface Science, 279* (2013)31-35,

8. D. F. Smith and J. A. Gucinski, ; "Synthetic silver oxide and mercury-free zinc electrodes for silver–zinc reserve batteries" *J. Power Sources, 80*(1999).66

9. D. Dellasega, A. Facibeni, F. Di Fonzo, M. Bogana, A. Polissi, C. Conti, C. Ducati, C. S. Casari, A. Li Bassi, and C. E. Bottani; "Nanostructured Ag_4O_4 films with enhanced antibacterial activity". *Nanotechnology, 19* (2008)475602.

10. J. Tominaga; "The application of silver oxide thin films to plasmon photonic devices". *J. Phys.Condens. Matter .15* (2003)R1101

11. M. Fujimaki, K. Awazu, and J. Tominaga; "Surface-enhanced Raman scattering from Ag nanoparticles formed by visible laser irradiation of thermally annealed AgO*x* thin films" *J. Appl. Phys. 100*,(2006).074303

12. P. Jeremy Allen, D O. Scanlon, and G W. Watson; "Electronic structures of silver oxide". *PHYSICAL REVIEW B, 84*(2011)115141.

13. M. T. Czy˙zyk, R. A. de Groot, G. Dalba, P. Fornasini, A. Kisiel, F. Rocca, and E. Burattini*; "Ag2O band structure and x-ray-absorption near-edge spectra". Phys. Rev. B 39*(1989)9831.

14. A. J. Varkey and A. F. Fort; " Some optical properties of silver peroxide (AgO) and silver oxide (Ag_2O) films produced by chemical-bath deposition". *Sol. Energy Mater. Sol. Cells 29*(1993)253.

15. W. Kohn and L; "Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects" .*J. Sham, Phys. Rev. 140*(1965)A1133

16. J. P. Perdew and M. Levy; " Physical Content of the Exact Kohn-Sham Orbital Energies: Band Gaps and Derivative Discontinuities". *Phys. Rev. Lett. 51*, (1884).

17. F.Pei, S.Wu, G.Wang, M.Xu, S-Y Wang, and L-Y.Chen; "Electronic and Optical Properties of Noble Metal Oxides M2O\(M = Cu, Ag and Au): First-principles Study". *Journal of the Korean Physical Society. 3* (2009) 1243~1249.

18. L. H. Tjeng, M. B. J. Meinders, J. van Elp, J.Ghijsen, G. A. Sawatzky and R. L. Johnson; "Electronic structure of Ag2O". *Phys. Rev. B 41* (1990)3190.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد

http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مطالعه‌ی حساسیت پارامترهای الکترومغناطیسی به تغییرات ابعاد موجبر با استفاده از برنامه‌نویسی پایتون

مستأجران، مریم [۱]؛ نیک‌دوست، علی محمد [۲]؛ کاظمی، فیروزه [۳]

[1] دانشکده فیزیک دانشگاه یزد، یزد

چکیده

موجبر مستطیلی WR284، می‌تواند به عنوان انتقال‌دهنده‌ی توان رادیو فرکانسی از کلایسترون به دیگر سازه‌ها در شتاب‌دهنده استفاده شود. فرکانس کار موجبر مستطیلی WR284 باید با کلایسترون سازگاری داشته باشد. باید توجه داشت که فرکانس کار موجبر از فرکانس قطع آن بزرگتر است. فرکانس قطع، در اثر خطای ساخت تغییر می‌کند. در این مقاله، تغییرات فرکانس قطع ناشی از خطای ایجاد شده در ابعاد موجبر مستطیلی از روش چند جمله‌ای آشوب تعمیم‌یافته با استفاده از برنامه نویسی پایتون محاسبه می‌شود. در ادامه، نتایج به دست آمده از این روش با نتایج حاصل از تئوری و شبیه‌سازی مونت‌کارلو مقایسه می‌شود.

واژه های کلیدی: موجبر، روش چند جمله‌ای آشوب تعمیم یافته (gPC)، پایتون

Study of the effect of uncertainty in waveguide dimensions on electromagnetic parameters by python programming

Mostajeran, Maryam[1]; Nikdoust, Ali Mohammad[2]; Kazemi, Firuzeh[3]

Department of Physics, Yazd University, Yazd

Abstract

The rectangular waveguide WR284 can be used in accelerators as a transmitter of the radio frequency power from the klystron to the other structures. The Klystron frequency must be matched with that of rectangular waveguide WR284. In order to use the rectangular waveguide in the accelerators, working frequency should be considered higher than the cut-off frequency. The cut-off frequency will be changed by the variation of the waveguide dimensions. In this paper, The variation of the cut-off frequency is investigated using generalized polynomial chaos method by Python programming language. The results are then compared with theoretical calculation and Monte Carlo simulation's results.

Keywords: waveguide, Generalized Polynomial Chaos, python

PACS No. ۲۰

مقدمه

شتاب‌دهنده‌های ذرات، دستگاهی هستند که انرژی ذرات کم انرژی را با استفاده از میدان الکتریکی به انرژی بالا افزایش می‌دهند. ساختارهای رادیو فرکانسی (RF[۱])، نظیر موجبرها از اجزای تشکیل دهنده‌ی شتاب‌دهنده‌ها هستند که بررسی پارامترهای الکترومغناطیسی آن‌ها بسیار اهمیت دارد. برای محاسبه‌ی پارامترهای الکترومغناطیسی ساختارهای پیچیده RF که حل آن‌ها به روش تئوری دشوار و در بعضی مواقع غیر ممکن می‌باشد از نرم‌افزارهای شبیه‌سازی استفاده می‌شود. رایج‌ترین روش برای ارزیابی تأثیر خطاها و انحرافات ایجاد شده در حین ساخت، شبیه‌سازی مونت‌کارلو[۲] است. در شبیه‌سازی مونت‌کارلو لازم است مدل شبیه‌سازی به تعداد دفعات زیاد اجرا شود، که این امر باعث می‌شود زمان اجرای آن طولانی شود. برای کاهش زمان اجرای شبیه‌سازی می‌توان روش چند جمله‌ای آشوب تعمیم یافته (gPC[۳]) را پیشنهاد داد. ما در این مقاله از روش gPC برای محاسبه‌ی اثر خطا استفاده می‌کنیم. برای اینکه بتوانیم نشان دهیم نتایج حاصل از این روش دارای دقت خوبی است، پارامتر الکترومغناطیسی مانند فرکانس قطع موجبر در نظر می‌گیریم که بتوان به صورت تئوری هم

۱ Radio Frequency
۲ Monte Carlo
۳ Generalized Polynomial Chaos

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

محاسبه کرد. موجبر مستطیلی WR284 که برای استفاده در شتابگر خطی پژوهشگاه دانش‌های بنیادی (IPM[۴]) مناسب است، در نظر می‌گیریم و اثر خطای ساخت این موجبر بر فرکانس قطع را مورد بررسی قرار می‌دهیم. برای بدست آوردن تابع فرکانس قطع با استفاده از روش gPC، فرکانس قطع را بر حسب چند جمله‌ای‌های متعامد بسط می‌دهیم. با استفاده از برنامه‌نویسی پایتون ضرایب بسط را محاسبه می‌کنیم و تابع فرکانس قطع را به دست می‌آوریم. در نهایت، نتایج به دست آمده از این روش با نتایج حاصل از حل تئوری و شبیه‌سازی مونت‌کارلو مقایسه می‌کنیم.

روش چند جمله‌ای آشوب تعمیم یافته (gPC)

با تغییر ابعاد موجبر WR284 به صورت ورودی برای نرم‌افزار شبیه‌سازی CST[۵] می‌توان پارامتر الکترومغناطیسی آن را به دست آورد. ولی اگر بخواهیم برای تعداد زیادی از ابعاد موجبر (به علت خطا در ابعاد) نرم‌افزار CST را اجرا کنیم این کار زمان زیادی خواهد گرفت. عملکرد نرم‌افزار CST به عنوان جعبه سیاه[۶] که مقادیر ورودی را دریافت می‌کند و خروجی مربوط به آن را محاسبه می‌کند، باید شناخته شود. به این معنی که، تابع $\mathrm{f}(\xi_1)$ که ξ_1 ورودی این نرم‌افزار است، باید محاسبه شود. با فرض اینکه متغیر ξ_1 دارای توزیع تصادفی یکنواخت در بازه‌ی $[-1,1]$ باشد، $\mathrm{f}(\xi_1)$ را می‌توان بر حسب چند جمله‌ای متعامد لژاندر به صورت زیر بسط داد و تابع آن را به دست آورد[۱].

$$\mathrm{f}(\xi_1)=\sum_{\alpha=0}^{N} c_\alpha P_\alpha(\xi_1), \qquad (1)$$

در اینجا، c_α ضرایب بسط، $P_\alpha(\xi_1)$ چند جمله‌ای متعامد لژاندر و N مرتبه‌ی بسط هستند. با توجه به مشخص بودن روابط چند جمله‌ای‌های متعامد لژاندر در مرتبه‌های مختلف، تنها با محاسبه‌ی ضرایب بسط در مرتبه‌های مختلف می‌توان چگونگی وابستگی تابع مجهول $\mathrm{f}(\xi_1)$ به ξ_1 را مشخص کرد. ضرایب بسط با استفاده از رابطه‌ی (۲) به دست می‌آید[۲].

$$c_\alpha=\frac{\mathrm{E}[\mathrm{f}(\xi_1)P_\alpha(\xi_1)]}{\mathrm{E}[P_\alpha(\xi_1)P_\alpha(\xi_1)]}=\frac{\int_{-1}^{1}\mathrm{f}(\xi_1)P_\alpha(\xi_1)d\xi_1}{\left(\frac{2}{2\alpha+1}\right)} \qquad (2)$$

در اینجا، E نماد میانگین است. انتگرال صورت کسر رابطه‌ی(۲) از روش کلینشو-کورتیز[۷] با استفاده از رابطه‌ی (۳) محاسبه می‌شود.

$$\int_{-1}^{1}\mathrm{f}(\xi_1)P_\alpha(\xi_1)d\xi_1=\sum_{i=1}^{n} w(t_i)\,\mathrm{f}(t_i)P_\alpha(t_i), \qquad (3)$$

در اینجا، t_i بعضی مقادیر ξ_1 (گره‌ها[۸])، $w(t_i)$ تابع وزن[۹] متناظر با گره‌ها، $\mathrm{f}(t_i)$ مقادیر تابع به ازای گره‌ها که با استفاده از نرم‌افزار CST به دست می‌آید، $P_\alpha(t_i)$ مقادیر چند جمله‌ای متعامد لژاندر به ازای گره‌ها و n تعداد گره‌ها هستند. برای $N\geq 1$ تعداد گره‌ها از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید[۳].

$$n=2^N+1 \qquad (4)$$

رابطه‌ی محاسبه‌ی گره‌ها و تابع وزن متناظر با گره‌ها به روش کلینشو-کورتیز در مرجع [۳] آورده شده است.

در حالت کلی، اگر تابع $\mathrm{f}(X_1)$ که متغیر ورودی آن دارای توزیع تصادفی در بازه‌ی $[a,b]$ است، را در نظر بگیریم. برای اینکه بتوان این تابع را بر حسب چند جمله‌ای متعامد لژاندر بسط داد باید متغیر ورودی آن را بر اساس توزیع تصادفی یکنواخت در بازه‌ی $[-1,1]$ تبدیل زد. رابطه‌ی کلی برای تبدیل زدن متغیر X_1 بر حسب نود t_i به صورت زیر است[۴].

$$X_1(t_i)=\frac{b-a}{2}t_i+\frac{b+a}{2}, \qquad (5)$$

با جایگذاری متغیر تبدیل یافته در تابع $\mathrm{f}(X_1)$، تابع تبدیل یافته حاصل می‌شود. ضرایب بسط برای تابع تبدیل یافته با استفاده از رابطه‌ی (۶) به دست می‌آید.

$$c_\alpha=\left(\frac{2\alpha+1}{2}\right)\sum_{i=1}^{n} w(t_i)\,\mathrm{f}\left(X_1(t_i)\right)P_\alpha(t_i), \qquad (6)$$

با مشخص شدن ضرایب بسط، تابع تبدیل یافته‌ی $\mathrm{f}(X_1)$ به دست می‌آید. با فرض اینکه M نمونه‌ی تصادفی برای X_1 داریم. با جایگذاری این نمونه‌های تصادفی در تابع، تعداد M مقدار برای $\mathrm{f}(X_1)$ حاصل می‌شود که خود دارای توزیع تصادفی هستند. برای مشخص شدن نوع توزیع آماری $\mathrm{f}(X_1)$ باید تابع چگالی احتمال (PDF[۱۰]) محاسبه شود. اگر به ازای مرتبه‌ی بسط N ضرایب بسط برابر با $\vec{C}_N=\left(c_{0_N},c_{1_N},...,c_{N_N}\right)$ و به ازای مرتبه بسط $N+1$ ضرایب برابر با $\vec{C}_{N+1}=\left(c_{0_{N+1}},c_{1_{N+1}},...,c_{N_{N+1}},c_{N+1_{N+1}}\right)$ باشد. آنگاه با

۴ Institute for Studies in Theoretical Physics and Mathematics
۵ CST STUDIO SUITE
۶ Black Box
۷ Clenshaw-Curtis
۸ Nodes
۹ Weight
10- Probability Density Function

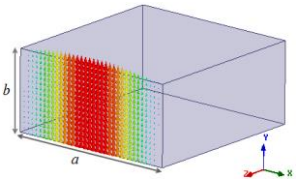
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

توجه به تعریف نُرم مرتبه‌ی دوم، خطای روش gPC بر حسب ضرایب بسط با استفاده از رابطه‌ی (۷) به دست می‌آید[۵].

$$Error=\frac{\left\|\vec{C}_{N+1}-\vec{C}_{N}\right\|}{\left\|\vec{C}_{N+1}\right\|}=\frac{\sqrt{\sum_{i=0}^{N+1}\left|c_{i_{N+1}}-c_{i_N}\right|^2}}{\sqrt{\sum_{i=0}^{N+1}\left|c_{i_{N+1}}\right|^2}}, \qquad (۷)$$

تأثیر خطای ساخت موجبر مستطیلی در محاسبه‌ی فرکانس قطع

موجبر خط انتقالی است که امواج RF تولید شده توسط کلایسترون[11] را به دیگر سازه‌های شتاب‌دهنده انتقال می‌دهد. موجبرها بر اساس ابعاد سازه و محدوده‌ی فرکانسی به دو دسته‌ی WR و WG تقسیم‌بندی می‌شوند. موجبر WR در محدوده‌ی فرکانسی گیگاهرتز و موجبر WG در محدوده‌ی فرکانسی مگاهرتز کار می‌کند. یکی از پارامترهای الکترومغناطیسی مهم موجبرها، فرکانس قطع می‌باشد. فرکانس قطع، فرکانسی است که پایین‌تر از این فرکانس موجی توسط موجبر منتقل نمی‌شود. لذا، فرکانس کار[12] موجبر باید بیشتر از فرکانس قطع باشد. موجبرهای مورد استفاده برای انتقال توان RF از کلایسترون معمولاً با سطح مقطع مستطیلی می‌باشند که مد غالب آن‌ها $TE_{1,0}$ است. خطوط میدان الکتریکی مربوط به موجبر مستطیلی با مد غالب $TE_{1,0}$ در شکل۱ نشان داده می‌شود.



شکل۱: خطوط میدان الکتریکی موجبر مستطیلی با مد غالب $TE_{1,0}$.

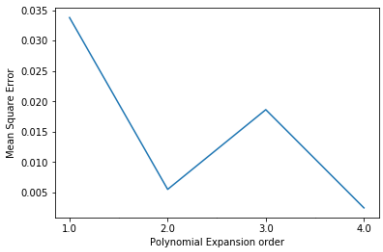
موجبر مورد نظر، موجبر باند S با محدوده‌ی فرکانسی ۲,۶ تا ۳,۹۵ گیگاهرتز می‌باشد که به موجبر مستطیلی WR284 معروف است. موجبر WR284 با ابعاد $a=۷/۲۱۳۶cm$ و $b=۳/۴۰۳۶cm$ دارای فرکانس قطع ۲,۰۷۸۴۹ گیگاهرتز است.

برای ارزیابی تأثیر خطای ایجاد شده در ابعاد سطح مقطع موجبر مستطیلی WR284 در محاسبه‌ی فرکانس قطع، برای تغییرات بُعد a بازه‌ی $[-۰/۱,۰/۱]$ را به عنوان خطا (انحراف از ابعاد بهینه شده) در راستای طول a در نظر می‌گیریم. با استفاده از روش gPC تغییرات فرکانس قطع در اثر تغییرات a را محاسبه می‌کنیم.

در این مقاله، نرم‌افزار شبیه‌سازی CST با استفاده از برنامه نویسی پایتون کنترل می‌شود که روش کنترل آن در مرجع[۶] توضیح داده شده است. با استفاده از زبان برنامه نویسی پایتون مقادیر گره‌های کلینشو-کورتیز که در بازه‌ی $[-۱,۱]$ قرار دارند به دست می‌آوریم. این گره‌ها را با استفاده از رابطه‌ی(۵)برای بازه‌ی $[۷/۱۱۳۶,۷/۳۱۳۶]$ تبدیل می‌زنیم و به عنوان بُعد a موجبر مستطیلی WR284 در نظر می‌گیریم. سپس فرکانس قطع به ازای گره‌های تبدیل یافته توسط نرم‌افزار CST به دست می‌آوریم. با مشخص شدن مقادیر فرکانس قطع به ازای گره‌های تبدیل یافته، ضرایب بسط با استفاده از رابطه (۶) محاسبه می‌کنیم و تابع فرکانس قطع را به دست آوریم. برای تشخیص مرتبه‌ی بسط مناسب برای محاسبه‌ی فرکانس قطع، باید با استفاده از رابطه‌ی (۷) خطا را بر حسب ضرایب بسط به دست آورد. با محاسبه‌ی واریانس خطا $\mathrm{V}[Error]$ می‌توان میانگین توان دوم خطا (MSE[13]) مطابق رابطه‌ی زیر محاسبه کرد[۷].

$$MSE=Error^2+\mathrm{V}[Error] \qquad (۸)$$

مقدار میانگین توان دوم خطا نشان‌دهنده‌ی خطای روش gPC است. در این روش، مرتبه‌ی بسطی مناسب است که مقدار میانگین توان دوم خطا مینیمم باشد. نمودار میانگین توان دوم خطای روش gPC بر حسب مرتبه‌های بسط $N=۱$، $N=۲$، $N=۳$ و $N=۴$ در شکل۲ نشان داده شده است.



شکل۲: نمودار میانگین توان دوم خطای روش gPC بر حسب مرتبه‌های بسط $N=۱$، $N=۲$، $N=۳$ و $N=۴$.

با توجه به شکل۲، مرتبه‌ی بسط $N=۴$ برای محاسبه‌ی فرکانس قطع به علت کمتر بودن خطا مناسب‌تر است. با فرض اینکه ۱۰^3 نمونه‌ی تصادفی برای a داریم، با جایگذاری این نمونه‌های تصادفی در تابع به دست آمده از روش gPC به ازای مرتبه‌ی بسط $N=۴$، تعداد ۱۰^3 مقدار برای فرکانس قطع حاصل می‌شود که PDF آن را به دست می‌آوریم. در اینجا، از برآوردگر کرنل برای محاسبه‌ی PDF استفاده می‌شود[۸]. برای مقایسه نتایج از

11- Klystron
12- Working Frequency
13- Mean Squared Error

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

شبیه‌سازی مونت‌کارلو استفاده کردیم و 10^3 نمونه تصادفی برای بُعد a در نظر گرفتیم و 10^3بار نرم‌افزار شبیه‌سازی CST اجرا و فرکانس قطع آن را به دست آوردیم. سپس PDF آن محاسبه کردیم.

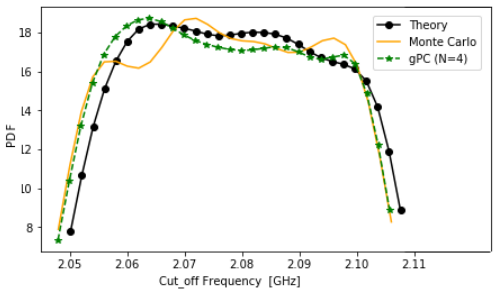
فرکانس قطع مربوط به مد $TE_{m,n}$ از روش تئوری، با استفاده از رابطه‌ی (۹) به دست می‌آید[۹].

$$f_{TE_{m,n}} = \frac{1}{2\pi\sqrt{\varepsilon\mu}}\sqrt{\left(\frac{m\pi}{a}\right)^2+\left(\frac{n\pi}{b}\right)^2} \qquad (۹)$$

در اینجا، ε ضریب گذردهی الکتریکی و μ ضریب تراوایی مغناطیسی، m و n اعداد کوانتمی مربوط به مد $TE_{m,n}$ و a و b ابعاد سطح مقطع موجبر مستطیلی هستند. با فرض اینکه، داخل موجبر مستطیلی خلأ و مد غالب $TE_{1,0}$ باشد فرکانس قطع از رابطه‌ی (۱۰) به دست می‌آید.

$$f_{TE_{1,0}} = \frac{1}{2\sqrt{\varepsilon\mu}}\sqrt{\left(\frac{1}{a}\right)^2}, \qquad (۱۰)$$

با جایگذاری 10^3 نمونه‌ی تصادفی برای تغییرات a در تابع $f_{TE_{1,0}}$، تعداد 10^3 مقدار برای فرکانس قطع به دست می‌آید و سپس PDF آن محاسبه می‌شود. در شکل۳، نمودار PDF بر حسب فرکانس قطع حاصل شده از روش gPC به ازای مرتبه‌ی بسط $N=4$ با تئوری و مونت‌کارلو مقایسه شده است.



شکل۳: تابع چگالی احتمال فرکانس قطع، مقایسه‌ی نتایج روش gPC به ازای مرتبه‌ی بسط $N=4$ با تئوری و مونت‌کارلو.

برای محاسبه‌ی خطای روش gPC و مونت‌کارلو نسبت به تئوری از رابطه‌ی زیر استفاده می‌شود.

$$Error = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(F_i - f_i)^2 \qquad (۱۱)$$

در اینجا، n تعداد نمونه‌های تصادفی، F_i فرکانس قطع بدست آمده از تئوری و f_i فرکانس قطع بدست آمده از روش شبیه‌سازی هستند. خطای بین روش مونت کارلو و تئوری برابر با $7/1714\times10^{-5}$ است. در حالیکه خطای بین روش gPC به ازای مرتبه‌ی بسط $N=4$ و تئوری برابر با $8/758\times10^{-5}$ است. بنابراین، روش gPC می‌تواند همانند روش مونت‌کارلو یک روش مناسبی برای ارزیابی تأثیر تغییرات ابعاد سطح مقطع موجبر مستطیلی WR284 در محاسبه‌ی فرکانس قطع باشد. لذا از این روش می‌توان برای پیش‌بینی تأثیر خطاها و انحرافات ایجاد شده در حین ساخت ساختارهای پیچیده‌ی RFدر محاسبه‌ی پارامترهای الکترومغناطیسی آن‌ها استفاده کرد.

٤. نتیجه‌گیری

فرکانس قطع موجبر مستطیلی WR284 به هندسه آن بستگی دارد برای ارزیابی خطای ساخت این موجبر بر فرکانس قطع عمدتاً از شبیه‌سازی مونت‌کارلو استفاده می‌شود. در شبیه‌سازی مونت‌کارلو، موجبر طراحی شده در نرم‌افزار شبیه‌سازی CST به تعداد دفعات زیاد اجرا می‌شود. برای کاهش زمان اجرای شبیه‌سازی می‌توان از روش gPC استفاده کرد. در این روش، فرکانس قطع بر حسب چند جمله‌ای لژاندر بسط داده می‌شود و با محاسبه‌ی ضرایب بسط تابع و سپس به ازای مقادیر تصادفی، تابع چگالی احتمال تابع به دست می‌آید. در این مقاله برای سنجش دقت در ارزیابی خطای ساخت، نتایج حاصل از روش gPC با نتایج شبیه‌سازی مونت‌کارلو و تئوری مقایسه شد. خطا در محاسبه‌ی فرکانس قطع از روش gPC برابر با $8/758\times10^{-5}$ است. در حالیکه خطا شبیه‌سازی مونت‌کارلو برابر با $7/1714\times10^{-5}$ است. بنابراین، روش gPC می‌تواند همانند شبیه‌سازی مونت‌کارلو یک روش خوبی برای بررسی خطای ساخت ساختارهای RF بر پارامترهای الکترومغناطیسی آن در مدت زمان بسیار کمتر باشد.

۵. مراجع

[۱] Sudret, Bruno. "Polynomial chaos expansions and stochastic finite element methods." J. Phoon, K.-K. and Ching (Ed.), Risk Reliab. Geotech. Eng (2014).

[۲] Feinberg, Jonathan. "*Some improvements and applications of non-intrusive polynomial chaos expansions*," (2015).

[۳] Waldvogel, Jörg. "Fast construction of the Fejér and Clenshaw–Curtis quadrature rules." BIT Numerical Mathematics 46.1 (2006).

[۴] Schmidt, Christian. "Uncertainty Quantification in a Computationally Optimised Volume Conductor Model for Deep Brain Stimulation". Diss. (۲۰۱۳).

[۵] Nobile, Fabio, Raul Tempone, and Clayton G. Webster. "An anisotropic sparse grid stochastic collocation method for partial differential equations with random input data." SIAM Journal on Numerical Analysis 46.5 (2008).

[۶] مستأجران، مریم؛کاظمی، فیروزه؛" بهینه‌سازی جفت کننده‌ی هم محور به موجبر ۱۸۰۰ با توان ورودی بالا با استفاده از نرم‌افزار *CST* تحت کنترل برنامه‌ی *MATLAB*"، مجله پژوهشی فیزیک ایران، جلد ۱۷، شماره ۵، زمستان(۱۳۹۷).

[۷] Das, Kalyan, Jiming Jiang, and J. N. K. Rao. "Mean squared error of empirical predictor." The Annals of Statistics 32.2 (2004).

[۸] جمشیدی، فرشید؛فلاح محسن خانی، زهره؛کشاورز، مهتاب؛«*برآورد چگالی داده‌ها و آماره‌ها*»، پژوهشکده آمار (۱۳۸٤).

[۹] مستأجران، مریم؛ کاظمی، فیروزه؛ حجازی، سعید؛ «آموزش شبیه‌سازی ساختارهای مغناطیسی با استفاده از نرم‌افزار CST Studio Suite ، چاپ اول، ۱۳۹۵، دانشگاه یزد.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

محاسبهٔ تحلیلی درهم‌تنیدگی برهم‌نهی حالت‌های +GHZ و -GHZ با استفاده از سنجهٔ هندسی

اشرف‌پور، مهرزاد[۱] ؛ ساقی، زهرا[۲]

[۱و۲] گروه فیزیک، دانشگاه شهید چمران، اهواز

چکیده

در این کار، برهم‌نهی‌هایی از حالت‌های +GHZ و -GHZ را در نظر می‌گیریم و با استفاده از سنجهٔ هندسی، درهم‌تنیدگی این حالت‌ها را محاسبه می‌کنیم. با توجه به رابطهٔ سنجهٔ هندسی، برای ویژه‌مقدار درهم‌تنیدگی حالت مورد مطالعه یک رابطهٔ تحلیلی بر حسب پارامترهای تاثیرگذار محاسبه می‌شود. در ادامه، با استفاده از رسم نمودارهای مناسب، چگونگی تغییرات درهم‌تنیدگی حالت‌های معرفی شده در این کار برحسب پارامترهای موثر بررسی می‌شود.

واژه‌های کلیدی: *درهم‌تنیدگی، سنجهٔ هندسی، حالت کوانتومی، حالت GHZ، تحلیلی، سه جزئی، کیوبیت.*

Analytic Calculation of Entanglement for a Superpositions of GHZ+ and GHZ- states via Geometric Measure

Ashrafpour, Mehrzad[1]; Saghi, Zahra[2]

[1,2] Department of Physics, Shahid Chamran University of Ahvaz

Abstract

In this work, we consider a superpositions of GHZ+ and GHZ- states and using the geometric measure, we calculate the entanglement of these states. According to the geometric measure relationship, for the entanglement eigenvalue of the studied state, an analytic relationship is calculated according to the involved parameters. In the following, the appropriate plots are drawn and the changes of the entanglement of the states introduced in this work according to the involved parameters are investigated.

***Keywords**: entanglement, geometric measure, quantum state, GHZ state, analytic, tripartite, qubit*

PACS No. 2

مقدمه

حالت‌های درهم‌تنیده در اطلاعات کوانتومی بسیار پرکاربرد و ارزشمند هستند [۱]. به این منظور سنجه‌های مختلفی نیز برای کمی کردن میزان درهم‌تنیدگی این حالت‌ها وجود دارد [۲]. از میان سنجه‌های درهم‌تنیدگی، سنجهٔ هندسی را برای سنجش میزان درهم-تنیدگی استفاده می‌کنیم زیرا این سنجه هم شناخته شده است[۳-۶]، هم مقدار درهم‌تنیدگی را دقیق‌تر اندازه‌گیری می‌کند [۳] و هم با سنجه‌های دیگر ارتباط دارد [۸،۷]. سنجهٔ هندسی به صورت کمترین فاصلهٔ حالت درهم‌تنیدهٔ مفروض با مجموعهٔ حالت‌های جدایی‌پذیر تعریف می‌شود. در اصل سنجهٔ هندسی از طریق محاسبهٔ زاویهٔ بین حالت درهم‌تنیده و نزدیک‌ترین حالت جدایی‌پذیر میزان درهم‌تنیدگی حالت کوانتومی خالص را اندازه می‌گیرد [۳].

محاسبات تحلیلی و بحث روی نتایج آنها همواره در فیزیک از اهمیت بسزایی برخوردار بوده است، زیرا این گونه بررسی‌های تحلیلی درک کاملی از مفاهیم و ایده‌های مسائل فیزیکی بدست می-دهند. رویکردهای معمول محاسبهٔ درهم‌تنیدگی حالت‌های کوانتومی با استفاده از سنجهٔ هندسی عموما عددی است زیرا در ادامهٔ روند سنجش میزان درهم‌تنیدگی حالت‌ها با استفاده از این سنجه باید بیشینه‌سازی روی حالت‌های حاصل‌ضربی انجام گیرد که به مسئلهٔ

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

ویژه‌مقداری غیرخطی منجر می‌شود و به ندرت می‌توان برای آن حل تحلیلی ارائه داد [۳]. از این رو بررسی دقیق‌تر این موضوع ارزشمند است، چرا که تاکنون نتایج تحلیلی اندکی برای درهم‌تنیدگی سیستم-های درهم‌تنیدهٔ چند جزئی بدست آمده است[۹].

از آنجا که حالت‌های GHZ، به‌صورت عمده در نظریهٔ اطلاعات کوانتومی و به‌ویژه در ترابرد کوانتومی و کدگذاری فوق فشردهٔ حالت‌ها استفاده می‌شود [۱۰]، در این کار به بررسی درهم‌تنیدگی سیستم سه جزئی دو بعدی متشکل از گروهی از حالت‌های GHZ که به حالت‌های +GHZ و -GHZ معروفند[۱۲،۱۱]، می‌پردازیم.

جواب‌های تحلیلی برای ویژه‌مقدار درهم‌تنیدگی سنجهٔ هندسی

حالت خالص درهم‌تنیدهٔ n جزئی که هر جز آن می‌تواند فضای هیلبرت مجزایی داشته باشد به صورت زیر معرفی می‌شود:

$$|\psi\rangle=\sum_{p_1p_2\dots p_n}\chi_{p_1p_2\dots p_n}\left|e^{(1)}_{p_1}e^{(2)}_{p_2}\dots e^{(n)}_{p_n}\right\rangle \qquad (۱)$$

برای درهم‌تنیدگی با استفاده از فاصلهٔ میان حالت درهم‌تنیدهٔ $|\psi\rangle$ و نزدیک‌ترین حالت خالص جداپذیر n جزئی اختیاری می‌توان تعریف هندسی زیر را ارائه داد:

$$d=\min_{|\phi\rangle}\ \||\psi\rangle-|\phi\rangle\| \qquad (۲)$$

که در آن $|\phi\rangle$ نزدیک‌ترین حالت جداپذیر است. در ادامه برای حالت $|\phi\rangle$ به مسئلهٔ ویژه‌مقداری غیرخطی مستقل از انتخاب پایه‌ها به صورت زیر خواهیم رسید [۳]:

$$\langle\psi|\left(\otimes^n_{j(\neq i)}|\phi^{(j)}\rangle\right)=\Lambda\langle\phi^{(i)}|,\left(\otimes^n_{j(\neq i)}\langle\phi^{(j)}|\right)|\psi\rangle=\Lambda|\phi^{(i)}\rangle \qquad (۳)$$

که در آن ویژه‌مقدار Λ، (مرتبط با ضرایب لاگرانژ با قید $\langle\phi|\phi\rangle=1$) حقیقی و مستقل از انتخاب پایه‌های مکانی بوده و در بازهٔ [-1,1] قرار دارند. از این رو، طیف ویژه‌مقادیر Λ می‌تواند به عنوان کسینوس زاویهٔ میان $|\psi\rangle$ و $|\phi\rangle$ تعبیر گردد. با محاسبهٔ ویژه‌مقدار درهم‌تنیدگی Λ_{max}، که متناظر با نزدیک‌ترین حالت جداپذیر است، سنجهٔ هندسی درهم‌تنیدگی به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$E_g(\psi)=1-\Lambda^2_{max} \qquad (٤)$$

برای یافتن عبارت‌های تحلیلی برای ویژه‌مقدار درهم‌تنیدگی سنجهٔ هندسی از ایدهٔ جالبی استفاده می‌شود که در آن برای حالت-های خالص، مسئلهٔ ویژه‌مقداری غیرخطی به مسئلهٔ ویژه‌مقداری خطی تقلیل می‌یابد [۱۳]. حالت خالص سه‌کیوبیتی $|\psi\rangle$ را در نظر می‌گیریم. Λ^2_{max} به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\Lambda^2_{max}=\max_{q_1,q_2,q_3}|\langle q_1q_2q_3|\psi\rangle|^2 \qquad (٥)$$

که در آن $|q_k\rangle$ها حالت‌های خالص تک‌کیوبیتی بهنجار هستند. عموما حالت‌های تقلیل یافته حالت‌های آمیخته هستند. بنابراین ویژه‌مقدار درهم‌تنیدگی برحسب ماتریس‌های چگالی نمایش داده می‌شود. با ادامهٔ روند محاسبات و بازآرایی ویژه‌مقدار درهم‌تنیدگی برحسب ماتریس چگالی تقلیل یافتهٔ ρ^{AB} کیوبیت‌های A و B، داریم [۱۳]:

$$\Lambda^2_{max}(\psi)=\max_{\varrho^1\varrho^2}\mathrm{tr}(\rho^{AB}\varrho^1\otimes\varrho^2) \qquad (٦)$$

که در نهایت ویژه‌مقدار درهم‌تنیدگی به صورت زیر بدست می-آید [۱٤]:

$$\Lambda^2_{max}=\frac{1}{4}\max_{s_1^2=s_2^2=1}\left(1+\mathbf{s_1}\cdot\mathbf{r_1}+\mathbf{s_2}\cdot\mathbf{r_2}+g_{ij}s_{1i}s_{2j}\right) \qquad (٧)$$

که در آن، $\mathbf{s_1}$ و $\mathbf{s_2}$ بردارهای بلاخ ماتریس‌های چگالی ϱ^1 و ϱ^2 هستند و $\mathbf{r_1}$، $\mathbf{r_2}$ و g_{ij} به صورت زیر تعریف می‌شوند [۱٤]:

$$\mathbf{r_1}=\mathrm{tr}(\rho^A\boldsymbol{\sigma}),\quad \mathbf{r_2}=\mathrm{tr}(\rho^B\boldsymbol{\sigma}),\quad g_{ij}=\mathrm{tr}(\rho^{AB}\sigma_i\otimes\sigma_j) \qquad (٨)$$

بیشینه‌سازی معادلهٔ (۷) با استفاده از روش ضرایب لاگرانژ به جفت‌معادلهٔ زیر منجر می‌شود:

$$\mathbf{r_1}+g\mathbf{s_2}=\lambda_1\mathbf{s_1},\qquad \mathbf{r_2}+g^T\mathbf{s_1}=\lambda_2\mathbf{s_2} \qquad (٩)$$

با استفاده از رابطهٔ (۹) ضرایب لاگرانژ λ_1 و λ_2 بر اساس بهنجارش بردارهای بلاخ محاسبه می‌شوند. $\mathbf{s_1}$ و $\mathbf{s_2}$ را نیز می‌توان با حل جفت‌معادلهٔ (۹) بدست آورد.

بررسی درهم‌تنیدگی برهم‌نهی حالت‌های +GHZ و -GHZ (نوع اول)

برهم‌نهی‌ای از حالت‌های +GHZ و -GHZ را به‌صورت زیر تشکیل می‌دهیم:

$$|\psi\rangle=\sqrt{s}|GHZ+\rangle+\sqrt{1-s}\,e^{i\varphi}\,|GHZ-\rangle \qquad (١٠)$$

که در آن داریم [۱۲]:

$$|GHZ+\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|000\rangle+|111\rangle),|GHZ-\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|000\rangle-|111\rangle) \qquad (١١)$$

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

اکنون به ازای φهای مختلف با استفاده از سنجهٔ هندسی، درهم-تنیدگی این حالت را بر حسب پارامتر برهم‌نهی s، مورد بررسی قرار می‌دهیم. با بکارگیری رابطهٔ (۸)، ماتریس g به ازای تمامی مقادیر φ به صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$g=\begin{pmatrix}0&0&0\\0&0&0\\0&0&1\end{pmatrix} \qquad (۱۲)$$

بردارهای $\mathbf{r_1}$ و $\mathbf{r_2}$ با استفاده از رابطهٔ (۸) و $\mathbf{s_1}$ و $\mathbf{s_2}$ نیز با استفاده از رابطهٔ (۹) برای مقادیر مختلف φ به صورت زیر به دست می‌آیند:

به ازای $\varphi=0$:

$$\mathbf{r_1}=\mathbf{r_2}=\begin{pmatrix}0\\0\\2\sqrt{s(1-s)}\end{pmatrix},\mathbf{s_1}=\begin{pmatrix}0\\0\\\frac{2\sqrt{s(1-s)}(1+\lambda_2)}{\lambda_1\lambda_2-1}\end{pmatrix},\mathbf{s_2}=\begin{pmatrix}0\\0\\\frac{2\sqrt{s(1-s)}(1+\lambda_1)}{\lambda_1\lambda_2-1}\end{pmatrix} \qquad (۱۳)$$

به ازای $\varphi=\frac{\pi}{6}$:

$$\mathbf{r_1}=\mathbf{r_2}=\begin{pmatrix}0\\0\\\sqrt{3s(1-s)}\end{pmatrix},\ \mathbf{s_1}=\mathbf{s_2}=\begin{pmatrix}0\\0\\\frac{\sqrt{3s(1-s)}}{\lambda-1}\end{pmatrix} \qquad (۱۴)$$

به ازای $\varphi=\frac{\pi}{4}$:

$$\mathbf{r_1}=\mathbf{r_2}=\begin{pmatrix}0\\0\\\sqrt{2s(1-s)}\end{pmatrix},\ \mathbf{s_1}=\begin{pmatrix}0\\0\\\frac{\sqrt{2s(1-s)}(1+\lambda_2)}{\lambda_1\lambda_2-1}\end{pmatrix},\mathbf{s_2}=\begin{pmatrix}0\\0\\\frac{\sqrt{2s(1-s)}(1+\lambda_1)}{\lambda_1\lambda_2-1}\end{pmatrix} \qquad (۱۵)$$

به ازای $\varphi=\frac{\pi}{3}$:

$$\mathbf{r_1}=\mathbf{r_2}=\begin{pmatrix}0\\0\\\sqrt{s(1-s)}\end{pmatrix},\ \mathbf{s_1}=\mathbf{s_2}=\begin{pmatrix}0\\0\\\frac{\sqrt{s(1-s)}}{\lambda-1}\end{pmatrix} \qquad (۱۶)$$

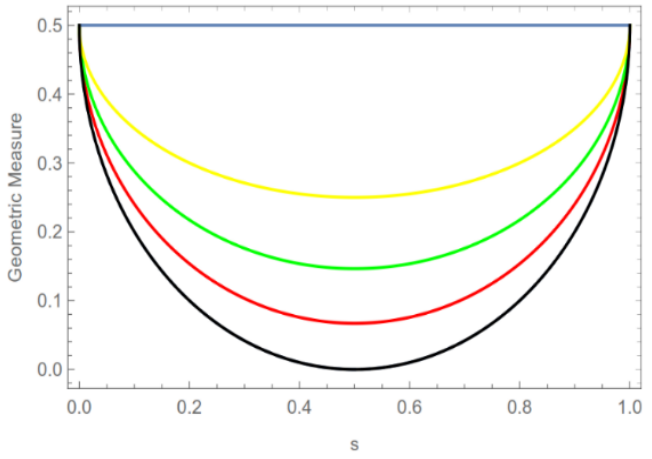
به ازای $\varphi=\frac{\pi}{2}$:

$$\mathbf{r_1}=\mathbf{r_2}=\begin{pmatrix}0\\0\\0\end{pmatrix},\ \mathbf{s_1}=\mathbf{s_2}=\begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix} \qquad (۱۷)$$

به ازای $\varphi=\pi$:

$$\mathbf{r_1}=\mathbf{r_2}=\begin{pmatrix}0\\0\\-2\sqrt{s(1-s)}\end{pmatrix},\mathbf{s_1}=\begin{pmatrix}0\\0\\-\frac{2\sqrt{s(1-s)}(1+\lambda_2)}{\lambda_1\lambda_2-1}\end{pmatrix},\mathbf{s_2}=\begin{pmatrix}0\\0\\-\frac{2\sqrt{s(1-s)}(1+\lambda_1)}{\lambda_1\lambda_2-1}\end{pmatrix} \qquad (۱۸)$$

از آنجایی که بردارهای بلاخ بهنجارند، می‌توان با استفاده از اصل بهنجارش و حل جفت معادلهٔ رابطهٔ (۹) مقادیر λ_1 و λ_2 را در رابطه-های قبل بدست آورد. با جایگذاری این مقادیر می‌توان $\mathbf{s_1}$ و $\mathbf{s_2}$ را به ازای مقادیر مختلف φ بر حسب پارامتر s محاسبه نمود. در نهایت با ادامهٔ روند محاسبات و استفاده از رابطهٔ (۷)، تغییرات سنجهٔ هندسی بر حسب پارامتر برهم‌نهی s مطابق شکل (۱) رسم شده است. همانطور که در شکل (۱) دیده می‌شود به ازای s=0 و s=1 بیشینه مقدار سنجهٔ هندسی برای حالت‌های درهم‌تنیدهٔ سه‌جزئی یعنی ۰/۵ و در $s=\frac{1}{2}$ کمترین مقدار سنجهٔ هندسی برای حالت‌های جداپذیر یعنی صفر به‌دست می‌آید که مطابق با انتظارمان با نتایج به‌دست آمده از شکل (۱) که برای حالت φ=0 ترسیم شده است، مطابقت دارد.



شکل ۱: تغییرات سنجهٔ هندسی برهم‌نهی حالت‌های +GHZ و -GHZ (نوع اول) بر حسب s به ازای تغییرات φ. نمودارها از پایین به بالا به ترتیب به ازای $\varphi=0=\pi$، $\varphi=\frac{\pi}{6}$، $\varphi=\frac{\pi}{4}$، $\varphi=\frac{\pi}{3}$ و $\varphi=\frac{\pi}{2}$ رسم شده‌اند.

بررسی درهم‌تنیدگی برهم‌نهی حالت‌های +GHZ و -GHZ (نوع دوم)

برهم‌نهی‌ای از حالت‌های +GHZ و -GHZ به‌صورت زیر تشکیل می‌دهیم:

$$|\psi\rangle=\sqrt{\cos\theta\sqrt{\frac{s}{3}}}\ |GHZ+\rangle+\sqrt{1-\cos\theta\sqrt{\frac{s}{3}}}\ |GHZ-\rangle \qquad (۱۹)$$

اکنون می‌توانیم بردارهای $\mathbf{r_1}$ و $\mathbf{r_2}$ را با استفاده از رابطهٔ (۸) به‌صورت زیر بدست آوریم:

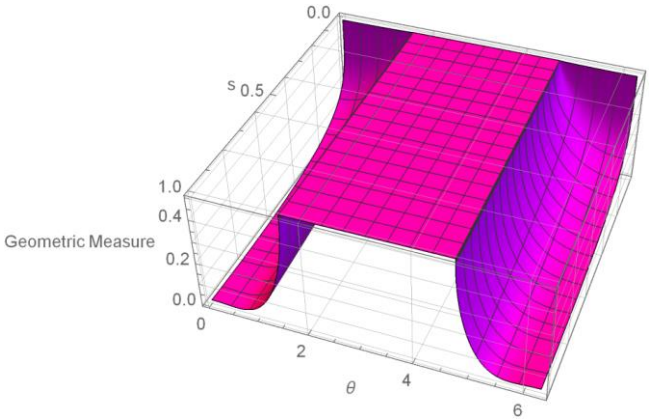
$$\mathbf{r_1}=\mathbf{r_2}=\begin{pmatrix}0\\0\\2\sqrt{\sqrt{\frac{s}{27}}\left(\cos\theta\left(3-\sqrt{3s}\cos\theta\right)\right)}\end{pmatrix} \qquad (۲۰)$$

با بکارگیری رابطهٔ (۸)، ماتریس g و همچنین با استفاده از رابطهٔ (۹)، $\mathbf{s_1}$ و $\mathbf{s_2}$ را هم به‌صورت زیر محاسبه می‌کنیم:

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

$$g=\begin{pmatrix}0&0&0\\0&0&0\\0&0&1\end{pmatrix},\ \mathbf{s_1}=\mathbf{s_2}=\begin{pmatrix}0\\0\\\dfrac{2\sqrt{\sqrt{\frac{s}{27}}\left(\cos\theta\left(3-\sqrt{3}s\cos\theta\right)\right)}}{\lambda-1}\end{pmatrix} \qquad (۲۱)$$

از آنجایی که بردارهای بلاخ بهنجارند، می‌توان با استفاده از اصل بهنجارش مقدار λ را بدست آورد. با جایگذاری این مقدار λ در رابطهٔ (۲۱) می‌توان $\mathbf{s_1}$ و $\mathbf{s_2}$ را بر حسب پارامتر s و θ محاسبه نمود. در نهایت با ادامهٔ روند محاسبات می‌توان تغییرات سنجهٔ هندسی را برحسب پارامترهای برهم‌نهی s و θ مطابق شکل (۲) رسم کرد. همانطور که انتظار داریم سنجهٔ هندسی برای $s=0$، حالت GHZ- با مقدار درهم‌تنیدگی ۰/۵ را نشان می‌دهد که همان مقداری است که برای حالت GHZ محاسبه شده بود و این مقدار مستقل از تغییرات پارامتر θ است.



شکل۲: تغییرات سنجهٔ هندسی برهم‌نهی حالت‌های GHZ+ و GHZ- (نوع دوم) بر حسب s و θ.

نتیجه‌گیری

در این کار روشی تحلیلی را برای یافتن سنجهٔ هندسی درهم-تنیدگی سیستم‌های سه جزئی کیوبیتی در حالت خالص مطالعه کردیم و کاربرد این روش را نیز در بررسی درهم‌تنیدگی دوگونه از انواع برهم‌نهی‌های حالت‌های GHZ+ و GHZ- بررسی نمودیم. با توجه به شکل(۱) نتیجه گرفتیم هنگامیکه $s=0$ باشد حالت GHZ+ با مقدار ۰/۵ و هنگامیکه $s=1$ باشد حالت GHZ- با مقدار ۰/۵ برای سنجهٔ هندسی محاسبه می‌شود. کمینه مقدار سنجهٔ هندسی نیز بسته به میزان پارامتر φ متغیر است و در تمامی حالت‌ها هنگامیکه $s=\frac{1}{2}$، در این صورت سنجهٔ هندسی کمترین مقدار خود را دارد به طوری که در این حالت به ازای $\varphi=0=\pi$ ، درهم‌تنیدگی این حالت از بین می‌رود. همچنین به ازای $\varphi=\pi/2$ برای همهٔ sها سنجهٔ هندسی مقدار ثابت ۰/۵ را بدست می‌دهد. از شکل (۲) نیز دریافتیم هنگامیکه تساوی $s=3\sec^2\theta$ برقرار شود، حالت GHZ+ را خواهیم داشت که مقدار سنجهٔ هندسی برای آن ۰/۵ است. همچنین به ازای $s=1$ و $\theta=\frac{\pi}{6}, \frac{11\pi}{6}$ سنجهٔ هندسی مقدار صفر را نشان می‌دهد. همچنین برای θهای متفاوت با افزایش s، به جز برای $\theta=\frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2}$ سنجهٔ هندسی کاهش می‌یابد تا هنگامیکه $s=1$ شود، بسته به مقدار پارامتر θ سنجهٔ هندسی مقادیر متفاوتی را نشان می‌دهد.

مرجع‌ها

[1] D. Mc Mahon; "*Quantum Computing Explained*"; John Wiley and Sons Publication. (2007) 86-107

[2] M. B. Plenio and S. Virmani; "An Introduction to Entanglement Measures"; *Quantum Information and Computation* **7**, (2007) 1-57.

[3] T.-C. Wei and P. M. Goldbart; "Geometric Measure of Entanglement and Applications to Bipartite and Multipartite Quantum States"; *Physical Review A* **68**, No. 042307 (2003).

[4] K. Uyanik and S. Turgut; "On the Geometric Measures of Entanglement"; *Physical Review A* **81**, No. 032306 (2010).

[5] D. C. Brody and L. P. Hughston; "Geometric Quantum Mechanics"; *Geometry and Physics* **38**, (2001) 19-53.

[6] L. Chen and M. Aulbach and M. Hajdusek; "Comparison of Different Definitions of the Geometric Measure of Entanglement"; *Physical Review A* **89**, No. 042305 (2014).

[7] D. Cavalcanti; "Connecting the Generalized Robustness and the Geometric Measure of Entanglement"; *Physical Review A* **73**, No. 044302 (2006).

[8] T.-C.Wei and M. Ericsson and P. Goldbart and W. J. Munro; "Connections Between Relative Entropy of Entanglement and Geometric Measure of Entanglement"; *Quantum Information and Computation* **4**, No. 252 (2004).

[9] B. M. Terhal and K. G. H. Vollbrecht; "Entanglement of Formation for Isotropic States"; *Physical Review Letters* **85**, No. 2625 (2000).

[10] P. Agrawal and A. Pati; "Perfect Teleportation and Superdense Coding with W-State"; *Physical Review A* **74**, No. 062320 (2006).

[11] D. Greenberger, M. Horne, A. Shimony and A. Zeilinger; "Bell's Theorem Without Inequalities"; *American Journal of Physics* **58**, (1990) 1131-1143.

[12] L. E. Buchhols, T. Moroder and O. Guhne; "Evaluating the Geometric Measure of Multiparticle Entanglement"; *Annalen der Physik* **528**, (2016) 278-287.

[13] J. Jung and M.-R. Hwang and H. Kim and M.-S. Kim and M.-S. Kim and D. K. Park and J.-W. Son and S. Tamaryan; "Reduced State Uniquely Defines Groverian Measure of Original Pure State"; *Physical Review A* **77**, No. 062317 (2008).

[14] L. Tamaryan and D. Park and S. Tamaryan; "Analytic Expressions for Geometric Measure of Three-Qubit States"; *Physical Review A* **77**, No. 022325 (2008).

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

تاثیر تنش کششی طولی بر امپدانس مغناطیسی میکروسیم‌های آمورف CoFeSiB

مرادی، مهرداد*؛ نوروزی، ایمان؛ دادستان، علی؛ داستانی، محمدمهدی

پژوهشکده علوم و فناوری نانو، دانشگاه کاشان، کاشان

چکیده

در این مقاله امپدانس مغناطیسی و حساسیت میدان میکروسیم‌های پایه کبالت تحت تاثیر تنش کششی طولی مورد بررسی قرار گرفت. برای اعمال تنش کششی طولی به میکرو سیم‌ها وزنه‌های ۱۱، ٤٥، ٥٧، ١٠٥، ١٥٦ و ١٩٧ گرمی بسته شد و به مدت ۳۰ دقیقه میکروسیم ها تحت تاثیر این وزنه‌ها قرار گرفت. داده‌های بدست آمده از آزمایشات نشان می‌دهد که امپدانس مغناطیسی این نوارها به طور موثری بعد از اعمال تنش کششی طولی افزایش می‌یابد. تنش کششی طولی به دلیل باز آرایی کردن ممان‌ها و همچنین ایجاد تغییر در ناهمسانگردی نمونه ها باعث بهبود امپدانس مغناطیسی می‌گردد. تمامی این آزمایشات در فرکانس ۸ مگاهرتز انجام شده است. در هر مرحله از آزمایش به دلیل نتیجه‌گیری دقیق‌تر از یک نمونه خام استفاده شده است و مقایسه ها بر اساس امپدانس مغناطیسی نسبی RMI مطرح شده است. بیشترین میزان افزایش امپدانس مغناطیسی در فشار ۱۰۸/۲۸ مگا پاسکال بدست آمد که به میزان ٤٠ درصد افزایش یافت (٥٧٤٪ تا ٨٠٤٪) و حساسیت میدان نیز افزایش ۳۵ درصدی داشت (۸/۱ تا۱۰/۸). این نتایج نشان می‌دهد که اعمال تنش کششی طولی می‌تواند روشی موثر، کم هزینه و سریع در کاربردهای حسگری باشد.

The influence of longitudinal tensile stress on magneto impedance of CoFeSiB amorphous micro-wires

Moradi. Mehrdad; Norouzi, Iman; Dadsetan, Ali; Dastani, Mohammad Mehdi

Institute of Nanoscience and Nanotechnology, University of Kashan, Kashan

Abstract

In this paper, the magneto impedance (MI) and field sensitivity of Co-based micro-wires were investigated under the influence of longitudinal tensile stress. To applying a longitudinal tensile stress, the weights with 11, 45, 57, 105, 156 and 197 grams were connected to the sample, and the micro-wires were affected by these weights for 30 minutes. The experimental results show that the MI of Co-based micro-wires was increases effectively after applying longitudinal tensile stress. One can deduce that the longitudinal tensile stress improves the MI due to the rearrangement of the magnetic moments and as well as the change in the magnetic anisotropy of the samples. All experiments were performed at frequency of 8 MHz. At each stage of the test, an as-cast micro-wire was used for more accurate results and measurements were carried out based on the relative MI (RMI). The maximum increase in MI was obtained at stress of 108.28MPa which shows 40% increase (574% to 804%) in MI and increase in field sensitivity from 8.1 to 10.8. The results show that applying longitudinal tensile stress can be effective, low-cost, and fast method for sensing applications.

PACS No: 75

مقدمه

در طی سال‌های اخیر کشف اثر امپدانس مغناطیسی توانسته است زمینه جدیدی از علم را بر روی دوست داران دانش فیزیک باز کند. این اثر برای اولین بار در سال ١٩٩٤ توسط مهری و همکارانش در سیم پایه کبالت دیده شد [۱]. امپدانس مغناطیس به شکل معادله (۱) تعریف می‌شود:

$$MI(\%) = \frac{\Delta Z}{Z} = \left\{ \frac{Z(H) - Z(H_{\max})}{Z(H_{\max})} \right\} \times 100 \qquad (1)$$

که در آن $Z(H)$ امپدانس اندازه‌گیری شده در حضور میدان مغناطیسی یکنواخت و $Z(H_{max})$ امپدانس اندازه‌گیری شده در میدان مغناطیسی اشباع است. تغییرات امپدانس مغناطیسی در حضور میدان مغناطیسی خارجی به دلیل اثری به نام اثر پوسته می‌باشد.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

هنگامی‌که یک جریان متناوب با فرکانس بالا از یک نمونه مغناطیسی عبور می‌کند جریان به جای عبور از تمام مقطع نمونه از سطح آن عبور می‌کند که به عنوان اثر پوسته شناخته می‌شود [۲]. درواقع جریان تنها در سطح نمونه در جریان است و به ضخامتی از سطح نمونه که جریان از آن عبور می‌کند عمق پوسته می‌گویند.

در اینجا لازم است در مورد حساسیت میدان نمونه نیز توضیح داده شود که به تغییرات امپدانسی نمونه نسبت به تغییرات میدان مغناطیسی خارجی حساسیت میدان می‌گویند که از رابطه زیر به دست می‌آید:

$$S = d(\frac{\Delta Z}{Z}) / dH \qquad (۲)$$

هر چه نمونه ما حساسیت میدان بیشتری داشته باشد برای استفاده در حسگر امپدانس مغناطیسی مناسب‌تر خواهد بود زیره با تغییر میدان مغناطیسی خارجی تغییرات بزرگ‌تری در امپدانس مغناطیسی مشاهده می‌شود.

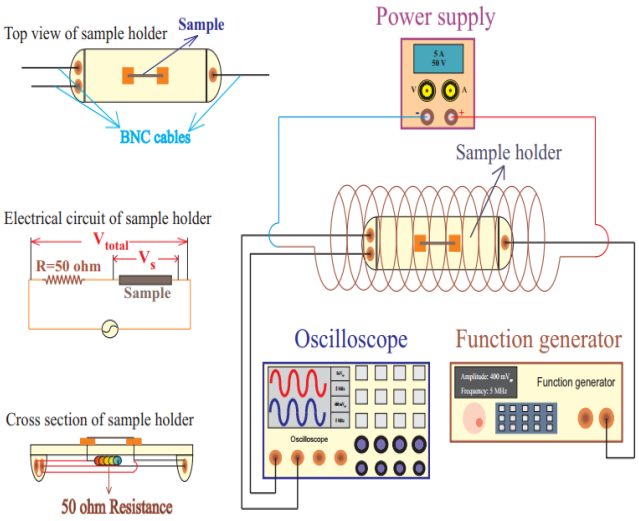
امپدانس مغناطیسی در میکروسیم‌ها یک موضوع مورد علاقه برای محققین در حوزه فیزیک کاربردی است، به علت اینکه از این خاصیت در حسگرهای میدانی استفاده می‌شود . حسگرهایی که بر پایه امپدانس مغناطیسی استوارند و به حسگرهای MI معروف هستند، مزایای زیادی دارند که از مهمترین آنها حساسیت میدان بالای این حسگرها می‌باشد. در بعضی موارد مقدار امپدانس مغناطیسی نمونه ها به مقدار قابل توجهی مشاهده نمی شود که راهکارهای مختلفی برای بهبود پاسخ امپدانس مغناطیسی پیشنهاد می‌شود که در این مقاله با استفاده از تنش کششی که یک روش ارزان، دردسترس و سریع است برای بهبود پاسخ امپدانس مغناطیسی استفاده شده است.

بخش تجربی

در این آزمایش از میکروسیم‌های پایه کبالت $Co_{68.15}Fe_{4.35}Si_{12.5}B_{15}$ که به روش ذوب ریسی تهیه گردیده است استفاده شده است. این روش برای تهیه میکروسیم‌های آمورف با قطرهای حدود ۱ تا ۳۰۰ میکرو متر قابل انتخاب است. در این آزمایش از میکروسیم‌های با طول ٤ سانتی‌متر و قطر ۱۱۰ میکرومتر استفاده شده است.

شش عدد نمونه انتخاب و امپدانس مغناطیسی آن‌ها اندازه‌گیری شد. برای اندازه‌گیری امپدانس مغناطیسی نمونه روی پایه اندازه‌گیری بسته شد که خود از چیدمان خاصی برخوردار است. در این چیدمان از یک مقاومت ۵۰ اهمی استفاده شده است. بکار بردن این مقاومت برای محاسبه جریان عبوری از نمونه و همچنین برای جلوگیری از آسیب رسیدن به منبع تغذیه می‌باشد زیرا مقاومت نمونه در فرکانس‌های پایین از چند اهم تجاوز نمی‌کند و جریان زیادی از مدار عبور می‌کند که می‌تواند باعث آسیب رسیدن به منبع تغذیه می‌شود.

ابتدا نمونه به پایه اندازه‌گیری بسته شد و سپس داخل سیملوله قرار داده شد و از طریق منبع تغذیه جریان مستقیم، یک میدان مغناطیسی ثابت طولی به نمونه اعمال شد. در پایه اندازه‌گیری یک ورودی برای جریان متناوب و دو خروجی که به کانال های ۱ و ۲ اسیلوسکوپ متصل می‌شود، وجود دارد. چیدمان اندازه گیری امپدانس مغناطیسی در شکل (۱) قابل مشاهده است:



شکل ۱: چیدمان آمایشگاهی اندازه‌گیری امپدانس مغناطیسی

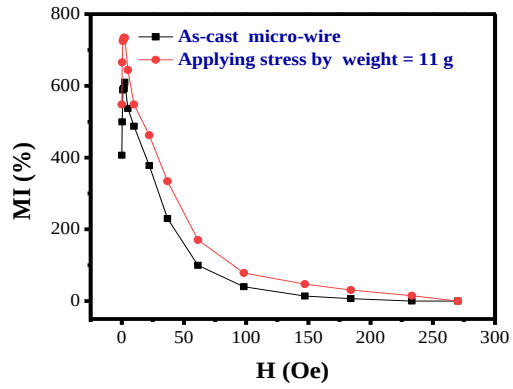
برای اعمال تنش کششی طولی نمونه‌ها از یک طرف به یک پایه ثابت بسته شدند و از طرف دیگر وزنه‌ها به مدت ۳۰ دقیقه به آن ها متصل گردید. وزنه‌های استفاده شده در طی این آزمایش ۱۱، ٤٥، ٥٧، ١٠٥، ١٥٦ و ١٩٧ گرمی بودند که به ترتیب تنش های کششی طولی معادل ١١/٣٤، ٤٦/٤٠، ٥٨/٧٨، ١٠٨/٢٨، ١٦٠/٨٧ و ٢٠٣/١٥ مگاپاسکال را به نمونه‌ها وارد می‌کردند.

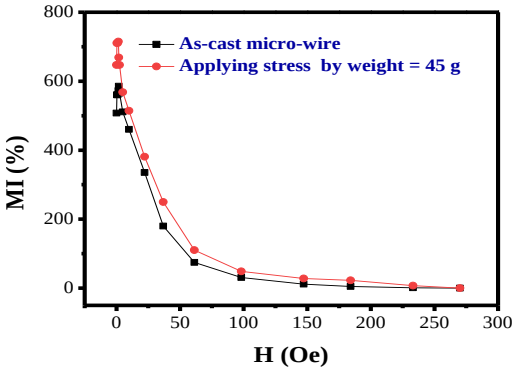
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

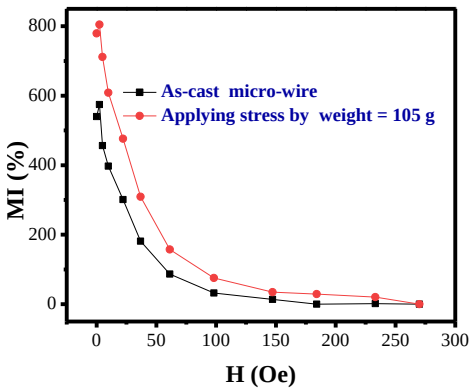
نتایج و بحث

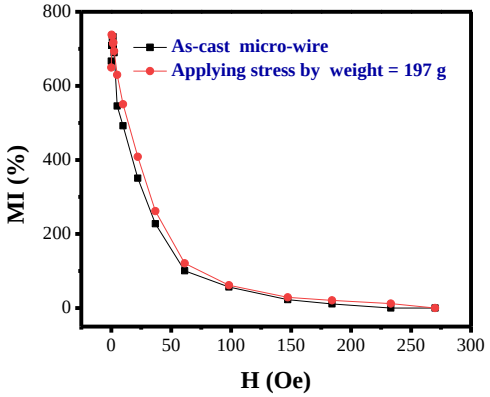
در شکل ۲، نمودار امپدانس مغناطیسی نمونه‌ها نسبت به نمونه خام (As-cast) به ازای چهار تا از تنش ها رسم شده است. در بیشتر نمونه‌ها در ابتدا با اعمال میدان مغناطیسی خارجی امپدانس مغناطیسی افزایش یافته است و بعد از رسیدن به بیشترین مقدار خود روند کاهش پیدا کرده است که منجر به ایجاد یک قله در نمودار امپدانس مغناطیسی شده است. دلیل حضور این قله نیز وجود میدان ناهمسانگردی غیر صفر در نمونه می‌باشد. در ابتدا میدان مغناطیسی خارجی با غلبه بر میدان ناهمسانگردی باعث افزایش امپدانس مغناطیسی می‌گردد، اما پس از آن با افزایش میدان مغناطیسی خارجی و در نتیجه افزایش عمق پوسته امپدانس مغناطیسی کاهش می‌یابد [۳]. در شکل ۳ مشاهده می‌شود در تنش کششی طولی ۱۱/۳٤ مگاپاسکال امپدانس مغناطیسی از ٦۱۰٪ به ۷۳٤٪ افزایش می‌یابد و حساسیت میدان نیز از ۲/۲ به ۲/۸ بر اورستد می‌رسد. شکل ٤ نشان از افزایش ۲۰ درصدی امپدانس مغناطیسی در تنش کششی طولی ۱۱/۳٤ مگا پاسکال دارد. در تنش کششی طولی ٤٦/٤ مگا پاسکال امپدانس مغناطیسی از ۵۸۵٪ به ۷۱٤٪ می‌رسد و حساسیت میدان از ۲/۱۸ به ۲/٦۵ بر اورستد افزایش می‌یابد که نشان از افزایش ۲۲ درصدی امپدانس مغناطیسی دارد. در تنش کششی طولی ۵۸/۷۸ مگا پاسکال امپدانس مغناطیسی از ٦۳۹٪ به ۸۱۰٪ افزایش می‌یابد و حساسیت میدان نیز از ۲/۳ به ۳/۰۱ بر اورستد می‌رسد و در نتیجه افزایش ۲٦ درصدی امپدانس مغناطیسی حاصل می‌شود. در تنش کششی طول ۱۰۸/۲۸ مگا پاسکال امپدانس مغناطیسی از ۵۷٤٪ به ۸۰٤٪ می‌رسد و حساسیت از ۲/۱٤ به ۳ بر اورستد افزایش پیدا می‌کند و افزایش ٤۰ درصدی امپدانس مغناطیسی در اثر تنش کششی طولی بوجود می‌آید. در تنش کششی طولی ۱٦۰/۸۷ مگا پاسکال امپدانس مغناطیسی از ۵۵۲٪ به ٦۲۳٪ افزایش پیدا می‌کند و حساسیت میدان از ۲/۰٦ به ۲/۳۲ بر اورستد می‌رسد و افزایش ۱۲ درصدی امپدانس مغناطیسی را داریم و در انتها تنش کششی طولی ۲۰۳/۱۵ مگاپاسکال باعث شده تا امپدانس مغناطیسی از ۷۳۲٪ به ۷۳٤٪ و حساسیت میدان از ۲/۷ به ۲/۸ بر اورستد افزایش یابد.

]





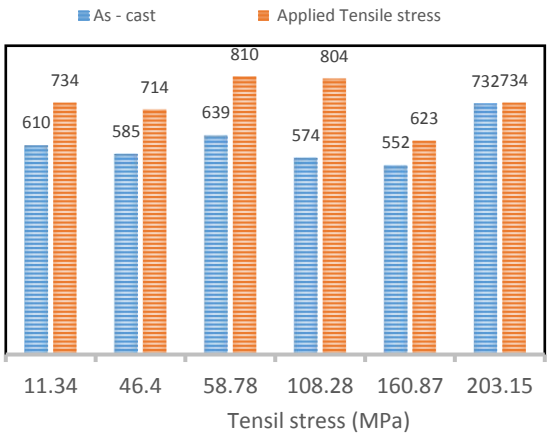




این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد :
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

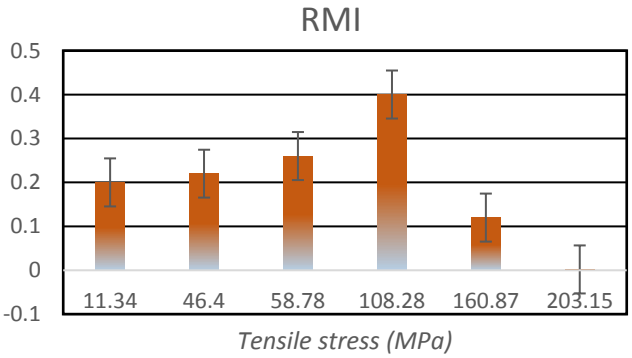
شکل ۲: منحنی امپدانس مغناطیسی نمونه‌ها در تنش‌های کششی طولی مختلف

در شکل ۳ مشاهده می‌شود در تنش کششی طولی ۱۱/۳٤ مگاپاسکال امپدانس مغناطیسی از ٦۱۰٪ به ۷۳٤٪ افزایش می‌یابد و حساسیت میدان نیز از ۲/۲ به ۲/۸ بر اورستد می‌رسد. شکل ٤ نشان از افزایش ۲۰ درصدی امپدانس مغناطیسی در تنش کششی طولی ۱۱/۳٤ مگا پاسکال دارد. در تنش کششی طولی ٤٦/٤ مگا پاسکال امپدانس مغناطیسی از ۵۸۵٪ به ۷۱٤٪ می‌رسد و حساسیت میدان از ۲/۱۸ به ۲/٦۵ بر اورستد افزایش می‌یابد که نشان از افزایش ۲۲ درصدی امپدانس مغناطیسی دارد. در تنش کششی طولی ۵۸/۷۸ مگا پاسکال امپدانس مغناطیسی از ٦۳۹٪ به ۸۱۰٪ افزایش می‌یابد و حساسیت میدان نیز از ۲/۳ به ۳/۰۱ بر اورستد می‌رسد و در نتیجه افزایش ۲٦ درصدی امپدانس مغناطیسی حاصل می‌شود. در تنش کششی طول ۱۰۸/۲۸ مگا پاسکال امپدانس مغناطیسی از ۵۷٤٪ به ۸۰٤٪ می‌رسد و حساسیت از ۲/۱٤ به ۳ بر اورستد افزایش پیدا می‌کند و افزایش ٤۰ درصدی امپدانس مغناطیسی در اثر تنش کششی طولی بوجود می‌آید. در تنش کششی طولی ۱٦۰/۸۷ مگا پاسکال امپدانس مغناطیسی از ۵۵۲٪ به ٦۲۳٪ افزایش پیدا می‌کند و حساسیت میدان از ۲/۰٦ به ۲/۳۲ بر اورستد می‌رسد و افزایش ۱۲ در صدی امپدانس مغناطیسی را داریم و در انتها تنش کششی طولی ۲۰۳/۱۵ مگاپاسکال باعث شده تا امپدانس مغناطیسی از ۷۳۲٪ به ۷۳٤٪ و حساسیت میدان از ۲/۷ به ۲/۸ بر اورستد افزایش یابد. بیشترین افزایش امپدانس مغناطیسی مربوط به تنش کششی طولی ۱۰۸/۲۸ مگا پاسکال می‌باشد که امپدانس مغناطیسی به میزان ٤۰ درصد افزایش یافته است. حساسیت میدان نیز تحت این تنش ۳۵ درصد افزایش داشته است.



شکل ۳: مقایسه بیشینه امپدانس مغناطیسی نمونه‌ها در فشارهای مختلف

با توجه به شکل ٤ مشاهده می‌شود از تنش کششی طولی ۱۱/۳٤ مگا پاسکال تا ۱۰۸/۲۸ مگا پاسکال، مقدار امپدانس مغناطیسی نسبی روند صعودی دارد اما پس از آن تاثیر تنش کششی طولی بر روی امپدانس مغناطیسی کمتر می‌شود. به طور کلی هنگامی که تنش کششی طولی به نمونه اعمال می‌شود دیواره ها رافزایش می‌یابد و با افزایش انرژی دیواره ها تنش کششی طولی موجب بازآرایی ممان‌ها و حوزه‌ها می‌شود و در نتیجه امپدانس مغناطیسی نیز افزایش می‌یابد [٤].



شکل ٤: مقایسه بیشینه امپدانس مغناطیسی نمونه ها در تنش‌های کششی طولی مختلف

نتایج

در این آزمایش نتیجه گیری شد که تنش کششی طولی باعث بهبود امپدانس مغناطیسی و حساسیت می‌گردد زیرا تنش، باعث گونه ای باز آرایی در حوزه های مغناطیسی می‌شود . بیشترین بهبود امپدانس مغناطیسی میکرو وایرها در این آزمایش به ازای فشار ۱۰۸/۲۸ مگا پاسکال رخ داد که بیش از ٤۰ در صد امپدانس مغناطیسی افزایش پیدا کرد. همچنین بیشترین حساسیت میدان نیز تحت این فشار ۳۵ درصد افزایش یافت. در نتیجه تنش کششی طولی راهی مناسب برای افزایش حساسیت حسگر های مغناطیسی می‌باشد.

مرجع‌ها

[۱] موسوی، سید روح الله؛ «*پایان نامه کارشناسی ارشد*»؛ دانشگاه کاشان، گروه نانو فیزیک، تابستان۱۳۹۸.

[2] J . M . D .Coey "Magnetism and magnetic materials " Cambridge University Press, New York (2009)

[3] A.C. Mishra, T. Sahoo, V. Srinivas and A.K. Thakur. *Physica B.* **406** (2011) 645

[4] Dadsetan.A, **Thesis** "*Magnetoimpedance and Field Sensitivity of CoFeSiB Amorphous Ribbons*", University of Kashan (2015)

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

طیف‌سنجی به روش پس پراکندگی رادرفورد با استفاده از الکترونیک هسته‌ای دیجیتال

بیگانه، علی؛ رفیع خیری، حسین

سازمان انرژی اتمی ایران، پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، پژوهشکده فیزیک و شتابگرها

چکیده

در این مقاله سیستم اکتساب داده برای انجام آزمایش پس پراکندگی رادرفورد به صورت دیجیتال ارائه شده است. این سیستم بر اساس یک دیجیتایزر شکل دهنده موج پایه ریزی شده است که به صورت مستقیم از پیش تقویت کننده آشکارساز نمونه برداری می‌کند و فرآیند شکل دهی به سیگنال به صورت نرم افزاری انجام می‌شود. سیستم طیف‌سنجی دیجیتال با نمونه آنالوگ مقایسه شده است و مزیت‌های آن از دیدگاه روش آنالیز پس پراکندگی رادرفورد مورد بحث قرار گرفته است. نتایج نشان می‌دهد که سیستم طیف‌سنجی دیجیتال با بهره‌گیری از فیلتر ذوزنقه‌ای به جای فیلتر گاوسی در پردازش دیجیتال می‌تواند مقدار قدرت تفکیک انرژی سیستم طیف سنجی را درحدود ۲۵ درصد بهبود دهد.

واژه‌های کلیدی: *طیف سنجی پس پراکندگی رادرفورد، پردازش دیجیتال سیگنال، دیجیتایزرشکل دهنده موج.*

Rutherford Backscattering Spectroscopy using digital nuclear electronics

Biganeh, Ali; Rafi-Kheiri, Hossein

Atomic Energy Organization of Iran, Nuclear Science and technology research institute, Physics and Accelerators Research School

Abstract

In this paper, the digitization of the data acquisition system for Rutherford Backscattering Spectroscopy (RBS) is presented. The system is established based on a waveform digitizer which directly samples at the preamplifier output of the detector and the pulse shaping is done by software. The digital spectroscopy is compared with its analog counterpart. The advantages of using the digital system are discussed from the RBS point of view. The results show that the digital system using the trapezoidal filter instead of Gaussian filter can improve the detector energy resolution up to %25.

***Keywords**: Rutherford Backscattering Spectroscopy, Digital Signal Processing, Waveform Digitizer.*
PACS No:28

مقدمه

تکنیک طیف‌سنجی به روش پس پراکندگی رادرفورد (RBS[1]) یکی از روش‌های آنالیز غیر مخرب با باریکه یونی است که نخستین بار در سال ۱۹۵۷ توسط رابین[2] و همکارانش توصیف شد[۱]. در این روش، نمونه مورد نظر با استفاده از باریکه یونی بمباران می‌شود و طیف انرژی ذرات پس پراکنده شده با استفاده از یک آشکارساز ذره باردار ثبت می شود. آنالیز RBS امکان تعیین کمی ترکیبات ماده، ضخامت سنجی لایه نازک و تعیین نمایه عمقی عناصر سنگین در ماتریس سبک از نمونه را فراهم می‌آورد. کاربردهای نوین این روش در مطالعه ساختار لایه‌های نازک در مرجع [۲] ارائه شده است. در روش RBS عمدتا از یک آشکارساز سد سطحی سیلیکونی برای اندازه‌گیری انرژی ذرات پس پراکنده شده استفاده می‌شود. قدرت تفکیک انرژی این آشکارساز نقش مهمی در صحت نتایج روش RBS ایفا می‌کند. سیستم اکتساب داده در روش RBS عمدتا متکی بر استفاده از الکترونیک هسته‌ای آنالوگ است. این در حالی است که سیستم‌های الکترونیک هسته‌ای آنالوگ عمدتا تحت تاثیر عواملی مثل نوفه‌های کاتوره‌ای و تغییرات دمای محیط قرار می‌گیرند

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

و عملکرد سیستم اندازه‌گیری را با خطا مواجه می‌کنند. در سال‌های اخیر توسعه و استفاده از تبدیلگرهای آنالوگ به دیجیتال، مدارهای مجتمع برنامه‌پذیر و پردازشگرهای دیجیتال، عملکرد سیستم‌های اندازه‌گیری را تا حد زیادی بهبود بخشیده‌اند. در این مقاله، سیستم اکتساب داده برای انجام آنالیز به روش RBS به صورت دیجیتال ارائه شده است.

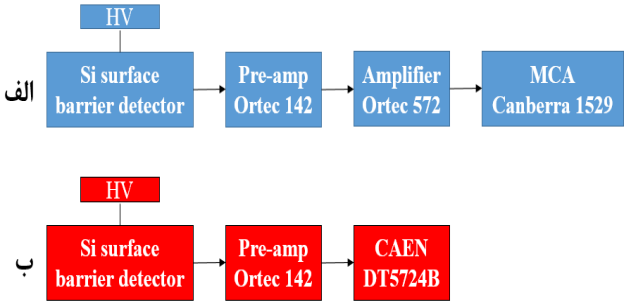
مبانی نظری

چیدمان الکترونیک هسته‌ای آنالوگ و دیجیتال برای انجام آنالیز RBS در شکل ۱ نشان داده شده است. چیدمان آنالوگ شامل آشکارساز سد سطحی، پیش تقویت کننده، تقویت کننده و تحلیلگر بس کاناله است. در سیستم دیجیتال، تقویت کننده و تحلیلگر بس کاناله حذف و یک دیجیتایزر ۱٤ بیتی (CAEN DT5724) به صورت مستقیم از پیش تقویت کننده با فرکانس MHz ۱۰۰ نمونه برداری می‌کند. در این چیدمان، تبدیلگر آنالوگ به دیجیتال اولین مدار بعد از پیش‌تقویت کننده است. این تبدیلگر دارای ۱٦۳۸٤ کانال برای ثبت ارتفاع سیگنال است و در مقایسه با تحلیلگر چندکاناله با ۲۰٤۸ کانال در سیستم آنالوگ، امکان دست‌یابی به پهنای کانال کمتر را فراهم می‌کند. شکل خام موج ثبت شده در این مدار تبدیلگر آنالوگ به دیجیتال، با استفاده از سفت افزار دیجیتایزر (DPP-PHA[۳]) به یک سیگنال تبدیل می‌شود[۳]. پایش سیگنال‌ها در دیجیتایزر در شکل۲ نمایش داده شده است. در مرحله بعد، این سیگنال با استفاده از یک الگوریتم بازگشتی به یک سیگنال ذوزنقه‌ای (شکل ۲-ج) تبدیل می‌شود که ارتفاع این سیگنال متناسب با انرژی ذره است. از آن‌جا که در فرآیند شکل‌دهی به سیگنال، خروجی پیش‌تقویت‌کننده به سرعت به عدد تبدیل می‌شود، این سیگنال دستخوش نوفه‌های الکترونیک هسته‌ای آنالوگ نخواهد شد و ناپایداری آن به شدت کاهش می‌یابد. فرآیند بهینه‌سازی شکل پالس با استفاده از فیلتر ذوزنقه‌ای و به صورت ریاضیاتی انجام می‌شود. مزایای استفاده از فیلتر ذوزنقه‌ای در مقایسه با فیلترهای مثلثی و گاوسی به صورت تحلیلی در مرجع [٤] ارائه شده است. قدرت تفکیک انرژی یک آشکارساز به ویژه در نرخ‌های شمارش زیاد، عمدتا تحت تاثیر مدت زمان جمع آوری بار در داخل آشکارساز قرار می‌گیرد. حساسیت روش پردازش سیگنال به تغییرات زمان جمع‌آوری پالس در داخل آشکارساز، تاثیر زیادی بر قدرت تفکیک انرژی قله تابش دارد. کسر بالستیک و جمع‌آوری ناقص بار در آشکارساز، به ویژه هنگامی که زمان شکل‌دهی به پالس کمتر ازμs ۲ باشد، سبب افزایش قدرت تفکیک انرژی می‌شوند. هدف از تصحیح اثر کسر بالستیک، کاهش حساسیت سیگنال به تغییرات در زمان خیزش پالس است. در پردازش دیجیتال سیگنال، همان‌گونه که در شکل۲-ب نشان داده شده‌است، از فیلتر ذوزنقه‌ای به جای فیلتر گاوسی برای تعیین ارتفاع سیگنال استفاده می‌شود. در این حالت، تعیین مقدار دقیق ارتفاع پالس بر روی ناحیه‌ی تخت بالایی از سیگنال ذوزنقه‌ای (شکل ۲-د) انجام می‌شود. در این ناحیه، ارتفاع سیگنال مستقل از افت و خیز زمان جمع‌آوری بار در داخل آشکارساز است و بنابراین اثر کسر بالستیک بر قدرت تفکیک انرژی تا حد زیادی حذف می‌شود. در طول زمان شکل‌گیری سیگنال ذوزنقه‌ای (دو برابر زمان خیزش سیگنال ذوزنقه‌ای بعلاوه زمان ناحیه تخت) در صورتی که رویداد دیگری مدار را تریگ کند، مدار حذف انباشتگی[٤] این رویداد را تشخیص می‌دهد و از ثبت آن بر روی طیف انرژی جلوگیری می‌کند. با این حال، رویداد دوم می‌تواند به عنوان رویداد انباشتگی شمارش و در زمان مرده سیستم محاسبه شود. این ویژگی در سیستم‌های الکترونیک آنالوگ در دسترس نیست. در صورتی که دو رویداد در فاصله زمانی کمتر از زمان خیزش سیگنال وارد سیستم پردازش دیجیتال شوند، مدار حذف کننده نمی‌تواند این دو رویداد را از یکدیگر تشخیص دهد. در این حالت، رویدادهای انباشتگی بر روی طیف ثبت می‌شوند. برای جلوگیری از ثبت این رویدادها می‌توان از تکنیک قطع تریگر استفاده کرد. در این تکنیک پس از تریگ اولین سیگنال و تا پایان زمان پردازش آن، هیچ سیگنال دیگری نمی‌تواند مدار را تریگ کند. هنگامی که زمان پردازش سیگنال به اتمام می‌رسد، خط پایه همان‌گونه که در شکل (۲-ی) نشان داده شده است، با استفاده از یک پنجره متحرک با

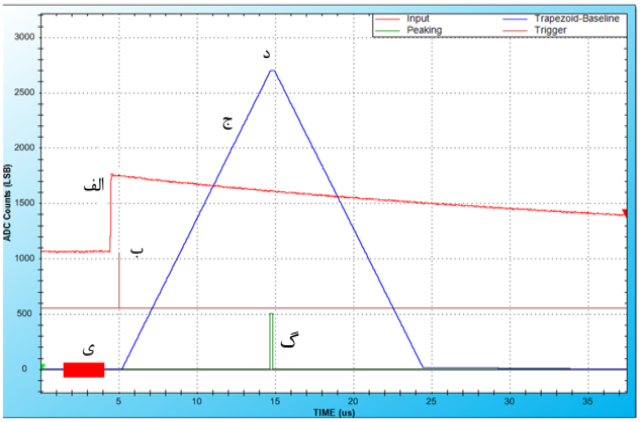
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

میانگین‌گیری از N رویداد سطح خط پایه را ارزیابی می‌کند. در نهایت، دامنه بین خط پایه و زمان ثبت ارتفاع سیگنال (شکل ۲-گ)، به عنوان دامنه سیگنال در نظر گرفته می‌شود.

اگرچه سیستم الکترونیک هسته‌ای دیجیتال در مقایسه با آنالوگ مزیت‌های بالقوه‌ای دارد، استفاده از آن در طیف‌سنجی با استفاده از آشکارسازهای سد سطحی توسعه چندانی نیافته است. در بخش بعدی، عملکرد سیستم ارئه شده در پشتیبانی از آزمایش RBS مورد آزمایش قرار گرفته است.



شکل۱: الکترونیک هسته‌ای آنالیز به روش RBS. الف)چیدمان آنالوگ و ب) چیدمان دیجیتال.



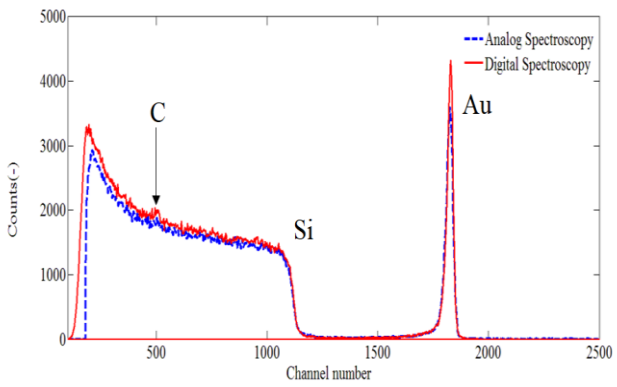
شکل۲: پایش پردازش دیجیتال سیگنال: الف)سیگنال پیش‌تقویت کننده، ب)سطح تریگر، ج)زمان اندازه‌گیری ارتفاع سیگنال، د)زمان ناحیه تخت، گ) زمان نمونه برداری از ارتفاع سیگنال، ی)پنجره متحرک برای تعیین خط پایه.

روش انجام آزمایش

تکنیک پس پراکندگی رادرفورد با استفاده از هر دو تکنیک آنالوگ و دیجیتال انجام شده است. در این آزمایش از باریکه هلیم با انرژی ۲ MeV و هدف نازک طلا که بر زیرلایه سیلیکونی لایه نشانی شده است، استفاده شد. آزمایش‌ها بر روی خط باریکه ۱۵ درجه راست آزمایشگاه واندوگراف تهران انجام شد. آشکارساز سد سطحی سیلیکونی (BU-014-100-300) در زاویه ۱۶۵درجه نسبت به باریکه فرودی قرار گرفته است. در طول آزمایش، باریکه هلیم با ابعاد $1/5\times1/5\ mm^2$ با حداکثر جریان۵nA بر روی نمونه قرار گرفت. در این شرایط زمان مرده سیستم اندازه‌گیری آنالوگ و دیجیتال کمتر از ۱۰ درصد است.

بحث در نتایج

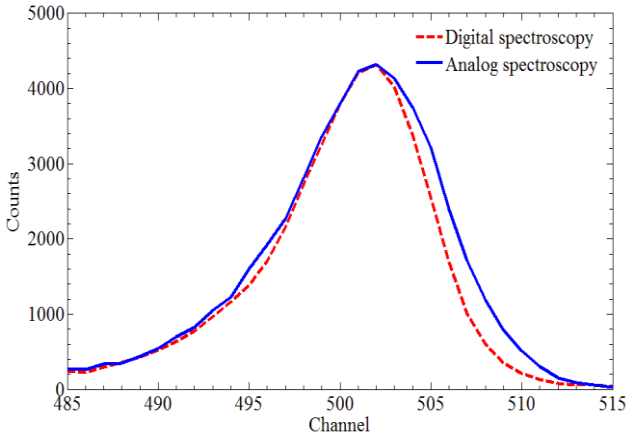
طیف پس پراکندگی کشسان برای نمونه Au-Si در دو چیدمان آنالوگ ودیجیتال در شکل ۳ نشان داده شده است. اندازه‌گیری قدرت تفکیک انرژی در قله انرژی مربوط به Au نشان می‌دهد که قدرت تفکیک انرژی در چیدمان دیجیتال در حدود ۲۵ درصد نسبت به چیدمان آنالوگ بهبود یافته است. این پیشرفت از دیدگاه تکنیک RBS بسیار مهم است. همان‌گونه که در شکل ۳ نشان داده شده ، بهبود قدرت تفکیک انرژی در سیستم طیف سنجی دیجیتال منجر به ظاهر شدن قله کربن سطحی در طیف شده است. این قله به علت آلودگی‌های محیطی و یا شکستن ترکیبات هیدروکربنی موجود در محفظه خلا در اثر برخورد باریکه ایجاد می‌شود. این در حالی است که در سیستم آنالوگ این قله تشخیص داده نشده است. بنابراین، در این مورد مطالعاتی استفاده از الکترونیک هسته‌ای دیجیتال سبب بهبود حد پایین تشخیص عنصر سبک کربن در بستر سنگین سیلسیوم شده است.



شکل۳: طیف پس پراکندگی کشسان هلیم MeV۲ از نمونه Au-Si

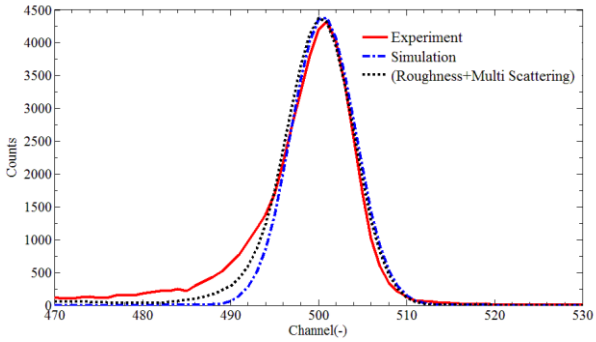
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

در شکل ٤ تقارن قله انرژی مربوط به عنصر Au در دو پیکربندی آنالوگ و دیجیتال با یکدیگر مقایسه شده‌اند. برای انجام این مقایسه، هر دو طیف به تعداد کل شمارش‌ها در قله انرژی بهنجار شده‌اند. همان‌گونه که در شکل ٤ نشان داده شده است، این قله دارای یک دنباله در لبه کم انرژی طیف است. منشا این لبه کم انرژی از لحاظ الکترونیک هسته‌ای وجود اثر کسر بالستیک و جمع آوری ناقص بار در داخل آشکارساز است. اگرچه جمع آوری ناقص بار در داخل آشکارساز کاملا اجتناب ناپذیر است، با تنظیم دقیق ناحیه تخت از فیلتر ذوزنقه‌ای (شکل ۲-د)، اثر کسر بالستیک تا حد زیادی در سیستم دیجیتال کنترل شده است و طیف ثبت شده با استفاده از این سیستم تقارن بیشتری از خود نشان داده است.



شکل٤: مقایسه تقارن قله انرژی مربوط به Au در دو پیکربندی آنالوگ و دیجیتال.

شبیه‌سازی طیف پراکندگی کشسان از نمونه Au-Si با استفاده از نرم افزار SIMNRA انجام شده است[۵]. در شکل ۵ طیف شبیه سازی شده با طیف تجربی ثبت شده برای قله Au در سیستم دیجیتال مقایسه شده‌اند. با استفاده از این شبیه سازی ضخامت لایه طلا nm ۵/۰٤±۰/۲۷ تعیین شد. با توجه به شکل طیف شبیه‌سازی شده دنباله کمتری نسبت به طیف تجربی نشان داده است. با این حال، با در نظر گرفتن اثرات زبری سطح و زیر لایه نمونه و پراکندگی‌های چندگانه در نرم افزار SIMNRA، دنباله کم انرژی طیف شبیه‌سازی شده با طیف تجربی مطابقت بیشتری پیدا می‌کند.



شکل۵: شبیه‌سازی قله پس پراکندگی کشسان Au با استفاده از نرم افزار SIMNRA.

نتیجه گیری

در این مقاله سیستم طیف‌سنجی پس‌پراکندگی رادرفورد براساس پردازش دیجیتال سیگنال با استفاده از نرم افزار طراحی شده است. این سیستم از ایجاد هرگونه تغییر بر روی سیگنال پس از انتقال آن به تبدیلگر آنالوگ به دیجیتال جلوگیری می‌کند و از این رو فرآیند شکل دهی به سیگنال، ایمن از همه اثرات مخربی است که در پردازش آنالوگ وجود دارد. مزیت‌های استفاده از این سیستم در مقایسه با نمونه آنالوگ مورد بحث قرارگرفت. عملکرد سیستم ارائه شده برای انجام روش RBS، با آنالیز یک نمونه Au-Si مورد آزمایش قرارگرفت. نتایج نشان داد که استفاده از سیستم دیجیتال در مقایسه با آنالوگ امکان بهبود قدرت تفکیک انرژی تا حدود ۲۵ درصد، بهبود تقارن قله انرژی، حذف موثر اثر کسر بالستیک و پایداری موقعیت قله انرژی را فراهم می‌کند. چیدمان ارائه شده می‌تواند جایگزین مناسبی برای الکترونیک هسته‌ای آنالوگ در روش RBS باشد.

مرجع‌ها

[1] Rubin, Sylvan, T. O. Passell, and L. E. Bailey. "Chemical analysis of surfaces by nuclear methods." Analytical Chemistry 29.5 (1957): 736-743.
[2] J.R. Tesmer and M. Nastasi, Eds. Handbook of Modern Ion Beam Materials Analysis. Materials Research Society, Pittsburgh, Pennsylvania, 1995.
[3] CAEN Electronic Instrumentation "Mc2 analyzer software for digital multi-channel analyzer" user manual, January 11th, 2017.
[4] Jordanov, Valentin T., and Glenn F. Knoll. "Digital synthesis of pulse shapes in real time for high resolution radiation spectroscopy." Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment 345.2 (1994): 337-345.
[5] Mayer, Matej. SIMNRA user's guide. Garching: Max-Planck-Institut für Plasmaphysik, 1997.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بررسی اثر آرگون بر تولید ازون در پلاسمای اکسیژن بوسیله کد ZdPlasKin

میرزایی، سید ایمان[1]؛ برخورداری، علی[2]

[1]گروه فیزیک اتمی و مولکولی دانشگاه تحصیلات تکمیلی و فناوری پیشرفته کرمان

[2]دانشکده فیزیک، دانشگاه شهید باهنر کرمان

چکیده

این مقاله، اثر حضور و عدم حضور آرگون بر پلاسمای اکسیژن بررسی می شود. ساختار الکترودی به گونه ای انتخاب شده است که تخلیه های کرونا و سد دی الکتریک برقرار شوند. از مدل جنبشی و با مدل معادلات نرخ بوسیله کد ZdPlaskin در مدول فورترن شبیه سازی ها انجام می شوند. تعداد 60 واکنش در مدل سازی انتخاب می شوند. اثرات مقادیر 0، 1، 5، ، 10، 15، و 20 درصد آرگون بر پلاسمای اکسیژن مشخص می شوند. تغییرات زمانی گونه های مختلف انتخابی در محیط پلاسما محاسبه می گردد. بیشتر شدن برخوردهای بین ذرات باردار ناشی از حضور آرگون، تولید ازون را افزایش می دهد که البته این افزایش تا حدی است و بعد از آن، افزودن آرگون نه تنها تولید ازون را بیشتر نکرده، حتی سبب کاهش مقدار آن بدون حضور آرگون می شود. بهترین مقدار آرگون برای تولید حداکثری ازون در این شبیه سازی 15 درصد بدست آمده است. به طور خاص، تولید ازون به عنوان موثرترین گونه در فرآیندهای ضدعفونی کننده پلاسمایی، در مقادیر مختلف آرگون مطالعه می گردد.

واژه های کلیدی: *پلاسمای اکسیژن، تولید ازون، مدل جنبشی.*

Study of Adding Argon effect on the Ozone Generation in Oxygen Plasma Discharge Using ZdPlasKin

Mirzaei, Seyed Iman[1]; Barkhordari, Ali [2]

[1]*Atomic and Molecular Physics Department, Graduate University of Advanced Technology, Kerman*

[2]*Faculty of Physics, Shahid Bahonar University of Kerman - Kerman*

Email: i.mirzaei69@gmail.com

Abstract

In this paper, the presence and not presence influences of argon gas on the oxygen plasma discharge is investigated. The corona and dielectric barrier discharges are simultaneously considered by selecting a suitable electrode configuration. By considering the kinetic model and solving the rate equations, the ZdPlaskin code in the Fortran module solver is implemented. Moreover, 10 reactions are chosen. The effects of 0, 1, 5,10 ,15 and 20 percent of argon gas on the oxygen plasma discharge is determined. The time evolutions of the different selected species in the plasma discharge medium is calculated. Ozone are produced by increasing of collisions between charged particles as a result of presence of argon. The more argon contents raise the ozone generation till a threshold and then reduce the ozone production less than its value in absent argon content. The best value of argon for higher ozone generation have been obtained as 15% in this simulation. In the special case, the ozone production is studied as the most effective species in the plasma decontamination processes.

Keywords: *Oxygen plasma, Ozone generation, Kinetic model.*

PACS No. 52

مقدمه

پلاسما به گاز یونیزه‌ای گفته می‌شود که همه یا بخشی قابل توجهی از اتم‌های آن یک یا چند الکترون از دست داده یا گرفته و به یون‌های مثبت و منفی تبدیل شده باشند. در این‌جا از پلاسمای سرد در فشار اتمسفری استفاده می‌شود که دمای آن، دمای اتاق است و در نتیجه کاربرد ساده‌ای در محیط عادی دارد. پلاسما را می‌توان به روش های گوناگون تخلیه الکتریکی تولید کرد[1]. دو روش ایجاد تخلیه الکتریکی، تخلیه سد دی‌الکتریک و تخلیه کروناهستند.

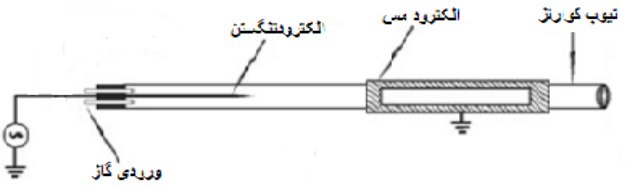
پلاسما را می‌توان در دو مد پیوسته و پالسی تولید کرد. مزیت تولید پلاسما در مد پالسی، جلوگیری از افزایش دماست که معمولا در سیستم رخ می‌دهد. وقتی از ترکیب گاز آرگون- اکسیژن استفاده می‌کنیم، گاز آرگون با برخوردهای بیشتر، منجر به شکستن و یونیزه شدن بهتر اکسیژن و درنتیجه گونه‌های فعال بیشتری تولید می‌شود[2].

از نظر فیزیکی تخلیه کرونا، تخلیه‌ای است که در اثر غیریکنواختی میدان الکتریکی ایجاد می‌شود و از نظر عملی زمانی قابل حصول است که از هندسه نقطه به صفحه استفاده شود. یکی از اشکالاتی که به استفاده از تخلیه تابشی در کاربردهای صنعتی وارد است، فشار پایین عملیاتی می‌باشد و برای اعمال فشار بالاتر بایستی شدت میدان را نیز افزایش داد. در فشارها و میدان‌های الکتریکی بالا تخلیه الکتریکی به شدت ناپایدار بوده و در صورتی‌که منبع تغذیه الکتریکی بتواند جریان کافی موردنیاز را تامین کند، تخلیه به قوس الکترکی با جریان بالا تبدیل می‌شود و رسیدن به شرایط تخلیه الکتریکی در گازها در فشار بالا بدون منتهی شدن به جرقه و مضرات آن، با استفاده از روش‌های گوناگون قابل دسترسی است که تخلیه کرونا یک از این موارد است. تخلیه الکتریکی کرونا در میدان‌های الکتریکی قوی وغیرهمگن با استفاده از شکل و ساختار هندسی ناهمسان الکترودهاست.

تخلیه سد دی‌الکتریک از نظر فیزیکی، تخلیه‌ای است که با افزایش در بارهای سطحی و در نتیجه میدانی قوی‌تر، ایجاد می‌شود و از نظر عملی وقتی می‌توان به آن رسید که حداقل یکی از الکترودها با دی‌الکتریک مناسب پوشیده شده‌باشد. تخلیه سد دی الکتریک یکی از انواع تخلیه الکترکی رایج در کاربردهای پلاسمایی است. در این نوع تخلیه الکتریکی خصوصیات فشار بالای تخلیه کرونا و حجم فعال زیاد تخلیه الکتریکی تابشی هردو وجود دارند. خصوصیت اصلی تخلیه سد دی الکتریک پوشیده شدن حداقل یکی از الکترودها توسط لایه عایق الکتریکی می‌باشد. هنگامی‌که در فضای تخلیه الکتریکی یونیزاسیون رخ دهد ذرات باردار بوجود آمده بر روی لایه دی‌اکتریک تجمع می‌نمایند. میدان الکتریکی بوجود آمده بر اثر این ذرات باردار میدان الکتریکی کلی را تحت تاثیر قرار می‌دهند و در جریان الکتریکی بین الکترودها برای چندنانوثانیه اختلال ایجاد می‌کنند به این ترتیب تخلیه‌های الکتریکی میکرو در محیط پلاسما تولید می‌شوند که باعث قوی‌تر شدن الکترون‌های محیط می‌شوند.[3].

روش مدلسازی

شکل (1) هندسه الکترودی مورد استفاده که ترکیبی از تخلیه های کرونا و سد دی الکتریک ایجاد می کند، را نشان می‌دهد. ابعاد ساختار جهت شبیه سازی به قرار زیر است، الکترود نوک تیز داخلی به قطر $1.6mm$، یک تیوب از جنس کوارتز با ضخامت $2mm$ به طول $30mm$، و الکترود بیرونی با ضخامت $1mm$ و طول $30mm$ است. از منبع تغذیه DC پالسی با حداکثر ولتاژ $5kV$ و حداکثر فرکانس $50kHz$ استفاده می‌شود.



شکل 1 : سیستم فسانه پلاسمای پالسی

در اینجا گاز اکسیژن به عنوان حامل اصلی و گاز آرگون به میزان 1، 5، 10، 15 و 20 درصد به اکسیژن اضافه می گردد. برای انجام شبیه سازی مهمترین و محتمل ترین واکنش های موجود از بین تمام واکنش های موجود انتخاب شده اند. از کد ZdPlaskin جهت بررسی تخلیه پلاسمایی استفاده شده که براساس مدل GlobalKin

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

نوشته شده است. در این روش با حل معادلات نرخ تغییرات زمانی چگالی و دمای گونه های تولید شده در پلاسمای غیرگرمایی بررسی می گردند. این کد جهت بدست آوردن و استفاده از ضرایب نرخ با BOLSIG+ جفت می گردد.

معادلات استفاده شده در این کد به قرار زیر هستند[4]:

$$\frac{dN_i}{dt} = \sum_{j=1}^{j_{max}} Q_{i,j}(t) \quad (1)$$

$$A + bB[+\delta\epsilon] \rightarrow a'A + eC[+\delta\epsilon] \quad (2)$$

$$R_j = K_j[A]^a[B]^b \quad (3)$$

$$Q_A = (a' - a)R, Q_R = -bR, Q_C = cR \quad (4)$$

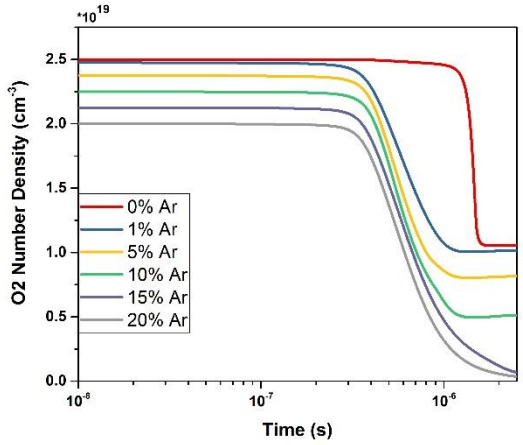
که N_i چگالی گونه iام و $Q_{i,j}$ جملات منبع متناظر با سهم فرآیندهای درنظر گرفته شده است. این معادلات و ساختار درنظر گرفته شده در یک مدول فورترن حل می شوند. گام زمانی در این حل، 10^{-15} ثانیه لحاظ شده است.

تحلیل نتایج

ازون یکی از ترکیبات ناپایدار اکسیژن بوده و به دلیل طول عمر کم سریعا به ملکول اکسیژن O_2 و اتم اکسیژن O تجزیه می گردد. اتم اکسیژن یکی از رادیکال های آزاد است که واکنش پذیری بالایی دارد[5]. ترکیبات اکسیدان و رادیکال‌های آزاد به علت فعالیت بالا و ناپایداری، واکنش پذیری زیادی دارند و قادر به برهمکنش با دی ان ای میکروارگانیسم ها و ایجاد تنش اکسیداتیو در آن‌ها گردند. در نتیجه این واکنش‌ها، در عملکرد این سلول‌های زنده اختلال ایجاد خواهد شد و چنانچه این آسیب شدید باشد منتهی به مرگ سلول‌های مذکور می‌شود[6].

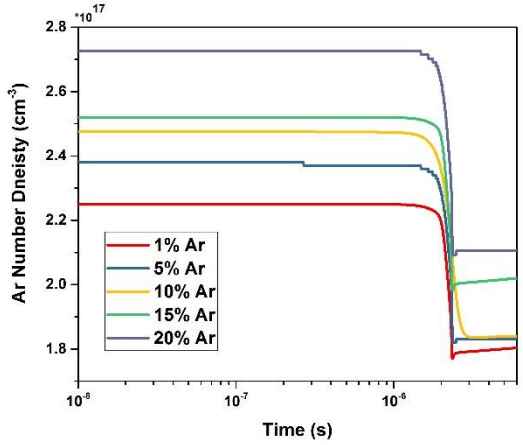
در این پژوهش، تخلیه الکتریکی در اکسیژن خالص و در حضور 1، 5، 10، 15 و 20 درصد آرگون ایجاد شده و تغییرات گونه های مهم انتخابی برحسب زمان بررسی شده است.

همان طور که از شکل 1 مشخص است میزان تجزیه ملکول اکسیژن با افزوده شده آرگون افزایش می یابد. افزوده شدن آرگون به محیط تخلیه الکتریکی می تواند برخوردها یونیزه کننده را افزایش داده و منجر به تجزیه بهتر ملکول اکسیژن گردد.



شکل 1- تغییرات زمانی چگالی اکسیژن در مقادیر مختلف آرگون.

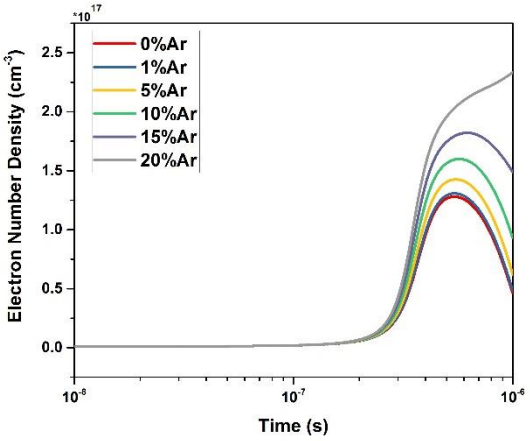
در شکل 2، تغییرات زمانی چگالی اتم آرگون در مقادیر مختلف نمایش داده شده است. با افزایش مقدار آرگون در محیط تخلیه الکتریکی، میزان تجزیه آن نیز بیشتر می گردد.



شکل 2- تغییرات زمانی چگالی آرگون در مقادیر مختلف آرگون.

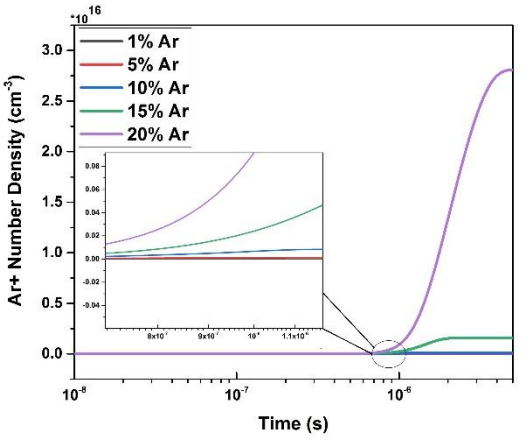
تغییرات زمانی چگالی الکترون در شکل 3 نشان داده شده است. مشخص است با افزایش مقدار آرگون، به دلیل افزایش برخوردها در محیط تخلیه الکتریکی، یونش بیشتر شده و تعداد الکترون ها در محیط افزایش می یابد.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



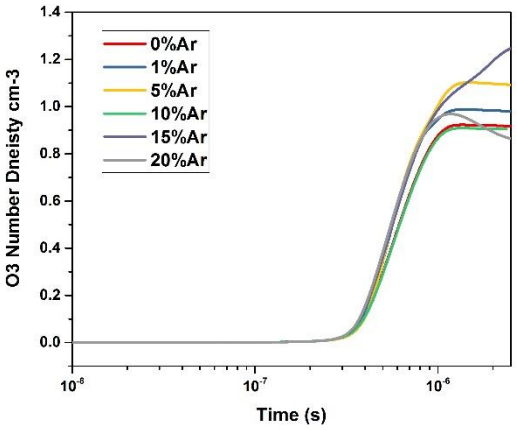
شکل 3- تغییرات زمانی چگالی الکترون در مقادیر مختلف آرگون.

متناظر با افزایش آرگون در محیط، با توجه به اینکه مقدار بیشتری از این گاز تحت تاثیر میدان الکتریکی قرار می گیرد، اتم های بیشتری از آرگون یونیزه شده و یون آرگون در محیط افزایش می یابد. این موضوع در شکل 4 مشخص است.



شکل 4- تغییرات زمانی چگالی یون آرگون در مقادیر مختلف آرگون.

در نهایت، تغییرات زمانی چگالی ازون تولید شده در سیستم تخلیه الکتریکی درنظرگرفته شده، با مقادیر مختلف آرگون در شکل 5 نمایش داده شده است. همان طور که دیده می شود، چگالی ازون در حضور آرگون، نسبت به عدم حضور آن در محیط تخلیه، افزایش محسوسی دارد. وقتی اتم آرگون به محیط افزوده و مقدار آن در محیط بیشتر می شود، به دلیل بیشتر شدن برخوردها تعداد الکترون بیشتری تولید می گردد. در اینجا واکنش های الکترونی نقش زیادی در فرآیندهای یونش و شکست ملکول ها و در نتیجه تولید گونه های ترکیبی مانند ازون ایفا می کنند. از طرفی، همان طور که از شکل 5 پیداست، افزایش آرگون تا حدی باعث افزایش مقدار ازون تولید شده در پلاسمای اکسیژن می شود. در واقع، بهترین مقدار ازون در حالتی بدست آمده است که مقدار آرگون اضافه شده به پلاسمای اکسیژن 15 درصد است و در مقادیر بالاتر، مقدار ازون حتی از مقدار اولیه تولیده شده نیز کمتر می گردد. جهت نشان دادن این موضوع و مقایسه آن، نمودار تغییرات مقدار ازون تولید شده در حضور 20 درصدی آرگون نیز در شکل 5 رسم شده است.



شکل 5- تغییرات زمانی چگالی ازون در مقادیر مختلف آرگون.

نتیجه گیری

در این مقاله، با شبیه سازی انجام گرفته براساس مدل جنبشی، اثر افزودن آرگون بر تولید ازون، به عنوان گونه ای با ارزش در فرآیندهای ضدعفونی کننده پلاسمایی، بررسی و با تخلیه اکتریکی در اکسیژن خالص مقایسه شده است. این مدل، با کد ZdPlaskin و استفاده از مدول فورترن پیاده سازی شد. مشخص گردید ملکول اکسیژن در حضور آرگون بهتر شکسته شده و میزان ازون بیشتری نسبت به عدم حضور آرگون در محیط تخلیه ایجاد می کند. افزایش آرگون تا حدی منجر به تولید بیشتر ازون می گردد و بعد از آن میزان تولید ازون را کمتر می کند. مقدار بهینه برای تولید حداکثری ازون در این شبیه سازی، در حضور 15 درصد آرگون بدست آمد.

مرجع ها

[1] C. Tendero, Ch. Tixier, P. Tristant, J. Desmaison, Ph. Leprince, "Atmospheric pressure plasmas: A review", *Spectrochimica Acta* Part B **61** (2006) **2 – 30**.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

[2] R. Pothiraja, N. Bibinov, P. Awakowicz, "Pulsed corona plasma source characterization for film deposition on the inner surface of tubes", *J. Phys. D: Appl. Phys*. **43** (2010).
[3] K.D. Weltmann, J. Winter, M. Polak, J. Ehlbeck, Th. Woedtke, "Atmospheric Pressure Plasmas for Decontamination of Complex Medical Devices", *NATO Science for Peace and Security Series A: Chemistry and Biology*, *Springer*, (2012).
[4] S. Pancheshnyi, B. Eismann, G.J.M. Hagelaar, L.C. Pitchford, Computer code ZDPlasKin, http://www.zdplaskin.laplace.univ-tlse.fr
[5] J. M. Mate, F. M. Sanchez-Jimenez, "Role of reactive oxygen species in apoptosis: implications for cancer therapy", *The International Journal of Biochemistry & Cell Biology* **32** (2000) **157-170**.
[6] M. Repetto, J. Semprine, A. Boveris, "Lipid Peroxidation: Chemical Mechanism,Biological Implications and Analytical Determination", *InTech*, (2012).

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بررسی تاثیر نقص تهی جای در افزایش مقاومت مغناطیسی یک شبکه دوبعدی

قدس بین جهرمی ، مهسا[۱] ؛ حسینی، مهدی[۱]

[۱] دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی شیراز، شیراز، ایران

چکیده

تغییرات بزرگ در مقاومت مغناطیسی یکی از موضوعات بنیادین تحقیقات از اواخر دهه هشتاد میلادی تاکنون بوده است و همچنین یکی از جذاب ترین اکتشافاتی است که توانسته است فیزیک بنیادین و تکنولوژی را به هم پیوند دهد. محاسبه‌ی مقاومت مغناطیسی را می‌توان با استفاده از تقسیم‌بندی محیط به یک شبکه‌ی مقاومتی شامل مقاومت‌های چهار پایانه‌ای عمود بر یک میدان مغناطیسی خارجی انجام داد. در این مقاله با بهره گیری از مدل کلاسیکی شبکه‌ی مقاومتی، تغییرات مقاومت مغناطیسی در موردشبکه‌ی دو بعدی مربعی که دربر دارنده‌ی نقص تهی جای هستند، مورد بررسی قرار می‌گیرند. نتایج نشان می‌دهند که ایجاد نقص در نقاط خاصی از شبکه، می‌تواند باعث ایجاد قله‌های بزرگی در نمودار مقاومت مغناطیسی شود.

واژه های کلیدی: *مقاومت مغناطیسی ، شبکه‌ی مقاومتی، نقص تهی جای.*

The investigation of the vacancy deficiencies effects on increasing the giant magnetoresistance in two dimensional networks

Ghodsbin Jahromi, Mahsa[1]; Hosseini, Mehdi[1]

[1] *Department of Physics, Shiraz University of Technology, shiraz, Iran*

Abstract

Giant magnetoresistance have been one of the basic subjects of researches since the late 1980s, and it is also one of the most fascinating discoveries that has combined fundamental physics and technology. The calculation of magnetoresistance can be done by dividing the system into homogeneous disks with four currents that are perpendicular to an external magnetic field. In this paper the magnetoresistance of a defected conductor investigated by using the classical resistor network model. The results show that deficiencies in the specified points of the network can be lead to large peaks.
***Keywords**: magnetoresistance, resistance network, vacancy defects*

PACS No. 72, 73, 75

مقدمه

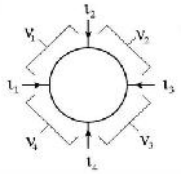
در سال‌های اخیر، بررسی مقاومت مغناطیسی بزرگ در مواد به یکی از جذاب‌ترین موضوعات در علم فیزیک تبدیل شده است[۳-۱]. این اثر منجر به پیشرفت‌های قابل توجهی در عملکرد درایوهای دیسک سخت، حسگرهای میدان مغناطیسی و تراشه‌های حافظه مغناطیسی شده است[۴]. این اثر در سال ۱۹۸۸ توسط البرت فرت و پیتر گرونبرگ در دو تیم جداگانه کشف و به دریافت جایزه نوبل در سال ۲۰۰۷ توسط این دو منتج شد[۵و۶]. این خاصیت در نتیجه‌ی چینش یکی در میان لایه‌های بسیار نازک از مواد فرومغناطیس، که ضخامتی در حد چند نانومتر دارند، و لایه‌هایی از مواد غیر مغناطیسی و قرارگیری آنها در معرض یک میدان مغناطیسی خارجی رخ می‌دهد. در چنین شرایطی شاهد تغییرات چشمگیری در مقاومت الکتریکی این موا د خواهیم بود که علت آن پراکندگی اسپین در فصل مشترک‌هااست[۴]. عوامل بسیاری در مقدار مقاومت مغناطیسی بزرگ سهیم هستند که ضخامت لایه های فاصله و میزان تحرک ذرات حامل جریان را می‌توان از مهمترین آنان دانست. مقاومت مغناطیسی خطی یکی حالت‌های ویژه‌ی مقاومت مغناطیسی است که در بسیاری از سیستم‌های مواد از جمله شبه فلزات، نیمه رساناها با نوار انرژی باریک، گرافن چندلایه و عایق‌های توپولوژیکی دیده می‌شود[۷]. تئوری مقاومت مغناطیسی همچنان در حال تکامل است و دانشمندان بر این باورند که افزایش بی نظمی به شکل های افزودن ناخالصی و یا ایجاد تغییرات در استوکیومتری و ناهمگنی بار در مواد می‌تواند منجر به پیدایش این پدیده در مواد مختلف گردد[۷].

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

دو نظریه مقاومت مغناطیسی کوانتومی و مقاومت مغناطیسی کلاسیک در توجیه این پدیده آمده است. نظریه‌ی کوانتومی دلیل این امر را چگالی پایین و جرم موثر کوچک حامل‌های جریان الکتریکی و قرارگیری آن‌ها در پایین ترین تراز لاندائو می‌داند[۸]. در حالی که در نظریه کلاسیک علت بوجود آمدن مقاومت مغناطیسی خطی، تاثیر نیروی لورنتس در خلاف جهت حرکت الکترون و در نتیجه کاهش رسانایی یک ماده الکترونیکی است[۹و۱۰]. در این مقاله تغییرات مقاومت مغناطیسی در مورد شبکه‌ی دو بعدی مربعی که دربر دارنده‌ی نقص تهی جای است را مورد بررسی قرار می‌دهیم.

تئوری

مدل شبکه مقاومتی یک روش کلاسیک برای بررسی مسائل مربوط به مقاومت مغناطیسی است. این روش علاوه بر سادگی و نداشتن محاسبات پیچیده‌ی کوانتومی، نتایج مدل کوانتومی را به خوبی تصدیق می‌کند. در این مدل ، یک دیسک مدور همگن با چهار ترمینال جریان و چهار اختلاف پتانسیل بین آنها به عنوان واحد مقاومت در نظر گرفته می‌شود.



شکل۱: واحد شبکه مقاومت شامل دیسک همگن رسانا با چهار پایانه جریان و چهار اختلاف پتانسیل بین پایانه‌ها [۹و۱۰].

جریان ها و اختلاف پتانسیل ها از طریق از یک ماتریس آمپدانس ۴×۴ به یکدیگر مرتبط می‌شوند[۹و۱۰].

$$v_i = z_{ij} I_j \quad z = \frac{\rho}{\pi t}\begin{pmatrix} a & b & c & d \\ d & a & b & c \\ c & d & a & b \\ b & c & d & a \end{pmatrix} \qquad (۱)$$

که در آن v_i اختلاف پتانسیل پایانه ها بر حسب ولت، z_{ij} ماتریس امپدانس و I_j جریان بر حسب آمپر می‌باشد. با حرکت در جهت عقربه‌های ساعت اختلاف پتانسیل بین پایانه‌ها مثبت در نظر گرفته می‌شود. ماتریس آمپدانس z برای هر واحد مقاومت با دو پارامتر μ که عامل تحرک حامل بار الکتریکی است و مقدار اسکالر $s=\rho/\pi t$ مشخص می‌شود. همچنین با در نظر گرفتن θ به عنوان زاویه عرضی(در این مقاله $\theta = 0.14 radians$ در نظر گرفته می‌شود) و با تعریف تابع $g(\varphi)$ و در حدی که $\varphi \to 0$:

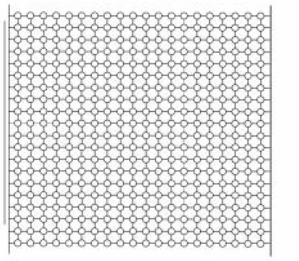
$$g(\theta) = -\frac{1}{\theta}\sum_{k=1}\frac{1}{2k^2}\sin(k\theta)(-1)^k + \frac{1}{\theta}\sum_{k=1}\frac{1}{k^2}2\sin\left(k\frac{\theta}{2}\right) \qquad (۲)$$

عناصر ماتریس آمپدانس را می‌توان به صورت زیر نوشت[۱۰و۱۱] :

$$a = \rho/\pi t\,[-g(\theta)+\pi/4] \qquad b = \rho/\pi t\,[g(\theta)+\pi/4]$$
$$c = \rho/\pi t\,[0.35-\pi/4] \qquad d = \rho/\pi t\,[-0.35-\pi/4] \qquad (۳)$$

با در نظر گرفتن جریان ها به عنوان شرایط مرزی و حل معادله لاپلاس برای پتانسیل الکتریکی یک دیسک همگن ضرایب z_{ij} محاسبه خواهند شد.

در این مقاله یک شبکه ۲۰×۲۰ که دارای نقص تهی جای در نقاط مختلف است را مورد بررسی قرار می‌دهیم.



شکل۲: نمونه‌ای از شبکه مقاومتی۲۰×۲۰

در این شبکه پایانه‌های سمت چپ به زمین و پایانه‌های سمت راست به پتانسیل ثابت U متصل است. با محاسبه‌ی R(H) از طریق رابطه‌ی ۲ و جایگذاری آن در رابطه‌ی ۳، مقاومت مغناطیسی خطی شبکه۲۰×۲۰ مورد بررسی قرار می‌گیرد.

$$R_{20\times20}(H) = U\Big/\sum_i^{20} I_i^L = U\Big/\sum_i^{20}(Z^{LL})_{ij}^{-1}V_j^L \qquad (۴)$$

$$(\Delta R/R) = \left[\left(R(H)-R(0)\right)/R(0)\right] \qquad (۵)$$

در رابطه‌ی ۵ جمع روی جریان‌ها، شامل جریان هایی می‌شود که زمین نشده‌اند. Z^{LL} ماتریس امپدانس کل شبکه و V^L پتانسیل روی لبه‌ی راست شبکه است که مقدار آن ثابت U در نظر گرفته می‌شود. همچنین به منظور بدون بعد سازی میدان مغناطیسی، $B=\mu H$ تعریف می‌شود که در آن B کمیت بدون بعد میدان

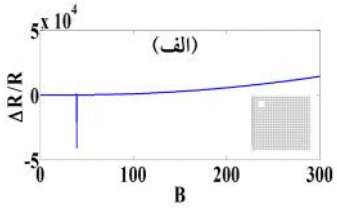
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

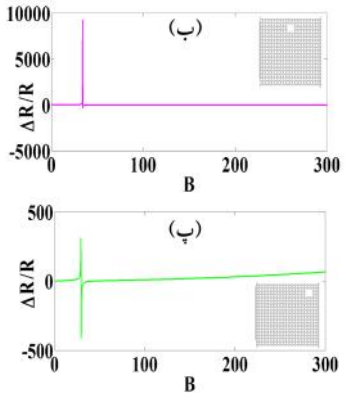
مغناطیسی، μ عامل تحرک حامل بار الکتریکی وH شدت میدان مغناطیسی است[۹و۱۰].

محاسبات و رسم نمودارها با حل عددی معادلات ولتاژ و جریان شبکه ذکر شده در نرم‌افزار متلب انجام شده است.

نتایج

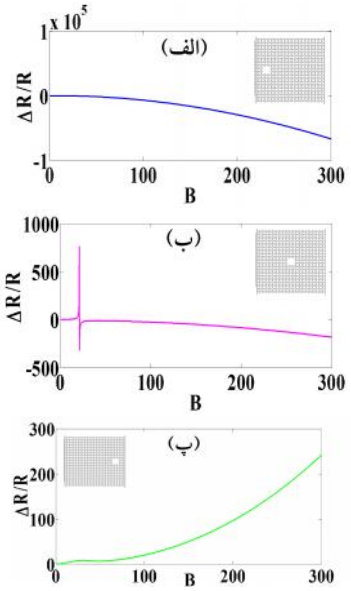
با حل عددی روابط فوق الذکر، نمودارهای مربوط به تغییرات مقاومت مغناطیسی در شبکه‌های مربعی با ابعاد متفاوت مورد مطالعه و بررسی قرار گرفتند. لازم به ذکر است که نتایج بدون حضور نقص تهی جای با نتایج ذکر شده در منابع ۹و۱۰مطابقت کامل داشتند. در این مقاله تغییرات مقاومت مغناطیسی در یک شبکه با ابعاد۲۰×۲۰ و تعداد ۴۰۰ ذره را در اثر ایجاد نقص و برداشتن ۴ ذره با الگوی مربعی بررسی می‌کنیم. شکل۳-الف نشان می‌دهد که با برداشتن چهار ذره از گوشه‌ی سمت چپ بالایی، تقعر نمودار مقاومت مغناطیسی مثبت است و نمودار در میدان حدود ۳۰ واگرا می‌شود یا به عبارتی دیگر در نمودار مقاومت مغناطیسی قله بوجود می‌آید. ایجاد قله در نمودار مقاومت مغناطیسی به جهت بوجود آوردن امکان ساخت حسگرهایی با حساسیت‌های بسیار بالا بسیار حائز اهمیت می‌باشد. شکل ۳-ب و ۳-پ نشان می‌دهند که با جا به جایی مکان نقص تهی جای به وسط و انتهای سطر بالا، مکان قله به سمت میدان‌های کوچکتر جابه‌جا می‌شود و تقعر نمودار مثبت باقی می‌ماند. به علت شرایط مرزی متفاوت در قسمت‌های راست و چپ شبکه، پایانه‌های سمت راست به پتانسیل ثابت U و پایانه‌های سمت چپ به زمین متصل است، رفتار نمودار مقاومت مغناطیسی با حرکت از سمت چپ به سمت راست سیستم متفاوت می‌شود. لازم به ذکر است که تمام نمودار های تغییرات مقاومت مغناطیسی در این شکل‌ها نیز به صورت غیر اشباع هستند که با حالت بدون نقص نیز همخوانی دارد[۹و۱۰].





شکل۳: نمودار مقاومت مغناطیسی یک شبکه با تعداد ۴۰۰ ذره و نقص تهی جای در (الف) سمت چپ، (ب)مرکز و (پ) سمت راست سطر بالا

شکل‌های ۴-الف، ۴-ب و ۴-پ نیز نمایان گر نمودار تغییرات مقاومت مغناطیسی در اثر ایجاد نقص تهی جای به ترتیب در قسمت های سمت چپ، مرکز و سمت راست سطر میانی شبکه هستند.

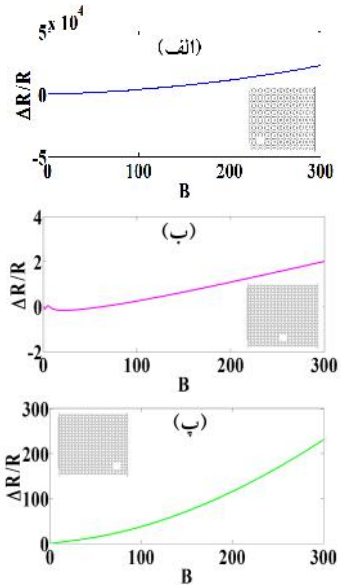


شکل۴: نمودار مقاومت مغناطیسی در اثر ایجاد نقص در شبکه‌ی ۲۰×۲۰ و قسمت‌های (الف) سمت چپ، (ب)مرکز و (پ) سمت راست سطر میانی

تقعر نمودار برای قسمت سمت چپ و مرکز سطر منفی است اما با نزدیک شدن به سمت راست شبکه تقعر نمودار بصورت مثبت در می‌آید و همگی بصورت غیراشباع می‌باشند. ایجاد نقص در سطر میانی، موجب بروز تغییرات مقاومت شده در حالی‌که نقص در ابتدا و انتها نمی‌تواند باعث واگرایی نمودار مقاومت مغناطیسی شود.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

تغییرات مقاومت مغناطیسی برای سطر پایین در شکل ۵ نشان داده شده است. همانطور که مشخص است تقعر نمودار برای هر سه قسمت مثبت است. شکل ۵-الف و شکل۵-پ بیان‌گر آن است در سمت چپ و راست سطر آخر قله‌ای مشاهده نمی‌شود. همچنین قله‌ی بوجود آمده در مرکز سطر نیز بسیار ناچیز است(شکل ۵-ب).



شکل ۵: نمودار ایجاد نقص تهی جای در سطر پایین (الف) سمت چپ، (ب)قسمت مرکزی و (پ) سمت راست و تاثیر آن بر مقاومت مغناطیسی شبکه‌ی ۴۰۰ ذره‌ای

با مقایسه‌ی نمودارهای مقاومت مغناطیسی بصورت ستونی، به این نتیجه می‌رسیم که با حرکت از بالا به پایین در قسمت های مختلف شبکه، واگرایی در نمودار مقاومت مغناطیسی رو به کاهش است. با توجه به اینکه نیروی لورنتس ناشی از میدان مغناطیسی با توجه به جهت جریان و میدان به سمت پایین است و بنابراین جریان هال حاملین بار که الکترون‌ها هستند به سمت پایین است. وجود جریان هال تقارن بالا و پایین شبکه را به هم میزند و باعث می‌شود وجود نقص در بالای شبکه تاثیر بیشتری بر مقاومت مغناطیسی داشته باشد.

نتیجه‌گیری

در این مقاله تغییر مقاومت الکتریکی برای یک شبکه ۲۰×۲۰ دارای نقص، در اثر قرارگیری در میدان مغناطیسی مورد بررسی و مطالعه قرار گرفت. نتایج بیانگر آن است که برای شبکه‌ی دو بعدی مربعی متشکل از ۴۰۰ ذره، به دلیل زوج بودن تعداد سطرها، نمودار مقاومت مغناطیسی بصورت غیراشباع است. همچنین ایجاد نقص در سطرهای بالاتر می‌تواند منجر به ایجاد واگرایی بیشتر شود و با حرکت از قسمت بالا به سمت پایین شبکه، قله‌ها کوچکتر می‌شوند.

منابع:

[1] Z. Guo, S. Park, H.T. Hahn, S. Wei, M. Moldovan, A.B. Karki, and D.P. Young, “Giant magnetoresistance behavior of an iron/carbonized polyurethane nanocomposite”, *Applied physics letters* **90**, No. 5 (2007) 053111.

[2] P. A. Grünberg, “ Nobel Lecture: From spin waves to giant magnetor esistance and beyond”, *Reviews of Modern Physics.* **80**, No.4 (2008) 1531.

[3] Z. Guo, H. T. Hahn, H. Lin, A. B. Karki, and D. P. Young, “Magnetic and magnetoresistance behaviors of particulate iron/vinyl ester resin nanocomposites”, *Journal of Applied Physics* **104**, No.1 (2008) 014314.

[4] E. Y. Tsymbal, and D. G. Pettifor, “Perspectives of giant magnetoresistance. In Solid state physics”, *Academic Press* **56**, (2001) 113-237.

[5] M. N. Baibich, J. M. Broto, A. Fert, F. N. Van Dau, F. Petrof, P. Etienne, and J. Chazelas, “ Giant magnetoresistance of (001) Fe/(001) Cr magnetic superlattices”, *Physical review letters **61***, No. 21 (1988) 2472.

[6] G. Binasch, and P. Grünberg, “F. aurenbach, W. Zinn”, *Physical review B* **39**, No.7 (1989) 4282.

[7] Z. Jia, R. Zhang, Q. Han, Q. Yan, R. Zhu, D. Yu and X. Wu ,"Large tunable linear magnetoresistance in gold nanoparticle decorated graphene", *Applied Physics Letters* **105**, No. 14 (2014) 143103.

[8] Abrikosov A. A., “Quantum linear magnetoresistance, solution of an old mystery”, *Journal of Physics A: Mathematical and General* **36**,No. 35 (2003) 9119–9131.

[9] M. M. Parish and P. B. Littlewood, "Non-saturating magnetoresistance in heavily disordered semiconductors." *Nature* **426**, No. 6963 (2003) 162.

[10] M. M. Parish and P. B. Littlewood, "Classical magnetotransport of inhomogeneous conductors", *Physical Review B* **72**, No. 9 (2005) 094417.

[11] قدس بین جهرمی، مهسا ؛حسینی، مهدی؛ «بررسی تغییرات محل قله مقاومت مغناطیسی و میزان ناهمگنی در شبکه نردبانی افقی »؛ *کنفرانس فیزیک ریاضی ایران* ، قم، دی ۱۳۹۸.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

حذف رنگ از آب آلوده با استفاده از تخلیه پلاسمایی کرونا

میرزائی سید ایمان [1] ؛ گنجویی علیرضا[2]؛ تراز مجید[3] ؛ کریمیان سعید[3] ؛موسی پور فهیمه[1] ؛ جلالی الهام[4]

[1]گروه فیزیک اتمی و مولکولی دانشگاه تحصیلات تکمیلی و فناوری پیشرفته کرمان

[2]مرکز تحقیقات بین المللی علوم وتکنولوژی پیشرفته و علوم محیطی

[3] گروه فیزیک، دانشگاه شهید باهنر کرمان

[4] گروه شیمی، دانشگاه شهید باهنر کرمان

چکیده

گونه های فعال به مقدار قابل توجهی در پلاسمای هوا تولید می شوند. این گونه ها به دلیل واکنش پذیری زیاد قادر به برهمکنش با مواد مختلف و اکسیداسیون آنها هستند. بعلاوه، یکی از چالش های موجود در تصفیه سازی آب های آلوده رنگ های آلی حلال در آب هستند. در این مقاله پارامترهای عملیاتی موثر در حذف یا کاهش رنگ Methyl Blue که محلول در آب است، با تکنولوژی پلاسما بررسی می گردند. از هندسه تک الکترودی برای تولید پلاسمای هوا و اعمال آن بر سطح آب استفاده شده است. به منظور بهینه سازی سیستم پلاسمایی و بدست آوردن شرایط مطلوب،اثر همزمان متغیرهای غلظت، حجم، و زمان بر حذف یا کاهش رنگ حل شده در آب بررسی شده و مقادیر بهینه ی این دو متغیر موثر بدست آمده است. نتایج نشان می دهند که با استفاده از روش پلاسما می توان به میزان 99.9 درصد رنگ محلول در آب را حذف کرد.

واژه های کلیدی: *تخلیه الکتریکی، تصفیه سازی پلاسمایی، رنگ آلی.*

Dye Removal from Wastewater Using Corona Plasma Discharge

Mirzaei ,Seyyed Iman [1] ; Ganjavi , Alireza[2]; Taraz , Majid[3] ; Karimian , Saeed [3]; Moosapour, Fahimeh [1]; Jalali , Elham[4]

[1]*Atomic and Molecular Physics Department of University of Advanced Technology*
[2]*Research Institute for Science and High Technology and Environmental Sciences – Kerman*
[3]*Department of Physics, Shahid Bahonar University of Kerman*
[4]*Department of Chemistry, Shahid Bahonar University of Kerman*
Email: i.mirzaei69@gmail.com

Abstract

Reactive species are widely generated in air plasma. These species can react and oxidize with different materials due to their high reactivity. On the other hand, degradation of organic dye from the wastewater is a challenge in the water treatment process. In this paper, operational parameters of the degradation or elimination of methyl blue organic dye is investigated by cold plasma technology. In order to produce the air plasma and colored water treated by it, one electrode geometry has been used. Moreover, the effects of simultaneous variables, i.e. concentration, volume, and time on the organic dye degradation are studied to obtain the optimize conditions of plasma treatment. The results show that about 99.9% of the colored water is bleached by plasma treatment.

***Keywords**: Electrical discharge, plasma treatment, organic dye.*

PACS No. 52

مقدمه

یکی از خطراتی که محیط زیست را تهدید می نماید رهاسازی آب های آلوده توسط کارنخاجات صنعتی است که بعضا دارای

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

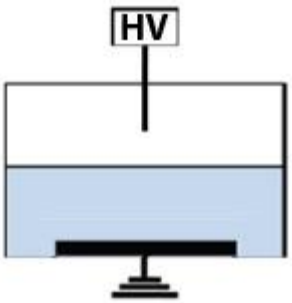
ترکیبات رنگی آلی هستند و حذف این رنگ ها به روش های معمول دارای بازدهی مناسبی نبوده و یا دارای مشکلات جانبی است [1]. بعلاوه، فاضلاب تولید شده در صنعت رنگرزی حاوی مقادیر قابل توجهی آلاینده های آلی است. تخمین زده می شود که سالانه میلیون ها تن رنگ تولید می گردد. مولکول های رنگی، به دلیل وجود اکسوکروم(ترکیب پیوندی محلول در آب) و کروموفورها(ترکیب رنگی) پیچیده و پایدار هستند که سمی، تبخیر شونده و به تجزیه با روش های فیزیکی، شیمیایی و زیستی مقاوم هستند. اخیرا مشخص شده است استفاده از روش پلاسمایی به منظور کاهش یا حذف اینگونه رنگ ها بازدهی مناسبی دارد و عوارض جانبی کمتری ایجاد می نماید. بعلاوه، پژوهش هایی در این زمینه توسط sarangapani در سال 2017، Chen و همکاران در سال 2019، Ghaisani و همکاران در سال 2019 گزارش گردیده است [2-4]. پلاسما به گاز یونیزه‌ای گفته می‌شود که همه یا بخشی قابل توجهی از اتم‌های آن یک یا چند الکترون از دست داده یا گرفته و به یون‌های مثبت و منفی تبدیل شده باشند. در مقایسه با سایر روش ها، روش های اکسیداسیون مبتنی بر پلاسما می توانند به صورت همزمان اثرات فیزیکی و شیمیایی مختلفی همچون میدان الکتریکی، نور ماورابنفش، موج شوک و گونه های فعال و غیره ایجاد کنند. تمامی اینها بدون عوامل شیمیایی اضافی قابل تولید هستند[3]. بعلاوه، پلاسمای غیرحرارتی قادر به تجزیه آلاینده فاضلاب ها در فشار اتمسفر و دمای اتاق با انرژی ورودی کمتر نسبت به پلاسمای حرارتی است[4].

تخلیه پلاسمایی در مایعات و در تماس با آنها را می توان به سه قسمت از جمله تخلیه مستقیم در مایعات، تخلیه در فاز گاز روی یک مایع، و تخلیه در یک محیط چند فازی همچون حباب ها یا کف های درون مایعات تقسیم کرد[4]. برای تخلیه در فاز گاز روی یک مایع، شکست گاز در شکاف بین مایع و صفحه ای با ولتاژ بالا رخ می دهد. بنابراین گونه های فعال پلاسما و الکترون های با انرژی زیاد ایجاد شده و سپس درون مایعات برای واکنش با ترکیب آلی منتقل می شوند. در این وضعیت، بهره پلاسمای غیرحرارتی تولید شده به انتقال جرم بین فاز گاز و مایع وابسته است. بمنظور افزایش بهره سیستم مورد نظر، باید بتوان با ایجاد روش های مناسب گونه های پلاسمایی فعال بیشتری را به آب مایع منتقل کرد.

در این‌جا، به منظور راه اندازی فرآیند اکسیداسیون رنگ آلی محلول در آب، از پلاسمای غیرحرارتی در فشار اتمسفری استفاده می‌شود که دمای آن در حد دمای اتاق است و در نتیجه کاربرد ساده‌ای در محیط عادی دارد. این فرایند، می تواند رنگ های آلی محلول در آب را به مولکول های کوچکتر تبدیل کند که می تواند برای پیش تصفیه فاضلاب مورد استفاده قرار گیرد. پلاسما را می‌توان به روش های گوناگون تخلیه الکتریکی تولید کرد[5-6]. در این پژوهش از روش ایجاد تخلیه الکتریکی کرونا استفاده شده است که با ایجاد میدان الکتریکی غیریکنواخت، توانایی بالایی در یونیزاسیون گاز خنثی دارد. بنابراین در این پژوهش، با استفاده از اثرات برهمکنشی گونه های فعال تولیده شده پلاسمای هوا با رنگ آلی محلول در آب به منظور اکسیداسیون، حذف یا کاهش آن مورد مطالعه قرار می گیرد.

روش آزمایش

هندسه مورد استفاده برای تولید پلاسما نقطه به صفحه است. اکترود توان سوزنی شکل به قطر 3 میلی متر است که نوک آن با زاویه 35 درجه تیز شده و به فاصله 1.5 سانتی متر از سطح آب قرار داده شده و الکترود زمین دایره ای شکل، به شعاع 5cm، در کف ظرف حاوی محلول قرار می گیرد. شکل 1، شماتیک ساختار مورد استفاده را نمایش می دهد.



شکل 1- چیدمان آزمایش.

به منظور مشخص کردن شرایط مطلوب و بهینه حذف رنگ محلول در آب به روش پلاسمایی از نرم افزار DesignExpert11 استفاده

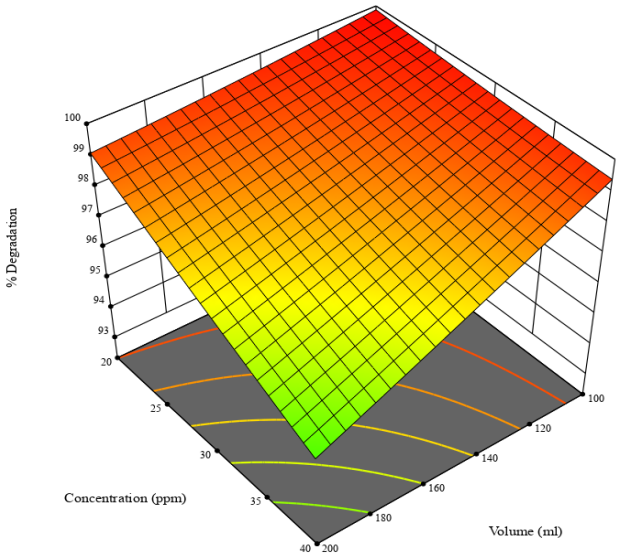
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

می شود. در این نرم افزار، با بهره گیری از روش سطح پاسخ، متغیرهای ورودی فرآیند کاهش یا حذف رنگ از آب، یعنی غلظت ابتدایی با دامنه تغییرات 10ppm تا 50ppm، زمان با دامنه تغییرات 5 تا 25 دقیقه، حجم با دامنه تغییرات 50 تا 250 میلی لیتر، و حذف رنگ به عنوان پاسخ در خروجی فرآیند درنظر گرفته می شوند.

نتایج

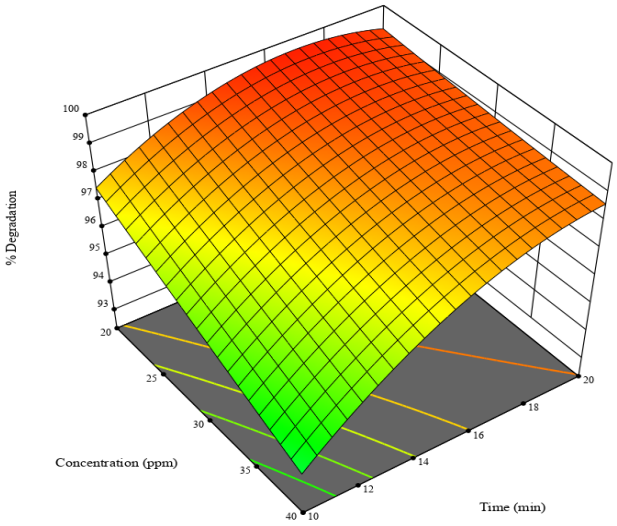
رادیکال‌های آزاد گونه‌هایی هستند (اتم یا مولکول) که یک الکترون جفت نشده در مدار بیرونی خود دارند و بسیار ناپایدار بوده و به سرعت با ترکیبات دیگر واکنش می دهند تا الکترون مورد نیاز خود را بدست آورند و ثبات یابند. گونه‌های رادیکال آزاد شامل گونه‌های فعال اکسیژن مانند OH، O_2^-، H_2O_2،... هستند[7].

در شکل 2، تغییرات حذف رنگ آلی محلول در آب برحسب دو متغیر همزمان غلظت و حجم را نشان می دهد. همانطور که دیده می شود در غلظت 20ppm و حجم 100 میلی لیتر، حذف رنگ به میزان 100% است.



شکل 2: حذف رنگ برحسب دو متغیر همزمان غلظت اولیه و حجم.

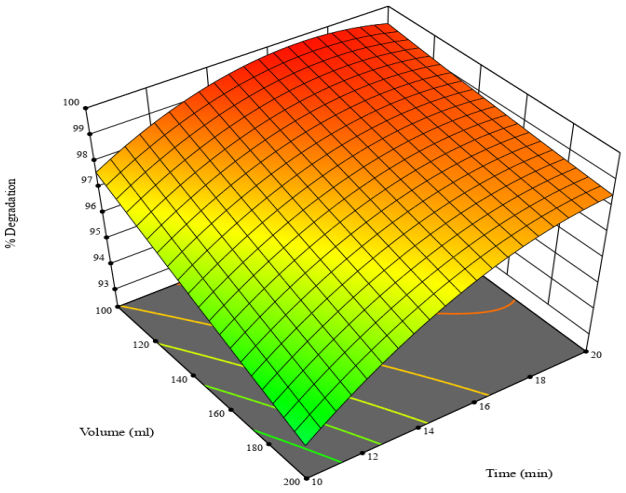
در شکل 3، فرآیند حذف رنگ آلی محلول در آب برحسب دو متغیر همزمان غلظت اولیه و زمان نشان داده شده است. همانطور که می توان دید، در غلظت اولیه 20ppm و پس از زمان 20 دقیقه، رنگ به میزان 99.5% از محلول حذف شده است.



شکل 3:: حذف رنگ برحسب دو متغیر همزمان غلظت اولیه و زمان.

واکنش‌های مربوط به رادیکال‌های آزاد را به سه مرحله می‌توان تقسیم کرد:(1) مرحله شروع: تشکیل رادیکال‌های آزاد از گونه‌های پایدار و یا واکنش رادیکال‌های آزاد با گونه‌های پایدار را شامل می‌شود.(2) مرحله اشاعه: شامل واکنش‌هایی که در آن تعداد رادیکال‌های آزاد یکسان باقی می‌ماند.(3) واکنش پایان: واکنش‌هایی که شامل ترکیب دو رادیکال آزاد برای تشکیل یک گونه باثبات‌تر است و تعداد رادیکال آزاد کاهش می‌یابد [8].

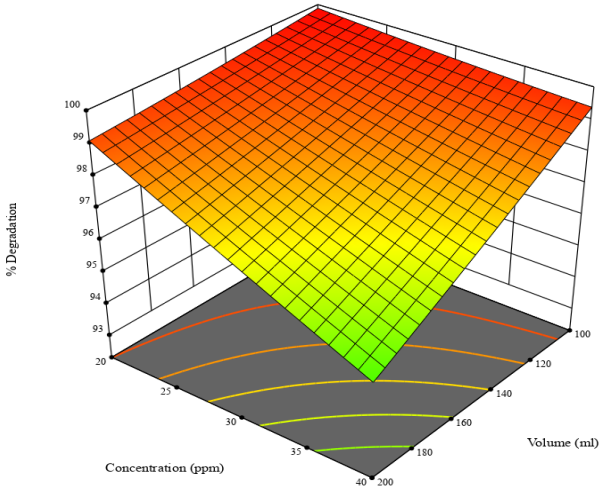
در شکل 4، اثر همزمان دو متغیر حجم و زمان بر فرآیند اکسیداسیون رنگ آلی محلول در آب و حذف آن نمایش داده شده است. مشخص است که بعد از گذشت زمان 20 دقیقه در حجم 100 میلی لیتر، حذف رنگ به میزان 99.8% رخ می دهد.



شکل 4- حذف رنگ برحسب دو متغیر همزمان حجم و زمان.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

اثر همزمان دو متغیر حجم و غلظت اولیه رنگ محلول در آب بر میزان کاهش یا حذف آن در شکل 5 نمایش داده شده است. می توان دید که در حجم 100 میلی لیتر و غلظت 20ppm، حذف رنگ محلول در آب به میزان 100٪ است.



شکل 5: حذف رنگ برحسب دو متغیر همزمان غلظت و حجم.

از آنجایی که ترکیبات اکسیدان و رادیکال‌های آزاد بسیار فعال و ناپایدار هستند، تمایل زیادی به واکنش با مولکول‌های دیگر نظیر رنگ دارند که موجب آسیب اکسیداتیو در آن‌ها می‌گردد. نتیجه این واکنش‌ها منجر به حذف رنگ از محلول و ته نشینی اکسید آن در آب می گردد.

از طرفی این روش‌ها، در مقایسه با روش‌های فیزیکی و شیمیایی موجود، مانند جذب سطحی، انعقاد الکتروشیمیایی و... بسیار موثرتر هستند و حداقل آثار جانبی را در تصفیه سازی آب های آلوده برجا می گذارند[9,10].

نتیجه گیری

در این پژوهش، اثر پلاسمای سرد هوا بر روی آب حاوی رنگ آلی بررسی گردید. از هندسه نقطه–صفحه و تخلیه کرونا جهت ایجاد پلاسمای هوا بهره گرفته شد. اثر همزمان متغیرهای غلظت رنگ آلی حل شده در آب، حجم آب رنگی، و زمان اعمال پلاسما بر آب رنگی مورد مطالعه قرار گرفت. مشخص گردید رادیکال های آزاد موجود در پلاسمای تشکیل در فاصله بین الکترودها و ظرف حاوی آب رنگی، علاوه بر ایجاد رادیکال هایی با واکنش پذیری زیاد در داخل آب نظیر OH، قادر به برهمکنش با رنگ آلی حل شده در آب بوده و با اکسید کردن، رنگ حل شده در آب را به میزان قابل توجهی حذف می کنند. با توجه به آلودگی رنگی بسیاری از فاضلاب ها و پساب های صنعتی، روش تصفیه سازی پلاسمایی در حذف این آلودگی های رنگی بسیار موثر و با عوارض کمتر است.

مرجع ها

[1] Forgacs, E., T. Cserháti, and G. Oros, Removal of synthetic dyes from wastewaters: A review. *Environment International*, 2004. 30(7): p. 953-971.

[2] Sarangapani, C., et al., Optimization of atmospheric air plasma for degradation of organic dyes in wastewater. *Water Science and Technology*, 2017. 75(1): p. 207-219

[3] Chen, Q., et al., Influence of the pH value on the degradation of an azo dye of methyl orange by air discharge plasma. Plasma Processes and Polymers, 2019. 16(5)

[4] Ghaisani, A.D., et al. Degradation of dyes in textile industry wastewater using dielectric barrier discharge (DBD) plasma. 2019 *American Institute of Physics Inc.*

[5] Atmospheric pressure plasmas: A review, Claire Tendero , Christelle Tixier , Pascal Tristant , Jean Desmaison , Philippe Leprince, *Spectrochimica Acta* Part B **61** (2006) **2 – 30**.

[6] Pulsed corona plasma source characterization for film deposition on the inner surface of tubes, Ramasamy Pothiraja, Nikita Bibinov and Peter Awakowicz, *J. Phys. D: Appl. Phys*. **43** (2010)

[7] Role of reactive oxygen species in apoptosis: implications for cancer therapy, Jose M. Mate s, Francisca M. Sanchez-Jimenez, *The International Journal of Biochemistry & Cell Biology* **32** (2000) **157-170**.

[8] Lipid Peroxidation: Chemical Mechanism,Biological Implications and Analytical Determination, Marisa Repetto, Jimena Semprine and Alberto Boveris, *InTech*, 2012.

[9] Gil, A., et al., Removal of dyes from wastewaters by adsorption on pillared clays. *Chemical Engineering Journal*, 2011. 168(3): p. 1032-1040

[10] Dalvand, A., et al., Dye Removal, Energy Consumption and Operating Cost of Electrocoagulation of Textile Wastewater as a Clean Process. *Clean - Soil, Air, Water*, 2011. 39(7): p. 665-672

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

ابزار تشخیصی برای اندازه گیری امیتنس باریکه

حسین زاده ، مریم ؛ کارگریان ، آمنه

پژوهشکده پلاسما و گداخت هستهای، پژوهشگاه علوم و فنون هستهای، تهران، ایران

چکیده

چشم یونی مولتی کاسپ در سیکلوترون کرج برای تولید باریکه هیدروژن منفی مورد استفاده قرار می گیرد. این چشمه یونی در روزهای اولیه ساخت قادر به تولید ۲.۵ میلی آمپر باریکه هیدروژن منفی بوده است. یک اسکنر سیمی برای اندازه گیری امیتنس باریکه پروتون و مشخصات آن در دو بعد عرضی و طولی فضای فاز طراحی و ساخته شده است که در این مقاله جزییات آن بررسی شده است.

واژه های کلیدی: *اسکنر سیمی، اندازه گیری امیتنس، چشمه یونی مولتی کاسپ، ابزار تشخیصی باریکه*

Diagnostic Tool for Beam Emittance Measurement

Hosseinzadeh, Maryam; Kargarian, Ameneh

Plasma Physics and Nuclear Fusion Research School, Nuclear Science and Technology Research Institute, Tehran, Iran.

Abstract

An H^- multicusp ion source has been designed and constructed for CYCLONE30 commercial cyclotron. This ion source at the beginning days was able to generate 2.5 mA H^- beam. A wire scanner was designed and constructed to measure the emitted proton beam profiles and its specifications in both the transverse and longitudinal phase space.

***Keywords**: wire scanner, emittance measurement, multicusp ion source, beam diagnostic*

PACS No. 28

مقدمه

چشمه یون مولتی کاسپ به طور عمده در راکتورهای گداخت و شتاب دهنده های ذرات برای تولید رادیوایزوتوپ مورد استفاده قرار گرفته می گیرند.

یکی از گامهای اساسی برای طراحی چشمه یونی مولتی کاسپ طراحی و بهینه سازی قدرت و تعداد مگنت های محصور کننده پلاسما در اطراف محفظه واکنش چشمه می باشد. در این نوع چشمه های یونی آهن ربا های دائم ی برا ی بهبود چگالی و یکنواختی پلاسما استفاده شود [۱]. محصورسازی پلاسما توسط هندسه های مختلف آهنرباها مورد بررسی قرار گرفته است. امروزه مشخص است که هندسه کاسپ تمام خط صرفنظر از فشار، بالاترین چگالی پلاسما را می دهد. افزایش تراکم در درجه اول به دلیل محصورسازی الکترونها ی اولیه است [۲]. در این مقاله طراحی و ساخت ابزار تشخیصی برای اندازه گیری امیتنس باریکه مورد بررسی قرار گرفته است.

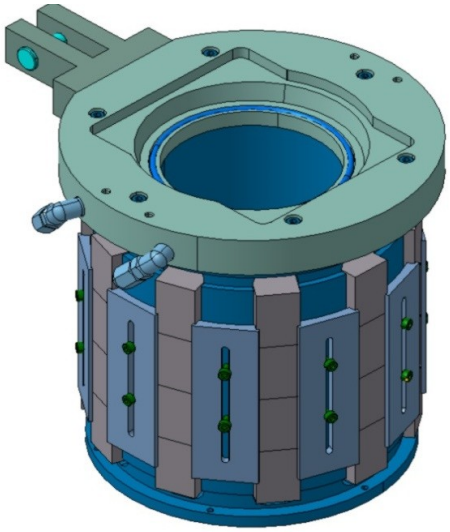
معرفی چشمه یونی

نمایی شماتیک از چیدمان آهنربای دائم ی برای محصور سازی پلاسما در چشمه یون Cyclone30 در شکل ۱ نشان داده شده است.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

محفظه واکنش چشمه یونی مولتی کاسپ واقع در شتابدهنده سیکلوترون کرج استوانه ای از جنس مس (به قطر ۱۰ cm و طول ۱۵ cm) است که ۱۰ مگنت از نوع دایمی آن را احاطه کرده است.

ستونی از مگنت های دائمی از جنس نئودیمیم با پلاریته مختلف که الکترون های پرانرژی و ذرات پلاسما را محصور می کند محفظه را احاطه کرده است که تولید میدان مغناطیسی به شکل کاسپ می کنند [۵-۳]. مگنت ها با قطب های مختلف با گرادیان میدان ۰ G (در مرکز) تا ۳ G چیده شده اند.



شکل ۱: نمای شماتیک از مگنت های محصور کننده مغناطیسی چشمه یونی Cyclone30

ساخت ابزار تشخیصی

دستگاه اسکنر سیمی از نوع خطی که برای اندازه گیری امیتنس باریکه مورد استفاده قرار می گیرد نیز در راستای این پروژه به شرح ذیل برای اندازه گیری امیتنس باریکه طراحی و ساخته شده است.

این دستگاه به اندازه گیری توزیع ذرات در صفحات X , Y می پردازد که توسط دو سیم مسی که توسط تجهیزات مکانیکی طراحی شده و قادر به حرکت در راستای عمودی و افقی می باشد ازسطح مقطع باریکه اسکن می گیرد تا بدین وسیله بتوانیم امیتنس باریکه را اندازه گیری نمائیم . حرکت سیم مسی توسط دو استپ موتور و یک مدار کنترلی صورت می گیرد بطوریکه در هر مرحله حرکت جریان الکتریکی ایجا د شده در سیم بواسطه بار الکتریکی ایجاد شده بر روی سیم ، توسط یک مدار میکرو کنترلی اندازه گیری و اطلاعات آن به کامپیوتر داده می شود و سپس توسط یک برنامه نرم افزاری نظیر مطلب مورد پردازش قرار خواهد گرفت و درنهایت نمودارهای مربوطه ترسیم می گردد و به وسیله آن می توان به نحوه توزیع ذرات در باریکه و امیتنس باریکه دست یافت.

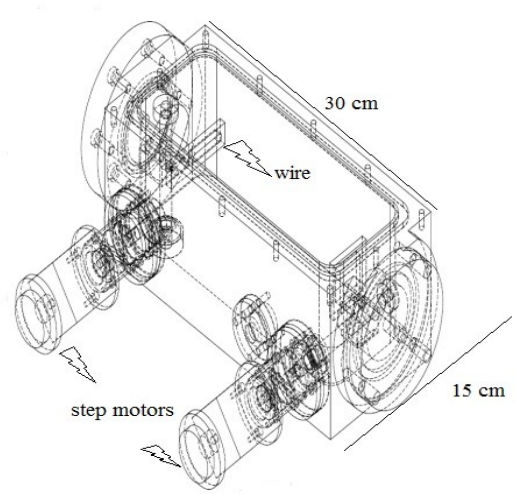
قسمت مکانیکی اسکنر سیمی

این دستگاه شامل یک محفظه برای عبوربیم می باشد که بدنه آن از آلومینیوم ساخته شده است. محفطه دستگاه با استفاده از فرز سی ان سی خالی شده و سقف آن از پلاستیک شفاف ساخته شده تا مسیر حرکت پرتو قابل مشاهده باشد.

در دو طرف دستگاه دو درپوش قرار دارد که به شکل دایره میباشد. در جلو این دستگاه دو استپ موتور به واسته ی کوپلینگ آن تعبیه شده است نیروی یکی از موتور ها با استفاده از شفتی که متصل به کوپلینگ میباشد به صورت افقی به داخل محفظه انتقال میدهد که باعث حرکت قسمت سیم شناساگر میشود که متصل به پنجره ای پلاستیکی میباشد که در راستای افقی توانایی حرکت دارد تا بتواند پرتو را در راستای افق اسکن نماید. موتور دوم نیرو را از طریق چرخ دنده به نیروی عمودی تبدیل می کند. این چرخ دنده ها از جنس برنج می باشند که نیرو و سرعت را به نسبت یک به یک تبدیل می نماید که باعث حرکت سیم شناساگر در راستای عمودی هم گام با حرکت افقی میکند می شود.

تمامی شفت ها با استفاده از بلبرنگ هایی که در سقف و دیوار و کف تعبیه شده اند ثابت شده است. نقشه های مکانیکی مربوط به این طراحی در اشکال زیر نشان داده شده است.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



شکل۲ : نقشه مکانیکی دستگاه اسکنر سیمی

قسمت الکتریکی

مشخصات استپ موتور به شرح ذیل می باشد.

استپ موتور ۲.۹ ولت ۱.۸ درجه 42D4002

مدل: 42D4002

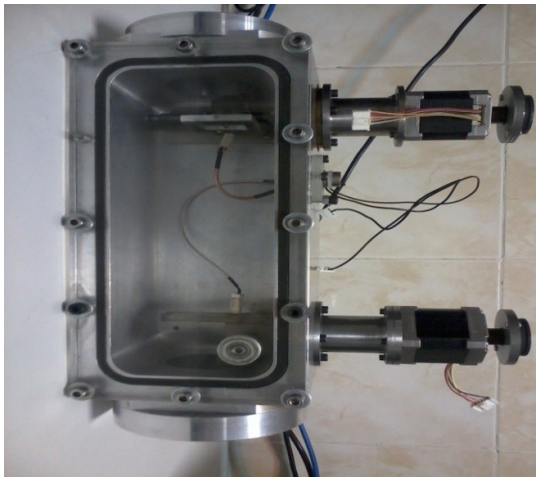
ولتاژ: ۲.۹ ولت

درجه چرخش(Deg) : ۱/۸

جریان(A): ۱/۲

گشتاور(Kg.cm): ٤

هرکدام از استپ موتورها دارای یک درایور بوده که با استفاده ازآنها استپ موتور برای حرکت خود استفاده می کند. نمایی از اسکنر سیمی ساخته شده در شکل زیر نشان داده شده است.


شکل ۳ : تصویر ساخته شده از دستگاه اسکنر سیمی

این دستگاه دارای یک برد الکترونیکی بوده که با استفاده از برنامه ای که نوشته می شود و به آن داده می شود و همچنین با استفاده از درایورهایی که به آن وصل می شود باعث حرکت استپ موتورها می باشد.

همچنین برای اندازه گیری جریان دو سیم مسی را از داخل چمبر برداشته و یک صفحه مسی در مسیر عبور ذرات قرار می دهیم. با برخورد باریکه به این صفحه مسی از روی ولت متری که به چمبر وصل می شود جریان باریکه ذرات اندازه گیری می شود.

ماژول راه نداز موتور L298 ، راه اندازی موتورهای DC

این ماژول بر اساس آی سی درایور موتور L298 ساخته شده است که به شما این امکان را می دهد که به راحتی و بدون هیچ قطعه اضافه با استفاده از انواع میکرو کنترلر ها سرعت و جهت دو موتور DC را به طور همزمان تغییر دهید و از آن در کاربردهایی نظیر روباتیک، کنترل دور موتور های DC ، درایور استپ موتور و ... بهره ببرید .

مشخصات ماژول

وجود پایه کنترل جریان برای عملکرد حفاظت جریان

قابلیت نصب مقاومت کنترل جریان برروی خود برد

جریان دهی تا ۲ آمپر برای هر موتور

محدوده وسیع ولتاژ از ۵ تا ٤٥ ولت

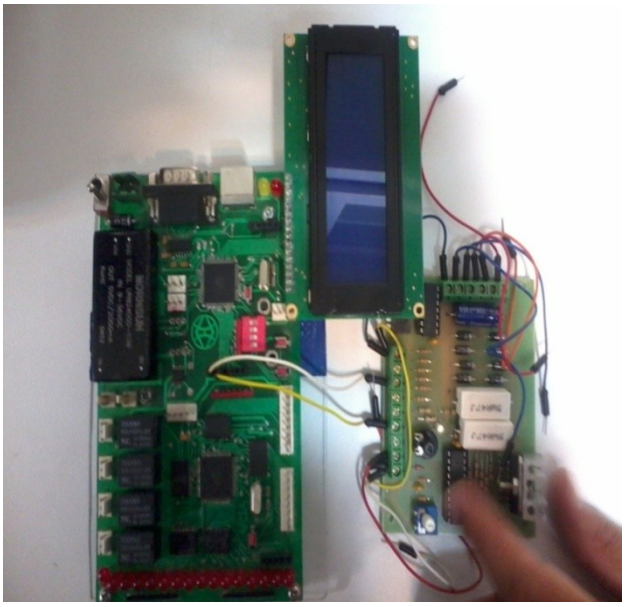
ابعاد کوچک ماژول ۵ * ۵ سانتیمتر

استفاده از کانکتور مخابراتی در ورودی و ترمینال در خروجی و تغذیه برای استفاده آسان از ماژول

موتور های جریان مستقیم برای کار کردن نیاز به تغذیه (بایاس) دارند. معمولا موتور هایی که برای ساختن ربات های دانشگاهی استفاده می شود با ولتاژ های ۵ یا ٦ یا ۹ یا ۱۲ یا ۲٤ کار می کند . و بسته به مدل ، روش ساخت ، قیمت و ... دارای جریان کشی حدود ۱۰۰ میلی آمپر تا ۵ آمپر می باشند . یک روش آن است که آن را مستقیما به باطری وصل نماییم در این صورت با سرعت نهایی هود و در یک جهت خاص می چرخد اما در ربات ها ما

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

نیاز به کنترل موتور [روشن و خاموش کردن ، کنترل سرعت ، کنترل جهت و کنترل موقعیت] داریم در نتیجه باید موتور را با استفاده از کنترلرها (مدارات منطقی یا مایکروکنترلر ها یا پی ال سی یا رایانه) کنترل نماییم اما خروجی میکروکنترلر ها ۵ ولت و ۲ میلی آمپر است و نمی تواند موتور را بچرخاند . بنابراین ما نیاز به مدارات واسطه برای اتصال کنترلر به موتور داریم . به این مدارات درایور می گویند . که این درایور می تواند ترکیب رله و ترانزیستور یا آی سی یا مدارات ترکیبی باشد معمولا برای موتور های دارای ولتاژ ۵ تا ٤٦ و جریان حداکثر ۲ آمپر از آی سی L298Nاستفاده می شود . قابل ذکر است با یک آی سی می توان دو موتور دی سی را همزمان کنتر ل نمود. راه اندازی دو موتور جریات مستقیم به صورت هم زمان با قابلیت گردش در دو جهت برای راه اندازی ، به دو باطری نیاز داریم . یکی برای تغذیه آیسی و دیگری برای تغذیه موتور ها ، منفی دو باطری را با سیم به هم وصل می کنیم و آن را «زمین» می نامیم یعنی مقدار آن صفر ولت ، فرض می شود . باطری تغذیه موتور ، دارای ولتاژی برابر با ولتاژ موتور و دارای قابلیت جریان دهی بیشتر یا مساوی با جریان مورد نیاز دو موتور باشد . همچنین ولتاژ باطری تغذیه آی سی باید بین ٥/٤ تا ۷ ولت باشد . برای جلوگیری از سوختن آی سی باید پایه های ۲ و ۳ و ١٤ و ١٥ را با استفاده از دیود محافظت کنیم یعنی به هر یک از پایه ها دو دیود وصل می نماییم. کاتد دیود اول را (قسمتی که خط دارد) به سر مثبت باطری تغذیه موتور ، و آند دیود اول را به پایه آیسی وصل می نماییم و کاتد دیود دوم را به پایه آیسی و آند دیود دوم را به زمین وصل می نماییم. بهتر است دو سر پایه ورودی موتور را با یک خازن بدون قطب پلاستیکی ظرفیت بالا ، به هم وصل نمایید . سپس طبق آن چه در زیر آمده پایه ها را وصل می نماییم . شکل درایورو برد الکترونیکی مربوط به این دستگاه در شکل ٤ نشان داده شده است.



شکل ٤ : درایورو برد الکترونیکی دستگاه اسکنر سیمی

نتیجه گیری

در این مقاله سعی بر طراحی و ساخت یک عدد اسکنر سیمی برای اندازه گیری امیتنس باریکه شده است. این دستگاه به اندازه گیری توزیع ذرات در دو بعد می پردازد و با حرکت در راستای عمودی و افقی از سطح مقطع باریکه اسکن می گیرد تا بدین وسیله بتوانیم امیتنس باریکه را اندازه گیری نمائیم . حرکت سیم مسی توسط دو استپ موتور و یک مدار کنترلی صورت می گیرد بطوریکه، در هر مرحله ، جریان الکتریکی ایجا د شده در سیم ، توسط یک مدار میکرو کنترلی اندازه گیری و اطلاعات آن به کامپیوتر داده می شود و سپس توسط یک برنامه نرم افزار مورد پردازش قرار خواهد گرفت و در نهایت با ترسیم نمودارهای مربوطه می توان به نحوه توزیع ذرات در باریکه و امیتنس باریکه دست یافت.

مرجع‌ها

[۱] R. Limpaecher and K.R. MacKenzie, Rev. Sci. Instr. 44 (1973) 726.

[۲] K.N. Leung, T.K. Samec and A. Lamm, Phys. Lett. 51A (1975) 490.

[۳] K.N. Leung, T.K. Samec, A. Lamm, Phys. Lett. A 51, 490 (1975).

[٤] Y. Ueda, M. Doi, M. Nishikawa, S. Goto, Rev. Sci. Instrum. 62, 105 (1991).

[٥] S.R. Walther, K.N. Leung, W.B. Kunkel, J. App. Phys. 64 (1998).

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

ردیابی پدیده‌های کوانتومی در دینامیک لیزر اتمی با در نظر گرفتن برخوردهای میان‌اتمی

قاسمیان، ابراهیم ؛ توسلی، محمد کاظم

گروه اپتیک و لیزر، دانشکده فیزیک، دانشگاه یزد

چکیده

در این مقاله دینامیک یک لیزر اتمی متشکل از یک چگالیده بوز-اینشتین برهم‌کنش کننده با دو میدان تابشی کلاسیکی مورد بررسی قرار می‌گیرد. چگالیده به عنوان زیرسامانه اتمی از اتم‌های سه‌ترازی نوع- ۸ تشکیل شده است. برای بررسی تحلیلی دینامیک سامانه، ابتدا تراز بالایی اتم‌ها را با استفاده از تقریب آدیاباتیک حذف می‌کنیم و به یک زیرسامانه اتمی دوترازی می‌رسیم. سپس، هامیلتونی موثر کل سامانه را بر حسب عملگرهای تکانه‌ای زاویه‌ای بازنویسی کرده و عبارت‌های تحلیلی توصیف کنننده دینامیک سامانه را با در نظر گرفتن شرایط فیزیکی مختلف بدست می‌آوریم. این مطالعه نشان می‌دهد که سامانه به دلیل برخوردهای میان‌اتمی پدیده‌های کوانتومی فروافت-احیا و خودگیراندازی ماکروسکوپی را از خود بروز می‌دهد. یکی دیگر از نتایج جالب این پژوهش این است که تعداد اتم‌های موجود در چگالیده (زوج یا فرد بودن تعداد آنها) رفتار وارونی جمعیت را به شدت تحت تاثیر خود قرار می‌دهد.

Tracking quantum phenomena in the dynamics of atom-laser in the presence of interatomic collisions

Ghasemian, Ebrahim ; Tavassoly Mohammad Kazem

Optics and Laser Group, Faculty of Physics, Yazd University

Abstract

In this paper we investigate the dynamics of an atom-laser consists of a Bose-Einstein condensate (BEC) interacting with two classical radiation fields. The BEC, as the atomic subsystem, contains of three-level atoms with ∧ -configuration. In order to study, analytically, the dynamics of system, we remove the upper level of atoms via the adiabatic elimination and reach an effective two-level atomic subsystem. Then, we rewrite the effective Hamiltonian in terms of angular momentum operators and then derive the analytical expressions for the dynamics of the system at different physical situations. The current study shows that the system undergoes two pure quantum phenomena i.e., the collapse-revival and macroscopic quantum self trapping (MQST) due to nonlinear collisional interactions. As another interesting result, the number of atoms (being odd or even) strongly influences the pattern of population inversion.

PACS No. 32

مقدمه

حدود ۷۱ سال بعد از پیش‌بینی بوز و اینشتین در مورد پدیده چگالیده بوز-اینشتین اولین مشاهدات تجربی آن در سال ۱۹۹۵ به انجام رسید و منجر به ساخت لیزرهای اتمی شد [۱]. تا کنون توجه بسیاری از پژوهشگران بر طراحی ابزاری برای تولید باریکه همدوسی از اتم‌های بوزونی (لیزر اتمی) متمرکز شده است. لیزر

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

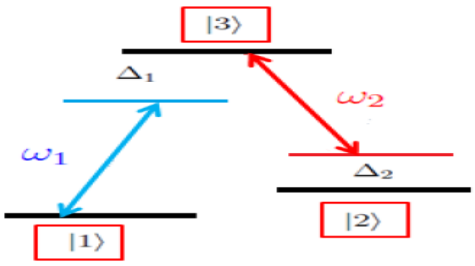
اتمی دارای کاربردهای گوناگونی در زمینه اپتیک اتمی است. لیتوگرافی اتمی، ساخت قطعات در مقیاس نانو و محک آزمایش‌های بنیادی مکانیک کوانتومی که شامل تداخل‌سنجی اتمی هستند، تنها نمونه‌هایی از کاربردهای گسترده لیزر اتمی محسوب می‌شوند[۲-۳]. در این مقاله دینامیک یک لیزر اتمی متشکل از اتم‌های سه‌ترازی برهم‌کنش کننده با دو میدان کلاسیکی مورد بررسی قرار می‌گیرد. ابتدا، هامیلتونی سامانه بر حسب عملگرهای میدان بوزونی در چارچوب کوانتش دوم معرفی می‌شود. سپس با استفاده از تقریب آدیاباتیک، یک هامیلتونی دومدی برای توصیف دینامیک اتم‌ها بدست می‌آوریم. در ادامه با حل معادلات حرکت هایزنبرگ، دینامیک سامانه را از طریق تحول زمانی وارونی جمعیت اتمی مورد مطالعه قرار می‌دهیم.

معرفی سامانه و هامیلتونی آن و حل معادلات مربوطه

یک چگالیده اتمی متشکل از اتم‌های سه‌ترازی در نظر می‌گیریم که با دو میدان تابشی کلاسیکی در حال برهم‌کنش است. دینامیک اتم‌های موجود در سامانه در دمای صفر مطلق و در چارچوب کوانتش دوم با هامیلتونی زیر توصیف می‌شود [٤]،

$$H = \sum_{i=1}^{3} \nu_i b_i^{\dagger} b_i - \left(g_1 b_3^{\dagger} b_1 e^{-i\omega_1 t} + g_1 b_3^{\dagger} b_2 e^{-i\omega_2 t} + h.c \right) + \sum_{i=1}^{3} \lambda_i b_i^{\dagger 2} b_i^{2} + \sum_{i \neq j}^{3} \lambda_{ij} b_i^{\dagger} b_j^{\dagger} b_i b_j , \quad (۱)$$

که b_i ($b_i^{\dagger}$) عملگرهای آفرینش (نابودی) میدان بوزونی اتم‌ها در ترازهای سه‌گانه $(i = 1,2,3)$ هستند. جملات موجود در سطر اول رابطه (۱)، هامیلتونی آزاد اتم‌ها در چگالیده و سطر دوم آن، برهم‌کنش میدان‌های کلاسیکی با اتم‌های درون چگالیده را توصیف می‌کند. میدان تابشی کلاسیکی با بسامد ω_1 گذار اتم‌ها بین دو تراز اول و سوم را با ثابت جفت‌شدگی g_1 انجام می‌دهد و میدان با بسامد ω_2 گذار مشابهی بین دو تراز دوم و سوم با ثابت جفت‌شدگی اتم-میدان g_2 ایجاد می‌کند. بنابراین، ساختار سه-ترازی Λ -شکل در سامانه بوجود می‌آید. همان‌طور که در شکل ۱ مشاهده می‌شود گذار مستقیم بین دو تراز اول و دوم ممنوع است. همچنین، سطر آخر (۱)، شامل هامیلتونی برخوردهای میان‌اتمی در ترازهای یکسان با ضریب برهم‌کنش λ_i و برخوردهای میان‌اتمی در ترازهای مختلف با قدرت برهم‌کنش λ_{ij} است.



شکل ۱- ترازهای انرژی اتم‌های سه‌ترازی نوع- Λ که مشابه ساختار ترازهای اتم سدیم است [۵]. دو لیزر کلاسیکی با بسامدهای ω_1 و ω_2 گذارهای اتمی را ایجاد می‌کنند که Δ_1 و Δ_2 پارامترهای نامیزانی بین بسامد لیزرها و بسامد گذارهای اتمی نشان داده شده هستند.

ابتدا هامیلتونی سامانه را در تصویر برهم‌کنش بدست آورده و سپس با استفاده از تقریب آدیاباتیک، با چشم‌پوشی از تغییرات زمانی عملگر تراز برانگیخته میانی (سوم) با استفاده از معادله حرکت هایزنبرگ، این عملگر را بر حسب عملگرهای دو تراز دیگر بدست آورده و به رابطه زیر می‌رسیم،

$$H_I = \Omega_1 b_1^{\dagger} b_1 + \Omega_2 b_2^{\dagger} b_2 + g_{eff} b_2^{\dagger} b_1 + g^{*}_{eff} b_1^{\dagger} b_2 + \lambda_1 b_1^{\dagger 2} b_1^{2} + \lambda_{12} b_1^{\dagger} b_1 b_2^{\dagger} b_2 + \lambda_2 b_2^{\dagger 2} b_2^{2}, \quad (۲)$$

که در آن از جانشانی‌های زیر استفاده شده است،

$$\Omega_1 = -\frac{|g_1|^2}{\Delta}, \quad \Omega_2 = -\frac{|g_2|^2}{\Delta}, \quad g_{eff} = \frac{g_1 g_2^{*}}{\Delta}, \quad (۳)$$

و شرایط تشدید دوفوتونی $\Delta = \Delta_1 = \Delta_2$ نیز لحاظ شده است،

$$\Delta_1 = \nu_3 - \nu_1 - \omega_1, \quad \Delta_2 = \nu_3 - \nu_2 - \omega_2. \quad (٤)$$

به منظور دست‌یابی به معادلات دینامیکی سامانه به صورت تحلیلی، عملگرهای تکانه‌ای زاویه‌ای زیر را معرفی می‌کنیم،

$$J_+ = b_1^{\dagger} b_2, \quad J_- = b_1 b_2^{\dagger}, \quad J_x = \frac{J_+ + J_-}{2}, \quad N = b_1^{\dagger} b_1 + b_2^{\dagger} b_2, \quad J_z = \frac{1}{2}(b_2^{\dagger} b_2 - b_1^{\dagger} b_1). \quad (٥)$$

به کمک این عملگرها می‌توان هامیلتونی (۲) را به صورت زیر بازنویسی کرد:

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

$$H_{Eff} = g_{Eff} J_+ + g^*_{Eff} J_+ + (\Omega_2 - \Omega_1 + (N-1)(\lambda_2 - \lambda_1)) J_z, + (\lambda_1 + \lambda_2 - \lambda_{12}) J_z^2, \quad (٦)$$

که در آن از جملاتی که ثابت حرکت هستند، صرف‌نظر شده است. با در نظر گرفتن ثابت جفت‌شدگی موثر به صورت یک عدد حقیقی می‌توان هامیلتونی موثر را به صورت زیر بازنویسی کرد،

$$H_{Eff} = GJ_x + AJ_z + BJ_z^2, \quad (٧)$$

که در آن از روابط زیر استفاده شده است،

$$G = |g_{Eff}|, \quad A = \Omega_2 - \Omega_1 + (N-1)(\lambda_2 - \lambda_1), \quad B = \lambda_1 + \lambda_2 - \lambda_{12}. \quad (٨)$$

اکنون با استفاده از رهیافت معادله حرکت هایزنبرگ، معادلات دینامیکی سامانه را بدست می‌آوریم. برای این منظور، با تنظیم پارامترهای اتمی، A را مساوی صفر قرار می‌دهیم و با استفاده از عملگر یکانی $U = \exp(-iGJ_x t)$، هامیلتونی سامانه را در چارچوب چرخان (RF) و تقریب موج چرخان (RWA) بصورت زیر بدست می آوریم،

$$H_{RF-RWA} = U^+ H_{Eff} U + i\frac{dU}{dt}U = -BJ_x^2. \quad (٨)$$

در اینجا از جملاتی که تغییرات زمانی سریعی دارند، صرف‌نظر شده است. اکنون، دوباره به چارچوب اولیه برگشته و هامیلتونی سامانه در تقریب موج چرخان را بصورت زیر بدست می‌آوریم،

$$H_{RWA} = U^+ H_{RF-RWA} U - i\frac{dU}{dt}U = GJ_x - BJ_x^2. \quad (٩)$$

از رابطه (۹) براحتی می‌توان دریافت که J_x ثابت حرکت سامانه است. اکنون، دو عملگر $J_1 = J_z + iJ_y$ و $J_2 = J_z - iJ_y$ را تعریف می‌کنیم که در ادامه از آنها برای بدست آوردن دینامیک سامانه استفاده می‌شود. تحول زمانی این دو عملگر بصورت زیر بدست می‌آید،

$$J_1(t) = e^{i(2BJ_x + B - G)t} J_1(0), \quad J_2(t) = e^{i(-2BJ_x + B + G)t} J_2(0). \quad (١٠)$$

وارونی جمعیت اتمی

در این بخش، وارونی جمعیت اتمی به عنوان یک پارامتر کلیدی برای بررسی دینامیک اتم‌های موجود در سامانه مورد مطالعه قرار می‌گیرد. این کمیت بصورت زیر تعریف می شود،

$$W(t) = 2\langle\psi(0)|J_z(t)|\psi(0)\rangle = \langle\psi(0)|e^{-2iBJ_x t} J_2(0)|\psi(0)\rangle e^{i(B+G)t} + h.c, \quad (١١)$$

که $|\psi(0)\rangle$ حالت اولیه است. اکنون با در نظر گرفتن حالت اولیه اتم‌ها در شروع برهم‌کنش به دو صورت حالت عددی و همدوس، وارونی جمعیت را بدست آورده و رفتار دینامیکی آن را به صورت تحلیلی و عددی مورد مطالعه قرار می‌دهیم. در حالت عددی فرض می‌کنیم که تمام اتم‌ها در تراز دوم قرار دارند و بنابراین حالت اولیه اتم‌ها بصورت $|\psi(0)\rangle = |0, N\rangle$ نوشته می‌شود که می‌توان آن را بر حسب ویژه‌حالت‌های عملگرهای تکانه زاویه‌ای بصورت $|\psi(0)\rangle = |j, j\rangle$ بازنویسی کرد که $j = N/2$ است. بنابراین، وارونی جمعیت را می‌توان بصورت زیر محاسبه کرد،

$$W(t) = \langle j, j|e^{-i\pi/2J_y} e^{-2iBJ_z t} J_+ e^{i\pi/2J_y}|j, j\rangle e^{i(G+B)t} + c.c, \quad (١٢)$$

که در آن از رابطه زیر استفاده شده است،

$$e^{-iAJ_x t} J_2(0) = e^{-i\pi/2J_y} e^{-AJ_z t} J_+(0) e^{i\pi/2J_y}. \quad (١٣)$$

پس از انجام محاسبات، رابطه (۱۲) را می‌توان به صورت زیر بازنویسی کرد،

$$W(t) = \frac{1}{2^N} e^{i(G+B)t} \sum_{m=-j}^{j} (j+m) \binom{2j}{j+m} e^{-2iBmt} + c.c. \quad (١٤)$$

رابطه بالا را می‌توان به صورت زیر ساده کرد و وارونی جمعیت اتمی در حالت عددی را بدست آورد،

$$W_N(t) = N(\cos Bt)^{N-1} \cos Gt. \quad (١٥)$$

رابطه (۱۵) نشان می‌دهد سامانه در نظر گرفته شده ویژگی‌های برجسته‌ای را از خود بروز می‌دهد. ویژگی اول که ناشی از برخوردهای میان‌اتمی در سامانه است منجر به ایجاد پدیده فروافت–احیا در رفتار وارونی جمعیت اتمی می‌شود. در غیاب برخوردهای میان‌اتمی همان‌طور که انتظار می‌رود، گذارهای اتمی بین دو تراز اول و دوم به صورت نوسانات هماهنگ انجام می‌شوند. از طرفی، هنگامی که $G = B$ است، سامانه یک رفتار کوانتومی دیگر را از خود نشان می‌دهد. در این شرایط اگر تعداد اتم‌های موجود در سامانه زوج باشد، وارونی جمعیت اتمی همواره دارای مقادیر نامنفی است. بعبارت دیگر میانگین زمانی وارونی جمعیت اتمی مخالف صفر است. در این شرایط اتم‌های موجود در

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

سامانه غالباً یکی از ترازهای اتمی را اشغال می‌کنند که بیانگر رفتار خودگیراندازی ماکروسکوپی کوانتومی (MQST) است [٦].

برای وارسی وارونی جمعیت در حالت همدوس، مانند حالت عددی، فرض می‌کنیم که در شروع برهم‌کنش تراز اول خالی از جمعیت است و اتم‌ها بصورت همدوس در تراز اتمی دوم توزیع شده‌اند. بنابراین حالت اولیه سامانه بصورت معرفی می‌شود،

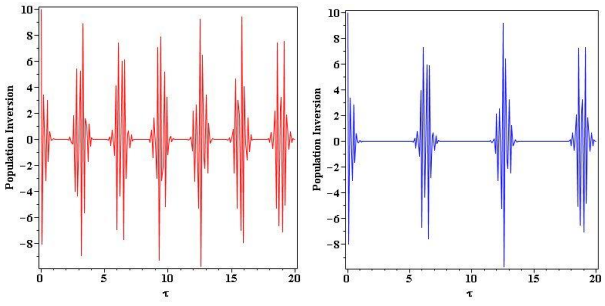
$$\left|\psi(0)\right\rangle = e^{-|\alpha|^2/2}\sum_{j=0}^{\infty}\frac{\alpha^{2j}}{\sqrt{(2j)!}}\left|j,j\right\rangle, \qquad (١٦)$$

که با استفاده از آن می‌توان وارونی جمعیت اتمی در حالت همدوس را بصورت زیر بدست آورد،

$$W_C(t) = \bar{N}\, e^{-2\bar{N}\sin^2(Bt/2)}\cos Gt\,. \qquad (١٧)$$

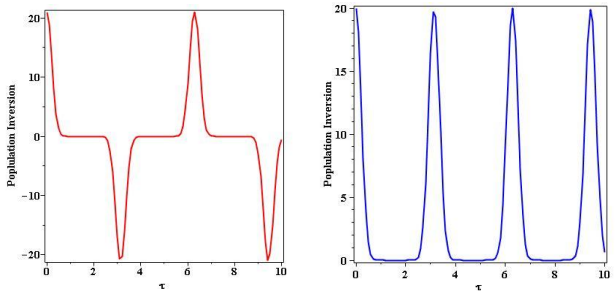
که $\bar{N} = |\alpha|^2$ میانگین تعداد اتم‌ها در سامانه را مشخص می‌کند. از مقایسه رابطه (١٥) و (١٧) می‌توان دریافت که دوره تناوب پدیده احیا در حالت همدوس $T_C = 2\pi/B$ دو برابر حالت همدوس $T_N = \pi/B$ است ولی هر دو رابطه دوره تناوب نوسانی یکسانی $T_O = 2\pi/G$ دارند.

شکل ٢ تحول زمانی وارونی جمعیت اتمی در دو حالت عددی و همدوس را نشان می‌دهد. علاوه بر بروز پدیده فروافت–احیاء، مشاهده می‌شود که دوره تناوب احیا در حالت همدوس دو برابر حالت عددی است. بنابراین، تعداد رخدادهای پدیده احیا در حالت عددی دو برابر حالت همدوس است.



شکل ٢– تحول زمانی وارونی جمعیت اتمی به ازای $G = 100\,B$ ، $N = \bar{N} = 10$ در حالت عددی (سمت راست) و حالت همدوس (سمت چپ).

شکل ٣ پدیده خودگیراندازی ماکروسکوپی کوانتومی را در رفتار وارونی جمعیت اتمی نشان می‌دهد. در شکل سمت راست، میانگین وارونی جمعیت اتمی مقداری مثبت است و می‌توان دریافت که در این شرایط اکثر اتم‌ها در تراز دوم به دام افتاده‌اند. شکل ٣ به ازای $N = 20$ و $N = 21$ در حالت عددی رسم شده است. اگر تعداد اتم‌های موجود در سامانه زوج باشد، پدیده خودگیراندازی، به وضوح در رفتار وارونی جمعیت مشاهده می‌شود، ولی به ازای تعداد فردی از اتم‌های موجود در سامانه، رفتار وارونی جمعیت به صورت نوسانی با دامنه مثبت و منفی است و اتم‌ها در اثر برهم‌کنش با میدان‌های تابشی کلاسیکی بین دو تراز اول و دوم بطور پیوسته در حال گذار هستند.



شکل٣– نمودارهای وارونی جمعیت در حالت عددی به ازای دو مقدار متفاوت تعداد اتم‌های موجود در سامانه. نمودار سمت راست پدیده خودگیراندازی کوانتومی را به ازای $N = 20$ نشان می‌دهد، در حالی که در نمودار سمت چپ به ازای $N = 21$ ، گذارهای اتمی بین دو تراز اول و دوم با گذشت زمان به صورت نوسانی انجام می‌شوند. هر دو نمودار به ازای $G = B$ رسم شده‌اند.

نتیجه‌گیری

نتایج حاصل از این پژوهش نشان داد که دو پدیده کوانتومی فروافت–احیا و خودگیراندازی ماکروسکوپی کوانتومی در رفتار وارونی جمعیت اتمی قابل ردیابی است. همچنین، یکی دیگر از نتایج جالب‌توجه این مطالعه این است که رفتار دینامیکی وارونی جمعیت اتمی به شدت به زوج یا فرد بودن تعداد اتم‌های موجود در سامانه وابسته است.

مرجع‌ها

[1] W. Ketterle, Reviews of Modern Physics **74**, 1131 (2002).

[2] H. M. Wiseman and M. J. Collett, Phys. Lett. A **202**, 246 (1995).

[3] A. M. Guzman, M. Moore, and P. Meystre, Phys. Rev. A **53**, 977 (1996).

[4] L. -M. Kuang, A. -H. Zeng, Z. -H. Kuang, Phys. Lett. A **319**, 24 (2003); E. Ghasemian, M. K. Tavassoly, J. Opt. Soc. Ame. B **35**, 86 (2018).

[5] I. Vadeiko, A. V. Prokhorov, A. V. Rybin, S. M. Arakelyan, Phys. Rev. A **72**, 013804 (2005).

[6] M. Abbarchi, A. Amo, V. G. Sala, D. D. Solnyshkov, H. Flayac, L. Ferrier, I. Sagnes, E. Galopin, A. Lema Ãotre, G. Malpuech and J. Bloch, nature physics **9**, 275 (2013).

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

سهم تابع توزیع فوتون در فوتون

زرین ، صلاح الدین[۱] ؛ دادفر، ساره[۲]

[۱و۲] گروه فیزیک، دانشگاه سیستان و بلوچستان، زاهدان

چکیده

ما در این مقاله به بررسی تابع توزیع در فوتون در مرتبه LO و NLO می پردازیم. این تابع توزیع با استفاده از معادلات تحولی DGLAP و تبدیل لاپلاس بدست می آیند. نتایج تابع توزیع بدست آمده با نتایج تابع توزیع کوارک شگفت و کوارک افسون ارائه شده توسط GRV ، مقایسه می شود. نتایج نشان می دهند که تابع توزیع فوتون بدست آمده تقریبًا یک مرتبه از لحاظ بزرگی کوچکتر از تابع توزیع کوارک افسون و شگفت می باشد.

واژه های کلیدی: *کرومودینامیک کوانتومی ،الکترودینامیک کوانتومی، DGLAP، فوتون*

The contribution of photon distribution function inside the photon

Zarrin, Salaheddin[۱]; Dadfar, Sareh[۲]

[۱،۲] Department of Physics, University of Sistan and Baluchestan, Zahedan

Abstract

In this paper, we obtain photon distribution function inside the photon at the LO and NLO approximations. This distribution function isobtained using by DGLAP evolution equations and Laplace transform. The obtained results of this distribution function iscompared with the results of the strange and charm quark distribution functions obtained by GRV. The results show that it is about one order of magnitude smaller than the mentioned quarks.

Keywords: *QED, QCD, DGLAP, photon*

PACS No. ۱۳

مقدمه:

در برهمکنش‌های الکترومغناطیسی فوتون عامل انتقال نیرو بین ذرات باردار می‌باشد. اگر فوتونی به عنوان ذره باردار مبادله شونده، به یک ذره و پاد ذره نوسان[۱] کند و یکی از آنها با یک بوزون پیمانه‌ای دیگر برهمکنش کند آنگاه ساختار فوتون آشکار می‌شود. تاکنون درباره ساختار فوتون مطالعات زیادی انجام شده است. در دهه‌ی اخیر محققان تابع ساختار فوتون و همچنین سطح مقطع چنین فرآیندهایی را مورد مطالعه قرار داده‌اند. این ساختار توسط آشکار سازهایی مانند HERA [۱و۲] و LEP [۳و٤] مشاهده شده و داده‌های مرتبط با این ساختار ارائه شده است. اخیراً محققان توانسته‌اند با استفاده از روش برازش، توابع توزیع فوتونی را در Q^2 های مختلف ارائه دهند [۵] بعلاوه تابع توزیع پارتونی فوتون و تابع ساختار آن را با استفاده از معادلات تحولی DGLAP بدست آورده‌اند [٦] و به کمک این معادلات توانسته‌اند سهم تابع توزیع فوتونی را در داخل پروتون محاسبه کنند [۷].

ما در این مقاله قصد داریم که سهم تابع توزیع فوتونی در فوتون را با استفاده از معادلات تحولی و تبدیل لاپلاس در مراتب LO و NLO بدست آوریم. در این مقاله ابتدا تابع توزیع فوتونی در مرتبه LO به صورت کامل توضیح داده می‌شود و سپس در ادامه به طور خلاصه، به محاسبه این سهم در مرتبه NLO QCD و LO QED

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

می پردازیم. از آنجا که سهم چنین توزیعی تاکنون در داده‌های آزمایشگاهی و برازشی ارائه نشده است لذا در انتها نتایج این توزیع را با توزیع‌های کوارک شگفت و افسون در فوتون که توسط GRV بدست آمده [۵] مقایسه کنیم.

محاسبه تابع توزیع

معادلات جفت شده DGLAP برای توابع توزیع یکتا F_s^{γ}، گلوئون G^{γ}، فوتون M^{γ} و غیریکتا F_{ns}^{γ} در داخل فوتون بدون در نظر گرفتن سهم فوتون در تابع توزیع کوارکی در مرتبه LO به صورت زیر می‌باشند [۹و۸].

$$\frac{\partial F_s^{1\gamma}(x,Q^2)}{\partial \ln Q^2} = \frac{\alpha_s^1(Q^2)}{2\pi}\left\{ P_{qq}^1(x)\otimes F_s^{1\gamma}(x,Q^2) + P_{qg}^1(x)\otimes G^{1\gamma}(x,Q^2)\right\} \quad (1)$$

$$\frac{\partial G^{1\gamma}(x,Q^2)}{\partial \ln Q^2} = \frac{\alpha_s^1(Q^2)}{2\pi}\left\{P_{gq}^1(x)\otimes F_s^{1\gamma}(x,Q^2) + P_{gg}^1(x)\otimes G^{1\gamma}(x,Q^2)\right\} \quad (2)$$

$$\frac{\partial M^{1\gamma}(x,Q^2)}{\partial \ln Q^2} = \frac{\alpha_e}{2\pi}\left\{ P_{\gamma q}^1(x)\otimes\left\langle e^2\right\rangle F_s^{1\gamma}(x,Q^2) + F_{ns}^{1\gamma}(x,Q^2)\right] + P_{\gamma\gamma}^1(x)\otimes M^{1\gamma}(x,Q^2)\Big\}, \quad (3)$$

$$\frac{\partial F_{ns}^{1\gamma}(x,Q^2)}{\partial \ln Q^2} = \frac{\alpha_e}{2\pi}Z_{ns}^1(Q^2) + \frac{\alpha_s^1(Q^2)}{2\pi}P_{qqns}^1\otimes F_{ns}^{1\gamma}(x,Q^2) \quad (4)$$

در معادلات بالا P ها توابع شکاف و α_s ثابت تزویج روان QCD و α_e ثابت تزویج QED و تابع $Z_{ns}(x)=\sum_{k=1}^{n_f} 2e_{qk}^2\left(e_{qk}^2-\left\langle e^2\right\rangle\right)P_{q\gamma}(x)$.

در این کار به جای LO از اندیس ۱ استفاده کرده‌ایم. برای حل معادلات (۱) تا (٤)، با استفاده از تبدیل لاپلاس آنها از فضای x به فضای s می‌بریم. برای این منظور ابتدا از تغییر متغییر $x\equiv\exp(-v)$ و $y\equiv\exp(-w)$ و $\frac{\partial\left(\alpha_s(Q^2)\right)}{\partial\ln Q^2}=\frac{\alpha_s(Q^2)}{4\pi}$ استفاده نموده و معادلات را ساده‌تر می‌کنیم. سپس تبدیل لاپلاس را روی آنها اعمال کرده به این ترتیب معادلات به صورت زیر بدست می‌آیند:

$$\frac{\partial f^1(s,\tau)}{\partial\tau} = \Phi_f^1(s) f^1(s,\tau) + \Theta_f^1(s) g^1(s) \quad (5)$$

$$\frac{\partial g^1(s,\tau)}{\partial\tau} = \Theta_g^1(s) f^1(s,\tau) + \Phi_g^1(s) g^1(s) \quad (6)$$

$$\frac{\partial m^1(s,\tau)}{\partial\tau} = \frac{\alpha_e}{\alpha_s^1(Q^2)}\left(\Omega_m^1(s) m(s,\tau) + \Upsilon_m^1(s) f^1(s,\tau) + \Upsilon_{nsm}^1(s) f_{ns}^1(s,\tau)\right) \quad (7)$$

$$\frac{\partial f_{ns}^1(s,\tau)}{\partial\tau} = \frac{\alpha_e}{\alpha_s^1(Q^2)} z^1(s) f_{ns}^1(s,\tau) + \Phi_{ns}^1 f_{ns}^1(s,\tau) \quad (8)$$

ضرایب Φ^1، Θ^1، Ω^1 و Υ^1 در مرجع [۱۰] آورده شده‌اند. با حل دو معادله (٦و۵) می‌توان $f^1(s,\tau)$ بدست آورد. همچین با حل مستقیم معادله (۸) تابع توزیع غیریکتا به صورت زیر بدست می آید.

$$f_{ns}^1(s,t) = \exp\left(\Phi_{ns}^1(s)\tau\right)\left[f_{0ns}^1(s) - \frac{a_1 z^1(s)\left(1-\exp\left(b_1-\Phi_{ns}^1(s)\right)\right)}{b_1-\Phi_{ns}^1(s)}\right] \quad (9)$$

لازم به ذکر است که معادله بالا با استفاده از این تقریب $\frac{\alpha_e}{\alpha_s}=\left(a_1\exp(b_1\tau)\right)$ بدست آمده که این تقریب توسط چندین مقاله مختلف استفاده و نتایج بدست آمده، قابل قبول بوده‌اند [۱۱ و۱۰، ۷، ٦]. با داشتن $f_{ns}^1(s,t)$ معادله (۷) و $f^1(s,\tau)$ به صورت زیر بدست می‌آید.

$$\frac{\partial m^1(s,\tau)}{\partial\tau} = \left(a_1\exp(b_1\tau)\right)\left[\Omega_m^1(s) m^1(s,t) + \Upsilon_m^1(s)\left(k_{ff}(s,t) f_0^1(s) + k_{fg}(s,t) g_0^1(s)\right) + \Upsilon_{nsm}^1(s)\left(Eq.(9)\right)\right] \quad (10)$$

حل این معادله به آسانی امکان پذیر نیست از اینرو مجدداً از تبدیلات لاپلاس استفاده می‌کنیم. این بار معادله را از فضای τ به فضای u می‌بریم. از آنجا که ضریب a_1 بسیار کوچکتر از یک می‌باشد، می‌توانیم از آن به عنوان پارامتر بسط استفاده نمود. بنابراین در مرتبه اول این بسط، معادله (۱۰) در فضای u در مرتبه LO به صورت زیر به دست می آید.

$$m_1^1(s,u) = \frac{m_0^1(s)}{u} \quad (11)$$

و در مرتبه دوم این بسط، معادله (۱۰) به صورت زیر به دست می‌آید.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

$$m_2(s,u)=\frac{m_0^1(s)}{u}+\frac{a_1}{u}\Big(A_1(s,u)f_{0s}(s)+ \quad (۱۲)$$
$$A_2(s,u)g_0^1(s)+A_3(s,u)f_{0ns}^1(s)+m_1^1(s,u-b_1)\Big)$$

که در معادله بالا ضرایب A_1، A_2 و A_3 به صورت زیر می‌باشند.

$$_1(\quad)=\frac{2a_1\Upsilon_m^1(s)R_2}{(\quad)}\Big|\frac{(\Phi_g^1(\quad)\quad{}^1_f(\quad))}{\quad{}_2}-\Big| \quad (۱۳)$$

$$A_2(s,u)=-\frac{4a_1\Upsilon_m^1(s)\Theta_f^1(s)}{\left(R_1^2-R_2^2\right)} \quad (۱٤)$$

$$A_3(s,u)=-\frac{a_1\Upsilon_{nsm}^1(s)}{\left(b+\Phi_{ns}^1(s)-u\right)} \quad (۱۵)$$

که در معادلات بالا $R_2=\left(-2b_1-\Phi_f(s)-\Phi_g(s)+2u\right)$ و $R_1=\sqrt{\left(\Phi_f^1(s)-\Phi_g^1(s)\right)^2+4\Theta_f^1(s)\Theta_g^1(s)}$ می‌باشند.

به دلیل کوچک بودن پارامتر a_1 نسبت به یک، فقط تا جمله دوم بسط را استفاده می‌کنیم. با استفاده از تبدیل لاپلاس معکوس معادله (۱۲) می‌توانیم جواب نهایی برای تابع توزیع فوتون در فوتون را در مرتبه LO بدست آوریم.

در ادامه به حل تابع توزیع فوتون در مرتبه NLO QCD می‌پردازیم. روش محاسبه این تابع توزیع در مرتبه NLO مشابه مرتبه LO می باشد با این تفاوت که در مرتبه NLO تابع‌های شکاف تغییر می‌کنند. توابع توزیع یکتا، گلوئون، فوتون و غیر یکتا در این مرتبه به صورت زیر می باشند:

$$\frac{\partial f^2(s,\tau)}{\partial\tau}=\left(\Phi_f^1(s)+a_2\exp(-b_2\tau)\Phi_f^2(s)\right)f^2(s,\tau) \quad (۱٦)$$
$$+\left(\Theta^1(s)+a_2\exp(-b_2\tau)\Theta^2(s_f)\right)g^2(s,\tau)$$

$$\frac{\partial g^2(s,\tau)}{\partial\tau}=\left(\Theta_g^1(s)+a_2\exp(-b_2\tau)\Theta_g^2(s)\right)f^2(s,\tau)+ \quad (۱۷)$$
$$+\left(\Phi^1(s)+a\ \exp(-b\ \tau)\Phi^2(s)\right)g^2(s,\tau)$$

$$\frac{\partial m^2(s,\tau)}{\partial\tau}\quad a\ \exp(b\ \tau)\Big(\quad{}_m(s)m\ \ (s,\tau) \quad (۱۸)$$
$$+\Upsilon_\gamma^1(s)f^2(s\quad)\quad{}^1_{ns\gamma}(\quad)\quad{}^2_{ns}(\quad)\Big)$$

$$\frac{\partial f_{ns}^2(s,\tau)}{\partial\tau}=a_3\exp(b_3\tau)z^2(s)+\left(\Phi_{ns}^1(s)+ \quad (۱۹)$$
$$a_2\exp(\ b_2\ )\quad{}^2_{ns}(\quad)\Big)\quad{}^2_{ns}(\quad)$$

ضرایب Φ^2 و Θ^2 در مرجع [۱۲] بدست آمده‌اند. در روابط بالا از بسط‌های معتبر زیر استفاده کرده‌ایم.

$$\frac{\alpha_s^2(Q^2)}{4\pi}=a_2\exp\quad{}_2\ ,\frac{\alpha_e}{\alpha_s}=a_3\exp(-b_3\ ) \quad (۲۰)$$

f^2 از حل معادلات (۱٦) و (۱۷) ، و f_{ns}^2 از حل معادله (۱۹) بدست می آیند. لازم به ذکر است برای بدست آوردن این دو تابع از تبدیل لاپلاس τ به u استفاده نموده‌ایم. حال با قرار دادن f^2 و f_{ns}^2 در معادله (۱۸) تابع توزیع فوتون را در مرتبه NLO QCD و در مرتبه دوم بسط های (۲۰) به صورت زیر بدست آوریم.

$$_2(\quad)=\frac{m^1(s)}{u}+\frac{a_3}{u}\Big(B_1(s\ u)f_{0s}(s) \quad (۲۱)$$
$$+B_2(s,u)g_0^2(s)+B_3(s,u)f_{0ns}^2(s)+m_1(s,u-b_3)\Big)$$

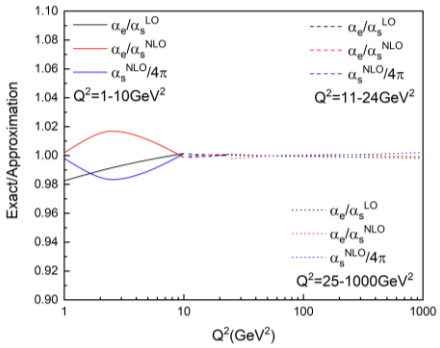
با استفاده از برنامه متمتیکا می‌توان ضرایب موجود در معادله بالا را به سادگی به دست آورد (به علت طولانی بودن ضرایب از آوردن آنها خودداری کرده‌ایم). اندیس ۲ روی حروف نشان دهنده مرتبه دوم یعنی NLO QCD می‌باشد. حال با استفاده از تبدیل لاپلاس معکوس و استفاده از تغییر متغییرهای $v\equiv\ln(1/x)$ و $\tau=1/4\pi\int_{Q_0^2}^{Q^2}\alpha_s(Q^2)d\ln(\quad^2)$ می‌توانیم معادلات (۱۲) و (۲۱) را به فضای x و Q^2 برگردانیم.

نتایج

در این بخش به نتایج عددی معادلات بدست آمده برای تابع توزیع فوتون در فوتون می‌پردازیم. برای بدست آوردن این نتایج، ما نیازمند توابع توزیع در مقیاس اولیه $Q_0^2=1GeV$ (یعنی f_{0s} و g_0 و f_{0ns}) می‌باشیم. برای این منظور، از نتایج برازش شده GRV [۷] استفاده کرده‌ایم. برای بدست آوردن تابع توزیع فوتون در مقیاس اولیه یعنی m_0 از روشی مشابه که در مرجع [۱۳] برای توزیع فوتون در پروتون استفاده شده بهره جسته‌ایم. برای مقادیر عددی پارامتر قطع QCD از نتایج مرجع [۱٤] استفاده شده است. همانطور که قبلاً بیان کردیم حل معادلات جفت شده DGLAP برای تابع توزیع فوتون به آسانی امکان پذیر نمی‌باشد و از اینرو در مراحل محاسبات ناگزیر به استفاده از تقریب‌هایی هستیم. در شکل (۱) اختلاف مقادیر واقعی و تقریبی نشان داده شده که با مشاهده این شکل مشخص می‌شود که تقریب‌هایی که ما در این مقاله استفاد نموده‌ایم قابل قبول می باشد. در شکل (۲) نتایج تابع توزیع فوتون در فوتون را در مقیاس‌های $Q^2=$ ۵،۱۰،۲۰،۸۰،۱۲۰

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

$800 GeV^2$ نشان داده‌ایم و آنها را با تابع توزیع کوارک شگفت و افسون که توسط GRV [۷] بدست آمده، مقایسه کرده‌ایم. همانطور که این شکل نشان می‌دهد سهم تابع توزیع فوتون در فوتون سهم قابل ملاحظه‌ای را در بر می‌گیرد.



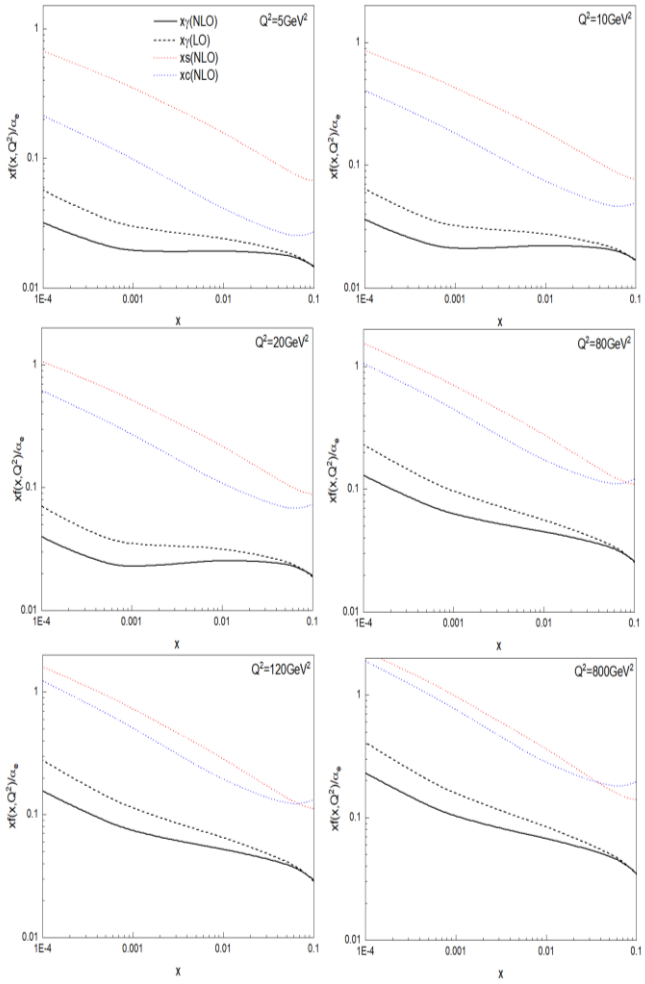
شکل ۱: نسبت مقادیر دقیق و تقریب های ارائه شده

نتیجه گیری

ما در این مقاله با استفاده از معادلات DGLAP برای فوتون و تبدیل لاپلاس به محاسبه تابع توزیع فوتون در فوتون پرداختیم و سپس آن را با تابع توزیع کوارک های شگفت و افسون مقایسه نمودیم. نتایج نشان می‌دهند که در Q^2 های بالا سهم توزریع فوتون در فوتون تقریبا ۱۰٪ کواراک افسون در فوتون می باشد که توسط GRV بدست آمده است. پس می‌توان سهم تابع توزیع فوتون در فوتون را به عنوان تصحیحی برای سطح مقطع فوتون-فوتون در نظر گرفت که منجر به نزدیک شدن محاسبات نظری با داده‌های تجربی خواهد شد.

مرجع‌ها

[۱] T. Ahmed, V. Andreev, B. Andrieu, M. Arpagaus, A. Babaev, H. Bärwolff, J. Ban et al.; "*Total photoproduction cross section measurement at HERA energies*"; Phys. Lett. B ۲۹۹(۳–٤). (۱۹۹۳) ۳۷٤.
[۲] J. Breitweg, Z.E.U.S. Collaboration; "*Measurement of dijet photoproduction at high transverse energies at HERA*"; Eur. Phys. J. C Part. Fields ۱۱(۱). (۱۹۹۹) ۳۵.
[۳] M. Acciarri, P. Achard, O. Adriani,M. Aguilar-Benitez, J. Alcaraz, G. Alemanni, J. Allaby et al.; "*Measurement of the photon structure function at high Q^2 at LEP*"; Phys. Lett. B ٤۸۳(٤). (۲۰۰۰) ۳۷۳.
[٤] M. Acciarri, P. Achard, O. Adriani,M. Aguilar-Benitez, J. Alcaraz, G.Alemanni,J.Allabyetal; "*The Q^2 evolution of the hadronic photon structure function $F_\gamma{}^2$ at LEP*"; Phys. Lett. B ٤٤۷(۱–۲). (۱۹۹۹) ۱٤۷.
[٥] M. Gluck, E. Reya, A. Vogt; "*Photonic parton distributions*"; Phys. Rev. D ٤٦(٥). (۱۹۹۲) ۱۹۷۳.
[٦] S. Dadfar,S. Zarrin; "*Analytic derivation of the photon structure function F^2_γ (x, Q^2) at the leading order and the next-to-leading order approximations based on the Laplace transform method*"; European Physical Journal C--Particles & Fields ۸۰, no. ٤. (۲۰۲۰) ۳۱۹.



شکل ۲: مقایسه بین تابع توزیع فوتون و کوارک شگفت و افسون را نشان می دهد.

[۷] M. Mottaghizadeh, P. Eslami, F. Taghavi-Shahri; "*Decoupling the NLO-coupled QED⊗QCD, DGLAP evolution equations, using Laplace transform method*"; Int. J. Mod. Phys. A ۳۲(۱٤). (۲۰۱۷).
[۸] R. Nisius; "*The photon structure from deep inelastic electron photon scattering*"; Phys. Rep. ۳۳۲(٤–٦). (۲۰۰۰) ۱٦٥.
[۹] R.J. DeWitt, L.M. Jones, J.D. Sullivan, D.E.Willen, H.W.Wyld Jr; "*Anomalous components of the photon structure functions*"; Phys. Rev. D ۱۹(۷). (۱۹۷۹) ۲۰٤٦.
[۱۰] S. Zarrin, G.R. Boroun; "*Solution of QCD⊗QED coupled DGLAP equations at NLO*". Nucl. Phys. B ۹۲۲. (۲۰۱۷) ۱۲٦.
[۱۱] M.M. Block, L. Durand, P. Ha, D.W. McKay; "*Decoupling the NLO coupled DGLAP evolution equations: an analytic solution to pQCD*"; Eur. Phys. J. C ٦۹(۳–٤). (۲۰۱۰) ٤۲٥.
[۱۲] K. Hamzeh, M. Abolfazl, T. S. Atashbar; "*Analytic derivation of the next-to-leading order proton structure function $F_p{}^2$ (x, Q^2) based on the Laplace transformation*"; Phys. Rev. C ۹٥(۳). (۲۰۱۷) ۰۳٥۲۰۱.
[۱۳] A.D. Martin, R.G. Roberts, W.J. Stirling, R.S. Thorne; "*Parton distributions incorporating QED contributions*"; Eur. Phys. J. C Part. Fields ۳۹(۲). (۲۰۰٥) ۱٥٥.
[۱٤] G.M. Prosperi, M. Raciti, and C. Simolo; "On the running coupling constant in QCD"; *Progress in Particle and Nuclear Physics* ٥۸, no. ۲. (۲۰۰۷) ۳۸۷.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

شبیه سازی بازتاب و عبور نور از لایه های اپتیکی همدوس، همدوس جزئی و ناهمدوس

مرعشی، سید عدنان؛ رضوانی جلال، مسعود؛ عبدی کیان، علیرضا

گروه فیزیک و فوتونیک، دانشگاه ملایر، ملایر

چکیده

در مقالهٔ حاضر، با استفاده از تکنیک ماتریس انتقال به مسئلهٔ بازتاب و عبور نور در لایه ها و پشته های اپتیکی پرداخته می شود. ابتدا، ماتریس انتقال کل به دست می آید. سپس، ضرایب بازتاب و عبور طیف مرئی و میانگین دقیق ریاضی آن‌ها با استفاده از یک کد رایانه ای برای لایه هایی با همدوسی کامل، همدوسی جزئی و نیز ناهمدوسی کامل محاسبه می شوند. معلوم می شود که طیف بازتابی و عبوری لایه های همدوس دارای فریزهای تداخلی تیز با نمایانی کامل هستند. در لایه های ناهمدوس هیچ اثری از تداخل نیست و عبور و بازتاب به طور هموار و مستقل از طول موج رخ می دهند. در همدوسی جزئی نیز خطوط تداخلی ضعیف با نمایانی کم قابل مشاهده می باشند. این نتایج بسیار دقیق تر از مواردی هستند که بر اساس میانگین گیری آماری با تعداد اجراهای محدود به دست می آیند.

واژه های کلیدی: *بازتاب و عبور نور، لایه های اپتیکی همدوس، ناهمدوس، نمایانی.*

Simulation of Light Reflection and Transmission form Coherent, Partially Coherent and Incoherent Optical Layers

Marashi, Seyed Adnan; Rezvani Jalal, Masoud; Abdikian, Alireza

Department of Physics and Photonics, Malayer University, Malayer

Abstract

In this paper, the problem of light reflection and transmission from optical layers and stacks is considered using transfer matrix technique. First, the total transfer matrix is obtained. Then, reflection and transmission coefficients of visible spectrum and their exact averages from coherent, partially coherent and incoherent layers are calculated using a computer code. It is found that, the reflection and transmission spectra for coherent layers have distinct coherence fringes with full visibility. For incoherent layers no sign of interference is seen and smooth reflection and transmission independent of wavelength occur. In partial coherence, week interference lines with low visibility are observable. The results are much more exact than those obtained by statistical averaging with finite number of executions.

***Keywords**: Reflection and transmission of light, Coherent optical layers, Incoherent, Visibility.*

PACS No. 41, 42, 89.

مقدمه

لایه های نازک اپتیکی کاربردهای بسیار گسترده ای دارند که از آن جمله می توان به لایهٔ ضد بازتاب در عدسی ها، شیشهٔ عینک و سلول های خورشیدی و همچنین ساخت آینه های دی الکتریکی و بلورهای فوتونی اشاره کرد [۱]. آنچه که در اپتیک لایه های نازک نقش اساسی را بازی می کند مسئلهٔ همدوسی است. به عبارت دیگر، ویژگی های جذاب اپتیکیِ لایه های نازک فقط در حضور نور همدوس اتفاق می افتد. البته، همهٔ منابع نوری دارای درجه ای از همدوسی هستند مثلاً، طول همدوسی در لیزرها خیلی طولانی است ولی برای نور خورشید این طول کمتر از μm ۳۰ است [۲]. این بدان معنی است که با لیزرها می توان به راحتی تداخل لایهٔ نازک ایجاد کرد ولی اگر قرار باشد با نور خورشید این کار انجام شود باید لایه هایی با ضخامت میکرومتری و پستی بلندی های خیلی کم طراحی کرد.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

از طرف دیگر، غیر از همدوسی نور، همدوسی لایه ها نیز نقش حیاتی در اپتیک لایه های نازک ایفاء می کند. منظور از همدوسی لایه ها میزان تغییرات تصادفی فازی درون آنها (ناشی از افت و خیز ضخامت، پستی و بلندی سطوح و یا وجود ناهمگنی ها، نقایص ساختاری و خلل و فرج و نیز سایر منابع پراکننده) می باشد [۳]. این عوامل ناهمدوسی لایه ای نیز باعث خواهند شد که آثار موجی لایه های نازک کاهش یابد [٤]. چنین وضعیتی برای وقتی که لایه های متعدّد پشت سر هم مثل آینه های براگ، بلورهای فوتونی و سلول های خورشیدی وجود داشته باشد وخیم تر نیز خواهد شد. روش های زیادی برای فرمول بندی و مطالعهٔ انتشار نور در لایه های نازک ناهمدوس و یا نیمه همدوس در مراجع گزارش شده است که اکثر آنها مبتنی بر تکنیک ماتریس انتقال می باشند [۷-۵]. در غالب این روش ها نور فرودی به طور همدوس وارد محاسبات می شود ولی برای لایه های مورد نظر درجهٔ دلخواهی از ناهمدوسی (یعنی افت و خیز ضخامت و ...) لحاظ می گردد. در انتها نیز آثار ناهمدوسی با یک میانگین گیری حساب می شود. فرایند متوسط گیری معمولاً روی تعداد محدودی از اجراها انجام می گردد و از این رو شامل خطا می باشد.

در مقالهٔ حاضر نیز از روش ماتریس انتقال برای مطالعهٔ نظری و محاسبه عددی بازتاب و عبور طیفی نور همدوس از سه لایهٔ اپتیکی همدوس، همدوس جزئی و ناهمدوس ولی با میانگین گیری دقیق ریاضی استفاده می شود.

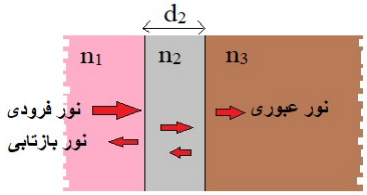
فرمول بندی ماتریسی بازتاب و عبور از لایه ها

برای مطالعهٔ بازتاب و عبور موج الکترومغناطیسی از لایه های اپتیکی، استفاده از روش ماتریس انتقال بسیار مناسب است [۸]. در این تکنیک، به انتشار در هر لایه و نیز عبور از لایه ای به لایهٔ دیگر یک ماتریس ۲×۲ نسبت داده می شود. برای مثال یک لایه با ضریب شکست n_2 و ضخامت d_2 در نظر بگیرید که بین محیط های چپ و راست با ضرایب شکست n_1 و n_3 طبق شکل ۱ واقع است. برای این تک لایه، یک ماتریس گذار از محیط n_1 به n_2، یک انتشار به طول d_2 در محیط n_2 و یک گذار از n_2 به n_3 وجود دارد که به صورت زیر هستند [۸]:

$$A_{n1\to n2}=\frac{1}{2n_2}\begin{bmatrix} n_2+n_1 & n_2-n_1 \\ n_2-n_1 & n_2+n_1 \end{bmatrix};$$
$$A_{n2}=\begin{bmatrix} e^{-ikn_2d_2} & 0 \\ 0 & e^{ikn_2d_2} \end{bmatrix};$$
$$A_{n2\to n3}=\frac{1}{2n_3}\begin{bmatrix} n_3+n_2 & n_3-n_{21} \\ n_3-n_2 & n_3+n_2 \end{bmatrix};$$

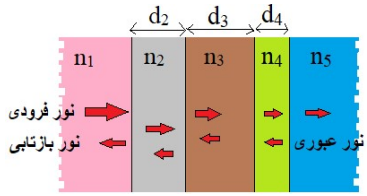
(۱)

با ضرب این ماتریس ها از آخر به اول، ماتریس انتقال لایه مورد نظر به دست می آید.



شکل ۱: لایهٔ n_2 به ضخامت d_2 بین محیط n_1 و محیط n_3 واقع شده است و نوری از سمت چپ به آن فرود می آید.

همین کار را می توان برای هر تعداد دلخواهی از لایه ها انجام داد. برای مثال، فرض می شود که سه لایه به ترتیب با ضرایب شکست n_2، n_3 و n_4 و ضخامت های d_2، d_3 و d_4 بین محیط های n_1 و n_5 طبق شکل ۲ واقع شده باشند و نوری از محیط چپ (n_1) عمود بر لایه ها فرود آید:



شکل ۲: لایه های n_2، n_3 و n_4 با ضخامت های d_2، d_3 و d_4 واقع در بین محیط های n_1 و n_5

ماتریس انتقال کل برای پیکربندی شکل ۲ به صورت زیر است:

$$A=\frac{1}{2n_5}\begin{bmatrix} n_5+n_4 & n_5-n_4 \\ n_5-n_4 & n_5+n_4 \end{bmatrix}$$
$$\begin{bmatrix} e^{-ikn_4d_4} & 0 \\ 0 & e^{ikn_4d_4} \end{bmatrix}\frac{1}{2n_4}\begin{bmatrix} n_4+n_3 & n_4-n_3 \\ n_4-n_3 & n_4+n_3 \end{bmatrix}$$
$$\begin{bmatrix} e^{-ikn_3d_3} & 0 \\ 0 & e^{ikn_3d_3} \end{bmatrix}\frac{1}{2n_3}\begin{bmatrix} n_3+n_2 & n_3-n_2 \\ n_3-n_2 & n_3+n_2 \end{bmatrix}$$
$$\begin{bmatrix} e^{-ikn_2d_2} & 0 \\ 0 & e^{ikn_2d_2} \end{bmatrix}\frac{1}{2n_2}\begin{bmatrix} n_2+n_1 & n_2-n_1 \\ n_2-n_1 & n_2+n_1 \end{bmatrix}$$

(۲)

از ماتریس انتقال به راحتی می توان ماتریس پراکندگی را به دست آورده و ضرایب بازتاب و عبور r و t را پیدا کرد. این ضرایب را می توان از معادلهٔ ماتریسی زیر نیز محاسبه کرد [۸]:

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

$$\begin{bmatrix} t(\omega) \\ 0 \end{bmatrix} = A \begin{bmatrix} 1 \\ r(\omega) \end{bmatrix} \quad (۳)$$

برای لحاظ کردن همدوسی لایه ها می توان از ماتریس انتقال رابطهٔ (۲) استفاده کرد. طبق این رابطه، ماتریس انتقال کل تابعی از ضخامت لایه ها به شکل $A(d_2,d_3,d_4)$ است. اگر بازهٔ کوچکی برای افت و خیز ضخامت هر لایه به میزان δ در نظر گرفته شود آنگاه به راحتی می توان مسئلهٔ بازتاب و عبور نور از لایه هایی با درجهٔ همدوسی دلخواه را پیدا کرد. روش کار بدین صورت است که ابتدا ضرایب بازتاب و عبور شدّت بر حسب ضخامت لایه ها به دست می آیند یعنی $R(d_2,d_3,d_4)$ و $T(d_2,d_3,d_4)$. سپس، میانگین دقیق آن‌ها در بازهٔ مجاز تغییرات یعنی δ_2، δ_3 و δ_4 محاسبه می شود. با این کار بازتاب و عبور در حضور همدوسی مد نظر به دست می آیند. تلورانس δ هم باید با توجه به میزان همدوسی انتخاب شود. برای انجام این کار باید مقدار δ را به اختلاف فاز بین ۰ و π مرتبط کرد. اگر ضریب شکست لایهٔ مورد نظر n و عدد موج نوری فرودی (در خلأ) هم k باشد آنگاه تلورانس ضخامتی δ باعث ایجاد تلورانس اختلاف فاز به اندازهٔ زیر خواهد شد [٦]:

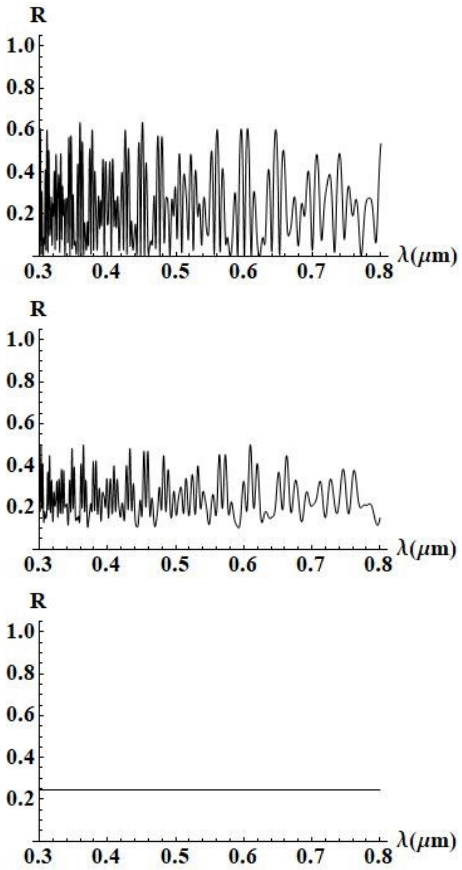
$$\Delta\varphi = nk\delta \quad (٤)$$

همدوسی کامل وقتی وجود دارد که هیچ افت و خیزی در فاز نباشد یعنی $\Delta\varphi=0$ در ناهمدوسی کامل نیز میزان افت و خیز باید $\Delta\varphi=\pi$ باشد تا امکان ایجاد اختلاف فاز ۱۸۰ درجه و حذف آثار تداخلی مهیّا شود. برای هر اختلاف فاز دیگری در بازهٔ $0<\Delta\varphi<\pi$ نیز همدوسی جزئی به وجود می آید. با این انتخاب ها و استفاده از رابطهٔ (٤)، تلورانس ضخامت برای لایهٔ مورد نظر پیدا می شود.

برای انجام شبیه سازی ها، برنامه ای به زبان *Mathematica* نوشته شده است که با دریافت مشخصات هندسی و اپتیکی لایه ها و میزان همدوسی آن‌ها، ماتریس انتقال کل را تشکیل می دهد و پس از میانگین گیری دقیق ریاضی از آن، ضرایب بازتاب و عبور شدت را محاسبه می کند.

نتایج شبیه سازی و بررسی آن‌ها

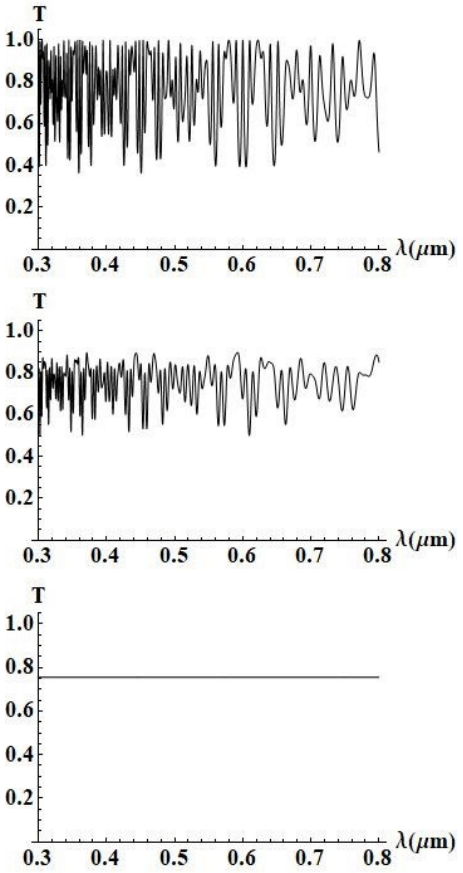
سه لایهٔ d_2، d_3 و d_4 به ترتیب با ضخامت های دلخواه ۳، ۵ و ۲ میکرومتر و ضرایب شکست ۱٫۵، ۳ و ۱٫۸ بین محیط های n_1=۱ و n_5=۱ لحاظ می شوند. نور مرئی در بازهٔ $0.3\,\mu m<\lambda<0.8\,\mu m$ به طور عمود به این سه لایه فرود می آید و بازتاب و عبور آن محاسبه می شود. سه نوع همدوسی در اینجا بررسی می شود: همدوسی کامل با $\Delta\varphi=0$ ناهمدوسی کامل با $\Delta\varphi=\pi$ و همدوسی جزئی با $\Delta\varphi=\pi/2$ برای این تلورانس های فازی، مقادیر δ از رابطهٔ (٤) به ترتیب دارای اندازهٔ ۰، π/nk و $\pi/2nk$ خواهد بود. بازتاب و عبور از این سه لایه به ترتیب در شکل های ۳ و ٤ ترسیم شده اند.



شکل ۳: ضریب بازتاب از سه لایهٔ مذکور در شکل ۲ برای حالت همدوسی کامل لایه ها (شکل بالا)، همدوسی جزئی به میزان ۵۰٪ (شکل وسط) و ناهمدوسی کامل (شکل پایین).

از این نمودارها به وضوح مشخص است که حاصل جمع ضرایب عبور و بازتاب برای هر نوع همدوسی برابر با $R+T=1$ است که دلیلی بر صحّت محاسبات بوده و، در حقیقت، پایستگی انرژی را نشان می دهد. در نمودارهای مربوط به همدوسی کامل (شکل ۳و٤-بالا) فریزهای تداخلی کامل با نمایانی (وضوح) بسیار بالا قابل مشاهده هستند که حاکی از بروز آثار موجی رفت و برگشتی وابسته به λ به خاطر همدوسی کامل لایه ها می باشند.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



شکل ۴: ضریب عبور از سه لایهٔ مذکور با همدوسی کامل لایه ها (بالا)، همدوسی جزئی ۵۰٪ (وسط) و ناهمدوسی کامل (پایین).

در لایه های ناهمدوس وضعیت کاملاً متفاوت است. در این حالت، دیگر خبری از فریزهای تداخلی نیست. به عبارت دیگر، همانطور که در مقدمه اشاره شد بسیاری از خواص لایه های نازک از همدوسی لایه ها نشات می گیرد و در ناهمدوسی کامل اثری از آن‌ها دیده نمی شود. در ناهمدوسی، همانطور که از شکل های ۳و٤-پایین هم معلوم است ضرایب بازتاب و عبور وابستگی طول موجی خود را به طور کامل از دست می دهند. این موضوع جالب بیان می کند که ضرایب بازتاب و عبور از لایهٔ ناهمدوس، بدون پاشندگی (یعنی مستقل از طول موج) می باشند [٤و٧].

در همدوسی جزئی نیز (شکل های ۳و٤-وسط) یک شرایط بینابینی وجود دارد یعنی فریزهای تداخلی دیده می شوند ولی نمایانی آن‌ها کم است. هر چه درجهٔ همدوسی کم شود نمایانی فریزها نیز کاهش می یابد و در ناهمدوسی کامل به صفر می رسد.

نتیجه گیری

در این مقاله، بازتاب و عبور نور همدوس از سه لایهٔ اپتیکی نازک به هم چسبیده برای فرود قائم با استفاده از تکنیک ماتریس انتقال و میانگین گیری دقیق مورد مطالعهٔ نظری و شبیه سازی قرار گرفت. معلوم شد که در بازتاب از لایه های همدوس، فریزهای تداخلی با نمایانی کامل تشکیل می شوند و، به عبارت دیگر، بازتاب و عبور نور از آن‌ها شدیداً به طول موج وابستگی پیدا می کند. برای لایه های ناهمدوس کامل، هیچ خبری از فریزهای تداخلی نبود که مؤید این مطلب است که همدوسی لایه ها شرط اساسی برای داشتن آثار اصیل موجی همچون تداخل است. در لایه هایی با همدوس جزئی نیز یک حالت میانی برقرار بود و فریزهای تداخلی با نمایانی کم دیده شدند. نتایج حاصل از این مقاله دقیق تر از موارد گزارش شده در مراجع (که بر اساس میانگین گیری آماری هستند) می باشد. این نتایج می تواند در توسعهٔ نظریه اپتیک ناهمدوس لایه های نازک و نیز سلول های خورشیدی و همچین بلورهای فوتونی بسیار کاربردی باشد.

سپاسگزاری

از حمایت دانشگاه ملایر در به ثمر رسیدن این کار پژوهشی تشکر می شود.

مرجع ها

[۱] A. Piegari and F. Flory; "*Optical thin films and coatings: From materials to applications*"; Second edition, Elsevier Science, (2018).

[۲] S. Divitt and L. Novotny; "Spatial coherence of sunlight and its implications for light management in photovoltaics"; *Optica* **20**, No.2 (2015) 95-103.

[۳] K. Jager et al; "On accurate simulations of thin-film solar cells with a thick glass superstrate"; *Optics Express* **26**, No.2 (2018) A89-A107.

[۴] A. Campa et al; "Two approaches for incoherent propagation of light in rigorous numerical simulations", *Progress in electromagnetics Research* **137** (2013) 187-202.

[۵] C. C. Katsidis and D. I. Siapkas; "General transfer-matrix method for optical multilayer systems with coherent, partially coherent, and incoherent interference"; *Applied Optics* **41**, No. 19 (2002) 3978-3987.

[۶] R. Santbergen et al "Optical model for multilayer structures with coherent, partly coherent and incoherent layers"; *Optics Express* **21**, N. S2 (2012) A262-A267.

[۷] M. C. Troparevsky et al; "Transfer-matrix formalism for the calculation of optical response in multilayer systems: from coherent to incoherent interference"; *Optics Express* **18**, N. 24 (2010) 24715-24721.

[۸] صالح، بهاء؛ *مبانی فوتونیک*، ترجمه: محمدصادق ابریشمیان، دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی، ۱۳۹۳.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بهینه‌سازی نرخ خطای بیت کوانتومی در پروتکل حالت طعمه توزیع کلید کوانتومی

سرشار، سامان [1و2]؛ شهیدانی، ساره[1]؛اکبری، محسن[1]

[1]مرکز فناوری‌های کوانتومی ایران، انتهای خیابان کارگر شمالی ، تهران

[2] گروه فیزیک، دانشگاه صنعتی شاهرود، شاهرود

چکیده

توزیع کلید کوانتومی ، ارتباط امن بین دو یا چند نفر را براساس قوانین مکانیک کوانتومی برای فواصل نسبتاً دور فراهم می نماید. پروتکل استفاده از حالت طعمه به عنوان یک روش مفید برای ارتقای عملکردی یک سامانه توزیع کلید کوانتومی پیشنهاد شده است. در این مقاله ما نشان دادیم که به ازای یک میانگین تعداد فوتونهای سیگنال ثابت، با تغییر میانگین تعداد فوتونهای حالت طعمه ، مقادیر نرخ خطای بیت کوانتومی و نرخ کلید ارسالی تغییر می‌کند. بنابراین، در بهینه سازی نرخ خطای مزبور اثر شدت پالس طعمه نیز باید درنظر گرفته شود.

واژه های کلیدی: توزیع کلید کوانتومی ، پروتکل حالت طعمه، نرخ خطای بیت کوانتومی

Optimization of the Quantum bit error rate in Decoy-state protocol of Quantum key distribution

Sarshar, Saman[1,2]; Shahidani, Sareh[1]; Akbari, Mohsen[1]

[1]Iranian Center for Quantum Technologies, Tehran,
[2] Department of Physics, Shahrood University of Technology, Shahrood

Abstract

Quantum key distribution provides a secure communication between two or more nodes in long distances. For quantum key distribution protocols that are based on weak laser sources, the performance is limited by multi-photon pulses. Decoy states have been proposed as a useful method for substantially improving the performance of quantum key distribution. In this paper we show that, for constant values of the mean photon number of the signal, quantum bit error rate and secure key rate depends on the mean photon number of decoy state.

***Keywords**: Quantum key distribution, Decoy-state protocol and Quantum bit error rate*

PACS No.

مقدمه

توزیع کلید کوانتومی (QKD)، روشی برای ایجاد ارتباط امن بین فرستنده و گیرنده در فواصل نسبتاً دور معرفی می نماید که بر قوانین مکانیک کوانتومی مبتنی است. در واقع، در این روش امنیت کلید توسط اصول مکانیک کوانتومی تأمین می شود و همانند رمزنگاری کلاسیک مبتنی بر توابع ریاضی یک طرفه نمی‌باشد و امنیت آن بی قید وشرط است [1].

در وضعیت ایده آل، بهترین منابع برای توزیع امن کلید چشمه های تک فوتونی هستند. اما از لحاظ تجربی، دستیابی به چشمه های تک فوتونی دشوار و گران است. به همین دلیل، استفاده از منابع لیزری به شدت تضعیف شده بیش از سایر چشمه ها مورد استقبال محققین قرار گرفته است. نقطه ضعف چشمه های لیزری تضعیف شده این است که تابع توزیع این نوع چشمه ها از نوع پواسونی است. به همین دلیل، احتمال حضور حالت‌های با بیش از

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

یک فوتون در زمان توزیع وجود دارد. در سال 2000 میلادی، حمله‌ای موسوم به "حمله تقسیم تعداد فوتون" بر اساس نقص حضور پالس‌های چند فوتونی طراحی شد[2]. در این نوع حمله ، فرض می‌شود استراق سمع کننده قادر به تعیین تعداد فوتون‌های هر پالس باشد. در اینصورت او تمام پالس‌های تک-فوتونی را بلوکه می‌کند و بخشی از پالس‌های چند-فوتونی را برای خود ذخیره می‌نماید و بقیه را با استفاده از دوربرد کوانتومی (یعنی یک کانال بدون اتلاف) برای گیرنده ارسال می کند.

در سال 2003 ، پیشنهادی برای مقابله با این حمله مطرح شد که در آن، فرستنده پالس‌های اضافی (موسوم به طعمه) را به همراه پالس سیگنال اصلی (که حامل اطلاعات بارگذاری‌شده است) برای گیرنده می‌فرستد[3]. به این ترتیب، پالس های طعمه که خود می‌توانند با یکدیگر متفاوت باشند و نسبت به پالس های سیگنال نیز متفاوت هستند، به طور تصادفی با پالس های سیگنال در هم آمیخته می‌شوند وگیرنده می تواند میزان انتقال پالس‌های با شدت های مختلف را از طریق کانال کوانتومی اندازه‌گیری نماید.

به عبارت دیگر، با در اختیار داشتن منبعی با تعداد فوتونهای مختلف می توان الگویی را برای کانال عدد فوتونی درنظر گرفت [4] و الگوی مزبور را می توان با استفاده از روش حالت طعمه توموگرافی کرد و تخمین های دقیق تری را بر روی مولفه ی تک فوتونی ایجاد نمود [5]. در روش حالت طعمه، تابع توزیع تعداد فوتونهای منبع متفاوت است و این ویژگی به آمار اندازه گیری متفاوت در خروجی منجر می شود. فرستنده و گیرنده می توانند پارامترهای کانال از قبیل بازده Y_n و نرخ خطای بیت کوانتومی e_n را برای هر مولفه‌ی عدد فوتونی تخمین بزنند. یک فرض اساسی در یک سامانه ی توزیع کلید مبتنی بر حالت طعمه آن است که باید پالسهای طعمه و پالس سیگنال در همه ویژگی‌ها به جز میانگین تعداد فوتونها یکسان و تمیزناپذیر باشند. این نکته بدین معنا است که بعد از اندازه گیری تعداد فوتونها توسط استراق سمع کننده، او هیچ راهی برای فهم آنکه تعداد فوتونهای اندازه گیری شده مربوط به کدام یک از حالتهای طعمه و یا سیگنال بوده است، ندارد. بازده و نرخ خطای بیت کوانتومی(QBER) تنها به تعداد فوتونها(ی سیگنال یا طعمه) وابسته است و به نوع توزیعی که آن حالت از آن نتیجه شده است وابستگی ندارد، یعنی رابطه زیر همواره برقرار است،

$$Y_n(signal)=Y_n(decoy),\qquad e_n(signal)=e_n(decoy). \tag{1}$$

در چنین شرایطی استراق سمع کننده قادر به حمله به کانال با استفاده از روش تقسیم تعداد فوتونها نیست.

بسیاری از نتایج تجربی ثبت شده، قدرت روش پالس حالت طعمه در تأمین امنیت دقیق کلید نهایی را با دقت بالایی نشان می دهند [6-8]. بر مبنای تئوری ارائه شده در [5] استفاده از تنها دو پالس طعمه برای رسیدن به اهداف پروتکل کفایت می‌کند. ویژگی دو پالس طعمه مزبور این است که یکی از آنها دارای شدت نزدیک به صفر یا در حالت "خلاء " می باشد و دیگری از لحاظ شدت ضعیف تر از پالس سیگنال می باشد[9]. در اینجا میانگین تعداد فوتون‌های طعمه را با ν و میانگین تعداد فوتون‌های سیگنال را با μ نشان می‌دهیم. در بررسی‌های انجام شده در این پژوهش نرخ خطای بیت کوانتومی سیگنال به صورت تابعی از ν و μ محاسبه شده است. نشان می دهیم که مقدار میانگین تعداد فوتونهای حالت طعمه بر روی مقادیر نرخ خطای بیت کوانتومی و نرخ کلید ارسالی بیت اثر قابل توجهی دارد. این اثر به ویژه در مسافتهای طولانی قابل ملاحظه تر است.

کمترین بهره ی تقویت فوتونی ، یعنی Q_1^L ، با استفاده از سه کمیت Q_μ، Q_ν و Y_0، داده می شود که به ترتیب بهره تقویت سیگنال ، بهره تقویت حالت طعمه و بازده خلاء را نشان می‌دهند[9]:

$$Q_1 \ge Q_1^{L,\nu,o}=\frac{\mu^2 e^{-\mu}}{\mu\nu-\nu_2}\left(Q_\nu e^{\nu}-Q_\mu e^{\mu}\frac{\nu^2}{\mu^2}-\frac{\mu^2-\nu^2}{\mu^2}Y_0\right) \tag{2}$$

که در آن Q_ν^L و Y_0^U به ترتیب حدهای پایین و بالایی بر روی پالس طعمه و گذردهی خلاء هستند. حد بالایی برای نرخ خطای تک-فوتون از رابطه زیر به دست می آید[9]،

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

$$1 \quad 1^{U,v,0} \quad \frac{\mu\left(E_v Q_v e^{v} - e_0 Y_0\right)}{Q_1^{L,v,0} e^{\mu} v} \qquad (3)$$

که در آن E_v نرخ خطای بیت کوانتومی حالت طعمه است.

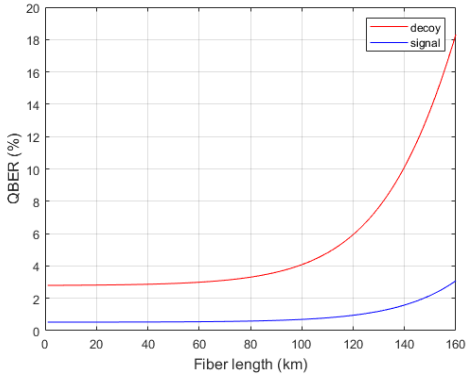
نرخ خطای بیت کوانتومی

نرخ خطای بیت کوانتومی به صورت نسبت نرخ‌های نادرست به کل بیت‌های دریافتی تعریف می‌شود و از مرتبه‌ی چند درصد می‌باشد. نرخ بیت نادرست از دو عامل ناشی میشود. عامل نخست کیفیت چیدمان اپتیکی است و عامل دوم از شمارش تاریکی آشکارساز ناشی میشود. سهم اول با دقت در پیاده‌سازی بخش های مختلف چیدمان قابل اصلاح و کمینه کردن است و به افزایش فاصله وابسته نیست ولی بخش دوم خطا، با افزایش مسافت انتقال داده افزایش می‌یابد. به عبارتی، با افزایش فاصله بین فرستنده و گیرنده و در نتیجه کاهش نرخ انتقال داده، نرخ خطای بیت کوانتومی ناشی از شمارش تاریکی افزایش می‌یابد. در شکل1، کاهش نرخ بیت امن نسبت به افزایش طول فیبر نشان داده شده است.

با درنظر گرفتن روابط (2)و(3)،می توان نشان داد که نرخ خطای بیت کوانتومی در پروتکل حالت- طعمه از فرمول زیر بدست می‌آید:

$$QBER^{signal} = \frac{e_1^{U,v,0} Q_1^{L,v,0} + e_0 Y_0 e^{-\mu}}{Q_\mu}, \qquad (5)$$

بر اساس این رابطه، نرخ خطای بیت کوانتومی برای پالس سیگنال به پارامترهای زیر وابسته است:

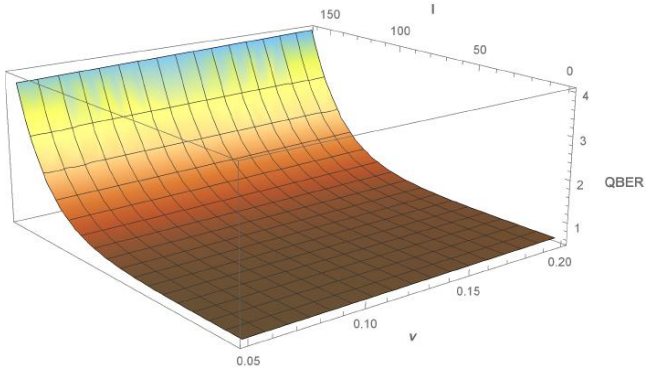


شکل1 : افزایش نرخ خطای بیت کوانتومی با افزایش طول فیبر.نرخ خطای بیت کوانتومی حالت طعمه به علت کمتر بودن میانگین تعداد فوتونهای آن نسبت حالت سیگنال، بیشتر است.

میانگین تعداد فوتون‌های سیگنال و طعمه، حد بالای نرخ خطای حالت تک فوتونی، حد پایین بهره تقویت حالت تک-فوتونی، نرخ خطای پس زمینه e_0، نرخ بازدهی پس‌زمینه Y_0 و بهره تقویت سیگنال. رابطه‌ی مشابهی را برای نرخ خطای بیت کوانتومی حالت طعمه می توان نوشت که از ذکر جزییات آن خودداری می‌کنیم.

در این مقاله، ما نشان دادیم که به ازای مقدار ثابت برای میانگین تعداد فوتون‌های سیگنال، تغییر میانگین تعداد فوتون‌های حالت طعمه سبب تغییر مقادیر نرخ خطای بیت کوانتومی و نرخ کلید ارسالی می‌شود. چنانچه در این شبیه‌سازی نشان داده شده است، با یک فیبر نوری به طول 160 کیلومتر، با افزایش میانگین تعداد فوتون های طعمه، نرخ خطای بیت کوانتومی افزایش و نرخ بیت امن ارسالی کاهش یافته است. این بررسی نشان می دهد، در بهینه سازی نرخ خطای بیت و امنیت ارسال، انتخاب میانگین تعداد فوتون‌های سیگنال به تنهایی کافی نیست و ضروری است تا فاکتور مهم دیگر، یعنی میانگین تعداد فوتون‌های طعمه نیز لحاظ گردد. در شکل2، این نتیجه نشان داده شده است. همانطور که در شکل2 نشان داده شده، نرخ خطای بیت کوانتومی با افزایش میانگین تعداد فوتون‌های طعمه افزایش یافته است و با افزایش طول فیبراین اثر قابل ملاحظه تر است.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



شکل2 : افزایش مانگین تعداد فوتون‌های حالت طعمه، منجر به افزایش نرخ خطای بیت کوانتومی به ازای طول های مختلف شده است.

مقادیر پارامترهای مهم در این شبیه سازی به صورت زیر فرض شده اند: بازدهی آشکارساز 0.3، ضریب میرایی فیبر نوری 0.2 دسی بل بر کیلومتر.

نتیجه گیری

در این مقاله نشان داده شده است که به ازای یک مقدار ثابت میانگین تعداد فوتون‌های سیگنال، مقدار میانگین تعداد فوتون‌های حالت طعمه بر روی مقادیر نرخ خطای بیت کوانتومی و نرخ کلید ارسالی به خصوص در مسافت های طولانی ارسال بیت اثر قابل توجهی دارد.

سپاسگزاری

از حمایت‌های گوناگون آقای دکتر علی اکبر صالحی، آقای دکتر محمدجواد کریمی ثابت و آقای دکتر محمدرضا آرم کمال تشکر و سپاس را داریم.

مرجع‌ها

[1] N. Gisin, G. Ribordy, W. Tittel and H. Zbinden, “Quantum cryptography,” *Rev. Mod. Phys*. **74**, (2002) 145–195.
[2] G. Brassard, N. L¨utkenhaus, T. Mor and B. C. Sanders, “Limits on practical quantum cryptography,” *Phys. Rev. Lett*. **85,** (2000) 1330–1333.
[3] W.-Y. Hwang, “Quantum key distribution with high loss: toward global secure communication,” *Phys. Rev. Lett*. **91,** (2003) 057901-1–4.
[4] Ma. X. *New. J. Phys*. **10**, (2008) 073018.
[5] X.-B. Wang, “Beating the photon pulse-number-splitting attack in practical quantum cryptography,” *Phys. Rev. Lett*. **94,** (2005) 230503-1–4.
[6] Y. Zhao, B. Qi, X. Ma, H.-K. Lo and L.Qian, “Experimental quantum key distribution with decoy states,” *Phys. Rev. Lett*. **96,** (2006) 070502-1–4.
[7] Z. L. Yuan, A. W. Sharpe and A. J. Shields, “Unconditionally secure one-way quantum key distribution using decoy pulses,” *Appl. Phys. Lett*. **90,** (2007) 011118-1–3.
[8] C. Gobby, Z. L. Yuan and A. J. Shields, Elec. Lett. “Unconditionally secure quantum key distribution over 50 km of standard telecom fiber,” *Electron. Lett*. **40,** (2004) 1603–1605.
[9] X. Ma, B. Qi, Y. Zhao and H.-K. Lo, “Practical decoy state for quantum key distribution,” *Phys. Rev. A* **72,** (2005) 012306-1–15.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

تأثیر پلاسمای جفت شده القایی (ICP) بر روی کاهش قارچ آسپرژیلوس از سطح پسته

قرشی، امیرحسین [۱]؛ کارگریان ، آمنه[۱]؛ روستا تسوجی، محمدامین [۲]

[۱]پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، پژوهشکده پلاسما و گداخت هسته‌ای، تهران، ایران

[۲]دانشکده مهندسی شیمی، دانشگاه آزاد مرودشت، مرودشت ، ایران

چکیده

در این مقاله، تأثیر پلاسما بر روی کاهش قارچ آسپرژیلوس از سطح پسته را با استفاده از دستگاه پلاسمای جفت‌شده القایی (ICP) مورد بررسی قرار داده‌ایم. بدین منظور، آزمایش‌های متفاوت با در نظر گرفتن پارامترهای مؤثر مانند فشار، توان، و زمان تابش برای از بین بردن قارچ آسپرژیلوس از روی سطح پسته به‌عنوان یک نمونه خشکبار، انجام و پارامترهای بهینه برای بیش‌ترین میزان کاهش قارچ با حفظ سلامت غذایی، بافت، ظاهر و افزایش ماندگاری پسته گزارش شده است. نتایج نشان می‌دهند، بیش‌ترین میزان کاهش قارچ آسپرژیلوس از سطح پسته با دستگاه ICP برابر با $2\ log(CFU/gr)$ (۳۳ ٪) در توان ۲۵۰w، فشار ۰٫۵ torr، و زمان ۲۰ دقیقه می‌باشد. انتظار می‌رود که در مقیاس‌های بزرگ صنعتی که دستگاه تولید پلاسما قادر به تحمل توان‌های ورودی بالاتر می‌باشد، این میزان کاهش قارچ به میزان بسیار بیش‌تری افزایش خواهد یافت. بنابراین، می‌توان تکنولوژی پلاسمای سرد را جایگزین روش‌های قدیمی و مرسوم کاهش قارچ آسپرژیلوس از سطح پسته، که اغلب گران بوده و دارای اثرات زیان‌آور بر روی سلامت محصولات هستند، نمود.

واژه های کلیدی: *قارچ اسپرژیلوس، پلاسمای جفت‌شده القایی، ماندگاری پسته، حذف قارچ.*

Influence of Inductively Coupled Plasma (ICP) on the Aspergillus fungus from the nut surface

A.H. Ghorashi[1], A. Kargarian[1], M. A. Roosta Tasouji[2]

1.Plasma and Nuclear Fusion Research School, Nuclear Science and Technology Research Institute, Tehran, Iran.
2.Chemical Eng. group, Faculty of Eng., Azad University, Marvdasht, Iran.

Abstract

The objective of this paper is investigation of plasma effect on the inactivation of Aspergillus Flavus fungi from nut surface using the Inductively Coupled Plasma (ICP) generating device. For this purpose, different experimental tests have been carried out by considering various parameters such as pressure, power, and radiation time in reduction of fungus from the surface of pistachio as a nut sample and eventually the optimum parameters for the maximum reduction of fungus by maintaining the food health, texture, appearance, and durability of the nuts are reported. The experimental results show the maximum reduction of Aspergillus fungus using the ICP device is 2 Log (CFU/gr) (33%) in power of 250 watt, pressure of 0.5 torr, and irradiation time of 10 minutes. It is expected that in large industrial scales, this fungi reduction will be increase because the plasma device is enabled to work in higher powers. Therefore, the cold plasma technology can replace the old and conventional Aspergillus fungi reduction methods, which are often very expensive and have detrimental effects on the nuts health.

***Keywords**:* Aspergillus Flavus, Inductively Coupled Plasma, pistachios sustained health, fungus reduction.

PACS No. 50

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد

http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مقدمه

مایکوتوکسین‌ها و آفلاتوکسین‌ها گروهی از ترکیبات سمی هستند که بطور طبیعی توسط چندین گونه قارچ و به طور عمده توسط قارچ آسپرژیلوس تولید می‌شوند و یکی از حادترین و بزرگترین تهدیدات برای محصولات کشاورزی می‌باشند[۱-۲]. قارچ آسپرژیلوس نسبت به آلودگی محصولات حاوی چربی و کربوهیدرات مانند دانه‌های روغنی و خشکبار علاقه نشان می‌دهد. در بین خشکبار، پسته جزء گران قیمت‌ترین آن‌هاست و این در حالی است که این خشکبار مناسب‌ترین بستر برای آلودگی به قارچ آسپرژیلوس است. از آنجایی‌که این معضل باعث لطمه و ضررهای بسیار اقتصادی و تجاری شده است، لذا، سازمان‌های جهانی جهت رفع این مشکل فعالیت‌های بسیاری انجام داده‌اند.

به منظور از بین بردن قارچ آسپرژیلوس، تاکنون بسیاری از روش-های درمانی مانند روش‌های شیمیایی ، فیزیکی، زیستی و بیولوژیکی پیشنهاد شده است [۳-٤]. اگرچه این روش‌ها می‌توانند آلودگی‌های قارچی سطحی را تا حدودی کاهش دهند، اما اغلب گران بوده و همچنین باعث اثرات زیان‌آور غیرقابل جبران برای محصولات می‌شوند. طی یک دهه گذشته، کاربرد پلاسما به‌عنوان یک روش نوین و غیر مخرب در بخش مهندسی و صنایع غذایی و فرآوری مواد غذایی بطور گسترده‌ای مورد توجه قرار گرفته است. پلاسمای سرد با قابلیت کار در دمای پایین می‌تواند امکان قارچ-زدایی از سطح محصولات را فراهم آورد. به‌علاوه، با توجه به محیط فعال شیمیایی پلاسما، این فناوری می‌تواند به تجزیه و از بین رفتن سم مایکوتوکسین تولید شده نیز منجر گردد. بنابراین، این روش می‌تواند بر خلاف سایر روش‌های مرسوم و قدیمی، به کاهش قارچ بدون آسیب زدن به بافت و سلامت غذایی محصولات، بپردازد. کاهش و یا حذف قارچ آسپرژیلوس از سطح خشکبار توسط پلاسمای سرد در تحقیقات مختلف گزارش شده است [۵-۱۰] که نتایج هر یک از این تحقیقات بسته به زمان تابش، توان ورودی، فشار و محیطی که از طریق آن پلاسما تولید می‌شود، متفاوت می‌باشند.

در این مقاله برای اولین بار، تأثیر پلاسمای غیرحرارتی با استفاده از دستگاه پلاسمای جفت شده القایی (ICP) بر روی کاهش قارچ آسپرژیلوس از روی سطح پسته مورد بررسی قرار گرفته است. با تکرار آزمایش در شرایط متفاوت، مقدار بهینه‌ی پارامترهای مؤثر در کاهش قارچ مانند فشار، توان ورودی، و زمان تابش نمونه‌ها مشخص گردید و بیش‌ترین میزان کاهش قارچ توسط دستگاه ICP بدست آمد.

شرح آزمایش

بذر قارچ آسپرژیلوس خالص در آزمایشگاه تخصصی پاستور، در محیط کشت آگار YEGC کشت داده شد. ظرف حاوی قارچ به مدت ٢٤ ساعت در انکوباتور در دمای ۳۷ درجه سانتی‌گراد و سپس در دمای ۲۵ درجه سانتی گراد برای ٤٨ ساعت بعد نگهداری شد. پس از ۳ روز قارچ رشد مناسب خود را داشته و محیط کشت چمنی قارچ آماده شده است. برای هر آزمایش، در مجموع ۱۰ عدد پسته را ۱۳ ساعت در دمای ۲۰ درجه سانتیگراد درون ظرف حاوی قارچ نگهداری کرده و نهایتا جهت اطمینان بیشتر با گیره‌ی فلزی، سطوح پسته را بر روی قارچ کشیده و نمونه‌ها درون ظرف دیگری ریخته و حدود ۱ تا ۳ ساعت زیر هود نگه‌داری می‌شود تا رطوبت اضافی پسته از بین برود و آماده تابش شوند. پس از آنکه پسته‌ها تحت تابش پلاسما قرار داده شدند، نمونه‌ها جهت فرآیند جداسازی و شمارش قارچ‌های باقیمانده به آزمایشگاه تخصصی قارچ پاستور انتقال داده می‌شوند. برای تابش نمونه‌ها از دستگاه ICP استفاده شده است. مکانیسم عملکرد این دستگاه بدین‌گونه می‌باشد که گاز از بالای دستگاه وارد چمبره شده و خروجی سیستم مولد موج رادیویی توسط سیم پیچی که به دور چمبره پیچیده شده به گاز درون محفظه اعمال می‌گردد. پمپ ایجاد خلاء، از پایین چمبره، مکش را انجام می‌دهد و نهایتاً با ایجاد جریان القایی قوی توسط سیم‌پیچ فرآیند یونیزه شدن گاز صورت می‌پذیرد. شکل۱ نمای بیرونی دستگاه تولید پلاسمای جفت شده القایی موجود در پژوهشکده پلاسما و گداخت هسته-ای، پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای را نشان می‌دهد.

برای انجام آزمایش پس از قرار دادن نمونه‌های آغشته به قارچ آسپرژیلوس بر روی ورقه‌ی فلزی و بین سیم‌پیچ، خلأ لازم ایجاد گردیده است، سپس دستگاه مولد موج رادیویی را بر روی توان

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مورد نظر تنظیم کرده و فرآیند تابش پلاسما بر روی نمونه‌ها انجام می‌شود. پس از تابش پلاسما بر روی نمونه‌ها، برای تست کیفیت نمونه‌های تابش‌دیده، از روش استاندارد Analysis Of Variance (ANOVA) استفاده شده است [۸، ۹].



شکل ۱: نمای بیرونی دستگاه پلاسمای جفت شده القایی (ICP)

نتایج تجربی

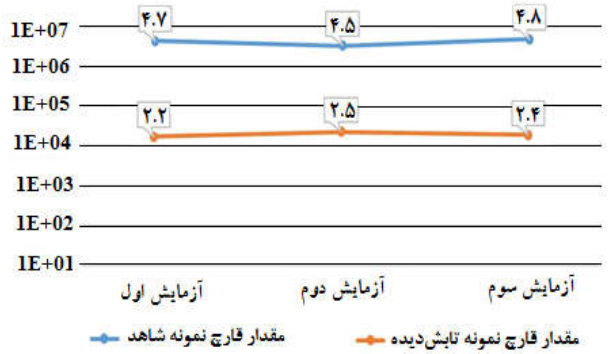
در این بخش نتایج حاصل از تابش پلاسما بر پسته خام، جهت از بین بردن قارچ آسپرژیلووس روی سطح نمونه با هدف افزایش ماندگاری پسته و با دستگاه تولید پلاسمای جفت‌شده القایی، بیان شده است. نتایج درج شده در جداول، حاصل از سه بار تکرار در شرایط کاملا یکسان می‌باشد. لازم به ذکر است که پلاسمای تولیدی توسط رادیکال‌های آزاد و یون‌های تولید شده، به دیواره‌ی سلولی و دئوکسی ریبونوکلئیک اسید (DNA) قارچ آسیب وارد کرده و آن را از بین می‌برد. تمامی مراحل تحت تابش گذاشتن نمونه‌ها، در پژوهشگاه پلاسما و گداخت هسته‌ای و پروسه‌ی میکروبی این پژوهش در آزمایشگاه میکروبیولوژی پاستور در تهران انجام شده است.

پس از طی فرآیندهای تابش‌دهی با دستگاه پلاسمای جفت شده القایی و شمارش مقدار قارچ نمونه‌ی تحت تابش قرار گرفته و همچنین شمارش قارچ‌های نمونه‌ی شاهد اعداد و ارقام بیان شده در جدول ۱ برای مدت زمان ۲۰ دقیقه تابش، حاصل شد. اعداد ذکر شده در جدول جزئیات هر سه بار تکرار آزمایش را نشان می‌دهند. توان در نظر گرفته شده برای انجام آزمایش ۲۵۰ وات می‌باشد که بیشینه مقدار مجاز برای دستگاه است. برای توان‌های پایین‌تر نیز آزمایش انجام شد اما نتایج ایده‌آلی حاصل نشد. بهینه فشار لازم برای انجام آزمایش با این دستگاه نیز ۰٫۵ torr می‌باشد که در آن نتایج قابل قبول برای کاهش قارچ از روی سطح نمونه‌ها حاصل شد.

جدول ۱. کاهش قارچ با دستگاه ICP در مدت زمان ۱۰ دقیقه

زمان (دقیقه)	توان (وات)	فشار (torr)	قارچ نمونه تابش دیده	مقدار قارچ نمونه شاهد
۲۰	۲۵۰	۰٫۵	$۲/۲\times۱۰^{۴}$	$۴/۷\times۱۰^{۶}$
۲۰	۲۵۰	۰٫۵	$۲/۵\times۱۰^{۴}$	$۴/۵\times۱۰^{۶}$
۲۰	۲۵۰	۰٫۵	$۲/۴\times۱۰^{۴}$	$۴/۸\times۱۰^{۶}$
میانگین حاصل از ۳ بار تکرار آزمایش کاهش قارچ با دستگاه ICP				
۲۰	۲۵۰	۰٫۵	$۲/۴\times۱۰^{۴}$	$۴/۶\times۱۰^{۶}$

بر اساس داده‌های مندرج در جدول ۱، جهت پی بردن به مقدار کاهش قارچ در شرایط ۲۵۰ وات، زمان تابش ۲۰ دقیقه و فشار ۰٫۵ torr می‌بایست مقایسه‌ای بین توان عدد ۱۰ موجود در ستون‌های مقدار قارچ نمونه تابش دیده و توان عدد ۱۰ در ستون‌های مقدار قارچ نمونه شاهد انجام داد. این مقایسه بیان کننده log ۲ کاهش پس از تابش می‌باشد. این مقدار کاهش از حاصلضرب تعداد کولنی‌های تشکیل شده درون ظرف در رقّت همان ظرف بدست می‌آید. شکل ۲، نمودار داده‌های درج شده در جدول ۱ می‌باشد که رنگ آبی نشان دهنده‌ی مقدار قارچ نمونه و رنگ قرمز نشان دهنده‌ی مقدار قارچ نمونه تابش دیده می‌باشد.



شکل ۲: نمودار کاهش قارچ با دستگاهICP

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



شکل ۳: نمودار لگاریتمی میانگین حاصل از ۳ بار تکرار آزمایش کاهش قارچ در ۲۵۰ وات، فشار torr ۰٫۵و زمان تابش ۱۰ دقیقه.

در شکل ۳ میزان اختلاف دو نمودار مستطیلی میزان کاهش قارچ را نمایش داده است. نمودار آبی رنگ مقدار میانگین برای قارچ نمونه شاهد و نمودار قزمز رنگ مقدار میانگین برای قارچ نمونه شاهد را نشان می‌دهند. اعداد درج شده بر روی نمودار میزان عددی مقدار لگاریتمی کاهش را بیان کرده است. این میزان کاهش به وضوح log ۲ کاهش قارچ توسط دستگاه پلاسمای جفت شده القایی را نشان داده است.

نتیجه گیری

در این مقاله تأثیر پلاسمای سرد بر روی کاهش قارچ آسپرژیلوس از سطح پسته به‌عنوان یک نمونه گران‌قیمت و پرمصرف خشکبار با استفاده از دستگاه ICP مورد بررسی قرار گرفت. بدین منظور، آزمایش‌ها در شرایط مختلف انجام شد و در نهایت با انتخاب پارامترهای بهینه بیش‌ترین میزان کاهش قارچ از سطح پسته با حفظ کامل سلامت غذایی، بافت و ظاهر پسته، حاصل گردیده است. نتایج کاهش میزان قارچ برابر با log(CFU/gr) ۲ (معادل با ۳۳٪) در توان ۲۵۰w، فشار torr ۰٫۵، و زمان ۲۰ دقیقه را نشان می‌دهند. توان و فشار اعمال شده بیش‌ترین مقادیر قابل تحمل توسط دستگاه پلاسمایی مورد آزمایش می‌باشد و ساختار دستگاه موجود توان انجام آزمایشات بیشتری را نداشت. لذا ، انتظار میرود که در مقیاس‌های بزرگ صنعتی که دستگاه‌های تولید پلاسما قادر به تحمل فشار و توان ورودی بالاتری هستند، کاهش قارچ به میزان بیش‌تری افزایش یابد. بنابراین، استفاده از پلاسمای سرد که دستگاه ICP یکی از مولدهای آن است از جمله مناسب‌ترین گزینه‌ها برای جلوگیری رشد سموم در خشکبار، غیرفعال کردن و یا کاهش قابل قبول قارچ آسپرژیلوس در مقایسه با سایر روش های مرسوم مانند استفاده از مواد شیمیایی، روش‌های کشاورزی، فیزیکی، و زیستی که به مراتب گران‌تر، دارای اثرات زیان‌بار برای محصولات، و یا غیرقابل اجرا در مقیاس بزرگ صنعتی هستند، می‌باشد.

مرجع ها

[1] Arrus, K.,et al., Aflatoxin production by Aspergillus flavus in Brazil nuts. Journal of Stored Products Research, **4**, (2005) 513-527.
[2] Dehghan P, et al., Aflatoxin and sclerotia production in clinical isolates of Aspergillus flavus group. Iranian J Publ Health, **37**, (2008) 41-50
[3] Tsitsigiannis DI, et al., Biological control strategies of mycotoxigenic fungi and associated mycotoxins in Mediterranean basin crops. Phytopathologia Mediterranea **51**, (2012) 158-174.
[4] Sarrami S, et al., Effects of various Toxeat concentrations on growth performance, immune response, cecal microflora, and gut morphology in broilers fed 3 with aflatoxin contaminated diets. Turkish Journal of Veterinary and Animal Sciences, **43**, (2019) 299-305
[5] Lee KH, et al., Assessment of microbial safety and quality changes of brown and white cooked rice treated with atmospheric pressure plasma. Food science and biotechnology. **27** (2018) 661-667.
[6] Los A, The potential of atmospheric air cold plasma for control of bacterial contaminants relevant to cereal grain production. Innovative food science & emerging technologies **44** (2017) 36-45
[7] Kim JE, et al., Microbial decontamination of onion powder using microwave-powered cold plasma treatments. Food microbiology **62** (2017) 112-123
[8] Dasan, B.G., et al., Nonthermal plasma treatment of Aspergillus spp. spores on hazelnuts in an atmospheric pressure fluidized bed plasma system: Impact of process parameters and surveillance of the residual viability of spores. Journal of Food Engineering, **196** (2017)139-149.
[9] Tasouji M A, et al., Inactivation of pistachio contaminant Aspergillus flavus by Atmospheric Pressure Capacitive Coupled Plasma (AP-CCP). Journal of Microbiology, Biotechnology & Food Sciences, **8**(2018) 668-671
[10] Thirumdas R, et al., Cold plasma: a novel non-thermal technology for food processing. Food Biophysics **10** (2015) 1-11.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

پس‌زمینه‌های کیهان‌شناسی ریسمان جفت‌شده با دو میدان فرمیونی

اقبالی، علی؛ حبیبی، فاطمه

گروه فیزیک، دانشگاه شهید مدنی آذربایجان، تبریز

چکیده

با استفاده از یک-فرم‌های چپ-ناوردای تعدادی از ابرگروه‌های لی ٤-بعدی از نوع(۲|۲) ، پس‌زمینه‌های کیهان‌شناسی ریسمان ۱+۲-بعدی که با دو میدان فرمیونی جفت شده‌اند، ساخته می‌شوند. ما نشان می‌دهیم که این پس‌زمینه‌ها تا حد یک حلقه به طور همدیس ناوردا هستند. در حقیقت، ما تعدادی جواب‌های جدید برای معادلات تابع-بتای یک-حلقه‌ی مدل سیگما روی ابرخمینه‌ها در حضور میدان دیلتون و در بعضی موارد وجود پیچش غیر صفر H وابسته به میدان پادمتقارن B به دست می آوریم.

واژه های کلیدی: *کیهان‌شناسی ریسمان، ابرخمینه، ابر گروه لی، معادلات تابع-بتا.*

String cosmological backgrounds coupled to two fermionic fields

Eghbali, Ali; Habibi, Fatemeh

Department of Physics, Azarbaijan Shahid Madani University, 53714-161, Tabriz, Iran

Abstract

Using the left-invariant one-forms of some four-dimensional Lie supergroups of the type (2|2), we construct 2+1-dimensional string cosmological backgrounds coupling to two fermionic fields. Indeed, these backgrounds are conformally invariant up to one-loop order. In fact, we find new solutions for one-loop beta-function equations of sigma-model on supermanifolds with a dilaton field in both cases of absence and presence of the torsion H (H=d B).

***Keywords**: String cosmology, Supermanifold, Lie supergroup, Beta-function equations.*

PACS No. (02)

۱. مقدمه

به طور مشابه با نسبیت عام شناخته شده، پس‌زمینه‌های همگن در کیهان‌شناسی ریسمان به صورت خمینه‌های فضا-زمان ۱+۳-بعدی تعریف می‌شوند؛ این خمینه‌ها یک گروه سه پارامتره از ایزومتری‌ها را شامل می‌شوند. همان‌طور که در مراجع[۱-٤] نشان داده شده است، کیهان‌شناسی ریسمان نوع بایانکی، فضا-زمان‌های ۱+۳-بعدی را در برمی‌گیرند، به‌طوریکه آن‌ها معادلات تابع-بتای ریسمان را در حد پایین ترین مرتبه (یک-حلقه) برآورده می‌کنند. این جواب‌های ریسمان نمونه-هایی برای مطالعه ناهمسانگردی فضایی و همچنین درک اثرات ناهمسانگردی روی دینامیک جهان اولیه را پیشنهاد می‌کنند. کیهان‌شناسی نوع بایانکی به طور کلی بر حسب یک گروه لی حقیقی ۳-بعدی از ایزومتری‌ها تعریف می‌شود، به طوریکه اثر این گروه‌های لی روی خمینه‌ی فضا-زمان به صورت متعددی است [۱-۵]. این مدل‌ها سپس به ۱+٤-بعد با گروه‌های لی ٤-بعدی حقیقی تعمیم داده شدند، که ابرسطح-های فضایی‌شان خمینه‌های ریمنی همگن هم‌بند بودند [۶،۷].

در این مقاله ما تعدادی جواب‌های جدید از پس‌زمینه‌های کیهان‌شناسی ریسمان روی ابرخمینه‌ها به‌دست می‌آوریم که با متریک‌های (۲|۱+۲)-بعدی، میدان دیلتون ثابت یا حداکثر وابسته به زمان و در بعضی موارد میدان پیچش غیرصفر مشخص می‌شوند. ابر جبرهای لی تا بعد چهار در مرجع [۸] طبقه‌بندی شده‌اند. این‌جا برای ساختن پس‌زمینه‌ی مدل‌ها تعدادی از ابرجبرهای لی ٤-بعدی از نوع (۲|۲) مورد استفاده قرار می-گیرند. به هر حال نتایج ما می‌تواند بسیاری از بینش‌های جدید درباره نظریه ابرگرانش را به وجود آورد، زیرا معادلات تابع-بتای یک-حلقه حالت خاصی از معادلات حرکت ابرگرانش تعمیم یافته هستند.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

۲. شرایط ناوردایی همدیس مدل سیگما تا حد یک-حلقه روی ابرخمینه‌ها و ساختار مدل

فرض کنید $\mathbf{M}$ یک ابرخمینه (شبه)ریمنی به عنوان فضای هدف با مختصات‌های x^M باشد. بعد ابرخمینه با $(d_B|d_F)$ نمایش داده می‌شود، به‌طوریکه d_B تعداد جهت‌های بوزونی از ابرخمینه را مشخص می‌کنند، در حالیکه d_Fها تعداد جهت‌های فرمیونی هستند. همان‌طور که در مرجع [۹] ذکر گردیده، به خاطر معکوس‌پذیری متریک مدل روی ابرخمینه، d_F می‌بایست یک عدد زوج باشد.

هم‌اکنون انتشار یک ریسمان بوزونی را در حضور سه میدان پس‌زمینه: متریک ابرمتقارن G_{MN}، میدان تانسوری پادمتقارن B_{MN} و میدان دیلتون Φ در نظر بگیرید. اندیس‌های M و N مقادیر ۱ تا d_B+d_F را شامل می‌شوند. بر این اساس کنش موثر ریسمان در حد انرژی‌های پایین روی ابرخمینه $\mathbf{M}$ برای میدان‌های پس‌زمینه ذکر شده به‌صورت زیر داده می‌شود [۱۰]

$$S_{eff}=\int d^Mx\ \sqrt{G}e^{-2\Phi}\left[R+4\vec{\nabla}_M\Phi\,\vec{\nabla}^M\Phi+\frac{1}{12}H_{MNP}H^{PNM}-4\Lambda\right], \quad (۱)$$

به‌طوریکه G ابردترمینان متریک ${}_MG_N$ را نمایش می‌دهد. هر دو مشتق همورداى $\vec{\nabla}_M$ و انحنای اسکالر R از متریک G_{MN} به دست می‌آیند. همچنین برای بالا بردن و پایین آوردن اندیس‌ها از متریک استفاده می‌شود. توجه داشته باشید که خواص ماتریس‌ها و تانسورها روی فضای ابربردار و ابرخمینه‌ها در مرجع [۹] به طور وضوح بحث شده است. در کنش (۱)، Λ ثابت کیهان‌شناسی نامیده می‌شود که برای ریسمان‌های بحرانی صفر است. علاوه بر این، H_{MNP} پیچش میدان تانسوری B_{MN} نامیده می‌شود که به صورت زیر تعریف می‌شود

$$H_{MNP}=(-1)^M\frac{\vec{\partial}B_{NP}}{\partial x^M}+(-1)^{N+M(N+P)}\frac{\vec{\partial}B_{PM}}{\partial x^N}+(-1)^{P(1+M+N)}\frac{\vec{\partial}B_{MN}}{\partial x^P}. \quad (۲)$$

برای توضیح مربوط به اندیس‌ها در توان (۱-) لازم است که فضای ابربردار V تعریف شود. فضای ابربردار V جمع مستقیم دو زیر فضای V_0 و V_1 به ترتیب با درجات (پاریتی) 0 و ۱ می‌باشد. درجات یک عنصر x از فضای ابربردار V به صورت $|x|$ نمایش داده می‌شود. هر گاه x متعلق به زیر فضای V_0 باشد، درجه x صفر است ($|x|=0$) و زوج نامیده می‌شود، در حالیکه درجه عناصر زیر فضای V_1، $|x|=1$ است و فرد نامیده می‌شوند. در نمادگذاری به کار رفته در مرجع [۹] درجات اندیس‌ها با همان اندیس‌ها در توان (۱-) داده می‌شوند، یعنی به جای $(-1)^x$ از $(-1)^{|x|}$ استفاده می‌شود. همان‌طور که در مرجع [۱۰] نشان داده شده، معادلات حرکت کنش موثر(۱) به صورت زیر است

$$R_{MN}+\frac{1}{4}H_{MQP}H^{PQ}{}_N+2\vec{\nabla}_M\vec{\nabla}_N\Phi=0, \quad (۳)$$

$$(-1)^P\vec{\nabla}^P\left(e^{-2\Phi}H_{PMN}\right)=0, \quad (۴)$$

$$4\Lambda-R-\frac{1}{12}H_{MNP}H^{PNM}+4\vec{\nabla}_M\Phi\vec{\nabla}^M\Phi-4\vec{\nabla}_M\vec{\nabla}^M\Phi=0. \quad (۵)$$

در معادله (۳)، R_{MN} تانسور ریچی مرتبط با متریک G_{MN} است. معادلات حرکت بالا همچنین می‌توانند به عنوان شرایط صفر توابع-بتای یک-حلقه در تناظر با مدل سیگمای زیر به‌دست آورده شوند

$$S=\frac{1}{2}\int d\sigma^+d\sigma^-\,(-1)^M\partial_+x^M(G_{MN}+B_{MN})\partial_-x^N-\frac{1}{4\pi}\int_\Sigma d\sigma^+d\sigma^-R^{(2)}\Phi, \quad (۶)$$

به‌طوریکه $\sigma^\pm=(\tau\pm\sigma)/2$ مختصات‌های مخروط نوری روی جهان-رویه Σ هستند. به‌علاوه، $R^{(2)}$ انحنای اسکالر جهان‌رویه را مشخص می-کند. هم اکنون می‌خواهیم کنش (۶) را روی یک ابرخمینه (۲+۱|۲)- بعدی $\mathbf{M}\approx\boldsymbol{O}\times\boldsymbol{G}$ به عنوان فضای هدف بسازیم، به‌طوریکه $\boldsymbol{G}$ یک ابرگروه لی ٤-بعدی از نوع (۲|۲) [۸] در نظر گرفته می‌شود، در حالیکه $\boldsymbol{O}$ به عنوان مدار $\boldsymbol{G}$ در $\mathbf{M}$ یک فضای یک-بعدی با مختصات زمانی $\{t\}$ می‌باشد. به عنوان یک فرض حالت ناهمسانگرد برای متریک مدل را در نظر می‌گیریم:

$$ds^2=(-1)^Mdx^MG_{MN}\ dx^N=-dt^2+(-1)^adx^\mu{}_\mu L^a g_{ab}(t)\,(L^{st})^b{}_\nu\ dx^\nu, \quad (۷)$$

در رابطه بالا نماد "st" ابرترانهاده ماتریس ${}_\mu L^a$ را تعریف می‌کند و x^μها مختصات‌های ابرگروه لی ایزومتری $\boldsymbol{G}$ هستند. ${}_\mu L^a$ها به عنوان یک-فرم‌های چپ-ناوردای موره کارتان از طریق یک عنصر ابرگروه لی $\boldsymbol{G}$، $g:\boldsymbol{G}\to\boldsymbol{M}$، به صورت زیر تعریف می‌شوند:

$$g^{-1}dg=(-1)^aL^a\ T_a=(-1)^adx^\mu{}_\mu L^a\ T_a, \quad (۸)$$

به‌طوریکه T_aها، $(a=1,...,\dim G)$ پایه‌های ابرجبرلی مربوط به ابرگروه لی $\boldsymbol{G}$ را نمایش می‌دهند. در غیاب میدان تانسوری B_{MN}، $g_{ab}(t)$ یک ماتریس ابرمتقارن وابسته به زمان در نظرگرفته می‌شود. چون می‌خواهیم جواب‌های کیهان‌شناسی به‌دست آوریم، فرض می‌کنیم که میدان دیلتون ثابت باشد یا حداکثر تابعی از زمان باشد. با یک انتخاب مناسب از ماتریس 4×4 $g_{ab}(t)$ می‌توانیم متریک ناهمسانگرد (۷) را روی یک ابرگروه لی ٤-بعدی مشخص از نوع (۲|۲) بسازیم. اما هنوز در این مرحله شکل دقیق $g_{ab}(t)$ و همچنین میدان دیلتون مشخص نیست. برای این منظور معادلات میدان (۳)-(۵) را در غیاب میدان پیچش برای متریک به‌دست آمده در فرآیند ذکر شده و همینین میدان دیلتون وابسته به زمان حل می‌کنیم. در این راستا، پس‌زمینه‌های کیهان‌شناسی ریسمان (۲+۱|۲)-بعدی به‌دست آورده می‌شوند که تا مرتبه یک-حلقه به‌طور همدیس ناوردا باقی می‌مانند.

۳. پس‌زمینه‌ی کیهان‌شناسی ریسمان از ابرگروه‌لی (C^3+A)

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

در این بخش ابتدا با استفاده از یک-فرم های چپ-ناوردا روی ابرگروه لی $\boldsymbol{(C^3+A)}$ متریک (۷) ساخته می‌شود. سپس با در نظر گرفتن متریک به‌دست آورده شده برای معادلات میدان (۳)-(۵)، شکل دقیق متریک و همچنین میدان دیلتون را پیدا می‌کنیم. توجه داشته باشید که فعلا میدان پیچش حضور ندارد. قبل از هر چیز لازم است که ابرجبر لی (C^3+A) را تعریف کنیم. (C^3+A) یک ابرجبر لی ٤-بعدی از نوع (۲|۲) است که توسط مجموعه مولدهای $\{T_1,T_2;T_3,T_4\}$ با درجات $grade(T_1)=grade(T_2)=0$ و $grade(T_3)=grade(T_4)=1$ تعریف می‌شود [۸]. به‌علاوه روابط (پاد)جابجایی غیرصفر متناظر با آن به صورت زیر داده می‌شود [۸]

$$[T_1,T_4]=T_3,\quad \{T_4,T_4\}=T_2, \tag{۹}$$

در این‌جا (T_2,T_3) مولدهای مرکزی جبر هستند. یک عضو از ابرگروه لی $\boldsymbol{(C^3+A)}$ به صورت زیر پارامتریزه می‌شود

$$g=e^{\chi T_4}e^{yT_1}e^{xT_2}e^{\psi T_3}, \tag{۱۰}$$

به‌طوریکه (y,x) میدان‌های بوزونی (زوج) هستند، در حالیکه (ψ,χ) میدان‌های فرمیونی (فرد) را نمایش می‌دهند. با استفاده از معادلات (۸)-(۱۰) یک-فرم های چپ-ناوردای متناظر به صورت زیر نتیجه‌گیری می‌شوند

$$g^{-1}dg=dy\ T_1+(dx-d\chi\frac{\chi}{2})\,T_2+(d\psi-d\chi y)\,T_3+d\chi\,T_4. \tag{۱۱}$$

برای تشکیل متریک (۷) با ابرگروه لی $\boldsymbol{(C^3+A)}$ از فرض زیر برای $g_{ab}(t)$ استفاده می‌کنیم

$$g_{ab}(t)=\begin{pmatrix} a_1(t) & 0 & 0 & 0\\ 0 & a_2(t) & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & a_3(t)\\ 0 & 0 & -a_3(t) & 0\end{pmatrix}. \tag{۱۲}$$

شایان ذکر است که هرگاه ماتریس $g_{ab}(t)$ به صورت دو زیر ماتریس-2×2 بلوکه قطری در نظر گرفته شود، بلوک اول مربوط به میدان‌های بوزونی است، در حالیکه هردو سطر و ستون بلوک دوم فرمیونی می‌باشد. چون ماتریس $g_{ab}(t)$ ابرمتقارن است، یعنی $g_{ab}(t)=(-1)^{ab}g_{ba}(t)$ [۹]، بنابراین عناصر قطر اصلی زیر ماتریس مربوط به بلوک دوم صفر خواهند شد. به هر حال متریک (۷) برای این مثال به صورت زیر در می‌آید:

$$\begin{aligned} ds^2=&-dt^2+a_1(t)dy^2+a_2(t)dx^2+a_2(t)\chi dxd\chi\\ &-2a_3(t)d\psi d\chi, \end{aligned} \tag{۱۳}$$

هم‌اکنون معادلات میدان (۳)-(۵) را برای متریک (۱۳) و یک میدان دیلتون وابسته به زمان حل می‌کنیم. چون میدان پیچش وجود ندارد، بنابراین معادله (٤) به سادگی برآورده خواهد شد. از معادلات (۳) و (۵) پس‌زمینه‌ی کیهان‌شناسی ریسمان جفت‌شده با دو میدان فرمیونی به صورت زیر نتیجه‌گیری می‌شود

$$\begin{aligned} &ds^2=-dt^2+e^t\lfloor dy^2+dx^2+\chi dxd\chi-2e^{-2t}d\psi d\chi\rfloor,\\ &B=0,\\ &\Phi(t)=\varphi_0+t, \end{aligned} \tag{۱٤}$$

به‌طوریکه φ_0 یک ثابت انتگرال‌گیری است. برای جواب بالا ثابت کیهان-شناسی صفر می‌شود. متریک مدل تخت است بر حسب این که انحنای اسکالر متناظرش $R=4$ است. علاوه بر جواب (۱٤) پس‌زمینه‌ی کیهان-شناسی ریسمان دیگری با ابرگروه لی $\boldsymbol{(C^3+A)}$ با یک میدان دیلتون ثابت به صورت زیر وجود دارد

$$\begin{aligned} &ds^2=-dt^2+a_0dy^2+(t+\frac{b_0}{2})^2(dx^2+\chi dxd\chi)-2c_0d\psi d\chi,\\ &B=0,\\ &\Phi(t)=\varphi_0, \end{aligned} \tag{۱۵}$$

به‌طوریکه a_0، b_0 و c_0 مقادیر ثابتی هستند. در این مورد هر دو انحنای اسکالر متریک و ثابت کیهان‌شناسی صفر می‌شوند.

٤. پس‌زمینه‌ی کیهان‌شناسی ریسمان از ابرگروه‌لی $GL(1|1)$

ابرجبر لی $gl(1|1)$ که در مرجع[۸] با نماد (C_{-1}^2+A) مشخص شده است، با روابط (پاد)جابجایی غیر صفر زیر تعریف می‌شود:

$$[T_1,T_3]=T_3,\ [T_1,T_4]=-T_4,\ \{T_3,T_4\}=T_2, \tag{۱٦}$$

به طوریکه (T_1,T_2) و (T_3,T_4) به ترتیب مولدهای بوزونی و فرمیونی هستند. یک عنصر مناسب از ابرگروه لی $\boldsymbol{GL(1|1)}$ را مشابه با رابطه (۱۰) انتخاب می‌کنیم. سپس با استفاده از فرمول (۸) یک-فرم های چپ-ناوردای متناظر به صورت زیر نتیجه‌گیری می‌شوند

$$g^{-1}dg=dy\ T_1+(dx-d\chi\ \psi e^y)\,T_2+(dy\ \psi+d\psi)\,T_3+e^y d\chi T_4. \tag{۱۷}$$

برای تشکیل متریک (۷) با ابرگروه لی $\boldsymbol{GL(1|1)}$، ماتریس $g_{ab}(t)$ را به صورت زیر انتخاب می‌کنیم

$$g_{ab}(t)=\begin{pmatrix} a_1(t) & b(t) & 0 & 0\\ b(t) & a_2(t) & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & a_3(t)\\ 0 & 0 & -a_3(t) & 0\end{pmatrix}. \tag{۱۸}$$

به این ترتیب می‌توان با استفاده از روابط (۱۷) و (۱۸) متریک (۷) را روی یک ابرخمینه (۲|۱+۲)-بعدی با ابرگروه لی $\boldsymbol{GL(1|1)}$ تشکیل داد. در نهایت پس‌زمینه‌ی کیهان‌شناسی ریسمان متناظر با این متریک از حل معادلات (۳)-(۵) به صورت زیر نتیجه‌گیری می‌شود

$$\begin{aligned} &ds^2=-dt^2-\frac{t^2}{2}dy^2+2b_0dxdy-2b_0e^y d\psi d\chi,\\ &B=0,\\ &\Phi(t)=\varphi_0, \end{aligned} \tag{۱۹}$$

به‌طوریکه b_0 و φ_0 مقادیر ثابتی هستند. برای این جواب هر دو تانسور ریچی و انحنای اسکالر متریک صفر می‌شوند. به‌علاوه ثابت کیهان‌شناسی متناظر با این جواب صفر است. جواب دیگری که برای آن ثابت کیهان-

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

شناسی، $\Lambda=1/4$، و میدان دیلتون وابسته به زمان است، به صورت زیر داده می‌شود

$$ds^2=-dt^2+(t+e^t)dy^2+2b_0dxdy-2b_0e^y d\psi d\chi, \quad (۲۰)$$
$$B=0,$$
$$\Phi(t)=\varphi_0+\frac{t}{2},$$

تنها مولفه غیرصفر از تانسور ریچی متناظر با متریک (۲۰)، $R_{yy}=(1+e^t)/2$ است؛ بر این اساس انحنای اسکالر صفر می‌شود.

۵. پس‌زمینه‌ی کیهان‌شناسی ریسمان از ابرگروه‌لی (C^3+A) در حضور میدان پیچش

برای به‌دست آوردن یک پس‌زمینه کیهان‌شناسی ریسمان در حضور میدان پیچش H، ما فرض کرده‌ایم که H را بتوان بر حسب یک-فرم‌های چپ-ناوردا روی خمینه (۲+۱|۲)-بعدی **M** با ابرگروه لی (C^3+A) به صورت زیر در نظر گرفت

$$H=A_i(t)dt\wedge L^a\wedge L^b+B_i(t)L^a\wedge L^b\wedge L^c, \quad (۲۱)$$

به‌طوریکه $A_i(t)$ و $B_i(t)$ها توابع وابسته به زمان هستند. چون میدان H بایستی کامل(exact) باشد، یعنی $dH=d^2B=0$، از این شرط می‌توان تعدای قیود بین توابع $A_i(t)$ و $B_i(t)$ به‌دست آورد. به‌علاوه می‌بایست همه انتخاب‌های مجاز از ضرب گوه‌ای بین L^aها روی ابرگروه لی (C^3+A) رعایت شوند؛ به عنوان مثال، ضرب گوه‌ای بین یک-فرم‌های فرمیونی یکسان نظیر $L^3\wedge L^3$ و $L^4\wedge L^4$ صفر نمی‌شود، یعنی این انتخاب مجاز است. به این ترتیب پس‌زمینه کیهان‌شناسی ریسمان با ابرگروه لی (C^3+A) در حضور میدان پیچش در فرم (۲۱) به صورت زیر نتیجه‌گیری می‌شود

$$ds^2=-dt^2+\frac{e^{-t}}{e^{-2t}+1}\left[dy^2+dx^2-2\chi dyd\chi+\chi dxd\chi\right]-2e^{-t}d\psi d\chi, \quad (۲۲)$$
$$B=\frac{1}{e^{-2t}+1}\left[dy\wedge dx+\frac{\chi}{2}dy\wedge d\chi-\chi e^{-2t}dx\wedge d\chi\right],$$
$$\Phi(t)=\varphi_0-\frac{1}{2}\log(e^{-2t}+1).$$

این پس‌زمینه معادلات میدان یک-حلقه (۳)-(۵) را با ثابت کیهان‌شناسی صفر برآورده می‌کند.

٦. نتیجه‌گیری

با استفاده از یک-فرم‌های چپ-ناوردای تعدادی از ابرگروه‌های لی ٤-بعدی از نوع (۲|۲)، پس‌زمینه‌های کیهان‌شناسی ریسمان ۱+۲-بعدی شامل متریک، میدان دیلتون و در یک مورد حضور میدان پیچش، که با دو میدان فرمیونی جفت شده‌اند، به‌دست آورده شد. همه پس‌زمینه‌ها تا حد یک-حلقه به طور همدیس ناوردا هستند. حال ممکن است این سوال پرسیده شود که کاربرد فیزیکی نتایج به‌دست آمده چیست؟ همان-طور که در مقدمه ذکر شد، معادلات تابع-بتای یک-حلقه حالت خاصی از معادلات حرکت ابرگرانش تعمیم یافته هستند، بنابراین جواب های ما می‌تواند بینش و درک جدیدی به ابرگرانش بدهد. علاوه بر این می‌توان با محاسبه ابردوتایی‌های دریفلد متناظر با ابرجبرهای لی بکار گرفته شده در این مقاله، زنجیره دوگانگی-T همدیس مربوط به پس‌زمینه‌های نتیجه شده را مطالعه کرد [۱۱]، به‌طوریکه در این زنجیره میدان پیچش H ظاهر می‌شود.

جدول ۱: **روابط (پاد)جابجایی غیرصفر و یک-فرم‌های چپ-ناوردای تعدادی‌از ابرجبرهای‌لی**

یک-فرم‌های چپ-ناوردا	روابط (پاد) جابجایی غیرصفر	ابرجبر لی g
$L^1=dy$ $L^2=xdy+dx-d\chi\ \psi,$ $L^3=-dy\ \psi-d\psi,$ $L^4=-d\chi,$	$[T_1,T_2]=T_2,\ [T_1,T_3]=T_3,$ $\{T_3,T_4\}=T_2$	(C_1^1+A)
$L^1=dy$ $L^2=xdy+dx,$ $L^3=-pdy\ \psi-d\psi,$ $L^4=-e^{-qy}d\chi,$	$[T_1,T_2]=T_2,\ [T_1,T_3]=pT_3,$ $[T_1,T_4]=qT_4$	D_{pq}^1 $pq\neq 0, p\geq q$
$L^1=dy$ $L^2=xdy+dx,$ $L^3=-pdy\ \psi-d\psi,$ $L^4=-d\chi,$	$[T_1,T_2]=T_2,\quad [T_1,T_3]=pT_3,$	$C_p^1\oplus A$ $p\neq 0$

جدول ۲: پس‌زمینه‌های کیهان‌شناسی ریسمان در غیاب میدان پیچش

ابرگروه G	متریک و میدان دیلتون	ثابت‌کیهان-شناسی Λ
(C_1^1+A)	$ds^2=-dt^2+2e^{aqt}(xdy^2+dxdy-d\psi d\chi),$ $\Phi(t)=\varphi_0$	0
	$ds^2=-dt^2+2e^{h(t)}(xdy^2+dxdy-d\psi d\chi),$ $\Phi(t)=\varphi_0+c_0t,\qquad h(t)=\frac{e^{2c_0t}}{2c_0}$	c_0^2
D_{pq}^1 $pq\neq 0, p\geq q$	$ds^2=-dt^2+[(1+t+2x)e^{aqt}+\frac{(p+q)(2-p-q)}{a_0^2}]dy^2$ $+2e^{aqt}dxdy-2e^{(aqt-qy)}(p\psi dyd\chi+d\psi d\chi),$ $\Phi(t)=\varphi_0$	0
	$ds^2=-dt^2+[2b_0x+\frac{(p+q)(p+q-2)}{2c_0}t+e^{2cqt}]dy^2$ $+2b_0dxdy-2a_0e^{-qy}(p\psi dyd\chi+d\psi d\chi),$ $\Phi(t)=\varphi_0+c_0t$	c_0^2
$C_p^1\oplus A$ $p\neq 0$	$ds^2=-dt^2+[(1+t+2x)e^{aqt}-\frac{p(p-2)}{a_0^2}]dy^2$ $+2e^{aqt}dxdy-2e^{aqt}(p\psi dyd\chi+d\psi d\chi),$ $\Phi(t)=\varphi_0$	0
	$ds^2=-dt^2+[2b_0x+\frac{p(p-2)}{2c_0}t+e^{2cqt}]dy^2$ $+2b_0dxdy-2a_0(p\psi dyd\chi+d\psi d\chi),$ $\Phi(t)=\varphi_0+c_0t$	c_0^2

Emails: eghbali978@gmail.com; fatemehhabibi151@yahoo.com

مرجع‌ها

[۱] G. F. R. Ellis and M. A. H. MacCallum, *Commun. Math. Phys.* **12** (1969) 108.
[۲] C. G. Callan, D. Friedan, E. Martinec, M. J. Perry, *Nucl. Phys.* B **262** (1985) 593.
[۳] E. J. Copeland, A. Lahiri and D. Wands, *Phys. Rev. D* **51** (1995) 1569.
[۴] M. Gasperini and R. Ricci, *Class. Quantum Grav.* **12** (1995) 677.
[۵] N. A. Batakis and A. A. Kehagias, *Nucl. Phys.* B **449** (1995) 248.
[۶] S. Hervik, *Class. Quantum Grav.* **19** (2002)5409.
[۷] B. Mojaveri, A. Rezaei-Aghdam, *Int. J. Mod. Phys.* A **27** (2012) 1250032.
[۸] N. Backhouse, *J. Math. Phys.* **19** (1978) 2400.
[۹] B. DeWitt, *Supermanifolds*, Cambridge University Press (1992).
[۱۰] A. Eghbali , A. Rezaei-Aghdam, *J. High Energy Phys.* **01** (2012) 151.
[۱۱] Ali Eghbali, arXiv:2003.11160 [hep-th].

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

تحول قرص‌های پیش‌سیاره‌ای در حضور بادهای مغناطیسی

قریشی، سیده معصومه[۱و۲] شادمهری، محسن[۱]

[۱] گروه فیزیک، دانشگاه گلستان،گرگان

[۲] مرکز تحقیقات نجوم و اخترفیزیک مراغه، مراغه

چکیده

تحول زمانی قرص‌های پیش‌سیاره‌ای در حضور بادهای مغناطیسی با استفاده از روابط بدست آمده از شبیه‌سازی‌های MHD غیر ایده‌آل مورد بررسی قرار گرفت. سهم بادهای مغناطیسی در خروج تکانه زاویه‌ای و اتلاف جرم با استفاده از این روابط که توسط عباراتی برحسب پارامتر پلاسما تعیین می‌شوند، توصیف می‌گردد. تحول کمیت های اساسی قرص همچون چگالی سطحی و آهنگ برافزایش برای محدوده گسترده‌ای از پارامترها مورد مطالعه قرار گرفتند. در حالی که در فاز اولیه تحول قرص، کمیت‌های قرص همچون جرم کل و شار مغناطیسی آن یک کاهش ناچیز را تجربه می‌کنند، افت سریع آن‌ها در فاز دوم تحول روی خواهد داد. مدل ما پیش‌بینی می‌کند که سهم باد مغناطیسی در تحول قرص در فاز دوم تحول بسیار چشمگیر خواهد بود.

واژه های کلیدی: *تحول قرص، قرص پیش‌سیاره‌ای، باد مغناطیسی.*

The evolution of the protoplanetary discs including magnetic winds

Ghoreyshi, Sayyedeh Masoumeh [1,2], Shadmehri, Mohsen[1]

[1] Department of Physics, Faculty of Sciences, Golestan University, Gorgan

[2] Research Institute for Astronomy and Astrophysics of Maragha (RIAAM), Maragha

Abstract

We study the evolution of the protoplanetary discs in the presence of magnetically driven winds with the stress relations motivated by the non-ideal MHD disc simulations. Contribution of the magnetic winds in the angular momentum removal and mass-loss is described using these relations which are quantified in terms of the plasma parameter. Evolution of the essential disc quantities including the surface density and accretion rate are studied for a wide range of the model parameters. While at the early phase of the disc evolution, disc quantities such as its total mass and magnetic flux undergo non-significant reductions, their rapid declines are found in the second phase of evolution. Our model predicts that contributions of the magnetic winds in the disc evolution are significant during the second phase.

***Keywords**: Disc Evolution, Protoplanetary Disc, Magnetic Wind*

PACS No. 98

مقدمه

انتقال تکانه زاویه‌ای در قرص‌های پیش‌سیاره‌ای یکی از مباحث مهم در این قرص‌ها بشمار می‌آید تا بتوان عمر آن‌ها را بدرستی تعیین کرده و درک بهتری برای شکل‌گیری سیارات داشت. در دیدگاه متعارف قرص‌های برافزایشی، ناپایداری مغناطوچرخشی عامل مؤثری در انتقال تکانه زاویه‌ای در نواحی یونیده یک قرص بحساب می‌آید، درحالی که در نواحی بیرونی قرص که یونیدگی پایین است، ناپایداری گرانشی می‌تواند نقش مهمی ایفا نماید. اما دیدگاه‌های دیگری نیز مطرح شده‌اند و بررسی عامل اساسی انتقال تکانه زاویه‌ای، یکی از چالش‌های مهم در قرص‌های پیش‌سیاره‌ای محسوب می‌شود.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

در سال‌های اخیر، شبیه‌سازی‌های MHD نشان داده که عامل اساسی ایجاد باد در قرص‌های برافزایشی می‌تواند تلاطمات ناشی از ناپایداری مغناطوچرخشی در حضور اثرات MHD غیر ایده‌آل باشد [۱]. به عبارتی می‌توان گفت که در قرص‌های برافزایشی، خروج تکانه زاویه‌ای بجای آنکه توسط ناپایداری مغناطوچرخشی روی دهد (که منجر به توزیع مجدد تکانه زاویه‌ای در قرص می‌شود)، می‌تواند توسط باد اتفاق افتد. بررسی‌های چندین قرص برافزایشی موجود در عالم که بخوبی مورد مطالعه قرار گرفته‌اند، نشان داده که سرعت برافزایش اندازه‌گیری شده تنها می‌تواند ناشی از باد مغناطیسی باشد [۲]. رصدهای قرص‌های پیش‌سیاره‌ای موجود در Chamaeleon I نیز پیشنهاد داده که بادهای مغناطیده می‌تواند نقش بسزایی در تحول این قرص‌ها بازی کند [۳]. از اینرو، در این کار قصد داریم تا تحول یک قرص پیرادوتایی را در حضور بادهای تبخیر نوری با منشأ بیرونی مورد بحث قرار دهیم.

معادلات اساسی

یک قرص استاندارد در نظر می‌گیریم که اتلاف جرم و خروج تکانه زاویه‌ای در آن از طریق باد انجام می‌پذیرد. فرض شده که قرص با یک پروفایل سرعت کپلری دوران می‌کند و رابطه $\Omega=(GM_*/r^3)^{1/2}$ برای سرعت زاویه‌ای آن برقرار می‌باشد. تعادل هیدروستاتیک قرص در جهت عمودی ایجاب می‌کند که رابطه $H=\sqrt{2}c_s/\Omega$ برای مقیاس ارتفاع قرص برقرار باشد که در آن سرعت صوت از رابطه $c_s=(k_BT/\mu)^{1/2}$ پیروی می‌کند. در اینجا فرض می‌کنیم که $\mu=2.1m_H$ باشد و برای دما نیز از رابطه $T=300\mathrm{K}(r/1\mathrm{au})^{-1/2}$ بهره می‌بریم. از این‌رو، معادله تحول چگالی سطحی قرص بصورت زیر بیان می‌شود

$$\frac{\partial\Sigma}{\partial t}=\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left[\frac{2}{r\Omega}\left(\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\Sigma c_s^2W_{r\phi}\right)+r^2\left(\rho c_s^2\right)_{mid}W_{z\phi}\right)\right]-C_w\left(\rho c_s\right)_{mid} \qquad (1)$$

که در آن، چگالی در صفحه میانی برابر با $\rho_{mid}=\Sigma/(\sqrt{\pi}H)$ می‌باشد. در این مقاله، فرض می‌کنیم که استرس نرمالیزه ناشی از تلاطم MHD و ناشی از باد مغناطیده بترتیب بصورت زیر تعریف می‌شوند

$$W_{r\phi}=10^{\left(-2.2+0.5\tan^{-1}\left(\frac{4.4-\log\beta_0}{0.5}\right)\right)} \qquad (۲)$$

$$W_{z\phi}=2\times10^{(1.25-\log\beta_0)} \qquad (۳)$$

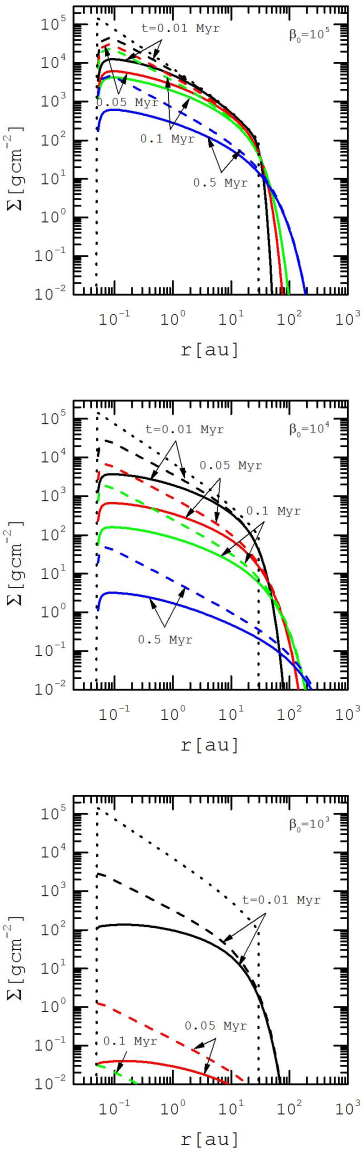
که در آن، پارامتر پلاسما β_0 نسبت فشار گاز به فشار مغناطیسی ناشی از مؤلفه عمودی میدان می‌باشد. معادلات (۲) و (۳) زمانی معتبر هستند که β_0 در محدوده هزار (باد قوی) تا صد هزار (باد ضعیف) باشد. در این مقاله فرض می‌کنیم که ضریب اتلاف جرم ناشی از باد C_w در حالت بدون بعد بصورت کسری از $W_{z\phi}$ در حالت بدون بعد بیان می‌شود. فرض می‌کنیم که این کسر می‌تواند دارای بازه $\psi=0.001-0.5$ باشد. توجه داشته باشید که هر چه این کسر بزرگتر باشد، مقدار اتلاف جرم توسط باد بیشتر می‌شود.

برای حل معادله (۱)، از روش تفاضل متناهی ضمنی[1] با یک شبکه فضایی لگاریتمی با ۲۵۸ سلول استفاده می‌کنیم. مرز درونی r_{in} قرص را 0.05 au و مرز بیرونی آنرا 20000 au انتخاب می‌کنیم تا مطمئن شویم که پاسخ‌های ما مستقل از مرز بیرونی قرص است. توزیع چگالی اولیه قرص را در بازه بین مرز درونی و شعاع اولیه قرص r_{d0} بصورت $\Sigma(r,0)=\frac{M_{d0}\exp(-r/r_{d0})}{2\pi\left[\exp(-r_{in}/r_{d0})-\mathrm{e}^{-1}\right]r_{d0}r}$ و در دیگر نواحی برابر با صفر در نظر می‌گیریم. همچنین فرض می‌کنیم که جرم اولیه قرص برابر با $M_{d0}=0.1M_*$ و شعاع اولیه آن $r_{d0}=30\,\mathrm{au}$ باشد. برای شرایط مرزی نیز فرض می‌کنیم که چگالی سطحی در مرز درونی و سرعت شعاعی در مرز بیرونی برابر با صفر هستند.

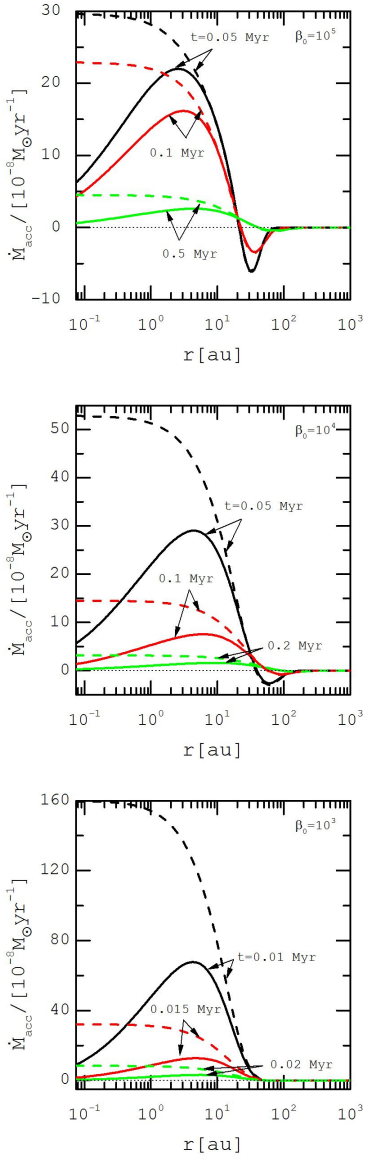
در شکل (۱)، چگالی سطحی قرص برای مقادیر متفاوت β_0 و ψ رسم شده است. نمودار ردیف بالایی در این شکل مربوط به بادهای مغناطیده ضعیف و ردیف پایینی آن مربوط به بادهای شدید است. منحنی‌های خط پر نیز مربوط به حالت‌هایی با اتلاف جرم بیشتر توسط باد است، در حالی که منحنی‌های خط چین مربوط به قرص‌هایی است که اتلاف جرم توسط باد بسیار ناچیز است. چگالی سطحی قرص بواسطه وشکسانی و باد، رفته رفته با زمان کاهش می‌یابد. نتایج ما نشان می‌دهد که هرچه اتلاف جرم توسط باد بیشتر باشد (ψ بالاتر)، نواحی درونی‌تر قرص دارای چگالی کمتری خواهد باد. با افزایش شدت باد (β_0 کمتر)، این

[1] Implicit Finite-Difference

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



شکل۱ : چگالی سطحی قرص در حضور باد مغناطیده برای مقادیر متفاوت β_0. منحنی‌های خط پر و خط چین بترتیب برای حالت‌هایی با $\psi = 0.5$ و $\psi = 0.001$ هستند. منحنی نقطه چین نیز بیانگر شرط اولیه چگالی است.

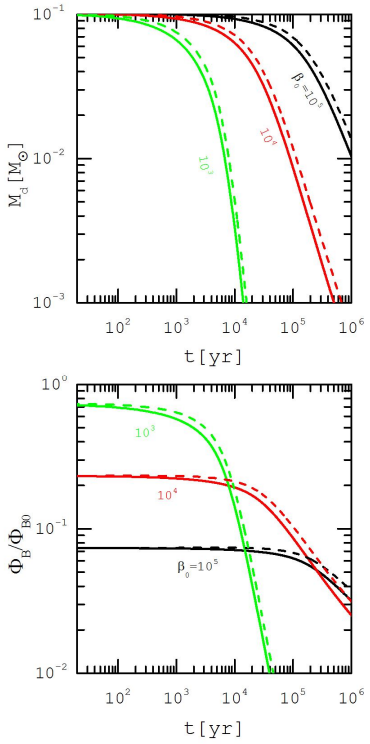


شکل۲ : آهنگ برافزایش قرص در حضور باد مغناطیده برای مقادیر متفاوت β_0. منحنی‌های خط پر و خط چین بترتیب برای حالت‌هایی با $\psi = 0.5$ و $\psi = 0.001$ هستند.

روند کاهش چگالی، در نواحی بیرونی‌تر قرص نیز مشاهده می‌شود. این روند کاهش چگالی، با گذشت زمان شدیدتر خواهد شد، بطوری که برای بادهای شدید (نمودار ردیف پایین)، پس از صد هزار سال تنها حالت‌هایی با $\psi = 0.001$ و در نواحی درونی قرص، دارای چگالی بزرگتر از یک صدم گرم بر سانتیمتر مربع خواهند بود. می‌توان دید که برای حالتی با $\psi = 0.5$ و پس از نیم میلیون سال، چگالی سطحی در مرز درونی قرصی با شدت باد متوسط تقریبا پنج هزارم چگالی سطحی در همین ناحیه در قرصی با شدت باد ضعیف می‌باشد.

در شکل (۲)، آهنگ برافزایش یک قرص پیش‌سیاره‌ای را در حضور بادهای مغناطیده نشان داده‌ایم. ما دریافتیم که آهنگ برافزایش نواحی درونی قرص در حضور بادهایی با اتلاف جرم بالاتر، به شدت کاهش می‌یابد و هر چه بادها شدیدتر می‌شوند، این کاهش بیشتر نیز خواهد شد. با گذشت زمان، تفاوت موجود

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



شکل۳ : جرم قرص (نمودار بالا) و شار مغناطیسی (نمودار پایین) در حضور باد مغناطیده برای مقادیر متفاوت β_0. منحنی‌های خط پر و خط چین بترتیب برای حالت‌هایی با $\psi = 0.5$ و $\psi = 0.001$ هستند.

در آهنگ برافزایش میان حالت‌های با ψ گوناگون، کمتر خواهد شد. در قرص‌هایی با بادهای شدیدتر، آهنگ برافزایش سریع‌تر به سمت صفر میل می‌کند. در واقع، ماده‌ای در قرص باقی نمی‌ماند تا به سمت ستاره مرکزی برافزایش نماید. توجه داشته باشید که آهنگ برافزایش جرم منفی به این معنا است که مواد به جای حرکت به سمت داخل، در حال حرکت به سمت بیرون هستند. برای بادهای ضعیف، حرکت مواد به سمت بیرون در نواحی بیرونی‌تر قرص با زمان کاهش می‌یابد. از سوی دیگر، هر چه شدت باد بیشتر می‌شود، حرکت به سمت بیرون مواد در نواحی بیرونی‌تر قرص، کمتر خواهد شد و تنها برافزایش مواد در قرص روی خواهد داد.

اثرات باد مغناطیده را روی جرم قرص (نمودار بالا) و شار مغناطیسی (نمودار پایین)، در شکل (۳) نشان داده‌ایم. می‌توان دید که در هر دوی این نمودارها، یک فاز تحولی کُند و یک فاز تحولی سریع وجود دارد. طی فاز تحولی کُند، تغییرات جرم و شار بسیار اندک بوده و در فاز بعدی، بشدت کاهش می‌یابند. هرچه شدت باد بیشتر باشد، مدت زمان فاز کُند، کمتر خواهد بود. بعنوان مثال، برای بادهای قوی، فاز تحولی سریع برای جرم قرص،تقریبا پس از هزار سال آغاز می‌شود، در حالی که برای بادهای ضعیف، این فاز پس از صد هزار سال روی می‌دهد. از این‌رو، شدت باد نقش بسزایی در فازهای تحولی قرص بازی می‌کند. نقش پارامتر ψ مربوط به اتلاف جرم توسط باد، در این فازهای تحولی تقریبا ناچیز است. اگر عمر قرص را مدت زمانی در نظر بگیریم که جرم قرص به یک صدم مقدار اولیه‌اش می‌رسد، قرصی با وجود بادهای ضعیف دارای عمری بیش از یک میلیون سال خواهد بود.

نتیجه گیری

در این کار به مطالعه قرص‌های پیش‌سیاره‌ای با حضور بادهای مغناطیده پرداختیم و اثر باد و اتلاف جرم توسط آنرا مورد بررسی قرار دادیم. نقش پارامتر اتلاف جرم، بخصوص در نواحی درونی قرص، بر روی چگالی سطحی و آهنگ برافزایش جرم بسیار پر رنگ بوده و هر چه باد شدیدتر باشد، باد می‌تواند اثرات بیشتری بر روی این کمیت‌های قرص داشته باشد. با بررسی تحول جرم قرص و شار مغناطیسی در آن، دریافتیم که دو نوع فاز تحولی کُند و سریع وجود دارد که طی فاز تحولی سریع، این کمیت‌های قرص دارای کاهش سریع خواهند بود. با فرض آنکه عمر قرص مدت زمانی است که جرم قرص به یک صدم جرم اولیه‌اش می‌رسد، نتایج ما نشان داد که حضور بادهایی شدید در قرص‌های پیش‌سیاره‌ای واقعی، بسیار ضعیف می‌باشد زیرا عمری در حدود ده هزار سال خواهند داشت.

مرجع‌ها

[۱] T. K. Suzuki, T. Muto, and S. i. Inutsuka; "*Protoplanetary Disk Winds via Magnetorotational Instability: Formation of an Inner Hole and a Crucial Assist for Planet Formation*"; *ApJ* **718**, (2010) 1289-1304.

[۲] L. Wang, and J. J. Goodman; "*Wind-driven Accretion in Transitional Protostellar Disks*"; *ApJ* **835**, (2017) 59.

[۳] G. D. Mulders, et.al; "*Constraints from Dust Mass and Mass Accretion Rate Measurements on Angular Momentum Transport in Protoplanetary Disks*"; *ApJ* **847**, (2017) 31.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

محاسبه پارامتر همزمانی جمع کننده در طیف تابش گاما به منظور تصحیح منحنی بازدهی آشکارساز HPGe

بیگانه، علی؛ کاکوئی، امیدرضا*

سازمان انرژی اتمی ایران، پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، پژوهشکده فیزیک و شتابگرها

چکیده

در این مقاله اثر جمع‌بندی همزمان در محاسبه بازدهی آشکارساز HPGe مورد مطالعه قرار گرفته است. پارامتر تصحیح اثر همزمانی جمع کننده برای خطوط تابش گاما از رادیوایزوتوپ‌های ^{22}Na، ^{134}Cs و ^{88}Y در فواصل مختلف چشمه از آشکارساز برای چند نوع چشمه نقطه‌ای، پلکسی و ویال (محلول چشمه در آب) با استفاده از کد EFTRAN محاسبه شده است. مقادیر محاسبه شده با گزارش‌های ارائه شده در سایر مقالات مقایسه شده‌اند. نتایج نشان می‌دهد که اثر جمع‌بندی همزمان در محاسبه بازدهی آشکارساز برای رادیوایزوتوپ‌هایی که شامل چند زنجیره‌ی واپاشی همزمان هستند، به ویژه هنگامی که چشمه در فاصله کوتاهی از آشکارساز قرار دارد، بسیار با اهمیت است. تصحیح منحنی بازدهی آشکارساز با در نظر گرفتن اثر جمع‌بندی همزمان می‌تواند میزان صحت در اندازه‌گیری فعالیت چشمه‌های پرتوزا را بهبود دهد.

واژه های کلیدی: *بازدهی آشکارساز، همزمانی جمع کننده، آشکارساز HPGe، کد EFTRAN*

Calculation of summing coincidence correction factor for efficiency curve correction of an HPGe detector

Biganeh, Ali; Kakuee, OmidReza*

Atomic Energy Organization of Iran, Nuclear Science and technology research institute, Physics and Accelerators Research School

Abstract

In this paper, the effect of summing coincidence on the HPGe detector efficiency is investigated. The summing coincidence correction factor for gamma lines of ^{22}Na, ^{134}Cs, and ^{88}Y is calculated by EFTRAN code for various radioactive sources such as point, Plexiglas, and vial type sources in the different source-detector distance. The calculated values are compared with the reported values in the literature. The results show that the effect of summing coincidence is important for radioactive sources involving coincidence chains in their decay scheme, specifically when the source is placed at a close distance to the detector. Correcting the detector efficiency curve considering the summing coincidence effect improves the accuracy of the activity measurement of radioactive sources.

***Keywords**: Detector efficiency, Summing coincidence, HPGe detector, EFTRAN code.*

PACS No:23

مقدمه

در حال حاضر در بسیاری از آزمایشگاه‌های سنجش پرتویی به منظور بهبود حد پایین آشکارسازی در اندازه‌گیری فعالیت چشمه-های پرتوزا، استفاده از آشکارسازهای با بازدهی بالا در فاصله‌ی بسیار کوتاه از چشمه پرتوزا مورد توجه قرار گرفته است. به هنگام طیف سنجی تابش گاما با استفاده از این آشکارسازها، در صورتی که چشمه تابشی مورد نظر شامل زنجیره‌ای از واپاشی‌های همزمان باشد، اثرات همزمانی جمع کننده در سنجش میزان پرتوزایی چشمه بسیار با اهمیت است[۱-۳]. تصحیح اثر جمع‌بندی همزمان هنگامی که فاصله چشمه تا آشکارساز کم باشد و یا در موارد استفاده از

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

آشکارسازهای بزرگ، ضروری است[٤]. به عنوان مثال، هنگام طیف‌سنجی نمونه‌های محیطی و یا مواد هسته‌ای که تعداد زیادی تابش‌گاما همزمان از خود گسیل می‌کنند، تصحیح اثر جمع‌بندی همزمان برای محاسبه فعالیت یک چشمه حجمی با ابعاد بزرگ نقش مهمی در صحت نتایج ایفا می‌کند[٥و٦]. تاکنون الگوریتم‌ها و معادلات تجربی بسیاری برای محاسبه این اثر به کار برده شده است[٧-٩]. کد EFTRAN به صورت ویژه برای ارزیابی اثرات جمع‌بندی همزمان دراندازه‌گیری بازدهی آشکارسازها توسعه یافته است. این کد با استفاده از Fortran 77 برنامه نویسی شده و از طریق نرم افزار Excel تحت سیستم عامل ویندوز قابل اجرا است[١٠]. در این مقاله، تصحیح بازدهی یک آشکارساز HPGe برای اندازه‌گیری میزان فعالیت چند نمونه از رادیو ایزوتوپ‌ها با استفاده از کد EFTRAN انجام شده است. نتایج حاصل از این مطالعه امکان تشخیص وجود یا عدم وجود اثرات جمع‌بندی همزمان در تعیین بازدهی آشکارساز و اهمیت آن در اندازه‌گیری سطح پرتوزایی نمونه‌ها را فراهم می‌کند.

مبانی نظری

اثر همزمانی جمع کننده در آشکارسازی هسته‌هایی که دو یا تعداد بیشتری تابش گسیل می‌کنند، ظهور می‌یابد. به عنوان مثال، زنجیره‌ی واپاشی عنصر X در شکل ۱ نشان داده شده است. زمانی که سه تابش گاما از چشمه X گسیل می‌شود، در صورتی که همزمانی این تابش‌ها در پنجره‌ی زمانی کوچکتر از زمان تشخیص آشکارساز اتفاق بیفتد، انرژی این تابش‌ها در آشکارساز انباشت شده و در طیف انرژی به صورت قله‌های مجموع نمایان خواهد شد. این موضوع سبب حذف تعدادی از تابش‌ها از قله اصلی و کاهش تعداد شمارش‌ها در این قله می‌شود. اثر جمع‌بندی همزمان به فاکتورهایی از چشمه و آشکارساز مثل انرژی تابش گاما، همبستگی زاویه‌ای و شدت تابش گاماهای همزمان، و هندسه چشمه-آشکارساز بستگی دارد. برای یک چشمه نقطه‌ای با نمودار واپاشی نشان داده شده در شکل ۱ با دو تراز برانگیخته، فاکتور تصحیح برای مساحت قله‌های انرژی E_1، E_2 و E_3 به ترتیب با روابط ۱ تا ۳ نشان داده می‌شود [١١].

$$C_1 = \frac{1}{1-p_{12}\varepsilon_{T2}} \qquad (١)$$

$$C_2 = \frac{1}{1-p_{21}\varepsilon_{T1}} \qquad (٢)$$

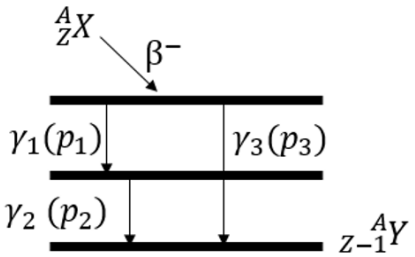
$$C_3 = \frac{1}{1+\frac{I_{\gamma_1}\varepsilon_{p1}\varepsilon_{p2}}{I_{\gamma_3}\ \varepsilon_{p3}}p_{12}} \qquad (٣)$$

در این رابطه p_{ij} احتمال گسیل همزمان γ_j با γ_i، ε_{pi} بازدهی آشکارساز برای انرژی E_i، ε_{Ti} بازدهی کل برای انرژی E_i و I_{γ_j} شدت گسیل فوتون در انرژی E_i است.

به منظور تصحیح بازدهی آشکارساز، فاکتور تصحیح همزمانی جمع کننده (F_c) برای E_i به صورت رابطه (٤) تعریف شده است[١٠].

$$\mathrm{F_c(E_i)} = \frac{\varepsilon_{\mathrm{m}}(\mathrm{E_i})}{\varepsilon_{\mathrm{c}}(\mathrm{E_i})} \qquad (٤)$$

در این رابطه، ε_m مقدار بازدهی اندازه‌گیری شده با استفاده از منحنی بازدهی و ε_c بازدهی تصحیح شده با در نظر گرفتن اثرات جمع‌بندی همزمان در انرژی E_i است. با توجه به رابطه‌ی ۱، هرچه فاکتور تصحیح از عدد ۱ فاصله گیرد، اثر همزمانی جمع کننده در محاسبه بازدهی آشکارساز اهمیت بیشتری پیدا می‌کند. در صورتی که $F_c < 1$ باشد، بخشی از شمارش‌ها در انرژی E_i از جمع شدن دو یا چند تابش حاصل شده‌اند. بلعکس برای حالتی که $F_c > 1$ تعدادی از تابش‌های گاما خارج از فوتوپیک ثبت شده‌اند. در این تصحیح، سطح فعالیت چشمه‌های مورد مطالعه به کمتر از ۱۰۰ بکرل محدود شده است و تنها اثرات همزمانی جمع کننده به دلیل تابش‌های همزمان از زنجیره‌های واپاشی در نظر گرفته می‌شود و از اثرات همزمانی جمع کننده که به صورت تصادفی در پرتوزایی با نرخ بالا ایجاد می‌شود، چشم پوشی شده است.



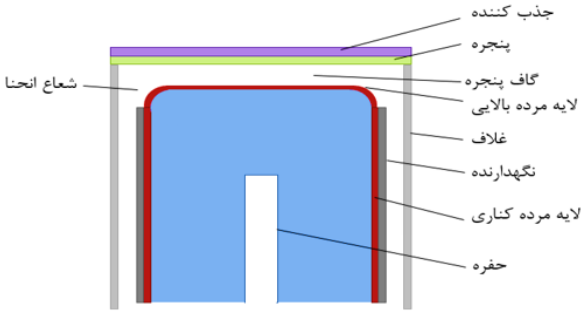
شکل ۱: زنجیره زنجیره واپاشی $^{A}_{Z}X$ به $^{A}_{Z-1}Y$ از طریق گسیل تابش بتا و تابش‌های گاما.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

روش انجام کار

دراین بخش برای تعیین کمی اثر جمع‌بندی همزمان در بازدهی شمارش، چند پارامتر مختلف شامل فاصله چشمه از آشکارساز، نوع و هندسه چشمه، مورد مطالعه قرارگرفته است. برای انجام این کار، یک آشکارساز HPGe از نوع p با بازدهی ۲۰ درصد (در قله انرژی ۱/۳۳MeV از ^{60}Co) با استفاده از کد EFTRAN شبیه‌سازی و در شکل۲ نشان داده شده است. ابعاد این آشکارساز در جدول ۱ ارائه شده است. این ساختار امکان محاسبه فاکتور تصحیح بازدهی آشکارساز برای انرژی‌های تابش گاما در محدوده انرژی ۰/٤ تا ۳ MeV را فراهم می‌کند.

چشمه‌های پرتوزا شامل ^{22}Na، ^{134}Cs و ^{88}Y به صورت نقطه‌ای و ویال استوانه‌ای در فواصل مختلف از آشکارساز قرار گرفته و پارامتر تصحیح برای هر حالت محاسبه شده است.



شکل ۲: شبیه سازی ساختار آشکارساز HPGe در کد EFTRAN.

جدول۱ : مشخصات ساختاری آشکارساز HPGe.

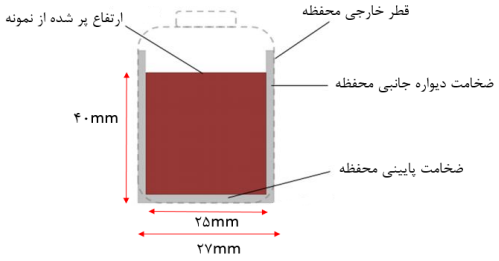
پارامتر	مقدار (mm)	پارامتر	مقدار (mm)
قطر کریستال	٦۰	قطر غلاف	۸۰
طول کریستال	٦۰	ضخامت غلاف	۱
لایه مرده بالایی	۱	ضخامت پنجره	۱
لایه مرده کناری	۱	گاف پنجره	۵
طول حفره کریستال	٤۰	ضخامت نگهدارنده	۱

بحث در نتایج

به منظور تعیین اثر نوع چشمه بر فاکتور تصحیح، چشمه ^{22}Na در سه نوع نقطه‌ای، پلکسی و ویال (محلول چشمه در آب) شبیه‌سازی شده است. در شکل۳ ابعاد ویال حاوی چشمه پرتوزای ^{22}Na نشان داده شده است. این چشمه در فاصله ۲ cm از آشکارساز قرار داده شده است. نتایج به دست آمده برای فاکتور تصحیح در جدول۲ ارائه شده است. با توجه به نتایج، تغییر نوع چشمه از حالت نقطه‌ای به ویال می‌تواند فاکتور تصحیح را ۰/۷ درصد برای انرژی ۵۱۱keV و ۱/۵ درصد برای انرژی ۱۲۷٤ keV از چشمه ^{22}Na تغییر دهد.

جدول۲: محاسبه فاکتور تصحیح (F_c) برای انواع مختلف چشمه ^{22}Na در فاصله ۲ cm از آشکارساز.

انرژی گاما (keV)	چشمه نقطه‌ای	پلکسی	ویال (محلول در آب)
۵۱۱	۱/۰۲۸	۱/۰۳۳	۱/۰۳۵
۱۲۷٤	۱/۰٦۲	۱/۰۷۵	۱/۰۷۸



شکل ۳: شبیه‌سازی ساختار چشمه حاوی نمونه پرتوزا (ویال یا پلکسی).

به منظور بررسی اثر فاصله چشمه از آشکارساز، یک چشمه نقطه‌ای ^{88}Y در فواصل مختلف از آشکارساز قرار گرفته و فاکتور تصحیح برای هر حالت محاسبه و در جدول۳ ارائه شده است. با توجه به این جدول، فاکتور تصحیح برای انرژی ۲۷۳٤ keV در فاصله چشمه از آشکارساز در محدوده ۰/۲ تا ۵۰ cm، از ۰/۰۹۳ تا ۰/۹۳۷ تغییر می‌کند. این تغییرات در فاکتور تصحیح، منجر به تغییر در بازدهی آشکارساز به میزان ۹۰ درصد برای قله مورد نظر خواهد شد. بنابراین اندازه‌گیری بازدهی آشکارساز با استفاده از قله ۲۷۳٤ keV از ^{88}Y در فواصل کوتاه چشمه از آشکارساز و بدون در نظر گرفتن اثر جمع‌بندی همزمان به نتایج کاملا غلط منجر خواهد شد. برای انرژی‌های کمتر از ۲۷۳٤ keV، مقدار فاکتور تصحیح بزرگتر از ۱ است. این مقدار بیانگر این حقیقت است که برای این قله‌های انرژی، تعدادی شمارش اضافی (ناشی از پراکندگی کامپتون تابش‌های با انرژی بیشتر و یا تولید زوج و به تبع آن نابودی زوج) بر روی فوتوپیک ثبت شده است. بنابراین در فواصل کوتاه برای این دسته از قله‌های انرژی نیز لازم است فاکتور تصحیح برای تعیین بازدهی آشکارساز به کار برده شود. در هرصورت، همان‌گونه که در جدول ۳ نشان داده شده است، با افزایش مقدار فاصله چشمه از آشکارساز تا ۵۰cm، فاکتور تصحیح به عدد ۱ نزدیک می‌شود و

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

در این شـــرایط می‌توان اثر همزمـانی جمع کننده را در محاســـبه بازدهی آشکارساز نادیده گرفت.

جدول۳: محاسـبه فاکتور تصـحیح برای چشـمه نقطه‌ای ^{88}Y در فواصل مختلف چشمه از آشکارساز (D) بر حسب cm.

انرژی گاما (keV)	D=۰/۲	D=۱	D=۵	D=۲۰	D=۵۰
٤٨٤	۱/۳۷۲	۱/۲۱٦	۱/۰٤٤	۱/۰۰۵	۱/۰۰۱
۵۱۱	۱/۱۵۲	۱/۰۹۲	۱/۰۲۰	۱/۰۰۲	۱/۰۰۰
۸۵۱	۱/۳۷۲	۱/۲۱٦	۱/۰٤٤	۱/۰۰۵	۱/۰۰۰
۸۹۸	۱/۱۵۳	۱/۰۹۲	۱/۰۲۰	۱/۰۰۲	۱/۰۰۰
۱۳۸۲	۱/۱٤٦	۱/۰۸۸	۱/۰۱۹	۱/۰۰۲	۱/۰۰۰
۱۸۳٦	۱/۱۸۱	۱/۱۰۸	۱/۰۲۳	۱/۰۰۲	۱/۰۰۰
۲۷۳٤	۰/۰۹۳	۰/۱۳۹	۰/٤۱۸	۰/۸۷۰	۰/۹۷۳

به منظور اعتبار سنجی نتایج، فاکتور تصحیح برای یک چشمه نقطه‌ای ^{134}Cs که در فاصله ۲ cm از آشکارساز قرار دارد با استفاده از کد EFTRAN محاسبه شده است. فاکتور تصحیح برای هر انرژی در جدول ٤ ارائه شده است. این نتایج با محاسبات انجام شده توسط پیتون و همکارانش با استفاده از نرم افزار ETNA مقایسه شده است [۱۲]. با توجه به جدول٤، مقادیر فاکتور تصحیح محاسبه شده در این مقاله حداکثر ۵ درصد با مقادیر محاسبه شده توسط پیتون و همکارانش تفاوت دارد.

جدول٤: مقایسه نتایج فاکتور تصحیح برای چشمه نقطه‌ای ^{134}Cs در فاصله ۲cm از آشکارساز.

انرژی تابش گاما(keV)	EFTRAN	ETNA [۱۲]	درصد تفاوت
٤۷۵	۱/۱٤۰	۱/۲۰۰	۵/۲٦
۵٦۳	۱/۱۵۲	۱/۲۰٤	٤/۵۱
۵٦۹	۱/۱۵۱	۱/۱۹۷	٤
٦۰۵	۱/۰۸۹	۱/۱۰۵	۱/۷٤
۷۹٦	۱/۰۸۹	۱/۱۲۷	٤/۱۳
۸۰۲	۱/۱۳۹	۱/۱۹۸	۵/۱۷
۱۳٦۵	۰/۸٤۲	۰/۸٤٦	۰/٤۷

نتیجه گیری

در این مقـالـه فـاکتور تصـــحیح اثرات جمع‌بندی همزمان در انرژی‌های مختلف برای تعدادی از رادیوایزوتوپ‌های گسیلنده گاما در انواع مختلف (نقطه‌ای، ویال محلول و پلکســـی) در فواصـــل مختلف چشـمه از آشکارساز با استفاده از کد EFTRAN محاسبه شـــد. نـتـایـج نشـــان داد اثـر همزمـانی جمع کننـده برای رادیوایزوتوپ‌هایی که شـامل چند زنجیره‌ی واپاشـی هسـتند و به ویژه هنگامی که فاصـله چشـمه تا آشکارساز کم باشد، نقش مهمی در تعیین بازدهی آشـکارساز ایفا می‌کند. انجام این محاسبات برای تصـحیح بازدهی آشکارساز و افزایش دقت در تعیین مقدار فعالیت رادیوایزوتوپ‌ها به کار برده می‌شـود. محاسـبه فاکتور تصـحیح در انرژی‌های مختلف در واکنش‌های هسـته‌ای تولید کننده هسـته‌های مرکب که شـامل زنجیره‌های واپاشی همزمان هستند، می‌تواند برای تصـحیح سـطح مقطع واکنش‌های هسـته‌ای نیز مورد اسـتفاده قرار گیرد. علاوه بر این، مقـایســـه مقادیر بازدهی اندازه‌گیری شـــده با بازدهی تصـــحیح شـــده برای انرژی‌های کمتر(مثل قله ۵۳ keV از ^{133}Ba) می‌تواند برای اســـتخراج اطلاعات از ســـاختار لایه مرده آشکارساز به کار برده شود[۱۳].

سپاسگزاری

از همکاری آقای دکتر ویدمار تیم (Vidmar Tim) از مرکز تحقیقات هسته‌ای بلژیک برای اجازه استفاده از کد EFTRAN سپاسگزاریم.

مرجع‌ها

[1] Wielopolski, Lucian, et al. "Basic considerations for Monte Carlo calculations in soil." Applied radiation and isotopes 62.1 (2005): 97-107.
[2] Knoll, Glenn F. Radiation detection and measurement. John Wiley & Sons,2010.
[3] Hernández, Francisco, and Farid El-Daoushy. "Accounting for incomplete charge collection in Monte Carlo simulations of the efficiency of well-type Ge-detectors." Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment 498.1-3 (2003): 340-351.
[4] Canberra (2009) Genie 2000 3.2 Spectroscopy Software Customization Tools V3.2.
[5] Sima, O. "Software for the computation of detection efficiency and of coincidence summing effects including neutron self-shielding." Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry 244.3 (2000): 669-673.
[6] Sima, O. "Applications of Monte Carlo calculations to gamma-spectrometric measurements of environmental samples." Applied radiation and isotopes 47.9-10 (1996): 919-923.
[7] Arnold, Dirk, and Octavian Sima. "Application of GESPECOR software for the calculation of coincidence summing effects in special cases." Applied radiation and isotopes 60.2-4 (2004): 167-172.
[8] Blaauw, M., & Gelsema, S. J. (2003). Cascade summing in gammaray spectrometry in Marinelli-beaker geometries: the third efficiency curve. Nuclear.Instruments.and Methods., A, 505,311e315.
[10] Vidmar, Tim. "EFFTRAN—a Monte Carlo efficiency transfer code for gamma-ray spectrometry." Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment 550.3 (2005): 603-608.
[11] Lépy, M-C., et al. "Intercomparison of methods for coincidence summing corrections in gamma-ray spectrometry." Applied Radiation and Isotopes 68.7-8 (2010): 1407-1412.
[12] Piton, François, et al. "Efficiency transfer and coincidence summing corrections for γ-ray spectrometry." Applied Radiation and Isotopes 52.3 (2000): 791-795.
[13] Arnold, Dirk, and Octavian Sima. "Application of GESPECOR Software for the calculation of coincidence summing effects in special cases." Applied radiation and isotopes 60.2-4 (2004): 167-172.

مطالعه میدانی مراکز بهداشتی تولیدکننده پسماندهای ویژه و بررسی پتانسیل فناوری پلاسما در امحای آنها

رشوندی، محدثه[۱] ؛ محمدحسینی، بابک[۲] ؛ خانی، محمدرضا[۳]

[۱] گروه فیزیک، دانشگاه بین المللی امام خمینی (ر ه)، قزوین

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

چکیده

در این پژوهش سعی شده است که تا حجم زباله های ویژه تولید شده در مراکز بهداشتی و نوع امحای آنها در قزوین مورد بررسی قرار گیرد. پس از شناخت زباله های غیر قابل امحا در این مراکز، سعی شده است راهکاری بر پایه فناوری پلاسما ارائه شود که توجیح صنعتی و اقتصادی هم برای استان داشته باشد جمع‌آوری اطلاعات بر مبنای تحقیقات میدانی بر روی چند واحد بیمارستانی از طریق توزیع پرسشنامه صورت گرفته و اطلاعات خروجی بررسی و در نهایت نموداری از میزان تولید زباله ها در این مراکز تهیه و ثبت شده است. زباله سوزهای بر پایه قوس پلاسمایی به عنوان راهکار پیشنهادی معرفی شده و صرفه اقتصادی آن مورد بحث قرار گرفته و اجرای آن در استان، با توجه به شرایط و منابع در دسترس، هم امکان سنجی شده است.

کلیدواژه: فناوری پلاسما، امحا زباله های ویژه

Field study of health centers producing special wastes and study of the potential of plasma technology in their extinction

Mohaddeseh, Rashvandi[1]; Mohammad Hosseini, Babak[1] ; Khani, Mohammad Reza[2]

[1] Department of Physics, Imam Khomeini Iinternational University, Qazvin
[2] Department of Physics, Shahid Beheshti University, Tehran

Abstract

n this research, an attempt has been made to examine the volume of special waste produced in health centers I and the type of their destruction in Qazvin. After recognizing the indestructible waste in these centers, an attempt has been made to provide a solution based on plasma technology that has an industrial and economic justification for the province. Collection of information based on field research on several hospital units has stionnaires. The output information has been reviewed and finally a been done through distribution of que diagram of the amount of waste production in these centers has been prepared and recorded. Plasma arc waste ncy has been discussed and its incineration has been introduced as a proposed solution and its economic efficie implementation in the province has been evaluated according to the available conditions and resources

Keywords: Plasma technology, special waste disposal

مقدمه

با توجه به روند افزایش جمعیت در کشورها پسماند شهری و به خصوص پسماند بیمارستانی که از نوع پسماندهای ویژه و خطرناک به حساب می‌آیند، تولید روزافزونی دارند. با ورود بیماری کوید ۱۹(کرونا) در جهان، امروزه مرگ و میر بی شماری را شاهد هستیم. در این جریان پسماندهای عفونی زیادی که از نوع زباله‌های ویژه محسوب می‌شوند، در بیمارستان‌های کل جهان تولید می‌شود آلودگی‌ها وخطرات ناشی از این پسماندها ادامه زندگی جانداران زمین را تهدید می‌کند بنابراین می‌توان با استفاده از تکنولوژی‌های بروز مخاطرات این تهدید را کاهش داد و حتی آن ها را به فرصت نیز تبدیل کرد. می‌توان پسماندها را به عنوان یک منبع تجدیدپذیر در نظر گرفت که با استفاده از آنها

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

علاوه بر تامین انرژی، از خطرات محیط زیستی دفع و دفن پسماند نیز کاست. مطالعات سال‌های اخیر نشان داده که تبدیل انرژی پسماند جامد شهری توسط فناوری گازی سازی پلاسما بسیار موثر است.[۱] پسماندهای ویژه نباید به هیچ وجه با پسماندهای شهری و خانگی مخلوط گردند، چرا که پراکنده شدن انواع مواد شیمیایی و بیولوژیکی حاوی عوامل بیماری‌زا و خطرناک از حساسیت خاصی برخوردار است. اگر به هر دلیلی این پسماندها باهم مخلوط گردند امحای آنها با روش های معمول، اثرات ناگوار زیست محیطی به همراه خواهد داشت با استفاده از فناوری پلاسما می‌توانیم امحا زباله‌های مخلوط را نیز بی خطر کنیم. در اثر پیش رو، پسماندی که جامعه آماری در هر سال تولید می شود، بررسی شد و در نهایت ارزش حرارتی و بازده انرژی برخی از این پسماندها در روش امحا بر پایه فناوری پلاسما، اندازه گیری شده است.

فناوری گازی‌سازی پلاسمایی PGV[1]

فنآوری پلاسما می‌تواند بازیافت و تبدیل مواد زباله مخلوط را به طور کامل و بدون خروج گازهای سمی و پسآب برجای مانده از دفن زباله انجام برساند. این فناوری به لحاظ اجرا، هزینه‌های سرمایه گذاری و هزینه های عملیاتی در مقایسه با ظرفیت کوره‌های مشابه از مزایای خوبی برخوردار است. در ضمن، این فناوری، قادر است تقریباً هر نوع زباله‌ای را به برق و محصولات قابل مصرف و بالقوه سالم تبدیل کند.جزء اصلی این سیستم، راکتور پلاسمایی است که می‌تواند شامل یک یا چند مشعل قوس پلاسمایی[2] باشد. PGV یک سیستم زباله سوز احتراقی نمی‌باشد. با عبور جریان DC بین دو قطب مثبت و منفی مشعل پلاسما، دمای فوق العاده زیادی، بین ۵۰۰۰ تا ۱۰۰۰۰ درجه سانتیگراد، ایجاد می‌شود. به دلیل اینکه اکسیژن کافی در راکتور وجود ندارد، عمل سوختن به طور کامل صورت نمی‌گیرد. به علت دمای بسیار زیاد هسته مرکزی راکتور، ترکیبات سمی در عرض چند میلی ثانیه می‌شکنند و از تولید محصولات ثانویه احتراق و گازهای سوختنی آلوده جلوگیری می‌کنند.. عمده ترین محصول حاصل از فرآیند PGV ،گاز سنتزی[3] ی‌باشد که ممکن است در صنایع مختلف به عنوان جانشین سوخت‌های دیزلی و یا در تولید آب گرم و بخار بکار می‌رود.[۳]

اثرات زیست‌محیطی زباله سوز پلاسمایی

این سیستم هیچ ماده آلوده کننده‌ای تولید نمی‌کند، یا میزان مواد آلاینده موجود در اتمسفر، زمین را افزایش نمی‌دهد. علاوه بر این، بوی که با دفن بهداشتی یا کمپوست بوجود می‌آید، در این روش منتشر نمی‌شود از سوی دیگر نیازی به زمین برای دفن یا کمپوست وجود ندارد؛ چون تنها محصولات آن، همانطور که به تفصیل ذکر شده، گازهای سنتزی با ارزش حرارتی بالایی است که قابل تصفیه بوده و منبع ارزشمندی از انرژی می‌باشند و همچنین خاکستر خنثایی بر جا می‌گذارد که آزمایشات، بی‌اثر بودن و غیر قابل نشت بودن آنرا ۱۰۰ ٪ تأییدمی کنند. [۲] همچنین به غیر از زباله‌های هسته‌ایی، این راکتور توانایی تصفیه انواع زباله‌ها شامل زباله های شهری(MSW)[4] ، بیمارستانی، زباله های سمی و خطرناک صنعتی و... را دارد. در این روش نیازی به جداسازی، خشک کردن و خرد کردن زباله ها قبل از ورود به راکتور نمی‌باشد. در جدول زیر میزان آلاینده‌های تولیدی توسط این تکنولوژی با سایر روش‌های زباله سوزی مقایسه شده است.

جدول۱: میزان تولید آلاینده ها در راکتور پلاسما و مقایسه آن با سایر روشهای زباله سوزی

تکنولوژی	SO_x Lb/Mwh	NO_x Lb/Mwh	خاکستر Lb / Mwh
زباله سوزهای رایج	۰/۲-۲/۷	۱/۱۱-۷	۱۴
زباله سوز با بستر سیال	۲/۷	۴	۱۴
گازی سازی با بستر سیال	۰/۱-۰/۵	۰/۵۶-۴	۰
گازی سازی با مشعل پلاسما	۰/۱-۰/۵	۰/۵-۲	۰

این سیستم از نظر اقتصادی نیز مقرون به صرفه است.هزینه سرمایه گذاری و اجراء یک واحد نیروگاه زباله سوز با راکتور پلاسما به ظرفیت ۳۵۰۰۰۰ تن در سال، معادل ۸۰- ۱۰۰ میلیون دلار برآورد شده است که ساخت آن ۱۸ ماه به طول می انجامد .

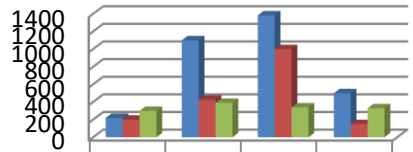
[1] Plasma Gasification & Vitrification
[2] Plasma Arc torch
[3] Synthetic Gas
[4] Municipal Solid Waste

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

تحقیق میدانی از مراکز درمانی

تمامی بیمارستان‌های مورد مطالعه، دارای برنامه عملیاتی تدوین شده برای مدیریت پسماند، از جمله جمع آوری، تفکیک و امحا، بودند. نمودار زیر میانگین پسماندهای پزشکی و عفونی و شبه خانگی تولیدی در این چهار بیمارستان را نشان می‌دهد:

نمودار۲: پسماندهای تولیدی در چهار بیمارستان



	A	B	C	D
میانگین پسماند پزشکی در روز	220	1100	1383	500
میانگین پسماندهای عفونی/تیز وبرنده	200	426/06	1000	150
میانگین پسماندهای شبه خانگی	300	391/36	339	330

این چند بیمارستان در سال حدود ۲۳۹۱/۹۹۱۲ تن زباله های پزشکی و عفونی و شبه خانگی تولید می‌کنند. که حدود ۴۸۶/۱۳ تن آن، زباله شبه خانگی و غیر خطرناک و ۱۹۰۵/۸۶ تن، زباله خطرناک است.به طور میانگین سالانه چیزی حدود ۲/۵ تن زباله به ازای هر تخت فعال بیمارستان تولید می‌شود. قزوین با دارا بودن ۱۲۰۰ تخت فعال می‌تواند ۳۰۰۰ تن زباله پزشکی ویژه و عادی در سال تولید کند. بنابر گفته وزیر بهداشت در سال ۱۳۹۸، در کل کشور حدود ۲۴۴۱۹۸ تخت در بیمارستان های دولتی،مراکز درمانی تحت پوشش دانشگاه علوم پزشکی،بیمارستان های بخش خصوصی و بیمارستان های خیریه وجود دارد [۴]. اگر به ازای هر تخت ۲/۵ تن زباله در سال تولید شود می‌توان تخمین زد که در کل کشور سالانه ۶۱۰۴۹۵ تن زباله عفونی و شبه خانگی به ازای هرتخت بیمارستانی تولید می‌شود.

در این چند بیمارستان سالانه حدود ۱ میلیارد و ۷۴۳ میلیون تومان هزینه امحا زباله می‌شود.در ۲۵ بیمارستان استان قزوین این مبلغ به ۴۴ میلیارد نیز می‌رسد.

ارزیابی ارزش حرارتی

بازده گاز سرد، با تقسیم ارزش حرارتی گاز سنتز به ارزش حرارتی پایین پسماند و انرژی الکتریکی مصرف شده درمشعل پلاسما به دست می آید

$$\eta_{syngas} = \frac{m_{syn}\,(kg) \times LHV_{syn}(\frac{kj}{kg})}{P_{torch} + P_o + (m_{waste} \times LHV_{waste})} \quad (۱)$$

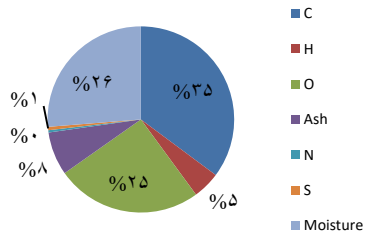
P_{torch} توان مصرف شده برای تولید اکسیژن و P_O توان مصرفی مشعل پلاسما است. m_{waste} و LHV_{waste} جرم پسماند ورودی و ارزش حرارتی کم m_{syn} و LHV_{syn} به ترتیب ارزش حرارتی و جرم گاز سنتز خروجی است..

ارزش حرارتی پایین با استفاده از قانون سه جزء به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$LHV\left(\frac{kj}{kg}\right) = 190 \times B - 25 \times W \quad (۲)$$

که در آن B درصد محتوای قابل احتراق زباله و W درصد رطوبت را بیان می‌کنند. برای بدست آوردن مقدار گاز سنتزی به آنالیز شیمیایی پسماندها و واکنش شیمیایی سوخت با اکسیژن نیاز داریم. با تحقیق در مورد آنالیزچند نمونه پسماند، ارزش حرارتی پایین پسماند و بازده گاز سنتزی بدست آورده شد که در ادامه برای نمونه محاسبات را برای زباله جامد شهری انجام داده‌ایم.

آنالیز اتمی MSW: [1]



فرمول شیمیایی زباله جامد شهری: $C_6H_{10}O_4$

واکنش شیمیایی MSW با اکسیژن

$$C_6H_{10}O_4 + 3O_2 \rightarrow 3CO + 3CO_2 + 4H_2 + H_2O$$

$$+1300\ kWh\ per\ ton\ of\ MSW \quad (۳)$$

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

با توجه به واکنش و عدد اتمی مقدار گاز سنتزی به ازای هر مول زباله جامد شهری حدود ۲۴۲ گرم گاز سنتزی بدست می‌آید. پس به ازای ۱۳۶۰/۳۶ کیلوگرم MSW به عبارتی ۹۳۱۷/۵۳ مول MSW ۲۲۵۴۸۴۲/۲۶ گرم گاز سنتزی تولید می‌شود

$$m_{syngas} = 2254/84\ \frac{kg}{h}$$

طبق واکنش به ازای هر مول زباله جامد شهری ۳ مول اکسیژن نیاز داریم.

$$3(O_2) = 6(16) = 96\ gr \quad ; \quad C_6H_{10}O_2 = 146\ gr$$

اگر ۶۰ درصد زباله قابل احتراق باشد، می‌توان میزان برق برای تولید یک تن اکسیژن مصرفی را محاسبه کنیم: [4]

$$1000\ kg \times 60\% \times \frac{96}{146} = 304\ kg\ of\ oxygen$$

برق مورد نیاز برای یک تن زباله پلاستیک برابر است با:

$$P_{O_2} = \frac{304}{1000\ kg} \times 250\ kwh = 75\ kwh$$

با استفاده از مقادیر بدست‌آمده به محاسبه بازده می‌پردازیم:

$m_{waste} = 1360/36\ \frac{kg}{h}$	$m_{syngas} = 2254/84\ \frac{kg}{h}$
$LHV_{waste} = 10750\ \frac{kj}{kg}$	$LHV_{syngas} = 8000\ \frac{kj}{kg}$
$P_{torch} = 30$ kwh	$P_{O_2} = 75\ kwh$

با جایگذاری اعداد بدست‌آمده در معادله (۱) بازده زباله جامد شهری را می‌توان محاسبه کرد:

$$\eta_{syngas} = \frac{2254.54 \times 8000}{(30 \times 3600_s) + (75 \times 3600) + (1360.36 \times 10750)}$$

$$= 1/2024\ \text{kj/h}$$

به طور کلی بازده گاز سنتزی برای سوخت MSW حدود ۱۲۰ درصد می باشد. به همین شیوه چند پسماند دیگر نیز بررسی و محاسبه گردیدند

.جدول۲: بررسی ارزش حرارتی و بازده چند نمونه پسماند

نوع زباله	$m_{waste}(\frac{kg}{h})$	$HHV_{waste}(\frac{kj}{kg})$	$LHV_{waste}(\frac{kj}{kg})$	$\eta_{syn}(\%)$
پلاستیک	۹۲/۶۱	۶۳/۳۱۷۵۸۵	۱۵۷۱۰	۵۵
کارتن	۸۸/۳۵	۸۲/۳۲۲۹۲	۵/۱۷۱۷۹	۴۹
چوب	۶۲۵/۱۵	۰۹/۸۳۴۸	۱۳۹۶۵	۵۷
پارچه	۸۸/۱۳	۱۲/۳۷۹۶۸۷	۱۲۲۸۸	۵۶

نتایج و بحث

با توجه به آمار بدست آمده دریافتیم که در شهر قزوین با وسعت وجمعیتی کم مقدار قابل توجهی زباله ویژه بیمارستانی تولید می‌گردد که امحای آنها به روش‌های معمول، عوارض وخطرات جبران ناپذیر را به بار می‌آورد . با اتکا به همین آمار می‌توان دریافت که در ایران و جهان سالانه چقدر زباله تولید و دفن می‌شود. طبق تحقیقات، زباله های عفونی مراکز مذکور فقط توسط دستگاه اتوکلاو بی‌خطرسازی می‌شوند و در زمینی دورتر از شهر دفن می‌شوند. تنها مراکز کمی از جهان از مکانیزم پلاسمایی استفاده می‌کنند که ظرفیت آنها بیش از ده تن است.در ایران نیز تعداد محدودی از این زباله سوز با ظرفیت یک تن در روز در حال اجرا است اما جوابگوی این حجم از زباله تولیدی در کشور نیست. در حال حاضر بهترین نوع زباله سوز، زباله سوز با استفاده از فناوری پلاسما می‌باشد پس بهتر است پایلودهای بیشتری در شهرها و کشورهای جهان ایجاد کرد تا انتشار این نوع از گازها به حداقل مقدار ممکن برسد. طبق محاسبات انجام شده، بازده های بدست آمده عدد مطلوبی را نشان می‌دهد. با این تفاسیر از نظر کیفی روش گازی‌سازی پلاسما ارزش سرمایه گذاری را خواهد داشت، اما هزینه بالای ساخت و راه اندازی زباله سوز برپایه این روش نسبت به سایر مواد جایگزین موجب شده است تا مسئولین خدمات شهری با توجه به مشکلات ناشی از عدم وجود تجهیزات مورد نیاز و بالا بودن ارزهای خارجی به سمت روش‌های کم هزینه‌تر در دفن و امحا زباله روی آورند. این روش در شرایط فعلی ظاهراً اقتصادی به نظر نمی‌رسد اما می توان ظرف مدت چند ماه این هزینه جبران و در نهایت تبدیل به سود کرد.

مراجع

[1] Gary C. Young, PhD., PE;" MUNICIPAL SOLID WASTE TO ENERGY CONVERSION PROCESSES"; 2010

[2] WWW.SOLENAGROUP.COM

[3] NOLAN-ITU Pty Ltd (3082-01); “Guideline for Determining the Renewable Components in waste for Electricity Generation”; 2001

[4] V. Frolov, A. Pukhov, M. Tseitlin, A. Andreev, I. Frolova, A. Gur'ianov, Metallurgical application of hydrogen-containing gases produced by the plasma solid waste gasification process at an environmentally clean thermal power station, International Journal of Hydrogen Energy, Volume 18,2007

[4] WWW.YJC.IR

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

ویژگی‌های الکترونی و اپتیکی آلومینیوم نیترید فلوئوردارشده‌ی تک‌لایه: مطالعه‌ی آثار بس-ذره ای

کرمی،ایمان ؛ کتابی،سیداحمد

دانشکده فیزیک دانشگاه دامغان ، دامغان

چکیده

با استفاده از نظریه‌ی تابعی چگالی، تقریب G_0W_0 و حل معادله‌ی بته-سالپیتر، ویژگی‌های الکترونی و اپتیکی آلومینیوم نیترید فلوئوردارشده‌ی تک لایه تحقیق شده است. نتایج ما نشان می‌دهد که عامل دارکردن آلومینیوم نیترید تک لایه توسط فلوئور باعث گذار گاف نواری غیرمستقیم به مستقیم می‌شود و مقدار گاف نواری را در تقریب G_0W_0 از ۵٫۷ الکترون ولت به ۷٫۹۵ الکترون ولت افزایش می‌دهد. تحلیل طیف جذب اپتیکی و اثرات اکسیتونی همچون برهم کنش الکترون-حفره نشان می‌دهد که فلوئوردارکردن آلومینیوم نیترید تک لایه باعث افزایش انرژی بستگی اولین قله‌ی طیف جذب از مقدار۱٫۷۲ الکترون ولت به ۲٫۱۲ الکترون ولت می-شود. نتایج کار حاضر پیشنهاد می‌کند که آلومینیوم نیترید فلوئوردارشده‌ی تک لایه کاندیدایی جذاب در کاربردهای اپتوالکترونیکی می‌باشد.

واژه های کلیدی: *آلومینیوم نیترید تک لایه، تقریب GW ، ویژگی‌های اپتیکی، انرژی بستگی*

Electronic and optical properties of fluorinated AlN monolayer: study of many-body effects

Karami, Iman; Ketabi, Seyed ahmad

School of Physics, Damghan University, Damghan,

Abstract

Using density functional theory ,G_0W_0 approximation and solving Bethe-salpeter equation(Bse), electronic and optical properties of fluorinated AlN monolayer were investigated. our results show that functionalization of AlN monolayer with fluorine induces an indirect to direct band gap transition and the band gap value increases from 5/7 to 7/95 eV within GW approximation. analyzing absorption spectra and excitonic effects such as electron-hole interaction show that fluorination of AlN monolayer increase the exciton binding energy of the first absorption spectra peak from 1/72 eV to 2/12 eV. results of this study suggest that fluorinated AlN monolayer is a promising candidate for optoelectronic applications.

***Keywords**: AlN monolayer, GW approximation, optical properties, binding energy*
PACS No.70

مقدمه

در سالهای اخیر گسترش مطالعات تجربی و تئوری روی گرافن محققان را به مطالعه نانوساختارهای جدیدی همچون سیلیسن، مولیبدن دی سولفید، روی اکسید و نیمرساناهای ترکیبی III -V تشویق کرد. در میان این مواد آلومینیوم نیترید به عنوان یک نیمرسانای ترکیبی III -V با داشتن ویژگی های جذابی همچون گاف نواری پهن در حدود ٦ الکترون ولت[۱]، پایداری شیمیایی عالی و رسانندگی گرمایی بالا[۲] کاربردهای زیادی در الکترونیک و اپتوالکترونیک ایفا می‌کند[۳]. تلاش‌های محققان در طی سالهای اخیر در مورد آلومینیوم نیترید در سطح نانو منجر به ظهور نانوساختارهای مختلفی همچون نانوسیم، نانولوله و نانوصفحات شده است. در میان طیف وسیع این نانوساختارها آلومینیوم نیترید تک لایه با ساختار شش ضلعی توجه بسیاری از محققان را به خود جلب نموده است ، پایداری این ساختار تک لایه با استفاده از محاسبات فونونی مورد تایید قرار گرفته است[٤]. داشتن گاف نواری غیرمستقیم در آلومینیوم نیترید تک لایه مانع کاربرد آن در وسایل اپتوالکترونیک می‌شود، به همین دلیل اصلاح شیمیایی ساختار می‌تواند روشی موثر جهت کنترل ویژگی‌های الکترونی و

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

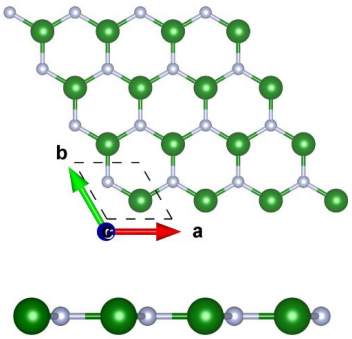
اپتیکی آلومینیوم نیترید تک لایه باشد. تاکنون ویژگی‌های الکترونی و اپتیکی آلومینیوم نیترید تک لایه‌ی عامل دار شده به طور شیمیایی توسط فلوئور به خوبی مطالعه نشده است. به همین منظور قصد داریم در این کار پژوهشی با بکارگیری نظریه‌ی تابعی چگالی در ترکیب با اختلال بس‌ذره ای و حل معادله‌ی بته–سالپیتر(BSE) ویژگی‌های الکترونی و اپتیکی آلومینیوم نیترید تک لایه‌ی عامل دار شده توسط فلوئور را مورد بررسی قرار دهیم.

جزئیات محاسبات

به منظور مطالعه ویژگی‌های حالت پایه از نظریه تابعی چگالی اجراشده در بسته‌ی نرم افزاری کوانتوم اسپرسو استفاده شده است. برای توصیف برهم کنش‌های تبادلی- همبستگی از تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) با تابعی PBE استفاده می‌کنیم، برهم کنش-های الکترون–یون بوسیله‌ی شبه پتانسیل هنجار–پایسته توصیف شده است[۵]. توابع موج برحسب امواج تخت با انرژی قطع ۶۰Ry بسط داده شده اند، همه‌ی ساختارها تا زمانی که بیشترین نیروی وارد شده روی هر اتم کمتر از $۰/۰۱\frac{eV}{A^{\circ}}$ شود به طور کامل بهینه شده اند. انتگرال‌های منطقه ی اول بریلوئن برای محاسبات الکترونی بر پایه‌ی روش مونخورست–پک، با توزیع نقاط ۱×۱۸×۱۸ انجام شده است. به منظور جلوگیری از برهم کنش دو لایه‌ی مجاور فاصله خلا ۲۰ آنگستروم در جهت عمود بر صفحه به کار برده شده است. انرژی جذب با استفاده از معادله $E_{ad}=E_T-E_{AlN}-2E_F$ محاسبه می‌شود که E_T ، E_{AlN} و E_F به ترتیب انرژی کل آلومینیوم نیترید فلوئودارشده تک لایه ، آلومینیوم نیترید تک لایه و اتم فلوئور می‌باشند. طبق این معادله، مقدار منفی انرژی جذب پایداری ساختار را نشان می‌دهد. به منظور مطالعه انرژی شبه ذرات در نظریه‌ی اختلالات بس–ذره ای از تقریب G_0W_0 استفاده شده است[۶] که در نهایت با حل معادله‌ی بته–سالپیتر براساس انرژی شبه ذرات اثرات اکسیتونی (برهم کنش الکترون–حفره) در محاسبات درنظر گرفته شده است[۷]. برای محاسبه طیف جذب اپتیکی از توزیع نقاط ۱×۲۴×۲۴ درمنطقه اول بریلوئن استفاده شده است. در کار پژوهشی حاضر محاسبات G_0W_0 و حل معادله‌ی بته–سالپیتر توسط بسته‌ی نرم افزاری یامبو انجام گرفته است.

نتایج

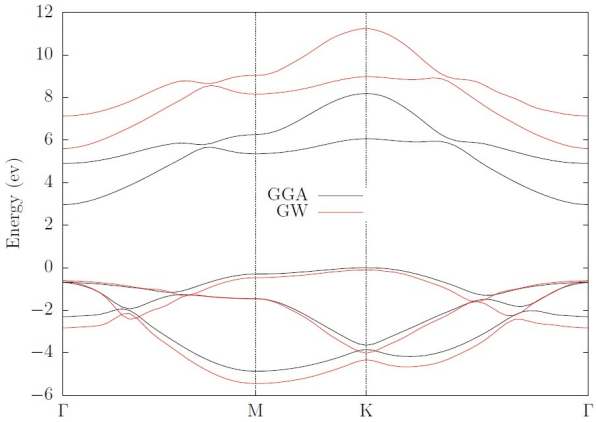
ساختار کریستالی آلومینیوم نیترید تک لایه در شکل (۱) نشان داده شده است ، بعد از بهینه سازی ساختار، زاویه‌ی پیوند Al-N-Al (N-Al-N) معادل با ۱۲۰ درجه تایید می‌کند که اتم‌های آلومینیوم(Al) و نیتروژن(N) در یک ساختار شش ضلعی تخت به صورت sp^2 ترکیب شده اند. ثابت شبکه و طول پیوند به ترتیب ۳٫۱۱ و ۱٫۷۹ آنگستروم می‌باشند که اندازه‌ی این مقادیر در توافق با کارهای تئوری قبلی است.



شکل۱: ساختار بهینه شده‌ی آلومینیوم نیترید تک لایه در دو راستای مختلف، آلومینیوم(سبز) و نیتروژن(آبی)

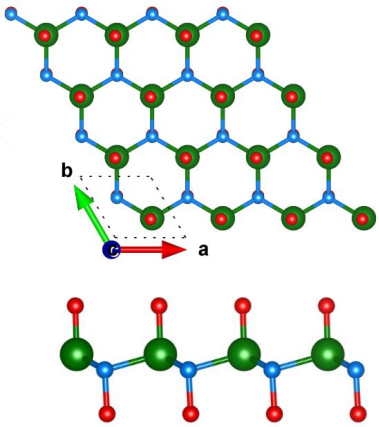
نوارهای انرژی آلومینیوم نیترید تک لایه با استفاده از دو سطح DFT-GGA و G_0W_0 در امتداد جهت‌های پرتقارن منطقه‌ی بریلوئن در شکل (۲) نشان داده شده است. روش DFT-GGA نشان می‌دهد که ساختار آلومینیوم نیترید تک لایه ، دارای گاف نواری غیرمستقیمی به اندازه‌ی ۲٫۹۶ الکترون ولت میان نقاط K و Γ منطقه‌ی بریلوئن می‌باشد که این گاف نواری غیرمستقیم به علت تصحیحات خودانرژی ناشی از برهم کنش الکترون به مقدار ۵٫۷ الکترون ولت افزایش می‌یابد.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

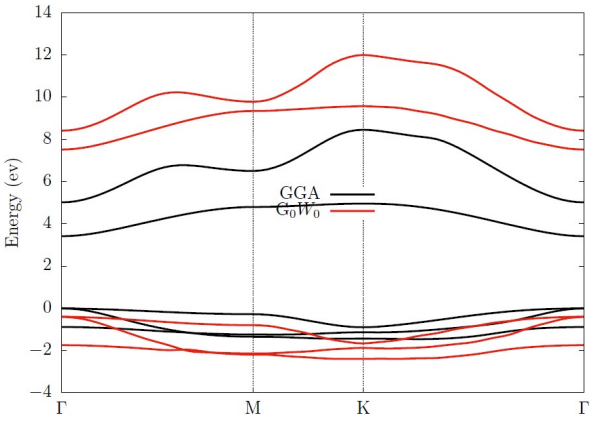


شکل(۲): نوارهای انرژی آلومینیوم نیترید تک لایه در محاسبات GGA (خطوط سیاه) و G_0W_0 (خطوط قرمز)

. در شکل(۳) ساختار کریستالی آلومینیوم نیترید تک لایه‌ی به طور کامل فلوئوردارشده نشان داده شده است. مقدار انرژی جذب ۱٫۹٤- الکترون ولت نشان می‌دهد که این ساختار پایدار است. زاویه‌ی پیوند F-Al-N (F-N-Al) معادل با ۱۰۷ درجه نشان می‌دهد که آلومینیوم نیترید فلوئوردارشده‌ی تک لایه دارای ساختاری چین خورده با بزرگی ۰٫٥٤ آنگستروم می‌باشد. ثابت شبکه‌ی بهینه شده و طول پیوندهای Al-N ، Al-F و N-F این ساختار به ترتیب ۳٫۲٥، ۱٫۹٥، ۱٫٦۳ و ۱٫٤۸ آنگستروم هستند. مشخصه های ساختاری همچون ثابت شبکه، بزرگی چین خوردگی آلومینیوم نیترید فلوئوردارشده‌ی تک لایه در مقایسه با آلومینیوم نیترید تک لایه‌ی تخت، باعث ایجاد ساختارهای نواری کاملا مختلف در هردو ساختار می‌شود. نوارهای انرژی محاسبه شده با استفاده از دو روش DFT-GGA و G_0W_0 در شکل (٤) نشان می‌دهد که آلومینیوم نیترید فلوئوردارشده‌ی تک لایه دارای گاف نواری مستقیمی در نقطه‌ی Γ منطقه‌ی بریلوئن به اندازه ۳٫٤۱ الکترون ولت در روش DFT-GGA و ۷٫۹٥ الکترون ولت در روش G_0W_0 می‌باشد. این تغییر نوع گاف از حالت غیرمستقیم به مستقیم و افزایش مقدار گاف در آلومینیوم نیترید فلوئوردارشده‌ی تک لایه می‌تواند مزیتی برای کاربرد این ساختار در ساخت وسایل اپتوالکترونیکی باشد، به همین خاطر انتظار داریم اختلاف عمده ای میان طیف جذب آلومینیوم نیترید تک لایه و آلومینیوم نیترید فلوئوردارشده‌ی تک لایه شاهد باشیم.



شکل(۳): ساختار بهینه شده‌ی آلومینیوم نیترید فلوئور دارشده‌ی تک لایه در دو راستای مختلف، آلومینیوم(سبز) ،نیتروژن(آبی) ، فلوئور(قرمز)

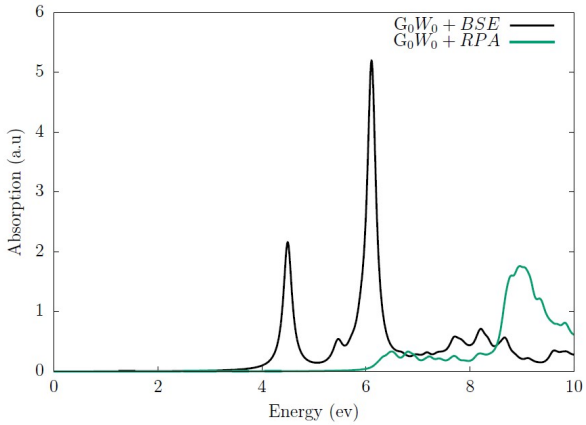


شکل(٤): نوارهای انرژی آلومینیوم نیترید فلوئوردارشده‌ی تک لایه در محاسبات GGA (خطوط سیاه) و G_0W_0 (خطوط قرمز)

درشکل(٥) طیف جذب (قسمت موهومی تابع دی الکتریک) آلومینیوم نیترید تک لایه در غیاب برهم کنش الکترون- حفره با استفاده از تقریب فاز تصادفی بر مبنای ساختار نواری شبه ذرات (G_0W_0+RPA) و حضور اثرات اکسیتونی با استفاده از حل معادله‌ی بته-سالپیتر (BSE+GW) نشان داده شده است. برای مطالعه طیف جذب آلومینیوم نیترید تک لایه و آلومینیوم نیترید فلوئوردار شده‌ی تک لایه از قطبش نور در راستای موازی با صفحه استفاده شده است. همانطور که در شکل (٥) می‌بنیم مقایسه‌ی طیف جذب در دو روش ذکر شده تایید می‌کند که برهم کنش‌های الکترون- حفره باعث انتقال طیف جذب BSE+ G_0W_0 به سمت انرژی‌های پائین و ظهور تعدادی اکسیتون پیوندی زیر گاف شبه ذرات می‌شود. لبه-ی طیف جذب که مطابق با اکسیتون روشن (فعال) از نظر اپتیکی

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

می‌باشد در ٤٫٤٩ الکترون ولت قرار دارد. این اکسیتون پیوندی با انرژی بستگی(که به صورت اختلاف انرژی میان گاف شبه ذره و انرژی اکسیتون تعریف می‌شود) ۱٫۷۲ الکترون ولت بطور عمده به علت گذار نواری بین نوار ظرفیت و رسانش در نقطه‌ی Γ می‌باشد.

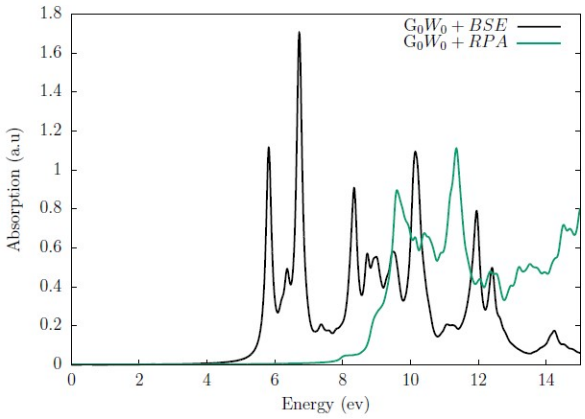


شکل(٥): طیف جذب اپتیکی آلومینیوم نیترید تک لایه در غیاب(سبز) و حضور(سیاه) برهم کنش‌های الکترون–حفره که به ترتیب مطابق با روش‌های G_0W_0+RPA و G_0W_0+BSE می‌باشند

به منظور بررسی اثر فلوئور روی ویژگی‌های اپتیکی آلومینیوم نیترید تک لایه طیف جذب آلومینیوم نیترید فلوئوردارشده ی تک لایه در غیاب و حضور برهم کنش الکترون–حفره در شکل (٦) نشان داده شده است. در شکل (٦) اولین اکسیتون پیوندی مطابق با اولین قله در طیف جذب در ٥٫٨٣ الکترون ولت مشاهده شده و این اکسیتون پیوندی با انرژی بستگی ۲٫۱۲ الکترون ولت به علت گذار نواری در نقطه ی Γ بین نوار ظرفیت و رسانش تشکیل شده است.

نتیجه گیری

نتایج نشان می‌دهد که محاسبات بر پایه تقریب G_0W_0 به علت درنظر گرفتن تصحیحات خودانرژی ناشی از برهم کنش الکترون–الکترون مقدار گاف نواری بدست آمده از نظریه‌ی تابعی چگالی را افزایش می‌دهد. همچنین درنظرگرفتن برهم کنش‌های الکترون–حفره که در طیف جذب اپتیکی به دست آمده از روش $G_0W_0 + RPA$ نادیده گرفته شده بود برای توصیف ویژگی‌های اپتیکی ضروری است. تحلیل طیف جذب اپتیکی نشان می‌دهد که فلوئور دارکردن آلومینیوم نیترید باعث افزایش انرژی بستگی اولین قله‌ی طیف جذب می‌شود. نتایج کار حاضر پیشنهاد می‌کند که آلومینیوم نیترید فلوئور دارشده‌ی تک لایه با داشتن گاف نواری مستقیم و انرژی بستگی قوی می‌تواند کاندیدایی جذاب برای ساخت وسایل اپتوالکترونیکی در محدوده‌ی فرابنفش باشد.



شکل(٦): طیف جذب اپتیکی آلومینیوم نیترید فلوئوردارشده‌ی تک لایه در غیاب(سبز) و حضور(سیاه) برهم کنش‌های الکترون–حفره که به ترتیب مطابق با روش‌های G_0W_0+RPA و G_0W_0+BSE می‌باشند

مرجع‌ها

[۱] J. Li, K. B. Nam, M. L. Nakarmi, J. Y. Lin, H. X. Jiang, Pierre Carrier, and Su-Huai Wei,Band "*structure and fundamental optical transitions in wurtzite AlN* ",Appl. Phys. Lett.**83** (2003) 5163

[۲] G. A. Slack, R. A. Tanzilli, R. O. Pohl, and J. W. Vandersande, "*The intrinsic thermal conductivity of AlN*", J. phys. Chem. Solids **48** (1987),641

[۳] A. Khan, K. Balakrishnan, and T. Katona , "*Effect of grain refinement on mechanical properties of ball-milled bulk aluminum*", Nat. Photonics **2**(2008) 77

[4] Sahin, H., Cahangirov, S., Topsakal, M., Bekaroglu, E., Akturk, E., Senger, R., Ciraci, S., "*Monolayer honeycomb structures of group-IV elements and III-V binary compounds: First-principles calculations*", Phys. Rev. B, **80** (2009): 155453–155464.

[5] D. R. Hamann, "*Optimized norm-conserving Vanderbilt pseudopotentials*",Phys. Rev. B **88** (2017), 085117

[6] L. Hedin and S. Lundquist. " *Explicit local exchange-correlation potentials*", J. Phys. C: Solid State Phys. **4** (14) (1970) 2064.

[7] M. Rohlfing, and S.G. Louie. "*Electron-hole excitations and optical spectra from first principles*",. Phys.Rev. B **62** (8) (2000) 4927.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بررسی ساختارستاره نوترونی با استفاده ازگرانش مجذورانرژی تکانه

نامور لاله زهرا [1]؛بیگدلی محسن [2]

گروه علوم پایه دانشگاه پیام نور زنجان [1] –گروه فیزیک دانشگاه زنجان [2]

چکیده

به دلیل گرانش مجذور انرژی-تکانه ($EMSG$)، انتظار می‌رود که در مراکز ستارگان نوترونی که چگالی بالایی دارند، انحرافات از پیش بینی‌های نسبیت عام قابل توجه شود.با استفاده از معادلات تعادل هیدروستاتیکی در $EMSG$ وحل آنها بصورت عددی ،روابط جرم-انرژی ستاره نوترونی را برای چهار معادله حالت واقعی‌ترEOS به دست می آوریم. از اندازه‌گیری‌های رصدی موجود جرم‌ها و شعاع‌های ستارگان نوترونی استفاده می‌کنیم تا پارامتر آزاد α را مقید کنیم که این پارامتر، جفت‌شدگی بین ماده و فضا-زمان را در $EMSG$ مشخص می‌کند. نشان می‌دهیم که $-10^{18} cm^3/g < \alpha < +10^{-17} cm^3/g$. با در نظر گرفتن این قید، بحث می‌کنیم که $EMSG$ چه سهمی در فیزیک ستاره‌های نوترونی می‌تواند داشته باشد.

واژه های کلیدی:

***EMSG**: گرانش مجذور انرژی تکانه*

Investigation of Neutron Stars Structure Using Energy _Momentum Square Gravity

Namvar, Laleh Zahra[1];Bigdeli Mohsen[2]

[1]department of Physics ,University of Payam e noor

[2]Department of Physics, Zanjan University

Abstract

It is anticipated that deviations from the general relativity predictions resulting from energy-momentum squared gravity ($EMSG$) become noticeable in the dense cores of neutron stars. Employing the obtained equations of hydrostatic equilibrium in EMSG and solving them numerically, we obtain the mass-radius relations of neutron star for four different realistic equations of state. We use the existing observational measurements of the masses and radii of neutron stars to constrain the free parameter, α, which determines the coupling between matter and space-time in EMSG. We demonstrate that $-10^{18} cm^3/g < \alpha < +10^{-17} cm^3/g$. Considering this constraint, we discuss what contributions EMSG can make towards the physics of neutron stars.

Key words

EMSG :Energy Momentum Square Gravity

PACS No.94

مقدمه

خصوصیات ساختاری ستارگان نوترونی،یعنی حداکثرجرم موضوعی است که اخترفیزیکدانان نظری مایل به مطالعه‌ی آن هستند. از لحاظ تئوری بدست آوردن معادلات هیدرواستاتیکی مناسب، در بررسی ساختار ستارگان نوترونی بسیارضرورت دارد.تاکنون از مدل هاو معیارهای مختلفی برای محاسبات این ساختار استفاده شده است. درستاره‌های نوترونی بدلیل داشتن چگالی بالا، گرانش انرژی تکانه در مراتب بالاتر میتواند نقش مهمی را ایفا کند .اخیرا مدل-گرانش مجذور انرژی_ تکانه(EMSG) مطرح شده است [۱].دراین مقاله رابطه شعاع جرمی را با استفاده از(EMSG) و معادلات واقع گرایانه(EOS)محاسبه می‌کنیم.ماEOS ماده‌ی ستاره نوترونی را با روش LOCV که یک روش‌میکروسکوپی است، بدست آورده-ایم[۲،۳]. روش LOCV یک ابزارقدرتمندبرای بدست آوردن ماهیت وخواص هسته دردماهای صفر ومحدود است[۴،۵].

روابط و محاسبات

در مدل EMSG با اضافه کردن $T_{\mu\nu}T^{\mu\nu}$ به خود انقباضی EMT، همراه باثابت کیهانشناسی به کنش هیلبرت –انیشتین، بصورت زیر ساخته می شود. جمله $T_{\mu\nu}T^{\mu\nu}$ تصحیح EMSG با ثابت واقعی α می باشد که شدت جفت شدگی گرانشی تصحیح رامورد بررسی قرار می دهد.

$$T_{\mu\nu}=-\frac{2}{\sqrt{-g}}\frac{\delta\left(\sqrt{-g}L_m\right)}{\delta g^{\mu\nu}}=g_{\mu\nu}L_m-2\frac{\partial L_m}{\partial g^{\mu\nu}} \qquad (۱)$$

$$G_{\mu\nu}+\Lambda g_{\mu\nu}=\kappa T_{\mu\nu}+\kappa\alpha\left(g_{\mu\nu}T_{\sigma\varepsilon}T^{\sigma\varepsilon}-2\theta_{\mu\nu}\right) \qquad (۲)$$

$$\theta_{\mu\nu}=T^{\sigma\varepsilon}\frac{\delta T_{\sigma\varepsilon}}{\delta g_{\mu\nu}}+T_{\sigma\varepsilon}\frac{\delta T^{\sigma\varepsilon}}{\delta g^{\mu\nu}}=-2L_m\left(T_{\mu\nu}-\frac{1}{2}g_{\mu\nu}T\right)-TT_{\mu\nu}+2T_{\mu}^{\gamma}T_{\nu\gamma}-4T^{\sigma\varepsilon}\frac{\partial^2 L_m}{\partial g_{\mu\nu}\partial g^{\sigma\varepsilon}} \qquad (۳)$$

ما بدنبال جوابهای متقارن کروی معادلات میدان EMSG در داخل ستاره نوترونی غیرچرخان هستیم . با بازنویسی معادلات فوق در متریک استاتیک و متقارن به شکل معادلات آشناتر TOV ، به معادلات تصحیح یافته زیر می رسیم:

$$\frac{dm}{dr}=4\quad{}^{2}1\qquad 1+8\quad+3\frac{}{2} \qquad (۴)$$

$$\frac{dP}{dr}=-G\frac{m}{r}\left|1+\frac{P}{}\right\|1-\frac{2}{}\left|\right.^{-1}\times\left|1+\frac{4\pi r^3P}{}+\alpha\frac{4}{}{}^{3}{}^{2}\right|1+3\frac{}{}^{2}\|$$

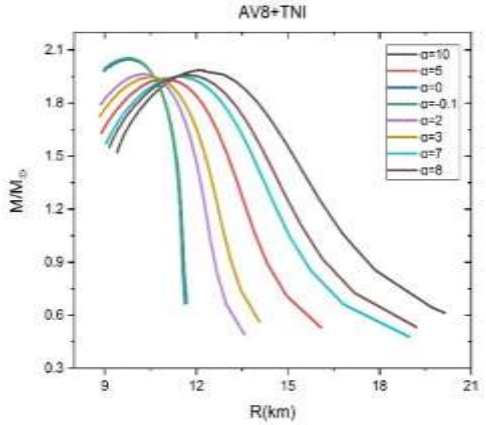
$$\times\left[1+2\alpha\rho\left(1+3\frac{P}{\rho}\right)\right]\left[1+2\alpha\rho\left(c_s^{-2}+3\frac{P}{\rho}\right)\right]^{-1} \qquad (۵)$$

روش

معادلات هیدرواستاتیکی (۴)و(۵)را برای یک معادله خاص P=P(ρ) از روش رانگ کوتای مرتبه ۴ که با فشار و ارتفاع مقیاس جرم سازگاراست، بصورت عددی حل می کنیم. برای هرمعادله حالت با یک چگالی مرکزی وفشارمرکزی متناظرش وتا سطحی که فشار صفرمی‌شود، انتگرال می‌گیریم. این نقطه بعنوان شعاع ستاره تعریف شده است وM جرم کل ستاره می‌باشد . سپس چگالی مرکزی را تغییر داده جرم و شعاع را دوباره بدست می‌آوریم. این فرایندراادامه می‌دهیم تارابطه‌ی جرم و شعاع را تعیین کنیم . سپس تمام این مراحل را برای مقادیر مختلف α تکرار می‌کنیم تاتاثیرآنرا بررابطه جرم و شعاع متمایزکنیم و تمام این فرایندومراحل را برای چهار نوع معادله حالت انتخابی مختلف AV8,AV8+TNI,AV6+TNI,UV14+TNI انجام می‌دهیم. این انتخابها نشاندهنده‌ی عدم قطعیتیست که درمعادله حالت ستارگان نوترونی وجوددارد.

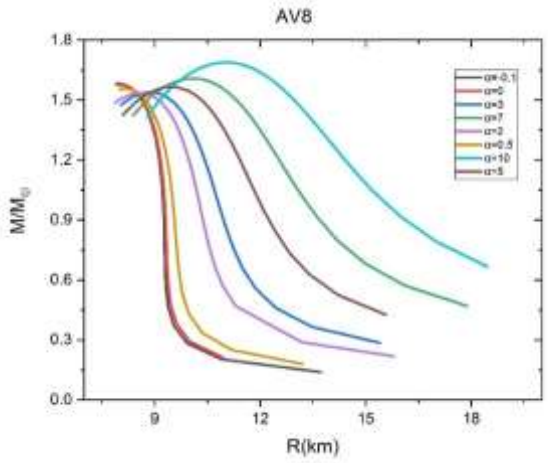
بحث و بررسی

درشکل۱ نمودار برحسب جرم و شعاع در محدوده‌ی $-10^{-18}g^{-1}cm^3\le\alpha\le10^{-17}g^{-1}cm^3$ برای پتانسیلهای ذکرشده و برای‌هر پارامترα بارنگ خاص رسم شده است که درآن روند کاهشی و سپس افزایشی برای جرم ماکزیمم و روند افزایشی برای شعاع را مشاهده می‌نماییم وبرای مقادیر منفی میزان تغییرات بصورت نامحسوس و نزدیک به حالت بدون حضور پارامتر α ، می‌باشد.

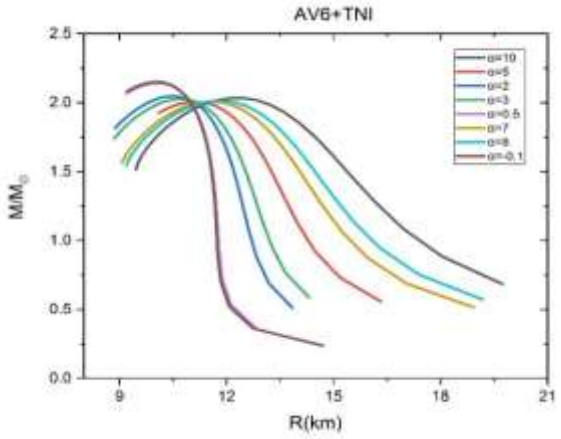


(a)

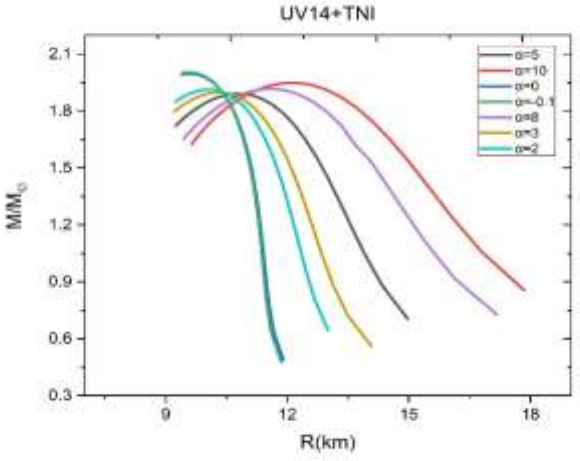
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



(b)



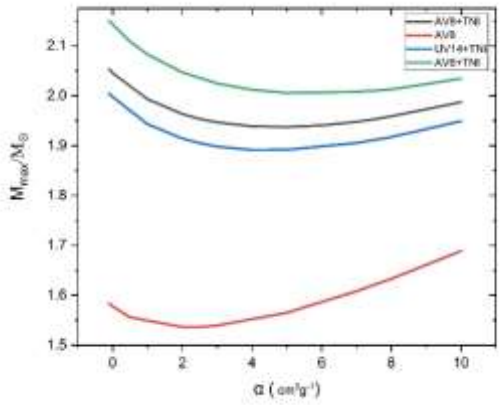
(c)



(d)

شکل۱: (a) جرم برحسب شعاع برای پتانسیل AV8+TNI، (b)جرم برحسب شعاع برای پتانسیل AV8، (c)جرم برحسب شعاع برای پتانسیل AV6+TNIو(d)جرم برحسب شعاع برای پتانسیل UV14+TNIکه α از مرتبه 10^{-17}

در شکل۲ ، جرم ماکزیمم برحسب α برای چهار پتانسیلEOS فوق رسم شده است. دراین پتانسیلها تغییرات جرم بصورت کاهشی سپس افزایشی را داریم.



شکل ۲:نمودار حداکثر جرم برحسب پارامترآزادα وαاز مرتبه10^{-17}برای چهارپتانسیل EOSتعریف شده

نتیجه گیری

همانطور که از اشکال فوق پیداست برای تمام پتانسیلهای EOS فوق با افزایش مقدار پارامتر αمیزان شعاع افزایش می یابد. همچنین تغییرات جرم ماکزیمم بصورت خطی نبوده ومنحنی بیضوی گون داشته که ابتدا روندکاهشی سپس افزایشی دارد. در مقایسه نمودارجرم ماکزیمم برحسب پارامتر آزاد α نیز روند ابتدا کاهش سپس افزایش جرم ماکزیمم نسبت به افزایش α رامشاهده می‌کنیم بااین تفاوت که تنها در پتانسیل AV8 مقدار جرم ماکزیمم در حداقل مقدار پارامترآزاد α کمتراز حداکثر پارامتر آزاد α می‌باشدواین بدین معناست که تاثیر مشهودی از گرانش مجذور انرژی ـتکانه را برروی این پتانسیل مشاهده می‌کنیم.

مرجع ها

[1] O. Akarsu, J. D. Barrow, S. Çıkıntoğlu, K. Yavuz Ekşi and N. Katirci,*Phys. Rev. D 97, 124017 (2018).*
[2] Z. Asadi and M. Bigdeli, *J. Phys. G: Nucl. Part. Phys. 45, 065101 (2018).*
[3] Z. Asadi and M. Bigdeli, (2019) *J. Phys. G: Nucl. Part. Phys (2019)*
[4] M. Bigdeli, *Phys. Rev . C 82, 054312 (2010).*
[5] G. H. Bordbar and M. Modarres, *Phys. Rev. C 57 (1998) 714*.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

ثابت‌های کشسانی ساختار تتراگونال ترکیب $PbTiO_3$ در چارچوب نظریه تابعی چگالی

ابراهیمی جابری؛ ریحانه[۱]، جلالی اسدآبادی؛ سعید[۱]
[۱] گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه اصفهان، اصفهان

چکیده

در کار حاضر ثابت‌های کشسانی و چگالی حالت‌های ساختار تتراگونال ترکیب $PbTiO_3$ با استفاده از نظریه تابعی چگالی مورد بررسی قرار گرفته‌اند. مقادیر ثابت‌های کشسانی با به‌کارگیری تقریب PBE-GGA و با استفاده از بسته محاسباتی IR-elast مورد بررسی قرار گرفته و سپس با استفاده از آن‌ها، پارامترهای مرتبط دیگر هم‌چون مدول حجمی، مدول یانگ، ثابت برشی، ضریب پواسون و سرعت‌های صوت را محاسبه کرده‌ایم. نتایج نشان می‌دهند که ثابت‌های کشسانی محاسبه شده در توافق خوبی با داده‌های تجربی می‌باشند. ضریب شکل پذیری محاسبه شده این بلور نیز نشان می‌دهد که بلور مورد نظر شکل‌پذیر است و ترد و شکننده نمی‌باشد.

واژه‌های کلیدی: *نظریه تابعی چگالی، ثابت‌های کشسانی.*

Elastic Constants in Tetragonal $PbTiO_3$ Compound within Density Functional Theory

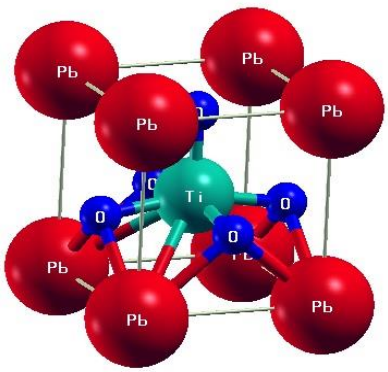
Ebrahimi-Jaberi; Reyhaneh[1], Jalali-Asadabadi; Saeid[1]
[1]*Department of physics, Faculty of Sciences, University of Isfahan, Isfahan*

Abstract

In this work, we study elastic constants and density of states of the Tetragonal $PbTiO_3$ compound by the density functional theory. We calculate elastic constants by using PBE-GGA approximation and the IR-elast computational package. Then by using these constants, we obtain some of the other related physical quantities such as Bulk modulus, Yang modulus, Shear constant, Poisson coefficient and sound velocities . Results show that our elastic constants are in good agreement with the experimental data. The calculated ductility shows that this compound is formable and it is not fragile.

مقدمه

پروسکایت‌ها با فرمول شیمیایی ABX_3 نشان داده می‌شوند که در آن A نشان‌دهنده کاتیون‌های فلزات خاکی کمیاب، فلزات قلیایی و فلزات قلیایی خاکی، B نشان‌دهنده کاتیون‌های فلزات عناصر واسطه و X نماینده آنیون‌های غیر فلزی مانند اکسیژن، کربن و نیتروژن هستند [۱]. پروسکایت‌های اکسیدی یک دسته مهم از پروسکایت‌ها می‌باشند که در آن‌ها اکسیژن به عنوان آنیون در بلور قرار می‌گیرد. این ترکیبات به دلیل دارا بودن خواص الکتریکی و فری الکتریکی متفاوت، کاربردهای فراوانی در ساخت وسایل الکترونیکی پیدا کرده‌اند [۲]. خواص کشسانی مواد مختلف همچون پروسکایت‌های اکسیدی دارای اهمیت زیادی بوده و با پتانسیل بین اتمی، خواص مکانیکی و طیف فونونی آن‌ها در ارتباط هستند. بنابراین بررسی و مطالعه خواص کشسانی در مواد دارای اهمیت فراوانی می‌باشد [۳]. ترکیب PbTiO3 یکی از ترکیبات مورد توجه پژوهشگران می‌باشد که تحت فشار محدود دارای فاز فروالکتریک می‌باشد [۴]. این ترکیب در دمای اتاق دارای ساختار تتراگونال و فاز فروالکتریک است [۵]. دمای لازم برای گذار فاز فروالکتریک-پاراالکتریک در این ترکیب ۷۶۳ کلوین است. در دماهای بالاتر از این دما، بلور دارای ساختار مکعبی و فاز پاراالکتریک می‌شود [۵]. در کار حاضر، به بررسی خواص الکترونی ساختار تتراگونال بلور $PbTiO_3$ با استفاده از کد محاسباتی WIEN2k [۶] پرداخته‌ایم. یاخته واحد بلور تتراگونال ترکیب $PbTiO_3$ در شکل (۱) نشان داده شده است.



شکل۱: بلور تتراگونال ترکیب $PbTiO_3$.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

روش محاسبات

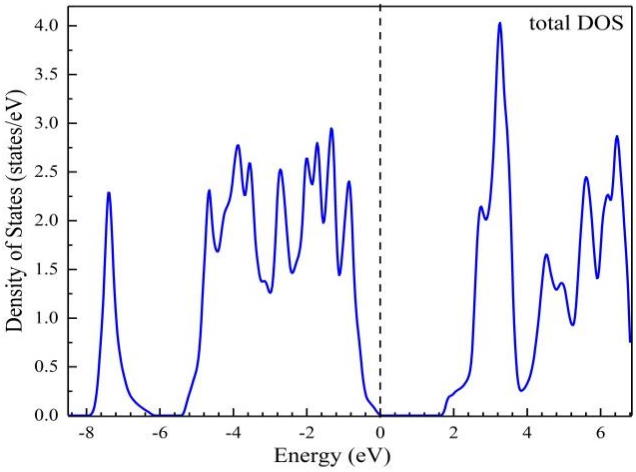
محاسبات انجام شده در کار حاضر با به کارگیری کدهای محاسباتی WIEN2k [۶] و IR-elast [۷] انجام شده‌اند. بلور $PbTiO_3$ در ساختار تتراگونال دارای گروه تقارن فضایی P4mm است [۵]. ما برای انجام محاسبات خود از مقادیر تجربی پارامترهای شبکه a=b=۳/۸۹۶ آنگستروم و c=۴/۱۵۸ آنگستروم [۸] استفاده کرده‌ایم. هم‌چنین توابع موج را در نواحی بین جایگاهی بر حسب امواج تخت تا بردار موج تخت $k_{max}=8/R_{MT}$ بسط داده‌ایم که در آن k_{max} شعاع کره مافین تین و k_{max} بیانگر بزرگ‌ترین بردار موج در بسط تابع موج است. شعاع کره مافین تین اتم‌های موجود در ترکیب $PbTiO_3$ را به ترتیب برابر R_{MT} (Pb)=۲/۳، R_{MT} ۱/۶۷ =(Ti) و R_{MT} (O)=۱/۵۱ بوهر و تعداد نقاط k در فضای وارون را برابر ۳۰۰۰ انتخاب کرده‌ایم. لازم به ذکر است که تمام محاسبات مقاله با در نظر گرفتن قطبش اسپینی انجام شده‌اند.

در این مقاله چگالی حالت‌های ترکیب $PbTiO_3$ را با به کارگیری تقریب PBE-GGA [۹] مورد بررسی قرار داده‌ایم. هم‌چنین ثابت-های کشسانی آن را با استفاده از این تقریب و استفاده از کد IRelast محاسبه نموده‌ایم.

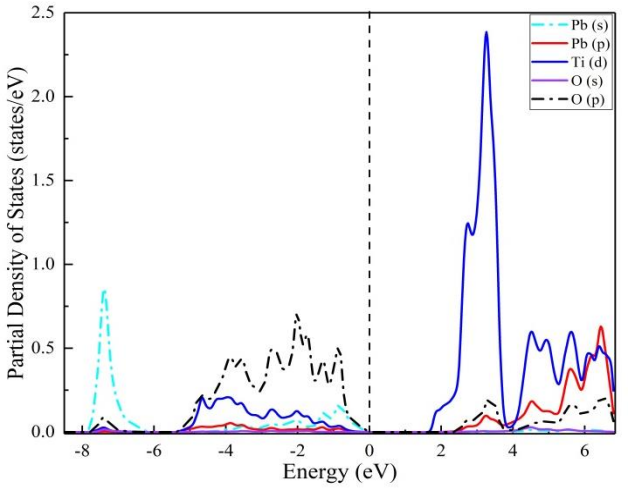
نتایج و بحث

در بررسی خواص الکترونی بلور $PbTiO_3$، نمودار چگالی حالت-های آن (کلی و جزیی) را (شکل ۲ و ۳)، مورد بررسی قرار داده‌ایم. همان‌گونه که در این شکل‌ها مشاهده می‌شود، بلور تتراگونال ترکیب $PbTiO_3$ یک نیم‌رساناست. گاف نواری متناظر با آن ۱/۳۹ الکترون ولت محاسبه شده است که کوچک‌تر از نتیجه تجربی گزارش شده برای این کمیت (۴-۳/۵ الکترون ولت) و در توافق نسبتا خوبی با کارهای دیگران می‌باشد [۱۲-۱۰]. اختلاف نتیجه کار حاضر با نتایج تجربی را می‌توان مرتبط با مناسب نبودن تقریب به‌کارگرفته شده در کار حاضر برای الکترون‌های جایگزیده اوربیتال d اتم تیتانیوم دانست. هم‌چنین در کار حاضر ما برهم‌کنش اسپین-مدار را وارد نکرده‌ایم. بنابراین انتظار می‌رود با استفاده از روش‌های مناسب جهت بررسی سامانه‌های همبسته قوی هم‌چون LDA+U [۱۳] و ... و هم‌چنین لحاظ کردن برهمکنش اسپین-مدار این اختلاف کاهش یابد. با توجه به نمودار چگالی حالت‌های جزیی (شکل۳) می‌توان دریافت که سهم عمده حالت‌های ظرفیت در نمودار چگالی حالت‌ها ناشی از الکترون‌های اوربیتال 2p در اتم اکسیژن و سهم عمده حالت‌های رسانش در نمودار چگالی حالت‌ها ناشی از الکترون‌های اوربیتال 3d اتم Ti و الکترون‌های اوربیتال 2p اتم اکسیژن می‌باشد. هم‌چنین با توجه به این شکل می‌توان به این نتیجه رسید که هیبریدشدگی اطراف سطح فرمی عمدتا ناشی از هیبریدشدگی الکترون‌های اوربیتال 3d اتم Ti با الکترون‌های اوربیتال 2p اتم O می‌باشد.

در ادامه کار به محاسبه ثابت‌های کشسانی بلور تتراگونال $PbTiO_3$ با به‌کارگیری تقریب PBE-GGA، با کمک کد محاسباتی IR-elast پرداخته‌ایم. در بسته محاسباتی IR-elast از تقریب انرژی برای محاسبه ثابت‌های کشسانی استفاده شده است [۷].



شکل ۲: نمودار چگالی حالت‌های الکترونی بر حسب انرژی بلور تتراگونال ترکیب $PbTiO_3$ با به‌کارگیری تقریب PBE-GGA.



شکل ۳: نمودار چگالی حالت‌های جزیی الکترونی بر حسب انرژی بلور تتراگونال ترکیب $PbTiO_3$ با به‌کارگیری تقریب PBE-GGA.

در یک بلور دارای ساختار تتراگونال شش ثابت کشسانی مستقل C_{11}، C_{12}، C_{13}، C_{33} ، C_{44} و C_{66} وجود دارد که از آن‌ها می توان

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

برای تعیین و بحث پیرامون پایداری مواد استفاده نمود. طبق پایداری ساختار بورن، ثابت‌های کشسانی در ساختار تتراگونال از روابط زیر پیروی می‌کنند [۱۴]:

$$C_{11} \quad C_{12} \quad 0 , \qquad (1)$$

$$C_{11} + C_{33} \quad 2C_{13} \quad 0 , \qquad (2)$$

$$C_{11} \quad 0 ; C_{33} \quad 0 ; C_{44} \quad 0 ; C_{66} \quad 0 , \qquad (3)$$

$$2C_{11} + C_{33} + 2C_{12} + 4C_{13} \quad 0 , \qquad (4)$$

$$\frac{1}{3}(C_{12} + 2C_{13}) < B < \frac{1}{3}(C_{11} + 2C_{33}) . \qquad (5)$$

مقادیر محاسبه شده ثابت‌های کشسانی در کار حاضر و مقادیر محاسبه شده آن‌ها توسط دیگران در جدول ۱ ذکر شده‌اند. همان‌طور که طبق این جدول مشاهده می‌شود، نتایج به‌دست آمده در کار حاضر نسبت به نتایج دیگران در اکثر موارد توافق بیشتری با مقادیر تجربی داشته‌اند.

جدول۱: ثابت‌های کشسانی بلور $PbTiO_3$ با به‌کارگیری تقریب PBE-GGA.

Elastic constants	C_{11} (GPa)	C_{12} (GPa)	C_{13} (GPa)
Present work	۳۶۵/۸۹۰	۱۰۲/۲۳۴	۱۲۶/۴۸۸
Other works	۳۱۳/۱ [۱۴]	۱۱۰/۷۱ [۱۴]	۹۲/۴۰ [۱۴]
	۲۸۰/۵ [۱۵]	۱۱۸/۵ [۱۵]	۱۱۸/۵ [۱۵]
Experiment	۲۳۵ [۱۶]	۱۰۱ [۱۶]	۹۹ [۱۶]

Elastic constants	C_{33} (GPa)	C_{44} (GPa)	C_{66} (GPa)
Present work	۱۰۸/۱۳۲	۶۲/۷۸۳	۱۰۵/۶۵۹
Other works	۱۹۷/۰ [۱۴]	۸۲/۷۲ [۱۴]	۸۵/۴۱ [۱۴]
	۲۷۹/۷ [۱۵]	۹۸/۶ [۱۵]	۹۸/۶ [۱۵]
Experiment	۱۰۵ [۱۶]	۶۵/۱ [۱۶]	۱۰۴ [۱۶]

با استفاده از ثابت‌های کشسانی می‌توانیم پارامترهای مهمی هم‌چون مدول حجمی (B) و مدول برشی (G) که با روابط زیر نشان داده می‌شوند را محاسبه کنیم [۱۴]:

$$B = \frac{(B_V + B_R)}{2} \qquad (6)$$

$$G = \frac{(G_V + G_R)}{2} \qquad (7)$$

در روابط ۶ و ۷ زیرنویس‌های V (Voigt) و R (Reuss) مربوط به تقریب Voigt-Reuss-Hill هستند که با استفاده از ثابت‌های کشسانی محاسبه می‌شوند [۱۴].

مدول حجمی اطلاعاتی در مورد قدرت پیوند بین ذرات در ماده و مقاومت آن‌ها در برابر تغییر شکل را به ما می‌دهد. مدول برشی نیز مقاومت ماده در برابر تغییر شکل پلاستیکی را مشخص می‌کند.

مقادیر ثابت‌های کشسانی به‌دست آمده در کار حاضر (جدول ۱) و مدول حجمی (جدول ۲) شرایط پایداری ساختار بورن را دارا می‌باشند. بنابراین، می‌توان نتیجه گرفت که ساختار تتراگونال بلور $PbTiO_3$ طبق اصول بورن، پایدار است.

مدول یانگ (E) و ضریب پواسون (ν) نیز کمیت‌های وابسته به مدول حجمی و مدول برشی هستند و به صورت زیر بیان می‌گردند [۱۴]:

$$E = \frac{9\,BG}{3\,B+G} , \qquad (8)$$

$$\nu = \frac{3\,B-2G}{2(3\,B+G)} . \qquad (9)$$

مدول یانگ نسبت بین تنش و کرنش را نشان می‌دهد. اگر در یک بلور نسبت مدول حجمی به مدول برشی بزرگ‌تر از ۱/۷۵ باشد آن بلور شکل پذیر است و در غیر اینصورت شکل پذیر نمی‌باشد [۱۷]. از آنجایی‌که نسبت مدول حجمی محاسبه شده در کار حاضر به مدول برشی محاسبه شده بزرگ‌تر از ۱/۷۵ است. بنابراین، می‌توان نتیجه گرفت که ساختار تتراگونال بلور $PbTiO_3$ شکل پذیر است و شکننده نمی‌باشد.

روابط بین سرعت صوت در راستاهای ممکن بر حسب ثابت‌های کشسانی در بلور دارای ساختار تتراگونال به صورت زیر می‌باشد [۱۴]:

$$v_L = \left(\frac{(B+\frac{3}{4}G)}{\rho}\right)^{\frac{1}{2}} , \qquad (10)$$

$$v_T = \left(\frac{G}{\rho}\right)^{\frac{1}{2}} . \qquad (11)$$

در روابط قبل ρ چگالی جرمی برحسب (kg/m^3) و اندیس‌های L و T به ترتیب نماد مدهای طولی و عرضی می‌باشند.

مقادیر محاسبه شده مدول حجمی، مدول برشی، مدول یانگ، ضریب پواسون و سرعت‌های صوت ساختار تتراگونال ترکیب $PbTiO_3$ در کار حاضر در جدول‌های ۲ و ۳ ذکر شده‌اند.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

جدول ۲: مدول حجمی (B)، مدول برشی (G)، مدول یانگ (E) و ضریب پواسون (ν) بلور $PbTiO_3$ با استفاده از تقریبPBE-GGA .

Properties	B(GPa)	G(GPa)	E(GPa)	ν
Present work	۱۳۸/۳۰۷	۶۳/۲۲۲	۱۶۴/۵۸۷	۰/۳۰۱
Other works	۱۵۲/۶۷ [۱۴]	۸۴/۳ [۱۴]	۲۱۳/۷ [۱۴]	۰/۲۶ [۱۴]
	۱۷۲/۴ [۱۵]			
Experiment	۱۰۴ [۱۶]			

جدول ۳: سرعت‌های صوت بلور $PbTiO_3$ با استفاده از تقریب-PBE GGA.

Sound velocities (m/s)	Present work	Other works
v_L	۲۹۶۷/۷۹	۵۸۹۶/۶۶۸ [۱۴]
v_T	۵۳۹۳/۳۹	۴۴۷۴/۳۰۶ [۱۴]

نتیجه‌گیری

در کار حاضر با بررسی چگالی حالت‌های ساختار تتراگونال ترکیب $PbTiO_3$ نیم‌رسانا بودن بلور $PbTiO_3$ تایید شد. هم‌چنین با کمک نمودار چگالی حالت‌های جزیی دریافتیم که که سهم عمده حالت-های ظرفیت در نمودار چگالی حالت‌ها ناشی از الکترون‌های اوربیتال 2p در اتم اکسیژن و سهم عمده حالت‌های رسانش در نمودار چگالی حالت‌ها ناشی از الکترون‌های اوربیتال 3d اتم Ti و الکترون‌های اوربیتال 2p اتم اکسیژن می‌باشند. هم‌چنین با توجه به این شکل می‌توان به این نتیجه رسید که هیبریدشدگی اطراف سطح فرمی عمدتا ناشی از هیبریدشدگی الکترون‌های اوربیتال 3d اتم Ti و الکترون‌های اوربیتال 2p اتم O می‌باشد. ثابت‌های کشسانی محاسبه شده در کار حاضر نیز نسبت به کار دیگران در توافق بهتری با مقادیر تجربی آن‌ها می‌باشد. سپس با کمک این ثابت‌ها مدول حجمی، مدول برشی، مدول یانگ، ضریب پواسون و سرعت‌های صوت را به‌دست آورده‌ایم. مدول حجمی محاسبه شده در این کار نیز در توافق بهتری با مقدار تجربی آن نسبت به کار دیگران است. در انتها نیز با محاسبه نسبت مدول حجمی به مدول برشی به این نتیجه رسیدیم که ساختار تتراگونال بلور PbTiO3 شکل پذیر است و شکننده نمی‌باشد.

مراجع

1. S. G. Javed, A. Khan, A. Majid, A. M. Mirza, and J. Bashir, "Lattice constant prediction of orthorhombic ABO3 perovskites using support vector machines," Computational Materials Science 39, 627 (2007).
2. N. Hamdad, and B. Bouhafs, "Theoretical analysis of the spin effect on the electronic and magnetic properties of the calcium manganese oxide CaMnO3: GGA+ U calculation," Physica B: Condensed Matter 405, 4595 (2010).
3. M. Shafiq, S. Arif, I. Ahmad, S. J. Asadabadi, M. Maqbool, and H. R. Aliabad, "Elastic and mechanical properties of lanthanide monoxides," Journal of Alloys and Compounds **618**, 292 (2015).
4. R. J. Nelmes and W. F. Kuhs, "The crystal structure of tetragonal PbTiO3 at room temperature and at 700K," Solid State Communications **54**, 721, (1985).
5. R.E.CohenandH.Krakauer, "Electronic structure studiesof the differences in ferroelectric behavior of BaTiO3 and PbTiO3," Ferroelectrics **136**, 65, (1992).
6. P. Blaha, K. Schwarz, F. Tran, R. Laskowski, C. K. H. Madsen, and L. D. Marks, "WIEN2k : An APW+lo program for calculating the properties of solid," The Journal of Chemical Physics **152**, 074101 (2020).
7. M. Jamal, M. Bilal, I. Ahmad, and S. Jalali-Asadabadi, "IRelast package," Journal of Alloys and Compounds **735**, 569 (2018).
8. A. G. Kalinichev, and J. D. Bass, "Elastic properties of tetragonal of $PbTiO_3$ single crystals by Brillouin scattering, " Journal of Materials Research **12**, 2623, (1997).
9. J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, "Generalized gradient approximation made simple," Physical Review Letters **77**, 3865 (1996).
10. S. F. Matar, I. Baraille, and M. A. Subramanian, "First principles studies of SnTiO3 perovskite as potential environmentally benign ferroelectric material, " Chemical Physics **355**, 43(2009).
11. Y. Konishi, O. Michio, Y. Yonezawa et al., "Possible ferroelectricity in SnTiO3 by first-principles calculations," MRS Online Proceedings Library Archive **748**, (2002).
12. H. O. Yadav, "Optical and electrical properties of sol-gel derived thin films of PbTiO3," Ceramics International **30**, 1493(2004).
13. V. I. Anisimov, F. Aryasetiawan, and A. Lichtenstein, "First-principles calculations of the electronic structure and spectra of strongly correlated systems: the LDA+ U method," Journal of Physics: Condensed Matter **9**, 767 (1997).
14. S. Kuma, and M. M. Woldemaria, "Structural, Electronic, Lattice Dynamic, and Elastic Properties of SnTiO3 and PbTiO3 Using Density Functional Theory," Advances in Condensed Matter Physics, (2019).
15. J. Long, L. Yang, and X. Wei, "Lattice, elastic properties and Debye temperatures of ATiO3 (A=Ba, Ca, Pb, Sr) from first principles," Journal of Alloys and Compounds **549**, 336 (2013).
16. A. Hachemi, H. Hachemi, A. Ferhat-Hamida, and L. Louail, "Elasticity of SrTiO3 perovskite under high pressure in cubic, tetragonalandorthorhombicphases,"Physica Scripta**82**, Article ID 025602, (2010).
17. S. F. Pugh, "XCII. Relations between the elastic moduli and the plastic properties of polycrystalline pure metals," The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science **45**, 823 (1954).

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

اثر ضخامت هدف بر رزونانس‌های واکنش هسته‌ای $^{29}Si(p,p\gamma_1)^{29}Si$

جوکار، علیرضا

پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، انتهای خیابان کارگر شمالی، تهران

چکیده

در این کار پژوهشی اثرات ضخامت هدف، تفرق انرژی و پهن‌شدگی انرژی باریکه بر سطح مقطع‌های رزونانسی واکنش‌های PIGE بخاطر اهمیت رزونانس های باریک در آنالیز نمایه عمقی بررسی شد. سطح مقطع‌ها برای رزونانس‌های باریک $^{29}Si(p,p\gamma_1)^{29}Si$ $(E\gamma=1273\ keV)$ محاسبه شد و نتایج با انجام یک آزمایش معیار با هدف ضخیم امتحان شد. مقایسه نتایج با باریکه پروتونی در انرژی‌های ۲۵۰۰، ۲۷۰۰ و ۳۰۰۰ keV نشان می‌دهد که یک توافق خوبی بین مقادیر بهره پرتوی گامای هدف ضخیم محاسبه شده از سطح مقطع‌های تصحیح شده با بهره تجربی در محدوده عدم قطعیت وجود دارد.

واژه‌های کلیدی: سطح مقطع، رزونانس‌های باریک، ضخامت هدف، PIGE

Influence of target thickness on resonances of the nuclear reaction $^{29}Si(p,p\gamma_1)^{29}Si$

Jokar, Alireza

Nuclear Science and Technology Research Institute, Tehran

Abstract

In this research work influence of the target thickness, energy straggling and beam energy spread on PIGE resonant cross sections were investigated due to the importance of the narrow resonances in depth profiling analysis. The cross section values for narrow resonances of the $^{29}Si(p,p\gamma_1)^{29}Si$ $(E\gamma=1273\ keV)$ reaction were calculated and then were checked by a performing a thick target benchmarking experiment. Comparison data for Ep=2500,2700 and 3000 keV shows that the thick target gamma-ray yields calculated from corrected resonant cross sections agree well with those measured data, within the estimated uncertainty.

Keywords: *cross section, narrow resonance, target thickness, PIGE*

PACS No,

مقدمه

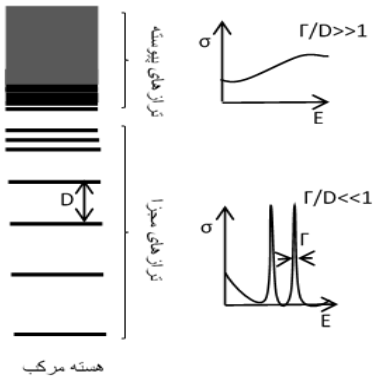
واکنش‌های هسته‌ای القایی با ذرات باردار انرژی پایین، اساس چندین روش برای آنالیز عناصر سبک می‌باشند. با استفاده از روش های اسپکترومتری پس پراکندگی کشسان (EBS)، آنالیز با واکنش هسته‌ای (NRA)، آنالیز به روش گسیل پرتو گاما ذره-القایی (PIGE) می‌توان نوع، غلظت و نمایه عمقی عناصر سبک را در نواحی سطحی مواد جامد تا عمق چند میکرومتراندازه‌گیری نمود. مزیت‌ها و محدودیت‌های هر یک از این روش‌ها در دیگر مقالات ارائه شده است [2-1]. در کل دو رویکرد متداول برای تعیین نمایه عمقی مواد با واکنش‌های هسته‌ای وجود دارد: تحلیل طیف انرژی و تحلیل رزونانس هسته‌ای[3] . روش تحلیل طیف انرژی بر پایه افت انرژِی ذرات سبک حاصل از واکنش در برگشت به سطح ماده است. در این روش از نواحی مسطح تابع تحریکی برای تعیین نمایه عمقی استفاده می‌شود. برخلاف روش تحلیل طیف انرژی، در روش تحلیل رزونانس هسته‌ای از رزونانس‌های قوی،خیلی باریک و مجزا برای تعیین نمایه عمقی عناصر سبک

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

استفاده می‌شود. لازم به ذکر است که در روش PIGE، فوتون‌های پرانرژی تنها کسر ناچیزی از انرژی خود را در برگشت به سطح از دست می‌دهند. از این رو روش تحلیل طیف اطلاعات درستی از نمایه عمقی نمی‌دهد. خوشبختانه به دلیل وجود رزونانس‌های تیز در بسیاری از توابع تحریکی واکنش‌های گسیل پرتو گاما ذره - القایی (بویژه با پروتون)، آنالیز PIGE روش بسیار مناسبی برای تعیین نمایه عمقی رزونانسی عناصر سبک با قدرت تفکیک بالا می‌باشد.

وجود این رزونانس‌ها را می‌توان به ترازهای کاملاً مجزا هسته مرکب نسبت داد (شکل۱). هنگامی که انرژی برانگیختگی هسته مرکب (انرژی برانگیختگی برابر با مجموع انرژی ذره فرودی در سیستم مرکز جرم و انرژی بستگی ذره در هسته مرکب است) با انرژی یکی از این ترازهای آن برابر باشد، این تراز برانگیخته شده و در نهایت رزونانس تیزی بر تابع تحریکی مشاهده می‌شود. در این واکنش‌ها وابستگی سطح مقطع رزونانسی به انرژی با معادله برات- ویگنر بیان می‌شود. با افزایش انرژی پرتابه، انرژی برانگیختگی هسته مرکب در ناحیه ترازها پیوسته می‌افتد. این ترازهای نامقید آن چنان نزدیک به یکدیگر قرا گرفته‌اند که یک ناحیه پیوستار تشکیل می‌دهند. در این ناحیه پیوسته، همانطور که از شکل ۱ می‌توان مشاهده نمود، سطح مقطع واکنش تابع ملایمی از انرژی خواهد بود.

لازم به ذکر اینکه تعیین شکل توابع تحریکی واکنش‌های هسته‌ای تا حد زیادی با استفاده از روش‌های نظری ممکن نیستند و تنها با اندازه‌گیری دقیق می‌توان به ساختار توابع تحریکی دست یافت. داده‌های تجربی گزارش شده در نشریات برای واکنش‌های PIGE با فرض تغییرات خیلی ملایم سطح مقطع در ضخامت نمونه هدف بدست آمده‌اند که برای نواحی نزدیک به رزونانس‌های بسیار تیز درست نیست (منظور از رزونانس‌های تیز، رزونانس‌های خیلی باریکی هستند که پهنای آنها خیلی کمتر از افت انرژی پرتابه در ضخامت ماده هدف می‌باشد). در حقیقت سطح مقطع گزارش شده برای این رزونانس‌ها، مقادیر میانگین‌گیری شده بر ضخامت هدف می‌باشد که اثرات پهن‌شدگی انرژی ذاتی باریکه و تفرق انرژی باریکه داخل هدف بر سطح مقطع‌ها در نظر گرفته نشده است.



شکل ۱: نمایش ترسیمی ترازهای انرژی یک هسته مرکب (بدون مقیاس)

با توجه به اهمیت سطح مقطع رزونانس‌های تیز برای تعیین نمایه عمقی، لزوم تصحیح آنها احساس می‌شود. با این وجود، تنها تعداد محدودی مقاله در ارتباط با مطالعه اثر ضخامت هدف بر سطح مقطع رزونانس‌های بسیار نازک منتشر شده است [4-6].

هدف از این کار پژوهشی تصحیح اثر ضخامت هدف SiO بکاربرده شده بر سطح مقطع رزونانس‌های تیز واکنش هسته‌ای $^{29}Si(p,p'\gamma)^{29}Si$ (Eγ=1273 keV) می‌باشد. تابع تحریکی این واکنش قبلاً در آزمایشگاه واندوگراف اندازه گیری و نتایج آن گزارش شده است. همچنین داده سطح مقطع جدول‌بندی شده واکنش فوق در کتابخانه داده هسته‌ای آنالیز با باریکه یونی [7] (IBANDL)بارگذاری شده است.

روش کار

برای واکنش‌های PIGE سطح مقطع تجربی σ_{exp}، با استفاده از رابطه زیر تعیین می‌شود:

$$Y_\gamma(E_0)=4\pi.\varepsilon_{abs}(E_\gamma).N_p.N_T.\sigma_{exp}(E_0) \qquad (۱)$$

که در معادله فوق، Yγ (E0) بهره پرتو گاما درانرژی فرودی E0،εabs(Eγ) بازده مطلق آشکارساز پرتو گاما معادل با انرژی Eγ، Np تعداد ذرات فرودی و N_T چگالی سطحی هدف می‌باشند. برای رزونانس‌های باریکتراز ضخامت هدف (Γres< ΔE)، معادله ۱ دیگر معتبر نیست و باید از رابطه کامل ۲ برای تعیین سطح مقطع استفاده شود [4,5].

(۲)

$$Y(E_0)=\frac{N_T.N_p.\varepsilon_{abs}}{x_t}\int_{x=0}^{x_t}\int_{E=0}^{\infty}\int_{E_1=0}^{\infty}g(E_0,E)f(E,E_1,x)\sigma(E_1)dxdEdE_1$$

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

g(E0,E)، پهن شدگی ذاتی انرژی باریکه است. این تابع نشان می دهد که باریکه خروجی ازمیدان مغناطیس شتاب‌دهنده تک انرژی نبوده بلکه یک توزیع گوسی به پهنایی Δb در اطراف انرژی میانگین E_0 دارد:

$$g(E_0,E)=\frac{1}{\delta\sqrt{2\pi}}\exp[\frac{-(E-E_0)^2}{2\delta_b^2}] \quad (۳)$$

که در رابطه فوق δb انحراف معیار و $\Delta b = ۲/۳۵۵\ \delta b$ می‌باشد. تابع $f(E, E_1, x)$ بیانگر تفرق انرژی باریکه در اثر کند شدن ذرات در داخل هدف است. این تابع احتمال برخورد ذره‌ای با انرژی E به سطح هدف و کاهش انرژی آن به E_1 در عمق x هدف را مشخص می‌کند. این تابع نیز با یک توزیع گوسی به پهنای Γ در اطراف انرژی میانگین $E_0-\Delta E(x)$ نشان داده می‌شود:

$$f(E,E_1,x)=\frac{1}{1.06\Gamma}\exp[\frac{-(E-E_1-S(E_0).x)^2}{0.36\Gamma^2}] \quad (۴)$$

با استفاده از تقریب گوس،در انتگرال سه گانه رابطه ۲ می توان اثرات پهن شدگی و تفرق انرژی باریکه را تنها با یک تابع گوسی شکل نشان داد:

$$F(E,E_1,x)=\frac{1}{1.06\Gamma_t}\exp[\frac{-(E-E_1-S(E_0).x)^2}{0.36\Gamma_t^2}] \quad (۵)$$

همچنین با بکار بردن فرمول برات- ویگنر برای رزونانس‌های مجزا، رابطه ۲ را می‌توان به صورت رابطه ۶ نوشت:

(۶)

$$Y(E_0)=\frac{N_T.N_p.\varepsilon_{abs}.\sigma_R}{x_t}\int_{x=0}^{x_t}\int_{E_1}^{\infty}\frac{1}{E_1}.\frac{\Gamma^2}{4(E_1-E)^2+\Gamma^2}F(E_0,E_1,x)dE_1dx$$

که در رابطه بالا σ_R، مقدار سطح مقطع در انرژی رزونانس است. با مقایسه دو رابطه ۱ و ۶ خواهیم داشت که:

(۷)

$$\frac{\sigma_{exp}(E_0)}{\sigma_R}=\frac{1}{x_t}\int_{x=0}^{x_t}\int_{E_1}^{\infty}\frac{E_R}{E_1}.\frac{\Gamma_R^2}{4(E_1-E_R)+\Gamma_R}F(E_0,E_1,x)dE_1dx$$

با حل انتگرال فوق و بدست آوردن نسبت $\sigma_{exp}(E0)/\sigma_R$، می توان سطح مقطع‌های اندازه‌گیری شده برای رزونانس‌های تیز را تصحیح نمود.

نتایج

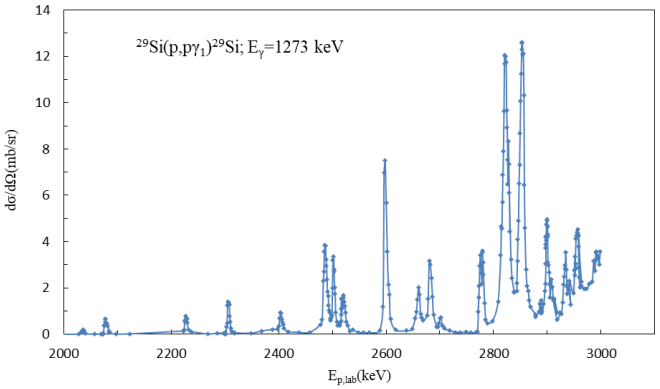
شکل ۲، تابع تحریکی اندازه‌گیری شده برای واکنش $^{29}Si(p,p\gamma_1)^{29}Si$ (Eγ=1273 keV) در بازه MeV ۳-۲ را نشان می‌دهد. تابع تحریکی این واکنش قبلاً در آزمایشگاه واندوگراف اندازه گیری شده است [8] . در این اندازه گیری‌ها سطح مقطع‌ها با گام‌های keV ۴۰-۱۰ در خارج رزونانس ها وkeV ۲-۱ در داخل ناحیه رزونانس‌ها اندازه‌گیری شدند. همانطور که از شکل ۲ نشان داده شده است تابع تحریکی واکنش دارای چندین رزونانس تیز می‌باشد.

برای اندازه‌گیری سطح مقطع‌ها، از فیلم نازک مونوکسید سیلیسیم (SiO) با ترکیب ایزوتوپی طبیعی به عنوان هدف استفاده شد. ضخامت لایه‌های نازک مونوکسید سیلیسیم ۲۵/۶±۱/۸ μg/cm2 با ترکیب استوکیومتری ۴۵ درصد سیلیسیم و ۵۵ درصد اکسیژن بود. با استفاده از نرم افزار SRIM-2006، افت انرژی پروتون‌های داخل لایه‌های مونوکسید سیلیسیم در بازه keV ۳/۲ -۳/ ۴ بدست آمد.

با حل انتگرال رابطه ۷، نسبت σ_{exp}/σ_R برای هر یک از رزونانس‌ها بدست آمده است. در جدول ۱ مقادیر سطح مقطع دیفرانسیلی اندازه‌گیری شده در رزونانس‌ها، مقادیر تصحیح شده آنها و ضریب تصحیح بکاربرده شده، ارائه شده است.

به منظوراطمینان از صحت مقادیر سطح مقطع بدست آمده از یک آزمایش معیار با هدف ضخیم استفاده شد. در این روش با انتگرال‌گیری از سطح مقطع‌ها برعمق هدف، بهره پرتوی گاما هدف ضخیم محاسبه شده با بهره پرتوی گاما هدف ضخیم اندازه‌گیری شده مقایسه می‌شود. بهره هدف ضخیم واکنش $^{29}Si(p,p\gamma_1)^{29}Si$ در انرژی‌های ۲۵۰۰ ، ۲۷۰۰ و keV ۳۰۰۰ از کار پژوهشی قبلی انجام شده در آزمایشگاه واندوگراف برداشته شده است [9] . داده بهره پرتوی گاما هدف ضخیم جدول‌بندی شده واکنش فوق در کتابخانه داده هسته‌ای آنالیز با باریکه یون IBANDL بارگذاری شده است.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



شکل ۲: تابع تحریکی اندازه‌گیری شده برای گامای ۱۲۷۳ keV

برای این اندازه گیری‌ها از هدف ضخیم ویفر چند بلوری سیلیسیمی استفاده شد. عدم قطعیت سیستماتیک برای مقادیربهره پرتوی گاما هدف ضخیم حدود ۹ درصد برآورد شده است. در جدول ۲ ستون دوم بهره پرتوی گاما هدف ضخیم تجربی، ستون سوم بهره حاصل از انتگرال‌گیری تابع تحریکی شکل ۲ و ستون چهارم بهره محاسبه شده حاصل از انتگرال‌گیری از تابع تحریکی شکل ۲ همراه با سطح مقطع‌های تصحیح شده در رزونانس‌ها می‌باشد. با مقایسه اختلاف نسبی بین مقادیر بهره تجربی و بهره محاسبه شده درهر انرژی می‌توان نتیجه گرفت که با تصحیح اثر ضخامت هدف، نتایج محاسبات بین ۷ تا ۱۲ درصد بهتر شده است. به طوری که اختلاف‌ها در محدوده عدم قطعیت ذکر شده (۹ درصد) می‌باشد.

جدول ۱: نتایج بدست آمده براي تصحيح سطح مقطع‌هاي واكنش $^{29}Si(p,p\gamma_1)^{29}Si$

E_R (keV)	ΔE (keV)	Γ (keV)	$\sigma_{exp}(E_R)$ (mb/sr)	$\sigma_{exp}(E_0)/\sigma_R$	σ_R (mb/sr)
۲۴۸۷	۳/۶۷	./۳۵	۳/۸۴	./۳۶	۱۰/۹۷
۲۵۲۰	۳/۶۳	۲/۲	۱/۶۸	./۷۶	۲/۲
۲۵۹۸	۳/۵۵	./۷۵	۷/۴۹	./۴۷	۱۵/۹۳
۲۶۶۰	۳/۵	./۲	۲/.۳	./۳۷	۴/۴۸
۲۶۸۰	۳/۴۸	./۶	۳/۱۵	./۴۵	۷
۲۸۲۰	۳/۳۳	۲/۷	۱۲/.۵	./۸۶	۱۴/.۱
۲۸۵۳	۳/۳۱	۱	۱۲/۶۱	./۵۶	۲۲/۵۱
۲۸۹۹	۳/۲۹	./۴	۴/۹۷	./۳۷	۱۳/۴۳
۲۹۵۶	۳/۲۴	./۶	۴/۵۲	./۵۱	۸/۸۶

جدول ۲: مقایسه بین بهره‌های پرتوی گاما هدف ضخیم تجربی و محاسبه شده واکنش $^{29}Si(p,p\gamma_1)^{29}Si$ (E_γ=1273 keV)

E_p (keV)	Y_{exp} (Nγ/μc.sr)	Y_{cal} (Nγ/μc.sr)	$Y_{cal,corrected}$ (Nγ/μc.sr)
۲۵۰۰	۴۶۵۰	۴۰۳۰	۴۳۶۵
۲۷۰۰	۱۲۷۶۰	۹۸۵۰	۱۱۴۰۰
۳۰۰۰	۴۸۱۰۰	۴۱۳۰۰	۴۴۲۰۰

نتیجه‌گیری

داده‌های تجربی گزارش شده در نشریات برای واکنش‌های PIGE با فرض تغییرات خیلی ملایم سطح مقطع در ضخامت نمونه هدف بدست آمده‌اند که برای نواحی نزدیک به رزونانس‌های بسیار تیز درست نیست در حقیقت سطح مقطع گزارش شده برای این رزونانس‌ها، مقادیر میانگین گیری شده بر ضخامت هدف می‌باشد که اثرات پهن‌شدگی انرژی ذاتی باریکه و تفرق انرژی باریکه داخل هدف را بر سطح مقطع‌ها در نظر گرفته نشده است. در این مقاله سطح مقطع‌ها برای رزونانس‌های باریک $^{29}Si(p,p\gamma_1)^{29}Si$ ($E\gamma$=1273 keV) محاسبه شد و نتایج با انجام یک آزمایش معیار با هدف ضخیم امتحان شد. مقایسه نتایج با باریکه پروتونی در انرژی‌های ۲۵۰۰، ۲۷۰۰ و ۳۰۰۰ keV نشان می‌دهد که یک توافق خوبی بین مقادیر بهره پرتوی گامای هدف ضخیم محاسبه شده از سطح مقطع‌های تصحیح شده با بهره تجربی در محدوده عدم قطعیت وجود دارد.

مراجع‌ها

[1] Y. Wang, M. Nastasi (Eds.), Handbook of Modern Ion Beam Materials Analysis, Second Edition, 2009.
[2] A. Jokar , O. Kakuee, V. Fathollahi, M. Lamehi-Rachti, N. Sharifzadeh "Measurement of deuteron induced gamma-ray emission cross sections on nitrogen for analytical applications", Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. Sect. B 431 (2018) 25-30.
[3] J.R. Bird, J.S. Williams, Ion Beam for Materials Analysis, ACADEMIC PRESS AUSTRALIA, 1989.
[4] A.P. Jesus, B. Braizinha, J. P. Ribeiro," Excitation function and cross-sections of the reaction 19F(p,pγ)19F " , Nucl.Instr. Meth. B 161-163 (2000) 186.
[5] K. Spyrou, C. Chronidou, S. Harissopulos, S. Kossionides, T. Paredellis," Cross section and resonance strengths of the 19F(p,αγ)16O reaction in the energy range Ep=0.8-3.6 MeV", Z.Phys. A 357 (1997) 283.
[6] A.P. Jesus, B. Braizinha, J. Cruz, J. P. Ribeiro, "Influence of target thickness on resonant elastic scattering of protons by 19F" Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. Sect. B 174 (2001) 229.
[7] http://wwwnds.iaea.org/ibandl.
[8] A. Jokar, O. Kakuee M. Lamehi-Rachti, "Differential cross sections measurement of $^{28}Si(p,p/\gamma)^{28}Si$ and $^{29}Si(p,p/\gamma)^{29}Si$ reactions for PIGE applications", Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. Sect. B 371 (2016) 37.
[9] A. Jokar, O. Kakuee M. Lamehi-Rachti, V. Fathollahi " Thick target yields of proton induced gamma-ray emission from Al, Si and P ", Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. Sect. B 394 (2017) 28.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مقاله نامه کنفرانس فیزیک ایران ۱-۴شهریورماه ۱۳۹۹، دانشگاه رازی، کرمانشاه

نوسانات جریان جوزفسون در اتصالات دوتایی ابررسانایی

امامی‌پور، حمیدرضا

دانشکده علوم پایه، گروه فیزیک، دانشگاه ایلام

چکیده

در این مقاله جریان مستقیم جوزفسون در اتصالات دوتایی در چارچوب نظریه تسوکادا-فوروساکی مورد مطالعه قرار می دهیم. اتصال دوتایی مورد نظر از ابررسانای موج-s عایق، فلز نرمال ، عایق، ابررسانای موج s- تشکیل شده است. برخلاف مورد اتصال یکتایی که در مقاله {Solid State Commun. 180 (2014) 11} مطالعه کردیم، در این جا جریان مستقیم جوزفسون، رفتاری نوسانی را برحسب و ضخامت لایه میانی نشان می‌دهد. نتایج نشان می‌دهند مقادیر پیک جریان مستقیم با افزایش شدت سد پتانسیل شروع به کاهش می کنند. همچنین جریان مستقیم جوزفسون بر حسب اختلاف فاز ابررسانایی ، انحراف از رابطه سینوسی استاندارد را نشان می‌دهد.

واژه های کلیدی: *جریان جوزفسون، اتصالات دوتایی ابررسانایی*

Josephson Current Oscillations in Double-barrier Superconducting Junctions

Emamipour, Hamid Reza

Department of Basic Science, Physics Group, University of Ilam, Ilam

Abstract

In this paper, we study DC (direct current) Josephson current in the framework of Forusaki-Tsukada theory. The double-barrier junction under-study consists of s-wave superconductor-insulator-normal metal-s-wave superconductor. Despite single-barrier junction which we studied in {Solid State Commun. 180 (2014) 11}, here the DC Josephson current shows an oscillating behavior with respect to the thickness of the intermediate layer. The appeared peaks in Josephson DC current start to decrease by enhancing the barrier-potential strength. Also, the DC Josephson current versus superconducting phase difference shows a deviation from standard sinusoidalrelation.
***Keywords**: Josephson current, double-barrier superconducting junction.*

PACS No. *70, 72, 74*

مقدمه

از زمان کشف جریان جوزفسون در حدود نیم قرن [۱و۲] پیش تاکنون تحقیقات وسیعی در خصوص جریان شارش یافته بین دو ابر رسانا به انجام رسیده است. انگیزه انجام چنین تحقیقاتی به کاربردهای وسیع جریان جوزفسون برمی‌گردد. به عنوان مثال از آن به عنوان کلیدهای روشن و خاموش کردن جریان در مدارات الکترونیکی استفاده می‌گردد. در کنار کارهای تجربی، تلاش‌های مختلفی جهت محاسبه جریان جوزفسون به صورت نظری به انجام رسیده است. یکی از این تئوری‌ها در سال ۱۹۹۱ توسط فوروساکی و تسوکادا ارائه شد[۳]. آنها براساس نظریه پراکندگی و با محاسبه ضریب بازتاب آندریف موفق به ارائه فرمول‌بندی نسبتاً ساده‌ای شدند که با استفاده از آن می‌توان جریان dc جوزفسون را محاسبه

این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد :
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

نمود. فرمول تسوکادا- فوروساکی (T-F) به موارد مختلف ابر رسانایی تعمیم داده شد. به عنوان مثال در مراجع [٤و٥] جریان dc جوزفسون برای یک اتصال بین ابر رساناهای فرومغناطیسی توسط ما محاسبه شده است. در این مقاله، جریان dc جوزفسون را برای پیوندی شامل دو اتصال محاسبه می‌کنیم.

نتیجه جالبی که به دست می‌آوریم نوسان جریان جوزفسون بر حسب ضخامت بین دو اتصال می باشد که در ادامه به جزئیات آن می‌پردازیم.

فرمول‌بندی

مدل مورد نظر ما یک اتصال دو تایی SINIS می‌باشد که در آن لایه میانی به ضخامت d یک فلز نرمال می‌باشد که از طریق یک عایقاز دو طرف به ابر رسانا متصل می‌باشد. فرض می‌کنیم که هر دو ابررسانا یکسان می‌باشند. شبه ذرات توسط معادله بوگلیوبوف- دژن که به شکل زیر است توصیف می‌شوند:

$$\begin{pmatrix} \mathrm{H_0}(\vec{\mathrm{r}}) & \Delta(\vec{\mathrm{r}}) \\ \Delta^*(\vec{\mathrm{r}}) & -\mathrm{H_0}(\vec{\mathrm{r}}) \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \mathrm{u}(\vec{\mathrm{r}}) \\ \mathrm{v}(\vec{\mathrm{r}}) \end{pmatrix} = \mathrm{E}\begin{pmatrix} \mathrm{u}(\vec{\mathrm{r}}) \\ \mathrm{v}(\vec{\mathrm{r}}) \end{pmatrix} \qquad (١)$$

در اینجا $H_0(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + w(\vec{r}) - \mu$ و μ پتانسیل شیمیایی می‌باشد. پتانسیل فصل مشترک با رابطه $w(\vec{r}) = w[\delta(z) + \delta(z-d)]$ مدل‌بندی می‌شود که در آن محور z عمود بر لایه‌ها و $\delta(z)$ پتانسیل دلتای دیراک می‌باشد. پتانسیل جفتی ابر رسانایی $\Delta(\vec{r})$ را به شکل زیر در نظر می‌گیریم:

$$\Delta(\vec{r}) = \Delta(T)\left[e^{i\Phi_L}\Theta(-Z) + e^{i\Phi_R}\Theta(Z-d)\right] \qquad (٢)$$

در اینجا Δ گاف ابر رسانایی است و تابعیت دمایی آن از نظریه BCS به دست می‌آید و $\emptyset = \emptyset_R - \emptyset_L$ اختلاف فاز ماکروسکوپی بین ابر رساناها می‌باشد.

یک شبه ذره الکترونی که از سمت چپ اتصال به فصل مشترک حرکت می‌کند حل معادله (١) برای آن منجر به جواب‌های زیر می‌گردد:

$$\Psi(z) = \begin{cases} \left[e^{ik^+z} + b_1 e^{-ik^+z}\right]\begin{pmatrix} \bar{u}e^{\frac{i\emptyset_L}{2}} \\ \bar{v}e^{-\frac{i\emptyset_L}{2}} \end{pmatrix} + a_1 e^{ik^-z}\begin{pmatrix} \bar{v}e^{\frac{i\emptyset_L}{2}} \\ \bar{v}e^{-\frac{i\emptyset_L}{2}} \end{pmatrix} & z<0 \\ (c_1 e^{iq^+z} + c_2 e^{-iq^+z})\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} + (c_3 e^{i\bar{q}z} + c_4 e^{-i\bar{q}z})\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} & 0<z<d \\ c_1 e^{ik^+z}\begin{pmatrix} \bar{u}e^{\frac{i\emptyset_R}{2}} \\ \bar{v}e^{-\frac{i\emptyset_R}{2}} \end{pmatrix} + d_1 e^{-i\bar{k}z}\begin{pmatrix} \bar{v}e^{\frac{i\emptyset_R}{2}} \\ \bar{u}e^{-\frac{i\emptyset_R}{2}} \end{pmatrix} & z>d \end{cases} \qquad (٣)$$

در روابط بالا $\bar{u}$ و $\bar{v}$ ضرایب همدوسی BCS می‌باشند که به صورت $\bar{u} = \sqrt{(1+\Omega/E)/2}$ و $\bar{v} = \sqrt{(1-\Omega/E)/2}$ و $\Omega = \sqrt{E^2 - \Delta^2}$ تعریف می‌شوند. با اعمال شرایط مرزی که به صورت زیر می باشند می توان ضریب بازتاب آندریف را محاسبه نمود:

$$\Psi(z)|_{z=0^-} = \Psi(z)|_{z=0^+}$$
$$\Psi(z)|_{z=d^+} = \Psi(z)|_{z=d^-}$$

$$\frac{d\Psi(z)}{dz}|_{z=0^-} = \frac{d\Psi(z)}{dz}|_{z=0^+}$$
$$\frac{d\Psi(z)}{dz}|_{z=d^+} = \frac{d\Psi(z)}{dz}|_{z=d^-}$$

(٤)

جریان dc جوزفسون طبق فرمول‌بندی فوروساکی – تسوکادا از رابطه زیر بدست می آید:

$$I = \frac{e\Delta k_B T}{2\hbar}\sum_{\omega_n}\frac{1}{\Omega_n}(k_n^+ + k_n^-)\left(\frac{a_{n1}}{k_n^+} - \frac{a_{n2}}{k_n^-}\right) \qquad (٥)$$

در اینجا $k_n^{\pm}$ و a_{n1}و a_{n2}با تمدید تحلیلی $\mathrm{E}\rightarrow \mathrm{i}\omega_n$ در روابط بالا به دست می‌آیند و $\omega_n = \pi k_B T(2n+1)$ با $n = 0, \pm1, \pm2, \ldots$ فرکانس ماتسو بارا می‌باشد. ضمناً Ω_n هم به شکل $\Omega_n = \sqrt{\omega_n^2 + \Delta^2}$ تعریف می شود.

نتایج عددی

رابطه کلی (٥) با محاسبه ضریب آندریف از روابط (٣) و (٤) و نیز استفاده از شرط $a_2(\emptyset) = a_1(-\emptyset)$به صورت زیر در می‌آید:

$$I = \frac{\pi K_B T\Delta^2}{eR}\int_{-\pi/2}^{+\pi/2} d\theta\cos\theta\sum_{\omega_n}\frac{sin\emptyset}{\Gamma_n} \qquad (٦)$$

که در آن

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

$$\Gamma_n = \Delta^2 cos\phi + \left[1 + \frac{z_\theta}{2})^2\Omega_n^2 + \omega_n^2\right]\cosh\left(\frac{2\omega_n d}{\hbar\ v}\right) + (2+z_\theta)\omega_n\Omega_n \sinh\left(\frac{2\omega_n d}{\hbar\ v}\right) - z_\theta(1-\frac{7}{8}z_\theta)\Omega_n^2\cos(2qd) + 2z_\theta^2(1-\frac{3}{4}z_\theta)^{\frac{1}{2}}\Omega_n^2 \sin(2qd) \quad (۷)$$

در این رابطه d پهنای لایه میانی فلز نرمال می باشد $v=\frac{\hbar q}{m}$ و $z_\theta=\frac{z}{\cos\theta}$. Z نیز شدت پتانسیل اتصال را نشان می‌دهد و پارامتری بدون بعد می باشد. ضمن آنکه φ نیز اختلاف فاز بین دو ابر رسانا است. تمام نتایج عددی نیز با فرض اینکه $\frac{E_F}{\Delta}=10^3$ باشد به دست آمده است. اما قبل از ارائه نتایج عددی اجازه دهید برای سنجش اعتبار رابطه ٦ و ٧ آنها را با نتایج قبلی مقایسه کنیم. اگر در روابط ٦ و ٧ d را برابر صفر قرار دهیم اتصال مورد نظر به یک اتصال SIS معمولی تبدیل خواهد شد. در این حالت نتیجه به دست آمده از فرمول های ٦ و ٧ با فرمول ٢٣ مرجع [٧] منطبق خواهد شد. همچنین با قرار دادن h=0 در مرجع [٥] و جایگذاری d=0 در روابط ٦ و ٧ سازگاری نتایج را به دست خواهیم آورد که این خود درستی روابط ٦ و ٧ را نشان میدهد.

شکل های ١ و ٢ جریان جوزفسون بهنجار شده را در دمای $\frac{k_BT}{\Delta}=0.05$ نشان می‌دهد. جریان جوزفسون بهنجار شده

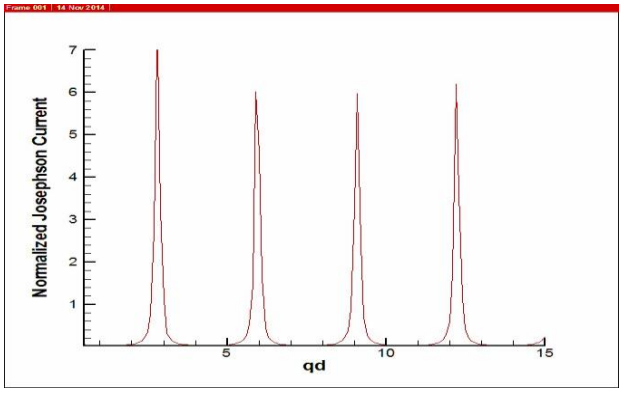
از تقسیم رابطه ٦ بر $R=\int d\theta\frac{\cos\theta}{1+z_\theta^2}$ تعریف می شود[٦و٧].

شکلهای یک و دو جریان بهنجار شده را به ترتیب به ازای z=1 و z=5 نشان می دهند. همان گونه که ملاحظه می شود جریان بهنجار شده برحسب پهنای لایه میانی رفتاری نوسانی را نشان میدهد. این رفتار نوسانی به دلیل وجود سینوس و کسینوس بر حسب پهنای لایه میانی در رابطه ٧ می باشد. مکان پیک ها نیز با قرار دادن رابطه ٧ برابر با صفر به دست می آید. هنگامی که شدت پتانسیل اتصال پایین است (z=1) در مقایسه با شدت پتانسیل بالا (z=5)، ارتفاع پیک ها پایین تر می باشد. این رفتار به این دلیل است که جریان جوزفسون بهنجار شده از تقسیم جریان بر R به دست می‌آید و لذا جریان بهنجار شده در z های بزرگ و در مکان پیکها متناسب با Z^2 رفتار می کند و لذا در مکان پیک ها ارتفاع جریان برای z های بزرگ بیشتر می باشد.

در اینجا مناسب است که در خصوص وابستگی جریان جوزفسون بهنجار شده به اختلاف فاز میان ابررساناها نیز اشاره کنیم. از روابط ٦ و ٧ ملاحظه می شود که در پهناهای کوچک جریان جوزفسون بهنجار شده از رفتار استاندارد $I=I_0\sin\varphi$ تبعیت می کند در حالی که در مکان پیک ها جریان جوزفسون شدیداً از تابعیت سینوسی منحرف می‌شود. ضمن آنکه مقادیر ماکسیموم آن نیز برای Z های بزرگتر، بالاتر می باشد که شبیه به رفتاری است که در شکل های ١ و ٢ نیز ملاحظه گردید.

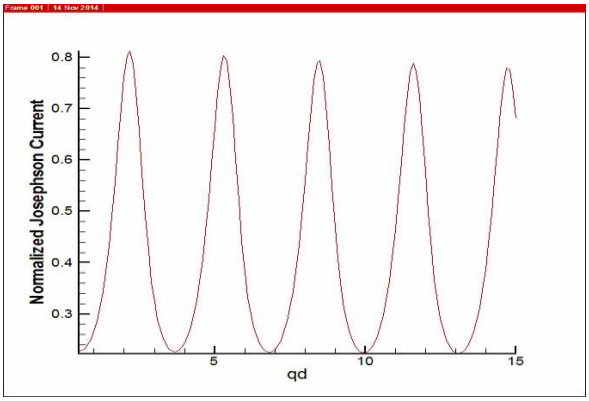
نتیجه گیری

به طور خلاصه، در این مقاله جریان جوزفسون را بر حسب پهنای لایه میانی مورد مطالعه قرار دادیم. ملاحظه کردیم که رفتار جریان جوزفسون رفتاری نوسانی می‌باشد. همچنین جریان جوزفسون بهنجار شده بر حسب اختلاف فاز میان ابررساناها برای پهنا های کوچک متناسب با $\sin\varphi$ می باشد در حالی که در مکان پیکها جریان جوزفسون از رفتار سینوسی شدیداً منحرف می گردد.



شکل ١:جریان جوزفسون بهنجار شده بر حسب پهنای لایه میانی به ازای z=1

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



شکل ۲ :جریان جوزفسون بهنجار شده بر حسب پهنای لایه میانی به ازای z=5 .

مرجع ها

[1] B.D. Josephson, *Adv. Phys*. '' Supercurrents through barriers ''14 (1965) 419.

[2] B.D. Josephson, *Rev. Mod. Phys*. '' Coupled superconductors" 36 (1964) 216.

[3] A. Furusaki and M.Tsukada, *Solid State Commun*." Dc Josephson effect and Andreev reflection'' 78 (1991) 299.

[4] Hamidreza Emamipour, *Solid State Commun*. "dc Josephson effect in a junction between two ferromagnetic superconductors" 180 (2014) 11.

[5] Hamidreza Emamipour, *Chin. Phys*. B "Josephson current versus potential strength of the interface in ferromagnetic superconductors" 23 (2014)057402.

[6] Y. Zhao and R. Shen, *Phys. Rev. B*, "Josephson effect in junctions of ferromagnetic superconductors with equal spin pairing symmetry" 73 (2006) 214511.

[7] X. Li, et. all, *Phys. Rev. B*, "Josephson current in ferromagnet-superconductor tunnel junctions" 65 (2002) 134507.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

محاسبه جذب تابش ترمزی معکوس در پلاسمای غیرهمگن و غیرمغناطیده

مرجان نامزد اردکانی ؛ لیلا غلامزاده

دانشکده فیزیک، دانشگاه یزد، یزد، ایران

چکیده

همجوشی محصورشدگی لختی با استفاده از باریکه‌های لیزری یا یونی راه‌اندازی می‌شود. در طرح همجوشی راه اندازی مستقیم نور لیزر مسقیما به سطح هدف برخورد کرده و تشکیل پلاسما می‌دهد. برای رسیدن به بهینه بازده لازم است که بیشترین نور لیزر به‌وسیله هدف جذب شود. یکی از فرایندهای جذب انرژی لیزر درسطح بحرانی جذب تابش ترمزی معکوس یا جذب برخوردی است. در این مقاله، با استفاده از نظریه جنبشی، جذب تابش ترمزی معکوس در یک پلاسمای غیرمغناطیده و غیرهمگن محاسبه شده است. بدین منظور، ابتدا تابع توزیع الکترون را درحضورمیدان الکتریکی قطبیده خطی محاسبه و سپس با استفاده از آن تابع چگالی جریان بدست آمده و نهایتا تابع جذب برخوردی محاسبه شده است. نمودار ضریب جذب برحسب تابعی ازمکان پلاسما نشان می‌دهد که این ضریب در سطح بحرانی بیشینه است و هرچه از سطح بحرانی دور شده مقدار جذب کاهش پیدا می‌کند و همچنین محاسبه میزان جذب برای دو طول موج لیزر مختلف نشان می‌دهد که با افزایش طول موج لیزر میزان جذب کاهش پیدا می‌کند.

واژه‌های کلیدی: *ضریب جذب تابش ترمزی معکوس، همجوشی محصورشدگی لختی، پلاسمای غیرهمگن*

Calculation of Inverse Bremsstrahlung Radiation Absorption in Inhomogeneous and - Unmagnetized Plasma

Namzad, Marjan, Gholamzadeh Leila

Department of Physics, Yazd University, Yazd, Iran

Abstract

Inertial confinement fusion is directed using laser or ion beams. In laser fusion, the laser light strikes to the target surface and forms a plasma. Our goal in this project is to absorb as much light as possible from the target. One of the processes of laser energy absorption at the critical surface is the Inverse Bremsstrahlung Radiation Absorption. In this paper, Inverse Bremsstrahlung Radiation Absorption (IBA) is calculated in an unmagnetized and inhomogeneous plasma using kinetic theory. For this purpose, first, the electron distribution function in the presence of a linearly polarized electric field is calculated and then the current density function is obtained using it and finally the absorption function is calculated. Plot of absorption coefficient in terms of plasma location shows that this coefficient is maximum at the critical level and the farther away from the critical level the absorption decreases and also calculation of the absorption for two different laser wavelengths shows that with increasing laser wavelength, absorption value decreases.

PACS No. (۲۸)

مقدمه

در همجوشی محصور شدگی لختی، سوخت با استفاده از باریکه‌های لیزری یا یونی تا دماهای بالا گرم می‌شود. در همجوشی لیزری، برای رسیدن به بهرهٔ بالا لازم است تا بیشترین مقدار ممکن انرژی لیزر در هدف جذب شود. یکی از مهمترین ساز و کارهای جذب در همجوشی لیزری، جذب برخوردی است که در سطح بحرانی روی می‌دهد. در این روش برای رسیدن به بهره بالا لازم است‌که بیشینه انرژی لیزر در هدف جذب شود. از جمله فرآیندهایی که در ناحیه برهم‌کنش لیزر با پلاسما (هاله) رخ می‌دهد و باعث جذب نور لیزر می‌شود جذب تابش ترمزی معکوس نام دارد. چنانچه ، الکترون در برخورد با یک یون یا دیگر الکترون‌ها، انرژی فوتون را جذب کند، تابش ترمزی معکوس رخ می دهد[۱-۲]. در فرآیند همجوشی راه اندازی شده با لیزر، ساز وکار اصلی انتقال انرژی بر عهدهٔ جذب تابش ترمزی معکوس است. از این رو به‌دست آوردن ضریب جذب تابش ترمزی معکوس با توجه به شرایط اولیه لیزر و پلاسما، از درجهٔ اهمیت بالایی برخوردار است.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد

http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

معمولاً لیزرهایی که در همجوشی محصور شدگی لختی‌استفاده می‌شوند شدت‌هایی از مرتبهٔ W/cm^2 10^{15} تا 10^{14} دارا هستند. سیلین در سال ۱۹۶۵ اولین کسی بود که جذب برخوردی غیرخطی‌را با استفاده از تابع توزیع الکترون‌های غیرهمسانگرد مورد بررسی قرار داد[۱-۲]. در سال ۲۰۰۹ ونگ و همکارانش جذب تابش ترمزی معکوس با اثرات غیرخطی را در شدت‌های بالای لیزر و با تابع توزیع غیرماکسولی مورد بررسی قرار دادند[۳]. در سال ۲۰۱٤، در آزمایشگاه‌های چین توسط شینگ مینگ، لولی و سومینگ ، جذب لیزر با شدت بالا از جمله الکترون های داغ را بررسی کردند. در سال ۲۰۱٤، خانم فیروزی و همکاران جذب تابش ترمزی معکوس را برای پلاسمای همگن با استفاده از تابع توزیع غیر گسترده بررسی کردند، اثر طول پالس لیزر را بر میزان جذب برخوردی بررسی کردند[٤]. در این مقاله، جذب تابش ترمزی معکوس در پلاسمای غیرهمگن و غیرمغناطیده با استفاده از نظریه جنبشی محاسبه شده است. بدین منظور ابتدا با استفاده از نظریه جنبشی بولتزمن تابع توزیع الکترون محاسبه شده و سپس چگالی جریان و نهایتًا ضریب جذب برای تابع توزیع ماکسولی محاسبه شده است.

معادلات اساسی

با استفاده از نظریهٔ جنبشی تابع توزیع الکترون‌ها محاسبه می‌شود. معادلهٔ بنیادی که تابع توزیع الکترون‌ها $f(\vec{r},\vec{v},t)$ در آن صدق می‌کند معادلهٔ بولتزمن است.

(۱)

$$\frac{\partial f_j}{\partial t}+\vec{v}\cdot\frac{\partial f_j}{\partial \vec{x}}+\frac{q_j}{m_j}(\vec{E}+\frac{\vec{v}\times\vec{B}}{C})\cdot\frac{\partial f_j}{\partial \vec{v}}=\Sigma_k(\frac{\partial f_{jk}}{\partial t})_c$$

که f_j ، q_j و m_j به‌ترتیب تابع توزیع سرعت، بار و جرم الکترون هستند. $\vec{E}$ و $\vec{B}$ میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی درون پلاسما هستند. از آنجا که می‌خواهیم پاسخ الکترون های پلاسما به تحریک، بوسیله میدان لیزر را محاسبه کنیم، تابع توزیع الکترون را به‌صورت دو قسمت $f^{(s)}$ (تابع توزیع استاتیک) و $f^{(h)}$ (تابع توزیع فرکانس بالا) در نظر می گیریم[٦]:

(۲)

$$f_e(\vec{r},\vec{v},t)=f^{(s)}(\vec{r},\vec{v},t)+f^{(h)}(\vec{v})\exp(i\omega_L t-ikx)$$

لیزرهایی که در همجوشی مورد استفاده قرار می‌گیرند پالسی هستند. از این‌رو میدان الکتریکی به‌صورت زیر در نظرگرفته شده است:

$$\vec{E}(x,t)=\vec{E}_0(x)\sin^2(\pi\frac{t}{\tau_L})\exp(i\omega_L t-ikx) \qquad (۳)$$

که $\vec{E}$، $\vec{E}_0$، τ_L و ω_L به ترتیب میدان الکتریکی در راستای z ، دامنه‌ی میدان، طول پالس لیزر و فرکانس لیزر هستند. برای این کار ابتدا دستگاه مختصات کروی را در نظر می‌گیریم: $\mu=\frac{v_x}{v}$, $\varphi=\arctan\frac{v_z}{v_y}$, v. با استفاده از این دستگاه مختصات معادله ۲ را به صورت $f(\nu,\mu,\varphi,t)=f_0(\nu)+f_1(\nu,\mu,\varphi,t)$ می‌توان نوشت. فقط مرتبه های اول از بسط تابع $f^{(s)}$ و $f^{(h)}$ درنظرگرفته شده است. برای $\vec{E}=0$، $f_0(\nu)$ تابع توزیع همسانگرد بوده و به صورت تابع ماکسولی $f_0(\nu)=n_e(\frac{m_e}{2\pi k_B T})^{3/2}\exp(-\frac{m_e\nu^2}{2k_B T})$ فرض شده است. در ادامه، برای محاسبه ضریب جذب تابش ترمزی معکوس، نیاز به دانستن چگالی جریان الکتریکی است. چگالی جریان الکتریکی ($\vec{J}$)از رابطه‌ی زیر استفاده شده است:

$$\vec{J}=-en_e\vec{v}=-e\int f(\vec{v},t)\,\vec{v}\,d^3v \qquad (٤)$$

برای تعیین چگالی جریان الکتریکی ابتدا باید تابع f_1 را بدست آورد.همچنین همان طور که قبلاً اشاره شد $f_0(\nu)$ تابع توزیع همسانگرد الکترون است که به‌صورت تابع ماکسولی تعریف شد. f_1 اولین تابع توزیع ناهمسانگرد است. با جایگذاری رابطه تابع توزیع الکترون در رابطه ۱ و درنظرگرفتن ترم برخورد الکترون – یون و حذف جمله مغناطیسی، رابطه ۵ بدست خواهد آمد:

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

$$\frac{\partial f_1}{\partial t}+\vec{v}\cdot\frac{\partial f_1}{\partial \vec{x}}-\frac{e}{m_e}(\vec{E})\cdot\frac{\partial f_0}{\partial \vec{v}}=-(\frac{2A}{v^3})f_1 \qquad (۵)$$

که $A=\frac{2\pi m_e Z e^4}{m_e^2}\ln\Lambda$. اکنون می‌توان تابع f_1 را برحسب میدان الکتریکی $\vec{E}$ و تابع $f_0(v)$ محاسبه کرد:

(٦)

$$f_1+ikv_x f_1-\frac{2}{v^3}\omega_L f_1=\frac{e}{m}E_0 x\,fs+\frac{A}{\pi}\frac{t}{\tau_L}e\quad \omega_L-i)\frac{\partial f_0}{\partial v_z}$$

که از رابطه بالا می‌توان تابع f_1 بدست آورد:

(۷)

$$f_1=\frac{\frac{e}{m_e}E_0(x)\sin^2(\pi\frac{t}{\tau_L})\exp(i\omega_L t-ikx)\frac{\partial f_0}{\partial v_z}}{\frac{2A}{v^3}+i(kv\mu-\omega_L)}$$

که با جایگذاری f_0 داریم:

(۸)

$$f_1=\frac{\frac{-e}{m_e}n_e(\frac{m_e}{k_B T})^{3/2}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}E_0(x)\sin^2(\pi\frac{t}{\tau_L})\exp(i\omega_L t-ikx)\sqrt{1-\mu^2}(\sin\varphi)v\exp(-\frac{m_e v^2}{2k_B T})}{\frac{2A}{v^3}+i(Kv\mu-\omega_L)}$$

با استفاده از رابطه‌ی(۸)، به‌محاسبه‌ی چگالی جریان الکتریکی می پردازیم:

(۹)

$$\vec{J}=-e\int f_0(v_x\hat{x}+v_y\hat{y}+v_z\hat{z})d^3\vec{v}-e\int f_1(v_x\hat{x}+v_y\hat{y}+v_z\hat{z})d^3\vec{v}$$
$$=(-e\int f_0 v\sqrt{1-\mu^2}(\cos\varphi\hat{y}+\sin\varphi\hat{z})d^3\vec{v})+(-e\int f_1 v\sqrt{1-\mu^2}(\cos\varphi\hat{y}+\sin\varphi\hat{z})d^3\vec{v})$$

جواب انتگرال اول صفرخواهد شدو انتگرال دوم به‌صورت زیر محاسبه خواهد شد:

$$\vec{J'}_2=\frac{e^2 n_e}{\sqrt{2\pi m}}(\frac{m_e}{k_B T})^{3/2}E_0(x)\sin^2(\frac{\pi t}{\tau_L})\exp(i\omega_L t-ikx)$$
$$\iiint\frac{(\sqrt{1-\mu^2}\sin\varphi)v\exp(-\frac{m_e v^2}{2k_B T})}{\frac{2A}{v^3}+i(Kv\mu-\omega_L)}$$
$$(v\cos\varphi\hat{i}+v\sin\theta\cos\varphi\hat{j}+v\sin\theta\sin\varphi\hat{k})v^2 dvd\mu d\varphi$$

پس چگالی جریان برابر است با:

$$\vec{J}=\frac{e^2 n_e}{\sqrt{2\pi m}}(\frac{m_e}{k_B T})^{3/2}E_0(x)\sin^2(\frac{\pi}{\tau_L})\exp(i\omega_L t-ikx)$$
$$\int_0^{2\pi}\sin^2\varphi d\varphi\int_{-1}^{+1}\int_0^{\infty}\frac{v^4\exp(-\frac{m_e v^2}{2k_B T})dv}{(kv\mu-\omega_L)^2}(1-\mu^2)d\mu$$
$$[\frac{2A}{v^3}-i(Kv\mu-\omega_L)\hat{k}$$

که برای حل انتگرال فوق ابتدا آن را گویا کرده و با توجه به اینکه $\frac{2A}{v^3}\approx\upsilon_{ei}$، بعد از گویا کردن عبارت و با توجه به اینکه $\frac{2A}{v^3}\ll\omega_L$، داریم:

$$\vec{J}=\frac{e^2 n_e}{\sqrt{2\pi m}}(\frac{m_e}{k_B T})^{3/2}(2A\pi)E_0(x)\sin^2(\pi\frac{t}{\tau_L})\exp(i\omega_L t-ikx)\int_{0}^{\infty}\int_{-1}^{+1}\frac{v\exp(-\frac{m_e v^2}{2k_B T})}{(kv\mu-\omega_L)^2}(1-\mu^2)d\mu d\upsilon\hat{z}$$

(۱۱)

ابتدا انتگرال نسبت به μ را محاسبه کرده و سپس با استفاده از بسط لگاریتمی زیر روابط را ساده می کنیم:

$$\log(\frac{kv+\omega}{-kv+\omega})=\log(\frac{1+\frac{kv}{\omega}}{1-\frac{kv}{\omega}})=\frac{kv}{\omega}-\frac{k^2v^2}{2\omega^2}+\frac{k^3v^3}{3\omega^3}+\ldots+\frac{kv}{\omega}+\frac{k^2v^2}{2\omega^2}+\frac{k^3v^3}{3\omega^3}+\ldots \qquad (۱۲)$$

با فرض اینکه $\frac{kv}{\omega}\ll 1$ است از آنجا جملات دوم و سوم بسط ها به‌سمت صفر میل می‌کند و باتوجه به انتگرال تابع خاص گاما،($\int\frac{\exp(-aX^2)}{x}=-\frac{1}{2}\Gamma$ آنگاه داریم:

$$\int_0^{\infty}[-4\frac{\exp(-\frac{m_e v^2}{2k_B T})}{k^2 v}+2\frac{\exp(-\frac{m_e v^2}{2k_B T})}{k^2 v}]dv=\frac{-2}{k^2}\int_0^{\infty}\frac{\exp(-\frac{m_e v^2}{2k_B T})}{v}dv=\frac{\Gamma}{k^2}$$

با حل انتگرال‌ها توسط نرم افزار Mathematica، و ساده سازی داریم: (۱۳)

$$\vec{J}=\frac{e^2 n_e}{\sqrt{2\pi m}}(\frac{m_e}{k_B T})^{3/2}(2A\pi)E_0(x)\sin^2(\pi\frac{t}{\tau_L})\exp(i\omega_L t-ikx)\frac{\Gamma}{k^2}=$$
$$(\frac{2\pi}{k_B T m_e})^{3/2}n_e^2 e^6 Z(\ln\Lambda)E_0(x)\sin^2(\pi\frac{t}{\tau_L})\exp(i\omega_L t-ikx)\frac{\Gamma}{k^2}$$

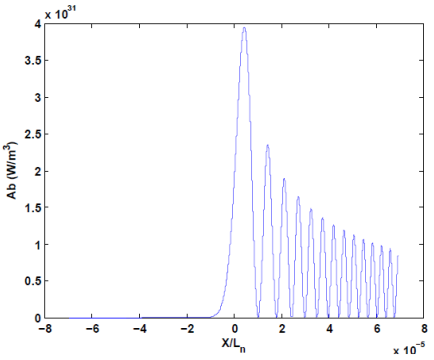
اکنون با داشتن چگالی جریان می توان ضریب جذب را محاسبه نمود. در حد کلاسیکی یک پلاسمای داغ، $T_e\gg\hbar\omega$، توافق خوبی بین توصیف کوانتومی و کلاسیکی برهم کنش لیزر و پلاسما وجود دارد و ضریب جذب به صورت $\langle\vec{E}\cdot\vec{J}\rangle$ محاسبه می شود،

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

البته براکت به این معناست که باید در طول یک پالس لیزر میانگین گیری زمانی هم انجام شود:

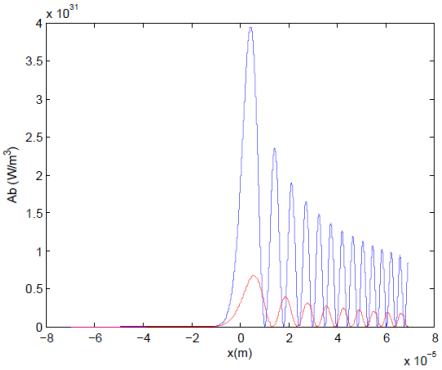
$$Ab = \frac{\frac{3e^6 Z}{8}\left(\frac{2\pi}{k_B T m_e}\right)^{\frac{3}{2}} \left(n_c\left(1-\frac{x}{L_n}\right)\right)^2 \ln\Lambda\, E_0^{\,2}(x)}{3}\Big)^{\Gamma/k^2} \qquad (۱٤)$$

با استفاده از معادلات ماکسول و معادله حرکت الکترون $E_0(x)$ محاسبه شود[۲و۵]. در شکل (۱) ضریب جذب برحسب تابعی از x برای تابع توزیع‌های ماکسولی با استفاده از پارامترهای اولیه لیزر و پلاسما Z=٤، T_e=۱۰ keV ، λ =۰/۳۵۳ μm ، =۱ ns، و τ_L و E_0=۱۰^{۱۵} V/m رسم شده است.



شکل ۱: نمودار ضریب جذب برخوردی برحسب تابعی از x برای توزیع-ماکسولی.

$x = ۰$، سطح بحرانی را نشان می‌دهد. $x > ۰$ ناحیه‌ی مربوط به پلاسمای با چگالی کم ($n_e < n_c$) و $x < ۰$ ناحیه‌ی مربوط به پلاسمای با چگالی بالا ($n_e > n_c$) است.



شکل ۲: نمودار جذب برحسب تابعی از x برای دو طول موج مختلف لیزر.

مطابق شکل ۱، بیشینه جذب 3.9×10^{31} W/cm^3 بدست امده است. همان‌طور که مشخص است، جذب در نزدیکی لایه بحرانی(x=۰)بیشینه است و به محض دورشدن از لایه بحرانی($x/L_n > ۰$) مقدار جذب کاهش می‌یابد. در شکل ۲ میزان جذب بر حسب طول موج لیزرها مقایسه شده‌اند. با توجه به شکل۲، افزایش طول موج لیزر باعث کاهش میزان جذب نور لیزر شده و مکان بیشینه ضریب جذب نور لیزر نیز از سطح بحرانی (x=۰) فاصله می‌گیرد.

بحث و نتیجه گیری

در این مقاله، جذب تابش ترمزی معکوس در پلاسمای غیرهمگن و غیرمغناطیده با استفاده از نظریه جنبشی محاسبه شده است. ابتدا با استفاده از نظریه جنبشی بولتزمن تابع توزیع الکترون محاسبه شده و سپس چگالی جریان و نهایتاً ضریب جذب برای تابع توزیع ماکسولی محاسبه شده است. با توجه به شکل‌های ۱و۲ میزان جذب در نزدیکی سطح بحرانی بیشتر است و هرچه از سطح بحرانی دورتر شویم میزان جذب نیز کاهش پیدا خواهد کرد. پارامترهای لیزر مانند طول موج به شدت در میزان جذب نور لیزر تاثیرگذار بوده و با افزایش طول موج نور لیزر، ضریب جذب کاهش پیدا می‌کند.

مراجع

[۱]S. Pfalzner, An Introduction to Inertial Confinement Fusion, Taylor & Francis, CRC Press,(۲۰۰٦).
[۲]S. Eliezer, The Interaction of High-Power Lasers with Plasmas, IOP Publishing, Ltd,(۲۰۰۲).
[۳]S.Weng, Z. Sheng, J. Zheng. Inverse bremsstrahlung absorption with nonlinear effects of high laser intensity and non-Maxwellian Distribution, Physical Review E۸۰ ٥ (۲۰۰۹) ۰٥٦٤۰۷.
[٤] N. Firouzi, L. Gholamzadeh, M. eslamikalantri, M. Sharifian, A. Sid. Investigation of the effect of laser pulse length on the inverse bremsstrahlung absorption in laser fusion plasma, High Energy Density Physics ۱٦ (۲۰۱٥)۳۲-۳٥.
[٥]A. Sid, Nonlinear inverse bremsstrahlung absorption in laser-fusion plasma corona, *Physics of Plasmas*, ۱۰ (۲۰۰۳) ۲۱٤-۲۱۹.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

رسانندگی گرمائی یک افزاره ی چاه کوانتومی نیمه هادی دوبعدی

انصاری پور، قاسم؛ انوش، اللهیار

گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه بوعلی سینا، همدان

چکیده

در این کار پژوهشی خواص گرمایی یک ساختار دوبعدی نیمه هادی مانند چاه کوانتومی Si با لحاظ نرخ واهلش فونون در فرآیندهای پراکندگی سه-فونونی واگرد، پراکندگی مرزی و پراکندگی ناخالصی را بررسی کرده ورابطهٔ پاشندگی مدهای برشی بر حسب بردار موج و رسانندگی گرمایی برحسب دما را در ساختار چاه کوانتومی سیلیکون و انبوههٔ متناظر محاسبه و رسم کرده ایم. نشان داده ایم که رسانندگی گرمایی شبکه در ساختار چاه کوانتومی نسبت به انبوههٔ متناظر پایین تر بوده و در توافق با داده های چاپ شدهٔ اخیر است.

واژه های کلیدی: *فونون، چاه کوانتومی، انبوهه، فرآیند واگرد.*

Thermal Conductivity of a Two Dimensional Semiconductor Quantum Well Device

Ansaripour, Ghassem; Anosh, Allahyar
Department of Physics, Bu-Ali Sina University, Hamedan

Abstract

In this work, the thermal properties of a two-dimensional semiconductor structures such as an Si quantum well is investigated regarding the phonon relaxation rate of the umklapp three-phonon scattering, boundary scattering, impurity scattering processes and the dispersion relation of the shear modes versus wave vector and the thermal conductivity versus temperature are calculated and plotted. We have shown that the lattice thermal conductivity of the quantum well structure is lower than that of the corresponding bulk, in agreement to the recent published data.

***Keywords**: Phonon, Quantum well, Bulk, Umklapp process*

PACS No. 68

مقدمه

رسانندگی گرمایی نیمه هادی ها متشکل از سهم های فونونی شبکه و الکترون هاست و نسبت این دو برای نیمه هادی های دوتایی، $K_e / K_{ph} \propto 1/2$ است. در اینجا یک ساختار چاه کوانتومی در دماهای نسبتا بالا در نظر می گیریم. انتظار میرود بر هم کنش سه- فونونی سازوکار پراکندگی غالب محدود کنندهٔ انتقال حرارت باشد. به لحاظ ناچیز بودن سهم الکترونی رسانندگی گرمایی در ساختارهای غیرآلاییده نیمرساناها، از آن چشم پوشی می کنیم. به خوبی می‌دانیم که فرایندهای پراکندگی سه-فونونی عادی که در آن تکانه کل حفظ می‌شود نمی‌توانند به تنهایی به مقاومت حرارتی محدود منجر شوند، گر چه آن‌ها به طور غیر مستقیم از طریق توزیع مجدد مدهای فونونی، اثرگذارند[1،2]. تنها فرایندهایی که تکانهٔ بلور را پایسته نگه نمی دارند، در مقاومت گرمایی شبکه سهیم اند.این فرایندها که به نام مقاوم ارجاع داده می‌شوند، پراکندگی مرزی، پراکندگی ناخالصی و پراکندگی سه-فونونی واگرد هستند. پراکندگی ناخالصی به نوبه خود می‌تواند دربرگیرندهٔ پراکندگی ایزوتوپ ناشی از حضور اتم‌های با جرم متفاوت، پراکندگی دررفتگی و پراکندگی اتم‌های عناصر مختلف باشد. در یک ماده با کیفیت بالا، همه این سازوکارهای پراکندگی ناخالصی، به جز پراکندگی ایزوتوپ، می‌توانند به شدت کاهش

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

یابند. به همین دلیل، ما در ابتدا به بررسی اثرات ایجاد شده توسط فونون های محبوس برروی فرایندهای مقاوم، که شامل پراکندگی سه–فونون واگرد، پراکندگی ایزوتوپ، و پراکندگی مرزی هستند، علاقمندیم[2].

در این مقاله پراکندگی فونونی و رسانندگی گرمایی چاه کوانتومی دو بعدی مورد بررسی قرار گرفته و منحنی های مربوطه رسم شده است.

ملاحظات نظری

با فرض غالب بودن فرایندهای مقاوم، برای محاسبهٔ رسانندگی گرمایی شبکه، K_L، از معادلهٔ گالاوی استفاده می کنیم[3]:

$$K_L = \frac{K_B}{2\pi^2 v}\left(\frac{K_B}{\hbar}\right)^3 T^3 \int_0^{\theta/T} \frac{\tau_c x^4 e^x}{(e^x-1)^2} dx \qquad (1)$$

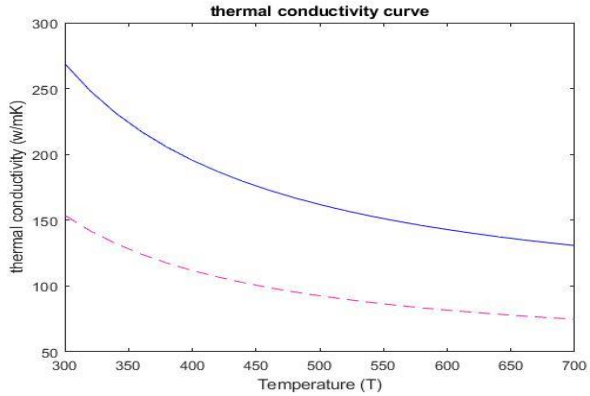
که در آن K_B ثابت بولتزمان، $\hbar$ ثابت پلانک کاهش یافته، θ درجه حرارت دبای، $x = \hbar\omega / k_B T$، و v سرعت صوت و τ_c زمان واهلش به صورت زیر داده می شود [4].

$$\frac{1}{\tau_C} = \frac{1}{\tau_U} + \frac{1}{\tau_B} + \frac{1}{\tau_I} \qquad (2)$$

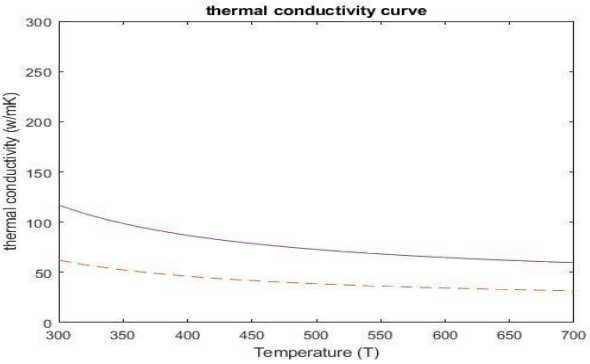
در دمای اتاق یا بالاتر بیشتر گرما در سیلیکون توسط فونون های صوتی با بردار موج q نزدیک به مرکز منطقه بریلوین انتقال می یابد. در این منطقهٔ فضای برداری q می توانیم پاشندگی فونونی را در تقریب پیوستهٔ کشسانی تعیین کنیم. منحنی تغییرات رسانندگی گرمایی شبکه در انبوههٔ سیلیکون (شکل1) و در چاه کوانتومی متناظر (شکل2) به صورت عددی نشان داده شده است [1].

در یک چاه کوانتومی سه نوع مختلف از مدهای صوتی محبوس با تقارن های ممتازشان مشخصه یابی می شوند: امواج برشی، امواج انبساطی و امواج مارپیچی [1،5].

مدهای برشی مانند مدهای عرضی نیمرسانای انبوهه بوده و تنها دارای یک مؤلفهٔ غیرصفر بردار جابجایی $u = (0,u_y,0)$ بوده که عمود بر جهت انتشارموج است و در صفحه چاه کوانتومی قرار دارد و به صورت زیر داده می شود [4]:



شکل1:. نمودار تغییرات رسانش گرمایی همه فرایندها (خط چین) و فرایند واگرد(خط توپر) انبوههٔ سیلیکون بر حسب دما.



شکل2:. نمودار تغییرات رسانش گرمایی همه فرایندها(خط چین) و فرایند واگرد (خط توپر) چاه کوانتومی سیلیکون متناظر با پهنای 20 nm بر حسب دما.

$$u_n(q_{//}, z) = (0, u_y, 0) \qquad (3)$$

که در آن

$$u_y = \begin{cases} \cos(q_{z,n} z) \ \ if\ n = 0,2,4... \\ \sin(q_{z,n} z) \ \ if\ \ n = 1,3,5... \end{cases} \qquad (4)$$

$q_{z,n}$ به صورت زیر کوانتیده است:

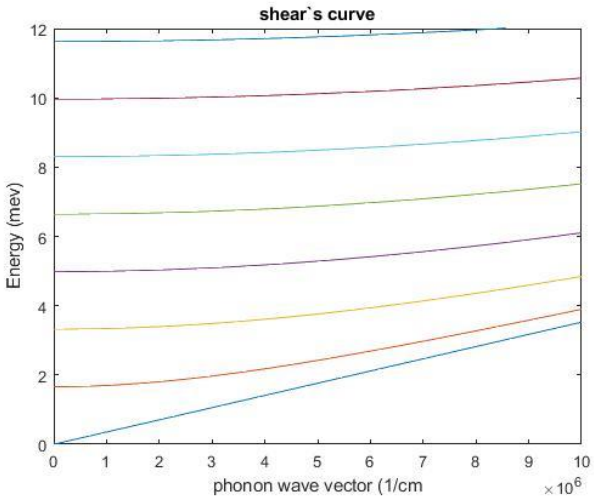
$$q_{z,n} = (\pi n / a) \qquad (5)$$

و رابطه پاشندگی موج برشی به صورت زیر داده می شود:

$$\omega_n = s_t \sqrt{q_{z,n}^2 + q_x^2} \qquad (6)$$

در شکل3 نمودار تغییرات انرژی برحسب بردار موج مد برشی در چاه کوانتومی سیلیکون با عرض 10 نانومتر و تعداد مدهای1تا 8 به ترتیب از پایین به بالا محاسبه و رسم شده است.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



شکل 3: نمودار تغییرات انرژی فونون مد برشی در یک چاه کوانتومی سیلیکون (w=10nm) برای مدهای (n=1,2,..,8) به ترتیب از پایین به بالا، وابسته به بردار موج.

مـدهای انبسـاطی و پیچشـی دو مؤلفـهٔ غیرصـفر $u = (u_x,0,u_z)$ دارند ورابطهٔ پاشندگی آنها به صورت زیر است [4]:

$$\omega_n = s_l \sqrt{q_x^2 + q_{l,n}^2} \qquad (7)$$

نتیجه گیری

در ساختارهای چاه کوانتومی دوبعدی حرارت بیشتر توسط فونون های صوتی انتقال پیدا کرده و سهم الکترونی در آن ناچیز است. برای محاسبهٔ رسانندگی گرمایی این ساختارها، سهم الکترون ها در رسانندگی گرمایی را نادیده گرفته و تنها مدهای فونونی را مورد بررسی قرار می دهیم.

در ساختار چاه کوانتومی سه نوع مد فونونی در نظر می گیریم. مد برشی که تنها یک مولفه خلاف صفر داشته و عمود بر جهت انتشار می باشد، مدهای انبساطی و پیچشی دو مولفه غیر صفرداشته و هر مد تابعی از شمارهٔ شاخه و عرض چاه کوانتومی بوده و همچنین بیشتر مسئولیت انتقال حرارت را این مدها به عهده دارند. هم چنین محاسبه نشان می دهد که رسانندگی گرمایی شبکه در ساختار چاه کوانتومی نسبت به انبوهۀ متناظر پایین تر است و با داده های مرجع [2] انطباق خوبی دارد.

مرجع‌ها

[1] A. Balandin, "*Thermal Properties of Semiconductor Low-Dimensional Structures",* D, E, Riverside- California (2000) 43.
[2] A. Balandin and K. L. Wang, "Significant decrease of the lattice thermal conductivity due to phonon confinement in a free-standing semiconductor quantum well", *Physical Review B* **58**, No. 3 (1998) 1544-1549.
[3] J. E. Parrott and A. D. Stuckes, "*Thermal conductivity of solids*", Methuen, New York (1975).
[4] N. Bannov and. V. Aristov, "Electron relaxation times due to the deformation-potential interaction of electrons with confined acoustic phonons in a free-standing quantum well", *Physical Review B* **5** (1995) 9930.
[5] A. Balandin and K. L. Wang, "Effect of phonon confinement on the thermoelectric figure of merit of quantum wells", *Journal of Applied Physics* **84** (1998) 6149.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

تولید انحصاری $\gamma\gamma \to ZZ$ به عنوان پنجره‌ای رو به فیزیک ورای مدل استاندارد

رضایی، زهرا؛ خسروی، تریتی

دانشکده فیزیک؛ دانشگاه یزد ،یزد

چکیده

در این مقاله به بررسی پراکندگی $\gamma\gamma \to ZZ$ در فضا-زمان ناجابجایی می‌پردازیم. از جفت‌شدگی‌های سه‌گانه بوزون‌های پیمانه‌ایی که در مدل استاندارد (SM) ممنوع هستند و به دلیل ویژگی‌های فضا-زمان ناجابجایی در این نظریه ظاهر می‌شوند استفاده کرده و سطح مقطع دیفرانسیلی بر حسب زاویه سمتی را محاسبه می‌کنیم. نشان داده‌ایم که ویژگی خاص فضا-زمان ناجابجایی که تقارن لورنتس را می‌شکند توزیع سمتی را نوسانی می‌کند.

واژه های کلیدی: *فضا-زمان ناجابجایی، پراکندگی فوتون-فوتون*

Exclusive $\gamma\gamma \to ZZ$ production as a window to the physics beyond the Standard Model

Rezaei, Zahra; Khosravi, Triti

Department of Physics, Yazd University, Yazd

Abstract

In this article, we study the $\gamma\gamma \to ZZ$ scattering in the noncommutative space-time. We use the triple gauge boson couplings which are forbidden in the SM and appear because of the noncommutative space-time properties and calculate the differential cross section with respect to the azimuthal angel. We have shown that the special property of the noncommutative space-time which breaks the Lorentz symmetry, causes the oscillatory azimuthal distribution.

***Keywords**: Noncommutative space-time, Photon-photon scattering*

PACS No. 12 ,13

مقدمه

مدل استاندارد ذرات بنیادی به‌عنوان نظریه‌ایی موفق برای توصیف سه نیروی بنیادی شناخته شده است. علی‌رغم موفقیت‌های این نظریه در پیش بینی نتایج بسیاری از آزمایش‌ها، ناتوانی مدل استاندارد در توضیح برخی مسائل همانند گرانش کوانتومی، نوسان طعم نوترینو، ماده و انرژی تاریک، فیزیک‌دانان ذرات را به سمت نظریه‌های ورای مدل استاندارد سوق داده است. نظریه میدان ناجابجایی یکی از بسط‌های مدل استاندارد است که ریشه در نظریه ریسمان دارد[۱].

استفاده از برخورد دهنده‌های ذرات در بسیاری از موارد در بررسی نظریه‌ها کارساز است. از آنجا که در برخوردهای فوتون-فوتون، محیط برهمکنش عاری از پدیده‌های مربوط به فرایندهای کوارکی و پیچیدگی‌های مربوطه هستند و به عنوان کانالی تمیز بشمار می‌آیند این نوع برخوردها برای بررسی نظریه‌های ورای مدل استاندارد مورد توجه هستند. در برخورددهنده‌های کنونی انجام آزمایش‌های فوتون-فوتون ممکن است هرچند به دلیل وابستگی نتایج برخی از آزمایش‌ها به تکانه ذرات، شتاب‌دهنده‌های لپتونی پرانرژی آینده محیط مناسب‌تری را برای بررسی این دست نظریه‌ها فراهم می‌کنند. در این مقاله قصد داریم پراکندگی فوتون-فوقون به حالت نهایی شامل دو بوزن پیمانه‌ایی ZZ را مورد بررسی قرار دهیم. انگیزه بررسی این مساله این است که در مدل استاندارد ذرات بنیادی راس مستقیم برای این برهمکنش در مرتبه درختی وجود ندارد و محاسبات از مرتبه حلقه‌های اختلالی انجام می‌شوند. از آنجا که به دلیل ویژگی‌های خاص فضا-زمان ناجابجایی چنین برخوردی در

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مرتبه درختی ممکن است بررسی این برهمکنش می‌تواند به تعیین ویژگی‌های فضا-زمان ناجابجایی کمک کند.

فضا-زمان ناجابجایی

ایده فضا-زمان ناجابجایی به زمان هایزنبرگ برمی‌گردد[۲]. پس از هایزنبرگ، اشنایدر در دهه ٤٠ میلادی به گسترش این نظریه پرداخت. در ادامه این نظریه مورد استقبال واقع نشد تا اینکه در دهه ۹۰ میلادی نظریه ریسمان پیش‌بینی کرد که سر ریسمانهای قرار گرفته بر روی دو شامه، جابجاپذیر نیستند و ایده ناجابجایی فضا-زمان دوباره مورد توجه قرار گرفت.

رابطه جابجایی مختصات فضا-زمان عبارت است از:

$$[\hat{x}^{\mu}.\hat{x}^{\nu}] = i\theta^{\mu\nu} = i\frac{c^{\mu\nu}}{\Lambda_{NC}^{2}} \qquad (۱)$$

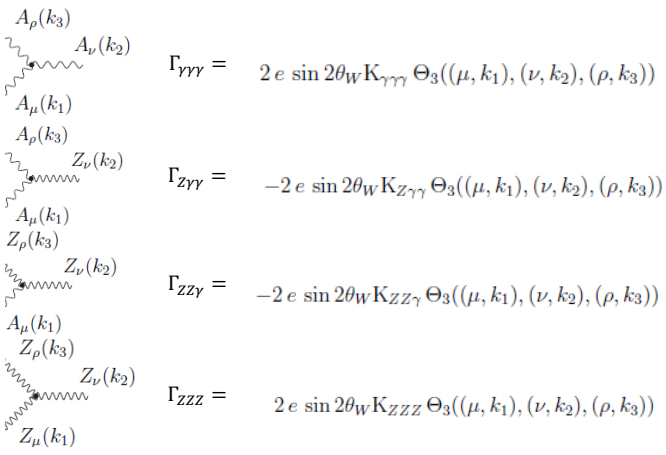
علامت کلاه برروی مختصات فضا-زمانی نشان دهنده عملگرشدن این کمیت‌ها در فضا-زمان ناجابجایی است[۲]. در رابطه (۱)، $\theta^{\mu\nu}$ پارامتر ناجابجایی نامیده می‌شود که تانسوری است ثابت، حقیقی، پادمتقارن و دارای بعد مربع طول. مقیاس انرژی ناجابجایی Λ_{NC} به صورت $\Lambda \equiv (\sqrt{\theta})^{-1}$ تعریف می‌شود. انتظار می‌رود اثرات فضا-زمان ناجابجایی در این مقیاس مشاهده شود. بطور کلی این مقیاس نامشخص است اما می‌توان در آزمایش‌های برخوردی و با استفاده از سیگنال‌هایی که فضا-زمان ناجابجایی فراهم می‌کند حد پایین برای این مقیاس استخراج کرد. $c^{\mu\nu}$ یک ماتریس پادمتقارن با مقدار ثابت c است که یک جهت مرجح در فضا-زمان ایجاد کرده و منجر به شکست تقارن لورنتس می‌شود. این تانسور پادمتقارن مشابه تانسور الکترومغناطیس $F^{\mu\nu}$ است و می‌توان عناصر آن را بصورت $c^{\mu\nu} = (c^{0i}.c^{ij})$ با $i.j = 1.2.3$ نوشت. ضرایب تانسور $c^{\mu\nu}$ بدون بعد هستند و می‌توان آنها را با سه بردار E_i مشابه با میدان‌های الکتریکی و سه بردار B_i مشابه با میدان‌های مغناطیسی به صورت زیر نوشت:

$$c^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 0 & -E^1 & -E^2 & -E^3 \\ E^1 & 0 & -B^3 & B^2 \\ E^2 & B^3 & 0 & -B^1 \\ E^3 & -B^2 & B^1 & 0 \end{pmatrix}$$

برای نوشتن نظریه ناجابجایی لازم است توابع معمولی را با توابع ناجابجایی و ضرب معمولی را با ضرب ستاره جایگزین کنیم. انجام این کار ما را با مشکلاتی از قبیل کوانتش بار و تعریف گروه پیمانه-ایی مواجه می‌کند[۳و٤]. برای رفع این مشکلات دو روش ارایه شده است. روش اول که به نگاشت سایبرگ-ویتن معروف است دارای گروه پیمانه‌ایی مدل استاندارد است و میدان‌های ناجابجایی برحسب میدان‌های معمولی بسط داده می‌شوند[۵]. در روش دوم، گروه تقارنی به گروه $U_*(3)\times U_*(2)\times U_*(1)$ بسط داده شده و سپس با دوبار استفاده از مکانیزم هیگز به گروه مدل استاندارد برگردانده می‌شود[٦]. $U_*(N)$ نسخه ناجابجایی U(N) معمولی است که با قرار دادن ضرب ستاره بین توابع ماتریسی بدست امده است.

در هر دو روش راس‌های برهمکنش تصحیحاتی از فضا-زمان ناجابجایی به‌دست می‌آورند. علاوه بر آن برخی برهمکنش‌های جدید ظاهر می‌شود. در ادامه قصد داریم دامنه پراکندگی برهمکنش $\gamma\gamma \to ZZ$ را در در فضا-زمان ناجابجایی و با استفاده از نگاشت سایبرگ-ویتن محاسبه کنیم.

همان‌طور که گفته شد راس‌های جدیدی در فضا-زمان ناجابجایی ظاهر می شوند که می‌توان برهمکنش سه‌گانه بوزون‌های پیمانه‌ایی مانند راس‌های $\gamma\gamma\gamma$ ، $\gamma\gamma Z$، γZZ و ZZZ را نام برد[۷]:



(۲)

جایی که $\mathrm{K_{abc}}$ ضرایب ثابت هستند [۷] و Θ_3 عبارت است از:

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

$$\Theta_3((\mu,k_1),(\nu,k_2),(\rho,k_3)) = -\theta^{\mu\nu}[k_1^\rho(k_2k_3)-k_2^\rho(k_1k_3)]$$
$$+(\theta k_1)^\mu[g^{\nu\rho}(k_2k_3)-k_2^\rho k_3^\nu]-(\theta k_1)^\nu[g^{\rho\mu}(k_2k_3)-k_2^\rho k_3^\mu]$$
$$-(\theta k_1)^\rho[g^{\mu\nu}(k_2k_3)-k_2^\mu k_3^\nu]+(k_1\theta k_2)[k_3^\mu g^{\nu\rho}-k_3^\nu g^{\rho\mu}]$$
$$+\text{cyclical permutations of } (\mu_i,k_i)\,.$$

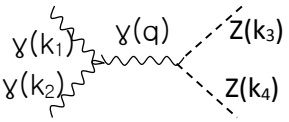
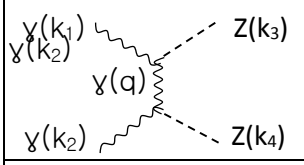
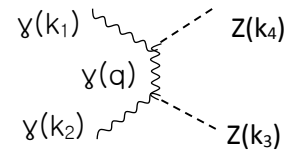
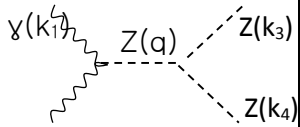
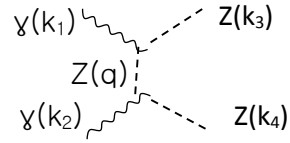
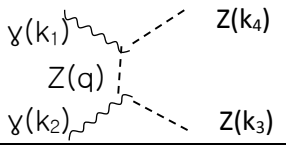
(۳)

در ادامه با استفاده از این راس‌های جدید، سطح مقطع دیفرانسیلی $\gamma\gamma \to ZZ$ را محاسبه می‌کنیم.

پراکندگی $\gamma\gamma \to ZZ$ در فضا-زمان ناجابجایی

باتوجه به راس‌های جدید ارائه شده در رابطه (۲)، شش نمودار فاینمن برای برهمکنش $\gamma\gamma \to ZZ$ وجود دارد که در جدول ۱ نشان داده شده است. این برهمکنش‌ها شامل سه کانال s، t و u است که با وساطت فوتون و Z انجام می‌شوند.

جدول ۱: دیاگرام های فاینمن و دامنه‌های متناظر آنها

	$M_{s\gamma} = M_{s\gamma}(\gamma\gamma \to ZZ)$
	$M_{t\gamma} = M_{t\gamma}(\gamma\gamma \to ZZ)$
	$M_{u\gamma} = M_{u\gamma}(\gamma\gamma \to ZZ)$
	$M_{sZ} = M_{s\gamma}(\gamma\gamma \to ZZ)$
	$M_{tZ} = M_{t\gamma}(\gamma\gamma \to ZZ)$
	$M_{uZ} = M_{u\gamma}(\gamma\gamma \to ZZ)$

بنابراین دامنه پراکندگی عبارت است از:

$$M_{tot} = M_{s\gamma} + M_{t\gamma} + M_{u\gamma} + M_{sZ} + M_{tZ} + M_{uZ} \quad (٤)$$

.با استفاده از راس‌های ارائه شده در معادله (۲)، دامنه‌های پراکندگی بصورت زیر هستند:

$$M_{s\gamma} = \varepsilon^*_\mu(k_2)\Gamma^{\mu\nu}_{\gamma\gamma\gamma}\varepsilon_\nu(k_1)S_\gamma(q^2)\varepsilon^*_\alpha(k_4)\Gamma^{\alpha\beta}_{\gamma zz}\varepsilon_\beta(k_3)$$
$$M_{t\gamma} = \varepsilon^*_\mu(k_3)\Gamma^{\mu\nu}_{\gamma\gamma z}\varepsilon_\nu(k_1)S_\gamma(q^2)\varepsilon^*_\alpha(k_4)\Gamma^{\alpha\beta}_{\gamma\gamma z}\varepsilon_\beta(k_2)$$
$$M_{u\gamma} = \varepsilon^*_\mu(k_4)\Gamma^{\mu\nu}_{\gamma\gamma z}\varepsilon_\nu(k_1)S_\gamma(q^2)\varepsilon^*_\alpha(k_3)\Gamma^{\alpha\beta}_{\gamma\gamma z}\varepsilon_\beta(k_2)$$
$$M_{sZ} = \varepsilon^*_\mu(k_2)\Gamma^{\mu\nu}_{\gamma\gamma z}\varepsilon_\nu(k_1)S_z(q^2)\varepsilon^*_\alpha(k_4)\Gamma^{\alpha\beta}_{zzz}\varepsilon_\beta(k_3)$$
$$M_{tZ} = \varepsilon^*_\mu(k_3)\Gamma^{\mu\nu}_{\gamma zz}\varepsilon_\nu(k_1)S_z(q^2)\varepsilon^*_\alpha(k_4)\Gamma^{\alpha\beta}_{\gamma zz}\varepsilon_\beta(k_2)$$
$$M_{uZ} = \varepsilon^*_\mu(k_4)\Gamma^{\mu\nu}_{\gamma zz}\varepsilon_\nu(k_1)S_\gamma(q^2)\varepsilon^*_\alpha(k_3)\Gamma^{\alpha\beta}_{\gamma zz}\varepsilon_\beta(k_2) \quad (٥)$$

جایی که $S_{\gamma/z}(q^2)$ انتشارگر ذره واسطه (فوتون و بوزون Z) با چارتکانه q و k_i و $\varepsilon_\alpha(k_i)$ به ترتیب چارتکانه‌ها و چاربردارهای قطبش مربوط به بوزون‌های اولیه و نهایی هستند.

سطح مقطع پراکندگی دو ذره به دو ذره در چارچوب مرکز جرم عبارت است از [۸]:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{16\pi^2}\frac{|\overrightarrow{k_1}|}{E_{cm}(2s)}|M|^2 \quad (٦)$$

پس از محاسبه دامنه پراکندگی کل، مجذور دامنه پراکندگی را محاسبه کرده و در رابطه (٦) قرار می‌دهیم. محاسبه دامنه و مجذور آن بسیار طولانی و دارای تعداد جملات زیادی است. برای انجام محاسبات از نرم‌افزار FORM، [۹] استفاده شده است. (علت استفاده از این نرم‌افزار سرعت بالای آن در انجام محاسبات است.)

با توجه به اینکه فضا-زمان ناجابجایی تقارن لورنتس را نقض می‌کند انتظار می‌رود وابستگی سمتی سطح مقطع پراکندگی که در مدل استاندارد دارای تقارن است شکسته شود. سطح مقطع دیفرانسیلی پراکندگی برحسب زاویه سمتی φ در شکل ۱ رسم شده است. برای رسم این نمودار مقدار انرژی مرکز جرم 1000 GeV و مقیاس ناجابجایی $\Lambda_{NC} = 1000$ GeV قرار داده شده است. از آنجا که در مدل استاندارد تقارن سمتی وجود دارد هرگونه انحراف از این تقارن به شناخت ویژگی‌های فضا-زمان ناجابجایی کمک می‌کند.

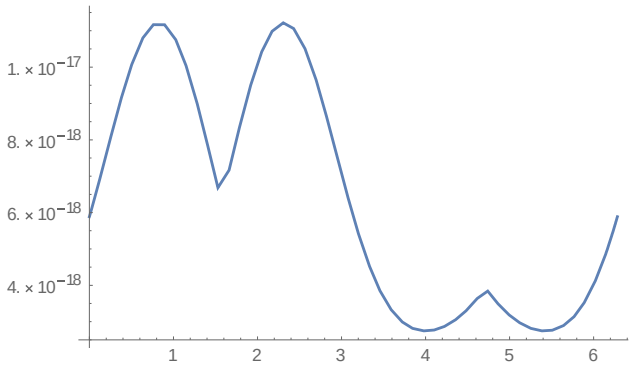
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

نتیجه گیری

در این مقاله به بررسی پراکندگی $\gamma\gamma \to ZZ$ در فضا-زمان ناجابجایی پرداختیم. این پراکندگی در مدل استاندارد در مرتبه حلقه رخ می‌دهد در حالیکه به دلیل ویژگی‌های فضا-زمان ناجابجایی، در این نظریه در مرتبه درختی می‌تواند انجام شود. چنین فرایندهایی برای بررسی ویژگی‌های نظریه ناجابجایی مفید هستند.

با معرفی راسهای برهمکنش در فضا-زمان ناجابجایی دیاگرام‌های فاینمن برهمکنش $\gamma\gamma \to ZZ$ را معرفی کرده و دامنه پراکندگی را محاسبه نمودیم. با استفاده از ویژگی فضا-زمان ناجابجایی که منجر به شکست تقارن لورنتس می‌شود در شکل ۱ نشان داده‌ایم که سطح مقطع پراکندگی تقارن سمتی ندارد.

درکار حاضر سهم عناصر زمان‌گونه و فضاگونه از ماتریس $c^{\mu\nu}$ را یکسان انتخاب کردیم. بررسی سهم این عناصر بطور جداگانه و بررسی تاثیر آنها در فرایند پراکندگی می تواند به فهم بیشتر از فضا-زمان ناجابجایی کمک کند که در کارهای آتی مورد بررسی قرار خواهد گرفت.



شکل ۱: سطح مقطع دیفرانسیلی (محور عمودی) بر حسب زاویه سمتی(زاویه فی- محور افقی)

مرجع‌ها

[1] Massó, Eduard. "An effective guide to beyond the standard model physics." *Journal of High Energy Physics* 1410 *(2014) 128.*

[2] F. Riad, M.M. Sheikh-Jabbari ; "Noncommutative QED and Anomalous Dipole Moments" ; *JHEP 0008(2000) 045 [hep- th/0008132]*.

[3] M. Hayakawa; "Perturbative Analysis on Infrared Aspects of Noncommutative QED on R**4"; *Phys. Lett. B 478(2000) 394 [hep-th/9912094*]

[4] M. Chaichian, et. al; "Noncommutative Gauge Field Theories: A No Go Theorem"; *Phys. Lett. B 526(2002) 132 [hep-th/0107037]*.

[5] X. Calmet, et. al; "The Standard Model on NonCommutative Space-Time"; *Eur. Phys. J. C 23(2002) 363 [hep-ph/0111115]*.

[6] M. Chaichian, et. al; "Noncommutative Standard Model: Model Building"; E*ur. Phys. J. C 29(2003*) *413-432.*

[7] Melic et. al; "The Standard Model on Non-Commutative Space-Time: Electroweak Currents and the Higgs Sector"; *Eur. Phys. J C 42(2005) 483-497 [hep-ph/0502249]*

[8] F. Halzen, A. D. Martin, "Quarks and Leptons: "An introductory course in Modern particle Physics", *Wiley, 1984.*

[9] https://www.nikhef.nl/~form/

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

تاثیر میدان تبادلی زیمانی بر رسانش ابررسانای عادی متصل شده به نانوسیم

امامی پور ، حمیدرضا

دانشکده علوم پایه، گروه فیزیک، دانشگاه ایلام

چکیده

در این مقاله رسانش تونلی یک اتصال، شامل نانوسیم و ابررسانای یکتایی موج s-در حضور میدان تبادلی زیمانی مورد مطالعه قرار می گیرد. نتایج به دست آمده از محاسبات عددی، وجود قله های مخصوصی را نشان می دهند. یک تابع موثر را با استفاده از فاصله میان این قله ها تعریف می کنیم و نشان می‌دهیم که تابع موثر با میدان تبادلی زیمانی به طور یکنواخت کاهش می یابد. همچنین رسانش در ناحیه زیر گاف، با افزایش شدت پتانسیل اتصال تضعیف می‌شود به گونه‌ای که در شدت پتانسیل‌های بالا رسانش در ناحیه زیر گاف به سمت صفر میل می‌کند. همچنین در حد پتانسیل بزرگ، طیف رسانش با چگالی حالتهای ابررسانایی مساوی شده و شکافتگی زیمانی را بازتاب می‌دهد. این نتایج، بر خلاف نتایج مربوط به رسانش ابررسانا های غیر عادی که در مرجع {Physica B 493 (2016) 81 } مطالعه شده است، می باشد و رهیافتی را برای محاسبه میدان زیمانی ارائه می‌دهد.

واژه های کلیدی: *نانو سیم ، ابررسانای عادی.*

Effect of Zeeman-exchange Field on Conductance of a Conventional Superconductor Connected to a Nano-wire

Emamipour, Hamidreza

Department of Basic Science, Physics Group, University of Ilam, Ilam,

Abstract

In this paper, we study tunneling conductance in a junction including a nano-wire and spin-singlet s-wave superconductor at the presence of a Zeeman exchange field. The obtained conductance-spectra from numerical calculations, shows special peaks. We define an effective gap function by using the difference between the peaks and show that effective gap decreases with increase of Zeeman exchange field. Also, in sub-gap region the conductance is suppressed by increase of potential strength such that at high potential barrier, the conductance in sub-gap region goes to zero. Also, at high potential barrier the conductance reflects the superconducting density of state with Zeeman splitting. These results are against of results for unconventional superconductors which we studied in {Physica B 493 (2016) 81} and present an approach for calculating Zeeman exchange field.

***Keywords**: Nano wire, conventional superconductor*
PACS No. 70, 72, 74

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مقدمه

یک خصوصیت اساسی نانوسیم ها رسانایی الکتریکی می باشد که با اعمال اختلاف پتانسیل الکتریکی در دو انتهای این ساختارها و در امتداد طولیشان انتقال بار الکتریکی اتفاق می‌افتد. از دیگر ویژگی‌های نانوسیم ها می‌توان به نسبت بالای طول به قطر آنها اشاره کرد. نانو سیم های فلزی در نانو قطعات الکترونیکی و الکتریکی به عنوان اتصال دهنده به کار می روند. بلندی، انعطاف پذیری و استحکام این نانو سیم ها خصوصیات ویژه ای را به آنها می بخشد. این نانوساختارها به دلیل خواص ویژه ای که دارند نویدبخش کارهای زیادی در قطعات الکترونیکی اند. برای سالیان طولانی ابررسانایی و فرومغناطیس به صورت دو پدیده ضد هم شناخته می شدند. دلیل این امر به چگونگی قطع مغناطیسی، در مواد فرومغناطیس و چگونگی نقش جفت‌های کوپر در مواد ابررسانا برمی‌گردد. به عبارت دیگر در مواد فرومغناطیس، اسپین الکترون ها همگی در یک جهت مشخص قرار می گیرند در حالی که در یک جفت کوپر الکترون ها با اسپین های خلاف جهت یکدیگر قرار می‌گیرند. اما این دیدگاه کلاسیک، از نحوه همزیستی میان ابر رسانایی و فرومغناطیس در سال‌های ۲۰۰۰ و ۲۰۰۱ میلادی از بین رفت . در این سالها به فاصله حدود ۱۳ ماه ، مجله نیچر سه مقاله را به چاپ رساند که در آنها وقوع ابر رسانایی، در سه ماده فرومغناطیس به اثبات رسید (۳-۱). این مواد به ابررساناهای فرومغناطیس معروف شدند. مهمترین سوال درباره ابررساناهای فرومغناطیس به نوع تقارن جفتهای کوپر در آنها بر می‌گردد. یکی از تقارن های پیشنهاد شده برای این ابر رسانا ها، تقارن اسپین یک تایی موج s- می باشد که شواهد بسیاری برای وجود چنین تقارنی در ابر رساناهای فرومغناطیس ارائه شده است. طیف سنجی تونلی می‌تواند ابزاری مهم در تشخیص نوع تقارن چنین ابررساناها یی باشد. نظریه مربوط به طیف سنجی تونلی ابررساناهای فرومغناطیس در سال ۲۰۰۷ برای اولین بار توسط تاناکا در دمای صفر ارائه شد و پس از آن، به دمای مخالف صفر آن را تعمیم دادیم (٤). در این مقاله طیف سنجی تونلی را برای اتصال ابررسانایی –نانو سیم فلزی در حضور میدان تبادلی زیمانی به کار می‌بریم و منحنی های رسانش را بر حسب ولتاژ اعمال شده به دست می آوریم. با اعمال شرایط مرزی در اتصال، ضرایب بازتاب آندریف و نرمال را محاسبه می‌کنیم و با قرار دادن روابط به دست آمده در فرمول ارائه شده توسط نظریه BTK (۵،٦) در حضور قطبش اسپینی برای اتصال و وارد کردن تابع توزیع فرمی–دیراک، در نهایت رسانش تونلی را به دست می آوریم و در آخر به بیان نتایج حاصل شده می‌پردازیم .

فرمول بندی

در ابتدا از معادلات بوگولیوبوف دی ژن اسپینی که به فرم زیر هستند شروع می کنیم (۷،۸):

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_{\vec{k}} + \vec{h}.\vec{\sigma} & \Delta(\vec{k}) \\ -\Delta^*(-\vec{k}) & -\varepsilon_{\vec{k}} - \vec{h}.\vec{\sigma} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{u}_\sigma \\ \vec{v}_\sigma \end{pmatrix} = E_\sigma \begin{pmatrix} \vec{u}_\sigma \\ \vec{v}_\sigma \end{pmatrix} \quad (۱)$$

که در اینجا $\varepsilon_{\vec{k}}$ برانگیختگی های انرژی تک ذره‌ای است که نسبت به سطح فرمی سنجیده می‌شود. $\vec{h}$ نیز میدان تبادلی ابررسانا می باشد که برای سادگی یکنواخت و در راستای z فرض می شود. $\vec{\sigma}$ نیز ماتریس های پائولی هستند. حالت اسپین یکتایی موج-s با رابطه $\Delta(\vec{k}) = i\Delta\sigma_y$ تعریف می‌شود. از حل معادله (۱) ویژه مقادیر و ویژه بردار های متناظر برای مورد اسپینی یکتایی موج s-به صورت زیر به دست می آید:

$$E_\pm(\vec{k}) = \pm\sqrt{\varepsilon_{\vec{k}}^2 + |\Delta|^2} \pm h \quad (۲)$$

$$u_{-\sigma\sigma} = \sqrt{\frac{1}{2}\left(1 + \frac{\sqrt{(E_\sigma - \sigma h_s)^2 - |\Delta|^2}}{E_\sigma - \sigma h_s}\right)}, \sigma = \pm \quad (۳$$

$$v_{-\sigma\sigma} = \sqrt{\frac{1}{2}\left(1 - \frac{\sqrt{(E_\sigma + \sigma h_s)^2 - |\Delta|^2}}{E_\sigma + \sigma h_s}\right)}, \sigma = \pm \quad (٤$$

حال برای محاسبه رسانش با استفاده از نظریه BTK ، ضریب بازتاب آندریف و ضریب بازتاب عادی را به دست می آوریم. الکترونهای فرودی به داخل ناحیه ابررسانا به صورت شبه ذرات الکترونی و شبه ذرات حفره‌ای منتشر می‌شوند. از حل معادله (۱) ، تابع موج نانو سیم

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

(فلز نرمال یک بعدی) به پهنای L با جایگذاری $|\Delta| = 0$ در آن به شکل زیر حاصل می شود:

$$\psi_N^{\sigma} = \sqrt{\frac{2}{L}}\cos(\frac{\pi}{L})\Big(a_{\sigma}\exp(ixq_x)^{x\ \ \ \sigma\ \ \ \ \ x)}\Big) \quad (۵)$$

که در آن a_σ و b_σ ضرایب بازتاب آندریف و عادی هستند و تابع موج برای پایین ترین تراز کوانتومی نانوسیم نوشته شده است و عدد موج q_x برای پایین تراز به صورت $q_x \quad {}^{2}_{F} \quad {}^{2}/\ {}^{2\ 1/2}$ می باشد. تابع موج ناحیه ابررسانا در حضور میدان تبادلی با جایگذاری $|\Delta| = \Delta_0$ در معادله (۱) به شکل زیر می باشد:

$$\psi_{FS}^{\sigma} = \begin{pmatrix} u_{-\sigma\sigma} \\ v_{-\sigma\sigma} \end{pmatrix} C_\sigma \int_{-k_F}^{k_F} d\lambda \exp(iy\lambda + ix(k_F^2 - \lambda^2)^{1/2}) + \begin{pmatrix} v_{-\sigma\sigma} \\ u_{-\sigma\sigma} \end{pmatrix} D_\sigma \int_{-k_F}^{k_F} d\lambda \exp(iy\lambda - ix(k_F^2 - \lambda^2)^{1/2}) \quad (۶)$$

با اعمال شرایط مرزی به صورت $\quad {}^{N} \quad {}^{FS}$ و $= z\psi_N^{\sigma}(x=0) \quad -\frac{d\psi_{FS}^{\sigma}}{dx}| \quad \frac{d\psi_N^{\sigma}}{dx}|_x$ ضرایب a_σ و b_σ به دست آمده سپس با جایگذاری در رابطه $G_{FS}^{\pm} = 1 - |b_\pm|^2 + |a_\pm|^2$ رسانش اتصال برای اسپین های بالا و پایین $\sigma = \pm$ از رابطه زیر به دست می آید:

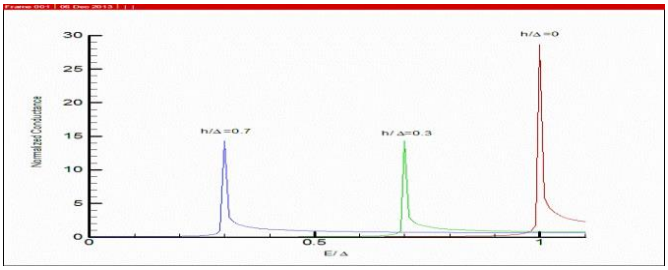
$$G_{FS}^{\pm} = \begin{cases} \frac{4|E \pm h_s|\gamma_1 F_0}{(F_0^2+\gamma_1^2+z^2)\sqrt{(E\pm h_s)^2 - |\Delta_0|^2 + 2(E\pm h_s)\gamma_1 F_0}} & |E \pm h_s| > \Delta_0 \\ \frac{8\Delta_0^2 F_0^2 \gamma_1^2}{4(E\pm h_s)^2\gamma_1^2 F_0^2 - (\Delta_0^2 - (E\pm h_s)^2)(F_0^2+\gamma_1^2+z^2)^2} & |E \pm h_s| < \Delta_0 \end{cases} \quad (۷)$$

در رابطه بالا h_s و Δ_0 به ترتیب شدت میدان تبادلی ناحیه ابررسانا و گاف ابررسانایی را مشخص می کنند و $\quad {}^{F} \quad {}^{1}$ و F_0 نیز به صورت $F_0 = 4/\pi^2 \int_{-\gamma_1}^{\gamma_1} d\lambda \frac{{}^{2}_{1} \quad {}^{2\ 1/2}}{(1-\lambda^2)^2}\cos^2(\pi\lambda/2)$ به دست می آید.

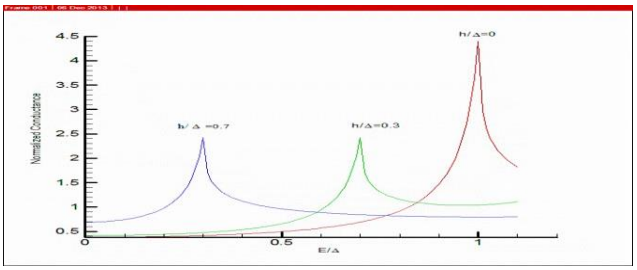
رسانش بهنجار شده را از رابطه $G = (G_{FS} + G_{FS})/G_{NN}$ به دست می آوریم که در آن G_{NN} رسانش اتصال در غیاب ابررسانا بوده و به شکل زیر تعریف میشود:

$$G_{NN} = 4F_0\gamma_1/(z^2 + (\gamma_1 + F_0)^2) \quad (۸)$$

در این رابطه z نیز شدت پتانسیل اتصال را مشخص می کند.



شکل ۱: رسانش بهنجار شده به ازای Z=10



شکل ۲: رسانش بهنجار شده به ازای Z=3

نتایج عددی:

شکل ۱ رسانش تونلی بهنجارشده را به ازای Z=10 و شکل ۲ رسانش تونلی را به ازای Z=3 در میدان های تبادلی مختلف نشان می‌دهد. در اینجا Z پارامتری است که شدت اتصال را نشان می‌دهد. اولین نکته‌ای که از این شکلها فهمیده می‌شود در خصوص مکان پیکها می باشد. اگر فاصله پیکها تا مبدا را با یک گاف موثر Δ_{eff} نشان دهیم متوجه می‌شویم که مکان پیکها از رابطه $\Delta_{eff}/|\Delta| = 1 - h/|\Delta|$ تبعیت می‌کند، یعنی با افزایش میدان تبادلی ابررسانا، گاف موثر به صورت خطی کاهش می‌یابد . لذا این نکته، روشی را برای اندازه گیری میدان تبادلی ابررسانا پیشنهاد میکند. اندازه گیری میدان های تبادلی مواد

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مختلف، بخصوص به لحاظ کاربردهای متفاوت در اسپینترونیک، از اهمیت زیادی برخوردار است و بنابراین منحنی‌های رسانش به دست آمده، می توانند برای این منظور به کار برده شوند.

نکته دیگر در خصوص منشاء پیک ها می باشد. این‌که منشاء آنها را بفهمیم روابط ۱۰ و ۱۱ را در $\frac{h}{\Delta}=0$ دقیق‌تر بررسی می‌کنیم. از رابطه ۱۰ ملاحظه می شود که در $\frac{E}{\Delta}=1$ و $\frac{h}{\Delta}=0$ مقدار G_{FS} برابر مقدار ثابت دو می‌شود در حالی که همان گونه که از رابطه ۱۱ ملاحظه می شود، مقدار G_{NN} با افزایش Z بسیار کوچک می‌شود . از آنجایی که رسانش بهنجارشده در شکل های ۱ و ۲ به صورت $G=(G_{FS}^{+}+G_{FS}^{-})/G_{NN}$ تعریف شده است لذا در Z های بزرگ، G متناسب با Z^2 رفتار می کند. به همین علت است که ارتفاع پیک ها در شکل یک بزرگتر از شکل ۲ می باشد. از طرف دیگر همانگونه که می دانیم چگالی حالتهای ابررسانایی به ازای $E>\Delta$ برابر $\frac{|E|}{\sqrt{E^2-\Delta^2}}$ و به ازای $E<\Delta$ برابر صفر می باشد. به عبارت دیگر شکل ۱ می‌دهد هرگاه شدت پتانسیل اتصال بزرگ باشد چگالی حالت های ابر رسانا و طیف رسانش بر هم منطبق می شوند. این نکته به صورت تحلیلی از روابط ۱۰ و ۱۱ نیز می‌توان به دست آورد. رابطه ۱۱ نشان می دهد که به ازای $Z>>1$ مقدار G_{NN} تقریباً برابر $G_{NN}=4F_0\gamma_1/z^2$ می‌شود و مقدار G_{FS} نیز به ازای $Z>>1$ برای اسپین های بالا و پایین ، برابر رابطه زیر می گردد:

$$G_{FS}=\begin{cases}\frac{4|E\pm h|\gamma_1 F_0}{Z^2\sqrt{(E\pm h)^2-|\Delta|^2}} & |E\pm h|>\Delta \\ \frac{8\Delta^2 F_0^2\gamma_1^2}{Z^4(\Delta^2-(E\pm h)^2)} & |E\pm h|<\Delta\end{cases} \qquad (۱۲$$

بنابراین در انرژی های بالای گاف، رسانش برابر چگالی حالت های ابر رسانا و در انرژی های زیر گاف متناسب با یک بر روی Z^2 رفتار می‌کند که این بررسی تحلیلی با نتایج عددی ارائه شده در شکل های ۱ و ۲ کاملاً سازگار می باشد.

نتیجه گیری

به طورخلاصه، در این مقاله به مطالعه رسانش تونلی در اتصال نانو سیم فلزی و ابررسانای موج s- در حضور میدان تبادلی پرداختیم. نتایج به دست آمده نشان می دهند که منحنی های رسانش می توانند به عنوان ابزاری جهت اندازه گیری میدان تبادلی ابررسانا مورد استفاده قرار گیرند. ضمن آنکه هنگامی که شدت پتانسیل اتصال بالا می‌باشد منحنی های رسانش چگالی حالتهای کوانتومی ابررسانا را بازتاب می دهند. این نتایج ، برخلاف نتایجی است که ما برای اتصال نانوسیم به ابررسانای موج d-که در مرجع [۹] مورد مطالعه قرار دادیم، می باشد.

مرجع‌ها

[1] Saxenna, S.S., et al., 2000. “Superconductivity on theborder of itinerant-electron ferromagnetism in UGe2”. *Nature* (London) 406, 587.

[2] Pfleiderer, C., et al., 2001. “Coexistence of superconductivity and ferromagnetism in the d-band metal ZrZn2”. *Nature* (London) 412, 58.

[3] Aoki, D., et al., 2001. “superconductivity and ferromagnetism in URhGe”. *Nature* (London) 413 , 613.

[4] Emamipour, H., and Abolhasani, M., 2010. “The conductance tunneling for a junction between a metal and a ferromagnetic superconductor at finite temperature”. *Superconductivity. Sci. Technol*.23 ,105001.

[5] Blonder, G.E., et al., 1982. “transition from metallic to tunneling regimes in superconducting micro-constrictions: Exess current, charge imbalance, and supercurrent conversion”. *Phys. Rev*. B22, 4515.

[6] Tanaka, Y., and Kashiwaya, S., 1995. *Phys.Rev.Lett*.74, 3451.

[7] Yokoyama, T., and Tanaka, Y., 2007. “Angular dependence of Josephson currents in unconventional superconducting junctions”. *Phys. Rev*. B 75, 132503.

[8] Powell, B. J., and Annett, J. F., and Gyorffy, B. L., 2003. ‘’The gap equations for spin singlet and triplet ferromagnetic superconductors’’ J. *Phys. A* 36, 9289.

[9] Emamipour, H, Mehrabzad, N. *Physica B,* ‘’Zeeman effects on the tunneling spectra of a ferromagnetic d-wave superconductor in contact with a quantum wire’’493, 2016 (81-85).

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بررسی پارامترهای موثر بر شفافیت القایی الکترومغناطیسی

نرگس شفیعی موسوی[۱]؛ پرویز پروین[۱] و مریم ایلچی[۲]

[۱]دانشکده مهندسی انرژی و فیزیک، دانشگاه صنعتی امیرکبیر

[۲]پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، پژوهشکده فوتونیک و فناوری‌های کوانتومی

چکیده

جهت بررسی اثر شفافیت القایی الکترومغناطیسی، فوتونیک کریستال Sio_2 در دو حالت آلاییده شدن با نانوکریستال سه ترازه Si و GaAs در نظر گرفته می‌شود. اثر فرکانس رابی میدان کنترلی و غلظت نانو کریستال میدان کاوشگر بر روی شفافیت سیستم بررسی می‌گردد. با انتخاب بالاترین فرکانس رابی میدان کنترلی و کمترین چگالی نانو کریستال، بالاترین عبور میدان کاوشگر حاصل می‌شود. اثر شفافیت در نانوکریستال Si نسبت به GaAs بیشتر است.

واژه های کلیدی: *شفافیت القایی الکترومغناطیسی، فرکانس رابی میدان کنترلی، چگالی نانو کریستال*

Investigating parameters on electromagnetically induced transparency

Shafii mousavi, Narges[1]; Parvin, parviz[1]; Eilchi, Maryam[2]

1 Photonics Engineering Group, Department of Physics, Amirkabir University of Technology

[2] Photonics and Quantum Technologies Research School, Nuclear Science and Technology Research Institute (NSTRI)

Abstract

Here, for investigating electromagnetically induced transparency (EIT) a three-level nanocrystal Si and GaAs doped on phonic crystal Sio_2. Effect of Rabi frequency of control and nanocrystal density on transparency investigated. By selecting the highest Rabi frequency of control pump and the lowest nanocrystal density, the maximum transmission of probe is obtained. The effect of transparency in nanocrystal Si is higher than GaAs.

***Keywords**: Electromagnetically induced transparency (EIT), Rabi frequency of control pump, nanocrystal density*

PACS No. 30

مقدمه

در شفافیت القایی الکترومغناطیسی (EIT) یک محیط کدر بوسیله انتشار دو پرتوی لیزر به محیط شفاف تبدیل می‌شود. چنین پدیده‌ای با بر هم کنش نور و ماده توضیح داده می¬شود. این اثر با تداخل کوانتومی به وجود می‌آید [۱]. شفافیت القایی الکترومغناطیسی پدیده‌ای است که در دو دهه اخیر به علت اثرات جالب در عبور نور و میزان پاشندگی مورد توجه بسیاری از محققان قرار گرفته است [۲]. این پدیده در حضور میدانهای لیزری قوی به نام میدان کنترل، جذب میدان کاوشگر در ماده حذف می¬شود و ماده نسبت به لیزر کاوشگر به صورت شفاف عمل می‌کند [۳].

در این مقاله فوتونیک کریستال Sio_2 در دو حالت آلاییده شدن با نانوکریستال Si یا GaAs در نظر گرفته می‌شود. اثر پارامترهای فرکانس رابی میدان کنترلی و غلظت نانو کریستال بر میزان عبور میدان کاوشگر بررسی می‌شود.

تئوری

تئوری EIT با استفاده از مکانیک کوانتومی بیان می‌شود. سیستم سه تزاره (Λ) با ترازهای ۲،۱ و ۳ در شکل ۱ نشان داده شده است. سیستم

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

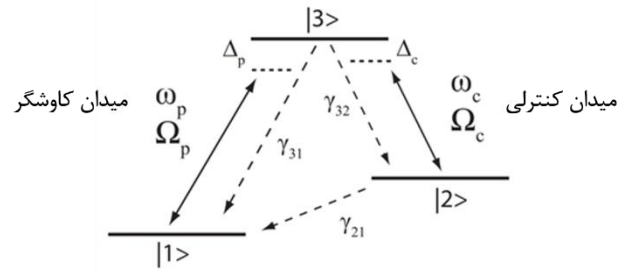
شامل دو تراز پایه $|1\rangle$ و $|2\rangle$ و تراز برانگیخته $|3\rangle$ است. انتقال مابین $|3\rangle \leftrightarrow |1\rangle$ و $|3\rangle \leftrightarrow |2\rangle$ مجاز است درحالیکه $|2\rangle \leftrightarrow |1\rangle$ ممنوع است. برهمکنش اتمها با لیزر با استفاده از فرکانس رابی میدان‌های کنترل (Ω_c) و کاوشگر (Ω_p) به صورت زیر بیان می‌شود:

$$\Omega_p = \frac{\mu_{13}E_P}{2\hbar} \ , \ \Omega_c = \frac{\mu_{23}E_C}{2\hbar} \quad (۱)$$

واکوکی فرکانس میدان‌های کنترل و کاوشگر برحسب به فرکانس های انتقال عبارتند از:

$$\Delta_c = \omega_{32} - \omega_c \ , \ \Delta_p = \omega_{31} - \omega_p \quad (۲)$$

که $\omega_{31} = \omega_3 - \omega_1$ و $\omega_{32} = \omega_3 - \omega_2$ فرکانس زاویه‌ای مابین ترازها را مشخص می‌کند.



شکل ۱: سیستم سه تراز EIT (Λ)، γ_{ij} آهنگ واهلش خودبخودی بین تراز i و j، Δ_p, Δ_c بترتیب واکوکی میدان کنترلی و کاوشگر

تحت تاثیر میدان‌های اعمالی، هامیلتونین سیستم سه ترازه عبارت است از [٤]:

$$H = -\hbar \begin{bmatrix} 0 & 0 & \Omega_p \\ 0 & -(\Delta_p - \Delta_c) & \Omega_c \\ \Omega_p & \Omega_c & -\Delta_p \end{bmatrix} \quad (۳)$$

معادلات آهنگ را می‌توان با استفاده از معادله تعمیم یافته فون – نویمان بدست آورد [۵]:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}[H, \rho] - decay\ terms \quad (٤)$$

تحول زمانی ماتریس چگالی برای سیستم سه ترازه به صورت زیر است [٦]:

$$i\dot{\rho}_{11} = \Omega_p\, \rho_{32} - \Omega_c\, \rho_{21} + \left(\Delta_p + \Delta_c - i\gamma_{13}\right) \rho_{31} \quad (۵)$$

$$i\dot{\rho}_{22} = \Omega_p^* \rho_{31} + \Omega_c\, (\rho_{33} - \rho_{22}) + (\Delta_c - i\gamma_{32})\, \rho_{32} \quad (٦)$$

$$i\dot{\rho}_{21} = \Omega_p\, (\rho_{22} - \rho_{11}) + \left(\Delta_p - i\gamma_{21}\right) \rho_{21} - \Omega_c^*\, \rho_{31} \quad (۷)$$

$$\imath\dot{\rho}_{31} = -\Omega_c\, \rho_{23} + \Omega_c^*\, \rho_{32} - i(\gamma_{32} + \gamma_{31})\rho_{33} \quad (۸)$$

$$i\dot{\rho}_{22} = -\Omega_p \rho_{12} + \Omega_p^* \rho_{21} + \Omega_c \rho_{23} - \Omega_c^* \rho_{32} + i(\gamma_{32} - \gamma_{21})\rho_{22} \quad (۹)$$

$$\rho_{ij} = \rho_{ji}^* \quad (۱۰)$$

$$\rho_{11} + \rho_{22} + \rho_{33} = 1 \quad (۱۱)$$

$$\gamma_{ij} = \gamma_{ji} \quad (۱۲)$$

این معادلات بیانگر تکامل زمانی سیستم هستند و می توانند به صورت عددی حل شود.

بررسی حالت پایا در حالت میدان کاوشگر ضعیف و $\dot{\rho_{13}} = \dot{\rho}_{12} = \dot{\rho_{23}} = 0$ است. همچنین با فرض $|1\rangle$ در حالت اولیه ، $\rho_{11} \cong 1$ در حالیکه عبارت $\rho_{22} \approx \rho_{33} \approx 0$ می‌شود زیرا، $\rho_{11} + \rho_{22} + \rho_{33} = 1$ است. بنابراین عنصر ماتریس چگالی بدست می‌آید:

$$\rho_{13} = \Omega_p \frac{-(\Delta_p - \Delta_c) - i\gamma_{21}}{\Omega_c^2 + (\gamma_{31} - i\Delta_p)(\gamma_{21} - i(\Delta_p - \Delta_c))} \quad (۱۳)$$

پذیرفتاری الکتریکی با استفاده رابطه قطبش محاسبه می‌گردد [۷]:

$$P = N\mu_{13}\rho_{31} = \varepsilon_0 \chi E = \varepsilon_0(\chi' + i\chi'')E \quad (۱٤)$$

که χ' و χ'' بترتیب قسمت حقیقی (فاز) و موهومی (جذب) است. پذیرفتاری الکتریکی برحسب عنصر ماتریس چگالی عبارت است از:

$$\chi = \frac{N\mu_{13}^2 2\rho_{31}}{\varepsilon_0 \hbar \Omega_p} = \frac{N\mu_{13}^2}{\varepsilon_0 \hbar} \frac{-(\Delta_p - \Delta_c) + i\gamma_{21}}{\Omega_c^2 + (\gamma_{31} + i\Delta_p)(\gamma_{21} + i(\Delta_p - \Delta_c))} \quad (۱۵)$$

جذب و عبور با استفاده از روابط زیر بدست می‌آید [۸]:

$$\alpha = Im(\chi) * L \quad (۱٦)$$

$$T = e^{Im(\chi)} \times L \quad (۱۷)$$

که L طول محیط سیستم است.

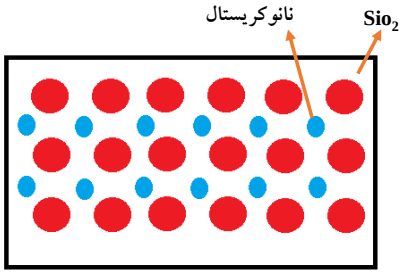
بحث و نتایج

جهت بررسی اثر شفافیت القایی الکترومغناطیسی دو نانوکریستال سه ترازه Si یا GaAs جهت آلاییده شدن در فوتونیک کریستال Sio_2 همانند شکل ۲ در نظر گرفته می‌شود. تاثیر قرکانس رابی میدان کنترلی و غلظت نانو کریستال در میزان عبور میدان کاوشگر با حل عددی معادلات با استفاده از ترم افزر متلب و مقادیر جدول ۱ بررسی می‌گردد.

جدول۱ : پارامترهای نانو کریستال‌های مورد استفاده

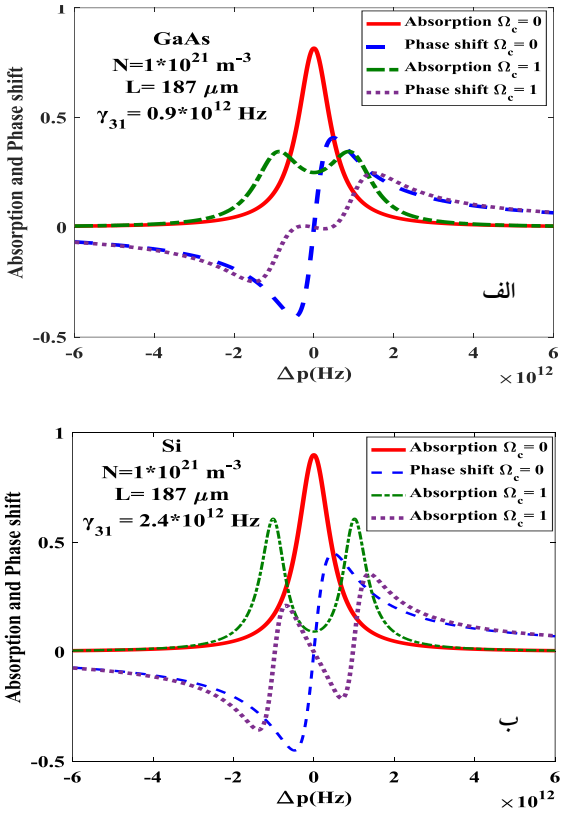
نانو کریستال	L (μm)	γ_{12} (Hz)	γ_{31} (Hz)
Si	187	4.8×10^{11}	2.4×10^{11}
GaAs	187	0.49×10^{12}	0.9×10^{12}

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



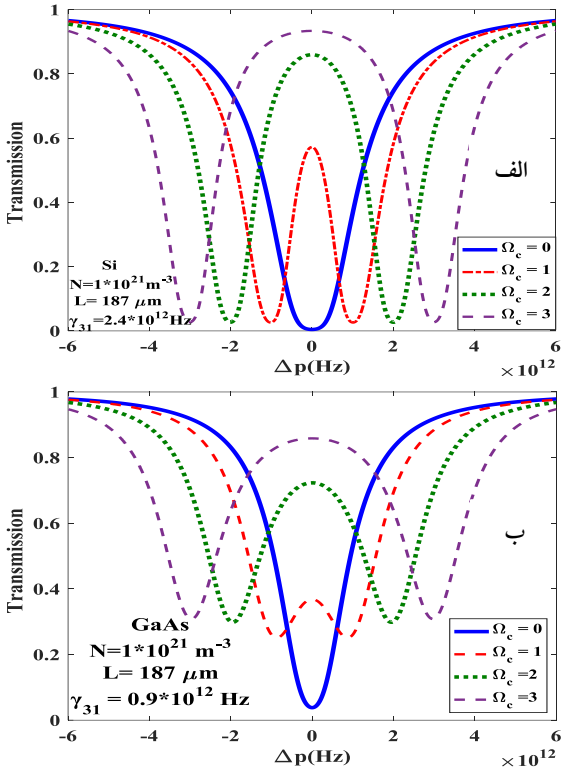
شکل ۲: نمایی از مدل انتخابی

در ابتدا، جذب و تغییرات فاز برحسب واکوکی میدان کاوشگر دو نانوکریستال در حضور و عدم حضور میدان کنترلی در شکل ۳ نشان داده شده است. طیف عبور میدان کاوشگر در حالت عدم حضور میدان کنترل به صورت لورنتسی است و ماکزیمم جذب را نشان می‌دهد. طیف تغییرات فاز تنها یک قله و دره دارد. از طرف دیگر، در حضور میدان کنترل، طیف عبور کاوشگر به علت اثر آلتر-تاتز به دو دسته تقسیم می‌شود. همچنین طیف تغییرات فاز دارای دو بیشینه و کمینه است.



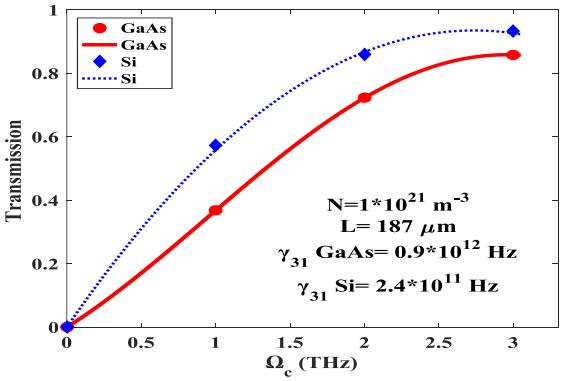
شکل ۳: جذب و تغییرات فاز برحسب واکوکی میدان کاوشگر، الف) GaAs، ب) Si

در حضور میدان کنترلی بیشترین میزان عبور میدان کاوشگر مربوط به Si است. اثر تغییرات فرکانس رابی میدان کنترلی از صفر تا سه تراهرتز برحسب واکوکی میدان کاوشگر در شکل ٤ نشان داده شده است. افزایش Ω_c سبب پهنای باند طیف عبوری می‌شود.



شکل ٤: طیف میدان کاوشگر بر حسب تغییرات فرکانس رابی میدان کنترل، الف) GaAs، ب) Si

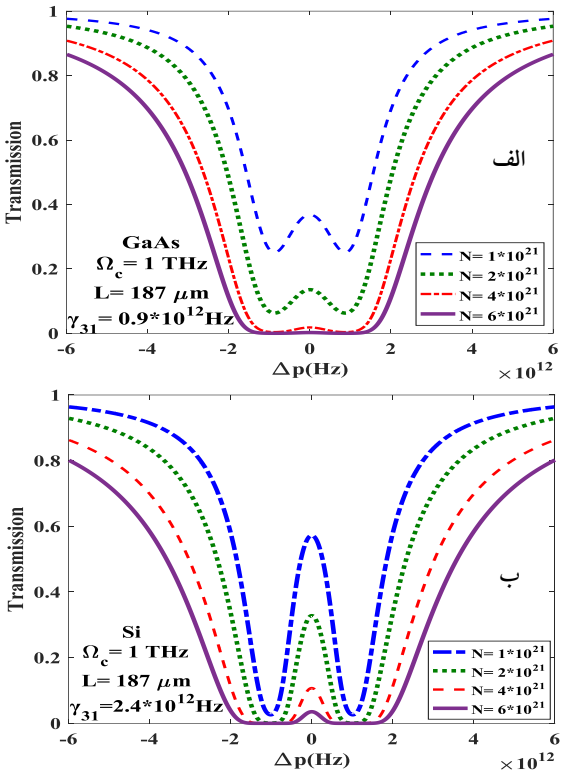
مطابق شکل ۵، تغییرات میزان عبور میدان کنترل نسبت به افزایش Ω_c صعودی است و به ماکزیمم شفافیت نزدیک می‌شود.



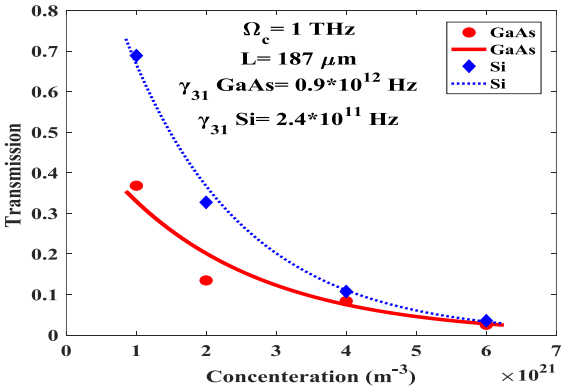
شکل ۵: میزان عبور میدان کاوشگر بر حسب فرکانس میدان کنترلی

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

شفافیت میدان کاوشگر در Si نسبت به GaAs بیشتر است. تاثیر تغییرات غلظت نانو کریستال Si و GaAs از ۱×۱۰^{۲۱} تا ۶×۱۰^{۲۱} m^{-3} بر روی طیف میدان کاوشگر بر حسب واکوکی میدان کاوشگر در شکل ٦ نشان داده شده است.



شکل ٦: طیف میدان کاوشگر بر حسب تغییرات غلظت نانو کریستال، الف) GaAs، ب) Si



شکل ۷: میزان عبور میدان کاوشگر بر حسب غلظت نانو کریستال

در حضور میدان کنترلی با فرکانس رابی ۱ THz، افزایش غلظت تغییر چندانی در طیف عبور رخ نمی-دهد اما مقدار بیشینه عبور مطابق شکل ٦ و ۷ کاهش می‌یابد و محیط کدر می‌شود.

نتیجه گیری

در حالت کمترین فرکانس رابی میدان کنترلی ، یک پنجره عبور با پهنای باریک ایجاد می‌شود که اساس اثر EIT است.

در حضور میدان کنترلی در سیستم سه ترازه، با افزایش فرکانس رابی میدان کنترل و کاهش غلظت نانو کریستال جذب کاهش می‌یابد وماده نسبت به میدان کاوشگر شفاف تر می‌شود.

برحسب کاربرد اثر شفافیت القایی الکترومغناطیسی می‌توان پس از در نظر گرفتن نانوکریستال مناسب، با انتخاب غلظت و فرکانس رابی کنترل بهیبه به میزان شفافیت دلخواه دست یافت.

مرجع‌ها

1- H. Hamedi, J. Ruseckas,.G. Juzeliunas, " Electromagnetically induced transparency and nonlinear pulse prop[agation in a combined tripod and Λ atom light coupling scheme", 50, *Journal of physics B*,2017, 18.

2- Harris,S.E., Yamamoto, Y., "photon switching by Quantum interference," *Phys.Rev.Lett*., 81(17),3611-3614,1998.

3- Harris SE, Field JE, Imamoglu A."Nonlinear optical processes using electromagnetically induced transparency", *Phys Rev Lett* 1990;64:1107.

4- M.Fleeischhauer, J.Marangoes, "Electromagnetically induced transparency: optics in coherent media", Reveiew of modern physics, **77**,2005,633.

5- Antonios, F.; Andreas, F.T.; Emmanuel, P. Phys. Lett. A 2010, **374**, 3354–3364.

6- JA. Fang, H. Xu, Z. Dai, Z. Jiang," Theoretical study of electromagnetically inducedtransparency in Er^{3+}:$YAlO_3$ crystal", *Physica B*, **328**, 2003,204-210.

7- Peter W. Milonni," Fast light, slow light and left-handed light. Series in optics and optoelectronics", *Institute of Physics Publishing*, 2005.

8- H.Schmidt and R. J.Ram,"All-optical wavelenghth converter and switch based on electromagnetically induced transparency", *Appl.Phys.Lett*.**76**,2000,3173-3175.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بررسی تاثیر غلظت عامل پوششی ال-آلانین بر کیفیت ساختاری و ریخت شناسی نانو ذرات $KTiOPO_4$ سنتز شده به روش هم رسوبی

غریب شاهیان ، الهه[1]

[1]دانشکده فنی دختران سمنان ، دانشگاه فنی حرفه ای ، سمنان

چکیده

نانو ذرات KTiOPO4(KTP) با استفاده از عامل پوششی ال-آلانین و به روش هم رسوبی سنتز گردید. نسبت های مولی ۱:۱، ۱:۲ و ۱:۳ از عامل پوششی برای بررسی اثر غلظت عامل پوششی بر کیفیت ساختاری و ریخت شناسی نانو ذرات سنتز شده مورد استفاده قرار گرفت. طیف سنجی پراش اشعه ایکس وتبدیل فوریه فرو سرخ نشان داد استفاده از عامل پوششی ال-آلانین منجر به چرخش شبکه بلوری می گردد. کوچکترین اندازه دانه بااستفاده از نسبت مولی ۱:۳ از عامل پوششی بدست آمد. استفاده از نسبت مولی ۱:۲ بهترین کیفیت ساختاری را در نانو ذرات سنتز شده نشان داد. آنالیز میکروسکوپ الکترونی رویشی گسترش صفحات بلوری را در نانو ذرات سنتز شده با استفاده از عامل پوششی ال-آلانین نشان داد.

واژه های کلیدی: *پتاسیم تیتانیل فسفات، روش هم رسوبی،عامل پوششی، ال-آلانین، ریخت شناسی، نانو ذرات.*

Study on the effect of L-Alanine concentration as capping agent on structural quality and morphology of KTP nanoparticles synthesized by co-precipitation method

Gharibshahian, Elaheh[1]

[1] *Department of Electrical and Computer Engineering, Faculty of Narjes vocational, Technical and Vocational University, Semnan*

Abstract

KTiOPO4(KTP) nanoparticles have been synthesized by L-Alanine as capping agent by co-precipitation method. 1:1, 1;2 and 1:3 mole ratios of L-Alanine were used. The effect of capping agent concentration on structural quality and morphology of obtained KTP nanoparticles was studied. X-ray spectroscopy and FT-IR analysis were shown using L-alanine as capping agent results in crystal lattice rotation. Smallest grain size was obtained with 1:3 mole ratio of capping agent. Using 1:2 mole ratio of L-Alanine showed the best structural quality of obtained nanoparticles. SEM microscopy showed development of crystal faces in obtained KTP nanoparticles.

***Keywords**: potassium titanyl phosphate, co-precipitation method, capping agent, L-alanine, morphology, nanoparticles*

PACS No. 81

مقدمه

پتاسیم تیتانیل فسفات ($KTiOPO_4$ یا KTP) به عنوان یک بلور نوری غیر خطی مهم و پرکاربرد شناخته می شود. این بلور به طور عمده جهت دو برابر کردن بسامد لیزر Nd:YAG مورد استفاده قرار می گیرد و دارای خواص با ارزشی از جمله پایداری دمایی بالا، مشخصات مکانیکی خوب، عبوردهی در محدوده وسیعی از طول موجها، ضریب غیر خطی بزرگ، آستانه آسیب لیزری بالا و پذیرش زاویه ای وسیع می باشد که آن را ماده ای مناسب برای لیزرهای صنعتی و پزشکی و کاربردهای دیگر ساخته است[۱و۲]. در سالهای اخیر توجه دانشمندان برروی تولیـــــد

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

نانوساختارهای KTP به جهت تولید هارمونیک مرتبه دوم با بازدهی بالا[۳]، همچنین بعنوان موادی مستعد برای غشاهای نانوفیلتری و کاربردهای بیولوژیکی متمرکز شده است[٤]. برای تولید نانوساختارهای KTP روش هایی نظیر پچینی[۱]، سل ژل[٥]، مکانیکی-شیمیایی[٦]، احتراقی[۷] و هم رسوبی[۹و۸] مورد استفاده قرار گرفته اند. در میان روش های بکارگرفته شده به جهت سنتز نانو ذرات KTP، روش هم رسوبی یک روش ساده و مرسوم در سنتز نانو ذرات معدنی است و از نظر تولید تجاری و سهولت در بدست آوردن میزان بالای محصول یک روش شناخته شده می باشد[۱۰]. اندازه ، شکل و خواص نانو ذرات به میزان بالایی متاثر از شرایط سنتز از جمله pH، غلظت، دما و سرعت هم زدن محلول واکنش است[۱۲، ۱۱]. در تهیه نانو بلورها از محلول و به روش هم رسوبی، انتخاب عامل پوششی از اهمیت بالایی برخوردار است زیرا جذب این عامل ها بر سطح نانو بلور، نقش مهمی را درکنترل اندازه ، شکل و خواص نانو ذرات ایفا می کند. در این کار پژوهشی نانو ذرات KTP به روش هم رسوبی و با استفاده از ال- آلانین به عنوان عامل پوششی سنتز گردید. ال – آلانین متعلق به گروه اسیدهای آمینه می باشد که یک عامل پوششی آلی زیست سازگار[۱۳] و ارزان بوده و پایداری بالایی دارد[۱۲، ١٤]. ال-آلانین با داشتن تنها یک گروه متیل ($-CH_3$) متصل به کربن، ساده ترین اسید آمینه از نظر ساختار مولکولی می باشد که در آن گروه متیل غیر فعال بوده و گروه آمینو یک جفت الکترون جهت تشکیل پیوند داشته و قادر به تشکیل پیوندهای هیدروژنی است[١٤]. کیفیت ساختاری نانو ذرات KTP سنتز شده با استفاده از عامل پوششی ال- آلانین به کمک پراش پرتو ایکس (XRD) و طیف سنجی تبدیل فوریه زیر قرمز (FT-IR) مورد بررسی قرار گرفت. میکروسکوپ الکترونی روبشی به جهت بررسی ریخت شناسی، اندازه و توزیع اندازه نانوذرات مورد استفاده قرار گرفت.

روش آزمایش

پودر سفید رنگ $Ti(OH)_4$ ، پتاسیم تیتانیل فسفات KH_2PO_4 ، HCl (٦ N) و عامل پوششی ال-آلانین به عنوان مواد اولیه در سنتز مورد استفاده قرار گرفتند. در ابتدا HCl (٦ N) به پودر سفید رنگ $Ti(OH)_4$ اضافه شد تا محلول شیری رنگ بدست آید. سپس محلول آبی پتاسیم دی هیدروژن فسفات به آرامی به این محلول اضافه گردید. نسبت مولی KH_2PO_4 به یون TiO^{2+} برابر واحد در نظر گرفته شد. عامل پوششی ال-آلانین با نسبت های مولی مولی ۱:۱ ، ۱:۲ و ۱:۳ به محلول اضافه گردیده و محلول برای رسیدن به یکنواختی کامل با سرعت بالا هم زده شد. pH محلول با استفاده از HCl (٦N) و K_2CO_3 بر روی ٦-٥ تنظیم گردیده و رسوب سفید رنگی بدست آمد که چندین مرتبه با آب دیونیزه به جهت از بین بردن یونهای ناخالصی کلراید شسته شد و خشک گردید. پودر اولیه در دمای ۷۰۰°C به مدت چندین ساعت، کلسینه گردید. مشخصات نانو ذرات سنتز شده در جدول ۱ آورده شده است.

جدول۱: مشخصات نانوذرات KTP سنتز شده با استفاده از نسبت های مولی مختلف از عامل های پوششی ال-آلانین

کد نمونه	پارامترهای شبکه			اندازه دانه (nm)	اندازه ذره (nm)	PDI
	c	b	a			
LA۱:۱	٦	۱۰	۱۲	٦۹/۰۰	۱۰۰	۱/۱۸
LA۱:۲	٦	۱۰	۱۲	۳٤/۹۷	۷٥	۱/۱٦
LA۱:۳	٦	۱۰	۱۲	۳٤/۸۷	۱۱٥	۱/۰۳
بدون استفاده از عامل پوششی	٦	۱۲	۱۰	۳۹/٤۲	۹۰	۱/۱٦

بحث و بررسی نتایج

- آنالیز پراش اشعه ایکس (XRD)

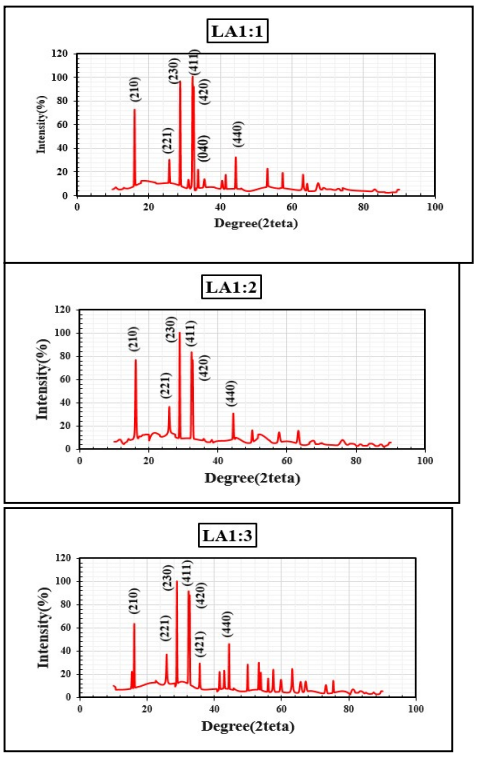
شکل ۱ طیف پراش اشعه ایکس نانو ذرات $KTiOPO_4$ سنتز شده به روش هم رسوبی با استفاده از نسبت های مولی ۱:۱، ۱:۲ و ۱:۳ از عامل های پوششی ال-آلانین را نشان می دهد. تمامی طیف ها تشکیل نانو ذرات $KTiOPO_4$ با فاز اورتورومبیک را تایید می کنند. همانطوری که از جدول ۱ مشاهده میگردد استفاده از عامل پوششی ال-آلانین منجر به چرخش شبکه بلوری گردیده است.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

میانگین اندازه دانه در پودرهای تولید شده، با استفاده از پهنای پیک در طیف پراش اشعه ایکس و به کمک رابطه شرر بدست آمد :

$$D = \frac{K\lambda}{\beta Cos(\theta)}$$

در این رابطه D اندازه بلوردانه، λ طول موج پرتـــــــو CuKα (۱/۵۴۰۵ Å) ، K یک مقدار ثابت (۰/۹) ، β ماکزیمم پهنای پیک در نیمه ارتفاع پیک و θ زاویه براگ می باشد.

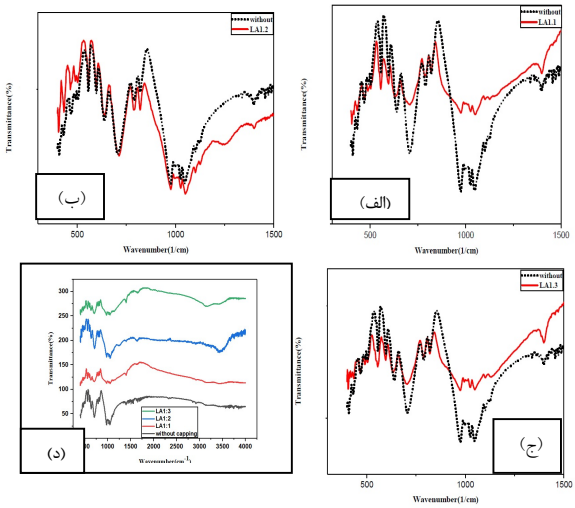


شکل۱. طیف پراش اشعه ایکس نانو ذرات KTP بدست آمده با استفاده از عامل پوششی ال-آلانین با نسبت های مولی مختلف

همانطوری که در جدول ۱ مشاهده میگردد به استثنای نسبت ۱:۱ از عامل پوششی، استفاده از عامل پوششی ال-آلانین منجر به کاهش اندازه دانه شده است و با کاهش نسبت عامل پوششی اندازه دانه کاهش می یابد.

-آنالیـــــز طیف سنجی FT-IR

طیف تبدیل فوریه فروسرخ (FT-IR) نانو ذرات سنتز شده در شکل ۲ نشان داده شده است. پیوندهای مشخصه KTP در محدوده ۱۲۰۰-۶۰۰cm^{-1} گزارش شده است[۱۵] شش پیونـد cm^{-1} ۹۷٤، ۹۹۵، ۱۰۲۷، ۱۰۵۰، ۱۱۰۰ و ۱۱۲٦ متعلق به پیوندهای کششی غیر متقارن ϑ_3 از گروه PO_4 می باشند.



شکل۲ : منحنی مقایسه ای از طیف تبدیل فوریه فروسرخ نانو ذرات بدست آمده بدون استفاده از عامل پوششی و با استفاده از عامل پوششی ال-آلانین با نسبت مولی (الف)۱:۱، (ب)۱:۲، (ج)۱:۳، (د) مقایسه در محدوده cm^{-1} ٤۰۰ – ٤۰۰۰

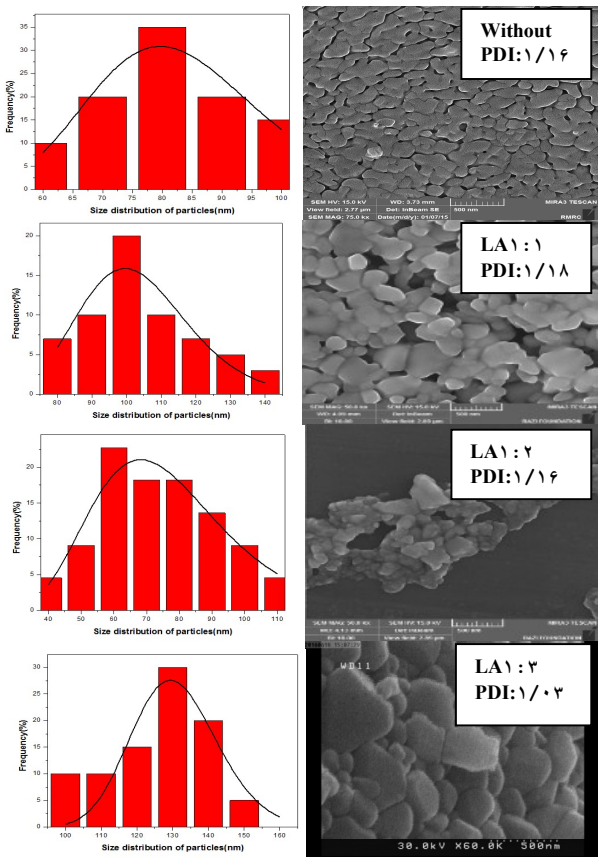
سه پیوند در cm^{-1} ۷۱۲،۷۸۵ و ۸۲۰ متعلق بـه نوسـانات Ti-O در ساختار اکتاهدرال تغییر شکل یافتـه TiO_6 مـی باشـند و قلـه هـای باقیمانده در محدوده cm^{-1} ٦٦۰-۳۵۰ به شکاف مـدهای تبهگـــــن ϑ_2 و ϑ_4 در گروه PO_4 نسبت داده می شوند. همـانطوری کـه در شکل ۲ دیده می شود همه طیف ها تشکیل ساختار KTP را تاییـد می کنند. استفاده از عامل پوششی در نسبت هـای مـولی ۱:۱ و ۱:۳ منجر به تضعیف شدت قله هـای مشخصـه P-O و Ti-O گردیـد. پیوندهای کششـی نامتقـارن گـروه COO در ترکیـب ال – آلانـین نزدیک به cm^{-1} ۱۵۹۵ آشکار می شوند[۱٦]. این قله ها در طیـف FTIR نمونه های بدست آمده با استفاده از ال – آلانـین بـه عنـوان عامل پوششی، به علت همبستگی اسید امینه بـا نـانو ذرات KTP ، از موقعیت طبیعی خود جا به جا شده و قلـه هـای مـرتبط بـا ایـن پیوند کششی در ناحیه cm^{-1} ۱٦٤۰-۱٦٤۷ مشاهده می شـوند. قلـه هـای جـذب در ناحیـه ۱٤۰٤-۱۳۹۸بـه پیونـد C-H و قلـه هـای ناخالصی در ناحیه cm^{-1} ۳۱۰۰-۳۵۰۰ به پیوندهای کششی N-H باقیمانده بر روی سـطح نـانو ذرات KTP کـه بطـور کامـل بعـد از کلسینه شدن حذف نگردیده اند دلالت دارد[۱٦ ، ۱۷].نسبت مولی

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

۱:۲ از ال-آلانین اگرچه قله جذب نسبتاً شدید ناشی از جذب N-H را نشان میدهد ولی بهترین کیفیت ساختاری را دارد. نسبت مولی ۱:۳ بیشترین جذب ناخالصی را نشان می دهد.

مطالعات میکروسکوپ الکترونی روبشی

ریخت شناسی نانو ذرات سنتز شده در شکل ۳ نشان داده شده است.



شکل۳. ریخت شناسی نانو ذرات KTP سنتز شده با استفاده از ال-آلانین

نانو ذرات KTP سنتز شده بدون استفاده از عامل پوششی ال-آلانین ریخت شناسی دمبلی شکل را نشان دادند. حدس میزنیم نانو ذرات کروی با انرژی سطح بالا بعد از کلسینه در دمای ۷۰۰ °C به یکدیگر جوش خورده و ذرات دمبلی شکل را بوجود آورده اند. استفاده از عامل پوششی ال-آلانین منجر به نانو ذراتی با حداقل یک صفحه بلوری گسترش یافته گردید. همانطوری که در شکل ۳ مشاهده میگردد کاهش غلظت عامل پوششی منجر به توده ای شدن نانو ذرات سنتز شده گردید.

نتیجه گیری

نانو ذرات KTP با استفاده از نسبت های مولی مختلف۱:۱، ۱:۲ و ۱:۳ از عامل پوششی ال-آلانین و به روش هم رسوبی سنتز شدند. به استثنای نسبت ۱:۱ از عامل پوششی سایر نسبت ها منجر به کاهش اندازه دانه گردید. عامل پوششی ال-آلانین مکانیزم رشد نانو ذرات را تغییر داده و منجر به چرخش شبکه بلوری گردید. ریخت شناسی نانو ذرات بدست آمده حداقل یک صفحه بلوری گسترش یافته را نشان داد.

مرجع ها

[۱] R. Malekfar, G. Ahmadi, A. Cheraghi, J. Rohollahnejad, F. Sahraiyan, M. Khanzadeh;" *Micro-Raman scattering of KTP ($KTiOPO_4$) nanocrystallites synthesized by modified sol–gel Pechini method*"; Acta Physica Polonica A;(2009)51: 308–312.

[۲] E. Gharibshahian, M. Jafar Tafreshi, M. fazli; "*Growth of $KTiOPO_4$ crystals by flux technique and their characterization*"; Indian J. Pure & Ap. Phy;(2009)47:356-361.

[۳] L.L. Xuan, D. Chauvat;" *Slablab A., Roch J. R. ; $KTiOPO_4$ Single Nanocrystal for Second-Harmonic Generation Microscopy, "Nanocrystals"*", Yoshitake Masuda (Ed.), (2010), ISBN: 978-953-307-126-8

[۴]M. Abrabri, A. Larbot, M. Persin, J. Sarrazin, M. Rafiq, L. Cot; "*Potassium titanyl phosphate membranes : Surface properties and application to ionic solution filtration*", J Membr Sci Technol;(1975) 39: 275-283

[۵] J. B. Christophe, A. H. Mark, W.S. George; "*Sol-Gel synthesis of Potassium Titanyl Phosphate: Solution Chemistry and Gelation*"; J. Sol-Gel Sci. Technol.;(1997)9: 183-199.

[۶] Y. Kanno; "*Synthesis and sintering of $KTiOPO_4$ via mechanochemical mixing route*", J ALLOY COMPD; (1994) 210: 45-50.

[۷] N. Arul Dhas, K.C. Patil; "*Synthesis of $AlPO_4$, $LaPO_4$ and $KTiOPO_4$ by flash combustion*", J ALLOY COMPD;(1993) 202: 137-141.

[۸] S. Kanti Biswas , A. Pathak, P. Pramanik; "*Synthesis of Nanocrystalline $KTiOPO_4$ Powder by Method*"; J Am Ceram Soc. ;(2007) 90:1071-1076.

[۹] E. Gharibshahian, M. Jafar Tafershi, M. Fazli,; "*Effects of solution concentration and capping agents on the properties of potassium titanyl phosphate nanoparticles synthesized using a co-precipitation method*"; J. Phys. Chem. Solids;(2018)116: 241-249

[۱۰] M. Alaei, A.M. Rashidi, I. Bakhtiari; "*Preparation of High Surface Area ZrO_2 Nanoparticles*", IJCCE ,No. 2(2014)33: 47-53

[۱۱] K. Harish, Manisha and S. Poonam; "*Synthesis and Characterization of MnO_2 Nanoparticles using Co-Precipitation Technique*"; IJCCE; No. 3;(2013) 3 : 155-160

[۱۲] R. Serrano-Garcı´, F. Purcell-Milton, S. McCarthy, Yurii K. Gun'ko; "*Synthesis and Magnetic Properties of L-Alanine Capped $CoFe_2O_4$ Nanoparticles; Chemistry Select*" ;(2018) 3, 4726 – 4729

[۱۳]E. Indubala, M. Dhanasekar, V. Sudha, E.J. Padma Malar, P. Divya, J. Sherine, R. Rajagopal, S. Venkataprasad Bhat and S. Harinipriya; "*L-Alanine capping of ZnO nanorods: increased carrier concentration in ZnO/CuI heterojunction diode* " ; RSC Adv.(2018) 8, 5350–5361

[۱۴] S.S. Talwatkar, Y.S. Tamgadge, A.L. Sunatkari, A.B. Gambhire, G.G. Muley; "*Amino acids (L-arginine and L-alanine) passivated CdS nanoparticles: Synthesis of spherical hierarchical structure and nonlinear optical properties*"; Solid State Sciences; 38 (2014) 42e48

[۱۵] J. C. Jacco;" *THE INFRARED SPECTRA OF KTiOPO 4 AND A K20-P2Os-TiO 2 GLASS "; Mater. Res. Bull.*,**21. No.10**(1986) 1189–94.

[۱۶]E. Gharibshahian, M. Jafar Tafershi, M. Fazli; "*Effects of solution concentration and capping agents on the properties of potassium titanyl phosphate noparticles synthesized using a co-precipitation method*" ; Journal of Physics and Chemistry of Solids; 116 (2018) 241–249

[۱۷] S. A.C . Azhan., S. Ganesan ; "*Effect of zinc acetate addition on crystal growth, structural, optical, thermal properties of glycine single crystal*", Arabian Journal of Chemistry; 10 (2017) S2615,10 pages

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

دزیمتری باریکه لیزر مادون قرمز در آب با استفاده از روش تداخل‌سنجی تمام‌نگاری دیجیتال

رنجبر، سپیده[۱]؛ بیگ‌زاده، امیرمحمد[۲]؛ رشیدیان وزیری، محمدرضا[۳*]؛ کریمی، رضا[۱]، سلیمی میدانشاهی، سحر[۴]

[۱]دانشگاه صنعتی امیرکبیر، دانشکده مهندسی انرژی و فیزیک، گروه فیزیک

[۲]پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، پژوهشکده کاربرد پرتوها، تهران

[۳]پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ی، پژوهشکده فوتونیک و فن‌آوری‌های کوانتومی، تهران

[۴]گروه فیزیک، دانشکده فیزیک شیمی، دانشگاه الزهرا، تهران

چکیده

لیزرها در کاربردهای مختلف پزشکی مانند پوست شناسی و جراحی زیبایی، بهبود زخم، تحریک عصبی، دندانپزشکی و برای تصحیح بینایی و مشکلات قرنیه مورد استفاده قرار می‌گیرند. لیزر در ناحیه مادون قرمز نزدیک (IR)، بازه طول‌موجی ۷۵۰-۱۲۰۰ نانومتر، عمق نفوذ عمیق‌تری از لیزرهای مرئی دارد. بنابراین، لیزرهای ناحیه مادون قرمز نزدیک نامزد خوبی برای کاربردهایی هستند که در آن‌ها نیاز به عمق نفوذ بیش‌تر در بافت، مانند حذف مو و سرطان درمانی است. برآورد دقیق میزان انرژی سپارش شده توسط باریکه لیزر در ماده جاذب در بالا بردن کیفیت این نوع از روش‌های لیزردرمانی بسیار ضروری است. در این مطالعه با استفاده روش تمام نگاری تداخل سنجی دیجیتال به برآورد میزان سپارش انرژی حاصل از باریکه غیریونساز لیزر مادون قرمز ۹۸۰ نانومتر در ماده معادل بافت آب پرداخته شده است.

کلمات کلیدی: دزیمتری،تداخل‌سنجی دیجیتال، بازسازی تمام‌نگاشت، باریکه غیریونساز

Infrared laser beam dosimetry in water using digital holographic interferometry

Ranjbar, Sepideh[1]; Beigzadeh, Amirmohammad[2]; Rashidian Vaziri, Mohammad Reza[3]; Karimi, Reza[1]; Salimi Meidanshahi, Sahar[4]

[1] Department of Energy Engineering and Physics, Amirkabir University of Technology, Tehran
[2] Radiation Application Research School, Nuclear Science and Technology Research Institute, Tehran
[3] Photonics and Quantum Technologies Research School, Nuclear Science and Technology Research Institute, Tehran
[1] Department of Physics, Alzahra University, Tehran, Iran

Abstract

Lasers are being used in a variety of medical applications such as dermatology and cosmetic surgery, wound healing, nerve stimulation, dentistry, and for correction of vision and corneal problems. Near-IR lasers, 750-1200 nm, have deeper penetration depths than visible lasers. Therefore, near-IR lasers are good candidates for applications that require deeper tissue penetrations, such as hair removal and cancer treatment. Precise estimation of the delivered amount of energy by the laser beam in the adsorbent is essential to improve the quality of these types of laser therapy applications. In this study, the energy absorption of a 980 nm IR laser beam in water tissue-equivalent material is investigated.

PACS No. 07.77.-n ,07.20.Fw, 29.40.-n

۱. مقدمه

امروزه لیزرها کاربرد وسیعی در پزشکی دارند. این کاربردها بر اساس جذب نور لیزر در بافت بدن است [۱]. آگاهی از میزان و توزیع انرژی جذب شده لیزر در ماده در امر طراحی روش تابش‌دهی مطلوب اثر بسازیی دارد. انرژی جذب شده در ماده در نهایت به شکل انرژی گرمایی تبدیل می‌شود، بنابراین می‌توان با اندازه‌گیری تغییرات دمایی ایجاد شده در ماده به میزان انرژی جذب شده در آن پی برد. یکی از روش‌های دقیق برای اندازه‌گیری پدیده‌های فیزیکی

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

استفاده از روش تداخل‌سنجی است [۲ و ۳]. در این مطالعه، هدف اندازه‌گیری تغییرات دمایی ایجاد شده در ماده جاذب به سبب جذب تابش لیزر مادون قرمز، با بهره‌گیری از سیستم تداخل‌سنجی بوده است.

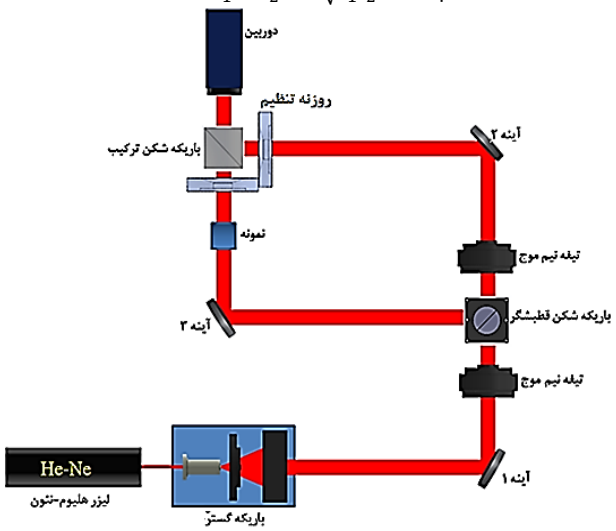
در ادامه چند مورد از تحقیقات انجام شده در زمینه اندازه‌گیری تغییرات دمایی با استفاده از سیستم تداخل سنجی آورده شده است. اندازه‌گیری مشخصات نیم‌رخ دمایی یک دستگاه اسپکتروفتومتر جذب اتمی با استفاده از یک تداخل سنج تالبوت در سال ۱۹۹۴ توسط شاخر و همکارانش انجام شد [۴]. در همین سال او و همکارانش با استفاده از تداخل سنج تالبوت نیم رخ دمایی یک مشعل گازی را اندازه گیری کردند [۵]. همین کار برای یک مشعل گازی با استفاده از تداخل‌سنج فازی توسط تاکور و همکارانش در سال ۲۰۰۱ تکرار شد [۶]. اکرت و همکارانش با استفاده از چیدمان تداخل‌سنجی ماخ زندر انتقال همرفت گرمایی را مورد بررسی قرار دادند [۷]. نیم‌رخ دو بعدی دما برای یک محیط فعال در یک لیزر دیودی به صورت تجربی توسط شافر و همکارانش اندازه‌گیری شد. آن‌ها از یک روش غیر مخرب با کمک تداخل‌سنج ماخ زندر استفاده کردند [۸]. تغییرات دمایی ایجاد شده در سطح اجسام گرم با استفاده از تداخل‌سنج ماخ زندر توسط ویکی و همکارانش اندازه‌گیری شد [۹]. آن‌ها از تحلیل تغییر شکل ایجاد شده در طرح‌های تداخلی که توسط دستگاه تداخل سنج قبل و پس از گرمایش اجسام ثبت شده بود برای استخراج تغییرات دما استفاده کردند.

۲. روش‌ها

۱،۲. تئوری، طراحی

طبق شکل ۱ ابتدا باریکه خروجی از لیزر با استفاده از باریکه گستر- یکسوساز طراحی شده به ابعاد مشخصی پهن و یکسو می شود. این باریکه سپس با استفاده از آینه ۱ به سمت تیغه نیم موج اول و سپس به سمت باریکه شکن قطبشگر هدایت می شود و به دو بازوی مرجع و شیئی تقسیم می شود. باریکه بازوی مرجع پس از عبور از تیغه نیم موج دوم به کمک آینه ۲ به سمت قطبشگر ترکیب و دوربین هدایت می‌شود. بخش دیگر باریکه پس از عبور از یک جسم جاذب که تحت تابش لیزر مادون قرمز قرار گرفته است عبور نموده و مستقیم به سمت دوربین هدایت می‌شود. شدت حاصل از برهم‌نهی این دو موج باریکه مرجع I_R و شیئی I_O به‌صورت زیر خواهد بود:

$$I = |I_R + I_O|^2 = (I_R + I_O)(I_R + I_O)^* = {a_1}^2 + {a_2}^2 + 2a_1a_2\cos(\varphi_1 - \varphi_2) = I_1 + I_2 + 2\sqrt{I_1 I_2}\cos\Delta\varphi \quad (۱)$$



شکل ۱: طرحی از سیستم تداخل‌سنجی ماخ-زندر به همراه باریکه‌گستر طراحی شده

I_1 و I_2 شدت مربوط به هر یک از موج‌ها و $\Delta\varphi = (\varphi_1 - \varphi_2)$ اختلاف‌فاز بین دو جبهه موج است. معادله (۱) جمع شدت‌های هر یک از دو موج است به اضافه جمله بخش تداخلی. بخش تداخلی رابطه (۱) زمانی بیشینه می‌شود که تداخل سازنده باشد یعنی:

$$\Delta\varphi = 2n\pi \quad \text{برای } n=0, 1, 2\ldots \quad (۲)$$

این بخش زمانی کمینه می‌شود که تداخل مخرب (ویرانگر) باشد یعنی:

$$\Delta\varphi = (2n+1)\pi \quad \text{برای } n=0, 1, 2\ldots \quad (۳)$$

که n مرتبه‌ی نوارهای تداخلی و وابسته به اختلاف‌فاز یا اختلاف طول مسیر نوری بین دو جبهه موج است. از تیغه نیم موج ۱ و۲ برای تنظیم کنتراست تمام‌نگار ثبت شده استفاده می‌شود. وضوح یک الگوی تداخلی و کنتراست آن با رابطه (۴) بیان می شود.

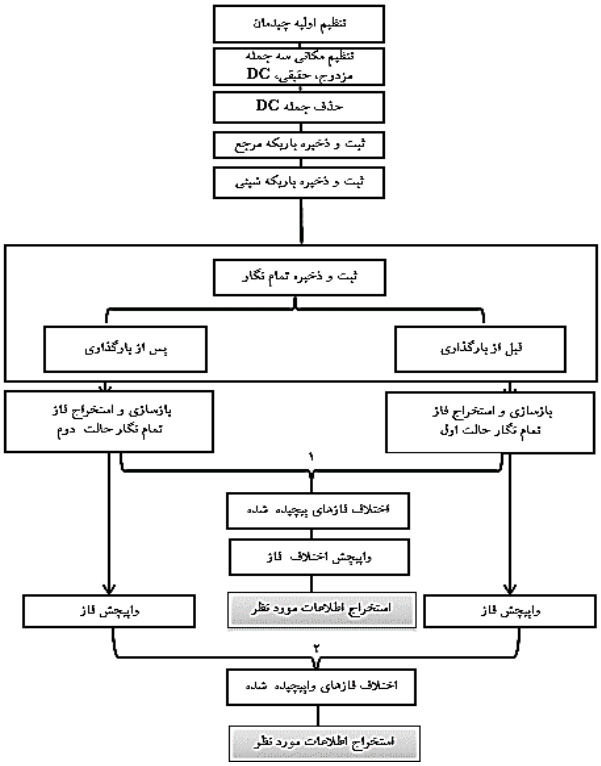
$$V = \frac{I_{max} - I_{min}}{I_{max} + I_{min}} \quad (۴)$$

که در آن I_{max} و I_{min} شدتهای بیشینه و کمینه مجاور هم هستند. آنها به ترتیب به ازای $\Delta\varphi = 0$ با $\Delta\varphi = \pi$ در معادله ۱ محاسبه می‌شوند. الگوریتم مناسبی در محیط برنامه نویسی متلب برای

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

اندازه‌گیری توزیع دز جذبی لیزر مادون قرمز نوشته شد که در شکل ۲ نشان داده شده است.

واپیچش اطلاعات فازی پیچیده با ا ستفاده از الگوریتم تو سعه داده شده با زبان C++ انجام شد. درنهایت پروفایل دز ایجاد شده ناشی از جذب باریکه پرتوی لیزر مادون قرمز ۹۸۰ نانومتر در ماده جاذب به صورت نیم رخ دمایی اندازه گیری شد.



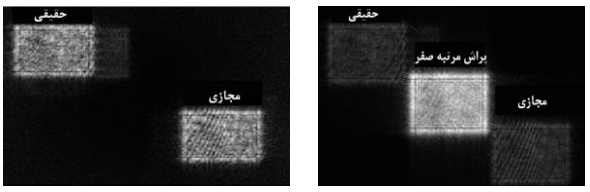
شکل ۲: طرحی از نحوه استخراج اطلاعات فاز به دو روش

۲،۲. تجربی

در این مطالعه تجربی چیدمان تداخل سنجی ماخ زندر که طرح آن در شکل ۱ نشان داده شده است مورد استفاده قرار گرفت. در این چ ید مان تجربی از لیزر قرمز هلیوم–نئون با طول ۶۳۲ نانومتر شرکت Melles Griot 098DPP با توان ۱۰ میلی وات به عنوان باریکه نور همدوس مورد نیاز تداخل سنج ماخ–زندر ا ستفاده شد. پس از رو شن نمودن لیزر حدود ۱۰ دقیقه به لیزر فر صت داده شد که به حالت عملکرد پایدار خود برسد. تمام چیدمان بر روی یک میز تمام نگاری ضد ارتعاش پیاده سازی شد. اجزای نوری مورد استفاده به صورت مغناطیسی بر روی میز نصب شدند. باریکه لیزر از بخش یک‌سو ساز–باریکه گ ستر برای پو شش سطح بی شتری از سلول جاذب عبور نمود. در طراحی آن از یک عدد شیئی میکروسکوپ جهت همگرا نمودن باریکه و یک عدد روزنه برای افزایش کیفیت باریکه و در نهایت از یک عدسی برای یکسوسازی باریکه استفاده شد. این چیدمان تداخل سنجی به صورت برون محوری تنظیم شد و زاویه بین باریکه مرجع و شیئی به گونه ای انتخاب شد که سه جمله DC مرکزی و حقیقی و مزدوج در تصاویر بازسازی شده از یکدیگر قابل تفکیک باشند. اندازه زاویه θ حدود ۱٫۸۱ رادیان تنظیم شد. این مقدار زاویه به طور مستقیم در معادله باز سازی ا ستفاده شد. طرح تداخلی بر روی دوربین CCD ثبت شد.

جدول ۱: مشخصات دوربین مورد استفاده

نام دوربین	DMK 23G445
ساخت	کشور آلمان
رزولوشن	Y800_1280x960
اندازه پیکسل	3.75 μm



الف ب

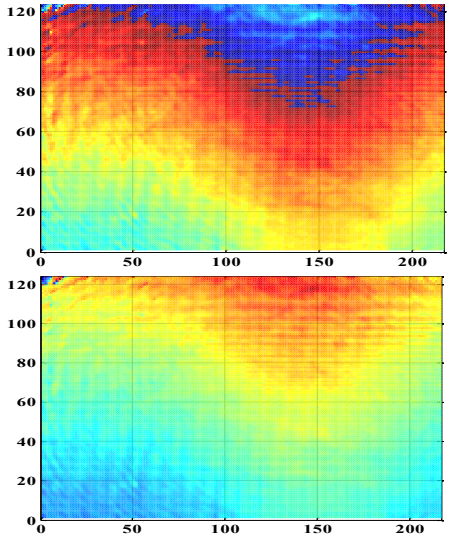
شکل ۳: اعمال صافی میانگین ۳×۳ بر روی تمام‌نگاشت دیجیتال پس از بازسازی و الف) قبل ب) حذف تصویر DC پس از بازسازی به روش فرنل.

در شکل ۳ سه جمله حقیقی، مجازی و جمله DC یا پراش مرتبه صفر نشان داده شده است و در شکل ب با ا ستفاده از الگوریتم توسعه داده شده در محیط متلب جمله پراش مرتبه صفر حذف گردید. پس از تنظیم زوایای بین باریکه مرجع و شیئی و فوا صل و روشن نمودن منبع گرمایی، جبهه موج‌های شیئی و مرجع (برای باز سازی تمام‌نگا شت) و نیز تمام‌نگا شت اولیه ثبت و ذخیره سازی شدند. دمای اولیه آب مقطر داخل سلول کوارتز ۳ر۲۲ درجه سلسیوس اندازه‌گیری شد. دما سنج دمای هوای آزمایشگاه را در حین آزمایش ۷ر۲۲ درجه سلسیوس نشان می‌داد.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

۳. نتایج

تعداد ۳ تمام‌نگاشت در فواصل زمانی ۶۰ ثانیه ثبت شدند. به این طریق که تمام‌نگاشت اول در زمان صفر ثانیه و تمام‌نگاشت دوم و سوم در ۶۰ و ۱۲۰ ثانیه ثبت شدند. تمامی مراحل استخراج فاز مطابق با روش دوم بحث شده در طرحواره ۲ و در نهایت نیم‌رخ دمایی اندازه گیری شد.



الف

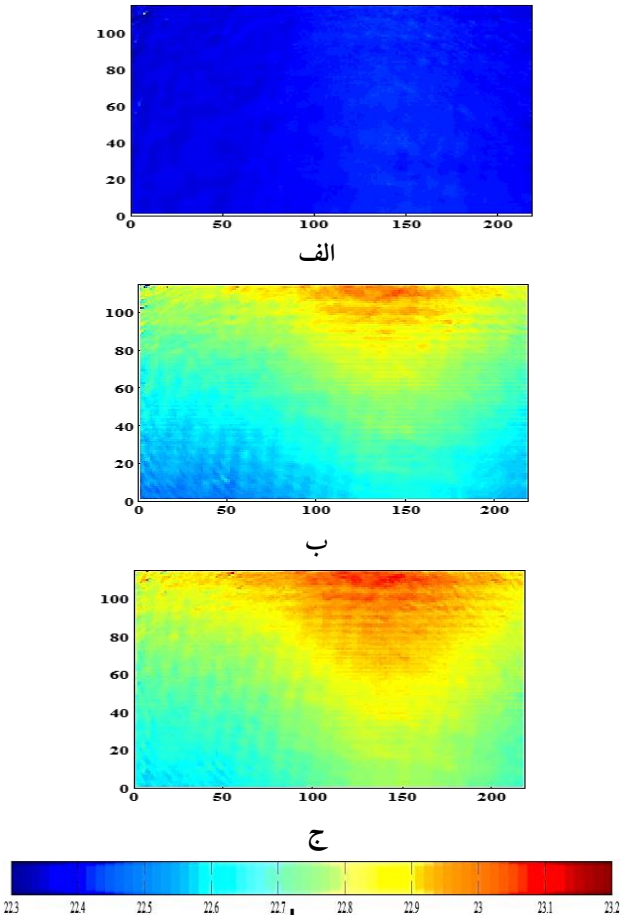
ب

شکل ۴: نیم رخ دمایی الف) قبل و ب) پس از واپیچش

در شکل ۴ نیم رخ دمایی پیچیده و واپیچیده در زمان ۱۲۰ ثانیه پس از روشن نمودن لیزر مادون قرمز نشان داده شده است. نتایج حاصل با استفاده از روش نوردهی دوگانه به صورت نیم‌رخ دمایی در زمان‌های مختلف برای زمان‌های ۰، ۶۰ و ۱۲۰ ثانیه در شکل ۵ آورده شده است.

۴. نتیجه‌گیری

در این کار پژوهشی با استفاده از چیدمان تداخل سنجی تمام نگاری میزان انرژی سپارش شده تو سط لیزر مادون قرمز در ماده معادل بافت آب به صورت نیم رخ دز دوبعدی اندازه گیری شد. نتایج نشان داد که با افزایش زمان پرتودهی به سبب تخلیه انرژی بیشتر فوتونها در آب میزان تغییردمایی در آب افزایش پیدا می کند. نتایج بد ست آمده با ترمیستور تعبیه شده در ماده نیز مورد مقایسه قرار گر فت که توافق خوبی را نشان داد. با این روش میتوان برآوردی از انرژی گرمایی سپارش شده در مواد معادل بافت در پرتودرمانی با لیزر بدست آورد.



الف

ب

ج

شکل ۵: نیم-رخ دمایی معادل پروفایل دز باریکه لیزر مادون قرمز درون سلول آب الف) ۰ ثانیه پس از پرتودهی ب) ۶۰ ثانیه پس از پرتودهی ج) ۱۲۰ ثانیه پس از پرتودهی

مرجع‌ها

[1] B. Jean and T. Bende, "Mid-IR laser applications in medicine," in *Solid-State Mid-Infrared Laser Sources*, ed: Springer, 2003, pp. 530-565.

[2] B. H. Bunch and A. Hellemans, *The history of science and technology: a browser's guide to the great discoveries, inventions, and the people who made them, from the dawn of time to today*: Houghton Mifflin Harcourt, 2004.

[3] P. Hariharan, *Basics of interferometry*: Elsevier, 2010.

[4] C. Shakher, A. P. Daniel, and S. Angra, "Measurement of the temperature profile of an atomic absorption spectrophotometer burner using a Talbot interferometer with circular gratings," *Optical Engineering*, vol. 33, pp. 2663-2670, 1994.

[5] C. Shakher and A. P. Daniel, "Talbot interferometer with circular gratings for the measurement of temperature in axisymmetric gaseous flames," *Applied optics*, vol. 33, pp. 6068-6072, 1994.

[6] A. Nakano, M. Shiraishi, and M. Murakami, "Application of laser holography interferometer to heat transport phenomena near the critical point of nitrogen," *Cryogenics*, vol. 41, pp. 429-435, 2001.

[7] E. Eckert and E. Soehngen, "Studies on heat transfer in laminar free convection with the Zehnder-Mach interferometer," AIR MATERIEL COMMAND WRIGHT-PATTERSON AFB OH1948.

[8] M. K. Shaffer, T. Lilly, B. Zhdanov, and R. Knize, "In situ non-perturbative temperature measurement in a Cs alkali laser," *Optics letters*, vol. 40, pp. 119-122, 2015.

[9] D. Wilkie and S. Fisher, "Measurement of temperature by Mach-Zehnder interferometry," *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers*, vol. 178, pp. 461-470, 1963.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بررسی یکنواختی توزیع شار فوتون در شتابدهنده خطی درمانی فاقد فیلتر هموارکننده

بیدختی، پریسا[۱]؛ کریمی شهری ، کیهاندخت[۱]

[۱] گروه فیزیک ، دانشگاه بیرجند ، بیرجند

چکیده

یکنواختی انرژی و توزیع فضایی شار فوتون رسیده به هدف درمان از پارامتر های مهم درمانی می باشد. از این‌رو در این مطالعه اثر حذف فیلترهموارکننده بر میزان یکنواختی انرژی و توزیع فضایی شار باریکه فوتون ۱۸ MV شتابدهنده خطی واریان مدل C/D ۲۱۰۰ در ۷ اندازه میدان تابشی شامل $25\times25\ cm^2$ و ۲۰×۲۰ و ۱۵×۱۵، ۱۰×۱۰، ٦×٦، ٤×٤، ۳×۳ با استفاده از کد مونت کارلوی MCNPX2 .6 .0 بررسی شده است. نتایج نشان داد که با حذف فیلتر در تمام میدان های تابشی، شار انرژی و توزیع فضایی شار فوتون کاهش می یابد. به طوریکه نسبت یکنواختی شار انرژی فوتون در شتابدهنده فاقد فیلتر به شتابدهنده دارای فیلتر(FFF/FF) به طور میانگین از ۰/۹۵در میدان ۳×۳ به ۰/۷۰ در میدان۲۵×۲۵می رسد. این نسبت برای یکنواختی توزیع فضایی شار از ۰/۹۳ تا ۰/۵۵می باشد.

واژه های کلیدی: شتابدهنده درمانی خطی واریان، پارامتر یکنواختی شار ،فیلتر مسطح ، شبیه سازی مونت کارلو

Investigation of the photon fluence distribution uniformity in free flattening filter clinical LINAC

Bidokhti, Parisa[1]; Karimi-Shahri, Keyhandokht[1]

[1] *Department of Physics, University of Birjand, Birjand*

Abstract

Energy uniformity and spatial photon fluence distribution are important treatment parameters. Therefore, in this study the effect of Flattening Filter-Free 18MV photon beam from Varian 2100C/D LINAC on energy uniformity and photon fluence uniformity investigated for 7 open field sizes of 3×3,4×4,6×6,10×10,15×15,20×20,25×25 cm^2 by MCNXP2.6.0 Monte Carlo code. The results showed that filter removal decreased the uniformity energy and spatial photon fluence distribution ratio in all open field sizes. As the uniformity factor of energy fluence (FFF/FF) was 0.95 for field size of 3×3 cm^2 and it dropped by 0.70 for 25×25 cm^2 field. This ratio was from 0.93 to 0.55 for the uniformity of photon fluence distribution.

Keywords: Varian 2100 C/D LINAC, uniformity factor of photon fluence, Flattening Filter, MCNPX2.6.0. Monte Carlo code

PACS No. 87

مقدمه

استفاده از شتابدهنده‌های خطی دارای فیلتر هموارکننده در پرتو درمانی بسیار مرسوم است [۱] . در یک طرح درمان بهینه، هدف اصلی رساندن شار فوتون به طور یکنواخت به همه ی حجم مورد درمان می‌باشد[۲]. در نتیجه ساختمان این فیلترها در راستای تحقق این هدف طراحی شده‌اند. اما مطالعات زیادی نشان داد که فیلتر هموارکننده منبع اصلی پراکندگی تابش در سر دستگاه درمانی بوده و موجب افزایش دز رسیده به ناحیه خارج از میدان و در نتیجه افزایش خطر ابتلا به سرطان ثانویه می‌گردد[٤-۳] . از این رو استفاده از تکنیک حذف فیلتر هموارکننده به علت مزایای آن که موجب افزایش دز جذبی بافت سرطانی و کاهش دز رسیده به ناحیه خارج از میدان تابشی و در نتیجه کاهش دز جذبی بافت سالم و به دنبال آن کاهش خطر ابتلا به سرطان ثانویه می‌گردد[۵] ، مورد توجه زیادی قرار گرفت.

مطالعات نشان داده است که حذف فیلتر هموارکننده شار فوتون رسیده به هدف را تغییر می دهد [٦] . به نظر می‌رسد این تغییر بر

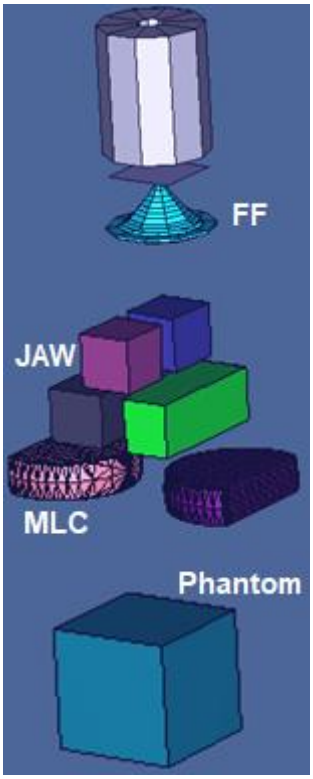
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

میزان یکنواختی شار رسیده به هدف از نقطه نظر انرژی و توزیع فضایی اثرگذارباشد.

در این مطالعه اثر حذف فیلتر هموارکننده بر میزان یکنواختی شار انرژی و توزیع فضایی شار باریکه فوتونی MV ۱۸ دستگاه واریان مدل C/D ۲۱۰۰ با استفاده از محاسبه پارامتر یکنواختی[۱] در میدان های تابشی cm^2 ۲۵×۲۵، ۲۰×۲۰، ۱۵×۱۵، ۱۰×۱۰، ۶×۶، ٤×٤، ۳×۳ بررسی شده است.

روش محاسبات

اعتبارسنجی سر دستگاه شتابدهنده واریان مدل C/D ۲۱۰۰ توسط نتایج تجربی انجام شده است[۷] . بر این اساس مقدار MeV ۱۸/۵ و cm ۰/۱٤ به ترتیب برای انرژی و پهنای باریکه الکترون دستگاه تعیین گردید و تابع توزیع گاوسی برای توزیع انرژی در نظر گرفته شد. شکل ۱ نمایی از سر دستگاه شبیه سازی شده را نشان می دهد.



شکل (۱) نمای سه بعدی سر دستگاه واریان شبیه سازی شده

یکنواختی شار انرژی و توزیع فضایی شار فوتون در امتداد محور عمود بر باریکه برای دو حالت با(FF[۱]) و بدون فیلتر (FFF[۲]) در سطح فانتوم مکعبی آب با ابعاد cm^3 ۵۰×۵۰×۵۰ که در فاصله cm ۱۰۰ از چشمه قرار گرفته است (SSD=۱۰۰ cm) و برای میدان های تابشی ذکر شده محاسبه شد. برای محاسبه یکنواختی شار انرژی سلولی با ابعاد cm^3 ۰/۱ ×۵۰×۵۰ در سطح فانتوم تعبیه شد و با استفاده از تالی F4 و کارت جانبی E4 مقادیر شار فوتون در بازه انرژی MeV ۰/۰۱ تا MeV ۱۸/۵ محاسبه گردید. همچنین برای محاسبه یکنواختی توزیع فضایی شار فوتون، با استفاده از مش تالی نوع ۱ در هوا و در cm ۱۰۰ =SSD روی محور عمود بر محور پرتو(محور x)شار فوتون محاسبه شد. برای محاسبه پارامتر یکنواختی از رابطه زیر استفاده شده است :

$$UF = \frac{\mu-\sigma}{\mu} \qquad (۱)$$

که در آن μ مقدار میانگین و σ انحراف از مقدار میانگین می‌باشد و برای محاسبه پارامتر یکنواختی شار انرژی و توزیع فضایی شار فوتون با استفاده از روابط زیر محاسبه شده است :

$$\mu = \frac{\sum_i f_i x_i}{\sum_i f_i} \qquad (۲)$$

$$\sigma = \sqrt{\frac{\sum_i (x_i-\mu)^۲}{N-۱}} \qquad (۳)$$

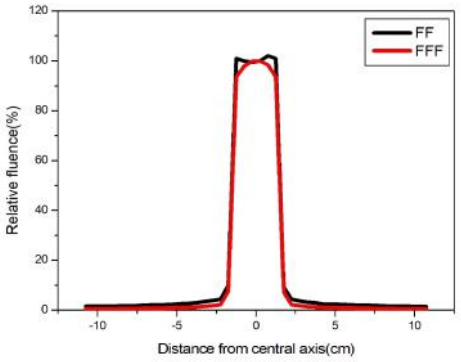
که x_i بازه i ام مکانی یا انرژی ، F_i فراوانی شار فوتون در بازه مکانی یا انرژی i ام می‌باشد.

کلیه شبیه سازی ها در کد مونت کارلو MCNPX در مد فوتون انجام شده و کارت قطع انرژی برای فوتون ها والکترون ها به ترتیب MeV ۰/۵ و MeV ۰/۰۱ در نظر گرفته شد. تعداد ذرات ترابرد شده ۲×۱۰^۹ می‌باشد.

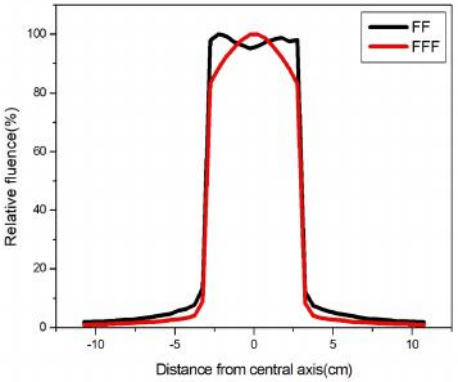
نتیجه گیری و بحث

شکل های ۲ تا ٤ توزیع فضایی شار باریکه های فوتون FFF و FF را به ترتیب در میدان های ۳×۳ ، ٦×٦ و cm^2 ۱۵×۱۵ نشان می‌دهد. شار فوتون به مقدار شار بیشینه هر میدان نرمال شده و بر حسب فاصله از محور مرکزی رسم شده است.

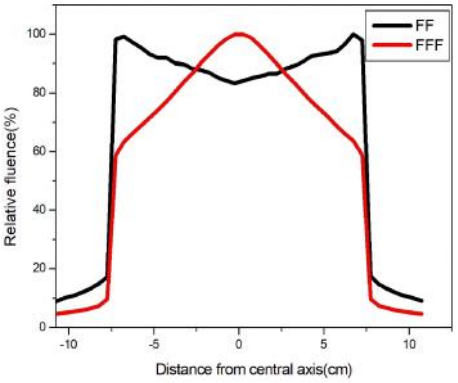
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



شکل (۲) مقایسه توزیع فضایی شار فوتون FF و FFF در امتداد محور مرکزی برای میدان cm^2 ۳×۳



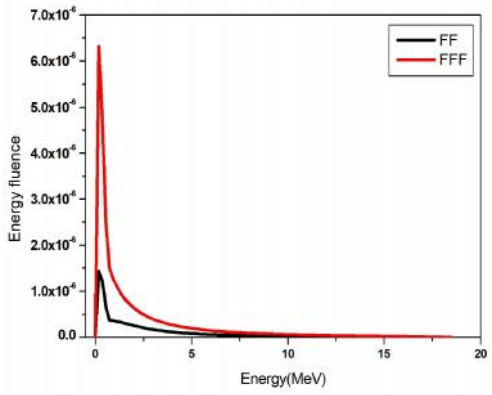
شکل (۳) مقایسه توزیع فضایی شار فوتون FF و FFF در امتداد محور مرکزی برای میدان cm^2 ٦×٦



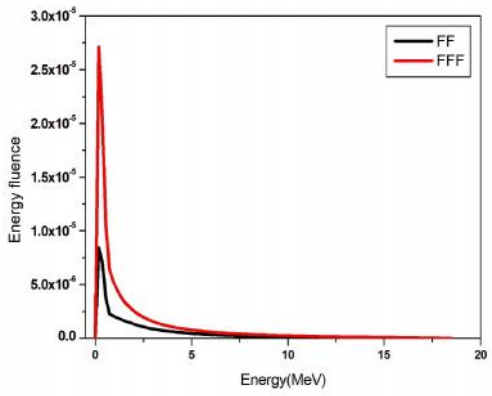
شکل (٤) مقایسه توزیع فضایی شار فوتون FF و FFF در امتداد محور مرکزی برای میدان cm^2 ۱۵×۱۵

همان طور که از شکل ها مشخص است توزیع فضایی شار باریکه فوتونی فاقد فیلتر هموارکننده در قسمت مرکزی دارای یک قله می‌باشد که می‌تواند عامل برهم زدن میزان یکنواختی شار رسیده به هدف گردد اما باریکه فوتونی هموار شده توزیع شار یکنواخت تری نسبت به باریکه فاقد فیلتر دارد. مقایسه توزیع فضایی شار در اندازه میدان های مختلف این واقعیت را آشکار می‌سازد که با افزایش اندازه میدان تابشی اختلاف بین پارامتر یکنواختی شار در شتابدهنده با فیلتر وبدون فیلتر افزایش می‌یابد. این اختلاف از ۷٪ در میدان تابشی ۳×۳ به ٤٥٪ در میدان تابشی ۲۵×۲۵ می رسد.

شکل های ٥ و ٦ مقایسه شارانرژی باریکه های فوتون FF و FFF را به ترتیب در میدان های تابشی ۱۰×۱۰ و ۲۵×۲۵ نشان می‌دهد.



شکل (٥) مقایسه شار انرژی فوتون FF و FFF در امتداد محور مرکزی برای میدان cm^2 ۱۰×۱۰



شکل (٦) مقایسه شار انرژی فوتون FF و FFF در امتداد محور مرکزی برای میدان cm^2 ۲۵×۲۵

مقایسه طیف انرژی باریکه های FF و FFF نشان می‌دهد که با حذف فیلتر مسطح تعداد فوتون ها در طیف انرژی باریکه بخصوص در انرژی های پایین فوتون (کمتر از MeV ۲) افزایش می‌یابد. این افزایش در میدان cm^2 ۳×۳، ۳۹٪ بوده و با بزرگ شدن اندازه میدان اختلاف تعداد فوتون های باریکه های FF و FFF در ناحیه انرژی پایین طیف انرژی فوتون (کمتر از MeV ۲) افزایش یافته و به اختلاف ٦۲٪ در میدان cm^2 ۲۵×۲۵،

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

می‌رسد که نشان دهنده افت میزان یکنواختی انرژی با بـزرگ شـده میدان تابشی است.

در جدول ۱ نسبت پارامتر یکنواختی شار انرژی و توزیـع فضـایی شار فوتون برای شتابدهنده بدون وبا فیلتر هموارکننده (FFF/FF) گزارش شده است.

جدول ۱: نسبت پارامتر یکنواختی (FFF/FF) شار فوتون در امتداد محور مرکزی در SSD= ۱۰۰ cm

نسبت پارامتر یکنواختی توزیع فضایی شار (FFF/FF)	نسبت پارامتر یکنواختی انرژی (FFF/FF)	اندازه میدان (cm^2)
۰/۹۳	۰/۹۵	۳×۳
۰/۹۲	۰/ ۹۵	٤×٤
۰/۹۰	۰/ ۹۳	٦×٦
۰/۷۳	۰/ ۸۷	۱۰×۱۰
۰/٦٥	۰/ ۸۲	۱٥×۱٥
۰/٦۱	۰/ ۷۸	۲۰×۲۰
۰/٥٥	۰/ ۷۰	۲٥×۲٥

بررسی نتایج گزارش شده نشان می‌دهد کـه اسـتفاده از شـتابدهنده فاقد فیلتر هموار کننده میـزان یکنـواختی شـار انـرژی را ۰/۹۵و ۰/۷۰ برابر و میزان یکنواختی توزیع فضـایی شـار را ۰/۹۳ و ۰/۵۵ برابر شتابدهنده دارای فیلتر به ترتیب در میدان‌هـای ۳×۳ و ۲۵×۲۵ کاهش می‌دهد. در مطالعه ای که توسط اسدی و همکـارانش روی دسـتگاه زیمـنس مـدل Oncor بـا اسـتفاده از کـد مونـت کـارلو BEAMcnr در دو حالت فاقد و دارای فیلتر هموارکننده انجام شده است، کاهش میزان یکنـواختی انـرژی باریکـه فوتـونی رسـیده بـه هدف برای میدان cm^2 ۱۰×۱۰، ۰/۸۳ گزارش شـده اسـت کـه بـا تقریب ٤٪ در توافق با مقدار ۰/۸۷ بدست آمده در این مطالعه است [۸] . تغییر این پارامتر در اثر حذف فیلتر مسـطح در انـدازه میـدان های کوچک از اهمیت کمتری برخـوردار اسـت. همـانطور کـه در جدول ۱ هم مشاهده می‌شود این پارامتر برای میـدان cm^2 ۳× ۳، ۰/۹۵ و ۰/۹۳ به ترتیب برای انرژی و شار مـی‌باشـد و بـا افـزایش اندازه میدان این مقادیر به ۰/۷۰ و ۰/۵۵ در اندازه میدان cm^2 ۲۵× ۲۵ می‌رسند. بنابراین نتایج نشان می‌دهد با افـزایش انـدازه میـدان، حذف فیلتر مسطح میـزان یکنـواختی انـرژی و شـار فوتـون را بـه ترتیب حدود ۲٦٪ و ٤۰٪ کاهش می‌دهد.

آنچه که از نتایج این مطالعه استنباط می‌شود وابستگی صریح میزان یکنواختی توزیـع شـار و انـرژی باریکـه فوتـون در حجـم هـدف درمانی به حضور یا عدم حضور فیلتر هموارکننده اسـت. همچنـین نتایج نشان داد که در تکنیکFFF میزان یکنـواختی توزیـع شـار و انرژی فوتون در اندازه میدان هـای تابشـی کوچـک‌تـر نسـبت بـه حالتیکه از شتابدهنده دارای فیلتر استفاده می‌شود، به میزان کمتـری تغییر می‌کند. اما در اندازه میـدان هـای تابشـی بزرگتـر یکنـواختی توزیع شار و انرژی فوتون در اثر حـذف فیلتـر هموارکننـده کمتـر می‌شود. با توجه به ایـن کـه یکـی از مهـم تـرین اهـداف در پرتـو درمانی رسیدن شار و در پی آن دز یکنواخت به کل حجم درمـانی است، پیشنهاد می‌شود در عمل بـرای انتخـاب تکنیـک FFF بایـد اندازه میدان های تابشی کوچک‌تر از میـدان مرجـع مـورد اسـتفاده قرار بگیرد تا ضمن بهره مند شدن از مزایای این روش، یکنـواختی شار و انرژی رسیده به هدف درمانی حفظ شود.

مرجع‌ها

[1] M. R. Ay,et al.; -A full quantitative analysis of 18 MV photon beam from 2100 C / D-Varian clinical linear accelerator with and without flattening filter; *Iranian journal of radiation research*, **vol.17**no.1 April, 2019.

[2] F. Khan,et al.; *The Physics of Radiation Therapy*. 2014.

[3] O. N. Vassiliev, et al.;Monte Carlo study of photon fields from a flattening filter-free clinical accelerator; *Medical Physics*, **vol. 33**, **no. 4**, pp. 820–827, 2006.

[4] A. Kajaria, et al.; Study of the Dosimetric Properties of an Unflattened 6-MV Photon Beam By Using the BEAMnrc Code; *Journal of the Korean Physical Society*, **vol. 69, no. 4** 2016.

[5] بیدختی،پریسا و کریمی شهری، کیهاندخت؛بررسـی اثـر حـذف فیلتـر هموارکننده دستگاه واریـان *C/D 2100 بـا باریکـه* MV ۱۸ بـر توزیـع عرضی دز و میزان پراکندگی تابش بـا اسـتفاده از کـد مونـت کـارلو MCNPX ؛کنفرانس هسته ای ایران ۱۳۹۸.

[6] F. Pönisch *et al.*; Properties of unflattened photon beams shaped by a multileaf collimator Properties of unflattened photon beams shaped by a multileaf collimator; American Association of Physicists in Medicine**, vol. 1738**, 2013.

[7] رازقندی،سـمیرا؛ کریمـی شـهری،کیهاندخت وفیروزآبـادی، محمـد مهدی؛ تعیین پارامترهای الکترون اولیه‌ی دستگاه واریان 2100C/D بـا باریکه‌ی MV ۱۸ با استفاده از کدMCNPX؛ کنفرانس هسـته ای ایـران ۱۳۹۷ .

[8] A. Asadi, et al.;Monte Carlo evaluation of the potential benefits of flattening filter free beams from the Oncor® clinical linear accelerator; *Journal of X-ray Science and Technology*, **vol. 26, no. 2**, 2018.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

شواهدی از رفتار وابسته به انرژی پتانسیل مغز دافعه در فرایند برخورد یون‌های سنگین در محدوده انرژی‌های فرودی < ۳۰۰ MeV

شیبانی، جواد[۱]؛ قرائی، رضا[۲]؛ میرجلیلی، ابولفضل[۱]؛ جاویدان، کورش[۳]

[۱]دانشکده فیزیک، دانشگاه یزد، یزد

[۲]گروه فیزیک، دانشگاه حکیم سبزواری، سبزوار

[۳] گروه فیزیک، دانشگاه فردوسی مشهد، مشهد

چکیده

با اعمال اثرات مغزی دافعه ناشی از تراکم‌ناپذیری ماده هسته‌ای در برهم‌کنش‌های نوکلئون-نوکلئون، به بررسی رفتار وابسته به انرژی سطح مقطع‌های همجوشی واکنش‌های $^{26}Mg+^{248}Cm$، $^{36}S+^{238}U$ و $^{48}Ca+^{208}Pb$ (متناظر با ناحیه جرمی $Z_pZ_t<1800$) و $^{50}Ti+^{209}Bi$، $^{40}Ca+^{238}U$ و $^{48}Ca+^{238}U$ (متناظر با ناحیه جرمی $Z_pZ_t>1800$) در محدوده انرژی‌های فرودی $E_{c.m.}<300$ MeV پرداخته‌ایم. برای دستیابی به این هدف، محاسبات پتانسیل برهم‌کنشی را برپایه مدل میکروسکوپیکی واپیچش-دوگانه (DF) همراه با نیروهای وابسته به چگالی از نوع M3Y انجام داده‌ایم. نتایج بدست آمده شواهدی از رفتار وابسته به انرژی را برای قدرت پتانسیل مغز دافعه دربرهم‌کنش‌های نوکلئونی نشان می‌دهد که تنها برای محدوده جرمی $Z_pZ_t>1800$ ظاهر می‌شود.

کلمات کلیدی: *برخورد یون‌های سنگین، سطح مقطع همجوشی، اثرات ماده هسته‌ای سرد، مدل واپیچش-دوگانه*

Signature of energy dependence of the repulsive core potential in the heavy-ion collision at incident energy range<300 MeV

Sheibani, Javad[1]; Gharaei, Reza[2] ;Mirjalili, Abolfazl[1]; Javidan, Kourosh[3]

[1]*Physics Dept., Yazd university, Yazd*

[2]*Physics Dept., Hakim Sabzevari university, Sabzevar*

[3]*Physics Dept., Ferdowsi university of Mashhad, Mashhad*

Within the framework of the double-folding (DF) model which is accompanied by the density-dependent M3Y force, we have investigated the energy-dependent behavior of the fusion cross sections for $^{26}Mg+^{248}Cm$, $^{36}S+^{238}U$ and $^{48}Ca+^{208}Pb$ (with $Z_pZ_t<1800$) as well as $^{50}Ti+^{209}Bi$, $^{40}Ca+^{238}U$ and $^{48}Ca+^{238}U$ reactions (with $Z_pZ_t>1800$) by imposing the repulsive core effects caused by the nuclear matter incompressibility. The obtained results show an energy-dependent behavior for the strength of repulsive core potential in nucleon-nucleon interactions for mass range of $Z_pZ_t>1800$.

Keywords*: Heavy-ion collision, fusion cross section, cold nuclear matter effects, double-folding model*
PACS No: 24

مقدمه

یکی از مهم‌ترین ابزارهای تئوری در زمینه آنالیز فرایند برخورد یون‌های سنگین از طریق کانال همجوشی کامل، پتانسیل برهم-کنشی میان هسته‌های پرتابه و هدف می‌باشد. در حالت کلی و با فرض قرار داشتن هسته‌ها در حالت موج-s، این پتانسیل شامل دو بخش هسته‌ای $V_N(r)$ و کولنی $V_C(r)$ خواهد بود. امروزه بدلیل شناخت کافی از برهم‌کنش‌های الکترواستاتیکی، امکان محاسبه دقیق پتانسیل کولنی در حین برخورد دو هسته در محدوده انرژی-های مگا الکترون ولت فراهم می‌باشد. این در حالی است که مطالعه برروی پتانسیل هسته‌ای و تلاش برای دستیابی به درک بیشتر از ابعاد مختلف ویژگی‌های آن همواره از موضوعات چالش برانگیز و در عین حال جذاب فیزیک هسته‌ای در طی دهه‌های اخیر بوده است. از جمله خصوصیات برجسته برهم‌کنش‌های هسته‌ای، وجود یک بخش دافعه ناشی از اثرات اشباع نیروهای هسته‌ای می‌باشد که مانع از نزدیک شدن بیش از حد نوکلئون‌ها به یکدیگر می‌شود. از نقطه نظر فیزیکی، حضور مغزی دافعه در برهم‌کنش‌های نوکلئون-نوکلئون را به نوعی می‌توان به اثرات اصل طرد پاؤلی نسبت داد؛ چراکه براساس این اصل توابع موج فرمیونی

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

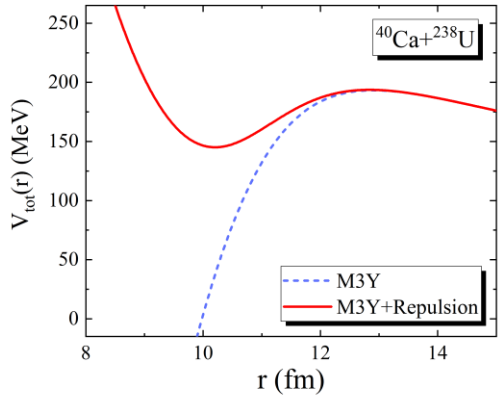
قادر به همپوشانی با یکدیگر نبوده و بنابراین قابل انتظار است که ماده هسته‌ای تراکم‌ناپذیر باشد. نتایج حاصل از تحقیقات مختلف آشکار می‌سازد که در نظرگرفتن اثرات تراکم‌ناپذیری ماده هسته‌ای در برهم‌کنش‌های نوکلئونی باعث بهبود نتایج پتانسیل برهم‌کنشی و همچنین سطح مقطع همجوشی یون‌های سنگین خواهد شد [۵-۱]. خاطر نشان می‌شود یکی از مدل‌های تئوری پرکاربرد برای شبیه-سازی اثرات مذکور در برهم‌کنش‌های نوکلئونی، مدل میکروسکوپیکی DF [۶] است. محققان در سال ۲۰۰۷ فرم اصلاح شده‌ای از این مدل را ارائه کرده‌اند که می‌تواند پاسخگوی نقش اثرات تراکم‌ناپذیری در واکنش‌های همجوشی یون‌های سنگین - باشد [۳]. باید توجه داشت که از نقطه نظر انرژی ذرات فرودی، مطالعات صورت گرفته برپایه مدل اصلاح شده DF بطور عمده به نواحی انرژی‌های زیرسدی اختصاص دارند، بعنوان مثال مراجع [۳-۱] را ملاحظه نمایید. این در حالی است که بررسی نقش اثرات شبیه‌سازی مغز دافعه در محدوده انرژی‌های بالای سد کولنی تنها به مطالعات اندکی نظیر [۴,۵] محدود می‌شوند. نکته قابل توجه دیگر محدوده جرمی واکنش‌هایی است که تاکنون مورد مطالعه قرار گرفته‌اند. این محدوده عبارت است از $64<Z_pZ_t<1176$. حال سؤالی که در این بین مطرح می‌شود این است که در صورت تعمیم این بازه به نواحی جرمی سنگین‌تر و به تبع آن نواحی انرژی بالاتر، آیا امکان وجود اثرات فیزیکی مهم دیگری در بحث برهم‌کنش‌های نوکلئون-نوکلئون مطرح خواهد بود؟ برای دستیابی به پاسخ مناسب، بر آن شدیم تا در تحقیق حاضر مطالعات مربوط به اثرات تراکم‌ناپذیری ماده هسته‌ای را به نواحی جرمی $ZpZt<2000$ تعمیم دهیم. در این راستا، شش واکنش همجوشی یون-سنگین شامل $^{26}Mg+^{248}Cm$، $^{36}S+^{238}U$، $^{48}Ca+^{208}Pb$، $^{50}Ti+^{209}Bi$، $^{40}Ca+^{238}U$ و $^{48}Ca+^{238}U$ را برگزیدیم که انرژی فرودی هسته-های پرتابه آن‌ها در سیستم مرکز-جرم در بازه $E_{c.m.}<300$ MeV قرار دارند. لازم به ذکر است که هسته‌های برخوردی را به شکل کروی فرض کرده و برای تعیین رفتار شعاعی پتانسیل در این واکنش‌ها از مدل DF بهره گرفته‌ایم. علاوه بر این، با توجه به بازه انرژی انتخابی محاسبات مقادیر تئوری سطح مقطع همجوشی را برپایه مدل نفوذ از سد تک بعدی انجام داده‌ایم.

روش کار

در چارچوب مدل DF، پتانسیل هسته-هسته از طریق جمع‌بندی برروی قدرت برهم‌کنش‌های نوکلئون-نوکلئون و به صورت زیر تعیین می‌گردد [۳]،

$$U_{DF}(r)=\int \rho_P(r_1)\upsilon(r_{12})\rho_T(r_2)dr_1dr_2 \qquad (۱)$$

همانگونه که مشاهده می‌گردد محاسبات این مدل منوط به آگاهی از شکل توزیع چگالی هسته‌ها و همچنین بخش مرکزی $\upsilon(r_{12})$ می‌باشد که به نوعی قدرت برهم‌کنش‌های نوکلئون-نوکلئون را تعیین می‌کند. در تحقیق حاضر، برای پارامترسازی این دو بخش به ترتیب از تابع توزیع دو پارامتری فرمی-دیراک [۱] و برهم‌کنش-های وابسته به چگالی از نوع نیروی CDM3Y6 [۶] بهره گرفته-ایم. گفتنی است که محاسبات مربوط به مدل پتانسیل DF را برپایه کد منتشرشده در مرجع [۷] انجام شده است. در گام نخست از محاسبات این تحقیق، پتانسیل برهم‌کنشی را براساس رویکرد فوق برای هر یک از شش سیستم همجوشی مورد مطالعه محاسبه کرده-ایم، شکل (۱) را برای واکنش دلخواه $^{40}Ca+^{238}U$ ملاحظه نمایید. نتایج بدست آمده نشان می‌دهد که مدل DF شکل پتانسیل را در فواصل شعاعی کم $(R < R_1+R_2)$ بصورت جاذبه محض پیش‌بینی می‌کند که از نقطه نظر فیزیکی قابل قبول نمی‌باشد.



شکل(۱): روند تغییرات پتانسیل برهم‌کنشی کل برحسب فاصله r به جهت نشان دادن اعمال اثرات مغز دافعه برای واکنش همجوشی دلخواه $^{40}Ca+^{238}U$.

عمده‌ترین دلیل برای وجود چنین رفتاری را می‌بایست در این واقعیت فیزیکی جستجو کرد که اساس مدل DF مبتنی بر "برخوردهای پیرامونی" است که در آن فرایند همپوشانی هسته‌ها از اهمیت چندانی برخودار نمی‌باشد. حال آنکه در واکنش‌های همجوشی یون-سنگین علاوه بر فواصل سطحی، برهم‌کنش هسته-

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

ها در فواصل شعاعی کم نیز از اهمیت ویژه‌ای برخودار است. برای رفع این نقیصه، محققان در سال ۲۰۰۷ یک بخش دافعه ناشی از اثرات طرد پاولی را به نتایج مدل پتانسیل DF اضافه کردند که بصورت زیر تعریف می‌گردد،

$$U_{rep}(r) = \int \rho_P(r_1) V_{rep} \delta(r_{12}) \rho_T(r_2) dr_1 dr_2 \qquad (۲)$$

همانگونه که مشخص است در اینجا برای تعیین بخش مرکزی انتگرال از فرم پیشنهادی $\upsilon_{rep} = V_{rep}\delta(r_{12})$ [۱] استفاده شده است که در آن ضریب V_{rep} قدرت برهم‌کنش‌های دافعه نوکلئونی را نشان می‌دهد. لازم به ذکر است که برای استخراج مقادیر این ضریب در واکنش‌های مختلف از همخوانی میان داده‌های تئوری و تجربی سطح مقطع همجوشی بهره گرفته‌ایم. نتایج مدل‌سازی اثرات مغزی سخت در برهم‌کنش‌های نوکلئونی نشان می‌دهد که اعمال این اثرات در فرمالیسم مدل DF علاوه بر اینکه باعث ظهور فرورفتگی‌های کم‌عمقی در نواحی داخلی پتانسیل می‌شود، ارتفاع و ضخامت سد را نیز در این مدل افزایش می‌دهد. این نتایج به وضوح در شکل (۱) قابل مشاهده می‌باشد. تحت چنین شرایطی انتظار خواهیم داشت که اصلاحات ناشی از اثرات تراکم‌ناپذیری ماده هسته‌ای برروی رفتار وابسته به انرژی سطح مقطع‌های همجوشی در نواحی انرژی بالا تأثیر گذار باشد که در ادامه به بررسی آن خواهیم پرداخت.

تراکم‌ناپذیری ماده هسته‌ای

با توجه به اهمیت خاصیت اشباع ماده هسته‌ای در محاسبات این تحقیق، در ابتدای این بخش قصد داریم تا قدرت ثابت تراکم-ناپذیری K در واکنش‌های یون-سنگین انتخابی مورد ارزیابی قرار دهیم. بطور کلی، برای تعیین مقادیر دقیق این ثابت نیاز است تا درک خود را در مورد معادله حالت $\varepsilon(\rho,\delta)$ در نزدیکی نقطه اشباع چگالی ($\rho=\rho_0$) افزایش دهیم. چراکه طبق تعریف زیر ثابت K مستقیماً به میزان انحنای معادله حالت هسته‌ای در نقطه اشباع وابسته است،

$$K = 9(\rho^2 \frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial \rho^2})_{\rho=\rho_0} \qquad (۳)$$

در این رابطه برای تعیین انرژی ماده هسته‌ای به ازای نوکلئون $\varepsilon(\rho,\delta)$ از مدل توماس-فرمی [۸] بهره گرفته‌ایم. در جدول (۱) مقادیر مربوط به ثابت تراکم‌ناپذیری در هر یک از واکنش‌های مورد مطالعه لیست شده‌اند. همانگونه که مشاهده می‌گردد از بین واکنش‌های مورد بررسی، بیشترین و کمترین میزان تراکم‌ناپذیری به ترتیب به سیستم‌های $^{50}Ti+^{209}Bi$ و $^{48}Ca+^{238}U$ اختصاص دارند. علاوه براین، مقدار متوسط ثابت K در محدوده جرمی حاضر برابر با K = ۲۱۸,۳۵ MeV می‌باشد که در مقایسه با مقدار گزارش شده K ≈ ۲۳٤ MeV [۱,۲] برای محدوده‌های جرمی سبک‌تر به میزان قابل توجهی کم‌تر است. تحت این شرایط می‌توان گفت ماده هسته‌ای شکل گرفته در حین برخورد هسته‌های سنگینی همچون ^{238}U و ^{48}Ca، به نسبت یون‌های سبک‌تر، نرم‌تر است.

جدول (۱): مقادیر حاصل برای ثابت تراکم‌ناپذیری واکنش‌های مختلف.

Reactions	Z_1Z_2	K (MeV)
$^{26}Mg+^{248}Cm$	۱۱۵۲	۲۱۷,۲۷
$^{36}S+^{238}U$	۱٤۷۲	۲۱۷,۲۵
$^{48}Ca+^{208}Pb$	۱٦٤۰	۲۱۸,۵۹
$^{50}Ti+^{209}Bi$	۱۸۲٦	۲۲۰,٦۷
$^{40}Ca+^{238}U$	۱۸٤۰	۲۱۹,۹۳
$^{48}Ca+^{238}U$	۱۸٤۰	۲۱٦,٤۲

آنالیز سطح مقطع‌های همجوشی: محدوده جرمی Z_pZ_t < 1800

سیستم‌های همجوشی یون-سنگینی که تاکنون در زمینه اهمیت اثرات اشباع ماده هسته‌ای در نواحی انرژی بالای سد مورد مطالعه قرار گرفته‌اند در محدوده Z_pZ_t < 700 قرار دارند. نتایج بدست آمده در این زمینه آشکار می‌سازد که اعمال اثرات مدل‌سازی مغزی دافعه در برهم‌کنش‌های نوکلئون-نوکلئون باعث افزایش ارتفاع سدهای کولنی و در نتیجه کاهش سطح مقطع‌های همجوشی در نواحی انرژی بالای سد خواهد شد. برای بررسی این نتیجه در محدوده جرمی انتخاب شده در تحقیق حاضر، مقایسه‌ای میان مقادیر تئوری و تجربی سطح مقطع همجوشی در چارچوب مدل-های اولیه و اصلاح شده DF برای سه واکنش $^{26}Mg+^{248}Cm$، $^{36}S+^{238}U$ و $^{48}Ca+^{208}Pb$ انجام داده‌ایم، شکل(۲) (نمودارهای سمت چپ) را ملاحظه نمایید. نگاه دقیق به نتایج بدست آمده در این شکل آشکار می‌سازد که اعمال اثرات ماده هسته‌ای (مشابه محدوده‌های جرمی کوچکتر [٤,۵]) باعث کاهش مقادیر تئوری

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

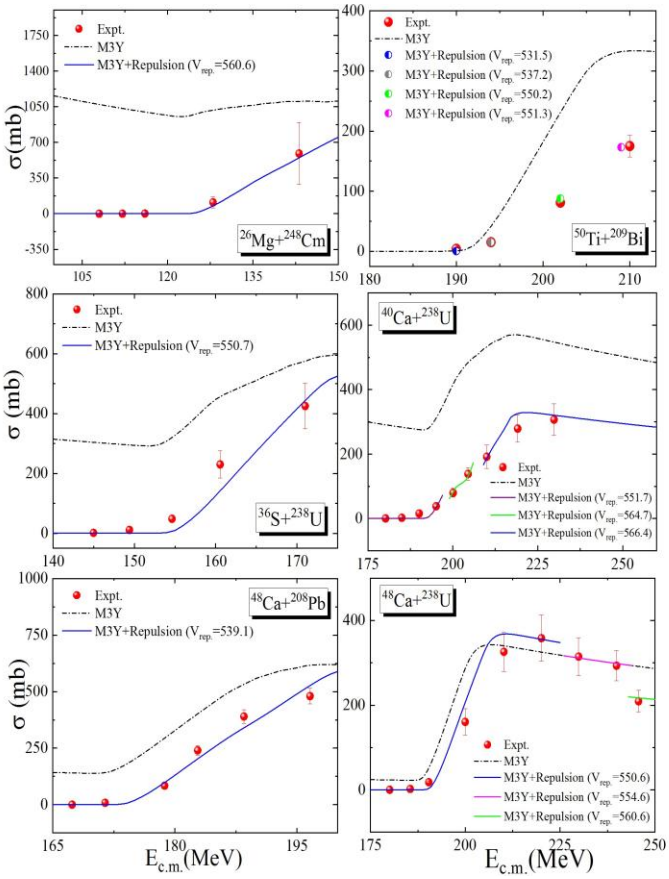
سطح مقطع همجوشی در حد انرژی‌های بالا و بهبود توافق آنها با داده‌های متناظر تجربی در هر یک از واکنش‌های مورد بررسی خواهد شد. در حقیقت، با تنظیم قدرت پتانسیل دافعه V_{rep} در مقادیر ۵۶۰٫۶ MeV (برای $^{26}Mg+^{248}Cm$)، ۵۵۰٫۷ MeV (برای $^{36}S+^{238}U$) و ۵۳۹٫۱ MeV (برای $^{48}Ca+^{208}Pb$) قادر خواهیم بود توافق قابل قبولی میان نتایج تئوری و تجربی حاصل از مدل اصلاح شده DF در محدوده جرمی $Z_pZ_t<1800$ بدست آوریم.

آنالیز سطح مقطع‌های همجوشی: محدوده جرمی $Z_pZ_t>1800$

در شکل (۲) (نمودارهای سمت راست)، روند تغییرات سطح مقطع‌های همجوشی حاصل از مدل‌های DF(M3Y) و DF(M3Y+Repulsion) برای سه واکنش $^{50}Ti+^{209}Bi$، $^{40}Ca+^{238}U$ و $^{48}Ca+^{238}U$ به صورت تابعی از انرژی مرکز جرم رسم شده‌اند. عدم توانایی مدل M3Y در پیش‌بینی داده‌های تجربی سطح مقطع در اینجا نیز مشهود است. نکته قابل توجه در نتایج حاصله برای سه واکنشی که در محدوده $Z_pZ_t>1800$ قرار دارند این است که در مورد آنها با یک تک مقدار مشخص برای قدرت مغزی دافعه قادر به بازتولید نتایج سطح مقطع‌های همجوشی در محدوده انرژی‌های مختلف نخواهیم بود. در حقیقت، نتایج بدست آمده یک رفتار وابسته به انرژی را برای این کمیت نشان می‌دهد. بطوریکه با افزایش انرژی فرودی در حین برخورد یون‌های سنگین در ناحیه $Z_pZ_t>1800$، قدرت مغزی دافعه در برهم‌کنش‌های نوکلئونی افزایش می‌یابد.

بحث و نتیجه‌گیری

در این تحقیق به مطالعه نقش مدل‌سازی اثرات تراکم‌ناپذیری ماده هسته‌ای برروی سطح مقطع‌های همجوشی ناشی از برخورد یون-های سنگین (با شرط $Z_pZ_t<1800$ و $Z_pZ_t>1800$) در محدوده انرژی $E<300$ MeV پرداخته‌ایم. برای این منظور، از مدل DF همراه با اصلاحات مغزی دافعه در برهم‌کنش‌های نوکلئونی بهره گرفته‌ایم. با توجه به محدوده انرژی‌های مورد مطالعه، محاسبات سطح مقطع همجوشی را نیز با مدل نفوذ از سد تک بعدی انجام داده‌ایم. نتایج حاصل نشان می‌دهد اعمال اثرات ماده هسته‌ای در چارچوب مدل میکروسکوپی DF باعث بهبود نتایج بدست آمده برای سطح مقطع‌های همجوشی در محدوده انرژی‌های بالا می-شود. علاوه براین، نشان دادیم که با تعمیم مطالعات مربوط به اثرات فیزیکی مذکور به نواحی جرمی خیلی سنگین، شواهدی مبنی بر وجود اثرات وابسته به انرژی برای قدرت مغزی دافعه ظاهر خواهد شد.



شکل(۲): روند تغییرات سطح مقطع‌های همجوشی برحسب انرژی $E_{c.m.}$ برای محدوده‌های $Z_pZ_t<1800$ (نمودارهای سمت چپ) و $Z_pZ_t>1800$ (نمودارهای سمت راست).

مرجع‌ها

[1] S. Misicu and H. Esbensen, Phys. Rev. C **75**, 034606 (2007).
[2] C. L. Jiang, B. B. Back, H. Esbensen, R.V.F. Janssens, K.E. Rehm, Phys. Rev. C **73**, 014613 (2006).
[3] R Gharaei, J. Phys. G: Nucl. Part. Phys. **44**, 045108 (2017).
[4] O.N. Ghodsi and V. Zanganeh, Nucl. Phys. A **846**, 40 (2010).
[5] R Gharaei, and M. R. Yazdi, Annals of Physics **412**, 168020 (2020).
[6] D.T. Khoa and G. R. Satchler, Nucl. Phys. A **668**, 3 (2000).
[7] I.I. Gontchar, M.V. Chushnyakova, Computer Physics Communications **181**, 168 (2010).
[8] W. D. Myers and W. J. Swiatecki, Phys. Rev. C **62**, 044610 (2000).

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بررسی توزیع شعاعی دز رادیوداروی رنیوم-۱۸۸، رنیوم-۱۸۶ و ساماریم-۱۵۳در درمان متاستاز استخوان با استفاده از کد MCNPX

صدر ممتاز، علیرضا؛ فکری ، پروانه

دانشکده علوم پایه دانشگاه گیلان ، رشت

چکیده

متاستاز استخوان یک عارضه ی شایع در هنگام پیشرفت سرطان در بیماران است. انتخاب شیوه مناسب برای درمان یا افزایش طول عمر بیماران مبتلا به متاستاز استخوان یک امر ضروری است.درمان با استفاده از رادیوداروها یکی از بهترین و موثرترین روش های درمانی به منظور تسکین و کاهش درد استخوانی می باشد. از جمله رادیوداروهای مورد توجه میتوان به رنیوم-۱۸۸،رنیوم-۱۸۶ و ساماریم-۱۵۳ اشاره کرد. هدف از این مطالعه محاسبه دز جذبی این رادیوداروها در استخوان ران پا می باشد. با استفاده از کد MCNPX سه استوانه هم محور با ارتفاع ۵ سانتی متر و قطر های ۱/۲ ، ۲/۶ و۷/۶ سانتی متر به ترتیب برای مغز استخوان، استخوان و بافت نرم شبیه سازی شد. با استفاده از تالی F8 دز جذبی در شبیه سازی MCNPX محاسبه شد. نتایج نشان داد که بیشترین و کمترین دز جذبی حاصل از ذرات بتا به ترتیب مربوط به ساماریم- ۱۵۳ با اکتیویته ۱۰/۰۱ مگابکرل و رنیوم -۱۸۶ با اکتیویته ۲/۱٤ مگابکرل می باشد و همچنین تابش گامای ساماریم-۱۵۳ بیشترین دز جذبی بر روی استخوان و محیط اطراف آن ایجاد میکند. بنابراین ساماریم-۱۵۳ برای درمان تومورهای حجیم و رنیوم-۱۸۶ برای برای تومور های کوچک تر مناسب تر خواهد بود.*

واژه های کلیدی: *دز جذبی،متاستاز استخوان،کد MCNPX ، رنیوم-۱۸۸، ساماریم-۱۵۳.*

Investigation of radial dose distribution of Re-188, Re-186 and Sm-153 in Treatment of Bone Metastases Using MCNPX code

Sadremomtaz, Alireza ; Fekri, Parvaneh

Department of Physics, University of Guilan, Rasht

Abstract

*Bone metastasis is a common complication when cancer progression in patients. Choosing the appropriate method for treatment or increase the life expectancy of patients with bone metastasis is an essential issue. Treatment using radiopharmaceuticals is one of the best and most effective treatment methods for relieving and reducing bone pain. .these radiopharmaceuticals are ^{188}Re, ^{186}Re and ^{153}Sm. The aim of this study was to calculate the absorption dose of these radiopharmaceuticals in the femur. By using of MCNPX code Three coaxial sub-cylinders 5cm in height and 1.2, 2.6, and 7.6cm in diameter were simulated for bone marrow, bone, and soft tissue respectively. By using *f8 tally absorption dose was calculated in MCNPX simulation. Results show that the maximum and minimum absorbed dose due to beta particles belong to ^{153}Sm with 10.01 MBq activity and ^{186}Re with 2.14 MBq activity , respectively. The ^{153}Sm gamma radiation also causes the highest dose of absorption on and around the bone. Therefore, ^{153}Sm can be suitably used for treatment of the massive tumors and ^{188}Re can be more useful for small tumors*

***Keywords**: Absorbed dose, Bone metastases, MCNPX code, Re-188, Sm-153*

PACS No. 20

مقدمه

متاستاز استخوان شایع ترین تومور های بدخیم استخوان هستند که منشاء آن ها خود استخوان نیست.وقتی فردی دچار سرطان ریه،پستان،پروستات تیروئید یااعضای دیگر شود،سلول های سرطانی از محل اولیه جدا می شوند و در جریان خون و دستگاه لنفاوی به حرکت در می آیند، خود را به استخوان رسانده و درآن شروع به رشد می کنند، در این صورت می گویند متاستاز استخوانی به وجود آمده است [۲،۱]. انتخاب شیوه مناسب برای درمان یا افزایش طول عمر بیماران مبتلا به متاستاز استخوان یک امر ضروری است. یکی از مهم ترین روش های درمان که امروزه بسیار رایج است درمان با استفاده از رادیو داروها است ،این ترکیبات به گونه ای طراحی و ساخته می شوند که بتوانند به ارگان مورد نظر در بدن رسیده و حداکثر دز ممکن را به بافت هدف که معمولا تومورهای سرطانی هستند، منتقل کنند[٤،٣]. اولین استفاده کلینیکی از مواد رادیواکتیو در سال ۱۹۳۷ جهت درمان لوسمی در دانشگاه کالیفرنیا بود. در اواسط دهه ٦٠ مطالعات گسترده ای در این زمینه ها آغاز گشت و در دهه ۱۹۷۰ توانستند با جاروب نمودن و هدایت مواد رادیواکتیو به درون ارگان های مشخص بدن، از ارگان های داخلی بدن مانند کبد و طحال، تومورهای مغزی و مجاری گوارشی تصویری را تهیه نمایند. در سال های دهه ۱۹۸۰ از رادیوداروها جهت تشخیص بیماری های قلبی استفاده نمودند و هم اکنون نیز با ضریب اطمینان بالایی از آنها در درمان و تشخیص و پیگیری روند درمان انواع بیماری ها استفاده می گردد. از جمله رادیودارو های مورد توجه می توان به رنیوم-۱۸۸ ، رنیوم-۱۸٦ و ساماریم-۱۵۳ اشاره کرد .این بتا گسیل ها را می توان در مقدارهای مورد نیاز از طریق واکنش (n،γ)تولید کرد[۷،٦،٥].در جدول یک ویژگی های این رادیونوکلئید ها آورده شده است. [۱۰،۹،۸]

جدول۱:ویژگی های رادیونوکلئیدهای ^{153}Sm ،^{188}Re و ^{186}Re

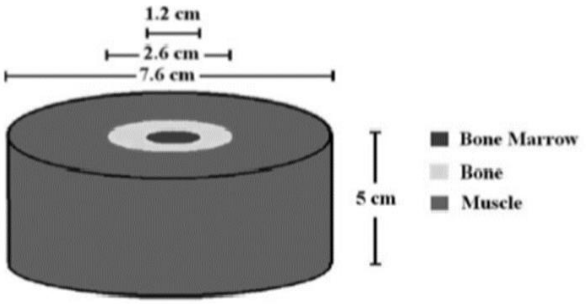
رادیونوکلئید	نیمه عمر (روز)	بیشینه انرژی ذرات بتا(keV)	متوسط انرژی ذرات بتا(keV)	درصد فراوانی	انرژی پرتو گاما(keV)	درصد فراوانی
رنیوم-۱۸۸	۰/۷	۲۱۲۰/۴۰ ۱۹۶۵/۳۸ ۱۴۸۷/۳۸	۷۹۵/۲۴ ۷۲۸/۷۴ ۵۲۷/۷۲	۷۱/۱ ۲۵/۶ ۱/۶۵	۱۵۵/۰۳ ۶۳۲/۹۹ ۴۷۷/۹۹	۱۵/۱ ۱/۲۷ ۱/۰۲
رنیوم-۱۸٦	۳/۷	۱۰۶۹/۵ ۹۳۲/۳۴ ۵۸۱/۶	۳۵۹ ۳۰۶ ۱۹۱/۹	۷۰/۹۹ ۲۱/۵۴ ۵/۷۸	۱۳۷/۱۶ ۱۲۲/۳	۹/۴۲ ۰/۶
ساماریم-۱۵۳	۱/۹	۸۰۸/۲ ۷۰۵/۰۲ ۶۳۵/۳۵	۲۸۳ ۲۲۶ ۲۰۹	۱۷/۵ ۵۰ ۳۲/۵	۱۰۳/۱۸ ۹۷ ۷۰	۲۸ ۱ ۴/۸۵

روش کار

در این مطالعه، شبیه سازی استخوان ران پا با استفاده از کد MCNPX انجام شده است[۱۲،۱۱]. هندسه شامل محیطی است که همه اجزا از جمله چشمه، فانتوم و آشکارسازها را در بر می گیرد. در این مدل محیط به صورت یک کره به شعاع ۵ سانتی متر که مرکز آن در مبدا مختصات واقع است فرض شده است. هندسه استوانه تقریب خوبی از استخوان ران پا است که در مدل در نظر گرفته شده است فانتوم به شکل استوانه ای به طول ۵ سانتی متر در راستای محور z تعریف شد.این فانتوم به صورت یک استوانه داخلی به قطر۱/۲ سانتی متر به عنوان مغز استخوان و یک پوسته استوانه ای به شعاع داخلی ۰/٦ سانتی متر و شعاع خارجی۱/۳ سانتی متر به عنوان استخوان قشری لحاظ شد. همچنین پوسته استوانه ای به شعاع داخلی۳/۸ سانتی متر در راستای محور z به عنوان بافت نرم اطراف استخوان تعریف شد وکسل های کوچکی برای محاسبه توزیع دز در نظر گرفته شد که این وکسل ها استوانه هایی به شعاع ۰/۵ میلی متر بودند که در راستای شعاع استوانه قرار داده شدند (۳۸ وکسل). و موقعیت چشمه در بازه

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

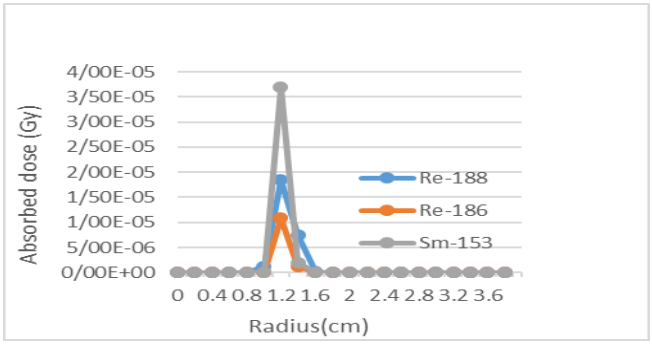
شعاعی ۱ تا ۳/۱ یعنی در بافت استخوانی فانتوم قرار داده شد با استفاده از مدل طراحی شده توزیع شعاعی دز جذبی حاصل از سه رادیوداروی ^{186}Re-HEDP, ^{153}Sm-EDTMP و-^{188}Re HEDP در سه بافت(در وکسل ها) محاسبه شد ، دادهها و درصد جرمی مربوط به مواد تشکیل دهنده ی سه بافت همگی از $ICRU$و$ICRP$ گرفته شده اند (جدول ۲). همچنین لازم به ذکر است تاریخچه ذرات گسیلنده از چشمه ده میلیون قرار داده شده است [۱۳،۱۴،۱۵].



شکل۱:هندسه و فانتوم شبه سازی شده در کد MCNPX

بحث و نتایج

از تالی *F8 معمولا برای محاسبه دز در هر سلول استفاده می شود به شرطی که بر واحد جرم آن سلول تقسیم گردد، بنابراین ابتدا کد MCNPX برای تالی *F8 اجرا و از فایل خروجی انرژی جذبی بتا و گاما در مغزاستخوان،استخوان و بافت نرم استخراج گردید، برای محاسبه دز جذبی بر حسب Gy/Bq انرژی جذبی در هر وکسل بر جرم آن تقسیم گردید و برای محاسبه دز جذبی بر حسب Gy دز جذبی برحسب Gy/Bq در اکتیویته هر چشمه ضرب شد .سپس نمودارهای توزیع دز تابشی در حجم وکسل ها برای ذرات بتا و گاما برای هر سه رادیودارو رسم شد . طبق مرجع ۱۴ اکتیویته رنیوم- ۱۸۸ و رنیوم- ۱۸۶ ، ۲/۱۴ MBq و ساماریم-۱۵۳ MBq ۱۰/۰۱ در نظر گرفته شد شکل ۲ توزیع شعاعی دز حاصل از پرتو های بتا در مدل طراحی شده در حجم وکسل ها را نشان می دهد . همان طور که مشاهده می شود با وجود بالاتر بودن انرژی بتای رنیوم-۱۸۸ دز حاصل از پرتوهای بتای ساماریم-۱۵۳در مقایسه با رنیوم-۱۸۸ و رنیوم-۱۸۶ بیشتر است که دلیل آن اکتیویته بیشتر ساماریم-۱۵۳ می باشد.همچنین مشاهده می شود که بیشترین مقدار انرژی ذرات بتا در بازه ی ۱ تا ۱/۳ جذب شده است دلیل این موضوع مجاورت با چشمه و برد کوتاه ذرات بتا می باشددر شکل۳ دز حاصل از پرتوهای بتای رادیوداروها بر سطح استخوان نشان داده شده است بیشترین دز مربوط به ساماریم-۱۵۳به دلیل اکتیویته بیشتر می باشد. در شکل۴ دز شعاعی حاصل از پرتوهای گامای سه رادیودارو در مغز استخوان، استخوان و بافت نرم نشان داده شده است مشاهده میشود که بیشترین دز جذبی حاصل از فوتون در سه بافت برای ساماریم-۱۵۳ می باشد که دلیل این امر فراوانی بیشتر گاماهای ساماریوم نسبت به رادیوداروهای دیگر و اکتیویته بالاتر آن است. همچنین در شکل۵ دز جذبی پرتوهای گاما بر روی سطح استخوان نشان داده شده است که رادیوداروی ساماریم-۱۵۳بیشترین دز جذبی بر روی سطح استخوان را دارا است.



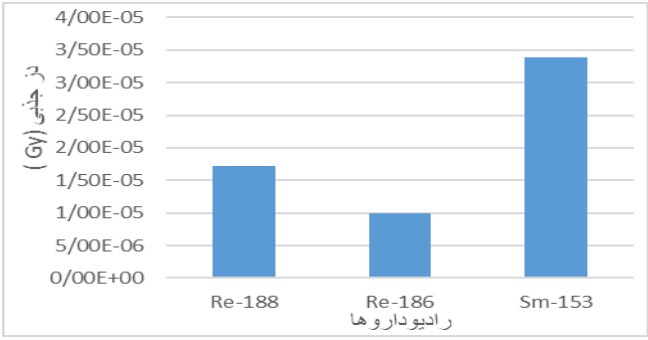
شکل۲:توزیع شعاعی دز حاصل از پرتوهای بتای گسیلنده از ساماریم-۱۵۳، رنیوم-۱۸۸و رنیوم-۱۸۶

جدول ۲. درصد وزنی و ترکیبات به کار رفته در مدل طراحی شده[۱۳]

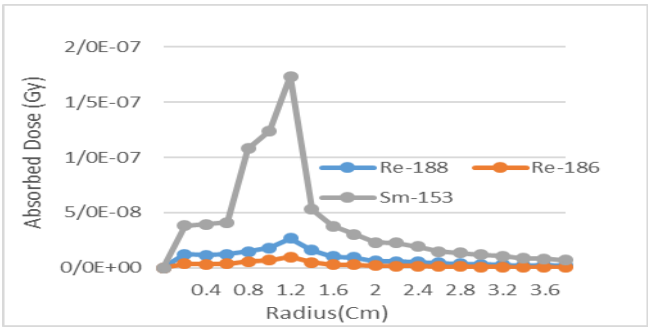
بافت	چگالی (g/cm^3)	درصد وزنی مولفه های عنصری					
		H	C	N	O	Ca	سایر
مغز استخوان	۱/۰۳	۱۰/۵	۴۱/۴	۳/۴	۴۳/۹	–	۰/۱Fe ، ۰/۱p ، ۰/۲S ، ۰/۲Cl ، ۰/۲K
استخوان	۱/۳۳	۳/۴	۱۵/۵	۴/۲	۴۳/۵	۲۲/۵	۰/۱Na ، ۱۰/۳P ، ۰/۳S ، ۰/۲Mg
بافت نرم	۱/۰۳	۱۰/۵	۲۵/۶	۲/۷	۶۰/۲	–	۰/۱ Na ، ۰/۲ P ، ۰/۳ S ، ۰/۲ Cl ، ۰/۲ K

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

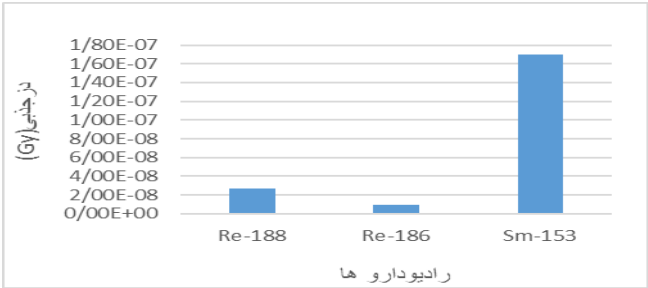
نتایج به دست آمده با نتایج تحقیقی که در سال۲۰۱۵ توسط رضا باقری و همکارانش انجام شد مقایسه شد خطای دز جذبی به دست آمده بر حسب Gy/Bq کمتر از یک درصد بود. در تحقیق فوق بیشترین دز حاصل از ذرات بتا در سطح استخوان مربوط به یوتریم-۹۰ و بیشترین دز حاصل از ذرات گاما مربوط به ساماریم-۱۵۳ بود. علاوه بر دز جذبی بر حسب گری/بکرل در مرجع ١٤ دز جذبی بر حسب Gy هم محاسبه شد [١٤].



شکل۳:دز جذبی حاصل از پرتوهای بتای گسیلنده از ساماریم-۱۵۳، رنیوم-۱۸۸ و رنیوم-۱۸٦ بر روی سطح استخوان.



شکل٤: توزیع شعاعی دز حاصل از پرتوهای گامای گسیلنده از ساماریم-۱۵۳، رنیوم-۱۸۸و رنیوم-۱۸٦



شکل۵: دز جذبی حاصل از پرتوهای گامای گسیلنده از ساماریم-۱۵۳، رنیوم-۱۸۸ و رنیوم-۱۸٦ بر روی سطح استخوان

نتیجه گیری

نتایج نشان داد که دز جذبی حاصل از تابش های بتای ساماریم-۱۵۳ با اکتیویته ۱۰/۰۱ MBq در استخوان بیشینه و پرتوگیری بافت های غیرهدف(مغز استخوان و بافت نرم) از آن بیشتر از دو رادیوداروی دیگر است.همچنین نتایج نشان داد که دز جذبی حاصل از تابش گامای ساماریم-۱۵۳ نسبت به رنیوم-۱۸۸ورنیوم-۱۸٦ قابل توجه تر است. بنابراین بهتر است برای تومور هایی که عمق بیشتری دارند با اکتیویته فوق از ساماریم-۱۵۳ استفاده شود.و تومور های سطحی از رنیوم-۱۸۸ و رنیوم-۱۸٦ استفاده شود.

مرجع ها

[١] N Aldo . Serafini . “Therapy of metastatic bone pain” J. Nucl. Med. (2001), 42 (6), pp 895-906.
[٢]A. Gojkovič Horvat,V. Kovač, P.Strojan. “Radiotherapy in palliative treatment of painful bone metastases” , (2009); 43(4), pp 213-224.
[٣] MG. Stabin ,“ Radiation Dosimetry in Nuclear Medicine” , Applied Radiation and Isotopes 50(1), 73- 7, (1999).
[٤] DF. Zech , S. Grond , J. Lynch , D Hertel, KA Lehmann . “Validation of World Health Organization Guidelines for cancer pain relief: a 10-year prospective study. Pain” 1995;63(1):65-76
[٥] A. Holmes, [153Sm]-EDTMP: a potential therapy for bone cancer, Semin. Nucl. Med., 22 (1992) 41-45.
[٦] W.A. Volkert, T.J. Hoffman, Therapeutic radiopharmaceuticals, Chem. Rev., 99 (1999) 2269-2292.
[٧] K. Hashimoto, K. Yoshihara, “Rhenium Complexes Labeled with 186,188Re for Nuclear Medicine,” Topics in current Chemistry, (1996), V. 176.
[٨] H.Palmedo et al, “ Dose escalation study with rhenium-188 hydroxyethylidene diphosphonate in prostate cancer patients with osseous metastases”, Eur J Nucl Med,(2000), Vol 27, pp 123-130
[٩] JM .De Klerk et al, “ Treatment of metastas bone pain using the bone seeking radiopharmaceutical Re-186- HEDP”, Anticancer Res,(1997), Vol 17, pp1773-1777
[١٠] EC. Etchebehere et al,” Treatment of bone pain secondary to metastases using samarium-153-EDTMP”,(2004), Sao Paulo Med J, Vol 122, pp 208-212
[١١] ی.کاسه ساز، م. حسن زاده ، آموزش کد MCNPX ، (١٣٩٤).
[١٢] م.وفابخش، ی.ریاضی،راهنمای استفاده از کد شبیه سازی mcnp4c ، (١٣٨٩)
[١٣] ICRU. Photon, electron, proton and neutron interaction data forbody tissues,ICRU Report 46, Bethesda, MD:ICRU;, (1992).
[١٤] M . bagheri .H. afarideh ,M. ghannadi maragheh ,” Study of Bone Surface Absorbed Dose in Treatment of Bone Metastases via Selected Radiopharmaceuticals: Using MCNP4C Code and Available Experimental Data, CANCER BIOTHERAPY AND RADIOPHARMACEUTICALS, (2015)
[١٥] رنجبر ، حسن. بررسی توزیع شعاعی دز و دز تجمعی رادیوداروهای مورد استفاده در تسکین درد متاستاز استخوان . مجله علوم و فنون هسته ای. (١٣٩٤)

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بهینه‌سازی چرخ تعدیلگر برد به کمک شبیه سازی نازل باریکه در روش پراکندگی منفعل در تکنیک پروتون‌درمانی

مهری، هانیه؛ طاهرپرور، پیوند

گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه دانشگاه گیلان، رشت، گیلان

چکیده

پروتون درمانی یکی از مهمترین روش‌های درمان انواع سرطان‌ها محسوب می‌شود. برای پرتوهای پروتونی تک انرژی، در ابتدا با افزایش عمق، مقدار دز عمقی به کندی افزایش می‌یابد، اما در انتهای برد این افزایش دز به صورت تیزتری (که قله براگ نامیده می‌شود) ادامه می‌یابد. به منظور ایجاد پوشش عمقی گسترده‌تر، می‌توان قله براگ، را با روی هم قرار دادن چندین پرتو با انرژی‌های متفاوت، پهن‌تر نموده و ناحیه‌ای با نام SOBP شکل داد. یکی از روش‌های تولید ناحیه SOBP، استفاده از چرخ تعدیلگر برد (RMW) در قسمت نازل باریکه است. در این تحقیق، با استفاده از کد مونت‌کارلو GATE به شبیه‌سازی یک چرخ تعدیلگر برد (RMW) در یک نازل پروتون درمانی پرداخته شده و به کمک برهمنهی قله های براگ حاصل از هر قطاع RMW، طول قوس مربوط به هر قطاع بهینه شده است.

واژه های کلیدی: پروتون‌درمانی، پراکندگی منفعل، RMW، GATE.

Optimization of range modulation wheel with nozzle simulation in passive scattering method in proton therapy technique

Mehri, Haniyeh; Taherparvar, Payvand

Department of Physics, Faculty of Basic Sciences, University of Guilan, Rasht, Guilan

Abstract

Proton therapy is one of the most important procedures for various types of cancer treatments. For single-energy proton beams, the depth dose increases slowly with increasing depth, but at the end of the proton range, this increase in dose continues more sharply (which is called Bragg peak). In order to dose spread over a wider region, the Bragg Peak can be widened by stacking several beams with different energies. Therefore, a flat area, which is called SOBP, will be formed. One of the most common methods for SOBP production is using a range modulation wheel (RMW) in the proton beam nozzle. In this study, by using GATE Monte Carlo code, we simulated the RMW geometry in a proton beam nozzle, which is located in the path of the proton beam. Furthermore, we optimized the length of the arc for each segment by using the Bragg peaks produced by each of RMW segments.

***Keywords**: Proton Therapy; passive scattering; RMW; GATE*

PACS No. 87.

مقدمه

در حال حاضر، سرطان‌ها از خطرناک ترین بیماری‌های تهدید کننده برای انسان‌ها محسوب می شود. روشهای درمانی فعلی برای درمان انواع سرطان‌ها؛ عمدتاً شامل جراحی، شیمی درمانی، رادیوتراپی یا ترکیبی از این موارد است. در سال‌های اخیر، استفاده از هادرون‌ها در پرتودرمانی خارجی بسیار مورد توجه قرار گرفته است و تقریبا برای درمان تمام انواع تومورهایی که به شکل سنتی

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

با پرتو ایکس و الکترون درمان می‌شوند، استفاده شده است، زیرا نهشت انرژی ذرات یونیزان برخلاف پرتوهای ایکس و گاما در انتهای عمق آنها بیشترین مقدار را دارد. با توجه به سهولت شتاب ذرات پروتونی (نسبت به سایر ذرات باردار سنگین‌تر)، پروتون‌درمانی جایگاه ویژه‌ای در پرتودرمانی خارجی یافته است زیرا شتاب ذرات پروتونی به سهولت انجام می‌شود و در درمان موارد متفاوتی مانند؛ تومورهای مغز، ستون فقرات، سر و گردن، پستان، ریه، بدخیمی‌های مربوط به معده و روده، سرطان‌های پروستات و زنان مورد استفاده قرار گرفته است [۱].

پروتون‌ها همانند ذرات باردار سنگین، با عبور از ماده به دلیل فعل و انفعالات کولنی و هسته‌ای، انرژی خود را در محیط به نهشت می گذارند. در نتیجه با افزایش عمق، میزان دُز جذبی، ابتدا به کندی افزایش، اما در انتهای برد این افزایش دُز به صورت قله تیزتری تحت عنوان قله براگ، ادامه می‌یابد انرژی باریکه به گونه ای انتخاب می شود تا مکان تومور در قله براگ واقع شود تا بالاترین میزان دُز را از تابش دریافت کند. با توجه به گستردگی پهنای تومور، یک قله براگ به تنهایی نمی تواند کل ناحیه تومور را بپوشاند بنابراین از برهمنهی چندین قله براگ از پروتون‌ها با دامنه های مختلف استفاده می شود تا ناحیه ای با پهنای مشخص با میزان دُزی تقریبا هموار ایجاد گردد تا تومور هدف به صورت طولی پوشانده شود. این ناحیه «قله براگ گسترش یافته» (SOBP[1]) نامیده می شود.

برای پهن کردن پرتو به صورت جانبی، از روش‌های پراکندگی منفعل و یا پویش نقطه به نقطه استفاده می‌شود. در یک نازل پراکندگی منفعل، یک پرتو باریک توسط یک سیستم پراکنده پراکنده می شود تا پرتوی پهن را به صورت جانبی شکل دهد. در این شیوه، باریکه پروتونی از یک فیلتر دندانه‌ای با نام فیلتر ریج و یا از چرخ تعدیل‌گر برد (RMW[2]) عبور می‌کند، تا عملا یک باریکه تک‌انرژی فرودی را به برهمنهی باریکه‌هایی با انرژی متفاوت تقسیم نماید. در مقابل در پویش نقطه به نقطه، جهت و مسیر یک پرتو باریک (پرتو مدادی) توسط آهنربا کنترل می شود تا تومور هدف در یک مسیر زیگزاگ به صورت طولی و نیز جانبی اسکن شود [۲،۳].

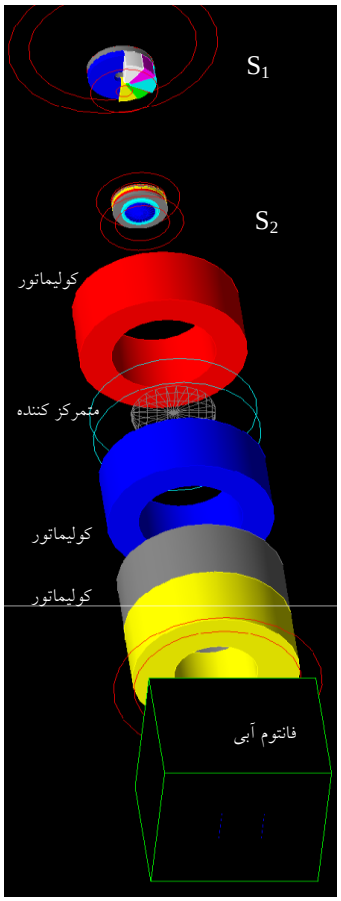
فیلتر ریج از مواد با عدد اتمی پایین مانند آلومینیوم ساخته می‌شود، که شامل دندانه‌های بسیار ریزی با ضخامت‌های مختلف هستند. درحالیکه، چرخ RM، با سرعت زاویه ای معینی در مسیر باریکه می چرخد و در هر مرحله ضخامت متفاوتی در مقابل باریکه قرار می‌گیرد. دراینصورت هر مرحله منجر به تشکیل یک قله براگ خواهد شد . طول قوس مربوط به هر قوس در واقع وزن هر قسمت را در ناحیه محاسبه دُز و SOBP تعیین می‌نماید. چرخ RM معمولا ترکیب یک ماده با عدد اتمی پایین (پلاستیک، کربن، آلومینیوم) و یک ماده با عدداتمی بالا (سرب، تنگستن) است که در هر مرحله در محدوده مناسب اما با قدرت پراکندگی ثابت تغییر داده می شود.

مدل و شبیه سازی

یکی از روش‌های مفید و کاربردی برای شبیه‌سازی فرآیندهای آماری و شبه‌آماری استفاده از روش‌هایی بر پایه تکنیک مونت‌کارلو است؛ و در این راستا کد شبیه سازی GATE بر پایه کد Geant4 موارد استفاده گسترده ای در کاربردهای اختصاصی پزشکی هسته ای یافته است. در این تحقیق با استفاده از کد شبیه‌سازی GATE به طراحی کل مجموعه مربوط به نازل پروتون درمانی در روش پراکندگی منفعل و استفاده از چرخ تعدیلگر برد (RMW) پرداخته‌ایم. محاسبه دُز جذبی ناشی از یک باریکه پروتونی در یک فانتوم آبی، پس از گذر از نازل پروتون درمانی طراحی شده، پرداخته شده است. بدین منظور، از یک چشمه نقطه‌ای باریکه پروتونی با انرژی ۳۰۰MeV، و یک حجم آبی مکعبی استفاده شد. و در ابتدا منحنی دُز جذبی عمقی در این فانتوم با در نظرگیری وکسل هایی به ضخامت ۱ میلیمتر محاسبه گشت.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

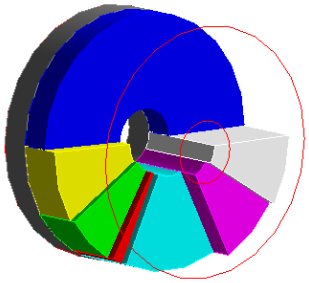
پس از محاسبه دُز و تعیین قله براگ مربوط به باریکه تک‌انرژی پروتونی، به کمک هندسه ارائه شده در مرجع [۲]، به طراحی و شبیه سازی اجزای یک نازل پروتون درمانی اقدام شد. این مجموعه شامل یک محفظه پوشش، پراکننده اول (S_1)، چرخ مدولاسیون دامنه، پراکننده دوم (S_2)، چندین کولیماتور، متمرکز کننده و روزنه است که نحوه طراحی و شبیه سازی آنها در کد GATE و نیز چگونگی قرارگیری آنها در شکل ۱ به نمایش درآمده است. نتایج حاصل از میزان دُز جذبی در یک فانتوم آبی در ابعاد ۴۰ مترمکعب و در ضخامت‌های ۱ میلیمتری در راستای عمقی با تعداد ذره ۵×۱۰^{۷} محاسبه شده است.



شکل۱ : نمایی از هندسه نازل پروتون‌درمانی در محیط GATE

پراکننده اول (RMW) که S_1 نامگذاری شده، شامل ۷ قطعه از جنس سرب و لگزان است که دارای ضخامت های متفاوتی می باشد، با قرارگیری هر قطعه در برابر چشمه پروتونی یک پیک براگ تشکیل شده است. این المان یکی از مهمترین اجزا در مجموعه نازل است تصویر دقیقتر آن در نمایی بزرگتر در شکل ۲ به نمایش درآمده است.

با توجه به اینکه طول قطاع هر یک از این هفت قطعه، درصد وزنی شدت هر پرتو را در میزان دُز نهایی تشکیل می‌دهد، بهینه سازی آن بخش مهمی از بهبود عملکرد نازل را تشکیل خواهد داد. به منظور بهینه سازی در ابتدا قله براگ حاصل هر کدام از قطاع ها به صورت مجزا محاسبه گردید که نمودار آن در شکل ۳ به نمایش درآمده است.



شکل۲ : نمایی از هندسه پراکننده اول (S_1) در محیط GATE

سپس درصدهای وزنی شدت هر پرتو، برای دستیابی به مقدار دُز ثابت در مکان x که محل رخداد ناحیه SOBP است به کمک رابطه زیر محاسبه گشت [۳]:

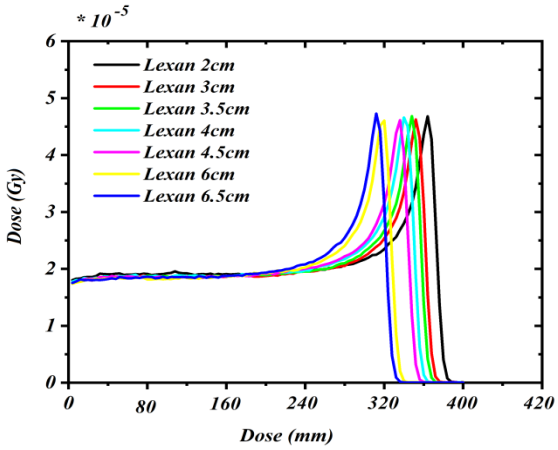
$$= \sum_i w_i D_i(x) \qquad (۱)$$

که در رابطه فوق w_i درصد وزنی شدت هر باریکه و $_i(x)$ دُز فیزیکی حاصل از باریکه پروتونی iام در مکان x، است. با حل معادله فوق می توان مقادیر w_i ها را یافت، که از رابطه زیر قابل محاسبه خواهد بود:

$$_n = D\sum_m((D^T)^{-1})_{m,n} \qquad (۲)$$

که D^T، ترانهاد ماتریس D است؛ که درایه‌های $D_{m,n}$ آن، مقدار دُز مربوط باریکه پروتونی nام در مکان x_m می‌باشد، و اندیس m، به تعداد پرتوهای دخیل در تشکیل ناحیه SOBP اشاره دارد. با محاسبه w_i زاویه هر قطاع به کمک رابطه $w_i * 360^o$ قابل محاسبه خواهد بود.

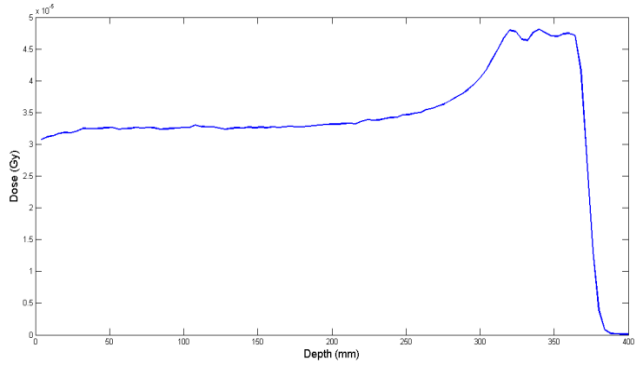
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹



شکل۳ : مقایسه توزیع دُز پرتو پروتونی با انرژی ۳۰۰MeV برای قطاع مختلف S_1

پراکننده دوم که S_2 نام دارد ازیک قسمت بیرونی از جنس سرب و یک قسمت درونی از جنس لگزان تشکیل شده است که این پراکننده درون یک کولیماتور با شعاع داخلی ٦/٥ سانتیمتر و شعاع خارجی ۱۰سانتیمتر قرار گرفته است.

قطعه چهارم در بخش نازل (شکل۱) یک متمرکز کننده می‌باشد که به منظور افزایش میزان دز جذبی در قسمت محوری و کاهش آن در قسمت های عرضی تعبیه می‌شود. سایر اجزای موجود در بخش نازل شامل کولیماتورها است که به منظور کاهش پرتوهای پراکنده در سیستم جایگذاری می‌شود. نتایج حاصل از محاسبه w_iها که درنهایت منجر به تعیین زاویه هر قطاع خواهد شد نشان می‌دهد که بیشرین زاویه قطاع به نازکترین لایه (با زاویه قطاع ۱۷۸ درجه) اختصاص می‌یابد و زوایای مربوط به سایر لایه ها به ترتیب ۰/۱۹، ۰/۱٤، ۰/۰۲۹، ۰/۲۸، ۰/۱۸ و ۰/۱۸ زاویه قطاع بزرگتر می‌باشد. تصویر RMW نشان داده شده در شکل۲ از این درصدها تبعیت می‌کند. نتایج حاصل از SOBP حاصل از طراحی چنین چرخی در شکل ٤ به نمایش گذاشته شده است که تا حد زیادی به یک SOBP نسبتا هموار نزدیک است.



شکل٤ : نمودار SOBP حاصل از RMW طراحی شده در نازل پروتون درمانی

نتیجه گیری

در این مقاله، با استفاده از کد شبیه‌سازی مونت‌کارلو GATE به شبیه‌سازی یک چرخ تعدیلگر برد در درون یک نازل پروتون‌درمانی در مسیر عبور یک باریکه پروتونی و محاسبه میزان دُز جذبی آن در یک فانتوم آبی پرداخته شده است و به کمک نتایج حاصل از میزان دُزجذبی جداگانه هریک از قطاع ها، به بهینه سازی میزان زاویه قطاع ها پرداخته شده است. در نازل پروتون‌درمانی، کولیماتورها و محافظ ها تنها برای توقف ذرات پراکنده در اطراف نازل و کاهش تا حد ممکن آنها در حجم هدف ضروری هستند. نقش اصلی پراکندگی توسط چرخ RMW ایفا می شود. نمودارها نشان می‌دهد که در روش پراکندگی منفعل، نقش چرخ RM در توزیع دُز نهایی به شدت تاثیرگذار است و البته با در نظرگیری قطاع های بیشتر برای این چرخ، می‌توان به منحنی هموارتری برای SOBP دست یافت.

مرجع‌ها

[1] F. M. Khan's, *Khan's the physics of radiation therapy*, Lippincott Williams & Wilkins/ Wolters Kluwer, *Fifth edition*, 677-697, 2014.

[2] F. Guan**,** *Design and simulation of a passive-scattering nozzle in proton beam radiotherapy*, 1-100, 2009.

[3] H. Paganetti, *Proton Therapy Physics*, Taylor and Francis, 18-57, 2011.

[4] T. Kanai et al, *Irradiation of mixed beam and design of spread-out Bragg peak for heavy-ion radiotherapy*, 78-85, 1997.

[5] Y. Song, J. Shin, S. Cho, S. Yoo, I. Cho, E. Kim, W. Jung, *A comparison study of ridge filter parameter using FULKA and GEANT4 simulation code*, 1–13, 2015.

[6] S. Jan, *et al "GATE: a simulation toolkit for PET and SPECT*, Phys. Med. Biol., 1–61, 2004.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

بررسی رفتار ضریب بهبود دز جذبی تومور در حضور نانوذرات طلا در ناحیه ی انرژی لبه های K و L با کد مونت کارلو MCNP5

صدرممتاز ، علیرضا[۱] ؛ آرامی، آرمین[۱] ؛ کاظمیان، محمدرضا[۱]

[۱] گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه گیلان ، رشت

چکیده

در کلیه روشهای درمانی مبتنی بر تابش هدف اصلی رسیدن بیشترین آسیب به بافت‌های تومور یا سلول های سرطانی و در عین حال مصون نگه داشتن بافت های سالم مجاور است. امروزه استفاده از نانوذرات طلا یکی از روش‌های متمرکز کردن انرژی تابش‌ها در بافت هدف است .حضور این نانوذرات به سبب زیاد بودن سطح مقطع برهمکنش طلا با انواع تابش که خود تابعی از عدد اتمی و چگالی الکترونی بالای طلا است، موجب افزایش حساسیت بافت به تابش و افزایش دز جذبی می شود. که علاقمندی پژوهشگران به استفاده از این نانو ذرات را در پی داشته است. هدف این مطالعه بررسی دز جذبی در حضور این نانوذرات و تاثیر غلظت های متفاوت این نانوذرات برای چشمه های گاما با گستره انرژی کیلو الکترون ولت و همچنین محاسبه ضریب بهبود دز در لبه های جذب لایه های اتمی K و L عنصر طلا و محاسبه میزان جابه جایی این لبه ها جهت حصول انتخاب بهینه انرژی و غلظت برای مطالعات پیش بالینی و بالینی است. این شبیه سازی با کد مونت کارلو MCNP5 انجام شد. افزایش غلظت نانو ذرات برای انرژی های مورد مطالعه به جز ۲۵/۱٤kev افزایش دوز جذبی را در پی داشت همچنین جابه جایی لبه جذب K از ۸۰/۷kev به بازه ۸۲kev-۸۳kev و جابه جایی زیرلایه های لایه L از بازه ۱۱/۹۱kev-۱٤/۳۵ kev به بازه٤٤kev-۵۱ kev ثبت شد.

واژه های کلیدی: *نانوذرات طلا، MCNP5، دزجذبی، لبه جذب*

an invesitgation on tumor dose enhacement factor in presence of gold nanoparticles in energy ranges of k and l edges by monte carlo code mcnp5

Sadremomtaz, Alireza [1]; Arami, Armin[1]; kazemiyan, Mohammadreza [1]

[1] *Physics Department, Faculty of Science, University of Guilan, Rasht*

Abstract

In all radiation-based therapies, the main goal is to achieve the maximum damage to tumor tissue or cancer cells and in the same time keep side cells immune. Todays, the use of gold nanoparticles is one of the methods to concentrate energy to the target tissue. The presence of these nanoparticles increases the sensitivity of the tissue to radiation and increases the absorption dose due to the high cross-sectional area of gold interaction with different types of radiation, which is a function of atomic number and high electronic density. Researchers are interested in using gold nanoparticlesThe aim of this study was to investigate the absorption dose in the presence of these nanoparticles and the effect with different concentrations for gamma sources with kiloelectronvolt energy range and also to calculate the dose improvement coefficient at the absorption edges of K and L atomic layers of gold element and calculate the displacement rate. The edges are important for optimal energy selection and concentration is a pre-clinical and clinical concern for studies. This simulation was done with the Monte Carlo code, MCNP5. An increase in the concentration of nanoparticles for the studied energies other than25.14kev resulted in an increase in absorption dose. Also, displacement of K absorption edge from80.7kev to(82kev-83kev) and displacement of L layer substrates from(11.91 kev- 14.35 kev)to(44 kev) were recorded.

***Keywords**: Gold Nanoparticles, MCNP5, abserbed dose, absorption edge*
PACS No. 87

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مقدمه

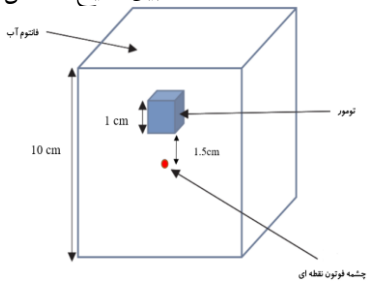
تاباندن اشعه گاما به بافت سرطانی یکی از روش های موثر برای از بین بردن سلول های سرطانی و تومورها است.تابش این پرتو به سلول ها باعث ایجاد ملکول هایی به نام رادیکال آزاد می شود.این ملکول ها موجب آسیب به DNA سلول های سرطانی و از بین رفتن آن ها می شود.[۱] فرآیند دزسنجی برای حصول طرح درمانی موثر و پربازده و همچنین جلوگیری از آسیب های ثانویه که در برخی موارد منجر به سرطان ثانویه ناشی از طرح درمان می شود، ضرورت دارد..[۲] باپیشرفت نانوتکنولوژی از نانوذرات برای تشخیص و درمان بیماری ها به ویژه درمان سرطان استفاده شده است در حیطه رادیوتراپی از ویژگی حساسیت پرتویی نانوذرات برای افزایش دز جذبی در سلول های سرطانی و بافت هدف استفاده می شود. نانوذرات طلا به صورت ذرات جامد کلوئیدی با شعاع ۱ تا ۱۰۰ نانومتر وجود دارند.[۳] حضور این نانو ذرات به سبب سطح مقطع برهم کنش بالای آن ها با انواع تابش، موجب افزایش حساسیت تومور به تابش و افزایش دز جذبی می شود. برخی ویژگی های مفید نانوذرات طلا مانند سازگاری بیولوژیکی با بدن ، نفوذپذیری برای تابش ها و عدم مشاهده مسمومیت های خونی و تابشی به هنگام استفاده ، موجب کاربرد فراوان این نانوذرات در پرتودرمانی، شده است. [٤] مطالعه شرابیانی و همکاران در سال ۲۰۱۷ که پیرامون دزیمتری در سرطان ملانیوم چشم انجام گرفت بیانگر افزایش دز جذبی در حضور نانوذرات طلا است.[۵] در مطالعه ای که در سال ۲۰۲۰ توسط کنفال و همکاران انجام شد نشان داده شد که افزایش دز وابسته به شکل نانوذرات نیز می باشد.[٦] مطالعات مربوط به این حوزه همچنان با پویایی روزافزون در حال انجام است.

مواد و روش ها

. با گسترش هرچه بیشتر کاربردهای فیزیک در علوم پزشکی، استفاده از کد MCNP به عنوان یک ابزار کمکی در مطالعات این عرصه افزایش روز افزون داشته است از این قبیل می توان به کاربردهای اساسی و مهمی همچون نوترون درمانی برای تومورهای مغزی ،پرتو درمانی با شدت متغییر ، دزیمتری های خاص در رادیوایمونوتراپی و محاسبه دز در شبیه سازی چشمه های x-ray اشاره کرد. [۷] در این مطالعه از کد MCNP5 با کتابخانه پیش فرض با عنوان ENDEF/BVII استفاده شد. در فرآیند این شبیه سازی یک فانتوم آب به شکل مکعب به ضلع ۱۰ سانتی متر تعریف شد و در مرکز آن چشمه ای نقطه ای با محدوده انرژی ۲۵kev تا ۱۳۰kev قرار گرفت. ۱/۵ سانتی متر بالاتر از چشمه مکعب دیگری به ضلع ۱ سانتی متر به عنوان تومور از جنس آب با چگالی ۱ گرم بر سانتی متر مکعب در نظر گرفته شد. با توجه به چگالی طلا همچنین اندازه و غلظت مورد نظر ،ساختار تومور به شبکه های مکعبی کوچک تقسیم بندی شده و درون هر مکعب شبکه یک نانوذره کروی طلا تعریف شد. نانوذرات طلا با شعاع ۷۰ نانومتر و با غلظت های ۷ ،۲۰ ،۳۰ ،۴۰ ،۵۰ ،۶۰ و ۷۰ میلی گرم در هر گرم تومور(mg/g) توزیع شدند. دز در مرکز تومور و در مکعبی به ضلع ۰/۵ سانتی متر و با استفاده از تالی F6 محاسبه شد که دز را با یکای Mev/g در اختیار میدهد؛ نتیجه ی این تالی با استفاده از رابطه (۱) به گری (Gy)تبدیل شد.

$$1Mev/g = 1.602\times10\text{^}-10J/Kg \qquad (۱)$$

همچنین در دو غلظت ۲۰ mg/g و ۷۵ mg/g تاثیر انرژی چشمه فوتون بر دز جذبی هر ماده بررسی شد در این فرآیند نیز ابتدا برای هر انرژی دز جذبی بدون حضور نانوذرات و بار دیگر در حضور نانوذرات محاسبه شد و با تقسیم این دو مقدار ضریب بهبود دز (DEF) محاسبه شده و میزان جابه جایی لبه های جذب لایه اتمی K و زیرلایه های لایهL برای طلا محاسبه شد.خروجی حاصل از اجرای کد ، با خطای آماری کمتر از۳ درصد و با اجرای کد برای صد میلیون ذره با پردازش موازی ٦ هسته بدست آمد. برخی از نتایج این پژوهش با مطالعات شرابیانی و همکاران[۵] مورد مقایسه قرار گرفت و با اختلاف ۱ درصد تطبیق نتایج حاصل شد.

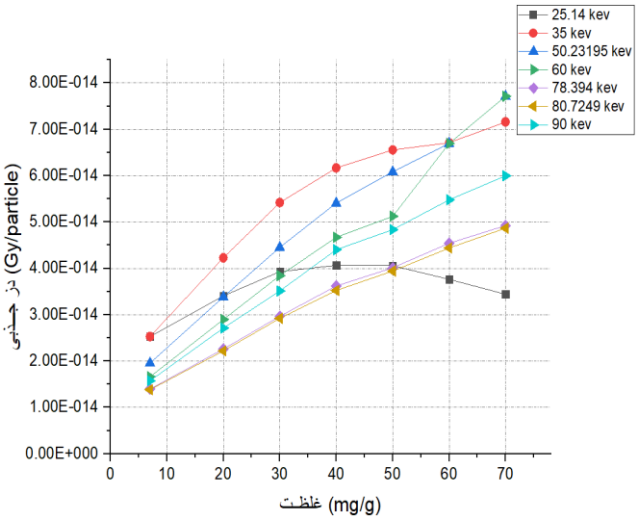


شکل۱ : فانتوم آب شبیه سازی شده [۵]

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

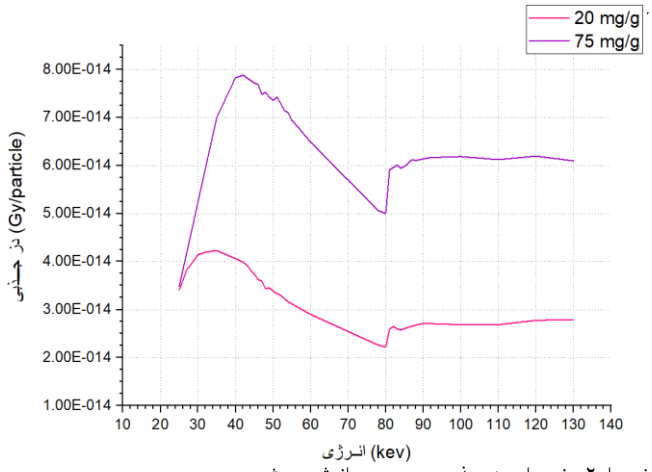
نتایج و بحث

نتایج حاصل از دزیمتری در فانتوم آب در حضور نانوذرات طلا در نمودار (۱) نمایش داده شده است. افزایش غلظت نانوذرات طلا از ۷mg/g تا ۷۰mg/g به ازای انرژی های مورد مطالعه جز یک مورد استثنا همواره با افزایش دز جذبی همراه است. با توجه به هندسه مسئله دز جذبی هم تابع انرژی چشمه و هم تابع غلظت نانو ذرات است. از آنجایی که دز در مکعبی واقع در مرکز تومور محاسبه می شود فوتون ها قبل از رسیدن به ناحیه دزسنجی با نانو ذرات طلا برهمکنش دارند، تاثیر این بر همکنش برای انرژی های پایین منجر به کاهش نفوذ فوتون های کم انرژی در تومور می‌شود؛ به عبارتی فوتون های کم انرژی بیشترانرژی خود را در ابتدای تومور به نهشت می گذارند به همین علت برای انرژی۲۵/۱٤ kev پس ازغلظت ۵۰mg/g دزجذبی در مکعب مورد نظر در مرکز تومور کاهش می یابد.لازم به ذکر است در این حالت پرتوها در لایه های اولیه ی تومور جذب میشوند و در دز جذب شده ی کل تومور همچنان نقش خواهند داشت پس به طور بدیهی دز کلی تومور همچنان در غلظت ٦۰mg/g بیشتر از ۵۰mg/g خواهد بود.



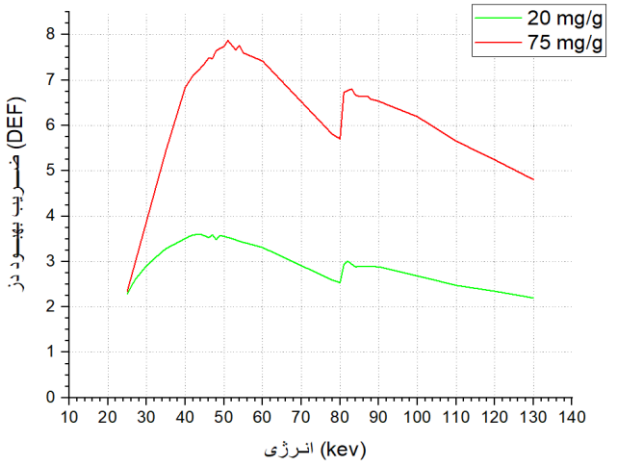
نمودار۱ : دزیمتری فانتوم آب در حضور نانوذرات طلا با غلظت های مختلف و تحت تابش انرژی های مختلف پرتو گاما

در نمودار (۲) دز جذبی برحسب انرژی تابشی برای دو غلظت ۲۰mg/g و ۷۵mg/g رسم شده است. نوسان های این نمودار تابع دو عامل عمده است. عامل اول رشد انرژی است که با افزایش انرژی انتظار داریم دز جذبی زیاد شود و عامل دوم افزایش پراکندگی فوتون ها در ورودی تومور به علت حضور نانوذرات طلا وایجاد محیط چگال که مانع رسیدن پرتوها یا رسیدن با انرژی



نمودار۲ : نمودار دز جذبی بر حسب انرژی چشمه

با توجه به نمودار (۲) می توان قله هایی برای دز جذبی مشاهده کرد که مربوط به لبه جذب لایه های اتمی طلا می باشد با دقت در این نمودار جابه جایی محل قله ها نسبت به محل واقعی لبه انرژی اتم طلا قابل مشاهده است که این میزان جابه جایی برای لایه L بیشتر از لایه k است چون جذب فوتون های با محدوده لبه L از ناحیه ورودی تومور تا مکعب مرکزی(محل دزسنجی) بیشتر است.دز جذبی یک عامل چند متغیره است لذا برای تعیین دقیق محل لبه های جذب لایه K و L نمی توان از آن استفاده کرد برای این منظور از نمودار ضریب بهبود دز که از تقسیم دز جذبی در حضور نانوذرات در یک انرژی مشخص بر دز جذبی بدون حضور نانوذرات به دست می آید، استفاده می کنیم نمودار (۳) بیانگر این مفهوم است.



نمودار۳ : نمودار ضریب بهبود دز جذبی بر حسب انرژی چشمه

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

جابه جایی لبه جذب لایه K و زیر لایه های لایه L به طور دقیق با گام های انرژی۱kev در نواحی حساس نمودار دز_انرژی محاسبه شده که به صورت قله هایی در نمودار(۳) مشخص است. در جدول (۱) مقدار دقیق این لبه های جذب مشخص شده است . بیشترین ضریب بهبود دز برای زیر لایه های لایه L در غلظت ۷۵mg/g به مقدار ۷/۸۷ و برای غلظت ۲۰mg/g به مقدار ۳/۵۸ بدست آمد و بیانگر این مهم است که با تابش بازه انرژی لایه L علاوه بر آسیب بیشتر به بافت هدف می توان پرتوگیری بافت های سالم اطراف هدف را نیز کاهش داد.البته به دلیل جابه جایی های لبه جذب انتخاب این بازه انرژی بهینه نیازمند شبیه سازی دقیق، از هندسه و جنس محیط هر پروژه درمانی است.

جدول۱ : لبه های جذب محاسبه شده برای لبه های جذب لایهK و L [۸]

لایه اتمی		لبه جذب (kev)	لبه جذب محاسبه شده برای غلظت ۲۰mg/g (kev)	لبه جذب محاسبه شده برای غلظت ۷۵mg/g (kev)
K		۸۰.۷	۸۲	۸۳
L	L-I	۱٤.۳	٤۹	٥٤
	L-II	۱۳.۷	٤۷	٥۱
	L-III	۱۱.۹	٤٤	٤٦

نتیجه گیری

نمودار دز جذبی به ازای تقریبا تمام غلظت ها برای انرژی تابشی ۳۵kev بیشتر از سایر انرژی ها قرار گرفت که این به علت نزدیکی این انرژی به لبه ی L طلا می باشد. همچنین با افزایش غلظت، قله های دز جذبی که ناشی از حضور همین لبه های انرژی بودند تیزتر شده و به سمت انرژی های بالاتر تمایل پیدا کردند. دلیل تمایل قله ها به سمت انرژی های بیشتر این است که افت انرژی فوتون هایی که وارد تومور می شوند با افزایش غلظت بیشتر می شود پس در غلظت های بالاتر فوتون ورودی باید انرژی بیشتری داشته باشد تا در هنگام رسیدن به مکعب مرکزی به عنوان ناحیه ی دزسنجی، انرژی آن با انرژی لبه های K و L اتم طلا مطابقت داشته باشد. که این نتیجه با مطالعه رنجبر و همکارانش [۸] پیرامون انرژی لبه K مطابقت دارد. در نمودار مربوط به DEF نیز اثرات لبه ی جذب به خوبی دیده می شود، این نمودار بیانگر دو نکته است: نکته ی اول این که میزان افزایش نرخ دز جذبی به ازای انرژی های محدوده ی لایه ی L بیشتر از K است و دوم این که قله های کوچکی که معرف زیر لایه ها هستند نیز قابل رویت است. نانو ذرات طلا به عنوان فعال کننده های بافت هدف می توانند دز جذبی را تا هشت برابر افزایش دهند از این رو استفاده از آن ها با توجه به ابعاد تومور می تواند منجر به نتایج مطلوبی پیرامون بهبود دز جذبی شود.باید دقت شود که این مطالعه برای اولین بار در ناحیه ی انرژی های اورتوولتاژ و در محدوده ی لبه ی L طلا انجام شده است و نشان دهند افزایش دز تا ۸ برابر بیشتر ازحالت عدم حضور نانوذرات است که این عدد به مراتب بهتر از استفاده از پرتوی فوتونی مگاولتاژ است؛ لذا توجه به اثر لبه جذب لایه های اتمی می تواند در انرژی های کم منجر به آسیب های بیشتری به بافت هدف شود.

مرجع‌ها

[۱] Jeremic B; "Single fraction external beam radiation therapy in the treatment of localized metastatic bone pain"; *J Pain Symptom Manage"*; 22, No. 6 (2001) 1048-1058.

[۲] Parida UK and Nayak PL; "Biomedical Applications of Gold Nanoparticles Opportunity and Challenges"; *World J Nano Sci Tech* **2**, No. 1 (2012) 10-25.

[۳] Chithrani BD, Ghazani AA; "Determining the Size and Shape Dependence of Gold Nanoparticle Uptake into Mammalian Cells"; *Nano Letters* **6**, No. 4 (2006) 662-668.

[٤] Hainfeld JF, Dilmamian, FA; "Radiotherapy enhancement with gold nanoparticles"; *J Pharm Pharmacol* **60**, No. 3(2008) 977-985

[٥] Sharabiani Marjan, Asadi somayeh; "Comparison of parameters affecting GNP-loaded choroidal melanoma dosimetry Monte Carlo study"; *Radiation Physics and Chemistry* **145**, No. (2018)180-183

[٦] Konefał Adam, and etc "Influence of a shape of gold nanoparticles on the dose enhancement in the wide range of gold mass concentration for high-energy X-raybeams from a medical linac"; *Reports of Practical Oncology and Radiotherapy* **25**, No. (2020) 579-585

[۷] کاسه ساز، یاسر،حسن زاده مصطفی؛ «*آموزش کد MCNPX*» مرکز آموزش و توسعه کدهای محاسباتی ؛ صفحه ۱ تا ٦٥.

[۸] Hassan Ranjbar and etc;"Investigation of the dose enhancement factor of high intensity low mono-energetic X-ray radiation with labeled tissues by gold nanoparticles"; *nukleonika* **55**, No.33(2010)307-312

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

ارزیابی دُز دریافتی اندام‌های بدن در براکی‌تراپی پروستات با چشمه ید-۱۲۵

یوسفی تاجانی، سبحان ؛ طاهرپرور، پیوند

گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه دانشگاه گیلان، خیابان نامجو، رشت

چکیده

با توجه به شیوع بیماری سرطان پروستات در میان مردان، براکی‌تراپی یکی از روش‌های مناسب برای درمان این نوع سرطان است. در براکی‌تراپی، تعیین دُز دریافتی اندام‌های مجاور بافت موردنظر نیز از اهمیت بالایی برخوردار است؛ زیرا اگر دُز دریافتی توسط این اندام‌ها بیش از اندازه باشد، خطراتی از جمله سرطان را به همراه خواهد داشت. استفاده از روش مونت‌کارلو یکی از ابزارهای مهم در تخمین میزان نهشت انرژی در روش‌های پرتو درمانی است. در این پژوهش، به کمک کد مونت‌کارلو GATE به شبیه‌سازی براکی‌تراپی پروستات توسط چشمه های پرتوزای ید-۱۲۵ با استفاده از یک فانتوم ریاضی پرداخته‌ایم، نتایج نشان می دهد با توجه به قرارگیری چشمه ها در بافت پروستات و طیف کم-انرژی ید، بیشترین میزان دُز در بافت پروستات جذب خواهد شد. همچنین، مثانه ۲ درصد دُز دریافتی پروستات و دُز دریافتی کلیه‌ها از مرتبه 10^{-6} برابر دُز دریافتی پروستات می‌باشد. با توجه به اهمیت تعیین و کنترل دُز دریافتی بافت‌های مختلف بدن در فرآیند براکی‌تراپی، این پژوهش بسیار کاربردی است.

واژه‌های کلیدی: *براکی‌تراپی، دُزیمتری، مونت‌کارلو GATE، سرطان پروستات*

Evaluation of received dose of organs in prostate brachytherapy by I-125 brachytherapy source

Yousefi Tajani, Sobhan; Taherparvar, Peyvand

Department of Physics, University of Guilan, Rasht

Abstract

Due to prevalence of prostate cancer between men, brachytherapy is one of appropriate ways for treatment of this type of cancer. In brachytherapy, determination of received dose in the adjacent organs is very crucial; because if the dose received by these organs were excessive, it can be harmful and dangerous. Using Monte Carlo method is one of important tools to estimate the deposited energy in treatment methods. In this research, with help of Monte Carlo GATE code, we simulated prostate brachytherapy by an I-125 radioactive source using a mathematical phantom. The results shows that due to locating sources in the prostate and the I-125 low-energy spectrum, the prostate receives the most dose. Also, the bladder receives 2 percent of the prostate's received dose and the kidneys receives an amount in order of 10^{-6} of the dose received by prostate. Regarding to importance of determination and control of the dose received by organs of body in brachytherapy process, this research is very practical.

Keywords: *Brachytherapy, Dosimetry, Monte Carlo GATE, Prostate Cancer*

PACS No. 87

مقدمه:

سرطان پروستات یکی از سرطان‌های شایع در مردان است؛ به طوری که آمار نشان می‌دهد که تقریبا از هر ٦ مرد بالای ۵۰ سال، یک نفر به این نوع سرطان دچار می‌شود [۱]. به طور کلی و بر اساس نحوه قرارگیری چشمه پرتوزا نسبت به بدن بیمار، پرتودرمانی در پزشکی هسته‌ای به دو بخش پرتودرمانی خارجی و داخلی تقسیم می‌گردد. در پرتودرمانی خارجی، چشمه پرتوزا در فاصله‌ای از بدن بیمار قرار می‌گیرد و همین امر پرتوگیری ناخواسته‌ای را در اندام‌های بین چشمه و تومور به دنبال خواهد داشت؛ امّا در پرتودرمانی داخلی (یا براکی‌تراپی)، به دلیل اینکه چشمه پرتوزا مستقیما در بدن بیمار قرار می‌گیرد، دُز معیّن به طور موضعی در ناحیه موردنظر نهشت

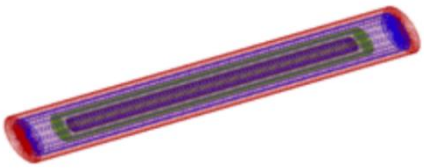
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد

http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

می‌یابد و کاهش دُز دریافتی توسط اندام‌های سالم اطراف تومور و تحویل حداکثری دُز به تومور را به دنبال دارد. در براکی‌تراپی از چشمه‌های مختلفی نظیر ید-۱۲۵، ایریدیوم-۱۹۲، پالادیوم-۱۰۳ و ... استفاده می‌شود. چشمه کم‌انرژی ید-۱۲۵ که یک گسیلنده گاما می‌باشد، به طور گسترده در درمان انواع بدخیمی‌ها نظیر سرطان پروستات، تومورهای بدخیم چشم، تومورهای مغزی و غیره مورد استفاده قرار می‌گیرد. در درمان سرطان پروستات به روش براکی-تراپی، به دلیل اینکه دُز رسیده به پروستات به دلیل چشمه‌های قرار گرفته در آن بسیار بالاست، اندام‌های اطراف آن نیز دُز زیادی دریافت خواهند کرد. در صورت دریافت بیش از اندازه مجاز دز توسط این اندام‌ها، خطرات جبران‌ناپذیری را به همراه خواهد داشت. در این تحقیق، دُز رسیده به اندام‌های بدن شامل پروستات، مثانه و کلیه‌ها در طی فرآیند براکی‌تراپی پروستات با استفاده از شبیه‌سازی به وسیله کد مونت‌کارلو GATE به دست آمده است. کد GATE یکی از ابزارهای قدرتمند شبیه‌سازی برای کاربردهای پزشکی هسته‌ای از جمله تصویربرداری و پرتودرمانی می‌باشد که در بستر کد GEANT4 توسعه یافته است.

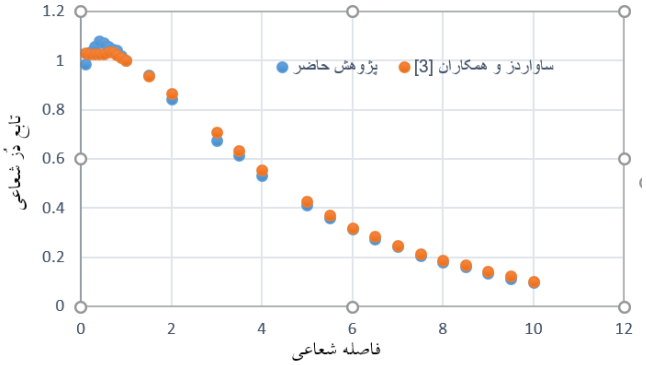
مواد و روش‌ها:

همانطور که اشاره کردیم، در این پژوهش دُز رسیده به اندام‌های مختلف بدن شامل پروستات، مثانه و کلیه‌ها در فرآیند براکی‌تراپی پروستات با استفاده از چشمه ید-۱۲۵ مدل Best Model 2301 محاسبه شد. برای این منظور، این چشمه توسط کد مونت‌کارلو GATE شبیه‌سازی گردید. چشمه ید-۱۲۵ مدل Best Model 2301، یک کپسول تیتانیومی با طول فیزیکی ۵ mm و شعاع خارجی و داخلی به ترتیب ۰/٤ mm و ۰/۳۲ mm است. ضخامت دیواره تیتانیومی ۰/۰٤ mm می‌باشد. قسمت داخلی کپسول از یک نشانگر استوانه‌ای از جنس تنگستن با طول فیزیکی ۳/۷ mm و قطر ۰/۲۵ mm تشکیل شده که توسط یک مخروط ارگانیک (کربن) با ضخامت ۰/۱ mm پوشانده شده است. ضخامت مخلوط ارگانیک در دو انتهای استوانه تنگستن ۰/۱۵ mm است. طول فعال چشمه ٤ mm می‌باشد [۲]. هندسه این چشمه طراحی شده توسط GATE در شکل ۱ نشان داده شده است.



شکل ۱: چشمه براکی‌تراپی ید-۱۲۵ مدل Best Model 2301 طراحی شده توسط کد مونت‌کارلو GATE

در ابتدا، تابع دُز شعاعی این چشمه را با استفاده از کد مونت‌کارلو GATE محاسبه نموده و نتایج حاصل از آن را با نتایج پژوهش ساواردز و همکاران [۳] مقایسه نمودیم که نمودار حاصل از آن در شکل۲ نشان داده شده است. این نمودار نشان‌دهنده تطابق مناسب نتایج حاصل از تابع دُز شعاعی چشمه طراحی شده به وسیله کد GATE با نتایج ساواردز و همکاران [۳] است. میانگین اختلاف نسبی در فواصل بین ۰/۱ cm تا ۱ cm ، ۱ cm تا ۵ cm و ۵ cm تا ۱۰ cm سانتی‌متر به ترتیب برابر با ۱/۸ ٪، ۳/۰٦ ٪ و ٤/٦ ٪ خواهد بود که این نشان از توافق خوب نتایج پژوهش حاضر با نتایج پژوهش ساواردز دارد.



شکل۲: مقایسه نتایج تابع دُز شعاعی چشمه طراحی شده در مطالعه حاضر با نتایج ساواردز [۳]

برای تسهیل در روند شبیه‌سازی و کاهش زمان اجرای آن، در ابتدا به کمک روش فضای فاز، نمونه‌گیری از ذرات گسیلی صورت پذیرفت و اطلاعات آن ذخیره گردید.

در مرحله بعدی، یک فانتوم ریاضی به وسیله کد مونت‌کارلو GATE طراحی شد. این فانتوم شامل یک استوانه به ارتفاع $70\ cm$ و شعاع $15/86\ cm$ از جنس آب است. درون این استوانه، کره‌هایی به عنوان پروستات، مثانه و کلیه‌ها در نظر گرفته شدند. شعاع کره پروستات $2/5\ cm$ و چگالی آن $1/059\ g/cm^3$، شعاع کره

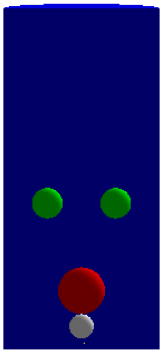
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مثانه cm ٤/٨ و چگالی آن g/cm^3 ١/٠٤ و شعاع کره کلیه‌ها cm ٣/١٤ و چگالی آن g/cm^3 ١/٠٥ است. ساختار و ترکیب این بافت‌ها در شبیه‌سازی بر اساس نتایج ICRU Report 44 [٤]، درنظر گرفته شد و در جدول ١ نشان داده شده است.

مثانه	پروستات	کلیه‌ها	بافت/ساختار
١٠/٥٪	١٠/٣	١٠/٣٪	هیدروژن
٩/٦٪	١٣/٤	١٣/٢٪	کربن
٢/٦٪	٣	٠/٣٪	نیتروژن
٧٦/١٪	٧٢/٣	٧٢/٤٪	اکسیژن
٠/٢٪	٠/٢٪	٠/٢٪	سدیم
٠/٢٪	٠/٢٪	٠/٢٪	فسفر
٠/٢٪	٠/٢٪	٠/٢٪	سولفور
٠/٣٪	٠/٢٪	٠/٢٪	کلر
٠/٣٪	٠/٢٪	٠/٢٪	پتاسیم
٠٪	٠٪	٠/١٪	کلسیم
٠٪	٠٪	٠٪	اسکاندیم

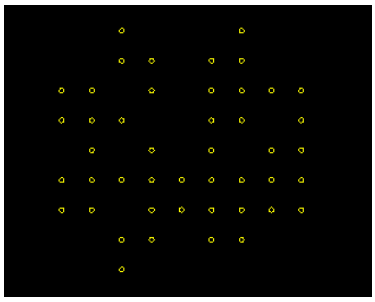
جدول١: ساختار بافت‌های استفاده شده در این پژوهش [۴]

نمایی از این فانتوم ریاضی در شکل ٣ نشان داده شده است. در این شکل، کره‌های سبز رنگ کلیه‌ها، کره قرمز رنگ مثانه و کره سفید رنگ پروستات است و استوانه آبی رنگ، استوانه پر شده از آب می‌باشد.



شکل٣: نمایی از فانتوم ریاضی طراحی شده در این پژوهش

سپس آرایشی متشکل از ٥٣ دانه ید-١٢٥ مدل Best Model 2301 در پروستات این فانتوم قرار داده شد. مختصات این آرایش بر اساس پژوهشی از Usgaonker که شامل ٩٨ دانه است، قرار داده شد و با توجه به تفاوت حجم پروستات فانتوم طراحی‌شده در پژوهش حاضر تعدادی از چشمه‌ها حذف گردیده و آرایش چشمه ها با ٥٣ دانه اختصاصی گردید. این چشمه‌ها همگی درون پروستات قرار گرفته‌اند. هر یک از این دانه‌ها استوانه‌هایی به ارتفاع mm ٥ و شعاع mm ٠/٤ بود که اَکتور فضایِ فاز ذخیره شده در مرحله اول به آن‌ها ضمیمه گردید. نمایی از این آرایـــش در صفحه X-Y در شکل٤ به نمایش درآمده است.



شکل٤: نمایی از آرایش چشمه‌های براکی‌تراپی استفاده شده در این پژوهش در صفحه X-Y در فضای GATE

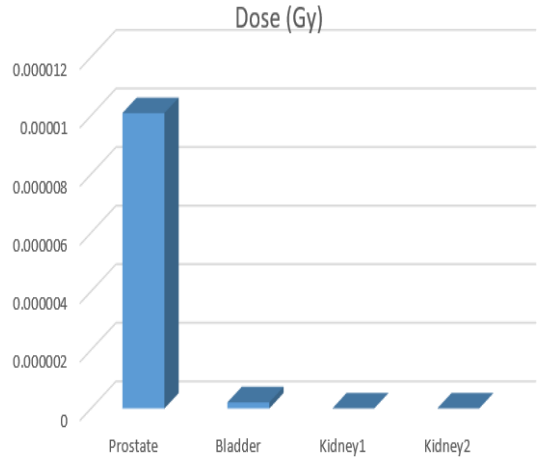
شبیه‌سازی با استفاده از لیست فیزیکی مناسب اجرا گردید و اَکتورهای دُز به هر کدام از اندام‌ها پیوست گردید و انرژی به نهشت گذاشته شده در کل هر بافت به دست آمد. سپس، با توجه به میزان چگالی، جرم و حجم بافت ها، میزان دُز نهشت یافته در آنها محاسبه گردید. برای به دست آمدن نتایج، ٥٠٠ میلیون ذره رهگیری شدند که خطای آماری کمتر از ٥ درصد برای محاسبه دُز اندام‌ها ایجاد می‌نماید. این خطای آماری در خروجی نتایج کد گزارش می‌شود.

نتایج:

شکل ٥ به مقایسه دُز دریافتی در بافت‌های مختلف به صورت نمودار ستونی می‌پردازد. پس از اجرای شبیه‌سازی، خروجی که شامل انرژی‌های به نهشت گذاشته شده در هر حجم بود، وارد اکسل شد و با استفاده از حجم و چگالی هر بافت، دُز رسیده به آن محاسبه شد. نمودار شکل ٥ به مقایسه دُز دریافتی در بافت‌های مختلف به صورت نمودار ستونی می‌پردازد. این نمودار نشان می‌دهد که دُز دریافتی در بافت پروستات که بافت تحت درمان می‌باشد، بیشینه است و سپس با افزایش فاصله از آن، دُز دریافتی توسط سایر بافت‌ها افت پیدا می‌کند. به طوری که نسبت دُز دریافتی مثانه به دُز دریافتی

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

پروستات تنها ۲درصد می‌باشد و در مورد کلیه‌ها نیز این دُز به شدت افت می‌کند و از مرتبه یک میلیونم برابر دُز دریافتی پروستات می‌باشد. بنابراین می‌توانیم نتیجه بگیریم که چشمه ید-۱۲۵ به دلیل انرژی پایین و افت سریع دُز با فاصله، یک چشمه مناسب برای درمان سرطان پروستات از طریق براکی‌تراپی می‌باشد.



شکل۵: نمودار ستونی دُز دریافتی توسط بافت‌های مختلف

بحث و نتیجه‌گیری:

در این پژوهش تلاش شد تا دُز رسیده به اندام‌های مختلف بدن در فرآیند براکی‌تراپی پروستات به وسیله آرایه‌ای از ۵۳ دانه ید-۱۲۵ مدل Best Model 2301 را به وسیله کد مونت‌کارلو GATE با رهگیری ۵۰۰ میلیون ذره محاسبه گردد. برای دستیابی به این هدف، ابتدا چشمه مذکور را با در نظر گرفتن لیست فیزیکی مناسب (emstandard-opt3) اعتبارسنجی نموده و سپس با چینش مناسب دانه‌های ید-۱۲۵ در فانتوم شبیه سازی شده، توزیع دُز در بافت‌های مختلف آن محاسبه گشت. همانطور که ملاحظه می‌شود، دُز دریافتی پروستات که چشمه‌های براکی‌تراپی درون آن کاشته شده‌اند، بیش‌تر است و همانگونه که انتظار داشتیم، دُز دریافتی در اندام‌های دیگر با توجه به فاصله‌ای که دارند، کمتر است؛ به طوری که دُز دریافتی در مثانه که در مجاورت پروستات قرار دارد، ۲درصد دُز دریافتی پروستات و دُز دریافتی کلیه‌ها که با فاصله بیشتری نسبت به آن قرار دارند، از مرتبه 10^{-6} برابر دُز دریافتی پروستات می‌باشد. این موضوع نشان می‌دهد که چشمه ید-۱۲۵ به دلیل دارا بودن طیف انرژی پایین و افت سریع دُز از بافت تحت درمان به بافت سالم، حتی بدون درنظرگیری بافت های میانی مابین اندام های اصلی مجاور آن، برای کاربردهای درمانی براکی‌تراپی بسیار مناسب است.

مراجع:

[1] احمدی، پروین؛ شمسایی ظفرقندی، مجتبی؛ *مجله سنجش و ایمنی پرتو*؛ **جلد ۱**؛ شماره ۱؛ ۱۳۹۱

[2] C. Thiam, V. Breton, D. Donnarieix, B. H. Geryes and L. Maigne; "Validation of a dose deposited by low-energy photons using GATE/GEANT4; *Physics in medicine and biology* **53**, No 11 (2008) 3039-55

[3] K.T. Sowards, A.S. Meigooni; "A Monte Carlo evaluation of the dosimetric characteristics of the Bests Model 2301 brachytherapy source";*Applied Radiation and Isotopes* **57** (2002) 327–333328

[4] International Commission on Radiation Units and Measurements, Tissue Substitutes in Radiation Dosimetry and Measurement. ICRU Report no. 44. (1989) Bethesda, MD.

[5] S. R. Usgaonker; MCNP modeling of prostate brachytherapy and organ dosimetry; Master's thesis, Texas A&M University. Texas A&M University; (2005); Available electronically from: http : / /hdl .handle .net /1969 .1 /305

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

اندازه‌گیری فوتونیکی غلظت اکسیژن محلول در آب در محیط کشت جلبک کلرلا

ایجادی مقصودی ، پرتو [۱]؛ زارع بهتاش ، حسین؛ [۲] حیدری، اسماعیل؛ [۱]

دانشکده فیزیک دانشگاه خوارزمی، تهران، ایران

[۲] دانشکده مهندسی، بخش هوافضا، دانشگاه گلاسگو، گلاسگو، بریتانیا

چکیده

اکسیژن یکی از عناصر حیاتی در کره‌ی زمین است بنابراین قابلیت اندازه‌گیری دقیق آن از اهمیت زیادی برخوردار است. در این پژوهش، هدف معرفی حسگر فوتونیکی برای اندازه‌گیری بلادرنگ غلظت اکسیژن محلول در محیط کشت جلبک کلرلا با استفاده از یک کمپلکس فلزی می‌باشد. برای این منظور، فیلمی نازک از اکتااتیل پورفیرین پلاتین به عنوان ماده‌ی حساس به اکسیژن یا لومینوفور در ماتریس پلی استایرن به روش لایه نشانی قطره‌ای تهیه شد. از باریکه‌ی لیزر نئودیوم یاگ با طول موج ۵۳۲ نانومتر برای برانگیخته کردن لومینوفور استفاده شد. با اندازه‌گیری شدت فسفرسانس فیلم در غلظت‌های متفاوت اکسیژن ،تابع کار حسگر بدست آمد و از جلبک کلرلا به عنوان مدلی بیولوژیکی برای آزمودن کارایی حسگر استفاده شد.

واژه های کلیدی :*اکتااتیل پورفیرین پلاتین، اکسیژن محلول، حسگر فوتونیکی، فسفرسانس، جلبک کلرلا*

A Photonic Technique for Measurement of DO Concentration in Chlorella Algae Culture Medium

Ijadi Maghsoodi, Parto[1]; Zareh-Behtash, Hossein[2] ; Heydari, Esmaeil[1]

[1] Department of Physics, University of Kharazmi, Tehran, Iran
[2] Aerospace Sciences Division, School of Engineering, University of Glasgow, Glasgow, UK

Abstract

Oxygen is one of the most crucial elements on the Earth; therefore, the ability to measure its concentration precisely is of great importance. In this study, the aim is to present a photonic oxygen sensor for realtime dissolved oxygen sensing in an algae culture medium using a metalloporphyrin complex. Thus, a thin film is produced consisting of platinum octaethyl porphyrin as the oxygen sensitive probe doped in a polystyrene matrix. A 532nm Nd:YAG laser is used as the excitation light. The oxygen sensor is characterized by measuring the phosphorescence intensity for different oxygen concentrations. Then Chlorella algae are used as a model to demonstrate the realtime capability of the sensor.

Keywords: *Dissolved-oxygen, phosphorescence, photonic sensor, platinum octaethyl porphyrin, Chlorella Algae*
PACS No.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مقدمه

اکسیژن محلول در آب یک عنصر کلیدی در تمام سیستم‌های زیستی و پزشکی است. بنابراین اندازه گیری دقیق آن حائز اهمیت میباشد. حسگرهای متعددی برای سنجش اکسیژن محلول به وجود آمده‌اند که هرکدام مزایا و معایب خود را دارند. روش تیتراسیون رینکلر و الکترود کلارک از رایج ترین آنها می‌باشند. تیتراسیون رینکلر که مرجع بسیاری از اکسیژن مترهای امروزی است قابلیت اندازه گیری در لحظه را ندارد[۱] و الکترود کلارک در روند اکسیژن متری کمی اکسیژن مصرف می‌کند که برای اندازه‌گیری مقادیر اندک اکسیژن مناسب نخواهد بود. همچنین نگه داری کردن و کالیبراسیون مکرر آن امری دشوار است.

در سالهای اخیر حسگرهای اپتیکی اکسیژن به دلیل نداشتن محدودیت‌های روش‌های پیشین و داشتن ویژگی‌های قابل توجه‌ای شامل مخرب نبودن، حساسیت و سرعت بالا، بدون تماس بودن، قابلیت ساخت در ابعاد کوچک و در لحظه بودن، توجه بسیاری را به خود جلب کرده اند.

اساس این حسگرهای فوتونیکی مبتنی بر پدیده‌ی کاهش تابش فوتولومینسانس ماده‌ی حساس به اکسیژن در حضور مولکول اکسیژن است. در این فرآیند، اکسیژن با حالت برانگیخته‌ی ماده حساس به اکسیژن برخورد کرده و طی انتقال غیرتابشی، انرژی از ماده به مولکول اکسیژن منتقل می‌شود. در نتیجه، شدت فوتولومینسانس ماده کاهش می‌یابد. برای اینکه حسگر حاصل حساسیت بالایی داشته باشد، ماده‌ی حساس به اکسیژن یا همان لومینوفور باید ویژگی‌های خاصی داشته باشد اعم از بازده کوانتومی بالا، طولانی بودن زمان برانگیخته ماندن مولکول که باعث بالا بردن احتمال کاهش تابش و انتقال استوکس قابل توجه می شود. همچنین میزان عبوردهی گاز از ماتریس پلیمری مورد استفاده تاثیر مستقیم بر عملکرد حسگر دارد. [۲]

در این پژوهش برای آزمودن کارایی حسگر از جلبک تک سلولی کلرلا به عنوان سیستم بیولوژیکی استفاده شد. جلبک کلرلا میکروجلبک های سبز تک سلولی‌ای هستند که در ابتدای زنجیره غذایی نقش مهمی دارند. آنها فراوان ترین تولید کننده اکسیژن در اکوسیستم آبی هستند و امروزه برای کاربردهای گوناگونی در حوزه‌های انرژی های برگشت پذیر، مهار دی اکسید کربن، تصفیه آب‌های فاضلاب، مکمل های غذایی، کودها و صنایع غذایی مورد توجه قرار گرفته‌اند. به دلیل بالا بودن بازده این جلبک‌ها طی فتوسنتز در تبدیل گاز دی اکسید کربن به لیپیدهای کربنی، کاندیدای مناسبی برای سوختهای زیست دیزلی هستند.[۳][٤]

نمک، اکسیژن تولید می‌کند. تحت شرایط نوری مختلف میزان تولید اکسیژن جلبک تغییر می‌کند و هدف در این پژوهش اندازه‌گیری در لحظه‌ی مقدار اکسیژن محلول در محیط کشت آبی جلبک کلرلا میباشد.

مواد و روش‌ها

اکتااتیل پورفیرین پلاتین ویژگی های مفیدی دارد اعم از بازده کوانتومی بالا، طولانی بودن زمان برانگیخته ماندن مولکول که باعث بالا بردن احتمال کاهش تابش و انتقال استوکس قابل توجه می شود. تمام این ویژگی ها منجر به بالا بودن حساسیت این ماده نسبت به اکسیژن می‌شوند لذا در این پژوهش از آن به عنوان ماده حساس به اکسیژن استفاده گردید.

اکتااتیل پورفیرین پلاتین از شرکت لومتک، پلی استایرن از شرکت سیگما و تولوئن از مرک تهیه شدند. پس از حل کردن اکتااتیل پورفیرین پلاتین و پلی استایرن در مقدار کمی تولوئن، مایعی با نسبت جرمی اکتااتیل پورفیرین پلاتین به پلی استایرن۱:۱۲۰تهیه شد و ۳۰۰ میکرولیتر از آن با پیپت اتوماتیک روی لام ۱٫۵ در ۱٫۵ سانتی متر لایه نشانی قطره‌ای انجام گرفت.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

طیف جذبی فیلم حاصل با استفاده از طیف سنج در ناحیه طول موج فرابنفش و مرئی (۲۰۰-۸۰۰ نانومتر) و طیف گسیلی آن با طیف سنج تورلبز اندازه گیری شد. از هارمونیک دوم لیزر نئودیم یگ پیوسته با طول موج ۵۳۲ نانومتر برای برانگیخته کردن لومینوفور استفاده شد

.به عنوان اکسیژن متر مرجع از اکسیژن متر HANNA edge HI2040 که از نوع الکترود کلارک می‌باشد، استفاده شد.جلبکهای کلرلا در محیط کشت آبی BBM کشت داده شد. [۵] و از نور LEDبا بیشینه شدت درطول موج ۴۵۳نانومتر برای رشد جلبک استفاده گردید.

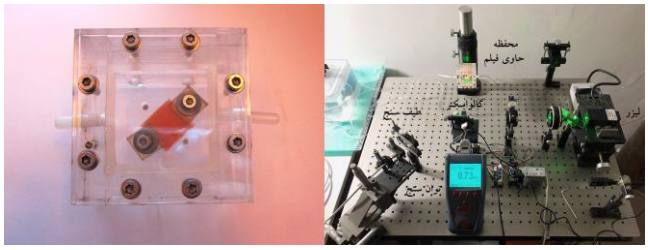
برای بدست آوردن حساسیت یا تابع کار حسگر، از رابطه‌ی استرن والمر استفاده می‌شود که K_{SV}نمایانگر حساست حسگر است.

$$\frac{I_0}{I} = 1 + K_{SV} pO_2$$

چیدمان آزمایش در شکل ۱ دیده می‌شود. باریکه لیزر تحریک کننده بعد از عبور از پلاریزورهای تنظیم شدت به تیغه تقسیم کننده نور می رسد. بخشی از نور توسط تیغه به توان سنج فرستاده می شود تا پایداری لیزر در طول آزمایش کنترل شود. بخش بیشتر نور بعد از عبور از تیغه و عدسی همگرا به آینه های گالوو اسکنر برخورد کرده و بر روی نمونه متمرکز می شود. نمونه در یک محفظه متصل به یک منبع محتوی آب یا محیط کشت جلبک قرار دارد که غلظت اکسیژن موجود در آن قابل کنترل است. تابش فسفرسانس نمونه توسط یک عدسی همگرا بر روی فیبر متصل به یک طیف سنج متمرکز شده و توسط نرم افزار آن تجزیه و تحلیل می شود.

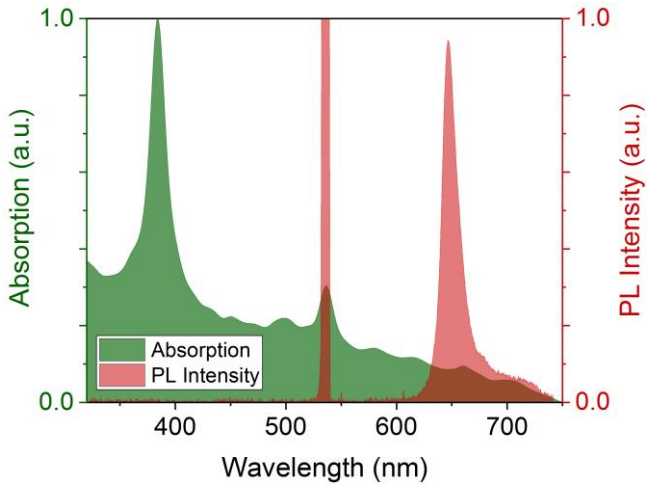
داده‌ها و نتایج

بیشینه‌ی جذب فیلم در ۳۸۵ نانومتر مربوط به نوار سورت و دو بیشینه در ۵۰۵ و ۵۳۵ نانومتر مربوط به نوار Q میباشند. (شکل ۲) از لیزر نئودیم یگ ۵۳۲ نانومتر برای برانگیخته کردن فیلم استفاده گردید. فیلم نازک تهیه شده در آب با دمای اتاق و در بازه‌ی اکسیژن ۰ تا ٤ پی‌پی‌ام کالیبره شد و از نمودار استرن والمر حساسیت حسگر بدست آمد.(شکل ۳)



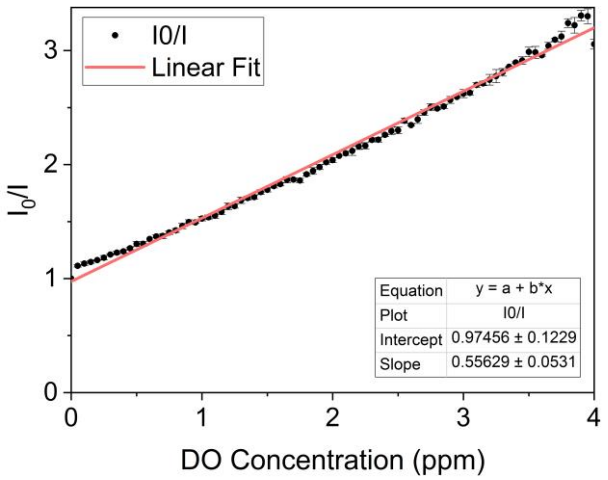
شکل۱ : چیدمان آزمایش (سمت راست) و محفظه حاوی فیلم حسگر

طیف جذبی جلبک تحت تابش لیزر بررسی گردید و تغییر قابل توجه ای مشاهده نشد.



شکل۲ : طیف جذبی (سبز)، طیف گسیلی (قرمز) مربوط به فیلم

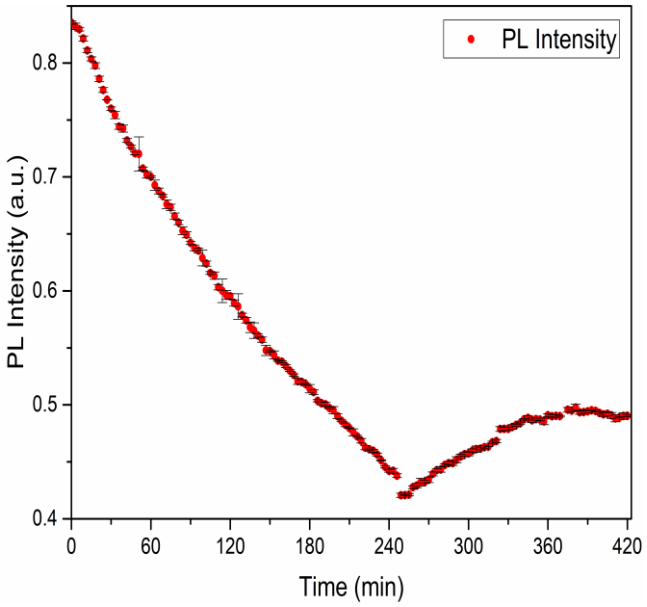
جلبک را در دو وضعیت نوری مختلف به طور متوالی بررسی کردیم. تحت تابش نور لامپ جلبک اکسیژن تولید و در غیاب آن



شکل۳ : نمودار استرن والمر نمایانگر حساسیت حسگر

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

اکسیژن مصرف می‌کند. شدت لومینسانس فیلم را در مجاورت جلبک در این دو وضعیت ثبت کردیم (شکل٤). از تغییرات شدت لومینسانس فیلم می‌توان با استفاده از تابع کار حسگر به غلظت اکسیژن محلول رسید.



شکل٤ : تغییرات لومینسانس حسگر درمحیط کشت جلبک با تغییر وضعیت نور تابشی. تابش نور لامپ تا دقیقه ۲٤۰ صورت گرفت.

نتیجه گیری

در این پژوهش یک حسگر فوتونیکی اکسیژن محلول با استفاده از کمپلکس فلزی اکتاتیل پورفیرین پلاتین و ماتریس پلی استایرن ساخته شد و میزان کاهش شدت فسفرسانس در حضور اکسیژن در بازه ۰ تا ٤ پی‌پی‌ام در محیط کشت جلبک کلرلا مورد بررسی قرار گرفت و کالیبره شد. از جلبک کلرلا به عنوان سیستم زیستی مورد آزمایش و برای آزمودن کارایی حسگر استفاده شد. مزیت این پژوهش در تولید حسگری فوتونیکی است که قابلیت اندازه گیری اکسیژن محلول را به طور لحظه ای و از راه دور فراهم می کند و در عین حال ساخت آن مقرون به صرفه است و کارکردی نسبتا آسان دارد که می تواند به راحتی در قالب دستگاهی کاربردی ساخته شده و مورد استفاده قرار گیرد.

سپاسگزاری

نویسندگان از صندوق حمایت از پژوهشگران بابت حمایت مالی این طرح تشکر می کنند.

مرجع‌ها

1. S. E. Braslavsky, "*Glossary of terms used in photochemistry*, 3rd ed. (IUPAC Recommendations 2006)", Pure & Appl. Chemistry, Vol. **79**, No. **3**, pp. 293-465, 2007.
2. R. Xue, *Nanofiber Based Optical Sensors for Oxygen Determination*, Ph.D dissertation, Ohio State University, 2014.
3. S. Sivakaminathan, B. Hankamer , J. Wolf and J. Yarnold, *High-throughput optimisation of light-driven microalgae biotechnologies*, Scientific Reports, **8**, 11687, 2018.
4. J. H. Mussgnug et al, *Engineering photosynthetic light capture: impacts on improved solar energy to biomass conversion*, Plant Biotechnology Journal, **5**, 802, 2007.
5. Nichols, H. Wayne, and Harold C. Bold. *Trichosarcina polymorpha gen. et sp. nov., Journal of Phycology* 1.1, 34-38, 1965.

Email: esmaeil.heydari@gmail.com

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

یادگیری ماشین در نظریه تابعی چگالی برای تعیین خواص ساختاری ZrCoBi

عسکری لمجیری، فرشته[۱]؛ جلالی اسد آبادی، سعید[۱]؛ یزدانی کچویی، مجید[۱]

[۱] دانشکده فیزیک، دانشگاه اصفهان، اصفهان

چکیده:

در این مقاله مقادیر مناسب پارامتر هابارد (U) برای ترکیب ZrCoBi با استفاده از ترکیب نظریه تابعی چگالی و یادگیری ماشین محاسبه شده‌اند. بدین منظور ثابت شبکه و مدول حجمی ترکیب را به ازای چند مقدار از پارامتر هابارد به کمک نظریه‌ی تابعی چگالی به‌دست آورده و برای پیش بینی نقاط میانی از روش برازش های خطی و گوسی بهره گرفته‌ایم و نتایج حاصل را با مقادیر تجربی پارامتر شبکه مقایسه کرده‌ایم. نتایج محاسبات نشان می‌دهند که اگر پارامتر هابارد تنها برای اتم Co در نظر گرفته شود مقدار ۱/۲۵ eV و اگر برای اتمهای Zr و Co در نظر گرفته شود مقدار ٦ eV برای اتم Zr و مقدار ۱/۲eV برای اتم Co برای بازتولید مقدار تجربی پارامتر شبکه مناسب‌اند. بر اساس مقادیر بهینه شده پارامتر هابارد، مدول حجمی برای این ترکیب پیش بینی شده است. ارزیابی برازش گوسی، درصد خطای بسیار کم پیش بینی ماشین از مقدار پارامتر شبکه را نشان می‌دهد. نتایج این مقاله نشان می‌دهند که می‌توان با استفاده از روش یادگیری ماشین و بدون از دست دادن دقت نتایج، از بسیاری از محاسبات ابتدا به ساکن سنگین اجتناب کرد و بنابراین سرعت انجام محاسبات را افزایش داد.

واژه های کلیدی:

نظریه تابعی چگالی ، یادگیری ماشین، برازش خطی، برازش گوسی ، پارامتر هابارد ، پارامتر شبکه ، مدول حجمی

Machine learning in density functional theory to predict ZrCoBi structural properties

Fereshteh Askari- Lemjiri[1]; Saeid Jalali- Asadabadi[1]; Majid Yazdani -Kachoei[1]

[1]*Department of Physics, University of Isfahan, **Isfahan***

Abstract:

In this paper, the suitable Hubbard parameter (U) for ZrCoBi compound is predicted using a combination of the density functional theory (DFT) and machine learning technique. To this end, first, the lattice parameter and bulk modulus of the case are calculated using DFT including some values of U parameter. Then, we have predicted the lattice parameter and bulk modulus of the system for the other values of the U parameter by means of the linear and Gaussian regressions without performing additional heavy DFT calculations. To find the best U parameter, we have compared our results with the available experimental data. Our results show that if the U parameter is considered only for the Co atom, the U_{eff}=1.25 eV can reproduce the experimental lattice parameter, while if two individual U parameters are considered for both the Zr and Co elements, the set of (U_{eff} =6 eV for Zr and U_{eff} =1.2 eV for Co) can lead to the experimental results. Evaluation of the regressions shows that the accuracy of the results predicted by the machine learning approach is high. The results of this paper show that machine learning can be considered as a reliable technique which can be used to speed up the calculations by avoiding furthered DFT calculations.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد

http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مقدمه:

معمولا، محاسبات نظریه‌ی تابعی چگالی با استفاده از رهیافت‌های معمول LDA و GGA در پیش بینی خواص دستگاه‌های همبسته‌ی قوی با اوربیتال‌های نیمه پر d و f با شکست مواجه می‌شوند. بنابراین، برای این دستگاه‌ها از رهیافت‌های دیگری نظیر LDA+U استفاده می‌شود [۱]. اما، نکته‌ی مهم در موفقیت این رهیافت انتخاب درست مقدار پارامتر هابارد U است. یک راه برای انتخاب مقدار مناسب U انجام محاسبات با مقادیر U مختلف و مقایسه‌ی نتایج محاسبات با مقادیر تجربی در دسترس است [۲]. اما، موفقیت این روش به گام و میزان تغییرات U وابسته است. برای بالا بردن دقت و شانس موفقیت این روش ناگزیر هستیم که گام تغییرات U را کوتاه انتخاب کنیم. اما، این کار منجر به تعداد محاسبات بسیار زیاد خواهد شد. همچنین، برخی ازترکیب‌ها به بیش از یک پارامتر U نیاز دارند. در این حالت با تعداد انتخاب‌های زیادی برای مقادیر U روبرو خواهیم بود. در بسیاری از موارد مقادیر U همبسته‌اند و این مطلب یافتن مقادیر U مناسب را بسیار مشکل خواهد ساخت، زیرا تغییر یک U منجر به تغییر دیگری خواهد شد. بنابراین، در بسیاری از محاسبات استفاده از روش ارایه شده در بالا برای یافتن U مناسب عملا امکان پذیر نخواهد بود. استفاده از ترکیب یادگیری ماشین و نظریه تابعی چگالی [۳] برای اجتناب از مشکلات روش فوق بسیار کارساز خواهد بود. ما در این مقاله از ترکیب یادگیری ماشین و نظریه تابعی چگالی برای یافتن مقدار مناسب U برای ترکیب ZrCoBi بهره گرفته‌ایم. این ترکیب به عنوان یک ماده ترموالکتریک با بهره‌وری بسیار بالا مورد توجه قرار گرفته است. خواص ساختاری و الکترونی این ترکیب برای مقادیر مختلف U اخیرا مورد مطالعه قرار گرفته‌اند [٤]. در این ترکیب دو عنصر Zr و Co دارای اوربیتال‌های نیمه پر d هستند و بنابراین به دو پارامتر U (یکی برای Zr و یکی برای Co) برای توصیف خواص این ترکیب بر اساس رهیافت LDA+U نیاز داریم. ما در این مقاله مقادیر مناسب U برای عناصر Zr و Co که منجر به پارامتر شبکه‌ی تجربی می‌شوند را با استفاده از ترکیب یادگیری ماشین و نظریه تابعی چگالی پیش بینی کرده‌ایم. همچنین مقدار مدول حجمی این ترکیب را با استفاده از این مقادیر U پیش بینی کرده‌ایم.

جزییات محاسبات

در این مقاله حل معادلات کوهن-شم با استفاده کد محاسباتی WIEN2k بر اساس روش LAPW و در حضور برهمکنش اسپین- مدار (SOC) انجام گرفته است. شعاع کرات مافین-تین برای اتمهای Zr، Co و Bi به ترتیب a.u ٢/٤، ٢/٤، ٢/٥ وهمچنین پارامترهای محاسباتی $R_{MT}K_{max}$ =٩/٥، l=١٠، G_{max}= ١٣$Bohr^{-1}$ و انرژی جداسازی ٩- ریدبرگ انتخاب شده‌اند.

به منظور استفاده از روش یادگیری ماشین در ابتدا بانک اطلاعاتی را در اختیار ماشین قرار می‌دهیم و ماشین را با آن آموزش می دهیم. سپس، اجازه می دهیم تا ماشین آنها را پردازش و به فرمت مناسب تبدیل و بهینه سازی کند تا الگوی داده‌ها را کشف کند به طوری که بتواند داده‌های مجهول را پیش بینی کند. می‌توان از تابع‌های مختلفی برای عمل برازش استفاده کرد. داده‌های گردآوری شده در بانک اطلاعاتی را به‌صورت مجموعه‌های $\{x_j\}$ و $\{f_j\}$ به ماشین آموزش می‌دهیم با این امید که ماشین با شناسایی الگوی این داده‌ها قادر به پیش بینی داده‌های مجهول شود. بر خلاف روش‌های برازش مبتنی بر پایه‌هایی از نوع چندجمله‌ای‌هایی مانند $\{1, x, x^2, \dots, x^n\}$ روش مبتنی بر هسته از یک پایه مناسب وابسته به داده‌های $\{x_j\}$ استفاده می‌کند. برای ایجاد چنین وابستگی‌ای نیاز به یک هسته و یک الگوریتم خوش تعریف داریم.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics٩٩

برای داشتن یک الگوریتم خوش تعریف لازم است که هسته معین مثبت باشد. یک هسته را معین مثبت گوییم، اگر ماتریس درونیابی مربعی منتج از پایه بالا، روی هر مجموعه نقاط دلخواه متمایز یک ماتریس معین مثبت باشد. یعنی با هر انتخاب دلخواه از داده‌های ، ماتریس $K = \left(k(x_i, x_j)\right)$ معین مثبت باشد (به عبارت دیگر، همه مقادیر ویژه آن حقیقی و مثبت باشند). یکی از مشهورترین هسته‌ها هسته گاوسی است که معمولاً در محاسبات فیزیکی نیز از آن استفاده می‌شود. هسته گاوسی به صورت زیر است [۵]:

$$k(\ ,y) = \exp\left(\frac{-(x-y)^2}{2h^2}\right), \qquad (2)$$

که در آن h پارامتری است که هم پوشانی داده‌ها را کنترل می‌کند. فرض می‌کنیم که برازش را بتوان بر حسب پایه هسته به شکل زیر نوشت:

$$f^{ML}(\ ) = \sum_{=1}^{N_T} \alpha_j k(\ x, x_j), \qquad (3)$$

که در آن f^{ML} تابع یادگیری ماشین (برازش) است و α_j ها مقادیر مجهولی هستند که باید تعیین شوند. در اینجا این مقادیر را به کمک تقریب کمترین مربعات به دست می‌آوریم. یعنی، آنها را طوری تعیین می‌کنیم که مجموع مربعات خطا روی داده‌های معلوم $\left(x_j, f_j\right)$ کمینه شود. بنابراین، $c(\alpha)$ را برای $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{N_T})$ به‌صورت زیرتعریف می‌کنیم:

$$c(\alpha) = \sum_{j=1}^{N_T}\left(f_j^{ML} - f_j\right)^2 , \qquad (4)$$

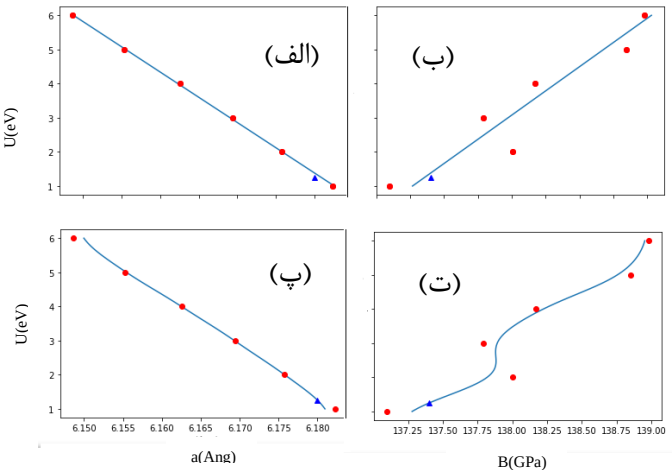
و بردار α را طوری تعیین می‌کنیم که $c(\alpha)$ کمینه شود [۶].

بحث و نتیجه‌گیری

در این تحقیق ابتدا به کمک نرم افزار WIEN2k ثابت شبکه و مدول حجمی ترکیب ZrCoBi را با استفاده از رهیافت LDA+U به ازای مقادیر پارامتر هابارد U(eV)=$\{۱,۲,۳,۴,۵,۶\}$ محاسبه کرده‌ایم. سپس، برای محاسبه مقادیر میانی جهت جلوگیری از محاسبات بسیار زیاد اطلاعات ورودی و خروجی نرم افزار WIEN2k را به ماشین آموزش داده ایم. ما در ابتدا پارامتر هابارد را تنها برای اتم Co تغییر داده و ثابت شبکه و مدول حجمی ترکیب را به‌دست آورده‌ایم. برای یافتن مقادیرمیانی از برازش خطی وگوسی استفاده کرده‌ایم. نتایج این محاسبات در شکل (۱) ارایه شده‌اند. همان‌طور که شکل (۱) نشان می‌دهد با افزایش مقدار U ثابت شبکه‌ی پیش بینی شده کاهش می‌یابد. برای ارزیابی برازش گوسی پارامتر شبکه و مدول حجمی را برای نقطه‌ی میانی U_{eff} =۱/۵ eV با استفاده از نظریه تابعی چگالی بازتولید کرده و میزان خطا را محاسبه کرده‌ایم. جدول (۱) نتایج حاصل از پیش بینی ماشین، محاسبات DFT و درصد خطای پیش بینی ماشین را نمایش می‌دهد. بر اساس این جدول میزان خطای ماشین بسیار کم و مقادیر پیش بینی شده توسط ماشین بسیار نزدیک به مقادیر محاسبه شده می‌باشند. این مطلب نشان می‌دهد که آموزش ماشین به درستی صورت گرفته و نتایج پیش بینی آن قابل اعتماد هستند. بنابراین، ما می‌توانیم مقادیر پارامتر شبکه و مدول حجمی ترکیب ZrCoBi را به ازای هر مقدار U_{eff} بین یک تا ٦ eV را بدون محاسبه و فقط بر اساس پیش بینی ماشین به‌دست آوریم. نتایج تجربی مقدار پارامتر شبکه را برای این ترکیب ٦/۱۸ eV گزارش کرده‌اند [۷]. بر اساس پیش بینی های ماشین مقدار U_{eff} =۱/۲۵ eV می‌تواند این مقدار را باز تولید کند. بنابراین، اگر پارامتر هابارد تنها برای اتم Co در نظر گرفته شود، مناسبترین مقدار برای پارامتر هابارد برای ترکیب ZrCoBi برابر ۱/۲۵ eV خواهد بود. همچنین، شکل (۱) نمودار ثابت شبکه و مدول حجمی بر حسب پارامتر هابارد که در آن علاوه بر نقاط آموزش داده شده نقطه مورد ارزیابی هم قرار داده شده‌اند را نمایش می‌دهد.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

ما در مرحله بعد پارامتر هابارد را برای جفت اتم (Zr,Co) در نظر گرفته و مقادیر U_{eff}-Zr و U_{eff}-Co را از ۱ تا ٦ eV با گام یک الکترون ولت تغییر داده و محاسبات پارامتر شبکه و مدول حجمی را بر اساس محاسبات DFT و با رهیافت LDA+U تکرار کردیم. سپس، ٣٦ نتیجه حاصل از محاسبات DFT را به عنوان ورودی به منظور آموزش به ماشین ارایه دادیم.

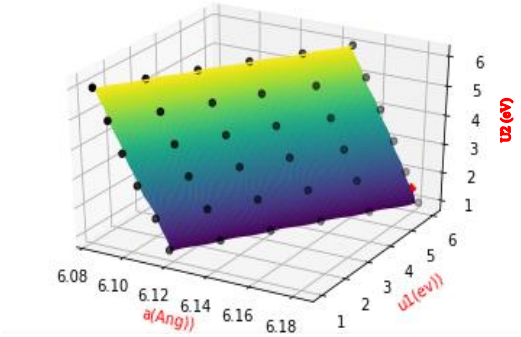


شکل۱: الف) برازش خطی پارامتر هابارد(eV)بر حسب ثابت شبکه (Ang) ب) برازش خطی پارامترهابارد(eV) بر حسب مدول حجمی(GPa) پ) برازش گوسی پارامتر هابارد(eV) بر حسب ثابت شبکه (Ang) ت) برازش گوسی پارامتر هابارد (eV) بر حسب بالک مدول (GPa). مثلث های آبی مقادیر تجربی را نشان می‌دهند.

جدول۲: در صدخطا برای بالک مدول دربرازش خطی و گوسی.

	DFT	برازش		در صد خطا	
	U=۱/۵eV	گوسی	خطی	گوسی	خطی
a (Ang)	٦/۱۷۹۰	٦/۱۷۸۱	٦/۱۷۹۱	٪۰/۰۰٤	٪۰/۰۰۱
B(GPa)	۱۳۷/۲۸٦	۱۳۷/٥٦۰	۱۳۷/٤٤٥	٪۰/۱۹۰	٪۰/۱۱۳

نمودار پارامتر شبکه بر حسب پارامترهای هابارد U_{eff}-Zr و U_{eff}-Co رسم شده است که U1 مربوط به Zr و U2 مربوط به Co می‌باشد. شکل(۲) در صد خطای برازش گوسی نسبت به محاسبات WIEN2k برای نقطه U=(۲/٥، ۳/٥) در محاسبه پارامتر شبکه برابر ۰/۳٪ و در محاسبه مدول حجمی ۱/۳٪ می باشد. نتایج ما پیش بینی می‌کنند که زوج U_{eff}-Zr= ٦ eV, U_{eff}-Co=۱/ ۲ eV مقدار پارامتر شبکه تجربی ترکیب را بازتولید خواهند کرد.



شکل ۲: نمودار پارامتر شبکه بر حسب آنگستروم نسبت به پارامتر هابارد بر حسب(eV) برای دو اتم Zr و Co. نقطه قرمز مقدار تجربی را نشان می‌دهد.

مقدار مدول حجمی ترکیب نیز به ازای این زوج برابر ۱۳۷/۵۷۱۰Gpa پیش بینی می‌شود.

مراجع:

1. M. Yazdani-Kachoei, and S. Jalali-Asadabadi, "Topological analysis of electron density in half-Heusler ZrXBi (X^{i} = Co, Rh) compounds: A density functional theory study accompanied by Baderâ€™s quantum theory of atoms in molecules," Journal of Alloys and Compounds **828**, 154287.

2 G. Fiedler, and P. Kratzer, "Ternary semiconductors NiZrSn and CoZrBi with half-Heusler structure: A first-principles study," Physical Review B **94**, 075203 (2016).

3. G. R. Schleder, A. C. M. Padilha, C. M. Acosta, M. Costa, and A. Fazzio, "From DFT to machine learning: recent approaches to materials science“a review," Journal of Physics: Materials **2**, 032001 (2019).

4. D. Zhao, M. Zuo, L. Bo, and Y. Wang, "Synthesis and Thermoelectric Properties of Pd-Doped ZrCoBi Half-Heusler Compounds," Materials **11** (2018).

5. S. Matthias, "GAUSSIAN PROCESSES FOR MACHINE LEARNING," International Journal of Neural Systems **14**, 69-106 (2004).

6. W. Mizukami, S. Habershon, and D. P. Tew, "A compact and accurate semi-global potential energy surface for malonaldehyde from constrained least squares regression," The Journal of Chemical Physics **141**, 144310 (2014).

7. A. Page, C. Uher, P. F. Poudeu, and A. Van der Ven, "Phase separation of full-Heusler nanostructures in half-Heusler thermoelectrics and vibrational properties from first-principles calculations," Physical Review B **92**, 174102 (2015).

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

شبیه سازی مالتی پکتور تک سطحی در دی الکتریک‌ها با استفاده از کد تک الکترونی

مستأجران، مریم؛ کاظمی، فیروزه

دانشکده فیزیک دانشگاه یزد ، صفائیه ، چهار راه پژوهش ، یزد

چکیده

پدیده‌ی مالتی پکتور به طور گسترده ای در دهه‌های اخیر مطالعه شده است. از آنجایی که این پدیده توان سیستم را محدود می کند و در بعضی موارد باعث تخریب سیستم می شود، شناخت این پدیده از اهمیت زیادی برخوردار است. این پدیده با رشد بسیار سریع الکترون‌ها در سیستم‌های رادیو فرکانسی تحت خلا مشخص می‌شود. به علت بالا بودن قیمت انجام تست تجربی، ابزارهای شبیه سازی برای پیش بینی نواحی که در آن مالتی پکتور اتفاق می افتد استفاده می شود. ما در این مقاله با در نظر گرفتن تک الکترون اولیه، پدیده‌ی مالتی پکتور تک سطحی در دی الکتریک‌ها را شبیه سازی می‌کنیم و نواحی که در آن مالتی پکتور اتفاق می افتد را تعیین می کنیم.

واژه های کلیدی: *مالتی پکتور، دی الکتریک‌ها، تک سطحی*

The simulation of the single-sided multipactor in dielectrics using a single electron code

Mostajeran, Maryam; Kazemi, Firuzeh

Department of Physics, University of Yazd, Yazd

Abstract

Multipactor phenomenon has been widely studied during in the past decades. As this effect limits the transmitted RF power and may degrade RF devices, its understanding is primordial. This phenomenon is characterized by a very fast growth of the electronic population in Radio-Frequency devices under vacuum. Due to the high cost of experimental tests, simulation tools are heavily used to predict the multipactor zones. In this paper we simulate the single-sided multipactor in a dielectric using a single electron code and the multipactor zones are then defined.

***Keywords**: Multipactor, Dielectrics, single side.*

PACS No Ne 80, 20

مقدمه

اثر مالتی پکتور، ایجاد بهمنی از الکترون هاست که در سیستم های رادیو فرکانسی(rf)[۱] تحت خلا اتفاق می افتد اگر سه شرط: ۱)همزمانی الکترون با میدان الکتریکی rf (شرط تشدید) ۲) شرط بزرگتر از یک بودن ضریب الکترون ثانوی(SEY)[۲] ۳) شرط پایداری، برآورده شود[۱]. به عبارتی با وقوع مالتی پکتور در مدت

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

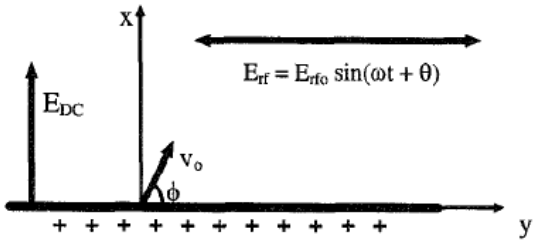
زمان چند نانوثانیه رشد نمائی الکترون ها اتفاق می‌افتد. این پدیده در سیستم های ماهواره ای ارتباط از راه دور، در سیستم گرمایشی پلاسمای rf در راکتورهای همجوشی(توکامک) و همچنین شتاب دهنده‌های ذرات اتفاق می‌افتد. این پدیده باعث ایجاد ابرالکترونی، ایجاد اختلال در سیستم و بازتاب سیگنال rf به منبع سیگنال می‌شود.

ساز و کار وقوع مالتی پکتور در فلزات و دی‌الکتریک‌ها متفاوت است. به دلیل وجود الکترون‌های آزاد در فلزات، سطح فلز با وجود از دست دادن الکترون، خنثی می‌ماند. در دی‌الکتریک‌ها پس از نشر الکترون ثانوی از سطح دی‌الکتریک، حفره بر جای می‌ماند که باعث باردار شدن دی‌الکتریک (بار مثبت) می‌شود، لذا در مطالعه‌ی مالتی پکتور در دی الکتریک ها علاوه بر در نظر گرفتن میدان rf، میدان ثابت E_{DC} هم در نظر گرفته می‌شود[۲].

از آنجائی که انجام آزمایش برای پیدا کردن نواحی وقوع مالتی پکتور گران قیمت است، روش های مختلفی برای تخمین زدن این نواحی استفاده می‌شود از جمله: مطالعات نظری و آماری، شبیه سازی به روش مونت کارلو و ذره در سلول (PIC)[۳]. ما در این مقاله با در نظر گرفتن یک الکترون اولیه، مالتی پکتور تک سطحی در دی الکتریک را شبیه سازی می‌کنیم و با فرض مشخص بودن میدان rf مقادیری از E_{DC} که در آن مالتی پکتور اتفاق می افتد را بدست می‌آوریم.

مدل مالتی پکتینگ تک سطحی

هندسه‌ی مالتی پکتینگ تک سطحی در شکل ۱ نشان داده شده است. الکترون با سرعت v_0 و زاویه ی ϕ نسبت به محور مثبت y انتشار می‌یابد و تحت تأثیر میدان های الکتریکی قرار می‌گیرد. میدان الکتریکی رادیو فرکانسی (rf) با دامنه‌ی E_{0rf} و فرکانس زاویه‌ای ω در جهت y بر ذره اثر می کند و به ذره انرژی می‌دهد و باعث انتقال ذره در راستای y می‌شود. E_{DC} به ذره انرژی نمی‌دهد بلکه الکترون با سرعت اولیه ی غیر صفر توسط این میدان الکتریکی به صفحه‌ی انتشار برمی‌گردد. در هر انتقال (پرواز) الکترون ها انرژی شان بیشتر می‌شود و هر بار، با انرژی بیشتری به سطح برخورد می‌کنند و الکترون های ثانوی را از سطح جدا می‌کنند. این فرایند تکرار می‌شود و بهمنی از الکترون های ثانوی تولید می‌شود.



شکل ۱: مدل مالتی پکتور تک سطحی با دو میدان الکتریکی rf و DC.

دینامیک الکترون

با استفاده از قانون دوم نیوتن می‌توان معادلات حرکت الکترون را بدست آورد. معادلات سرعت در دو راستا از روابط ۱و۲ بدست می‌آید.

$$\dot{x} = -\frac{e}{m} E_{DC} t + v_0 \sin\varphi \qquad (۱)$$

$$\dot{y} = -\frac{e}{m} E_{rf0} \left[\cos(\omega t + \theta) - \cos\theta\right] + v_0 \cos\varphi \qquad (۲)$$

می‌توان انرژی برخوردی الکترون به سطح، W، $W \quad \frac{m}{2} \cdot 2 \quad \cdot 2$ را در هر برخورد محاسبه کرد. زمان پرواز الکترون(از انتشار تا برخورد) با استفاده از رابطه‌ی $t_{flight} = \frac{2m}{e} \frac{\upsilon_0 \sin\varphi}{E_{DC}}$ بدست می‌آید[۲]. شرط تشدید زمانی اتفاق می‌افتد که زمان پرواز،مضرب فردی از نصف دوره تناوب باشد، رابطه‌ی ۳.

$$t_{flight} = \frac{(2n-1)}{2f} \qquad n=1,2,\ldots. \qquad (۳)$$

در این رابطه n مرتبه‌ی مالتی پکتور است. با استفاده از شرط تشدید، E_{DC} تشدیدی بدست می‌آید.

$$E_{DC} = \frac{4mf\upsilon_0 \sin\varphi}{} \qquad (٤)$$

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

با فرض f = ۳۲۵ MHz و $\varphi = \frac{\pi}{2}$، E_{DC} را برای انرژی‌های اولیه‌ی ۱، ۵ و ۱۰ الکترون ولت (eV) بدست آوردیم(جدول ۱).

جدول ۱. E_{DC} تشدیدی برای سه مرتبه ی مالتی پکتور و سه انرژی متفاوت الکترون اولیه.

W_0 / n	1 eV	5 eV	10 eV
1	4384.489 V/m	9804.017 V/m	13864.973 V/m
2	1461.496 V/m	3268.005 V/m	4621.657 V/m
3	876.897 V/m	1960.803 V/m	2772.994 V/m

با توجه به جدول ۱، مرتبه‌های بالای مالتی پکتورتک سطحی در E_{DC} کمتر اتفاق می‌افتد.

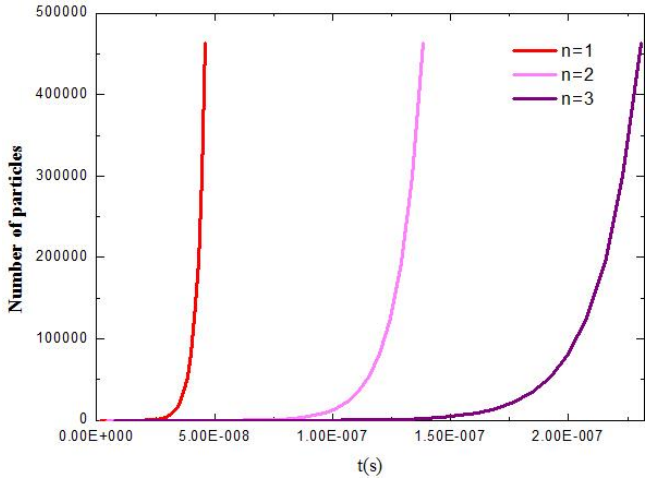
مدل انتشار الکترون ثانوی

الکترون های اولیه در هر برخورد، به طور متوسط تعدادی الکترون ثانویه تولید می‌کنند که این تعداد، ضریب الکترون ثانوی، SEY، نامیده می‌شود. SEY به جنس سطح و انرژی برخوردی الکترون بستگی دارد. ما در این مقاله از مدل دایان برای محاسبه‌ی ضریب الکترون ثانوی استفاده می کنیم [٤].

$$SEY \ \alpha \ (\frac{1}{})^{\frac{1}{p}}(\frac{R}{})^{\frac{1}{p}-1}(1-e^{-\frac{R}{\lambda_0}}) \qquad (۵)$$

در اینجاR ماکزیمم عمق نفوذ الکترون(به انرژی برخوردی الکترون بستگی دارد)، λ_0 عمق فرار میانگین الکترون‌های ثانویه و p توان در محدوده ی ۱,۳۵-۱,٦٦ است. مقادیری که در این مقاله برای پارامترهای SEY در نظر گرفتیم برای سطح دی الکتریک است و از مرجع [۵] گرفته شده است.

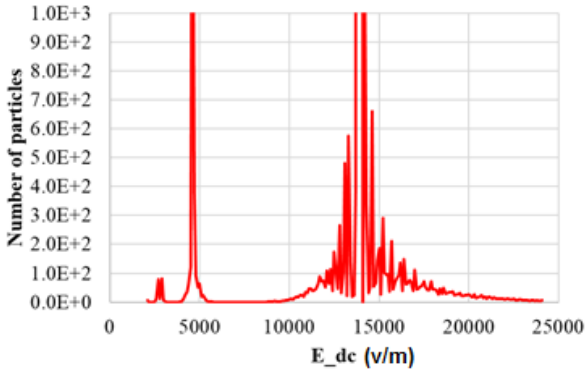
با استفاده از رابطه‌ی ۵، می‌توان تعداد الکترون‌های ثانویه تولید شده درهر برخورد را محاسبه کرد. در بسیاری از مقالات (به طور مثال[۸-٦]) ۳۰ برخورد برای تعیین ناحیه‌ی وقوع مالتی پکتور در نظر گرفته شده است. از این رو، ما در ابتدا ۳۰ برخورد را در نظر گرفتیم. تعداد الکترون‌های ثانویه تولید شده در ۳۰ برخورد را با فرض صفر بودن فاز اولیه، $\theta_1 = 0$، W_0 = ۱۰ eV و $E_{rf0} = 30$ KV/m محاسبه کردیم. شکل۲ تعداد الکترون°ها را برای سه مرتبه‌ی متفاوت مالتی پکتور (به عبارتی سه مقدار مختلف E_{DC} تشدیدی) بر حسب زمان (معادل ۳۰ برخورد) نشان می‌دهد. رشد نمائی تعداد الکترون های نشان دهنده ی وقوع مالتی پکتور است.



شکل۲ : تعداد الکترون ها بر حسب زمان (معادل ۳۰ برخورد) برای سه مرتبه‌ی مالتی پکتور با فرض $E_{rf0} = 30$ KV/m .

در شکل ۲ ، تعداد الکترون ها پس از ۳۰ برخورد برای سه مقدار E_{DC} تشدیدی یکسان است ولی در مرتبه‌ی بالاتر مالتی پکتور رشد ذرات کندتر است ومدت زمان بیشتری طول می کشد که به مقدار ٤٥٠٠٠٠ برسد.

شکل ۳ تعداد الکترون ها دربرخورد ۳۰ ام را برای E_{DC} های مختلف نشان می‌دهد. همانطور که درشکل ۳ دیده می‌شود نوسان های خیلی زیادی در تعداد الکترون‌ها دیده می‌شود.

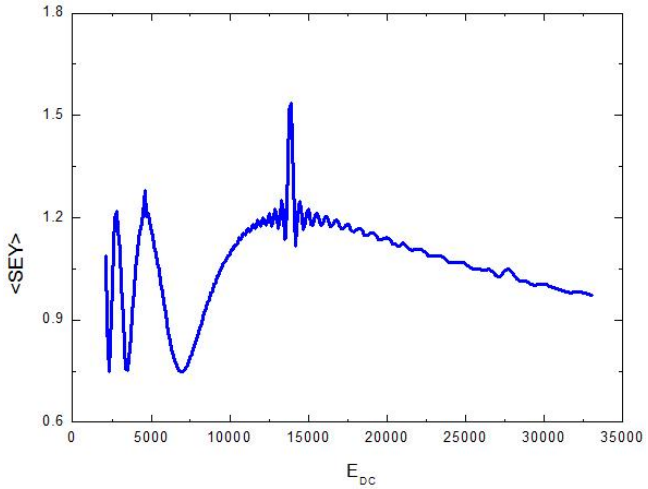


شکل۳ : تعداد الکترون های تولید شده در برخورد ۳۰ ام بر حسب E_{DC}

یکی دیگر از کمیت‌هایی که برای وقوع مالتی پکتور بررسی می‌شود $< SEY >$ است. اگر $< SEY >$ بزرگتر از یک باشد

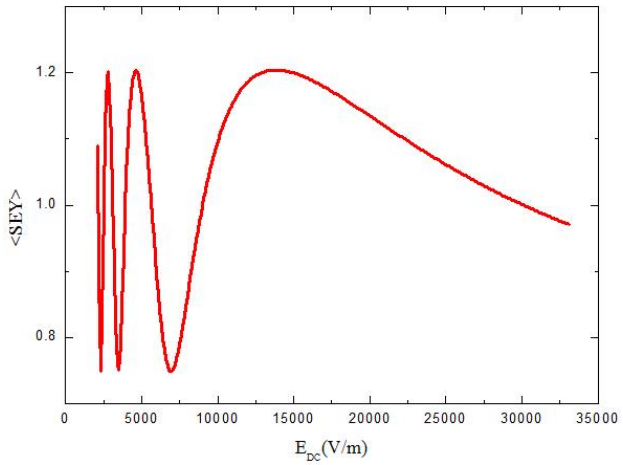
: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

نشان دهنده وقوع مالتی پکتور است. همانطور که در شکل ٤ مشاهده می‌شود $< SEY >$ برحسب E_{DC} هم دارای نوسان است.



شکل٤ : $< SEY >$ برحسب E_{DC} با فرض $E_{rf0} = 30$ KV/m و ۳۰ برخورد.

برای حل این مشکل، موارد زیادی بررسی شد و نهایتاً علت این نوسان‌ها، کافی نبودن تعداد برخوردها دربدست آوردن نتایج مشخص شد. لذا تعداد برخوردها را افزایش دادیم تا این نوسانات از بین برود و به حالت پایدار برسیم، شکل۵.



شکل۵: $< SEY >$ برحسب E_{DC} با در نظر گرفتن $E_{rf0} = 30$ KV/m و 10^5 برخورد.

با استفاده از شکل ۵.مقادیری از E_{DC} که $< SEY >$ مربوط به آن بزرگتر از یک است را می توان به عنوان نواحی که مالتی پکتور در آن اتفاق می‌افتد تعیین کرد.

نتیجه گیری

به علت بالا بودن قیمت انجام تست تجربی، ابزارهای مختلفی از جمله مطالعات آماری برای تخمین زدن نواحی که مالتی پکتور اتفاق می افتد، استفاده می‌شود. در این مطالعات اغلب تعداد ۳۰ برخورد در نظرگرفته شده است. ما در این مقاله با در نظر گرفتن یک الکترون اولیه، مالتی پکتور تک سطحی در دی الکتریک ها را با در نظر گرفتن ۳۰ برخورد شبیه سازی کردیم. نتایج بدست آمده نشاندهنده‌ی نوسان‌های زیادی بود، لذا نهایتاً جواب‌های بدون نوسان را با در نظر گرفتن تعداد زیادی برخورد بدست آوردیم. در E_{rf0} معین با محاسبه‌ی $< SEY >$ برای E_{DC} های مختلف، نواحی که در آن مالتی پکتور اتفاق می‌افتد را بدست آوردیم.

مرجع‌ها

[1] V. Semenov, V. Nechaev, E. Rakova, N. Zharova, D. Anderson, M. lisak, J. Puech, *Phys. Plasma*. 12 (2005) 073508.

[2] Ang, Lay-Kee, et al. "*Power deposited on a dielectric by multipactor*" ;IEEE transactions on plasma science 26.3 (1998): 290-295.

[3] A. Plaçais, E. Sorolla, M. Belhaj, J. Hillairet, and J. Puech, "*A three-dimension Dionne's model for multipactor simulations*," 2020.hal-02472458v2

[٤] Dionne, G. F. (1975). "*Origin of secondary-electron-emission yield-curve parameters*". Journal of *Applied Physics*, 46(8), 3347-٣٣٥١.

[٥] مستاجران، مریم، شهبازی، الهه، " *بررسی اثر دما بر نشر الکترون ثانویه در دی‌الکتریک‌ها* " چهارمین کنفرانس شتابگرها و کاربرد آن، آذر ۱۳۹۸

[6] A.G. Sazontov, V.A. Sazontov and N.K. Vdovicheva, "*Multipactor breakdown prediction in a rectangular waveguide: statistical theory and simulation results*", Contrib. Plasma Phys. 48 (2008) 331.

[7] M. Mostajeran, M. Lamehi Rachti "*Importance of number of gap crossings on secondary emission in the simulation of two-sided multipactor*" JINST 5 P08003, 2010.

[8] V. Semenov et al., "*Multipactor in rectangular waveguides*", *Phys. Plasmas* **14** (2007) 033501.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

کنترل انتشار ویروس HDV در محیط با بررسی جایگزیدگی اطلاعات اسپینی

سلیمی، مصطفی؛ بهنیا، سهراب؛ فتحی زاده، سمیرا

گروه فیزیک، دانشگاه صنعتی ارومیه، ارومیه، ایران

چکیده

عدم انتقال اطلاعات از ویروس به بیرون می تواند روشی برای کنترل و جلوگیری از شیوع بیماری های واگیردار باشد. این روش می تواند افراد جامعه را از مراقبت های جدی در تماس با بیماران بی نیاز بگرداند. در این کار، ما سعی کرده ایم روشی را برای جلوگیری از انتقال اطلاعات از ویروس به محیط بر مبنای اعمال ولتاژ به محیط آلوده معرفی کنیم. با بررسی جایگزیدگی حالت های اسپینی در سیستم ویروس می توان انتقال اطلاعات به محیط را پیش بینی کرد. محدوده ولتاژ بین حدود ۲۰ تا ۳۰ ولت، بازه ای است که در آن اطلاعات به بیرون نشت می کند. در ولتاژهای پایین، حالت های اسپینی جایگزیده هستند و می توان گفت که اطلاعات اسپینی به بیرون نفوذ نمی کند. در نتیجه می توان پیش بینی کرد که با اعمال ولتاژهای بسیار پایین در محیط های آلوده به ویروس می توان از انتشار اطلاعات اسپینی و درنتیجه انتشار بیماری در محیط جلوگیری کرد.

واژه های کلیدی: *اطلاعات اسپینی، آشوب کوانتومی، حمام گرمایی، دی ان ای*

Controlling the spread of HDV virus in the environment by investigation the localization of spin information

Salimi, Mostafa; Behnia, Sohrab; Fathizadeh, Samira

Department of Physics, Urmia University of Technology, Urmia, Iran

Abstract

Preventing the transmission of information from the virus to the environment can be a method to control the spread of infectious diseases. This method can eliminate the need for serious care in contact with patients. In this work, we have tried to introduce a novel method to prevent the transmission of information from the virus to the environment based on the applying of voltage to the infected environment. By studying the localization of spin modes in the virus system, it is possible to predict the transfer of information to the environment. The voltage range between about 20 to 30 volts is a range that information leaks out. At low voltages, the spin modes are localized and it can be said that the spin information does not penetrate the outside. As a result, it can be predicted that applying the very low voltages in virus-infected environments can prevent the spread of spin information and thus the spread of disease in the environment.

***Keywords**: Spin Information, Quantum Chaos, Heat Bath, DNA*

PACS No. 72, 81, 87

مقدمه

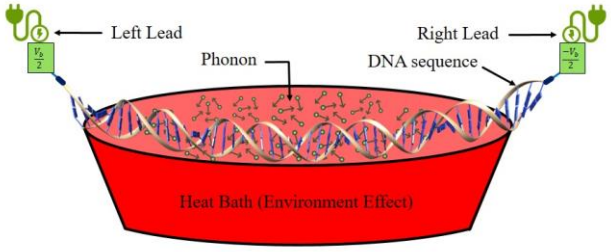
اخیرا، یکی از مسائل مهم روز مطالعه در مورد نحوه انتقال ویروس ها از محیط آلوده به موجود سالم می باشد. تا حال، فاکتورهای بسیاری بررسی شده اند که انتقال ویروس در محیط را کنترل کرده و از انتشار آن در محیط جلوگیری کنند. انتشار ویروس در محیط می تواند موجب اپیدمی یا پاندمی بیماری شود که در اینصورت مدیریت و مهار بیماری در جامعه را مشکل می سازد. بنابراین، بررسی عوامل انتشار و کنترل آنها می تواند در مهار همه گیری بیماری کمک کند. در این کار ما قصد داریم که انتشار ویروس در محیط را از طریق بررسی انتشار یا جایگزیدگی اطلاعات اسپینی در آن بررسی کنیم. برای این کار خواص آماری ترازهای انرژی را در یک توالی طبیعی از ژنوم ویروس دلتای هپاتیت[1] بررسی می کنیم. برای شبیه‌سازی اثرات محیط روی سیستم‌های زیستی آنها را در تماس با یک حمام حرارتی قرار می‌دهیم. حمام گرمایی کوانتومی شامل مجموعه‌ای از اجزای برهم‌کنشی ضعیف(نوسانگر) است که هر کدام از اجزاء دارای درجات آزادی محدود و زیادی هستند [۱]. بررسی نوسانات انرژی

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

در چنین سیستم بازی بعنوان یک سیستم کوانتومی بس‌ذره‌ای که با حمام حرارتی جفت شده‌اند از تمرکزهای جدید در مطالعات ترمودینامیک کوانتومی و کوانتوم بیولوژیک است. برای یک آنسامبل از سیستم‌های کوانتومی که با حمام حرارتی جفت شده‌اند، رفتار غیر خطی این آنسامبل با حل معادلات اصلی کوانتومی[۲] بیان می‌شود و حساسیت آن به تغییرات و شرایط اولیه محیط توسط ابزارهای آشوب کوانتومی[۳] بررسی می‌شود [۲]. خواص آماری و تحلیل رفتار چنین سیستم‌هایی مطابق با نظریه ماتریس‌های تصادفی[۴] است [۳]. نوسانات طیفی، خواص انتقال و جایگزیدگی سیستم مورد مطالعه بر اساس این نظریه بررسی می‌شود. در این مطالعه با انتخاب یک توالی طبیعی از ژنوم ویروس دلتای هپاتیت[۵] [٤]، اثرات محیط را در قالب حمام حرارتی و اتصال با الکترودها بررسی می‌کنیم. برای این منظور با بکارگیری ابزارهای آشوب کوانتومی به تحلیل سیستم می‌پردازیم.

ابزار و مدل سازی ریاضی

آشوب کلاسیکی بر تحلیل مسیرها در فضای فاز تکیه دارد. از آنجائیکه مسیر در دانش کوانتوم با اصل عدم قطعیت هایزنبرگ رد می‌شود، بنابراین تحلیل دینامیکی ترازهای انرژی و توابع موج می‌تواند اطلاعاتی درباره نحوه عملکرد سیستم کوانتومی در اختیار بگذارد. نوسانات ترازهای انرژی این سیستم‌ها با تابع توزیعی نمایش داده می‌شود که به دو صورت پواسنی[۶] (در ناحیه انتگرال‌پذیر رفتار کلاسیکی غیر آشوبناک دارند) و ویگنری[۷] (معادل کلاسیکی آنها آشوبناک است) می‌باشد. برای این تقسیم‌بندی از تابع توزیع فضایی نزدیک‌ترین همسایگان $P(s)$ استفاده می‌شود که فاصله نزدیک‌ترین همسایگی با رابطه $s = E_{i+1} - E_i$ محاسبه می‌شود. ابزار دیگری که خواص جایگزیدگی ویژه حالت ها را می سنجد، نسبت مشارکت معکوس (IPR[۸]) است که برای ویژه حالتی که کاملا جایگزیده باشد برابر با ۱ و برای حالت های کاملا ناجایگزیده برابر $\frac{1}{N}$ می باشد که در آن N سایز سیستم را بیان می کند.



شکل۱ : تصویری از سیستم مورد مطالعه: مولکول‌های DNA (سیستم) متصل به الکترودهای چپ و راست و غوطه‌ور در حمام حرارتی(محیط)

با توجه به شکل (۱) با انتخاب توالی طبیعی از ژنوم HDV آن را در تماس با حمام حرارتی و الکترودهایی از چپ و راست قرار داده‌ایم.

هامیلتونی کل با رابطه زیر بیان می‌شود [۵]:

$$H_T = H_{sys} + H_{Lead} + H_{Bath} + H_{sys-Lead} + H_{sys-Bath} \quad (۱)$$

در رابطه (۱) جمله اول مربوط به هامیلتونی DNA (سیستم) است که بصورت زیر تعریف می‌شوند:

$$\begin{aligned} H_{sys} &= \sum_{i,j=1,2} \sum_{\sigma=\uparrow\downarrow} \varepsilon_{i,j}\, c_{i,j}^{+\sigma} c_{i,j}^{\sigma} + V_{i,i+1,j}\, c_{i+1,j}^{+\sigma} c_{i,j}^{\sigma} \\ &+ \sum_{i,\sigma} \lambda_i\, c_{1,i}^{+\sigma} c_{2,i}^{\sigma} + \sum_{i,j} 2it_{so}\cos\theta\, (c_{i,j}^{+\uparrow} c_{i+1,j}^{\uparrow} - c_{i,j}^{+\uparrow} c_{i-1,j}^{\uparrow} \\ &- c_{i,j}^{+\downarrow} c_{i+1,j}^{\downarrow} + c_{i,j}^{+\downarrow} c_{i-1,j}^{\downarrow} + D_{i,i+1}\, c_{i,j}^{+\uparrow} c_{i+1,j}^{\downarrow} - D_{i,i+1}^{+}\, c_{i,j}^{*\downarrow} c_{i+1,j}^{\uparrow} \\ &+ D_{i-1,i}^{*}\, c_{i,j}^{+\downarrow} c_{i-1,j}^{\uparrow} - D_{i-1,i}\, c_{i,j}^{+\uparrow} c_{i-1,j}^{\downarrow}) + H.c. \end{aligned} \quad (۲)$$

بطوریکه j تعداد رشته‌ها و i، تعداد سایت‌ها در هر رشته از DNA ویروس می‌باشد. $(c_{j,i})c_{j,i}^{+}$ عملگر خلق (فنا) یک الکترون در سایت (j,i)، $\varepsilon_{j,i}$ انرژی روی سایت الکترون، $t_{j,i}$ انتگرال پرش در یک رشته و λ_i اندرکنش بین زنجیره‌ای، θ زاویه مارپیچ و

$$D_{n,n+1} = it_{so}\sin\theta\{\sin[n\Delta\phi] + \sin[(n+1)\Delta\phi] + i\cos[n\Delta\phi] + i\cos[(n+1)\Delta\phi]\}$$

می‌باشد که ϕ زاویه پیچش است. جمله دوم در رابطه (۱) بیان‌کننده هامیلتونی الکترودها است:

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

$$H_{Lead}=\sum_{j=1,2}\sum_{k,\sigma}(\varepsilon_{L_{j,k}}+\frac{eV_b}{2})\ a^{+\sigma}_{L_{j,k}}a_{L_{j,k}} \\ +\sum_{j=1,2}\sum_{k,\sigma}(\varepsilon_{R_{j,k}}-\frac{eV_b}{2})\ a^{+\sigma}_{R_{j,k}}a_{R_{j,k}} \quad (۳)$$

که $a^{+}_{\beta_{j,k}}$ $(a_{\beta_{j,k}})$ با $\beta=L,R$، عملگر خلق(فنا) الکترون در الکترود β، $\varepsilon_{\beta_{j,k}}$ انرژی روی سایت الکترودها و V_b ولتاژ بایاس می‌باشد. هامیلتونی مربوط به برهم‌کنش سیستم- الکترود با رابطه زیر بیان می‌شود:

$$H_{sys-Lead}=\sum_{j=1,2}\sum_{k,\sigma=\uparrow\downarrow}(t_L\ a^{+\sigma}_{L_{j,k}}c^{\sigma}_{i,j}+t_R\ a^{+\sigma}_{R_{j,k}}c^{\sigma}_{j,N}+H.c.) \quad (٤)$$

که t_β عناصر ماتریس تونل‌زنی از سایت $k-$ام الکترود β به زنجیره DNA می‌باشد. هامیلتونی حمام با رابطه زیر بیان می‌شود:

$$H_{Bath}=\sum_{i=1}^{N}\hbar\omega_i\ b_i^{+}b_i+2\sum_{i=1}^{N-1}\hbar\Omega_i\ \left(b_i^{+}b_{i+1}+b_{i+1}^{+}b_i\right)+H.c. \quad (٥)$$

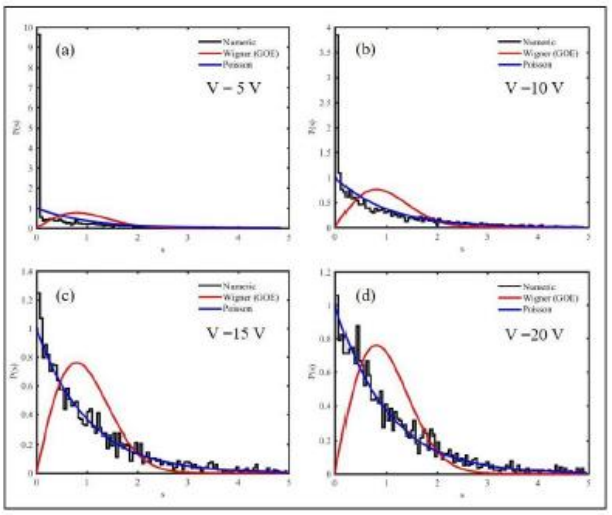
هامیلتونی جمله مربوط به برهم‌کنش حمام با DNA نیز با رابطه زیر تعریف می‌شود:

$$H_{sys-Bath}=\sum_{i=1,}^{N}\sum_{\sigma=\uparrow\downarrow}\sum_{j=1,2}t_i\ b_i^{+}c_{i,j}^{\sigma}+H.c. \quad (٦)$$

که t_i نیز عناصر ماتریس تونل‌زنی بین حمام و DNA می‌باشد.

بررسی و تحلیل

در این مطالعه زنجیره مولکول DNA دو رشته‌ای بعنوان مولکول مرکزی با N سایت در نظر گرفته شده است که مطابق شکل (۱) از دو انتها به دو الکترود با k سایت متصل و از بالا و پایین با حمام‌های حرارتی در ارتباط است. ماتریس هامیلتونی توصیف کننده، یک ماتریس $(6N+8k)\times(6N+8k)$ عضوی می‌باشد. در شکل‌های (۱) و(۲) نمودار تابع توزیع فضایی نزدیک‌ترین همسایگان $P(s)$ برای توالی‌های مختلف از DNA ویروس در ولتاژهای مختلف و نسبت فرکانس حمام $\omega/\omega_c=5$ رسم شده است. در شکل های ((a)۱) و((b)۱) نمودار $P(s)$ در ولتاژ ۵ و ۱۰ ولت دارای یک پیک اولیه است که به پیک شنیرلمن[۹] مشهور است [٦]. پیک اولیه به علت تبهگنی بیش از حد در این سیستم است و نشان دهنده حالت‌های اسپینی جایگزیده می‌باشد. در این حالت اسپین الکترون ها کاملا جایگزیده هستند. بنابراین، انتقال اطلاعات اسپینی صورت نمی گیرد و شاید بتوان گفت اطلاعات انتشار ویروس نیز کاملا جایگزیده بوده و انتشاری صورت نمی پذیرد. با افزایش ولتاژ در شکل ((c)۱) شاهد از بین رفتن پیک اولیه هستیم و تابع $P(s)$ بر نمودار پواسنی تقریباً منطبق می‌شود. در حالت پواسونی نیز همچنان اسپین ها جایگزیده هستند. پس در این حد نیز انتقال اطلاعات اسپینی و در نتیجه انتشار ویروی تقریبا ناممکن است. با افزایش ولتاژ از تبهگنی سیستم کاسته می‌شود. کاهش تبهگنی با افزایش ولتاژ به معنی شکستن برخی از تقارن‌ها در شبکه است. این کاهش جایگزیدگی به معنی افزایش جریان‌های اسپینی خالص عبوری از سیستم است که بصورت $S_t=S^{\uparrow}+S^{\downarrow}$ محاسبه می‌شود. در ولتاژ ۲۰ ولت، نمودار P(s) تقریبا بطور کامل بر نمودار پواسونی منطبق می شود (شکل ((d)۱)). حالت پواسونی نشان می دهد که ترازهای اسپینی سیستم هنوز جایگزیده هستند و اگر جایگزیدگی حالت های اسپینی را بتوانیم معادل با جایگزیدگی اطلاعات بدانیم، می‌توانیم نتیجه بگیریم که در این محدوده ها از ولتاژ اعمالی به محیط ویروسی می‌توانیم از انتشار ویروس جلوگیری کنیم.

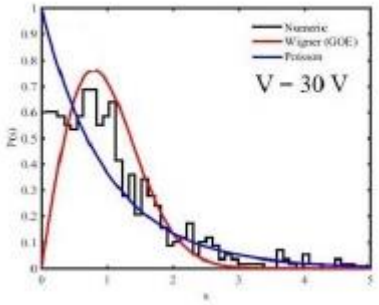


شکل۱ : تابع $P(s)$ برای ۵۰۰ جفت باز در ولتاژهای ۵ تا ۲۰ ولت.

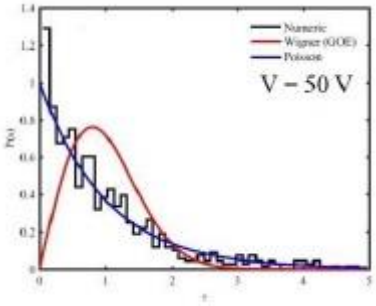
ولتاژ اعمالی به محیط را همچنان افزایش می‌دهیم. مشاهده می شود که بعد از ۲۰ ولت، نمودار P(s) رفته رفته از حالت پواسونی خارج می‌شود. در ولتاژ ۳۰ ولت، نمودار یک حالت گذار به ویگنری را نشان می‌دهد (شکل (۲)). فاز ویگنری متناظر با حالتی است که ترازهای اسپینی رفته رفته از حالت جایگزیده خارج می

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

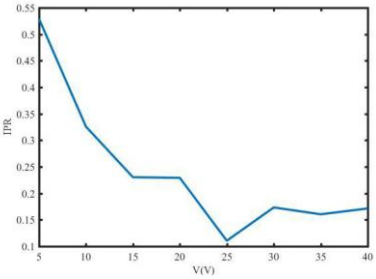
شوند و این نشان می‌دهد که در این مقدار ولتاژ اطلاعات اسپینی می‌تواند به بیرون نشت کند. این نتیجه می‌تواند معادل با انتشار ویروس در محیط در نظر گرفته‌شود. ولتاژ اعمالی به سیستم را همچنان افزایش می‌دهیم. مشاهده می‌شود که در ولتاژهای بالاتر از ٤٠ ولت مجددا سیستم به حالت پواسونی برمی‌گردد. یعنی با افزایش بیشتر ولتاژ، حالت های اسپینی مجددا جایگزیده می‌شوند. یعنی انتقال اطلاعات اسپینی دوباره متوقف می‌شود و می‌توان گفت شیوع ویروس کاهش می یابد (شکل (۳)).



شکل۲ : تابع $P(s)$ برای ۵۰۰ جفت باز در ولتاژهای ۳۰ ولت.



شکل۳ : تابع $P(s)$ برای ۵۰۰ جفت باز در ولتاژهای ۵۰ ولت.



شکل٤ : نمودار IPR برای ۵۰۰ جفت باز در ولتاژهای مختلف.

نتایج فوق را می‌توان با استفاده از نمودار IPR برای ویژه حالت های اسپینی توالی ویروس تایید کرد. شکل ٤ نشان می‌دهد که با اعمال ولتاژ به سیستم در ولتاژهای پایین می‌توان شاهد جایگزیدگی اطلاعات اسپینی بود. با افزایش ولتاژ میزان جایگزیدگی کاهش می‌یابد تا اینکه در محدوده ولتاژهای حدود ۲۵ ولت می‌توان شاهد گذار سیستم به یک حالت انتشار توابع موج سیستم رسید. بعد از ۳۰ ولت نیز با افزایش ولتاژ مجددا توابع اسپینی جایگزیده می‌شوند. بنابراین، اگر بتوان جایگزیدگی اطلاعات اسپین را معادل با عدم نفوذ اطلاعات ویروس به محیط معرفی کرد، می توان با اعمال ولتاژهای بسیار پایین به توالی های ویروس جلوی انتشار آنها در محیط را گرفت.

نتیجه گیری

کنترل و جلوگیری از انتشار ویروس در محیط یکی از بحث های چالش برانگیز در حوزه مسائل اپیدمولوژی می‌باشد. عدم انتقال اطلاعات از ویروس به محیط بیرون می‌تواند ما را از مراقبت های پیچیده برای جلوگیری از تماس بی‌نیاز کند. روش‌های مختلفی برای جلوگیری از انتقال اطلاعات پیشنهاد شده‌است. این کار با اعمال یک میدان مغناطیسی در محیط ممکن است امکان پذیر باشد و نیاز به تست تجربی آن هست. روش های دیگری مثل منتشر کردن گاز ازون در محیط هم هست که به دلیل سمی بودن ازون فقط در موارد بسیار ضروری از آن استفاده می کنند. در این کار، ما از روش کنترل الکتریکی استفاده کرده‌ایم و بازه ای از ولتاژ اعمالی که درآن کمترین مقدار انتقال اطلاعات اسپینی به محیط بیرون اتفاق بیافتد را پیش بینی نموده‌ایم. در این بازه، حالت های اسپینی در داخل سیستم جایگزیده شده و نشت اطلاعات به بیرون به کمترین حد ممکن می رسد.

مرجع‌ها

[۱] Brody, D. C., & Hughston, L. P. (2016). Thermodynamics of quantum heat bath. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, **49(42), 425302**.

[۲] Jang, S., Cao, J., & Silbey, R. J. (2002). Fourth-order quantum master equation and its Markovian bath limit. *The Journal of chemical physics*, **116(7), 2705-2717**.

[۳] Guhr, T., Müller–Groeling, A., & Weidenmüller, H. A. (1998). Random-matrix theories in quantum physics: common concepts. *Physics Reports*, **299(4-6), 189-425**.

[٤] Lai, M. M. (1995). The molecular biology of hepatitis delta virus. *Annual review of biochemistry*, **64(1), 259-286**.

[٥] Fathizadeh, S., Behnia, S., & Ziaei, J. (2018). Engineering DNA Molecule Bridge between Metal Electrodes for High-Performance Molecular Transistor: An Environmental Dependent Approach. *The Journal of Physical Chemistry B*, ***122*(9), 2487-2494**.

[٦] B.V. Chirikov, D.L. Shepelyansky, Shnirelman peak in level spacing statistics, *Phys. Rev. Lett*. **74 (1995) 518**.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

تغییر توپولوژی با اعمال اختلال وابسته به زمان در ساختار شش وجهی بورون نیترید

نوروزی، میلاد؛ ایران نژاد، فاطمه؛ سیدیزدی، جمیله

گروه فیزیک، دانشگاه ولی عصر (عج) رفسنجان

چکیده

در این مقاله با استفاده از پتانسیل دوره‌ای-زمانی و اندرکنش پالس لیزری با ساختار شش وجهی بورون نیترید، فاز بری و عدد ناوردای توپولوژی چرن برای این سیستم مورد بررسی قرار می‌گیرد. از آنجایی که اعمال پالس لیزری با قطبش دایروی به هامیلتونی فرمیون‌های حامل در تک لایه بورون نیترید یک نوع اختلال وابسته به زمان به شمار می‌رود، در این مطالعه با استفاده از فرمالیسم فلوکید برای پتاسیل دوره‌ای-زمانی، انحنای بری و عدد چرن را برای این سیستم محاسبه و اثر تغییرات دامنه پالس لیزری در ناوردایی توپولوژی (عدد چرن) و تغییر سیستم از حالت عایق نرمال به مخروط دیراک گاف‌دار با پراکندگی دیراکی مورد مطالعه قرار گرفته است.

Change of topology by applying a time-dependent perturbation to the hexagonal boron nitride structure

Norouzi, Milad; Irannezhad, Fatemeh; Seyedyazdi, Jamileh

Department of Physics, Faculty of Science, Vali-e-Asr University of Rafsanjna, Iran.

Abstract

In this study, we investigate Berry curvature and Chern number using a time-periodic potential for interaction of laser pulse with hexagonal boron nitride structure. Given that the application of a circularly polarized laser pulse to the Hamiltonian related to fermions inside a monolayer boron nitride, is a type of time-independent perturbation. Consider that the time-dependent Schrödinger equation can be solved in the formalism of the Floquet theory we review and calculate Berry curvature, Chern number, and the effect of changing amplitude of laser pulse on topology invariant. We studied the change of the system from normal insulation mode to a gapped Dirac cone mode.

PACS No. 78

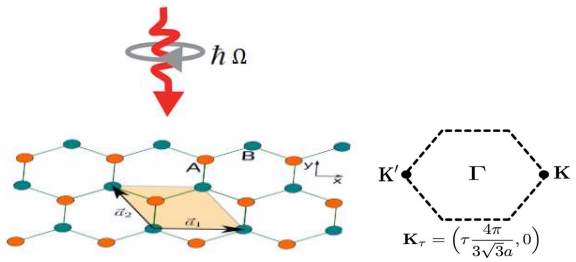
مقدمه

فازهای توپولوژی نقشی محوری در خواص نوری گروهی از سیستم‌های ماده چگال دارند [۳-۱]. برای حرکت الکترون در پتانسیل دوره‌ای مانند الکترون‌ها در جامدها و بلورهای فوتونیک وغیره، توپولوژی مربوط به توابع موج بلاخ متناوب، به فاز بری[۱] مربوط به حرکت الکترون در یک مسیر بسته، مرتبط است [٤]. با استفاده از هامیلتونی سیستم می‌توان انحنای بری و ناوردای توپولوژی عدد چرن را حساب کرد [٥و٦]. در سیستم‌هایی با اختلال وابسته به زمان می‌توان انحنای بری را مهندسی کرد [۷]. برای حل معادله شرودینگر وابسته به زمان، با توجه به اختلال پالس لیزری در مرتبه فمتو ثانیه، از فرمالیسم گاستون فلوکید[۲] استفاده می‌شود که دو فضای هیلبرت و فضای دوره‌ای-زمانی را به صورت ضرب تانسوری ادغام می‌کند [۸-۱۰]. با توجه به پالس لیزری با قطبش دایروی هامیلتونی سیستم را می‌توان بر حسب پتانسیل دوره‌ای-زمانی در نظر گرفت. هامیلتونی ساختار بورون نیترید شش وجهی از لحاظ هامیلتونی تنگ بست و تقریب انرژی‌های پایین، همانند گرافن گاف‌دار محاسبه می‌شود با این تفاوت که انرژی هر سایت مربوط به بورون و نیترید باعث گاف نواری در ساختار نواری انرژی سیستم می‌شود [۱۱و۱۲]. در این مقاله انحنای بری و عدد چرن برای ساختار بورون نیترید با پالس لیزری و فرمالیسم فلوکید[۳] مورد بررسی قرار داده می‌شود و نشان داده خواهد شد که تغییر دامنه پالس با توجه به دامنه بحرانی، حالت سیستم را برای چاهک‌ها از عایق معمولی به مخروط دیراکی گاف‌دار [٤]با پراکندگی دیراکی تغییر می‌دهد.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد

http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

مدل و فرمالیسم



شکل-۱: شماتیک اعمال اختلال پالسی به ساختار شش وجهی بورون نیترید.

۱- هامیلتونی گاستون-فلوکید برای ساختار شش وجهی بورون نیترید

با توجه به شکل ۱، یک مدل ساده برای ساختار شش وجهی بورون نیترید (h-BN)[۹] با دو زیر شبکه A و B [۱۱] را تحت پتانسیل وابسته به زمان $\boldsymbol{A(t)} = (A_x(t).A_y(t))$ به صورت زیر در نظر می‌گیریم.

$$\boldsymbol{H_{k\tau}} = \boldsymbol{v_f \Pi_{k\tau}} \cdot \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\varepsilon_b \sigma^+} + \boldsymbol{\varepsilon_n \sigma^-} \qquad (۱)$$
$$\boldsymbol{\Pi_{k\tau}} = [\tau\{\hbar k_x + e\,A_x(t)\}.\hbar k_y + e\,A_y(t)]$$
$$\boldsymbol{\sigma^+} = \frac{\boldsymbol{\sigma_z} + \boldsymbol{\sigma_0}}{\boldsymbol{2}} .\boldsymbol{\sigma^-} = \frac{\boldsymbol{\sigma_z} - \boldsymbol{\sigma_0}}{\boldsymbol{-2}}$$

که در آن $\tau = \pm$ به ترتیب متناظر هست با چاهک‌های K و $\acute{K}$ و مولفه-های مربوط به σ، ماتریس‌های پاولی هستند. $\hbar$ ثابت پلانک و v_f سرعت فرمی (مقدار سرعت فرمی از مرجع [۱۲]) در h-BN است. همچنین ε_b و ε_n به ترتیب انرژی سایت‌های بورون و نیترید در ساختار هستند. با توجه به مسئله، A(t) بردار پتانسیل ناشی از اختلال زمانی اعمال شده به ساختار، توسط تابش پالسی است. تابش تک فام با قطبش دایروی را به صورت زیر در نظر می‌گیریم [۱۳].

$$\boldsymbol{A(t)} = \boldsymbol{Re}\left(\boldsymbol{A_0\, e^{i\Omega t}}\right) \quad (۲)$$
$$\boldsymbol{A_0} = A_0(\hat{x} - i\hat{y})$$

که در آن $\Omega = \frac{2\pi}{T}$ فرکانس پالس اعمالی به ساختار و A_0 دامنه میدان اعمالی است. برای حل معادله شرودینگر وابسته به زمان با توجه شرایط پالس‌ها از مرتبه فمتو ثانیه می‌توان از روش نظریه گاستون-فلوکید استفاده کرد. نظریه فلوکید مشابه نظریه بلاخ در مکانیک کوانتمی است، با این تفاوت که در نظریه فلوکید پتانسیل دوره‌ای زمانی به کار می‌رود. در این نظریه، عملگر تحول زمانی به صورت زیر فرمول‌بندی می‌شود:

$$\boldsymbol{U(t_2.t_1)} = \mathbf{e}^{-\mathbf{i}\boldsymbol{\Sigma(t_2)}}\boldsymbol{e^{-iH_F}e^{i\Sigma(t_1)}}$$

که در آن $\Sigma(t) = \Sigma(t+T)$ عملگر هرمیتی دوره‌ای-زمانی و H_F هامیلتونی فلوکید وابسته به زمان است که به صورت زیر محاسبه می‌شود.

$$\boldsymbol{H_F} = \boldsymbol{H_{k\tau}} - \boldsymbol{i\hbar}\,\frac{\boldsymbol{\partial}}{\boldsymbol{\partial t}} \qquad (۳)$$

المان ماتریسی H_F با توجه به دو فضای هیلبرت و فضای مربوط به تابع پریودیک با دوره تناوب T به صورت زیر محاسبه می‌شود [۱۴].

$$\langle \boldsymbol{i.m}|\boldsymbol{H_F}|\boldsymbol{j.n}\rangle = \frac{\boldsymbol{1}}{\boldsymbol{T}}\int_0^T \boldsymbol{dt}\,\langle \boldsymbol{i.m}|\boldsymbol{H_{k\tau}}|\boldsymbol{j.n}\rangle\, \boldsymbol{e^{-(n-m)i\Omega t}} + \boldsymbol{n\,\hbar\,\Omega\delta_{nm}}$$

که در اینجا (n, m = -1,0,1) برانگیختگی فوتونی است. در واقع مسئله وابسته به زمان به مسأله وابسته به زمان با فضای بعد بالا نگاشت پیدا می‌کند. اگر شرط $eA_0v_f \ll \hbar\Omega$ برقرار باشد (شامل جذب و انتشار یک فوتون مجازی است)، هامیلتونی (۳) با تقریب به صورت زیر محاسبه می‌شود[۱۰].

$$\boldsymbol{H_F(k)} \approx \boldsymbol{H_{k\tau_0}(k)} + \frac{[\boldsymbol{H_{-1}(k).H_1(k)}]}{\hbar\,\boldsymbol{\Omega}}$$

که در آن

$$\boldsymbol{H_m(k)} = \frac{\boldsymbol{1}}{\boldsymbol{T}}\int_0^T \boldsymbol{dt}\,\langle \boldsymbol{i.m}|\boldsymbol{H_{k\tau}}|\boldsymbol{j.n}\rangle\, \boldsymbol{e^{-(n-m)i\Omega t}}$$

در نهایت هامیلتونی فلوکید برای ساختار مسئله h-BN و هامیلتونی (۱) به صورت زیر محاسبه می‌شود.

$$\boldsymbol{H_F(k)} = \left(\tfrac{\varepsilon_b+\varepsilon_n}{2}\right)\boldsymbol{\sigma_0} + \begin{pmatrix} \Delta_1 & v_f\hbar(\tau k_x - ik_y) \\ v_f\hbar(\tau k_x + ik_y) & \Delta_2 \end{pmatrix} \quad (٤)$$
$$\Delta_1 = \frac{\varepsilon_b - \varepsilon_n}{2} - \frac{\tau e^2 {v_f}^2 {A_0}^2}{\hbar\,\Omega}$$
$$\Delta_2 = -\left(\frac{\varepsilon_b - \varepsilon_n}{2}\right) + \frac{\tau e^2 {v_f}^2 {A_0}^2}{\hbar\,\Omega}$$

۲- محاسبه عدد چرن

در انتقال کوانتمی بی دررو (گذار کوانتمی حالات سیستم در زمان-های متفاوت) فازی در سیستم به وجود می‌آورد و به فاز دینامیکی سیستم اضافه می‌کند، که به آن فاز هندسی بری می‌گویند. فاز بری در یک سیستم بی دررو با پارامتر $\mathbf{k} = (k_x.k_y)$ به صورت زیر است:

$$\gamma_k = i\oint \boldsymbol{dk}\, A_k$$

در این رابطه $A_k = \langle u_k|i\partial_k u_k\rangle$ اتصال بری یا بردار پتانسیل بری معرفی می شود که $|u_k\rangle$ ویژه توابع سیستم کوانتمی است. با توجه به درجه آزادی پیمانه‌ای A_k و ناوردایی بودن هر کمیت فیزیکی پیمانه‌ای میدان قوی یا انحنای بری به صورت:

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

$$\Omega_{ij} = \partial_{ki}A_{kj} - \partial_{kj}A_{ki} = -2Im\left\langle \partial_{k_x}u_k \middle| \partial_{k_y}u_k \right\rangle$$

تعریف می‌شود. در مقایسه با هندسه غیراقلیدسی که در یک منیفلد دوبعدی فشرده و جهت‌پذیر با متریک ریمانی، انتگرال انحنای گاوسی، ناوردایی توپولوژی را نتیجه می‌دهد، می‌توان ناوردایی چرن را برای حالت‌های فیزیکی دوبعدی در منطقه اول بریلوئن به صورت زیر محاسبه کرد [۱۵]:

$$\boldsymbol{C = \frac{1}{2\pi}\int \Omega_{ij}\, d\,k_x\, dk_y} \quad (۵)$$

با توجه به هامیلتونی (٤) انحنای بری برای نوار ظرفیت ساختار مسأله مورد نظر، به صورت زیر محاسبه می‌شود.

$$\boldsymbol{\Omega_{k_xk_y} = -\frac{v_f{}^2\hbar^2\left(\frac{\varepsilon_b-\varepsilon_n}{2} - \frac{\tau e^2 v_f{}^2 A_0{}^2}{\hbar\,\Omega}\right)}{\left(v_f{}^2\hbar^2\tau^2 k_x{}^2 + v_f{}^2\hbar^2 k_y{}^2 + \left(\frac{\varepsilon_b-\varepsilon_n}{2} - \frac{\tau e^2 v_f{}^2 A_0{}^2}{\hbar\,\Omega}\right)^2\right)^{3/2}}}$$

با توجه به رابطه (۵) عدد چرن برای نوار ظرفیت را می‌توان به صورت زیر حساب کرد:-

$$\boldsymbol{C = -\frac{sign(\frac{\varepsilon_b-\varepsilon_n}{2} - \frac{\tau e^2 v_f{}^2 A_0{}^2}{\hbar\,\Omega})}{2}}$$

نتایج و بحث

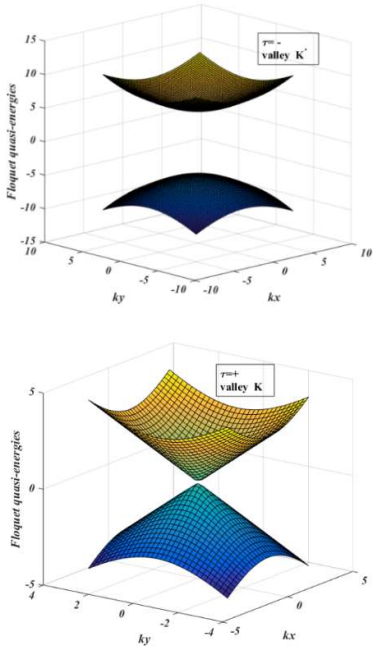
شبه-انرژی‌های فلوکید با توجه به هامیلتونی (٤) و حل مسأله ویژه مقداری به صورت:

$$\boldsymbol{E_{c.v}(k) = \frac{\varepsilon_b+\varepsilon_n}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\varepsilon_b-\varepsilon_n}{2} - \frac{\tau e^2 v_f{}^2 A_0{}^2}{\hbar\,\Omega}\right)^2 + \left(v_f{}^2\hbar^2\mathbf{k}^2\right)}} \quad (٦)$$

قابل محاسبه هستند. با توجه به دامنه بحرانی به صورت:

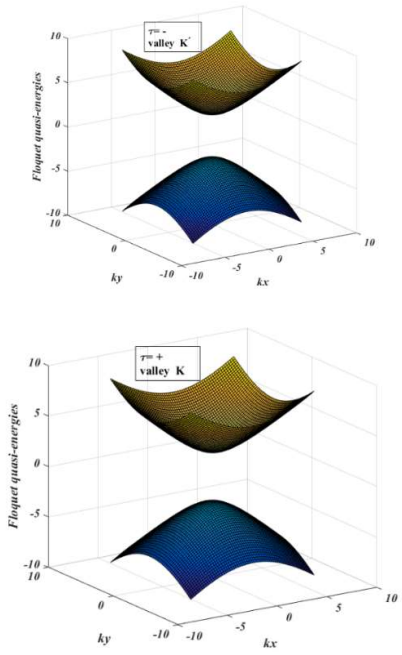
$$\boldsymbol{Ac = \frac{\sqrt{(\frac{\varepsilon_b-\varepsilon_n}{2})(\hbar\,\Omega)}}{e\,v_f}}$$

نمودار-۱ مربوط به فرمول شبه-انرژی فلوکید (٦)، برای $A_0 = Ac$ در چاهک K گاف انرژی با پراکندگی دیراکی (که اصطلاحاً به مخروط دیراکی گاف دار معروف است [١٦]) تبدیل می‌شود و در چاهک $\acute{K}$ شکافتگی نوار انرژی عایق معمولی را داریم.



نمودار-۱: شبه-انرژی فلوکید برای چاهک K و $\acute{K}$ برای حالتی که دامنه پالس با دامنه بحرانی برابر باشد.

همچنین با توجه به نمودار-۲ شبه انرژی فلوکید برای حالت $A_0 = 0$ در چاهک K و چاهک $\acute{K}$، شکافتگی باند انرژی یکسان داریم.



نمودار-۲: شبه-انرژی فلوکید برای چاهک K و $\acute{K}$ برای حالت دامنه پالس صفر باشد.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

در حقیقت عدد چرن مجموع دو چاهک (C_+ برای چاهک K و C_- برای چاهک $\acute{K}$) وابسته به دامنه‌ی میدان اعمالی و دامنه‌ی بحرانی است. مجموع دو عدد چرن چاهک‌ها به صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$C_+ + C_- = \begin{cases} 0 \ for \ A_0 < Ac \\ 1 \ for \ A_0 > Ac \end{cases}$$

با تغییر عدد چرن و تغییر گاف سهمی در عایق معمولی به مخروط دیراکی گاف‌دار، توسط دامنه میدان اعمالی A_0، توپولوژی سیستم تغییر می‌کند.

نتیجه‌گیری

در این پژوهش با استفاده از فرمالیسم فلوکید برای پتاسیل دوره‌ای-زمانی، انحنای بری و عدد چرن برای سیستم بورون نیترید محاسبه شده و اثر تغییرات دامنه پالس لیزری در ناوردایی توپولوژی (عدد چرن) و تغییر سیستم از حالت عایق نرمال به مخروط دیراک گاف‌دار با پراکندگی دیراکی مورد مطالعه قرار گرفته است.

مراجع

1. Haldane, F. D. M. & Raghu, S. Possible realization of directional optical waveguides in photonic crystals with broken time-reversal symmetry. *Phys. Rev. Lett*., 100, 013904 (2008)
2. Hafezi, M., Mittal, S., Fan, J., Migdall, A. & Taylor, J. M. Imaging topological edge states in silicon photonics. *Nat. Photon*. 7, 1001–1005 (2013).
3. Jotzu, G. et al. Experimental realization of the topological Haldane model with ultracold fermions. *Nature* 515, 237 (2014).
4. Chen, Wen-Jie, Meng Xiao, and Che Ting Chan. "Photonic crystals possessing multiple Weyl points and the experimental observation of robust surface states" Nature communications, 7, no. 1 (2016): 1-10.
5. Gradhand, M., D. V. Fedorov, Falko Pientka, P. Zahn, I. Mertig, and B. L. Györffy. "First-principle calculations of the Berry curvature of Bloch states for charge and spin transport of electrons", Journal of Physics: Condensed Matter, 24, no. 21 (2012): 213202.
6. Xiao, Di, Ming-Che Chang, and Qian Niu. "Berry phase effects on electronic properties", Reviews of modern physics 82, no. 3 (2010): 1959.
7. Y. Liu, G. Bian, T. Miller & T.-C. Chiang. "Visualizing electronic chirality and berry phases in graphene systems using photoemission with circularly polarized light". *Phys. Rev. Lett.* 107, 10.1103/physrevlett.107.166803 (2011).
8. F. Mahmood *et al.* Selective scattering between floquet-bloch and volkov states in a topological insulator". *Nat Phys* 12, 306 (2016).
9. Lindner, Netanel H., Gil Refael, and Victor Galitski. "Floquet topological insulator in semiconductor quantum wells", Nature Physics, 7, no. 6 (2011): 490-495.
10. Kitagawa, Takuya, Takashi Oka, Arne Brataas, Liang Fu, and Eugene Demler. "Transport properties of nonequilibrium systems under the application of light: Photoinduced quantum Hall insulators without Landau levels", Physical Review B, 84, no. 23 (2011): 235108.
11. Ribeiro, R. M., and N. M. R. Peres. "Stability of boron nitride bilayers: Ground-state energies, interlayer distances, and tight-binding description", Physical Review B, 83, no. 23 (2011): 235312.
12. Khan, Asir Intisar, Trisha Chakraborty, Niloy Acharjee, and Samia Subrina. "Stanene-hexagonal boron nitride heterobilayer: Structure and characterization of electronic property", Scientific Reports, 7, no. 1 (2017): 1-10.
13. Boyd, Robert W., Nonlinear Optics, Academic press, 2019.
14. Bukov, Marin, Luca D'Alessio, and Anatoli Polkovnikov. "Universal high-frequency behavior of periodically driven systems: from dynamical stabilization to Floquet engineering", Advances in Physics, 64, no. 2 (2015): 139-226.
15. M. Z. Hasan & C. L. Kane. "Colloquium: Topological insulators". *Rev. Mod. Phys.*, 82, 3045 (2010).
16. Bansil, Arun, Hsin Lin, and Tanmoy Das. "Colloquium: Topological band theory", Reviews of modern physics, 88, no. 2 (2016): 021004.

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

تولید مستقیم مزون آپسیلون به طریق ترکش کوارک b

اوسطی ، توفیق

[1]دانشکده علوم دانشگاه رازی، کرمانشاه

چکیده

*مزون آپسیلون دارای ساختار کوارکی **bb** است این مزون در حالت موج s، اسپین یک دارد ومی تواند در نابودی الکترون-پوزیترون تولید شود. در مقاله تولید مستقیم آپسیلون به طریق ترکش مستقیم کوارک و پاد کوارک **b** و ترکش گلئون مورد مطالعه قرار گرفته است. بر این اساس با در نظر گرفتن تصحیحات حرکت فرمی و تصحیحات مرتبه ی **NLO**، سطح مقطع غیرانحصاری تولید مزون آپسیلون حول جرم آن و حول قطب Z^0 محاسبه شده است.*

واژه های کلیدی: *سطح مقطع، تابع ترکش، مزون آپسیلون.*

Direct production upsilon meson via *b* quark fragmentation

Tawfigh, Osati[1]

[1] *Department of Physics, University of Razi, Kermanshah*

Abstract

The upsilon meson has a quark structure $b\bar{b}$. This meson has a spin-1 in the S-wave state, and it is possible to generate in the electron-positron annihilation. In this thesis, the direct production of upsilon was investigated by direct quark and anti-quark b and gluon fragmentation. Accordingly, considering the Fermi motion corrections and NLO corrections, the meson-upsilon cross section production is calculated around its mass and around the Z0 pole. The results are in good agreement with experimental data. Additionally, the Z0 decay rate has been calculated for the upsilon meson, taking into account the Fermi motion corrections and NLO corrections.

***Keywords**: cross section, fragmentation function,Upsilon meson.*

PACS No. 10

مقدمه

مزون آپسیلون به وسیله ی تیم تجربی E۲۸۸ در سال ۱۹۷۷ در آزمایشگاه فرمی لب کشف شد[۱]. برای ارزیابی چشم انداز مطالعه ی تجربی مزون آپسیلون $(b\bar{b})$ در شتاب دهنده های حال و آینده دانستن پیش بینی های دقیقی از سطح مقطع های تولید آن از اهمیت بسیار مهمی برخورداراست.مکانیسم مسلط برای تولید $b\bar{b}$ در ناحیه ی تکانه های عرضی زیاد ترکش کوارک b یا پاد آن می باشد.. فرآیند ترکش به وسیله ی یک تابع جهانی ترکش $D(z)$ توصیف می شود. توابع ترکش برای کوارکونیوم های سنگین با استفاده از QCD اختلالی محاسبه می شود [۱۴-۲]. در شکل (۱) نمودار فاینمن در اولین مرتبه اختلال برای ترکش پادکوارک $\bar{b}$ به مزون آپسیلون *داده* شده است. تابع ترکش در مقیاس اولیه انرژی μ_0 که برابر جرم ذرات در حالت نهایی است به صورت زیر تعریف می شود[۱٤-٦].

$$D_{\bar{Q}\to M}(z,\mu_0)=\int\left|T_{\bar{Q}\to M}\right|^2\delta^{(3)}(\boldsymbol{p}+\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{p}')\mathrm{d}^3\boldsymbol{p}\mathrm{d}^3\boldsymbol{k}d^3\boldsymbol{k}' \quad (۱)$$

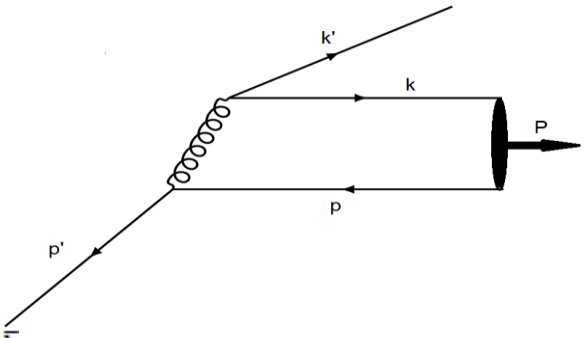
که در آن

$$T_{\bar{b}\to M}(p',k,k',p) \quad \int d[x]T_M \quad {}_M(q'^2,x_i) \quad (۲)$$

در رابطه اخیر T- دامنه‌ی تولید مزون برداری

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

آپسیلون است. که می توان با استفاده از قضیه عاملبندی آن را به صورت تلفیقی از بخش سخت دامنه پراکندگی T_M که اثرات فاصله ی کوتاه پوشش را می دهد و دامنه ی احتمال $\Phi_M(x_i,q'^2)$ که گذار کوارک – پادکوارک به حالت مقید را توصیف می کند نوشت. پارامتر ترکش z می باشد.



شکل (۱): نمودار فاینمن در اولین مرتبه ی اختلال برای ترکش پاد کوارک $\bar{b}$ به مزون آپسیلون.

تابع ترکش در مرتبه ی LO

در این مقاله ما تابع ترکش در مرتبه ی LO با استفاده از QCD اختلالی و با نادیده گرفتن اثر حرکت فرمی بر اساس [۱۳] محاسبه کرده ایم که پس از انجام محاسبات لازم در مرتبه ی LO و بدون در نظر گرفتن اثر حرکت فرمی به ترتیب برای حالتهای با قطبش طولی، عرضی و حالت بدون قطبش بصورت زیر بدست می آید.

$$D_{\bar{b}\to\Upsilon_T}(z,\mu_0)=const\ \frac{G_T(z)}{F_T(z)} \qquad (۳)$$

$$G_T(z)=\left((-1+z)^3z^3\left((-1+z)^2\alpha^2+2(-1+z)\alpha\beta+\beta^2+\left(2-2z+z^2\right)\delta^2\right)\right)$$

$$F_T(z)=(2\beta^2\left(1+2z\left(-1+\beta\right)+z^2\left(1-2\beta+\beta^2+\delta^2\right)\right)^2$$
$$\left(-(-1+z)z\alpha^2+\alpha\left(1+2z\left(-1+\beta\right)+z^2\left(1-2\beta+\beta^2+\delta^2\right)\right)+\right.$$
$$\left.\beta\left(1+2z\left(-1+\beta\right)+z^2\left(1-2\beta+\beta^2+\delta^2\right)\right)\right)^2)$$

$$D_{\bar{b}\to\Upsilon_L}(z,\mu_0)=const\ \frac{G_L(z)}{F_L(z)} \qquad (۴)$$

$$G_L(z)=-((-1+z)^3z^2(1-2\beta^2+z\left(\alpha^2-2\alpha\beta+5\beta^2\right)+2z^4\beta^2\left(\alpha^2+\delta^2\right)-z^3\left(-1+4\beta^2\right)\left(\alpha^2+\delta^2\right)+$$
$$z^2\left(2\alpha\beta+\alpha^2\left(-3+2\beta^2\right)-\delta^2+2\beta^2\left(-1+\delta^2\right)\right)))$$

$$F_L(z)=(2\beta^2\left(1+2z\left(-1+\beta\right)+z^2\left(1-2\beta+\beta^2+\delta^2\right)\right)^2$$
$$\left(-(-1+z)z\alpha^2+\alpha\left(1+2z\left(-1+\beta\right)+z^2\left(1-2\beta+\beta^2+\delta^2\right)\right)+\beta\left(1+2z\left(-1+\beta\right)+z^2\left(1-2\beta+\beta^2+\delta^2\right)\right)\right)^2)$$

$$D_{\bar{b}\to\Upsilon}(z,\mu_0)=\text{const}\ \overline{F(z)} \qquad (۵)$$
$$=((-1+z)^3z^2(-1+2\beta^2-2z^4\beta^2\left(\alpha^2+\delta^2\right)+z^3\left(-3+4\beta^2\right)\left(\alpha^2+\delta^2\right)-$$
$$z\left(3\alpha^2-6\alpha\beta+7\beta^2+4\delta^2\right)+z^2\left(-6\alpha\beta+\alpha^2\left(7-2\beta^2\right)+5\delta^2-2\beta^2\left(-1+\delta^2\right)\right)))$$

$$F(z)=\left|2\beta^2\left(\left(1+z\left(-1+\beta\right)\right)^2+z^2\delta^2\right)^2\right|$$

تصحیحات NLO روی تابع ترکش $\bar{b}\to\gamma$

تصحیحات NLO ترکش کوارک سنگین b به حالت آپسیلون شامل سهم های تصحیحات حقیقی و مجازیQCD می باشد. این تصحیحات روی تابع ترکش $b\to\gamma$ در مرجع [۸] اعمال شده است. نتایج حاصل از محاسبات آن ها به ازای مقادیر عددی $m_b=4.5Gev$ و $\langle k_T^2\rangle=0.7Gev$ و $|R(0)|^2=6.48Gev^3$ نشان می دهد که احتمال ترکش $b\to\gamma$ در مقیاس $\mu=3m_b$ برای مرتبه ی LO برابر 3.8×10^{-5}و برای مرتبه ی NLO برابر 4.4×10^{-5} می باشد.

تصحیح حرکت فرمی روی تابع ترکش آپسیلون

تابع موجی که بخش نرم دامنه ی پراکندگی گذار پارتون ها به مزون را توصیف می کند، در واقع در برگیرنده ی اثر های حالت مقید روی تولید مزون می باشد که یکی از این اثر ها در واقع حرکت فرمی سازنده های حالت مقید می باشد. این اثر نقش خود را در تابع موج حالت مقید به نمایش می گذارد. بروسکی، هانگ و لی پیج (BHL) یک تابع موج آزاد بوست[۱] پیشهاد داده اند[۱۵]. که نوعی تابع موج گاوسی می باشد و شامل پارامتری است که عرض آن را کنترل می کند. به این پارامتر،پارامتر محبوسیت گویند و با β نمایش می دهند.

$$\Psi_M(x_i,k_T)=A_M\ \exp\left\{\frac{-1}{8\beta^2}\left[\frac{m_{1T}^2}{x_1}+\frac{m_{2T}^2}{x_2}\right]\right\} \qquad (۶)$$

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

در اینجا $m_{1T}^2 = m_1^2 + q_T^2$ و $m_{2T}^2 = m_2^2 + q_T^2$ و m_1 و m_2 به ترتیب جرم های کوارک وپاد کوارک های سازنده هستند. اگر چنان چه حرکت فرمی نادیده گرفته شود در رابطه(۶)، $\beta = 0$ خواهد بود. در این صورت Ψ_M شکل ساده ی دلتای دیراک خواهد گرفت. اثر حرکت فرمی روی توابع ترکش $c \to J/\psi$ و $b \to \gamma$ در مرجع [۱۶] مطالعه شده است. نتایج به دست آمده در [۱۶] نشان می دهد که احتمال های ترکش با در نظر گرفتن حرکت فرمی حداقل ۱۴٪ رشد کرده است.

سطح مقطع تولید مستقیم $\Upsilon(1s)$ در انهدام الکترون-پوزیترون در مرتبه ی *LO* و *NLO*

سطح مقطع غیر انحصاری تولید هادرون در نابودی الکترون- پوزیترون در مرتبه ی LO را می توان به صورت زیر نوشت[۱۷]:

$$\frac{1}{\sigma_{tot}}\frac{d\sigma^H}{dx_E} = \frac{1}{\sum_q \hat{e}_q^2}\sum_q \hat{e}_q^2 \left\{D_q^H(x_E,Q^2) + D_{\bar{q}}^H(x_E,Q^2)\right\} \quad (۷)$$

در انرژی های کمتر از قطب Z^0 می توان تقریب $\hat{e}_q^2 = e_q^2$ و $\sigma_{tot} = \frac{4\pi\alpha^2(Q^2)}{s}$ را اعمال کرد. بنابراین خواهیم داشت:

$$\sigma^\Upsilon = \frac{8\pi\alpha^2(\quad^2)}{s}\times\int_0^1 D_b^\Upsilon(z,Q^2)dz = \frac{8\quad^2(\quad^2)}{s}\times FP \quad (۸)$$

که در اینجا FP احتمال کل ترکش می باشد. در فرآیند تولید مستقیم آپسیلون در مرحله NLO، علاوه بر کوارک – پادکوارک b، گلئونها نیز سهیم می باشند .

$$\sigma^\Upsilon = \frac{4\pi\alpha^2(Q^2)}{s}\int_0^1 \{2D_{\bar{b}}^\Upsilon \quad \frac{C_F\alpha_s(Q^2)}{2\pi} \quad {}_{\bar{b}}^{\Upsilon} \quad {}_{g}^{\Upsilon} \quad dx_E \quad (۹)$$

در اینجا D_g^Υ تابع ترکش گلئون به مزونهای دوطعم سنگین می باشد که در مرجع [۳] محاسبه شده است و از محاسبات آنها احتمال ترکش گلئون به آپسیلون برابر $۱/۵۲\times۱۰^{-۶}$ به دست آمده است. در این مقاله تمام این تصحیحات را روی سطح مقطع تولید مزون آپسیلون اعمال کرده ایم که نتایج حاصل از محاسبات ما در جدولهای (۱) و (۲) داده شده است.

جدول(۱): سطح مقطع غیر انحصاری تولید $\Upsilon(1S)$ در نابودی الکترون- پوزیترون در انرژی مرکز جرم حول قطب Z^0، به ازای $m_b = 4.25GeV$ و $f_B = 0.25GeV$

E_{cm}	$\sigma^\Upsilon(nb)$
۸۹	۱۵/۰۰۳۶
۹۰	۲۲/۳۷۵۴
۹۰/۵	۳۲/۹۶۲۳
۹۰/۶	۳۵/۲۵۱۱
۹۰/۷	۳۷/۴۵۱۱
۹۰/۸	۳۹/۴۶۳۵
۹۰/۹	۴۱/۲۵۳۱
۹۱	۴۲/۶۳۲۲
۹۱/۱	۴۳/۵۴۳۸
۹۱/۲	۴۳/۹۲۳۵
۹۱/۳	۴۳/۷۴۴۹
۹۱/۴	۴۳/۰۲۳۲
۹۱/۵	۴۱/۸۱۲۸
۹۲	۳۱/۶۶۱۵
۹۲/۵	۲۱/۵۸۵۳
۹۳	۱۴/۷۰۲۵

جدول(۲): سطح مقطع غیر انحصاری تولید مزون $\Upsilon(1S)$ در انهدام الکترون- پوزیترون با در نظر گرفتن تصحیحات حرکت فرمی و *NLO*

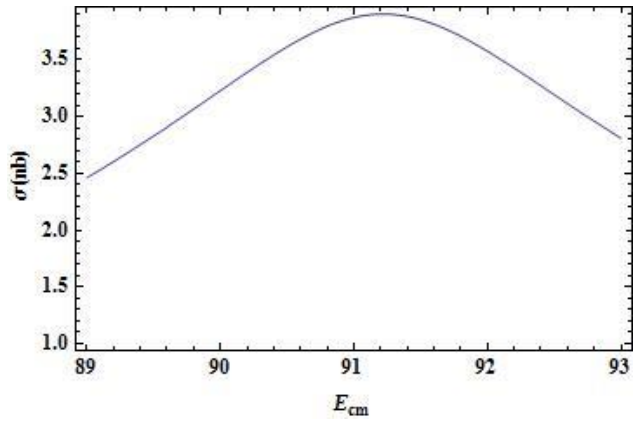
$E_{cm}^{(GeV)}$	LO+FM+NLO	*Expriment*	*Data*
۹/۳۶	۴/۰۱۹۲۳	ARGUS[19]	۳/۴۶±۰/۳
۹/۳۹	۴/۰۴۳۲۷	Crystal-Ball at Dorsi[15]	۳/۴۸±۰/۴
۹/۴۱	۴/۰۵۹۴۱	DESY-147[16]	۴/۱±۰/۷
۹/۴۲۵	۴/۰۷۱۵۷	DESY-147[16]	۴/۶±۰/۶
۹/۴۴	۴/۰۸۳۷۸	DESY-147[16]	۳/۹±۰/۵
۹/۴۵	۶/۰۹۱۹۴	DESY-147[16]	۷/۸±۰/۸۵
۹/۴۵۵	۱۱/۵۹۶۰۳	DESY-147[16]	۱۲/۶±۰/۶
۹/۴۶	۱۳/۱۰۰۱۳	DESY-147[16]	۱۳/۸±۰/۹۱۱
۹/۴۶۰	۱۳/۱۰۰۱۳	CLEO[18]	۲/۵±۰/۲
۹/۴۷	۷/۰۹۱۹۸	DESY-147[16]	۸/۶±۱/۱
۹/۴۸	۴/۸۸۳۳۵	DESY-147[16]	۵/۱±۰/۷۳
۹/۴۹	۴/۷۷۴۷۵	DESY-147[16]	۵/۶±۰/۷۳
۹/۵۰	۴/۰۶۶۱۸	DESY-147[16]	۴/۲۳±۰/۶
۹/۵۱	۴/۰۵۷۶۳	DESY-147[16]	۴/۳۵±۰/۲

بحث و نتیجه گیری

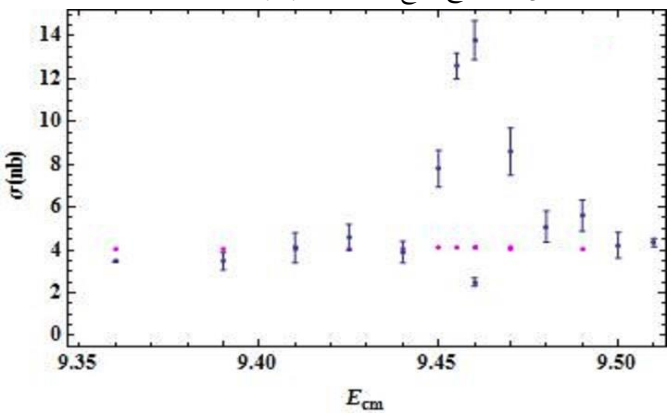
در این مقاله سطح مقطع غیر انحصاری تولید مزون آپسیلون حول قطب Z و حول جرم مزون آپسیلون با اعمال تصحیحات مرتبه ی NLO و تصحیحات حرکت فرمی انجام شده است. نتایج حاصل از محاسبات در جدولهای (۱) و (۲) داده شده است نتایج ما نشان می دهد که سطح مقطع تولید مزون آپسیلون حول قطب Z یعنی

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹

انرژی ۹۱/۲GeV و در انرژی ۹/۶GeV که برابر جرم مزون آپسیلون می باشد، ماکزییم است که توافق خوبی با داده های تجربی دارد. رفتار این سطح مقطع ها بر حسب انرژی مرکز جرم در شکلهای (۲) و (۳) داده شده است.



شکل(۲): سطح مقطع تولید مزون $\Upsilon(1S)$ حول قطب Z^0.



شکل(۳): رفتار سطح مقطع غیر انحصاری تولید $\Upsilon(1S)$ حول جرم آن بر حسب انرژی مرکزجرم.

مرجع‌ها

[۱] M. Tanabashi et al., Phys. Rev. D. **98**, 030001 (2018).

[۲] M. Suzuki, Phys. Rev. D. **33**, 676 (1986).

[۳] E. Bratten and T.C. Yuan, Phys. Rev. Lett. **71**, 1673 (1993).

[۴ E. Bratten *et al*., Phys. Rev. D **48**, 5049 (1993)

[۵] E. Bratten *et al*., Phys. Rev. D **48**, 4230 (1993)

[۶] M. A. Gomshi Nobary, R. Sepahvand, Phys. Rev. D. **71**, 034024 (2005).

[۷] M. A. Gomshi Nobary, R. Sepahvand, Nucl. Phys. B (2007).

[۸] R. Sepahvand and S. Dadfar, Phys. Rev. D. **95**, 034012 (2017).

[۹] R. Sepahvand and S. Dadfar, Nucl.Phys. A **960** (2017) 36-52

[۱۰] G. R. Boroun, T. Osati and S. Zarrin, IJTP **54** (2015) 3831-3840

[۱۱] S. Mohammad Moosavi Nejad, Eur. Phys. J. A (2016) **52**: 127

[۱۲] T. Osati_ and B. Abubakri, Commun. Theor. Phys. **67** (2017) 212–216.

[۱۳] T. Osati and P. Wasee, IJTP **58** (2019)1384–1394.

[۱۴] D. C. Hom et al., Phys. Rev. Lett. 39, 252 (1997)..

[15] Jakub Owski et al., Zeit. Phys. C40 (1988) 49

[16] Bienlein et al., Phys. Lett. 78 B (1978) 360

[17] M. Hirai, et al., Phys. Rev D **75** (2007) 094009.

[18] Anderson et al., Phys. Rev. Lett. 50 (1983) 807.

[19] M. Tanabashi et al., Phys. Rev. D. **98**, 030001 (2018).

: این مقاله به شرط در دسترس بودن در سایت انجمن فیزیک به آدرس زیر معتبر می باشد
http://www.psi.ir/cp/physics۹۹