مایع اسپینی کوانتمی: حالات خوشه‌ای رزونانسی و پاسخ غیر خطی

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

چکیده

مایع اسپینی کوانتمی فازی از ماده است که نظم بلند-برد مغناطیسی نشان نمی‌دهد و به همین واسطه مشخصه‌یابی آن پیچیده است. در غیاب نظم بلند-برد، فازهای عجیب برآمده از یک سیستم همبسته در یک مایع کوانتمی ظهور میکند مانند:حالت باندهای والانس رزونانسی، فازهای منظم خوشه‌ای و برانگیخته‌گیهای کسری. مغناطیسهای درمانده کوانتمی نماینگر فاز مایع اسپینی هستند که در آن تبهگنی بسیار بزرگ حالت پایه مانع از تشکیل نظم بلند-برد میشود. ولی افت و خیزهای غیر هارمونیک کوانتمی میتوانند تبهگنی حالت پایه را به سمت یک حالت مشخص کوانتمی سوق دهند. در این سخنرانی، مفاهیم اساسی مایع اسپینی کوانتمی مرور میشود و چند نمونه از مدلهای دوبعدی آن بررسی میگردد [۱، ۲، ۳]. مدل آیزینگ در میدان عرضی بر روی شبکه شطرنجی را در حد درماندگی قوی نگاه میکنیم که بواسطه افت و خیزهای غیر هارمونیک کوانتمی یک حالت خوشه‌ای رزونانسی در آن ایجاد میشود. با یک نگاشت، مدل شبکه شطرنجی به مدل آیزینگ در میدان عرضی روی شبکه مربعی با برهمکنشهای قطری تبدیل میشود. مدل تبدیل شده دارای حالت پایه‌ای بصورت باندهای والانس رشته‌ای است که نمایانگر ترکیب ماکروسکپی از حالتهای کوانتمی در دو بعد است. همچنین، پاسخ غیر خطی پذیرفتاری مغناطیسی در شبکه کیتائف تعمیم یافته ارائه میگردد. بر خلاف پاسخ خطی که دارای یک قله پهن در تابع ساختار دینامیکی است، پاسخ غیر خطی دارای مشخصات ریز و پاسخهای تیز است. به همین دلیل پاسخ غیر خطی میتواند به عنوان یک رهیافت مناسب جهت مشخصه‌یابی برانگیخته‌گیهای کسری در مایعهای اسپینی کوانتمی مطرح باشد.

Quantum spin liquids: Cluster resonating states and non-linear responses

Langari, Abdollah[1]
[1] Department of Physics, Sharif University of Technology, Azadi St., Tehran

Abstract

Quantum spin liquid phase of matter does not show magnetic long-range order, which makes its characterization to be complex. In the absence of long-range order, spin liquids show fascinating emergent properties within a correlated phase, like resonating valence-bond state, cluster ordered phase and fractional excitations. Frustrated quantum magnets show spin liquid state in their phase diagram, where an exponentially large degenerate classical ground state prevents a long range ordered state. However, anharmonic quantum fluctuations could remove the degeneracy toward a unique quantum ground state. In this talk, I will review the basic notions of quantum spin liquids and discuss some features in two-dimensional models [1, 2, 3]. The Ising model in transverse field on the checkerboard lattice at the highly frustracted point show an emergent plaquette resonating valence bond state due to anharmonic quantum fluctuations. The model can be mapped to Ising model in trasverse field on the square lattice with diagonal interactions. The latter shows a string valence bond state, which is a macroscopic superposition of distinct quantum states in two dimensions. Moreover, non-linear magnetic susceptibility of the extended Kitaev model is prsented, which shows sharp signatures of anyonic excitations in contract to the broad continuum response of the (linear) dynamical spin structure factor. Hence, the non-linear response could be a proper method to characterize the fractional excitatins of quantum spin liquids.

[1] M. Sadrzadeh and A. Langari, Eur. Phys. J. B. 88: 259 (2015).
[2] M. Sadrzadeh, R. Haghshenas, S. S. Jahromi, and A. Langari, Phys. Rev. B 94, 214419 (2016).
[3] M. Sadrzadeh, R. Haghshenas, and A. Langari, Phys. Rev. B 99, 144414 (2019).

بررسی ساختار الکترونی و فونونی ابررساناهای جدید با استفاده از تابش سینکروترونی

حسین خسروآبادی

مرکز شتابدهنده دایموند، آکسفورد، انگلستان

بررسی خواص فیزیکی مواد ابررسانا مانند بررسی خواص الکتریکی و مغناطیسی آنها نقش مهمی در کشف فرآیند و ساز و کار ایجاد حالت ابررسانایی به خصوص در ابررساناهای دمای بالا دارد. دراین میان بویژه بررسی حالتهای ساختار الکترونی و فونونی و برهمکنش بین شبه ذرات که نهایتا حالتهای دسته جمعی کوانتومی را برای این مواد ایجاد می کند بسیار ارزشمند است. از زمان کشف ابررساناهای دمای بالا در ترکیبات اکسید مسی و پایه آهن تا مواد جدید ترکیبات پایه هیدروژنی که ابررسانایی دمای بالا را در فشارهای بالا از خود نشان میدهند، روشهای مختلف آزمایشگاهی برای این بررسیها استفاده شده است. همزمان پیشرفت سریع در ارتقا و بهینه سازی چشمه های نور در شتابدهنده های سینکروترونی نسل سوم، آنها را به ابزاری قوی برای بررسی خواص مواد و از جمله ابررسانایی دمای بالا کرده است. داشتن خصوصیات ویژه این تابش مانند شدتهای بسیار بالا در محدوده مادون قرمز تا پرتو ایکس، قابلت تنظیم انرژی و اندازه حرکت فوتونهای ورودی و پراکنده شده، تنظیم محدوده باند انرژی در محدوده میلی الکترون ولت و قطبش پذیری این شتابدهنده ها نسبت به ابزار استاندارد آزمایشگاهی روشهای جدیدی برای بررسی این خواص مطرح کرده است. انجام آزمایشهایی مانند طیف نگاری الکترونی با گسیل فوتونی و بررسی مدهای فونونی با روشهای پراکندگی ناکشسان پرتو ایکس با مدهای نوسانی اطلاعات بسیار جامعی در این زمینه را ایجاد کرده است. در این سخنرانی ابتدا به معرفی شتابدهنده های سینکروترونی نسل سوم و پیشرفتهای اخیر آن پرداخته و در ادامه تعدادی از مهمترین دستاوردهای سالهای اخیر در زمینه بررسی خواص ابررساناهای دمای بالا ارایه و بررسی خواهد شد.

Exploring the supersolid phase of matter with dipolar quantum gases

Giovanni Modugno
LENS and Dipartimento di Fisica e Astronomia, Università di Firenze, and CNR-INO, Pisa

Abstract

The long-sought supersolid is a fundamental phase of matter expected to combine properties of solids with those of superfluids. A supersolid phase was recently discovered in Bose-Einstein condensates of strongly dipolar atoms [1]. I will discuss the exceptional properties of dipolar supersolids, spanning from double symmetry breaking [2] and quantum phase transitions [3], to the coexistence of superfluidity and crystal-like structure [3] and to a novel type of Josephson effect.

References

[1] L. Tanzi et al., Observation of a dipolar quantum gas with transient supersolid properties, Phys. Rev. Lett. 122, 130405 (2019).
[2] L. Tanzi, et al., Supersolid symmetry breaking from compressional oscillations in a dipolar quantum gas, Nature 574, 382 (2019).
[3] G. Biagioni et al. Dimensional crossover in the superfluid-supersolid quantum phase transition, Phys. Rev. X 12, 021019 (2022).
[4] L. Tanzi et al., Evidence of superfluidity in a dipolar supersolid from non-classical rotational inertia, Science, 371, 1162 (2021).

Printable magnetoactive smart and functional materials: from materials processing to applications

S. Lanceros-Mendez

[1] *BCMaterials, Basque Center for Materials, Applications and Nanostructures, UPV/EHU Science Park, 48940 Leioa (Spain).*
[2] *IKERBASQUE, Basque Foundation for Science, 48009 Bilbao, Spain (Spain).*
[3] *Physics Centre of Minho and Porto Universities (CF-UM-UP), University of Minho, 4710-057, Portugal*
[4] *LaPMET – Laboratory of Physics for Materials and Emergent Technologies, University of Minho, 4710-057, Portugal*
Email:Senentxu.lanceros@bcmaterials.net

Abstract

Smart and multifunctional materials are a key driving force for the development of wireless, sustainable and interconnected systems, playing a central role in the scope of the digitalization and circular economy paradigms. Active and multifunctional materials are being, in fact, increasingly implemented in areas such as sensors and actuators, energy generation and storage, among others. The successful development of applications relies both in the ability to proper tailor their functional response and in their application with suitable (and sustainable) fabrication technologies.
In particular, magnetoactive functional materials processable by additive manufacturing technologies is an area of increasing interest due to improved sustainability, simple integration into devices and the possibility of obtaining multifunctional materials over large and flexible areas.
Relevant results, strategies and challenges in the development of specific magnetically active multifunctional materials will be shown, together with applications in the areas of sensors, actuators, biomedicine and energy generation.

Acknowledgements

Spanish Ministry of Economy and Competitiveness (MINECO) through the project MAT2016-76039-C4-3-R (AEI/FEDER, UE). Basque Government Industry Department under the ELKARTEK program, respectively. European Union's Horizon 2020 Programme for Research, ICT-02-2018 - Flexible and Wearable Electronics. Grant agreement no. 824339 - WEARPLEX is also acknowledged

روشهای تجربی در مطالعه ویژه گی های بلوری، دی الکتریکی و مغناطیسی مواد چندفروئی

احمدوند،حسین

[1]دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی اصفهان

چکیده

مواد چندفروئی (Multiferroic Materials) شامل دو نظم مغناطیسی و فروالکتریکی به صورت همزمان هستند. جفت شدگی بین این دونظم منجر به اثر مگنتوالکتریک (Magnetoelectric effect) می شود که در سالهای اخیرمورد توجه فیزیک پیشه گان بوده است. وجود این برهمکنش باعث می شود که با اعمال میدان مغناطیسی بتوان قطبش الکتریکی را کنترل کرد و یا با اعمال میدان الکتریکی مغناطش ماده را تغییر داد. با توجه به فیزیک غنی و کاربردهای فناورانه این مواد، در سالهای اخیر توجه زیادی صرف یافتن مواد چندفروئی جدید و همچنین شناخت ویژه گیهای فیزیکی این مواد شده است. در این سمینار، ابتدا مقدمه ای درباره این مواد و ویژه گی های جالب آنها ارایه خواهد شد. سپس روشهای تجربی جهت مطالعه ساختار بلوری (پراش اشعه ایکس سینکرترون)، ساختار مغناطیسی (پراش نوترون)، خواص دی الکتریکی (ثابت دی الکتریک بر حسب دما)، خواص مغناطیسی (مغناطش بر حسب دما و میدان مغناطیسی) و خواص مگنتوالکتریکی مورد بحث قرار خواهند گرفت. برخی از نتایج تجربی حاصله (از جمله در مورد ماده چندفروئی KNiPO4) نیز گزارش و بحث خواهند شد.

سازوکار زوج‌شدگی کوپر در ساختارهای پیچ خورده دی‌کالکوژنیدهای عناصر واسطه

محمدحسین زارع

دانشگاه صنعتی قم

مطالعات اخیر، شاهد کشف ساختار نواری کاملاً تخت در دو لایه‌های واندروالس پیچ‌خورده با ساختار ابرشبکه ماره بوده است. از آن‌جا که می‌توان برهم‌کنش کولنی و ضریب پرشدگی را در این دسته از مواد، با تغییر زاویه چرخش دو لایه نسبت به هم، مهندسی زیرلایه و ولتاژ گیت کنترل کرد، نتایج تجربی نشان می‌دهند که این مواد، بستر بسیار مناسبی، برای مشاهده‌ی فازهای همبسته قوی، نظیر فازهای عایق مات و ابررسانایی هستند. در این سخنرانی، مطالعات نظری مدل هابارد ماره آلاییده، که برای توصیف فیزیک کم انرژی ساختارهای پیچ‌خورده دی‌کالکوژنیدهای عناصر واسطه مناسب است، ارائه خواهد شد. با استفاده از روش تقریب فاز تصادفی، به تحلیل ساختار افت و خیزهای اسپینی و تقارن گاف ابررسانایی می‌پردازیم.

Mechanism of Cooper pairing in twisted bilayers of transition metal dichalcogenides

Mohammad-Hossein Zare

Qom University of Technology

Recent studies have shown the existence of a nearly flat band in twisted two layers of wan der Waals materials with a moire superlattice structure. Since the Coulomb interaction and the filling are highly tunable and experimentally accessible quantities that can be tuned by twist angle, substrate engineering and gating in this class of materials, therefore they are promising playground to realize intriguing correlated quantum phases such as Mott insulator phase and superconductivity. In this talk, theoretical studies of the doped moire Hubbard model, which is suitable for describing the low-energy physics of twisted bilayers of transition metal dichalcogenides, will be presented. We are interested to analyze the structure of spin fluctuations and the symmetry of the superconducting gap function using a random-phase approximation.

Chirality inversion of Majorana edge modes in a Fu-Kane heterostructure

Carlo Beenakker

Carlo Beenakker, Instituut-Lorentz, Leiden University

Abstract

Fu and Kane have discovered that a topological insulator with induced s-wave superconductivity supports chiral Majorana modes propagating on the surface along the edge with a magnetic insulator. We show that the direction of motion of the Majorana fermions can be inverted by the counterflow of supercurrent. The chirality inversion is signaled by a doubling of the thermal conductance of a channel parallel to the supercurrent. Moreover, the inverted edge can transport a nonzero electrical current, carried by a Dirac mode that appears when the Majorana mode switches chirality. The chirality inversion is a unique signature of Majorana fermions in a spinful topological superconductor: it does not exist for spinless chiral p-wave pairing.

Topological superconductivity in nearly ferromagnetic UTe2

Johnpierre Paglione
Maryland Quantum Materials Center
Department of Physics, University of Maryland

Abstract

Topological superconductivity has attracted great interest in condensed matter physics because of its potential applications in quantum computing. Spin-triplet superconductors are one promising class that can host the topological excitations of interest, but experimental realizations are few and far between. Here we report the discovery and properties of superconductivity in UTe2, a material closely related to known ferromagnetic superconductors such as UGe2, URhGe, and UCoGe, but lacking long-range magnetic order. Several experimentally measured properties feature telltale indications of an unconventional energy gap and a spin-triplet pairing state that is consistent with the presence of strong magnetic fluctuations due to an incipient quantum critical point. Furthermore, the superconductivity in UTe2 is remarkably robust to extremely high magnetic fields, showing re-entrant pairing up to at least 65 Tesla. I will review basic properties and our detailed investigations of the gap structure, relation to incipient magnetic order and Kondo coherence, as well as indications of an anomalous normal state fluid that suggest many surprises await for this exotic material.

بررسی نظریه افت‌وخیزهای اسپینی در ترکیبات ابررسانای دمای بالای پایه آهن $Nd_{1-X}Ca_xFeAsO_{0.8}F_{0.2}$

شهبازتهرانی، فاطمه؛ دادمهر، وحید*

آزمایشگاه پژوهشی مغناطیس و ابررسانا، دانشکده فیزیک و شیمی، دانشگاه الزهرا(س)، تهران، ایران

چکیده

ترکیبات ابررسانای برپایه آهن $Nd_{1-X}Ca_xFeAsO_{0.8}F_{0.2}$ به روش واکنش حالت جامد تک مرحله‌ای سنتز شد. با رسم نمودار فاز ابررساناهای سنتز شده مشخص شد، که با توجه به افزایش کلسیم و کاهش دمایی موج چگالی اسپینی (T_{SDW})، اسپین یون‌های آهن در دماهای پایین‌تری به صورت آنتی فرومغناطیسی منظم شده و همچنین T_C کاهش یافته است. براساس نتایج تجربی بدست آمده و مطابقت با نظریه‌های موجود، مشخص شد که افزایش ناخالصی در نمونه‌های سنتز شده، در حالت تقارن S++ (افت‌وخیزهای اوربیتالی) تاثیری ندارد، درحالیکه در حالت تقارن S± (افت‌وخیزهای اسپینی)، باعث فرونشانی ابررسانایی در نمونه‌های آلاییده شده است. لذا سازوکار ابررسانایی حاکم بر نمونه‌ها می‌تواند از نوع افت و خیزهای اسپینی باشد.

The investigation of spin-fluctuations theory in the high-temperature Iron-based superconductors $Nd_{1-x}Ca_xFeAsO_{0.8}F_{0.2}$

Shahbaz Tehrani, Fatemeh; Daadmehr, Vahid*

Magnet & Superconducting Research Lab., Faculty of Physics & Chemistry, Alzahra University, Tehran, Iran

Abstract

The polycrystalline iron-based compounds $Nd_{1-x}Ca_xFeAsO_{0.8}F_{0.2}$ were synthesized using a one-step solid-state reaction method. By plotting the phase diagram for the synthesized superconductors, it was found that according to the increase of the calcium impurities and the decrease of the spin-density wave temperature (T_{SDW}), Fe ions arranged stripe antiferromagnetically at lower temperatures and also the T_C declined. Based on the obtained results and in agreement with the available theories, the S++ state (orbital-fluctuations) has no effect on the impurity-doped samples while the S± state (spin-fluctuations) causes the superconducting suppression in the doped samples. So the dominant superconductivity mechanism in the samples can be the spin-fluctuations.

PACS No. 74, 75

مقدمه

در سال ۲۰۰۸، برای نخستین بار پدیده ابررسانایی در ترکیبات $LaFeAsF_xO_{1-x}$ با دمای گذار حدود ۲۶ کلوین برای آلایش x~۰٫۱۱ گزارش شد [۱]. با مشاهده ابررسانایی در ترکیبات برپایه آهن، انگیزه بسیاری در میان محققان و فیزیکدانان ایجاد شد، مبنی بر اینکه این ترکیبات می‌توانند راهگشای مهمی در شناخت سازوکار پدیده ابررسانایی در ابررساناهای دمای بالا باشند. براساس مطالعات نظری و پژوهش‌های تجربی، تاکنون دو نوع سازوکار ابررسانایی برای ابررساناهای برپایه آهن گزارش شده است: ۱-افت‌وخیزهای اسپینی [۲] و ۲-افت‌وخیزهای اوربیتالی [۳]. براساس محاسبات نوار انرژی و برطبق نظریه افت‌وخیزهای اسپینی، حالت موج S با تغییر علامت در گاف انرژی[1] (S±) در ابررساناهای برپایه آهن پیش‌بینی شده و منشاء این افت‌وخیزها، برهمکنش کولنی و درهم‌تنیدگی درون اوربیتالی[2] است [۲]. به علاوه، براساس نظریه افت‌وخیزهای اوربیتالی، علامت گاف انرژی بین بسته‌های موج الکترونی و حفره‌ای در این ابررساناها، یکسان باقی می‌ماند و حالت S++ تشکیل می‌شود [۳]. افت‌وخیزهای اوربیتالی از درهم‌تنیدگی بین اوربیتالی و برهمکنش‌های الکترون-فونون ناشی از فونون‌های اپتیکی یون‌های آهن سرچشمه می‌گیرد [۳]. مطالعات نظری [٤] توصیف می‌کنند که حالت S± نسبت به ناخالصی‌های غیرمغناطیسی بسیار شکننده است، و فقط ۱٪ از ناخالصی‌های غیرمغناطیسی با پتانسیل پراکندگی متوسط می‌تواند ابررسانایی و حالت جفت شدگی S± را کاملاً سرکوب کند، در حالی که برای تقارن و حالت S ++، دمای گذار ابررسانایی

[1] fully-gapped sign-reversing S-wave

[2] intra-orbital nesting

تغییرات قابل توجهی را با افزودن ناخالصی‌های غیرمغناطیسی نشان نمی‌دهد [٤]. بنابراین، یک راهکار مناسب برای تعیین نوع تقارن و سازوکار جفت‌شدگی در ابررساناهای برپایه آهن، افزودن و آلاییدن سیستم با ناخالصی غیرمغناطیسی است. به‌علاوه، بر اساس مدل پنج مداری، اوناری[3] و همکاران [٥] دریافتند که حالت ±S که به نظریه افت‌وخیزهای اسپینی نسبت داده می‌شود، در برابر ناخالصی‌های غیرمغناطیسی (در مقادیر کم آلایش) بسیار شکننده است، در حالی‌که حالت ++S که دلالت بر وجود افت‌وخیزهای اوربیتالی دارد، نسبت به همه مقادیر ناخالصی‌ها ثابت و بدون تغییر بوده و بر آن تأثیر نمی‌گذارد.

بر این اساس، در این مقاله به بررسی اثر آلایش یون‌های کلسیم در ترکیبات ابررسانای پایه آهن $Nd_{1-X}Ca_xFeAsO_{0.8}F_{0.2}$ به عنوان ناخالصی‌های غیرمغناطیسی پرداخته شده است. برای این منظور، نمودار فاز[4] نمونه‌ها با نظریه‌های مذکور مقایسه شده و رهیافتی برای بررسی سازوکار ابررسانایی و جفت‌شدگی غالب در ابررساناهای برپایه آهن ارائه شده است.

آزمایشات تجربی

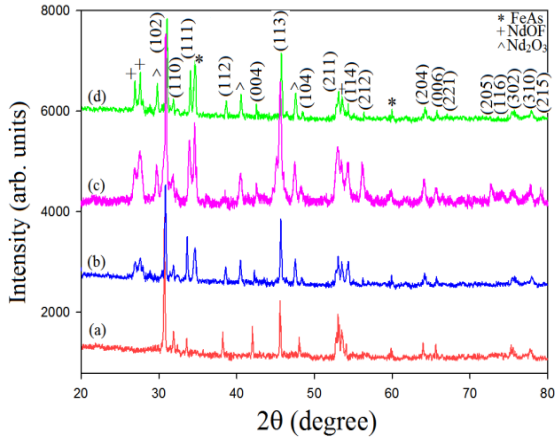
ترکیبات ابررسانای پایه آهن $Nd_{1-X}Ca_xFeAsO_{0.8}F_{0.2}$ با آلایش کلسیم ۰٫۰۵ و ۰٫۰۲۵، ۰/۰۱، ۰ =x به روش واکنش حالت جامد تک مرحله ای سنتز شده‌اند. نمونه‌های $NdFeAsO_{0.8}F_{0.2}$، $Nd_{0.99}Ca_{0.01}FeAsO_{0.8}F_{0.2}$، $Nd_{0.975}Ca_{0.025}FeAsO_{0.8}F_{0.2}$ و $Nd_{0.95}Ca_{0.05}FeAsO_{0.8}F_{0.2}$ به ترتیب با نمادهای Nd-1111، Nd-Ca0.01 ، Nd-Ca0.025 و Nd-Ca0.05 نامگذاری شده‌اند. برای ساخت یک گرم از نمونه مورد نظر، مقادیر محاسبه شده براساس علم وزن‌سنجی از پودرهای نئودیمیوم، آهن، اکسید آهن Fe_2O_3، آهن (III) فلوراید FeF_3، کلسیم فلوراید CaF_2 و تکه‌های آرسنیک (تمامی مواد اولیه دارای خلوص ٪۹۹٫۹ هستند) توسط ترازویی با دقت 10^{-5} گرم توزین شدند. سپس این مواد به مدت ۲ ساعت با یکدیگر ساییده و مخلوط شدند. تمامی مراحل توزین و ساییدن درون گلاوباکسی حاوی گاز نیتروژن انجام شد. پودر همگن بدست آمده به شکل قرص درآمده و درون لوله کوارتز قرار گرفت. لوله کوارتز توسط پمپ خلاء تا فشار 10^{-4} mbar، تخلیه و سپس بسته شد. در ادامه، لوله کوارتز درون کوره استوانه‌ای قرار گرفته و با آهنگ دمایی ۱۰ °C/min تا دمای ۳۵۰°C حرارت داده شد و به مدت ٥ ساعت در این دما قرار گرفت. سپس تا دمای ٦٤٠°C با آهنگ دمایی ذکر شده (و باقی ماندن در این دما به مدت ١٤ ساعت) و بعد از آن تا دمای ۸۸۰°C (و حرارت دادن در این دما به مدت ۲۰ ساعت) و در آخر تا دمای ۱۱۵۰°C (و باقی ماندن در این دما به مدت ۲۰ ساعت) حرارت داده شد. در این مرحله پودر حاصله، دوباره به مدت ۲ ساعت ساییده شده و به شکل قرص در می‌آید. سپس قرص بدست آمده درون لوله کوارتز قرار گرفته و بار دیگر بسته می‌شود و فرآیند حرارت‌دهی مذکور، دوباره تکرار می‌شود. برای بررسی مشخصات ساختاری نمونه‌ها از دستگاه XRD با تابش CuKα استفاده شد. برازش داده‌های حاصل از اندازه‌گیری XRD توسط نرم افزار "Material Analysis Using Diffraction" (MAUD) صورت گرفت. مقاومت الکتریکی نمونه‌ها با استفاده از روش چهار پروب، با جریان مستقیم ۱۰ mA اندازه گیری شد و دقت اندازه‌گیری ولتاژ دو سر نمونه‌ها میکروولت است.

بحث و بررسی

شکل ۱ الگوی XRD ترکیبات سنتز شده را نشان می‌دهد. برای تعیین ساختار بلوری و پارامترهای ساختاری نمونه‌ها، با استفاده از نرم افزار MAUD و تحلیل ریتولد، طیف XRD نمونه‌ها را ظریف‌سازی نمودیم. براساس این تحلیل، ساختار بلوری تتراگونال با گروه تقارنی P4/nmm:2 در تمامی نمونه‌ها تشکیل شده است. صفحات میلر مربوط به این ساختار بلوری برای نمونه‌های سنتز شده در شکل ۱ مشخص شده است.

در شکل ۲ مقاومت الکتریکی نمونه‌های سنتز شده نشان داده شده است. در پژوهش قبلی این گروه پژوهشی، از نقطه نظر تجربی به بررسی اثر پارامترهای ساختاری بر دمای گذار ابررسانایی در ترکیبات $Nd_{1-x}Ca_xFeAsO_{0.8}F_{0.2}$ پرداخته شده است [٦]. براین اساس، ثابت‌های شبکه و طول باند Fe-As با افزایش آلایش کلسیم، کاهش یافته است. به علاوه، دمای گذار نمونه‌ها، با

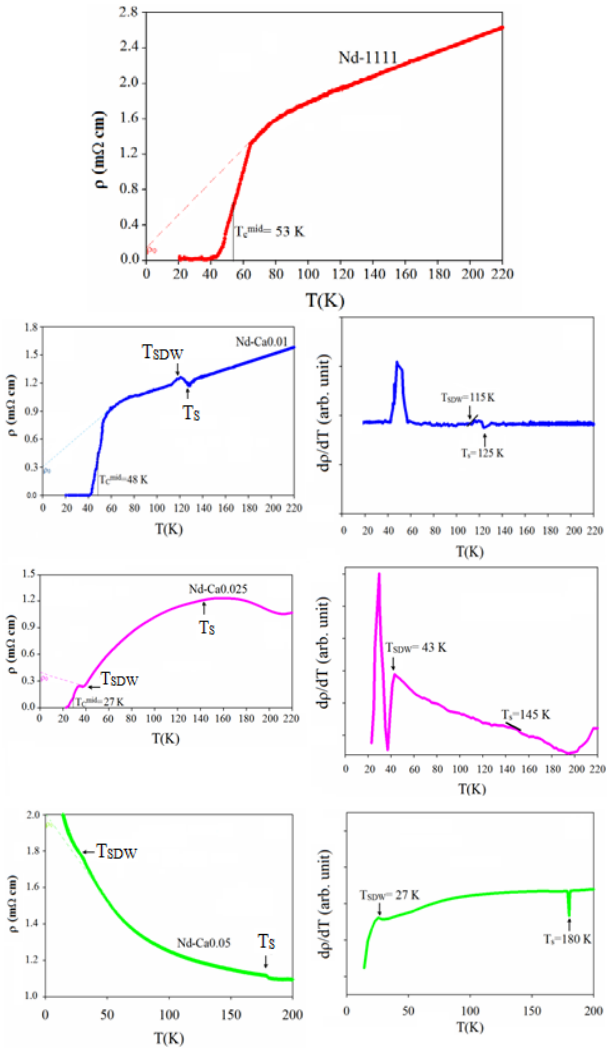
[3] S. Onari
[4] Phase Diagram



شکل ۱. مقایسه الگوهای XRD ترکیبات $Nd_{1-x}Ca_xFeAsO_{0.8}F_{0.2}$
((a) x=0, (b) x=0.01,(c)=0.025, (d)=0.05)

کاهش پارامترهای شبکه، طول باند Fe-As و ضخامت لایه Fe-As و دور شدن زوایای پیوندی As-Fe-As از مقدار تتراهدرون منظم کاهش یافته است. این مسئله تایید کننده مطالعات تئوری انجام شده براساس تئوری افت‌و خیزهای اسپینی و افت‌وخیزهای اوربیتالی، به عنوان مکانیسم جفت شدگی در ابررساناهای برپایه آهن است [٦]. در مقاله حاضر، در ادامه پژوهش قبلی، به بررسی این مسئله پرداخته شده است که کدام یک از این سازوکارهای افت‌وخیزهای اسپینی و افت‌وخیزهای اوربیتالی نقش مهم‌تری را در نمونه‌های ابررسانای پایه آهن سنتز شده بازی می‌کنند و غالب هستند. برای این منظور، در مورد ابررساناهای برپایه آهن، مطالعه روی نمودار فاز برای فهم سازوکار ابررسانایی مفید است. درباره نمودار فاز ترکیبات برپایه آهن چندین نکته مهم وجود دارد: اول اینکه سه نوع فاز در هر یک از این نمودارها وجود دارد که عبارتند از ۱- فاز نرمال ۲- فاز ابررسانشی و ۳- فاز آنتی-فرومغناطیسی. محور افقی آلایش الکترونها یا حفره ها و همچنین محور عمودی، دما را برحسب کلوین نمایش می‌دهد. فاصله‌ی بین گذار ساختاری که در دمای T_S اتفاق می‌افتد و گذار آنتی فرومغناطیسی یا چگالی موج اسپینی[5] که در دمای T_N (دمای نیل) و یا T_{SDW} اتفاق می‌افتد را ناحیه شبه گاف می‌گویند. دمای گذار ساختاری دمایی است که در آن ابررسانا به دلیل فشار یا آلایش از ساختار بلوری تتراگونال به اورتورمبیک تغییر شکل می‌یابد. موضوع دوم در مورد ابررساناهای برپایه آهن این است که ترکیب

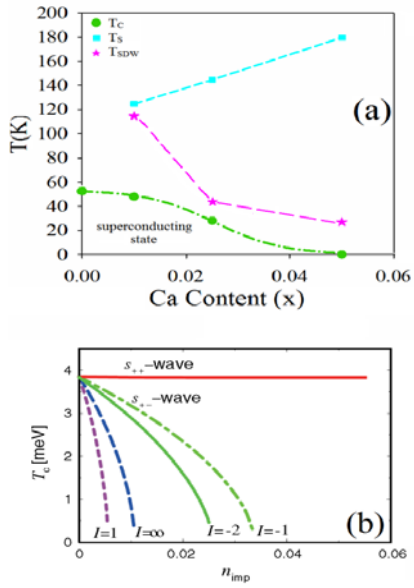
[5] Spin Density Wave (SDW)



شکل ۲. نمودار مقاومت الکتریکی ρ(T) و نمودار مشتق مقاومت برحسب دما برای نمونه‌های سنتز شده

مادر[6] این ترکیبات فلز هستند و نمایش آنتی‌فرومغناطیسی دارند و با آلایش الکترونها یا حفره‌ها هر دو گذار آنتی‌فرومغناطیسی و ساختاری به طور پیوسته‌ای تغییر کرده و به فاز ابررسانشی می-رسیم؛ با این وجود، حالت آنتی فرومغناطیسی کاملاً از بین نمی‌رود و حالتهای همزمان ابررسانایی و آنتی فرومغناطیسی به وجود می-آید، که به آن همزیستی یا رقابت ابررسانایی و مغناطیس می‌گویند. این مسئله در تضاد با ابررساناهای کوپراتی است که در آن ترکیب مادر این ترکیبات، عایق‌های مات هستند و برخلاف ابررساناهای برپایه آهن، این‌بار بعد از فرونشانی کامل همبستگی

[6] Parent



شکل ۳- (a) نمودار فاز ترکیبات $Nd_{1-x}Ca_xFeAsO_{0.8}F_{0.2}$ و (b) نمودار فاز از دیدگاه نظری برای ناخالصی غیرمغناطیسی دلخواه در مرجع [۵]

آنتی فرومغناطیسی، این ترکیبات ابررسانا می‌شوند. بنابراین در ادامه برای بررسی سازوکار ابررسانایی در ترکیبات برپایه آهن سنتز شده $Nd_{1-x}Ca_xFeAsO_{0.8}F_{0.2}$، نمودار فاز مربوطه ترسیم شده است. برای این منظور، همانطور که در شکل ۲ نشان داده شده است، برآمدگی‌های دیگری نیز در اندازه گیری مقاومت نمونه‌های آلاییده با کلسیم وجود دارد. به طور کلی، این برآمدگی‌ها در ترکیبات برپایه آهن معمولاً به گذار ساختاری (T_S) و گذار چگالی موج اسپینی (T_{SDW}) و یا گذار آنتی فرومغناطیسی نسبت داده می‌شوند [٤]. برای تعیین دقیق‌تر دماهای T_S و T_{SDW} در نمونه‌ها، مشتق مقاومت نمونه‌ها محاسبه شد (شکل ۲) و مقادیر دقیق T_S و T_{SDW} برای نمونه های سنتز شده بدست آمد و براین اساس، نمودار فاز ابررساناهای برپایه آهن $Nd_{1-x}Ca_xFeAsO_{0.8}F_{0.2}$، در شکل ۳(a) ترسیم شده است. این شکل، فرونشانی حالت ابررسانایی و حالت SDW را با افزایش ناخالصی های کلسیم نشان می‌دهد، در حالی که T_S افزایش می‌یابد. چنین رفتاری در ترکیبات دیگری از ابررسانای برپایه آهن نیز مشاهده شده است [٤]. ساختار الکترونی ترکیبات پایه آهن پیشنهاد می‌کند که نظم آنتی فرومغناطیسی، برهم کنش‌های جفت‌شدگی ابررسانایی را در این ترکیبات به وجود می‌آورد و تاثیر و نقش مستقیمی بر روی سازوکار ابررسانایی در این ترکیبات دارد [۳]. با این پیش زمینه، در نمونه‌های سنتز شده، با توجه به کاهش دمای گذار آنتی فرومغناطیسی (T_{SDW}) با افزایش آلایش کلسیم، می‌توان توصیف کرد که یون‌های آهن به علت افزایش یون‌های غیرمغناطیسی کلسیم، در دماهای پایین‌تری به صورت آنتی فرومغناطیسی آرایش یافته و منظم می‌شوند و بنابراین دمای گذار ابررسانایی (T_C) نیز کاهش می‌یابد. بنابراین، به عنوان یک نتیجه مهم، افت‌وخیزهای اسپینی تأثیر مستقیمی در سازوکار ابررسانایی نمونه های سنتز شده در این پژوهش دارد. به‌علاوه، تطابق نمودار فاز نمونه‌های سنتز شده (شکل۳(a)) و نتایج حاصل از مدل نظری اوناری و همکاران [۵] (شکل۳(b))، نشان می‌دهد که با آلاییدن مقدار کم ناخالصی غیرمغناطیسی یون‌های کلسیم (x≤۰/۰۵) در نمونه‌های سنتز شده، خاصیت ابررسانایی کاملاً سرکوب می‌شود. در نتیجه و طبق نظریه مذکور، تقارن ±S و افت‌وخیزهای اسپینی در مقایسه با افت-وخیزهای اوربیتالی در ابررساناهای برپایه آهن آلاییده با کلسیم در این پژوهش، غالب هستند.

نتیجه گیری

در پژوهش حاضر به بررسی سازوکار ابررسانایی غالب در ابررساناهای پایه آهن $Nd_{1-x}Ca_xFeAsO_{0.8}F_{0.2}$ پرداخته شده است. برطبق نمودار فاز ابررساناهای سنتزشده و در تطابق با نظریه‌های موجود، از آن جایی که افزایش ناخالصی غیرمغناطیسی در نمونه-های $Nd_{1-x}Ca_xFeAsO_{0.8}F_{0.2}$ در حالت تقارن ++S که دلالت بر حاکمیت نظریه افت‌وخیزهای اوربیتالی دارد، تاثیری ندارد و در حالت ±S که به سازوکار افت‌وخیزهای اسپینی نسبت داده می‌شود، باعث سرکوب ابررسانایی برای مقادیر کم ناخالصی در نمونه‌ها شده است، می‌توان نتیجه گرفت که سازوکار ابررسانایی حاکم بر نمونه‌های آلاییده با کلسیم، از نوع افت‌وخیزهای اسپینی است.

مرجع‌ها

[1] Y. Kamihara, T. Watanabe, M. Hirano, H. Hosono, *J. Am. Chem. Soc.* **130**, No. 11 (2008) 3296–3297.
[2] H. Nakaoka, Y. Yamakawa, H. Kontani, *Phys. Rev. B* **98**, (2018) 125107.
[3] T. Saito, S. Onari, H. Kontani, *Phys. Rev. B* **82**, (2010) 144510.
[4] P. F. S. Rosa, C. Adriano, T. M. Garietezi, M. M. Piva, K. Mydeen, T. Grant, Z. Fisk, *Scientific Reports* **4**, (2014) 6252.
[5] S. Onari, H. Kontani, *Phys. Rev. Let.* **103**, (2009) 177001.
[6] F. Shahbaz Tehrani, V. Daadmehr, J. Supercond. Nov. Magn. **33**, No. 2 (2020) 337-345.

بررسی تأثیر ضخامت بر خواص مغناطیسی لایه نازک پرمالوی با استفاده از شبیه سازی میکرومغناطیس

کریم آبادی، محسن[۱]؛ جزیره‌پور، محمد[۲]*؛ علی، رستم نژادی[۳]؛

دانشکده الکتروسرام و مهندسی برق، دانشگاه صنعتی مالک اشتر ایران

چکیده: *در این تحقیق اثر ضخامت بر خواص مغناطیسی لایه نازک دیسکی شکل از پرمالوی با قطر ۴۰۰nm و با ضخامت متغییر از ۱۰nm تا ۴۰nm به وسیله شبیه سازی میکرومغناطیس بررسی شد. مقایسه نمودارهای پسماند در ضخامت‌های مختلف نشان داد که در اثر افزایش ضخامت مقادیر مغناطش باقی مانده کاهش و میدان اشباع ماده افزایش پیدا می‌کند. به طوری که مقدار مغناطش باقی مانده و میدان اشباع به ترتیب از ۰/۸۴ و ۲۵ mT در ضخامت ۱۰nm به ۰/۰۰۹ و ۱۲۰mT در ضخامت ۴۰nm می‌رسد. نمودار پسماند در ضخامت ۱۰nm دارای نسبت بالای مربعی شدن (m_r/m_s) است. که با افزایش ضخامت این نسبت کاهش پیدا می‌کند که علت آن به وجود آمدن ایجاد جریان‌های گردابی در پیکربندی بردارهای مغناطش سیستم است. از آنجایی که منشأ تغییرات مغناطش سیستم تغییر در انرژی‌های مغناطیسی سیستم است. بررسی تغییرات انرژی‌های مغناطیسی نمونه با میدان نشان داد که مغناطش ماده در جهت میدان اعمالی با انرژی زیمان و تبادلی رابطه‌ی عکس و با انرژی وامغناطش رابطه‌ی مستقیم دارد.*

کلمات کلیدی: شبیه سازی میکرومغناطیس، برگشت مغناطیسی ، لایه نازک پرمالوی

The use of micromagnetic simulation to investigate the influence of thickness on the magnetic characteristics of permalloy thin film

Karimabadi, Mohsen[1]; Mohammad, Jazirehpour[2*]; Rostamnejadi, Ali[3];

(*corresponding author's E-mail: Jazirehpour@mut-es.ac.ir)

Electroceramics and engineering department; Malek ashtar University of technology Iran

Abstract:*In this study micromagnetic simulation was used to evaluate changes in the magnetic characteristics of a disc-shaped Permalloy thin film with a diameter of 400 nm and a thickness ranging from 10 to 40 nm. A comparison of remanence curves at various thicknesses revealed that as thickness increased, the remanence magnetization decreased and the saturation field of the material increased. As a result, the remanence magnetization and saturation field decrease from 0.84 and 25 mT in 10 nm thickness to 0.009 and 120 mT in 40 nm thickness, respectively. At a thickness of 10 nm, the magnetization curves have a high squareness ratio (m_r/m_s). Due to the presence of eddy currents in the configuration of the system magnetization vectors, this ratio falls with increasing thickness. Because the source of system magnetization changes is a change in the system's magnetic energy. The magnetization of matter in the direction of the applied field is inversely connected to the exchange energy and Zeeman energy and is directly related to the magnetostatic energy, according to an examination of changes in the magnetic energies of the sample with the field.*

Keywords: micromagnetic simulation, magnetic revers, Permalloy thin film

مقدمه:

دستیابی به علم ساخت محیط‌های ذخیره سازی در وسایل مغناطیسی نیازمند این است که تغییراتی که با تغییر میدان مغناطیسی در مواد و نانو نقاط مغناطیسی ایجاد می‌شود را به خوبی شناخت و این تغییرات را کنترل کرد [۱]. پیکربندی مغناطیسی در این عناصر، به نوسانات شکل و زبری مرزها بسیار حساس است. مکانیزم پیچیده برگشت مغناطیسی بسته به سابقه میدان اعمال شده می‌تواند منجر به حالت‌های پایدار متفاوتی شود و از این رو خود فرآیند برگشت را تحت تأثیر قرار می‌دهد [۲]. بنابراین درک دقیق مکانیسم‌های برگشت مغناطیسی در نانوساختارهای ضروری است [۳]. شبیه سازی میکرومغناطیس یک روش محاسباتی مفید برای مطالعه‌ی خواص مغناطیسی مواد در ابعاد نانو است که می‌توان به وسیله آن ساز و کار برگشت مغناطیسی را شبیه سازی کرد. تجزیه تحلیل میکرومغناطیس مبتنی بر حل معادله‌ی لاندائو است [٤]. به وسیله حل این معادله می‌توان مغناطش ماده در حضور میدان مغناطیسی را محاسبه کرد. آقای رئنایی و همکاران در پژوهشی با استفاده از بسته شبیه سازی نرم افزار OOMMF، در یک نمونه مثلثی شکل از پرمالوی نشان دادند که در نتیجه‌ی ناهمسانگردی شکل، در میدان‌های برگشت مغناطیسی با تغییر زاویه‌ی میدان

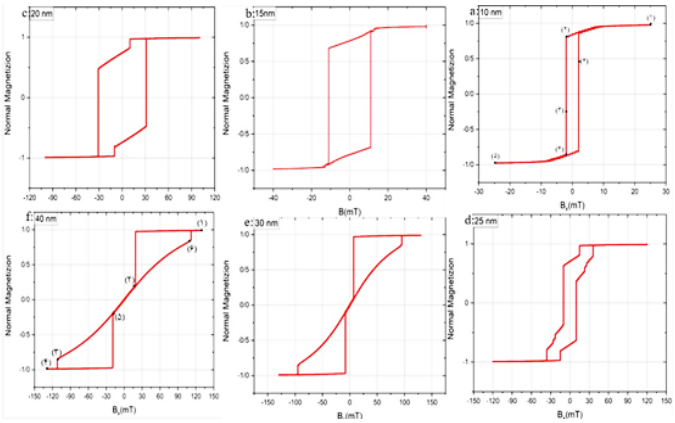
خارجی یک توزیع گسترده وجود دارد. این امر یک شاخص مهم برای ساخت مواد با چگالی بالا به شمار می‌رود. توزیع میدان‌های برگشت با در نظر گرفتن رقابت بین انرژی تبادلی و وامغناطش در زاویه‌های مختلف قابل درک است[۵]. در پژوهش دیگری توسط آقای پرادش و همکاران با تغییر قطر داخلی یک حلقه مغناطیسی از آلیاژ پرمالوی نمودار پسماند مغناطیسی آن شبیه سازی شد. همانطور که قطر داخلی نمونه ها از ۰ به ۱۹۰nm افزایش می‌یابد، خواص مغناطیسی به تدریج تغییر می‌کند. مغناطش‌های باقی مانده به دلیل وجود حالت گردابی برای قطر داخلی ۰ تا ۱۷٤nm بسیار کوچک هستند. در ضخامت داخلی ۱۸۰nm بالاترین مقدار مغناطش باقی‌مانده ثبت شد. این حالت به میدان مغناطیسی بزرگتری برای تغییر وضعیت گردابی نیاز دارد. تغییرات عمدتاً به دو پارامتر نسبت داده می‌شود: انرژی تبادلی و انرژی وامغناطش. این دو پارامتر به انحنای داخلی حلقه بستگی دارد. انرژی تبادلی با قطر داخلی تغییر چندانی نمی‌کند، اما افزایش زیادی در انرژی وامغناطش باعث می‌شود که با اعمال یک میدان مغناطیسی کوچک سیستم از حالت گردابی خارج شده و یک حلقه پسماند باریک ایجاد گردد [٦]. از نتایج این پژوهش‌ها می‌توان یافت که انرژی وامغناطش دارای بیشترین تأثیر در نمودار پسماند است. در این پژوهش‌ها ضخامت ماده که می‌تواند بیشترین اثر را بر روی انرژی وامغناطش داشته باشد ثابت بوده و اثر آن مورد بررسی قرار نگرفته است. در این تحقیق اثر تغییرات ضخامت بر نمودار پسماند مغناطیسی و انرژی‌های سیستم بررسی خواهد شد.

روش شبیه سازی

هندسه انتخابی برای شبیه سازی یک دیسک پرمالوی با قطر ٤۰۰nm و ضخامت متغیر از ۱۰nm تا ٤۰nm می‌باشد. برای ترکیب $Ni_{80}Fe_{20}$ مقدار مغناطش اشباع ۸٦۰ kA/m و مقادیر ثابت میرایی و ثابت تبادلی به ترتیب برابر با $\alpha = 1$ و $1/3\times10^{-11}\ J/m$ در نظر گرفته شد [۷]. هدف از شبیه سازی رسم نمودار پسماند مغناطیسی و بررسی تأثیر ضخامت بر روی این نمودار و پیکربندی بردارهای مغناطش است. برای رسم نمودار پسماند ابتدا فرض شده که ماده در جهت مثبت محور x اشباع کامل است لذا جهت گیری اولیه‌ی بردارهای مغناطش به صورت m = (۱،۰،۰) می‌باشد. میدان مغناطیسی برخلاف جهت گیری اولیه‌ی بردارهای مغناطش و در جهت (-x) اعمال می‌شود تا دیسک مغناطیسی به حالت اشباع کامل در جهت میدان مغناطیسی اعمالی برسد. سپس جهت میدان اعمالی به جهت (+x) تغییر داده شده تا با رسیدن به اشباع مجدد یک چرخه کامل برای رسم نمودار پسماند مغناطیسی طی شود.

بررسی نتایج

نمودار پسماند مغناطیسی حاصل از شبیه سازی در ضخامت‌های مختلف در راستای محور x در شکل(۱)، نشان داده شده است. در ضخامت ۱۰nm نمودار پسماند با میدان کوچکتری به اشباع رسیده و دارای نسبت بالای مربعی شدن (m_r/m_s) است. پیکربندی بردارهای مغناطش در این ضخامت نشان دهنده‌ی یک حالت ضعیف گردابی هستند. با افزایش ضخامت در ضخامت‌های ۱۵nm و ۲۰nm در نمودار پسماند مغناطیسی یک جهش ایجاد می‌شود. که مربوط به هسته گذاری حالت گردابی در بردارهای مغناطش سیستم است.



شکل(۱): نمودار پسماند مغناطیسی در راستای محور x، برای دیسک پرمالوی با قطر٤۰۰nm و ضخامت a(۱۰nm، b(۱۵nm، c(۲۰nm، d(۲۵nm، e(۳۰nm و d(٤۰nm شبیه سازی شده در نرم افزار OOMMF.

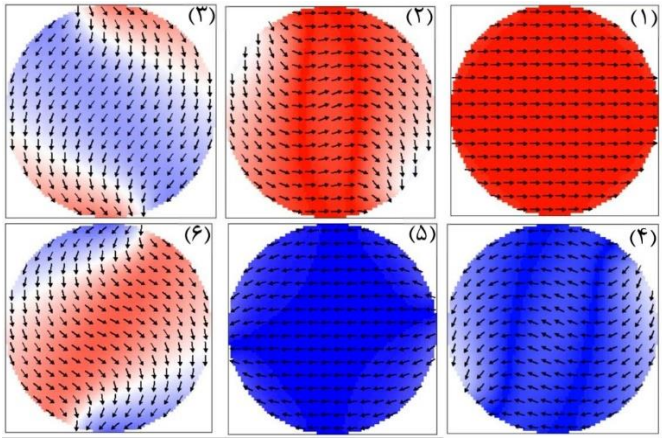
بررسی پیکربندی بردارهای مغناطش نشان می‌دهد که هسته گرداب بردارهای مغناطش در این ضخامت یک حالت S شکل دارد. در ضخامت ۲۵nm پیکربندی بردارهای مغناطش از حالت S شکل خارج شده و تشکیل دو هسته گردابی را می‌دهند. این دو هسته باعث دو جهش در نمودار پسماند در این ضخامت شده‌اند. جهش اول باعث افزایش میدان وادارندگی و جهش دوم باعث افزایش میدان اشباع در سیستم شده است. در ضخامت‌های ۳۰nm و ٤۰nm

نمودار پسماند داری یک جهش بزرگ است. پیکربندی بردارهای مغناطش حالت تک هسته به خود گرفته و به دلیل قفل شدن تعداد بیشتری از بردارهای مغناطش و تشکیل کامل هسته گذاری تغییرات مغناطش در جهت میدان اعمالی با کندی صورت می‌گیرد که باعث افزایش میدان اشباع سیستم می‌شود در این ضخامت میدان وادارندگی نزدیک به صفر امکان ذخیره سازی با چگالی بالا را افزایش می‌دهد. جدول (۱)، نشان دهنده‌ی تغییرات میدان وادارندگی، میدان اشباع و مغناطش باقی مانده بر حسب ضخامت برای لایه دیسکی شکل از پرمالوی است. در اثر افزایش ضخامت مقادیر میدان اشباع افزایش و مقادیر مغناطش باقی مانده کاهش پیدا می‌کند به طوریکه مقدار مغناطش باقی در ضخامت ٤٠nm نزدیک به صفر است.

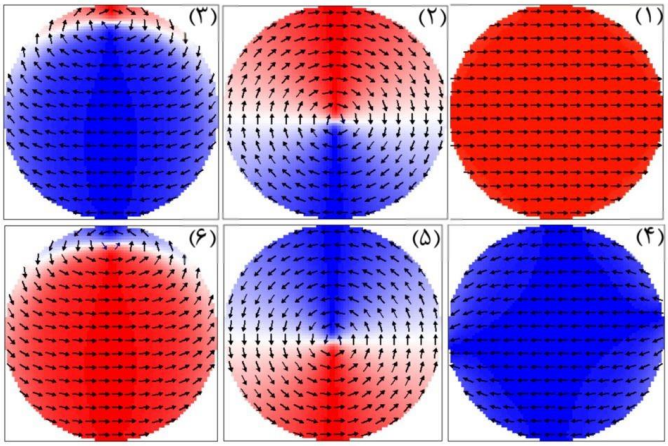
جدول(۱)، تغیرات میدان وادارندگی، میدان اشباع و مغناطش باقی مانده با تغییر ضخامت در لایه نازک پرمالوی.

ضخامت	میدان وادارندگی(mT)	میدان اشباع (mT)	مغناطش باقی مانده
۱۰ nm	۲	۲۵	۰/۸٤
۱۵ nm	۱۱	٤۰	۰/۷۸
۲۰ nm	۳۱	٦۰	۰/۷۳
۲۵ nm	۱۰	۷۰	۰/۷۰
۳۰ nm	۰	۱۰۰	۰/۰۱۲
٤۰ nm	۰	۱۲۰	۰/۰۰۹

شکل(۳) و شکل(٤) به ترتیب نشان دهنده‌ی پیکربندی بردارهای مغناطش در ضخامت‌های ۱۰nm و ٤۰nm برای درک بهتر نحوه پیکربندی بردارهای مغناطش است.

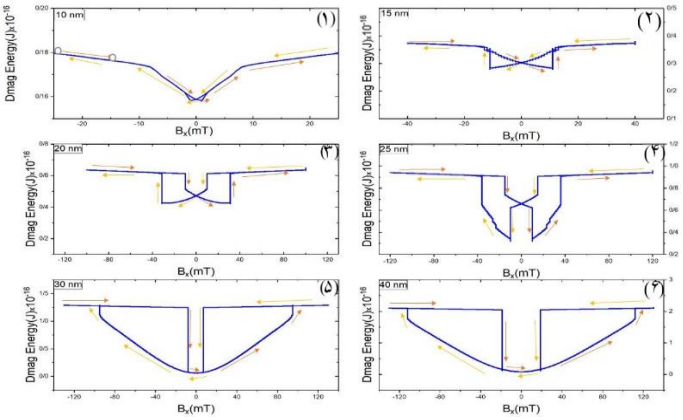


شکل(۲)، تغییر جهت گیری بردارهای مغناطش متناظر با نقاط مشخص شده در شکل (۱)، برای دیسک پرمالوی با ضخامت ۱۰ nm در راستای محور x.



شکل(۳)، تغییر جهت گیری بردارهای مغناطش متناظر با نقاط مشخص شده در شکل (۱)، برای دیسک پرمالوی با ضخامت ٤۰ nm در راستای محور x.

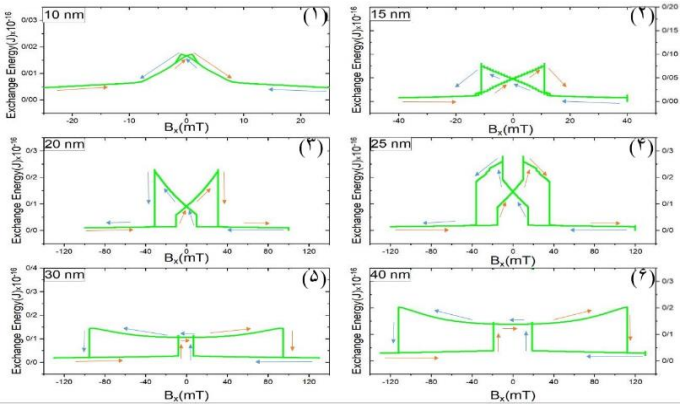
منشأ تغییرات مغناطش سیستم تغییر در انرژی‌های مغناطیسی سیستم است. بررسی انرژی‌های سیستم نشان می‌دهد که انرژی انرژی وامغناطش سیستم نسبت به انرژی تبادلی در سطح بالاتری قرار دارد. شکل(٤)، نشان دهنده‌ی تغییرات انرژی وامغناطش سیستم بر حسب میدان خارجی در ضخامت‌های مختلف می‌باشد.



شکل(٤)، تغییرات انرژی وامغناطش پرمالوی با میدان خارجی، در ضخامت‌های ۱۰nm(۱)، ۱۵nm (۲)، ۲۰nm (۳)، ۲۵ nm (٤)، ۳۰nm (٥)، ٤۰ nm (٦).

با کاهش میدان و شروع هسته گذاری حالت گردابی شیب کاهش انرژی وامغناطش افزایش پیدا می‌کند. در نقطه‌ی پسماند با تغییر جهت میدان در خلاف جهت پیکربندی اولیه سیستم انرژی وامغناطش به دلیل وجود حالت گردابی همچنان در حال کاهش است. با افزایش میدان هسته‌ی حالت گردابی حذف می‌شود که در این نقطه انرژی وامغناطش در کمترین سطح خود است. در این نقطه

با حذف هسته‌ی حالت گردابی انرژی وامغناطش افزایش چشمگیری دارد. پس از این نقطه انرژی وامغناطش با افزایش میدان خارجی با شیب ملایمی شروع به افزایش می‌کند تا سیستم به اشباع کامل برسد. یکی از عوامل تقارن حلقه‌ی پسماند، تقارن در روند تغییرات رفت و برگشت انرژی وامغناطش سیستم با میدان اعمالی است. بنابراین می‌توان نتیجه گرفت که تغییرات مغناطش سیستم با تغییرات انرژی وامغناطش رابطه‌ی مستقیم دارد. با افزایش ضخامت، سطح و دامنه نوسانات انرژی وامغناطش افزایش پیدا می‌کند. بالا آمدن سطح انرژی وامغناطش سبب افزایش میدان‌های اشباع در سیستم می‌شود.



شکل(۵)، تغییرات انرژی تبادلی پرمالوی با میدان خارجی، در ضخامت‌های (۱) ۱۰ nm، (۲) ۱۵ nm، (۳) ۲۰ nm، (٤) ۲۵ nm، (۵) ۳۰ nm، (٦) ٤۰ nm.

شکل(۵)، نشان دهنده‌ی انرژی تبادلی سیستم بر حسب میدان اعمالی در ضخامت‌های مختلف است. سطح انرژی تبادلی در سطح پایین‌تری از انرژی وامغناطش قرار دارد. دامنه نوسان انرژی تبادلی با میدان خارجی در مقایسه با انرژی وامغناطش کوچکتر است. در شروع شبیه سازی با کاهش میدان خارجی انرژی تبادلی با شیب کمی در حال افزایش است. در میدان پسماند اگر چه میدان در جهت (x−)، در حال افزایش است اما به دلیل وجود هسته حالت گردابی انرژی تبادلی همچنان در حال کاهش است. افزایش انرژی تبادلی باعث کندی تغییرات مغناطش با تغییرات میدان خارجی می‌شود. به همین دلیل در این بازه در حلقه‌ی پسماند مغناطیسی جهش داریم. با افزایش میدان و حذف هسته‌ی حالت گردابی انرژی تبادلی اُفت محسوسی دارد. در این میدان با کاهش انرژی تبادلی مغناطش ماده در جهت میدان اعمالی شروع به افزایش می‌کند تا به اشباع کامل برسد. بنابراین به دلیل رابطه‌ی عکس تغییرات انرژی تبادلی با میدان خارجی تغییرات مغناطش سیستم با انرژی تبادلی نیز رابطه عکس دارد. در اثر فزایش ضخامت لایه پرمالوی سطح انرژی تبادلی افزایش بسیار کمی دارد.

نتیجه گیری

نتایج حاصل از شبیه سازی نشان داد که در اثر افزایش ضخامت مقادیر مغناطش باقی مانده کاهش و میدان اشباع افزایش پیدا می‌کند. مغناطش ماده در جهت میدان اعمالی با انرژی تبادلی رابطه‌ی عکس و با انرژی وامغناطش رابطه‌ی مستقیم دارد. با افزایش ضخامت مقدار و دامنه تغییرات انرژی وامغناطش سیستم نسبت به انرژی تبادلی بیشتر است. این تغییرات باعث ایجاد تغییر در ساز و کار تشکیل و نابودی هسته‌های حالت گردابی می‌شود. افزایش انرژی تبادلی و کاهش انرژی وامغناطش با کاهش میدان خارجی از ضخامت ۱۰nm تا ۲۰nm در یک محدوده‌ی برابر قرار دارند. با افزایش ضخامت و در ضخامت‌های ۳۰nm و ٤۰nm کاهش انرژی وامغناطش سیستم نسبت به ضخامت‌های کوچکتر بیشتر می‌شود. در هنگام هسته گذاری حالت گردابی انرژی وامغناطش نزدیک به صفر و انرژی تبادلی در بیشینه مقدار خود قرار دارد. بنابراین جهش حاصل از حالت گردابی در حلقه‌ی پسماند بزرگتر می‌شود و به میدان‌های بزرگتری برای غلبه بر حالت گردابی نیاز است.

مراجع

[1]. Whittenburg, S., N. Dao, and C. Ross, *Micromagnetic studies of hysteresis in nickel pillars.* Physica B: Condensed Matter, 2001. **306**(1-4): p. 44-46.
[2]. Gan, W., et al., *Multi-vortex states in magnetic nanoparticles.* Applied Physics Letters, 2014. **105**(15 :(p. 152405.
[3]. Vavassori, P., et al., *Magnetization reversal via single and double vortex states in submicron Permalloy ellipses.* Physical Review B, 2004. **69**(21): p. 214404.
[4].Kronmuller, H., H. Kronmüller, and M. Fähnle, *Micromagnetism and the microstructure of ferromagnetic solids*. 2003: Cambridge university press.
[5]. Raanaei, H. and S. Abbasi, *Switching Fields Distribution of a Triangular Permalloy Nanodot*.
[6]. Mishra, A., *In-plane hysteresis of permalloy nanorings: a study of micromagnetic simulation.* Indian Journal of Physics, 2015. **89**(9): p. 915-921.
[7]. Coey, J.M., *Magnetism and magnetic materials*. 2010: Cambridge university press .

محاسبات ابتدا به ساکن تک لایه CrI_3 آلاییده

محمدی ، مهناز*[۱] ; پاکیزه ، اسماعیل[۲]

[۱]استادیار، گروه فیزیک، دانشکده مکانیک، دانشگاه صنعتی قم، ایران

[۲]دانشکده نفت و گاز گچساران، دانشگاه یاسوج، گچساران ۵۶۰۰۱-۷۵۸۱۳، ایران

چکیده

تک لایه کروم تری یدید (CrI_3) که اخیراً کشف شده است، اولین آهنربای دو بعدی واقعی است. با این حال، برهمکنش آن با اکسیژن، هیدروژن و دیگر عناصر یک سوال اساسی است، که درک آن برای بررسی بیشتر پتانسیل های کاربردی آن ضروری است. در این مقاله با استفاده از نظریه ی تابعی چگالی (DFT) اسپین قطبیده خواص الکترونی و مغناطیسی نانولایه CrI_3 مورد مطالعه قرار گرفته است. محاسبات با استفاده از کد کوانتوم اسپرسو و بر مبنای شبه پتانسیل انجام گرفت. برای محاسبه جمله تبادلی در معادله شرودینگر از تقریب شیب تعمیم یافته GGA استفاده شده است. نتایج ساختار الکترونی نشان داد که این ترکیب نیمه رسانا و دارای گاف انرژی eV ۰/۸ و با مغناطش $6\ \mu_B$ می باشد.تأثیر آلایش O، H و F بر خواص الکترونی، ساختاری و مغناطیسی بررسی شد. آلایش با اتم F به طور قابل توجهی بر خواص الکترونی و مغناطیسی تک لایه CrI3 تأثیر دارد، در حالی که O و H تأثیری ناچیزی بر این خواص دارند. یافته‌های ما نشان می‌دهد که آلایش تک لایه CrI_3 خواص ساختاری، الکترونی و مغناطیسی آن را تغییر می‌دهد. بنابراین، آلایش کنترل شده می‌تواند یک راه موثر برای کنترل خواص و عملکرد تک لایه CrI3 و دیگر مواد مغناطیسی بسیار نازک باشد.

First principle study of doped CrI_3 monolayer

Mohammadi, Mahnaz[1] : Pakizeh, Esmaeil [2]

[1] Department of Physics, Faculty of Mechanical Engineering, Qom University of Technology, Qom, Iran

[2]Faculty of Petroleum and Gas, Yasouj University, Gachsaran 75813-56001, Iran

Abstract

The recently discovered chromium triiodide (CrI_3) monolayer is the first real 2D magnet. However, its interaction with oxygen and hydrogen remains an open fundamental question, an understanding of which is essential for further exploration of its application potentials. In this paper, the electronic and magnetic properties of CrI_3 monolayer have been studied using spin polarized density functional theory (DFT). Calculations were performed using the Quantum espresso code and based on pseudo potential. The Generalized Gradient Approximation (GGA) is used to calculate the exchange sentence in Schrodinger equation. We investigated the influence of O,H and F on the structural, electronic, and magnetic properties of the CrI_3 monolayer. Our findings reveal that the F in the CrI_3 monolayer enrich its structural, electronic, and magnetic properties. We have also found that both the adsorption of hydrogen and oxygen atoms neglect ably influences the electronic and magnetic properties of the monolayer. Thus, the controlled doping can be an effective way to tune properties and functionalities of the CrI3 monolayer and other ultrathin magnetic material.

PACS No ۶۵ ,۷۲ ,۷۱

مقدمه

از زمان کشف گرافن در سال ۲۰۰٤، تحقیقات بر روی انواع مواد ۲ بعدی نشان داده که این ترکیبات دارای خواص الکترونی، نوری، مکانیکی و حرارتی قابل توجهی به دلیل کاهش ابعاد هستند که موجب کاربردهای متنوعی در فناوری نانو شده است[۱-٤].

اما درک خواص مغناطیس مواد ۲ بعدی در دماهای محدود همچنان یک چالش است.

تک لایه CrI_3 به عنوان اولین آهنربای دو بعدی واقعی، به طور تجربی تولید شده است [۵-٦]. CrI_3 یک فرومغناطیس و نیمه هادی ذاتی است که به آسانی می‌توان آن را از فاز سه بعدی با یک

روش کم هزینه تولید کرد. CrI_3 به عنوان یک ماده ایده آل توجه تحقیقات زیادی را در بررسی خواص مغناطیس، اسپینترونیک، مگنتو-الکتریک، اسپینترونیک و اپتوالکترونیک به خود جلب کرده است. به طور کلی، دمای کوری پایین تک لایه CrI_3 یک مانع بزرگ در کاربردهای آن می باشد[۷].

در دهه گذشته ثابت شده است که آلایش مولکولی روشی موثر و قابل انعطاف برای تعدیل خواص الکترونی و مغناطیسی مواد دو بعدی مانند گرافن، تک لایه/نانوریبون BN، MoS_2 ، سیلیکون و تک لایه As, Sb, Bi است [۸].

بعلاوه اکسیداسیون رایج ترین نقص طبیعی موجود در مواد دو بعدی در طول ساخت یا در زمان کاربرد آنها است و اکسیداسیون کنترل شده تأثیر قابل توجهی بر ویژگی‌ها و عملکرد مواد دو بعدی موجود دارد[۹]. در این مقاله با استفاده از محاسبات ابتدا به ساکن نانولایه‌هایCrI_3 شبیه‌سازی و سپس خواص ساختاری، الکترونی و مغناطیسی آن مورد بررسی قرار گرفت. سپس این نانولایه با اتم های اکسیژن، هیدروژن و فلوئور آلایش شد و تاثیر آلایش بر کلیه خواص ذکر شده مورد بررسی قرار گرفت.

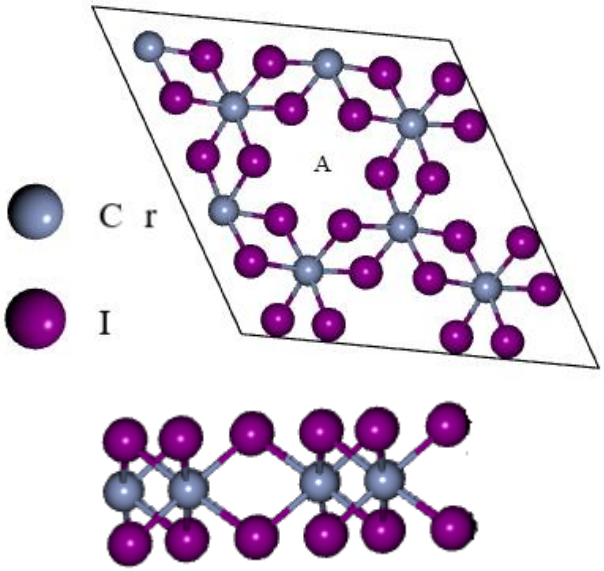
روش و جزئیات محاسبه:

محاسبات با استفاده از کد محاسباتی PWscf در چارچوب نظریه‌ی تابعی چگالی (DFT) اسپین قطبیده، با روش موج تخت و شبه پتانسیل انجام شده است[۸]. برای محاسبه‌ی پتانسیل تبادلی -همبستگی از تقریب شیب تعمیم یافته GGA و تابع PBE استفاده شد[۱۰]. انرژی قطع تابع موج ۵۰۰eV در نظر گرفته شد. در تمام محاسبات جایگاه اتم‌ها و ثابت شبکه، شرط همگرایی انرژی کل 0.0001 Ry انتخاب شد. مش‌بندی منطقه اول بریلوئن با استفاده از روش منخورست-پک با ۶*۶*۱ نقطه برای نانوصفحه انجام شد. ابرسلول اولیه از ۲ اتم **Cr** و ۶ اتم **I** تشکیل شده است و ۲۰Å خلاء برای جلوگیری از برهمکنش لایه‌ها در نظر گرفته شد. برای بررسی حالت‌های مغناطیسی از ابرسلول ۱*۲*۲ استفاده گردید.

بحث و نتایج:

نانوصفحات **CrI3** ساختار ساندویچ شده **I-Cr-I** دارد که در آن اتم های **Cr** سیستم بلوری هگزاگونال دارند. هر اتم **Cr** توسط ۶ اتم **I** در ساختار هشت وجهی احاطه شده است و هر اتم **I** با دو اتم همسایه **Cr** پیوند دارد.

پس از محاسبات بهینه ثابت شبکه حدود ۶/۹۷ Å بدست آمد(شکل ۱). همچنین طول پیوند مربوط به Cr-I، ۲/۷۳Åو ضخامت لایه (فاصله دو اتم I در لایه) ۳/۱۴ Å محاسبه شد.

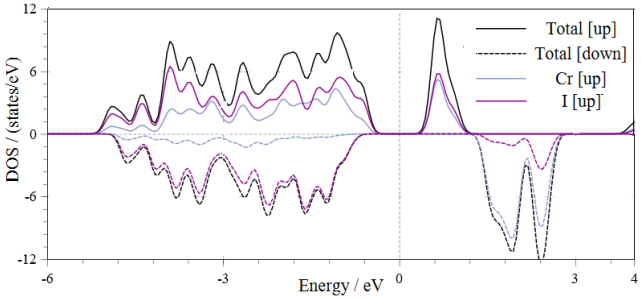


شکل ۱: ابرسلول ۱*۲*۲ نانولایه CrI_3. (بالا: نمای بالا و پایین: نما از کنار لایه)

محاسبات چگالی حالت‌ها نشان می‌دهد که این ساختار نیمه هادی با گاف ۰/۸ الکترون ولت می‌باشد (شکل۲) و چگالی حالت‌ها در هر دو کانال اسپین بالا و اسپین پایین دارای گاف انرژی هستند. همچنین نمودار نوار انرژی نشان می‌دهد که لبه‌های نوار ظرفیت و رسانش در اطراف سطح فرمی کاملاً اسپین قطبیده هستند و منحصراً توسط الکترون‌هایی با اسپین یکسان اشغال شده‌اند که نشان می‌دهد این ترکیب نیمه هادی است.

برای بررسی خواص مغناطیسی این لایه محاسبات با نظم فرومغناطیس و آنتی فرومغناطیس نیز انجام شد. نتایج نشان می‌دهد که انرژی نظم فرومغناطیس به اندازه ی ۱۴meV پایینتر می باشد.

بنابراین این لایه فرومغناطیس با مغناطش کل $6\ \mu_B$ می‌باشد که با نتایج تجربی در توافق خوبی می‌باشد[۱۱].



شکل ۲: چگالی حالات الکترونی نانولایه CrI_3 (سطح فرمی در صفر قرار دارد).

برای آلایش با اکسیژن از ابرسلول ۱*۲*۲ استفاده شد و با توجه به تقارن لایه دو جایگاه متفاوت برای اکسیژن در نظر گرفته شد. اکسیژن ۲/۵ Å در بالای اتم Cr و I قرار داده شد. البته لازم به ذکر است که اتم اکسیژن در جایگاه A (در شکل ۱) نیز قرار داده شد که در این جایگاه محاسبات به همگرایی نرسید.

برای هر دو جایگاه محاسبات بهینه صورت گرفت و انرژی جذب طبق رابطه زیر محاسبه گردید.

$$E_b = E_T(CrI_3 + O) - E(CrI_3) - E(O)$$

که در آن $E_T(CrI_3 + CrI_3)$ ، انرژی کل تک لایه‌های CrI_3 آلایش شده با اتم اکسیژن، $E(CrI_3)$، انرژی کل تک لایه CrI_3 و $E(O)$ انرژی یک اتم اکسیژن منزوی است. همین محاسبات برای F و H نیز به همین صورت انجام شد. نتایج انرژی های جذب در جدول ۱ خلاصه شده است، همانطور که مشاهده می‌شود در کلیه حالت‌ها انرژی پیوند منفی می‌باشد که حاکی از پایدار بودن موقعیت مربوطه می‌باشد. در کلیه حالت ها پایدارترین حالت زمانی است که اتم ناخالصی در بالای اتم I قرار می‌گیرد و اتم اکسیژن دارای بیشترین انرژی جذب است.

در مورد جایگاه بالای I مشاهده شد که پس از جذب هر سه نوع اتم، اتم ناخالصی حرکت کرده و با دو اتم I پیوند می دهد در حالی که در مورد جایگاه بالای Cr مشاهده شد که اتم ناخالصی در همان مکان باقی مانده و تنها با اتم Cr پیوند داده است که این امر موجب بالاتر بودن انرژی جذب در حالت دوم شده است. لازم به ذکر است که جذب در جایگاه بالای I موجب تغییر طول پیوند Cr-I شده که این تأثیرات در مورد ناخالص هیدروژن کمتر از دو اتم دیگر بوده است. جذب در جایگاه بالای Cr تأثیرقابل چشم پوشی بر خواص ساختاری داشته است.

.

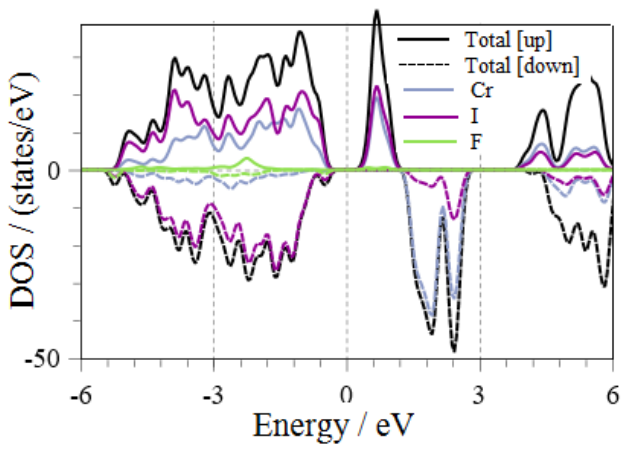
جدول ۱: انرژی جذب (eV) و مغناطش کل (μ_B)

اتم ناخالصی	بالای Cr	بالای I	مغناطش کل
o	-2.22	-2.25	6
H	-0.80	-0.80	6
F	-1.72	-2.25	5.75

.

ستون آخر جدول ۱ مغناطش کل پس از محاسبات بهینه را نشان می‌دهد. اتم‌های اکسیژن و هیدروژن پس از جذب تأثیری بر مغناطش لایه نداشته اند ولی اتم F باعث کاهش مغناطش کل شده است. نتایج حاصل از مغناطش نمونه با ناخالصی O در توافق با گزارش موجود می‌باشد[۱۲]. هیچ کدام از ناخالصی‌ها نیز باعث تغییر خاصیت فرومغناطیس نانولایه CrI_3 نشده‌اند. بررسی مقدار بار انتقال یافته با روش Mulliken نشان می‌دهد که 0.54e بار از F به لایه منتقل شده است که باعث ایجاد اوربیتال d غنی شده و بنابراین کاهش مغناطش شده است.

بدلیل اینکه اتم F بر مغناطش تأثیر داشته در این قسمت به بررسی این مورد می پردازیم. در شکل ۳ نمودار چگالی حالات جزیی رسم شده است. نتایج نشان می‌دهد افزودن ناخالصی F باعث کاهش 0.4eV گاف انرژی اسپین بالا و کاهش 0.3eV گاف انرژی اسپین پایین می شود و بنابراین باعث کم شدن گاف انرژی CrI_3 می شود ولی همچنان خاصیت نیمه رسانایی نانولایه حفظ شده است. به علاوه هیبریدشدگی بین اتم F و I بوجود آمده که نشان دهنده ی پیوند میان آنها است. حالت‌های جدید بوجود آمده در نزدیکی سطح فرمی مربوط به اوربیتال‌های p اتم F می‌باشد که وجود این حالت‌های اضافه و تغییر عدد اشغال اوربیتال d با توجه به تئوری میدان میانگین می‌تواند نشانه ای از تغییر برهمکنش تبادلی و بنابراین تغییر دمای کوری این نانولایه با حضور ناخالصی F باشد.



شکل ۳: چگالی حالات الکترونی نانولایه CrI_3 با ناخالصی F در جایگاه بالای اتم I (سطح فرمی در صفر قرار دارد).

.

نتیجه گیری

در این مقاله با استفاده از نظریه‌ی تابعی چگالی (DFT) اسپین قطبیده خواص الکترونی و مغناطیسی نانولایه CrI_3 مورد مطالعه قرار گرفته است. محاسبات با استفاده از کد کوانتوم اسپرسو و بر مبنای شبه پتانسیل انجام گرفت. نتایج ساختار الکترونی نشان داد که این ترکیب نیمه رسانا و دارای گاف انرژی ۰/۸ eV و با مغناطش ٦ μ_B می باشد. تأثیر آلایش O، H و F بر خواص الکترونی، ساختاری و مغناطیسی بررسی شد. در کلیه حالت‌ها انرژی جذب منفی می‌باشد که نشان می‌دهد سیستم پایدار است. آلایش با اتم F به طور قابل توجهی بر خواص الکترونی و مغناطیسی تک لایه CrI_3 تأثیر دارد، در حالی که O و H تأثیری ناچیزی بر این خواص دارند. آلایش با اتم F موجب کاهش مغناطش نانولایه می‌شود. همچنین در ساختار الکترونی حالت‌های جدیدی در نزدیکی سطح فرمی بوجود آمده و عدد اشغال اوربیتال d تغییر یافته که با توجه به تئوری میدان میانگین می‌تواند نشانه‌ای از تغییر برهمکنش تبادلی و بنابراین تغییر دمای کوری این نانولایه با حضور ناخالصی F باشد.

مرجع‌ها

[1] Klein, D. R.; MacNeill, D.; Lado, J. L; Soriano, D.; Navarro-Moratalla, E. ; Watanabe, K. ; Taniguchi, T.; Manni, S.;Canfield, P.; Ferna´ndez-Rossier J. ; and Jarillo-Herrero, P.Probing magnetism in 2D van der Waals crystalline insulators via electron tunneling, Science 360 (2018)1218–1222.

[2] Huang, B. ; Clark, G.; Navarro-Moratalla, E.; Klein, D. R.; Cheng, R. ; Seyler, K. L. ; Zhong, D.; Schmidgall, E.; McGuire, M. A.; Cobden, D. H. ; Yao, W.; Xiao, D.; Jarillo-Herrero P.; and Xu, X. Layer-dependent ferromagnetism in a van der Waals crystal down to the monolayer limit, Nature 546(7657) (2017) 270–273.

[3] Geim A. K.; and Novoselov, K. S. The rise of graphene, Nat. Mater 6(3) (2007) 183–191.

[4] Geim, A. K. Graphene: Status and Prospects, Science 324 (2009)1530–1534.

[5] Wang, H.; Eyert V.; and Schwingenschlogl, U. Electronic structure and magnetic ordering of the semiconducting chromium trihalides CrCl3, CrBr3, and CrI3, J. Phys.: Condens. Matter 23(11) (2011)116003.

[6] Jr. J. F. D.; and Olson, C. E.; Magnetization, Resonance, and Optical Properties of the Ferromagnet CrI3, J. Appl. Phys 36(3) (1965) 1259–1260.

[7] Huang, B. ; Clark, G.; Navarro-Moratalla, E.; Klein, D.R. ; Cheng, R.; Seyler, K.L. ; Zhong, D. ; Schmidgall, E.; McGuire, M.A. ; Cobden, D.H. ; et al., Nature 546 (2017) 270.

[8] Guss, P.; Foster, M. E. ; Wong, B. M. ; Doty, F. P. ; Shah, K.; Squillante, M. R. ; Shirwadkar, U. ; Hawrami, R. ; Tower J.; and Yuan, D. Results for aliovalent doping of CeBr3 with Ca2+, J. Appl. Phys 115(3) (2014) 034908.

[9] Gr¨onke, M. ; Buschbeck, B. ; Schmidt, P.; Valldor, M. ; Oswald, S.; Hao, Q. ; Lubk, A. ; Wolf, D.; Steiner, U.; B¨uchner B.; and Hampel, S. Adv. Mater. Interfaces 6(2019) 1901410.

[10] Kohn, W.; Sham, L. J. Self –Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects. Phys. Rev. *A* 140(1965) 1133-1138.

[11] Rajeswaran, B.; Khomskii, D. I. ; Zvezdin, A. K. ; Rao, C. N. R.; and Sundaresan, A. Field-induced polar order at the Ne´el temperature of chromium in rare-earth orthochromites: interplay of rare-earth and Cr magnetism, Phys. Rev. B:Condens. Matter Mater. Phys 86(21) (2012) 214409.

[12] Rassekh, M.; Hec, J.; Farjami, S.; Juan, S,; Palacios, J. Remarkably enhanced Curie temperature in monolayer CrI3 by hydrogen and oxygen adsorption: A first-principles calculations. Computational Materials Science 183 (2020) 109820.

اثر مجاورت در سیستم شیشه اسپینی و فرومغناطیس جفت شده

ایزدی ، فاطمه ؛ سپهری نیا، رضا

دانشکده فیزیک دانشگاه تهران ، انتهای خیابان کارگر شمالی ، تهران

چکیده

سیستم متشکل از فرومغناطیس و شیشه اسپینی که به یکدیگر جفت شده اند را مورد مطالعه قرار داده ایم. انرژی آزاد این سیستم بر حسب چهار پارامتر مغناطش و پارامتر نظم ادواردز-اندرسون در هر زیرسیستم بیان شده است. فازهای مختلف سیستم را بر حسب این پارامترها برای شدت‌های مختلف جفت شدگی تعیین می-کنیم. نتایج بدست آمده نشان می‌دهد فازهای فرومغناطیس و شیشه اسپینی هم‌زمان در دو زیرسیستم رخ می‌دهند. مقدار پارامتر نظم در هر زیر سیستم متفاوت است که میزان نظم موجود در هر یک را نشان می‌دهد.

واژه های کلیدی: *فرومغناطیس-شیشه اسپینی-نمودار فاز.*

Magnetic proximity in a coupled Ferromagnet-Spin glass system

Izadi, Fateme; Sepehrinia, Reza

Department of Physics, University of Tehran, Tehran,

Abstract

We have studied the system consisting of a ferromagnet and a spin glass coupled to each other. The free energy of this system is expressed in terms of four magnetization and the Edwards-Anderson order parameters in each subsystem. We determine the different phases of the system based on these parameters for different coupling intensities. The results show that the ferromagnetic and spin glass phases occur simultaneously in two subsystems. The value of the order parameter in each subsystem is different, which indicates the amount of order in each subsystem.

***Keywords**: Ferromagnet-Spin glass-Phase diagram*

مقدمه

ترکیب مواد با ویژگی‌های متفاوت مغناطیسی کاربردهای فراوان در الکترونیک و اسپینترونیک برای ضبط مغناطیسی و طراحی دستگاه‌هایی مانند شیرهای اسپینی و شبه اسپینی، اتصالات تونلی مغناطیسی، حسگرهای مغناطیسی و غیره دارند. خواص گوناگون نوین در این سیستم‌های ترکیبی ناشی از اثرات سطحی است. از جمله بایاس تبادلی و مجاورت مغناطیسی، پدیده های مهمی هستند که در بسیاری از این سیستم‌ها مشترک هستند[۱].

بایاس تبادلی یک ناهمسانگردی مغناطیسی یک جهتی است که ابتدا در سیستم جفت شده فرومغناطیس و پادفرومغناطیس مشاهده شد [۲] و تا کنون در انواع سیستم‌های دیگر مشاهده شده است و به عنوان تثبیت کننده در هدهای ضبط مغناطیسی و شیرهای اسپینی استفاده شده است[۵-۳]. مجاورت مغناطیسی یک پدیده نسبتاً کلی است که قادر به القا و تغییر خواص مغناطیسی مختلف مانند دمای گذار به فازهای منظم و غیره است که کاربردهای مختلفی نیز دارد.

علیرغم تاثیر تکنولوژیکی، درک نظری این پدیده‌ها برای مدت طولانی چالش‌های زیادی را ایجاد کرده است[۱۱-۹] . مدل های ابتدایی بایاس تبادلی در پیش‌بینی کمّی مشاهدات تجربی ناموفق بودند . در طول سال ها مدل های دقیق‌تری برای توضیح این پدیده معرفی شدند. یکی از عواملی که به نظر می‌رسید نقش مهمی ایفا می‌کند، ناخالصی‌ها و بطور کلی بی‌نظمی در این سیستم هاست[۱۲]. این مشاهده منجر به این حدس شد که امکان مشاهده بایاس تبادلی در لایه فرومغناطیس در مجاورت با یک شیشه اسپینی نیز رخ می‌دهد. این پدیده در چندین آزمایش و شبیه سازی های عددی تایید شد. کارهای تجربی بعدی ویژگی جالبی را در دولایه فرومغناطیس - شیشه اسپینی نشان داد که علامت بایاس تبادلی بسته به ضخامت لایه شیشه اسپینی تغییر می‌کند[۱۳]. اگرچه مطالعات بسیار تجربی و نظری در مورد بایاس تبادلی انجام شده است اما همچنان موضوع تحقیق گسترده است.

مطالعه نظری مجاورت مغناطیسی نیز برای چندین سیستم انجام شده است[۱]، اما توجه بسیار کمتری به این پدیده در مقایسه با اثر بایاس تبادلی شده است. بویژه اثر مجاورت در یک سیستم فرومغناطیس- شیشه اسپینی جفت شده با توجه به نتایج تجربی به دست آمده و ویژگی‌های جالب این سیستم که در بالا به آن اشاره شد، حائز اهمیت است. با توجه به کارهای تجربی اخیر، در این تحقیق یک مطالعه نظری بر روی نمودار فاز تعادلی سیستم فرومغناطیس- شیشه اسپینی جفت شده انجام داده ایم. ما از یک مدل کمینه متشکل از یک فرومغناطیس آیزینگ با برد بینهایت و شیشه اسینی شرینگتون-کرک‌پاتریک استفاده می‌کنیم که به یکدیگر جفت شده‌اند.

مدل و هامیلتونی

هامیلتونی سیستم مورد مطالعه عبارتست از (۴.۱۱)

$$H = -\sum_{i<j} J_{ij}\sigma_i\sigma_j - J_I\sum_{i,j}\tau_i\tau_j - D\sum_i \sigma_i\tau_i \quad (۱)$$

τ_i و σ_i اسپین‌های آیزینگ (± 1) هستند و J_{ij} برهم‌کنش تصادفی با تابع توزیع

$$P(J_{ij}) = \frac{1}{J_1}\sqrt{\frac{N}{2\pi}}\exp\left(-\frac{N}{2J_1^2}\left(J_{ij}-\frac{J_0}{N}\right)^2\right) \quad (۲)$$

است که $J_0 > 0$ میانگین و J_1 واریانس است $J_I > 0$.ثابت و Dبرهم‌کنش بین هر اسپین از مدل آیزینگ با یک اسپین از مدل شرینگتون-کرک‌پاتریک است.

محاسبه انرژی آزاد

با استفاده از روش رپلیکا[1] انرژی آزاد سیستم را محاسبه می‌کنیم. برای به‌دست آوردن انرژی آزاد با روش رپلیکا، ابتدا باید متوسط پیکربندی توان n ام تابع پارش محاسبه شود. انرژی آزاد بر حسب چهار پارامتر نظم بیان می‌شود: m_i مغناطش مدل آیزینگ، m_s مغناطش مدل شرینگتون-کرک‌پاتریک ، q_i پارامتر نظم شیشه‌اسپینی برای مدل آیزینگ و q_s پارامتر نظم شیشه‌اسپینی برای مدل شرینگتون-کرک‌پاتریک

$$-n\beta f_{eff} = -\frac{\beta^2 J_1^2}{2}\sum_{\alpha<\beta} q_{\alpha\beta}^{s^2} - \frac{\beta J_0}{2}\sum_\alpha m_\alpha^{s^2} - \frac{\beta^2 J_2^2}{2}\sum_{\alpha<\beta} q_{\alpha\beta}^{i^2} - \frac{\beta J_I}{2}\sum_\alpha m_\alpha^{i^2} + \frac{\beta^2(J_1^2+J_2^2)n}{4} + \log \mathrm{Tr}\exp\Big(\beta^2 J_1^2\sum_{\alpha<\beta} q_{\alpha\beta}^s\sigma_\alpha\sigma_\beta + \beta J_0\sum_\alpha m_\alpha^s\sigma_\alpha + \beta^2 J_2^2\sum_{\alpha<\beta} q_{\alpha\beta}^i\tau_\alpha\tau_\beta + \beta J_I\sum_\alpha m_\alpha^i\tau_\alpha + \beta D\sum_\alpha \sigma_\alpha\tau_\alpha\Big)$$

با فرض تقارن رپلیکا داریم

$$\sum_{\alpha<\beta} q_{\alpha\beta}^2 = \frac{n(n-1)}{2}q^2 \xrightarrow{n\to 0} -n\frac{q^2}{2}$$

$$\sum_\alpha m_\alpha^2 = nm^2$$

با بازنویسی جمع $\sum_{\alpha<\beta}$ و در نتیجه خطی کردن جملات $(\sum_\alpha \sigma_\alpha)^2$ و $(\sum_\alpha \tau_\alpha)^2$ با استفاده از انتگرال گاوسی انرژی آزاد مؤثر به شکل زیر به‌دست می‌آید

$$-\beta f_{eff} = \frac{1}{4}\beta^2 J_1^2(1-q_s)^2 - \frac{1}{2}\beta J_0 m_s^2 - \frac{1}{2}\beta J_I m_i^2 + \int \mathrm{D}z_1 \log[2A] + \frac{1}{4}\beta^2 J_2^2(1-q_i)^2 + \beta^2 q_i J_2^2 \int \mathrm{D}z_1 \frac{\cosh(2\beta J_1\sqrt{q_s}z_1 + 2\beta J_0 m_s) + \cosh(2\beta D)}{A^2}$$

که در آن

$$A = e^{\beta D}\cosh(\beta J_1\sqrt{q_s}z_1 + \beta J_0 m_s + \beta J_I m_i)$$
$$+e^{-\beta D}\cosh(\beta J_1\sqrt{q_s}z_1 + \beta J_0 m_s - \beta J_I m_i)$$

شرط اکسترمم شدن انرژی آزاد نسبت به متغیرهای q_i, m_s, m_i و q_s معادلات حالت را می‌دهد

$$m_s = \int Dz\ \frac{B_+}{A} \qquad m_i = \int Dz\ \frac{B_-}{A}$$
$$\beta J_1(1-q_s) = \int Dz\ \frac{B_+}{A}\frac{z}{\sqrt{q_s}}$$
$$\frac{1}{2}(1-q_i) =$$
$$\int Dz\ \frac{\cosh(2\beta J_1\sqrt{q_s}z_1 + 2\beta J_0 m_s) + \cosh(2\beta D)}{A^2}$$

که در این معادلات

$$B_\pm = e^{\beta D}\sinh(\beta J_1\sqrt{q_s}z + \beta J_0 m_s + \beta J_I m_i)$$
$$\pm e^{-\beta D}\sinh(\beta J_1\sqrt{q_s}z + \beta J_0 m_s - \beta J_I m_i)$$

برای اطمینان از درستی نتایج، در دو حد جفت‌شدگی بینهایت و صفر آنها را بررسی می‌کنیم. با قرار دادن $D = 0$ در معادلات بالا، مطابق انتظار دو مدل از هم جدا می‌شوند و رفتار هر یک مانند حالت استاندارد است: مدل آیزینگ بردنامتناهی یک فاز فرومغناطیس دارد که در $T = J_0$ به فاز پارامغناطیس گذار می‌کند و معادلات حالت q_i و m_i همان معادلات برای مدل آیزینگ می‌شود :

$$m_i(D=0) = \tanh\beta J_I m_i$$
$$q_i(D=0) = \tanh^2\beta J_I m_i$$

و مدل شرینگتون-کرک‌پاتریک نیز سه فاز فرومغناطیس، پارامغناطیس و شیشه‌اسپینی دارد و پارامترهای نظم

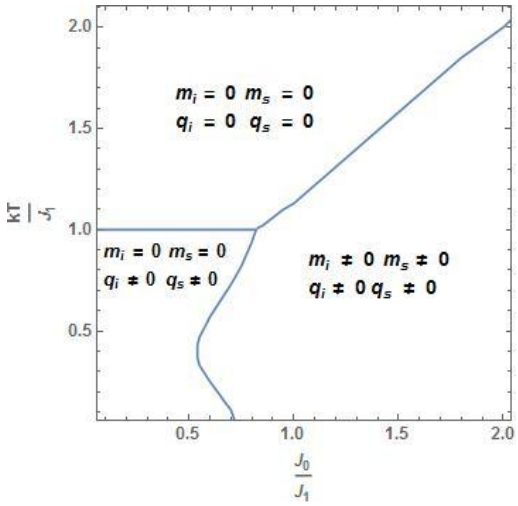
$$m_s(D=0) = \int Dz\tanh(\beta J_1\sqrt{q_s}z + \beta J_0 m_s)$$
$$q_s(D=0) = \int Dz\tanh^2(\beta J_1\sqrt{q_s}z + \beta J_0 m_s)$$

در طرف مقابل در حد $D \to \infty$ این سیستم تبدیل به یک مدل شرینگتون-کرک‌پاتریک می‌شود که میانگین توزیع برهم‌کنش‌های تصادفی $J_0 + J_I$ است و معادلات حالت :

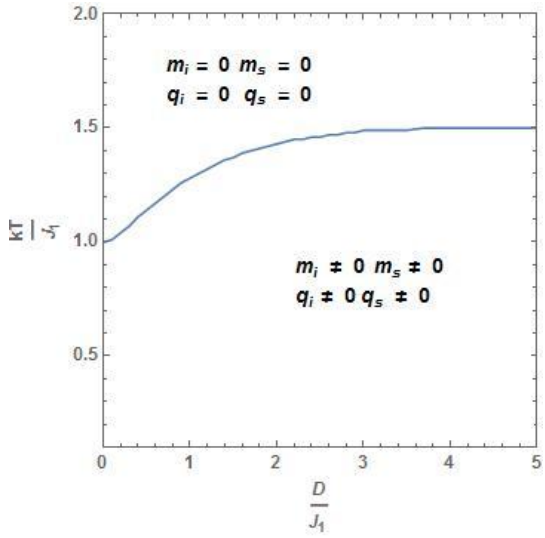
$$m_s(D\to\infty) = m_i(D\to\infty) =$$
$$\int Dz\tanh(\beta J_1\sqrt{q_s}z + \beta J_0 m_s + \beta J_I m_i) = m$$
$$q_s(D\to\infty) = q_i(D\to\infty) =$$
$$\int Dz\tanh^2(\beta[J_1\sqrt{q_s}z + (J_0 + J_I)m])$$

نتایج

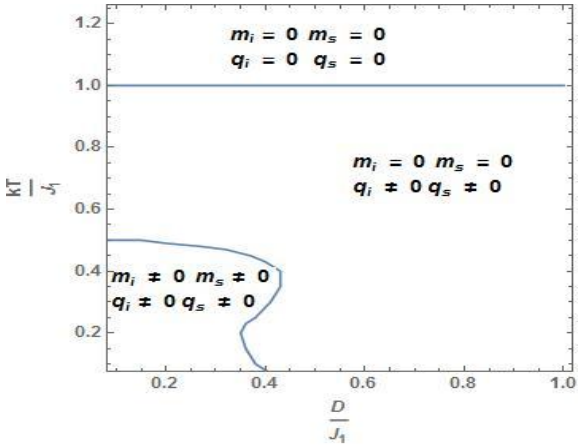
اکنون با حل همزمان چهار معادله اصلی با جفت‌شدگی دلخواه و می‌توانیم نمودار فاز این سیستم را به‌دست آوریم.



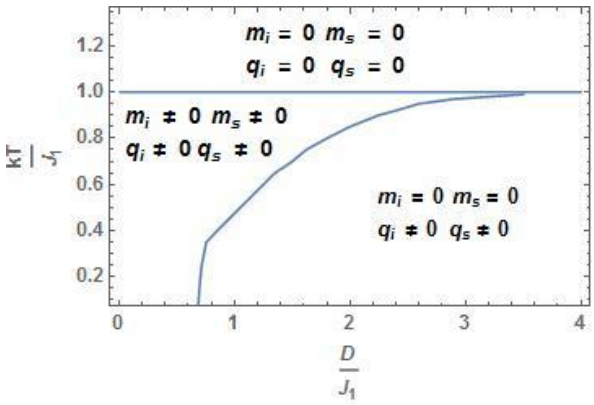
شکل ۱ : نمودار فاز برای مقادیر J_I/J_1 و D/J_1 برابر با ۰.۵



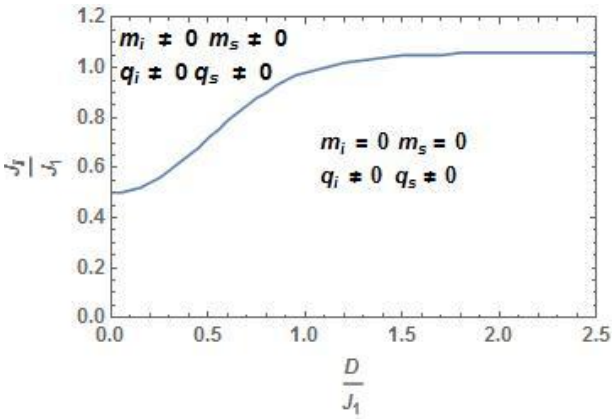
شکل ۲ : نمودار فاز برای مقادیر J_0/J_1 برابر ۰.۵ و J_I/J_1 برابر ۱



شکل ۳ : نمودار فاز برای مقادیر J۰/J۱ برابر ۰.۵ و J۰/J۱ برابر ۰.۵



شکل ٤ : نمودار فاز برای مقادیر J۰ برابر صفر و J۱/J۱ برابر ۱



شکل ۵ : نمودار فاز برای مقادیر J۰ برابر صفر و kT/J۱ برابر ۰.۵

نتیجه گیری

سیستم جفت شده فرومغناطیس–شیشه اسپینی مورد مطالعه قرار گرفت. انرژی آزاد سیستم با استفاده از روش رپلیکا محاسبه شد و پارامترهای نظم به دست آمد. برای مقادیر مختلف پارامترها، نمودارهای فاز در شکل ها نشان داده شده است. نتایج بدست آمده نشان می‌دهد دمای گذار بین فاز های مختلف در اثر جفت شدگی دو زیرسیستم، تغییر می‌کند. بخصوص مرز میان فازهای فرومغناطیس و شیشه اسپینی به مقدار جفت‌شدگی سیستم حساس است و دچار تغییر شکل زیادی می‌گردد. فازهای مختلف در زیر سیستمها هم‌زمان رخ می‌دهند.

مرجع‌ها

[۱] P. Manna and S. Yusuf, Physics Reports ٥٣٥, ٦١ (٢٠١٤).
[۲] W. H. Meiklejohn and C. P. Bean, Physical review ١٠٢, ١٤١٣ (١٩٥٦).
[۳] M. Kishimoto, T. Sueyoshi, J. Hirata, M. Amemiya, and F. Hayama, Journal of Applied Physics ٥٠, ٤٥٠ (١٩٧٩).
[٤] A. Berkowitz, F. Parker, E. Hall, and G. Podolsky, IEEE Transactions on Magnetics ٢٤, ٢٨٧١ (١٩٨٨).
[٥] W. C. Cain and M. H. Kryder, Journal of applied physics ٦٧, ٥٧٢٢ (١٩٩٠).
[٦] O. Rader, E. Vescovo, J. Redinger, S. Bl¨ugel, C. Carbone, W. Eberhardt, and W. Gudat, Physical review letters ٧٢, ٢٢٤٧ (١٩٩٤).
[٧] T. Yang, B. Liu, F. Pan, J. Luo, and K. Tao, Journal of Physics: Condensed Matter ٧, ١١٢١ (١٩٩٥).
[٨] M. Tomaz, W. Antel Jr, W. O'Brien, and G. Harp, Journal of Physics: Condensed Matter ٩, L١٧٩ (١٩٩٧).
[٩] M. Kiwi, Journal of Magnetism and Magnetic materials ٢٣٤, ٥٨٤ (٢٠٠١).
[١٠] F. Radu and H. Zabel, Magnetic heterostructures pp. ٩٧–١٨٤ (٢٠٠٨).
[١١] J. Nogu´es and I. K. Schuller, Journal of Magnetism and Magnetic Materials ١٩٢, ٢٠٣ (١٩٩٩).
[١٢] T. Schulthess and W. Butler, Physical review letters ٨١, ٤٥١٦ (١٩٩٨).
[١٣] M. Ali, P. Adie, C. H. Marrows, D. Greig, B. J. Hickey, and R. L. Stamps, Nature Materials ٦, ٧٠ (٢٠٠٧).

بررسی ویژگی‌های ساختاری و ابررسانایی ابررسانای دمای بالا $Bi_2Sr_2Ca_2Cu_3O_{10+\theta}$ با افزودن دی‌اکسید تیتانیوم

فلاح آرانی، حسام؛ شهبازطهرانی، فاطمه؛ ریاحی نوری، نسترن؛ کوهانی، حسین

گروه پژوهشی مواد غیرفلزی، پژوهشگاه نیرو، تهران، ایران

چکیده

در این پژوهش به بررسی تاثیر نانوذرات دی‌اکسید تیتانیوم بر ویژگی‌های ساختاری و ابررسانایی ابررسانای دمای بالا $Bi_{1.6}Pb_{0.4}Sr_2Ca_2Cu_3O_{10+\theta}$ (Bi-۲۲۲۳) پرداخته شده است. برای این منظور ترکیب ابررسانای Bi-۲۲۲۳ به روش سل-ژل سنتز شده و در ادامه، فرآیند اصلاح سطح نانوذرات دی‌اکسید تیتانیوم، توسط واکنش شیمیایی با تولوئن دی ایزوسیانات (TDI) صورت گرفت. به منظور مشخصه یابی نمونه‌ها و بررسی اثر نانوذرات دی اکسید تیتانیوم بر ویژگی‌های ساختاری و ابررسانایی ترکیبات، اندازه‌گیری‌های پراش اشعه X، پذیرفتاری مغناطیسی و منحنی هیسترزیس انجام شد. برطبق تحلیل الگوی پراش اشعه X با استفاده از نرم‌افزار MAUD، درصد شکل گیری فاز مطلوب ابررسانایی Bi-۲۲۲۳ با اضافه کردن نانوذرات دی اکسید تیتانیوم کاهش یافت. به علاوه، براساس اندازه‌گیری‌های مغناطیسی، دمای گذار ابررسانایی با افزایش درصد نانوذرات کاهش یافته است. همچنین، اضافه نمودن نانو ذرات بر پهنای حلقه هیسترزیس تاثیر گذاشته و ترکیب با ۰٫۲ درصد وزنی، دارای بیشترین مقدار مغناطش پذیری، پهنای حلقه هیسترزیس و چگالی جریان بحرانی درون دانه‌ای در میان ترکیبات سنتز شده است.

The investigation of structural and superconducting properties of high-temperature superconductor $Bi_2Sr_2Ca_2Cu_3O_{10+\theta}$ with addition of titanium dioxide

Fallah Arani, Hesam; Shahbaz Tehrani, Fatemeh; Riahi-Noori, Nastaran; Koohani, Hossein

Non-Metallic Materials Research Group, Niroo Research Institute (NRI), Tehran, Iran

Abstract

In this study, the effect of titanium dioxide nanoparticles on structural and superconducting properties of high-temperature superconductor $Bi_{1.6}Pb_{0.4}Sr_2Ca_2Cu_3O_{10+\theta}$ (Bi-2223) has been investigated. First, the Bi-2223 superconductor has been synthesized using the sol-gel method, and titanium dioxide nanoparticles have been modified by toluene 2-4 diisocyanate (TDI). The X-ray diffraction and magnetic measurements have been performed to study the synthesized sample. Based on the analysis of X-ray diffraction patterns by MAUD software, the addition of titanium dioxide nanoparticles decreased the formation of the desired Bi-2223 superconducting phase. In addition, according to the magnetic measurements, the superconductivity transition temperature has reduced with the increase of the nanoparticles. Also, the addition of nanoparticles affected the hysteresis loop width, and the compound with 0.2wt.% had the maximum magnetization, hysteresis loop width, and intra-granular critical current density.

PACS No. 74, 81

مقدمه

ابررسانای سرامیکی پایه بیسموت (BSCCO) با فرمول عمومی $Bi_2Sr_2Ca_{n-1}Cu_nO_{2n+4+x}$ از مهم‌ترین طبقه‌بندی‌های ابررساناهای دما بالا است که دارای ساختارهای لایه‌ای بوده که خواص ابررسانایی بسته به تعداد صفحات اکسید مس تغییر می‌کند. ترکیبات BSCCO دارای ساختارهای مختلفی می‌باشند که دمای بحرانی آن‌ها، از ۲۰ کلوین برای فاز Bi-۲۲۰۱ (n=۱)، ۸۵ کلوین برای فاز Bi-۲۲۱۲ (n=۲) و ۱۱۰ کلوین برای فاز Bi-۲۲۲۳ (n=۳) متغیر است. روش های سنتز مختلفی برای ساخت ترکیبات BSCCO وجود دارد و سنتز دشوار Bi-۲۲۲۳ به واسطه طبیعت متنوع واکنش‌پذیری مولفه‌های اکسیدی سیستم BSCCO است که منجر به تشکیل فازهای اکسیدی ناخواسته در حین سنتز ترکیبات ابررسانای BSCCO می‌شود و در نمونه تولیدی همواره ترکیبی از فازهای Bi-۲۲۰۱، Bi-۲۲۱۲ و Bi-۲۲۲۳ قابل مشاهده است [۱]. به علاوه، اتصال ضعیف بین دانه‌ها، ویژگی‌های میخکوبی ضعیف، خواص مکانیکی ضعیف، کاهش سریع چگالی جریان بحرانی در میدان‌های قوی از دیگر مشکلاتی است که محققین سعی در برطرف کردن آن دارند، تا با شکل‌گیری ساختار دانه‌ای بهتر چگالی جریان بحرانی افزایش یابد. به‌طور کلی افزودن نانوذرات نقش مهمی در کنترل خواص ابررسانایی، تغییر ویژگی‌های فیزیکی

ساختارهای لایه‌ای ابررساناها و افزایش سطح دیاگرام ابررسانایی دارند. این افزودنی‌ها اگر مراکز میخکوبی مناسبی را برای حرکت گردشاره‌ها ایجاد کنند، چگالی جریان بحرانی، با افزایش دما و افزایش میدان مغناطیسی کاهش کم‌تری خواهد داشت [۲,۳].

بر این اساس، در این تحقیق به بررسی نقش افزودن نانوذرات دی‌اکسید تیتانیوم بر خواص ساختاری و ابررسانایی ابرسانای Bi-۲۲۲۳ با هدف بهبود احتمالی خواص ابررسانایی نظیر دمای بحرانی و چگالی جریان بحرانی و همچنین بهبود کاربردهای این ماده پرداخته شده است.

آزمایشات تجربی

برای سنتز ترکیب ابررسانای سرامیکی به روش سل-ژل با فرمول استوکیومتری $(Bi_{1.66}Pb_{0.34})Sr_2Ca_2Cu_3O_{10+x}$، به یک محلول پایه و یک محلول مواد نیاز است که محلول مواد شامل پودرهای (با خلوص ۹۹ درصد) نیترات بیسموت، نیترات سرب، نیترات استرانسیوم، نیترات کلسیم و نیترات مس هستند. برای تشکیل محلول مواد ابتدا آب دیونیزه در بشر ریخته شده و روی هم‌زن مغناطیسی قرارگرفت. پس از اینکه دمای آب افزایش یافت، نیترات بیسموت توزین شده، بتدریج به آب در حال چرخش افزوده شد. برای بالا بردن میزان انحلال نمک نیترات بیسموت، اسید نیتریک توسط بورت به محلول در حال تشکیل افزوده شد. پس از افزودن اسید نیتریک، محلول شفاف بی‌رنگی حاصل شد. pH محلول در این مرحله کمتر از ۳ بود. سپس نیترات مس توزین شد و بتدریج به محلول در حال چرخش در دمای ۵۰°C اضافه شد و محلول شفافی به رنگ آبی روشن حاصل شد. بعد از آن نیترات استرانسیوم به محلول فوق اضافه شد. نمک نیترات استرانسیوم نیز با انحلال بالا در محلول حل شد و محلول آبی روشن شفاف ظاهر شد. سپس نیترات سرب و نیترات کلسیم به ترتیب به محلول اضافه شد و هر دو نمک سریعاً حل شدند. محلول مواد نهایی به رنگ آبی روشن شفاف بدست آمد.

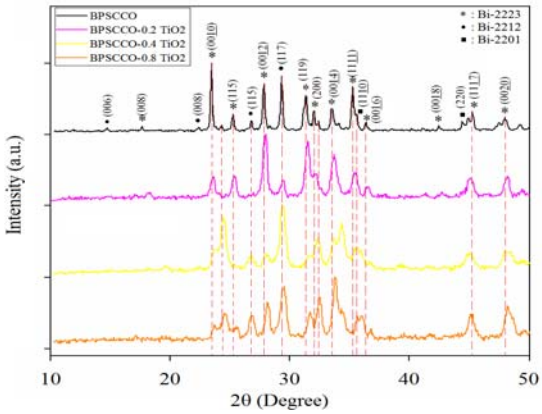
محلول پایه شامل اتیلن دی آمین تترا استیک اسید، اتیلن گلیکول، آمونیاک و آب مقطر بوده و برای تشکیل محلول پایه، اتیلن گلیکول به آب دیونیزه در دمای ۵۰°C اضافه شد. آنگاه اتیلن دی آمین تترا استیک اسید بتدریج به محلول اضافه شد. برای انحلال آن آمونیاک توسط بورت محلول ریخته شد. پس از افزودن آمونیاک، اتیلن دی آمین تترا استیک اسید بطور کامل در آب و اتیلن گلیکول حل شد و محلول بی رنگ شفافی بدست آمد. pH محلول اندازه‌گیری شد که مقدار آن ۵ بود. در این مرحله محلول پایه نیز تشکیل شد. زمانی که دمای محلول پایه به ۸۰°C رسید (در حالی‌که محلول در حال چرخش بود)، محلول مواد توسط بورت به آن اضافه شد. برای جلوگیری از رسوب ذرات جامد و تعلیق آنها آمونیاک توسط بورت دیگری به درون محلول ریخته شد و در نهایت محلول شفافی به رنگ آبی پررنگ بدست آمد. pH نهایی محلول معادل ۳ بود. پس از ۱۵ دقیقه ژل بسیار رقیق شفاف آبی رنگی حاصل شد. در این مرحله، محلول از روی هم‌زن مغناطیسی و از حالت چرخش خارج شد و درون حمام روغن در دمای ۱۲۰°C به مدت ۵ ساعت قرار گرفت. سپس دمای حمام به ۱۶۰°C افزایش یافت. پس از ۳۶ ساعت ژل به‌طور کامل خشک شد و ساختار اسفنجی شکلی به‌دست آمد. ژل خشک شده توسط هاون عقیق به مدت ۲ ساعت بطور کامل ریزدانه شد. پودر ریزدانه حاصل درون بوته آلومینایی ریخته شد و فرایند کلسینه کردن روی آن انجام شد. مدت زمان لازم برای فرآیند کلسیناسیون ۲۴ ساعت و آهنگ حرارت دهی ۵ درجه سانتی گراد بر دقیقه بوده و نمونه در دمای ۸۲۰°C به مدت ۱۲ ساعت کلسینه شد. بعد از اولین مرحله کلسینه کردن پودرهای به‌هم چسبیده به مدت ۱ ساعت آسیاکاری شدند تا کلوخه‌های ایجاد شده شکسته شود و پودر همگنی برای انجام مرحله دوم کلسینه کردن آماده شود. مرحله دوم کلسینه کردن براساس رژیم حرارتی مرحله اول انجام پذیرفت.

به علاوه، در این تحقیق عامل‌دار کردن نانوذرات دی اکسید تیتانیوم (TiO_2) با قطر میانگین ۳۰ نانومتر با گروه‌های عاملی هیدروکسیل به کمک تولوئن ۲-۴ دی‌ایزوسیانات (TDI) تقطیر شده و تولوئن خشک، انجام شد. این ذرات در دمای ۱۱۰ °C به مدت ۱۲ ساعت خشک شدند و سپس ۳ گرم نانو ذرات TiO_2 و ۳٫۱۲ گرم TDI در ۵۰ میلی‌لیتر تولوئن خشک به کمک حمام اولتراسونیک به مدت ۱۰ الی ۱۵ دقیقه پخش شد. مخلوط واکنش روی هم‌زن مغناطیسی در دمای ۹۵ °C به مدت ۶ ساعت قرارگرفته و در ادامه به کمک سانتریفیوژ جداسازی می‌شود. پودر

بدست آمده با تولوئن بدون آب، شسته شده تا TDI واکنش نکرده و یا TDI جذب شده روی سطح به صورت فیزیکی از بین روند. پودر دی اکسید تیتانیوم عامل‌دار شده در خشک‌کن خلا در دمای ۸۰°C به مدت ۲٤ ساعت خشک شد. پس از این مرحله، نانوذرات TiO_2، با درصدهای گوناگونی (٪۰/۰، ٪۰/۲، ٪۰/٤ و٪۰/۸) به پودر ابررسانا افزوده شده و به مدت ۲ ساعت در اتانول آسیاکاری شدند. در نهایت، برای دستیابی به کامپوزیت های نهایی، پودرهای آسیاکاری شده به شکل قرص درآمده و برای انجام فرآیند تف‌جوشی به مدت ۱۰۰ ساعت در دمای ۸۵۰°C قرارگرفتند، تا کامپوزیت‌های TiO_2 (۰/۰-۰/۸) – Bi-۲۲۲۳ بدست آید.

بحث و بررسی

در شکل ۱ الگوی XRD ترکیبات Bi-۲۲۲۳ همراه با مقادیر مختلف نانوذرات دی اکسید تیتانیوم (x=۰/۰-۰/۸ Wt%) نشان داده شده است. در الگوهای پراش، قله‌های مربوط به فازهای ابررسانایی Bi-۲۲۲۳، Bi-۲۲۱۲ و Bi-۲۲۰۱ مشخص شده و هیچ



شکل ۱. الگوی XRD ترکیبات سنتز شده

قله اضافی نشان دهنده واکنش بین Ti با عناصر اولیه Bi-۲۲۲۳ در حد تشخیص الگوی XRD وجود ندارد. برطبق نتایج بدست آمده از نرم افزار MAUD، درصد شکل‌گیری فاز Bi-۲۲۲۳، فازهای ثانویه Bi-۲۲۱۲ و Bi-۲۲۰۱ و ثابت‌های شبکه در کامپوزیت‌های ابررسانایی در جدول ۱ آورده شده است. برطبق نتایج جدول، افزودن مقادیر کم (۰/۲ درصد وزنی) نانوذرات بر شکل گیری فاز مطلوب ابررسانایی Bi-۲۲۲۳ تاثیر چندانی نداشته و افزودن مقادیر بالاتر نانو ذرات درصد شکل‌گیری فاز مطلوب Bi-۲۲۲۳ را کاهش می‌دهد. به‌علاوه، پارامترهای شبکه ترکیبات افزوده شده، تغییری

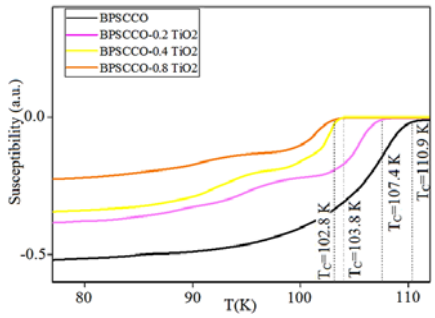
جدول۱. مشخصات ساختاری ترکیبات سنتز شده

x(wt%) TiO_2-NP	$f_{(2223)}$	$f_{(2212)}$	$f_{(2201)}$	a≈b(Å)	c(Å)
۰/۰	~۸۹	~۹	~۲	۳/۸۲۳(۱)	۳۷/۰۷٤(٤)
۰/۲	~۸۸	~۹	~۳	۳/۸۲۳(۱)	۳۷/۰۷٤(۲)
۰/٤	~۸۲	~۱۲	~٦	۳/۸۲۳(۳)	۳۷/۰۷٤(٤)
۰/۸	~۷۷	~۱۳	~۱۰	۳/۸۲۳(۲)	۳۷/۰۷٤(٥)

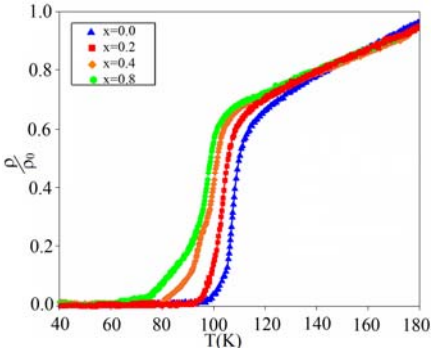
نسبت به نمونه خالص Bi-۲۲۲۳ ندارد. بنابراین می‌توان گفت که دی اکسید تیتانیوم به ساختار شبکه Bi-۲۲۲۳ وارد نشده است.

شکل ۲ منحنی پذیرفتاری مغناطیسی کامپوزیت‌های ابررسانایی سنتزشده را بر حسب دما، برای حالت سردشدن در حضور میدان مغناطیسی ۰/۰۰۱ تسلا نشان می‌دهد. اولین کاهش و تغییر شیب، دمای گذار درون دانه‌ای (T_C) را نشان می‌دهد و دومین قله در T_{Cj} (دمای گذار بین دانه‌ای) مربوط به دمای گذار فاز ابررسانایی برای فازهای ثانویه نظیر Bi-۲۲۱۲ است. در کامپوزیت‌های شامل نانوذرات، T_C با افزایش درصد نانوذرات کاهش می‌یابد و علت این کاهش را به می‌توان به کرنش ایجاد شده در فصل مشترک افزودنی و زمینه ابررسانا نسبت داد. در تمامی نمونه‌ها به جز نمونه خالص یک گذار ثانویه در T_{cj} حوالی ۹۰ درجه کلوین مشاهده می‌شود که نشان می‌دهد با اضافه کردن نانو افزودنی‌ها شرایط برای تغییرات فازی Bi-۲۲۲۳ به فاز Bi-۲۲۱۲ به صورت جزئی فراهم شده و لذا درصد شکل‌گیری فاز Bi-۲۲۱۲ در کامپوزیت‌ها افزایش یافته است. به‌علاوه، کامپوزیت Bi-۲۲۲۳ شامل ۰/۲ درصد وزنی نانوذرات، بیش‌ترین مقدار پذیرفتاری مغناطیسی را در بین کامپوزیت‌های سنتزشده نشان می‌دهد.

شکل ۳، منحنی مقاومت ویژه نرمال‌شده نمونه‌های سنتز شده را برحسب دما نشان می‌دهد. براین اساس، مقاومت ویژه تمامی نمونه‌ها با کاهش دما به صورت خطی کاهش یافته و سپس با



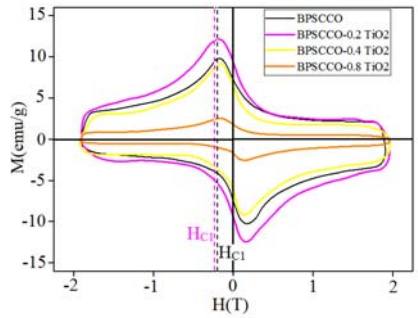
شکل۲. منحنی پذیرفتاری مغناطیسی کامپوزیت های سنتزشده



شکل۳. منحنی مقاومت ویژه کامپوزیت های سنتزشده

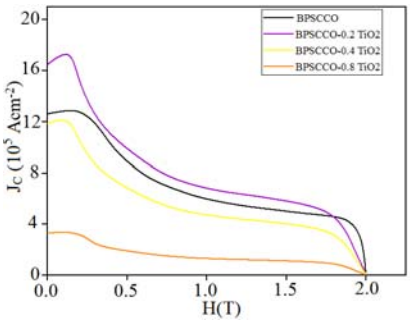
کاهش بیشتر دما، گذار ابررسانایی رخ می‌دهد. دمای گذار ابررسانایی نمونه‌ها براساس اندازه‌گیری مقاومت ویژه، در تطابق با نتایج بدست آمده از اندازه‌گیری پذیرفتاری مغناطیسی است.

شکل ٤ حلقه هیسترزیس مغناطیسی کامپوزیت‌های سنتز شده در دمای ۱۰ درجه کلوین برای میدان مغناطیسی اعمالی در بازه ۲± تسلا را نشان می‌دهد. افزودن نانوذرات بر پهنای حلقه هیسترزیس تاثیر گذاشته و برای کامپوزیت‌های شامل دی اکسیدتیتانیوم، مقدار مغناطش پذیری و پهنای حلقه هیسترزیس با افزایش مقدار تا ۰٫۲ درصد وزنی افزایش یافته و سپس با افزایش بیش‌تر نانوذرات تا ۰٫۸ درصد وزنی کاهش می‌یابد. افزایش در پهنای حلقه هیسترزیس کامپوزیت ($Bi-2223-0.2TiO_2$) می‌تواند نتیجه بهبود مورفولوژی دانه‌های ابررسانا و قوی‌تر شدن میخکوبی شار باشد.



شکل ٤. منحنی هیسترزیس ترکیبات سنتز شده

شایان ذکراست میدان بحرانی اول ($H_{C1}\approx 0.2$ T) که محدوه اثر مایسنر است، در کامپوزیت $Bi-2223-0.2TiO_2$ افزایش یافته، لذا این کامپوزیت در محدوه بیش‌تری نسبت به نمونه خالص خاصیت دیامغناطیس کامل خود را حفظ کرده و ایجاد گردشاره‌ها و پیدایش ناحیه مختلط در میدان مغناطیسی بزرگ‌تری رخ می‌دهد. این مورد قابلیت‌های کاربردی این ترکیب را توسعه می‌دهد.



شکل۵. منحنی چگالی جریان درون دانه‌ای ترکیبات سنتز شده

چگالی جریان بحرانی درون دانه‌ای کامپوزیت‌های سنتز شده، بر حسب میدان مغناطیسی اعمالی، بدست آمده از حلقه‌های هیسترزیس و معادله بین[1]، در شکل ۵ مشاهده می‌شود. تمامی نمودارها دارای یک قله ماکزیمم در حوالی ۰٫۲ تسلا هستند که نشان دهنده شروع نفوذ گردشاره‌ها است که در نتایج حلقه هیسترزیس در مورد آن بحث شد. به‌علاوه، افزودن نانوذرات TiO_2 با درصد وزنی ۰٫۲، موثرترین مرکز میخکوبی را ایجاد کرده که می‌تواند گردشاره‌های بیش‌تری را میخکوب کرده و ممانعت موثرتری در برابر حرکت آن‌ها ایجاد نماید و لذا بیشترین چگالی جریان بحرانی را در میان ترکیبات سنتز شده داراست.

نتیجه‌گیری

در این تحقیق، اثر نانوذرات دی اکسید تیتانیوم بر پارامترهای ساختاری، دمای گذار ابررسانایی و چگالی جریان بحرانی در ابررساناهای سرامیکی $Bi_{1.6}Pb_{0.4}Sr_2Ca_2Cu_3O_{10+\delta}$ +x(TiO_2) با مقدار درصدهای وزنی (٪۰٫۰، ٪۰٫۲، ٪۰٫٤ و ٪۰٫۸)، سنتز شده به روش سل-ژل بررسی شده است. براساس نتایج، با افزودن ۰٫۲ درصد وزنی نانوذرات دی اکسید تیتانیوم به ابررسانای Bi-۲۲۲۳، می‌توان به خواص ابررسانایی مطلوبی نظیر دمای بحرانی ۱۰۷٫٤ درجه کلوین، چگالی جریان بحرانی درون دانه‌ای ۱۷٫۸۷×۱۰^۵ آمپر/سانتی متر مربع و میدان برگشت ناپذیر ۱٫۸۱ تسلا و میدان بحرانی اول ۰٫۱۵۹ تسلا دست یافت.

مرجع‌ها

[1] H. Fallah-Arani, S. Baghshahi, A. Sedghi, D. Stornaiuolo, D. Tafuri, N. Riahi-Noori, Ceram. Int. **39,** (2017) 1143–1152.
[2] N.K. Saritekin, M. Pakdil, E. Bekiroglu, G. Yildirim, J. Alloy. Comp. **688,** (2016) pp. 637–646.
[3] S.F. Oboudi, M.Q. Mustafa, Adv. Nanoparticles **5,** (2016) 75–82.

[1] Bean's equation

ساخت و مشخصه‌یابی گلوگاه میکرومتری ابررسانای $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ با لیتوگرافی مرطوب

ترکاشوند، مهدی[۱]؛ صندوقچی، محمد[۱]؛ محمدی‌زاده، محمدرضا[۱]

[۱] آزمایشگاه پژوهشی ابررسانایی و ابرمواد، دانشکده فیزیک دانشگاه تهران، انتهای خیابان کارگر شمالی ، تهران

چکیده

گلوگاه‌های ۳۰ میکرومتری روی لایه‌های نازک $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ بر بستر تک بلور $SrTiO_3$، ساخته شده با استفاده از روش رسوب آلی فلز، به روش فوتو لیتوگرافی ایجاد شدند. نشان داده شد که در این ابعاد با بهینه‌سازی روش لیتوگرافی مرطوب می‌توان دمای گذار بالاتر از ۹۰K و پهنای گذار کمتر از ۵ K نمونه را حفظ کرد.

واژه های کلیدی: *ابررسانا، لایه نازک، لیتوگرافی مرطوب، اتصال ضعیف، گلوگاه*

Fabrication and Characterization of Micrometer Constriction of $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ Superconductor by Wet Lithography

Torkashvand, Mahdi[1]; Sandoghchi, Mohammad[1]; Mohammadizadeh, Mohammadreza[1]

[1]*Superconducting and Supermaterials Research Lab (SRL), Department of Physics, University of Tehran, Tehran*

Abstract

$YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ thin films were deposited on $SrTiO_3$ substrates using metal-organic decomposition process. 30 μm constrictions were fabricated on these thin films by photolithography method. It was shown that by optimization of wet-lithography, the transition temperature of greater than 90K and transition width of less than 5K of the samples can be preserved in such scales.

***Keywords**: Superconductor, Thin film, Weak links, Wet lithography, constriction*

PACS No. 70,72,74

مقدمه

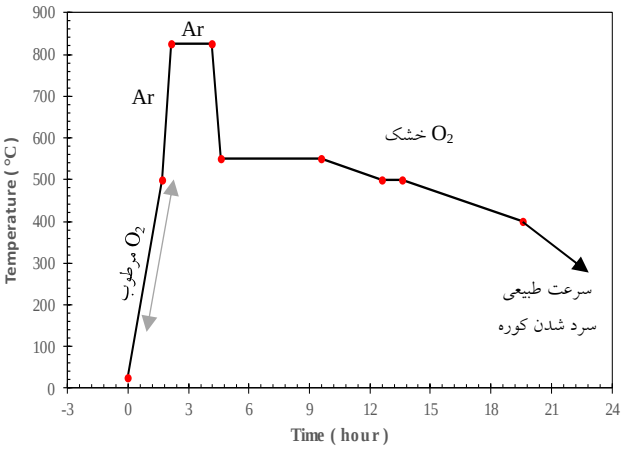
اتصال دو ابررسانا با استفاده از ناحیه‌ی غیرابررسانا یا با ابررسانایی که دمای گذار ابررسانایی پایین‌تری نسبت به دو ابررسانای اصلی دارد، منجر به پدیده‌های متفاوتی می‌شود [1]. برای مثال اگر ناحیه‌ی غیرابررسانا عایق باشد (ساختار ابررسانا–عایق–ابررسانا (SIS)) پدیده‌ی تونل‌زنی جوزفسون رخ می‌دهد [2]. اتصالات از این نوع را پیوندگاه تونلی می‌نامند. ولی اگر ناحیه‌ی غیرابررسانا فلز معمولی یا ابررسانا با دمای گذار ابررسانایی پایین‌تر باشد نوعی دیگر از پیوندگاه‌ها به نام ساختار ابررسانا–فلز عادی–ابررسانا (SNS) را می‌توان ساخت، که زیر مجموعه‌ای از اتصالات با نام اتصال ضعیف در نظر گرفته می‌شوند [1]. منظور از اتصال ضعیف ناحیه‌ای است که جریان بحرانی به مقدار قابل توجهی نسبت به مناطق دیگر ابررسانا کاهش پیدا کرده باشد. تحت شرایط خاصی که تابع ابعاد پیوندگاه می‌باشد اتصالات ضعیف رفتاری مشابه پیوندگاه‌های تونلی از خود نشان می‌دهند [3]. از آنجا که مشاهده‌ی اثر جوزفسون نیاز به همپوشانی تابع موج ابررسانایی در ناحیه‌ی میانی دارد ضخامت این ناحیه باید از مرتبه‌ی چند طول همدوسی ابررسانا (ξ) باشد [3]. این موضوع، ساخت پیوندگاه‌های از نوع SIS را دشوار می‌کند. برای مثال بزرگ‌ترین طول همدوسی ابررسانای $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ (YBCO) از مرتبه‌ی ۲ nm است [4].

بنابراین برای ساخت اتصال جوزفسون از این ابررسانا ضخامت ناحیه‌ی عایق باید کمتر از ۳ξ [3] یا کمتر از ٦ nm باشد. با توجه به این محدودیت، که برای مثال فرآیند لایه‌نشانی ناحیه‌ی عایق را سخت‌تر می‌کند، ساخت پیوندگاه SIS از ابررساناهای YBCO دشوارتر از ساخت پیوندگاه از ابررساناهای متعارف با طول همدوسی‌های چند صد نانومتری [5] می‌شود. از طرفی به دلیل اثر تقارب یا بازتاب آندریف مسئله‌ی ابعاد پیوندگاه در اتصالات ضعیف کم اهمیت‌تر می‌شود [1]. در نتیجه مشاهده‌ی اثر جوزفسون در این اتصالات ساده‌تر است. از این رو به طور کلی اتصالات ضعیف کاربردی‌تر از اتصالات SIS هستند. برای ساخت اتصال ضعیف از ابررسانای YBCO می‌توان به چند روش عمل کرد [1,5,6]. ساخت پیوندگاه‌های SNS با چند مرتبه لایه‌نشانی و یا تخریب ابررسانایی در ناحیه‌ای از لایه نازک YBCO با استفاده از تابش‌های الکترونی یا یونی متمرکز از متداول‌ترین روش‌ها است [1]. روش دیگر باریک کردن ناحیه‌ای از لایه نازک YBCO با استفاده از روش‌های متفاوت لیتوگرافی مانند لیتوگرافی الکترونی، یونی، فوتولیتوگرافی و... است (در این مقاله این ناحیه را گلوگاه می‌نامیم) [1]. از آنجا که اثر جوزفسون در فناوری‌های نوین مانند حسگرهای مغناطیسی، پردازشگرهای سریع، کامپیوترهای کوانتومی، آشکارسازهای تک فوتونی و به طور کلی الکترونیک کاربرد فراوانی دارد، مطالعه خواص پیوندگاه جوزفسون یا به طور کلی‌تر اتصالات ضعیف از نیازهای کنونی و آینده‌ی علمی کشور است. همان‌طور که اشاره شد اثر جوزفسون را در اتصالات ضعیف با ایجاد گلوگاه میکرومتری و تنظیم ابعاد آن می‌توان مشاهده کرد.

در این مقاله با هدف ساخت گلوگاه میکرومتری و با توجه به امکانات موجود در کشور، از روش لیتوگرافی مرطوب استفاده شده است. هرچند که روش لیتوگرافی مرطوب روش بهینه‌ای برای ایجاد گلوگاه از ابررسانای YBCO نیست، زیرا که رطوبت می‌تواند خاصیت ابررسانایی این ماده را کاهش دهد [7]، لکن در ادامه نشان می‌دهیم که چگونه با بهینه‌سازی شرایط لیتوگرافی می‌توان دمای گذار ابررسانایی این گلوگاه را حفظ نمود.

جزئیات تجربی

در گام اول ابررسانای لایه نازک YBCO به روش رسوب آلی فلز ساخته شد [8]. مراحل به این ترتیب بود که ابتدا پیش محلول آبی رنگ از استات‌های فلزی ایتریم، باریم و مس با نسبت‌های مولی ۳:۲:۱ آماده شد. سپس پوشش دهی زیرلایه‌های تک بلور $SrTiO_3$ (STO) با استفاده از دستگاه لایه‌نشانی چرخشی با سرعت ۳۰۰۰ r/min و مدت یک دقیقه انجام می‌شد. در ادامه این مجموعه به مدت ۱۰ دقیقه در دمای ۸۰°C روی صفحه‌ی داغ حرارت داده شدند. بعد از آن جهت تشکیل لایه نازک ابررسانا، این پیش نمونه‌ها به کوره منتقل شدند (شکل ۱).



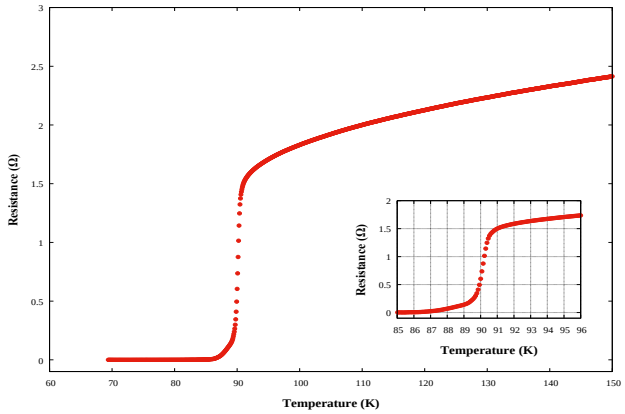
شکل ۱: برنامه‌ی دمایی-زمانی ساخت لایه نازک YBCO.

برای تشکیل فاز ابررسانا علاوه بر بهینه کردن مقدار شار گاز، کنترل جو داخل کوره مطابق شکل ۱ (اکسیژن مرطوب، گاز نجیب و اکسیژن خشک)، لازم است. با اکسیژن گیری مناسب و در نتیجه کوچک شدن δ در $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ دمای گذار ابررسانایی ترکیب به حدود ۹۱ کلوین خواهد رسید. کیفیت سطح نمونه‌ها با دستگاه میکروسکوپ نیروی اتمی (AFM) مورد بررسی قرار گرفت. اندازه‌گیری مقاومت بر حسب دما به روش اتصال چهار پایانه‌ای انجام شد. برای این کار سیم‌های اتصال با استفاده از چسب نقره به لایه متصل شدند. جریان مستقیم ۲۰ μA توسط منبع جریان Keithley، به نمونه‌ها اعمال شده و اندازه‌گیری ولتاژ با استفاده از نانوولت‌متر Keithley در حالت اندازه‌گیری Delta انجام شد.

برای فوتولیتوگرافی از فوتورزیست مثبت استفاده شد. پوشش‌دهی لایه نازک با استفاده از دستگاه لایه‌نشانی چرخشی با سرعت ۳۰۰۰ r/min و مدت ۳۰ ثانیه انجام شد. سپس نمونه‌ی پوشش داده شده به مدت دو دقیقه در دمای ۱۰۰ °C حرارت داده شد. در ادامه شکل طرح گلوگاه به روش مستقیم به روی نمونه منتقل شده و سپس نمونه به مدت حدود ۱۲ دقیقه تحت تابش قرار می‌گرفت. در این کار از سدیم هیدروکسید ۲٪ به عنوان ظاهرکننده (developer) طرح نهائی روی نمونه استفاده شد. پس از ظهور طرح نمونه در دمای ۱۰۰ °C به مدت یک ساعت دیگر حرارت داده شد. در نهایت از اسید فسفریک ۳ درصد به عنوان خورنده‌ی YBCO برای پیاده‌سازی طرح نهائی استفاده شد.

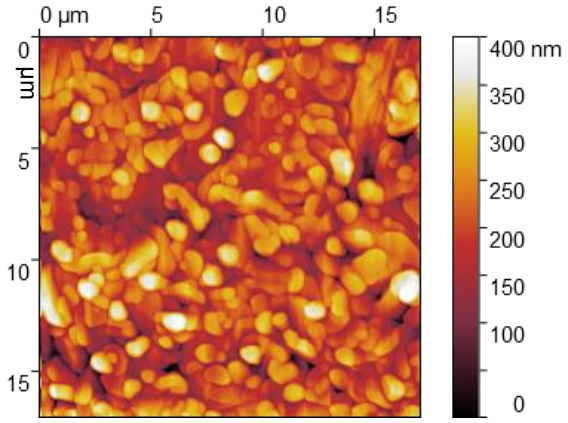
نتایج و تحلیل

بیش از ۵۰ نمونه لایه نازک YBCO ساخته شدند. در ابتدا نتایج مقاومت برحسب دمای نمونه‌ها به منظور مشخص کردن دمای گذار بررسی شد. شکل ۲ نتیجه یکی از نمونه‌های ابررسانا را نشان می‌دهد. همان‌طور که از این شکل دیده می‌شود، مقاومت نمونه رفتار فلزی دارد. شروع دمای گذار ابررسانایی این نمونه حدود ۹۱ K و پهنای گذار آن کمتر از ٤ K است. رفتار مشابهی برای سایر نمونه‌های بهینه مشاهده شد. مقاومت ویژه نوعی دمای اتاق این نمونه‌ها کمتر از ۲۵۰ μΩ.cm (معادل مقاومت ۱۰ اهم) بودند. به علاوه تحلیل نتایج AFM لایه نازک (شکل ۳) نشان می‌دهد که زبری متوسط و زبری میانگین مربعی نوعی لایه‌ها به ترتیب حدود ٤۰ nm و ۵۰ nm است.



شکل ۲: مقاومت برحسب دما برای لایه‌نازک YBCO .

این نتایج نشان می‌دهد که لایه‌های نازک ساخته شده دارای کیفیت مناسبی برای پیاده سازی گلوگاه هستند.



شکل ۳: نتیجه نوعی AFM از لایه نازک YBCO.

پس از ساخت نمونه‌های ابررسانا، مرحله فوتولیتوگرافی مستقیم (یک به یک) انجام شد. در این مرحله هدف ایجاد گلوگاه‌هایی با پهنای کمتر از ۳۰ μm (با توجه به محدودیت چاپ فیلم لیتوگرافی در کشور) بود. همان‌طور که در مقدمه اشاره شد جذب رطوبت باعث کاهش دمای گذار ابررسانایی (T_c) ترکیب YBCO می‌شود. بنابراین در این روش لیتوگرافی، مدت زمان تماس نمونه با ماده مرطوب باید بهینه شود. شکل ٤ نتیجه‌ی اندازه‌گیری مقاومت برای یکی از گلوگاه‌های ایجاد شده بعد از بهینه‌سازی مراحل لیتوگرافی را نشان می‌دهد. همان‌طور که از این شکل دیده می‌شود، گلوگاه همچنان ابررسانا با دمای گذار بالاتر از ۹۱ K است. از طرف دیگر پهنای گذار کوچک نیز نشان می‌دهد که بعد از لیتوگرافی مرطوب خاصیت ابررسانایی نمونه تا حد مطلوبی حفظ شده است. افزایش ظاهری مقاومت نمونه بعد از لیتوگرافی (شکل ٤) نسبت به نمونه‌های لیتوگرافی نشده (شکل ۲)، می‌تواند به دلیل وجود ناحیه‌ی گلوگاه باشد. زیرا در تقریب ساده مقاومت را می‌توان به صورت زیر در نظر گرفت

$$R = \rho L/A = \rho L/wt \qquad (1)$$

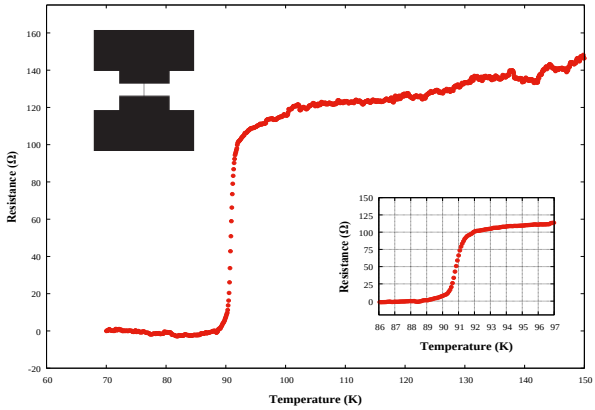
با فرض تغییر نکردن مقاومت ویژه‌ی نمونه و ضخامت لایه نازک می‌توان نوشت

$$R_{Lithography} = \frac{w}{w_{Lithography}} R = \frac{5mm}{30\mu m} R \approx 167\, R \qquad (2)$$

با در نظر گرفتن مقدار نوعی مقاومت نمونه در دمای اتاق حدود R ~۱-۱۰ Ω خواهیم داشت

$$R_{Lithography} \approx 167\ R = 167 - 1670\ \Omega. \quad (3)$$

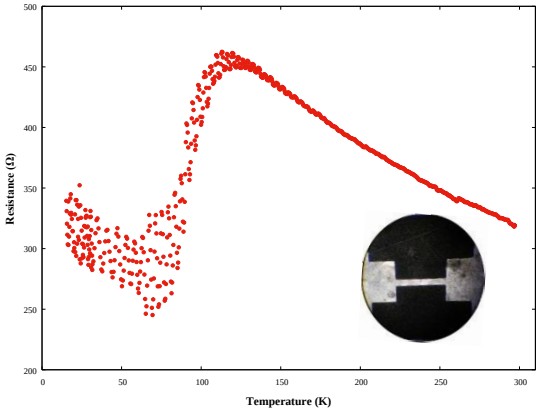
در نتیجه یکی از دلایل افزایش مقاومت از مرتبه‌ی ۲ تا ۳ برابری بعد از لیتوگرافی می‌تواند به خاطر کاهش سطح مقطع عبور جریان (به دلیل کاهش پهنای w، ایجاد گلوگاه میکرومتری) باشد. در مورد ماده‌ی ابررسانا افزایش مقاومت در ناحیه‌ی گلوگاه منجر به کاهش چگالی جریان بحرانی می‌شود. با کاهش قابل توجه پهنای گلوگاه، چگالی جریان بحرانی را می‌توان نزدیک به صفر کرد. در نتیجه بخش باریک شده می‌تواند به عنوان ناحیه‌ی غیرابررسانا عمل کند.



شکل ٤: مقاومت برحسب دما برای گلوگاه (۳۰ μm) ساخته شده از لایه‌نازک YBCO . تصویر سیاه رنگ نشان دهنده طرح ماسک است.

در چنین شرایطی گلوگاه تبدیل به ناحیه‌ی ابررسانا–غیرابررسانا–ابررسانا می‌گردد. در نتیجه اگر ابعاد ناحیه‌ی غیر ابررسانا بهینه باشد می‌توان در این مجموعه نیز اثر جوزفسون را مشاهده کرد.

در همین راستا در ادامه‌ی کار تلاش شد تا گلوگاه‌هایی با پهنای کمتر ساخته شود. برای کاهش پهنای گلوگاه از روش فوتولیتوگرافی کاهنده‌ی ماسک (کاهش ابعاد طرح با استفاده از روش‌های اپتیکی) استفاده گردید. با کاهش عرض پیوندگاه، بهینه‌سازی شرایط لیتوگرافی مرطوب، به دلیل نرخ خورندگی بالای اسید فسفریک [7]، نسبت به حالت قبل دشوارتر شد. شکل ۵ نتیجه‌ی اندازه‌گیری مقاومت بر حسب دما برای گلوگاه‌های ایجاد شده با عرض نزدیک به ۱۰ میکرومتر را نشان می‌دهد. همان‌طور که از این شکل دیده می‌شود، رفتار مقاومتی نمونه از حالت فلزی به نیم رسانا تبدیل شده است. با این وجود رفتار مشابه گذار ابررسانایی در این شکل دیده می‌شود. هر چند این رفتار مطلوب نیست، انتظار می‌رود با بهینه‌سازی شرایط برای نمونه‌های ۱۰ میکرومتری نیز رفتار مشابه شکل ۵ مشاهده کرد.



شکل ۵: مقاومت برحسب دما برای گلوگاه (۱۰ μm) ساخته شده از لایه‌نازک YBCO به همراه بزرگ نمایی تصویر واقعی گلوگاه.

نتیجه‌گیری

در این کار لایه نازک‌های YBCO با دمای گذار بالاتر از ۹۰ K و پهنای گذار کمتر از ۵ K با استفاده از روش رسوب آلی فلز ساخته شدند. سپس نشان دادیم که با بهینه‌سازی شرایط فوتولیتوگرافی می‌توان از روش لیتوگرافی مرطوب برای ایجاد گلوگاه‌های میکرومتری استفاده کرد. تحت این شرایط گلوگاه همچنان ابررسانایی با دمای گذار بالاتر از ۹۰ K نشان می‌دهد.

سپاسگزاری

بخشی از هزینه‌های این طرح با حمایت معاونت پژوهشی دانشگاه تهران و موسسه علوم و فناوریهای کوانتومی دانشگاه تهران انجام شد.

مراجع

[1] F. Tafuri, ed., *Fundamentals and Frontiers of the Josephson Effect*, Springer International Publishing, Cham, (2019).
[2] B.D. Josephson, Possible new effects in superconductive tunnelling, *Physics Letters*. **1** (1962) 251–253.
[3] K.K. Likharev, Superconducting weak links, *Rev. Mod. Phys.* **51** (1979) 101–159.
[4] P. Mangin, R. Kahn, *Superconductivity An introduction*, Springer International Publishing, Cham, (2017).
[5] P. Seidel, ed., *Applied superconductivity: handbook on devices and applications*, Wiley-VCH, Weinheim, (2015).
[6] A. Barone, G. Paternò, *Physics and Applications of the Josephson Effect*, 1st ed., Wiley, (1982).
[7] T. Emery-Adleman, B. Taylor, Fabrication of YBCO Josephson Junction Using Wet Etching, in: V. In, P. Longhini, A. Palacios (Eds.), *Proceedings of the 5th International Conference on Applications in Nonlinear Dynamics*, Springer International Publishing, Cham, (2019): pp. 244–249.
[8] M. Rasti, M.R. Mohammadizadeh, Fabrication of YBCO Thin Films by Fluorine-Free MOCSD Method: Influence of Sintering Near the Melting Point, IEEE Transactions on Applied Superconductivity. **30** (2020) 1–8.

اثر مغناطوگرمایی در ریبون‌های آلیاژ $Ni_{42}Co_8Mn_{39}Sn_{10}Ge_1$

قطبی ورزنه، علی؛ کاملی، پرویز

دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان

چکیده

در این تحقیق آلیاژ حافظه‌پذیر فرومغناطیس $Ni_{42}Co_8Mn_{39}Sn_{10}Ge_1$ به روش آلیاژسازی مکانیکی همراه با عملیات حرارتی ساخته شد. سپس با استفاده از دستگاه مذاب ریسی نمونه‌های نواری آن با سرعت چرخ مبرد 30 متر بر ثانیه به دست آمد. نمونه های به دست آمده به مدت 1 ساعت در دمایی 1173 در کوارتز بازپخت شدند. ویژگی ساختار ریبون‌های به دست آمده با استفاده از تحلیل پراش پرتو ایکس تحت دما مورد بررسی قرار گرفت و گذار ساختاری در نمونه‌ها تایید شد. در ادامه خواص مغناطیسی آن‌ها با استفاده از منحنی مغناطش تحت دما در میدان‌های متفاوت بررسی شد. در محدوده‌ی گذار ساختاری اختلاف مغناطش قابل توجه همراه با پسماند گرمایی کم مشاهده شد که از نقطه نظر کاربرد در سردسازی مغناطیسی ایده آل است. در انتها با استفاده از معادله ماکسول تغییرات آنتروپی به عنوان یکی از پارمترهای اثر مغناطوگرمایی در محدوده‌ی گذار ساختاری محاسبه شد و مقدار قابل توجه 15/7 J/kgK در میدان 2 تسلا به دست آمد که در مقایسه با مطالعات قبلی روی نمونه‌های نواری قابل توجه است.

Magnetocaloric effect in $Ni_{42}Co_8Mn_{39}Sn_{10}Ge_1$ alloy ribbons

Ghotbi Varzaneh, Ali; Kameli, Parviz

Department of Physics, Isfahan University of Technology, Isfahan

Abstract

In this investigation, $Ni_{42}Co_8Mn_{39}Sn_{10}Ge_1$ ferromagnetic shape memory alloy has been prepared by mechanical alloying through thermal treatment. Then the ribbons samples were prepared using a melt spinning system with a wheel speed of 30 m/s and were subjected to heat treatment at 1173 for one hour. Structural properties were evaluated using a temperature-dependent X-ray technique, and martensitic transformation (MT) was confirmed. In addition, isotherm magnetization was measured under different magnetic fields. Low thermal hysteresis and sudden change of magnetizaiotn have been observed around MT, which is ideal from a practical point of view. Finally, isothermal entropy changes was calculated by the Maxwell equation as a key parameter for the magnetocaloric effect. A considerable value of 15.7 J/kgK under a magnetic field of 2 T was obtained, which is comparable with the literature.

PACS No. 75

مقدمه

سردسازی مغناطیسی در محدوده‌ی دمای اتاق، یک زمینه‌ی جدید در علوم پایه، علم مواد و مهندسی است. تاکنون در سرتاسر جهان تعداد زیادی از نمونه‌های اولیه‌ی یخچال‌های مغناطیسی که بر پایه‌ی اثر مغناطوگرمایی کار می‌کند ساخته شده است [1]. سردسازی مغناطیسی بر پایه‌ی اثر مغناطوگرمایی کار می‌کند که بیشتر در ترکیبات حاوی عناصر نادر خاکی مشاهده شده است اما محققان در تلاش برای دست‌یابی به مقدار قابل توجه این اثر در آلیاژهای که عناصر نادر خاکی ندارند مانند ترکیبات هویسلر بر پایه‌ی نیکل- منگنز نیز هستند. موادی که برای کاربردهای عملی اثر مغناطوگرمایی به کار می‌روند باید مقرون به صرفه باشند و در میدان‌های مغناطیسی پایین بتوانند این خاصیت را از خود نشان دهند. موادی که در حال حاضر در این یخچال‌ها استفاده می‌شوند ترکیباتی بر

پایه گادولونیم هستند که قیمت تمام شده‌ی آنها زیاد است. از این رو تحقیقات به منظور یافتن موادی که اثر مغناطو-گرمایی مناسبی را در دماها و میدان‌های در دسترس از خود نشان دهند و همچنین صرفه اقتصادی بیشتری داشته باشند ادامه دارد [2].

در کنار چالش‌های مهندسی زیادی که در زمینه سردسازی مغناطیسی وجود دارد، مواد مغناطوگرمایی با ویژگی‌های مناسبی نیز مورد نیاز هستند. اول از همه تغییرات دمای آدیاباتیک (ΔT_{ad}) باید تا اندازه‌ی ممکن بزرگ باشد. به همان اندازه پارامتر تغییرات آنتروپی (ΔS) اهمیت دارد که این پارامتر می‌تواند مشخص کند چه مقدار گرما می‌تواند در یک چرخه‌ی سرمایش منتقل شود [3]. برای مشخصه یابی این دو پارامتر دو روش مستقیم و غیرمستقیم وجود دارد در روش مستقیم ΔT_{ad} را مستقیماً اندازه می‌گیرند و در روش دوم که به روش مغناطومتری شناخته می‌شود با استفاده از منحنی‌های مغناطش (M-H) در دماهای مختلف و یا منحنی‌های مغناطش (M-T) در میدان‌های مختلف و با استفاده از معادله‌ی ماکسول تغییرات آنتروپی را به‌دست می‌آورند. [4].

همانطور که اشاره شد چالش‌هایی برای کاربردی سازی مواد مغناطوگرمایی پیش‌رو است. یک تماس گرمایی مناسب بین ماده‌ی مغناطوگرمایی و سیالی که کار تبادل گرما را دارد نیز جز پیش نیازها است. به این منظور هدایت حرارتی ماده باید زیاد باشد. علاوه بر این نباید حاوی مواد و عناصر مضر باشد و اثرات بدی روی محیط زیست داشته باشد [5]. جنبه‌ی مهم دیگر، افزایش انتقال حرارت با دست کاری ساختار ماده‌ی مغناطوگرمایی است به نحوی که بتوان آن‌ها را به شکل‌هایی درآورد که نسبت سطح به حجم آن‌ها به قدر کافی بزرگ باشد (مانند نمونه‌های نواری (ریبون)). بنابراین یک ماده‌ی مغناطوگرمایی باید بتواند بدون کاهش عملکرد خود به شکل دلخواه درآید [6].

در پروژهای قبلی در گروه اثر مغناطوگرمایی در نمونه‌های حجمی آلیاژهای بر پایه‌ی نیکل–منگنز بررسی شده است. در این پژوهش هدف این است که یک قدم جلوتر رفته و به بررسی اثر مغناطوگرمایی در نمونه‌های نواری بپردازیم. بیشتر مطالعاتی که توسط محققان در این زمینه انجام شده است روی نمونه‌های حجمی است اما در نمونه‌های نواری با نسبت سطح به حجم بیشتر امکان کاربرد با بازدهی بیشتر وجود دارد. در این پژوهش ماده‌ی Ni-Co-Mn-Sn که قبلاً اثر مغناطوگرمایی مناسبی را در نمونه‌ی حجمی از خود نشان داده است انتخاب شده است. البته از یک درصد ژرمانیوم در جایگاه قلع برای بالاتر بردن دمای گذار آن نیز استفاده شده است. سپس مطالعه‌ای بنیادی و کاربردی روی آلیاژ ساخته شده انجام شده است. تا کنون مطالعه‌ی اثر مغناطوگرمایی روی نمونه‌های ریبون آلیاژ معرفی شده انجام نشده است و این مطالعه این گاف را پر خواهد کرد و یک قدم این زمینه‌ی مطالعاتی را به سمت تجاری سازی خواهد برد.

آزمایش

آلیاژ $Ni_{42}Co8Mn_{39}Sn_{10}Ge_1$ به روش آلیاژسازی مکانیکی ساخته شد و سپس تحت عملیات حرارتی قرار گرفت که جزئیات روش ساخت با آلیاژسازی مکانیکی در مقاله‌ی دیگر گزارش شده است [4]. سپس فرایند مذاب ریسی روی آلیاژ تهیه شده انجام شد. این کار در اتمسفر آرگون با فشار 700 mbar، قطر نازل 0/6 mm با سرعت چرخش دیسک 30 m/s صورت گرفت. نوارهایی با پهنای 1 mm تا 2 وضخامت 10 mμ تا 20 تهیه شد. نمونه‌های به دست آمده در لوله‌ی کواتز کپسوله شده و به منظور همگنی بهتر به مدت 1 ساعت در دمایی 1173 کلوین بازپخت شدند. در ابتدا از دستگاه میکروسکوپ الکترونی روبشی Hitachi مدل TM300 مجهز به میکروآنالیز EDS برای بررسی استوکیومتری ترکیب ساخته شده استفاده شد. سپس با استفاده از الگوی پراش پرتو ایکس از تشکیل فاز مورد نظر اطمینان حاصل شد این تحلیل در دماهای 524، 284 و 174 کلوین به منظور بررسی گذار ساختاری انجام شد. برای این کار از دستگاه Bruker D8 Advanve با لامپ مس استفاده شد.

در ادامه با استفاده از دستگاه SQUID Quantum Design مدل MPM-7 منحنی‌های مغناطش بر حسب دما (M-T) در میدان‌های 0/1، 1، 2، 3، 4، 5 و 7 تسلا اندازه گیری شد. در انتها از منحنی‌های مغناطش برای محاسبه تغییرات آنتروپی استفاده شد.

نتایج و بحث

با استفاده از طیف EDS درصد اتمی موجود در آلیاژ ساخته شده مورد بررسی قرار گرفت (جدول 1). این تحلیل در پنج ناحیه‌ی مختلف در سطح تماس با مبرد و همچنین در پنج ناحیه در سطح آزاد نمونه‌های نوار انجام شد تا از همگنی نمونه‌ها اطمینان حاصل شود. مقادیر به دست آمده از سطح در تماس با مبرد و سطح آزاد نشان داد استوکیومتری در هر دو سطح با تقریب خوبی برابر هست و همگنی بالای آلیاژ ساخته شده تایید شد. از مقادیر اندازه‌گیری شده میانگین‌گیری شد و نتایج در جدول 1 گزارش شده است. نتایج نشان می‌دهد مقادیر به دست آمده با تقریب خیلی خوبی به مقادیر اسمی نزدیک است که نشان از دست‌یابی به استوکیومتری دلخواه است.

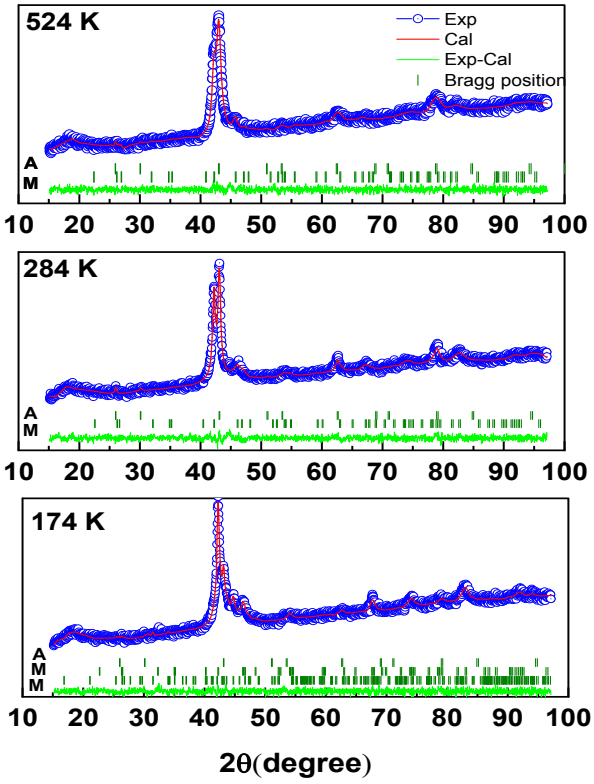
جدول 1: درصد عناصر تشکیل دهنده‌ی ریبون در نمونه‌ی اسمی و نتایج به دست آمده از آنالیز EDS ،

نمونه	Ni	Co	Mn	Sn	Ge
اسمی	42	8	39	10	1
اندازه گیری شده	41/6	8	39/7	9/6	1/1

الگوی پراش پرتو ایکس نمونه در 3 دمای 524 ، 284 و 174 کلوین اندازه گیری شد و با استفاده از تحلیل ریتولد در نرم افزار Full-Prof مورد بررسی قرار گرفت (شکل 1). همان‌طور که مشاهده می‌شود نمونه در دمای بالا (524 کلوین) تقریباً تماماً در فاز آستنیت قرار دارد و رد ناچیزی از مارتنزیت باقی مانده در بستر آستنیت مشاهده می‌شود. در دمای نزدیک به دمای اتاق الگوی پراش ایکس وجود دو فاز آستنیت و مارتنزیت را به صورت همزمان تایید می‌کند که ناشی از وقوع گذار در همین حوالی می‌تواند باشد. اما در دمای 174 کلوین درصد فاز مارتنزیت به مقدار قابل توجهی افزایش یافته است و تنها کسر ناچیزی از آستنیت باقی مانده در آن مشاهده می‌شود. رفتار مشاهده شده الگوی پراش ایکس تحت دما وقوع گذار ساختاری در این آلیاژ که یکی از اهداف این پروژه است را تایید می‌کند [5]. همانطور که انتظار می‌رود پارامتر شبکه فاز مکعبی با کاهش دما رفتاری کاهشی دارد (جدول 2). محاسبه حجم سلول واحد دوفاز نشان می‌دهد حجم سلول واحد در فاز مارتنزیت و آستنیت متفاوت هستند که این موضوع به یکی از عوامل پسماندی که در ادامه در منحنی های مغناطش مشاهده شده است نسبت داده می شود. در الگوی های اندازه گیری شده اثری از وجود قله‌های ابرشبکه که نشان دهنده‌ی نظم بلند برد است دیده نمی‌شود.

جدول 2:پارمتر شبکه فاز آستنیت و مارتنزیت در دماهای مختلف

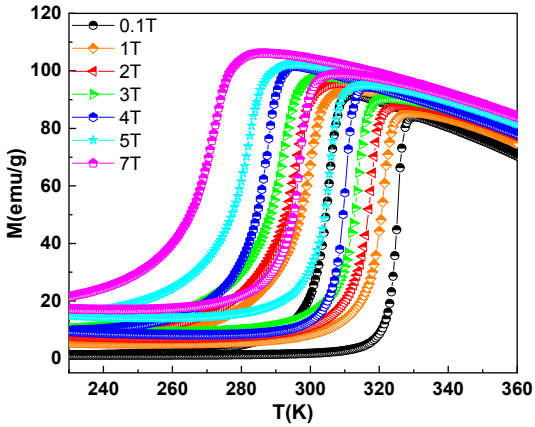
دمای اندازه گیری	فاز آستنیت	فاز مارتنزیت		
	a_c (Å)	a	b	c (Å)
524	5/950	3/971	3/971	6/617
284	5/937	3/939	3/939	6/692
174	5/930	3/919	3/919	6/728



شکل1 : تحلیل ریتولد پراش پرتو ایکس در دماهای مختلف.

شکل 2 منحنی مغناطش بر حسب دما را برای آلیاژ ساخته شده در بازه‌ی دمایی 230 تا 360 کلوین طی سرد

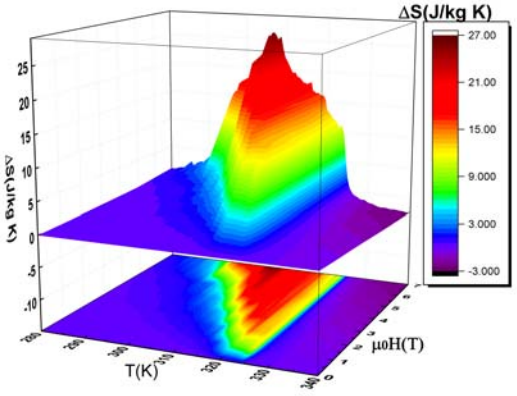
و گرم شدن نشان می‌دهد. پسماند گرمایی در محدوده‌ی 300 کلوین مشاهده می‌شود که نشان دهنده وجود گذار ساختاری است [5]. مقدار پسماند گرمایی در این نمونه‌ها کمتر از 20 کلوین است که به دلیل سازگاری هندسی دو فاز مارتنزیت و آستنیت و اختلاف حجم کمتر از $1\ Å^3$ است. این نمونه پسماند گرمایی کمتری نسبت به نمونه های حجمی از خود نشان می‌دهد که پتانسیل آن را در رفتارهای چرخه‌ای مغناطوگرمایی نشان می‌دهد. دمای گذار ساختاری این آلیاژ از نظر کاربردی ایده آل است. با توجه به اینکه گذار ساختاری در محدوده ی باریکی از دما انجام می شود و اختلاف مغناطش فاز آستنیت و مارتنزیت زیاد است بنابراین انتظار می رود تغییرات آنتروپی بالایی در محدوده گذار ساختاری از خود نشان دهد. تغییرات آنتروپی با استفاده از رابطه ماکسول که جزئیات آن در مقاله دیگری گزارش شده است محاسبه شد (شکل 3) [4]. محاسبه با استفاده از منحنی‌های مغناطش در مسیر گرمایش انجام شد. تغییرات آنتروپی در میدان 7 تسلا در محدوده‌ی دمای اتاق برابر 26/8 J/kgK است که مقدار قابل توجهی است و پتانسیل استفاده در یخچال‌های مغناطیسی را دارد.



شکل 2 : تغییرات مغناطش بر حسب دما در میدان مختلف.

تشکر و قدردانی

از صندوق حمایت از پژوهشگران و فناوران کشور بابت حمایت پروژه شماره 4000228 تشکر و قدردانی می‌شود.



شکل 3 : تغییرات آنتروپی در محدوده گذار ساختاری طی گرم شدن.

نتیجه گیری

آلیاژ $Ni_{42}Co_8Mn_{40}Sn_{10}Ge_1$ به صورت نوار ساخته شد. گذار ساختاری آن با استفاده از الگوی پراش پرتو ایکس تحت دما مورد بررسی قرار گرفت. ویژگی‌های مغناطیسی و اثر مغناطوگرمایی آن در محدوده دمای گذار ساختاری بررسی شد. آلیاژ ساخته شده تغییرات آنتروپی بالایی در میدان‌های در دسترس (2 تسلا) را از خود نشان می‌دهد که برای استفاده در یخچال‌های مغناطیسی مناسب است.

مراجع

[1] F. Scarpa, G. Tagliafico, and L. A. Tagliafico; "A classification methodology applied to existing room temperature magnetic refrigerators up to the year 2014"; *Renewable Sustainable Energy Reviews* **50**, (2015) 497-503.

[2] I. Dincer, E. Yüzüak, and Y. Elerman; "Influence of irreversibility on inverse magnetocaloric and magnetoresistance properties of the (Ni, Cu)$_{50}$Mn$_{36}$Sn$_{14}$ alloys"; *Journal of Alloys and Compounds* **506**, No.2 (2010) 508-512.

[3] K. Skokov, A. Y. Karpenkov, D. Y. Karpenkov, and O. Gutfleisch; "The maximal cooling power of magnetic and thermoelectric refrigerators with La(FeCoSi)$_{13}$ alloys"; *Journal of Applied Physics* **113**, No. (2013) 17A945.

[4] M. N. Inallu *et al.*; "Magnetocaloric effect in W-doped Ni–Mn–Sn alloy probed by direct and indirect measurements"; *Journal of Physics D: Applied Physics,* **52**, No. 23 (2019) 235001.

[5] J. R. Gómez, R. F. Garcia, A. D. M. Catoira, and M. R. Gómez; "Magnetocaloric effect: A review of the thermodynamic cycles in magnetic refrigeration"; *Renewable Sustainable Energy Reviews* **17**, (2013) 74-82.

[6] I. A. Radulov, K. P. Skokov, D. Y. Karpenkov, T. Gottschall, and O. Gutfleisch; "On the preparation of La(Fe,Mn,Si)$_{13}$H$_x$ polymer-composites with optimized magnetocaloric properties"; *Journal of Magnetism Magnetic Materials* **396**, (2015) 228-236.

رفتار غیرعادی وابستگی ناهمسانگردی مغناطیسی به قطر آرایه نانوسیم‌های کبالت

علی‌چراغی، لیلا ؛ قاسمی، علی ؛ پایمزد، ابراهیم ؛ نصراصفهانی، محمدرضا؛ افسر، محمود

دانشکده مهندسی مواد، دانشگاه مالک اشتر ، شاهین‌شهر، اصفهان

چکیده

درک تاثیر ناهمسانگردی مغناطوبلوری بر خواص مغناطیسی نانوسیم‌ها، اساس توسعه فناوری‌های اسپینترونیک است. در این تحقیق، آرایه نانوسیم‌های کبالت با قطرهای ۳۰ و۶۰ نانومتر درون حفره‌های قالب‌های اکسید آلومینیوم آندی از طریق روش الکتروانباشت پالسی AC رشد داده شدند. خواص مورفولوژیکی و مغناطیسی به‌ترتیب با میکروسکوپ الکترونی روبشی نشر میدانی و مغناطومتر نمونه ارتعاشی با قابلیت رسم منحنی‌های بازگشتی مرتبه اول (FORCs) مطالعه شدند. نتایج نشان داد، وادارندگی عمودی آرایه نانوسیم‌های با قطر ۶۰ نانومتر، ۹۵۷ Oe بوده، درحالی‌که برای آرایه نانوسیم‌ها با قطر ۳۰ نانومتر و طول یکسان ۶۹۰Oe است. توزیع میدان کلیدزنی و FORC نشان می‌دهند، که رفتار افزایشی غیرعادی در وادارندگی به افزایش فاز (۱۰۰) hcp کبالت با توزیع حدود ۷۵۰ Oe مربوط می شود.

واژه های کلیدی: *آرایه نانوسیم‌های کبالت، ویژگی‌های مغناطیسی، توزیع میدان کلیدزنی، الکتروانباشت.*

Abnormal behavior of magnetic anisotropy dependence on the diameter of Co nanowires

Alicheraghi, Leila; Ghasemi, Ali; Paimozd, Ebrahim; Nasr Esfahani, Mohammad Reza; Afsar, Mahmoud

Department of Materials Engineering, Malek Ashtar University of Technology, Shahin Shahr, Esfahan

Abstract

Understanding the effect of magnetocrystalline anisotropy on the magnetic properties of nanowires is a fundamental development of spintronic technologies. In this work, Co nanowire arrays with diameters of 30 nm and 60 nm were grown in pores of anodic aluminum oxide templates via a pulsed electrodeposition technique. Morphological and magnetic properties were investigated using field emission scanning electron microscopy and vibrating sample magnetometer equipped with first-order reversal curves (FORCs) software, respectively. The results were indicated that, the perpendicular coercivity of nanowire arrays with diameter of 60 nm is 957 Oe, whereas that of nanowire arrays with diameter of 30 nm is only 690 Oe. The switching field distribution and FORC show that an abnormal increasing behavior of coercivity is related to the increase in (100) Co hcp phase with distribution of about 750 Oe.

***Keywords**: Cobalt nanowire arrays, Magnetic properties, Switching field distribution, Electrodeposition.*

PACS No.81

مقدمه

نانوساختارها، اساس گسترش فناوری‌های جدید و تجهیزات نسل آینده می‌باشند. اندازه کوچک و ویژگی‌های منحصربه‌فرد و قابل تنظیم نانوسیم‌ها سبب شده است که امکان استفاده در بسیاری از تجهیزات مانند حسگرهای بیولوژیکی و شیمیایی، ذخیره و تبدیل انرژی و دستگاه‌های مایکروویو داشته باشند. بنابراین، درک سازوکار رشد و مطالعه مشخصات ساختاری و مغناطیسی آرایه نانوسیم‌ها، برای انواع کاربردهای آینده ضروری است [۱].

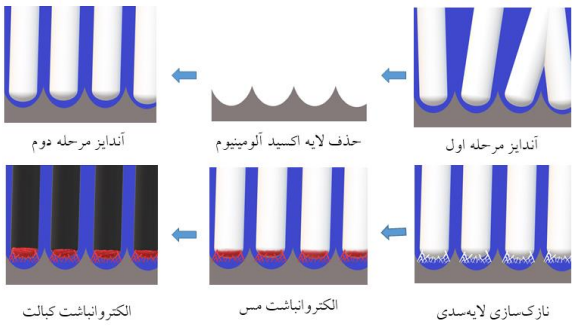
نانوسیم کبالت به‌دلیل کاربردهای بالقوه‌اش و ناهمسانگردی مغناطوبلوری بزرگ در ساختار hcp در زمینه‌های مختلفی از جمله عوامل موثر بر تعیین محور آسان نانوسیم‌ها، فرآیندهای بازگشت مغناطش در آرایه نانوسیم‌ها و برهم‌کنش مغناطیسی بین سیمی مورد مطالعه قرار گرفته است [٤-٢]. قطر نانوسیم مغناطیسی نقش موثری در تعیین رفتارهای فوق دارد. به‌طور معمول، وادارندگی آرایه نانوسیم‌ها با افزایش قطر به‌دلیل افزایش برهم‌کنش مغناطواستاتیک بین سیمی کاهش می‌یابد [٥-٣].

در این مطالعه، وادارندگی غیرعادی عمودی آرایه نانوسیم‌های کبالت مشاهده شد. به این صورت که، وادارندگی آرایه نانوسیم‌های با قطر ٦٠ نانومتر، ٩٥٧ Oe بوده، درحالی‌که برای آرایه نانوسیم‌ها با قطر ٣٠ نانومتر و طول یکسان ٦٩٠ Oe است. برای درک واضح این پدیده، توزیع میدان کلیدزنی و دیاگرام FORC نمونه‌ها مورد بررسی قرار گرفت.

روش آزمایش

ابتدا قالب اکسید آلومینیوم آندی با قطر حفره‌های ٣٠ و ٦٠ نانومتر ساخته شدند. برای ساخت قالب با قطر حفره ٣٠ نانومتر، پس از الکتروپولیش ورق آلومینیوم (با خلوص ٩٩/٩٩٧ درصد)، مرحله اول آندایز در اسید اگزالیک ٠/٣ مولار در دمای ١٧ °C با ولتاژ ثابت ٤٠ ولت به مدت ٦ ساعت انجام شد. لایه اکسید آلومینیوم ایجاد شده با غوطه‌وری در اسید کرومیک ٠/٢ مولار و اسید فسفریک ٠/٥ مولار حذف شد. آندایز مرحله‌ی دوم با شرایط مشابه مرحله‌ی اول و تنها با کاهش زمان آندایز از ٦ به ٣ ساعت انجام گردید. در ادامه به‌منظور کاهش ضخامت لایه‌ی اکسید آلومینیوم سدی، فرآیند نازک‌سازی با کاهش ولتاژ از ٤٠ به ١٠ ولت و با نرخ ٠/٠٠١ ولت در ثانیه انجام شد. برای نمونه‌ها با قطر ٦٠ نانومتر، بعد از مرحله دوم با استفاده از محلول اسید فسفریک قطر از ٣٠ به ٦٠ نانومتر رسید.

پس از ساخت قالب، حفره‌ها توسط الکتروانباشت متناوب پالسی در دو مرحله پر شدند. ابتدا، قسمت دندریتی کف حفره‌ها توسط انباشت مس پر شد. انباشت مس در این ناحیه، هدایت الکتریکی برای انباشت نانوسیم‌های کبالت را بهبود بخشیده و از این طریق پایداری بیشتر در فرآیند الکتروانباشت را به دنبال خواهد داشت. سپس، آرایه نانوسیم‌های کبالت با استفاده از روش الکتروانباشت متناوب پالسی رشد داده شد. طرح‌واره‌ای از روش ساخت در شکل ١ نشان داده شده است. بار انباشت شده با مقایسه قطر قالب‌ها برای ثابت ماندن طول نانوسیم‌ها قابل محاسبه است. بنابراین، با افزایش قطر حفره‌ها از ٣٠ به ٦٠ نانومتر، بار الکتروانباشت نیز باید افزایش یابد [٥].



شکل ١ : طرح‌واره‌ای از مراحل ساخت آرایه نانوسیم‌های کبالت.

برای بررسی خواص مورفولوژیکی نمونه‌های تهیه‌شده و قالب، از میکروسکوپ الکترونی روبشی نشر میدانی (FE-SEM, MIRA3 TESCAN) استفاده شد. خواص مغناطیسی نانوسیم‌ها با استفاده از مغناطومتر نمونه ارتعاشی (VSM؛ شرکت مغناطیس دانش پژوه کاشان) با قابلیت رسم منحنی‌های بازگشتی مرتبه اول در دمای اتاق اندازه‌گیری شد.

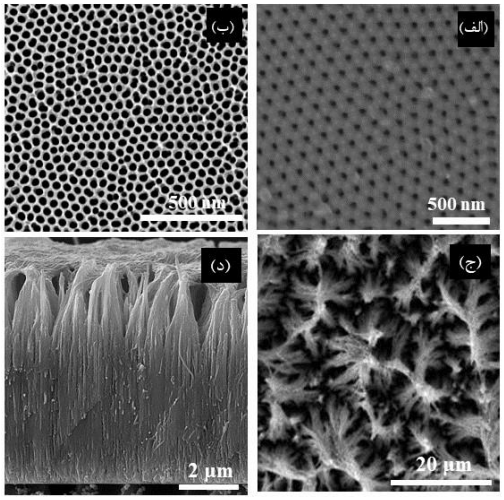
در این تحقیق، آرایه نانوسیم‌های کبالت در دو قطر ٣٠ و ٦٠ نانومتر با استفاده از الکتروانباشت متناوب پالسی در قالب‌های AAO رشد داده شده است. میدان وادارندگی عمودی غیرعادی در قطر ٦٠ نانومتر مشاهده شد. در این راستا، توزیع میدان کلیدزنی و FORC برای بررسی بیشتر رسم گردید.

بحث و نتایج

الف) مطالعه مورفولوژیکی

شکل‌های٢(الف وب) تصاویر میکروسکوپی الکترونی روبشی نشر میدانی (FESEM) از نمای بالای نانوحفره‌های قالب را پس از آندایز دوم برای قطرهای ٣٠ و ٦٠ نانومتر نشان می‌دهد. در هر

دو قالب، فاصله بین حفره‌ای ثابت و برابر ۱۰۰ نانومتر می‌باشد، اما بین نانوسیم‌ها با افزایش قطر حفره‌ها کاهش می‌یابد. در شکل‌های ۲(ج ود) تصاویر FESEM از نمای بالا و سطح مقطع عرضی نانوسیم‌های مغناطیسی کبالت مشاهده می‌شود. از این شکل رشد یکنواخت نانوسیم‌ها، همراه با پرشدگی مناسب و نظم بالای آرایه نانوسیم‌ها را قابل مشاهده است.

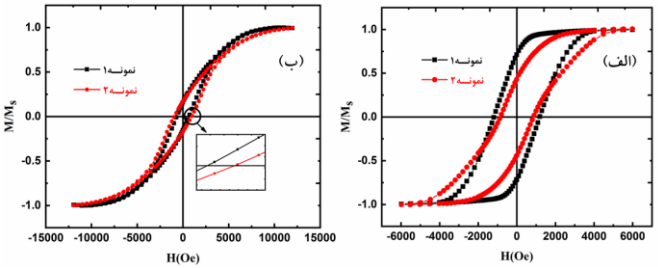


شکل۲ : تصویر FESEM از؛ (الف) نانوحفره‌های قالب اکسید آلومینیوم آندی با قطر۳۰nm، (ب) نانوحفره‌های قالب اکسید آلومینیوم آندی با قطر۶۰nm، (ج) نمای بالای آرایه نانوسیم‌های کبالت پس از حذف قالب اکسید آلومینیوم آندی و (د) سطح مقطع عرضی آرایه نانوسیم‌های کبالت پس از حذف قالب اکسید آلومینیوم آندی.

ب) خواص مغناطیسی با اندازه‌گیری حلقه پسماند

حلقه‌های پسماند موازی و عمود بر محور آرایه نانوسیم‌ها به‌ترتیب در شکل‌های۳(الف و ب) نشان داده شده است. در حالت اعمال میدان موازی با راستای محور طولی نانوسیم‌های Co، با افزایش قطر، میدان وادارندگی موازی کاهش می‌یابد. این موضوع می‌تواند به‌دلیل ایجاد ساختارهای چندبلوری در قطرهای بزرگ‌تر، برهم‌کنش مغناطواستاتیک و افزایش گشتاورهای مغناطیسی باشد [٦-٤]. نیاز به اعمال میدان مغناطیسی قوی‌تر برای اشباع مغناطیسی نانوسیم‌ها در راستای عمود، نشان دهنده نقش ناهمسانگردی شکل و قرارگیری جهت آسان مغناطیسی در طول محور نانوسیم‌ها با نسبت ابعادی (نسبت طول به قطر) بیش‌تر از ۱۰ می‌باشد.

جدول۱ اطلاعات استخراج شده از حلقه‌های پسماند را نشان می‌دهد. نکته قابل توجه این است که نسبت مربعی در حالت موازی رفتاری کاهشی دارد؛ همانگونه که بیان شد این به‌دلیل افزایش برهم‌کنش مغناطواستاتیکی بین سیمی با افزایش قطر می‌باشد.



شکل۳ : حلقه‌های پسماند نمونه۱ و نمونه۲، (الف) موازی با محور آرایه نانوسیم‌های کبالت و (ب) عمود بر محور آرایه نانوسیم‌های کبالت.

جدول۱ : ویژگی‌های مغناطیسی (وادارندگی Hc و نسبت مربعی Sq) آرایه نانوسیم‌های Co با قطرهای مختلف تحت میدان موازی (‖) و عمود (⊥) به محور نانوسیم‌های تعبیه شده در قالب AAO.

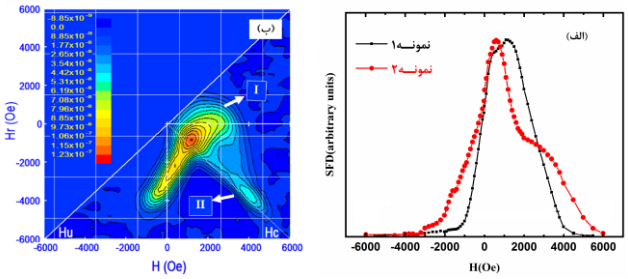
شماره نمونه	میدان اعمال شده موازی		میدان اعمال شده عمودی	
	Hc(Oe)	Sq	Hc(Oe)	Sq
۱	۱۳۳٤	۰/۷۲	٦۹۰	۰/۱۵
۲	۸٦۲	۰/٤٤	۹۵۷	۰/۱۷

به‌عبارت دیگر، محاسبات نظری بیان می‌کند ناهمسانگردی مغناطیسی کلی آرایه نانوسیم‌ها عمدتاً به سه عامل ناهمسانگردی شکل، برهم‌کنش مغناطواستاتیک بین‌سیمی و ناهمسانگردی مغناطوبلوری H_{ma} وابسته است. بنابراین، میدان ناهمسانگردی کل به‌صورت جمع این سه عامل می‌شود [٤ و۷]:

$$H_a=2\pi M_s-6.3\pi M_s a^2L/D^3+H_{ma} \quad (۱)$$

که در آن M_s مغناطش اشباع، a شعاع نانوسیم، L طول نانوسیم و D فاصله بین نانوسیم‌ها می‌باشد. رابطه۱ نشان دهنده وابستگی قوی میدان ناهمسانگردی به قطر است که با نتایج حاصل از نمونه‌های ساخته شده تطابق دارد. شایان ذکر است که مقدار ناهمسانگردی مغناطوبلوری در کبالت با ساختار hcp با ناهمسانگردی شکلی در نانوسیم‌ها قابل مقایسه است. بنابراین، ناهمسانگردی مغناطوبلوری می‌تواند نقش موثری در تعیین نانوسیم‌های کبالت ایفا کند.

در منحنی‌های پسماند شکل۳(ب)، افزایش قابل توجه میدان وادارندگی عمودی آرایه نانوسیم‌ها با قطر ۶۰ نانومتر مشاهده شده است که می‌توان این افزایش را به ناهمسانگردی مغناطوبلوری فاز (۱۰۰) hcp کبالت نسبت داد. به‌عبارت دیگر، افزایش این فاز با ناهمسانگردی مغناطوبلوری عمود بر ناهمسانگردی شکل، منجر به کاهش ناهمسانگردی موثر طولی شده است [۸ و۹].



شکل٤ : (الف) توزیع میدان کلیدزنی حلقه‌ی پسماند مغناطیسی نمونه۱ (رنگ سیاه) و نمونه۲ (رنگ قرمز) را نمایش می‌دهد، (ب) نمودار FORC از نمونه دوم، ناحیهI مربوط به توزیع H_C فاز نرم مغناطیسی و ناحیهII مربوط به توزیع H_C فاز سخت مغناطیسی می‌باشد.

در این راستا، اگر به شاخه نزولی حلقه پسماند نمونه۲ در شکل۳(الف) توجه شود، منحنی مغناطش اشباع را تقریباً به‌دنبال حلقه پسماند نمونه۱ ترک می‌کند و در ادامه به میدان وادارندگی پایین‌تر نزدیک می‌شود. این تغییر پذیرفتاری را می‌توان بر اساس وجود دو فاز مغناطیسی تحلیل کرد [۹]. فاز مغناطیسی نرم‌تر فاز (۱۰۰) hcp کبالت با توزیع ۷۵۰Oe با توجه به میدان کلیدزنی پایین‌تر، ابتدا مغناطش خود را معکوس می‌کند و سپس نوبت به فاز مغناطیسی سخت‌تر که می‌توان آن را به فاز (۱۰۱) و یا (۰۰۲) hcp کبالت نسبت داد، می‌رسد [۱۰]. این رفتار همچنین با وضوح بیشتری در توزیع میدان کلیدزنی (SFD)، در شکل٤(الف) نشان داده شده است و ایجاد ساختار دو فازی در نمونه۲ را مورد تایید قرار می‌دهد. در حقیقت، قله اول در توزیع میدان کلیدزنی مربوط به فاز نرم مغناطیسی و قله دوم نشان دهنده وجود یک فاز سخت-تر است. باتوجه به وابستگی ساختار و منحنی‌های بازگشتی مرتبه اول، این تحلیل و بررسی نیز روی نمونه‌ها انجام شد [۱۰]. دیاگرام FORC نمونه۲ در شکل٤(ب) نشان داده شده و حاکی از چگالی فاز نرم (ناحیهI در دیاگرام FORC) بیشتر نسبت به فاز سخت‌تر (ناحیهII در دیاگرام FORC) و همچنین وجود دو فازمغناطیسی با توزیع H_C متفاوت در نمونه۲ است.

نتیجه‌گیری

آرایه نانوسیم‌های کبالت با قطرهای ۳۰ و ۶۰ نانومتر با طول یکسان به روش الکتروانباشت پالسی در قالب AAO ساخته شدند. اندازه-گیری‌های مغناطیسی نشان داد که میدان وادارندگی و نسبت مربعی درحالت میدان موازی با افزایش قطر کاهش می‌یابد و این به‌دلیل افزایش سهم برهم‌کنش‌های مغناطیسی است که با نتایج نظری و دیگر مطالعات تجربی در توافق می‌باشد. افزایش غیرعادی وادارندگی عمودی از ۶۹۰Oe به ۹۵۷Oe به‌ترتیب در قطرهای ۳۰ و ۶۰ نانومتر دیده شد. توزیع میدان کلیدزنی و دیاگرام FORC نشان می‌دهند که رفتار غیرعادی وادارندگی عمودی به‌دلیل افزایش فاز (۱۰۰) hcp کبالت با ناهمسانگردی مغناطوبلوری عمود بر ناهمسانگردی شکل می‌باشد که منجر به کاهش ناهمسانگردی موثر طولی شده است.

مرجع‌ها

[۱] Moreno, Julián A., et al. "Cylindrical magnetic nanowires applications." *IEEE Transactions on Magnetics* **57**.4 (2021): 1-17.
[۲] Li, Wuxia, et al. "The magneto-optical properties of annealed Co 96 Pt 4 nanowire arrays." *Journal of applied physics* 97.10 (2005): 104306.
[۳] Ivanov, Yu P., M. Vázquez, and O. Chubykalo-Fesenko. "Magnetic reversal modes in cylindrical nanowires." *Journal of Physics D: Applied Physics* **46**.48 (2013): 485001.
[٤] Proenca, M. P., et al. "Co nanostructures in ordered templates: comparative FORC analysis." *Nanotechnology* **24**.47 (2013): 475703.
[٥] Almasi-Kashi, M., et al. "Correlation between microstructure and first-order-reversal-curve of Co nanowire arrays." *Physica Scripta* **90**.8 (2015): 085803.
[٦] Zhang, Huimin, et al. "Growth mechanism and magnetic properties of Co nanowire arrays by AC electrodeposition." *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **468** (2018): 188-192.
[٧] Han, G. C., et al. "Angular dependence of the coercivity and remanence of ferromagnetic nanowire arrays." *Journal of Applied Physics* **93**.11 (2003): 9202-9207.
[٨] Vivas, L. G., et al. "Coercivity of ordered arrays of magnetic Co nanowires with controlled variable lengths." *Applied Physics Letters* **98**.23 (2011): 232507.
[٩] García, J., et al. "Magnetization reversal dependence on effective magnetic anisotropy in electroplated Co–Cu nanowire arrays." *Journal of Materials Chemistry C* **3**.18 (2015): 4688-4697.
[۱۰] Jafari-Khamse, E., M. Almasi Kashi, and A. Ramazani. "Angular dependence of interactions in polycrystalline Co nanowire arrays." *Materials Chemistry and Physics* **159** (2015): 128-138.

اثر دمای کلسینه بر ویژگی‌های ساختاری، ریزساختاری و مغناطیسی لایه‌نازک هگزافریت استرانسیم ساخته شده به روش اسپری پایرولیزیز

رحیمی، مجتبی؛ سرحدی، رضا

گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه بیرجند، بیرجند

چکیده

در این مقاله، لایه‌های نازک هگزافریت استرانسیم ($SrFe_{۱۲}O_{۱۹}$) بر روی زیرلایه Si (۱۰۰) با روش اسپری پایرولیزز نشانده شدند. پس از لایه‌نشانی، لایه‌ها در دماهای مختلف (۶۰۰–۹۰۰ °C)، کلسینه شدند. الگوهای پراش اشعه ایکس، شکل‌گیری ساختار بلوری هگزافریت نوع M با گروه فضایی P6₃/mmc را برای لایه‌های کلسینه‌شده در دماهای ۷۰۰–۹۰۰ °C نشان می‌دهد، در حالیکه هیچ جهت‌گیری مرتبط با فاز هگزاگونال برای لایه‌های کلسینه شده در دمای ۶۰۰ °C مشاهده نشد. تصاویر FESEM، مورفولوژی دانه‌ها را به صورت میله‌ای شکل نشان می‌دهد بطوریکه با افزایش دمای کلسینه، اندازه متوسط دانه‌ها افزایش می‌یابد. مشخصه‌یابی مغناطیسی لایه‌ها در جهت‌های عمود و موازی با سطح لایه تایید کرد که با افزایش دمای کلسینه، همواره مغناطش اشباع افزایش یافته درحالیکه میدان وادارندگی تا دمای ۸۰۰ °C افزایش و سپس کاهش می‌یابد.

واژه‌های کلیدی: *هگزافریت استرانسیم، لایه نازک، اسپری پایرولیزیز، دمای کلسینه*

Effect of calcination temperature on the structural, microstructural and magnetic properties of strontium hexaferrite thin film prepared by spray pyrolysis method

Rahimi, Mojtaba; Sarhaddi, Reza

Department of Physics, Faculty of sciences, University of Birjand, Birjand

Abstract

In this research, the strontium hexaferrite ($SrFe_{12}O_{19}$) thin films were deposited by the spray pyrolysis method on Si(100) substrate. After deposition, the films were calcined at different temperatures (600-900 °C). The XRD patterns show the formation of M-type hexaferrite crystal structure with P6₃/mmc space group for the calcined films at 700-900 °C, whereas no orientation related to hexagonal phase has been observed for films calcined at 600 °C. FESEM images show acicular-like morphology for grains, whereas the average grain size increases with increasing calcination temperature. The magnetic characterization of films in the parallel and perpendicular directions of film plane confirmed that with increasing the calcination temperature, the saturation magnetization (M_s) increases continuously, whereas the coercivity filed (H_c) increases first and then decreases at 800 °C.

***Keywords**: Strontium hexaferrite, thin film, spray pyrolysis, calcination temperature*
PACS No. 75, 81

مقدمه

هگزافریت استرانسیم ($SrFe_{۱۲}O_{۱۹}$)، در دسته هگزافریت‌های نوع M (مگنتوپلامبیت‌ها) با فرمول کلی $MO.6Fe_2O_3$ قرار دارد. این ماده با توجه به پایداری شیمیایی و مکانیکی عالی، مقاومت خوب در مقابل سایش و خوردگی، ناهمسانگردی تک‌محوری، دمای کوری و پسماند مغناطیسی بالا، یکی از گزینه‌های مناسب جهت استفاده در حسگرهای مغناطیسی، محیط‌های ضبط مغناطیسی با چگالی بالا و قطعات مایکروویو می‌باشد. برای تهیه لایه نازک هگزافریت‌ها، تاکنون روش‌های مختلفی مانند لیزر پالسی، پوشش‌دهی چرخشی و کندوپاش استفاده شده‌اند [۱]. در

این بین، روش اسپری پایرولیزیز، به علت ساده و ارزان بودن و همچنین امکان کنترل شرایط اولیه آزمایش جهت دستیابی به لایه نازک با کیفیت، از اهمیت خاصی برخوردار است. با اینحال تاکنون، پژوهشی در زمینه ساخت لایه‌های نازک هگزافریت استرانسیم با روش اسپری پایرولیزیز در ایران انجام نشده است. از این رو در این تحقیق، از روش اسپری پایرولیزیز برای تهیه لایه نازک هگزافریت استرانسیم استفاده شد. سپس اثر دمای کلسینه بر خواص ساختاری، میکروسکوپی (ریزساختار) و مغناطیسی لایه-های نازک ساخته شده، مورد بررسی قرار گرفت.

جزئیات روش ساخت و مشخصه‌یابی لایه‌ها

برای تهیه محلول لایه‌نشانی، در ابتدا و پس از توزین مواد اولیه، نیترات آهن ۹ آبه و نیترات استرانسیم با نسبت مولی آهن به استرانسیم ۱۰ به ۱ در آب دوبار یونیزه حل گردید. سپس اسید سیتریک با نسبت برابر با مجموع مول‌های فلزی به محلول اضافه گردید. در کنار هم‌زدن مداوم محلول به کمک همزن مغناطیسی، محلول تا دمای ۷۰ °C گرم شد و سپس محلول آمونیاک به آرامی و بصورت قطره قطره اضافه شد تا جایی که pH محلول برابر ۷ گردید. سپس محلول به مدت ٤ ساعت در دمای ۱۰۵ °C رفلاکس گردید.

برای آماده‌سازی زیرلایه‌ها، ابتدا ویفر سیلیکونی Si(۱۰۰) به تعدادی زیرلایه کاملاً مشابه و با اندازه یکسان برش داده شد. سپس زیرلایه‌ها با استفاده از حمام اولتراسونیک و به کمک اتانول، استون و آب دوبار یونیزه تمیز شده و در نهایت با گاز نیتروژن خشک گردید. در ادامه، زیرلایه‌ها بر روی هیتر دستگاه اسپری پایرولیزیز قرار داده شد و تا دمای ٤٥٠°C گرم شدند. سپس مقدار ۳۰cc از محلول، طی سه مرحله با آهنگ ۵ cc/min بر روی سطح زیرلایه‌ها، اسپری گردید. دیگر پارامترهای لایه‌نشانی، در جدول ۱ آورده شده است. در پایان، لایه‌ها در کوره الکتریکی به مدت ۱ ساعت در دماهای ٦۰۰، ۷۰۰، ۸۰۰ و ۹۰۰ °C، کلسینه شدند. بر این اساس، نمونه‌ها با عناوین SFO-600، SFO-700، SFO-800 و SFO-900 نامگذاری شدند. با استفاده از الگوی پراش پرتو ایکس (XRD) و به کمک رابطه دبای-شرر، اندازه بلورک‌ها محاسبه شد.

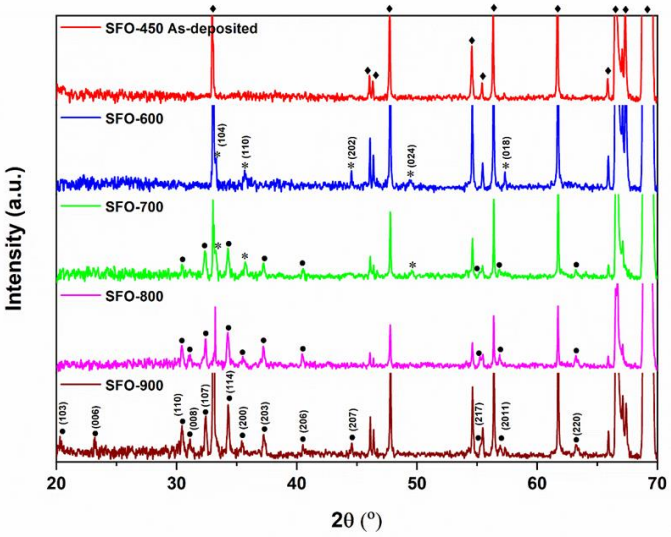
شکل و اندازه دانه‌ها با استفاده از میکروسکوپ الکترونی FESEM بررسی شد. با استفاده از مغناطیس‌سنج نمونه ارتعاشی (VSM) نیز منحنی پسماند نمونه‌ها اندازه گیری و پارامترهای مغناطیسی شامل وادارندگی مغناطیسی (H_C) و مغناطش اشباع (M_s) محاسبه گردید.

جدول ۱: پارامترهای لایه‌نشانی جهت ساخت لایه‌های نازک هگزافریت استرانسیم به روش اسپری پایرولیزیز

فاصله نازل تا صفحه گرمکن دستگاه	زمان استراحت بین مراحل لایه نشانی	گاز حامل	فشار گاز حامل
۳۲ cm	۵ min	هوا	۲/۵ bar

نتایج و بحث

شکل ۱، الگوی پراش پرتو ایکس لایه‌های هگزافریت استرانسیم بدون کلسینه و کلسینه شده در دماهای مختلف را نشان می‌دهد.

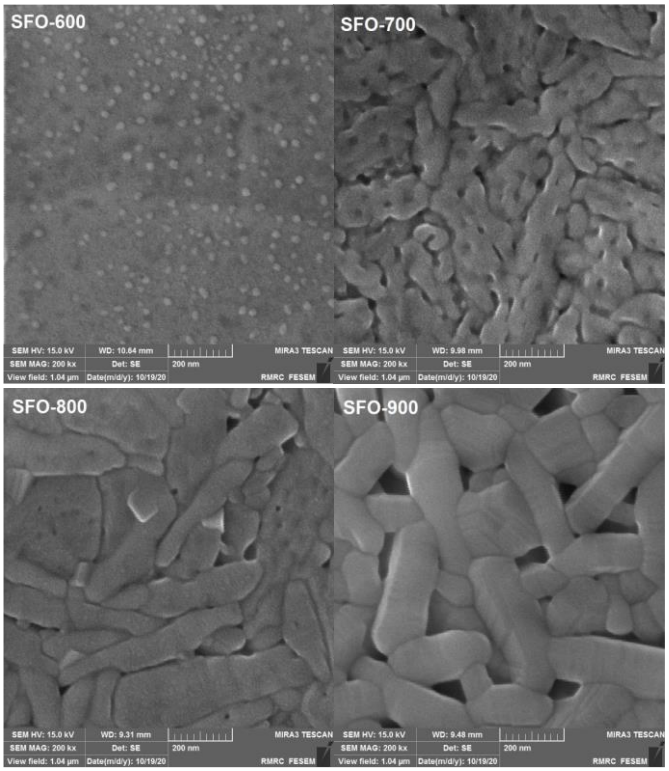


شکل ۱: الگوی XRD لایه‌های $SrFe_{۱۲}O_{۱۹}$ قبل و بعد از کلسینه شدن در دماهای مختلف ((●) $SrFe_{12}O_{19}$، (❋) α-Fe_2O_3 و (♦) Si)

همانطور که مشاهده می‌شود در نمونه لایه‌نشانی شده بدون کلسینه (SFO-450,As-deposited)، هیچ قله‌ای مربوط به اکسید آهن، فریت اسپینلی استرانسیم و هگزافریت استرانسیم مشاهده نمی‌شود. کلیه قله‌های مشاهده شده در این نمونه با قله‌های متعلق به زیرلایه Si(100) مطابقت دارد که نشان‌دهنده این است که دمای زیرلایه (٤٥٠ °C)، برای تشکیل فاز بلوری هگزافریت استرانسیم کافی

نبوده و نمونه دارای طبیعت آمورف می‌باشد. از طرف دیگر، قله‌های ظاهرشده در الگوی XRD نمونه کلسینه شده در دمای °C ٦٠٠، مربوط به هماتیت (α-Fe_2O_3) است و هیچ قله‌ای مربوط به فاز بلوری مگنتوپلامبیت مشاهده نمی‌شود. بر این اساس، می‌توان نتیجه گرفت که دمای °C ٦٠٠ نیز برای تشکیل فاز هگزافریت استرانسیم کفایت نمی‌کند. با افزایش دمای کلسینه به °C ٧٠٠، تعدادی از قله‌های مربوط به فاز هگزاگونال $SrFe_{12}O_{19}$ مشاهده می‌شود. ضمناً اگرچه با افزایش دما از °C ٦٠٠ به °C ٧٠٠ برخی از قله‌های α-Fe_2O_3 از بین رفته است، با این حال هنوز تعدادی از قله‌های α-Fe_2O_3 نیز وجود دارد. بر این اساس نتیجه می‌گیریم که در دمای °C٧٠٠، فاز هگزافریت استرانسیم شکل گرفته ولی ساختار بلوری لایه‌ها، هنوز به صورت تک‌فاز تشکیل نشده است. لایه‌های کلسینه شده در دماهای °C ٨٠٠ و °C ٩٠٠ کاملاً تک‌فاز بوده و کلیه قله‌ها مربوط به فاز بلوری $SrFe_{12}O_{19}$ می‌باشد. نتایج محاسبات نشان می‌دهد با افزایش دمای کلسینه از °C ٧٠٠ به °C ٩٠٠، متوسط اندازه بلورک‌ها از ٤٨ به ٥٩ نانومتر افزایش می‌یابد. همچنین ثابت‌های شبکه a و c به ترتیب از ٥/٨٦ به ٥/٨٧ و از ٢٢/٧٣ به ٢٣/٠١ آنگستروم تغییر می‌کند که موید وجود ناهمسانگردی در سلول واحد هگزافریت استرانسیم است [٢].

تصاویر FESEM نمونه‌های کلسینه شده در دماهای °C ٦٠٠ تا °C ٩٠٠ در شکل ٢ نشان داده شده است. ریخت‌شناسی سطح لایه‌ها به ویژه برای دماهای کلسینه بالاتر از °C ٦٠٠، نشان می‌دهد دانه‌های تشکیل دهنده لایه‌ها، میله‌ای شکل (سوزن مانند) هستند بطوریکه وقتی از لبه، این دانه‌ها را نگاه کنیم، شبیه پلاکت به نظر می‌رسند [٣]. این موضوع در لایه SFO-900 به وضوح قابل مشاهده است. علاوه بر این، لایه‌ها بصورت پیوسته شکل گرفته‌اند و توزیع دانه‌ها نیز نسبتاً همگن می‌باشد. متوسط اندازه قطر دانه‌ها در دماهای ٦٠٠، ٧٠٠، ٨٠٠ و °C ٩٠٠ به ترتیب برابر ١٩، ٦٤، ١٠٩ و ١٣١ نانومتر برآورد گردید که نشان می‌دهد با افزایش دمای کلسینه، متوسط اندازه دانه‌ها نیز افزایش می‌یابد [٤].



شکل ٢: تصاویر FESEM لایه‌های $SrFe_{12}O_{19}$ کلسینه‌شده در دماهای مختلف

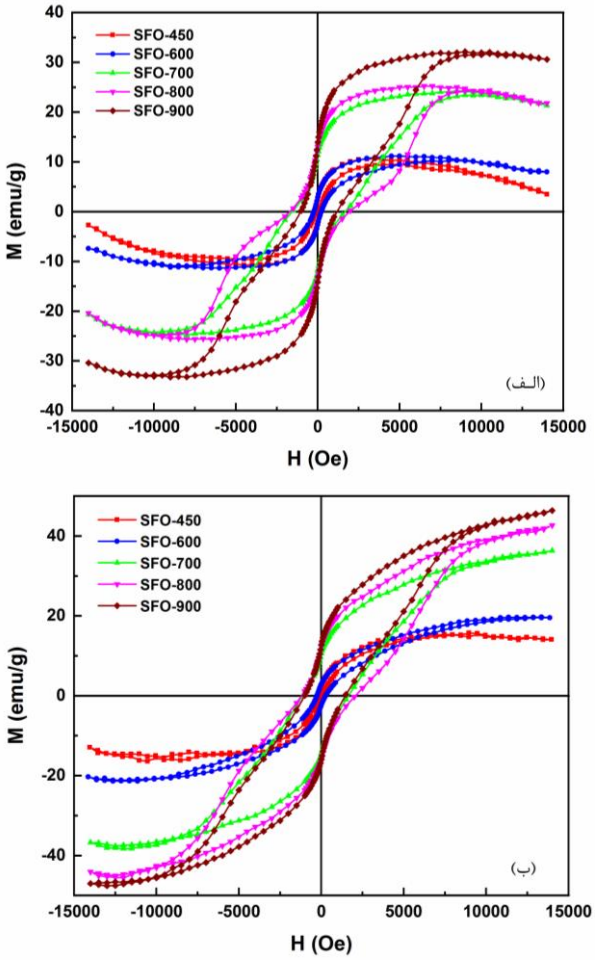
شکل ٣، منحنی M-H لایه‌های $SrFe_{12}O_{19}$ به همراه سهم زیرلایه را در دمای اتاق، قبل و بعد از کلسینه‌شدن و در دو حالت میدان موازی و عمود بر سطح لایه نشان می‌دهد. مقادیر مغناطش اشباع(M_s) و وادارندگی(H_c) لایه‌ها در جدول٢ گزارش شده است.

جدول ٢: پارامترهای مغناطیسی لایه‌های $SrFe_{12}O_{19}$ قبل و بعد از کلسینه شدن

نمونه	موازی با سطح لایه		عمود بر سطح لایه	
	M_s (emu/g)	H_c (Oe)	M_s (emu/g)	H_c (Oe)
SFO-450	١٠/٧١	١٤٧	١٥/٧٢	١١٠
SFO-600	١١/١٦	٢٢٦	٢٠/٥٣	٢٦٣
SFO-700	٢٤/٥٤	١٦١٩	٣٧/٣	١٣٩٥
SFO-800	٢٥/٤٤	١٨١٨	٤٤/١٥	١٦٣٢
SFO-900	٣٢/٦٩	١١٠٩	٤٦/٩٨	١٢٣٢

با توجه به شکل ٣، نمونه‌ها در راستای موازی با سطح سریع‌تر به اشباع می‌رسند. در نتیجه، محور آسان مغناطیسی نمونه‌ها (محور c) در صفحه موازی با سطح لایه قرار دارد [٥]. در بین لایه‌های کلسینه شده، کمترین مقدار M_s مربوط به لایه SFO-600 است. این مطلب در توافق با نتایج XRD، به دلیل وجود فاز α-Fe_2O_3 در

نمونه و همچنین به خاطر داشتن اندازه ذرات کوچک‌تر در مقایسه با سایر لایه‌ها است که مغناطش اشباع را کاهش می‌دهد [٦].



شکل ۳: منحنی M-H لایه $SrFe_{۱۲}O_{۱۹}$ قبل و بعد از کلسینه: (الف) میدان موازی با سطح لایه (ب) میدان عمود بر سطح لایه

با افزایش دمای کلسینه از ٦۰۰ به ۷۰۰ درجه سانتیگراد، مغناطش اشباع افزایش چشمگیری نسبت به سایر دماها پیدا می‌کند که بیانگر شکل‌گیری فاز بلوری هگزافریت استرانسیم است و با نتایج XRD در شکل ۱ نیز تطابق کامل دارد [٤]. کم بودن مغناطش اشباع لایه‌ها در مقایسه با مغناطش هگزافریت استرانسیم حجمی (M_s = 92.6 emu/g) را می‌توان به تشکیل دانه‌های سوزنی شکل نسبت داد که سطح لایه‌ها را اشغال کرده و تمایل به کاهش مغناطش اشباع به ویژه در حالت عمود بر سطح دارند [۷]. با افزایش دمای کلسینه از ٦۰۰ تا ۸۰۰ °C، H_c نیز افزایش می‌یابد اما با افزایش دمای کلسینه به ۹۰۰ °C، روند کاهشی می‌شود. این نحوه رفتار می‌تواند ناشی از انتقال ساختار مغناطیسی تک حوزه (SD) به چند حوزه (MD)، همزمان با رشد اندازه ذرات باشد. چرا که در حالت ساختار مغناطیسی چند حوزه، جابجایی دیوار بین حوزه‌ها، آسان‌تر صورت می‌گیرد [۸].

نتیجه‌گیری

نتایج حاصل از این پژوهش را می‌توان بدین صورت خلاصه کرد:

(الف) افزایش دمای کلسینه از ٦۰۰ تا ۹۰۰ درجه سانتیگراد، منجر به بهبود تشکیل فاز بلوری $SrFe_{۱۲}O_{۱۹}$ می‌گردد.

(ب) کمترین دمای کلسینه برای تشکیل هگزافریت استرانسیم تک فاز در این تحقیق ۸۰۰ °C بدست آمد که بیشترین مقدار میدان وادارندگی را هم نسبت به سایر نمونه‌ها دارد.

(ج) متوسط اندازه بلورک‌ها و دانه‌ها با افزایش دمای کلسینه، افزایش می‌یابد.

(د) برای دماهای کلسینه بالاتر از ٦۰۰ درجه سانتیگراد، دانه‌هایی میله‌ای شکل و پلاکت مانند، سطح لایه را پر کرده‌اند.

(ر) مغناطش اشباع لایه‌ها با افزایش دمای کلسینه افزایش می‌یابد که تاییدکننده کاهش فاز ناخالصی و افزایش اندازه دانه‌ها می‌باشد.

مرجع‌ها

[۱] P. Kameli; "Structure and magnetization of strontium hexaferrite ($SrFe_{12}O_{19}$) films prepared by pulsed laser deposition"; *Frontiers in Materials* **8**, (2021) 365.

[۲] A.D. Volodchenkov, S. Ramirez, R. Samnakay, R. Salgado, Y. Kodera, A.A. Balandin and J.E. Garay; "Magnetic and thermal transport properties of $SrFe_{12}O_{19}$ permanent magnets with anisotropic grain structure"; *Materials & Design* **125**, (2017) 62-68.

[۳] S. M. Masoudpanah and S. A. S. Ebrahimi; "Synthesis and characterization of nanostructured strontium hexaferrite thin films by the sol–gel method"; *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **324(14)**, (2012) 2239–2244.

[٤] S. M. Masoudpanah and S. A. S. Ebrahimi; "Structure and magnetic properties of nanocrystalline $SrFe_{12}O_{19}$ thin films synthesized by the Pechini method"; *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **342**, (2013)128–133.

[٥] A. Yourdkhani, D. Caruntu, A. K. Perez and G. Caruntu; "Liquid phase deposition of barium hexaferrite thin films"; *The Journal of Physical Chemistry C* **118(4)**, (2014) 1774–1782.

[٦] M. Naseri and R. Ghasemi; "Structure and physical properties of $Fe_6O_8/BaFe_6O_{11}$ nanostructure"; *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **406**, (2016) 200–206.

[۷] A. R. Abuzir and S. A. Salman; "Fabrication and micromagnetic modeling of barium hexaferrite thin films by RF magnetron sputtering" *Results in Physics* **8**, (2018) 587–591.

[۸] E. Roohani, H. Arabi, R. Sarhaddi, S. Sudkhah and A. Shabani; "Effect of annealing temperature on structural and magnetic properties of strontium hexaferrite nanoparticles synthesized by sol–gel auto-combustion method"; *International Journal of Modern Physics B* ***29*(27)**, (2015) 1550190.

برانگیختگی‌های توپولوژیک در آرایه‌ای از چگالیده‌های بوز-انیشتین

درویشی، مریم[1]؛ پوراسمعیلی، فاطمه[1]؛ عابدین‌پور، سعید[1]

[1]دانشکده فیزیک، دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه، زنجان

چکیده

در این مقاله به مطالعه خصوصیات توپولوژیک آرایه‌ای از چگالیده‌های بوز-انیشتین می‌پردازیم. نشان می‌دهیم که در یک ابرشبکه دو مولفه‌ای هنگامی که برهمکنش بین سلولی در مقایسه با برهمکنش درون سلولی قوی‌تر باشد حالت‌های لبه‌ای توپولوژیک در مدهای جمعی ظاهر می‌شوند و سیستم در فاز غیربدیهی قرار دارد.

واژه های کلیدی: *چگالیده‌های بوز-انیشتین، خصوصیات توپولوژیک، ابرشبکه، مدهای جمعی.*

Topological Excitations in an Array of Bose-Einstein

Darvishi, Maryam[1]; Pouresmaeeli, Fatemeh[1]; Abedinpour, Saeed[1]

[1] *Department of Physics, Institute for Advanced Studies in Basic Sciences, Zanjan*

Abstract

This paper studies the topological properties of an array of Bose-Einstein condensates. We show that in a bi-partite superlattice the topological edge collective modes emerge when the intercell interaction is larger than the intracell interaction and the system is in a topologically nontrivial phase.

***Keywords**: Bose-Einstein condensates, topological properties, superlattice, collective modes.*

PACS No.

مقدمه

در سال‌های اخیر، مطالعه خصوصیات توپولوژیک مواد به دلیل کاربردهای گسترده در موضوعات مختلف از جمله الکترونیک [1]، فوتونیک [2] و محاسبات کوانتومی [3] بسیار مورد توجه قرار گرفته است. حالت‌های توپولوژیک مواد به عنوان حالت‌های لبه‌ای شناخته می‌شوند که در حضور بی‌نظمی و اختلال از نظر توپولوژیکی مقاوم هستند [4]. وجود این حالت‌ها نقش مهمی در سیستم‌های هال کوانتومی و عایق‌های توپولوژیک دارند [5]. سیستم‌های یک بعدی مانند مدل معروف Su-Schrieffer-Heeger (SSH) دارای فاز زک کوانتیزه و فاز غیر بدیهی توپولوژیک هستند که این خصوصیات توپولوژیک از تقارن کایرال نشأت می‌گیرند [4]. در صورتی که در مدل SSH دوبعدی فاز غیربدیهی حتی در غیاب انحنای بری هم قابل مشاهده است [6].

بسترهای بسیاری از جمله ابرشبکه‌ها [7] و آرایه‌هایی از موجبرها [8] برای مشاهده و ایجاد خصوصیات توپولوژیک بکار گرفته شده است. در یافته‌های اخیر یک ابرشبکه فوتونی با تعداد عناصر دلخواه در هر سلول واحد برای خلق تعداد قابل تنظیمی از حالت‌های لبه‌ای ارائه شد [9]. همچنین در یک بلور فوتونی متشکل از فلز و خلأ، نمودار فاز بدست آمد و اثر ضخامت لایه‌ها بر وجود حالت‌های لبه‌ای مطالعه شد[10]. در مطالعات تجربی، وجود حالت‌های لبه‌ای در آرایه‌های موجبر سیلیکونی دارای تقارن زمان-پاریته تایید شد [11].

در این کار ما به بررسی امکان ظهور حالت‌های لبه‌ای و فاز توپولوژیک در مدهای جمعی یک ابرشبکه یک بعدی از چگالیده‌های بوز-انیشتین می‌پردازیم. خواهیم دید در شرایطی که

برهمکنش بین سلولی از برهمکنش درون سلولی قوی‌تر باشد حالت‌های لبه‌ای در طیف سرعت صوت این مدها مشاهده می‌شود و سیستم در فاز غیر بدیهی یا توپولوژیک قرار می‌گیرد.

مدل فیزیکی

یک آرایه N تایی از چگالیده‌های بوز-انیشتین را که هر عنصر این آرایه شامل ذراتی با جرم m_i و چگالی n_i است را درنظر می‌گیریم. اعمال یک پتانسیل خارجی سبب ایجاد نوسانات چگالی به شکل زیر می‌شود:

$$\delta n_i(q,\omega)=\sum_{j=1}^{N}\chi_{i,j}(q,\omega)V_j^{ext}(q,\omega)\quad ,i=1,...,N, \tag{1}$$

که در رابطه بالا $\chi_{i,j}(q,\omega)$ عناصر ماتریس تابع پاسخ خطی چگالی-چگالی برهمکنشی هستند که در تقریب فاز تصادفی (RPA) می‌توان آن را به صورت زیر نوشت

$$\chi(q,\omega)=\left[\mathrm{I}\ -\Pi(q,\omega)V(q)\right]^{-1}\Pi(q,\omega), \tag{2}$$

که I ماتریس واحد $N\times N$، $\Pi(q,\omega)$ ماتریس تابع پاسخ چگالی-چگالی غیر برهمکنشی و $V(q)$ ماتریس برهمکنش بین ذرات است.

حالت‌های جمعی را می‌توان از شرط تشدید برای معادله (1) به دست آورد

$$\chi^{-1}(q,\omega)\delta n(q,\omega)=0, \tag{3}$$

که در واقع $\chi^{-1}(q,\omega)=\Pi^{-1}(q,\omega)-V(q)$ است. در صورتی که تونل زنی بین چگالیده‌های مختلف وجود نداشته باشد، $\Pi_{i,j}(q,\omega)=\delta_{i,j}\Pi_i(q,\omega)$ است. تابع پاسخ چگالی-چگالی غیربرهمکنشی یک گاز بوزونی با چگالی n_i و انرژی $\varepsilon_{q,i}=\hbar^2q^2/(2m_i)$ در دمای صفر به صورت زیر خواهد بود

$$\Pi_i(q,\omega)=\frac{2n_i\varepsilon_{q,i}}{(\hbar\omega)^2-\varepsilon_{q,i}^2}. \tag{4}$$

با کمی مرتب سازی، رابطه (3) را می‌توان به شکل یک مسئله ویژه مقداری تعمیم یافته نوشت

$$\mathrm{D}(q)\delta n(q,\omega)=E^2\mathrm{S}(q)\delta n(q,\omega), \tag{5}$$

که $E=\hbar\omega$ و عناصر ماتریس $\mathrm{D}(q)$ و $\mathrm{S}(q)$ به صورت زیر تعریف می‌شوند

$$\mathrm{D}_{i,j}(q)=V_{i,j}(q)+\delta_{i,j}\frac{\varepsilon_{q,i}}{2n_i},$$

و

$$\mathrm{S}_{i,j}(q)=\frac{\delta_{i,j}}{2n_i\varepsilon_{q,i}}. \tag{6}$$

درنهایت مسئله ویژه مقداری زیر را خواهیم داشت

$$\mathrm{D}(q)\delta\tilde{n}(q,\omega)=E^2\delta\tilde{n}(q,\omega), \tag{7}$$

که

$$\mathrm{D}_{i,j}(q)=\left[\mathrm{S}^{-\frac{1}{2}}(q)D(q)\mathrm{S}^{-\frac{1}{2}}(q)\right]_{i,j}=\varepsilon_{q,i}^2\delta_{i,j}+2\sqrt{n_i\varepsilon_{q,i}n_j\varepsilon_{q,j}}V_{i,j}(q), \tag{8}$$

و

$$\delta\tilde{n}(q,\omega)=\mathrm{S}^{\frac{1}{2}}(q)\delta n(q,\omega). \tag{9}$$

حال می‌توان برانگیختگی‌های جمعی را از رابطه زیر بدست آورد

$$\det\left(\mathrm{D}(q)-E^2(q)\mathrm{I}\ \right)=0. \tag{10}$$

برای یک سیستم متقارن که چگالی لایه‌ها و جرم تمام ذرات یکسان باشند داریم

$$\mathrm{D}(q)=\varepsilon_q^2\mathrm{I}\ +2n\varepsilon_qV(q)\mathrm{I} \tag{11}$$

اکنون یک شبکه AB را درنظر می‌گیریم که در آن دو نوع چگالیده بوز-انیشتین به صورت یک ابرشبکه یک بعدی نامتناهی مرتب شده‌اند. این می‌تواند آرایه‌ای متناوب از دو لایه باشد. در این ساختار فاصله بین A و B در هر سلول واحد d و ثابت شبکه a است. همچنین چگالی ذرات در لایه‌های A و B به ترتیب n_A و n_B است (شکل 1). با انجام تبدیل فوریه در راستای امتداد شبکه(در اینجا z) خواهیم داشت:

$$\mathrm{D}(q,k)=\begin{pmatrix}\varepsilon_{q,A}^2+2n_A\varepsilon_{q,A}V_{AA}(q,k) & 2\sqrt{n_A\varepsilon_{q,A}n_B\varepsilon_{q,B}}V_{AB}(q,k)\\ 2\sqrt{n_B\varepsilon_{q,B}n_A\varepsilon_{q,B}}V_{AB}^*(q,k) & \varepsilon_{q,B}^2+2n_B\varepsilon_{q,B}V_{BB}(q,k)\end{pmatrix}. \tag{12}$$

که در آن $\varepsilon_{A(B),q}=\hbar^2q^2/\left(2m_{A(B)}\right)$ و

$$\begin{aligned}V_{AA}(q,k)&=V_{Ai,Ai}(q)+2\cos(ka)V_{Ai,Ai+1}(q)+2\cos(2ka)V_{Ai,Ai+2}(q)+\cdots,\\ V_{BB}(q,k)&=V_{Bi,Bi}(q)+2\cos(ka)V_{Bi,Bi+1}(q)+2\cos(2ka)V_{Bi,Bi+2}(q)+\cdots,\\ V_{AB}(q,k)&=V_{Ai,Bi}(q)e^{ikd}+V_{Ai,Bi-1}(q)e^{-ik(a-d)}+V_{Ai,Bi+1}(q)e^{ik(a+d)}+\cdots.\end{aligned} \tag{13}$$

در رابطه بالا $V_{\alpha i,\beta j}(q)$ برهمکنش بین لایه α از سلول i ام و لایه β از سلول j ام است.

اگر دو لایه A و B را یکسان درنظر بگیریم به طوری که جرم ذرات و چگالی لایه‌ها یکسان باشند ولی فاصله درون سلولی و بین سلولی دو لایه، متفاوت باشد، ماتریس $\mathrm{D}(q,k)$ برای چنین سیستمی به شکل زیر ساده می‌شود:

$$\mathrm{D}(q,k)=\begin{pmatrix} \varepsilon_q^2+2n\varepsilon_q V_{AA}(q,k) & 2n\varepsilon_q V_{AB}(q,k) \\ 2n\varepsilon_q V_{AB}^*(q,k) & \varepsilon_q^2+2n\varepsilon_q V_{BB}(q,k) \end{pmatrix}. \quad (14)$$

در واقع، این ماتریس شبیه هامیلتونی مدل معروف SSH است بنابراین انتظار داریم که دارای خواص توپولوژیکی یکسانی باشند. برای ساده سازی بیشتر، یک برهمکنش کوتاه برد بین ذرات درنظر می‌گیریم که در آن برهمکنش‌های درون لایه‌ای را با v_S، برهمکنش بین دولایه A و B دورن سلول واحد را با v_I و برهمکنش بین دو لایه A و B مجاور از دو سلول متفاوت را با v_O تقریب می‌زنیم که تمام این پتانسیل‌ها مستقل از q هستند. در این صورت می‌توانیم ماتریس $\mathrm{D}(q,k)$ را به صورت زیر بازنویسی کنیم:

$$\mathrm{D}(q,k)=\begin{pmatrix} \varepsilon_q^2+2n\varepsilon_q v_S & 2n\varepsilon_q e^{ikd}\left(v_I+v_O e^{-ika}\right) \\ 2n\varepsilon_q e^{-ikd}\left(v_I+v_O e^{+ika}\right) & \varepsilon_q^2+2n\varepsilon_q v_S \end{pmatrix}. \quad (15)$$

بنابراین پاشندگی حالت‌های جمعی و سرعت صوت–صفر در طول موج‌های بلند، برای چنین سیستمی به شکل زیر خواهد بود

$$E_\pm^2(q,k)=\varepsilon_q^2+2n\varepsilon_q\left[v_S\pm\sqrt{v_I^2+v_O^2+2v_I v_O\cos(ka)}\right], \quad (16)$$

$$v_\pm(k)=\lim_{q\to 0}\frac{E_\pm(q,k)}{\hbar q}=\sqrt{\frac{n}{m}\left[v_S\pm\sqrt{v_I^2+v_O^2+2v_I v_O\cos(ka)}\right]}. \quad (17)$$

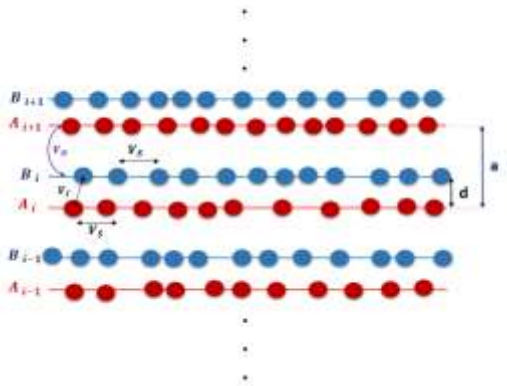
عدد چرخش که معیاری برای تشخیص فاز های توپولوژیک در یک سیستم است را می توان با محاسبه انتگرال زیر بدست آورد:

$$w=\frac{1}{2\pi}\int_{FBZ} dk\,\langle u_n(k)|i\partial_k|u_n(k)\rangle, \quad (18)$$

که $|u_n(k)\rangle$ حالت های بلاخ با شاخص نواری n می باشند. عدد چرخش برای این سیستم به صورت زیر بدست می‌آید:

$$w=\begin{cases} 1 & v_I<v_O \\ 0 & v_I>v_O \\ undefined & v_I=v_O \end{cases}, \quad (19)$$

یعنی در حالتی که $v_I<v_O$ باشد سیستم در فاز توپولوژیک غیربدیهی قرار دارد.

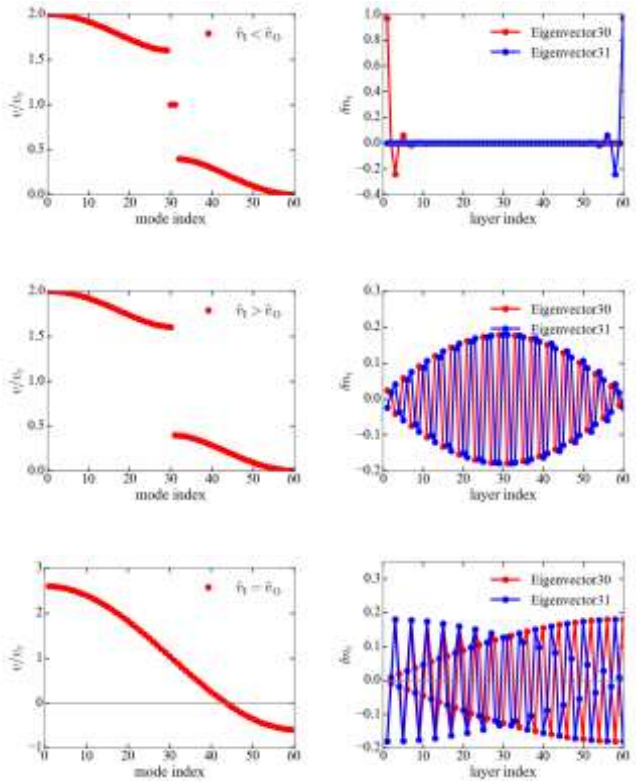


شکل 1 : ساختار یک ابرشبکه یک بعدی از چگالیده‌های بوز–انیشتین.

نتایج

در این بخش طیف سرعت صوت مدهای جمعی مورد بررسی قرار می‌گیرد. این نتایج برحسب سه پارامتر بدون بعد، جفت شدگی درون لایه‌ای، درون سلولی و بین سلولی $\tilde{v}_{S/I/O}=nv_{S/I/O}/mv_c^2$ بیان شدند که $v_c=\hbar/ma$ تعریف شده است. در شکل (2) سرعت صوت و دو ویژه بردار مدهای جمعی یک ابرشبکه محدود به ازای مقادیر متفاوت $\tilde{v}_I=0.2,\ \tilde{v}_O=0.8$، $\tilde{v}_I=0.8,\ \tilde{v}_O=0.2$ و $\tilde{v}_I=\tilde{v}_O=0.8$ نشان داده شده است. هنگامی که برهمکنش بین سلولی از برهمکنش درون سلولی قوی تر باشد حالت‌های لبه‌ای با تبهگنی دوگانه در گاف ظاهر می‌شوند در این شرایط نوسان‌های چگالی متناظر با این حالت‌ها در لبه‌ها جایگزیده هستند. وجود این حالت‌های جایگزیده نشان دهنده این است که سیستم در فاز غیربدیهی یا توپولوژیک قرار دارد. اما در صورتی که برهمکنش بین سلولی ضعیف‌تر از برهمکنش درون سلولی باشد حالت‌های لبه‌ای ظاهر نمی‌شوند و تنها حالت‌های توده (بالک) وجود دارد. در این شرایط، سیستم در فاز بدیهی قرار دارد. همچنین در حالت سوم که قدرت برهمکنش بین سلولی و درون سلولی یکسان هستند گاف بسته شده و مانند حالت قبل نوسان‌های چگالی غیرجایگزیده هستند. با توجه به رابطه (18)، مقدار عدد چرخش برای این حالت‌ها به ترتیب 1، 0 و تعریف نشده است.

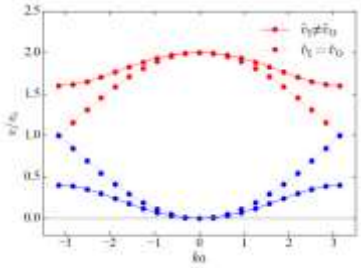
شکل (3) سرعت صوت مدهای جمعی یک ابرشبکه نامحدود در دو حالت $\tilde{v}_I = 0.2, \tilde{v}_O = 0.8$ و $\tilde{v}_I = \tilde{v}_O = 0.5$ را نشان می‌دهد. همانطور که انتظار می‌رود در صورتی که این دو برهمکنش مساوی یا نامساوی باشند به ترتیب گاف بسته شده و غیر صفر است.



شکل2 : سرعت صوت (در واحد v_c) و ویژه بردارهای مدهای جمعی یک ابرشبکه از چگالیده های بوز-انیشتین با 60 آرایه در سه حالت $\tilde{v}_I = 0.2, v_O = 0.8$ (بالا)، $\tilde{v}_I = 0.8, v_O = 0.2$ (وسط) و $\tilde{v}_I = \tilde{v}_O = 0.8$ (پایین). در اینجا $\tilde{v}_S = 1$ اختیار شده است.

نتیجه گیری

به طور خلاصه، ما به مطالعه یک ابرشبکه یک بعدی متشکل از چگالیده‌های بوز-انیشتین پرداختیم و اثر برهمکنش‌های بین سلولی و درون سلولی را بر خصوصیات توپولوژیک مدهای جمعی این ابرشبکه بررسی کردیم. نشان دادیم در صورتی که برهمکنش بین سلولی از برهمکنش درون سلولی قوی‌تر باشد حالت‌های لبه‌ای در طیف سرعت صوت مدهای جمعی قابل مشاهده بوده و سیستم در فاز توپولوژیکی غیربدیهی قرار دارد.



شکل3 : سرعت صوت مدهای جمعی یک ابرشبکه نامحدود از چگالیده‌های بوز-انیشتین برای مقادیر $\tilde{v}_I = 0.2, \tilde{v}_O = 0.8$ و $\tilde{v}_I = \tilde{v}_O = 0.5$. در اینجا $\tilde{v}_S = 1$ می‌باشد.

مرجع‌ها

[1] M. Z. Hasan and C. L. Kane, "Colloquium: Topological insulators", *Rev. Mod. Phys.* **82**, No. 4 (2010) 3045-3067; X. Qi and S. Zhang, "Topological insulators and superconductors", *Rev. Mod. Phys.* **83**, No. 4 (2011) 1057-1110.

[2] S. Longhi, "Probing one-dimensional topological phases in waveguide lattices with broken chiral symmetry", *Optics Letters*, **43**, No. 19 (2018) 4639-4642.

[3] N. Petropoulos, R. Bogdan Staszewski, D. Leipold, and E. Blokhina, "Topological order detection and qubit encoding in Su–Schrieffer–Heeger type quantum dot arrays", *Journal of Applied Physics*, **131**, No. 7 (2022) 74401-74415.

[4] J. K. Asbóth, L. Oroszlány, and A. Pályi, "*A short course on topological insulators*", Lecture Notes in Physics (2016).

[5] B. A. Bernevig, T. L. Hughes, and S. C. Zhang, "Quantum spin Hall effect and topological phase transition in HgTe quantum wells", *Science*, **314**, No. 5806 (2006) 1757-1761.

[6] F. Liu and K. Wakabayashi, "Novel topological phase with a zero berry curvature", *Phys. Rev. Lett.* **118**, No. 7 (2017) 076803.

[7] N. Malkova, I. Hromada, X. Wang, G. Bryant, and Z. Chen, "Observation of optical Shockley-like surface states in photonic superlattices", *Optics Letters*, **34**, No. 11 (2009) 1633-1635.

[8] Y. E. Kraus, Y. Lahini, Z. Ringel, M. Verbin, and O. Zilberberg, "Topological states and adiabatic pumping in quasicrystals", *Phys. Rev. Lett.* **109**, No. 10 (2012) 106402.

[9] B. Midya and L. Feng, "Topological multiband photonic superlattices", *Phys. Rev. A.* **98**, No. 4 (2018) 043838.

[10] H. Jiang, W. Liu, J. Xu, B. Gao, C. Zhu, S. Xie, and Y. Yang, "Topological edge modes in one-dimensional photonic crystals containing metal", *OSA Continuum*, **4**, No. 5 (2021) 1626-1639.

[11] W. Song, W. Sun, C. Chen, Q. Song, S. Xiao, S. Zhu, and T. Li, "Breakup and recovery of topological zero modes in finite non-Hermitian optical lattices", *Phys. Rev. Lett.* **123**, No. 16 (2019) 165701.

تأثیر نانوذرات ZnO بر تشکیل فاز و ویژگی‌های ابررسانایی $Bi_{1.6}Pb_{0.4}Sr_2Ca_2Cu_3O_{10+\delta}$

آفتابی، علی[۱]؛ مظفری، مرتضی[۲]

[۱] گروه فیزیک، دانشگاه کردستان، سنندج

[۲] دانشکده فیزیک، دانشگاه اصفهان، اصفهان

چکیده

تأثیر افزودن مقادیر گوناگون نانوذرات ZnO بر میزان تشکیل فاز و ویژگی‌های ابررسانایی ترکیب $Bi_{1.6}Pb_{0.4}Sr_2Ca_2Cu_3O_{10+\delta}$ مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج نشان می‌دهد که افزودن نانوذرات ZnO تا 0.2 wt% میزان تشکیل فاز را به مقدار چشم‌گیری افزایش می‌دهد. همچنین با افزودن نانوذرات مقدار انرژی جفت‌شدگی جوزفسون از حدود 39 meV در نمونه بدون آلایش تا مقدار 136 meV در نمونه حاوی 0.2 wt% نانوذرات افزایش می‌یابد. علاوه بر این چگالی جریان بحرانی از مقدار 114 A/cm² در نمونه بدون آلایش تا حدود 249 A/cm² در نمونه شامل 0.2 wt% نانوذرات ZnO افزایش می‌یابد. این نتایج بیانگر افزایش قابل توجه تشکیل فاز، جفت‌شدگی بین دانه‌ای و چگالی جریان بحرانی فاز ابررسانا $Bi_{1.6}Pb_{0.4}Sr_2Ca_2Cu_3O_{10+\delta}$ با افزودن نانوذرات ZnO تا 0.2 wt% است.

واژه‌های کلیدی: *ابررسانای دمای بالا، چگالی جریان بحرانی، جفت¬شدگی بین دانه‌ای، نانوذرات ZnO.*

The effects of the ZnO nanoparticles on the phase formation and superconducting properties of the $Bi_{1.6}Pb_{0.4}Sr_2Ca_2Cu_3O_{10+\delta}$

Aftabi, Ali[1]; Mozaffari, Morteza[2]

[1] *Department of Physics, University of Kurdistan, Sanandaj*

[2] *faculty of Physics, University of Isfahan, Isfahan*

Abstract

Here, the effects of different amounts (0 0 wt% ≤ x ≤ 0.1 wt%) of the ZnO nanoparticles on the phase formation, and superconductivity properties of the $Bi_{1.6}Pb_{0.4}Sr_2Ca_2Cu_3O_{10+\delta}$ superconducting phase have been studied. Results showed that the addition of the ZnO nanoparticles (0.2 wt%) improves the phase formation significantly. It was found that the Josephson coupling energy, E_j, increases from ~39 meV for the ZnO free sample to ~136 meV for the sample with 0.2 wt% ZnO nanoparticles. The measurements also showed that the critical current density increases from 114 A/cm² in undoped sample to 249 A/cm² for the x= 0.2 wt %. These results point out a significant enhancement of the phase formation, inter-granular coupling, and critical current density of the superconducting phase with the addition of the 0.2 wt% ZnO nanoparticles.

***Keywords**: superconductor, Critical current density, Inter-granular coupling, ZnO nanoparticles.*

PACS No. 74

مقدمه

در بین ابررساناهای دمای بالا، ترکیب $Bi_{1.6}Pb_{0.4}Sr_2Ca_2Cu_3O_{10+\delta}$ ((Bi,pb)-2223)، به دلیل دمای گذار نسبتاً بالا و ویژگی‌های مکانیکی مطلوب، مورد توجه بسیاری قرار گرفته است. این ویژگی‌ها سبب شده است که این ترکیب یک کاندید مناسب برای ساخت قطعات مختلف ابررسانا، از جمله تک بلورها، لایه‌های نازک، نانوسیم‌ها، نوارها و کابل-ها باشد. [1]. می‌توان گفت محدویت‌های اصلی این ترکیب ابررسانا برای کاربرهای عملی شامل اتصال‌های ضعیف بین دانه‌ای، میخکوبی شار پایین و وجود ناخالصی است. نشان داده شده است که ایجاد نقایص مصنوعی، در مرتبه طول همدوسی، روشی بسیار مؤثر برای جلوگیری از حرکت گردشاره‌ها و بهبود قابلیت میخکوبی شار و ویژگی‌های ترابردی ابررساناهای سرامیکی است [2–5] در اینجا تأثیر افزودن نانوذرات ZnO بر تشکیل فاز و ویژگی‌های ابررسانایی (Bi,Pb)-2223 مورد بررسی قرار گرفته است.

روش تجربی

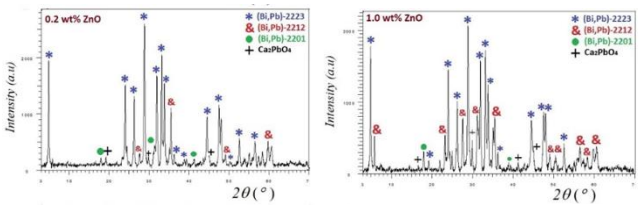
نمونه‌های کامپوزیتی $((Bi,Pb)\text{-}2223)_{1-x}(ZnO\ NPs)_x$، با مقادیر x=0.0, 0.1, 0.2, 0.3, 0.5, 1 wt%، به روش واکنش حالت جامد، همانگونه که در مقالات قبلی ذکر شده است، تهیه شد [5–7]. ویژگی‌های ساختاری و ابررسانایی نمونه‌ها مورد بررسی قرار گرفت.

نتایج

الگوی پراش پرتو ایکس برای نمونه‌های x=0.0, 0.2 wt%، به عنوان نمونه، در شکل ۱ نشان داده شده است. در نمونه بدون آلایش

قلههای اصلی مربوط به فازهای (Bi,Pb)-2212 و (Bi,Pb)-2223 است. درصد وزنی فازهای مختلف تشکیل شده در هر نمونه، بر اساس شدت نسبی قلههای پراش، محاسبه شد (جدول ۱). مشاهده میشود که با افزایش مقدار نانوذرات تا 0.2 wt% مقدار فاز (Bi,Pb)-2223 افزایش مییابد و از حدود 40 wt% در نمونه بدون آلایش به حدود 87 wt% در نمونه آلاییده شده با 0.2 wt% نانوذرات ZnO میرسد. برای مقادیر بیشتر نانوذرات درصد تشکیل این فاز به کندی کاهش مییابد. همچنین دیده میشود که با افزایش درصد آلایش نانوذرات ZnO، در ابتدا مقدار فاز (Bi,Pb)-2212 کاهش مییابد تا در نمونه x=0.2 wt% به کمینه مقدار خود میرسد و سپس با افزایش درصد آلایش، میزان این فاز با شیب ملایمی افزایش مییابد. این نتایج بیانگر این است که افزودن مقدار کمی (0.2 wt%) از نانوذرات ZnO تشکیل فاز مطلوب (Bi,Pb)-2223 را به مقدار چشمگیری افزایش میدهد. مشخص شده است که دمای بهینه تفجوشی درست در زیر دمای ذوب برای ترکیبات ابررسانای پایه بیسموت قرار دارد. همچنین مشخص شده است که افزودن ناخالصی دمای ذوب این ترکیبات را کاهش میدهد [8]. بنابراین افزایش تشکیل فاز مطلوب (Bi,Pb)-2223 با افزودن نانوذرات ZnO را میتوان به بهبود فرآیند تفجوشی در نمونههای آلاییده نسبت داد. همچنین مشاهده میشود که با افزودن درصدهای گوناگون نانوذرات جابهجایی قابل مشاهدهای در محل قلههای پراش مربوط به فاز (Bi,Pb)-2223 دیده نمیشود. این بیانگر آن است که نانوذرات ZnO در بین دانههای ابررسانا قرار گرفته و ساختار بلوری نمونهها را تحت تأثیر قرار نداده است.

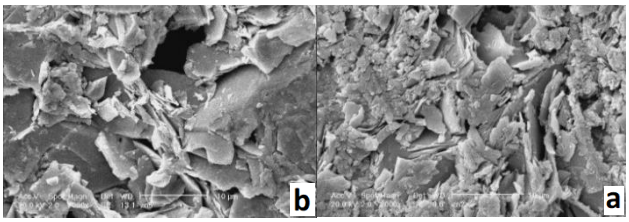
تصاویر SEM برای مقادیر x=0.0, 0.2 wt%، به عنوان نمونه، در شکل ۲ نشان داده شده است. این تصاویر یک ساختار دانهای را نشان میدهد که مشخصه تمام مواد ابررسانای دمای بالا است. در این تصاویر دانه-های صفحهای شکل دیده میشود که نمایانگر فاز (Bi,Pb)-2223 هستند. مقایسه تصاویر نشان میدهد که مقدار دانههای صفحهای شکل در نمونه x= 0.2 wt% نسبت به نمونه بدون آلایش به طور چشمگیری افزایش یافته است. تصاویر SEM نیز افزایش چشمگیر تشکیل فاز (Bi,Pb)-2223 را با افزودن 0.2 wt% نانوذرات تأیید مینماید. علاوه بر این دیده میشود که اندازه دانهها در نمونه آلاییده شده در مقایسه با نمونه بدون آلایش افزایش یافته است که این امر میتواند سبب کاهش میزان تخلخل و همچنین اتصال قویتر در بین دانهها شود.



شکل۱ : الگوی پراش پرتو ایکس پس از عملیات تفجوشی.

جدول۱ : درصد وزنی فازهای گوناگون تشکیل شده در نمونهها

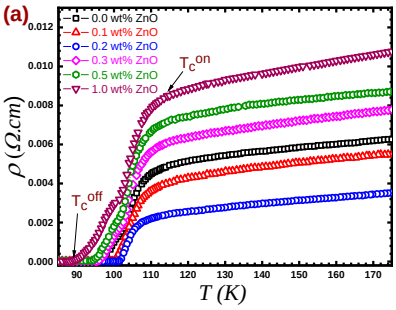
Ca_2PbO_4 (wt%)	Bi-2201 (wt%)	Bi-2212 (wt%)	Bi-2223 (wt%)	x (wt%)
2	1	57	40	0.0
4	1	11	84	0.1
3	2	8	87	0.2
3	2	11	84	0.3
3	4	12	81	0.5
5	3	19	73	1.0



شکل۲ : تصاویر SEM برای نمونههای شامل الف- 0.0 wt% و ب- 0.2 wt% نانوذرات ZnO.

نمودار تغییرات مقاومت با دما برای نمونههای گوناگون در شکل ۳ نشان داده شده است. تمام نمونهها در دماهای بالای T_c^{on} (دمای شروع گذار به حالت ابررسانایی) رفتار خطی مانند فلزات دارند، یعنی با کاهش دما مقاومت به صورت خطی کاهش مییابد. در این دما یک افت ناگهانی در مقاومت ایجاد میشود تا اینکه مقاومت در دمای T_c^{off} به مقدار صفر میرسد (ρ=0). دمای T_c^{on} تقریباً برای تمام نمونهها یکسان و پیرامون 108 K است در حالی که دمای T_c^{off} با افزایش میزان آلایش با نانوذرات تغییر میکند. مقادیر به دست آمده برای نمونههای گوناگون در جدول ۲ ثبت شده است. نتایج نشان میدهد که با افزایش مقدار نانوذرات، T_c^{off} از حدود 96.0 K در نمونه x=0.0 wt% به حدود 101.0 K در نمونه x=0.2 wt% افزایش مییابد و سپس برای مقادیر بالاتر نانوذرات کاهش مییابد تا اینکه در نمونه x=1.0 wt% به حدود 88.5 K میرسد. این نتایج بیانگر این است که پهنای گذار ($\Delta T_c=T_c^{on}-T_c^{off}$) با افزایش میزان نانوذرات از 12.5 K در نمونه بدون آلایش به 6.5 K در نمونه x=0.2 wt% کاهش مییابد و سپس برای مقادیر بیشتر افزایش یافته تا اینکه در نمونه x=1.0 wt% به 20.5 K میرسد. همچنین مقایسه مقاومت الکتریکی نمونهها در حالت نرمال (دمای 175 K) نشان میدهد که با افزایش میزان آلایش نانوذرات مقاومت ویژه ابتدا کاهش یافته و از مقدار 6.2 mΩ.cm در نمونه بدون

آلایش به 3.5 mΩ.cm در نمونه x=0.2 wt% می‌رسد. سپس برای مقادیر بیشتر نانوذرات مقاومت افزایش می‌یابد و در نمونه x=1.0 به مقدار 10.7 mΩ.cm می‌رسد. مقاومت الکتریکی در حالت نرمال به میزان تخلخل نمونه، جفت‌شدگی بین دانه‌ای، پراکندگی از مرز دانه‌ها و ناخالصی‌ها بستگی دارد. همانگونه که نتایج XRD نشان داد، میزان تشکیل فاز مطلوب (Bi,Pb)-2223 در نمونه x=0.2 wt% بیشینه و مقدار فاز ناخواسته (Bi,Pb)-2212 کمینه است. همچنین نتایج تصاویر میکروسکوپ الکترونی هم نشان داد که میزان تخلخل در این نمونه کمینه است. بنابراین می‌توان نتیجه گرفت که کاهش مقاومت الکتریکی، با افزایش مقدار آلایش نانوذرات تا 0.2 wt%، به کاهش مقدار فازهای ناخالصی و میزان تخلخل نمونه مربوط می‌شود.



شکل۳ : تغییرات مقاومت با دما برای نمونه‌های گوناگون.

جدول۲ : مقادیر به دست آمده از نمودارهای تغییرات دمایی مقاومت الکتریکی.

R(175 K) (mΩ.cm)	ΔT_c (K)	T_c^{off} (K)	T_c^{on}(K)	x (wt%)
6.2	12.5	96.0	108.5	0.0
5.5	9.0	100.0	109.0	0.1
3.5	6.5	101.5	108.0	0.2
7.7	12.5	96.0	108.5	0.3
8.7	14.5	94.0	108.5	0.5
10.7	20.5	88.5	109.0	1.0

نمودارهای تغییرات پذیرفتاری مغناطیسی با دما ($\chi'(T)$) و مشتق آن ($d\chi'/dT$) به ترتیب در شکل‌های ٤ الف و ب نشان داده شده است. یک ویژگی مشخصه برای ابررساناهای دمای بالا وجود دو افت تند در نمودار $\chi'(T)$ و درنتیجه وجود دو قله در نمودار $d\chi'/dT$ است. این گذار دو مرحله‌ای به دلیل ساختار دانه‌ای و اتصالات ضعیف بین دانه‌ها است. اولین قله در T_c به گذار به حالت ابررسانایی در درون دانه‌ها مربوط است. قله دوم در T_{cJ} مربوط به گذار به حالت ابررسانایی بین دانه‌ها است و با خواص جفت‌شدگی بین دانه‌ای مرتبط است. در دماهای $T_{cJ}<T<T_c$، دانه‌ها جفت نمی‌شوند و نمونه به طور کلی دارای مقاومت الکتریکی است. در زیر T_{cJ}، دانه‌ها جفت می‌شوند. فاصله باریک/ پهن بین پیک‌های درون دانه‌ای (T_c) و بین دانه‌ای (T_{cJ}) نشان دهنده جفت‌شدگی بهتر/بدتر بین دانه‌ها است. نتایج بیانگر آن است که افزودن نانوذرات تأثیر قابل مشاهده‌ای بر T_c ندارد در حالی که سبب تغییر T_{cJ} می‌شود. T_c تقریباً ثابت و برابر 105 K است. با افزایش میزان آلایش نانوذرات در ابتدا T_{cJ} افزایش می‌یابد و از مقدار 95.5 K در نمونه بدون آلایش به مقدار 102.0 K در نمونه x=0.2 wt% می‌رسد. برای مقادیر بیشتر آلایش دمای T_{cJ} کاهش می‌یابد و در نمونه x=1.0 wt% به مقدار 93.0 K می‌رسد. این نتایج نشان می‌دهد که افزودن نانوذرات ZnO تأثیر محسوسی بر ویژگی‌های درون دانه‌ای نمونه‌ها ندارد، در حالی که بر ویژگی‌های بین دانه‌ای تأثیر می‌گذارد و سبب بهبود جفت‌شدگی بین دانه‌ها می‌شود. ابررساناهای دمای بالا را می‌توان به صورت آرایه‌ای از دانه‌ها که با پیوندگاه ضعیف جوزفسون با یکدیگر متصل‌اند در نظر گرفت. اتصال بین دانه‌ای از طریق جریان جوزفسون در لایه‌های بین دانه‌ها رخ می‌دهد. T_{cJ} دمایی است که اتصال بین دانه‌ها از بین می‌رود. در این دما انرژی حرارتی از انرژی جفت‌شدگی جوزفسون یک جفت دانه بیشتر می‌شود و دو دانه از هم جدا می‌شوند به طوری که دیگر جریان ابررسانا بین آنها جاری نمی‌شود. انرژی جفت‌شدگی جوزفسون به صورت زیر داده می‌شود [9]:

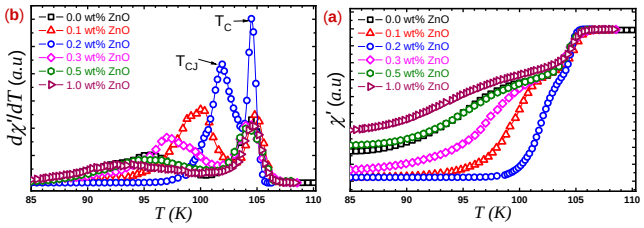
$$E_j = \frac{h}{4\pi e} I_0 \ . \qquad (3)$$

در این رابطه h ثابت پلانک، e بار پایه و I_0 بیشینه جریان جوزفسون است در مرزدانه‌ها است. جریان I_0 به صورت زیر تعیین می‌شود [10]:

$$I_0 = 1.57 \times 10^{-8} \left(\frac{T_C^2}{T_C - T_{CJ}} \right) . \qquad (4)$$

مقادیر جریان I_0 و انرژی جفت‌شدگی جوزفسون، E_j، برای نمونه‌های گوناگون با استفاده از روابط بالا و مقادیر به دست آمده برای T_c و T_{cJ} محاسبه شد (جدول ۳). مشاهده می‌شود که با افزایش درصد آلایش نانوذرات در ابتدا مقدار I_0 افزایش یافته و از حدود 19 μA در نمونه بدون آلایش به مقدار 66 μA در نمونه شامل 0.2 wt% نانوذرات می‌رسد. برای مقادیر بیشتر نانوذرات کاهش می‌یابد تا اینکه در نمونه شامل 1.0 wt% افزودنی به مقدار 15 μA می‌رسد. همچنین مقایسه مقادیر به دست آمده برای انرژی جفت‌شدگی جوزفسون، E_j، نشان می‌دهد که با افزایش میزان آلایش نانوذرات، در ابتدا مقدار این انرژی افزایش می‌یابد و از حدود 39 meV در نمونه بدون آلایش به مقدار 136 meV به ازای x=0.2 wt% می‌رسد. برای مقادیر بیشتر آلایش مقدار E_j کاهش می‌یابد و در نمونه x=1.0 wt% به مقدار 30 meV می‌رسد. این نتایج بیانگر بهبود چشم‌گیر جفت‌شدگی بین دانه‌های ابررسانا با افزودن 0.2 wt% نانوذرات ZnO است. مشخص شده است

که دانه‌های فاز ناخواسته (Bi,Pb)-2212 سبب اتصال ضعیف بین دانه‌ها می‌شوند. بنابراین بهبود چشم‌گیر جفت‌شدگی بین دانه‌های ابررسانا را می‌توان به کاهش فاز ناخواسته (Bi,Pb)-2212 و کاهش میزان تخلخل نسبت داد.

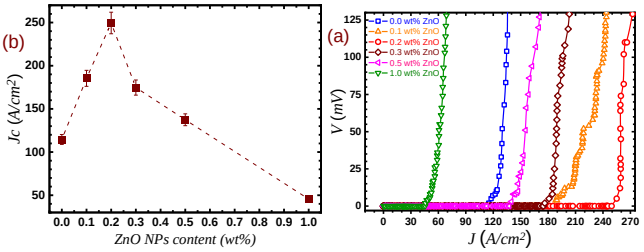


شکل ٤ : الف-تغییرات بخش حقیقی پذیرفتاری مغناطیسی متناوب با دما و ب- مشتق پذیرفتاری مغناطیسی متناب برای نمونه‌های گوناگون.

جدول۳: مقادیر به دست آمده از نمودارهای تغییرات دمایی پذیرفتاری مغناطیسی.

E_j (meV)	I_0 (μA)	T_{cJ} (K)	T_c (K)	x (wt%)
39	19	95.5	104.5	0.0
73	36	100.0	104.5	0.1
136	66	102.0	104.5	0.2
47	23	97.0	104.5	0.3
37	18	95.0	104.5	0.5
30	15	93.0	104.5	1.0

برای بررسی تأثیر نانوذرات بر چگالی جریان بحرانی، نمودار V-J برای نمونه‌های مختلف، در دمای 77 K، اندازه‌گیری شد (شکل ۵ الف). مقادیر J_c برای نمونه‌های گوناگون از نمودارهای V-J با دقت 2μV/cm به دست آمد (شکل ۵ ب). با افزایش میزان آلایش نانوذرات چگالی جریان بحرانی افزایش می‌یابد و از حدود 114 A/cm^2 در نمونه بدون آلایش به مقدار 249 A/cm^2 در نمونه حاوی 0.2 wt% نانوذرات ZnO می‌رسد. سپس برای مقادیر بیشتر آلایش نانوذرات چگالی جریان بحرانی کاهش می‌یابد و درنهایت به مقدار 45 A/cm^2 به ازای x=1.0 wt% می‌رسد. این افزایش چشم‌گیر در چگالی جریان بحرانی به بهبود جفت‌شدگی بین دانه‌های ابررسانا مربوط می‌شود.



شکل ۵: (الف) نمودار V-J در دمای 77 K، (b)تغییرات چگالی جریان بحرانی بر حسب میزان آلایش نانوذرات ZnO.

نتیجه گیری

تأثیر افزودن درصدهای وزنی گوناگون از نانوذرات ZnO بر ویژگی‌های فاز ابررسانای (Bi,Pb)-2223 مورد بررسی قرار گرفت. نتایج نشان داد که با افزایش میزان نانوذرات تا 0.2 wt% میزان تشکیل فاز مطلوب به مقدار قابل توجهی افزایش می‌یابد و مقدار فازهای ناخواسته به شدت کاهش می‌یابد. همچنین با افزودن نانوذرات تا 0.2 wt% مقاومت الکتریکی حالت نرمال و پهنای گذار نمونه‌ها کاهش می‌یابد. همچنین دیده شد که آلایش نانوذرات تأثیری بر ویژگی‌های درون دانه‌ای فاز ابررسانا ندارد در حالی که جفت‌شدگی بین دانه‌ها را به طور چشم‌گیری بهبود می‌بخشد. مقادیر به دست آمده برای انرژی جفت‌شدگی جوزفسون نشان داد که با افزایش درصد آلایش نانوذرات این انرژی افزایش می‌یابد و از مقدار 39 meV در نمونه بدون آلایش به مقدار 136 meV در نمونه شامل 0.2 wt% نانوذرات می‌رسد. این بهبود جفت‌شدگی بین دانه‌ای به کاهش فازهای ناخواسته با افزایش درصد آلایش نانوذرات تا 0.2 wt% مربوط می‌شود. همچنین مشخص شد که با افزودن نانوذرات ZnO چگالی جریان بحرانی به مقدار قابل ملاحظه‌ای افزایش می‌یابد. چگالی جریان بحرانی از مقدار 114 A/cm^2 در نمونه بدون آلایش به مقدار 249 A/cm^2 می‌رسد. به طور خلاصه این نتایج بیانگر افزایش قابل توجه تشکیل فاز، جفت‌شدگی بین دانه‌ای و چگالی جریان بحرانی فاز ابررسانا (Bi,Pb)-2223 با افزودن نانوذرات ZnO تا 0.2 wt% است.

مرجع‌ها

[1] A. Aftabi and M. Mozaffari, *J. Alloys Compd.* **907**, (2022) 164455.
[2] S. Hussain, J. Ali, N. A. Khan and A. Raza, *J. Alloys Compd.* **817**, (2020) 1.
[3] Y. V. Litvinov, R. V. Vovk and O. V. Dobrovolskiy, *Phys. C Supercond. its Appl.* **573**, Elsevier, (2020) 1353645.
[4] R. Algarni, M. A. Almessiere, Y. Slimani, E. Hannachi and F. Ben Azzouz, *J. Alloys Compd.* **852**, (2021) 157019.
[5] A. Aftabi and M. Mozaffari, *Sci. Rep.* **11**, (2021) 4341.
[6] A. Aftabi and M. Mozaffari, *J. Supercond. Nov. Magn.* **28**, (2015) 2337.
[7] A. Aftabi, M. Mozaffari and P. Kameli, *Iran. J. Phys. Res.* **9**, (2019) 65.
[8] M. Annabi, A. M'Chirgui, F. Ben Azzouz, M. Zouaoui and M. Ben Salem, *Phys. C Supercond.* **405**, (2004) 25.
[9] E. Hannachi, M. A. Almessiere, Y. Slimani, A. Baykal and F. Ben Azzouz, *J. Alloys Compd.* **812**, Elsevier B.V, (2020) 152150.
[10] S. A. Alotaibi, Y. Slimani, E. Hannachi, M. A. Almessiere, G. Yasin, F. O. Al-qwairi, M. Iqbal and F. Ben Azzouz, *Ceram. Int.* **47**, (2021) 34260.

رسانش اضافی ناشی از افت‌وخیزهای زوج‌های کوپر در ابررسانای MgB_2 آلاییده به سیلیکون کاربید

شجاع، علی‌اکبر؛ قربانی، شعبان‌رضا؛ عربی، هادی

گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه فردوسی مشهد، مشهد

چکیده

رسانش اضافی ناشی از افت‌وخیزهای ابررسانایی در ابررسانا منیزیم دی بورایدِ آلا ییده به سیلیکون کاربید با اندازه‌گیری مقاومت نمونه بر حسب دما در میدان‌های مختلف مطالعه شد. داده‌های رسانش اضافی به کمک مدل آسلامازو-لارکین مورد بررسی قرار گرفت. ابعاد رسانش اضافی در ناحیه میدان میانگین و دمای گذار بین آن‌ها تعیین شد. پارامترهای سطح مقطع کانال رسانش یک بعدی، طول همدوسی و عمق نفوذ لندن در میدان‌های مختلف محاسبه گردید. نتایج نشان داد که مقادیر این پارامترها و دمای گذار بین ابعاد در ناحیه میدان میانگین، با افزایش میدان کاهش می‌یابد.

Cooper pair fluctuations induced excess conductivity in SiC doped MgB_2 superconductor

Shoja, Ali Akbar; Ghorbani, Shaban Reza; Arabi, Hadi

Department of Physics, Faculty of Science, Ferdowsi University of Mashhad, Mashhad

Abstract

The fluctuation-induced excess conductivity in SiC doped MgB_2 was investigated by resistivity as a function of temperature in different magnetic fields. The excess conductivity data was analyzed by using Aslamazov-Larkin (AL) model. Dimensions of conductivity in the mean-field regime and the crossover temperatures between them were determined. Cross-sectional of 1D channels, coherence length, and penetration depth parameters were calculated. The results indicated that the values of these parameters and the crossover temperatures were reduced by increasing the magnetic field.

PACS No

مقدمه

افت‌وخیزهای ترمودینامیکی منجر به ظهور خواص ابررسانایی در دماهای بیشتر از دمای بحرانی می‌شود. این افت‌وخیز ابررسانایی از اهمیت بالایی برخوردار است زیرا می‌تواند اطلاعات ارزشمندی را در مورد ابررسانایی فراهم می‌کند[۱, ۲]. به عنوان مثال افت‌وخیز های ابررسانایی ابزاری مهم برای استخراج پارامترهای میکروسکوپی از قبیل زمان شکست فاز و طول همدوسی است[۳, ٤]. این افت‌وخیزها بر روی خواص فیزیکی متفاوتی مانند رسانایی الکتریکی، دیامغناطیس و گرمای ویژه در بالا و پایین دمای بحرانی اثر دارند[۵]. افت‌وخیزهای ابررسانایی باعث پهن شدگی ناحیه گذار از حالت عادی به حالت ابررسانایی می‌شود.

یکی از آسان‌ترین راه‌های مطالعه افت‌وخیزها بررسی مقاومت نمونه است. در دماهای نزدیک به دمای بحرانی، تغییرات مقاومت بر حسب دما در ناحیه عادی تقریبا به صورت خطی، یعنی به شکل

$\rho_n(T)=aT+\rho_n(0)$ کاهش می‌یابد[٦]. دو پارامتر $\rho_n(0)$ و $a =$ $d\rho/dT$ وابسته به میدان مغناطیسی هستند. در نزدیکی دمای بحرانی انحراف در نمودار مقاومت از حالت عادی به علت شکل‌گیری زوج‌های کوپر ناشی از افت‌وخیزها آغاز می‌شود و در نهایت در دماهای خیلی کمتر از دمای بحرانی T_c تمام الکترون‌ها تقریبا به صورت زوج در می‌آیند.

شکل‌گیری زوج‌های کوپر در دماهای بیشتر از دمای بحرانی منجر به ایجاد رسانش اضافی $\Delta\sigma$ بر اساس رابطه زیر

$$\Delta\sigma(T)=\frac{1}{\rho(T)}-\frac{1}{\rho_n(T)} \qquad (۱)$$

می‌شود که در این رابطه، $\rho(T)$ مقاومت اندازه‌گیری شده و $\rho_n(T)$ مقاومت حالت عادی در صورت عدم انحراف در نمودار مقاومت است[۷, ۸].

از آن‌جا که افت‌وخیزها منجر به تغییر پارامتر نظم ابررسانایی می‌شوند، برای توصیف رسانش اضافی ناشی از افت‌وخیزها نظریات مختلفی ارائه شده است. آسلامازو-لارکین بر اساس نظریه گاوسین تنها توان دوم پارامتر نظم را در انرژی آزاد در نظر گرفتند و سهم مستقیم اثر تشکیل زوج‌های کوپر را در رسانش اضافی به صورت $\Delta\sigma=A\varepsilon^{-\lambda}$ تعیین کردند که در این رابطه، ε دمای کاهش یافته بوده و به صورت $\varepsilon=\frac{T-T_{mf}}{T_{mf}}$ تعریف می‌گردد. T_{mf} دمای افت‌وخیز میدان میانگین بوده و می‌توان آن را از طریق اکسترمم نمودار $\frac{d\rho}{dT}-T$ تعیین کرد[۹, ۱۰]. در ناحیه میدان میانگین که در آن نظریه گینزبرگ لاندائو اعتبار خود را حفظ می‌کند، مقادیر λ برای رسانش اضافی به صورت $\lambda=2-\frac{D}{2}$ بیان می‌شود که در آن D بیانگر بُعد رسانش است و مقادیر A در این ناحیه برای هر بعد به صورت زیر است:

$$A_{3D}=\frac{e^2}{32\hbar\xi_c(0)} \qquad (۲)$$

$$A_{2D}=\frac{e^2}{16\hbar d} \qquad (۳)$$

$$A_{1D}=\frac{e^2\xi_c(0)}{32\hbar s} \qquad (٤)$$

که در آن s سطح مقطع کانال رسانش یک بعدی، $\xi(0)$ طول همدوسی، d فاصله موثر بین صفحات سیستم رسانش دو بعدی، e بار الکترون و $\hbar$ ثابت کاهش‌یافته پلانک است. در ناحیه موج کوتاه که در آن نظریه گینزبرگ لاندائو اعتبار خود را از دست می‌دهد مقدار λ برابر سه است.

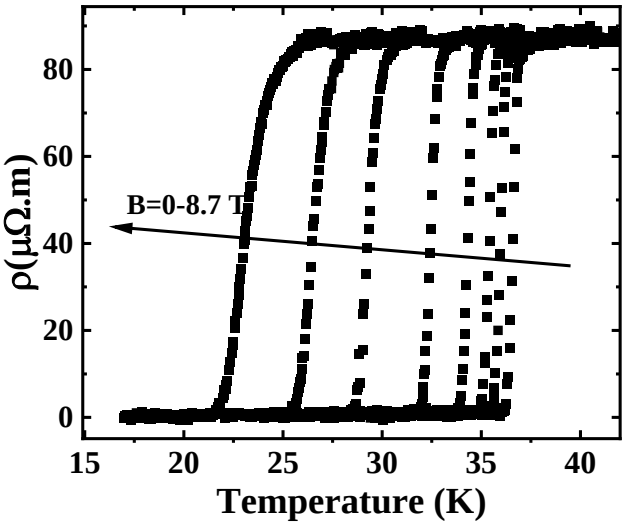
در این مطالعه رسانش اضافی ناشی از افت‌وخیزها در نمونه منیزیم دی بورایدِ آلاییده به ۱۰٪ وزنی سیلیکون کاربید با اندازه‌گیری منحنی مقاومت بر حسب دما مورد بررسی قرار خواهد گرفت و به کمک مدل‌های موجود پارامترهای میکروسکوپی سنجیده می‌شوند.

روش ساخت و اندازه‌گیری

منیزیم دی بوراید آلاییده با ۱۰٪ وزنی سیلیکون کاربید با روش حالت جامد سنتز گردید که روش سنتز آن در مرجع[۱۱] شرح داده شده است. نتایج پراش اشعه X نشان داده که فاز اصلی نمونه دارای ساختار MgB_2 بود. مقاومت ویژه‌ی الکتریکی نمونه به روش چهارمیله، در دماهای پایین و در میدان‌های مغناطیسی مختلف توسط سیستم اندازه‌گیری خواص فیزیکی (PPMS) در دانشگاه ولانگونگ استرالیا اندازه‌گیری شد.

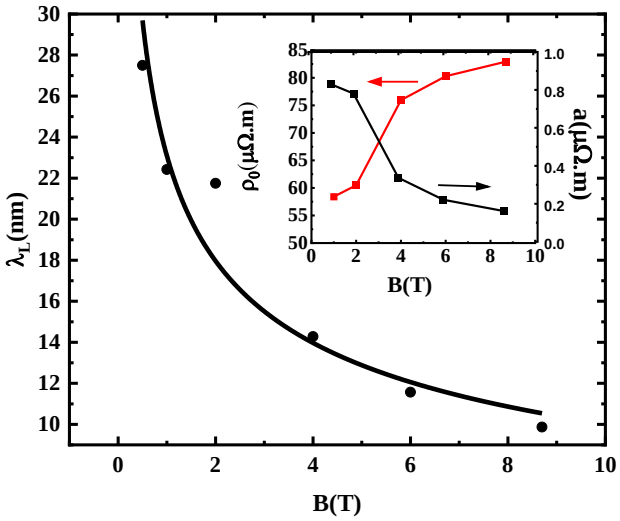
نتایج و بحث‌ها

شکل ۱، تغییرات مقاومت ویژه بر حسب دما را در میدان‌های مغناطیسی مختلف نشان می‌دهد. دمای گذار در میدان صفر تسلا، برابر ۳۷.۱۷ کلوین است. همان طور که در شکل ۱ مشاهده می شود با افزایش میدان مغناطیسی، دمای گذار کاهش می‌یابد و پهنای ناحیه گذار در محدوده دمای بحرانی ابررسانایی افزایش می‌یابد.



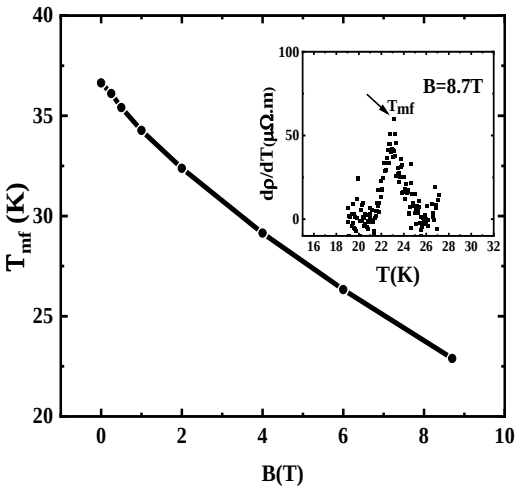
شکل ۱: مقاومت ویژه الکتریکی منیزیم دی بورایید آلاییده با ۱۰٪ وزنی سیلیکون کاربید به صورت تابعی از دما و میدان مغناطیسی.

از برازش رابطه $\rho_n(T)=aT+\rho_n(0)$ به داده‌های تجربی مقاومت در حالت عادی، دو پارامتر $\rho_n(0)$ و $a=\frac{d\rho}{dT}$ تعیین گردیدند. نتایج مربوط به این پارامترها مطابق نمودار داخلی شکل ۲ نشان داده شده‌اند. $\rho_n(0)$ با افزایش میدان مغناطیسی افزایش می‌یابد که نشان دهنده افزایش پراکندگی حاملهای بار است. پارامتر a از طریق رابطه $a=\frac{\mu_0 k_B}{\hbar}\lambda_L^2$ با عمق نفوذ لندن مرتبط است[۱۲]. وابستگی عمق نفوذ لندن به میدان به دلیل ساختار دو نواری این ابررسانا است[۱۳]. با استفاده ازنتایج مربوط به پارامتر a عمق نفوذ لندن تعیین شد که نتایج مربوط به آن در شکل ۲ رسم شده است. همانطور که مشاهده می‌شود عمق نفوذ لندن با افزایش میدان مغناطیسی کاهش می‌یابد.



شکل۲: نمودار تغییرات عمق نفوذ لندن بر حسب میدان برای ابررسانای منیزیم دی بورایید آلاییده به ۱۰٪ وزنی سیلیکون کاربید. شکل داخلی تغییرات مقاومت در دمای صفر و شیب تغییرات مقاومت را بر حسب میدان نمایش می‌دهد.

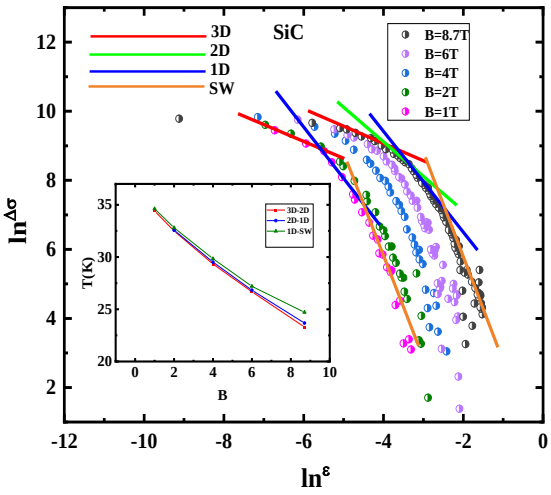
دمای میدان میانگین T_{mf} از روش اکسترمم نمودار $\frac{d\rho}{dT}-T$ محاسبه شد. شکل ۲ نشان می‌دهد که T_{mf} با افزایش میدان کاهش می‌یابد.



شکل ۳: دمای میدان میانگین بر حسب میدان. شکل داخلی نحوه تعیین دمای میدان میانگین را در میدان ۸.۷ تسلا نمایش می‌دهد.

رسانش اضافی ناشی از افت‌وخیزها بر اساس معادله ۱ محاسبه گردید و جهت تعیین سازوکار رسانشی و تعیین ابعاد رسانش اضافی مطابق شکل ٤، نمودار $\ln\Delta\sigma-\ln\varepsilon$ برای هر میدان رسم شد. از

طریق برازش روابط آسلامازو-لارکین با داده‌های تجربی این نمودار، حضور هر سه بعد رسانش افت‌وخیزی در میدان‌های بزرگتر از یک تسلا معین گردید. قسمت داخلی شکل ٤ نشان می‌دهد که دمای گذار بین ابعاد با افزایش میدان کاهش می‌یابد.



شکل ٤: برازش شکل لگاریتمی معادلات آسلامازو-لارکین بر نمودار لگاریتمی رسانش اضافی بر حسب دمای کاهش یافته برای نمونه منیزیم دی بوراید آلاییده به ۱۰٪ وزنی سیلیکون کاربید. قسمت داخلی کاهش دمای گذار بین ابعاد را با افزایش میدان نمایش می‌دهد.

پارامتر A برای هر بعد در ناحیه میدان میانگین با استفاده از برازش معادله $\Delta\sigma=A\varepsilon^{-\lambda}$ به داده‌های تجربی در هر میدان مغناطیسی تعیین گردید سپس پارامترهای $\xi(0)$ و s با استفاده از معادلات ۲ و ٤ محاسبه شدند. جدول ۱ مقادیر به دست آمده این پارامترها را در میدان‌های بین ۱ تا ۸.۷ تسلا نمایش می‌دهد. نتایج به دست آمده نشان می‌دهد که مقادیر $\xi(0)$ و s با افزایش میدان مغناطیسی کاهش می‌یابند. کاهش طول همدوسی با افزایش میدان به دلیل کاهش مسافت آزاد میانگین به دلیل اعمال میدان مغناطیسی است که با نتایج مربوط به پارامتر $\rho_n(0)$ در توافق است.

جدول ۱: تغییرات طول همدوسی و سطح مقطع رسانش بر حسب میدان مغناطیسی

$B(T)$	۱	۲	٤	٦	۸.۷
$\xi_c(nm)$	۱۷.٦۸	۱٥.۸	۹.۷۱	۸.۲۹	٦.۷۷
$s(nm^{۲}\times ۱۰^{٤})$	۱۷.٦۹	٤.۹۹	۱.۰۱	۰.٤۰	۰.۱٤۷

نتیجه‌گیری

از برازش داده‌های تجربی رسانش اضافی ناشی از افت‌وخیزهای ابررسانایی در نمونه منیزیم دی بوراید آلاییده به ۱۰٪ وزنی سیلیکون کاربید به کمک مدل آسلامازو-لارکین پارامترهای میکروسکوپی و اثر میدان بر آن‌ها مورد بررسی قرار گرفت. نتایج به دست آمده نشان داد که افزایش میدان مغناطیسی سبب کاهش پارامترهای میکروسکوپی از قبیل طول همدوسی و عمق نفوذ لندن شده است.

مراجع

[۱] Bouchoucha, I., F. Ben Azzouz, and M. Ben Salem, *Excess conductivity studies in Zn0. 95Mn0. 05O and ZnO added YBa2Cu3O y superconductors.* Journal of superconductivity and novel magnetism, 2011. **24**(1): p. 345-350.
[۲] Kim, S.H., et al., *Fluctuation conductivity of single-crystalline BaFe 1.8 Co 0.2 As 2 in the critical region.* Journal of Applied Physics, 2010. **108**(6): p. 063916.
[۳] Khan, N.A., et al., *Fluctuation-induced conductivity analyses of Be-doped (Bi0. 25Cu0. 25Li0. 25Tl0. 25) Ba2Ca2Cu3O10-δ superconductors in the critical regime and beyond.* Journal of Applied Physics, 2012. **111**(3): p. 033917.
[۴] Rostamabadi, E., S.R. Ghorbani, and X. Wang, *Excess conductivity in nano-carbon doped MgB2 superconductor*. The European Physical Journal B, 2019. **92** :(5)p. 1-6.
[۵] Rajput, S. and S. Chaudhary, *On the fluctuation induced excess conductivity in stainless steel sheathed MgB2 tapes.* J. Mater, 2013. **1**: p. 2013.
[۶] Khan, N.A. and A. Mumtaz, *Studies of fluctuation induce conductivity of Mg doped Cu0. 5Tl0. 5Ba2 (Ca2− yMgy)(Cu0. 5Zn2. 5) O10− δ (y= 0, 0.5, 1.0) superconductors.* Physica B: Condensed Matter, 2010. **405**(13): p. 2772-2780.
[۷] Ghorbani, S.R. and X. Wang, *In-field Conductivity Fluctuations in Ba0. 72K0. 28Fe2As2 Single Crystals.* Journal of Superconductivity and Novel Magnetism, 2018. **31**(8): p. 2349-2353.
[۸] Slimani, Y., et al., *Excess conductivity investigation of Y3Ba5Cu8O18±δ superconductors prepared by various parameters of planetary ball milling technique.* Journal of Superconductivity and Novel Magnetism, 2018. **31**(8): p. 2339-2348.
[۹] Ansari, I.A., et al., *Fluctuation-Induced Conductivity of carbon in glucose-doped MgB2 superconductor.* Arabian Journal for Science and Engineering, 2017. **42**(1): p. 383-388.
[۱۰] Rasti, M. and M.R. Mohammadizadeh, *Fluctuation Conductivity in MOD-Derived YBCO Thin Films.* Journal of Superconductivity and Novel Magnetism, 2021. **34**(3): p. 705-713.
[۱۱] Kim, J.H., et al., *Systematic study of a MgB2+ C4H6O5 superconductor prepared by the chemical solution route.* Superconductor Science and Technology, 2007. **20**(7): p. 715.
[۱۲] Hu, T., et al., *Universal linear-temperature resistivity: possible quantum diffusion transport in strongly correlated superconductors.* Scientific reports, 2017. **7**(1): p. 1-7.
[۱۳] Eisterer, M., *Magnetic properties and critical currents of MgB2.* Superconductor Science and Technology, 2007. **20**(12): p. R47.

رسانندگی هال دینامیکی یک ابررسانای موج-p کایرال ایجاد شده با سیم‌های کوانتومی

یزدانی‌حمید ، مقداد[1]

[1] گروه فیزیک، دانشگاه آیت اله العظمی بروجردی، لرستان، بروجرد

چکیده

در این بررسی، رسانندگی دینامیکی ابررسانای توپولوژیکی با موج کایرال p_x+ip_y با استفاده از فرمول کوبو مورد محاسبه قرار گرفته است. این کمیت در اثر مشخصه کایرالیتی پارامتر نظم حالت ابررسانایی ایجاد می‌شود و باعث ایجاد یک زاویه کر غیرصفر می‌شود. زاویه کر محدود به معنی تغییر در قطبش امواج الکترومغناطیس تابانده شده به ماده است. ابررسانای کایرال این تحقیق با استفاده از لایه‌هایی که از سیم‌های کوانتومی تشکیل شده‌اند ایجاد می‌شود. سیم‌های کوانتومی این لایه‌ها به اندازه ۹۰ درجه نسبت به هم چرخیده اند. برهم‌کنش بین لایه‌ای نقش کلیدی در پاسخ جریان الکتریکی به امواج الکترومغناطیس ایفا می‌کند. حالت استاتیک این پاسخ، رسانندگی الکتریکی استاتیک، می‌تواند ویژگی‌های توپولوژیکی این سامانه و هم‌چنین گذار فاز توپولوژیکی را مشخص کند.

واژه های کلیدی: *ابررسانای توپولوژیکی، سیم‌های کوانتومی، رسانندگی الکتریکی دینامیکی، گذار فاز توپولوژیکی.*

Dynamical Hall Conductivity of a Chiral p-wave Superconductor Engineered by Quantum Wires

Yazdani-Hamid, Meghdad[1]

[1] *Department of Physics, Ayatollah Boroujerdi University, Lorestan, Boroujerd*

Abstract

In this research, we compute the dynamical Hall conductivity of a superconductor with p_x+ip_y order using the Kubo formula. This property arises from the chirality characteristic of the superconducting order parameter and results in a non-zero Kerr angle. The finite Kerr angle corresponds to the change in the polarization of the incident electromagnetic wave. Here we propose a construction of chiral superconductor with layers composed of quantum wires. The quantum wires of two layers stacked on top of one another with a twist by 90°. The coupling between two layers plays a key role in the charge current response to the electromagnetic radiation. The static state of this response, i.e. the static Hall conductivity, can help us to determine the topological properties and to identity the topological phase transitions.

***Keywords**: Topological Superconductor, Quantum Wires, Dynamical Hall conductivity, Topological Phase Transitions.*

PACS No. 72, 74, 78

مقدمه

در سالیان اخیر ابررساناهای توپولوژیکی به دلیل داشتن فرمیون-های مایورانا در عیوب توپولوژیکی، لبه‌ها و گردشاره‌هایشان بسیار مورد توجه قرار گرفته‌اند. این ذرات که با پادذره‌یشان برابر هستند از آمار غیرآبلی تبعیت می‌کنند و در محاسبات کوانتومی مورد استفاده قرار می‌گیرند [1]. ابررسانای توپولوژیکی به‌صورت طبیعی خیلی به‌ندرت یافت می‌شود به استثناء Sr_2RuO_4 که آن هم اخیرا در مورد حالت پارامتر نظم آن شک و تردید وجو دارد [2]. کاندیدهای

دیگری که به عنوان ابررسانای توپولوژیکی شناخته می‌شوند با استفاده از اثر تقارب بین سامانه‌های کوانتومی هال با ابررساناها [3] و هم‌چنین تقارب ما بین ابررساناها و نیمه‌رسانا ایجاد می‌شوند [4]. در این مقاله ما پاسخ اپتیکی، رسانندگی هال دینامیکی، به ازاء پتانسیل‌های شیمیائی متفاوت برای نوعی دیگر از ابررساناهای توپولوژیکی که ناشی از تقارب بین سیم‌های کوانتومی در دو لایه که نسبت به هم به اندازه ۹۰ درجه چرخیده‌اند را با استفاده از فرمول کوبو محاسبه می‌کنیم [5]. با توجه به گاف این سامانه، p_x+ip_y، انتظار می‌رود این سامانه یک سامانه توپولوژیکی باشد و برای پتانسیل‌های شیمیائی متفاوت رفتار توپولوزیکی متفاوت داشته باشد. برای بررسی توپولوژیکی با مساوی قرار دادن فرکانس برابر با صفر در رسانندگی دینامیکی، رسانندگی استاتیکی توپولوژیکی را می‌توان محاسبه کرد. از آن‌جائیکه رسانندگی هال دینامیکی با اثر کر ارتباط دارد [6]، می‌توان انتظار داشت که این سامانه دارای اثر کر غیرصفر باشد. به عبارت دیگر پارامتر نظم ابررسانایی کایرال این سامانه قطبش امواج الکترومغناطیس تابانده شده را تحت تاثیر قرار می‌دهد و باعث تغییر آن می‌شود.

روش و مدل

مدلی که بررسی می‌کنیم شامل دو لایه است که در هر لایه سیم-های کوانتومی قرار گرفته‌اند. سیم‌های کوانتومی در دو لایه با زاویه ۹۰ درجه نسبت به هم قرار گرفته‌اند [5]. چرخش بین سیم‌های کوانتومی در دو لایه و برهم‌کنش بین‌لایه‌ای، g، برای داشتن رسانندگی هال ضروری می‌باشند. پارامترهای t و Δ به‌ترتیب برهم-کنش نزدیک‌ترین همسایه و گاف ابررسانایی در سیم کوانتومی مدل کیتائف هستند [7]. پارامتر t' برهم‌کنش بین سیم‌های کوانتومی درون‌لایه‌ای است. با توضیحات بالا می‌توان هامیلتونین مدل را در فضای وارون می‌توان به‌صورت زیر نوشت:

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{h}_{\boldsymbol{k}} \Psi_{\mathbf{k}} ,$$

$$\hat{h}_{\boldsymbol{k}} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{\mathbf{k}1} & g & \Delta_{\mathbf{k}1} & 0 \\ g & \varepsilon_{\mathbf{k}2} & 0 & \Delta_{\mathbf{k}2} \\ \Delta_{\mathbf{k}1}^{*} & 0 & -\varepsilon_{\mathbf{k}1} & -g \\ 0 & \Delta_{\mathbf{k}2}^{*} & -g & -\varepsilon_{\mathbf{k}2} \end{pmatrix}. \qquad (1)$$

علامت " Λ " نشان‌دهنده تانسوری بودن است. در رابطه بالا اسپینور چهار مؤلفه‌ای نامبو به‌صورت $\Psi_{\mathbf{k}} = (c_{\mathbf{k}1}, c_{\mathbf{k}2}, c_{-\mathbf{k}1}^{\dagger}, c_{-\mathbf{k}2}^{\dagger})^{T}$ است که در آن $c_{\mathbf{k}i}$ عملگر فنا یک الکترون در لایه i با بردار موج $\mathbf{k}$ است. هم‌چنین تابع انرژی هر لایه و تابع گاف مربوط به آن به‌صورت زیر تعریف می‌شوند:

$$\varepsilon_{\mathbf{k}1(2)} = -2t\cos k_{x(y)} - 2t'\cos k_{y(x)} - \mu$$
$$\Delta_{\mathbf{k}1} = 2\Delta \sin k_x , \quad \Delta_{\mathbf{k}2} = 2i \sin k_y . \qquad (2)$$

در این رابطه μ پتانسیل شیمیائی است و "i" ناشی از چرخش بین لایه‌ها است. مقادیر عددی پارامترها به‌صورت $(t, \acute{t}, g, \Delta) =$ (1,0.3,0.8,0.2) می‌باشند. مقادیر μ متغیر است.

ذکر این نکته ضروری است که در محاسبات انجام شده، اثر اسپین وارد نشده است. با لحاظ کردن اثر جفت-شدگی اسپین-مدار، هامیلتونین یک ماتریس 8×8 خواهد بود و ماتریس جریانی که در ادامه توضیح خواهیم داد برای اسپین بالا و پایین مشابه خواهد بود (لطفا توضیحات اضافی (الف) را نگاه کنید).

همانطوریکه قبلا بیان شد هدف ما محاسبه پاسخ جریان الکتریکی یا سرعت الکترون‌ها به تابش الکترومغناطیس است. با داشتن هامیلتونین می‌توان تانسور جریان الکتریکی را با استفاده از روابط زیر بدست آورد:

$$\hat{J}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} J^{e}(\mathbf{k}) & 0 \\ 0 & J^{h}(\mathbf{k}) \end{pmatrix},$$
$$\hat{J}^{e}(\mathbf{k}) = -e\nabla_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} \varepsilon_{\mathbf{k}1} & g \\ g & \varepsilon_{\mathbf{k}2} \end{pmatrix},$$
$$\hat{J}^{h}(\mathbf{k}) = e\nabla_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} -\varepsilon_{\mathbf{k}1} & -g \\ -g & -\varepsilon_{\mathbf{k}2} \end{pmatrix}$$
$$J^{\Delta}(\mathbf{k}) = -e\nabla_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} \Delta_{\mathbf{k}1} & 0 \\ 0 & \Delta_{\mathbf{k}2} \end{pmatrix}. \qquad (3)$$

در این‌جا رابطه آخر تغییر پارامتر نظم بر اثر تابش الکترومغناطیسی را بیان می‌کند. با توجه به اینکه پارامتر نظم ابررسانایی در حال بررسی یک پارامتر نظم کایرال می‌باشد قطبش امواج الکترومغناطیس تابانده شده توسط مشخصه کایرالیتی آن‌ها تغییر پیدا می‌کند و این ویژگی باعث ایجاد یک اثر کر غیرصفر می‌شود. برای داشتن این اثر که با قسمت موهومی رسانندگی هال دینامیکی ارتباط دارد نیاز به $J^{\Delta}(\mathbf{k})$ غیرصفر داریم به دلیل اینکه برهم‌کنش بین‌لایه‌ای مقدار

ثابتی دارد و مستقل از $\mathbf{k}$ می‌باشد. در غیر این‌صورت اثر کر برای این ابررسانای کایرال نخواهیم داشت که خلاف نتایج تجربی است. فرمول کوبو برای رسانندگی به‌صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\sigma_{\mathrm{H}}(\omega)=\frac{\mathrm{i}}{2\omega}\lim_{\mathbf{q}\to 0}[\hat{\mathcal{K}}_{\mathrm{xy}}(\mathbf{q},\omega)-\hat{\mathcal{K}}_{\mathrm{yx}}(\mathbf{q},\omega)] \tag{4}$$

$\mathbf{q}$ و ω به‌ترتیب بردار موج و انرژی تابش الکترومغناطیس است (در تمامی این مقاله $\hbar=1$ و $k_B=1$ است). کمیت $\hat{\mathcal{K}}_{xy}(\boldsymbol{q},\omega)$ تابع همبستگی جریان-جریان است و به‌صورت زیر می‌باشد:

$$\hat{\mathcal{K}}_{\mathrm{xy}}(\mathbf{q},\omega_m)=T\times \sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{\omega_n}} Tr\left[\hat{J}_x\hat{G}_0(\boldsymbol{k},\omega_n)\hat{J}_y\hat{G}_0(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q},\omega_n+\omega_m)\right], \tag{5}$$

که در این‌جا $\omega_n=(2n+1)\pi T$ و $\omega_m=2\pi mT$ به‌ترتیب فرکانس‌های ماتسوبارای فرمیونی و بوزونی هستند. تابع گرین بدون ناخالصی به‌صورت $G_0(\boldsymbol{k},\omega)=[i\omega-h_{\boldsymbol{k}}]^{-1}$ تعریف می‌شود.

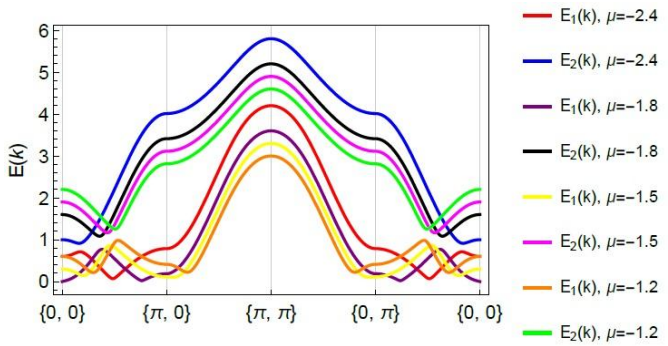
با قرار دادن روابط (۳) و (۵) در داخل رابطه (٤) خواهیم داشت:

$$\begin{aligned}&\sigma_H(\omega)=\\&g^2\{4Im[(\Delta_1^*(\boldsymbol{k})-\Delta_2^*(\boldsymbol{k}))v_{1x}^{\Delta}(\boldsymbol{k})v_{2y}^{\Delta}(\boldsymbol{k})\\&(\Delta_2^*(\boldsymbol{k})\varepsilon_1(\boldsymbol{k})+\Delta_1^*(\boldsymbol{k})\varepsilon_2(\boldsymbol{k}))+v_{1x}^{\Delta}(\boldsymbol{k})v_{2y}^{\Delta}(\boldsymbol{k})\\&(\varepsilon_1(\boldsymbol{k})+\varepsilon_2(\boldsymbol{k}))(\Delta_2^*(\boldsymbol{k})\Delta_1(\boldsymbol{k})-\varepsilon_1(\boldsymbol{k})\varepsilon_2(\boldsymbol{k}))]\\&\mathcal{W}(\boldsymbol{k})+(\varepsilon_1(\boldsymbol{k})+\varepsilon_2(\boldsymbol{k}))2Im\left(v_{1x}^{\Delta*}(\boldsymbol{k})v_{2y}^{\Delta}(\boldsymbol{k})\right)\\&\mathcal{V}(\boldsymbol{k})\}+g^4\{2Im[v_{1x}^{\Delta*}(\boldsymbol{k})v_{2y}^{\Delta}(\boldsymbol{k})]\\&(\varepsilon_1(\boldsymbol{k})+\varepsilon_2(\boldsymbol{k}))\mathcal{W}(\boldsymbol{k})\}\end{aligned} \tag{6}$$

که در این‌جا

$$\begin{aligned}&\mathcal{W}(\boldsymbol{k})=\mathcal{W}_1(\boldsymbol{k})+\mathcal{W}_1^*(\boldsymbol{k})+\mathcal{W}_2(\boldsymbol{k})+\mathcal{W}_2^*(\boldsymbol{k})\\&\mathcal{W}_1(\boldsymbol{k})=\frac{\mathcal{P}_1(\boldsymbol{k})}{2E_1(\boldsymbol{k})\left(E_1^2(\boldsymbol{k})-E_2^2(\boldsymbol{k})\right)(2E_1(\boldsymbol{k})-i\omega_m)}\\&\mathcal{P}_1(\boldsymbol{k})=\frac{1}{(E_1(\boldsymbol{k})-E_2(\boldsymbol{k})-i\omega_m)(E_1(\boldsymbol{k})+E_2(\boldsymbol{k})-i\omega_m)}\\&\mathcal{W}_2(\boldsymbol{k})=\mathcal{W}_1(\boldsymbol{k})(E_1(\boldsymbol{k})\leftrightarrow E_2(\boldsymbol{k}))\\&\mathcal{V}_r(\boldsymbol{k})=(E_r(\boldsymbol{k})(E_r(\boldsymbol{k})-i\omega_m))\mathcal{W}_r(\boldsymbol{k}),\quad r=1,2\\&\mathcal{V}(\boldsymbol{k})=\mathcal{V}_1(\boldsymbol{k})+\mathcal{V}_1^*(\boldsymbol{k})+\mathcal{V}_2(\boldsymbol{k})+\mathcal{V}_2^*(\boldsymbol{k})\,.\end{aligned} \tag{7}$$

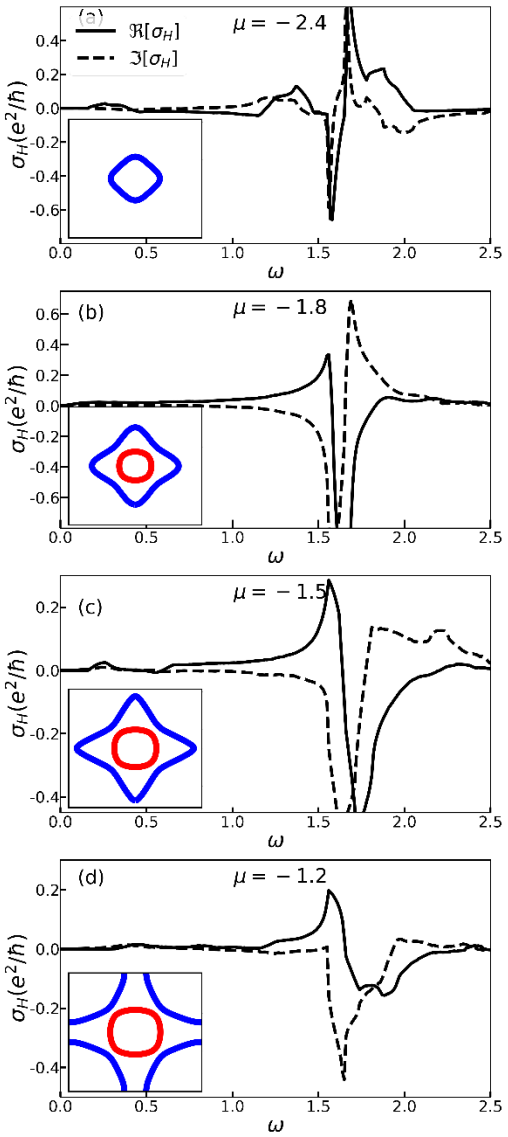
در رابطه (٦)، $v_{im}^{\Delta}(\boldsymbol{k})$ مولفه m سرعت گاف یا شیب تابع گاف لایه iام است. حضور قسمت موهومی و هم‌چنین تابع گاف یا مشتق‌اش در تمامی جملات رابطه (٦) بیان‌کننده این موضوع است که دو لایه باید نسبت به هم به اندازه ۹۰ درجه چرخیده باشند درغیر این‌صورت رسانندگی هال دینامیکی و اثر کر معادلش و هم‌چنین ویژگی



شکل ۱ : طیف شبه‌ذرات برای مقادیر مختلف پتانسیل شیمیائی.

توپولوژیکی ابررسانای تحت بررسی از بین می‌روند. در واقع این نکته به این معنا است که تابع گاف در راستای x و y باید به‌اندازه ۹۰ درجه اختلاف فاز داشته باشند یعنی شکل تابع گاف در حالت کلی باید به‌صورت $\mathbf{f_1(k)+if_2(k)}$ باشد که در آن $\mathbf{f_1(k)}$ ($\mathbf{f_2(k)}$) مربوط به اوربیتال ۱ (۲) است. نکته مهم دیگر این است که رابطه (٦) شامل دو جمله‌ای که متناسب با توان‌های دو و چهار برهم‌کنش بین لایه‌ای می‌باشد. $E_1(\boldsymbol{k})$ و $E_2(\boldsymbol{k})$ طیف شبه‌ذرات است که با استفاده از دترمینان تابع گرین محاسبه شده‌اند. در شکل ۱ اثر پتانسیل شیمیائی بر روی طیف شبه‌ذرات نشان می‌دهد. به دلیل اینکه ویژگی‌های اپتیکی ناشی از گذارهای بین‌نواری و درون نواری است و از طرف دیگر پتانسیل شیمیائی مسئولیت عبور ذرات در داخل سامانه فیزیکی را دارد، این شکل برای درک ما از طیف‌های اپتیکی می‌تواند حائز اهمیت باشد. هرچند که این کمیت وابسته به بردار موج نیست اما معنی فیزیکی آن به ما می‌گوید که تغییر در آن سطح فرمی و طیف انرژی را تغییر می‌دهد. در تغییرات پتانسیل شیمیائی شدیدا طیف انرژی را جابه‌جا می‌کند و کمینه‌های انرژی که در گذارهای توصیف‌کننده ویژگی‌های الکتریکی و رسانندگی الکتریکی بسیار مهم هستند را تحت تاثیر قرار می‌دهد.

بعد از تمدید تحلیلی $i\omega_m\to\omega+i\epsilon$ و قرار دادن $\epsilon=10^{-4}$ در رابطه ٦ می‌توان قسمت‌های حقیقی و موهومی رسانندگی هال دینامیکی را برای مقادیر مختلف پتانسیل شیمیائی بدست آورد (شکل ۲). با استفاده از قسمت حقیقی استاتیک می‌توان گذار توپولوژیکی را بررسی کرد. از آن‌جائیکه قسمت موهومی بیان کننده طیف شبه‌ذرات است، برای هر مورد از پتانسیل شیمیائی، سطح فرمی



شکل۲ : قسمت‌های حقیقی و موهومی رسانندگی هال دینامیکی برای مقادیر مختلف پتانسیل شیمیائی به همراه سطح فرمی معادل

معادل با آن نیز رسم شده است که ارتباط بین تکنینگی در چگالی حالت‌های شبه‌ذرات و سطح فرمی را بهتر مشخص کند.

قسمت موهومی که با خط‌چین نمایش داده شده است کاملا وابسته به پتانسیل شیمیائی است. در بازه انرژی تقریبا بین ۱ تا ۲/۵ پیک‌های شبه‌ذرات اتفاق می‌افتد. تکینگی در این پیک‌ها نشان‌دهنده تکینگی فن‌هوف است. تیزی این پیک با کاهش دادن پتانسیل شیمیائی کاهش می‌یابد و با توجه به ماهیت پتانسیل شیمیائی که مسئول عبور ذرات است این نتیجه منطقی می‌باشد. در $\mu = -2.4$، پیک‌ها شبیه به تابع دلتای دیراک می‌باشد و در $\mu = -1.5$، تکینگی از بین می‌رود. هم‌چنین قسمت حقیقی نیز وضعیت مشابهی برایش اتفاق می‌افتد.

این تغییرات در ترابرد الکتریکی ناشی از تغییرات در طیف انرژی و هم‌چنین گذارهای درون‌نواری و بین‌نواری است. با توجه به اینکه تغییر در پتانسیل شیمیائی باعث گذار فاز توپولوژیکی می‌شود، می‌توان گفت که حضور و غیاب تکینگی فن‌هوف در رسانندگی هال دینامیکی با ویژگی‌های توپولوژیکی مرتبط است.

اغلب پیک‌ها در $\omega \approx 2g \approx 1.5$ اتفاق می‌افتد که بیان‌کننده از بین رفتن حالت ابررسانایی در این محدوده انرژی است. پیک‌های بسیار کوچکی در $\omega \approx 2\Delta$ وجود دارد، محدوده انرژی که بیان‌کننده از بین رفتن حالت ابررسانائی در ابررساناهای معمول است. در انرژی‌های بالا که محدوده‌ای برای توصیف سامانه‌های همبسته قوی است نیز پتانسیل شیمیائی منجر به تغییراتی می‌شود. با توجه به شکل ۲ می‌توان گفت که در محدوده انرژی‌های پایین، تغییر در پتانسیل شیمیائی تغییرات در قسمت‌های موهومی و حقیقی ایجاد می‌کند و این را می‌توان به تغییر کردن کمینه‌های انرژی درشکل۱ نسبت داد.

به‌عنوان نکته آخر باید تاکید کرد که رسانندگی هال نه تنها در ابررساناهای کایرال یافت می‌شود بلکه در سامانه‌های دیگر نظیر ابررسانایی در اکسیدهای مس دو لایه چرخیده شده [8] و هم‌چنین در سامانه راشبا با میدان زیمان [9] نیز وجود دارد. در تمامی این سامانه‌ها تقارن برگشت زمان شکسته شده است.

نتیجه گیری

در این مقاله رسانندگی هال دینامیکی یک ابررسانای کایرال ایجاد شده بوسیله سیم‌های کوانتومی با استفاده فرمول کوبو بررسی شده است. چرخش سیم‌های کوانتومی در لایه‌های مختلف و هم‌چنین برهم‌کنش بین لایه‌ها نقش کلیدی در ایجاد رسانندگی هال دارند. اما مقدار برهم‌کنش بین ذرات در سیم‌های کوانتومی و هم‌چنین مقدار پتانسیل شیمیائی از دو پارامتر ذکر شده تاثیر بیشتری در مقدرا پاسخ اپتیکی دارند. دو پارامتر موثرتر در پاسخ اپتیکی، تکینگی فن‌هوف را شدیدا تحت تاثیر قرار می‌دهند و از آنجائیکه این دو پارامتر در گذار فاز توپولوژیکی موثر هستند، می‌توان گفت که تکینگی فن‌هوف در

فازهای توپولوژیکی مختلف متفاوت هستند. تاثیر این دو پارامتر بیشتر در انرژی‌های بالاتر از برهم‌کنش بین لایه‌ها است. هم‌چنین دو پارامتر مذکور، پاسخ اپتیکی در انرژی‌های بالا جائیکه سامانه کاملا شبیه به سامانه‌های همبسته قوی رفتار می‌کنند را نیز تحت تاثیر قرار می‌دهند.

توجه

بخش نتیجه‌گیری بر اساس محاسبات بیشتر که در این مقاله بیان نشده است نیز می‌باشد.

مرجع‌ها

[1] M. Sato and Y. Ando; "Topological superconductors: a review"; *Reports on Progress in Physics* **80**, No. 7 (2017) 076501.
[2] Y. Maeno, *et.al.*; "Superconductivity in a layered perovskite without copper"; *nature* **372**, No. 6506 (1994) 532-534.
[3] X. L. Qi, T. L. Hughes and S. C. Zhang; "Chiral topological superconductor from the quantum Hall state"; *Physical Review B* **82**, No. 18 (2010) 184516.
[4] M. Leijnse and K. Flensberg; "Introduction to topological superconductivity and Majorana fermions"; *Semiconductor Science and Technology* **27**, No. 12 (2012) 124003.
[5] T. Tummuru, O. Can and M Franz; "Chiral p-wave superconductivity in a twisted array of proximitized quantum wires"; *Physical Review B* **103**, No. 10 (2021) L100501.
[6] J. Xia, Y. Maeno, P. T. Beyersdorf, M. M. Fejer and A. Kapitulnik; "High Resolution Polar Kerr Effect Measurements of Sr_2RuO_4: Evidence for Broken Time-Reversal Symmetry in the Superconducting State"; *Physical Review Letters* **97**, No. 16 (2006) 167002.
[7] A. Y. Kitaev; "Unpaired Majorana Fermions in Quantum wires"; *Physics-uspekhi* **44**, No. 10s (2001) 131.
[8] O. Can, X. X. Zhang, C. Kallin and M. Franz; "Probing time reversal symmetry breaking topological superconductivity in twisted double layer copper oxides with polar Kerr effect"; *Physical Review Letters* **127**, No. 15 (2021) 157001.
[9] S. B. Chung and R. Roy; "Hall conductivity in the normal and superconducting phases of the Rashba system with Zeeman field"; *Physical Review B* **90**, No. 18 (2014) 184516.

توضیحات اضافی

الف) هامیلتونین در حضور برهم‌کنش اسپین-مدار

در حضور اسپین-مدار، هامیلتونین مدل و ماتریس جریان به‌صورت زیر خواهند شد:

$$\mathrm{H} = \sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{h}_{\boldsymbol{k}} \Psi_{\mathbf{k}} ,$$

$$\hat{h}_{\boldsymbol{k}} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{\mathbf{k}1}\sigma_0 & g\sigma_0 & \Delta_{\mathbf{k}1}\sigma_x & 0 \\ g\sigma_0 & \varepsilon_{\mathbf{k}2}\sigma_0 & 0 & \Delta_{\mathbf{k}2}\sigma_x \\ \Delta_{\mathbf{k}1}^{*}\sigma_x & 0 & -\varepsilon_{\mathbf{k}1}\sigma_0 & -g\sigma_0 \\ 0 & \Delta_{\mathbf{k}2}^{*}\sigma_x & -g\sigma_0 & -\varepsilon_{\mathbf{k}2\sigma_0} \end{pmatrix}, \qquad (1^*)$$

$$\hat{\mathrm{J}}(\mathbf{k}) = \sigma_0 \otimes \begin{pmatrix} \mathrm{J}^{\mathrm{e}}(\mathbf{k}) & 0 \\ 0 & \mathrm{J}^{\mathrm{h}}(\mathbf{k}) \end{pmatrix},$$
$$\mathrm{J}^{\Delta}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} 0 & \mathcal{J}^{\Delta}(\mathbf{k}) \\ \mathcal{J}^{\Delta *}(\mathbf{k}) & 0 \end{pmatrix},$$
$$\mathcal{J}^{\Delta}(\mathbf{k}) = \sigma_x \otimes [-\mathrm{e}\nabla_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} \Delta_{\mathbf{k}1} & 0 \\ 0 & \Delta_{\mathbf{k}2} \end{pmatrix}]. \qquad (2^*)$$

در این‌جا $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ ماتریس‌های پائولی در فضای اسپین هستند و σ_0 ماتریس یکانی مرتبه ۲. در این مورد پایه به‌صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\Psi_{\mathbf{k}} = (\mathrm{c}_{\mathbf{k}1\uparrow}, \mathrm{c}_{\mathbf{k}2\uparrow}, \mathrm{c}_{\mathbf{k}1\downarrow}, \mathrm{c}_{\mathbf{k}2\downarrow}, \mathrm{c}_{-\mathbf{k}1\uparrow}^{\dagger}, \mathrm{c}_{-\mathbf{k}2\uparrow}^{\dagger}, \mathrm{c}_{-\mathbf{k}1\downarrow}^{\dagger}, \mathrm{c}_{-\mathbf{k}2\downarrow}^{\dagger})^{\mathrm{T}}$$

در این حالت ماتریس تابع گاف به‌صورت یک ماتریس 4×4 تعریف می‌شود که با فرض در نظر نگرفتن جفت‌شدگی درون‌باندی داریم:

$$\hat{\Delta}_{\boldsymbol{k}} = \begin{pmatrix} \bar{\Delta}_{\mathbf{k}1} & 0 \\ 0 & \bar{\Delta}_{\mathbf{k}2} \end{pmatrix}, \qquad (3^*)$$

که در این‌جا برای جفت‌شدگی سه‌تائی داریم:

$$\bar{\Delta}_{\mathbf{ki}} = (\boldsymbol{d}_i \cdot \boldsymbol{\sigma})(i\sigma_2) \qquad (4^*)$$

و برای جفت‌شدگی تک‌تائی

$$\bar{\Delta}_{\mathrm{ki}} = (d_i^0)(i\sigma_2) \qquad (5^*)$$

علامت خط راست بر روی کمیت‌ها نشان‌دهنده نوشتن در فضای اسپین است. از آن‌جائیکه تابع گافی که ما بررسی می‌کنیم به‌صورت جفت‌شدگی سه‌گانه است ما از مورد اول استفاده می‌کنیم. بردار $\mathbf{d}$ تابع گاف کایرال استفاده شده با تکانه زاویه‌ای یک، در راستای z جهت‌گیری می‌شود بنابراین مولفه‌های x و y آن برابر با صفر می‌شود. به‌همین دلیل در رابطه (1^*) تابع گاف در مولفه x ماتریس‌های پائولی ضرب می‌شود. با لحاظ نکردن اسپین، کافی است که این مولفه ماتریس پائولی را از محاسبات حذف کنیم.

بررسی تاثیرات آرایه ای از مراکز پین شدگی شبکه همدیس بر جریان بحرانی نوار ابررسانا

زویداوی، سارا[۱] ؛ حسینی، مهدی[۱]

[۱]دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی شیراز، بلوارمدرس شیراز

چکیده

در این مطالعه تغییرات چگالی جریان بحرانی دریک نوار ابررسانا شامل شبکه پین شدگی که از اعمال تبدیل همدیس روی شبکه ای مربعی از مراکز پین شدگی ایجاد شده مورد مطالعه قرارگرفته است. این موضوع بدلیل امکان افزایش چگالی جریان بحرانی، حائز اهمیت است و پژوهشگران متعددی به بررسی آن پرداخته اند. در این کار ابتدا با حل معادله لانژوین برای دینامیک گردابه ها مکان آنها برحسب زمان بدست آمده و به کمک آن چگالی جریان بحرانی برحسب میدان مغناطیسی بدست آمده است. نتایج نشان می دهد که پس از اعمال تبدیل همدیس، در میدان های بزرگ جریان بحرانی افزایش اندکی پیدا می کند، همچنین پدیده قله دوم نیز مشاهده گردید.

واژه های کلیدی: گردابه، چگالی جریان بحرانی، تبدیل همدیس

Investigation of the conformal pinning center array effects on the critical current of a superconducting tape

Zoveidavi, Sara[1]; Hosseini, Mehdi[1]

[1] *Department of Physics, Shiraz University of technology, Shiraz*
Modares Boulevard, Shiraz

Abstract

In this study, the critical current density changes in a superconducting tape including pinning centers array in the form of conformal transformation of square lattice have been studied. This issue is important because of the improvement in the critical current density and has been studied by several researchers. In this work, by solving the Langevin equation, the vortices position versus time is obtained and according to that, the critical current density versus magnetic field is calculated. The results show that by applying the conformal transformation, the critical current increases slightly in large fields, and furthermore the second peak effect is observed.

***Keywords**: Vortex, Critical current density, Conformal transformation*
PACS No.74

مقدمه

دراثراعمال جریان الکتریکی به ابررسانای نوع دو نیروی لورنتس به گردابه ها وارد می شود و باعث حرکت آنها می شود، حرکت شار مغناطیسی، میدان الکتریکی و در نتیجه اختلاف پتانسیل دردو سر ابررسانا ایجاد میکند که نهایتا اتلاف انرژی به همراه دارد در این شرایط ابررسانا مقاومت اهمی از خود نشان می دهد و جریان عبوری از ماده کاهش می یابد ، بنابراین جهت کاهش اتلاف انرژی باید حرکت گردابه ها کمتر شود [۱].

یکی از راه های بهبود جریان بحرانی I_C و کاهش هدررفت انرژی اضافه کردن ناخالصی و ایجاد ناکاملی به طور مناسب در ماده ی ابررسانا می باشد به طوری که این نا خالصی ها به عنوان پین کننده گردابه ها در سطح ابررسانا ایجاد می شوند و نقش مهمی در افزایش جریان بحرانی دارند [۲]. در ابررساناهای نوع دو حرکت گردابه ها باعث محدود شدن انتقال جریان می شود که به منظور غلبه بر این محدودیت انواع مختلفی از مراکز پین بندی مصنوعی برای بی حرکت کردن گردابه ها در فیلم ابررسانا وارد می شود. انواع مختلف پین بندی به شکل آرایه های متفاوت از جمله: مثلثی [٤]، کاگومه [٥]، پنروز [۹،۱۰،۱۱]، لانه ی زنبوری [٦] و... که توسط پژوهشگران بررسی شده اند [۱۲،۱۳]. نحوه ی چینش پین بندی ها از اهمیت بالایی برخورداراست. گروهی از پژوهشگران طی بررسی های مختلف به این نتیجه دست یافتند که ، برای آرایه های متفاوت با تعداد پین های مساوی آرایه های پین بندی لانه زنبوری و کاگومه نسبت به آرایه ی مثلثی جریان بحرانی بالاتری دارند [۳]. همچنین آرایه های پین بندی دوره ای مانند مربعی [۷] مورد مطالعه قرارگرفته است که در مقایسه با آرایه ی تصادفی

جریان بحرانی افزایش می یابد. آرایه های تصادفی همچنان دارای این اشکال اساسی هستند که فقط در نزدیکی مقادیر خاصی از میدان به جای دامنه وسیعی از میدان پین بندی بهتری ارائه می دهند و در تلاش برای غلبه بر این نقص نوع جدیدی از هندسه پین ها ارائه شد که آرایه همدیس نام دارد [۸]. در اینجا ما چگالی جریان بحرانی یک نوار ابررسانا در حضور یک آرایه ی همدیس از حفره های نانو مقیاس را بررسی می کنیم.

جزئیات محاسبات

با درنظر گرفتن گردابه ها به عنوان یک سیستم با ویسکوزیته بالا، ویژگی های دینامیکی آنها را می توان با استفاده از معادلات زیر شبیه سازی کرد [۱۳] :

$$\eta \mathbf{v}_i = \mathbf{f}_i = \mathbf{f}^{vv}{}_i + \mathbf{f}^{vp}{}_i + \mathbf{f}^{T}{}_i \qquad (۱)$$

f_i ، نیروی کل وارد شده بر گردابه است، نیروی ناشی از برهم کنش گردابه ها بصورت زیر است:

$$\mathbf{f}^{vv}{}_i = \mathbf{r}_{ij} f_0 k_1(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| / \lambda) \qquad (۲)$$

k_1، در این رابطه تابع بسل نوع دوم و λ عمق نفوذ است.

$$f_0 = \phi_0^2 / 8\pi^2 \lambda^3 \qquad (۳)$$

ϕ_0 کوانتوم شارمغناطیسی است، r_i مکان ورتکس i ام و r_j مکان ورتکس j ام است که:

$$\mathbf{r}_{ij} = \left(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j\right) / \left|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j\right| \qquad (۴)$$

$$\mathbf{f}_i^{vp} = (f_p / r_p)\left|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_k^{(p)}\right| \Theta\left(r_p - \left|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_k^{(p)}\right| / \lambda\right) \mathbf{r}^{(p)}{}_{ik} \qquad (۵)$$

f_i^{vp} نیروی پین شدگی و f_p ماکزیمم نیروی پین شدگی است و f^T در رابطه ۱ نیروی حاصل از ارتعاشات دمایی است.

با در نظر گرفتن شبکه ی مربعی، تاثیر آرایه ی همدیس را بررسی می کنیم و از رابطه ی زیر برای اعمال تبدیل همدیس استفاده می کنیم [۱٤] :

$$Z(w) = -il_1 \ln(iw / l_2) \qquad (٦)$$

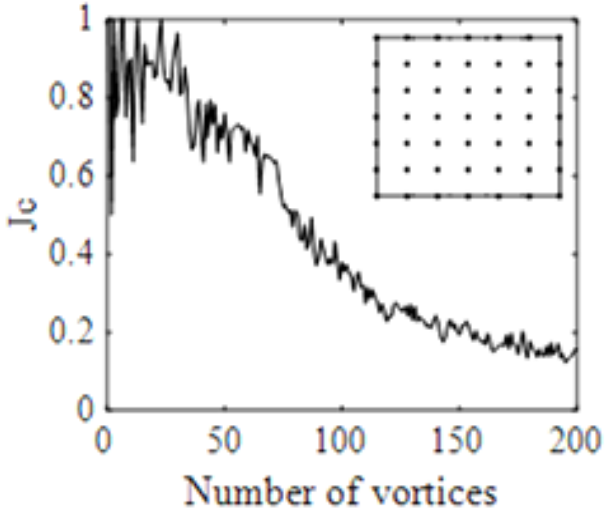
l_1 و l_2 پارامترهای آزاد تابع همدیس هستند، w نیز متغیر مختلط تابع همدیس است. این رابطه در این شبیه سازی آرایه مربعی را به ناحیه نیم دایره ای تبدیل می کند.

نتایج و بحث

باتوجه به شکل۱ شبکه مربعی به عنوان مرجع در نظر گرفته شده و توسط رابطه (٦) به ازای l_1 ثابت و l_2 متغیر چندین شبکه همدیس ایجاد و توسط شبیه سازی نمودارهای چگالی جریان بحرانی J_c برحسب میدان مغناطیسی را به دست می آوریم که در این شبیه سازی تعداد ورتکس ها از صفر تا ۲۰۰ ، تعداد مراکز پین شدگی ۱۰۰ ، مقدار f^T (نیروی حاصل از ارتعاشات گرمایی) ۰/۵، شعاع مراکز پین شدگی r_p، ۰/۱ است و شبکه مراکز پین شدگی ۷در۷ تعیین شده است. با توجه به رابطه زیر:

$$J_c = N_{vp} / N_v \qquad (۷)$$

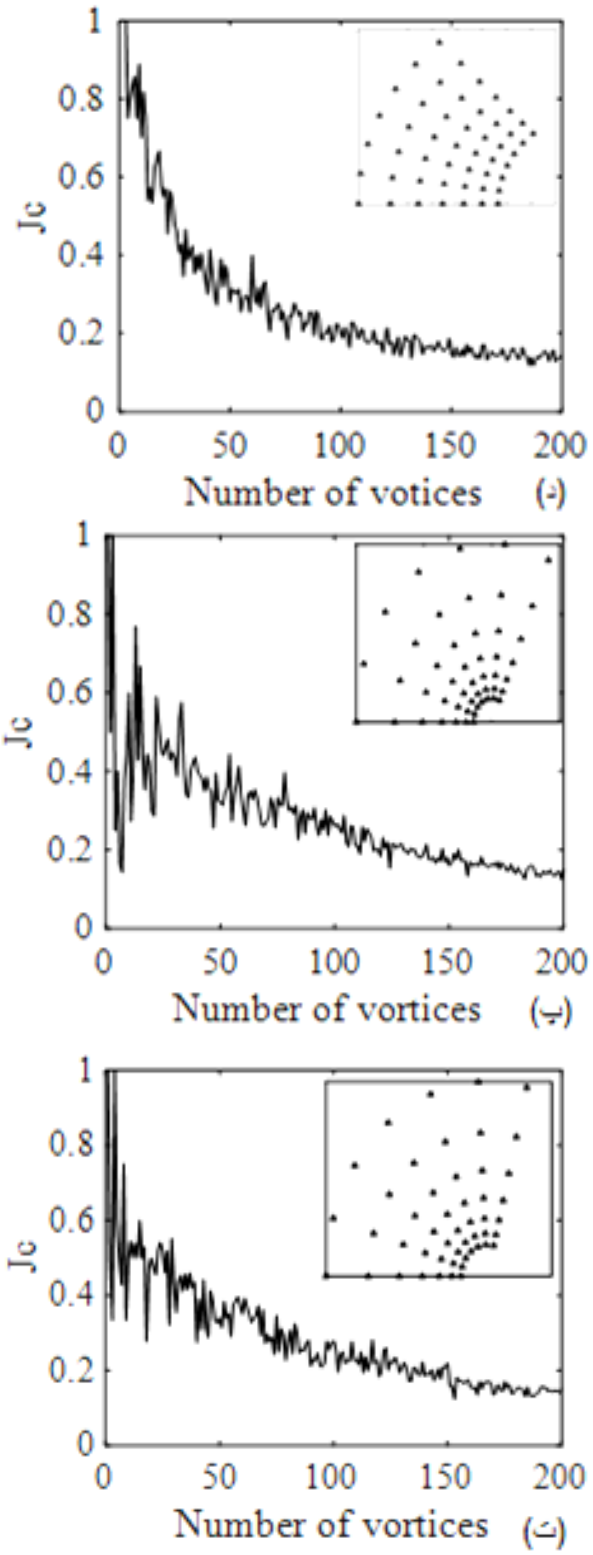
چگالی جریان بحرانی نرمالیزه شده را بدست می‌آوریم که N_{vp} تعداد گردابه‌های پین‌شده و N_v تعداد کل گردابه‌ها است. درشکل۱ J_c شبکه مربعی، در نزدیکی میدان مغناطیسی صفر، بیشترین مقدار را دارد و با افزایش میدان J_c افت می کند.



شکل (۱) : نمودار J_c برحسب تعداد ورتکس هابرای شبکه مربعی ۷در ۷.

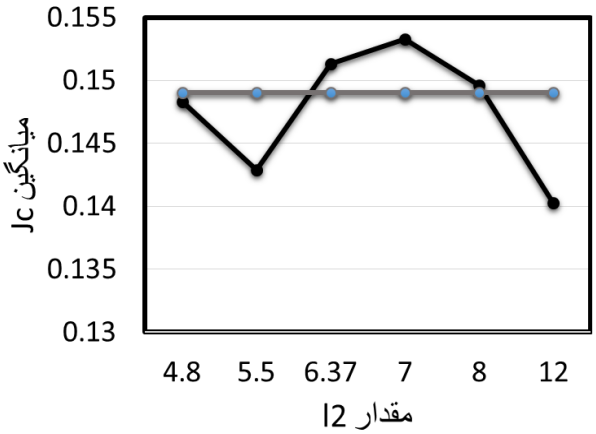
درشکل ۲ تغییرات J_c را بعد از اعمال تبدیل همدیس، به ازای مقادیر مختلف l_2 بدست آورده ایم. مقادیر l_2 طوری انتخاب شده که حالت زاویه اول مراکز پین شدگی به صورت یک قطاع دایره با زاویه ۹۰ درجه باشد و تعدادی حالت با زاویه بزرگتر و کوچکتر نیز انتخاب شده است.

در ادامه با مشاهده نتایج و مقایسه مقدار میانگین در بخش های دیگر شکل۲ به بررسی آنها می پردازیم:



شکل(۲) : نمودار J_c برحسب تعداد ورتکس ها برای شبکه همدیس ۷ در۷ به ازای الف: ٦/٣٧= l_2، ب: ٨= l_2، ج: ٧= l_2، د: ١٢= l_2، پ: ٤/٨= l_2، ت: ٥/٥= l_2.

روند کاهشی مقدار J_c در تمام نمودارهای شکل ۲ به جز ۲-پ دیده میشود. در این حالت پدیده قله دوم [۱۱] قابل مشاهده است که با افزایش میدان مغناطیسی به دلیل ایجاد پایداری در شبکه گردابه ها جریان بحرانی به صورت موقت افزایش می یابد. از نکات قابل توجه در شکل ۲ افزایش مقدار چگالی جریان بحرانی در میدان های بالا برای برخی از حالات است.



شکل(۳) : میانگین J_c برای ۱۰٪ پایانی میدان مغناطیسی برحسب مقادیر l_2.

به منظور مشاهده بهترین چینش پین شدگی به منظور بدست آمدن بالاترین چگالی جریان بحرانی در میدان های بالا، در شکل ۳ نمودار، میانگین J_c در ۱۰٪ پایانی تعداد گردابه ها برای همه حالت های شکل ۲ رسم شده است. نتایج نشان می دهد که بالاترین مقدار چگالی جریان بحرانی برای $l_2=7$ بدست آمده است. همچنین با افزایش بیشتر یا کاهش پارامتر l_2 مقدار چگالی جریان بحرانی کاهش می‌یابد. قابل ذکر است که برای پارامتر l_2 کمتر از ٤/٨ هندسه چینش دستخوش تغییر چشمگیر می‌شود و نتایج مناسبی بدست نمی‌دهد.

نتیجه گیری

در این پژوهش، چگالی جریان بحرانی با اعمال مراکز پین شدگی به صورت شبکه مربعی و تبدیل همدیس آن بررسی شد. نتایج نشان می دهد با اعمال این تبدیل همدیس برای برخی پارامترهای خاص امکان افزایش چگالی جریان بحرانی در میدان های بالا وجود دارد. همچنین پدیده قله دوم نیز در دو حالت مشاهده گردید.

مراجع

[۱] G. Blatter, M. V. Feigel'man. V. B. Geshkenbein. A. I. Larkin. and V. M. Vinokur: "Vortices in high-temperature superconductors "; *Reviews of Modern Physics* **66**, No. 4 (1994) 1-2.
[۲] Y. L. Wang, M. L. Latimer, Z. L. Xiao. R. Divan. L. E. Ocola. G. W. Crabtree. and W. K. Kwok: "Enhancing the critical current of a superconducting film in a wide range of magnetic fields with a conformal array of nanoscale holes"; *Physical Review B* **87**, No. 22 (2013) 1-2.
[۳] N. P. Vizarim1 · M. Carlone1 · L. G. Verga2· P. A. Venegas3; "Surface effects on the dynamic behavior of vortices in type II superconducting strips with periodic and conformal pinning arrays"; *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism* **31**, No. 7 (2018) 1-9.
[۴] Cao, R., Lance Horng, T. C. Wu, Jong-Ching Wu, and T. J. Yang; "Temperature dependent pinning phenomenon in superconducting Nb films with triangular and honeycomb pinning arrays"; *Journal of Physics: Condensed Matter* **21**, No. 7 (2009) 1-4.
[۵] J Cuppens., G. W. Ataklti, Werner Gillijns, Joris Van de Vondel, V. V. Moshchalkov, and A. V. Silhanek; "Vortex dynamics in a superconducting film with a kagomé and a honeycomb pinning landscape"; *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism* **24**, No. 1 (2011) 7-11.
[۶] Reichhardt, C., and CJ Olson Reichhardt; "Vortex molecular crystal and vortex plastic crystal states in honeycomb and kagome pinning arrays"; *Physical Review B* **76**, No. 6 (2007) 1-8.
[۷] S. B. Field, S. S. James, J. Barentine, V. Metlushko, G. Crabtree, H. Shtrikman, B. Ilic, and S. R. J. Brueck; "Vortex configurations, matching, and domain structure in large arrays of artificial pinning centers"; *Physical Review Letters* **88**, No. 6 (2002) 1-2.
[۸] D. Ray, C. Reichhardt, and C. J. Olson Reichhardt ; "Pinning, ordering, and dynamics of vortices in conformal crystal and gradient pinning arrays"; *Physical Review B* **90**, No. 9 (2014) 1-3.
[۹] V. Misko, S. Sergey, and N. Franco; "Critical currents in superconductors with quasiperiodic pinning arrays: One-dimensional chains and two-dimensional Penrose lattices"; *Physical Review B* **74**, No. 2 (2006) 4-14.
[۱۰] V. Misko, S. Sergey, and N Franco; "Critical currents in quasiperiodic pinning arrays: Chains and penrose lattices "; *Physical Review Letters* **95**, No. 17 (2005) 1-2.
[۱۱] G. R. Berdiyorov, M. V. Milošević, and F. M; "Vortex configurations and critical parameters in superconducting thin films containing antidot arrays: Nonlinear Ginzburg-Landau theory"; *Physical Review B* 74, No. 17 (2006) 3-10.
[۱۲] A. N. Grigorenko, S. J. Bending, M. J. Van Bael, M. Lange, V. V. Moshchalkov, H. Fangohr and P. A. J. De Groot; "Symmetry locking and commensurate vortex domain formation in periodic pinning arrays "; *Physical Review Letters* **90**, No. 23 (2003) 2-8.
[۱۳] C. Reichhardt, C. J. Olson, and F. Nori; "Commensurate and incommensurate vortex states in superconductors with periodic pinning arrays"; *Physical Review B* **57**, No. 13 (1998) 1-2.
[۱۴] R. M. Menezes, C. C. Silva; "Conformal vortex crystals"; *Scientific Reports* **7**, No. 1 (2017) 1-8.

ساخت و مشخصه‌یابی ترکیب ابررسانای پایه‌آهن $Ba_{0.6}K_{0.4}Fe_2As_2$

باغبان زاده ، ایمان ؛ شاکری پور، حمیده

دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان ۸۳۱۱۱-۸۴۱۵۶

پست الکترونیکی: hshakeri@iut.ac.ir

چکیده

ترکیب $Ba_{0.6}K_{0.4}Fe_2As_2$ به روش حالت جامد دومرحله ای و سنتز دما پایین ساخته شد. دراین روش، ابتدا پیش ماده FeAs در دو دمای ۶۰۰ و سپس ۹۰۰ درجه سانتیگراد هر کدام به مدت ۲۴ ساعت نگهداری شده و ساخته شد. پیش ماده با فلزهای Ba و K ترکیب شد و پس از پخت در دمای ۸۰۰ درجه سانتیگراد درنهایت ترکیب مورد نظر حاصل آمد. طیف پراش پرتوایکس نمونه با استفاده از نرم افزار MAUD به روش ریتولد آنالیز و تحلیل شد. همچنین از ترکیب حاصل شده آزمون مقاومت الکتریکی تحت دما گرفته شد.

واژه های کلیدی: *ابررسانای پایه‌آهن، واکنش حالت جامد، (Ba,K)-122*

Synthesis and characterization of $Ba_{0.6}K_{0.4}Fe_2As_2$ Iron-based superconductor

Baghbanzadeh, Iman; Shakeripour, Hamideh

Department of physics, Isfahan university of technology, Isfahan 84156-83111

Abstract

$Ba_{0.6}K_{0.4}Fe_2As_2$ Iron based superconductor was synthesized by two-step solid state reaction method with low sintering temperature. In the first step, FeAs precursor was prepared with heat treatment at 600 C and 900 C for 24 hours at both temperatures. Then, the prepared FeAs precursor was combined with Ba and K metals and heated at 800 C to obtain $Ba_{0.6}K_{0.4}Fe_2As_2$. X-ray diffraction spectrum analysis was performed by MAUD software using Rietveld method. Moreover, the electrical resistivity measurement was done vs temperature.

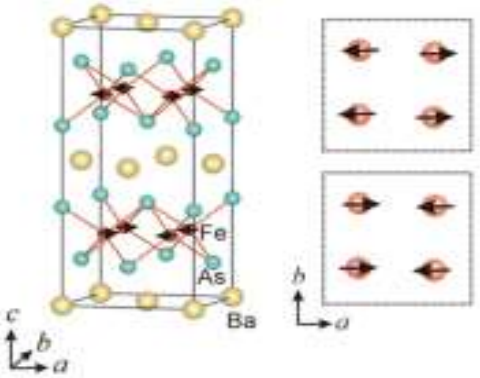
***Keywords**: Iron based superconductor, Solid state reaction, (Ba, K)-122*

مقدمه:

ابررساناهای پایه‌آهن به طور عمده حداقل از چهار خانواده 1111، 122، 111 و 11 تشکیل می‌شوند [1]. ابررسانای پایه آهن در سال 2006 با ترکیب LaFePO با دمای گذار 4 کلوین توسط گروهی به رهبری هیدیو هوسونو[1] کشف شد [1]. با ادامه تحقیقات، در سال 2008 ترکیب $LaFeAsO_{1-x}F_x$ که دمای گذاری برابر با 26 کلوین داشت، کشف شد واین کشف مورد توجه فیزیک‌دان‌های زیادی قرار گرفت. به دلایل متعددی این ابررساناها مورد علاقه محققین هستند: انواع مختلفی از ابررساناهای پایه آهن کشف شده است که نوع 122 دارای کمترین ناهمسانگردی (γ<2) بوده [2,3]، که این موضوع سبب علاقه مندی محققان به جهت استفاده از این خانواده برای ساخت سیم ونوار شده است [1,4].

[1] Hideo Hosono

در اینجا، ساخت ابررسانای 122 با ترکیب $Ba_{0.6}K_{0.4}Fe_2As_2$ مورد نظراست که ترکیب مادر آن $BaFe_2As_2$ بوده و همانند برخی دیگر از ترکیبات پایه‌آهن، ترکیب مادر یک آنتی فرومغناطیس بوده و دارای دمای‌گذار ابررسانایی نمی‌باشد [5]. دلیل گذار مغناطیسی با استفاده از آنالیز پراش نوترون قابل مشاهده است. در این آنالیز با کاهش دما، در مرز 140 کلوین نمونه از ساختار تتراگونال به ساختار اورتورمبیک گذار می‌کند. همزمان با گذار ساختاری، گذار مغناطیسی هم مشاهده می شود؛ یون‌های آهن موجود در صفحه FeAs به صورتی که در شکل (1) آمده است جهت‌های متفاوتی در دو راستای a و b نسبت بهم دارند. کاهش دما، سبب گذار فاز مغناطیسی از پارامغناطیس به پادفرومغناطیس می‌شود [6].



شکل۱: سلول واحد به همراه جهت گیری‌های اسپنی یون‌های آهن [6]

همانگونه که در تصویر مشاهده می شود، جهت گیری اسپین‌های آهن در راستای a به‌صورت پادفرومغناطیس و در راستای b به صورت فرومفناطیس می‌باشند. به دلیل اصل پائولی، یون ها با اسپین موافق ازهم دور و یون ها با اسپین مخالف بهم نزدیک شده و در این صورت تجمع یون هایی با اسپین مخالف بیشتر شده و در نهایت یون‌های آهن در صفحه FeAs از خود خاصیت پادفرومغناطیسی نشان می‌دهند. به جهت سرکوب گذار فازها، ایجاد فشار شیمیایی با استفاده از آلایش، همچون آلایش پتاسیم در جایگاه باریوم استفاده می‌شود تا درنهایت گذار ابررسانایی حاصل آید [5,6].

بیشترین دمای گذار ابررسانای $Ba_{1-x}K_xFe_2As_2$ در مقدار x=0.4 می باشد که دمایی برابر با 38 کلوین را دارا است، این ترکیب دارای میدان بحرانی بالایی(H_{c2}) 75 تسلا می باشد [7,5].

روش ساخت نمونه:

پس از استریل کردن وسایل مورد نیاز مانند اسپاتول، قاشقک، پنس، هاون و لوله‌کوارتز، جعبه دستکش[2] خلاء شد. گاز آرگون با درصد خلوص 99/9 به جعبه دستکش تزریق شد. توزین عناصر با درصد خلوص ۹۹/۹۹، براساس استوکیومتری مربوطه انجام شد.

برای سنتزترکیب، از روش حالت جامد دومرحله‌ای با ساخت پیش ماده FeAs مشابه با اکثر مقالات مطالعه شده، استفاده شده است [8,9, 5,10]. برای سنتز FeAs با نسبت 1:1، عناصر آهن و ارسنیک توزین شده و درهاون آلومینا با هم ترکیب شدند. سپس پودر به دست آمده، به قرص تبدیل شده و درون لوله کوارتز قرار گرفت. لوله کوارتز با استفاده از حرارت، درحالی که گاز درون لوله خلاء می شد، پلمپ شد. لوله کوارتز، درون کوره تحت دمای ٦٠٠ درجه سانتیگراد به مدت ٢٤ ساعت و سپس در دمای ٩٠٠ درجه سانتیگراد به مدت ٢٤ ساعت، حرارت داده شد.

عناصر باریوم و پتاسیم به همراه پیش ماده آهن ارسنیک، درهاون آلومینا به مدت دوساعت، سایش داده شد و پودر حاصله به‌صورت قرص‌هایی مستطیلی شکل درآمدند و دریک ورقه تانتالوم پیچانده شد و سپس درون لوله کوارتز قرار گرفت. لوله کوراتز، که حاوی مقداری گازآرگون بود، مشابه مرحله قبل پلمپ شد که در شکل (۲) قابل مشاهده می‌باشد.

شکل۲ : نمونه پیچانده شده در ورقه تانتالوم که در لوله کوارتز پلمپ شده است.

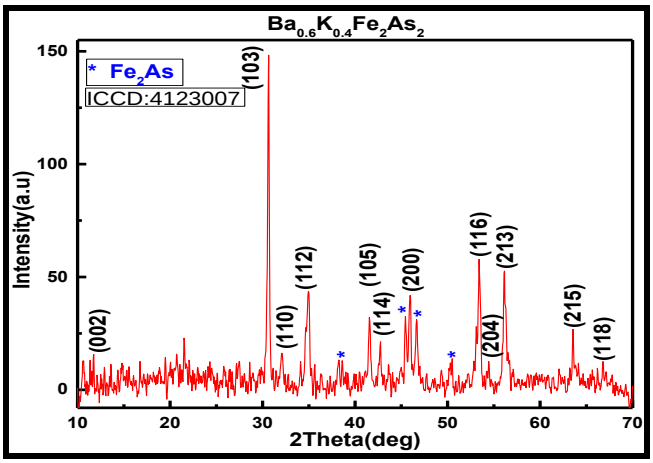
لوله کوارتز تحت دمای ۸۰۰ درجه سانتیگراد به مدت ٤٨ ساعت قرار گرفت.

[2] Gloves box

به‌دلیل سفت بودن باریوم، در سایش اولیه، ترکیب به دست آمده، کامل همگن نشد. پس، سایش دوباره ی نمونه و آماده سازی آن برای بار دوم حرارت دهی، مانند قبل، انجام شد و نمونه ساخته شد.

نتایج، بحث و بررسی:

آنالیزالگوی پرتوایکس این ترکیب $Ba_{0.6}K_{0.4}Fe_2As_2$ با استفاده از نرم افزار MAUD به روش ریتولد انجام شد. نتایج آنالیز XRD در شکل (۳) قابل مشاهده است. طیف پراش پرتو ایکس این نمونه دارای (87٪) خلوص و (13٪) ناخالصی Fe_2As می‌باشد. مقایسه حاصل از این آزمون نسبت به گزارش های موجود در مقالات در جدول (۱) قابل مشاهده است که نشان از تطابق نسبتا خوبی با مقالات گزارش شده دراین زمینه می‌باشد.

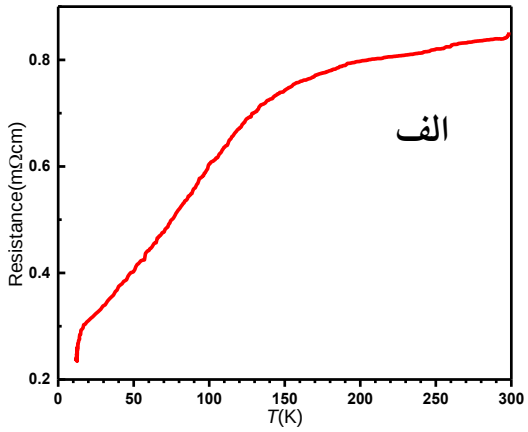


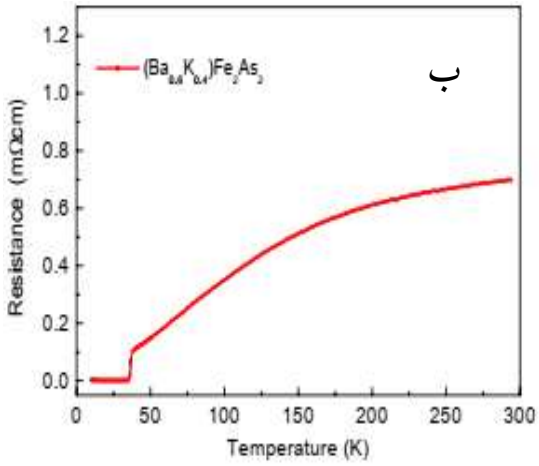
شکل ۳: الگوی پراش‌پرتوایکس ترکیب $Ba_{0.6}K_{0.4}Fe_2As_2$. ناخالصی Fe_2As با علامت ستاره آبی رنگ نشان داده شده است.

جدول 1: مقایسه پارامترهای شبکه نمونه سنتز شده $Ba_{0.6}K_{0.4}Fe_2As_2$، با مقالات گزارش شده

مرجع	a=b	c
XRD	3/96(A°)	13/04(A°)
[5]	3/91(A°)	13/29(A°)
[11]	3/94(A°)	13/19(A°)
[12]	3/91(A°)	13/31(A°)

آزمون مقاومت الکتریکی تحت دما که در شکل الف (٤) قابل مشاهده است، نشان از داشتن رفتاری فلزی می‌باشد. همچنین مقایسه این آزمون با مقالات گزارش شده [5]، شکل ب (٤)، می‌تواند نشان دهنده سازگاری نسبتا خوبی باشد.





شکل 1: (الف) مقاومت ویژه مربوط به ترکیب ساخته شده $Ba_{0.6}K_{0.4}Fe_2As_2$ که با (ب) گزارش مقاله [5] مقایسه شده است.

نتیجه گیری:

با در نظر گرفتن داده های گزارش شده، روش ساخت و دمای مورد استفاده به جهت کلوخه سازی ترکیب $Ba_{0.6}K_{0.4}Fe_2As_2$ را می‌توان مورد تایید قرار داد.

با توجه به آنالیز های انجام شده می توان مشاهده نمود که درصد پتاسیم حین حرارت دهی کاهش می یابداز اینرو با جایگزین کردن

کوروزه های آلومینا امید برای جلوگیری از بخار پتاسیم در آزمایش های بعدی وجود دارد.

مرجع‌ها:

[1] Hosono H. “Recent advances in IBSC toward applications.” Materials Today. 2018, 21, 278-302.

[2] Qin D. “Realization of epitaxial thin films of the Sc K-doped $BaFe_2As_2$.” Physical Review Materials. 2021, 5, 014801.

[3] Qi Y. “Transport critical currents in the IBSC wires prepared by the ex situ PIT method.” Supercond. Science and Technology. 2010, 23, 055009.

[4] Yuan Q. “Nearly isotropic Superconductivity in (Ba, K) Fe_2As_2. Nature. 2009, 457, 565-8.

[5] Rotter M. Superconductivity at 38 K in the IBSC $(Ba_{1-x}K_x)Fe_2As_2$ PRL. 2008, 101, 107006.

[6] Huang, Q. "Neutron-diffraction measurements parent $BaFe_2As_2$ compound IBSC." *PRL 2008, 101, 257003.*

[7]J*ohrendt D.” Superconductivity magnetism and crystal chemistry of* $Ba_{1-x}K_xFe_2As_2$*.” Physica C, Superconductivity. 2009, 469, 332-9.*

[8] *Weiss, J. D. "High intergrain critical current density in fine-grain* $(Ba_{0.6}K_{0.4})Fe_2As_2$ *wires and bulks." Nature Materials, 2012, 11, 682-685.*

[9] Togano. "Large critical current densities of (Ba, K) Fe_2As_2+ Ag Superconductivity wires fabricated by PIT ." *Applied physics express.* 2011, 4, 043101.

[10] E. Maltsev. “Synthesis of IBSC $Ba_{0.6}K_{0.4}Fe_2As_2$ by mechanical alloying,” *Bulletin of the Lebedev Physics Institute. 2019, 46, 248–250.*

[11] Eguchi N. “Powder x-ray diffraction of $BaFe_2As_2$ under hydrostatic pressure.”Conference Series 2012, 400, 022017.

[12] Guler AD. Superconductivity in Pt-and La-Doped $BaFe_2As_2$ Compounds Prepared by Solid-State Reaction”. IEEE Transactions on Magnetics. 2015, 51, 1-4.

بررسی تغییرات احتمال انتقال در اتصال دو سطحی جوزفسون بروی کیوبیت ابررسانا

نوروزی[۱]، میلاد؛ سیدیزدی[۱]، جمیله؛ حسینی[۲]، سیدمحمد؛ ایران‌نژاد[۱]، فاطمه

[۱]گروه فیزیک، دانشگاه ولی عصر (عج) رفسنجان، رفسنجان، ایران

[۲]گروه فیزیک، دانشگاه ارومیه، ارومیه، ایران

چکیده

در این پژوهش سطوح انرژی کیوبیت‌ها در انتقال‌دهنده‌های ابررسانا با توجه به تغییرات احتمال انتقال در اتصال جوزفسون بررسی شده است. در مدل تئوری پژوهش از اتصال جوزفسون با ساختار دو سطحی Al/InAs (2DEG)/Al با رویکرد میکروسکوپی معادله بوگولیوبوف-دوژن و حالت‌های باندی آندریف استفاده شده است. مدار کیوبیت ابررسانا و مدل فیزیکی آن با استفاده از جفت‌شدن یک خازن و ولتاژ به جزیره ابررسانا (کیوبیت) با هامیلتونی کاملاً میکروسکوپی مورد مطالعه قرار گرفته است. در نهایت نشان داده می‌شود که با تغییر پتانسیل شیمیایی در ساختار اتصال جوزفسون دو سطحی و در نهایت احتمال انتقال در اتصال، انرژی برای کیوبیت‌ها قابل تغییر می‌باشد. این تغییرات به معنای قابل کنترل بودن کیوبیت‌ها در ادوات ابررسانا است که از اهمیت بالایی در ادوات محاسبات کوانتومی برخوردار است.

Investigation of transmission probability changes in planar Josephson junction on superconducting qubit

Norouzi[1], Milad; Seyedyazdi[1], Jamileh; Hosseiny[2], Seyed Mohammad; Irannezhad[1], Fatemeh

[1]Department of Physics, Faculty of Science, Vali-e-Asr University of Rafsanjan, Iran.

[2]Department of Physics, Faculty of Science, Urmia University, Urmia, Iran.

Abstract

In this study, the energy levels of qubits in superconducting transmitters have been investigated due to changes in the transmission probability at the Josephson junctions. In this research, the theoretical model of the Josephson junction with the Al/InAs (2DEG)/Al planar structure has been used with the microscopic approach of Bogoliubov–de Gennes (BdG) equation and Andreev bound state (ABS). The superconducting qubit circuit and its physical model have been studied using a capacitor and voltage coupled to a superconducting island (qubit) with a full microscopic Hamiltonian. Finally, it is shown that by changing the chemical potential in the structure of the planar Josephson junction and finally the probability of transmission in the junction, the energy for the qubits can be changed. These changes mean that qubits can be controlled in superconducting devices, which is of great importance in quantum computing devices.

PACS No.(74.20)

مقدمه

اتصالات جوزفسون (JJs)[۱] هیبریدی دو سطحی در ساختارهای هیبرید ابرسانا/نیم‌رسانا همواره مورد علاقه دانشمندان است. تونل-زنی جریان بحرانی الکترواستاتیک کیوبیت‌های ابررسانا[۲]، قابلیت کنترل‌پذیری با ولتاژ را فراهم می‌سازد [۳-۱]. در مرجع [۴] اندازه‌گیری همزمان جریان بحرانی فاز محور و طیف حالت باندی آندریف در اتصال جوزفسون با حالت انتقالی بالای ساختار Al/InAs (2DEG)/Al مورد مطالعه قرار گرفته است. اتصالات جوزفسون دو سطحی یک زمینه آرمانی برای آزمایش خاصیت‌های

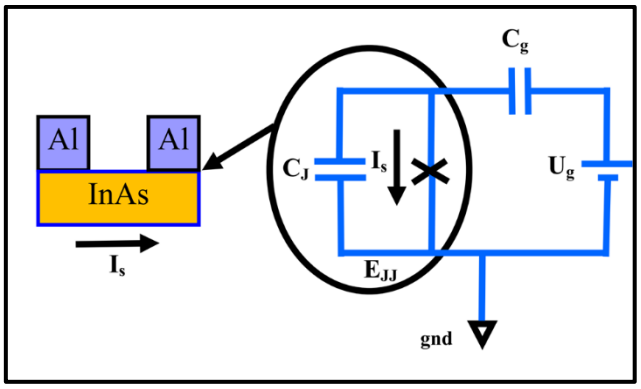
[1]Josephson junctions

[2] Superconducting qubit

مهم در فیزیک ماده چگال است. از این موارد می‌توان به بکارگیری ABS[3] در ادوات با انتقال بالا [۵و۶] و توپولوژی قابل تنظیم فاز در شکل‌های چند ترمینالی اشاره کرد [۹-۷]. اتصالات جوزفسونی که شامل جزایر ابررسانای مزوسکوپی[۴] می‌شود، یکی از متنوع‌ترین بسترهای مهندسی حالت کوانتومی و اجرای کیوبیت حالت جامد هستند [۱۲-۱۰]. فیزیک حاکم بر این نوع اتصالات به وسیله ترکیب بین دو کمیت انرژی شارژ E_C مربوط به جزیره‌ها و جفت‌شدگی جوزفسون E_J در میان اتصال جوزفسون است [۱۳]. جزایر ابررسانایی جفت شده جوزفسون به وسیله دینامیک مربوط مایورانا[۵] (در صورت وجود) در اتصالات، مورد مطالعه قرار گرفته است [۱۴]. پتانسیل جوزفسون به صورت کاملاً میکروسکوپی از هامیلتونی بوگولیوبوف-دوژن[۶] مربوط به مدل اتصال با توجه به فرمیون‌ها با انرژی پایین در نظر گرفته شده است [۱۴]. الکترودینامیک کوانتومی (QED)[7] مطالعه اندرکنش مدارهای ابررسانای غیرخطی است که به عنوان اتم‌های مصنوعی یا کیوبیت‌ها برای پردازش اطلاعات کوانتومی با میدان‌های الکترومغناطیسی کوانتیزه شده در حوزه فرکانس مایکروویو عمل می‌کنند. مدار QED با استفاده از QED کاواکی [۱۵]، زمینه تحقیقاتی که از فیزیک اتمی و اپتیک کوانتومی سرچشمه می‌گیرد، به پیشرفت‌هایی در مطالعه بنیادی اندرکنش نور-ماده، در توسعه اطلاعات کوانتومی، فناوری پردازش [۱۶] به کاوش در سیستم‌های کوانتومیِ ترکیبیِ جدید [۱۷] منجر شده است. در این پژوهش به صورت نظری و کاملاً میکروسکوپی امکان مهندسی کیوبیت‌ها با استفاده از تغییرات پتانسیل شیمیایی در اتصال جوزفسون نشان داده شده است.

مدل و فرمالیسم

در شکل ۱ مدار یک کیوبیت ابررسانا نمایش داده شده است که در آن اتصال جوزفسون دارای ساختار Al/InAs (2DEG)/Al است.



شکل ۱- بلوک دیاگرام مربوط به کیوبیت ابررسانای ساده.

هامیلتونی کاملاً میکروسکوپی مربوط به جفت‌شدگی جزایر ابررسانایی به صورت زیر است [۱۴]

$$H = 4E_C\left(\hat{N} - n_g\right)^2 + \frac{1}{2}\hat{c}^{\dagger}H_{BdG}\left(\hat{\varphi}\right)\hat{c} \qquad (۱)$$

در اینجا $\hat{N}$ با عملگر تعداد جفت‌های کوپر مرتبط است و $\hat{\varphi}$ اختلاف فاز در جزیره ابررسانا است. همانطور که در شکل ۱ دیده می‌شود انرژی شارژ، $E_C = e^2/C_\Sigma$، که بر حسب خازن کل $C_\Sigma = C_J + C_g$ تعریف شده است (C_J و C_g به ترتیب خازن‌های شانت شونده[۸] و گیت تعریف می‌شوند). انرژی شارژ نتیجه‌ای از ترکیب انرژی‌های شارژ درون مدار جزیره ابررسانا است [۱۸و۱۹]. در معادله بالا $\frac{1}{2}\hat{c}^{\dagger}H_{BdG}\left(\hat{\varphi}\right)\hat{c}$ هامیلتونی BdG مربوط به اتصالات جوزفسون در ساختار هیبریدی ابررسانا/نیم‌رسانای Al/InAs /Al است [۲۰] برای یک اتصال جوزفسون که از طول همدوسی ابررسانا کوچکتر است، یک رابطه بین انرژی $E_i\left(\varphi\right)$ مربوط به یک حالت باندی آندریف و اختلاف فاز بین دو طرف ابررسانا در اتصال جوزفسون وجود دارد که صورت زیر است [۲۱].

$$E_i\left(\varphi\right) = \pm\Delta^*\sqrt{1-\tau_i\left[\sin\left(\varphi/2\right)\right]^2} \qquad (۲)$$

که در آن τ_i احتمال انتقال است. طیف، نسبت به φ تناوبی است و زمانی انرژی صفر می‌شود که $\tau_i \to 1$ و $\varphi = \pi$ باشد. هر ABS پر شده یک ابرجریان دارد که به صورت زیر بدست می‌آید.

[3] Andreev bound state
[4] Mesoscopic superconducting islands
[5] Majorana
[6] Bogoliubov–de Gennes
[7] Quantum electrodynamics
[8] Shunting capacitance

$$I_i(\varphi) = -\frac{e}{\hbar}\frac{\partial E_i(\varphi)}{\partial \varphi} = \frac{e}{2\hbar}\frac{\Delta^* \tau_i \sin(\varphi)}{\sqrt{1-\tau_i\left[\sin\left(\varphi/2\right)\right]^2}} \qquad (۳)$$

مجموع توزیع جریان تمامی ABS ها منجر به رابطه جریان-فاز CPR[9] اتصال می‌شود، به طوری که یک اتصال با مُدهای بسیار انتقال دهنده، توسط یک CPR با رفتار سینوسیِ مایلِ رو به جلو مشخص می‌شود. [۴]. انرژی مربوط به ابرجریان از طریق اتصال جوزفسون را می‌توان به صورت کلاسیکی زیر نوشت: (توجه شود که $\tau_i \ll 1$ است و در مخرج و رادیکال معادله ۳ فقط یک باقی می‌ماند)

$$\begin{aligned} H_{JJ} &= \int U\, I_i(\varphi)dt \\ &= \int\left(\frac{\hbar}{2e}\frac{\partial\varphi}{\partial t}\right)\left(\frac{e}{2\hbar}\Delta^*\tau_i \sin(\varphi)\right)dt \\ &= -\frac{1}{4}\Delta^*\tau_i \cos(\varphi) = E_{JJ}\cos(\varphi) \end{aligned} \qquad (۴)$$

که در آن $E_{JJ} = -\frac{1}{4}\Delta^*\tau_i$ است. و همچنین $U = \frac{\hbar}{2e}\frac{\partial\varphi}{\partial t}$ انرژی ابرجریان است.

برای دست‌یابی به هامیلتونی کوانتومی مدار کیوبیت ابررسانا، رفتار کوانتومی را اعمال می‌کنیم به صورتی که متغیرهای مد نظر را به صورت عملگری در نظر می‌گیریم.

$$\varphi(\ phase\ \ variable\ ) \rightarrow \hat{\varphi}(operator\ )$$

با در نظر گرفتن تقریب بار می‌توان نوشت

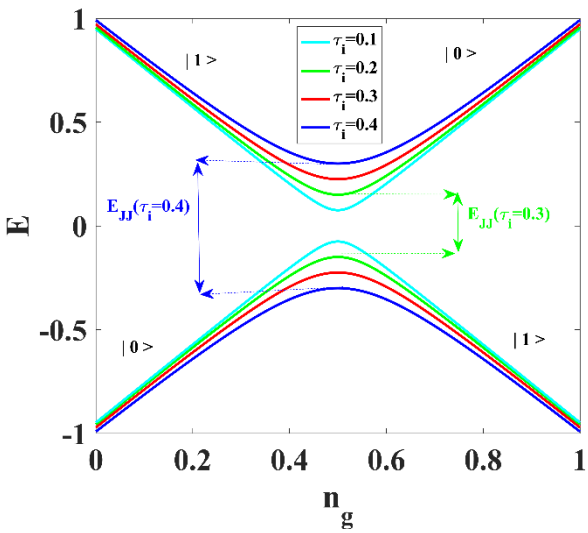
$$E_C \gg E_{JJ}, n_g \in (0,1) \qquad (۵)$$

با در نظر گرفتن تقریب شارژ، حلت‌های بار به دو حلت $|0\rangle$ و $|1\rangle$ تبدیل می‌شود. برای کیوبیت شارژ، ماتریس هامیلتونی (۱) به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$H = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2}(1-2n_g)E_C & -\frac{1}{2}E_{JJ} \\ -\frac{1}{2}E_{JJ} & \frac{1}{2}(1-2n_g)E_C \end{pmatrix} \qquad (۶)$$

ویژه مقدار انرژی مربوط به کیوبیت بار به عنوان تابعی از n_g به صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$E_{01} = \pm\frac{1}{2}\sqrt{E_C^2 + E_{JJ}^2 - 4E_C^2 n_g + 4E_C^2 n_g^2} \qquad (۷)$$



شکل ۲- طیف انرژی مربوط به کیوبیت شارژ که تابعی از n_g است.

همان طور که در شکل ۲ مشاهده می‌شود طیف انرژی کیوبیت با تغییرات احتمال انتقال در اتصال جوزفسون $\tau_i = \{0.1, 0.2, 0.3, 0.4\}$، تغییر می‌کند. در واقع در این نوع ساختارها مانند Al/InAs (2DEG)/Al تغییر پتانسیل شیمیایی باعث می‌شود τ_i قابل کنترل باشد در نتیجه می‌توان با تنظیم پتانسیل شیمیایی حالت‌های تشدیدی کیوبیت را کنترل کرد.

نتیجه‌گیری

در این پژوهش تغییرات احتمال انتقال را در کیوبیت ابررسانا را مورد مطالعه قرار دادیم. در یک روند کاملاً میکروسکوپیکی مدلی ارائه شد که تغییرات پتانسیل شیمیایی، یا به عبارتی تغییرات احتمال انتقال در ساختارهای هیبریدی جوزفسونی مانند Al/InAs(2DEG)/Al را بررسی می‌کند. در این بررسی نشان داده شد که تغییرات در احتمال انتقال که ناشی از تغییرات پتانسیل شیمیایی می‌تواند باشد، منجر به تغییرات در کیوبیت‌های ابررسانا می‌شود.

مرجع‌ها

[1] Larsen, Thorvald Wadum, Karl David Petersson, Ferdinand Kuemmeth, Thomas Sand Jespersen, Peter Krogstrup, Jesper Nygård, and Charles M. Marcus. "*Semiconductor-nanowire-based superconducting qubit*." *Physical review letters*, 115, no. 12 (2015): 127001.

[9] Current-phase relation

[2] Casparis, Lucas, Malcolm R. Connolly, Morten Kjaergaard, Natalie J. Pearson, Anders Kringhøj, Thorvald W. Larsen, Ferdinand Kuemmeth et al. "*Superconducting gatemon qubit based on a proximitized two-dimensional electron gas.*"*Nature nanotechnology*, 13, no. 10 (2018): 915-919.
[3] Wang, Joel I-Jan, Daniel Rodan-Legrain, Landry Bretheau, Daniel L. Campbell, Bharath Kannan, David Kim, Morten Kjaergaard et al. "*Coherent control of a hybrid superconducting circuit made with graphene-based van der Waals heterostructures*.", *Nature nanotechnology*, 14, no. 2 (2019): 120-125.
[4] Nichele, F., E. Portolés, A. Fornieri, A. M. Whiticar, A. C. C. Drachmann, S. Gronin, T. Wang et al. "*Relating Andreev bound states and supercurrents in hybrid Josephson junctions*." *Physical Review Letters*, 124, no. 22 (2020): 226801.
[5] Zazunov, A., V. S. Shumeiko, E. N. Bratus, J. Lantz, and G. Wendin. "*Andreev level qubit*." *Physical review letters*, 90, no. 8 (2003): 087003.
[6] Janvier, C., Leandro Tosi, L. Bretheau, Ç. Ö. Girit, M. Stern, P. Bertet, P. Joyez et al. "*Coherent manipulation of Andreev states in superconducting atomic contacts*." Science, 349, no. 6253 (2015): 1199-1202.
[7] Van Heck, B., S. Mi, and A. R. Akhmerov. "*Single fermion manipulation via superconducting phase differences in multiterminal Josephson junctions*." *Physical Review B* 90, no. 15 (2014): 155450.
[8] Riwar, Roman-Pascal, Manuel Houzet, Julia S. Meyer, and Yuli V. Nazarov. "*Multi-terminal Josephson junctions as topological matter*." *Nature communications*, 7, no. 1 (2016): 1-5.
[9] Pankratova, Natalia, Hanho Lee, Roman Kuzmin, Kaushini Wickramasinghe, William Mayer, Joseph Yuan, Maxim G. Vavilov, Javad Shabani, and Vladimir E. Manucharyan. "*Multiterminal josephson effect*." *Physical Review X*, 10, no. 3 (2020): 031051.
[10] Blais, Alexandre, Ren-Shou Huang, Andreas Wallraff, Steven M. Girvin, and R. Jun Schoelkopf. "*Cavity quantum electrodynamics for superconducting electrical circuits: An architecture for quantum computation*." *Physical Review A*, 69, no. 6 (2004): 062320.
[11] Devoret, Michel H., and Robert J. Schoelkopf. "*Superconducting circuits for quantum information: an outlook*." *Science*, 339, no. 6124 (2013): 1169-1174.
[12] Wendin, Göran. "*Quantum information processing with superconducting circuits: a review." Reports on Progress in Physics*, 80, no. 10 (2017): 106001.
[13] Bouchiat, Vincent, D. Vion, Ph Joyez, D. Esteve, and M. H. Devoret. "*Quantum coherence with a single Cooper pair*." *Physica Scripta*, 1998, no. T76 (1998): 165.
[14] Ávila, J., E. Prada, P. San-Jose, and R. Aguado. "*Superconducting islands with topological Josephson junctions based on semiconductor nanowires*." *Physical Review B*, 102, no. 9 (2020): 094518.
[15] Haroche, S., and J.-M. Raimond, 2006, *Exploring the Quantum: Atoms, Cavities, and Photons* (*Oxford University Press*, New York, USA).
[16] Blais, Alexandre, Steven M. Girvin, and William D. Oliver. "*Quantum information processing and quantum optics with circuit quantum electrodynamics*." *Nature Physics*, 16, no. 3 (2020): 247-256.
[17] Clerk, A. A., K. W. Lehnert, P. Bertet, J. R. Petta, and Y. Nakamura. "*Hybrid quantum systems with circuit quantum electrodynamics*." *Nature Physics*, 16, no. 3 (2020): 257-267.
[18] Van der Wiel, Wilfred G., Silvano De Franceschi, Jeroen M. Elzerman, Toshimasa Fujisawa, Seigo Tarucha, and Leo P. Kouwenhoven. "*Electron transport through double quantum dots*." *Reviews of modern physics*, 75, no. 1 (2002): 1.
[19] Li, Tommy, William A. Coish, Michael Hell, Karsten Flensberg, and Martin Leijnse. "*Four-Majorana qubit with charge readout: Dynamics and decoherence*." *Physical Review B*, 98, no. 20 (2018): 205403.
[20] Shabani, Javad, Morten Kjærgaard, Henri J. Suominen, Younghyun Kim, Fabrizio Nichele, Kiryl Pakrouski, T. Stankevic et al. "*Two-dimensional epitaxial superconductor-semiconductor heterostructures: A platform for topological superconducting networks.*" *Physical Review B*, 93, no. 15 (2016): 155402.
[21] Beenakker, C. W. J., and H. Van Houten. "*Josephson current through a superconducting quantum point contact shorter than the coherence length*." *Physical Review Letters*, 66, no. 23 (1991): 3056.

با عرض سلام و ارادت خدمت داوران گرامی

در بخش نظرات داوران ذکر شده بود که این مقاله حالت خاصی از مقاله مرجع [۱۲و۱٤] است.

اما نویسندگان با نظر داور موافق نیستند. در واقع، **روشی** که در این مقاله به کار رفته **همان روش مقالات [۱۲و۱٤] است**. آیا هر بار که از یک روش موجود استفاده میشود، موضع تبدیل به یک حالت خاص از یک حالت کلی تر است؟ آیا هر مقاله و نتیجه جدید، باید روشی جدید را ابداع کند؟ آیا نتیجه بدیع یعنی روش بدیع؟ مسلما که اینطور نیست.

از نظر نویسندگان این مقاله حالت جدیدی را بررسی می کند که تاکنون در مقالات ارائه نشده است و کاملا جدید است. در مرجع [۱۲و ۱٤] به مورد سه فرمیون پرداخته شده است که تابع موجی متفاوت و چندجمله ای جک کاملا متفاوتی دارد. همچنین بعد از نوشتن این مقاله و تحلیل نمودارها به این نتیجه رسیدیم که هیچ شباهتی بین نتایج این مقاله با دو مورد مذکور وجود ندارد و به همین علت آن را برای ارائه در کنفرانس ابر رسانایی که زیر شاخه ای هم در مورد بوزون ها دارد آماده کردیم.

درخواست بازنگری تصمیم داور محترم را داریم.

با تشکر از حسن توجه داوران

برهم کنش سه تایی سه بوزون در حالت چگالش بوز-اینشتین

رحمتی، حمیده و لطیفی، انوشه

گروه فیزیک، دانشکده مکانیک، دانشگاه صنعتی قم

چکیده

در این مقاله سیستمی با سه ذرّه بوزونی یکسان و در شرایط چگالش بوز-اینشتین را در نظر گرفته ایم که روی حلقه اپتیکی قرار دارند. نشان داده شده است که برهم کنش غالب این سیستم از نوع کالوجرو-ساترلند است. در اینجا هامیلتونی حاصل از سه ذره بوزونی را مطرح کرده ایم که برهم کنش دوتایی و سه تایی با هم دارند. پاسخ تابع موج این سیستم را با استفاده از چندجمله ای های جک نوشته ایم که با جاگذاری در هامیلتونی سیستم مقدار انرژی آن هم بدست می آید. همچنین در حالت برهم کنش سه تایی کامل بوزون ها، چگالی احتمال را برابر صفر قرار داده ایم تا پیکربندی های ممنوع سیستم و پایداری ذرات را ارزیابی کنیم.

کلید واژه ها : مساله سه جسم، هامیلتونی کالوجرو-ساترلند، سیستم بوزونی، پیکربندی ممنوع .

Triplet interaction of 3 bosons in the case of BEC

Rahmati, H. and Latifi, A.

Department of Mechanics, Faculty of Science
Qom University of Technology, Qom, Iran

Abstract

In this article, three identical bosonic particles have been considered which are in the case of BEC and are on an optical ring. It has been demonstrated that the dominant interaction in this case is the Calogero-Sutherland type. Here, we have posed the Hamiltonian of three bosons which have two-body and three-body interactions with each other. Then, using the Jack polynomials, we have written the wave function of this system and by replacing the wave function in the Hamiltonian the spectrum of the energy is obtained. Also, in the case of the full interaction of 3 bosons the null probability density equation is explicitly solved, and in this case, all of forbidden configurations are found and the stability of the system is discussed too

key words : Three-body problem, Calogero-Sutherland Hamiltonian, Bosonic system, Forbidden configuration.

مقدمه

مدل کالوجرو–ساترلند (C-S) مسالهٔ بس ذرّه ای کوانتومی و حل پذیری است که با مسائل فیزیکی مختلف مانند اثر هال کوانتومی [۱]، یانگ –میلز ٤ بعدی [۲]، انتشارگر امواج سالیتونی [۳] ، سیاه چاله ها [٤] و برهم کنش بوزون ها در حالت چگالش بوز–اینشتین (BEC) [٥] ارتباط دارد. در سیستم های بس ذره ای و بوزونی داشتن اطلاعات از ویژه تابع اهمیت زیادی دارد زیرا نه تنها ساختار کامل طیف سیستم را مشخص می کند [۷و٦]، بلکه همان طور که نشان خواهیم داد در یک سیستم کوانتومی بوزونی و سه جسمی می توان مشخص کرد همبستگی ذرات سیستم به یکدیگر چگونه است و چه برهم کنشی دارند.

در این جا می خواهیم با شروع از سه ذره بوزونی یکسان که روی حلقه ای اپتیکی قرار دارند ویژه مقدار انرژی سیستم و تمامی پیکربندی های ممنوع آن را در حالت برهم کنش کامل سه ذره، یعنی برهم کنش هم زمان دوتایی و سه تایی تعیین کنیم. همچنین میزان پایداری این سیستم را نیز مشخص خواهیم کرد.

معرفی پتانسیل کالوجرو–ساترلند

در سیستمی که در حالت چگالش بوز–اینشتین (BEC) قرار دارند ذرات در پایین ترین حالت انرژی خود قرار دارند و بررسی سیستم در دماهای بسیار پایین انجام می شود. نشان داده شده است که برهم کنش غالب در این سیستم از نوع کالوجرو–ساترلند و عکس مجذور فاصله است [٥]. اولین کارهایی که در زمینه سیستم بس ذره ای انجام شد مربوط به در نظر گرفتن ذرات روی خط و با برهم کنش دوتایی عکس مجذور فاصله بود[۸]. با استفاده از رابطه زیر

$$V(r) = \frac{\hbar^2 a^2}{m} g \sum_{-\infty}^{\infty} (1+nL)^{-2} = \frac{\hbar^2 a^2}{m} \frac{g\pi^2}{L^2} \left[sin \frac{\pi r}{L} \right]^{-2} \qquad (۱)$$

این موضوع به سیستمی با N ذره روی حلقه ای به محیط L تعمیم داده شد که البته در حد ترمودینامیکی برقرار است. حالت خاصی از سه ذره روی خط و با معرفی مختصات قطبی در [۹و۱۰] در نظر گرفته شد. برهم کنش سه تایی و مثلثاتی سه ذره نیز در [۱۱] در نظر گرفته شده است که پاسخ آن از چندجمله ای های جک بدست می اید . ثابت کردیم حد ترمودینامیکی که برای N ذره بکار می رود برای سه ذره نیز درست است و در واقع دو پتانسیل عکس مجذور فاصله و مثلثاتی یکی هستند [۱۲] و قابل تبدیل به یکدیگرند.

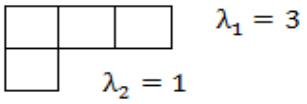
موضوع دیگر برهمکنش سه تایی بوزون ها در این سیستم است. از آن جایی که در مرجع [۸] برهم کنش دوتایی ذرات مد نظر است برای تبدیل برهم کنش دوتایی سه ذره به این شکل عمل می کنیم که برهمکنش مرکز جرم دو تا از ذرات را با ذره سوم در نظر می گیریم که در این صورت به شکل برهم کنش دوتایی قابل بررسی خواهد بود.

چندجمله ای های جک و پارتیشن

پارتیشن $\boldsymbol{\lambda}$ دنباله ای صعودی از اعداد صحیح و مثبت است:

$$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_N \quad ,1 \leq i \leq N \qquad (۲)$$

پارتیشن $\boldsymbol{\lambda}$ با جدول های یانگ نمایش داده می شوند و متناظر با یک چندجمله ای با تمام جایگشت های کامل هستند. به طور مثال در سیستمی با سه ذره و پارتیشن $\lambda = (3,1,0)$:



شکل۱. پارتیشن مربوط به $\lambda = (3,1,0)$

و چندجمله ای آن به این شکل در می آید:

$$m_\lambda(x,y,z) = x^3y^1z^0 + y^3x^1z^0 + x^3z^1y^0 + y^3z^1x^0 + z^3y^1x^0 + z^3x^1y^0 \quad (۳)$$

و در نتیجه چندجمله ای های جک به صورت زیر تعریف می شوند [۱۳]:

$$J(z)^\alpha_\lambda = \sum_{\mu\le\lambda} v_{\lambda\mu} m_\mu(z) \quad (٤)$$

که α ضریب برهم کنش ذرات و $v_{\lambda\mu}$ ضریب بهنجارش است. این چندجمله ای پاسخ عملگر دیفرانسیلی لاپلاس-بلترامی است:

$$H_{LB} = 6\frac{\hbar^2a^2}{m}\left[\sum_{j=1}^{N}\left(z_j\frac{\partial}{\partial z_j}\right)^2 + \frac{1}{\alpha}\sum_{1\le j\le k}^{N}\frac{z_j+z_j}{z_j-z_j}\left(z_j\frac{\partial}{\partial z_j} - z_j\frac{\partial}{\partial z_j}\right)\right] \quad (۵)$$

نمایش پارتیشن ها در فضای فوک هم انجام می شود به این صورت که هر پارتیشن تعداد اعداد اشغال را نشان می دهد. به طور مثال برای پارتیشن $\lambda = (3,1,0)$ عدد صفر و یک و سه هر کدام یک بار ظاهر می شوند:

شکل۲.نمایش فوک پارتیشن $\lambda = (3,1,0)$

بنابراین از روی پارتیشن و چیدمان ذرات در نمایش فوک، بوزون یا فرمیون بودن آن ها قابل تشخیص است.

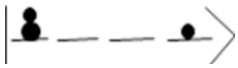
هامیلتونی سه بوزون با برهم کنش کامل مثلثاتی

سه ذرهٔ بوزونی داریم که بر روی حلقه ای به محیط L حرکت می کنند و دارای دو نوع برهمکنش دو و سه جسمی (C-S) با یکدیگر هستند:

$$H^{full} = \frac{-\hbar^2}{2m}\sum_{i=1}^{3}\partial_{x_i}^2 + \frac{\hbar^2}{m}a^2g_v\sum_{i<j}^{3}\frac{1}{sin^2(a(x_i-x_j))} + \frac{\hbar^2}{m}a^2g_\mu\sum_{\substack{i<j\\ i,j\neq k}}^{3}\frac{1}{sin^2(a(x_i+x_j-2x_k))}. \quad (٦)$$

که $g_v = v(v-1)$ و $g_\mu = \mu(\mu-1)$ ثابت های جفت شدگی متناظر با بر همکنش های دو و سه جسمی هستند که $0 < v < 1$ و $0 < \mu < 1$ است. ثابت پلانک $\hbar$ است و $a = \frac{\pi}{L}$ ثابتی از جنس عکس طول. فاصله زاویه ای هر دو ذره $a(x_i - x_j)$ است و $a(x_i + x_j - 2x_k)$ فاصله زاویه ای یکی از ذرات و مرکز جرم دوتای دیگر را نشان می دهد. به ازای $v = 0$ یا 1 برهم کنش دوتایی حذف می شود و هامیلتونی(٦) به مدل [۱۱] تبدیل می شود؛ به ازای $\mu = 0$ یا 1 برهم کنش عکس مجذوری دوتایی را داریم [۸]. در حالتی که ضرایب برهم کنش در بازه $0 < v < 1$ و $0 < \mu < 1$ باشند سیستمی پایدار با برهم کنش جاذبه و خارج از این فاصله ها برهم کنش دافعه و ناپایداری سیستم را داریم.

مشابه روش مرجع [١٤] با انجام یک تبدیل پیمانه ای و استفاده از متغیر $z_j = \exp[2ia(R - x_{kl})]$ به عملگر لاپلاس-بلترامی این هامیلتونی می رسیم (در این جا $R = \frac{1}{3}(x_1 + x_2 + x_3)$ مرکز جرم است)؛ با توجه به داشتن سه ذره بوزونی پارتیشن مناسب این سیستم $\lambda = (3,0,0)$ است که نمایش فوک زیر را دارد:



شکل۳: پارتیشن مجاز سه بوزون

در نتیجه تابع موج نسبی این سیستم عبارتست از:

$$\psi_{rel}(z_j) = J_{[3,0,0]}^{(\mu+v)^{-1}}(z_1,z_2,z_3)(z_1z_2z_3)^{q-2(\mu+v)} \times \prod_{\substack{j,k=1\\ j\neq k}}^{3}(z_j - z_k)^{(\mu+v)} \quad (۷)$$

که $J_a^b(z)$ چندجمله ای های جک هستند و q عددی مثبت است که جاگیری ذرات را روی قسمت های مختلف دایره مثلثاتی نشان می دهد [۱۵]. با جاگذاری (۷) در (٦) انرژی سیستم عبارتست از:

$$E_\lambda^{rel} = 2a^2[2v^2 + 3\mu v] \quad (۸)$$

حالت های ممنوع سه بوزون با برهم کنش سه تایی کامل

با استفاده از چگالی احتمال ذرات می توان به دو موضوع پی برد؛ اول این که از صفر قرار دادن آن حالت های ممنوع سیستم درمی آید و دوم این که احتمال حضور و وابستگی ذرات به هم مشخص می شود. بنابراین با جاگذاری متغیرهای x_i در تابع موج (۷) چگالی احتمال عبارتست از:

$$|\psi_{rel}|^2 = 4^{1+\mu+\nu}\begin{bmatrix}3+2\cos 6a(x_{21}+x_{31})+2\cos 6a(x_{32}+x_{12})+\\ 2\cos 6a(x_{13}+x_{23})\end{bmatrix}\times\begin{bmatrix}\sin 2a(x_{21}+x_{31})+\sin 2a(x_{32}+x_{12})+\\ \sin 2a(x_{13}+x_{23})\end{bmatrix}^{2(\mu+\nu)} \quad (۹)$$

مشاهده می شود μوν همواره با هم ظاهر می شوند؛ یعنی نمی توان سهم دقیق برهم کنش دوتایی و سه تایی را تشخیص داد! این نکته در رابطه با انرژی سیستم (۸) نیز خودنمایی می کند.

چگالی احتمال برابر حاصلضرب دو جمله است اکنون با صفر قرار دادن آن برای هر جمله پاسخ هایی داریم. در بخش سینوسی با استفاده از روابط مثلثاتی کمیت های سینوس و کسینوس نهایتا برای صفر شدن این بخش داریم:

$$a(x_{31}+x_{32})=0 \text{ یا } \pi \quad a(x_{21}+x_{23})=0 \text{ یا } \pi \quad (۱۰)$$

$$a(x_{21}+x_{31})=0 \text{ یا } \pi$$

اگر بخش کسینوسی را کمی ساده کنیم و برابر صفر قرار دهیم:

$$4\cos 3a(x_{31}+x_{21})\cos 9ax_{32}+4\cos^2 3a(x_{31}+x_{21})+1=0 \quad (۱۱)$$

در این رابطه برای متغیر $\cos 3a(x_{31}+x_{21})$ معادله ای درجه دو داریم که به دلیل داشتن دلتای منفی، هیچ گاه صفر نمی شود و همواره مثبت است. از طرفی قسمت سینوسی این عبارت به ازای سه زاویه 2π وπو0 برابر صفر می شود. بنابراین کل عبارت تنها به ازای این سه مقدار نتیجه صفر دارد .

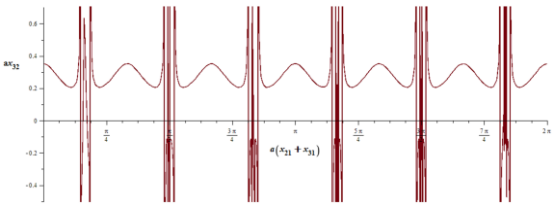
از سوی دیگر در بخش کسینوسی با استفاده از رابطه جمع دو کسینوس برای جملات دوم و سوم داریم:

$$2\cos 6a(x_{21}+x_{31})+4\cos 3a(x_{21}+x_{31})\cos 9ax_{32}=-3 \quad (۱۲)$$

که نتیجه می دهد:

$$a(x_{32})=\frac{1}{9}\cos^{-1}\left(\frac{-3-2\cos 6a(x_{21}+x_{31})}{4\cos 3a(x_{21}+x_{31})}\right) \quad (۱۳)$$

با توجه به شکل ٤ در محدوده مقادیر تقریبی $\frac{7\pi}{4}$ و $\frac{3\pi}{2}$ و $\frac{5\pi}{4}$ و $\frac{3\pi}{4}$ و $\frac{\pi}{2}$ و $\frac{\pi}{4}$ برای $a(x_{21}+x_{31})$ بیشترین وابستگی به مکان نسبی دو ذره دوم و سوم یعنی $a(x_{32})$ مشاهده می شود و در سایر نقاط وابستگی بسیار کم تری داریم:



شکل ٤.پاسخ معادله (۱۳) که نشان می دهد وابستگی ذرات سیستم به یکدیگردر تمام مناطق وجود دارد ولی در برخی نقاط این وابستگی بیشتر می شود.

نتیجه گیری و بحث

مسائل بس ذره ای جایگاه ویژه ای در فیزیک دارند. پتانسیل (C-S) که در یک سیستم بس ذره ای بوزونی اعمال می شود قابلیت کاربرد در سیستمی با سه بوزون را بر روی حلقه دارد. بنابراین در این حالت با در نظر گرفتن برهم کنش دوتایی و سه تایی سه بوزون هامیلتونی این سیستم را نوشتیم و ویژه توابع آن را با چندجمله ای های جک نوشتیم. سپس با جاگذاری تابع موج ویژه مقدار انرژی این سیستم را هم بدست آوردیم.

با استفاده از محاسبه تابع چگالی احتمال پی بردیم در سیستمی متشکل از سه ذره بوزونی یکسان روی حلقه با برهم کنش (C-S)

پیکربندی های ممنوعی از ذرات نیز وجود دارد که در سه مقدار 2π و π و 0 است؛ همچنین با توجه به پیوستگی نمودار در تمام نقاط نتیجه می گیریم که مکان نسبی ذرات در این سیستم به هم وابسته اند و ذرات آزاد نیستند.

نکته قابل توجه این است که از روی ویژه تابع انرژی و ویژه مقدار این سیستم نمی توان به دقت مشخص کرد که چه سهمی از برهم کنش دوتایی یا سه تایی ذرات حضور دارد.

مراجع

[1] B.A. Bernevig, F.D.M. Haldane, Properties of non-Abelian fractional quantum Hall states at filling $= \frac{k}{r}$, *Phys. Rev. Lett. 101 (2008).*
[2] N.A. Nekrasov, Seiberg-Witten prepotential from instanton counting, *Adv. Theor. Math. Phys. 7, 831-864 (2003).*
[3] H. H. Chen *et al.*, Algebraic internal wave solitons and the integrable Calogero-Moser-Sutherland N-body problem, *Phys. Fluids* ***22****, 187 (1979).*
[4] G. Gibbons, P. Townsend, Black holes and Calogero models, *Physics Letters B 454, 187–192. (1999).*
[5] Y. Yu, Z. Luo and Z. Wang , Effects of dipole–dipole interaction between cigar-shaped BECs of cold alkali atoms: towards inverse-squared interactions, J. Phys.: Condens. Matter 26 (2014).
[6] K. Sogo, A simple derivation of multivariable hermite and legendre polynomials, *J. Physical Society of Japan 65, 3097–3099 (1996).*
[7] K. Vacek, A. Okiji, N. Kawakami, Eigenfunctions for SU(nu) particles with 1/r2interaction in harmonic confinement, *J. Physics A. Math and General, 27,7, L201–L206 (1994).*
[8] B.Sutherland, Exact results for a quantum many-body problem in one dimension. *Phys. Rev. A 4, 2019–2021 (1971).*
[9] F. Calogero,C. Marchioro, Exact solution of a one-dimensional three body scattering problem with two-body and/or three-body inverse-square potentials, *J. Math. Phys. 15, 1425–1430 (1974).*
[10] J. Wolfes, On the three-body linear problem with three-body interaction, *Journal of Mathematical Physics 15, 1420–1424 (1974).*
[11] C. Quesne, Exactly solvable three-particle problem with three-body interaction, *Phys. Rev. A 55, 3931–3934 (1997).*
[12] A. Latifi, H. Rahmati, Select the appropriate model in the quantum three-body problem: pairwise or full three body interactions. Case study of Calogero-Sutherland Hamiltonian, The paper was submitted to FOOD journal.
[13] F. Lesage, V. Pasquier, D. Serban, Dynamical correlation functions in the Calogero-Sutherland model, Nucl. Phys. B 435, 585-603 (1995).
[14] H. Rahmati, A. Latifi,. Exact energy of the two and three-body interactions in the trigonometric three-body problem via jack polynomials, *J. Few-Body Systems 60.(2019).*
[15] R. P. Stanley, Some combinatorial properties of Jack symmetric functions, Adv. Math. 77, 76-115 (1989).

بررسی خواص مغناطیسی ابررسانای $YBa_2Cu_{3-x}Bi_xO_{7-\delta}$

رضایی‌مطهر، نجمه؛ شاکری‌پور، حمیده

دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان ۸۳۱۱۱-۸۴۱۵۶

پست الکترونیکی: hshakeri@iut.ac.ir

چکیده

در این تحقیق، نمونه‌های ابررسانای ایبکو آلایش شده با عنصر بیسموت در جایگاه مس Cu با درصد ناخالصی x=۰ تا x=۰/۰۵ به روش استاندارد واکنش حالت جامد ساخته شدند. اندازه‌گیری وابستگی دمایی پذیرفتاری مغناطیسی نمونه‌ها نشان می‌دهد که با آلایش بیسموت Bi در ترکیب $YBa_2Cu_{3-x}Bi_xO_{7-\delta}$، در دمای گذار فاز ابررسانایی تغییر قابل توجهی رخ نمی‌دهد. همچنین در تصاویر میکروسکوپ الکترونی روبشی با افزایش آلایش تا حد بهینه، افزایش سایز دانه‌ها مشاهده می‌شود.

واژه های کلیدی: $YBa_2Cu_{3-x}Bi_xO_{7-\delta}$، *ابررسانای ایبکو، آلایش بیسموت،*

Investigation of Magnetic Properties of $YBa_2Cu_{3-x}Bi_xO_{7-\delta}$ Superconductors

Rezaei Motahar, Najmeh; Shakeripour, Hamideh

Department of physics, Isfahan university of technology, Isfahan 84156-83111

Abstract

In the present study, YBCO superconducting samples, with substitution of Bi for the Cu site, with the impurity content of x=0 to x=0.05, were prepared by the standard solid state reaction method. Temperature dependence of AC magnetic susceptibility measurements of samples did not change by Bi doping in $YBa_2Cu_{3-x}Bi_xO_{7-\delta}$ compound. The grain size also increases with increasing Bi in the $YBa_2Cu_{3-x}Bi_xO_{7-\delta}$ compound.

***Keywords**: $YBa_2Cu_{3-x}Bi_xO_{7-\delta}$, Bismuth doping, Magnetic susceptibility*

PACS No

مقدمه

با کشف ابررسانای $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ تلاش‌های فراوانی برای مطالعهٔ ابررسانایی، به منظور فهم مکانیزم جفت‌شدگی در این دسته از ترکیبات به وجود آمد. یکی از راه‌های بررسی، آلایش عناصر مختلف در این ترکیبات است [۱]. در این پژوهش، به دنبال جای‌نشانی در جایگاه مس در این ترکیب هستیم. با توجه به مطالعات صورت گرفته با جای‌نشانی عناصر Gd و Pr در جایگاه مس دیده شده، دمای گذار برای هر دو کاهش یافته است. اما این کاهش دما برای عنصر مغناطیسی Gd آرام تر از عنصر Pr است. مطالعه جای نشانی عناصر مغناطیسی و غیرمغناطیسی در جایگاه مس نشان می‌دهد کاهش دمای گذار برای یون غیر مغناطیسی بیشتر از کاهش دما برای یون مغناطیسی است [۲]. در تحقیقات بسیاری که در مورد اثر جایگزینی عناصر فراوانی از جمله عناصر مغناطیسی Ni, Co, Fe در ترکیب $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ در جایگاه مس منتشر شده است، تقریباً همه نتایج نشان از تضعیف ابررسانایی، به دلیل تخریب صفحات و زنجیره‌های Cu-O دارند [۳،٤]. با بررسی عناصر غیرمغناطیسی Zn و Ga در جایگاه Cu، دمای گذار کاهش می‌یابد [٥،٦]. کاهش دما برای عنصر غیر مغناطیسی Zn کاهش دمای بیشتری داشته است. به طور کلی، جاینشانی به جای عنصر کلیدی مس در ترکیب ایبکو موجب کاهش شدید دمای گذار می شود.

در این پژوهش، هدف بررسی تأثیر آلایش یون غیرمغناطیسی بیسموت در جایگاه مس بر روی خواص ابررسانای $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ می‌باشد. در این پژوهش از آزمون پذیرفتاری مغناطیسی AC استفاده شده است.

این اندازه‌گیری از دمای اتاق تا دمای K ۷۷ و میدان HZ ۳۳۳ اندازه‌گیری شده است. در این اندازه‌گیری تغییر قابل توجه‌ای در دمای گذار نمونه مشاهده نشده است. همچنین از نمونه‌ها تصاویر میکروسکوپ الکترونی روبشی گرفته شد. در این تصاویر افزایش سایز دانه‌ها تا آلایش x=۰/۰۱ مشاهده شده است.

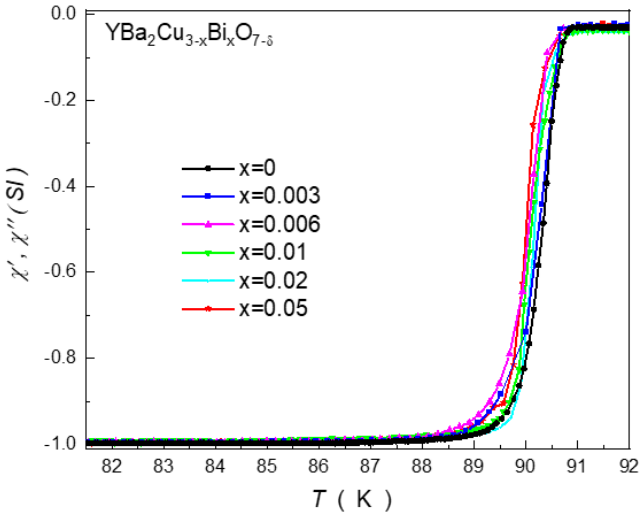
روش ساخت

برای ساخت نمونه‌ها در این پژوهش از روش استاندارد واکنش حالت جامد استفاده شد. در ابتدا پودرهای Y_2O_3, $BaCO_3$, CuO, Bi_2O_3 با استفاده از استوکیومتری مشخص با دقت mg ۰/۱ توزین شدند. سپس، همه‌ی پودرها در هاونی از جنس آلومینا قرار داده شدند و عمل سایش پودرها انجام شد. پودر حاصل، به منظور عمل تکلیس به مدت ۲٤ ساعت در دمای ۸۵۰ درجه سانتی‌گراد طی دو مرحله در کوره قرار داده شد. پودر حاصل، تحت پرس به قرص تبدیل شد و به مدت ۲٤ ساعت در مجاورت شار اکسیژن در دمای ۹۵۰ درجه سانتی‌گراد عمل کلوخه سازی آن‌ها انجام گرفت. بعد از ساخت نمونه‌ها از آن‌ها آزمون پذیرفتاری مغناطیسی و میکروسکوپ الکترونی روبشی گرفته شد.

نتایج وبحث

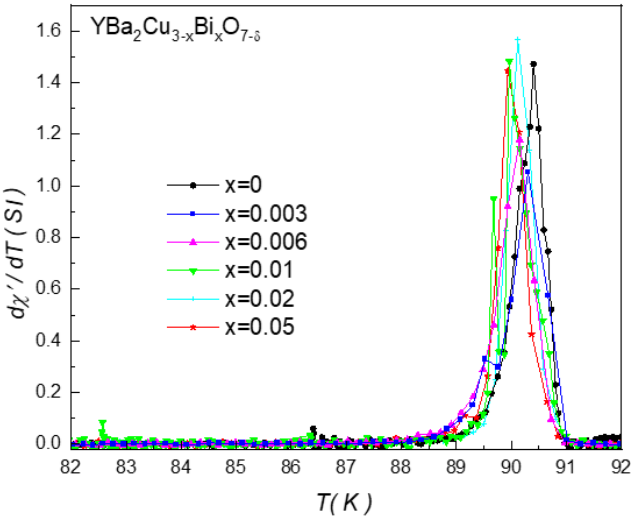
درشکل (۱)، تغییرات پذیرفتاری مغناطیسیAC نمونه‌ها بر حسب دما نشان داده شده است. مؤلفه‌ی حقیقی پذیرفتاری‌مغناطیسی، افت سریعی از حالت بهنجار افقی به حالت دیامغناطیسی ابررسانایی دارد. دمای مربوط به شروع افت را T_c می‌نامند (در اینجا T_{c_onset} نامیده شد). هر چه این گذار تیزتر باشد، نشان دهنده همگنی نمونه و اتصال قوی بین دانه‌ها و کم بودن میزان فاز ناخالصی است. در دمای پایین‌تر از دمای گذار تمام حجم نمونه توسط ابرجریان های پوششی دیامغناطیس می‌شود. در این حالت χ' به حالت اشباع رسیده و مقدار آن ۱- است [۷].

برای مشخص کردن مقدار دمای گذار ابررسانایی هر نمونه، مشتق پذیرفتاری بر حسب دما رسم شده است. شکل(۲). از روی مکان قله ها، مقادیر T_{c_peak} به دست آمد. همچنین، پهنای گذار ΔT_c تعیین و در جدول (۱) آورده شده اند (ΔT_c معمولا از اختلاف بین T_{c_onset} و T_{c_peak} یعنی $T_{c_onset} - T_{c_peak}$ به دست می‌آید و یا از روی پهنای متوسط پیک در نمودار مشتق پذیرفتاری، تعیین می شود). تشابه بین مقادیر پهنای نمودار همه نمونه ها در شکل(۲) نشان دهنده این است که ساخت همه نمونه‌ها مشابه است. نیز، فاز ناخالصی که باعث پهن شدن نمودار در دمای گذار می‌شود، مقدار ناچیزی است.



شکل ۱: نمودار پذیرفتاری مغناطیسی بر حسب دما برای ترکیب $YBa_2Cu_{3-x}Bi_xO_{7-\delta}$

با توجه به شکل(۱) با آلایش بیسموت در جایگاه مس تا آلایش x=۰/۰۵ تغییر قابل توجه‌ای در دمای گذار ابررسانایی در ترکیب $YBa_2Cu_{3-x}Bi_xO_{7-\delta}$ مشاهده نشده است. که این بر خلاف مطالعات انجام شده در این زمینه است.

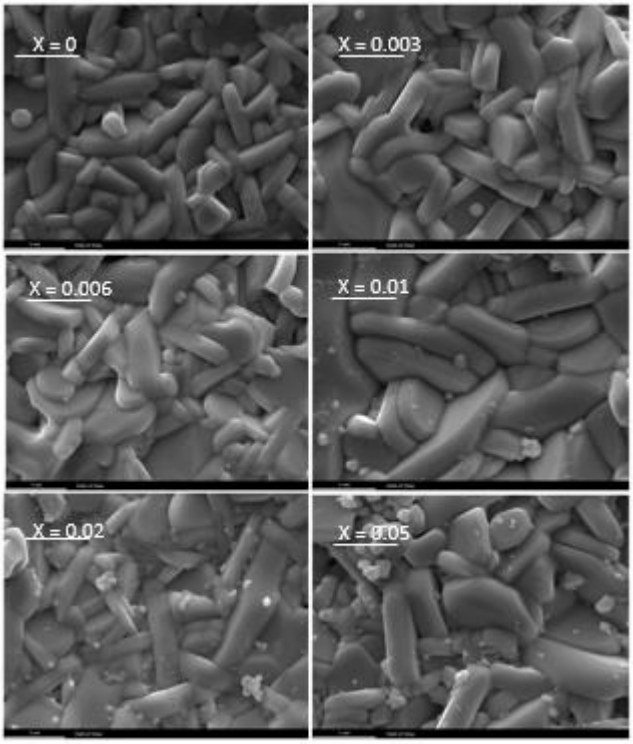


شکل ۲: نمودار مشتق پذیرفتاری مغناطیسی برحسب دما به ازای غلظت های مختلف آلایش بیسموت در ترکیب $YBa_2Cu_{3-x}Bi_xO_{7-\delta}$

جدول ۱: مقادیر T_c_onset و T_c_peak و پهنای گذار $T\Delta_c$ به ازای غلظت‌های مختلف آلایش بیسموت در ترکیب $YBa_2Cu_{3-x}Bi_xO_{7-\delta}$

$YBa_2Cu_{3-x}Bi_xO_{7-\delta}$	T_{c_onset} (K) ± 0.2	$T_{c_at\ peak}$ (K)	ΔT_c (K) T_{c_onset}-$T_{c_at\ peak}$
x=0	۹۰/۹۰	۹۰/۳۹	۰/۵۱
x=0.003	۹۱	۹۰/۲۸	۰/۷۲
x=0.006	۹۰/۷۲	۹۰/۱۵	۰/۵۷
x=0.01	۹۰/۹۹	۹۰/۱۱	۰/۸۸
x=0.02	۹۰/۸۱	۸۹/۹۶	۰/۸۵
x=0.05	۹۰/۸٤	۸۹/۹۳	۰/۹۱

در شکل (۳) تصویر میکروسکوپ الکترونی روبشی (SEM) نمونه‌های $YBa_2Cu_{3-x}Bi_xO_{7-\delta}$ نشان داده شده است. در این تصاویر، عدم ذوب شدگی و تشکیل دانه‌های ابررسانا مشاهده می‌شود که نشان دهنده‌ی مناسب بودن دمای پخت برای ساخت ترکیب می‌باشد. افزایش سایز دانه‌ها تا آلایش x=۰/۰۱ مشاهده می‌شود. این افزایش سایز می‌تواند ناشی از وارد شدن بیسموت در ترکیب باشد. بیشتر از x=۰/۰۱، دانه های بسیار ریزی در تصاویر در شکل (۳) دیده می شود که نشان از حد اشباع بیسموت در ترکیب است. به عبارتی تا مقادیر آلایش ۱۰ درصد، بیسموت قابل وارد شدن و حل شدن در ترکیب است. با این حال، دمای گذار ترکیب کاهش چندانی نشان نمی دهد (شکل (۱)). این مشاهده هم چنین در مغایرت با مشاهده کاهش دمای گذار با آلایش بیسموت در جایگاه ایتریوم در کار قبلی گروه است [۸].



شکل۳: تصویر میکروسکوپ الکترونی روبشی با بزرگنمایی ۵ میکرومتر نمونه $YBa_2Cu_{3-x}Bi_xO_{7-\delta}$

نتیجه گیری

با مطالعه ترکیب ابررسانا $YBa_2Cu_{3-x}Bi_xO_{7-\delta}$ به وسیله اندازه گیری پذیرفتاری مغناطیسی AC دیده می‌شود، در نمونه‌های آلایش شده با عنصر بیسموت، تغییر قابل توجه‌ای در دمای‌گذار نمونه‌ها با افزایش آلایش مشاهده نشده است. از تصاویر میکروسکوپ الکترونی روبشی نمونه‌ها می توان مشاهده کرد که با افزایش آلایش تا حد بهینه، افزایش سایز مشاهده می‌شود. این افزایش سایز می تواند حاکی از وارد شدن بیسموت در ترکیب باشد.

سپاسگزاری

از همکاری آقای خالید رحمانی در اندازه گیری نمونه ها سپاس گزاری می شود.

مرجع‌ها

[1] A. K. Saxena;"High-temperature superconductors"; 1st, Springer (2010) 41-46.

[2] M. H. Badr, L. M. S. El-Deen, M. El-Hofy, and A. A. Haswa, "Investigating double-regime crossover in $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ superconductors," *Crystal Structure Theory and Applications*, vol.3, no.**01**, p.30, 2014.

[3] V. Awana, S. Malik, W. Yelon, C. A. Cardoso, O. De Lima, A. Gupta, A. Sedky, and A. Narlikar, "Neutron diffraction on $Er_{1-x}Ca_xBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ (0.0 x 0.3) system: possible oxygen vacancies in CuO_2 planes," *Physica C*: Superconductivity, vol.338, no.**3**, pp.197-204, 2000.

[4] D. Hechel, L Nowik, E. Bauminger, and I. Felner, "Magnetic order and superconductivity in $YBa_2Cu_{1-y}M_yO_{7-\delta}$ (M= Fe, Co)," *Physical Review B*, vol.42, no.**4**, p.2166, 1990.

[5] H. Shimizu, T. Kiyama, and J. Arai, "Influence of Fe, Co, Ni and Zn substitution on critical temperature and structural change of gdba2cu307," *Physica C*: Superconductivity, vol.196, no.**3- 4**, pp.329-334, 1992.

[6] J. Bringley, T.-M. Chen, B. Averill, K. Wong, and S. Poon, "Synthesis and characterization of $YBa_2(Cu_{1-x}M_x);O_{7-\delta}$ (M= Co, Ni): Crystal symmetry, superconductivity, and the role of oxygen," *Physical Review B*, vol.38, no.**4**, p.2432, 1988.

[7] Malik, A. I., Celebi, S., and Halim, S. A., "Ac susceptibility study in $Bi1.6Pb0.4Sr2(Ca_{1-x}Ndx)_2Cu_3O_{7-\delta}$ ceramic superconductors", *Physica C*, Vol. 377, p.421–430,2002.

[۸] رضایی مطهر، نجمه؛ شاکری پور، حمیده؛ "بررسی‌خواص‌ابررسانای‌ایبکو آلاییده شده با بیسموت" ششمین کنفرانس رشد بلور ایران، سمنان ۱٤۰۰

ساخت و بررسی خواص مغناطیسی ابررسانای ایبکو آلاییده شده با نانولوله‌های کربنی

جولایی، مینا ؛ شاکری پو، حمیده

دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان ۸۳۱۱۱-۸۴۱۵۶

پست الکترونیکی: hshakeri@iut.ac.ir

چکیده

در این پژوهش، به بررسی رفتار مغناطیسی ابررسانای ایبکو ($YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$) آلاییده شده با مقادیر ۰/۲، ۰/۵، ۰/۹ و ۱/۳ درصدوزنی نانولوله کربن (CNT) تهیه شده به روش سل- ژل پرداخته شد. با استفاده از آنالیز پذیرفتاری مغناطیسی، مشاهده شد که دمای گذار نمونه‌های آلاییده شده تفاوت زیادی با نمونه‌ی خالص ندارند. همچنین طبق تصاویر میکروسکوپ الکترونی روبشی (SEM)، دیده می‌شود که اندازه‌ی دانه‌ها تا آلایش بهینه ۰/۵، افزایش یافته و ارتباطات بین دانه‌ای بهبود یافته است.

واژه های کلیدی: *ابررسانای ایبکو ($YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$)، نانولوله کربن (CNT)، سل- ژل.*

Synthesis and investigation of magnetic properties of YBCO superconductor doped with carbon nanotubes

Joolaei, Mina; Shakeripour, Hamideh

Department of physics, Isfahan university of technology, Isfahan 84156-83111

Abstract

In this study, the magnetic properties of the $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ superconducting samples were investigated. The samples were prepared with the Sol-gel method and doped with 0.2, 0.5, 0.9 and 1.3wt% carbon nanotubes (CNT). Using magnetic susceptibility measurements, it was found that the transition temperature of the doped samples is not much different from the pure one. Moreover, according to the scanning electron microscopic images (SEM), the size of the gains was increased by the optimum doping of the dopant, and inter-grain connections improved.

***Keywords**: YBCO superconducting ($YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$), carbon nanotubes (CNT), sol- gel.*

PACS No

مقدمه

پس از کشف ابررساناهای دمابالای کوپراتی مانند YBCO، تلاش‌های بسیاری برای دستیابی به ترکیباتی با دمای گذار بالاتر صورت گرفت. آلایش عناصر مختلف در جایگاه‌های مختلف این ترکیب، منجر به بهبود یا تخریب خواص ابررسانایی می‌شود. محققان برای شناخت بهتر مکانیزم ابررسانایی در این مواد، عناصر زیادی را در جایگاه‌های مختلف جاینشانی کرده اند.

افزایش چگالی جریان بحرانی و دمای گذار در ابررساناهای دمابالا یکی از اهداف محققین برای استفاده بیشتر این مواد در صنعت می باشد. چگالی جریان بحرانی، به نحوه‌ی ساخت و نوع ماده و اتصالات بین دانه‌ای وابستگی زیادی دارد.

درسال‌های اخیر، نانومواد مبتنی بر کربن از جمله نانولوله‌های کربنی، با توجه به ساختار استثنایی، هندسه و خواص مهمی مانند استحکام بالا، هدایت حرارتی خوب و... بسیار مورد توجه واقع شدند [۱-۳]. تقریباً هرنوع نقصی که ابعاد آن برابر و یا کمی بزرگتر از طول همدوسی باشد، می‌تواند به عنوان مرکز میخکوبی، عمل کند تا حرکت گردابه‌ها را متوقف کند و درنتیجه، مقادیر چگالی جریان بحرانی تحت اعمال میدان مغناطیسی افزایش یابد. از آنجایی که نانولوله‌های کربنی، رسانا و دارای طول مشخصه (~ nm) حدوداً برابر طول همدوسی $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ (~ nm) هستند، انتظار می‌رود که چگالی جریان بحرانی $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ با آلایش نانولوله‌های کربنی افزایش یابد.

پژوهش‌هایی برای بررسی اثر نانولوله‌های کربنی بر خواص ابررسانایی ترکیبات ابررسانای مختلفی انجام شده است [۱۱-٤]. تمام این مطالعات افزایش میخکوبی و در نتیجه افزایش چگالی جریان بحرانی را با آلایش نانولوله‌های کربنی را ثبت کرده‌اند. همچنین مقالات محدودی افزایش کمی از دمای گذار را تا آلایش بهینه‌ای ثبت کرده‌اند. لازم به ذکر است که افزایش چگالی جریان بحرانی نمونه‌های آلاییده چشمگیرتر از افزایش دمای گذار این نمونه‌ها می‌باشد. بدین منظور در این پژوهش به بررسی اثر آلایش نانولوله‌های کربنی بر ترکیب ابررسانای $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ ساخته شده به روش سل- ژل پرداختیم . برای بررسی ارتباطات بین دانه-ای از تصاویر تهیه شده با میکروسکوپ الکترونی روبشی، کمک گرفتیم. همچنین برای بررسی خواص مغناطیسی و دمای گذار نمونه‌ها از آنالیز پذیرفتاری مغناطیسی AC استفاده کردیم.

روش ساخت نمونه

روش ساخت نمونه ها در این پژوهش، روش سل- ژل می باشد. در اولین مرحله، مواد اولیه که به صورت نیترات ترکیب موردنظراست؛ به عبارتی $Y(NO_3)_3.6H_2O$، $Ba(NO_3)_2$ و $Cu(NO_3)_2.3H_2$ با خلوص بالا، با نسبت مولی ۱:۲:۳ با ترازویی با دقت ۰/۱ میلی گرم، توزین می‌شوند. سپس برای تهیه محلول ۰/۵ مولار، هر کدام از پودرهای توزین شده را درون بشرهایی که حاوی آب مقطر مشخصی هستند، انتقال داده و به کمک همزن مغناطیسی محلول‌های همگنی ایجاد می‌کنیم.

دراین روش ساخت برای تهیه ژل، از اسید سیتریک استفاده می-کنیم. محلول‌های ۰/۵ مولار هریک از کاتیون‌ها را با یکدیگر ترکیب کرده و با نرخ مناسبی وارد اسید سیتریک می‌شود.

یکی از مهم‌ترین کارها در راستای تبدیل سل به ژل، تنظیمpH است که تأثیر به سزایی در کیفیت محصول دارد. برای تنظیم pH مورد نظرکه در بازه ٦ تا ۷ می‌باشد، از اتیلن دی آمین استفاده می-کنیم. پس از تنظیم pH، ژل را به مدت چند ساعت حرارت داده تا آب فیزیکی آن تبخیر شود. سپس آن را جهت خود احتراقی به کوره انتقال می‌دهیم.

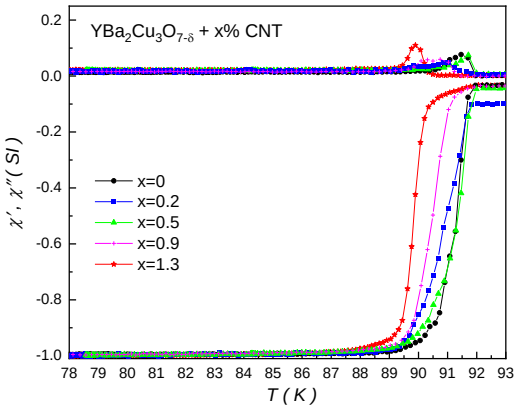
خود احتراقی در بازه دمایی ۲۸۰ تا ۳۰۰ درجه سانتی‌گراد انجام می‌شود. البته جهت خروج تمام گازهای حاصل از خوداحتراقی مانند NO و NO_2، دمای کوره را تا ۵۲۰ درجه سانتی‌گراد افزایش می‌دهیم. پس از اتمام مرحله خود احتراقی، پودری نرم و حجیم، با رنگ قهوه‌ای تیره حاصل می‌شود. اکنون به منظور آماده سازی ماده برای تکلیس، پودر به دست آمده را برای مدت زمان معینی سایش داده و پس از آن نمونه را درون کوره، به مدت ٢٤ ساعت در دمای ۸۸۰ درجه سانتی‌گراد جهت تکلیس، قرار می‌دهیم. در این روش دو مرتبه عمل تکلیس انجام می‌شود. پس از اتمام تکلیس، پودر به دست‌آمده را با نانولوله‌های کربنی که به مقدار معینی توزین شده-اند سایش می‌دهیم و آن را درون قالب ریخته و تحت فشار مناسبی، پودرها شکل‌دهی می‌شوند.

نمونه ها را جهت کلوخه سازی درون کوره گذاشته و با سرعت مناسبی دما را تا ۹۳۰ درجه سانتی‌گراد افزایش می‌دهیم. از آنجایی که نمونه بخشی از اکسیژن خود را در دماهای بالای ۸۸۰ درجه سانتی‌گراد، از دست می‌دهد نمونه را تحت شار اکسیژن قرار می-دهیم. همچنین برای جلوگیری از تشکیل فاز تتراگونال، سرد سازی نمونه را به کندی انجام می‌دهیم.

پس از پایان مرحله کلوخه سازی از نمونه تست پذیرفتاری مغناطیسی گرفته که در ادامه نتایج آن مورد بحث قرار می‌گیرند.

بحث و بررسی

نمونه‌های ابررسانا دارای خاصیت دیامغناطیس کامل هستند. برای بررسی این خاصیت از آنالیز پذیرفتاری مغناطیسی استفاده کردیم. نتایج آنالیز پذیرفتاری شامل دو بخش حقیقی و موهومی می‌باشند. همانطور که در شکل ۱ مشاهده می‌کنید، بخش حقیقی پذیرفتاری نمونه‌ها دارای یک گذار تیز از حالت بهنجار به حالت ابررسانایی دیامغناطیس دارند. دمای مربوط به شروع گذار نمونه‌ها، دمای بحرانی نامیده می‌شود و با T_c نمایش داده می‌شود.

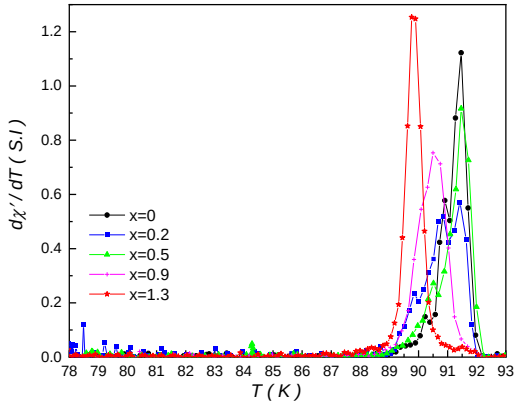


شکل۱ : نمودار پذیرفتاری مغناطیسی برحسب دما برای ترکیب $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ با آلایش نانولوله کربنی با درصدهای وزنی ۱/۳و۰/۹و۰/۵و۰/۲و۰=x تحت میدان مغناطیسی ۰/۸ A/m و فرکانس ۳۳۳Hz.

همانطور که در شکل ۱ دیده می‌شود، دمای گذار نمونه‌ها تا آلایش ۰/۵، تغییر زیادی نسبت به دمای گذار نمونه خالص نداشته و برای نمونه‌های با آلایش ۰/۹ و ۱/۳ شاهد کاهش اندک دمای گذار نسبت به نمونه خالص هستیم.

همچنین نمونه‌ها تا آلایش ۰/۵ دارای گذار تیزی هستند که به معنای همگنی نمونه و ارتباطات قوی بین دانه‌ای است و بنابراین افزایش چگالی جریان بحرانی را پیش‌بینی می‌کنیم؛ که برای بررسی این پیش‌بینی آنالیزهایی در دست انجام است.

با مشتق گرفتن از قسمت حقیقی پذیرفتاری نسبت به دما، $d\chi'/dT$ ، می‌توان دمای گذار هر نمونه را از قله نمودار به دست آمده محاسبه کرد؛ که با T_{c_peak} نمایش داده می‌شود و برای نمونه‌های ما در شکل ۲ نشان داده شده است. اختلاف بین T_c به‌دست آمده از قسمت حقیقی پذیرفتاری و T_{c_peak} به دست آمده از مشتق پذیرفتاری نسبت به دما را با ΔT_c مشخص می‌کنیم که برابر با پهنای متوسط هر پیک در نمودار مشتق پذیرفتاری است.



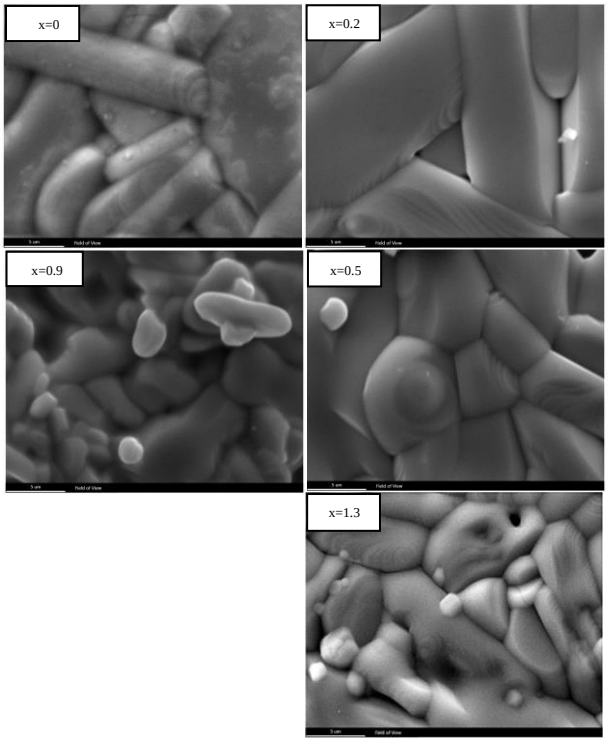
شکل۲ : نمودار مشتق دمایی 'χ برحسب دما برای ترکیب $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ با آلایش نانولوله کربنی با درصدهای وزنی ۱/۳و۰/۹و۰/۵و۰/۲و۰=x تحت میدان مغناطیسی ۰/۸ A/m و فرکانس ۳۳۳Hz.

اطلاعات مربوط به هر نمونه را طبق توضیحات قبلی به‌دست آورده و در جدول ۱ ثبت شده‌اند.

جدول۱ : مقادیر T_c و T_{c_peak} و ΔT_c برای نمونه های آلاییده شده با نانو لوله کربنی در ترکیب $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ + x% CNT .

$YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ + x% CNT	T_c (K)	T_{c_peak} (K)	ΔT_c (K) $T_c - T_{c_peak}$
x=۰	۹۱/۹۶	۹۱/٤٦	۰/۵۰
x=۰/۲	۹۲/۰۲	۹۱/٤۲	۰/٦۰
x=۰/۵	۹۲/۱۳	۹۱/٤٦	۰/٦۷
x =۰/۹	۹۱/٤٦	۹۰/۵۰	۰/۹٦
x =۱/۳	۹۰/۹۳	۸۹/۹٦	۰/۹۷

برای بررسی اندازه دانه‌ها و ارتباطات بین دانه‌ای از تصویر برداری میکروسکوپ الکترونی روبشی بهره گرفتیم که این تصاویر در شکل ۳ آورده شده است.



شکل۳: تصاویر میکروسکوپ الکترونی روبشی با بزرگنمایی ۵ میکرومتر، برای ترکیب های ابررسانای ایبکوآلاییده با نانولوله‌های کربنی با درصد وزنی های متفاوت نشان داده شده ($YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ + x% CNT).

همانطور که از شکل ۳ پیدا است، متوسط اندازه دانه‌ها تا آلایش ۰/۵ افزایش یافته است که احتمالا به ارتباطات بین دانه‌ای بهتری منتج می‌شود.

نتیجه گیری

با مطالعه ترکیب ابررسانای $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ + x% CNT (x=۰و۰/۲و۰/۵،۰/۹و۱/۳) به وسیله اندازه‌گیری پذیرفتاری مغناطیسی AC مشاهده می‌شود که دمای گذار نمونه‌های آلاییده تفاوت زیادی با نمونه خالص ندارند و برای آلایش های ۰/۹ و ۱/۳ کاهش اندک دمای گذار را شاهد هستیم. گذار تیز نمونه‌ها از حالت بهنجار به ابررسانایی تا آلایش ۰/۵ درصد وزنی بیانگر همگنی نمونه و بهبود ارتباطات بین دانه‌ای است که تصاویر میکروسکوپ الکترونی روبشی نیز با نتایج پذیرفتاری همخوانی دارد. طبق این نتایج پیش‌بینی می‌شود که چگالی جریان بحرانی با آلایش نانوتیوپ افزایش می‌یابد که بدین منظور آنالیزهایی در دست انجام است.

سپاسگزاری

از همکاری آقای خالید رحمانی در اندازه‌گیری نمونه‌ها سپاس‌گزاری می‌شود.

مرجع‌ها

[1] W. Qin, F. Vautard, L.T. Drzal, J. Yu, Mechanical and electrical properties of carbon fiber composites with incorporation of Graphene nanoplatelets at the fiberematrix interphase, Compos. B Eng. 69 (2015) 335-341.

[2] R.S. Ruoff, D.C. Lorents, Mechanical and thermal properties of carbon nano-tubes.

[3] R.Z. Ma, J. Wu, B.Q. Wei, J. Liang, D.H. Wu, Processing and properties of carbon nanotubes-nano-SiC ceramic, J. Mater. Sci. 33 (1998) 5243-5246.

[4] C. H Cheng, Y. Yang, P. Munroe, Y. Zhao, Comparison between nano-diamond and carbon nanotube doping effects on critical current density and flux pinning in MgB2, Supercond. Sci. Technol. 20 (2007) 296-301.

[5] K. Fossheim, E.D. Tuset, Th W. Ebbesen, Michael M.J. Treacy, J. Schwartz, Enhanced flux pinning in Bi2Sr2CaCu2O8+x superconductor with embedded carbon nanotubes, Physica C 248 (1995) 195-202.

[6] S.L. Huang, M.R. Koblischka, K. Fossheim, T.W. Ebbesen, T.H. Johansen, Increased flux pinning in both pure and carbon-nanotube-embedded Bi-2212 superconductors, Physica C 282-287 (1997) 2279-2280.

[7] S. Dadras, et al.," Increase of critical current density with doping carbon nano-tubes in $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$", Physica C 469 (2009) 55–59.

[8] K. Yakinci, et al.," Enhanced superconducting properties of multi-wall carbon nanotubes added YBCO-123", J. Molecular Structure1211(2020)128089.

[9] E. Hannachi, et al." AC susceptibility investigation of YBCO superconductor added by carbon nanotubes", J. Alloys and Compounds 812 (2020) 152150.

[۱۰] ف.گودرزی، "ساخت و مشخصه‌یابی نانوکریستال‌های ابررسانای YBCO آلاییده با نانولوله‌های‌کربنی (CNT) "، پایان نامه کارشناسی ارشد فیزیک، دانشگاه الزهراء (س)، ۱۳۹۰.

[۱۱] م.مجیدی، "ساخت و بررسی اثر رقابتی آلایش گرافیت و نانولوله‌های کربنی در ابررسانای دمای بالایYBCO "، پایان نامه کارشناسی ارشد فیزیک شیمی، دانشگاه الزهراء (س)، ۱۴۰۰.

ساخت و بررسی اثر نانوذرات ZnO بر حالت نرمال ابررسانای دمای بالای BSCCO-۲۲۲۳

طاوسیان، مریم ؛ دادمهر، وحید

آزمایشگاه پژوهشی مغناطیس و ابررسانایی دانشگاه الزهرا(س) ، خیابان ده‌ونک ، تهران

چکیده

در این مقاله، اثر افزودن نانوذرات ZnO را بر ابررسانای دمای بالای Bi-۲۲۲۳ بررسی می‌کنیم. به این منظور، سنتز نمونه‌ها با درصدوزنی‌های (۰/۰-۰/۲-۰/۳-۱) به روش سل-ژل انجام شد. مشخصه یابی نمونه‌ها توسط XRD و SEM انجام و با استفاده از نرم افزار XPERT و MAUD تحلیل شد. مقاومت الکتریکی (R) و دمای بحرانی (Tc) نمونه‌ها با روش چهارمیله‌ای مورد بررسی قرار گرفت. بررسی پراش اشعه ایکس برای تمام نمونه‌ها ساختار تتراگونال را با تقارن I4/mmm نشان داد که با افزودن نانوذرات اکسیدروی، اندازه بلورک‌ها کاهش یافت. به کمک نرم افزار MAUD طیف پراش اشعه ایکس، مورد بررسی قرار گرفت و نتایج به دست آمده بیان می‌کند نمونه خالص دارای ۵۵/۳۵ ٪فاز ۲۲۲۳ ، ۳۳/۱۱ ٪فاز ۲۲۱۲ ،حدود ۳ ٪فاز ۲۲۰۱ بوده است. درصد وزنی فاز Bi-۲۲۲۳ نمونه های آلایش یافته با افزایش مقدار اکسیدروی، افزایش می‌یابد و در نمونه آلایش یافته ۰/۲ ٪وزنی، در مرحله زینتر مقدارش به ۸۷ ٪ افزایش می‌یابد. دمای بحرانی نمونه‌ها با روش چهار پروب اندازه گیری شدند. برای نمونه ۰/۲ و ۰/۳ ٪وزنی شاهد دمای گذاری برابر با ۱۱۰ و ۱۰۹ کلوین هستیم، نمونه ۱ ٪وزنی دارای دو فاز با دمای گذار اول ۱۰۹ کلوین و دمای گذار دوم ۶۰ کلوین است.

واژه های کلیدی: *ابررسانای دمای بالای **BSCCO-۲۲۲۳**، سل-ژل، دمای گذار بحرانی و طیف اشعه ایکس.*

Fabrication & analysis of ZnO nano Particle effects on the Normal state of HTSC BSCCO-*2223*

Tavousian, Maryam; daadmehr, Vahid

Magnet & Superconducting Res, Lab, University of Alzahra, Tehran,

Abstract

In this paper, we investigate the effect of adding ZnO nanoparticles on the high-temperature superconductor Bi-2223. For this purpose, the samples were synthesized by the sol-gel method with percentages of x= 0.0,0.2,0.3,1 wt%. The samples were characterized by XRD and SEM and analyzed using XPERT and MAUD software. The electrical resistance (R) and critical temperature (Tc) of the samples were tested by the 4-Probe method. Examination of X-ray diffraction for all samples showed a tetragonal structure with I4/mmm symmetry, which reduced the size of the crystals by adding Zinc oxide nanoparticles. Using MAUD software, the X-ray diffraction spectrum was examined and the results show that the pure sample had 55.35% of phase 2223, 33.11% of phase 2212, and about 3% of phase 2201. The weight percentage of phase Bi-2223 of contaminated samples increases with an increasing amount of zinc, and in the contaminated sample of 0.2 wt%, its value increases to 87% in the sintering stage. The critical temperature of the samples was measured by the four-prop method. For the sample of 0.2 and 0.3% by weight, we see the temperature equal to 110 and 109 K, the sample of 1wt% by weight has two phases with the first transition temperature of 109 K and the second transition temperature of 60 K.

***Keywords**: High-Temperature Superconductor, BSCCO-2223, Sol-Gel, Critical Transition Temperature, X-Ray Spectrum*

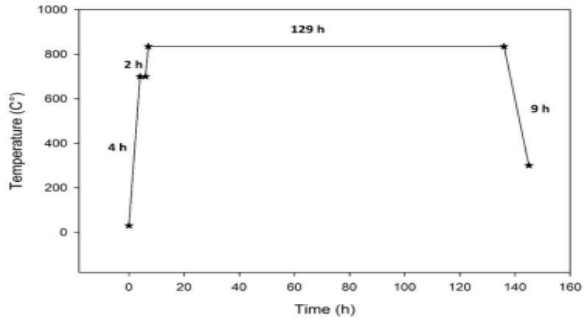
PACS No. *(11 Times New Roman, italic)*

مقدمه

بعد از کشف ابررسانای دمای بالای BSCCO در سال ۱۹۸۸ توسط گروه مائدا [۱] ، ابررسانای پایه بیسموت با فرمول کلی $(Bi,Pb)_2Sr_2Ca_{n-1}Cu_nO_{10+\delta}$، (n=1,2,3) دارای سه فاز پایه با مقادیر متغیر دمای بحرانی: فاز ۲۲۰۱ با دمای گذار ۲۰ کلوین، فاز ۲۲۱۲ با دمای گذار ۸۵ کلوین و فاز ۲۲۲۳ دارای دمای گذار ۱۱۰ کلوین می‌باشد [۲]. در سالهای اخیر مطالعات زیادی برای بهبود خواص ابررسانایی با افزودن نانوذرات مختلف به منظور بهبود چگالی جریان و دمای بحرانی انجام شده است [۳-۸]. یکی از کاربردهای ابررسانای دمای بالا استفاده از حالت نرمال آن میباشد که افزایش یا کاهش رسانندگی، با افزودن آلایش‌های گوناگون قابل کنترل است. از آنجایی که ترکیبات بیسموت خواص رسانایی توپولوژیکی را ارائه می‌دهند، کاربردهای صنعتی ابررساناهای دمای بالا مورد توجه دانشمندان قرار گرفته است. به ویژه در صنعت باتری سازی به الکترودهای دارای رسانندگی بالا و قابل کنترلی که تابعیت زمانی مشخص دارند نیاز است. در این مقاله، با افزودن درصدهای مختلفی از نانوذرات ZnO به ابررسانای Bi-۲۲۲۳ رسانندگی نمونه‌ها مورد تحلیل و بررسی قرار گرفت. مشاهده شکل‌گیری فاز و ریزساختار همه‌ی نمونه‌ها به ترتیب با الگوی پراش پرتو ایکس XRD و تصاویر SEM صورت گرفت.

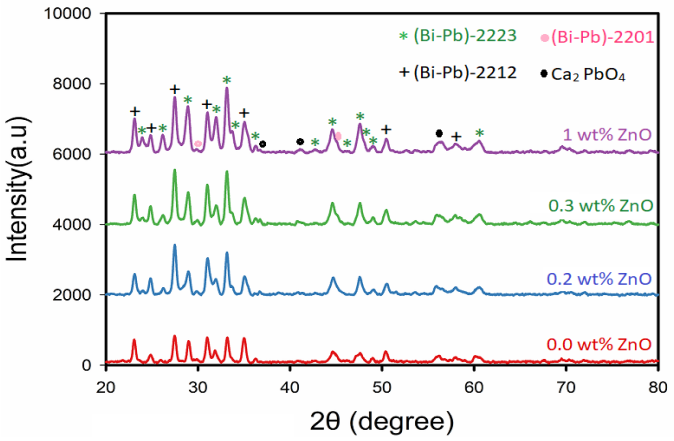
روش آزمایش

در این آزمایش، نمونه‌ها به روش سل-ژل سنتز [۹] و نانوذرات ZnO با درصدزنی‌های x=0.0\0.2\0.3\1wt% به $Bi_{1.7}Pb_{0.3}Sr_2Ca_2Cu_3O_{10+\delta}$ اضافه شدند. به منظور ساخت نمونه‌هایی با مقادیر مختلف ZnO، نیترات بیسموت ۵ آبه با (خلوص ۹۸٪)، نیترات استرانسیوم با (خلوص ۹۹٪)، نیترات کلسیم با (خلوص ۹۹/۵٪)، نیترات سرب با (خلوص ۹۹/۵٪) با نسبت مولی۳:۲:۲:۳.۰:۱.۷ در بشر حاوی آب دیونیزه در دمای ۵۰ درجه سانتی گراد حل شدند (برای انحلال پذیری بهتر بیسموت از اسیدنیتریک استفاده شد). بعد از تهیه ی سلی همگن، به محلول پایه که شامل EDTA,EG,Urea بود، بوسیله پیپت به آرامی اضافه شد و در دمای ۸۰ درجه سانتی گراد ژل به دست آمد (pH محلول در این مرحله باید ٦ الی ۷ باشد). ژل با ویسکوزیته بالا درون کوره مکعبی قرار داده شد و به مدت ۱۰ ساعت در آن دما قرار گرفت. سپس یک ساعت در دمای ۱۱۰ درجه سانتی‌گراد و نیم ساعت در دمای ۳۰۰ درجه سانتی‌گراد قرار گرفت و پودری خاکستری رنگ به دست آمد. پودر حاصل، به مدت یک ساعت درون هاون ساییده شد و سپس داخل بوته آلومینا ریخته و مرحله کلسینه انجام شد. بعد از اتمام مرحله‌ی تکلیس پودر ZnO که با روش سل-ژل به دست آوردیم، با درصد وزنی های x=0.2\0.3\1wt% به پودر خاکستری رنگ اضافه و به خوبی با آن مخلوط گردید. پودر را دوباره به مدت یک ساعت ساییده و سپس تحت فشار مکانیکی به قرص تبدیل کرده و به مدت ۱۲۹ ساعت در دمای ۸۳۵ درجه سانتیگراد در معرض اکسیژن طبق شکل۱ تحت حرارت دهی قرار گرفت.



شکل۱ : نمودار حرارت دهی مرحله زینتر

طیف پراش اشعه ایکس نمونه ها با استفاده از نرم افزار MAUD تحلیل شد.



شکل۲ : الگوی پراش اشعه ایکس نمونه *Bi*-۲۲۲۳ آلایش یافته با درصد وزنی های مختلف ZnO

پارامترهای ثابت شبکه و کسرحجمی نمونه‌های نشان داده شده در شکل۲ ، به ترتیب در جدول ۱ و ۲ آورده شده است.

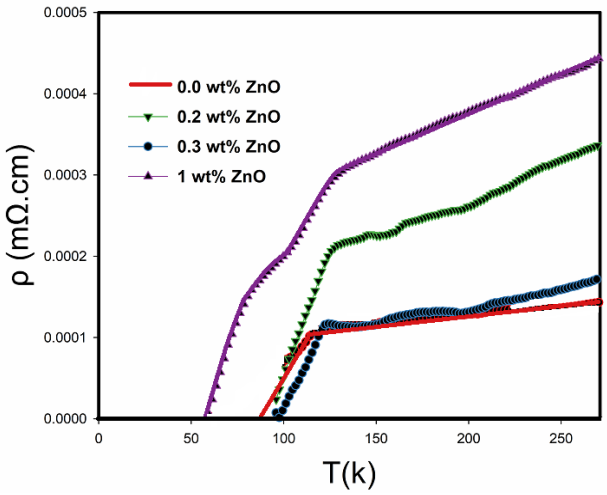
جدول۱: پارامترهای شبکه نمونه های آلاییده با ZnO

فاز	Bi-2223 (%)	Bi-2212 (%)	Bi-2201 (%)	Ca_2PbO_4 (%)
BSCCO+0/0wt%ZnO	۵۶/۵۳	۳۹/۸۱	۳/۸۴	-
BSCCO+0/2wt%ZnO	۸۷/۴۲	۸/۴۳	۰/۴۸	۳/۶۶
BSCCO+0/3wt%ZnO	۷۰/۵۶	۱۸/۳۲	۱۰/۴	۰/۷۲
BSCCO+1wt%ZnO	۷۳/۳۳	۲۰/۸۵	۵/۲	۰/۶۲

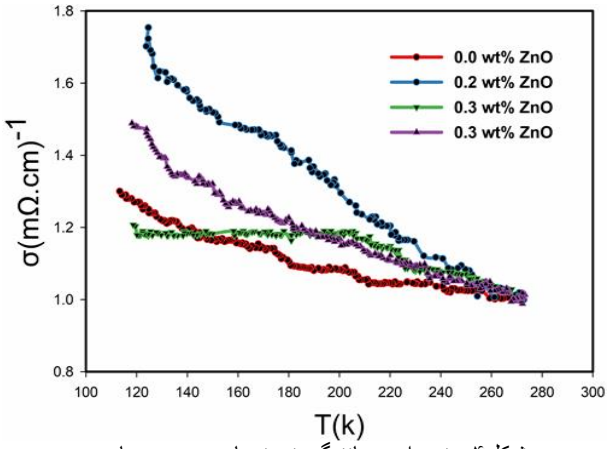
جدول۲: کسر حجمی نمونه های آلاییده با ZnO

فاز	R_{wp}	R_b	R_{exp}	S
BSCCO+0/0wt%ZnO	۱۴/۵۲	۱۱/۱۸	۸/۴۳	۱/۷۲
BSCCO+0/2wt%ZnO	۱۰/۹۳	۷/۹۸	۷/۳۵	۱/۴
BSCCO+0/3wt%ZnO	۱۱/۸۱	۸/۴۵	۶/۹۴	۱/۷
BSCCO+1wt%ZnO	۱۰/۷۱	۷/۷۳	۶/۴۵	۱/۶

در نمودار مقاومت الکتریکی ویژه نمونه‌ی خالص در شکل۳ مشاهده می‌شود گذار ابررسانایی در ۱۱۰k است اما با افزودن ZnO نمودار مقاومت الکتریکی ویژه نمونه آلایش یافته با ۱ ٪وزنی نانوذرات اکسید روی به دلیل افزایش درصد تشکیل فاز ساختاری ۲۲۱۲ ، نمونه دارای دو فاز با دمای گذار بحرانی ۱۱۰k و ۶۰k می‌باشد. پس از افزودن نانوذرات اکسید روی به نمونه خالص دمای بحرانی تغییر نکرده است و این امر نشان می‌دهد اتم-های روی در فضاهای خالی بین ساختار قرار گرفته‌اند.

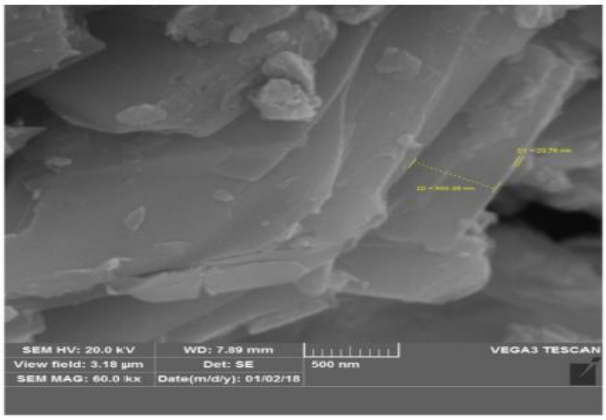


شکل۳ : مقاومت الکتریکی نمونه ها بر حسب دما

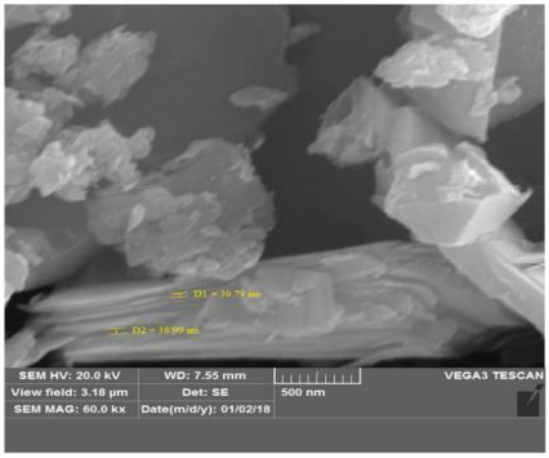


شکل۴ : نمودار رسانندگی نمونه‌ها بر حسب دما

نمودار رسانندگی بر حسب دمای بحرانی نمونه‌ها در شکل٤ مشاهده می‌شود، نمونه‌ی با ۰/۲ درصدوزنی دارای رسانندگی بهتری نسبت به نمونه‌های دیگر می‌باشد که در صنعت باتری سازی، به منظور ساخت الکترود ابرباتری قابل شارژ Zn-Ni به کار می‌رود. همانطور که در تصویر SEM نمونه خالص شکل۵ مشاهده می‌شود دانه‌هایی با ساختار صفحه‌ای شکل در نمونه وجود دارد که از جمله ویژگی‌های ابررسانای BSCCO می‌باشد. همچنین ساختارهای لایه‌ای که از مشخصه‌های اصلی ابررساناهای دمای بالا است در دانه‌ها مشاهده می‌شود. میکروگراف‌های SEM نمونه‌های آلایش‌یافته در مرحله زینتر، که در شکل٦ آورده شده، افزایش دانه‌های صفحه مانند را به نمایش گذاشت که نشانه‌ای از بهبود سنتز نمونه‌ها و تشکیل ساختار لایه‌ای و همینطور بهبود مورفولوژی و جفت شدن بین دانه‌ای در نمونه‌های اضافه شده با ZnO را تشخیص می‌دهد.



شکل۵ : sem نمونه خالص



شکل٦ : sem نمونه‌ی ۰/۲ درصدوزنی

نتیجه گیری

نمونه‌ها با روش سل-ژل ساخته شدند و نانوذرات ZnO با درصدوزنی‌های x= 0.2\0.3\1wt% در مرحله زینتر به نمونه خالص ابررسانای دمای بالای BSCCO-۲۲۲۳ اضافه شدند. مقاومت الکتریکی و دمای گذار نمونه‌ها با روش چهارمیله‌ای اندازه‌گیری شدند. الگوی پراش اشعه ایکس نمونه‌ها با کمک نرم افزار EXPERT و MAUD مورد تحلیل و بررسی قرار گرفت و فازهای ساختاری شناسایی شدند، همچنین مرزدانه‌ها به وسیله‌ی میکروسکوپ الکترونی روبشی اندازه‌گیری شدند. نتایج به دست آمده از تحلیل طیف XRD و تصاویر SEM و دمای گذار نشان می‌دهند که نمونه خالص ابررسانای BSCCO-۲۲۲۳ دارای فاز ساختاری Bi-۲۲۲۳ با تقارن tetragonal و گروه فضایی I4/mmm و دمای گذار بحرانی ۱۱۰k می‌باشد. با افزودن نانوذرات زینک با ٪وزنی ۰/۲ به نمونه خالص در مرحله زینتر، دمای گذار بحرانی ۱۱۰k و با افزایش آلایش‌های ۰/۳ و ۱wt% دمای بحرانی به ۱۰۹k رسیده است. همچنین میکروگراف‌های SEM افزایش دانه‌های صفحه مانند را به نمایش گذاشت و بهبود جفت شدن بین دانه‌ای در نمونه‌های اضافه شده با ZnO را تشخیص میدهد. آلایش ۰/۲ درصدوزنی نانوذرات ZnO دارای بیشترین درصد تشکیل فاز ابررسانایی Bi-۲۲۲۳ با مقدار ۸۷٪ را با دمای گذار ۱۱۰k نشان می دهد.

مرجع‌ها

[۱] Maeda, H., et al., *A new high-Tc oxide superconductor without a rare earth element.* Japanese Journal of Applied Physics, 1988. **27**(2A): p. L209.

[۲] Abbasi, H., J. Taghipour, and H. Sedghi, *The effect of MgCO3 addition on the superconducting properties of Bi2223 superconductors.* Journal of Alloys and Compounds, 2009. **482**(1-2): p. 552-555.

[۳] Annabi, M., et al., *Addition of nanometer Al2O3 during the final processing of (Bi, Pb)-2223 superconductors.* Physica C: Superconductivity, 2004. **405**(1): p. 25-33.

[۴] Guilmeau, E., B. Andrzejewski, and J. Noudem, *The effect of MgO addition on the formation and the superconducting properties of the Bi2223 phase.* Physica C: Superconductivity, 2003. **387**(3-4): p. 382-390.

[۵] Gul, I., et al., *Effect of Ag2CO3 addition on the morphology and physical properties of Bi-based (2223) high-Tc superconductors.* Physica C: Superconductivity and its applications, 2006. **449**(2): p. 139-147.

[۶] Kong, W. and R. Abd-Shukor, *Enhanced electrical transport properties of nano NiFe2O4-added) Bi1. 6Pb0. 4) Sr2Ca2Cu3O10 superconductor.* Journal of Superconductivity and Novel Magnetism, 2010. **23**(2): p. 257-263.

[۷] Najafpour, H., S. Shojaei, and S. Shojaei, *The Effect of AgNO3 addition on the formation and superconducting properties of the Bi2223 phase.* Journal of superconductivity and novel magnetism, 2010. **23**(4): p. 487-491.

[۸] Rojek, A. and B. Cendlewska, *Effect of Sb additions on the formation of the high-TC phase in the Bi-Pb-Sr-Ca-Cu-O superconducting thick films.* Solid state communications .۱۹۹۳ , :(۱۱)۸۶p. 735-738.

[۹] Moghadasi, F.S., V. Daadmehr, and M. Kashfi, *Characterization and frequency-thermal response of electrical properties of Cu nanoferrite prepared by sol–gel method.* Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 2016. **416**: p. 10.۳-۱۰۹

پیش بینی دمای گذار مواد ابررسانا با استفاده از روش های یادگیری ماشین

گش‌مرد، حسن ؛ شاکری‌پور، حمیده
دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی اصفهان ، اصفهان ۸۳۱۱۱-۸۴۱۵۶
پست الکترونیکی: hshakeri@iut.ac.ir

چکیده

یکی از روش‌های تعیین خواص مواد استفاده از روش‌های شبیه‌سازی و محاسباتی است. امروزه نتایج چشمگیر حاصل از رهیافت‌های مبتنی بر هوش مصنوعی و الگوریتم‌های یادگیری ماشینی، پژوهشگران حوزه ماده-چگال را متقاعد ساخته که مسائل پیش‌روی خود را از این طریق حل نمایند. در این پژوهش با استفاده از الگوریتم CatBoost دمای گذار 1286 ترکیب ابررسانا پیش‌بینی و تعیین شد که میانگین خطا برای این تعداد ابررسانا 6.19 کلوین و R^2 به مقدار 0.956 به‌دست آمد. برای هر ترکیب ابررسانا 29 ویژگی در نظر گرفته شد.

واژه‌های کلیدی: *مواد ابررسانا، یادگیری ماشین، الگوریتم CatBoost.*

Predicting the transition temperature of superconducting materials using machine learning methods

Gashmard, Hassan; Shakeripour, Hamideh
Department of Physics, Isfahan University of Technology, Isfahan 84156-83111
hshakeri@iut.ac.ir

Abstract

One of the methods for determining the properties of materials is the use of simulation and computational methods. Today, the impressive results of artificial intelligence approaches and machine learning algorithms have convinced condensed-matter researchers to solve their advancement problems in this way. In this study, using the CatBoost algorithm, the transition temperature of 1286 superconductors was predicted, and determined that the average error for this number of superconductors was 6.19 K and R^2 was 0.956. Twenty-nine properties were considered for each superconducting compound.

***Keywords**: Superconducting Materials, Machine Learning, CatBoost algorithm*

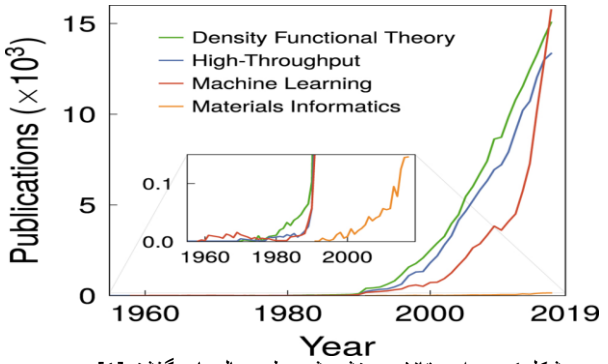
مقدمه

در فیزیک ماده-چگال، برای ساخت و پیشنهاد یک ترکیب جدید می توان چهار راهبرد کلی را در گذر زمان متصور شد. این چهار راهبرد عبارتند از: 1- روش آزمون و خطای مبتنی بر شهود فیزیکی و تجربی. 2- راهبرد دوم مبتنی بر قوانین فیزیکی و شیمیایی است. 3- شبیه سازی ومحاسبات کامپیوتری راهبرد سوم است. 4- رهیافت چهارم مبتنی بر علم داده-محور (همانند یادگیری ماشینی) است [1].

در طی سالیان متمادی حجم زیادی از داده در آزمایشگاه‌های تجربی و همچنین از طریق محاسبات و شبیه سازی های مبتنی بر مکانیک کوانتوم در حوزه فیزیک ماده-چگال تولید شده است [2]و[3]. این مهم موجب شده است تا پژوهشگران به منظور حل مسائل خود در زمینه علم مواد اقبال فراوانی نسبت به راهبرد چهارم یعنی روش های داده-محور همانند یادگیری ماشین نشان دهند. در شکل 1 میزان افزایش مقالات منتشر شده در زمینه یادگیری ماشین نسبت به دیگر روش های محاسباتی در طی چند سال اخیر قابل مشاهده است [1].

در فیزیک ماده-چگال، محققان به دنبال درک بر همکنش مواد در سطح اتمی هستند، زیرا منشاء خواص مواد از همین برهمکنش های اتمی است [2]. در بین روش‌های محاسباتی، نظریه تابعی چگالی (DFT) موفقیت‌های چشمگیری در تعیین خواص مواد و حل مسائل مکانیک کوانتومی داشته است. برخلاف دستاوردهای بزرگ نظریه تابعی چگالی، محدودیت‌های مهمی متوجه این نظریه است که برخی از آنها عبارتند از:

اعمال تقریب‌های زیاد، بروز خطا برای سیستم های با همبستگی قوی، استفاده فقط برای تعداد محدودی از اتم ها، افزایش هزینه های محاسباتی و زمان اجرا با افزایش اندازه سیستم، بازدهی پایین، چرخه های توسعه طولانی و غیره [4-6].



شکل1: میزان مقالات منتشر شده طی سال‌های گذشته[1]

در مورد مواد ابررسانا نیز همبستگی‌های قوی الکترونی در این دسته از مواد، انجام محاسبات ابتدا به ساکن را برای محاسبه ساختارهای الکترونی و پیش‌بینی دمای گذار مربوط به آنها بسیار دشوار می‌کند. بنابراین، رویکردهای جدیدی برای یافتن مواد ابررسانا و تعیین خواص آنها مورد نیاز است [7].

یکی از راه‌های جایگزین برای حل مسائل مکانیک کوانتوم و تعیین خواص اتمی مواد، استفاده از روش های یادگیری ماشین است که برخی از مزیت‌های استفاده از آن عبارتند از: کاهش هزینه‌های محاسباتی، کاهش زمان اجرا، کارایی بالا در پیش بینی خواص مواد، چرخه توسعه کوتاه و غیره. به عبارت دیگر، راهبرد استفاده از یادگیری ماشین در مسائل مکانیک کوانتومی، دقت و سرعت در حل این مسائل است [4] و [6].

یادگیری ماشین زیرمجموعه ای از هوش مصنوعی به شمار می رود و یادگیری عمیق زیر مجموعه ای از یادگیری ماشین محسوب می شود.

فرآیند پیش‌بینی در روش‌های یادگیری ماشینی به این صورت است که ابتدا الگوریتم از طریق داده های ورودی، آموزش داده می‌شود و سپس الگوریتم، روابط و الگوهای موجود در داده‌های ورودی را استخراج و شناسایی می‌کند. این الگوهای استخراج شده **"مدل"** نامیده می شوند و ما از این مدل ها برای پیش بینی نمونه های جدید (مثلا پیش بینی دمای گذار ترکیبات جدید ابررسانا که در مجموعه داده وجود ندارند) استفاده می‌کنیم [1].

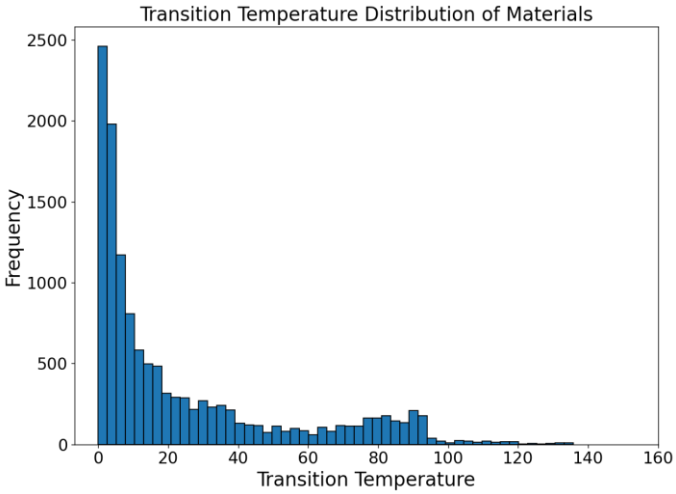
امروزه الگوریتم های یادگیری ماشین به طور جدی بر جنبه های مختلف زندگی انسان تأثیرگذار هستند. بعضی از آنها عبارتند از: طراحی و ساخت داروهای جدید، دستیار صوتی، ماشین های خودران، شناسایی مسیرهای ترافیکی، رسانه های اجتماعی، امور مالی ،کشف مواد جدید، پیش بینی خواص مواد، مطالعه شیمی کوانتومی [6] و [8].

روش‌ها

به طور کلی، سازوکار در رهیافت یادگیری ماشین برای پیش‌بینی دمای گذار مواد ابررسانا به این صورت است که در ابتدا تعداد زیادی ترکیب ابررسانا با دمای گذار مشخص جمع‌آوری می‌کنیم و آن را **مجموعه داده** می‌نامیم. پس از آن، برای هر ترکیب ابررسانا، تعدادی ویژگی فیزیکی و شیمیایی اختصاص می‌هیم. در واقع الگوریتم های یادگیری ماشین، یک ترکیب را به واسطه ویژگی‌هایش می‌شناسند و مشخصه هر ترکیب، ویژگی‌هایی است که برای آن ترکیب در نظر می‌گیریم. به بیان ساده‌تر تمایز ترکیب‌ها در تفاوت ویژگی‌های آنهاست که الگوریتم‌ها این تفاوت‌ها را درک کرده و سپس مدلی متناسب با مجموعه داده طراحی می‌کنند. پس از فرآیند آموزش و یادگیری توسط الگوریتم، اگر ترکیب جدیدی همراه ویژگی‌هایش به مدل داده شود این انتظار وجود دارد که الگوریتم بر اساس مدلی که در مرحله یادگیری و آموزش طراحی نموده است، دمای گذار ترکیب جدید را پیش بینی نماید.

دو مرحله اساسی و مهم در روش‌های مبتنی بر یادگیری ماشین وجود دارد. مرحله نخست جمع‌آوری و آماده‌سازی یک مجموعه داده و انجام مراحل پیش‌پردازش داده بر روی آن و مرحله دوم انتخاب یک الگوریتم مناسب به منظور یادگیری و پیاده‌سازی بر روی مجموعه داده است.

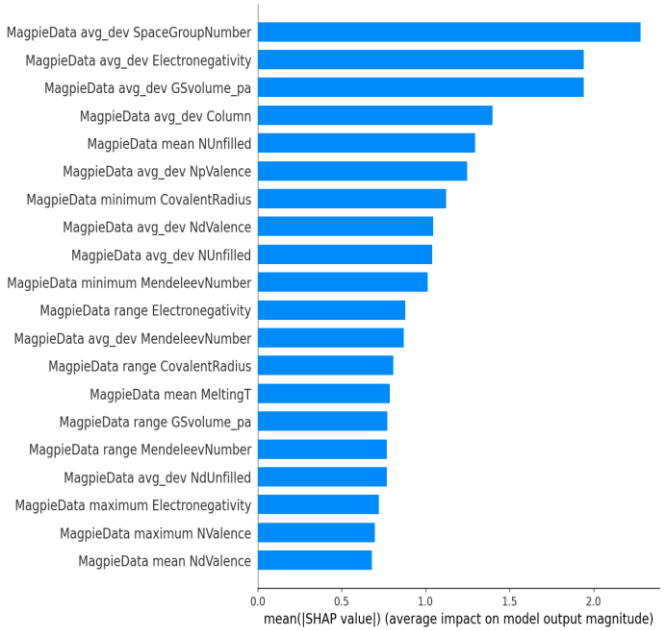
در تحقیق حاضر، از مجموعه داده‌ای شامل 13562 مواد ابررسانا استفاده شد که دمای گذار آنها بین 0 تا 323 کلوین گزارش شده است که پس از حذف ترکیب های با دمای گذار پرت (Outlier) درنهایت محدوده دمای گذار مواد ابررسانا بین 0.01 تا 136 کلوین کاهش یافت که در شکل 2 قابل مشاهده است. این مجموعه داده برگرفته از سایت https://dice.nims.go.jp است که مقالات دیگر نیز مجموعه داده خود را از همین سایت گزارش می‌کنند.



شکل2: نمودارتوزیع دمای گذارمواد ابررسانا

پس از تهیه مجموعه داده و انجام مراحل پیش پردازش بر روی آن، نوبت به ساخت وتولید ویژگی های فیزیکی برای هر ترکیب ابررسانا می‌رسد. در اینجا برای هر ترکیب ابررسانا 132 ویژگی با استفاده از کتابخانه Magpie تولید شد و پس از آن با استفاده از روش SHAP تعداد 25 ویژگی از این 132 ویژگی انتخاب گردید و به الگوریتم داده شد تا فرآیند یادگیری انجام پذیرد. شکل 3، بیست ویژگی اول از نظر اهمیت را به ترتیب نشان می‌دهد که 5 مورد نخست آن عبارتند از: انحراف میانگین مربوط به عدد گروه فضایی عناصرهرترکیب ، انحراف میانگین الکترونگاتیویتی عناصرهرترکیب، انحراف میانگین حجم جامد عناصر هر ترکیب، انحراف میانگین مربوط به گروه عناصرهرترکیب در جدول تناوبی، میانگن تعداد الکترون‌های خالی لایه ظرفیت مربوط به عناصر هر ترکیب و...

همچنین 4 ویژگی جدید به 25 ویژگی اولیه اضافه گردید که موجب بهینه‌تر شدن معیارهای ارزیابی الگوریتم گردید و عملکرد مدل را بهبود بخشید. این چهار ویژگی عبارتند از: الکترون خواهی(Electron Affinity)، تعداد عناصر هر ترکیب، جمع اندیس‌های هر ترکیب، دسته‌بندی ترکیب‌های ابررسانا از نظر خانواده آنها به سه دسته ابررسانای کوپراتی و پایه آهن و دسته سوم که ابررساناهایی به‌جز کوپراتی و پایه آهن محسوب می‌شوند.



شکل3: 20 تا از مهمترین ویژگی‌ها از نظرروش SHAP

در این پژوهش از الگوریتم CatBoost استفاده کردیم. الگوریتم CatBoost عضوی از خانواده روش های جمعی یادگیری ماشین به حساب می‌آید که مبتنی بر درخت تصمیم گیری تقویت کننده گرادیان است. این الگوریتم در اواخر سال 2018 ارائه گردید که برای حل مسائل رگرسیون و کلاس‌بندی مورد استفاده قرار می‌گیرد [11].

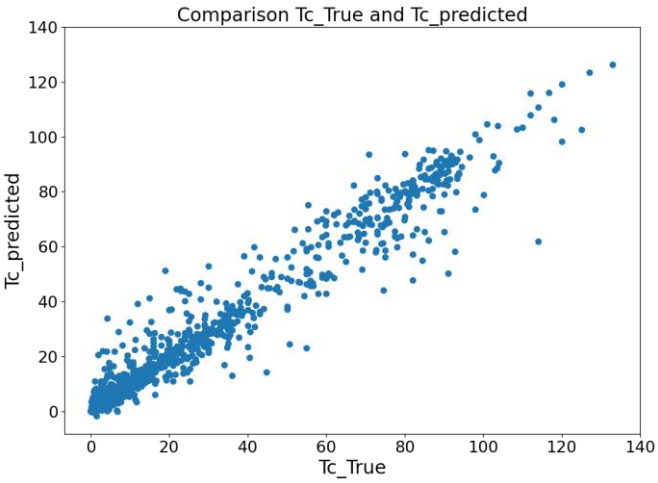
به منظور ارزیابی و کارایی مدل، از سنجه های R-Squared (R^2) و Error-Square-Mean- Root(RMSE) استفاده می‌کنند. به بیان دیگر با استفاده از کمیت‌های بالا می‌توان میزان کارایی و دقت یک مدل را محاسبه نمود. هرچه مقدار R-Squared به عدد یک نزدیکتر باشد به این معناست که دقت و کارایی مدل بیشتر است و همچنین RMSE مقدار میانگین خطا را نشان می‌دهد که هرچه به صفر نزدیکتر باشد مطلوب‌تر است [9]:

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{m}(y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^{m}(y_i - \bar{y})^2} \quad RMSE = \sqrt{\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}(y_i - \hat{y}_i)^2}$$

در روابط فوق m تعداد ترکیب‌های ابررسانا را نشان میدهد و y_i مقدار واقعی نمونه i ام است (که در اینجا مقدار دمای گذار مربوط به نمونه i ام است که به صورت تجربی و در آزمایشگاه اندازه‌گیری شده است). $\hat{y}_i$ مقدار نمونه i ام است که توسط مدل پیش بینی می‌شود و در نهایت $\bar{y}$ مقدار میانگین مربوط به مقادیر واقعی m نمونه است.

در این کار تعداد 1286 ترکیب ابررسانا یعنی 10 درصد از مجموعه داده اصلی را برای مرحله آزمون کنار گذاشتیم تا الگوریتم را پس از فرآیند یادگیری بیازماییم. این ترکیب‌ها شامل ابررساناهای کوپراتی، پایه آهن و غیره هستند.

الگوریتم CatBoost با استفاده از مدلی که در مرحله یادگیری ایجاد کرده بود برای هر یک از این 1286 ترکیب، دمای گذارش را پیش بینی نمود که در شکل 4 قابل مشاهده است.



شکل4: مقایسه مقدار واقعی و مقدار پیش‌بینی شده توسط مدل برای دمای گذار مربوط به 1286 ترکیب ابررسانا

در اینجا مقدار R^2 برابر با 0.956 بدست آمد که در مقایسه با مقالات دیگر مقدار بالاتری است و این به معنای آن است که این مدل برای پیش بینی دمای گذار مواد ابررسانای جدید قابل اعتماد است.

در جدول 1 مقادیر ارزیابی مربوط به این پژوهش را با مقالات دیگر به منظور مقایسه آورده‌ایم. همانطور که دیده می‌شود، مقالات [3]،[7]،[9] و[10] از الگوریتم های مختلفی استفاده کرده‌اند و برای هر کدام معیارهای ارزیابی R-Squared وRMSE محاسبه شده است که در جدول 1 آنها را گزارش کرده‌ایم.

مجموعه داده‌های DataS، DataK و DataH به ترتیب شامل 6198 ، 13000 و 21263 ترکیب ابررسانا هستند که همگی از سایت https://dice.nims.go.jp مجموعه داده خود را انتخاب کرده‌اند. سال انتشار مقالات به همراه مراجع آنها در ستون دوم این جدول قابل مشاهده است.

جدول1: مقایسه نتایج حاصل از این پژوهش با دیگر مقالات

نام الگوریتم	سال انتشار /مرجع	مجموعه داده	RMSE(K)	R2
CNN	2020/[9]	DataS(6198)	12.02	0.831
Deep Learning	2021/[7]	DataK(13000)	-	0.920
GBDT	2020/[9]	DataS	10.92	0.873
XGBoost	2018/[10]	DataH(21263)	9.5	0.92
Random Forest	2018/[3]	DataS	-	0.876
ConvGBDT	2020/[9]	DataS	8.93	0.907
ConvGBDT	2020/[9]	DataH	8.69	0.937
ConvGBDT	2020/[9]	DataK	8.83	0.931
Catboost	**This work**	**13562**	**6.19**	**0.956**

مقاله [3] از یک مدل کلاس‌بندی برای مواد ابررسانا استفاده کرده است تا تعیین کند که چه ترکیب‌هایی قابلیت ابررسانا شدن را دارند. در نهایت مدلی که طراحی کرده‌اند، 35 ترکیب را به عنوان کاندیدهای مواد ابررسانا تشخیص داده است. در اینجا با استفاده از مدلی که طراحی کردیم، برای 10 ترکیب از این 35 ترکیب، دمای گذار آنها را پیش بینی کردیم که نتیجه آن در جدول 2 نشان داده شده است.

جدول2: پیش‌بینی دمای گذار مربوط به 10 ترکیب که به تشخیص مدل ارائه شده در مقاله [3] این ترکیب‌ها قابلیت ابررسانا شدن را دارند.

ترکیب	دمای گذار پیش بینی شده
$Rb_1As_1O_2$	16.669575
$K_1Sb_1O_2$	11.591027
$Cs_1Sb_1O_2$	11.598808
$Ag_1Cr_1O_2$	32.914078
$K_{0.8}Li_{0.2}Sn_{0.76}O_2$	17.91082
$Rb_1Se_1O_2F_1$	19.2702
$Cs_1Be_1As_1O_4$	15.712889
$K_1Te_1O_2F_1$	21.950878
$Na_3Ni_2Bi_1O_6$	38.142952
$Cs_3Al_1Ge_2O_7$	52.718166

نکته قابل توجه در جدول 2 این است که ستون دوم، دمای گذار پیش بینی شده توسط مدلی که در این کار ارائه گردید را نشان می‌دهد.

نتیجه گیری

تعیین دمای گذار یک ترکیب در آزمایشگاه کار زمان‌بر و پرهزینه‌ای است. استفاده از روش‌های محاسباتی دیگر نیز محدودیت‌های خاص خود را دارند که در مقدمه به برخی از آنها اشاره شد. روش‌های مبتنی بر هوش مصنوعی، به‌ویژه یادگیری ماشین در حوزه علم مواد موفقیت‌های چشمگیری داشته‌اند. هدف از این پژوهش طراحی یک مدل مبتنی بر الگوریتم‌های یادگیری ماشین بود که دمای گذار مواد ابررسانا را با دقت خوبی پیش بینی نماید. در این پژوهش از الگوریتم CatBoost استفاده شد که معیارهای ارزیابی مطلوب‌تری نسبت به کارهای مشابه در مقالات دیگر به‌دست آمد و این نشان می‌دهد که برای تعیین و پیش‌بینی دمای گذار یک ترکیب جدید، می‌توان از مدل ارائه شده در این کار استفاده نمود.

مرجع‌ها

[1] Schleder GR, Padilha AC, Acosta CM, Costa M, Fazzio A. From DFT to machine learning: recent approaches to materials science–a review. Journal of Physics: Materials. 2019 May 16;2(3):032001.
[2] Bedolla E, Padierna LC, Castañeda-Priego R. Machine learning for condensed matter physics. Journal of Physics: Condensed Matter. 2020 Nov 5;33(5):053001.
[3] Stanev V, Oses C, Kusne AG, Rodriguez E, Paglione J, Curtarolo S, Takeuchi I. Machine learning modeling of superconducting critical temperature. npj Computational Materials. 2018 Jun 28;4(1):1-4.
[4] Rupp M. Machine learning for quantum mechanics in a nutshell. International Journal of Quantum Chemistry. 2015 Aug 15;115(16):1058-73.
[5] Burke K. Perspective on density functional theory. The Journal of chemical physics. 2012 Apr 21;136(15):150901.
[6] Wei J, Chu X, Sun XY, Xu K, Deng HX, Chen J, Wei Z, Lei M. Machine learning in materials science. InfoMat. 2019 Sep;1(3):338-58.
[7] Konno T, Kurokawa H, Nabeshima F, Sakishita Y, Ogawa R, Hosako I, Maeda A. Deep learning model for finding new superconductors. Physical Review B. 2021 Jan 12;103(1):014509.
[8] Rao NT. A review on industrial applications of machine learning. International Journal of Disaster Recovery and Business Continuity. 2018 Nov 1;9:1-9.
[9] Dan Y, Dong R, Cao Z, Li X, Niu C, Li S, Hu J. Computational prediction of critical temperatures of superconductors based on convolutional gradient boosting decision trees. IEEE Access. 2020 Mar 19;8:57868-78.
[10] Hamidieh K. A data-driven statistical model for predicting the critical temperature of a superconductor. Computational Materials Science. 2018 Nov 1;154:346-54.
[11] Hancock JT, Khoshgoftaar TM. CatBoost for big data: an interdisciplinary review. Journal of big data. 2020 Dec;7(1):1-45.

گشتاور انتقالی آندریو در اتصال فرومغناطیس – ابررسانا بر روی سطح عایق توپولوژیک

مرتضی صالحی

گروه فیزیک ، دانشکده علوم پایه، دانشگاه بوعلی سینا ،65178 ، همدان، ایران.

چکیده

در حضور فرومغناطیسی القایی که دارای مولفه موازی با سطح یک عایق توپولوژیک است، اندازه و راستای این مولفه مکان مخروط‌های دیراک در فضای وارون را تغییر می‌دهد. این تغییر مکان منجر به تغییر راستای حرکت فرمیون‌های منتشر شده بر روی سطح درعبور از اتصال‌ها می‌شود. ما به صورت تئوری نشان دادیم که این تغییر مسیر برای بازتاب‌های آندریو در یک اتصال بین فرومغناطیس- ابررسانا نیز وجود دارد که منجر به اعمال یک گشتاور انتقالی ناشی از بازتاب آندریو به فصل مشترک اتصال خواهد شد. همچنین، به عنوان یک اثر قابل مشاهده در آزمایشگاه ،یک جریان هال موازی با فصل مشترک شارش پیدا می‌کند که اندازه آن متناسب با گشتاور انتقالی آندریو است و علامت آن نشان‌دهنده سهم موثر الکترون‌ها یا حفره‌ها در فرآیند ترابرد از فصل مشترک است.

واژه های کلیدی: *عایق توپولوژیک، فرومغناطیس هم صفحه، بازتاب آندریو، گشتاور انتقالی آندریو، جریان هال*

Andreev Transfer Torque at the ferromagnetic-superconductor junction on the surface of topological insulators

Morteza Salehi

Department of Physics, Bu-Ali Sina University, Hamadan, 65178, Iran.

Abstract

In the presence of in-plane ferromagnetism on the surface of topological insulators, the Dirac cone's location in the inversion space tunes with respect to its magnitude and direction. This change bends the propagation direction of fermions that transport over the junctions. We theoretically show a similar effect for Andreev reflection occurs at the ferromagnet-superconductor junction, which imposes an Andreev transfer torque on the interface of the junction. As an experimental signature, a Hall current flows parallel to the interface. Its value is comparable with the Andreev transfer torque, and its sign manifests the electron or hole contribution in the transport mechanism.

***Keywords**: Topological Insulators, in-plane ferrmagnetism, Andreev Reflection, Andreev Transfer Torque, Hall current.*

PACS No. 72, 74, 68

مقدمه

تلاش‌های اولیه برای مطالعه برهم‌کنش اسپین–مدار منجر به پیش‌بینی وجود عایق‌های توپولوژیک در دو بعد شد[۱]. عایق‌های توپولوژیک موادی هستند که در کپه خود گاف انرژی دارند اما حالت‌های سطحی آنها بدون گاف است و توسط تناظر کپه–لبه نسبت به اختلال مقاوم است. این حالت‌های سطحی دارای رابطه پاشندگی خطی مانند فرمیون‌های دیراک در گرافین هستند. در گرافین اندازه حرکت به درجه آزادی شبه‌اسپین (ناشی از تقارن زیرشبکه) جفت شده است در صورتی که در عایق‌های توپولوژیک این جفت‌شدگی بین اندازه حرکت و اسپین واقعی فرمیون‌ها رخ می‌دهد. اندکی بعد از کشف عایق‌های توپولوژیک دو بعدی، نسخه سه بعدی آنها نیز در موادی مانند Bi_2Se_3 پیش‌بینی و کشف شد[۲]. مطالعه حالت‌های سطحی در عایق‌های توپولوژیک توجه بسیار زیادی را در سال‌های اخیر به خود معطوف کرده است. القاء

مغناطش یا ابررسانایی به این حالت‌های سطحی به واسطه مجاورت آنها با الکترودهای مغناطیسی یا ابررسانایی مطالعه این دو پدیده در یک ماده با برهم‌کنش قوی اسپین–مدار را دسترس پذیر کرده است. در این تحقیق ما به مطالعه ترابرد یک اتصال مابین فرومغناطیس–ابررسانا در یک ماده عایق توپولوژیک می‌پردازیم. ما نشان می‌دهیم که اگر ابررسانایی به صورت موج s القاء شده باشد و فرومغناطیسی مولفه‌ای موازی با سطح عایق توپولوژیک داشته باشد، راستای انتشار فرمیون‌های دیراک در بازتاب از این فصل مشترک دچار تغییر خواهد شد. این تغییر همراه با اعمال یک گشتاور انتقالی به فصل مشترک خواهد بود. اندازه این گشتاور انتقالی متناسب با جریان هال خواهد بود که موازی با فصل مشترک شارش خواهد کرد.

چارچوب تئوری:

هامیلتونی موثر حاکم بر حرکت فرمیون‌های دیراک در سطح یک عایق توپولوژیک در حضور فرومغناطیسی با رابطه زیر توصیف می‌شود[۲، ۳]،

$$H_e(k) = \hbar v_F\,(\boldsymbol{\sigma}\times\boldsymbol{k}).\hat{e}_z - (\boldsymbol{m}.\boldsymbol{\sigma}) \qquad (۱)$$

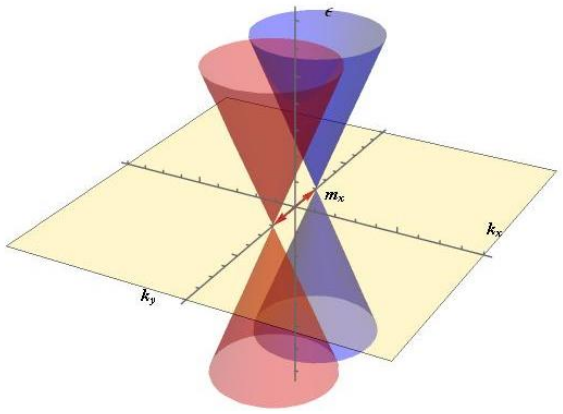
که σ و k اسپین و بردار موج هستند. همچنین، **m** مغناطش موثر جفت شده به درجه آزادی اسپین ذره و v_F سرعت فرمی است. برای سادگی ضریب $\hbar v_F = 1$ قرار می‌دهیم. در حضور ابررسانایی و تقارن الکترون–حفره ناشی از القاء ابررسانایی موج s در ماده، شبه‌ذرات الکترون–گونه و حفره–گونه از معادله بوگولیوبوف–دوژن که به صورت زیر نوشته می‌شود، تبعیت خواهند کرد[٤]،

$$\begin{pmatrix} H_e(k)-\mu & \Delta \\ \Delta^* & \mu - H_e(-k)\end{pmatrix}\begin{pmatrix} u \\ v\end{pmatrix} = \varepsilon\begin{pmatrix} u \\ v\end{pmatrix} \qquad (۲)$$

کمیت Δ پارامتر نظم مختلط ابررسانایی موج s است و ε پتانسیل شیمیایی است. همچنین ε ویژه مقدار انرژی متناظر با حالت‌های الکترون–گونه یا حفره–گونه شبه ذرات است. همان‌طور که در قسمت (a) شکل ۲ نشان داده شده است، ساختار تک اتصالی که در نظرگرفتیم در ناحیه $x \le 0$ فرومغناطیس و در ناحیه $x > 0$ ابررساناست. برای فرومغناطیسی هم‌صفحه ویژه مقادیر انرژی ذرات الکترون–گونه و حفره–گونه به صورت زیر بدست می‌آیند،

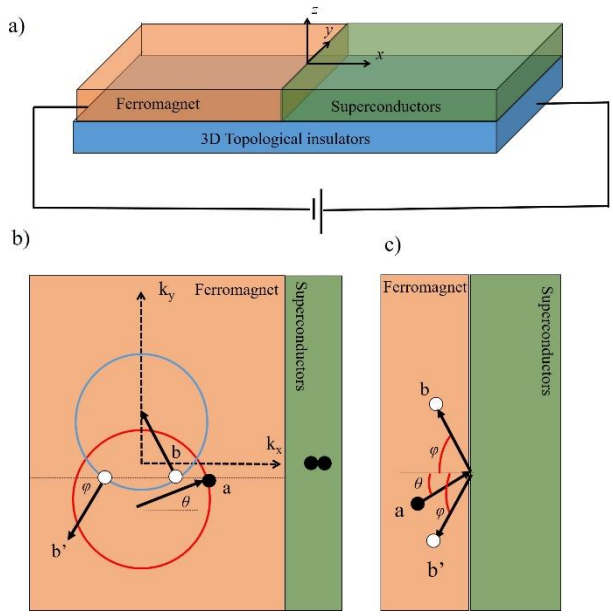
$$\varepsilon_e = \pm\sqrt{(k_x+m_y)^2+(k_y-m_x)^2}-\mu$$
$$\varepsilon_h = \pm\sqrt{(k_x-m_y)^2+(k_y+m_x)^2}+\mu \qquad (۳)$$

رابطه (۳) نشان می‌دهد که در حضور فرومغناطیسی هم‌صفحه، مخروط‌های دیراک الکترون–گونه و حفره–گونه در فضای اندازه حرکت به اندازه $2\sqrt{m_x^2+m_y^2}$ از یکدیگر جدا می‌شوند. این نکته در شکل ۱ نشان داده شده است. در این شکل محور عمودی انرژی و مخروط قرمز رنگ الکترون–گونه و مخروط آبی رنگ حفره گونه است.



شکل ۱- جدا شدن مخروط‌های دیراک الکترون–گونه و حفره–گونه در فضای اندازه حرکت در حضور فرومغناطیسی هم صفحه. در حضور m_x مقدار این جداشدگی به اندازه $2m_x$ خواهد بود [۲].

اگر یک اتصال مانند قسمت (a) شکل ۲ در نظر بگیریم، یک الکترون فرودی از سمت فرومغناطیس این شانس را دارد که در برخورد با فصل مشترک به صورت یک حفره بازتاب کند، این فرآیند که به بازتاب آندریو شناخته می‌شود منجر به انتقال یک زوج کوپر به داخل ماده ابررسانا می‌شود. در شرایط بالستیک برای ذره فرودی در فرآیند پراکندگی انرژی ذره و مولفه اندازه حرکت آن موازی با فصل مشترک (در اینجا مولفه k_y) بقاء خواهند داشت. یک بازتاب آندریو برای یک ذره الکترون–گونه در فضای اندازه حرکت در قسمت (b) شکل ۲ در موقعیت a با یک دایره مشکی رنگ نشان داده شده است. ذره در فضای حقیقی در راستای سرعت گروه خود حرکت می‌کند، این راستا متناظر با برداری است که از مرکز دایره قرمز رنگ (که نشان دهنده مکان ذره با انرژی ε بر روی مخروط دیراک از زاویه بالا است) به سمت مکان



شکل ۲- (a) ساختار اتصالی فرومغناطیس ابررسانا در آزمایشگاه با استفاده از دو الکترود فرومغناطیسی و ابررسانایی را بر روی سطح ابررسانا القاء می‌کنیم. (b) فرآیند پراکندگی در فضای اندازه حرکت برای بازتاب آندریو در حد بالستیک، فرمیون فرودی در موقعیت a با راستای انتشار θ و حفره های بازتابیده متناظر در دو موقعیت b برای بازتاب آینه‌ای و b' برای بازتاب بازگشتی نشان داده شده‌اند. (c) فرآیند پراکندگی در فضای واقعی برای بازتاب آندریو نشان داده شده در قسمت (b).

قرار گیری ذره کشیده است و نشان دهنده انتشار ذره با زاویه θ نسبت به محور عمود بر اتصال است. حفره بازتابیده، که با دایره سفید رنگ نشان داده شده است، نیز دارای انرژی ε است و در صورتی پایدار خواهد بود که بتواند یک جای خالی بر روی دایره آبی رنگ (نشان دهنده مکان حفره‌ها بر روی مخروط دیراک حفره-گونه) برای خود بیابد. اگر این جای خالی در نوار ظرفیت قرار داشته باشد، بازتاب متناظر با موقعیت b آینه‌ای خواهد بود و اگر در نوار رسانش قرار داشته باشد بازتاب متناظر با موقعیت b' بازگشتی خواهد بود. فرآیند بازتاب آندریو توضیح داده شده در بالا در فضای حقیقی در قسمت (c) شکل ۲ نشان داده است. این اثر بخوبی نشان می‌دهند که جفت‌شدگی بین فرومغناطیسی و اسپین از یک سو و جفت‌شدگی بین اسپین و اندازه حرکت از سوی دیگر منجر به تغییر مسیر حرکت الکترون و حفره در بازتاب آندریو می‌شود.

برای الکترون فرودی بر فصل مشترک این احتمال نیز وجود دارد که در اثر برخورد با فصل مشترک با یک بازتاب نرمال مواجه شده و به صورت یک الکترون بازتاب کند.

ضرایب بازتاب نرمال، r ، و بازتاب آندریو، r_A ، و همچنین احتمال عبور را با استفاده از پیوستگی تابع موج کل بر روی فصل مشترک می‌توان بدست آورد.

$$\Psi_e^+ + r\Psi_e^- + r_A\Psi_h^- = t_e\Psi_e^{s+} + t_h\Psi_h^{s-} \qquad (٤)$$

این ضرایب برای محاسبه جریان عبوری از فصل مشترک مناسب هستند.

حال اگر مولفه z ام موج چگالی اسپینی را به صورت $S_z = \Psi^\dagger\sigma_z\Psi$ در نظر بگیریم، که Ψ و $\Psi^\dagger$ عملگرهای نابودی و خلق در کوانتش دوم باشند، رابطه (۲) را نیز می‌توانیم در کوانتش دوم بازنویسی کنیم. آنگاه با استفاده از معادله حرکت هایزنبرگ می‌توانیم یک معادله دینامیکی برای مولفه z چگالی موج اسپینی به صورت زیر بدست آوریم،

$$\frac{\partial S_z}{\partial t} + \nabla.\boldsymbol{J}_z^s = dT_z \qquad (٥)$$

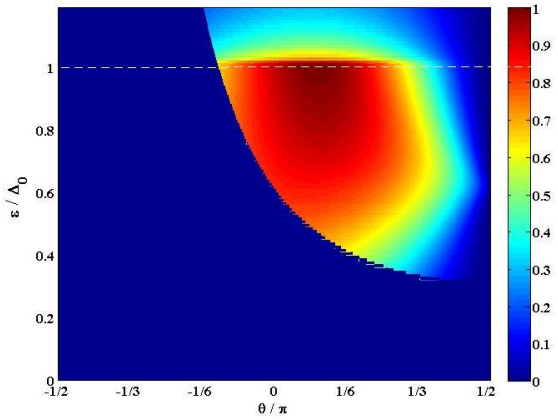
که $J_z^s = i\,\boldsymbol{J}\times\hat{e}_z$ چگالی جریان وابسته به موج اسپینی است و نشان دهنده چرخش جریان در فصل مشترک است. همچنین، dT_z چگالی گشتاور انتقالی ناشی از چرخش جریان در اتصال است[٥]. این چرخش جریان تماما به واسطه بازتاب آندریو رخ می‌دهد لذا ما آن را گشتاور انتقالی آندریو نام‌گذاری می‌کنیم. در شرایط پایا، چگالی موج اسپینی مستقل از زمان یعنی $\partial_t S_z = 0$ است. انجام انتگرال بر روی کل فضا در رابطه (٥) و اعمال قضیه دیورژانس به رابطه زیر منجر می‌شود،

$$T_z = \int dT_z = \int \nabla.J_z^s d^3r = \oint(\boldsymbol{J}\times\hat{e}_z).d\boldsymbol{l} \qquad (٦)$$

که انتگرال حلقه بر روی فصل مشترک گرفته می‌شود. این رابطه به وضوح نشان‌دهنده این است که چرخش جریان در فصل مشترک منجر به اعمال یک گشتارو در راستای عمود بر سطح عایق توپولوژیک می شود. بدلیل ماهیت دو بعدی سطح عایق توپولوژیک سایر مولفه‌های گشتاور انتقالی آندریو صفر بدست می‌آید.

نتایج

همان‌طور که در بخش تئوری نشان دادیم، در حضور فرومغناطیس هم‌صفحه فصل مشترک اتصال فرومغناطیس و ابررسانا نسبت به راستای انتشار ذره حساس خواهد بود. لذا شبه ذراتی که در راستاهای مشخصی حرکت کنند این شانس را خواهند داشت تا بازتاب آندریو با احتمال غیرصفر داشته باشند. در شکل ۳ احتمال بازتاب آندریو بر حسب زاویه فرودی ذره الکترون-گونه رسم شده است. برای سادگی تنها مولفه $m_x = 0.3$ در نظر گرفته شده است. یک گاف غیر مستقیم ناشی از عدم هم‌پوشانی مخروط‌های دیراک تا $\varepsilon = m_x$ در نمودار مشخص است.



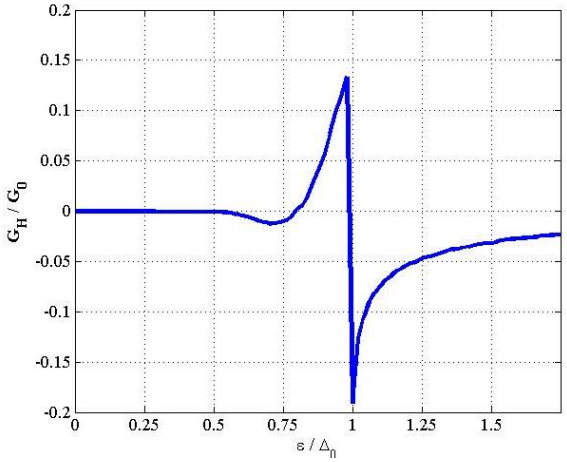
شکل ۳- احتمال بازتاب آندریو بر حسب زاویه الکترون فرودی، محور افقی زاویه فرود نسبت به محور عمود بر فصل مشترک را مشخص می‌کند و محور عمود بر حسب انرژی رسم شده است.

علاوه بر آن در انرژهای بالاتر احتمال بازتاب آندریو کاملا وابسته به راستای فرود ذره است. این وابستگی به زاویه مطابق با شکل ٤ منجر به شارش یک جریان هال خواهد شد.

$$G_H = \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \left((1-|r|^2)Sin\theta + |r_A|^2 sin\varphi\right) d\theta \qquad (۷)$$

از آنجاییکه بار الکتریکی عامل جریان رسانندگی طولی و هال یک کمیت بقادار ا ست. مقدار چرخش جریان در را ستای طولی متناظر با مقدار جریان ایجاد شده در راستای هال است. لذا براحتی می‌توان نشان داد که گشتاور انتقالی آندریو با اندازه جریان هال به صورت زیر رابطه دارد،

$$T_z = \oint J_y dx - J_x dy = 2\, A\, G_H \qquad (۸)$$



شکل ٤- جریان هال بهنجار شده نسبت به جریان عبوری سطح عایق توپولوژیک. علامت مثبت و منفی جریان نشـان دهنده سـهم غالب حالت‌های الکترون گونه یا حفره گونه در جریان هال است.

از طرفی علامت جریان نشان‌دهنده سهم غالب حالت‌های الکترون-گونه یا حفره-گونه در جریان هال است.

جمع‌بندی

در این مقاله نشان دادیم که بر روی سطح یک عایق توپولوژیک در یک اتصال فرومغناطیس-ابررسانا در صورتی که فرومغناطیسی هم‌صفحه داشته باشیم، احتمال بازتاب آندریو و بازتاب نرمال بسته به راستای انتشار ذره فرودی تغییر خواهد کرد. این وابستگی سبب شارش یک جریان هال موازی با فصل مشترک اتصال خواهد شد. همچنین این چرخش جریان یک گشتاور انتقالی آندریو بر فصل مشترک وارد خواهد کرد که اندازه آن با جریان هال شارش پیدا کرده متناسب است.

مرجع‌ها

[۱] C. L. Kane and E. J. Mele, "Z_{2} Topological Order and the Quantum Spin Hall Effect," *Phys. Rev. Lett.* **95** , 146802 (2005).
[۲] M. Z. Hasan and C. L. Kane, "Colloquium: Topological insulators," *Rev. Mod. Phys.* **82**, 3045 (2010).
[۳] D. Hsieh, *et al.* "A tunable topological insulator in the spin helical Dirac transport regime" Nature **460**, 1101 (2009).
[۴] Y. Tanaka, T. Yokoyama and N. Nagaosa, "Manipulation of the Majorana Fermion, Andreev Reflection, and Josephson Current on Topological Insulators," *Phys. Rev. Lett.* **103**, 107002 (2009).
[۵] Razieh Beiranvand and Morteza Salehi, " Current Transfer Torque and Hall conductance at the ferromagnetic topological insulators junction" *J. Phys.:Condens. Matter* **33** 325401 (2021.

ساخت YBCO با استفاده از روش حالت جامد و سل-ژل خوداحتراقی و بررسی خواص ساختاری و ابررسانایی آن

ترابی ، زینب[۱،۲]؛ الماسی ، محمد[۱] ؛ نجات بخش، نوید[۲] ؛ مکاریان ، محمدحسین [۲]

[۱] پژوهشکده علوم و فناوری نانو دانشگاه کاشان ، کیلومتر ٦ بلوار قطب راوندی ، کاشان- اصفهان

[۲] گروه مواد و فیزیک، شرکت بهیار صنعت سپاهان ،اصفهان

چکیده

در این تحقیق ابررسانای YBCO با استفاده از روش های حالت جامد و سل-ژل-احتراقی ساخته شد و اثر تغییر برنامه دمایی پخت بر تشکیل فاز Y123 مورد بررسی قرار گرفت. روش سل ژل- خوداحتراقی به جهت ساخت نانوذرات YBCO با خواص پذیرفتاری مغناطیسی مناسب تر، انتخاب شد. خواص ساختاری ومغناطیسی نمونه ها با طیف سنجی پراش اشعه ایکس (XRD)، طیف سنجی فلورسانس اشعه ایکس (XRF)، پذیرفتاری مغناطیسی (AC Susceptibility)، مورد بررسی و مطالعه قرار گرفت. طیف پراش اشعه X و طیف فلورسانس اشعه X نشان می دهد فاز ابررسانای Y:123 تولید شده است و مطالعه پذیرفتاری مغناطیسی نمونه نهایی نشان دهنده گذار ابررسانایی در دمای ۹۰ کلوین را نشان می دهد.

واژه های کلیدی: ابررسانای پایه ایکو ؛ فاز Y123؛ دمای سینترینگ ؛سل ژل ؛حالت جامد

Fabrication of YBCO using solid state and self-ignition sol-gel method and investigation of its structural and superconducting properties

Torabi, Zeinab[1]; Almasi, Mohammad[2]; Najatbakhsh, Navid[3]; Mokariaan, Mohammad hossein[4]

[1] Research Institute of Nanoscience and Technology, University of Kashan, Isfahan,
[2] Department of Physics and material, medical equipment Mfg Co., Isfahan,

Abstract

In this study, YBCO superconductors were fabricated using solid state and solgel-combustion methods and the effect of changing the sintering program on the formation of Y123 phase was investigated. The self-combustion sol-gel method was selected to fabricate YBCO nanoparticles with more suitable magnetic conductivity properties. Structural properties of the samples were studied by X-ray diffraction (XRD), X-ray fluorescence (XRF), magnetic susceptibility (AC Susceptibility). X-ray diffraction spectrum and X-ray fluorescence spectrum indicate that the superconducting phase Y: 123 has been generated, and the final sample magnetic susceptibility study shows the superconducting transition at 90 K.

***Keywords**: YBCO base superconductor. Phase Y123; Sintering temperature; sol-gel; solid state*

PACS No. 74

مقدمه

مواد ابررسانا موادی هستند که در دمای بسیار پایین مقاومت الکتریکی و میدان مغناطیسی آنها از بین میرود، اما میزان شار جریان عبوری از آنها نیز دارای یک بیشینه مشخص برای هر ماده است.(به عبارت دیگر مواد ابررساناها اگر دمایشان از یک دمای بحرانی T_C کمتر شود، مقاومت الکتریکی در آنها به صفر خواهد رسید)[۱] . ترکیب $YBa_2Cu_3O_{7-x}$ که به اختصار YBCO یا Y:123 نامیده می شود، به دلیل دمای ابررسانایی بالا که در حدود دمای تبخیر نیتروژن مایع است، از معروفترین و پرکاربردترین مواد ابررسانا به خصوص در مواردی که به تولید فیلم نازک نیاز هست، مانند سنسورهای اسکوییدی است. در ابتدا آماده سازی احجام ابررسانا با استفاده از روش تجاری سرامیک به وسیله تعداد زیادی از دانشمندان انجام شد. در این روش ها از ترکیب پودر اکسید عناصر سازنده یعنی مس، باریم و ایتریم با نسبت مناسب و سپس فشردن و تفجوشی، پودر ابررسانا تولید می شود. تخلخل بالای ذاتی روش متالورژی پودر و همچنین همگنی ضعیف ناشی از عدم اختلاط بهینه

پودرها در فاز جامد و وابستگی به اندازه ذرات پودر، علیرغم تولید ابررسانا در مدت زمان اندک، سبب شد تا دانشمندان به دنبال روش های جایگزین جهت رفع عیوب باشند [۲] .

روش سل ژل خود احتراق به دلیل توانایی در کنترل مناسب استوکیومتری و تولید ذرات همگن با اندازه زیرمیکرومتر مورد توجه بوده است. یکی از مهمترین گامها در این روش، بهینه سازی فرایند تکلیس و تولید ماده ابررسانا با خلوص مناسب است. پس از تولید نمونه به روش سل ژل خود احتراق پودر تولیدشده باید تکلیس شود تا واکنشها کامل و مواد اضافه ازترکیب خارج شوند. در طی گرمادادن تعادلی ترکیب Y:123، در حدود ۱۰۲۰ تا ۱۰٤۰درجه سانتیگراد این ماده به صورت پریتکتیک به ترکیبات CuO، Y_2BaCuO_5و $BaCuO_2$ تجزیه خواهد شد. فاز ارتورومبیک $Y_1Ba_2Cu_3O_7$در دمای بالاتر از۶۵۰درجه سانتیگراد ناپایدار خواهد بود. در ۹۰۰ تا ۹۵۰ درجه سانتیگراد اندیس محتوای اکسیژن ترکیب کمتر از ۵/٦ بوده و ساختار تتراگونال خواهد شد. اگر ماده از این حالت کوئنچ شود، ابررسانا نخواهد بود. برای دستیابی به محتوای اکسیژن مطلوب (نزدیک به۷) ماده می بایست به مدت طولانی در اکسیژن در محدوده دمایی ٤۰۰ تا ۵۰۰ درجه سانتیگراد آنیل شود، تا محتوای اکسیژن افزایش یابد. همچنین آنیل در حدود ۹۰۰ درجه سانتیگراد در حضور جریان اکسیژن در مدت زمان کوتاه و سپس سرد کردن آرام در اتمسفر اکسیژن مفید خواهد بود [۳] .

ساخت

ساخت نمونه YBCO -A به روش حالت جامد

مواد اولیه مورد استفاده در روش حالت جامد، اکسیدهای CuO ، CaO، BaO، YO می باشد. پس از توزین مواد، مواد اولیه در محیط پروپانول برای شکستن آگلومره ها و شکستن ذرات درشت و همچنین هموژناسیون پودرهای اولیه فرآیند، به مدت ۳ ساعت آسیاب شدند. در فرایند سایش با هدف سایش خیس و رسیدن به ذرات ریزتر و محیط استریل برای ترکیب شدن پیش ماده های ترکیب ایبکو از ایزوپروپانول استفاده میکنیم .برای خشک شدن، پودر مخلوط شده را در دمای $120\ ^{o}C$ درون آون قرار داده میشود . سپس پودر یکنواخت حاصل درون بوته کوارتز ریخته شد. بوته حاوی پودر، برای کلسیناسیون داخل کوره با دما $930^{o}C$ به مدت زمان کلسیناسیون ۱۲ ساعت تحت اکسیژن قرار می گیرد و با شیب ملایم خنک می شود پودر حاصل سیاه رنگ خواهد شد. بعد از عملیات سایش ، پودر به قالب منتقل می شود و با پرس و فشار ۲۰ بار ، قرص دیسک شکل به قطر ۲۰میلی متر و ضخامت۲ میلیمتر بدست خواهد آمد و با همان برنامه زینترینگ نیز انجام می شد.

ساخت نمونهB- YBCO به روش سل ژل

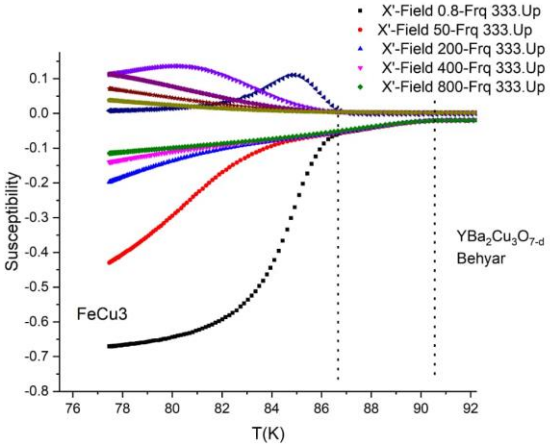
این روش بر مبنای تولید محلول مناسبی از نیترات عناصر سازنده YBCOو ایجاد ژل خود احتراق است. مقادیر مناسبی از ترکیبات $Y(NO_3)_3$، پودر $Ba(NO_3)_2$و پودر $Cu(NO_3)_2$ واسید سیتریک انتخاب شد و محلول آبی هر ترکیب با آب دیونیزه ساخته شد و برروی هیتر استیرر با دمای ٦۰ درجه قرار گرفت. سیتریک اسید به محلول اضافه می شود، در این مرحله از فرایند، یون های NO_3- از ترکیب نیترات های فلزی خارج میشود و اسید سیتریک که در محیط های اسیدی با ظرفیت یک شرکت میکند، جایگزین آن خواهد شد با ادامه روند تهیه سل و تبخیر آب و تبدیل به ژل ، این یون مجدد به نیترات باریم تبدیل می شود و نیترات باریم در نهایت رسوب می کند. پس بایستی به نسبت فلزات از سیتریک اسید استفاده شود. در این مرحله محلول به دلیل تشکیل رسوبات سفید رنگ نیترات باریم به رنگ سبزآبی متمایل می شود. در ادامه آمونیوم هیدروکسید قطره قطره اضافه می شود در این مرحله یون Cit_3- بیشتری تشکیل می شود و ترکیب پیوند های قوی تری با یون باریم تشکیل خواهد داد. نهایتا رسوب از بین می رود و محلول بنفش رنگی حاصل می شود. در فرایند تنظیم PH، همراه با آمونیوم هیدروکسید ،از اتیلن دی امین (محلول بازی قوی) استفاده می شود تا سریعتر به PH مد نظر (٦/۵ تا ۷) دست یابیم. سل درحمام آب ودر دمای $100^{o}C$ قرار می گیرد تا آب محلول تبخیر شود و ژل شکل بگیرد . حباب های گازی در ژل پدیدار می شود که ناشی از واکنش های بین اسید سیتریک و آمونیوم هیدروکسید هستند. ژل را منتقل به ظرف

استیلی کرده و تحت دما ^{o}C ۳۷۰ قرار می گیرد و ژل به ماده جامد به شکل فوم چسبناک سیاه رنگی تبدیل می شود و در نهایت فرایند خوداحتراقی رخ می دهد و تبدیل به پودر کرک مانندی می شود.(روند این تغییرات در شکل۱ نشان داده شده است). بعد از فرایند آسیاب در هاون عقیقی به مدت ۲۰ دقیقه پودر نرمی حاصل می شود و فرایند کلسینه در دمای ^{o}C ۸۵۰ تحت گاز اکسیژن به مدت ۲٤ ساعت قرار می گیرد. بعد از کلسینه ماده مجددا تحت فرایند سایش در هاون عقیق قرار میگیرد و در قالب با ابعاد مشخص پودر ریخته می شود و قرصی با قطر ۱۸/۸۲ میلی متر و ضخامت ۲ میلی متر بدست آمد. در دمای ^{o}C ۹۲۰ تحت گاز اکسیژن به مدت ۲٤ ساعت قرار میگیرد و فرایند خنک سازی با rate ۱ °C/min انجام می شود و برای اکسیژن گیری بهتر در دمای ^{o}C ۵۰۰ به مدت ۵ تا ٦ ساعت می ماند. [٤و٥] .

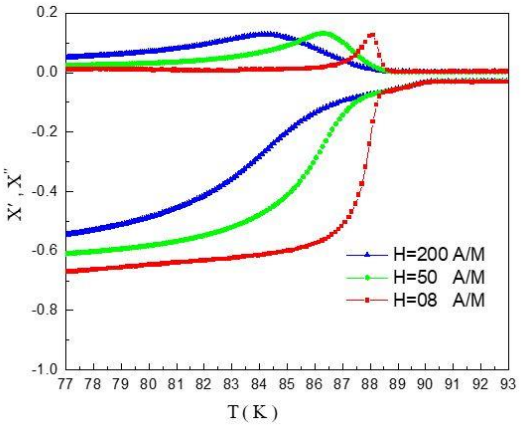
شکل۱: روند تغییرات سل ژل خود احتراق تولید ابررسانای دمابالا

نتایج

مواد ابررسانا با دو ویژگی خاصیت دیامغناطیس و مقاومت صفر شناسایی می شود. در این پژوهش به علت عدم دسترسی به تست مقاومت بر حسب دما، با استفاده از تست پذیرفتاری مغناطیسی خاصیت ابررسانایی ماده مد نظر، مورد بررسی قرار گرفته است. .پذیرفتاری مغناطیسی بر حسب دما توسط دستگاه پذیرفتاری سنج ACS7000 ساخت شرکت Lake-Shore مدل ۷۰۰۰ انجام شد، داده های بسیار مفید و حساس از اندازه گیری مولفه های حقیقی (χ')و موهومی (χ'') پذیرفتاریAC این نمونه ها بدست می آید. داده های پذیرفتاری مغناطیسی نمونه در فرکانس ۳۳۳ هرتز و میدان های A/m ۰/۸، ۵۰، ۲۰۰، ٤۰۰ ، ۸۰۰ و در دمای ۷۰ تا ۱۰۰ کلوین اندازه گیری شده است. بهترین بلور YBCO فقط ی قله تیز در قسمت موهومی و یک پله تند در قسمت حقیقی نشان می دهد .پذیرفتاری مغناطیسی نمونهA ساخته شده به روش حالت جامد در شکل۲ نشان داده شده است و بیشترین میزان پذیرفتاری مغناطیسی حدود $\chi = -$۰/۷ در میدان A/m ۰/۸ (~۰/۰۱Oe) اندازه گیری شده است. همچنین در منحنی قسمت حقیقی دو پله دیده می شود که نشان دهنده حضور فاز دوم Y211است.



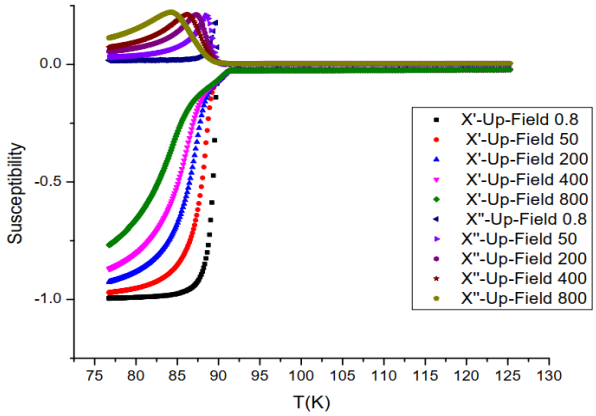
شکل۲: پذیرفتاری مغناطیسی$YCa_2Cu_3O_7$ در میدان های مختلف (نمونهA ساخته شده به روش حالت جامد)



شکل۳ : پذیرفتاری مغناطیسی$YCa_2Cu_3O_7$ در میدان های مختلف (نمونه B ساخته شده به روش سل ژل خود احتراقی)

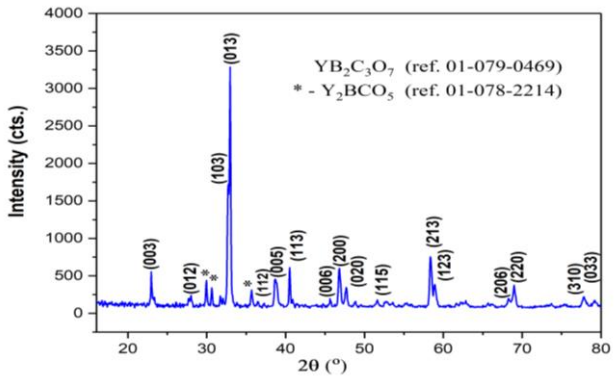
پذیرفتاری مغناطیسی نمونه ای که به روش سل ژل خود احتراق ساخته شده در شکل ۳ نشان داده شده است و همانطور که در تصویر دیده می شود نتایج گذار مشابه با نمونه A می باشد و همچنان گذار به χ= −۱ نرسیده است. اما پهنای پیک های قسمت موهومی پذیرفتاری مغناطیسی، با افزایش میدان اعمالی افزایش یافته که ناشی از گذار بین دانه ای در این نمونه است. این تغییردر قسمت موهومی میتواند به اندازه و مورفولوژی ذرات مرتبط باشد. نمونه C در شکل٤، افت تیزی از حالت نرمال به حالت

دیامغناطیسی- ابررسانایی در دمای ۹۰ کلوین(دمای گذار ابررسانایی (T_c)) را نشان می دهد که ناشی از گذار درون دانه ای است. بهبود گذار ابررسانایی در این منحنی نسبت به منحنی پذیرفتاری نمونه B به علت تغییر در rate خنک سازی فرایند پخت و افزایش زمان اکسیژن گیری است که منجر به تشکیل فاز کامل Y123 وگذار کامل ابررسانایی شده است.

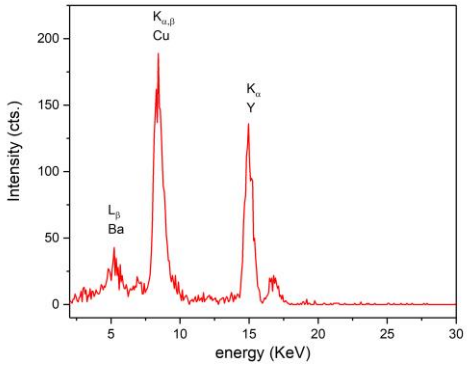


شکل٤ :پذیرفتاری مغناطیسی$YCa_2Cu_3O_7$ در میدان های مختلف (نمونه C ساخته شده به روش سل ژل خود احتراقی و دما دهی متفاوت)

در شکل ٥ الگو پراش پرتو X نمونهC نشان داده شده و با کارت شماره(٠٤٦٩-٠٧٩-٠١-ref) تطبیق دارد، طیف دارای پیک های مرتبط با فاز Y:123است. همچنین پیک های مرتبط با ترکیب Y:211با شدت بسیار اندک مشهود است. طیف سنجی فلورسانس اشعه ایکس XRF نمونه C در شکل ٦ نشان داده شده و پیک های مرتبط با عناصر تشکیل دهنده YBCO را نشان می دهد . در این آنالیز عنصر اکسیژن قابل شناسایی نیست زیرا انرژی اکسیزن ٠/٥٢. کیلوالکترون ولت است که دستگاه های XRF نشان نمی دهند.



شکل٥ : XRDالگوی پراش پرتو X برای نمونه F



شکل٦: طیف سنجی فلورسانس اشعه ایکس XRF نمونه F

نتیجه گیری

در این پژوهش نمونه های ابررسانای دما بالا $YBa_2Cu_3O_{7-x}$ با دو روش حالت جامد و سل ژل خوداحتراق ساخته شد. پس از بررسی و مطالعات خواص بلوری، ساختاری و مغناطیسی، نمونهC با گذار کامل ابررسانایی در دمای بحرانی ۹۰ کلوین و همچنین با پیدایش پیک های عناصر تشکیل دهنده در آنالیزXRF ، به عنوان نمونه ای مناسب، برای تولید فیلم نازک حسگر اسکوییدی شناسایی شد.

سپاسگزاری

از همکاری استاید بزرگوار دکتر حمیده شاکری پور و دکتر مهدی رنجبر و همکاران محترم در شرکت بهیار صنعت سپاهان صمیمانه تشکر می‌کنیم. اینکار با پشتیبانی معنوی و مادی بهیار صنعت سپاهان انجام شد.

مرجع‌ها

[۱] Malozemoff, A.P., Fleshler, S.,Rupich, M., Thieme, C., Li, "Progress in HTS Coated Conductors and Their Applications"; *Superconductor Science and Technology*, Vol. 21, No. 3, pp. 1 – 12, 2008.

[۲] Maeda, H., Tanaka, Y., Fukutumi, M., Asano, T., "A New High-Tc Oxide Superconductor without a Rare Earth Element", Japanese Journal of Applied Physics, No. 27, pp. 209–210, 1988.

[۳] Liu, R.S., Wang, W.N., Chang, C.T., and Wu, P.T., "Synthesis and Characterization of High-Tc Superconducting Oxides by the Modified Citrate Gel Process", Journal of Applied Physics, L2155, 1989.

[۴] Schilling, A., "Superconductivity above 130 K in the Hg–Ba–Ca–Cu–O system", Nature, Vol. 363, No. 56, 1993.

[۵] Bednorz, J.G., and Muller, K.A., "Possible high Tc superconductivity in the Ba-La-Cu-O system", Zeitschrift für Physik B, Vol. 64, p. 189-193, 1986.

ساخت، مشخصه‌یابی و بررسی اثر نانوترکیب Al_2O_3 بر خواص ترابردی ابررسانای دمای بالای BSCCO (2223)

سرداری، فرزانه؛ دادمهر، وحید

آزمایشگاه پژوهشی مغناطیس و ابررسانا، دانشکده فیزیک شیمی، دانشگاه الزهرا، تهران

چکیده

ابررسانای BSCCO به روش سل-ژل تهیه و تأثیر آلاییدن درصدهای گوناگون نانوذرات Al_2O_3 بر تشکیل فاز و ویژگی‌های ابررسانایی آن بررسی شد. نتایج نشان می‌دهد که با آلایش ابررسانای BSCCO با نانوذرات Al_2O_3 قبل از مرحله‌ی زینتر، پیوند بین دانه‌ها افزایش می‌یابد. علاوه بر آن، نمونه‌های آلاییده شده با نانوذرات Al_2O_3 انرژی میخکوبی بیشتری در مقایسه با نمونه‌ی خالص داشته و این موجب افزایش چگالی جریان بحرانی (Jc) خواهد شد. بنابراین خواص ساختاری، الکتریکی و بلوری با آلایش نمونه‌ها با استفاده از نانوذرات Al_2O_3 قبل از مرحله‌ی زینتر در ابررسانای دمای بالای BSCCO-2223 بهبود می‌یابد.

واژه های کلیدی: *ابررسانای دمای بالای پایه بیسکو (BSCCO)، میخکوبی شار، دمای بحرانی (Tc)، جریان بحرانی (Jc).*

Preparation & Characterization and Investigation of Al_2O_3 Nanoparticles on Properies of BSCCO Superconductor

Sardari, Farzaneh; Daadmehr, Vahid

Magnet & Superconducting RES. Lab, Department of Physics and Chemistry, University of Alzahra, Tehran

Abstract

BSCCO superconductor has been made by sol-gel method and investigated the effects of adding different percentage of Al_2O_3 nanoparticles on the phase formation of BSCCO anf it's superconductivity features. The result indicates when Al_2O_3 nanoparticles added before sintering, coupling between grains increased. Moreover, the samples with added Al_2O_3 nanoparticles has more pinning energy in comparison to the non-added Al_2O_3 nanoparticles and it will increase the critical current (Jc). Therefore, the structural, electrical and crystallographic properties of the samples improved by adding Al_2O_3 nanoparticles before sintering process in the high temperature superconductor BSCCO-2223.

***Keywords**: High Temperature Superconductor of BSCCO, Pinning Center, Critical Temperature (Tc), Critical Current (Jc).*

PACS No. 61

مقدمه

ابررساناهای پایه بیسموت با فرمول عمومی $Bi_2Sr_2Ca_{n-1}Cu_2O_{2n+4+\delta}$ دارای سه فاز اصلی ۳ و ۲ ،۱=n هستند. در میان این فازها، فاز Bi-۲۲۲۳ (n=۳) با دمای بحرانی Tc=۱۱۰K به دلیل دمای بحرانی بالا بیشتر مورد توجه است. از زمان کشف ابررسانای دمای بالا در خانواده‌ی بیسموت‌دارها در سال ۱۹۸۸، تحقیقات گسترده‌ای برای بهبود خواص ابررسانایی انجام شده است [۱،۲]. در حالت کلی ابررساناهای بس‌بلوری را می‌توان به صورت آرایه‌ای از دانه‌های ابررسانا که به گونه‌ی ضعیفی با هم جفت شده‌اند، توصیف کرد. این ارتباط ضعیف بین دانه‌ای، مقدار چگالی جریان بحرانی Jc این مواد را محدود می‌کند. محدودیت اصلی سیستم ابررسانای Bi-۲۲۲۳ اتصال‌های ضعیف بین دانه‌ای و میخ‌کوبی شار پایین است[۳]. یکی از راه‌های افزایش میخکوبی شار، ایجاد نقایص بلورین در مرتبه‌ی طول همدوسی

است[۴]. از دیگر راههای افزایش میخکوبی شار، افزودن ناخالصی‌های نانومتری به مواد ابررساناست. خواص ابررسانایی در ابررساناهای دمای بالا با آلایش ناخالصی به شدت تغییر می‌یابد. زیرا ناخالصی‌ها برچگالی حفره‌های صفحات CuO_2 تاثیر می گذارند. علاوه براین، گذار ابررسانایی به مقدار حامل‌های بار متحرک به خصوص در صفحات CuO_2 وابسته است. بنابراین، چگالی حامل‌ها در اثر آلایش ناخالصی منجر به تغییر دمای گذار می شود. در این پژوهش تاثیر افزودن درصدهای گوناگون نانوذرات Al_2O_3 به ابررسانای Bi-۲۲۲۳ مورد بررسی قرار گرفته است.

روش‌های آزمایش

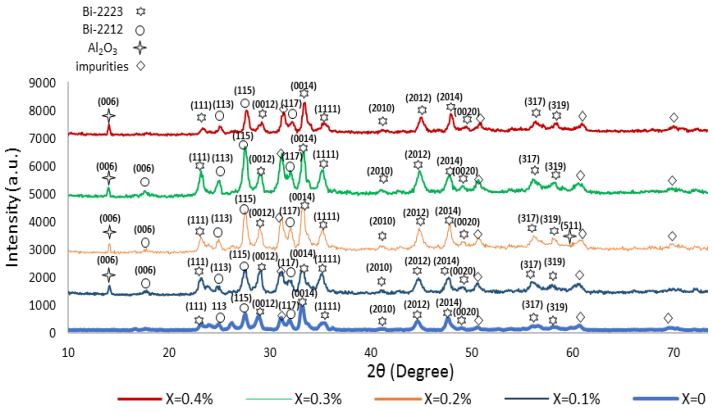
پس از استوکیومتری و توزین دقیق، ۲۰cc آب دیونیزه در بشر ریخته شد و روی همزن مغناطیسی قرار گرفت. پس از اینکه دمای آب به ۶۰°C رسید، نیترات بیسموت به آن افزوده شد. جهت حل شدن نیترات بیسموت، اسید نیتریک به محلول افزوده شد. سپس به ترتیب نیترات استرانسیوم و نیترات مس به ترکیب اضافه شده و محلول به رنگ آبی روشن درآمد. در مرحله‌ی آخر نیز نیترات کلسیم و نیترات سرب اضافه شد.

جهت تشکیل محلول پایه، EDTA به ۲۰ cc آب دیونیزه در دمای ۸۰°C اضافه شد. برای انحلال EDTA، آمونیاک به محلول اضافه گردید. سپس اتیلن گلیکول و اوره اضافه شد. در این مرحله محلول پایه تشکیل و فرآیند کامل شد. محلول تشکیل شده در مرحله‌ی قبلی توسط دکانتور به محلول پایه اضافه شد. با ادامه‌ی حرارت‌دهی محلول در دمای ۸۰°C روی همزن مغناطیسی، با تبخیر آب در طول چند دقیقه، سل به ژل تبدیل شد.

یک بار مرحله‌ی خشک کردن جهت خروج رطوبت و اکسیژن اضافی از محلول انجام و در این مرحله نمونه کاملا خشک شد. رسوب تشکیل شده با ساختار اسفنجی حاصل از خشک شدن از داخل بشر خارج و توسط هاون به مدت ۱ ساعت بطور کامل خرد شد. پودر خاکستری متمایل به سیاه همگنی بدست آمد و جهت کلسیناسیون، درون کوره قرار گرفت. طی دو بار کلسینایسیون، فازهای ناپایدار نمونه حذف و ساختار اولیه‌ی سلول تشکیل شد. قبل از مرحله‌ی زینتر، نانوپودر Al_2O_3 توزین شده جهت درصدهای وزنی مورد نظر ۰/۱، ۰/۲، ۰/۳ و ۰/۴ به نمونه‌ها اضافه شد. پودرها به بچ‌های یک گرمی تقسیم شده و هر بچ توسط قالب مخصوص به قطر ۱۳mm و با فشار ۵۰ Kg/cm^3 به ضخامت ۳-۲ mm درآمدند. قرص‌ها درون یک بوته‌ی آلومینایی قرار گرفته و برای انجام فرآیند زینترینگ به مدت ۱۳۰ ساعت در دمای ۸۳۵C° درون کوره قرار گرفت.

مشخصه‌یابی، تحلیل و نتایج

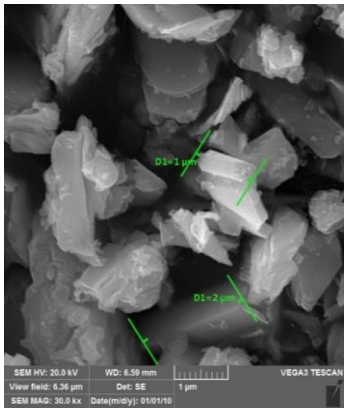
الگوهای پراش پرتو XRD نمونه‌ها به همراه شماره‌ی صفحات در شکل ۱ نشان داده شده است. همانگونه که مشاهده می‌شود، صفحات مربوط به فاز اصلی Bi-۲۲۲۳ و صفحات مربوط به فاز فرعی Bi-۲۲۱۲ در تمامی نمونه‌ها تشکیل شده است. اما صفحه‌ی شماره‌ی (۰۰۶) مربوط به فاز Bi-۲۲۱۲ در نمونه‌ی خالص و x=۰/۴ مشاهده نمی‌شود. پیک‌ها در تمامی نمونه‌ها بر هم منطبقند. صفحه‌ی شماره (۰۰۶) مربوط به آلایش Al_2O_3 و پیک‌های مربوط به ناخالصی‌ها نیز دیده می‌شود.



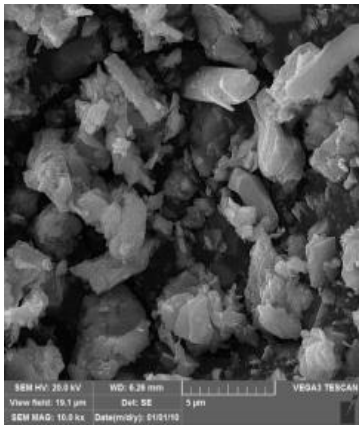
شکل۱: طیف XRD همه‌ی نمونه‌های ساخته شده به همراه شماره‌ی صفحات

به منظور بررسی ریزساختار، از نمونه‌ها SEM گرفته شد. تصاویر SEM نمونه‌ی خالص و نمونه‌ی X=۰/۴ در شکل ۲ نشان داده شده است. همان‌طور که دیده می‌شود، دانه‌های ابررسانا تشکیل صفحاتی داده‌اند که از جمله ویژگی‌های ابررسانای BSCCO است. در نمونه‌های ساخته شده تخلخل مشاهده می‌شود که با آلایش و افزایش آن، میزان تخلخل کاهش یافته و دانه‌های ابررسانا تماس بیشتری با یکدیگر خواهند داشت.

(الف)



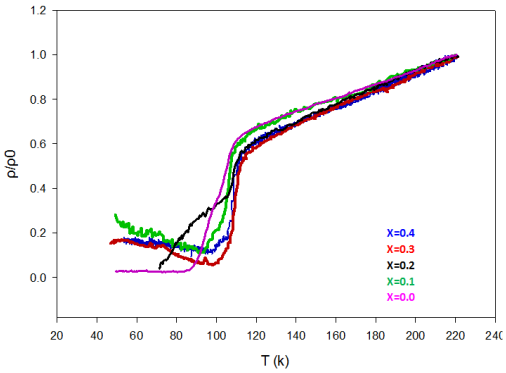
(ب)



شکل۲: تصویر SEM نمونه‌ی خالص (الف) و نمونه‌ی X=۰/۴ (ب)

دمای گذار نمونه‌ها به روش چهارمیله‌ای (4 probe) اندازه‌گیری شد. نمودار بهنجار شده $\rho-T$ نمونه‌ها در شکل ۳ نشان داده شده است

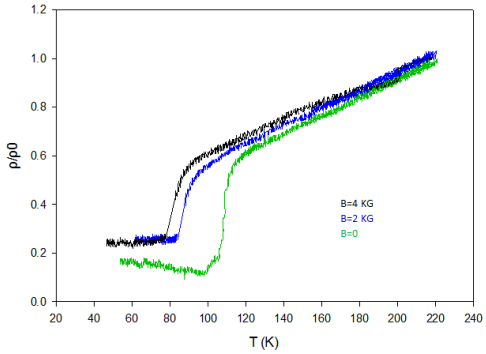
.



شکل۳: نمودار بهنجار شده $\rho-T$ تمام نمونه‌ها

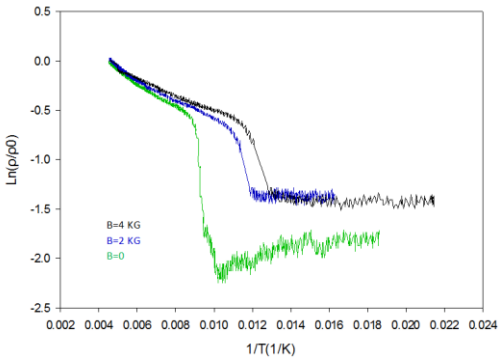
همان‌طور که مشاهده می‌شود، برای نمونه‌ی خالص و ۰/۲ دو گذار وجود دارد که بیانگر دو فازی شدن نمونه است. گذار اول مربوط به گذار فاز Bi-۲۲۲۳ و گذار دوم مربوط به گذار فاز Bi-۲۲۱۲ است. مقاومت ویژه‌ی ρ نمونه‌ها کاملاً صفر نمی‌شود که دلیل آن وجود ناخالصی و تشکیل فازهای ناخواسته است. در نمونه‌های آلاییده، بعد از گذار ابررسانایی، شاهد افزایش مقاومت هستیم که دلیل آن تشکیل فازهای ناخواسته با رفتار عایق‌گونه است.

به منظور بررسی سازوکار میخکوبی شار، لازم است که رفتار ابررسانا را در حضور میدان مغناطیسی بررسی کنیم. شکل ۴ نمودار بهنجار شده $\rho-T$ نمونه‌ی X=۰/۴ را در حضور میدان مغناطیسی نشان می‌دهد. در حضور میدان، دمای گذار Tc نمونه کاهش یافته و گذار ابررسانایی پهن‌تر می‌شود. براساس اتلاف انرژی ناشی از حرکت گردشاره‌ها می توان به خوبی پهن شدگی ناحیه گذار در مقاومت الکتریکی به خاطر حضور میدان مغناطیسی را شرح داد[۵]. شار مغناطیسی به داخل ابررسانای Bi که یک ابررسانای نوع II است، می‌تواند نفوذ کند. همین نفوذ میدان مغناطیسی از جفت شدن همه‌ی دانه‌های ابررسانا جلوگیری می‌کند.



شکل۴: نمودار بهنجار شده $\rho-T$ نمونه‌ی X=۰/۴ در حضور میدان مغناطیسی

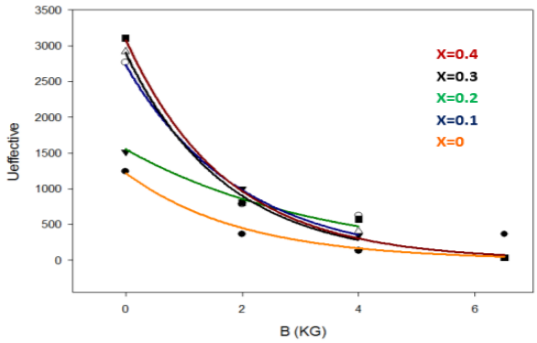
با استفاده از مقادیر اندازه‌گیری شده‌ی مقاومت ویژه ρ بر حسب دمای گذار Tc، می‌توان انرژی میخکوبی را از شیب نمودار $\ln(\rho/\rho_0)(1/T)$ بدست آورد. نمودار آرهینوس مقاومت الکتریکی برای نمونه‌ی X=۰/۴ در شکل ۵ آورده شده است.



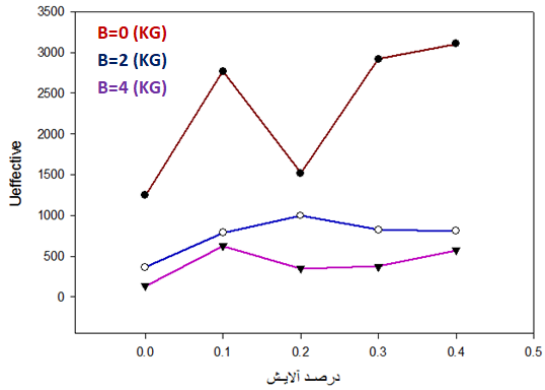
شکل۵: نمودار آرهینوس مقاومت الکتریکی برای نمونه‌ی X=۰/۴

همانطور که در شکل ۵ دیده می‌شود، در حضور میدان مغناطیسی، شیب نمودار کاهش یافته و هر چه میدان مغناطیسی قوی‌تر می‌شود، کاهش شیب نمودار $\ln(\rho/\rho_0)$-1/T بیشتر است. در واقع میدان مغناطیسی، جفت‌شدگی دانه‌های ابررسانا را تضعیف کرده و بنابراین انرژی میخکوبی نیز کاهش خواهد یافت. قابل انتظار است که Jc نیز کاهش خواهد یافت.

به منظور بررسی کمی و کیفی بین نمونه‌های ساخته شده، لازم است مقایسه‌ای بین آن‌ها صورت گیرد. به همین منظور $U_{effective}$ (انرژی فعالسازی یا انرژی میخکوبی شار) بر حسب میزان میدان مغناطیسی اعمال شده به نمونه‌ها در شکل ۶ و بر حسب میزان آلایش در شکل ۷ ترسیم شده است.



شکل۶: نمودار $U_{effective}$ بر حسب میدان مغناطیسی اعمال شده به نمونه‌ها



شکل۷: نمودار $U_{effective}$ بر حسب میزان آلایش نمونه‌ها

همان‌طور که در شکل ۶ دیده می‌شود، نمونه‌ها با درصدهای آلایش متفاوت، رفتار مشابهی دارند. با اعمال میدان و افزایش شدت آن، انرژی فعالسازی (میخکوبی) کاهش یافته، بنابراین Jc نمونه نیز کاهش خواهد داشت. اما مقدار کاهش یکسان نیست. به طور مثال نمونه‌ی خالص کم‌ترین مقدار انرژی را دارد و این نشان‌دهنده‌ی بهبود خواص الکتریکی در اثر آلایش است.

با افزایش میزان آلایش به مقدار X=۰/۱ انرژی فعالسازی (میخکوبی) افزایش می‌یابد. اما در نمونه‌ی X=۰/۲ انرژی میخکوبی نسبت به نمونه‌ی X=۰/۱ کاهش یافته است. با افزایش آلایش به مقادیر X=۰/۳ و X=۰/۴ انرژی میخکوبی بدون حضور میدان مغناطیسی افزایش می‌یابد. بنابراین می‌توان گفت تضعیف انرژی میخکوبی در نمونه‌ی X=۰/۲ می‌تواند به علت کیفیت پایین نمونه باشد، نه افزایش آلایش. با بررسی اجمالی تمامی نمونه‌ها در تمامی میدان‌ها، نمونه‌ی X=۰/۱ انرژی میخکوبی بهینه‌ای نسبت به سایر نمونه‌ها دارد. بنابراین Jc بیشتری نیز خواهد داشت.

نتیجه گیری

در حضور میدان مغناطیسی، دمای گذار Tc نمونه‌ها، به دلیل کاهش میزان جفت شدگی دانه‌های ابررسانا کاهش می‌یابد. با آلایش نمونه‌ها با نانو ذرات Al_2O_3، انرژی فعالسازی (میخکوبی) نمونه‌ها افزایش می‌یابد. نتایج محاسبه‌ی انرژی میخکوبی نمونه‌ها در حضور میدان‌های مختلف مغناطیسی با استفاده از شیب منحنی آرهینوسی نشان می‌دهد که با افزایش میدان مغناطیسی، انرژی میخکوبی کاهش می‌یابد. نمودارهای انرژی میخکوبی در حضور میدان مغناطیسی نشان دادند که نمونه با آلایش X=۰/۱ انرژی میخکوبی بهینه‌ای در مقادیر کم‌آلایش دارد. بنابراین Jc بیشتری نیز خواهد داشت و می‌تواند برای مصارف صنعتی مورد استفاده قرار گیرد.

مرجع‌ها

[۱] E. Chavira, R. Escudero, D. Rios-Jara and L. M. Leno; "Influence of lead on the formation of the 110 K superconducting phase in the Bi-Sr-Ca-Cu-O compounds"; *Phys. Rev. B* **38** (1988) 9272.

[۲] I. Hamadeeh, A. Agil, A. K. Yahya and A. H. Shaari; "Superconducting properties of bulk $Bi_{1.6}Pb_{0.4}Sr_2Ca_{2-x}Cd_xCu_3O_{10}$ system prepared via conventional solid state and co precipitation methods"; *Physica C* **463** (2007) 207.

[۳] P. Kameli, H. Salamati, I. Abdolhosseini; *Jornal of Alloys and Compounds* (2007).

[۴] M. Annabi, A. Mchirgui, F. Ben. Azzouz, M. Zouaoui and M. Ben. Salem; *Physica C* **405** (2004) 25-33.

[۵] A. K. Pradhan, Z. X. Shi, M Tokunaga, T. Tamegai, Y. Takano, K. Togano, H. Kito, and H. Ihara. (n.d.). *Phys. Rev. B* **64** (2001) 212509.

اثر کاربید سیلیسیم بر ویژگی‌های ساختاری و ابررسانایی ابررسانای سرامیکی Bi-۲۲۲۳

فلاح آرانی، حسام؛ شهبازطهرانی، فاطمه؛ کوهانی، حسین؛ ریاحی نوری، نسترن

گروه پژوهشی مواد غیرفلزی، پژوهشگاه نیرو، تهران، ایران

چکیده

در این تحقیق، اثر افزودن نانوویسکر کاربید سیلیسیم بر فاز ابررسانای دمابالای (Bi-۲۲۲۳) $Bi_{1.6}Pb_{0.4}Sr_2Ca_2Cu_3O_{10+\theta}$ به منظور بهبود خواص ساختاری، ابررسانایی و میخکوبی شار مغناطیسی بررسی شده است. ابررسانای سرامیکی Bi-۲۲۲۳ به روش سل-ژل سنتز شد و در ادامه، فرآیند عامل دار کردن سطح نانوویسکر کاربید سیلیسیم به کمک ترکیب آلی ازو بیس ایزو بوتیرو نیتریل (AIBN) انجام شد. اندازه گیری‌های پراش اشعه X، پذیررفتاری مغناطیسی و منحنی هیسترزیس به منظور بررسی خواص ترکیبات سنتز شده صورت گرفت. براین اساس، با افزایش مقادیر نانوویسکر کاربید سیلیسیم، فاز مطلوب Bi-۲۲۲۳ کاهش یافته اما ثابت های شبکه تغییری نکرده است. لذا، نانوویسکر کاربید سیلیسیم به ساختار شبکه Bi-۲۲۲۳ وارد نشده‌اند. برطبق اندازه گیری‌های مغناطیسی، دمای گذار ابررسانایی ابتدا (در مقایسه با نمونه خالص) افزایش پیدا کرد و سپس با افزایش بیشتر درصد نانوویسکر از ۰٫۲ به ۰٫۸، کاهش یافت. همچنین، بیشترین مقدار مغناطش پذیری، پهنای حلقه هیسترزیس و چگالی جریان بحرانی درون دانه‌ای به نمونه با ۰٫۲ درصد وزنی نانوویسکر کاربید سیلیسیم، تعلق دارد.

The effect of silicon carbide on structural and superconducting properties of the Bi-2223 ceramic superconductor

Fallah Arani, Hesam; Shahbaz Tehrani, Fatemeh; Koohani, Hossein; Riahi-Noori, Nastaran

Non-Metallic Materials Research Group, Niroo Research Institute (NRI), Tehran, Iran

Abstract

In this research, the addition effect of silicon carbide (SiC) nano-whisker for improvement of the structural, superconducting, magnetic, and flux pinning properties of high-temperature superconductor $Bi_{1.6}Pb_{0.4}Sr_2Ca_2Cu_3O_{10+\theta}$ (Bi-2223) had been investigated. The Bi-2223 ceramic superconductor was prepared using the sol-gel method, and silicon carbide nano-whisker (SiC-NW) were modified by Azobisisobutyronitrile (AIBN). The X-ray diffractometry, magnetic susceptibility, and hystersis loop measurements had performed for the investigation of synthesized compounds. Accordingly, the Bi-2223 desirable phase decreased by increasing the SiC-NW but lattice parameters had not been changed. So, SiC-NW did not enter to the Bi-2223 structure. Based on the magnetic measurements, the superconductivity transition temperature first increased (compared to the pure sample) and then decreased when the SiC-NW was added from 0.2 to 0.8. Also, the maximum magnetization, hysteresis loop width, and intra-granular critical current density belonged to the sample with the 0.2wt.% SiC- NW.

PACS No. 74, 81

مقدمه

با توجه به کاربردهای تکنولوژیکی گسترده ابررساناها در ژنراتورها، ترانسفورماتورها، موتورها، محدودکننده‌های جریان خطای ابررسانایی و ذخیره‌سازهای انرژی، شناخت، مشخصه‌یابی و بهبود پارامترهای بحرانی مواد ابررسانا برای تجاری سازی و توسعه کاربردها از اهمیت بسیاری برخوردار است. ابررسانای سرامیکی (Bi-۲۲۲۳) $Bi_{1.6}Pb_{0.4}Sr_2Ca_2Cu_3O_{10+\theta}$ از جمله مواد ابررسانای دمای بالا است که دمای بحرانی بالاتر از ۱۰۰ درجه کلوین داشته و قابلیت حفظ خواص ابررسانایی تا میدان مغناطیسی حدود ۱۰۰ تسلا را دارد. البته مشکلات فراوانی در سنتز Bi-۲۲۲۳ وجود دارد که علت آن تشکیل فازهای اکسیدی ناخواسته و همچنین فازهای ثانویه Bi-۲۲۰۱ و Bi-۲۲۱۲ در حین سنتز آن است که ناشی از طبیعت متنوع واکنش‌پذیری مولفه‌های اکسیدی سیستم ابررسانای سرامیکی پایه بیسموت (BSCCO) است. بهبود و افزایش چگالی جریان بحرانی به واسطه برطرف کردن اتصالات ضعیف بین دانه‌ای و بهبود خواص مکانیکی و ویژگی‌های میخکوبی از جمله موضوعاتی است که در زمینه مواد ابررسانا بسیار مورد توجه

محققین است تا با شکل‌گیری ساختار دانه‌ای بهتر، چگالی جریان بحرانی افزایش یابد. یک راهکار موثر می‌تواند اضافه نمودن نانوساختارهای مختلف به عنوان مراکز میخکوبی به زمینه ابررسانا باشد[۱,۲]. اگر چه تا امروز تحقیقات زیادی در مورد نقش نانو افزودنی‌ها بر شکل گیری و خواص ابررسانایی فازهای ابررسانایی سیستم BSCCO انجام شده است، ولی در این تحقیقات فقدان اطلاعات کافی در مورد تاثیر افزودنی‌های نانوویسکر (NW) در مقایسه با افزودنی‌های دیگر مشهود است [۵-۳].

در این پژوهش هدف اصلی افزودن نانوویسکر کاربید سیلیسیم (SiC-NW) به عنوان مراکز میخکوبی جدید به ابررسانای دمابالای Bi-۲۲۲۳ بوده و در ادامه خواص ساختاری، ابررسانایی و کاربردی کامپوزیت‌های سنتز شده در اثر افزودن نانوویسکر کاربید سیلیسیم به ابررسانای سرامیکی Bi-۲۲۲۳ بررسی شده است.

آزمایشات تجربی

به منظور سنتز کامپوزیت‌های سرامیکی xSiC + $(Bi_{1.66}Pb_{0.34})Sr_2Ca_2Cu_3O_{10+\theta}$ که در آن x درصد وزنی نانوویسکر کاربید سیلیسیم (٪۰٫۰، ٪۰٫۲، ٪۰٫۴ و ٪۰٫۸) است، ابتدا ابررسانای Bi-۲۲۲۳ به روش سل-ژل سنتز شده است. جزئیات روش سنتز ابررسانای سرامیکی Bi-۲۲۲۳ در پژوهش‌های قبلی ما آورده شده است [۱،۶]، بنابراین از ذکر دوباره آن صرف نظر شده است.

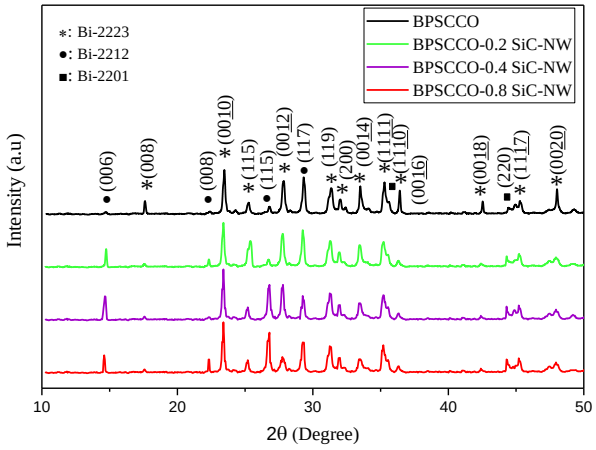
عامل‌دار کردن افزودنی‌ها به کمک سیلان از اگلومره شدن نانو افزودنی‌ها جلوگیری کرده و کامپوزیت ابررسانایی همگن‌تری را ایجاد می‌کند. بنابراین، قدم بعدی در سنتز کامپوزیت‌های مورد نظر، عامل‌دار کردن سطح نانوویسکر کاربید سیلیسیم به کمک ترکیب آلی ازو بیس ایزو بوتیرو نیتریل (AIBN) است. در ابتدا تجزیه ترکیب AIBN موجب آزاد شدن گاز نیتروژن و شکل‌گیری دو رادیکال سیانو ۲ پروپیل می‌شود. این رادیکال‌ها با هیدروکربن‌های غیر اشباع روی سطح کاربید سیلیسیم واکنش می‌دهند و گروه‌های سیانو را در سطح SiC ایجاد می‌کنند. در ادامه، با هیدرولیز محلول آبی شامل سدیم هیدروکسید، گروه‌های سیانو به گروه‌های کربوکسیل تبدیل شده و به راحتی در مایع پخش می‌شود. بنابراین چگالی گروه‌های کربوکسیل در سطح SiC که با ترکیب AIBN عامل‌دار شده افزایش می‌یابد.

پس از عامل‌دار کردن SiC-NW، درصدهای گوناگون (٪۰٫۰، ٪۰٫۲، ٪۰٫۴ و ٪۰٫۸) از این ترکیب، به پودر ابررسانا اضافه شد و به منظور همگن‌شدن به مدت ۲ ساعت در اتانول آسیاکاری شدند. در انتها، برای دستیابی به کامپوزیت‌های نهایی مورد نظر، پودرهای حاصل از آسیاکاری، به شکل قرص درآمده و برای انجام فرآیند تف‌جوشی به مدت ۱۰۰ ساعت در دمای ۸۵۰°C درون کوره قرارگرفتند.

از دستگاه پراش اشعه X (XRD) متعلق به شرکت PANalytical® با تابش Cu-Kα، به منظور مشخصه یابی ساختاری نمونه‌های سنتز شده از جمله ثابت‌های شبکه، اندیس‌های میلر و فازهای غالب و ناخواسته، استفاده شد. برازش داده های حاصل از اندازه گیری XRD توسط نرم افزار "Material Analysis Using Diffraction" (MAUD) انجام گرفت. پذیرفتاری مغناطیسی نمونه‌ها توسط دستگاه پذیرفتاری سنج AC مدل ۷۰۰۰ شرکت Lake Shore و نتایج مربوط به حلقه‌های هیسترزیس مغناطیسی به کمک SQUID مدل S۷۰۰X اندازه‌گیری شد.

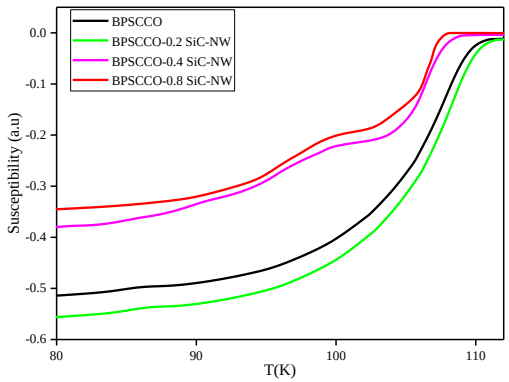
بحث و بررسی

الگوی XRD کامپوزیت های Bi-۲۲۲۳ با مقادیر گوناگون نانوویسکر کاربید سیلیسیم در شکل ۱ نشان داده شده است. باتوجه به نتایج بدست آمده از نرم افزار MAUD، فاز ابررسانایی دما بالای Bi-۲۲۲۳ به عنوان فاز غالب و فازهای Bi-۲۲۱۲ و Bi-۲۲۰۱ به عنوان فازهای ثانویه در تمامی نمونه‌ها مشاهده شده است. همچنین درصد شکل‌گیری فازهای مذکور و ثابت‌های شبکه کامپوزیت‌های سنتز شده به طور مجزا در **Error! Reference source not found.** آورده شده است. براساس نتایج، افزودن نانوویسکر کاربید سیلیسیم برای مقادیر x≥۰/۴ ، باعث کاهش محسوس فاز اصلی و مطلوب ابررسانایی Bi-۲۲۲۳ شده و فازهای ناخواسته ابررسانایی مذکور دیگر را افزایش می‌دهد. همچنین به علت عدم تغییر پارامترهای شبکه کامپوزیت‌ها با افزایش مقدار نانوویسکر، می‌توان چنین استدلال نمود که کاربید سیلیسیم به شبکه Bi-۲۲۲۳ وارد نشده‌اند.



شکل ۱. الگوی XRD ترکیبات سنتز شده

منحنی پذیرفتاری مغناطیسی کامپوزیت‌های سنتز شده با مقادیر مختلف SiC-NW بر حسب دما، برای حالت سردشدن در حضور میدان مغناطیسی ۰٫۰۰۱ تسلا (FC) در شکل ۲ نشان داده شده است. اولین کاهش و تغییر شیب را می‌توان ناشی از وجود گذار درون دانه‌ای (T_C) دانست و دومین پیک در T_{Cj} (دمای گذار بین دانه‌ای) ناشی از حضور فازهای ابررسانایی ثانویه نظیر Bi-۲۲۱۲ است. همان گونه که در شکل ۲ قابل مشاهده است، مقدار T_C در نمونه با ۰٫۲ درصد وزنی نانوویسکر نسبت به نمونه خالص، افزایش می‌یابد و سپس با افزایش درصد کاربید سیلیسیم از ۰٫۲ به ۰٫۸ کاهش می‌یابد که می‌توان آن را ناشی از کرنش ایجاد شده در فصل مشترک افزودنی و زمینه ابررسانا دانست. به علاوه، خاصیت ابررسانایی می‌تواند به علت اعوجاج نواحی اطراف فصل مشترک با تغییر چگالی حامل‌های بار، از بین رود. همچنین، ترکیبات سنتز شده Bi-۲۲۲۳-۰٫۴SiC-NW و Bi-۲۲۲۳-۰٫۸SiC-NW دارای یک گذار ثانویه در T_{Cj} حوالی ۹۰ درجه کلوین هستند که نشان می‌دهد افزودنی‌ها شرایط را برای تغییر فاز ابررسانایی از فاز Bi-۲۲۲۳ به فاز Bi-۲۲۱۲ به صورت جزئی فراهم می‌کنند و بدین شکل، تشکیل فاز Bi-۲۲۱۲ با افزایش SiC-NW در کامپوزیت‌ها افزایش می‌یابد. به‌علاوه بیش‌ترین مقدار پذیرفتاری مغناطیسی مربوط به کامپوزیت Bi-۲۲۲۳ شامل ۰٫۲ درصد وزنی SiC-NW است (شکل ۲). با توجه به این نکته که مقدار پذیرفتاری نزدیک‌تر به ۱- و شیب تند با پهنای کم حین سرمایش در پذیرفتاری



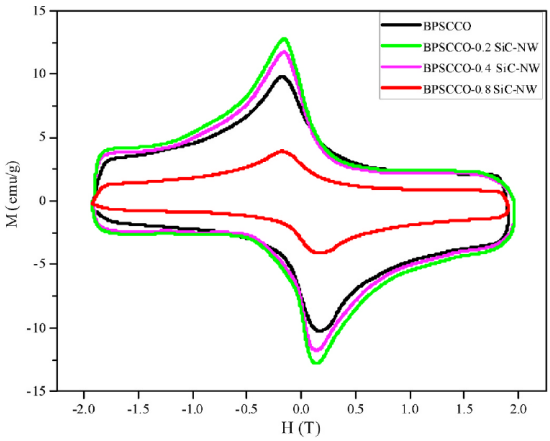
شکل ۲. منحنی پذیرفتاری مغناطیسی کامپوزیت های سنتزشده

مغناطیسی، نشان دهنده کیفیت بالای نمونه در ایجاد خاصیت دیامغناطیس کامل است، لذا این مسئله نشان می‌دهد که کامپوزیت Bi-۲۲۲۳-۰٫۲SiC-NW عملکرد بهتری در نزدیک شدن به خاصیت دیامغناطیس کامل، نسبت به نمونه خالص دارد. لذا، افزون بر افزایش دمای بحرانی با افزایش مقدار نانوویسکر به مقدار ۰/۲ درصد وزنی، خواص مغناطیسی (طرد شار و دیامغناطیس کامل) نیز در کامپوزیت Bi-۲۲۲۳-۰٫۲SiC-NW نسبت به نمونه خالص، بهبود یافته و شرایط را برای بهبود خواص مغناطیسی فراهم کرده است. بنابراین می‌توان نتیجه‌گیری کرد که کامپوزیت SiC-NW Bi-۲۲۲۳-۰٫۲ قابلیت‌های کاربردی مطلوب‌تری را در مقایسه با دیگر ترکیبات سنتز شده داراست.

شکل ۳ حلقه هیسترزیس مغناطیسی کامپوزیت‌های ابررسانایی Bi-۲۲۲۳ متشکل از مقادیر گوناگون کاربید سیلیسیم را در دمای ۱۰ درجه کلوین برای میدان مغناطیسی اعمالی در بازه ۲± تسلا نشان می‌دهد. در مورد کامپوزیت‌های ابررسانایی Bi-۲۲۲۳ شامل نانوویسکر کاربید سیلیسیم، مقدار مغناطش پذیری و پهنای حلقه هیسترزیس در مقادیر ۰٫۲ و ۰٫۴ درصد وزنی نسبت به نمونه خالص افزایش یافته و سپس با افزایش بیش‌تر مقدار نانوویسکر تا

جدول ۱. مشخصات ساختاری ترکیبات سنتز شده

SiC-NW (wt%)	$f_{(2223)}$	$f_{(2212)}$	$f_{(2201)}$	a≈b (Å)	c(Å)	T_C (K)
۰٫۰	~۸۹	~۵	~۶	۳٫۸۲۳(۱)	۳۷٫۰۷۴(۴)	۱۱۰٫۹
۰٫۲	~۸۸	~۵	~۷	۳٫۸۲۳(۲)	۳۷٫۰۷۴(۲)	۱۱۱٫۴
۰٫۴	~۸۳	~۱۱	~۶	۳٫۸۲۳(۴)	۳۷٫۰۷۴(۱)	۱۰۸٫۶
۰٫۸	~۷۷	~۱۴	~۹	۳٫۸۲۳(۳)	۳۷٫۰۷۴(۱)	۱۰۷٫۸



شکل ۳. منحنی پسماند کامپوزیت‌های سنتز شده

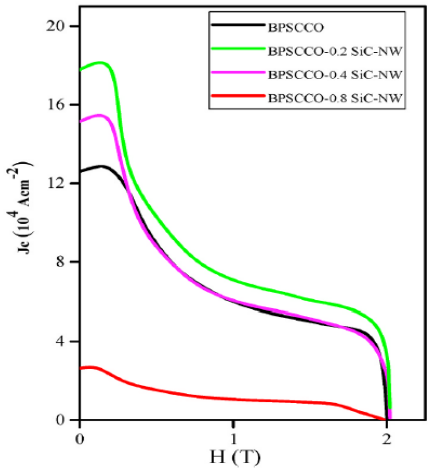
۰٫۸ درصد وزنی کاهش می‌یابد. با توجه به اینکه پهنای حلقه‌های هیسترزیس به پارامترهای زیادی نظیر قدرت میخکوبی شار، مقدار فازهای ابررسانایی دما بالا و دما پایین، طول همدوسی و کیفیت ریز ساختار بستگی دارد، می‌توان نتیجه گرفت در کامپوزیت‌های Bi-۲۲۲۳-۰٫۲SiC-NW و Bi-۲۲۲۳-۰٫۴SiC-NW برآیند نتایج پارامترهای ذکرشده به طرز مطلوبی سطح حلقه هیسترزیس این دو کامپوزیت را نسبت به نمونه خالص افزایش داده است.

در شکل ۴، چگالی جریان بحرانی درون دانه‌ای (J_{Cm}) محاسبه شده با استفاده از حلقه‌های هیسترزیس و معادله بین[1] برای تمامی کامپوزیت‌های سنتز شده در دمای ۱۰ درجه کلوین به تصویر کشیده شده است. مقادیر J_{Cm} به مقدار نانو افزودنی وابسته بوده و کم‌ترین مقدار J_{Cm} برای بیشترین مقدار نانو افزودنی (۰٫۸ درصد وزنی) مشاهده شده است. به علاوه، افزایش J_{Cm} در کامپوزیت‌های Bi-۲۲۲۳-۰٫۲SiC-NW و Bi-۲۲۲۳-۰٫۲SiC-NW در مقایسه با نمونه خالص را می‌توان به بهبود مراکز موثر میخکوبی در این کامپوزیت‌ها نسبت داد. نتایج چگالی جریان کامپوزیت‌های شامل نانو افزودنی نشان می‌دهد، که اضافه نمودن نانوویسکر کاربید سیلیسیم با درصد وزنی ۰٫۲، موثرترین مرکز میخکوبی محسوب می‌شود که می‌تواند گردشاره‌های بیش‌تری را میخکوب کرده و ممانعت موثرتری در برابر حرکت آن‌ها ایجاد نماید.

نتیجه‌گیری

در این مقاله، اثر افزودن نانوویسکر کاربید سیلیسیم بر ویژگی-

[1] Bean's equation



شکل ۴. منحنی چگالی جریان درون دانه‌ای کامپوزیت‌های سنتز شده

های ساختاری و ابررسانایی ابررساناهای سرامیکی x(SiC)+ $Bi_{1.6}Pb_{0.4}Sr_2Ca_2Cu_3O_{10+\delta}$ با درصدهای وزنی (۰٫۰٪، ۰٫۲٪، ۰٫۴٪ و ۰٫۸٪) که به روش سل-ژل سنتز شده اند، مورد مطالعه قرار گرفته است. براساس نتایج اندازه‌گیری XRD و برازش داده‌ها با استفاده از نرم افزار MAUD، افزایش نانوویسکر کاربید سیلیسیم درصد فاز مطلوب ابررسانایی Bi-۲۲۲۳ را کاهش داده و از طرفی باعث افزایش فازهای ابررسانایی ثانویه می‌شود. به علاوه، ثابت-های شبکه کامپوزیت‌ها نسبت به نمونه خالص Bi-۲۲۲۳ تغییر نیافته است. بنابراین می‌توان گفت که نانوویسکر کاربید سیلیسیم به ساختار شبکه Bi-۲۲۲۳ وارد نشده‌اند. برطبق نتایج اندازه-گیری‌های مغناطیسی، با افزودن ۰٫۲ درصد وزنی نانوویسکر کاربید سیلیسیم به ابررسانای Bi-۲۲۲۳ خواص ابررسانایی مطلوبی نظیر دمای بحرانی ۱۱۱٫۴K، چگالی جریان بحرانی درون دانه‌ای ۱۸٫۵۶×۱۰^{5}A/cm^2 و میدان برگشت ناپذیر ۱٫۸۲ تسلا قابل دسترسی است.

مرجع‌ها

[1] H. Fallah-Arani, S. Baghshahi, A. Sedghi, D. Stornaiuolo, D. Tafuri, N. Riahi-Noori, Ceram. Int. **39**, (2017) 1143–1152.
[2] N.K. Saritekin, M. Pakdil, E. Bekiroglu, G. Yildirim, J. Alloy. Comp. **688**, (2016) pp. 637–646.
[3] S.F. Oboudi, M.Q. Mustafa, Adv. Nanoparticles **5**, (2016) 75–82.
[4] E. Hannachi,· Y. Slimani, A. Ekicibil, A. Manikandan, F. Ben Azzouz, J. Mater. Sci: Mater. Electron. **30**, No. 9 (2019) 8805-8813.
[5] E. Hannachi, Y. Slimani, A. Ekicibil, A. Manikandan, F. Ben Azzouz, Mater. Chem. Phys. **235**, (2019) 121721.
[6] H. Fallah-Arani, S. Baghshahi, A. Sedghi, D. Stornaiuolo, F. Tafuri, N. Riahi-Noori, Phys. C Supercond. Its Appl. **548**, (2018) 31-39.

ترکیبات پایدار وخواص فونونی هیدرید پالادیوم با استفاده‌از داده‌کاوی

عرب نصرت آبادی ، حامد[۱] ؛ حسینی ؛ سید وحید[۱] ؛عباس نژاد ،محدثه [۲]؛ محمدی زاده، محمدرضا[۱]

[۱] آزمایشگاه پژوهشی ابررسانایی و ابرمواد ،دانشکده فیزیك دانشگاه تهران ، انتهاي خیابان کارگر شمالي ، تهران

[۲] دانشکده فیزیک، دانشگاه شهید باهنر کرمان، کرمان، ایران

چکیده

در پژوهش جاری، با استفاده از الگوریتم ژنتیک فازهای جدید ترکیب هیدرید پالادیوم در فشار *GPa* ۵۰ وصفر مورد بررسی قرار گرفت. در فشار مذکور ترکیباتی همچون *PdH* ، *Pd_2H* و *Pd_4H* توسط الگوریتم ژنتیک پیشنهاد داده شد. محاسبات فونونی نشان می دهد که ترکیبات مذکور هیچ گونه بسامد موهومی در نمودار پاشندگی فونونی از خود نشان نمی دهند، بنابراین دارای پایداری مکانیکی هستند. با این وجود محاسبات ابررسانایی بر پایه نظریه *BCS* نشان داد که بر همکنش الکترون-فونون در این ترکیبات بسیار کم است و دمای گذار ابررسانایی حدود *K* ۰/۲ به‌دست آمد.

واژه های کلیدی: الگوریتم ژنتیک،*PdH*،*Pd_2H*،*Pd_4H*

Stable structure and phonon properites of PdH_X

Arab nusrat abadi, Hamed[1]; Hosseini , S. Vahid [1]; ; Abbasnejad, Mohaddeseh[2]; Mohmadizade, Mohamad Reza[1],

[1]Superconductivity Research Laboratory (SLR), Department of Physics, University of Tehran, North Kargar Av., P.O. Box 14395-547, Tehran, Iran

[2] Faculty of Physics, Shahid Bahonar University of Kerman, Kerman, Iran

Abstract

In the present study, the new compositions of palladium hydride composition at pressure zero and 50 GPa have been investigated using genetic algorithm. At this pressure, compounds such as PdH, Pd_2H and Pd_4H were proposed by a genetic algorithm. The phonon calculations show that these compounds do not show any imaginary frequency in the phonon dispersion curve, so they have mechanical stability. However, superconductivity calculations based on BCS theory showed that the electron-phonon interaction in these compounds is very low and the superconducting transition temperature was about 0.2 K.

***Keywords**: Genetic algorithm, PdH،Pd2H،Pd4H*

PACS NO .74

مقدمه

ترکیبات PdH_x از جمله ترکیبات مهم هیدریدهای فلزی تلقی می شود که دارای خواص فیزیکی بسیار جالبی است. اتم پالادیوم به تنهایی از خود خاصیت ابررسانایی نشان نمی‌دهد. حال آنکه با ترکیب این عنصر با هیدرژون دمای گذار ابررسانایی مشاهده شده است. دمای تجربی گذار ابررسانایی این ماده به صورت ۹ K گزارش شده است [۲و۱]. همچنین از این ترکیب در زمینه ذخیره سازی هیدرژن و سنسورهای هیدروژنی مورد استفاده قرار گرفته می‌شود [۱۲]. نکته بسیار مهمی که در این ترکیب دیده می شود این است که خواص الکترونی و رسانندگی این ترکیب به x وابسته است[۲]. ترکیب PdH در فشار صفر دارای فاز آلفا (α) و بتا (β) است که که اولی در تقارن مکعبی و دومی در تقارن هگزاگونال (Hexagonal) قرار دارد[۱۳]. با توجه به ترکیب متنوع هیدروژن با پالادیوم در فشارهای مختلف احتمال کشف ترکیب‌های جدید این ساختار در فشارهای مختلف وجود دارد. بنابراین در پژوهش جاری سعی بر آن است که با استفاده از الگوریتم ژنتیک فازهای جدید این ماده را در فشار GPa ۵۰ وصفر مورد بررسی قراردهیم . همان‌طور که هیدریدهای فلزی در فشارهای بالاتر دمای گذار ابررسانایی بالایی از خود نشان داده‌اند [۹]، بنابراین تحقیق جاری سعی بر آن دارد که پس از شناسایی چند ترکیب در فشارهای مذکور با استفاده از

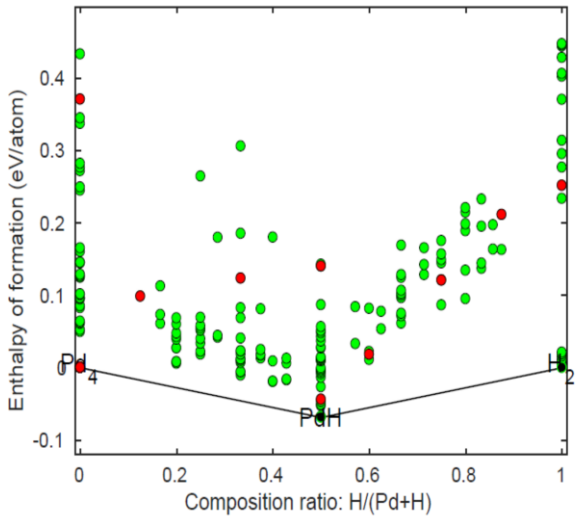
منحی کانوکس هال (Convex hull)، پایداری مواد یافت شده را مورد بررسی قرار دهد و سپس خواص ابررسانایی این ترکیبات را مورد مطالعه قرار دهد.

روش انجام محاسبات

محاسبات حاضر با استفاده از دو بسته محاسباتی صورت گرفته است. (۱): کد USPEX که اساس کار آن الگوریتم ژنتیک است، الگوریتم ژنتیک ساختارهای بهینه و شبه پایدار را با استفاده از داده های احتمالی که به سه روش تولید مثل (Generation)، ترکیب (Crossover) و جهش (Mutation) تعیین می‌کند و برگزیده‌ها عبور کرده از مراحل قبل در مرحله بعد دوباره تکرارمی‌شوند تا زمانی‌که شرط همگرایی برقرار شود. ساختارهایی که از این سه مرحله عبور کنند ساختارهای پیشنهادی و شبه پایدار برنامه USPEX خواهند بود ، این ساختارها در منحنی کانوکس هال (منحنی آنتالپی برحسب نرخ ترکیب دو اتم می‌باشد) قرار می گیرند. منحنی کانوکس هال را با ۳۰ داده‌ی ورودی مادر که به صورت تصادفی توسط کد ایجاد می‌شود ،آغاز می‌شود ، سپس با انتخاب ۲۰مرحله بهینه سازی پیاپی برای الگوریتم تعیین می‌شود ، تامحاسبات به همگرایی نهایی برسد . (۲): بسته محاسباتی کوانتوم اسپرسو (Quantum ESPRESSO) که بر اساس نظریه تابعی چگالی و استفاده از امواج تخت و شبه پتانسیل نوشته شده است. در این محاسبات ، از شبه‌پتانسیل فوق نرم برای توصیف اندرکنش الکترون‌ها با مغزه‌ها انتخاب شده‌است. برای توصیف انرژی تبادلی همبستگی از Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) تقریب شیب تعمیم‌یافته (GGA) استفاده شده است. و مش بندی شبکه وارون بصورت ۴×۴×۴ صورت گرفته شده است و انرژی قطع ساختارها به صورت ۵۰ Ry بهینه شده است تا همگرایی نیرو بدست آید. محاسبات برهمکنش الکترون -فونون از روش تابع چگالی اختلالی صورت می گیرد که از طریق آن ماتریس های الکترون-فونون محاسبه می‌شوند. برای انجام محاسبات فونونی نیز شبکه وارون به صورت ۴×۴×۴ صورت گرفته‌است. از محاسبه ماتریس‌های الکترون-فونون ثابت جفت شدگی الکترون-فونون λ محاسبه می‌شود.و با داشتن این ثابت و پتانسیل کولنی الکترون-الکترون μ که بدون بعد است و که به میزان ۰/۱ در نظرگرفته‌می‌شود. با داشتن کمیت های فوق دمای ابررسانایی با فرمول نیمه تجربی آلن-دنیس پیش‌بینی می‌شود [۱۱].

شرح نتایج و بحث

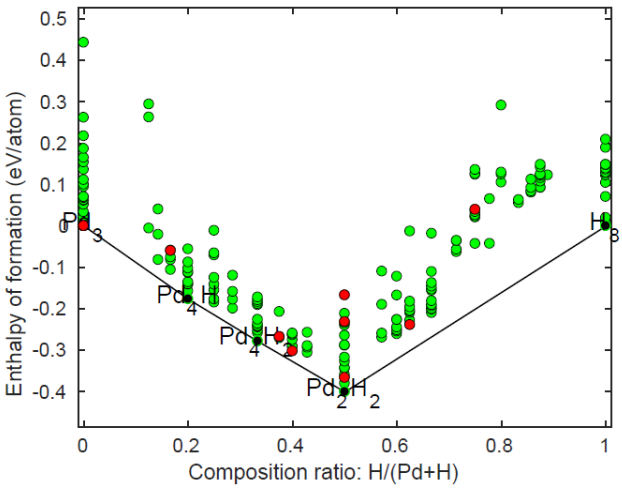
نتایج ترکیب PdH_X در فشار صفر و ۵۰ GPa در شکل ۱ و ۲ نشان داده شده است. شکل ۱ نمودار کانوکس‌هال ساختار پیش بینی شده در دما و فشار صفر است ،همان طور که در شکل مشخص است اتم پیش‌بینی‌شده روی منحنی کانوکس‌هال ترکیب PdH است که پس ازبهینه‌سازی‌های متوالی بدست آمده‌است.



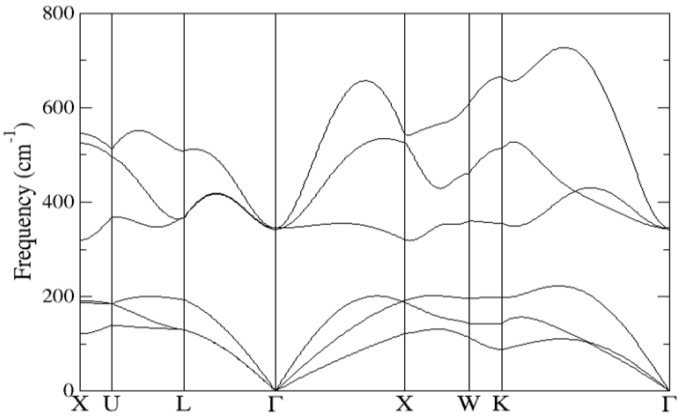
شکل۱:نمودار آنتالپی برحسب نسبت ترکیب پالادیوم وهیدورژن در فشار صفر

همان‌طور که مشاهده‌می‌شود نقاط بسیاری در بالای نمودار توسط کد محاسبه‌شده‌است که این نقاط حاصل دارای کمینه مقدار انرژی نیستند که کدالگوریتم ژنتیک آن‌ها را حذف‌کرده‌است [۵]. نقاط در بازه انرژی و حدهای حالت‌های گازی و فلزی اتم‌های H_2 و Pd_2 هستند، همان طور که مشخص‌است ساختارهای پایین منحنی به‌دلیل نبودن در محدوده انرژی آزاد با استوکیومتری پایدار به صورت خودکار از محاسبات کنارگذاشته شده‌اند ، و ساختارهای بالای منحنی هم درحالت‌های قابل قبول‌اند ، ولی کاملا ناپایدار هستند، و نقاط روی منحنی در فشار مورد نظر در حالت پایدارهستند ، همان‌طور که در شکل دیده می‌شود نقاط قرمز رنگ داده‌های اولیه یا مادر هستندو نقاط سبز رنگ داده‌های تولیدشده درمراحل بعد بهینه‌سازی هستند ،که تعداد کل ساختارها نزدیک به ۴۰۰=۲۰×۲۰ عدد می‌باشد.[۴و۵]. در شکل ۲ مشاهده می‌کنید نمودار کانوکس‌هال برای دمای صفر و فشار ۵۰ GPa است ، بررسی این منحنی نشان می‌دهد که مانند فشار صفر این نمودار شکستگی‌های به سمت پایین ندارد [۴] و همان‌طورکه بیان‌شد داده‌های زیر منحنی قابل قبول نیستند، و سپس دوماده در حالت آزاد دارای بیشترین انرژی است و سپس داده‌های محاسبه‌شده‌ی بالای منحنی دارای انرژی آزاد کمتری نسبت به دو اتم در حالت بدون قید دارند، ومانند قبل ساختارهایی که روی منحنی قرارگرفته‌اند ، پتانسیل پایدارشدن را دارند که این سه ساختار پایدار به صورت PdH، Pd_2H و Pd_4H است. ساختارهای دارای ضریب استتکیومتری مضرب ۲ ساختار جدیدی به نظرنمی‌رسند، بلکه ساختار ابرسلولی ترکیبات فوق تلقی

می‌شوند. [۷].و پس این فرم فقط در نوشتار است ، باید این مواد در تقارن‌های مورد نظر بررسی کرد.

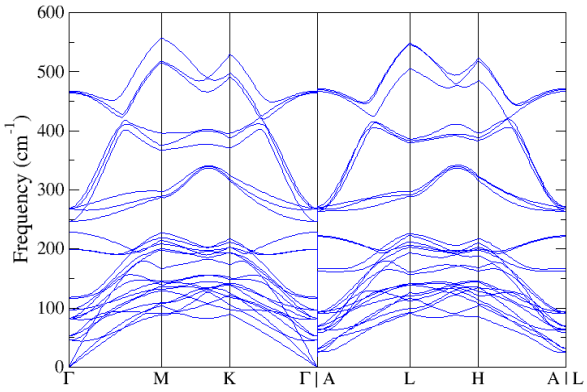


شکل ۲: نمودار آنتالپی برحسب نسبت ترکیب پالادیوم وهیدورژن در فشار ۵۰GPa



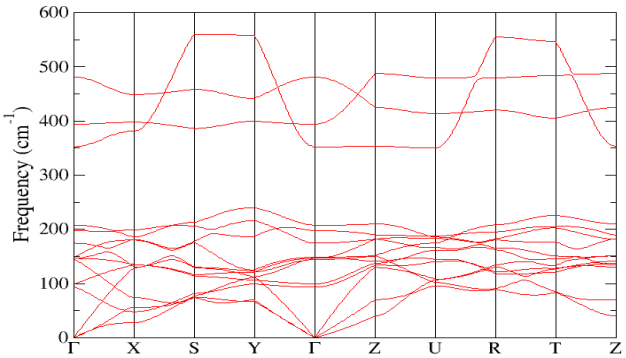
شکل ۳:نمودار فرکانس فونونی ترکیب PdH

باید توجه کرد که ساختارهای به‌دست‌آمده به صورت نیمه پایدار هستند و تحت شرایطی از جمله فشار پایدار شده‌اند، برای اطمینان حاصل کردن از این موضوع باید فرکانس‌های فونونی آن‌ها را بررسی‌کرد [۱۱]. شکل ۳ فرکانس‌های فونونی اپتیکی و آکوستیکی را برای ترکیب PdH در فاز مکعبی نشان‌می‌دهد. همان‌طور که از شکل پیداست در این ترکیب هیچ‌گونه شاخه فونونی منفی دیده‌نمی‌شود که به معنای پایداری مکانیکی این ساختار است. همچنین بایستی ذکر کرد که در ابتدا این ساختار ناپایدار شد. که پس از اضافه کردن اثرات نسبیتی به خاطر جرم سنگین اتم پالادیوم، همچون اثرات برهمکنش اسپین-مدار این ترکیب پایدار شد، نشان می دهد این اثرات در این ساختار نقش به‌سزایی را ایفا می‌کنند[۱۳]. همچنین در راستای Γ-X مدهای اکوستیکی طولی و عرضی کاملا ازهم تفکیک شده‌اند که نشان می‌دهد در این راستا تقارن شکسته‌شده‌است. همچنین مدهای اپتیکی در نقطه Γ تبهگن هستند که نشان دهنده فلزی بودن این ساختار است.



شکل ۴:نمودار فرکانس فونونی ترکیب Pd_2H

شکل ۴ نمودار پاشندگی فونونی یکی از ترکیب های محاسبه شده را نشان می‌دهد. این ساختار دارای ۹ اتم در سلول واحد است. بنابریان ساختار دارای ۱۸ مد فونونی است. همانند ترکیب PdH این ترکیب نیز هیچ‌گونه بسامد فونونی منفی درتمام منطقه بریلوئن از خود نشان‌نمی‌دهد ،به معنای پایداری این فاز است. در راستای های Γ-M و K-Γ مدهای اپتیکی دارای شیب زیادی هستند،که نشان‌می‌دهد برهمکنش‌های فونونی در این راستاها می‌تواند بسیار مهم باشند. پس می‌توان محاسبات اصول اولیه ابررسانایی را برپایه BCS نشان‌داد که دمای گذار ابررسانایی این ساختار تقریبا K ۰/۲ است ، که دلیلی بر همکنش ضعیف الکترون-فونون در این ساختار است. این امر نشان می دهد که این ساختار ابررسانای فونون-واسطه ضعیفی است.



شکل ۵:نمودار فرکانس فونونی ترکیب Pd_4H

شکل ۵ طیف فونونی Pd_4H را نشان‌می‌دهد که این ساختار دارای ۵ اتم در سلول واحد است. بنابراین این ترکیب دارای ۱۵ مد فونونی است. و به دلیل سنگین بودن اتم پالادیوم نسبت به اتم هیدروژن مدهای اتم پالادیوم بیشتر

در فرکانس پایین قراردارد ،پس مدهای اتم هیدروژن در فرکانس‌های بالاتر قرارمی‌گیرد. همانند دو ساختار قبل این ترکیب پیشنهاد شده توسط الگوریتم ژنتیک به دلیل منفی نبودن فرکانس‌ها از نظر مکانیکی پایدار به نظر می‌رسد. همانطور که در شکل دیده‌می‌شود بین مدهای اکوستیکی و اپتیکی در این ساختار هم‌پوشانی وجود دارد ، پس ترکیب مورد نظر عایق حرارتی خوبی به نظرنمی‌رسد.مدهای اپتیکی در بسامدهای $۴۰۰\ cm^{-1}$ و cm^{-1} ۵۰۰ تقریبا صاف هستند که این امر حالت های بسیار بزرگی در چگالی حالت‌های فونونی ایجادمی‌کند که برای خواص ابررسانایی می‌تواند موثرباشد. با این وجود محاسبات بر همکنش الکترون-فونون برای این ساختار نیز نشان داد که دمای ابررسانایی این ساختار تقریبا K ۰/۳ است که نشان می دهد بر همکنش الکترون-فونون در این ترکیب نیز صعیف است. با این وجود سعی و کوشش ما برای یافتن این ترکیب ها در فشارهای بالاتر ادامه دارد ، آیا می‌توانیم با افزایش فشار و یافتن ترکیب‌های گوناگون در فشارهای بالاتر شاهد افزایش دمای بحرانی ابررسانایی باشیم یا خیر؟!

نتیجه‌گیری

در پژوهش حاضر با استفاده از بسته نرم افزار USPEX که برمبنای الگوریتم ژنتیک و بسته محاسباتی Quantum Espresso است ،اقدام به یافتن ترکیب های جدید PdHx در فشار Gpa ۵۰و ۰GPa نمودیم. که محاسبات سه ترکیب به صورت PdH وPd_2H و Pd_4H را پیشنهاد می‌دهد. محاسبات فونونی نشان می دهد که ترکیب‌های یافت‌شده بااستفاده از الگوریتم ژنتیک پایدار هستند. اما محاسبات ابررسانایی اصول اولیه بر پایه BCS نشان‌داد که این ترکیب‌های یافت‌شده دارای دمای گذار پایین ابررسانایی هستند که نشان‌می‌دهد بر همکنش الکترون-فونون در این ساختارها ضعیف است. بنابراین تلاش برای یافتن ترکیب‌هایی بر پایه پالادیوم و هیدرژن در فشارهای بالاتر ادامه دارد تا بتوان دمای گذار ابررسانایی را در ترکیبات هیدریدهای پالادیم افزایش داد.

سپاسگزاری

از حمایت مالی معاونت پژوهشی دانشگاه تهران تشکر می‌کنیم .

مرجع‌ها

[۱]*Tripodi, P ,etal ,Possibility of high temperature superconducting phases in PdH. Physica C: Superconductivity, 388, 571-572. ,(2003)*
[۲]*Manchester, F. D., etal., The H-Pd (hydrogen palladium) system. Journal of phase equilibria, 15(1), 62-83. (1994)*
[۳]*Kawae, T.,etal. , Superconductivity in palladium hydride systems. Journal of the Physical Society of Japan, 89(5), 051004. (2020)*
[۴] *Anelli, A., etal. Generalized convex hull construction for materials discovery. Physical Review Materials, 2(10), 103804. (2018)*
[۵]*Mitchell, M., An introduction to genetic algorithms. MIT press. (1998)*
[۶]*Andrew, A. M., Another efficient algorithm for convex hulls in two dimensions. Information Processing Letters, 9(5), 216-219. (1979)*
[۷]*Glass, C. W.,etal .USPEX—Evolutionary crystal structure prediction. Computer physics communications, 175(11-12), 713-720. (2006)*
[۸]*Chen, W. C.. Predictive Modeling of Superhard and Topological Materials by Density Functional Theory and Machine Learning (Doctoral dissertation, The University of Alabama at Birmingham). (2021)*
[۹]*Tripodi, P., etal. Superconductivity in PdH: phenomenological explanation. Physica C: Superconductivity, 408, 350-352. (2004)*
[۱۰] *Oganov, A. R., etal , Crystal structure prediction using ab initio evolutionary techniques: Principles and applications. The Journal of chemical physics, 124(24),244704.(2006)*
[۱۱]*Weber, F., etal . Phonons and electron-phonon coupling in the phonon-mediated superconductor YNi2B2C. arXiv preprint arXiv:1404.0526.(2014)*
[۱۲]*Kowalska, E., Influence of PdHx formation ability on hydrogen sensing properties of palladium-carbonaceous films. Sensors and Actuators A: Physical, 203, 434-440. (2013)*
[۱۳]*Setayandeh, S. S., etal . Electron and phonon band structures of palladium and palladium hydride: a review. Progress in Solid State Chemistry, 60, 100285. (2020)*

بررسی اتصالات جوزفسون با لایه میانی فرومغناطیس با استفاده از روش بستگی قوی

پاشایی اصل، پیام [۱]؛ عبداللهی پور، بابک [۱]

[۱] گروه فیزیک ماده چگال، دانشکده فیزیک، دانشگاه تبریز، تبریز

چکیده

جریان جوزفسون یک جریان ناشی از تونل زنی جفت های کوپر از میان دو ابررسانا است که توسط یک لایه ی غیر ابررسانا به هم متصل شده‌اند. این لایه ی میانی می‌تواند عایق، فلز نرمال و یا یک ماده مغناطیسی باشد. ما در این مقاله به بررسی اتصالات جوزفسون متشکل از لایه‌ی میانی فرومغناطیس با استفاده از رویکرد حل عددی معادله ی بوگولیوبوف –دوژن مبتنی بر مدل بستگی قوی خواهیم پرداخت. ما حالت‌های مختلفی برای مغناطش لایه فرومغناطیسی را در نظر گرفته و نمودار جریان–فاز در این حالات را مورد بررسی قرار می‌دهیم.

واژه های کلیدی: *اتصالات جوزفسون، ، **ابررسانا**، فرومغناطیس، معادله بوگولیوبوف – **دوژن***

Study of Josephson junctions with ferromagnetic interlayer using the tight binding method

Pashaei asl, Payam[1]; Abdollahipour, Babak[1]

[1] *Department of Physics, University of Tabriz, Tabriz,*

Abstract

Josephson current is a current caused by tunneling of the Cooper pairs between two superconductors connected by a non-superconducting layer. This intermediate layer can be insulator, normal metal, or a magnetic material. In this paper, we investigate the Josephson junctions consisting of a ferromagnetic layer by numerical solution of the Bogoliubov-de Gennes equation based on the tight binding method. We consider different forms for the magnetization of the ferromagnetic layer and study the current-phase dependence of the Josephson current in these states.

***Keywords**: Josephson junctions, Superconductor, Ferromagnet, Bogoliubov-de Gennes equation*

PACS No.

مقدمه

اتصالات جوزفسون به عنوان یک ابزار فعال در حوزه الکترونیک ابررسانا و فناوری اطلاعات کوانتومی استفاده می‌شود. ویژگی‌های برجسته الکترونیک غیرخطی و یک رابطه‌ی معمولا سینوسی بین جریان و اختلاف فاز ابررسانا برای این اتصال وجود دارد[۱]. علاوه بر این علاقه‌ی زیادی به خواص جدید واسطها و اتصالات ابررسانا ها با مواد مغناطیسی وجود دارد. ساختارهای هیبریدی متشکل از مواد ابررسانا و مغناطیسی به عنوان دستگاه هایی با قابلیت جدید شناخته شده‌اند[۲]. یکی از جالب‌ترین اثرات در این نوع اتصالات (S/FM/S) تشکیل حالت‌های π است[۲و۳]. در شرایط مناسب یک فرومغناطیس می‌تواند به عنوان یک جابجا کننده فاز از حالت عادی $\phi=0$ به $\phi=\pi$ عمل کند که اخیرا از این ویژگی برای ساخت سیستم‌های بیت کوانتومی (کیوبیت) برای محاسبات کوانتومی استفاده می‌شود[٤]. بنابراین اتصالات $0-\pi$ جوزفسون با یک لایه میانی غیرفلزی برای کاربرد به عنوان کیوبیت بسیار مورد توجه هستند[۵]. به طور کلی قرار دادن مواد فرومغناطیسی در یک اتصال جوزفسون با سرکوب نظم ابررسانایی همراه است، اما همچنین می‌تواند پدیده‌های جدیدی به وجود بیاید که ممکن است

امکان طراحی مدارهای جدید را فراهم کند و انجام محاسبات را سرعت بخشد.

مدل و معادلات اساسی

ابتدا هامیلتونی سیستم ابررسانا را به شکل معادله هابارد با استفاده از تصویر کوانتش دوم بیان می‌کنیم. ابررساناهای فلزی را بصورت یک شبکه مربعی دو بعدی مدل می‌کنیم. بنابراین در حالت کلی هامیلتونی یک اتصال جوزفسون با لایه فرومغناطیس میانی بر روی یک شبکه مربعی دو بعدی ساده عبارت است از:

$$H = t\sum_{<ij>\sigma}^{n} c_{i\sigma}{}^{\dagger}c_{i\sigma} + \sum_{ij\sigma}^{n}(\Delta_{ij}c_{i\sigma}{}^{\dagger}c_{j\bar{\sigma}}{}^{\dagger} + H.C)$$
$$-\sum_{i\sigma}^{n} n_{i\sigma}(\mu - hi) + \sum_{i}^{n} m_i(n_{i\sigma} - n_{i\bar{\sigma}}) \qquad (۱)$$

که جمله اول در این رابطه انرژی جنبشی الکترون‌ها، جمله دوم اندرکنش جاذبه موثر بین الکترون‌ها، جمله سوم انرژی روی هر سایت و جمله چهارم انرژی نظم مغناطیسی را نشان می‌دهد. در این رابطه $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}{}^{\dagger}c_{i\sigma}$ عملگر تعداد ذرات با اسپین σ در سایت i و Δ پارامتر نظم ابررسانایی است که با فرض ابررسانای تک-گانه i=j خواهد بود و t پارامتر پرش به نزدیک‌ترین همسایه می‌باشد. m پارامتر نظم مغناطیسی و μ پتانسیل شیمیایی می‌باشد. پارامترهای نظم ابررسانایی و نظم مغناطیسی به صورت خودسازگار و به ترتیب با استفاده از روابط:

$$\Delta_{ij} = -\left(\frac{V_i}{2}\right) < c_{i\sigma}c_{j\bar{\sigma}} - c_{i\bar{\sigma}}c_{j\sigma} > \qquad (۲)$$

$$m_i = \frac{U_i}{2}(\langle n_{i\sigma}\rangle - \langle n_{i\bar{\sigma}}\rangle) \qquad (۳)$$

بدست می‌آیند. U_i و V_i پتانسیل‌های ابررسانایی و مغناطیسی هستند که وابسته به سایت هستند[٦و٧و٨]. با استفاده از تقریب میدان میانگین و تبدیلات بوگولیوبوف–دوژن، معادله بوگولیوبوف–دوژن برای این اتصال با استفاده از هامیلتونی ۱ بصورت رابطه زیر بدست می‌آید:

$$\begin{bmatrix} -t\delta_{\langle ij\rangle} - \mu\delta_{ij} \pm \sigma mi\delta_{ij} & \cdots & -\Delta i\delta_{ij} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \Delta i\delta_{ij} & \cdots & t\delta_{\langle ij\rangle} + \mu\delta_{ij} \mp \sigma mi\delta_{ij} \end{bmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} u_{\sigma n}(j) \\ \vdots \\ v_{\bar{\sigma}n}(j) \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} u_{\sigma n}(j) \\ \vdots \\ v_{\bar{\sigma}n}(j) \end{pmatrix}$$

(٤)

با در نظر گرفتن شرایط مرزی دوره‌ای در راستای عرضی و با توجه به وجود تقارن انتقالی در این راستا، تبدیل فوریه هامیلتونی بوگولیوبوف–دوژن در راستای عرضی (y) را به دست می‌آوریم. در نتیجه معادله حرکت سیستم بصورت یک معادله یک بعدی در راستای طولی (x) درمی‌آید:

$$E_{in\sigma}u_{in\sigma}(k_y) = -te^{ik_y a j_y}\left(u_{n\sigma,j_x+1}(k_y) + u_{n\sigma,j_x-1}(k_y) + 2cos(k_y)u_{j_x,n\sigma}(k_y)\right) - \Delta_i v_{i\sigma'}(k_y) + \sigma m_i u_{i\sigma}(ky) - \mu u_{i\sigma}(k_y)$$

(٥)

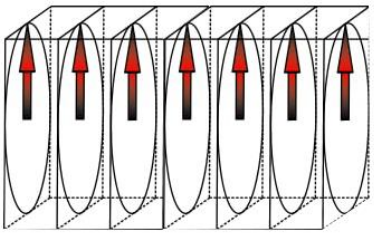
با حل عددی این معادله ماتریسی برای یک سیستم با طول محدود ویژه مقادیر و ویژه توابع هامیلتونی را بر حسب اندازه حرکت عرضی به دست می‌آوریم. نهایتا جریان جوزفسون برای چنین اتصالی را می‌توان به صورت رابطه زیر بدست آورد:

$$J_{ij} = te/ih\sum_{Ky,\sigma,\bar{\sigma}}^{n} u^{*}{}_{\sigma n}(k_y)u_{\sigma n}(k_y)F(E_{n\sigma}) + v^{*}{}_{\bar{\sigma}n}(k_y)v_{\bar{\sigma}n}(k_y)F(-E_{n\sigma})$$

(٦)

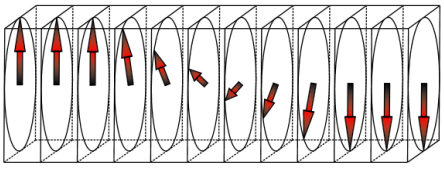
در این رابطه J_{ij} بر حسب توابع موج الکترون‌گونه و حفره‌گونه بین دو سایت i و j مجاور هم محاسبه می‌شوند و $-\boldsymbol{\pi} < k_y \leq \boldsymbol{\pi}$ است و $F(E_{n\sigma})$ تابع توزیع فرمی–دیراک می‌باشد. در این مطالعه جریان جوزفسون بر حسب اختلاف فاز ابررسانایی برای حالت‌های متفاوت مغناطش در لایه‌ی فرومغناطیس میانی بررسی می‌شود. حالت اول یک لایه‌ی فرومغناطیسی با مغناطش یکنواخت در کل طول پیوند می باشد شکل (۱). حالت دوم متشکل از دو لایه مغناطیسی با جهت‌گیری‌های مخالف‌هم با یک دیواره حوزه کاملا تیز و ناگهانی بین آنهاست. یعنی نصف طول پیوند دارای مغناطش +m و نصف

دیگر طول پیوند مغناطش مخالف m- دارد. در حالت سوم مغناطش در طول پیوند بصورت خطی تغییر می‌کند $m=m_0(1-2|x|/L)$ که L طول پیوند را نشان می‌دهد، شکل (۲). و حالت نهایی مربوط به تغییر مغناطش لایه فرومغناطیسی با مکان بصورت یک تابع سینوسی خواهد بود $m \sin(2\pi x/L)$ ، شکل (۳).



شکل(۱): مغناطش یکنواخت در لایه میانی

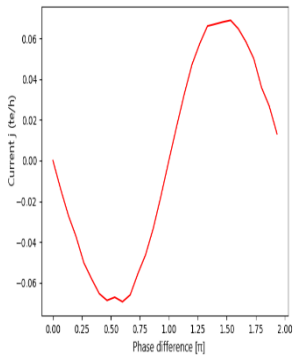
شکل(۲): تغییر خطی مغناطش در لایه میانی

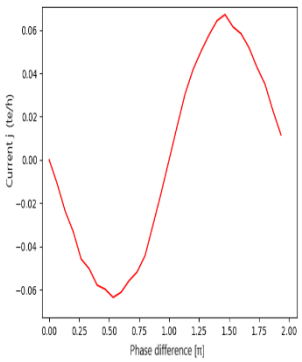


شکل(۳): تغییر مغناطش سینوسی در لایه میانی

نتایج محاسبات

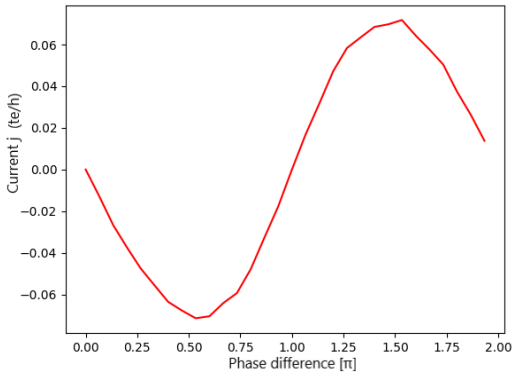
ما جریان dc جوزفسون در اتصال S/FM/S را بر روی یک شبکه مربعی در راستای (۱۰۰) محاسبه می‌کنیم. در تمامی حالت‌ها اتصال جوزفسون در دمای ثابت T = ۱۰K در نظر گرفته می‌شود. شکل ٤ (الف) و (ب) نمودار جریان–فاز را برای حالت مغناطش یکنواخت و بازای دو طول مختلف لایه فرومغناطیس نشان می‌دهد. نمودار جریان–فاز بصورت یک منحنی تقریبا سینوسی است. این نمودار نشان می‌دهد که جریان بحرانی (بیشینه جریان) به طول اتصال (ضخامت لایه فرومغناطیسی) وابسته بوده و با افزایش طول اتصال جریان بحرانی کاهش می‌یابد. طول اتصال در نمودار (الف) ۲۰ برابر ثابت شبکه و در نمودار (ب) ۱۰ برابر ثابت شبکه در نظر گرفته شده است. شکل ۵ نمودار جریان–فاز را برای اتصال جوزفسون با لایه مغناطیسی میانی که اندازه مغناطش آن بصورت خطی با مکان تغییر می‌کند و در شکل ۲ نمایش داده شده است نشان می‌دهد. ملاحظه می‌شود که اندازه جریان بحرانی و شکل نمودار جریان–فاز در این حالت تفاوت چندانی با حالت مغناطش یکنواخت ندارد. شکل ٦ نمودار جریان–فاز اتصال جوزفسون با لایه میانی متشکل از دو لایه فرومغناطیسی با مغناطش‌های پادموازی و با ضخامت یکسان را نشان می‌دهد. مقایسه این نمودار با نمودارهای قبلی نشان می‌دهد که بیشینه جریان بطور قابل ملاحظه‌ای افزایش یافته است. چنین افزایش قابل ملاحظه‌ای در بیشینه جریان نشان دهنده نفوذ بیشتر همبستگی‌های ابررسانایی به داخل ناحیه مغناطیسی متشکل از دو لایه با مغناطش‌های پادموازی است که از سازگاری بیشتر نظم ابررسانایی با نظم پادفرومغناطیسی حکایت دارد. و بالاخره شکل ۷ نمودار جریان–فاز برای اتصال جوزفسون که در آن مغناطش لایه فرومغناطیس میانی بصورت سینوسی با مکان تغییر می‌کند (شکل۳) را نشان می‌دهد. ملاحظه می‌شود که اندازه بیشینه جریان در این حالت مقداری بزرگتر از حالت مغناطش یکنواخت ولی کمتر از حالت مغناطش متشکل از دو لایه با مغناطش‌های پادموازی دارد. دلیل فیزیکی برای این نتیجه از آنجا ناشی می‌شود که در این حالت نیز عملا دو لایه مغناطیسی با مغناطش‌های پادموازی وجود دارد ولی مغناطش در داخل هر لایه یکنواخت نبوده و همچنین مغناطش بجای تغییر ناگهانی در بین دو لایه به آرامی در بین دو لایه تغییر جهت می‌دهد.



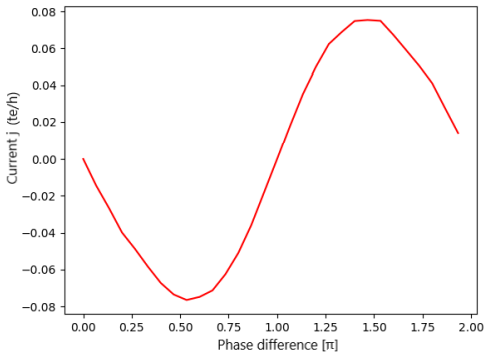


٤ (الف): نمودار جریان–فاز برای حالت مغناطش یکنواخت با طول اتصال برابر با ۲۰ ثابت شبکه

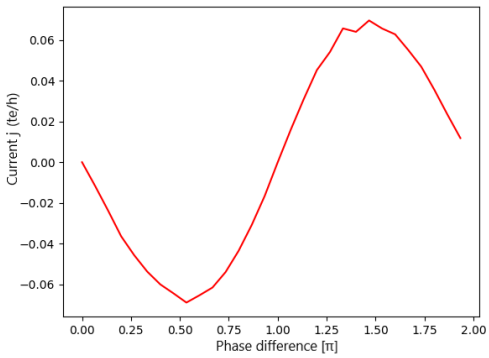
٤ (ب): نمودار جریان–فاز برای حالت مغناطش یکنواخت با طول اتصال برابر با ۱۰ ثابت شبکه



شکل۵ : نمودار جریان–فاز برای حالت تغییر خطی مغناطش لایه مغناطیسی میانی با مکان و طول اتصال برابر ۲۰ ثابت شبکه



شکل ٦ : نمودار جریان–فاز اتصال جوزفسون با لایه میانی متشکل از دو لایه مغناطیسی با مغناطش‌های پادموازی و طول ۲۰ ثابت شبکه



شکل ۷ : نمودار جریان–فاز اتصال جوزفسون با لایه فرومغناطیس میانی با مغناطش متغییر بصورت سینوسی در مکان و طول ۲۰ ثابت شبکه

در حل عددی مسله ثابت های اتصال وابسته به سایت رو برحسب $t = ۲.۵$ ev به شکل $V_i = ۰.۲t$ و $U_i = ۰.۳t$ و $\mu = ۰.٦t$، $m=۰.۳t$ از طرفی یک مقدار اولیه برای نظم ابررسانایی در نظر گرفته می‌شود $\Delta_0 = ۰/۰۴t$.

نتیجه‌گیری

با توجه به نمودارهای جریان–فاز بدست آمده، ملاحظه می‌شود که همانگونه که انتظار می‌رود افزایش طول اتصال و تغییر پروفایل مغناطش لایه مغناطیسی میانی می‌تواند تاثیر محسوسی بر جریان بیشینه اتصال یا جریان بحرانی داشته باشد. مشاهده می‌شود که با افزایش طول اتصال جریان بحرانی کاهش می‌یابد. جریان بحرانی در حالتی که لایه مغناطیسی میانی متشکل از دولایه با مغناطش‌های پادموازی است مقدار بیشتری نسبت به حالت‌های دیگر دارد که نشان دهنده سازگاری بهتر نظم ابررسانایی با نظم پادفرومغناطیسی است.

مرجع‌ها

[۱] Himmel, N. (2015). Josephson junctions with ferromagnetic alloy interlayer.

[۲] Naess, K. (2019). *Thermoelectric Properties of (Anti) ferromagnet Superconductor Hybrid Junctions* (Master's thesis, NTNU).

[۳] Bozorth, R. M. (1993). *Ferromagnetism* (p. 992). (Wiley-VCH).

[۴] Kawabata, S., Asano, Y., Tanaka, Y., Golubov, A. A., & Kashiwaya, S. (2010). Josephson π state in a ferromagnetic insulator. *Physical review letters*, ***104*(11)**, 117002.

[۵] Zhu, J. X. (2016). *Bogoliubov-de Gennes method and its applications*. (Berlin: Springer).

[۶] Schmidt, V. V., Schmidt, V. V., Müller, P., & Ustinov, A. V. (1997). *The physics of superconductors: Introduction to fundamentals and applications*.(Springer Science & Business Media).

[۷] Muñoz, W. A., Covaci, L., & Peeters, F. M. (2012). Tight-binding study of bilayer graphene Josephson junctions. *Physical Review B*, ***86*(18)**, 184505.

[۸] Black-Schaffer, A. M., & Doniach, S. (2008). Self-consistent solution for proximity effect and Josephson current in ballistic graphene SNS Josephson junctions. *Physical Review B*, ***78*(2)**, 024504.

ابررسانایی آمیخته تک گانه و سه گانه در مولیبدن دی سولفاید

خضرلو ، مریم

دانشکده فنی خوی، دانشگاه صنعتی ارومیه، ارومیه

چکیده

جمله جفت شدگی اسپین – مدار در تک لایه مولیبدن دی سولفاید منجر به شکست تقارن وارونی می گردد. ابررسانایی در چنین سیستم هایی با شکست تقارن وارونی به صورت آمیخته اسپین تک گانه و سه گانه می باشد. لذا در تک لایه مولیبدن دی سولفاید باید ابررسانایی آمیخته مورد بررسی قرار گرفته و نتیجه آن بر روی رفتارهای فیزیکی مطالعه شود. در بررسی حالت آمیخته اسپینی میتوان هر کدام از این حالات اسپین تک گانه با اسپین سه گانه را به طور همزمان در نظر گرفت. در بررسی طیف پراکندگی ابررسانایی آمیخته در مولیبدن دی سولفاید تک لایه، یکی از حالات دارای ویژگی بسیار جالبی می باشد. اگر حالت آمیخته شامل قسمت اسپین تک گانه با بخش زوج اوربیتالی و شبه اسپین بوده و قسمت اسپین سه گانه دارای بخش فرد اوربیتالی و زوج شبه اسپین باشد، طیف انرژی دارای کج شدگی خواهد بود.

واژه های کلیدی: *تک لایه مولیبدن دی سولفاید، ابررسانایی آمیخته، شبه اسپین، کج شدگی انرژی.*

PACS No. *81, 74*

مقدمه

مواد دیراک به جهت اینکه دو نوار انرژی خطی آنها در نقطه دیراک به همدیگر می رسند در فیزیک ماده چگال از اهمیت بالایی برخوردار هستند. انواع مختلفی از مواد دیراک از جمله بروفن 8- Pmmn [۱]، رسانای ارگانیک لایه ای $\alpha(BEDT-TTF)_2I_3$ [۲] و کلاس خاصی از عایق های توپولوژیک [۳] که هامیلتونی موثر انرژی پایین دارند توسط مخروط های دیراک کج توصیف می شوند. طیف دیراک کج بیانگر اثرات قابل توجهی در گذارهای کوانتومی هستند و زمینه گسترده ای در مطالعات ماده چگال ایجاد می کنند.

تک لایه ترکیبات فلزات واسطه با چالکوگنیدها (TMDs) به علت درجه آزادی اسپین و چاهک الکترونها در ابزارهای اسپینترونیک از اهمیت بالایی برخوردار هستند [۴]. این در حالی است که ترکیبات شش گوشه گرافن در زمینه های مختلف، متفاوت رفتار می کنند. TMDsها نیمه رساناهایی با گاف انرژی در نقاط دیراک می باشند و جفت شدگی اسپین–مدار قوی در آنها منجر به جداشدگی قابل توجهی در نوار ظرفیت میشود [۵و۶] . لذا دو چاهک تبهگن (K,-K) به علت شکست تقارن وارونی و جفت شدگی اسپین–مدار قوی در نقاط دیراک ایجاد می شود که با عدد شبه اسپین چاهک توصیف می شوند و با تقارن معکوس زمانی با یکدیگر مرتبط هستند. از آنجایی که اندیس اسپین در TMDsها به چاهک قفل شده است، مقدار ممان مغناطیسی برای دو چاهک یکسان و دارای علامت های مختلف می باشد [۷و۸]. طبق مطالعات تئوری و تجربی تحت شرایط خاص می توان خاصیت ابررسانایی را در TMDs ها القا نمود[۹–۱۲]. در ابررساناهای بدون مرکز تقارن، عدم وجود مرکز وارونی منجر به جفت شدگی اسپین–مدار نامتقارن می گردد که این موضوع پاسخ های اسپینی و مداری را در حالات ابررسانایی تحت تاثیر قرار می دهد. جفت شدگی اسپین–مدار نامتقارن در شبکه های ابررسانای بدون مرکز تقارن دوبعدی منجر به بروز ابررساناهای ترکیبی تک گانه و سه گانه می گردد [۱۳]. لذا ظهور چنین ابررساناهای ترکیبی تک گانه و سه گانه در TMDs ها مطرح می گردد. در کار حاضر اثر ابررسانایی ترکیبی بر روی طیف انرژی مورد مطالعه و بررسی قرار می گیرد. ماده مورد مطالعه تک لایه TMDs خواهد

بود که با شکل های مختلف ماتریس ابررسانایی در هامیلتونی بررسی می شود.

تئوری مسئله و فرمالیسم

خاصیت ابررسانایی به واسطه اثر مجاورت می تواند در نمونه مولیبدن دی سولفاید القا شود. باید توجه داشت که شبکه لانه زنبوری تک لایه مولیبدن دی سولفاید منجر به تعریف دو زیر شبکه می گردد. از اینرو حالات ابررسانایی در این ماده دارای تابع موج جفت کوپر مشتمل بر سه قسمت اسپینی ψ_S، اوربیتالی ψ_L و زیر شبکه ψ_{A-B} به صورت $\Psi_{pair} = \psi_S \otimes \psi_L \otimes \psi_{A-B}$ خواهد بود. طبق اصل طرد پائولی و لزوم پادمتقارن بودن تابع موج این ذرات تحت تعویض ذره، می توان چهار حالت ممکن را تعریف نمود. بخش جفت شدگی تک گانه با قسمت فرد اوربیتالی و شبه اسپینی و قسمت زوج اوربیتالی و شبه اسپینی می تواند رخ دهد . هم چنین حالت اسپین سه گانه با قسمت زوج اوربیتالی و فرد شبه اسپین و همچنین فرد اوربیتالی و زوج شبه اسپین قابل تعریف است.

در کار حاضر تمرکز بر روی حالات برانگیخته حفره می باشد چرا که این حالات در دسترس آزمایشگاهی، با دو گروه غیر تبهگن اسپینی در ارتباط هستند. حالات برانگیخته حفره نسبت به حالات الکترونی از نظر جفت شدگی ابررسانایی بیشتر مورد توجه هستند زیرا به علت اوربیتال نوع d فلزات واسطه تنوع بیشتری برای انواع جفت شدگی در نوار ظرفیت ایجاد میکنند. هامیلتونی حالات کم انرژی در اطراف نقاط دیراک عبارت است از:

$$\hat{\mathcal{H}}_{TMD}(\vec{k}) = \left(at(\xi k_x \hat{\tau}_1 + k_y \hat{\tau}_2) + \frac{E_g}{2}\hat{\tau}_3\right) \otimes \hat{\sigma}_0 - \frac{\xi\lambda}{2}(\hat{\tau}_3 - \hat{\tau}_0) \otimes \hat{\sigma}_3$$

ماتریسهای پائولی $\hat{\sigma}_i$ و $\hat{\tau}_i$ به ترتیب بر روی فضای اسپینی و زیرشبکه اثر میکنند. ξ نیز بیانگر اندیس چاهک بوده و حالات ۱± دو نقطه دیراک را نشان می دهد. کمیت های نواری a و t به ترتیب با ثابت شبکه و انرژی بستگی موثر متناسب می باشند. انرژی گاف E_g فاصله بین نوار ظرفیت و رسانش را اندازه می گیرد و کمیت λ شدت جفت شدگی اسپین-مدار را نشان می دهد.

قفل شدگی اسپین-چاهک منجر به از دست رفتن تبهگنی اسپینی شده و امکان دسته بندی ابررسانایی در مولیبدن دی سولفاید را در دو کلاس بین چاهکی (با مومنتوم مرکز جرم صفر) و تک چاهکی (مومنتوم مرکز جرم جفت کوپر محدود) فراهم می سازد. به علت شکست مرکز تقارن و از دست رفتن تبهگنی اسپینی، دسته بندی ابررسانایی بر اساس دو کلاس تک گانه و سه گانه غیرممکن می باشد. در مجاورت با ابررسانای نوع s، با ناپایداری ناشی از حالت جفت شدگی بین چاهکی، اسپین جفت کوپر ترکیبی یکسان از حالت تک گانه و سه گانه اسپینی با مولفه سوم اسپین صفر خواهد بود. انرژی گاف ابررسانایی را بر حسب حالات تک گانه و سه گانه می توان به صورت زیر نوشت:

$$\hat{\Delta}_m(k) = \Delta^S(k)\hat{X}_1 e^{i\varphi_1} + d^S(k)\hat{X}_2 e^{i\varphi_2} + \Delta^T(k)\hat{X}_3 e^{i\phi_1} + d^T(k)\hat{X}_4 e^{i\phi_2}$$

که در این عبارت

$$\hat{X}_i \equiv \{\hat{\tau}_0 \otimes (i\hat{\sigma}_2), (i\hat{\tau}_2) \otimes (i\hat{\sigma}_2), (i\hat{\tau}_2) \otimes \hat{\sigma}_0, (i\hat{\tau}_3\hat{\tau}_2) \otimes (i\hat{\sigma}_3\hat{\sigma}_2)\}$$

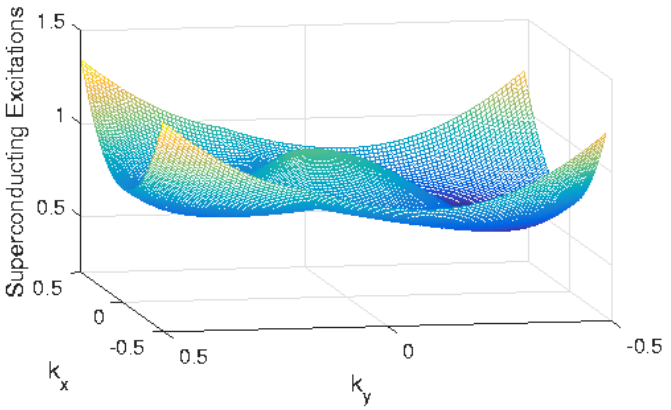
مولفه های اسپین تکتایی در صورتی که تابعی زوج نسبت به عدد موج باشند با پارامتر Δ^S توصیف می شوند و در صورت فرد بودن با پارامتر d^S توصیف می شوند. همچنین پارامتر نظم سه تایی در صورت زوج یا فرد بودن نسبت به عدد موج به ترتیب با Δ^T و d^T بیان می شوند. $\varphi \equiv (\varphi_1, \varphi_2)$ و $\phi \equiv (\phi_1, \phi_2)$ فاز ابررسانایی دو بخش تک تایی و سه تایی را نشان می دهند. پارامتر مثبت و حقیقی Δ_m بیانگر مقدار انرژی گاف ابررسانایی می باشد و برای نرمالیزه کردن پارامترهای جفت شدگی تک تایی و سه تایی بکار می رود. برای بررسی اثر ابررسانایی آمیخته می توان هامیلتونی را در غیاب تقارن اسپینی در نظر گرفته و انرژی ویژه مقداری را در حضور جملات اسپین تک گانه و سه گانه بدست آورد. برای این منظور حالتی را در نظر میگیریم که بخش تک گانه تابعی زوج و بخش سه گانه تابعی فرد نسبت به عدد موج باشد. در این صورت می توان رابطه زیر را برای انرژی برانگیختگی ابررسانایی بدست آورد:

$$\varepsilon_{mix} = \zeta\sqrt{\frac{Z_1^2 + Z_2^2}{2} + (\hbar v_F|k|)^2 + |\Delta^S|^2 + |d^T|^2 + v\sqrt{\Lambda}}$$

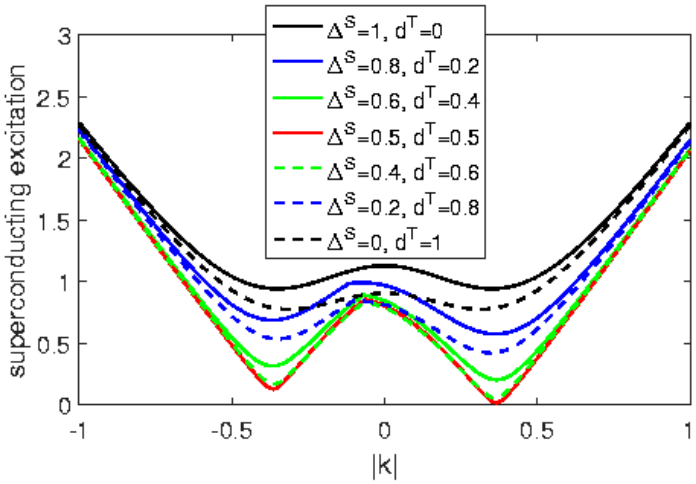
با تحلیل دقیق این فرم انرژی می توان دریافت که پارامتر کج شدگی فقط در حضور ابررسانایی آمیخته وجود خواهد داشت. از نظر گذارهای کوانتومی وجود پارامتر کج شدگی در انرژی بسیار مهم می باشد. اگر هر کدام از بخش های $|\Delta^S|$ و $|d^T|$ برابر صفر شود انرژی برانگیختگی به حالت تک گانه و سه گانه بدون کج شدگی تبدیل خواهد شد.

تحلیل انرژی ابررسانایی

در تحلیل نتایج انرژی برانگیختگی ابررسانایی را برای حالتی که بخش تک گانه تابعی زوج از عدد موج و بخش سه گانه تابعی فرد نسبت به عدد موج باشد در نمودار ۱ بدست می آوریم. انرژی که در این حالت برای ابررسانایی حاصل می شود به فرم دیراک کج شده می باشد. مواد دیراک دو بعدی جدید با مخروط دیراک کج شده در سالهای اخیر مورد توجه بسیار بوده است. در سیستم های حالت جامد شبکه های مشخصی می توانند چنین طیف دیراک کج شده ای داشته باشند. دسته عظیمی از آنها شامل بروفن و طیف خاصی از عایق های توپولوژیک هستند. مقدار بسیار اندکی از کج شدگی هم می تواند در گرافن تحت کشش ایجاد شود. در کار حاضر اثر تقارن جفت شدگی محدود به تغییر گاف موثر ابررسانایی نمی شود. زمانی که پتانسیل های جفت شدگی تک گانه و سه گانه با تابعیت متفاوت نسبت به عدد موج در هامیلتونی ابررسانایی وارد می شوند، اجزای غیر همشکل ناشی از جفت شدگی آمیخته مقدار مشخصی از کج شدگی را در طیف مخروطی دیراک گونه ایجاد می کنند. می توان نشان داد که پارامتر کج شدگی به دامنه جفت شدگی تک گانه و سه گانه وابسته است و بیشینه مقدار کج شدگی زمانی اتفاق می افتد که سهم این حالات یکسان می باشد (شکل ۲). همچنین پتانسیل جفت شدگی آمیخته موثر فقط در این شرایط می تواند برابر صفر گردد. نکته جالب توجه در این باب آن است که موقعیت گاف ابررسانایی از سهم دامنه های جفت شدگی مستقل است. در غیاب جمله جفت شدگی اسپین-مدار کج شدگی نمودار ناپدید می گردد. انرژی برانگیختگی ابررسانا به طور مستقیم با جمله جفت شدگی اسپین-مدار وابسته است.



نمودار ۱- طیف برانگیختگی ابررسانایی برای حالت آمیخته تک گانه با تابعیت زوج و سه گانه با تابعیت فرد نسبت به اندازه حرکت



نمودار ۲- بررسی میزان کج شدگی طیف برانگیختگی ابررسانایی با تغییر سهم قسمت های تک گانه و سه گانه

نتیجه گیری

ایجاد طیف دیراک کج شده گذارهای کوانتومی را در ساختارهای ماده چگال به شدت تحت تاثیر قرار می دهد. در کار حاضر صرفا با در نظر گرفتن ابررسانایی ترکیبی بدون اینکه ساختار ماده تغییری داشته باشد می توان به طیف دیراک کج شده رسید. طبیعتا این خاصیت فرآیندهای مهمی چون جریان جوزفسون و انعکاس آندریف را تحت تاثیر قرار خواهد داد و

نتایج این طرح راه را برای مطالعات چنین ساختارهایی فراهم می نماید.

مرجع‌ها

[1] A. D. Zabolotskiy, Y. E. Lozovik, *Phys. Rev. B* **94** (2016) 165403.
[2] S. Katayama, A. Kobayashi, Y. Suzumura, *J. Phys. Soc. Jpn.* **75** (2006) 054705.
[3] A. Varykhalov et. al., *Phys. Rev. B* **95** (2017) 245421.
[4] J. R. Schaibley, H. Yu, G. Clark, P. Rivera, J. S. Ross, K. L. Seyler, W. Yao, X. Xu, *Nat. Rev. Mater.* **1** (2016) 16055.
[5] Z. Y. Zhu, Y. C. Cheng, U. Schwingenschlogl, *Phys. Rev. B* **84** (2011) 153402.
[6] D. Xiao, G. B. Liu, W. Feng, X. Xu, W. Yao, *Phys. Rev. Lett*. **108** (2012) 196802.
[7] X. Xu, W. Yao, D. Xiao, T. F. Heinz, *Nat. Phys*., **10** (2014) 343.
[8] H. Zeng, J. Dai, W. Yao, D. Xiao, X. Cui, *Nat. Nanotechnol*., **7** (2012) 490.
[9] J. T. Ye, Y. J. Zhang, R. Akashi, M. S. Bahramy, R. Arita, Y. Iwasa, *Science* **338** (2012) 1193.
[10] Y. Saito et. al., *Nat. Phys.* **12** (2016) 144.
[11] N. F. Q. Yuan, K. F. Mak, K. T. Law, *Phys. Rev. Lett.* **113** (2014) 097001.
[12] D. J. Trainer et. al., *ACS Nano* **14** (2020) 2718.
[13] M. R. Aliabad, M. H. Zare, *Phys. Rev. B* **97** (2018) 224503.

اثر برهمکنش تماسی سه جسمی در میرایی گاز بوزونی چگالیده

منیری، سید مصطفی [۱]؛ دارششدر، النار [۲]

[۱] گروه علوم پایه، دانشکده فنی مهندسی گلپایگان، دانشگاه صنعتی اصفهان، گلپایگان، ۶۷۴۹۷-۸۷۷۱۷

[۲] دانشکده فیزیک، دانشگاه کردستان، سنندج، ۱۶۱۷۵-۶۶۱۷۷

چکیده

در این مقاله تأثیر برهمکنش تماسی سه جسمی در میرایی گاز بوزونی چگالیده و رقیق بررسی می شود. برای این کار از تقریب میدان میانگین و تقریب پوپوف در محاسبات استفاده می‌شود. این بررسی برای نسبت‌های متفاوت برهمکنش سه جسمی نسبت به برهمکنش دوجسمی در حد دماهای پایین انجام شده است. با توجه به محاسبات انجام شده، نشان داده شده است که با افزایش قدرت برهمکنش سه جسمی نسبت به برهمکنش دوجسمی میرایی لاندائو کاهش پیدا می کند.

واژه های کلیدی: ***گاز بوزونی، میرایی لاندائو***

The effect of three-body contact interaction on condensed Bose gas damping

Moniri, Seyed Mostafa[1]; Darsheshdar, Elnaz[2]

[1] *Basic Sciences Group, Golpayegan College of Engineering, Isfahan University of Technology, Golpayegan 87717-67498, Iran*

[2] *Department of Physics, University of Kurdistan, P.O. Box 66177 15175, Sanandaj, Iran*

Abstract

In this paper, the effect of three-body contact interaction on the damping of condensed and dilute Bose gas is investigated. To do this, the mean field approximation and the Popov approximation are used in the calculations. This study was performed at different values of three-body interaction strength than two-body interaction at low temperatures. According to the calculations performed, it is shown that Landau damping decreases with increasing strength of three-body interaction compared to two-body interaction.

***Keywords**: Bose gas, Landau damping*

PACS No. 32

مقدمه

علاوه بر برهمکنش های تماسی دو جسمی، برهمکنش های سه جسمی نیز نقش مهمی در طیف گسترده ای از پدیده های فیزیکی در گازهای چگالیده دارند و فیزیک جدیدی را در مقایسه با برهمکنش های دو جسمی ارائه می دهند. برهمکنش سه جسمی در گاز فراسرد بوزونی در فضای آزاد بررسی شده است [۱]. تعامل بین برهمکنش جاذبه دوجسمی و برهمکنش دافعه تماسی سه جسمی منجر به پدیده های جدیدی در گازهای بوزونی و فرمیونی می‌شود. اثرات برهمکنش سه جسمی در برانگیختگی‌های جمعی، دمای گذار، تخلیه چگاله، پایداری چگاله‌های بوزونی و بارگذاری اتمهای بوزونی فوق‌سرد در شبکه های نوری تاکنون مورد بررسی قرار گرفته‌اند. وجود یک برهمکنش دافعه سه جسمی خالص، چگالی انرژی میدان متوسط را به $n^{5/2}$ (n چگالی ذرات است) تغییر می‌دهد. اخیرا در آزمایشها پایداری قطرات کوانتومی با برهمکنش‌های جاذبه سه جسمی مشاهده شده است [۲]. در واقع این مسئله با در نظر گرفتن اثر افت و خیزهای کوانتومی LHY (لی، هوانگ و یانگ) که اولین بار در سال ۱۹۵۷ مورد مطالعه قرار گرفت، توضیح داده می‌شود [۳]. از طرفی این افت و خیزهای

جمعی در یک گاز بوزنی میرا می‌شوند. دو فرایند میرایی متفاوت می‌تواند اتفاق بیافتد. یک فرایند میرایی بلیاو که ناشی از واپاشی یک برانگیختگی به دو برانگیختگی است و در دمای صفر رخ می‌دهد [٤]. فرایند دیگر میرایی لاندائو است که ناشی از پراکندگی مدهای جمعی توسط برانگیختگی‌های گرمایی است. این فرایند در دمای معین اتفاق می‌افتد و با افزایش دما به فرایند میرایی غالب در سامانه‌ها تبدیل می‌شود [٤].

در این مقاله، اثر برهمکنش‌های جاذبه دوجسمی و برهمکنش دافعه تماسی سه جسمی در میرایی لاندو در یک گاز رقیق و چگالیده بوزونی مطالعه می شود.

فرمول بندی سامانه‌ی تحت مطالعه

یک گاز رقیق چگالیده از بوزون ها با برهمکنش تماسی دو و سه جسمی را در نظر می گیریم. هامیلتونی کوانتیزه شده‌ی این سیستم بصورت زیر است

$$\mathcal{H}=\int d\mathbf{r}\Psi^{\dagger}(\mathbf{r},t)[-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m}-\mu(\mathbf{r})]\Psi(\mathbf{r},t)$$
$$+\frac{g_2}{2}\int d\mathbf{r}\Psi^{\dagger}(\mathbf{r},t)\Psi^{\dagger}(\mathbf{r},t)\Psi(\mathbf{r},t)\Psi(\mathbf{r},t) \qquad (۱)$$
$$+\frac{g_3}{6}\int d\mathbf{r}\Psi^{\dagger}(\mathbf{r},t)\Psi^{\dagger}(\mathbf{r},t)\Psi^{\dagger}(\mathbf{r},t)\Psi(\mathbf{r},t)\Psi(\mathbf{r},t)\Psi(\mathbf{r},t)$$

که در آن $\Psi^{\dagger}(\mathbf{r})$ و $\Psi(\mathbf{r})$ به ترتیب عملگرهای خلق و نابودی هستند، m جرم ذره است، μ پتانسیل شیمیایی، g_2 ثابت جفت شدگی برهمکنش کوتاه برد و g_3 قدرت برهمکنش دافعه تماسی سه جسمی هستند. به طور کلی ثابت جفت شدگی برهمکنش سه جسمی g_3 یک عدد مختلط است که قسمت موهومی آن بازترکیب سه جسمی و بخش واقعی آن پارامتر پراکندگی سه جسمی را توصیف می‌کند.

ما در اینجا از روش معمول شکست تقارن پیمانه ای برای سیستم های بوزونی استفاده می‌کنیم و عملگر بوزونی را به صورت مجموع دو قسمت زیر می‌نویسیم.

$$\Psi(\mathbf{r},t)=\phi(\mathbf{r},t)+\psi(\mathbf{r},t) \qquad (۲)$$

که در آن $\phi(\mathbf{r})=\langle\Psi(\mathbf{r})\rangle$ تابع موج چگاله ها است و عملگر $\psi(\mathbf{r})$ روی نا چگاله ها عمل می کند، ذراتی که طبق تعریف دارای خاصیت $\langle\psi(\mathbf{r})\rangle=0$ هستند. با نوشتن معادله حرکت هایزنبرگ برای عملگر میدان به صورت زیر خواهیم داشت:

$$i\partial_t\phi(\mathbf{r},t)=\left(-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m}-\mu(\mathbf{r})\right)\phi(\mathbf{r},t)$$
$$+g_2\left[n_c(\mathbf{r},t)+2n(\mathbf{r},t)\right]\phi(\mathbf{r},t)+g_2m(\mathbf{r},t)\phi^*(\mathbf{r},t)$$
$$+\frac{g_3}{2}[n_c^2(\mathbf{r},t)+6n_c(\mathbf{r},t)n(\mathbf{r},t) \qquad (۳)$$
$$+m^*(\mathbf{r},t)\phi^2(\mathbf{r},t)+3n^2(\mathbf{r},t)]\phi(\mathbf{r},t)$$
$$+\left[\frac{3g_3}{2}n_c(\mathbf{r},t)m(\mathbf{r},t)+g_3n(\mathbf{r},t)m(\mathbf{r},t)\right]\phi^*(\mathbf{r},t)$$

که در آن چگالی‌های عادی و غیرعادی به صورت زیر تعریف می‌شوند

$$n(\mathbf{r},t)=\langle\psi^{\dagger}(\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t)\rangle$$
$$m(\mathbf{r},t)=\langle\psi(\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t)\rangle \qquad (٤)$$

برای توصیف افت و خیزهای چگاله‌ها، $\phi(\mathbf{r},t)$ را به $\phi(\mathbf{r},t)=\phi(\mathbf{r})+\delta\phi(\mathbf{r},t)$ حول مقدار تعادلی $\phi(\mathbf{r})$ بسط می‌دهیم. همچنین $\phi(\mathbf{r})$ را حقیقی در نظر می‌گیریم. در دمای محدود، افت و خیزهای چگاله‌ها با افت و خیزهای ناچگاله‌ها جفت می‌شود که می‌توان آن را به شکل $n(\mathbf{r},t)=n(\mathbf{r})+\delta n(\mathbf{r},t)$ و $m(\mathbf{r},t)=m(\mathbf{r})+\delta m(\mathbf{r},t)$ نوشت. در اینجا از عبارت‌های متناسب با چگالی غیرعادی چگاله ها $m(\mathbf{r})=\langle\psi(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})\rangle$ و مزدوج مختلط آن صرف نظر کرده‌ایم. این تقریب با تقریب پوپوف مطابقت دارد [٥] و انتظار می‌رود که هم در دماهای بالا که $n(r)\gg m(r)$ و هم در دماهای پایین (که در آن دو چگالی یکسان هستند) مناسب باشد. با جاگذاری روابط بالا در رابطه (۳)، و خطی سازی بر حسب افت خیزهای چگاله‌ها، رابطه حاکم بر این افت و خیزها به صورت زیر به دست می آید:

$$i\partial_t\delta\phi(\mathbf{r},t)=\hat{\mathcal{L}}\left[\delta\phi(\mathbf{r},t)\right]+\hat{\mathcal{M}}\left[\delta\phi^*(\mathbf{r},t)\right]$$
$$+\phi(\mathbf{r})\left(2g_2+3g_3n_c(\mathbf{r})\right)\delta n(\mathbf{r},t)$$
$$+\phi(\mathbf{r})\left(g_2+\frac{3g_3}{2}n_c(\mathbf{r})\right)\delta m(\mathbf{r},t) \qquad (٥)$$
$$+\frac{g_3}{2}\phi(\mathbf{r})n_c(\mathbf{r})\delta m^*(\mathbf{r},t)$$

که در آن

$$\hat{\mathcal{L}}[f(\mathbf{r})]=[-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m}-\mu(\mathbf{r})+g_2 n_{tot}(\mathbf{r})$$
$$+\frac{3g_3}{2}n_c^2(\mathbf{r})+6g_3 n_c(\mathbf{r})n(\mathbf{r})]f(\mathbf{r})+g_2 n_{tot}(\mathbf{r})f(\mathbf{r}) \quad (٦)$$
$$\hat{\mathcal{M}}[f(\mathbf{r})]=g_2 n_c(\mathbf{r})f(\mathbf{r})$$
$$+\left(g_3 n_c^2(\mathbf{r})+3g_3 n_c(\mathbf{r})n(\mathbf{r})\right)f(\mathbf{r})$$

و $n_{tot}(\mathbf{r})=n_c(\mathbf{r})+n(\mathbf{r})$ چگالی کل بوزون‌هاست.

هامیلتونی ناچگاله‌ها و جفت شدگی افت و خیزهای چگاله‌ها با ناچگاله‌ها را می توان با استفاده از بسط $\phi(\mathbf{r},t)=\phi(\mathbf{r})+\delta\phi(\mathbf{r},t)$ و $n(\mathbf{r},t)=n(\mathbf{r})+\delta n(\mathbf{r},t)$ و $m(\mathbf{r},t)=\delta m(\mathbf{r},t)$ در هامیلتونی رابطه (۱) و خطی سازی بر حسب افت و خیزها به دست آورد. همچنین برای قطری سازی این هامیلتونی می توان از تبدیلات بوگولیوبف زیر استفاده کرد:

$$\psi(\mathbf{r},t)=\sum_i [u_i(\mathbf{r})\hat{a}_i(t)+v_i^*(\mathbf{r})\hat{a}_i^\dagger(t)]$$
$$\psi^\dagger(\mathbf{r},t)=\sum_i [u_i^*(\mathbf{r})\hat{a}_i^\dagger(t)+v_i(\mathbf{r})\hat{a}_i(t)] \quad (٧)$$

که در آن $\hat{a}_i(t)$ و $\hat{a}_i^\dagger(t)$ به ترتیب عملگرهای خلق و فنای شبه ذرات بوزونی در زمان t هستند که از روابط جابجایی بوزونی پیروی می‌کنند. هم چنین توابع $u_i(\mathbf{r})$ و $v_i(\mathbf{r})$ ضرایب بوگولیوبف هستند. چگالی‌های عادی و غیرعادی برحسب عملگرهای $\hat{a}_i(t)$ و $\hat{a}_i^\dagger(t)$ به ترتیب به صورت روابط زیر نوشته می‌شوند.

$$n(\mathbf{r},t)=\sum_{ij} u_i^*(\mathbf{r})u_j(\mathbf{r})f_{ij}+v_i(\mathbf{r})v_j^*(\mathbf{r})f_{ji}$$
$$+u_i^*(\mathbf{r})v_j^*(\mathbf{r})g_{ij}^*+v_i(\mathbf{r})u_j(\mathbf{r})g_{ij}+v_i(\mathbf{r})v_j^*(\mathbf{r})$$
$$m(\mathbf{r},t)=\sum_{ij} u_i(\mathbf{r})v_j^*(\mathbf{r})f_{ji}+v_i^*(\mathbf{r})u_j(\mathbf{r})f_{ij}$$
$$+u_i(\mathbf{r})u_j(\mathbf{r})g_{ij}+v_i^*(\mathbf{r})v_j^*(\mathbf{r})g_{ij}^*+u_i(\mathbf{r})v_j^*(\mathbf{r}) \quad (٨)$$

که در آن توابع $f_{ij}\equiv\langle\hat{a}_i^\dagger(t)\hat{a}_j(t)\rangle$ و $g_{ij}\equiv\langle\hat{a}_i(t)\hat{a}_j(t)\rangle$ هستند. از نظر فیزیکی، f_{ij} به معنی نابودی یک شبه ذره با انرژی E_j و خلق یک شبه ذره دیگر با انرژی E_i است که در میرایی لاندائو اتفاق می افتد. اما g_{ij} متناظر با نابودی (خلق) دو شبه ذره با انرژی‌های E_i و E_j است که در میرایی بلیاو صورت می گیرد. در ادامه تنها به بررسی میرایی لاندائو می پردازیم. می توان رابطه (۵) را برحسب f_{ij} به صورت زیر بازنویسی کرد.

$$i\partial_t\delta\phi(\mathbf{r},t)=\hat{\mathcal{L}}\left[\delta\phi(\mathbf{r},t)\right]+\hat{\mathcal{M}}\left[\delta\phi^*(\mathbf{r},t)\right]$$
$$+\phi(\mathbf{r})\left(2g_2+3g_3 n_c(\mathbf{r})\right)$$
$$\sum_{ij}\left(u_i^*(\mathbf{r})u_j(\mathbf{r})+v_j(\mathbf{r})v_i^*(\mathbf{r})+v_i^*(\mathbf{r})u_j(\mathbf{r})\right)f_{ij} \quad (٩)$$
$$+g_3\phi(\mathbf{r})n_c(\mathbf{r})\sum_{ij} u_i^*(\mathbf{r})v_j(\mathbf{r})f_{ij}+\ldots$$

علامت ... در رابطه بالا مربوط به جملات متناسب با g_{ij} است که در اینجا از آنها صرفنظر می شود. فرض می کنیم چگاله‌ها با بسامد ω به صورت $\delta\phi(\mathbf{r},t)=\delta\phi_1(\mathbf{r})e^{-i\omega t}$ و $\delta\phi^*(\mathbf{r},t)=\delta\phi_2(\mathbf{r})e^{-i\omega t}$ نوسان می‌کنند. اگر جملات مربوط به جفت شدگی اتم‌های چگاله و ناچگاله و گاز ابرشاره فرمیونی را در نظر نگیریم، معادلات بوگولیوبف برای افت و خیزهای اتم‌های چگاله با بسامد ω_0 به صورت رابطه‌ی ماتریسی زیر نوشته می‌شوند.

$$\hbar\omega_0\begin{pmatrix}\delta\phi_1^0(\mathbf{r})\\ \delta\phi_2^0(\mathbf{r})\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\hat{\mathcal{L}} & \hat{\mathcal{M}}\\ -\hat{\mathcal{M}}^* & -\hat{\mathcal{L}}^*\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\delta\phi_1^0(\mathbf{r})\\ \delta\phi_2^0(\mathbf{r})\end{pmatrix} \quad (١٠)$$

برای چگالی‌های کوچک اتم‌های ناچگاله، می‌توان سهم جملات برهم کنشی را به صورت یک اختلال کوچک به صورت زیر در نظر گرفت:

$$\delta\phi_1=\delta\phi_1^0+\delta\phi_1'$$
$$\delta\phi_2=\delta\phi_2^0+\delta\phi_2' \quad (١١)$$

با جاگذاری روابط بالا در رابطه (۹) و تعریف روابط تعامد لازم، بسامد افت و خیزهای چگاله ها به صورت زیر به دست می آید:

$$\hbar\omega=\hbar\omega_0+\sum_{ij} f_{ij}(\omega_0)\int d\mathbf{r}\left[A_{ij}(\mathbf{r})\delta\phi_1^*(\mathbf{r})+A_{ji}^*(\mathbf{r})\delta\phi_2^*(\mathbf{r})\right] \quad (١٢)$$

که در آن ضریب $A_{ij}(\mathbf{r})$ به صورت زیر تعریف می‌شود:

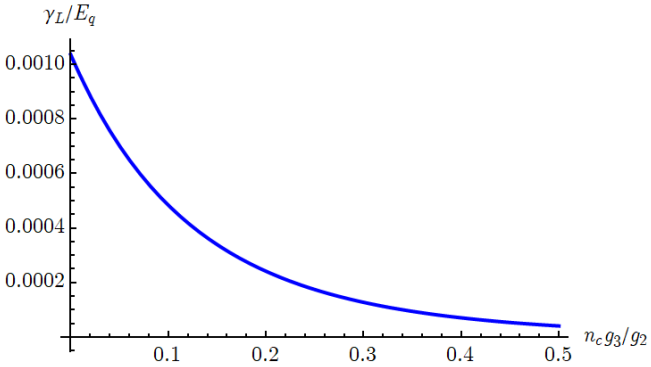
$$A_{ij}=\phi(\mathbf{r})\left(2g_2+3g_3 n_c(\mathbf{r})\right)(u_i^*(\mathbf{r})u_j(\mathbf{r})$$
$$+v_i^*(\mathbf{r})v_j(\mathbf{r})+v_i^*(\mathbf{r})u_j(\mathbf{r}))+g_3 n_c(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r})u_i^*(\mathbf{r})v_j(\mathbf{r}) \quad (١٣)$$

قسمت موهومی بسامد به دست آمده نشان دهنده ضریب میرایی است. برای محاسبه تابع $f_{ij}(\omega_0)$ از معادله حرکت هایزنبرگ و تبدیل فوریه استفاده می‌کنیم. در نهایت ضریب میرایی به صورت رابطه زیر به دست می آید:

$$\gamma_L(\omega_0)=\pi\sum_{ij}(n_i-n_j)\delta(\omega_0-(E_j-E_i))\left|\mathcal{A}_{ij}\right|^2 \quad (١٤)$$

که در آن $\mathcal{A}_{ij}=\int d\mathbf{r}\left[A_{ij}(\mathbf{r})\delta\phi_1^*(\mathbf{r})+A_{ji}^*(\mathbf{r})\delta\phi_2^*(\mathbf{r})\right]$ است.

رابطه بالا را می توان برای یک گاز بوزونی همگن در نظر گرفت. افت و خیزها در این حالت به صورت موج تخت $\delta\phi_1(\mathbf{r}) = V^{-1/2}u_q e^{i\mathbf{q}.\mathbf{r}}$ و $\delta\phi_2(\mathbf{r}) = V^{-1/2}v_q e^{i\mathbf{q}.\mathbf{r}}$ نوشته می‌شوند. ضرایب u_q و v_q نیز توسط معادلات بوگولیوبف به صورت $u_q(v_q) = \pm\sqrt{\epsilon_q + n_c(g_2 + n_c g_3)/2E_q \pm 1/2}$ داده می شود که در آن $\varepsilon_q = \hbar^2 q^2/2m$ و $E_q = \sqrt{\epsilon_q^2 + 2\epsilon_q n_c(g_2 + n_c g_3)}$ طیف انرژی بوگولیوبف است. در حد طول موج های بلند طیف انرژی به صورت فونونی $E_q \approx cq$ نوشته می‌شود که در آن $c = n_c(g_2 + n_c g_3)/m$ سرعت صوت در دمای T است. در اینصورت برای دماهای پایین ضریب میرایی به صورت شکل (۱) برای مقادیر مختلف قدرت برهمکنش سه جسمی نسبت به برهمکنش دو جسمی به دست می آید.



شکل ۱: میرایی لاندائو بر حسب تغییرات برهمکنش دافعه سه جسمی نسبت به برهمکنش جاذبه دو جسمی در دماهای پایین. کمیت $k_B T/n_c g_2 = 0.1$ و $n_c a^3 = 0.1$ در نظر گرفته شده است.

همان‌طور که از شکل (۱) مشاهده می‌شود، با افزایش مقدار برهمکنش سه جسمی میرایی لاندائو کاهش پیدا می کند. البته باید توجه داشت که ما در اینجا از تقریب هارتری-فوک-بوگولیوبف-پوپوف (HFBP) استفاده می کنیم [۵] که در این تقریب تنها جملات مربوط به $n(\mathbf{r})$ و $n_c(\mathbf{r})$ در نظر گرفته می شوند و از جملات مربوط به $m(\mathbf{r})$ و پارامترهای نظم مرتبه بالاتر صرف نظر می شود. در واقع با توجه به اینکه محاسبات در دمای پایین در نظر گرفته شده است، لذا چگالی اتم‌های ناچگاله بسیار کم بوده و در نتیجه از برهمکنش سه جسمی بین ناچگاله صرف نظر شده است. این تقریب در دماهای پایین کارایی دارد و در دماهای نزدیک به دمای بحرانی T_c منجر به واگرایی در نتایج می شود [٦]. برای تعمیم محاسبات به دماهای بالاتر باید از نظریه وابسته به زمان HFB استفاده کنیم که در آن دینامیک ناچگاله‌ها و مولفه‌های مربوط به $m(\mathbf{r})$ نیز در نظر گرفته می شود [٧].

همچنین ما در این مقاله از جملات برهمکنش ناچگاله‌ها با یکدیگر در محاسبات صرف نظر کردیم. در صورت در نظر گرفتن برهمکنش ناچگاله‌ها با یکدیگر، محاسبه تابع $f_{ij}(\omega_0)$ از معادله حرکت هایزنبرگ به یک معادله پیچیده منجر می شود که به صورت تحلیلی قابل حل نیست.

نتیجه گیری

در این مقاله تأثیر برهمکنش تماسی سه جسمی در میرایی یک گاز بوزونی چگالیده و رقیق مطالعه شده است. با استفاده از تقریب میدان میانگین و همچنین تقریب پوپوف، میرایی لاندو برای گاز بوزونی در دماهای کم و با چشم پوشی از برهمکنش بین ناچگاله ها بررسی شده است. این بررسی در مقادیر متفاوت از نسبت برهمکنش سه جسمی به برهمکنش دوجسمی انجام شده است. با توجه به محاسبات نشان داده شده است که با افزایش قدرت برهمکنش سه جسمی نسبت به برهمکنش دوجسمی میرایی لاندائو کاهش پیدا می کند.

مرجع‌ها

[1] D.S. Petrov, *Phys. Rev. Lett.* **112** 103201 (2014).

[2] I. Ferrier-Barbut, H. Kadau, M. Schmitt, M. Wenzel, T. Pfau, *Phys. Rev. Lett.* **116** 215301 (2016).

[3] T.D. Lee, K. Huang, C.N. Yang, *Phys. Rev.* **106** 1135 (1957).

[4] L. P. Pitaevskii, and S. Stringari, *Phys. Lett. A* **235**, 398 (1997).

[5] V.N. Popov, *Theoret. Math. Phys.* **11** 478 (1972).

[6] A. Griffin, *Phys. Rev. B* **53**, 9341 (1996).

[7] A. Boudjemâa, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **51** 025203 (2018).

[8] A. Boudjemâa and N. Guebli, *J. Phys. A: Math. Theor.* **50** 425004 (2017)

مقایسه تأثیر یک و دو مرحله کلوخه سازی بر خواص مغناطیسی ابررسانای $Y_{1-x}Bi_xBa_2Cu_3O_{7-\delta}$

رضایی‌مطهر، نجمه؛ شاکری‌پور، حمیده

دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان ۸۳۱۱۱-۸۴۱۵۶

پست الکترونیکی: hshakeri@iut.ac.ir

چکیده

در این پژوهش، نمونه‌های $Y_{1-x}Bi_xBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ *(x= ۰/۰۰۳، ۰/۰۵، ۰/۱۰، ۰/۱۵)* **. با استفاده از روش واکنش حالت جامد طی یک مرحله و دو مرحله کلوخه سازی ساخته شدند. در نمودار اندازه‌گیری وابستگی دمایی پذیرفتاری مغناطیسی برای نمونه‌های یک مرحله زینتر در دمای ۹۳۰ درجه سانتیگراد پهن شدگی مشاهده می‌شود،** *و در نمودار پذیرفتاری مغناطیسی برای نمونه‌های دو مرحله زینتر در آلایش* $x=$ *۰/۰۰۳ پهن شدگی از بین رفته ولی در آلایش‌های بالاتر پهن شدگی نمودار بیشتر شده که این پهن شدگی می‌تواند ناشی از ذوب شدن بیسموت در ترکیب، در مرحله دوم کلوخه سازی باشد.*

واژه های کلیدی: $Y_{1-x}Bi_xBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ ، ***پذیرفتاری مغناطیسی, کلوخه سازی***

Comparison of the effect of one- and two-stage Sintering on the magnetic properties of $Y_{1-x}Bi_xBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ superconductors

Rezaei Motahar, Najmeh; Shakeripour, Hamideh

Department of physics, Isfahan university of technology, Isfahan 84156-83111

Abstract

In this study, $Y_{1-x}Bi_xBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ (x = 0.003, 0.05, 0.1, 0.15) samples were prepared using one-step and two-step sintering by the standard solid state reaction methods. The temperature dependence of the magnetic susceptibility measurements show that all those samples prepared with one-stage sintering at 930 C do not show a sharp phase transition to the superconductivity state. However, the temperature dependence of the magnetic susceptibility of the x=0.003 sample, with low doping of Bi and with two-stage sintering, shows a sharp phase transition. Although, the samples with higher doping of Bi do not show sharp transition even with two sintering stage; it may be due to the melting of Bi in the sample.

***Keywords**: $Y_{1-x}Bi_xBa_2Cu_3O_{7-\delta}$, magnetic susceptibility, sintering*

PACS No.

مقدمه

خواص فیزیکی ابررساناهای کوپرات به ترکیب شیمیایی و تراکم بار در این ترکیبات بستگی دارد. تراکم بار در ابررساناهای کوپرات را می‌توان توسط آلایش ناخالصی در ترکیب تغییر داد. آلایش عناصر در جایگاه‌های مختلف ترکیب، باعث تغییر در خواص فیزیکی ابررسانایی می‌شود و سبب بهبود یا تخریب خواص ابررسانایی خواهد شد. **پس از دستیابی به ترکیب** $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ بادمای‌گذارحدود۹۰ کلوین‌و بالاتربودن این دما نسبت به دمای نیتروژن مایع این‌ترکیب مورد توجه محققین قرار گرفت [۱]. برای فهم سازوکار ابررسانایی در این ترکیب، تحقیقات فراوانی انجام شده است. یکی از راه‌های بررسی، آلایش عناصر مختلف در این ترکیبات است [۲]. پس از کشف **ترکیب** $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ محققان برای شناخت بهتر این ترکیب عناصر زیادی در جایگاه اتم ایتریوم آلایش کردند. با آلایش عناصری که از نظرشعاع یونی مشابه عنصر ایتریوم بودند. دمای گذارتغییر چندانی نداشته است[۳]. تحقیقات زیادی مبنی بر آلایش عناصر ۳ ظرفیتی در جایگاه ایتریوم وجود

دارد [۷-٤]. در این تحقیق، هدف مقایسه تأثیر یک مرحله و دو مرحله عمل کلوخه سازی بر خواص مغناطیسی ترکیب $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ تحت آلایش عنصر غیرمغناطیسی Bi^{3+} در جایگاه Y^{3+} است. شعاع یونی بیسموت و ایتریم به ترتیب حدود ۱۱۷ pm و ۱۰٤ pm می باشد. آلایش عنصر بیسموت در جایگاه ایتریوم در تحقیقات مختلف حاکی از آن است که آلایش عنصر بیسموت در این ترکیب محدودیت‌هایی دارد [۹،۸].

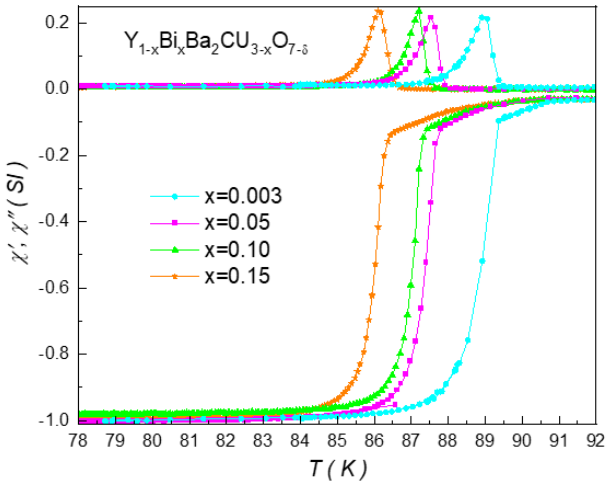
ساخت

نمونه‌های $Y_{1-x}Bi_xBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ با استفاده از روش استاندارد حالت جامد با آلایش‌های (۰/۲۰و ۰/۱۵، ۰/۱۰، ۰/۰۵، ۰ =x) و با استفاده از استوکیومتری جرمی، پودرهای $BaCO_3$, CuO, Y_2O_3, Bi_2O_3 با دقت mg ۰/۱ توزین شده ودر مجاورت ایزوپروپانول در هاون از جنس آلومینا، پودرها به مدت یک ساعت تحت سایش قرار گرفتند. سپس، عمل تکلیس در دمای ۸۵۰°C و به مدت ۲٤ ساعت در دو مرحله انجام شد. بعد از تکلیس پودرهمگن، به درون قالب پرسی به شکل مکعب مستطیل ریخته شده و تحت فشار ۹۰bar قرار گرفت. نمونه‌ها به شکل قطعه هایی با ابعاد mm^3 ۱×۳×۱۰ درآمدند. نمونه ها بر روی ورقه‌ای از طلای خالص در مجاورت اکسیژن به مدت ۲٤ ساعت دردمای ۹۳۰°C حرارت دیدند [14]. برای مطالعه خواص ابررسانایی نمونه‌ها، از آزمون پذیرفتاری مغناطیسی AC استفاده شد. این اندازه‌گیری از دمای اتاق تا دمای ۷۷ K و تحت میدان مغناطیسی بسیار کوچک متناوب ۰/۸ A/m و با دوره تناوب ۳۳۳ Hz انجام گرفت. بعد از اندازه‌گیری و مطالعه پذیرفتاری مغناطیسی برای مرحله دوم کلوخه‌سازی، نمونه‌ها بر روی ورقه‌ای از طلای خالص در مجاورت اکسیژن به مدت ۲٤ ساعت دردمای ۹۵۰°C حرارت دیدند. پس از اتمام این مرحله نیز برای مطالعه خواص ابررسانایی نمونه‌های دو مرتبه کلوخه‌سازی شده از آزمون پذیرفتاری مغناطیسی AC استفاده شد. در ادامه نمونه‌های یک مرتبه و دومرتبه کلوخه سازی شده با یکدیگر مقایسه ومورد بررسی قرار می‌گیرد.

نتایج و بحث

در شکل (۱) و (۲) نمودار پذیرفتاری مغناطیسی نشان داده شده است. همانگونه که مشاهده می‌شود با کاهش دما، در دمای مشخص گذار تیزی رخ می‌دهد، پذیرفتاری مغناطیسی حقیقی از مقدار تقریباً صفر به مقدار منفی یک می‌رسد. دمایی را که در آن نمودار حقیقی به صورت ناگهانی گذار تیزی را انجام می‌دهد را دمای گذار T_c می نامند.

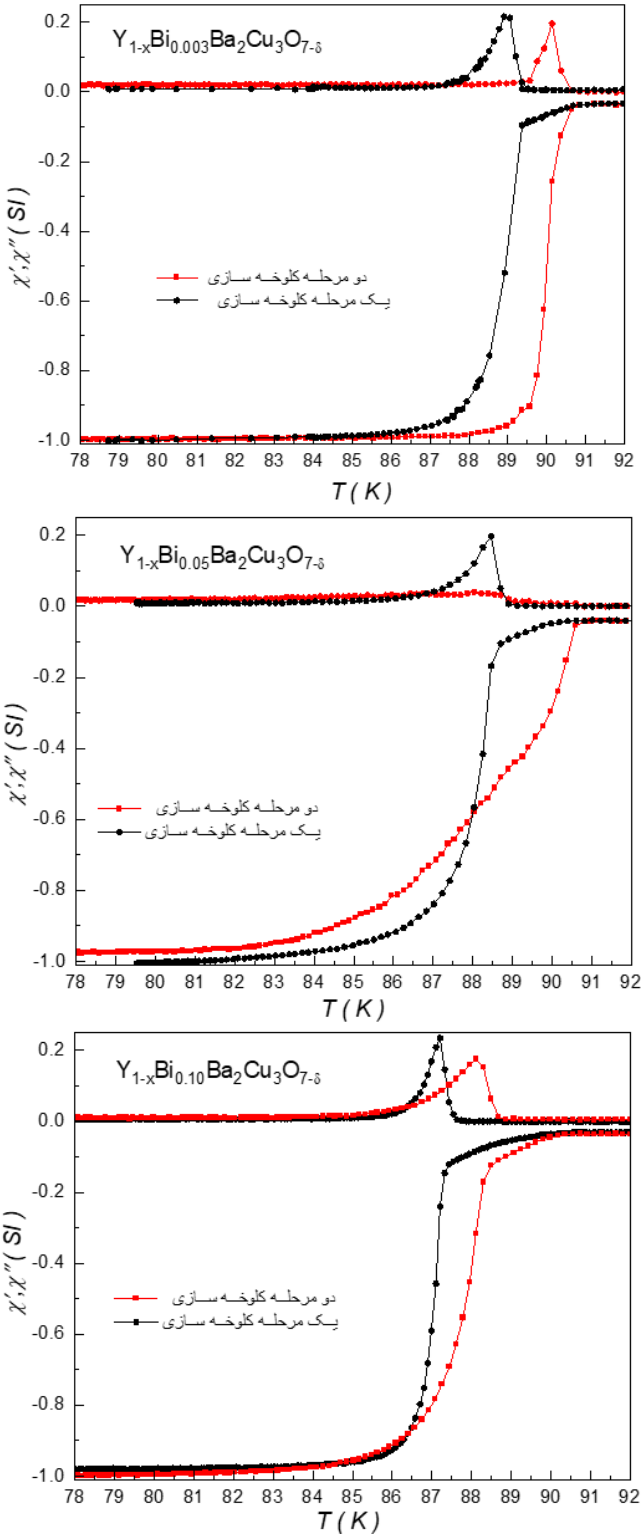
در شکل (۱) نمودار پذیرفتاری مغناطیسی برای نمونه‌هایی که ساخت آن ها با یک مرحله کلوخه سازی انجام شده نشان داده شده است. همانگونه که درشکل مشاهده می‌کنید نمونه‌ها داری پهن شدگی هستند و نشان از این است که نمونه یا دانه های درون نمونه همگن نیستند. برای رفع پهن شدگی و دست‌یابی به نمونه‌هایی با گذار تیزتر نمونه‌های ساخته شده دو مرتبه عمل کلوخه سازی در دمای ۹۵۰ درجه سانتی‌گراد بر روی آن‌ها انجام شد.

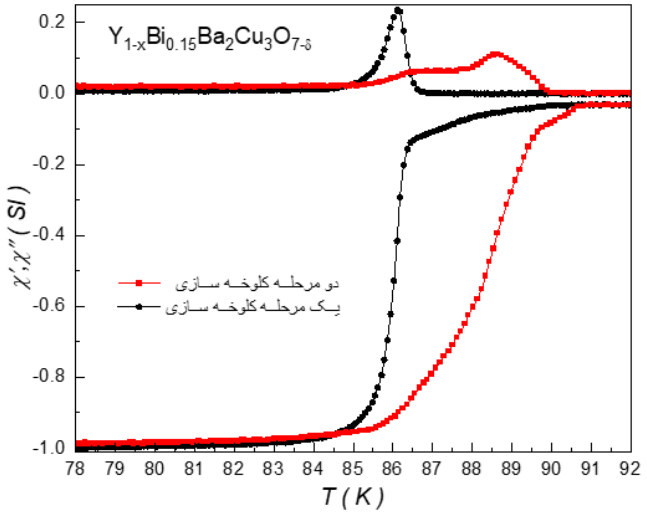


شکل ۱: نمودار پذیرفتاری مغناطیسی بر حسب دما برای ترکیب $Y_{1-x}Bi_xBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ (x= ۰/۰۰۳، ۰/۰۵، ۰/۱۰، ۰/۱۵). (ساخت نمونه ها با استفاده از یک مرحله کلوخه سازی در دمای ۹۳۰ درجه سانتی‌گراد).

در شکل (۲) نمونه های ساخته شده با دو مرحله کلوخه سازی نشان داده شده است. با توجه به نمودار پذیرفتاری نمونه‌ها برای آلایش ۰/۰۰۳ پهن شدگی در نمودار پذیرفتاری مغناطیسی از بین رفته و نمودار پذیرفتاری مغناطیسی تیزتری نسبت به یک مرحله کلوخه سازی مشاهده می‌شود. که این می‌تواند نشان دهنده اتصال

بین دانه‌ای بهتر و همگنی بهتر برای نمونه‌ی دو مرحله کلوخه سازی شده باشد. ولی در آلایش‌های بالاتر، در نمواره‌ها پهن شدگی مشاهده می‌شود. که این می‌تواند به دلیل ذوب شدن بیسموت در ترکیب‌های با آلایش بالا باشد.





شکل ۲: نمودار پذیرفتاری مغناطیسی بر حسب دما برای ترکیب $Y_{1-x}Bi_xBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ (x= ۰/۰۰۳، ۰/۰۵، ۰/۱۰، ۰/۱۵). ساخت نمونه‌ها با استفاده از دو مرحله کلوخه سازی در دمای ۹۳۰ و ۹۵۰ درجه سانتی گراد

نتیجه گیری

با مطالعه ترکیب ابررسانای $Y_{1-x}Bi_xBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ (۰/۱۰، ۰/۱۵ ، x= ۰/۰۰۳، ۰/۰۵). ساخته شده با یک مرحله و دو مرحله کلوخه سازی به وسیله اندازه‌گیری پذیرفتاری‌مغناطیسی، می‌توان نتیجه گرفت که برای نمونه های یک مرحله کلوخه سازی در دمای ۹۳۰ درجه سانتی گراد در نمودار پهن شدگی مشاهده می شود که با دو مرحله کلوخه سازی نمونه x=۰/۰۰۳ پهن شدگی نمودار پذیرفتاری از بین رفته ولی برای آلایش‌های بالاتر پهن شدگی نمودار بیشتر شده است. که می‌تواند نشان دهنده ذوب شدن بیسموت در ترکیب باشد. به نظر می رسد دمای پخت مناسب نمونه ها برای یک مرحله کلوخه سازی ۹۴۰ درجه سانتیگراد می باشد.

سپاسگزاری

از همکاری آقای خالید رحمانی برای همکاری در اندازه‌گیری صمیمانه تشکر می‌کنیم.

مرجع‌ها

[1] M.-K. Wu, J. R. Ashbum, C. W. Chu, et al.; "Superconductivity at 93 K in a new mixed-phase Y-Ba-Cu-O compound system at ambient pressure"; *Physical Review Letters* 58 (1987) 908.

[2] K.N. Yang, Y. Dalichaouch, J.M. Ferreira, B.W. Lee, J.J. Neumeier, M.S. Torikachvili, H. Zhou, M.B. Maple, and R.R. Hake, *"High* temperature superconductivity, in rare-earth (R)-barium copper oxides $(RBa_2)Cu_3O_{9-d}$*"*, Solid State Communications. Vol. 63, p.515-519 (1987).

[3] T. K. Y. Tatsumi, Y. Misawa, K. Fujiwara, Jpn. J. Appl. Phys. 31 (1992).

[4] N. Mori, Y. Takano, H. Enomoto, H. Ozaki, and K. Sekizawa, "Resistive transition behavior of impurity-doped $YBa_2Cu_3O_7$ type superconductors," Physica B: Condensed Matter. 194 (1994) p. 20492050.

[5] G. Svensson, Z. Hegedüs, L. Wang, and Ö. Rapp, "Studies of the ScxY1-x Ba2Cu3O7-δ system (0⩽ x⩽ 1)," *Physica C*: Superconductivity. 153 (1988) p. 864-865.

[6] X. D. C. F.Zuo, A. Chakraborty, B.R. Patton, J.R. Gaines, A.J. Epstein, , *Solid State Commun*. 68 (1988).

[7] F. K. Y. Tatsumi, K. Fujiwara, Jpn. J. Appl. Phys. 33 (1994).

[8] S. Blower and C. Greaves, "The structure of β-Bi_2O_3 from powder neutron diffraction data," Acta Crystallographica Section C: *Crystal Structure Communications*. 44 (1988) p. 587-589.

[9] J. Jung, J. Franck, W. Miner, and M. Mohamed, "Effect of substitution of Bi, Ga, and Fe on the structure and superconducting transition of $YBa_2Cu_3O_{6+\delta}$ " Phys. Rev. B*: Condens. Matter*. 37 (1988).

مقایسه تأثیر فرآیند های تولید بر خواص مغناطیسی، بلوری و ریزساختاری آلیاژ هویسلر Mn_2CoGe

اسدیان، علیرضا[۱]؛ حکیمی، محسن[۲]

[۱] دانشجوی دکتری دانشکده فیزیک دانشگاه یزد، یزد

[۲] دانشیار دانشکده فیزیک دانشگاه یزد، یزد

چکیده

آلیاژهای هویسلر پایه منگنز به دلیل خاصیت فری مغناطیسی و نیم فلز بودنشان موردتوجه بسیاری قرارگرفته‌اند. در این پژوهش ترکیب هویسلر Mn_2CoGe با دو روش ذوب قوسی- آسیاب کاری و ذوب قوسی – باز پخت ساخته شد. ساختار بلورین نمونه‌ها با استفاده از الگوی پراش پرتوی ایکس و ریزساختار با نگاره‌های SEM موردبررسی قرار گرفت. ویژگی‌های مغناطیسی نمونه‌ها با استفاده از مغناطیس‌سنج نمونه ارتعاشی (VSM) اندازه‌گیری شد. مقایسه نمونه‌ها، یک تفاوت معنی‌دار در میزان بلوری‌شدن در فرآیند باز پخت نسبت به آسیاب کاری را نشان داد. بهبود نظم بلوری، طی باز پخت، به دستیابی مغناطش اشباع تا حد $0/8\ \mu_B/F.u.$ منجر شد. این مقدار به دلیل تک‌بلور نبودن نمونه، از مقدار پیش‌بینی‌شده توسط اسلیتر-پائولینگ کمتر است. افزایش وادارندگی در نمونه‌ی باز پخت نسبت به نمونه آسیاب شده به عواملی چون فعال شدن ناهمسانگردی مغناطوبلوری به دلیل ساختار بلوری بهتر نمونه ارتباط داده شد.

واژه‌های کلیدی: *هویسلر، پایه منگنز، ذوب قوسی، آسیاب کاری، باز پخت*

Comparison of the effect of complementary production process on magnetic, crystalline and microstructural properties of Heusler Mn_2CoGe alloy

Ali Reza, Asadian[1]; Mohsen, Hakimi[2]

[1] *PHD Student, Department of Physics, University of Yazd, Yazd*

[2] *Associate Professor, Department of Physics, University of Yazd, Yazd*

Abstract

Manganese-based Heusler alloys have received a lot of attention due to their ferrimagnetic properties and being half-metallic. In this research, a combination of Heusler Mn_2CoGe was made by two methods of arc melting-milling and arc melting-annealing. The crystal structure of the samples was investigated using X-ray diffraction pattern and microstructure with SEM images. The magnetic properties of the samples was measured using a vibrating sample magnetometer (VSM). Comparison of the samples showed an improvement of crystallization in the annealing process compared to the milled sample. Improvement of crystallization, during annealing, resulted in achievement of saturation magnetization up to 0/8 μ_B/ F.U. This value is less than the value predicted by Slater-Pauling, this difference could be related to the non cubic structure of the sample and this fact that the sample is not single crystal. The increase in coercivity in the annealed sample compared to the milled one was related to factors such as the activation of magnetocrystalline anisotropy due to the better crystal structure of annealed sample.

***Keywords**: Heusler, Manganese-based, Arc Melting, Milling, Annealing*

PACS No. 75

مقدمه

آلیاژهای هویسلر پایه منگنز به دلیل خاصیت فرو مغناطیسی، فری مغناطیسی و نیم فلز بودنشان موردتوجه بسیاری قرارگرفته‌اند [۱،۲]. از این خواص در حوزه‌های متنوعی مثل اپتیک-مغناطیس، قطعات اسپینترونیک، TMR، GMR، تزریق اسپینی، ابررسانایی، مواد حافظه شکل، مواد ترموالکتریک، عایق‌های توپولوژیکی و... استفاده می‌شود [۳،٤]. گشتاور مغناطیسی ترکیبات هویسلر پایه منگنز رابطه اسلیتر-پاولینگ را به‌خوبی برآورده می‌کند. مدل اسلیتر-پائولینگ گشتاور مغناطیسی ترکیبات هویسلر

را به ازای تعداد الکترون ظرفیت آن‌ها (Z_t) به‌صورت $M = Z_t-24$ تخمین می‌زند. با استفاده از این رابطه گشتاور مغناطیسی با واحد μ_B بر واحد فرمول شیمیایی به دست می‌آید. برای نمونه ترکیب این مقاله، Mn_2CoGe، $Z_t=27$ و گشتاور مغناطیسی کل $M=3\ \mu_B/U.F$ به دست می‌آید. فالیو و همکاران با استفاده از نظریه DFT، ثابت شبکه a برای Mn_2CoGe را برابر ۳/۷٤ آنگستروم و مغناطش نمونه را برابر ۰/۹۷ مگنتون بوهر بر واحد فرمولی گزارش کرده‌اند [۱]. مارکوس و همکارانش با استفاده از نظریه SPRKKR ثابت شبکه را برابر ۵/۸۰ آنگستروم و مغناطش نمونه را برابر 2/98 مگنتون بوهر بر واحد فرمولی گزارش کرده‌اند [۵] که تطابق خوبی با مدل اسلیتر-پاولینگ دارد. تحقیقات انجام‌شده بر روی Mn_xCoGe $(0/8 \le x \le 2/5)$ نشان داده است ثابت شبکه a برای $x=0/8$ برابر ٤/۰۲ آنگستروم و برای $x=2/5$ برابر ٤/۰۹ آنگستروم هست. همچنین مغناطش این دو نمونه به ترتیب برابر ۲/۸۷ و ۲/۹۹ مگنتون بور گزارش‌شده است [٦].

معمولاً برای ساخت ترکیبات هویسلر از فرآیند ذوب-قوسی استفاده می‌شود. در این روش ابتدا عناصر خالص آلیاژ به‌صورت استوکیومتریک باهم مخلوط شده و سپس به‌وسیله قوس الکتریک ذوب می‌شوند. قرص‌های به‌دست‌آمده از این فرآیند را خردکرده و چندین بار مرحله ذوب تکرار می‌شود تا از تشکیل یک ترکیب همگن در سراسر ماده اطمینان حاصل شود. مثلاً اصلاح ساختار بلوری آلیاژ Co_2FeSi به ساختار ایدئال $L2_1$ که به روش ذوب قوسی تهیه شده است، توسط بالک و همکارانش گزارش‌شده است [۷].

برای ساخت آلیاژهای هویسلر، دقت بالایی لازم است تا از ورود اکسیژن به سیستم جلوگیری شود. این مسئله برای عنصر Mn که تمایل واکنش با اکسیژن در آن زیاد است، از حساسیت بیشتری برخوردار می‌باشد. برای این منظور از یک خلأ 10^{-4} mbar و هم‌زمان گاز فوق‌العاده خالص Ar استفاده می‌شود. استفاده از مواد اکسیژن گیر مثل Ti و Ta که قبل از ترکیب اصلی ذوب می‌شوند، می‌تواند منجر به بهبود کیفیت محصول شود. همچنین کاهش وزن نمونه، در طول فرآیند ذوب، باید به‌دقت موردتوجه قرار گیرد. چراکه بعضی عناصر مثل Sb و Mn در طول فرآیند ذوب، تمایل به تبخیر شدن دارند.

خواص ترکیبات هویسلر به‌شدت به نظم اتمی عناصر و ساختار بلوری این ترکیبات وابسته است. در این ترکیبات برهمکنش‌ها، نقش برجسته‌ای را بازی می‌کنند و برهمکنش‌ها نیز به‌طور مؤثری به نظم بلوری آن‌ها وابسته است. محاسبات ساختار نواری نشان داده است که حضور حجم کمی از بی‌نظمی در شبکه بلوری می‌تواند منجر به تغییرات فراوان در ساختارهای الکترونی و درنتیجه خواص گذردهی و مغناطیسی شود [۸].

دلایل متعددی برای تغییر در نظم اتمی و ساختار بلوری در نمونه‌های مختلف شناخته‌شده و مطرح می‌شود. ازجمله می‌توان به تغییر در استوکیومتری، نظم بلوری، مورفولوژی، نابجایی‌ها و ... اشاره کرد. به عبارتی روش ساخت با تأثیر بر این عوامل می‌تواند بر ویژگی‌های مغناطیسی این ترکیب اثر بگذارد [۹]. در این تحقیق تأثیر روش ساخت بر ویژگی‌های ساختاری و مغناطیسی موردبررسی قرارگرفته است. برای این منظور برای ساخت نمونه‌های ترکیب هویسلر Mn_2CoGe از دو روش ذوب قوسی-آسیاب کاری و ذوب قوسی- باز پخت استفاده‌شده است.

ساخت و آزمایش

نمونه ترکیب Mn_2CoGe با روش ذوب قوسی ساخته شد. در این روش پس از قرارگیری قطعات کوچک فلزی با استوکیومتری مناسب درون محفظه حاوی آرگون، با عبور جریان الکتریکی بزرگی از نمونه‌ها، فرآیند ذوب انجام گرفت. به دلیل سرعت‌بالای سرد شدن نمونه‌ها در این روش، محصول ازنظر ساختاری بی‌شکل خواهد بود و برای تشکیل ساختار بلوری لازم است فرآیندهای تکمیلی مثل باز پخت یا آسیاب کاری روی نمونه‌ها انجام گیرد. لذا در ادامه بخشی از محصول به‌دست‌آمده از ذوب قوسی به مدت ۱۵ ساعت تحت آرگون آسیاب و S_{am} نامیده شد. بخش دیگر به مدت ٤۸ ساعت در دمای ۸۰۰ درجه سلسیوس تحت خلأ باز پخت شده و S_{aa} نام گرفت.

با استفاده از آنالیز پراش پرتو X، ساختار بلوری نمونه‌ها مشخص و توسط نرم‌افزار X'Pert، داده‌های XRD موردبررسی قرار گرفت. اندازه متوسط بلورک‌ها تعیین شد. تصاویر SEM نمونه‌ها، برای بررسی ریزساختار و همچنین حلقه‌های پسماند مغناطیسی آن‌ها به‌منظور مطالعه ویژگی‌های مغناطیسی در دمای محیط با استفاده از یک دستگاه مغناطش سنج نمونه ارتعاشی (VSM) اندازه‌گیری شد.

نتایج و بحث:

مقایسه ساختار بلوری Mn_2CoGe در دو روش ساخت

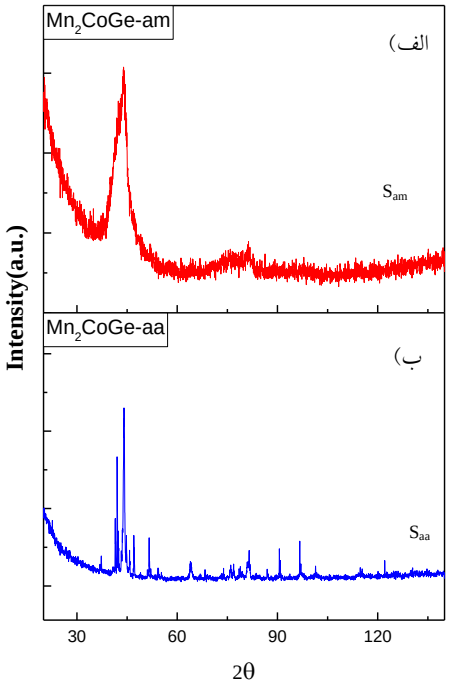
نتایج آنالیز پراش پرتوی X نمونه‌های Mn_2CoGe که در دو روش ساخت ذوب قوسی–آسیاب کاری (S_{am}) و ذوب قوسی–باز پخت (S_{aa}) آماده‌شده بودند، به ترتیب در شکل‌های ۱(الف) و ۱(ب) نشان داده‌شده است. طیف مربوط به نمونه S_{am} دو قله نسبتاً پهن در محدوده زوایای 2θ برابر ۸۰–۴۰ و ۸۰–۷۰ درجه را نشان می‌دهد. این قله‌های پهن نشان از ساختار نسبتاً آمورف‌گونه این نمونه است. با توجه به اینکه مکان قله‌های پهن با مکان قله‌های نمونه پخت شده تطابق دارد احتمالاً این قله‌های پهن از تجمیع و همپوشانی قله‌های مزبور حاصل‌شده‌اند. در مقابل نمونه به‌دست‌آمده از باز پخت متشکل از تعداد زیادی قله تیز بوده که نشان‌دهنده بلوری‌شدن نمونه است. با مقایسه داده‌های نزدیک به طیف در نرم‌افزار Xpert معلوم شد فاز غالب مربوط به ساختار مکعبی با پارامتر شبکه ۵/۸۰۵ آنگستروم است. این ساختار با ساختار Ni_2MnGa با کارت استاندارد مرجع 03-065-5328 تطابق دارد. همچنین در بخش‌هایی از ماده فاز دوم تشکیل شده است، که با ساختارهای دوتایی MnGe تا حدی تطابق دارد. علاوه بر این با استفاده از رابطه دیبای شرر ($D=0.9\lambda/\beta\cos\theta$) [۱۰] اندازه بلورک‌ها در این دو نمونه محاسبه شد که به ترتیب برای نمونه‌های S_{am} و S_{aa} برابر ۱/۷ و ۱۷ نانومتر است. خلاصه نتایج در جدول (۱) ارائه‌شده است.

ترکیب	نمونه	ساختار بلوری	اندازه بلورک(nm)
Mn_2CoGe	S_{am}	آمورف گونه	1/7
	S_{aa}	مکعبی	17

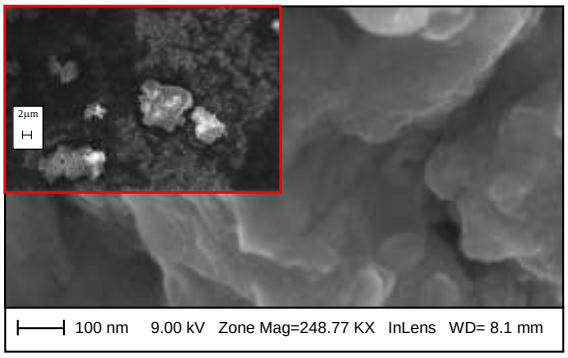
جدول ۱ مقایسه ویژگی‌های ساختاری نمونه‌ها

مقایسه ریزساختار Mn_2CoGe در دو روش ساخت

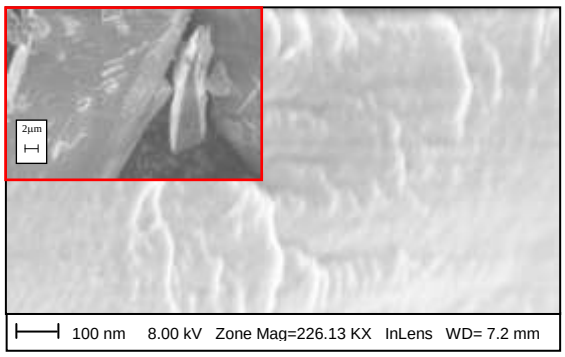
تصاویر SEM نمونه‌های S_{am} و S_{aa} در شکل ۲ و ۳ نشان داده‌شده است. این تصاویر نشان می‌دهد که در نمونه S_{am} که عناصر بعد از ذوب، آسیاب شدند ساختار بلوری کامل شکل نگرفته و تخلخل و آمورف‌گونه شدن نمونه در مقیاس نانومتر کاملاً مشخص است. درحالی‌که در نمونه S_{aa} که عناصر بعد از ذوب باز پخت شدند، ذرات درهم‌تنیده شده و جوش‌خورده‌اند و ساختار بلوری یکنواختی شکل‌گرفته است. بزرگ‌تر بودن اندازه بلورک‌های نمونه S_{aa} نسبت به نمونه S_{am} در راستای تأیید همین مطلب است.



شکل ۱ مقایسه نمودار XRD نمونه S_{am} و S_{aa} آلیاژ Mn_2CoGe



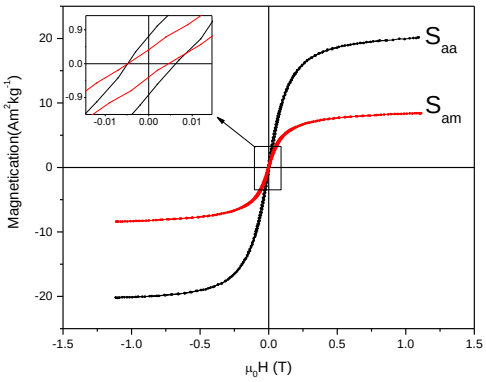
شکل ۲ مقایسه تصویر SEM نمونه S_{am} آلیاژ Mn_2CoGe درمقیاس 1μm و 100 nm



شکل ۳ تصویر SEM نمونه S_{aa} ترکیب Mn_2CoGe در مقیاس 1μm و 100 nm

مقایسه خواص مغناطیسی Mn_2CoGe در دو روش ساخت

حلقه‌های پسماند مغناطیسی نمونه‌های S_{am} و S_{aa} در دمای محیط در شکل ٤ نمایش داده‌شده است. محدوده مرکزی حلقه پسماند در یک بزرگنمایی بیشتر در الحاقی قرارگرفته است. شکل عمومی حلقه پسماند در دو نمونه نشان می‌دهد هر دو ترکیب ازنظر مغناطیسی رفتاری نرم دارند. مغناطش اشباع در نمونه S_{aa} برابر $18\ Am^2/kg$ بیشتر از مقدار این کمیت مربوط به نمونه S_{am} ($7\ Am^2/kg$) است که نشان از بهبود خاصیت مغناطیسی نمونه در طول پخت دارد.



شکل ٤ حلقه‌های پسماند نمونه‌های S_{am} و S_{aa}

مقادیر مغناطش اشباع برحسب مگنتون بوهر به ازای واحد فرمولی باهدف مقایسه با مدل اسلیتر–پائولینگ محاسبه و به همراه سایر کمیت-های منتج شده از حلقه‌های پسماند نمونه‌ها در جدول ۲ آمده است.

H_c (Oe)	M_r (Am^2/kg)	M_S $(\mu_B/F.u.)$	نمونه	ترکیب
45	0/4	0/36	S_{am}	Mn_2CoGe
48	0/7	0/81	S_{aa}	

جدول۲: ویژگی‌های مغناطیسی نمونه‌ها

همان‌گونه که قبلاً نیز اشاره شد بر طبق مدل اسلیتر–پائولینگ برای این ترکیب مغناطش اشباع ۳ مگنتون بوهر به ازای واحد فرمولی تخمین زده‌شده است. مقدار مغناطش اشباع هر دو نمونه از این مقدار کمتر است. باوجوداین بالا بودن مغناطش اشباع S_{aa} نسبت به S_{am} به این دلیل است که نمونه S_{am} نسبتاً آمورف‌گونه بوده درحالی‌که در نمونه S_{aa} ساختار بلوری تشکیل‌شده و بنابراین نظم مغناطیسی بیشتری دارد. از طرف دیگر ذرات نمونه S_{am} کوچک‌تر از نمونه S_{aa} است (جدول ۱) و بنابراین نسبت سطح به حجم در نمونه S_{am} بیشتر شده و بی‌نظمی موجود در سطوح مانع پیوند بین مغناطش بین اتم‌ها شده و همین عامل باعث کاهش نظم مغناطیسی می‌شود. همچنین میدان وادارندگی در نمونه S_{aa} بیشتر از نمونه S_{am} است، زیرا ساختار بلوری S_{aa} کامل شده و درنتیجه ناهمسانگردی مغناطوبلوری فعال گردیده است درصورتی‌که در نمونه S_{am} که ساختاری آمورف‌گونه دارد، این پدیده عمل نمی‌کند. بالاتر بودن مغناطش باقیمانده در نمونه S_{aa} به بالاتر بودن مغناطش اشباع در آن نسبت به نمونه S_{am} برمی‌گردد.

نتیجه‌گیری

آلیاژ هویسلر Mn_2CoGe با روش ذوب قوسی ساخته شد و سپس دو نمونه از آن تحت فرآیندهای تکمیلی آسیاب کاری و باز پخت قرار گرفت. آزمایش و تحلیل‌ها نشان داد، نمونه باز پخت شده ریزساختار یکنواخت با بلورک‌های بزرگ، ساختار بلوری منظم‌تر و مکعبی نسبت به نمونه آسیاب شده پیداکرده است. همچنین حلقه‌های پسماند نمونه‌ها، مغناطش اشباع و مغناطش باقیمانده حدوداً دو برابری را برای نمونه باز پخت شده نسبت به نمونه دیگر نشان داد. هرچند برای هر دو نمونه، مغناطش اشباع از پیش‌بینی اسلیتر پاولینگ کمتر بود.

مرجع‌ها

[1] G. reiner, A. Kalache, And et al; "New Mn2-based Heusler Compounds"; *Inorganic and General Chemistry*; **Vo.640, I.5** (2014) 738-752.
[2] V.V. Marchenkov, V.Y. Irkhin, "*Half-Metallic Ferromagnets, Spin Gapless Semiconductors, and Topological Semimetals Based on Heusler Alloys: Theory and Experiment*", *Phys. Metals Metallogr*. **122**, (2021)1133–1157.
[3] D.Kalliecharan,"Growth and characterization OF Mn2xCoGe, Mn_{2-x}RhGe and Mn_{2-x}CoGe thin film" *Thesis for the master of science*, Dalhousie University Halifax, Nova Scotia (2018)
[4] Y. Wang, L. Wang & W. Mi, " Highly spin-polarized electronic structure and magnetic properties of $Mn_{2.25}Co_{0.75}Al_{1-x}$ Ge $_x$ Heusler alloys: first-principles calculations " ; *RSC advances* ***10*(38)** (2020), 22556–22569.
[5] M. Meinert, J. M. Schmalhorst, and et al; "Exchange interactions and Curie temperatures in Mn_2CoZ compounds"; *Condensed Matter*, **Vo.23, N.11** (2010) *1-12*.
[6] D. Kalliecharan, J. S. R. McCoombs And et al; "Ferrimagnetism in sputtered MnxCoGe thin films"; *Materials Science (cond-mat.mtrl-sci)*, **Volume 1** (2019) 1-8.
[7] B. Benjamin, W. Sabine and et all; "Rational design of new materials for spintronics: Co_2FeZ (Z = Al, Ga, Si, Ge) Rational design of new materials for spintronics: Co_2FeZ (Z = Al, Ga, Si, Ge)"; *Sci. Technol. Adv. Mater*. **No.9** (2008) 1-13.
[8] Y. Miura, K. Nagao and M.Shirai; "Atomic disorder effects on half-metallicity of the full-Heusler alloys $Co_2(Cr_{1-x}Fe_x)Al$: A first-principles study"; *PHYSICAL REVIEW B* **69, 144413** (2004) 1-8.
[9] M. Hakimi, P. Kameli and et al; "Structural and Magnetic Properties of Co_2CrAl Heusler Alloys Prepared by Mechanical Alloying"; *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, **Vol. 322,I.21**, (2010) 34-43.
[10] Y. Waseda, E. Matsubara and K. Shinoda;" *X-ray diffraction* crystallography"; **1th edition**, *Springer* (2011) p122-126.

ساخت نوار ابررسانای دما بالا YBCO با استفاده از روش PIT: بررسی لوله‌های مسی و مس پوشش‌داده شده با نقره

قالب تراش، پردیس[۱و۲]؛ مرادی، مهرداد[۲]؛ ترابی، زینب[۱و۲]؛ نجات بخش، نوید[۱]؛ مکاریان، محمد حسین[۱]

[۱] شرکت دانش بنیان بهیار صنعت سپاهان، شهرک علمی تحقیقاتی، اصفهان

[۲] پژوهشکده علوم و فناوری نانو، دانشگاه کاشان، کاشان

چکیده

در این مقاله به بررسی ساخت سیم ابررسانای دما بالا $YBa_2Cu_3O_{7-x}$ (YBCO) با استفاده از روش پودر در لوله با بهره‌گیری از لوله‌هایی از جنس مس و مس پوشش‌داده شده با نقره پرداخته‌شده است. پس ازمرحله‌ی ساخت YBCO و پودر کردن آن‌ها، پودرها به ترتیب داخل لوله‌هایی از جنس مس و مس پوشش‌داده شده با نقره ریخته شد و پس از بستن مجاری لوله، به وسیله‌ی غلتک‌کاری و پرس تحت تغییر شکل مکانیکی قرار گرفت و به شکل نوار مسطح با سطح مقطع مستطیل درآمد. از نمونه‌ها آزمایش اثر مایسنر و از پودر داخل لوله آنالیز پراش اشعه ایکس (XRD) گرفته شد. در آنالیز XRD اثری از وجود نقره و مس در ساختار ابررسانا بعد از پرس دیده نشد و هم چنین اثر مایسنر در نمونه‌هایی که با نورد تحت تغییر شکل قرار گرفته بودند، مشاهده نشد. اما در نمونه‌هایی که با پرس تحت تغییر شکل قرار گرفته بودند، به‌خوبی مشاهده شد. از این نمونه آنالیز پذیرفتاری مغناطیسی گرفته شد. در نهایت به منظور بهبود خواص ابررسانایی و مکانیکی، نوارها تحت عملیات حرارتی قرار گرفتند. نتایج نشان داد که نوارهای ساخته شده با استفاده ازلوله‌های مسی بعد از عملیات حرارتی بطور کامل اکسید شد اما نوارهای ساخته شده با استفاده ازلوله‌های پوشش داده شده با نقره، درجه‌ی اکسید شدن کمتری داشت و استفاده ازلوله‌ی مسی پوشش داده شده با نقره انتخاب مناسب تری است.

واژه های کلیدی: *ابررسانا، نوار ابررسانای دما بالا، YBCO، روش پودر در لوله*

Fabrication of high-temperature superconducting YBCO tape using powder-in-tube method (PIT): investigation of copper and copper coated with silver tubes

Ghalebtarash, Pardis[1,2]; Moradi, Mehrdad[2]; Torabi, Zeinab[1,2]; Nejatbakhsh, Navid[1]; Mokariaan, Mohammad Hossein[1]

[1]Behyaar Sanat Sepahan Knowledge-enterprise, Isfahan Science and Technology Town (ISTT), Isfahan
[2] Institute of Nanoscience and Nanotechnology, University of Kashan, Iran

Abstract

In this paper, fabrication of the high temperature superconducting $YBa_2Cu_3O_{7-x}$ (YBCO) wire has been investigated using powder in tube method with copper tube and copper tube coated by silver. After synthesis of YBCO and grinding them, the powders were put in tubes of copper and copper coated by silver and after closing the pipe ducts, it is mechanically deformed by rolling and pressing and becomes a tape with a rectangular cross section. The Meissner's effect was taken from the samples and X-ray diffraction (XRD) analysis was performed from the powder inside the tube. As a result of XRD, there was no trace of silver and copper in the superconducting structure after pressing. Also, the Meissner's effect was not observed in the samples were deformed by rolling. But it was well observed in the samples were deformed by the pressing. The magnetic susceptibility test was performed for the samples. Eventually, in order to improve the superconducting and mechanical properties, the tapes were subjected to heat treatment. The results shown that the tapes made of copper tube were completely oxidized after heat treatment, but the tapes made of copper tubes coated with silver had a lower degree of oxidation. Therefore, using the copper tube coated with silver is a better choice.

***Keywords**: Superconductor, HTS tape, YBCO, Powder-In-Tube (PIT) method*
PACS No. 74

مقدمه

ابررسانای YBCO (ایبکو) با دمای گذار K ۹۰، در سال ۱۹۸۷ توسط چو و همکارانش کشف شد [۱]. این اولین ابررسانای با دمای بیشتر از نقطه‌ی جوش نیتروژن مایع بود. این کشف متحول کننده‌ی ابررساناهای دما بالا منجر به تحقیقات زیادی در زمینه‌ی استفاده از آن‌ها در صنعت شد. بسیاری از کاربردهای عملی ابررسانایی استفاده از آن‌ها به صورت سیم و یا نوار طویل در کابل‌های انتقال جریان زیاد، موتورها، ژنراتورها، تبدیل کننده‌ها، محدود کننده‌های جریان و تولید کنندگان میدان مغناطیسی قوی است [۲]. مشکلاتی از قبیل شکنندگی، رفتار ارتباط ضعیف مرزدانه‌ای و وابستگی به استکیومتری اکسیژن، از عواملی هستند که ساخت سیم‌های ابررسانای دما بالای YBCO را با کیفیت خوب محدود و مشکل می‌کنند. از روش‌های مختلفی برای ساخت سیم از این دسته مواد، استفاده می‌شود که یکی از آن‌ها روش پودر در لوله (Powder-In-Tube method) است. این روش به‌خاطر فرایند ساخت آسان، فراهم ساختن نوارهایی با طول زیاد و خصوصیات انعطافی و انتقالی نسبتا خوب نسبت به روش‌های دیگر، مورد توجه و انتخاب قرار گرفته است [۳].

در این مقاله، برای غلبه بر مشکل شکنندگی ترکیبات ابررسانای اکسیدی YBCO، از لوله‌های فلزی از جنس مس و مس پوشش‌داده شده با نقره استفاده شده است که خاصیت چکش خواری و مکانیکی آنها را بهبود ببخشد. هم‌چنین فلزات به‌دلیل دارا بودن خاصیت رسانایی گرمایی خوب، به‌عنوان وسیله‌ای برای پراکندگی حرارتی گرمای ایجاد شده در محیط ابررسانا استفاده می‌شوند و حفاظی در برابر عوامل جوی مانند رطوبت و علاوه بر این در صورت از بین رفتن ابررسانایی، می‌توانند مسیری معمولی برای عبور جریان‌های کم فراهم کنند [٤].

روش ساخت

ابتدا ترکیب $YBa_2Cu_3O_{7-x}$ (YBCO) با استفاده از نیترات آب‌دار فلزات $Y(NO_3)_2$, $Ba(NO_3)_2$, $Cu(NO_3)_2$ با روش سل‌ژل به‌دست آمد و سپس در دمای ۹۲۰ درجه‌ی سانتی‌گراد کلسینه شد. در ادامه تحت فشار MPa ۱۵۰ به صورت قرص درآمد و همراه با اکسیژن دهی در دمای ۹۳۰ درجه‌ی سانتی‌گراد کلوخه‌سازی شد. بر روی قرص YBCO پس از پایان عملیات کلوخه سازی، آنالیز XRD و آزمایش اثر مایسنر انجام شد که به خوبی این اثر مشاهده شد. در اثر مایسنر نمونه تا دمای نیتروژن مایع (منفی ۱۷۰ درجه سانتیگراد) خنک می شود. لازم به ذکر است مراحل ساخت ابررساتای YBCO توسط گروه‌های دیگر در شرکت بهیار صنعت سپاهان انجام شد و جزییات ساخت در گزارش‌های انها آمده است. در مرحله بعد قرص به صورت پودر درآمد و در دو لوله‌ی مسی که آنها را با نام C و A و دو لوله‌ی مسی پوشش داده شده با نقره که با نام B و D نام‌گذاری کردیم، ریخته شد. از هر لوله دو نمونه اماده شد تا بتوانیم از صحت آزمایش‌ها اطمینان حاصل کنیم.

پوشش نقره بر روی لوله‌های مس با روش آب‌کاری با استفاده از محلول الکترولس نقره با دمای کاری ٦۰ درجه‌ی سانتی‌گراد، انجام شد. مشخصات لوله‌های استفاده شده در جدول شماره ۱ مشاهده می‌شود. به‌منظور فشرده کردن پودر داخل لوله، پس از ریختن مقدار کمی پودر با کمک میله‌ای بر پودر فشار وارد کرده تا چگال‌تر شود و به این ترتیب لوله‌ها از پودر YBCO پر شدند. در نهایت با مسدودسازی انتهای آن‌ها، نمونه‌های A و B با استفاده از نورد و نمونه‌های C و D با استفاده از پرس با فشار MPa ۱۱۰، تحت تغییر شکل مکانیکی قرارگرفتند. ضخامت نوارها پس از نورد ۰/۱ میلی‌متر و پس از پرس ۰/۳ میلی‌متر بود.

نتایج و بحث

نمونه‌های A تا D با طول ۱ سانتی‌متر تحت آزمایش اثر مایسنر قرار گرفتند. نتیجه‌ی اثر مایسنر برای نمونه‌هایی که با پرس تغییر شکل یافته بودند (C,D)، به خوبی مشاهده شد و نمونه با خنک سازی در دمای نیتروژن مایع در فاصله‌ی ۲-۳ میلی‌متری از آهنربا قرار گرفت. اثر مایسنر برای نمونه‌هایی که تحت نورد سرد قرار گرفته بودند (A,B)، مشاهده نشد. در شکل ۱ تصویر آزمایش اثر مایسنر بر روی نمونه‌ی C مشاهده می‌شود.

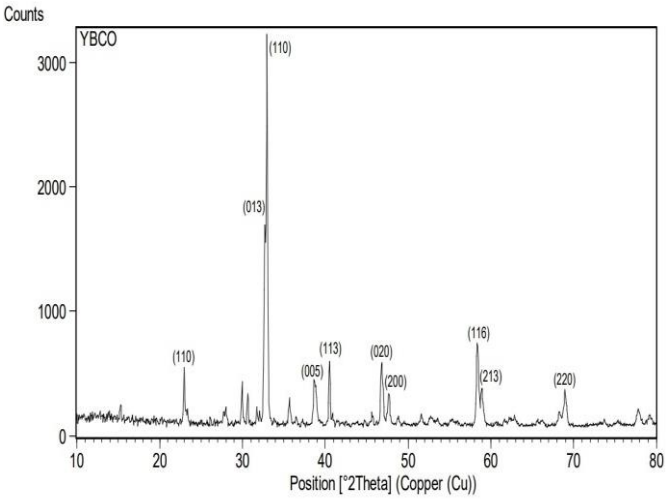
جدول ۱: مشخصات لوله‌های استفاده شده در ساخت نوار ابررسانا.

نمونه	طول (cm)	قطر داخلی (mm)	ضخامت دیواره (mm)	وزن ابررسانا (g)
A	۸	۳/٤	۱/۳۲	۲/۳۹
B	۸	۳/٤	۱/۳۲	۲/۳۹
C	۳	۳/۹	۰/۱	۰/۱
D	۳	۳/۹	۰/۱	۰/۱

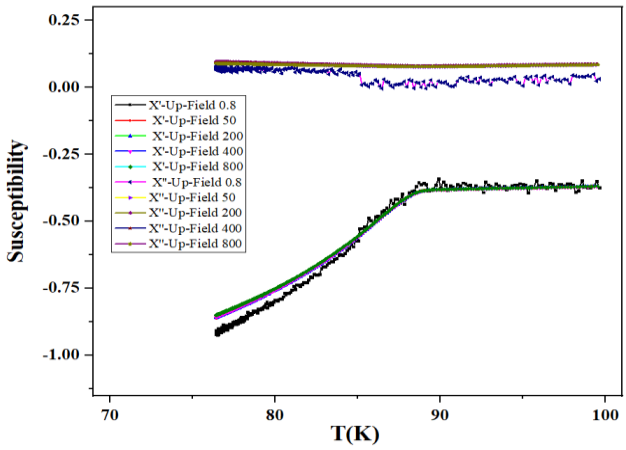
شکل ۱: تست اثر مایسنر مشاهده شده در نمونه‌ی C.

برای تعیین ساختار بلوری و فازهای موجود در نمونه‌ی ساخته شده (نمونه‌ی C)، از دستگاه پراش پرتو ایکس استفاده شد. این دستگاه بر اساس رابطه‌ی براگ استوار است. با شناسایی قله‌های موجود در طیف حاصل از نمونه و مقایسه‌ی آن با کارت‌های استاندارد JCPDS، اندیس‌های میلر مربوط به هر قله نام‌گذاری شدند. آنالیز XRD گرفته‌شده در شکل ۲ مشاهده می‌شود. قله‌های نامگذاری شده درون الگوی پراش پرتو ایکس، مربوط به YBCO است و اثری از مس و نقره در آن دیده نمی‌شود. همچنین بر روی نمونه‌ی C آنالیز پذیرفتاری مغناطیسی بر حسب دما توسط دستگاه پذیرفتاری سنج ACS7000 ساخت شرکت LakeShore انجام شد، که نمودار آن مطابق شکل ۳ است. در این شکل تغییرات مولفه‌ی حقیقی $\chi'(T)$ و موهومی $\chi''(T)$ پذیرفتاری مغناطیسی متناوب AC نمونه c بر حسب دما در بازه ۷۰ تا ۱۰۰ کلوین در فرکانس ۳۳۳ هرتز و میدان‌های مغناطیسی ۰/۸، ۵۰، ۲۰۰، ٤۰۰ و ۸۰۰ آمپر بر متر مشاهده می‌شود.

همان‌طور که شکل ۳ نشان می‌دهد، در قسمت موهومی در دمای ۸۵ کلوین قله‌ای پهن مشاهده می‌شود که نشان‌دهنده‌ی اتلاف در زمانی است که میدان به کل نمونه نفوذ کرده باشد. این قله‌ی پهن به دلیل عدم تف جوشی نمونه و اتصال بین دانه‌ای ضعیف در ابررسانا و روکش فلزی تشکیل شده است. همچنین گذار ابررسانایی در قسمت حقیقی در میدان‌های مغناطیسی مختلف در دمای ۸۷ کلوین اتفاق افتاده است. دمای گذار ابررسانایی در نمونه‌ی مربوط به سیم که دارای مغزه‌ی اکسیدی است، نسبت به نمونه‌های حجمی YBCO کاهش یافته است. علت این اتفاق چنین توجیه می‌شود که به علت تنشی که در هنگام پرس کردن بر روی سیم اعمال می‌شود، هم‌سویی دانه‌ها و ساختار لایه‌ای کاهش یافته است.

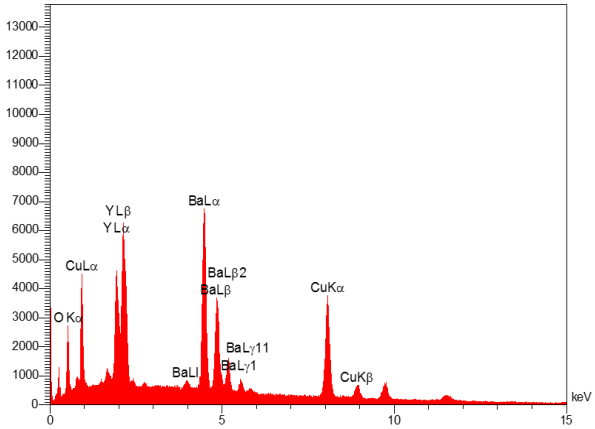


شکل ۲: نمودار XRD پودر YBCO درون نمونه‌ی C پس از پرس تحت فشار ۱۱۰ MPa.



شکل ۳: نمودار پذیرفتاری مغناطیسی نمونه‌ی C بر حسب دما در بازه ۷۰ تا ۱۰۰ کلوین در میدان‌های مغناطیسی ۰/۸، ۵۰، ۲۰۰، ٤۰۰ و ۸۰۰ آمپر بر متر.

در گام بعد، هر چهار نمونه به‌منظور بهبود خواص ابررسانایی و کاهش حفره‌های موجود در مغزه، تحت عملیات گرمادهی تف‌جوشی (sintering)، در محیط گاز آرگون با دمای ۹۲۰ درجه‌ی سانتی‌گراد به مدت ۱۵۰۰ دقیقه در کوره‌ی تیوبی قرار گرفتند. پس از اتمام فرایند تف‌جوشی مشاهده شد که، مقداری از اکسیژن ترکیب جذب پوشش مسی شده و نمونه ها اکسید شده و ابررسانا به عایق تبدیل شده است و پوشش نقره کمک قابل توجه‌ای به پیشگیری از این اتفاق نکرده است و فقط کمی از مقدار ان کاسته است.



شکل ٤: فراوانی عناصر موجود در نمونه C بر حسب انرژی

جدول ۲: نتایج EXD نمونه C.

Element	Line	Intensity	W%	A%
O	Ka	۳۱۸/۲	۱۷/۳۰	٥٤/۲۳
Cu	Ka	۹۷٤/۰	۲٥/۸۸	۲۰/٤۳
Y	La	۷۳۷/۰	۲۳/۱۲	۱۳/۰٤
Ba	La	۱۲۷۷/٥	۳۳/۷۰	۱۲/۳۰
Sum			۱۰۰	۱۰۰

به منظور بررسی عنصری نمونه C، از آن آنالیز EDX گرفته شد و نتایج در شکل ٤ و جدول شماره ۲ آورده شده است. اعداد نشانگر آنست که به غیر از عنصر ایتریم که حدودا دو برابر مقدار استاندارد است، درصد عنصری بقیه مواد قابل قبول هستند. مقدار اکسیژن باید حدود ٥٤ باشد که همخوانی قابل قبول با مقدار اندازه‌گیری دارد.

نتیجه‌گیری

نتایج به‌دست آمده نشان می‌دهد که برای مشاهده‌ی اثر مایسنر در نمونه‌های قبل از کلوخه سازی، لازم است چگالی مغزه‌ی ابررسانا به اندازه‌ی کافی بالا باشد و بافت آن منسجم باشد. هم چنین جنس لوله، عامل بسیار مهمی در ساخت سیم ابررسانا با روش PIT است. پوششی که انتخاب می‌شود نباید تأثیر مخرب در خواص ابررسانایی نمونه داشته باشد و باعث افت خواص آن پس از فرایند تف‌جوشی شود. در نتیجه لوله‌هایی از جنس مس و مس پوشش‌داده شده با نقره انتخاب مناسبی برای ساخت نوار ابررسانای YBCO نیست، اما لوله مس پوشش داده شده با نقره عملکرد بهتری را نشان داده است.

سپاسگزاری

نویسندگان مقاله از مدیریت و همکاران در شرکت بهیار صنعت سپاهان که این پژوهش با پشتیبانی مادی و معنوی آن‌ها انجام شد، تشکر می‌کنند.

مرجع‌ها

[1] M. K. Wu, J. R. Ashburn, C. J. Torng, P. H. Hor, R. L. Meng, L. Gao, Z. J. Huang, Y. Q. Wang, and C. W. Chu, “Superconductivity at 93 K in a new mixed-phase Y-Ba-Cu-O compound system at ambient pressure”, Phys. Rev. Lett. Vol. 58, pp. 908, 1987.

[2] A. Harabor, P. Rotaru, N. A. Harabor, P. Nozar, and A. Rotaru, "Orthorhombic YBCO-123 ceramic oxide superconductor: Structural, resistive and thermal properties," Ceramics International, vol. 45, pp. 2899-2907, 2019.

[3] J. Bowker and G. Whitlow, "Effect of heat treatment conditions on critical current of $YBa1Cu_3O_7$-delta/Ag powder-in-tube wires", Superconductor Science and Technology, vol. 6, p. 106, 1993.

[4] K. Osamura, T. Takayama, and S. Ochial, "Dependence of critical current density on microstructure in Ag sheathed $Ba_2YCu_3O_6$+ x tapes," Cryogenics, vol. 30, pp. 430-433, 1990.

بررسی اثرعملیات حرارتی تحت گاز هیدروژن وآرگون بر تشکیل پروسکایت دوگانه تک فاز Ba_2FeMoO_6

قربانی، زهرا[۱] ؛ احسانی، محمد حسین*[۲]

[۲] آزمایشگاه تحقیقاتی مواد مغناطیسی دانشکده فیزیک، دانشگاه سمنان،سمنان

چکیده

تاثیر عملیات حرارتی تحت گاز H_2/Ar در دمای ۹۰۰ درجه سانتی گراد روی تشکیل Ba_2FeMoO_6 تک فاز تهیه شده به روش سل- ژل مورد بررسی قرار گرفت.برای بررسی ساختار کریستالی BFMO ،پراش پرتو ایکس پودری انجام شد. برازش ریتولد ساختار مکعبی با گروه فضایی $Fm^{-}3m$ را توصیف کرد. تصویر میکروسکپ الکترونی روبشی پیوستگی ذرات و وجود مرزدانه ها را به وضوح نشان داد.در طیف مادون قرمز فوریه قله هایی در نزدیکی۴۳۰ و ۸۲۵ برای نمونه ها مشاهده شد که به ترتیب به ارتعاش خمشی وکششی در جایگاه هشت وجهی یون های فلزی نسبت داده می شود.

واژه های کلیدی: *پروسکایت دو گانه، تک فاز،عملیات حرارتی،هیدروژن /آرگون.*

Investigation of annealing treatment effect under H_2 and Ar gases on the formation a single phase double perovskite Ba_2FeMoO_6

Ghorbani, Zahra[1]; Ehsani, Mohammad Hossein*[2]

[2] *Magnetic Lab, Department of Physics, University of Semnan, Semnan*

Abstract

Influence of heat treatment was investigated in 900°c under H_2/Ar on synthesis of a single phase double pervoskite Ba_2FeMoO_6 (BFMO) which was produced by sol-gel method. Powder X-ray diffraction has been employed to study the crystal structure of BFMO. Rietveld refinement described a cubic structure with $Fm^{-}3m$ space group .FESEM images showed that the grains compacted together and grain boundaries were clear. FTIR spectra revealed the peaks nearby 430 and 825. The presence of these peaks related to bending and stretching vibration of metal ion bands at octahedral sites, respectively.

***Keywords**: Ba_2FeMoO_6; double perovskite; single phase; annealing treatment; H_2/Ar.*

مقدمه

اکسیدهای پروسکایت دوگانه$AA'BB'O_6$ کاربردهای بسیاری در جذب هیدروژن برای ذخیره سازی[۵] به عنوان آند در سلول های سوختی اکسید جامد[۱۲-۶] ، تجهیزات حافظه های مغناطیسی [۶] اسپین ترونیک ،پدیده های مغناطو مقاومت [۷] و سرد سازی مغناطیسی[۸] دارند.

نگرانی در مورد گرم شدن کره زمین و هزینه های بالای انرژی مصرفی نیاز به فناوری سردسازی جایگزین و سازگار با محیط زیست و مقرون به صرفه را خواستار است که در این راستا ،فن آوری سرد سازی مغناطیسی مبتنی بر اثر مگنتو کالریک مواد در مقایسه با سردسازی به وسیله گازهای تراکمی معمولی کار آمدتر و سازگارتر با محیط زیست است.[۲] .

اکسید های پروسکایت دوگانهA_2FeMoO_6 (A= Sr, Ba, Ca) نیمه فلزهای فری مغناطیس هستند که ممان های مغناطیسی $Fe^{3+}(s=5/2)$ با $Mo^{5+}(s=1/2)$ جفت شدگی آنتی فرومغناطیس تشکیل می دهند[۱۳-۱۱] .

در میان این مواد، پروسکایت های دوگانه Ba_2FeMoO_6 به دلیل دمای گذار نزدیک به دمای اتاق مورد توجه بیشتری قرار گرفته است[۸] .

یکی از مسائل مهم در تولید ترکیبات پروسکایت دوگانه دست یابی به فاز خالص این ترکیبات ذکر شده است. مطالعات انجام شده روی پروسکایت های دوگانه حاکی ازتشکیل فاز ناخالص در این ترکیبات می باشد. محققین با استفاده از گاز سولفید هیدروژن ، متان یا مخلوط جریان گازهای هیدروژن –آرگون ، هیدروژن – نیتروژن تحقیقاتی را برای دست یابی به فاز خالص اکسیدهای پروسکایت دوگانه انجام داده اند[۱٤-۳] .

برخی مرجع ها تشکیل فاز خالص رامشکل و نیازمند بعضی از تمهیدات مانند استفاده از کپسول های تخلیه سیلیس یا یک جو بسیار احیاء کننده می دانند[۵] .

شرایط آزمایشگاهی و فرآیندهای ساخت از جمله دمای پخت و فشار جو تاثیر به سزایی در تشکیل فاز خالص و ساختار این ترکیبات دارند[۱۳-۵] .

این ترکیبات با استفاده از روش های مختلفی مانند واکنش حالت جامد[۱۲] ،سل –ژل استاندارد[۱۱-۱۰] و سل –ژل احتراقی [۹] تولید می شوند. هدف از این تحقیق بررسی خواص مغناطیسی و مگنتوکالریک اکسید پروسکایت دوگانه تک فاز Ba_2FeMoO_6 می باشد که در این مقاله تنها به روش ساخت و بررسی دست یابی به فاز خالص پرداخته می شود.

تجربی

مواد اولیه و آماده سازی ترکیب

در این تحقیق پروسکایت دوگانه Ba_2FeMoO_6 به روش سل–ژل استاندارد آماده شد. نسبت های مشخص از پودر مواد $(NH_4)_6Mo_7O_{24}.4H_2O$, $Fe(NO_3)_3.9H_2O$, $Ba(No_3)_2.4H_2O$ در ۳۰ سی سی آب دوبار یونیزه حل ودر دمای ۷۰ درجه سانتی گراد روی یک اجاق الکتریکی در حالی که به وسیله همزن مغناطیسی همزده می شد به مدت دوساعت قرار گرفت.در این مدت زمان اتیلن گلیکول و اسید سیتریک حل شده در آب دوبار یونیزه قطره قطره به محلول فوق افزوده شد.سپس محلول به مدت ۵ ساعت دیگر در همان دما روی اجاق قرار داشت تا ژل قرمز رنگ به دست آمد، PH محلول ۲ اندازه گیری شد. پس از آن محلول مستقیما روی اجاق در دمای ۱۰۰ درجه سانتیگراد به مدت ۱۲ ساعت قرار داشت تا محلول خشک شود.ماده حاصل پس از سرد شدن درون هاون دستی ساییده و پس از وزن شدن برای عملیات حرارتی در دمای ۳۰۰ درجه سانتی گراد به مدت ۳ ساعت درون کوره قرار گرفت.

به منظور بررسی اثر دمای تکلیس، ماده حاصل پس از ساییده شدن، وزن و به سه قسمت مساوی تقسیم شد،S_1800, S_1900 و S_11000 به ترتیب تحت دمای۸۰۰ ،۹۰۰و۱۰۰۰ درجه سانتی گراد در کوره به مدت ۱٦ ساعت قرار گرفتند.

درپایان نمونه ها به صورت قرص در آورده شدند و عملیات حرارتی تحت گاز$5\%H_2$ و Ar در دمای ۹۰۰ درجه سانتی گراد به مدت ۱۰ ساعت انجام شد.

به منظور بررسی ساختار و تشکیل فاز خالص ، پراش پرتو ایکس نمونه ها قبل و بعد از عملیات حرارتی تحت گاز ۵٪ هیدروژن و۹۵٪ آرگون، به وسیله دستگاه پراش پرتو ایکس مدل (Advance Bruker D-8) انجام شد.

طیف سنجی مادون قرمز فوریه با دستگاه طیف سنج مدل (8400s-SHIMAZU), ریخت شناسی و طیف سنجی توزیع انرژی توسط میکروسکپ الکترونی روبشی (ZEISS Sigma 300 HV)انجام شد.

بحث و بررسی

مشخصه یابی پراش پرتو ایکس

شکل ۱ الگوهای پراش پرتو ایکس نمونه ها (a) قبل از عملیات حرارتی تحت گاز هیدروژن و آرگون را نشان می دهد. که با توجه به الگوهای پراش پرتو ایکس گزارش شده در مرجع های [۱۵-۱۱] و مرجع شماره ۳۰۳٤-۱۵۳-۹٦ موجود در پایگاه داده ها متعلق به Ba_2FeMoO_6 ، مواد آماده شده همگی دارای ناخالصی $BaMoO_4$ می باشند. همان گونه که مشاهده می شود با افزایش دمای تکلیس شدت قله اصلی نمودارها که متعلق به ترکیب $BaMoO_4$ می باشد کاهش یافته و در نمونه S_1900 شدت قله متعلق به Ba_2FeMoO_6 افزایش یافته که می تواند بیانگر تشکیل بهتر فاز مورد نظر در این دما باشد. با افزایش دمای تکلیس در

نمونه $S_1$1000 شدت این قله نیز کاهش یافته وبر شدت قله های دیگر افزوده شده که می تواند گویای تشکیل فاز دیگری باشد که ممکن است متعلق به ترکیب $Ba_5Fe_5O_{14}$ باشد.

اثر عملیات حرارتی تحت گاز هیدروژن و آرگون در تشکیل فاز خالص

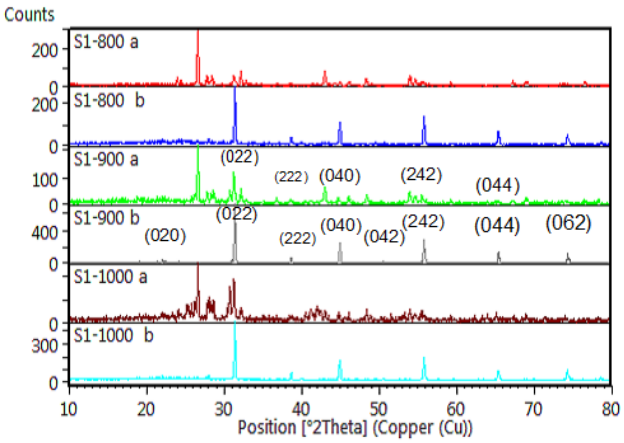
به منظور دست یابی به فاز خالصBFMO نمونه های برشته شده در دماهای ذکر شده به صورت قرص در آورده شدند و عملیات حرارتی تحت گاز $5\%H_2$ و Ar در دمای ۹۰۰ درجه سانتی گراد به مدت ۱۰ ساعت انجام شد.

شکل ۱ نمودارهای (b) پراش پرتو ایکس بعد از عملیات حرارتی تحت گاز$5\%\ H_2$ و Ar رانشان می دهد.همان طور که مشاهده می شود قله اصلی که متعلق به فاز ناخالصی بود در تمام نمونه ها از بین رفته و فاز خالص Ba_2FeMoO_6 تشکیل شده است.اثر عملیات حرارتی بر نمونه S_1-1000 بسیار قابل توجه می باشد که نشان دهنده تاثیر بسیار زیاد عملیات حرارتی تحت گاز$5\%H_2$ و Ar در تشکیل فاز خالص BFMO نمونه ها داشته است.

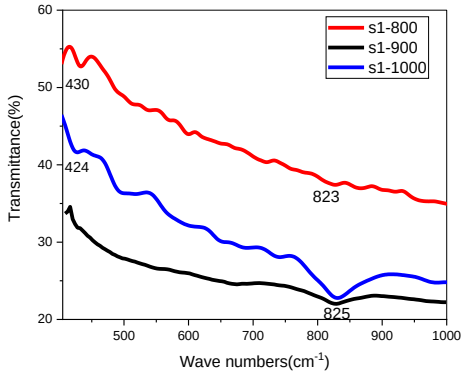
نتایج برازش ریتولد به وسیله نرم افزار فول پروف نشان داد که ناخالصی ها از بین رفته و BFMO باساختار مکعبی با گروه فضایی $Fm^{-}3m$ حاصل شده است.پارامترهای شبکه a=b=c=۸.۰۷۵ و حجم یاخته واحد v=۵۲۶.۵۳۳ به دست آمده است.

طیف سنجی مادون قرمز تبدیل فوریهFT-IR

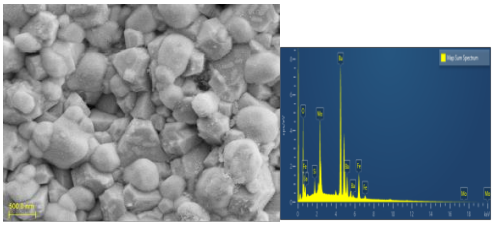
شکل ۲ نمودارهای طیف سنجی مادون قرمز تبدیل فوریه سه نمونه مورد بررسی را نشان می دهد. نتایج طیف سنجی مادون قرمز برای سه نمونه فوق پس از عملیات حرارتی تحت گاز هیدروژن و آرگون در جدول ۱ آورده شده است. قله های۴۲۴ و ۴۳۰ متعلق به ارتعاش خمشی و قله ۸۲۳ و۸۲۵ متعلق به ارتعاش کششی Mo-O در هشت وجهی MoO_6 می باشد که تاییدی بر تشکیل پروسکایت دوگانه می باشد[۴-۱].



شکل۱: نمودار پراش پرتو ایکس نمونه ها (a) قبل و (b) بعد از عملیات حرارتی تحت گاز هیدروژن و آرگون



شکل۲:نمودارطیف سنجی مادون قرمز تبدیل فوریه نمونه ها



شکل۳:سمت چپ تصویر میکروسکوپ الکترونی روبشی وسمت راست طرح EDS نمونهS_1-900

مشخصه یابی میکروسکوپ الکترونی روبشی FESEM

تصاویر میکروسکوپ الکترونی روبشی نمونه حرارت دیده در ۹۰۰ درجه سانتی گراد بعد از عملیات حرارتی تحت گاز هیدروژن و آرگون در شکل۳ نشان می دهد دانه ها به هم متصل و مرزدانه ها به خوبی مشخص می باشند.

طرح EDS حضور عناصر تشکیل دهنده پروسکایت دوگانه Ba_2FeMoO_6 را نشان می دهد.

جدول۱ :نتایج طیف سنجی مادون قرمز فوریه

مرجع	نمونه	موقعیت قله	مدارتعاش
[۱،٤]	S_1800	٤۳۰	ارتعاش خمشی پیوند Mo-O
[۳،۱٦]		۸۲۳	ارتعاش کششی متقارنMo-O در هشت وجهی MoO_6
[۳،۱٦]	S_1900	۸۲٥	ارتعاش کششی متقارنMo-O در هشت وجهی MoO_6
[۱،٤]	S_11000	٤۲٤	ارتعاش خمشی پیوند Mo-O
[۳،۱٦]		۸۲٥	ارتعاش کششی متقارنMo-O در هشت وجهی MoO_6

نتیجه گیری

نتایج به دست آمده ازپراش پرتو ایکس نمونه های آماده شده به روش سل-ژل نشان داد که برای دستیابی به فاز خالص Ba_2FeMoO_6 عملیات حرارتی تحت گاز $5\%H_2$ و Ar تاثیر به سزایی داشته است.بررسی طیف مادون قرمز نمونه ها ارتعاش خمشی و کششی ناشی از پیوند Mo-O در هشت وجهی MoO_6 را نشان داد که گواهی بر تشکیل پروسکایت دو گانه می باشد.تصویر میکروسکپ الکترونی عبوری علاوه بر پیوستگی دانه ها تشکیل مرز دانه ها را به وضوح نشان می دهد.

مرجع‌ها

[۱] M. Bazarganipour; "Synthesis and characterization of $BaMoO_4$ Nanostructures prepared via a Simple Sonochemical Method and their degradation ability of methylene blue" *Ceramics International* (2016)

[۲] Imad Hussain, M. S. Anwar, S. N. Khan, Aga Shahee, Zeeshan Ur Rehman, Bon Heun Koo; "Magnetocaloric effect and magnetic properties of the isovalent Sr^{2+} substituted Ba_2FeMoO_6 double perovskite" ; *Ceramics International* (2017)

[۳] X. Y. Li, Z. F. Yao, L. Y. Zhang, G. H. Zheng, Z. X. Dai and K. Y. Chen; "Generation of oxygen vacancies on Sr_2FeMoO_6 to improve its photocatalytic performance through a novel preparation method involving pH adjustment and use of surfactant" ; *Applied Surface Science* **480** (2019) 262–275.

[٤] S. Feraru, P. Samoila, A.I. Borhan, M. Ignat, A.R. Iordan, M.N. Palamaru; "Synthesis, characterization of double perovskites Ca_2MSbO_6 (M = Dy, Fe, Cr, Al) materials via sol-gel auto-combustion and their catalytic properties"; *Materials Characterization* (2013)

[٥] J. J. Alvarado-Flores, R. Mondragon-Sanchez, M. L. Avalos Rodrıguez, J. V. Alcaraz-Vera, J. G. Rutiaga-Quinones and S.J. Guevara-Martınez; "Synthesis, characterization and kinetic study of the $Sr_2FeMoO_{6-\delta}$ double perovskite: New findings on the calcination of one of its precursors"; *International Journal Of Hydrogen Energy* (2021)

[٦] N. Kalanda, M. Yarmolich, A. Petrov, I. Raevski, S. Kubrin, S. Raevskaya, I. Bobrikov, A. Lazavenka and D.-H. Kim; "The influence of cation ordering and oxygen nonstoichiometry on magnetic properties of $Sr_2FeMoO_{6-\delta}$ around Curie temperature"; *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **500** (2020)

[۷] I. Angervo, M. Saloaro, S. Granroth, H. Huhtinen and P. Paturi ; "Refined Sr_2FeMoO_6 interface realized with photoemission and magnetization analysis"; *Applied Surface Science* **507** (2020)

[۸] K. S. Kim, M. S. Lee, Y. D. Zhang, B. S. Kang, S. C. Yu and B. W. Lee; "Behavior of magnetic entropy change in perovskite $Ba_{2-x}La_xFeMoO_6$"; *Journal of Applied Physics* **111** (2012)

[۹]M. K. Rath and K.-T.Lee; "Characterization of novel Ba_2LnMoO_6 (Ln = Pr and Nd) double perovskite as the anode material for hydrocarbon-fueled solid oxide fuel cells"; *Journal of Alloys and Compounds* (2018)

[۱۰]T. Tiittanen and M. Karppinen; "Kinetics and thermodynamics of B-site cation order in $(Sr, Ba)_2FeSbO_6$ perovskite"; *Journal of Solid State Chemistry* (2017)

[۱۱]W. H. Song, J. M. Dai, S. L. Ye, K. Y. Wang, and J. J. Du; "Preparation and magnetic properties of the double-perovskite A_2FeMoO_6 (A= Ca, Sr, Ba). polycrystals with nanometer-scale particles"; *Journal of Applied Physics* **89** (2001)

[۱۲] H. Ding, N. P. Sullivan, S. Ricote; "Double perovskite $Ba_2FeMoO_{6-\delta}$ as fuel electrode for protonic-ceramic membranes"; *Solid State Ionics* (2017)

[۱۳] F. Xiao-mei, L. Guang-yao, H. Qing-zhen and R.Guang-hui; "Influence of annealing treatment on structural and magnetic properties of double perovskite Sr_2FeMo0_6"; *Trans. Nonferrous Met. SOC.China* **16** (2006) 122-126

[۱۴] T.G. Howell, C.P. Kuhnell , T.L. Reitz , A.M. Sukeshini , R.N. Singh ; "A_2MgMoO_6 (A = Sr, Ba) for use as sulfur tolerant anodes"; *Journal of Power Sources* **231** (2013) 279-284

[۱۵] H. Han, C.S. Kim, B.W. Lee; "Magnetic properties of ordered Perovskite Ba_2FeMoO_6"; *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* ***254–255*** *(2003) ,574–576*

[۱۶] Y. A. Alsabah, A. A. Elbadawi, E. M. Mustafa, M. A. Siddig; "The Effect of Replacement of Zn^{2+} Cation with Ni^{2+} Cation on the Structural Properties of $Ba_2Zn_{1-x}Ni_xWO_6$ Double Perovskite Oxides (X = 0, 0.25, 0.50, 0.75, 1)"; *Journal of Materials Science and Chemical Engineering* ***4****(2016), 61-70*

تأثیر نسبت مولی آهن به استرانسیم بر خواص ساختاری و مغناطیسی نانوذرات *هگزافریت استرانسیوم* سنتز شده به روش سل_ژل

آذرنوش، اسماعیل[۱]؛ داورپناه، عبدالمحمود[۱]؛ رخشانی اول، سجاد[۲]؛

[1]گروه فیزیك دانشگاه سیستان و بلوچستان، بلوار دانشگاه، زاهدان
[2] گروه شیمی، دانشگاه سیستان و بلوچستان، بلوار دانشگاه، زاهدان

چکیده

در این کار پژوهشی، نانو ذرات هگزافریت استرانسیوم به روش سل-ژل سنتز شده است. ژل‌ها از نیترات فلزی و اسید سیتریک با نسبت مولی Fe/Sr مختلف و آمونیاک به عنوان عامل تنظیم کننده pH تهیه شدند. فاز، شناسایی پیوند و ترکیبات، مورفولوژی و اندازه ذرات، خواص مغناطیسی نمونه‌ها با استفاده از پراش اشعه ایکس، طیف سنجی تبدیل فوریه فروسرخ، میکروسکوپ الکترونی روبشی گسیل میدانی و مغناطیس‌سنج نمونه ارتعاشی مورد مطالعه قرار گرفت. اثر نسبت مولی Fe/Sr بر ساختار بلوری و خواص مغناطیسی هگزافریت استرانسیوم مورد بررسی قرار گرفت. تحلیل پراش اشعه ایکس تشکیل فاز خالص هگزافریت استرانسیوم نوع M را در دماهای 950 و 1050 درجه سلسیوس نشان می‌دهد. میدان وادارندگی (2500-6000 Oe) در شرایط مختلف سنتز به دست آمد. علاوه بر این، ساختار و خواص مغناطیسی پودرهای هگزافریت استرانسیم تولید شده به شدت به شرایط سنتز بستگی دارند.

واژه های کلیدی:
هگزافریت استرانسیم، سل_ژل، فریت، نانوذرات، خواص مغناطیسی

The effect of molar ratio of iron to strontium on structural and magnetic properties of strontium hexaferite nanoparticles synthesized by sol-gel method

Azarnosh, Esmail[1]; Davarpanah, Abdol Mahmood[1]; Rakhshani Aval, Sajad[2];

[1] Department of Physics, University of Sistan and Baluchestan, Zahedan,
[2] Department of Chemistry, University of Sistan and Baluchestan, Zahedan,

Abstract

In this research, strontium hexaferite nanoparticles were synthesized by sol-gel method. The gels were prepared from metal nitrate and citric acid with different molar ratios of Fe / Sr and ammonia as pH adjusting agent. Phase, bond and composition identification, morphology and particle size, magnetic properties of the samples were studied using X-ray diffraction, field emission scanning electron microscopy and vibration sample magnetometer. The effect of Fe / Sr molar ratio on the crystal structure and magnetic properties of strontium hexaferite was investigated. X-ray diffraction analysis shows the formation of pure phase strontium hexaferite type M at temperatures of 950 and 1050 degrees Celsius. Wide coercivities (2500-6000 Oe) was obtained under different synthesis conditions. In addition, the structure and magnetic properties of the strontium hexaferite powders produced strongly depend on the synthesis conditions.

***Keywords**: Strontium hexaferite, sol_gel, ferrite, nanoparticles, magnetic properties*
PACS No. 75

مقدمه

مواد مغناطیسی طیف گسترده ای از مواد را در بر می‌گیرند که می‌توانند به عنوان مواد مغناطیسی نرم یا سخت با طیف گسترده‌ای از کاربردهای صنعتی و فناوری طبقه‌بندی شوند. بر اساس ساختار بلوری و ترکیبات شیمیایی، هگزافریت ها به شش نوع اصلی (M، W، Y، Z، X، U) طبقه بندی می‌شوند. در میان این انواع مختلف، $SrFe_{12}O_{19}$ به دلیل خواصی مانند سختی مکانیکی، مقاومت در برابر خوردگی، میدان وادارندگی بالا با ناهمسانگردی قوی در امتداد محور c، دمای کوری بالا و مغناطش اشباع زیاد مورد توجه ویژه‌ای در تحقیقات مواد قرار گرفته است [1] .

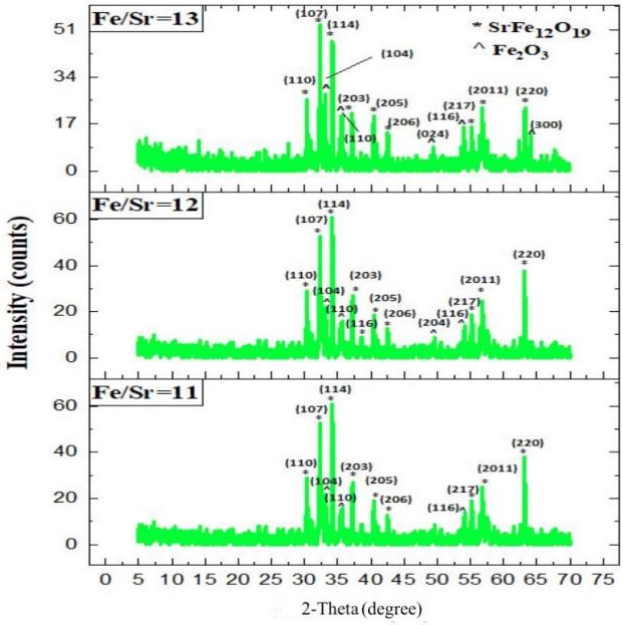
روشهای آزمایشی

برای سنتز فریت استرانسیم از نیترات آهن 9 آبه ($Fe(NO_3)_3.9H_2O$)، نیترات استرانسیم ($Sr(NO_3)_2$) ساخت شرکت مرک آلمان و اسید سیتریک به عنوان مواد اولیه استفاده شده است، نیترات‌های فلزی با نسبت مولی مختلف Fe به Sr جداگانه در حداقل مقدار آب دوبار تقطیر شده حل شدند، مقدار 0/21 گرم نیترات استرانسیم در آب حل شدند و به ترتیب نسبت-های مولی آهن به استرانسیم 11، 12 و 13 به 4/44، 4/84 و 5/25 گرم نیترات آهن 9 آبه که در آب حل شده بودند، به صورت جداگانه اضافه شدند، سپس همزده شدند تا محلول شفافی به دست آمد. اسید سیتریک به آرامی به محلول‌ها اضافه شد و دوباره به مدت 20 دقیقه محلول همزده و سپس محلول آمونیاک کم کم اضافه شد تا pH در 7 تنظیم شد. محلول‌ها به آرامی روی یک صفحه داغ در 80 ºC با هم زدن مداوم گرم شدند تا آب

تبخیر شود و در نهایت ژل‌های قهوه‌ای چسبناک به دست آمدند. ژل‌های بدست آمده در دماهای مختلف بازپخت شد. در مرحله اول Fe به Sr را با نسبت‌های مولی مختلف بکار برده شدند و ژل‌های بدست آمده در دمای ۹۰۰ °C بازپخت شد. آزمایش‌ها در آزمایشگاه تحقیقات نانو مواد مغناطیسی دانشگاه سیستان و بلوچستان انجام شده است. نمونه‌های بدست آمده تحت آنالیزهای پراش پرتو ایکس، میکروسکوپ الکترونی روبشی گسیل میدان، طیف سنجی پراش انرژی پرتو ایکس و مغناطیس سنج نمونه ارتعاشی قرار داده شدند که در ادامه نتایج آنالیزها مورد تحلیل و بررسی قرار می‌گیرند.

نتایج پراش اشعه ایکس

شکل 1 الگوهای پراش پرتو ایکس پودرهای فریت استرانسیم با نسبت مولی Fe^{+3}/Sr^{+2} متفاوت (11، 12 و 13) با دمای بازپخت ۹۰۰ °C برای 2 ساعت و pH = ۷ در تشکیل $SrFe_{12}O_{19}$ را نشان می‌دهد که توسط دستگاه Bruker advance D8 واقع در آزمایشگاه مرکزی دانشگاه سیستان و بلوچستان گرفته شده است. الگوهای پراش پرتو ایکس پودرهای تولید شده در نسبت مولی 12 وجود فازهای فریت شش ضلعی استرانسیم و اکسید آهن را نشان می‌دهد. الگوی پراش پرتو ایکس در مقادیر 2θ به صورت، 30/37، 32/35، 34/18، 37/12، 40/38، 56/85 و 63/13 درجه که به ترتیب نسبت داده شده به اندیس‌های میلر (110)، (107)، (114)، (203)، (205)، (2011) و (220) که بازتاب الگوی استاندارد برای بلورهای شش ضلعی نوع M، $SrFe_{12}O_{19}$ است (کارت JCPDS شماره 1198-80)، هستند. علاوه بر این، اندیس‌های میلر، (104) ، (110)، (116) و (024) در مقادیر 2θ به صورت 33/17، 35/61، 54/01 و 49/34 منعکس کننده حضور فاز اکسید آهن است [۲].



شکل 1. الگوهای پراش پرتو ایکس سه نمونه در دماهای بازپخت °C 900

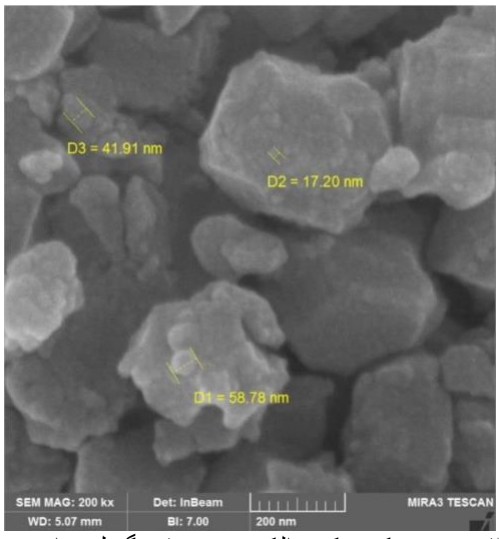
کاهش نسبت مولی آهن به استرانسیم باعث افزایش درصد تشکیل تک فاز فریت شش ضلعی استرانسیم می‌شود. در نسبت مولی 11 از پنج قله مربوط به اکسید آهن درنسبت 12 به 1 آهن و استرانسیم دو قله آخر حضور ندارند و درصد تشکیل تک فاز $SrFe_{12}O_{19}$ افزایش یافته است، در نسبت مولی 13 به 1، آهن به استرانسیم یک قله در 64/05 دیده می‌شود که مربوط به اکسید آهن است و حاکی از کاهش درصد فاز $SrFe_{12}O_{19}$ است. کاهش درصد تشکیل فاز $SrFe_{12}O_{19}$ با افزایش نسبت مولی آهن به استرانسیم با بررسی الگوهای پراش سه نمونه که در کار انجام شده بوسیله محمود حسین و همکاران [۳] نیز قابل مشاهده است، دیده می‌شود. نتایج نشان داد که اندازه متوسط بلورک‌ها با کاهش نسبت مولی Fe/Sr افزایش می‌یابد. جدول ۱ میانگین اندازه بلورک‌ها را نشان می‌دهد.

جدول ۱ میانگین اندازه بلورک‌ها در نسبت‌های مولی متفاوت

نسبت مولی Fe/Sr	میانگین اندازه بلورک‌ها (نانومتر)
11	44/70
12	42/85
13	41/83

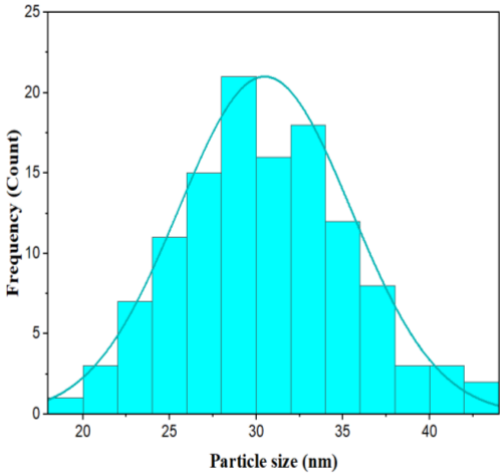
نتایج میکروسکوپ الکترونی روبشی گسیل میدان

شکل۲ تصویر حاصل از میکروسکوپ الکترونی روبشی گسیل میدان شرکت مهامکس مربوط به نمونه بازپخت شده در دمای ۹۰۰ °C با نسبت مولی 11 را نشان می‌دهد، که در مقیاس 200 نانومتر با بزرگنمایی 25 هزار برابر قابل مشاهده است. این تصویر نشان از ذراتی نزدیک به شش ضلعی برای ذرات فریت استرانسیم دارد.



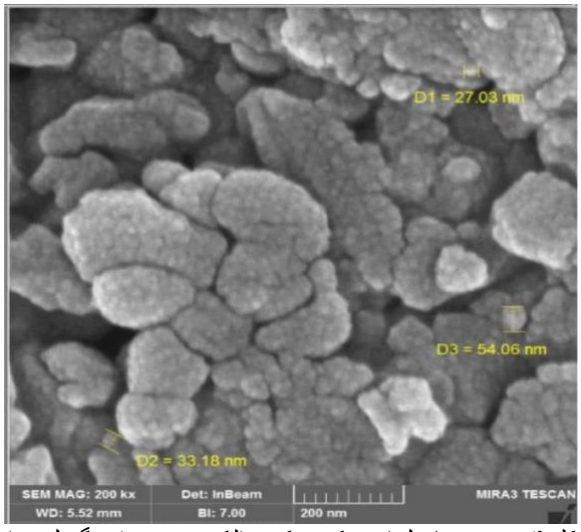
شکل ۲ تصویر میکروسکوپ الکترونی روبشی گسیل میدان مربوط به نمونه با نسبت مولی 11

با استفاده از تصویر بدست آمده از میکروسکوپ الکترونی روبشی گسیل میدان مربوط به نمونه با نسبت مولی 11، توزیع اندازه ذرات برای 120 ذره محاسبه و در شکل ۳ نشان داده شده است. برای انجام این کار از نرم افزارهای ایمج جی و اوریجین استفاده شده است. نتایج نشان از ذراتی با فراوانی بیشتر در محدوده بین 30-28 نانومتر دارد. کمترین اندازه بین ذرات در نمودار شکل ۳، برابر 18/84 نانومتر و بیش‌ترین اندازه 42/63 نانومتر است، حد وسط توزیع اندازه ذرات نیز 30/11 نانومتر است.



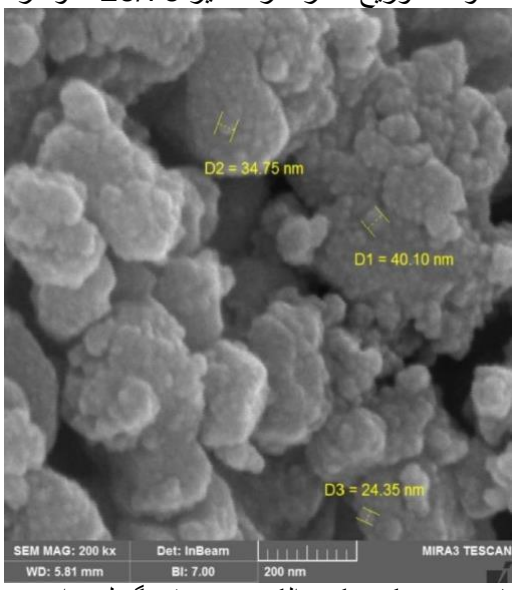
شکل ۳ نمودار توریع اندازه ذرات برای نمونه با نسبت مولی 11

شکل ۴ تصویر میکروسکوپ الکترونی روبشی گسیل میدان مربوط به نمونه بازپخت شده در دمای 900 ºC با نسبت مولی ۱۲ را نشان می‌دهد، که در مقیاس 200 نانومتر به ترتیب با بزرگنمایی ده هزار برابر قابل مشاهده است. این تصویر نیز شکل ذرات را تقریبا نزدیک به شش ضلعی برای ذرات هگزافریت استرانسیم نشان می‌دهد. با استفاده از تصویر بدست آمده از میکروسکوپ الکترونی روبشی گسیل میدان مربوط به نمونه با نسبت مولی 12، توزیع اندازه ذرات همانند قبل محاسبه شد. نتایج نشان داد که ذراتی با فراوانی بیش‌تر در محدوده بین 30-25 نانومتر وجود دارد. کمترین اندازه ذرات 12/61 نانومتر و بیش‌ترین اندازه 48/34 نانومتر است، حد وسط توزیع اندازه ذرات نیز 29/74 نانومتر است.



شکل ۴ تصویر حاصل از میکروسکوپ الکترونی روبشی گسیل میدان مربوط به نمونه با نسبت مولی ۱۲

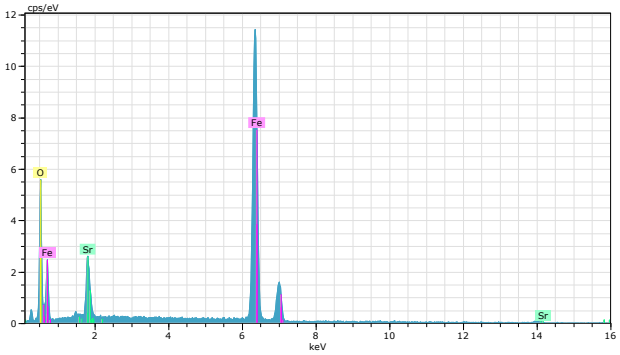
شکل ۵ تصویر میکروسکوپ الکترونی روبشی گسیل میدان مربوط به نمونه با نسبت مولی 13 می‌باشد، توزیع اندازه ذرات برای 120 ذره همانند شکل ۳ محاسبه شد. نتایج نشان از ذراتی با فراوانی بیش‌تر در محدوده بین 30-28 نانومتر دارد. کمترین اندازه ذرات 16/02 نانومتر و بیش‌ترین اندازه 37/57 نانومتر است، حد وسط توزیع اندازه ذرات نیز 28/78 نانومتر است.



شکل ۵ تصویر میکروسکوپ الکترونی روبشی گسیل میدان مربوط به نمونه با نسبت مولی 13

نتایج آنالیز طیف سنجی پراش انرژی پرتو ایکس

شکل ۶ طیف سنجی پراش انرژی پرتو ایکس از شرکت مهامکس ترکیبات پودر هگزافریت استرانسیم نوع M بازپخت شده در دمای 900 ºC را نشان می‌دهد. همانطور که در شکل دیده می‌شود، فقط عناصر تشکیل دهنده هگزافریت استرانسیوم (Sr، Fe، O) شناسایی شده‌اند.



شکل ۶ طیف پراش انرژی پرتو ایکس نمونه با نسبت مولی 12

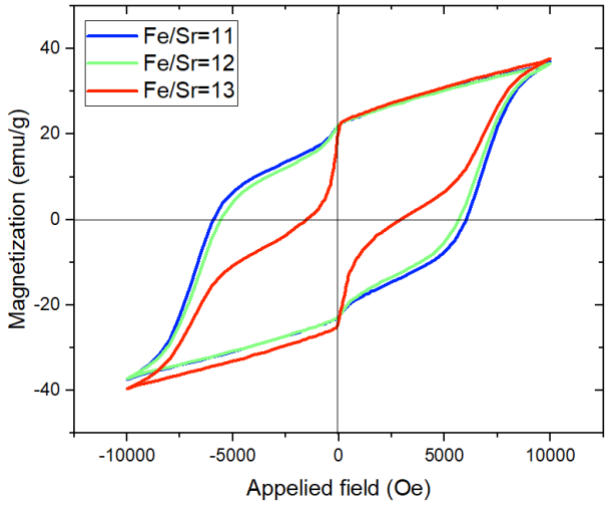
نتایج طیف سنجی پراش انرژی پرتو ایکس حاصل از نمونه با نسبت مولی ۱۲ با مقادیر نظری آبرام و همکاران [۴] مطابقت خوبی دارد که برای مقایسه در جدول ۲ داده شده است.

جدول ۲ مقایسه نتایج طیف پراش انرژی پرتو ایکس نمونه با نسبت مولی ۱۲ با مقادیر نظری

عنصر	درصد وزنی نمونه آزمایشگاهی (%)	درصد وزنی نظری (%)	خطای درصد وزنی نمونه آزمایشگاهی (%)
Fe	61/53	63/10	1/57
O	31/32	28/63	2/59
Sr	7/16	8/25	1/09

نتایج مغناطیس‌سنج نمونه ارتعاشی نانوذرات هگزافریت استرانسیم

شکل ۷ نتایج مغناطیس‌سنجی نمونه ارتعاشی گرفته شده با دستگاه ساخته شده توسط شرکت مغناطیس کویر در دانشگاه کاشان برای سه نمونه با نسبت های مولی 11، 12 و 13 را نشان می‌دهد. کم‌ترین میدان وادارندگی (H_c) مربوط به نمونه با نسبت مولی 13 و بیش‌ترین مقدار آن مربوط به نمونه با نسبت مولی 11 است. میدان وادارندگی برای سه نمونه با توجه به افزایش نسبت مولی، روندی کاهشی دارد، از 6000(Oe) در نسبت مولی 11 به 2500(Oe) در نسبت مولی 13 می‌رسد. در نسبت مولی 12 این مقدار برابر با 5500(Oe) است که در مقایسه با نسبت مولی 11 کمتر و نسبت مولی 13 بیشتر است، این روند کاهش میدان وادارندگی با کاهش نسبت مولی Fe به Sr در کار یانگ فی وانگ و همکاران [۵] نیز دیده می‌شود. مغناطش اشباع نیز روند کاهشی از نسبت مولی 11 به 12 دارد و از 36/9 (emu/g) در نسبت مولی 11 به 36/6 (emu/g) در نسبت مولی 12 می‌رسد، همچنین مغناطش باقیمانده نیز از 22/67 (emu/g) در نسبت مولی 11 به 22/63 (emu/g) در نسبت مولی 12 می‌رسد که این تغییرات مشابه کار ین پی فو و همکاران [6] است. مغناطش اشباع و مغناطش باقیمانده در نسبت مولی 13 نسبت به نسبت‌های مولی 11 و 12 افزایش می‌یابد، به طوری که مغناطش اشباع در نسبت مولی 13 برابر با 37/7 (emu/g) و مغناطش باقیمانده 23/47 (emu/g) است. برای خلاصه جدول ۳ را ببینید.



شکل ۷ منحنی‌های پسماند سه نمونه با نسبت‌های مولی متفاوت

جدول ۳ نتایج مغناطیس‌سنجی نمونه ارتعاشی سه نمونه با نسبت‌های مولی متفاوت

نسبت مولی *Fe/Sr*	میدان وادارندگی H_c (Oe)	مغناطش باقیمانده M_r (emu/g)	مغناطش اشباع M_s (emu/g)
11	6000	22/67	36/9
12	5500	22/63	36/6
13	2500	23/26	37/7

نتیجه گیری

در این مقاله، تأثیر نسبت مولی Fe/Sr بر خواص ساختاری و مغناطیسی نانوذرات $SrFr_{12}O_{19}$ سنتز شده به روش سل_ژل مورد بررسی قرار گرفته است. نتیجه گیری حاصل از تجزیه و تحلیل پراش اشعه ایکس، میکروسکوپ الکترونی روبشی گسیل میدان، طیف سنجی پراش انرژی پرتو ایکس و مغناطیس سنج نمونه ارتعاشی به شرح زیر خلاصه می‌شود:

- طیف پراش اشعه ایکس حاصل از نانوذرات $SrFe_{12}O_{19}$ پس از بازپخت در دمای ۷۵۰ °C وجود دو فاز $SrFe_{12}O_{19}$ و Fe_2O_3 را که دارای ساختارهای شش گوشه هستند را تایید می‌کند.

در نمونه با نسبت مولی 12 به 1 (آهن به استرانسم) بازپخت شده در 900 °C نیز این دو فاز وجود داشت که با کاهش نسبت مولی درصد حضور فاز هگزافریت استرانسیم و با افزایش نسبت مولی درصد حضور فاز مربوط به اکسید آهن Fe_2O_3 افزایش یافت.

- تصاویر میکروسکوپ الکترونی روبشی گسیل میدان گرفته شده از نانوذرات با نسبت‌های مولی متفاوت نشان می‌دهد که با افزایش نسبت مولی آهن به استرانسیم اندازه نانوذرات کاهش می‌یابد.

- نتایج طیف سنجی پراش انرژی پرتو ایکس وجود عناصر تشکیل دهنده هگزافریت استرانسیم را تایید نمود.
- برای نمونه بازپخت شده در ^{o}C 900 مغناطش اشباع، مغناطش باقیمانده از نسبت مولی 11 به نسبت مولی 12 روندی کاهشی داشتند و در نسبت مولی 13 افزایش یافتند، میدان وادارندگی از نسبت مولی 11 به 12 و 13 روندی کاهشی داشتند که با کار یانگ فی وانگ و همکاران [۵] در توافق خوبی است.
- نتایج مغناطیس‌سنجی نانوذرات $SrFe_{12}O_{19}$ در دمای اتاق نشان دهنده فرومغناطیس سخت بودن این نانوذرات است.

سپاسگزاري

از همکاري حوزه معاونت پژوهشی دانشگاه سیستان و بلوچستان صمیمانه تشکر مي‌کنیم.

مرجع‌ها

[1]. Al-Garalleh G. A., Bsoul I., Maswadeh Y., Al-Hwaitat E., Mahmood S. H., Effects of synthesis route on the structural and magnetic properties of $Sr_{1-x}RE_xFe_{12}O_{19}$ nanocrystalline hexaferrites, *Applied Physics A* **125** (2019), 467 https://doi.org/10.1007/s00339-019-2762-y

[2] Roohani, E., Arabi, H., Sarhaddi, R., Sudkhah, S., & Shabani, A. Effect of annealing temperature on structural and magnetic properties of strontium hexaferrite nanoparticles synthesized by sol-gel auto-combustion method. *International Journal of Modern Physics B*, Vol **29** (2015) Issue 27,

[3] Hessien, M. M., El-Bagoury, N., Mahmoud, M. H. H., Alsawat, M., Alanazi, A. K, Rashad, M. M. Implementation of La^{3+} ion substituted M-type strontium hexaferrite powders for enhancement of magnetic properties, (2020), *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*,

[4]. Abraime, B., Ait Tamerd, M., Mahmoud, A., Boschini, F., Benyoussef, A., Hamedoun, M., Xiao, Y., el Kenz, A., Mounkachi, O. Experimental and theoretical investigation of $SrFe_{12}O_{19}$ nanopowder for permanent magnet application, *Ceramics International*, Vol **43**, Issue 17, (2017) 15999–16006.

[5] Wang, Y., Li, Q., Zhang, C., Li, B. Effect of Fe/Sr mole ratios on the formation and magnetic properties of $SrFe_{12}O_{19}$ microtubules prepared by sol-gel method. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, Vol. **321**, Issue 19 (2009) 3368–3372,

[6] Fu, Y. P., Lin, C. H., Fe/Sr ratio effect on magnetic properties of strontium ferrite powders synthesized by microwave-induced combustion process. *Journal of Alloys and Compounds* Vol **386**, Issue 1–2, (2005) 222–227.

خواص ساختاری، الکترونی و مغناطیسی ترکیب $FeSb_2S_3$ با استفاده از نظریه ی تابعی چگالی

پاکیزه ، اسماعیل[۱]؛ محمدی، مهناز[۲]

[۱]دانشکده نفت و گاز گچساران، دانشگاه یاسوج، گچساران ۷۵۸۱۳-۵۶۰۰۱، ایران

[۲]گروه فیزیک، دانشکده **مکانیک**، دانشگاه صنعتی قم، ایران

چکیده

در این مقاله با استفاده از نظریه ی تابعی چگالی، خواص الکترونی، ساختاری و مغناطیسی ساختار $FeSb_2S_3$ را بدست آوردیم. محاسبات با استفاده از کد کوانتوم اسپرسو و بر مبنای امواج تخت تقویت شده ی خطی انجام گرفت. برای محاسبه جمله تبادلی در معادله شرودینگر از شبه پتانسیل بر پایه تقریب PBA-GGA استفاده کردیم. محاسبات اکترونی نشان داد که این ترکیب نیمه رسانا و دارای گاف نواری 1.22 ev می باشد. نتایج خواص مغناطیسی نشان داد که با اضافه شدن آهن به ترکیب Sb_2S_3 این ساختار دارای قطبش مغناطیسی $3\mu_B$ می شود.

واژه های کلیدی: *نظریه ی تابعی چگالی، خواص مغناطیسی، خواص الکتریکی*

Structural, electronic and magnetic properties of $FeSb_2S_3$ compounds using density functional theory

Pakizeh, Esmaeil[1]; Mohammadi, Mahnaz[2]

[1]*Faculty of Petroleum and Gas, Yasouj University, Gachsaran 75813-56001, Iran*

[2]*Department of Physics, Faculty of Science, Qom University of Technology, Qom, Iran*

Abstract

In this paper, we obtain the electronic, structural and thermoelectric properties of $FeSb_2S_3$ using density functional theory (DFT). Calculations were performed using the quantum espresso code based on plane augmented wave (PAW) method. We used pseudopotential based on the PBA-GGA approximation to calculate the exchange correlation term in Schrdinger equation. Electronic calculations showed that this compound is semiconductor and has a 1.22 ev band gap. The results of magnetic properties showed that with the addition of iron to the Sb_2S_3 compound, this structure has a magnetic polarization of $3\mu B$.

***Keywords**: DFT; magnetic properties; electric properties.*

PACS No. 70, 71, 75

مقدمه

خواص فیزیکی و شیمیایی سیستم های کالکوژنید سه تایی بیش از دو دهه مورد مطالعه قرار گرفته اند [۱،۲]. اخیرا فازهای چهارتایی این ترکیبات نیز در حال بررسی می باشند. در سال های اخیر خواص فیزیکی بسیاری از این ترکیبات به خوبی توسعه یافته اند. خواص نوری این ساختارها، بدلیل ساختار شیمیایی متنوع آنها، جالب، رو به رشد و قابل تنظیم می باشند [۳-۵].

به دلیل بزرگ بودن گشتاورهای مغناطیسی ناهمسانگرد یون های فلزات واسطه درون این ساختارها، کالکوژنیدها دارای خواص مغناطیسی مناسبی می باشند.

با این حال، مانند سایر ترکیبات کالکوژنیدها ، مطالعه طبیعت و بزرگی جفت شدن بین یونهای مغناطیسی در این ترکیبات ساده نیست.

مشکلات عمدتا ناشی از شکافتگی میدان بلوری حالت پایه و برانگیختگی گرمایی یون های آزاد آنها می باشد.

از این رو در میان این مواد، کالکوژنیدهای ترکیب شده با آهن و گادولینیوم، مواد منحصر به فردی برای آشکار کردن ماهیت برهمکنش های مغناطیسی بین یون ها می باشند.

در این مقاله خواص ساختاری، الکترونی و مغناطیسی ترکیب کالکوژنید Sb_2S_3 و $FeSb_2S_3$ با استفاده از نظریه تابعی چگالی مورد مطالعه قرار گرفته است.

۱- جزییات محاسباتی

محاسبات با استفاده از بسته شبیه سازی Quantum-Espresso و بر اساس روش امواج تخت تقویت شده خطی (PAW) انجام شده است [٦].

از تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) و فرمول بندی PBE به عنوان جمله تبادلی همبستگی استفاده گردید.

برای محاسبات الکترونی، از آرایش الکترونی و لایه های ظرفیت $4d^{10}5p^3$ برای Sb ، $3s^23p^4$ برای S و $4s^23d^6$ برای آهن بهره بردیم. از آنجایی که این مواد دارای گاف نواری نسبتا بزرگی می باشند، در این مقاله از جمله تصحیحی پتانسیل هابارد یعنی تقریب GGA+U استفاده نکردیم. هر چند که به خاطر وجود اتم آهن و الکترون های تراز d، می توان در یک بررسی دقیق و جامعتر از این تقریب نیز استفاده و نتایج مقایسه گردند.

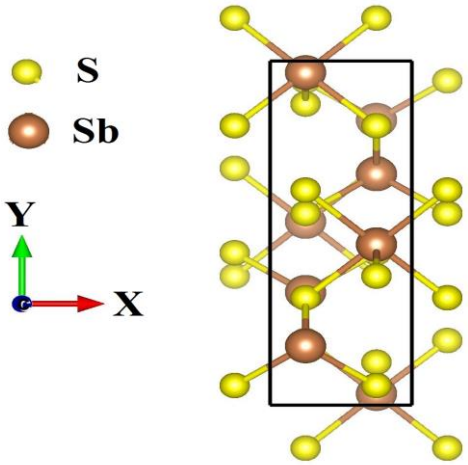
برای محاسبات خودسازگار (scf) با امواج تقویت شده ی خطی، انرژی قطع برای بسط ویژه مقادیر توابع موج را ۳۰ ریدبرگ (408 eV) انتخاب نمودیم.

انتگرال گیری در منطقه ی اول بریلوین با سلول بندی بردارهای شبکه وارون (k-points) از مرتبه 6×3×3 انجام گرفت. حد همگرایی انرژی برای محاسبات خودسازگار را از مرتبه 10^{-6} ریدبرگ قرار دادیم. برای انتگرال گیری بالای سطح فرمی از روش smearing با میزان پهن شدگی0.02 ریدربرگ استفاده نمودیم.

۲- نتایج و مباحث

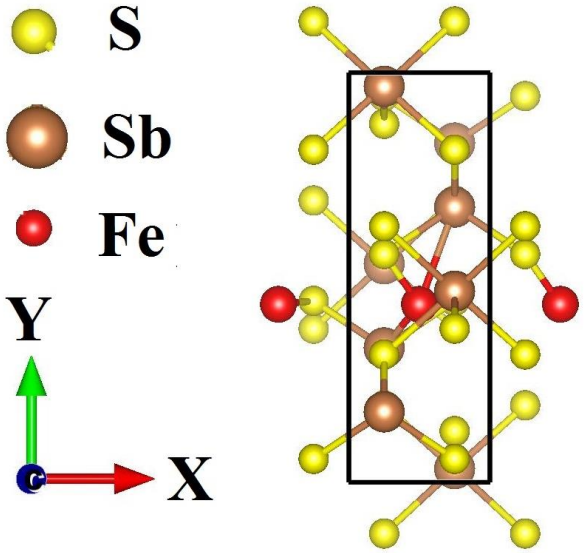
۱-۲: خواص ساختاری

ترکیب Sb_2S_3 دارای ساختار بلوری اورترومبیک می باشد. شکل ۱ ساختار بلوری این ترکیب را نشان می دهد [۷]. پس از بهینه سازی ساختار هندسی این ترکیب، ثابت های شبکه تعادلی در جهات x، y و z به ترتیب 3.87، 11.23 و 12.13 آنگستروم بدست آمد. مطابق شکل ۱، هر اتم Sb توسط ۵ اتم S محاصره شده است. ساختار هندسی این ترکیب شامل یک مثلثی ۲ سر، یک منشوری و یک هشت وجهی می باشد.



شکل۱: ساختار بلوری ترکیب Sb_2S_3.

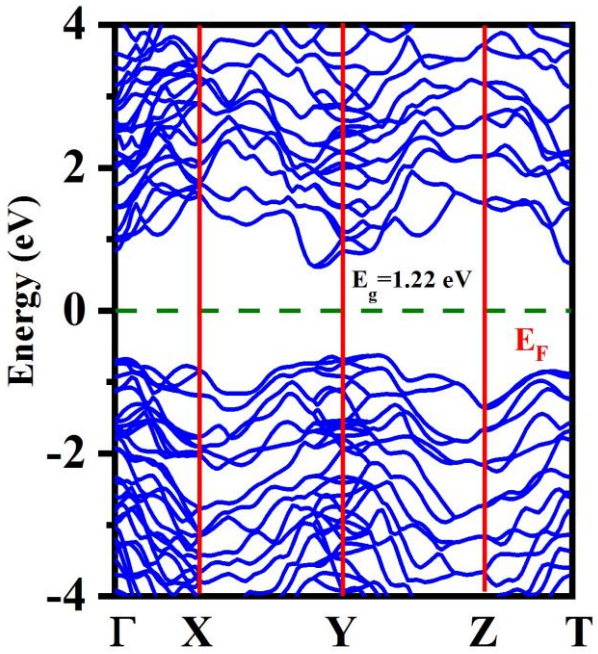
پس از اضافه شدن آهن به ترکیب Sb_2S_3، ساختار را مجددا بهینه نموده و پایدارترین حالت مطابق شکل ۲ بدست آمد. موقعیت اتم آهن در این ساختار برای جهات، x، y و z به ترتیب 2.01، 4.80 و 7.33 آنگستروم بدست آمد.



شکل۲: ساختار بلوری ترکیب $FeSb_2S_3$.

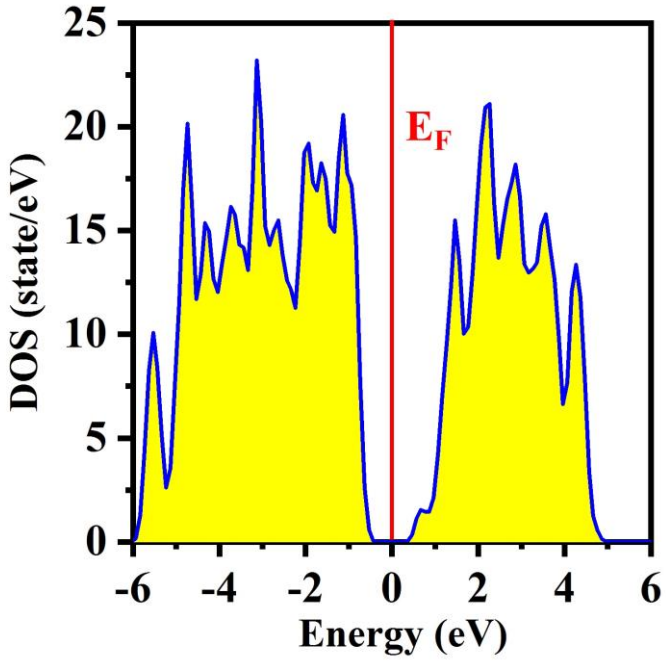
۲-۲: ساختار نواری الکترونی

برای مشخصه یابی الکترونی ترکیب Sb_2S_3، ساختار نواری الکترونی این ماده را در منطقه اول بریلوین و با استفاده از مسیر پرتقارن Γ–X-Y-Z-T ترسیم نمودیم (شکل ۳). مقیاس انرژی بر حسب الکترون ولت و انرژی نوارها نسبت به انرژی فرمی سنجیده شده است. مطابق شکل انرژی صفر بیانگر موقعیت تراز فرمی می باشد (خط چین سبز). مقدار انرژی تراز فرمی پس از محاسبات خودسازگار 5.33 eV بدست آمد. مطابق شکل، نوارهای انرژی پایین ترین لایه رسانش و بالاترین لایه ی ظرفیت بر تراز انرژی فرمی در نقطه ی Y مماس می باشند و در بقیه نقاط همدیگر را قطع نکرده اند. نتایج حاصله نشان می دهد که ترکیب Sb_2S_3 دارای گاف نواری غیرمستقیم 1.22 eV و نیمه رسانا می باشد.



شکل ۳. نمودار ساختار نواری الکترونی Sb_2S_3.

در تایید ساختار نواری الکترونی، چگالی حالات الکترونی مطابق شکل ٤ ترسیم گردید. مطابق این تصویر، در اطراف تراز فرمی یک شکافتگی به بزرگی 1.22 eV ملاحظه می گردد که وجود گاف نواری در این ساختار را تایید می کند.



شکل٤: چگالی حالات الکترونی ترکیب Sb_2S_3.

۳-۲: خواص مغناطیسی

گشتاور مغناطیسی کل، برای ساختار $FeSb_2S_3$ را با استفاده از تعداد الکترون‌های لایه ی ظرفیت و قانون Slater-Pauling (SP) بدست آوردیم [۸]. بر اساس این قانون، گشتاور مغناطیسی، مواد مغناطیسی بصورت $M_t = Z_t - 18$ محاسبه می شود، که در آن M_t گشتاور کل مغناطیسی در واحد سلول و Z_t تعداد کل الکترون های لایه ی ظرفیت می باشد. این ترکیب در دمای اتاق فرومغناطیس و در دماهای پایین تر (9 K) آنتی فرومغناطیس می باشد [۱].

با توجه به آرایش الکترونی، اتم های Fe، Sb و S به ترتیب دارای ٦، ۳ و ٤ الکترون ظرفیت هستند. طبق قانون SP گشتاور مغناطیسی کل 3 μB برای ساختار $FeSb_2S_3$ بدست آمد. گشتاور مغناطیسی کل بدست آمده توسط محاسبات مقدار صحیح را نشان می دهد و از قانون SP تبعیت می کند. این نتایج تایید می کند که ساختار $FeSb_2S_3$ ویژگی مغناطیسی را در فشار صفر GPa نشان می دهد.

سهم اصلی در گشتاور مغناطیسی کل ترکیب $FeSb_2S_3$ ناشی از اتم های آهن است. اتم های Sb و S حامل یک گشتاور مغناطیسی کوچک هستند که به دلیل القای قطبش مغناطیسی توسط اتم های آهن اطراف آنها بوجود می آید.

نتیجه گیری

در این تحقیق خواص الکترونی، ساختاری و مغناطیسی ماده $FeSb_2S_3$ در چارچوب نظریه تابعی چگالی و با استفاده از کد محاسباتی Quantum Espresso محاسبه گردید. ساختار نواری و چگالی حالات الکترونی نشان داد که این ترکیب نیمه رسانا با گاف نواری 1.22 eV می باشد. نتایج خواص مغناطیسی نشان داد که با اضافه شدن آهن به ترکیب Sb_2S_3 این ساختار دارای قطبش مغناطیسی 3 μB می شود.

سپاسگزاری

از همکاری کلاستر محاسبات سریع دانشگاه یاسوج (DHPC) صمیمانه تشکر می‌نماییم.

مرجع‌ها

[1] G. B. Jin, E. S. Choi and T. E. Albrecht-Schmitt, Journal of Solid State Chemistry 182 (**5**), 1075-1081 (2009).

[2] D. L. Gray, B. A. Rodriguez, G. H. Chan, R. P. Van Duyne and J. A. Ibers, Journal of Solid State Chemistry 180 (**5**), 1527-1532 (2007).

[3] M. A. Ali and M. W. Qureshi, Vacuum **201**, 111072 (2022).

[4] M. U. Sohaib, K. Abid, N. A. Noor, M. A. Khan, R. Neffati, S. H. Abdel-Hafez and E. E. Hussein, Journal of Materials Research and Technology **15**, 4683-4693 (2021).

[5] T. Mathew, S. Rahul K, C. P. Sujith and V. Mathew, Solid State Sciences **113**, 106456 (2021).

[6] P. Giannozzi, et al., "Quantum Espresso: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials"; J. Phys. Cond. Mat **21**, (2009) 395502.

[7] https://materialsproject.org/materials/mp-2809/

[8] I. Galanakis, P. H. Dederichs, N. Papanikolaou, Phys. Rev. B 66 (2002) 134428.

مقایسه ویژگی‌های مغناطیسی نانوذرات،لایه نازک و نمونه حجمی $CoFe_2O_4$

سیار، سجاد؛ اصلی بیکی، باقر؛ عسگری، اصغر

دانشکده فیزیک دانشگاه تبریز ، تبریز

چکیده

در این تحقیق، برای بررسی تاثیر ابعاد و اندازه بر روی ویژگی های ساختاری و مغناطیسی فریت کبالت، سه شکل از این ماده شامل نانوذرات (به دو روش همرسوبی و تجزیه گرمایی)، لایه نازک (به روش لایه نشانی چرخشی) و نمونه حجمی (به روش حالت جامد) سنتز گردید. سپس با استفاده از دستگاه پراش پرتو ایکس، میکروسکوپ الکترونی روبشی گسیل میدان و مغناطش سنج نمونه ارتعاشی ویژگی‌های ساختاری و مغناطیسی مورد مطالعه و مقایسه قرار گرفت.

واژه های کلیدی: *فریت کبالت، نانوذرات، نمونه حجمی، لایه نازک، مغناطش.*

Comparison of magnetic properties of nanoparticles, thin film and Bulk sample of $CoFe_2O_4$

Sayyar, Sajjad; Aslibeiki, Bagher; Asgari, Asghar

Department of Physics, University of Tabriz, Tabriz

Abstract

In this study, to investigate the effect of dimension and size on the structural and magnetic properties of cobalt ferrite, three different samples including nanoparticles (by co-precipitation and thermal decomposition methods), thin film (by spin coating method) and a bulk sample (by solid state method) were synthesized. Then, their structural and magnetic properties were studied and compared using X-ray diffractometer, field emission electron microscope and vibrating sample magnetometer.

***Keywords**: Cobalt ferrite, Nanoparticles, Bulk sample, Thin Film, Magnetization*

PACS No. 61- 75-81

مقدمه

فریتهای اسپینلی گروهی از مواد مغناطیسی با فرمول شیمیایی MFe_2O_4 هستند که اکسید آهن (III) جز اصلی آنها است. فریت کبالت ($CoFe_2O_4$) یک فریت سخت با ساختار اسپینلی مکعبی معکوس است و خصوصیاتی نظیر وادارندگی و ناهمسانگردی زیاد، مغناطش اشباع متوسط و پایداری شیمیایی و فیزیکی را دارد. از جمله کاربردهای ماده فوق می‌توان به برنامه های ضبط رسانه، ذخیره سازی داده ها، حسگرها، صنعت خودرو، دستگاه های مایکروویو اشاره کرد. ویژگی های مغناطیسی این ماده به شدت وابسته به اندازه بلورکها و شکل نمونه است بطوریکه با تغییر این کمیت ها، می توان ویژگی ها را طوری کنترل کرد تا به هدف کاربردی مورد نظر دست یافت. با توجه به اهمیت این موضوع، ماده مذکور در سه حالت نانوذرات، لایه نازک و نمونه حجمی تهیه گردید و مطالعات مغناطیسی و ساختاری بر روی آن صورت گرفت.

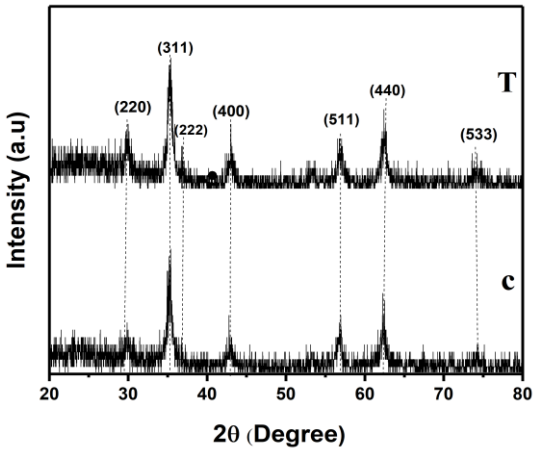
تهیه نمونه ها

نانوذرات به دو روش همرسوبی و تجزیه گرمایی تهیه شدند. در روش همرسوبی، از $FeCl_3.6H_2O$ ، $CoCl_2.4H_2O$ و NaOH به عنوان عامل رسوب دهنده استفاده شد. پس از مشخص کردن مقادیر استوکیومتری، مخلوط نمک های فلزی و سدیم هیدروکسید

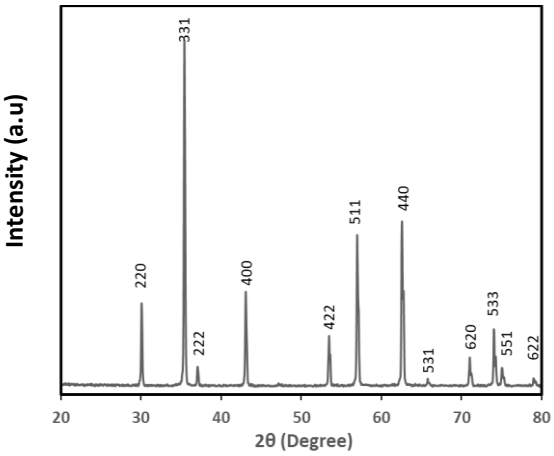
را به صورت جداگانه در آب دی یونیزه حل کردیم. سپس دمای محلول نمک های فلزی تا ۸۰ درجه سانتی گراد بالا برده شد ومحلول سدیم هیدروکسید را به آن اضافه گردید و عمل هم زدن ۳۰ دقیقه در دمای ثابت ۸۰ در جه سانتی گراد ادامه یافت. سپس با استفاده از یک آهنربای قوی، رسوبات را با آب دی یونیزه شست و شو دادیم و رسوبات به دست آمده در دمای اتاق، خشک شد. برای تهیه نانوذرات به روش تجزیه گرمایی، از $Co(No_3)_2.6H_2O$، $Fe(No_3)_3.9H_2O$ و $C_6H_8O_7$ استفاده شد. پس از مشخص کردن مقادیر معین، نیترات کبالت و نیترات آهن و اسید سیتریک به صورت یکنواخت، مخلوط گردید. سپس مخلوط به مدت یک ساعت در دمای ۵۰۰ درجه سانتی گراد در کوره قرار داده شد. برای تهیه نمونه حجمی فریت کبالت، از Co_3O_4 و Fe_3O_4 استفاده شده است. پس از مشخص کردن مقادیر استوکیومتری، مواد شیمیایی فوق را مخلوط کرده وسپس مخلوط حاصل به صورت قرص درآورده شد و به مدت ۲٤ ساعت در دمای ۱۳۵۰ درجه سانتی گراد پخت شد. برای سنتز لایه نازک فریت کبالت بر بستر سیلیکون، از نانوذرات فریت کبالت استفاده شد. تمامی مراحل تهیه نانوذرات، مطابق روش همرسوبی انجام شد ولی در انتهای سنتز، به جای خشک کردن، نانوذرات در محلول پلی‌وینیل‌پرولیدون در اتانول با غلظت ۱۰ mg/ml تهیه شده بود، حل گردید. در انتها، از دستگاه لایه نشانی چرخشی با سرعت ۱۰۰۰ rpm و به مدت ۲۰s استفاده شد و لایه نازک تهیه گردید.

الگوی پراش پرتو ایکس

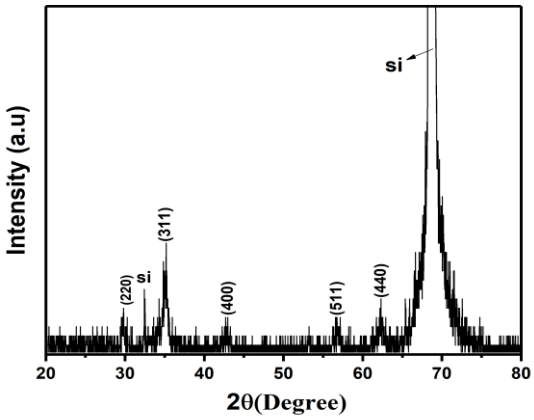
شکل ۱ الگوی پراش پرتو ایکس نمونه‌های نانوذرات به روش‌های همرسوبی و تجزیه گرمایی، شکل۲ الگوی پراش پرتو ایکس نمونه حجمی و شکل ۳ الگوی پراش حاصل از لایه نازک را نشان می‌دهد که همگی در محدوده ۸۰-۲۰ اندازه‌گیری شده‌اند. با بررسی‌هایی که از طریق نرم‌افزار X′pert high score صورت گرفت، خالص بودن نمونه‌ها و عدم وجود قله اضافی اثبات گردید. همچنین در جدول شماره ۱، اندازه بلورکها ، به منظور بررسی ویژگی‌های مغناطیسی، نوشته شده است. شکل٤ تصویر FE-SEM مربوط به نمونه حجمی را نشان می‌دهد.



شکل۱ : الگوی پراش پرتو ایکس نانوذرات همرسوبی(C) و تجزیه گرمایی (T) فریت کبالت.



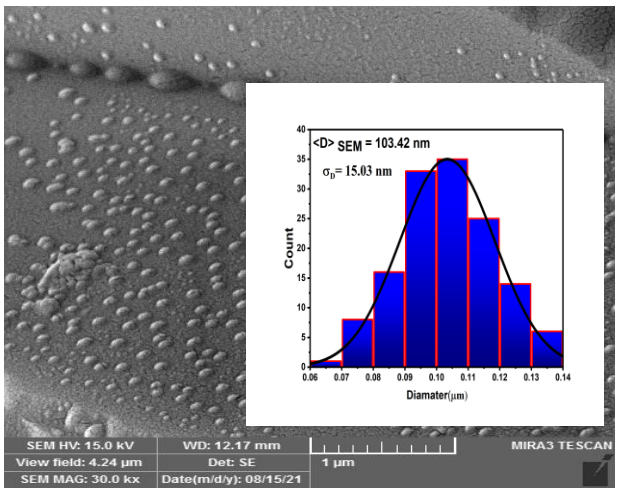
شکل۲ : الگوی حاصل از پراش پرتو ایکس مربوط به نمونه حجمی فریت کبالت.



شکل۳ : الگوی پراش پرتو ایکس لایه نازک فریت کبالت بر بستر سیلیکون

جدول ۱: اندازه بلورک نمونه‌های مختلف تهیه شده.

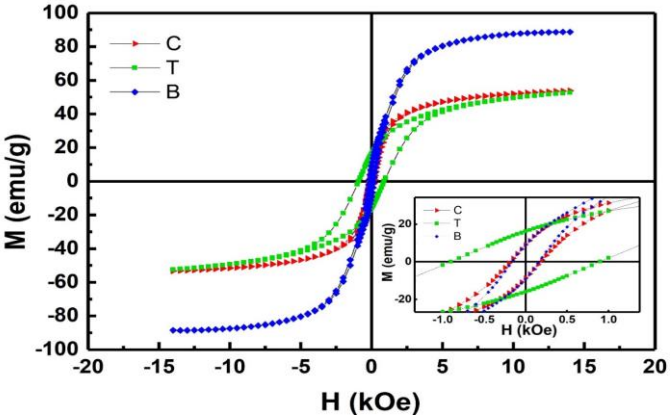
نام نمونه	نانوذرات همرسوبی	نانوذرات تجزیه گرمایی	لایه نازک	نمونه حجمی (SEM)
<D> (nm)	۱۵/۰۴	۱۴/۳۴	۱۸/۵۱	۱۰۳/۴۲



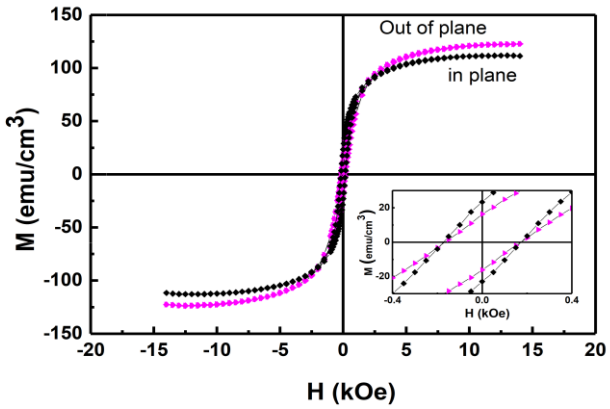
شکل٤ : تصویر میکروسکوپ الکترونی روبشی گسیل میدانی (FE-SEM) از نمونه حجمی فریت کبالت به همراه نمودار توزیع اندازه بلورکها.

بررسی ویژگی‌های مغناطیسی

برای بررسی ویژگی‌های مغناطیسی از دستگاه مغناطش سنج نمونه ارتعاشی (VSM) با حداکثر شدت میدان ١٤ kOe استفاده شد. مغناطش نمونه‌ها بر حسب میدان اعمالی توسط دستگاه VSM در دمای اتاق اندازه‌گیری شده و منحنی پسماند مغناطیسی در شکل ٥ و ٦ رسم شده است. از طریق بررسی منحنی پسماند می‌توان پارامترهای مغناطیسی مختلفی را اندازه‌گیری کرد که ارقام مربوط به هر یک از آن‌ها، در جدول ۲ گزارش شده است.



شکل٥ : حلقه پسماند برای نانوذرات همرسوبی (C)، نانوذرات تجزیه گرمایی (T) و نمونه حجمی (B) در دمای اتاق.



شکل٦ : حلقه پسماند برای نمونه لایه نازک فریت کبالت در دمای اتاق.

جدول۲ : پارامترهای مغناطیسی اندازه‌گیری شده از منحنی پسماند توسط برای نمونه‌های مختلف.

نام نمونه	نانوذرات همرسوبی	نانوذرات تجزیه گرمایی	نمونه حجمی	لایه نازک
M_S	۵۳/۸۱ (emu/g)	۵۲/۷۱ (emu/g)	۸۸/۷۷ (emu/g)	۱۲۲/۷۰ (emu/cm^3)
M_R	۹/۱٤ (emu/g)	۱٦/۱۸ (emu/g)	۹/۱۱ (emu/g)	۲۳/٤۷ (emu/cm^3)
H_C	۱۷۹/۹۸ (Oe)	۸۹۳/۹۹ (Oe)	۱٦۱/۹۱ (Oe)	۱۷۳/۵۳ (Oe)

منحنی پسماند تمامی نمونه‌ها بر سخت بودن فریت کبالت تاکید دارند. از جمله عوامل اصلی تغییر مغناطش اشباع در سیستم فریتهای اسپینلی می‌توان به نحوه توزیع کاتیونها در جایگاههای A و B، اندازه نانوذرات و بی‌نظمی‌های اسپینی پوسته در ابعاد کوچک (نانوذرات) اشاره کرد[۲]. طبق جدول ۲، در مقایسه مغناطش اشباع نمونه حجمی با نانوذرات و لایه نازک، مشاهده می‌شود که اختلاف زیادی وجود دارد. دلیل بیشتر بودن مغناطش اشباع در حالت حجمی این است که با کاهش اندازه بلورکها (تا مقیاس نانو) و ایجاد اتمهای سطحی بیشتر، خواص نانوذرات به ویژه خواص مغناطیسی دچار تغییر می‌شود. با کاهش اندازه بلورکها، سهم لایه مرده پارامغناطیس سطحی (همان لایه بی‌نظم روی سطح نانوذرات که حاصل از پیوندهای شکسته روی سطح می‌باشد) در مغناطش کل، افزایش می‌یابد و در نتیجه باعث کاهش

مقدار آن نسبت به حالت حجمی می‌شود. لایه مرده از رابطه زیر به دست می‌آید [۳]:

$$M_s = M_s(b)\,[1-6t/d] \qquad (۱)$$

که در آن، Ms مغناطش اشباع، Ms (b) مغناطش اشباع در حالت حجمی، d قطر ذرات و t ضخامت لایه مرده است. با توجه به مقدار مغناطش اشباع در حالت حجمی و اندازه بلورکها، ضخامت لایه مرده مطابق جدول ۳ است. باتوجه به جدول ۳، ضخامت لایه مرده برای نانوذرات همرسوبی و تجزیه گرمایی تقریبا نزدیک به یکدیگر هستند و به همین علت مغناطش اشباع یکسانی دارند. این در حالی است که ضخامت لایه مرده برای لایه نازک تقریبا ۲/۳۱ برابر نانو ذرات تجزیه گرمایی و نسبت مغناطش اشباع نانوذرات تجزیه گرمایی به مغناطش اشباع لایه نازک هم برابر ۲/۲۸ است که این دو عدد بسیار نزدیک به یکدیگرهستند. به طور کلی با افزایش ابعاد و نزدیک شدن به حالت حجمی، اهمیت اثر اندازه بلورکها و لایه مرده کمتر می‌شود و تغییر نحوه توزیع کاتیون‌های فلزی در جایگاههای ساختار اسپینلی تأثیر بیشتری در مغناطش اشباع می‌گذارند. از دیگر موارد تاثیرگذار در مغناطش اشباع نانوذرات و لایه نازک فریت کبالت می‌توان به این مورد اشاره کرد که به دلیل ابعاد کوچک (نانو مقیاس)، بی‌نظمی اسپینهای سطحی (ناشی از جای خالی اکسیژن و پیوندهای شکسته آهن- اکسیژن یا کبالت - اکسیژن در سطح)، و ناهمسانگردی سطحی باعث شده است که مغناطش اشباع کمتری داشته باشند.همچنین با مقایسه مقادیر وادارندگی، می‌توان متوجه شد که این پارامتر مغناطیسی در نانوذرات تجزیه گرمایی به مراتب بیشتر از نانوذرات همرسوبی است که برای علت آن، می‌توان دو دلیل آورد. اولین دلیل به بازپخت نمونه تجزیه گرمایی در دمای ۵۰۰ درجه سانتی‌گراد برمی‌گردد. یعنی با بازپخت در دماهای بالاتر (تا حدود ۷۰۰ درجه سانتی گراد) می‌توان به مقدار وادارندگی بالاتری دست پیدا کرد که این مورد با منابع مطابقت دارد[٤]. دومین دلیل افزایش ثابت ناهمسانگردی مؤثر است که می‌تواند مقدار وادارندگی را افزایش دهد. ناهمسانگردی موثر از دو قسمت ناهمسانگردی حجمی و ناهمسانگردی سطحی تشکیل می‌شود که در نانو ذرات، ناهمسانگردی سطحی، بسیار تاثیر گذارتر است. البته ذکر این نکته بسیار ضروری است که تاثیر اندازه بلورکها در میدان وادارندگی، بدین گونه است که ابتدا با افزایش قطر ذرات، میدان وادارندگی افزایش پیدا می‌کند و بعد از رسیدن به یک مقدار مشخص، کاهش می‌یابد. بنابراین نمونه حجمی که در دمای بالا تهیه شده، به دلیل اندازه بلورکها (۱۰۳ nm) دارای وادارندگی پایینی به نسبت نانوذرات تجزیه گرمایی است. در شکل شماره ٦، منحنی پسماند لایه نازک به دو صورت داخل و خارج بر لایه نازک نشان داده شده است که دلیل شباهت این دو منحنی، به تشکیل شدن لایه از نانوذرات برمی‌گردد که نشان می‌دهد مغناطش جهت‌گیری خاصی را ندارد.

جدول ۳: ضخامت لایه مرده برای نمونه‌های نانوذرات و لایه نازک.

نام نمونه	نانوذرات همرسوبی	نانوذرات تجزیه گرمایی	لایه نازک
t (nm)	۰/۹۸	۰/۹۷	۲/۲۷

نتیجه گیری

ویژگی‌های مغناطیسی نانوذرات با دستگاه مغناطش سنج نمونه ارتعاشی مورد ارزیابی قرار گرفت و منحنی پسماند تمامی نمونه‌ها، خاصیت فرومغناطیس فریت کبالت را تایید می‌کنند. مغناطش اشباع برای نمونه حجمی بیشتر از نانوذرات و لایه نازک است که دلیل آن، تشکیل لایه مرده بر سطح نانوذرات و لایه نازک و بی نظمی اسپین‌های سطحی است. بیشترین مقدار وادارندگی در نانوذرات تجزیه گرمایی به دست آمد. وادارندگی سایر نمونه‌ها کمتر از مقدار وادارندگی نانوذرات تجزیه گرمایی است.

مرجع‌ها

[۱] G. Bulaia, O. Rusub, M. M. Cazacub, F. Tudorached, et al, "Structural magnetic and humidity sensing properties of rare earth doped cobalt ferrite thin film synthesized by pulsed laser deposition",*Journal of Ovonic Research*, **14** (2018) 119-128.

[۲] De. Sharma, N. Khare, "Tailoring the optical bandgap and magnetization of cobalt ferrite thin films through controlled zinc doping", *AIP ADVANCES*, **6**, (2016) 085005.

[۳] A.Franco , F. Silva, "Effect of the Zn content in the magnetic properties of $Co_{1-x}Zn_xFe_2O_4$ mixed ferrites," *Journal of Applied Physics*, ***113***, No. 17, (2013) B513.

[٤] R.S. Yadav, et al, "Structural, cation distribution, and magnetic properties of $CoFe_2O_4$ spinel ferrite nanoparticles synthesized using a starch-assisted sol-gel auto-combustion method", *J. Supercond. Nov. Magn.* **28**, (2015) 1851–1861.

ساخت و مطالعه خواص ساختاری و مورفولوژی سطحی نمونه بالک مولیبدینیت آلاییده شده با منگنز

پاک مهر ، مهدی[1] ؛ دهقانی، پرنیان[1]؛ وفایی، مینا[1]

[1]دانشکده فیزیک دانشگاه شیراز ، پردیس ارم ، شیراز

چکیده

ساخت نمونه نیمرسانای آلاییده شده مغناطیسی جهت ساخت قطعات الکترونیکی جدید و استفاده از درجه آزادی اسپین الکترون ها در سالیان اخیر مورد تحقیق بوده است. ساخت چنین نیمرساناهایی معمولا با اضافه نمودن منگنز (Mn) به عنوان ناخالصی یا اتم آلاینده مغناطیسی به نمیرسانای غیر مغناطیسی مانندگالیم آرسناید (GaAs) میسر می‌شود که دارای دمای کوری در حد دمای اتاق می‌باشند. در سالیان اخیر مولیبدینیت (MoS_2) به عنوان یک نیمرسانای جدید که می‌تواند جایگزینی برای سیلیکون باشد مورد توجه بوده است. در این پژوهش سعی بر ساخت نمونه کپه مولیبدینیت آلاییده شده مغناطیسی با اضافه نمودن نمک منگنز به عتوان آلاینده مغناطیسی به پودر مولیبدینیت با استفاده از روش اسپارک پلاسما سینترینگ می‌باشد. بررسی خواص ساختاری و مورفولوژی سطحی نمونه نشان از تهیه نمونه با مشخصات فیزیکی قابل قبول در گام اول می‌باشد.

واژه های کلیدی: *نیمرسانای آلاییده مغناطیسی، مولیبدینیت، سینترینگ پلاسمایی*

Fabrication with structural and surface morphology Study of Manganese doped bulk Molybdenite

Pakmehr, Mehdi[1]; Dehghani, Parnian[1]; Vafaee, Mina[1]

[1] Department of Physics (Eram Campus), Shiraz University, Shiraz 71496

Abstract

Making new magnetically diluted semiconductor is crucial for fabricating new electronic devices using spin degree of freedom of charge carriers. Making such semiconductors have been realized using ordinary semiconductors like GaAs with Manganese (Mn) as a dopant having Curie temperature around the room temperature. Molybdenite (MoS_2) as a novel semiconducting material which potential of substituting Silicon have been topic of interest recently within research communities. In this manuscript possibility of making bulk magnetically diluted Molybdenite investigated by adding Manganese salt into the Molybdenite powder using Spark plasma sintering technique. Initial study of the sintered sample using SEM surface and PXRD structural analysis confirm the acceptable quality of it.

PACS No. 70

مقدمه

ساخت نمونه نیمرسانای آلاییده شده مغناطیسی جهت ساخت قطعات الکترونیکی جدید با سرعت و کارایی بالاتر با استفاده از اسپین الکترون‌ها در سالیان اخیر مورد تحقیق و توجه محققان بوده است. ساخت چنین نیمرساناهایی معمولا با اضافه نمودن منگنز (Mn) به عنوان آلاینده مغناطیسی به مواد نیمرسانای غیر

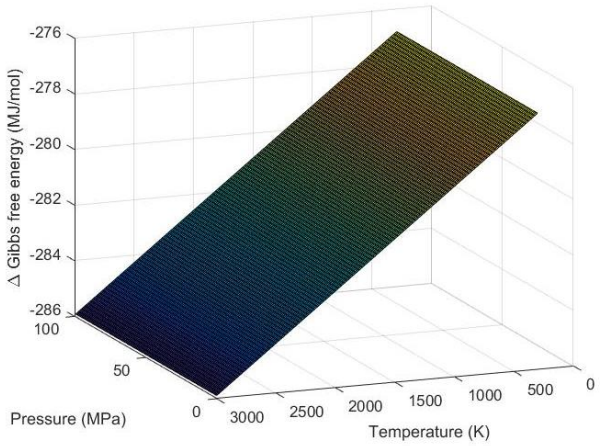
مغناطیسی میسور می‌شود که دمای کوری آنها معولا در حد دمای اتاق می‌باشند[1]. دی‌سولفید مولیبدن (MoS_2) با نام معدنی مولیبدینیت از دیرباز شناخته شده و مورد استفاده بشر بوده است. به علت رنگ سیاه گاها دی‌سولفیدمولیبدن با دی‌سولفید-سرب(PbS_2) اشتباه گرفته و برای تهیه رنگ سیاه جوهر به کار برده شده است[2]. مهمترین کاربرد این ماده علاوه بر روانکار خشک در بازه گسترده دمایی 185°- تا 350° سانتیگراد در سالیان اخیر به عنوان یک نیمرسانای جدید با گاف انرژی مناسب (1.3 الکترون ولت در مورفولوژی کپه) و ضریب دی الکتریک بالا می باشد. به دلایل فوق این ماده کاندیدای مناسبی برای استفاده در صنعت (اپتو)الکترونیک است[3]. در این پژوهش بعد از اضافه نمودن نمک منگنز (به عنوان آلاینده مغناطیسی) به پودر مولیبدینیت، سعی بر ساخت نمونه کپه مولیبدینیت آلاییده شده مغناطیسی با استفاده از روش اسپارک پلاسما سینترینگ بوده است. پس از ساخت نمونه کپه خواص ساختاری و مورفولوژی آن در گام نخست مورد بررسی قرار گرفته است.

روش ساخت و بررسی نمونه

به علت دمای ذوب بسیار بالای مولیبدینیت (2300° C) جهت ساخت نمونه کپه مولیبدینیت از تکنیک پخت جرقه پلاسمایی (اسپارک پلاسما سینترینگ) که مختص مواد دیرذوب سرامیکی می‌باشد استفاده شده است[4]. بدین منظور ابتدا با اضافه نمودن پودر نمک منگنز (٪14) به مولیبدینیت (٪86) با خلوص بالا و امتزاج آنها با یکدیگر، از ترکیب فوق به میزان مکفی در قالب گرافیتی ریخته می‌شود. پس از جایگذاری قالب در دستگاه پخت جرقه پلاسمایی، نمونه در خلا نسبتا بالا (10^{-3} تور) تحت فشار هیدروستاتیک (80 مگا پاسکال) قرار می‌گیرد. در حین فرایند پخت، طی چند دقیقه به نمونه درون قالب پروفایل جریان بالا مناسب، جهت تغییر مورفولوژی به صورت کپه اعمال می‌گردد[4,5]. نمونه حاصل از این فرایند به صورت قرصی شکل، به قطر 2 سانتی‌متر و ضخامت 2 میلی‌متر مطابق شکل 1 می‌باشد.

شکل 1: تصویر نمونه قرصی شکل سینتر شده (راست)، تصویر نمونه بعد از سابیده شدن سطح (چپ)

کنترل پروفایل دما و فشار نمونه به نحو مطلوب (تابعیت انرژی گیبس نمونه به این کمیات وابسته است) در ساخت نمونه مناسب به صورت چندکریستالی تعیین کننده می‌باشد. بدین منظور پروفایل انرژی گیبس نمونه آلاییده شده با نمک منگنز با استفاده از روابط مربوطه که در مرجع 6 قید شده‌اند محاسبه گردیده است. در این راستا نمونه مولیبدینیت آلاییده شده با نمک منگنز را به عنوان یک آلیاژ شامل دو ترکیب در نظر گرفته شده است. بنابراین انرژی گیبس شیمیایی نمونه حاصله، به کسر مولی مولیبدینیت و نمک منگنز در ترکیب نهایی بستگی دارد. جمله دیگر انرژی گیبس ناشی از مغناطش ناخالصی نمک منگنز است و به کسر مولی، دمای کوری و میزان مغناطش نمک منگز وابسته است. تابعیت انرژی گیبس نمونه آلاییده شده بر حسب دما و فشار (در بازه تغییرات آنها) در شکل 2 نشان داده شده است.



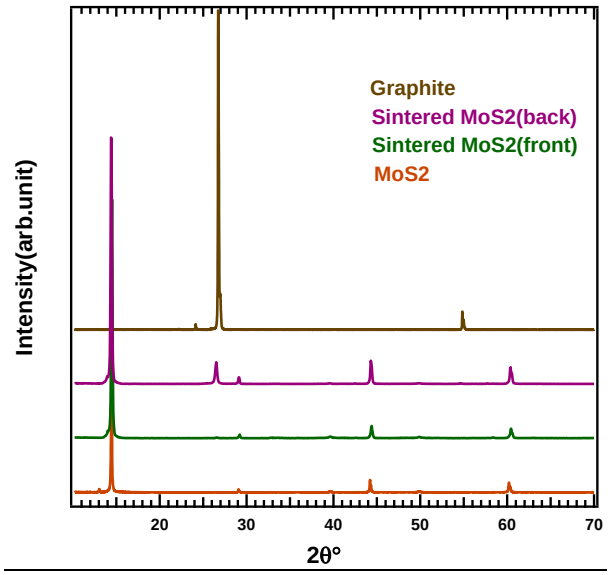
شکل 2: پروفایل انرژی گیبس نمونه مولیبدینیت آلاییده شده مغناطیسی

پروفایل انرژی گیبس نشان می‌دهد که سهم قسمت مغناطیسی با افزایش دما افزایش پیدا می‌نماید، در حالی که سهم قسمت شیمیایی با افزایش دما کاهش می‌یابد. از آنجایی که سهم قسمت

مغناطیسی در انرژی گیبس نسبت به قسمت شیمیایی کوچکتر است در نتیجه انرژی گیبس نمونه با افزایش دما کاهش یافته و منفی‌تر می‌گردد.

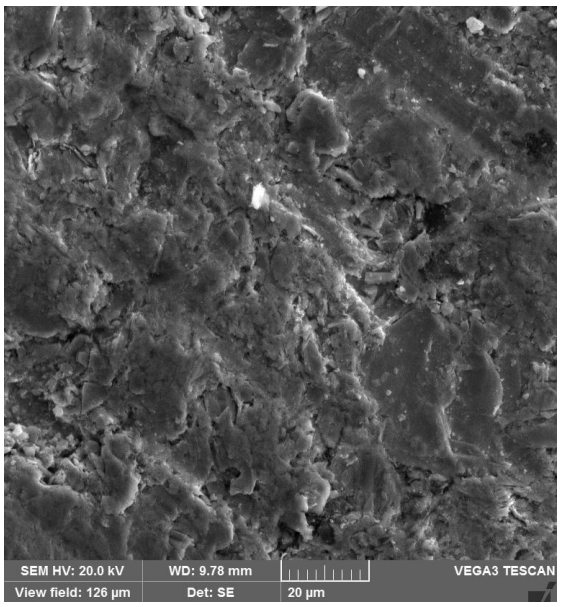
جهت بررسی کیفیت نمونه بعد از سابش مکانیکی یک سطح آن، با استفاده از روش های آنالیز ساختاری (PXRD) و میکروسکوپ الکترونی روبشی (SEM) به مطالعه خواص فیزیکی نمونه پرداخته شده است.

کیفیت نمونه تهیه شده از نظر استحکام مکانیکی به گونه‌ای است که در حین عمل سابش دچار شکستگی نمی‌شود. نتایج آنالیز ساختاری موید پدیده دیفیوژن یا پخش کربن/گرافیت قالب در سطح خارجی نمونه قرص در حین فرایند پخت (به علت دمای بالا) می‌باشد که بعد از عمل سابش مکانیکی اثری از آن در طیف پراش اشعه ایکس نمونه دیده نمی‌شود. کیفیت و مکان قله‌های پراش منطبق بر نمونه پودر مولیبدینیت (در صورت کنترل مناسب پروفایل دما و فشار در طی فرایند پخت) می‌باشد. اضافه نمودن نمک منگنز تا حدودی باعث تغییر شکل در قله مشخصه طرح پراش ($2\Theta=8$) مولیبدینیت می‌گردد و تغییری در ثابت شبکه ($c/a=3.89$,$a=3.16$ Å) (جابجایی قله‌های طرح پراش) با توجه به میزان اندک آلایش ایجاد نمی‌شود. طرح پراش نمونه های مختلف در شکل 3 نمایش داده شده‌اند.



شکل 3: نمودار طرح پراش اشعه ایکس نمونه های مختلف مولیبدینیت

علاوه بر این با استفاده از میکروسکوپ الکترونی روبشی (SEM) به مطالعه خواص مورفولوژی سطحی و کیفیت ساخت نمونه از نظر تخلخل فیزیکی آن پرداخته شده است. همانطور که از تصویر شکل 4 برمی‌آید اعمال فشار در حین فرایند پخت به میزان مکفی علاوه بر جلوگیری از وجود ترک نمونه مانع از آمورف شدن نمونه حاصل می گردد.



شکل 4: تصویر از سطح نمونه بعد از سابش

نتیجه گیری

در این کار تحقیقاتی بعد از تهیه نمونه بالک مولیبدینیت آلاییده شده مغناطیسی با اضافه نمودن نمک منگنز، به مطالعه خواص فیزیکی نمونه قرصی شکل با استفاده از روش انالیز ساختاری و سطحی آن پرداخته شده است. نتایج این آزمایش‌های نشانگر تهیه نمونه چند کریستالی با کیفیت و خواص مکانیکی مناسب در گام اول می‌باشد. همچنین پروفایل انرژی آزاد گیبس نمونه مولیبدینیت آلاییده شده مغناطیسی در حین فرایند پخت محاسبه گردیده است که با اضافه شدن نمک حالت پایدارتری دارد.

سپاسگزاری

نویسندگان از همکاری و مساعدت سرکار خانم فاموری کمال تشکر و امتنان را دارند.

مرجع‌ها

[1] J. K. Furdyna; "Diluted magnetic semiconductors"; *Applied Physics letters* **64**, No. 4 (1988) 40-46.

[2] A. R. Lansdown; "*Molybdenum Disulphide lubrication*"; 1th edition, Elsevier. (1999) chpts 1,3,4

[3] K. F. Mak, C. Lee, J. Hone, J. Shan and T. F. Heinz; "Atomically thin MoS_2: A New direct-gap semiconductor"; *Phys. Rev. Lett.* **105**, (2010) 136805

[4] M. Tokita; "Progress of Spark plasma sintering (SPS) method, systems, ceramics applications and industrialization"; *Ceramics* **4**, (2021) 160-198.

[5] پاک مهر، مهدی، فهندژ، مارال؛ «ساخت و بررسی مقدماتی نمونه بالک مولیبدینیت»؛ *مقاله نامه نهمین کنفرانس ملی خلا ایران*، پاییز 1398، صفحه 47 تا 50.

[6] X. J. Liu, Y. M. Fang, C. P. Wang, D. L. Peng; "Effect of magnetic field on thermodynamic properties and phase transition of Fe-based alloys"; *Journal of alloys and compounds*. **459**, (2008) 169-173

اثر جایگزینی لایه های اتمی MnO_2 با FeO_2 در ابرشبکه $YMnO_3/YFeO_3$ نسبت به حالت بلوری ترکیب $YMnO_3$ و $YFeO_3$

حمید لطیف المیاحی، آلا[۱]؛ اعظمی، آزاده[۱*]

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

چکیده

در این تحقیق ترکیب بلوری $YMnO_3$ و $YFeO_3$ و ابرشبکه $YMnO_3/YFeO_3$ با استفاده از روش شبه‌پتانسیل، در چارچوب نظریهٔ تابعی چگالی و با استفاده از کد محاسباتی کوانتوم اسپرسو ساخته شد. با استفاده از تقریب LDA+U خواص الکتریکی و مغناطیسی هر دو ترکیب بلوری و ابرشبکه ساخته شده بررسی گردید. پارامتر هابارد استفاده شده در تقریب LDA+U از روش پاسخ خطی بر روی اتم Mn و Fe به ترتیب ۳/۵ eV و ٤/٦١ eV بدست آمد که در تطابق بسیار خوبی با مقادیر گزارش شده است. نتایج محاسبات چگالی حالت و ساختار نواری هر دو ترکیب بلوری نشان داد که هر دو ترکیب فرومغناطیس و از نظر الکتریکی نیمه‌فلز هستند. پس از ساخت ابرشبکه $YMnO_3/YFeO_3$ وجود ساختار الکتریکی نیم‌فلزی و پیکربندی فرومغناطیس نیز دیده شد. در فصل مشترک لایه‌ها وجود ٦ الکترون در اربیتال d آهن و ٥ الکترون در اربیتال d منگنز و با استفاده از مدل تبادل دوگانه می توان منشأ وجود پیکربندی مغناطیسی را در ابرشبکه مذکور تأیید کرد.

The effect of replacing MnO_2 atomic layers with FeO_2 in the $YMnO_3$ / $YFeO_3$ superlattice relative to the crystalline state of $YMnO_3$ and $YFeO_3$

Hamid Latif almayahi, Ala[1], Aezami, Azadeh [1*]

[*1] *Departments of Physics, Ahvaz Branch, Islamic Azad University, Ahvaz, Iran*

Abstract

In this paper, $YMnO_3$ و $YFeO_3$ bulk and $YMnO_3/YFeO_3$ superlattice are constructed via pseudo-potential method, within framework of density functional theory, by utilizing the Qouantum -Espresso code. Using the LDA + U approximation, the electrical and magnetic properties of both the crystalline compounds and superlattice were investigated. The Hubbard parameter used in the LDA + U approximation was obtained from the linear response method on the Mn and Fe atoms of 3.5 eV and 4.61 eV, respectively, which is in very good agreement with the experimental values. The results of density of state calculations and band structure of both crystalline compounds showed that both compounds are ferromagnetic and semi-metalic. After the construction of the $YMnO_3$/ $YFeO_3$ superlattice, the presence of a semi-metallic structure and ferromagnetic configuration was also observed. In the interface between the layers, the presence of 6 electrons in the d orbital of Fe and 5 electrons in the d orbital of Mn, and using the double exchange model, the origin of the magnetic configuration in the superlattice can be confirmed.

Keywords: *پارامتر هابارد، ابرشبکه، کوانتوم اسپرسو, $YMnO_3$ و $YFeO_3$، $YMnO_3/YFeO_3$.*
PACS No. ۷۰ و ۷۱ و ۷۳ و ۷۵

مقدمه

به دلیل کاربرد وسیع، در سال‌های اخیر تحقیقات گسترده‌ای روی اکسیدهای فلزی یا ترکیب چند اکسیدی صورت گرفته است که

اهمیت استفاده از این مواد را در صنایع مختلف نشان می‌دهد. مواد دارای خاصیت مولتی‌فرویئک برای طیف گسترده‌ای از کاربردهای صنعتی به مواد پرکاربردی تبدیل شده‌اند. این امر در درجهٔ اول به دلیل همزیستی و تأثیر متقابل بین درجات آزادی مداری، بار در این مواد است. کاربردهای این مواد شامل ذخیره سازی داده‌ها، خازن‌ها، مبدل‌ها، محرک‌ها و غیره است[۲و۱].

با توجه به ویژگی‌های فیزیکی و شیمیایی استثنایی، منگنایت‌های خاکی نادر با فرمول کلی $RMnO_3$ به دلیل ویژگی‌های منحصر به فرد خود گزینه‌های اصلی در سالهای اخیر برای کاربردهای صنعتی هستند. همچنین این مواد کاربردهای بالقوه‌ای در حسگرها، مغناطوالکترونیک، ذخیره‌سازی داده‌های مغناطیسی، حافظهٔ غیر فرار، مبدل‌ها، محرک‌ها و فروالکتریک‌ها در ترانزیستورهای اثر میدان دارند [۲] علاوه بر این، از آن‌ها در ساختارهای لایه‌ای فلزی–فروالکتریک–عایق–نیمه‌فلزی برای توسعه ترانزیستورهای اثر میدان بر اساس اثر فروالکتریک استفاده می‌شود، منگنایت ایتریوم بسیار مورد توجه است، به ویژه در دهه اخیر، این ماده به عنوان یک مادهٔ مولتی‌فروئیک در نظر گرفته شده است، که در آن وقوع هم زمان حالت‌های فروالکتریک و مغناطیسی در دمای پایین مشاهده شده است .

اگرچه بیشتر فروالکتریک‌ها اکسیدهایی با ساختار پروسکایت هستند، اما مطالعات اخیر همزیستی این درجه آزادی را در منگنایت‌های شش–ضلعی نیز تأیید می‌کند. یکی از این منگنایت-ها، شش ضلعی($h\text{-}YMnO_3$) $YMnO_3$ ، که در سال‌های اخیر بسیار مورد توجه قرار گرفته است. در این پژوهش ابرشبکهٔ $YMnO_3/YFeO_3$ را ساخته و خواص الکتریکی و مغناطیسی آن را با استفاده از نظریهٔ تابعی چگالی و روش شبه پتانسیل با کد محاسباتی کوانتوم اسپرسو مورد بررسی قرار می‌دهیم. در این تحقیق ابتدا ساختارهای بلوری $YMnO_3$ و $YFeO_3$ را مورد بررسی قرار می دهیم و سپس خواص الکتریکی و مغناطیسی ابرشبکه ساخته شده را بررسی خواهیم کرد.

روش انجام محاسبات

در این تحقیق محاسبات با استفاده از روش امواج تخت با شبه پتانسیل فوق نرم در چارچوب نظریه‌ی تابعی چگالی با نرم افزار کوانتوم اسپرسو [۳] وتقریب LDA+U انجام شده است. برای محاسبه پتانسیل تبادلی-همبستگی در تقریب چگالی موضعی هابارد (LDA+U) با استفاده از روش پاسخ خطی، پارامتر هابارد برای اتم Mn را ۳/۵ eV و برای اتم Fe مقدار ۴/۶۱eV بدست آوردیم که تطابق خوبی با سایر نتایج گزارش شده دارد[۵و٤].

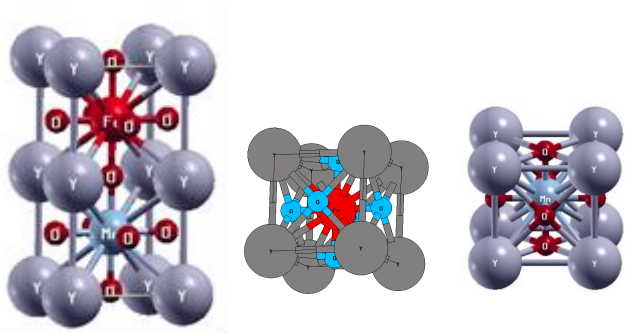
برای ساخت ابرشبکه $YMnO_3/YFeO_3$ از ترکیب بلوری $YMnO_3$ و $YFeO_3$ استفاده شده است که مقدار ثابت شبکه ساختار پروسکایت مکعبی بهینه شده $YMnO_3$ و $YFeO_3$، به ترتیب $\mathring{A}$ ۳/۸۷۲ و $\mathring{A}$ ۳/۸۸۳ بدست آمد. انرژی قطع تابع موج پس از بهینه‌سازی برای ترکیب‌های $YMnO_3$ و $YFeO_3$ به ترتیب ٦٥ Ry و۵۵ Ry در محاسبات منظور شده است.

انتگرال‌های منطقهٔ اول بریلوئن با استفاده از مش‌بندی یکنواخت برای تقریب LDA+U برای ترکیب‌های بلوری مکعبی $YMnO_3$ و $YFeO_3$ به ترتیب ۱۰×۱۰×۱۰ و ۷×۷×۷ بهینه شده است. در ابرشبکه $YMnO_3/YFeO_3$ ثابت‌های شبکه درون صفحه‌ای (a=b) را برابر ثابت شبکه $YMnO_3$ و برابر $\mathring{A}$ ۳/۸۷۲ در نظرگرفتیم و c پارامتر شبکه در جهت محور z (همانطور که در شکل ۱ج ملاحظه می شود) را طوری محاسبه کردیم که حجم محاسبه شده در هر بلور ثابت باقی بماند [۶]. پس از بهینه‌سازی پارامترهای اولیه ابرشبکه، انرژی قطع بهینه ۵۰ Ry تعداد نقاط ویژه k بهینه ۲۱٦ (٦×٦×٦) برای ابرشبکه $YMnO_3/YFeO_3$بدست آمد. تابع پهن‌شدگی mp با مقدار ۰/۰۱۵ را برای ابرشبکه بهینه کردیم. پارامترهای بهینه شده را تحت واهلش ساختاری قرار دادیم، نتایج حاصل نشان می‌دهد که فشار از مرتبه ۰/۲ کیلوبار و نیروی وارد بر هر یون از مرتبه 10^{-4} Ry/a-u است.

بحث و نتایج

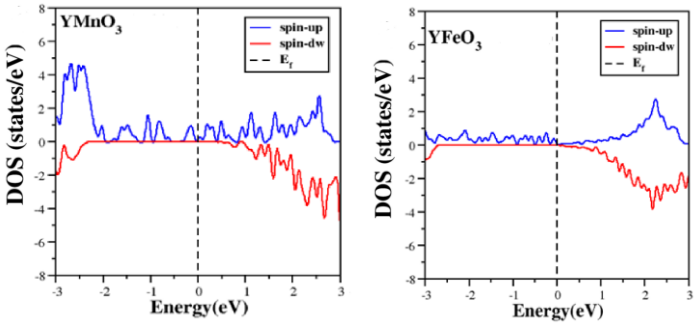
ابتدا برای بررسی ساختار بلوری ترکیب $YMnO_3$ و $YFeO_3$ پس از بهینه‌سازیهای اولیه، محاسبات چگالی حالات و ساختارنواری را با استفاده از تقریب LDA+U و پارامترهابارد را برای اتم منگنز ۳/۵ eV و برای اتم آهن ٤/٦١ eV انجام دادیم. همانطور که در شکل ۲ ملاحظه می شود، چگالی حالات ترکیب

$YMnO_3$ و $YFeO_3$ ساختار نیم‌فلزی و پیکربندی مغناطیسی فرومغناطیس را نشان می‌دهد.



(الف) (ب) (ج)

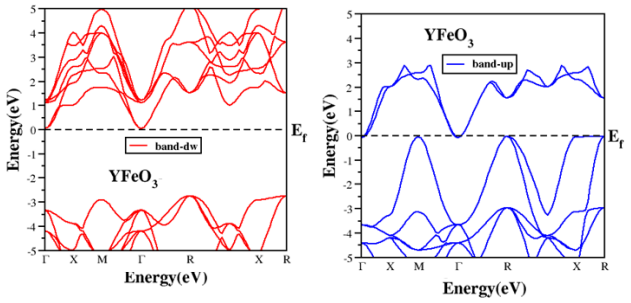
شکل۱: بطور شماتیک قسمت (الف) شبکه بلوری ترکیب $YMnO_3$ قسمت (ب) شبکه بلوری $YFeO_3$ و قسمت (ج) لایه‌های ابرشبکه $YMnO_3/YFeO_3$ را نشان می‌دهد.



(ب) (الف)

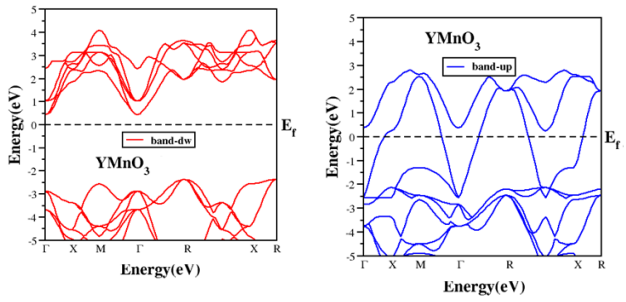
شکل۲: قسمت (الف) نمودار چگالی حالات کل ترکیب بلوری YFO_3 و قسمت (ب) نمودار چگالی حالات کل ترکیب بلوری $YMnO_3$ را نشان می‌دهد.

ساختار نواری هر دو ترکیب $YMnO_3$ و $YFeO_3$ نیز محاسبه و در شکل ۳ و ٤ رسم شده است که نتایج حاصل از محاسبات چگالی حالات کل را تأیید می کند. گاف نواری محاسبه شده از روی نمودار ساختارنواری ترکیبات $YMnO_3$و $YFeO_3$ به ترتیب ۳/۱٤ eV و ۳/۳۳ eV بدست آمد. پس از بررسی ساختار الکتریکی و مغناطیسی دو ترکیب $YMnO_3$ و $YFeO_3$ ابرشبکه $YMnO_3/YFeO_3$ معادل آلیاژ $YMn_{0.5}Fe_{0.5}O_3$ را ساختیم. پس از بهینه‌سازی‌های اولیه محاسبات چگالی حالات کل در شکل ۵ نشان داد که ابرشبکه ساخته شده از دو ترکیب بلوری$YMnO_3$ و $YFeO_3$ باز هم دارای یک ساختار فرومغناطیس و همچنان نیم-فلز باقی می ماند. شکل ٦ محاسبات چگالی حالات جزئی منگنز و آهن را در مرز مشترک لایه‌ها نشان می‌دهد. همانطور که در شکل ملاحظه می‌شود آهن در مرز مشترک لایه‌ها دارای پیکربندی پادفرومغناطیس و نیم‌فلز است در حالی که منگنز فرومغناطیس و نیم‌فلز می‌باشد، از آنجائیکه آهن در لایه آخر خود دارای ٦ الکترون در اربیتال d و منگنز ۵ الکترون در اربیتال d می‌باشد، یک الکترون در مرز مشترک لایه‌ها بین آهن و منگنز به اشتراک گذاشته شده و یک پیوند کووالانسی بین آهن و منگز خواهیم داشت. بر اساس مدل تبادل دوگانه جابجایی این الکترون از یک عنصر به عنصر دیگر در مرز لایه‌ها سبب پایداری و منشأ نظم فرومغناطیس در ابرشبکه $YMnO_3/YFeO_3$ یا معادل آن آلیاژ $YMn_{0.5}Fe_{0.5}O_3$ خواهد شد.



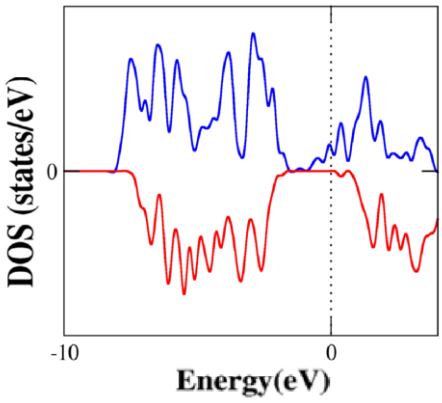
(ب) (الف)

شکل ۳: ساختار نواری ترکیب $YFeO_3$ (الف) برای اسپین اکثریت و قسمت (ب) برای اسپین اقلیت را نشان می‌دهد.

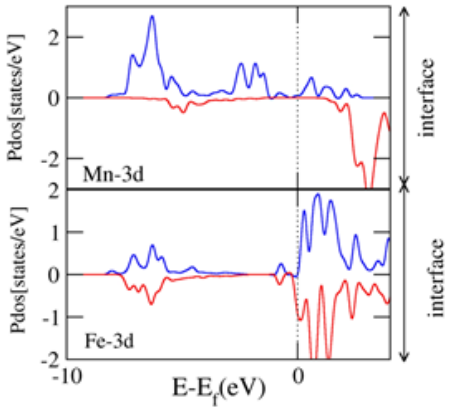


(ب) (الف)

شکل ٤: ساختار نواری ترکیب $YMnO_3$ (الف) برای اسپین اکثریت و قسمت (ب) برای اسپین اقلیت را نشان می‌دهد.



شکل۵: نمودار چگالی حالت کل در ابرشبکه $YMnO_3/YFeO_3$ را نشان می-دهد.



شکل ٦: چگالی حالت جزئی عنصر Mn-3d و Fe-3d را نشان می‌دهد.

با توجه به نمودارهای شکل ٦ و مقایسه چگالی حالت های انرژی کلی با جزئی مشاهده می‌شود که اربیتال‌های d اتم‌های Mn و Fe نقش خیلی مهمی را در چگالی حالت‌های کلی دارد.

نتیجه‌گیری

بطور خلاصه نتایج محاسبات در این تحقیق نشان می‌دهد که با توجه به اینکه در هر دو ترکیب $YMnO_3$ و $YFeO_3$ و ابرشبکه $YMnO_3/YFeO_3$ از Fe و Mn استفاده می شود و این عناصر جزو دسته عناصری هستند که ذرات آنها دارای همبستگی قوی هستند بنابراین برای محاسبات باید از تقریب LDA+U استفاده نمود. به همین منظور پارامتر هابارد استفاده شده در تقریب LDA+U با استفاده از روش پاسخ خطی بر روی اتم Mn و Fe به ترتیب ۳/۵ eV و ٤/٦١ eV بدست آوردیم که در تطابق بسیار خوبی با مقادیر گزارش شده است. نتایج محاسبات چگالی حالت و ساختار نواری هر دو ترکیب بلوری نشان می دهد که هر دو ترکیب دارای پیکربندی فرومغناطیس و از نظر الکتریکی نیمه-فلز هستند. پس از ساخت ابرشبکه $YMnO_3/YFeO_3$ وجود ساختار الکتریکی نیم‌فلزی و پیکربندی فرومغناطیس نیز دیده شد. در فصل مشترک لایه‌ها وجود ٦ الکترون در اربیتال d آهن و ٥ الکترون در اربیتال d منگنز و با استفاده از مدل تبادل دوگانه می-توان منشأ وجود پیکربندی مغناطیسی را در ابرشبکه مذکور تأیید کرد.

مرجع‌ها

[1] B. B. Van Aken, T. T. M. Palstra, A. Filippetti & N. A. Spaldin; "The origin of ferroelectricity in magnetoelectric YMnO3"; Nature Materials. **3** (2004) 164–170.
[2] O. Rosales-Gonzáleza, F. Sánchez-De Jesúsa, C. A.Cortés-Escobedob, A.M.Bolarín-Miró;" Crystal structure and multiferroic behavior of perovskite YFeO3"; Ceramics International **44** (2018) 15298-15303.
[3] P. Giannozzi, S.Baroni, et al; Matteo Calandra; "QUANTUM ESPRESSO: a Modular and OpenSource Software Project for Quantum Simulations of Materials"; J. Phys. Condens. Matt **21** (2009).
[4] A. Aezami, M. Abolhassani, M. Elahi; "Exchange interaction, electronic structure and magnetic properties of (LaMnO3)m/(SrTiO3)n superlattices: ab initio study";. J. Alloys. Com pound **587** (2014) 778-782.
[5] A. Aezami; "Effect of tensile and compressive strain on the magnetic ordering of the $(LaMnO_3)_1/(SrTiO_3)_1$ superlattices"; j. pranama **91** (2018) 1-4.
[6] B. R. K. Nanda, S. Satpathy.; "Electronic and magnetic structure of the $(LaMnO_3)_{2n}/(SrMnO_3)_n$ superlattices"; Phys. Rev. B **79** (2009) 054428.

کنترل انتقال جمعیت در سیستم اسپینی سه ترازی با استفاده از لیزر جاروب شده خطی

غلامی، طیبه[۱] ; حسینی، سیدمهدی[۱]

[۱]دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی شیراز، بلوار مدرس، شیراز

چکیده

لیزرهای جاروب شده خطی یک ابزار کارآمد در انتقال جمعیت بین حالت های مختلف در یک سیستم کوانتمی است. در این مقاله جابه جایی جمعیت در سیستم اسپین سه ترازی مورد بررسی قرارگرفته است. برای این کار با استفاده از هامیلتونی و حل عددی معادله شرودینگر وابسته به زمان، احتمالات گذار محاسبه و تحلیل شده است. نتایج نشان می دهد که پارامتر جاروب اهمیت بسیاری در کنترل جابه جایی جمعیت دارد و مشاهده می شود که در مقادیر پایین پارامتر جاروب، احتمال گذار افزایش می یابد. علاوه بر این با تغییر بسامد مرکزی میدان لیزر تغییر رفتاری در انتقال جمعیت سیستم اسپینی می توان مشاهده کرد. بنابراین گذار اسپینی با تنظیم بسامد میدان لیزری که به صورت خطی با زمان تغییر می کند و همینطور پارامتر جاروب شده، می توان بهبود بخشید.

واژه های کلیدی: *انتقال جمعیت، لیزر جاروب شده، اسپین سه ترازی، پارامتر جاروب، بسامد مرکزی*

Control of population transfer in a three-level spin system using linear chirped laser

Gholami, Tayebeh[1]; Hosseini, Mehdi[1]

[1] *Department of Physics, Shiraz University of technology, Shiraz*

Abstract

Linear chirped lasers are efficient tools for transferring populations between different states in a quantum system. In this paper, population transfer in a three-level spin system is investigated. In this work, by using Hamiltonian and numerical solution of the time-dependent Schrodinger equation the transition probabilities are calculated and analyzed. The results show that the chirping parameter is very important in controlling population transfer and it is observed that at low values of the chirping parameter, the probability of transition increases. In addition, by changing the central frequency of the laser field, a behavioral change in the population transfer of the spin system can be observed. Therefore, the spin transition can be improved by adjusting the laser field frequency, which changes linearly with time, as well as the chirping parameter.

***Keywords**: Population transfer, chirped lasers, three-level spin, chirping parameter, central frequency*

PACS No 32, 34

مقدمه

دستکاری سیستم های اسپینی بدلیل اهمیت آن در رشته های اتمی و حالت جامد در چند دهه ی اخیر بسیار مورد توجه بوده است [۱]. مطالعه برهمکنش امواج الکترومغناطیس با سیستم های اسپینی دو یا سه ترازی و کنترل جمعیت در این سیستم با توجه به کاربردهای گسترده ای که در اپتیک کوانتمی دارد بسیار حائز اهمیت است [٤-۲]. از جمله کاربرد های آن فرآیند اطلاعات کوانتمی [٥،٦]، دینامیک برخورد [۷]، مدارهای ابررسانا [۸]، خنک کننده ی لیزری [۹]، ساعت اتمی [۱۰،۱۱]، طیف سنجی [۱۲] و کامپیوترهای کوانتمی [۱۳] می توان نام برد.

در بررسی جابه جایی جمعیت از دو دیدگاه نیمه کلاسیک و تمام کوانتمی استفاده می شود. که در این مقاله با دیدگاه تمام کوانتمی و بوسیله ی مدل جینزکامینگز به مطالعه انتقال جمعیت در سیستم اسپین سه ترازی پرداخته شده است [١٤]. نمونه سیستم اسپینی سه ترازی پرکاربرد در بررسی اتمی و دستکاری اتم ها، نیتروژن تهی جایی مرکزی است که قابلیت بالای آن در کنترل اسپین ها با استفاده از میدان های محرک خارجی موجب توضیح پدیده هایی

همچون نوسانات رابی و درهم تنیدگی کوانتمی می شود که مرتبط با تشدید مغناطیسی است [۱۷-۱۵]. به همین دلیل مدل ایده آلی برای مطالعات نظری در این زمینه است.

جابه جایی جمعیت با استفاده از حالت های اسپینی در بستر روش های مختلفی انجام می گیرد یکی از رویکردهای مهم و پر کاربرد کنترل جمعیت، عبور بی دررو القایی رامان [۱۸] است. در این روش با استفاده از دو حالت توالی پالس متعارف و توالی پالس نامتعارف جمعیت را از تراز پایه به تراز هدف بوسیله یک تراز واسطه برانگیخته می کند. از دیگر راهکارهای رایج انتقال جمعیت استفاده از روش لاندئوزنراشتوکلبرگ است مبنای کارکرد آن، تغییر میدان مغناطیسی وابسته به زمان است [۲۱-۱۹]. در این مقاله به مطالعه کنترل جمعیت به شیوه ی لیزر جاروب شده می پردازد [۲۲]. این روش اولین بار در سال ۱۹۹۰ میلادی توسط چلکاوسکی مطرح شد که براساس جاروب کردن بسامد لیزر، جمعیت انتقال می یابد.

روش محاسبات

در این بخش انتقال جمعیت در سیستم اسپینی سه ترازی Λ شکل با استفاده از دو لیزر پمپ و استوکس مورد بررسی قرار گرفته است. این سیستم کوانتمی شامل سه حالت پایه، میانی و برانگیخته است، که لیزر پمپ و استوکس به ترتیب حالت میانی را به حالت پایه و برانگیخته متصل می کند. برای مطالعه دینامیک سیستم با توجه به مدل جینزکامینگز هامیلتونی به این صورت بیان شده است [۲۵-۲۳] :

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \hbar\sum_{i=1}^{3}\omega_i\sigma_{ii}\\ &+\hbar(\omega_L\hat{\alpha}_L^{+}\hat{\alpha}_L+\omega_R\hat{\alpha}_R^{+}\hat{\alpha}_R)\\ &+\hbar\omega'(\hat{\alpha}_L\sigma_{21}+\hat{\alpha}_L^{+}\sigma_{12})+\hbar\omega''(\hat{\alpha}_R^{+}\sigma_{32}+\hat{\alpha}_R\sigma_{23})\end{aligned} \quad (۱)$$

در این هامیلتونی، ω_i بسامد گذار اتمی، $\sigma_{ii}=|i\rangle\langle i|$ ماتریس اشغال ترازها، $\hat{\alpha}_L$ و $\hat{\alpha}_R$ به ترتیب عملگر میدان های پمپ و استوکس هستند. ω'، ω'' بسامد برهمکنش بین اتم و میدان پمپ و استوکس است که بیانگر قدرت جفت شدگی بین میدان و اتم و $\hbar$ ثابت پلانک است. بسامد لیزرهای پمپ و استوکس با ω_L و ω_R نشان داده می شوند و با توجه به اینکه دینامیک جمعیت در برهمکنش یک سیستم اسپینی سه ترازی با لیزر جاروب شده خطی مورد مطالعه قرار گرفته است بنابراین بسامد لیزرها به این شکل در نظر گرفته شده است:

$$\omega_L=\alpha_L t+\omega_{L0} \quad (۲)$$

$$\omega_R=\alpha_R t+\omega_{R0} \quad (۳)$$

که در رابطه (۲) و (۳)، ω_L و ω_R بسامد دو لیزر جاروب شده خطی، α_L و α_R پارامترهای جاروب شدگی، ω_{L0} و ω_{R0} بسامد مرکزی دو لیزر پمپ و استوکس هستند. در سیستم مورد بررسی اگر هامیلتونی (۱) را بر ویژه حالت های $|g,n,m-1\rangle$، $|e,n-1,m-1\rangle$ و $|g,n-1,m\rangle$ که به ترتیب معادل حالت های پایه، میانی و برانگیخته هستند اعمال شود ماتریس هامیلتونی سیستم حاصل می شود:

$$\hat{H}=\hbar\begin{pmatrix}-\delta_1+\omega_L n+\omega_R(m-1) & \omega'\sqrt{n} & 0\\ \omega'\sqrt{n} & \omega_2+\omega_L(n-1)+\omega_R(m-1) & \omega''\sqrt{m}\\ 0 & \omega''\sqrt{m} & -\delta_2+\omega_L(n-1)+\omega_R m\end{pmatrix} \quad (٤)$$

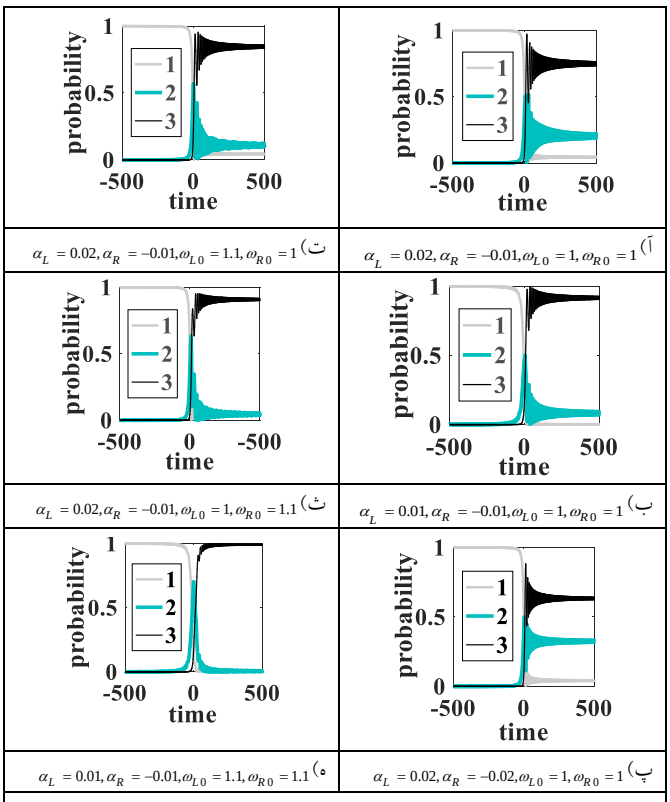
لازم به ذکر است n و m تعداد فوتون میدان های لیزر پمپ و استوکس و همینطور $\delta_1=\omega_2-\omega_1$ و $\delta_2=\omega_2-\omega_3$ است. با حل عددی معادله شرودینگر وابسته به زمان به بررسی دینامیک جمعیت پرداخته شده است. در این محاسبات برای سهولت کار سیستم بدون بعد فرض شده است :

$$\begin{aligned}&\omega_1=\hat{\omega}_1\delta_2,\omega_2=\hat{\omega}_2\delta_2,\omega_{L1}=\hat{\omega}_{L1}\delta_2,\omega_{L2}=\hat{\omega}_{L2}\delta_2\\ &t_1=\frac{\hat{t}}{\delta_2},\delta_1=\hat{\delta}_1\delta_2\end{aligned} \quad (۵)$$

نتایج و بحث

برای کنترل تأثیر پارامترهای مختلف سیستم بر دینامیک جمعیت، با حل عددی معادله شرودینگر در یک مرحله احتمال انتقال بر حسب زمان و در مرحله دیگر مقادیر ۱۰٪ احتمال نهایی حالت های پایه، میانی و برانگیخته بر حسب پارمترهای جاروب که با عنوان AFP ارائه شده، بدست آمده است. در اینجا فرض بر آن است که در ابتدا برهمکنش سیستم اسپینی در حالت پایه قرار دارد و بعد از اعمال لیزر جاروب شده جمعیت سیستم به حالت

برانگیخته منتقل می شود. در تمامی محاسبات انجام شده، بسامد برهمکنش $\omega'' = \omega' =$ ۰/۱ و تعداد فوتون ها ۱ در نظر گرفته شده است. و همینطور بازه ی زمانی به نحوی فرض شده است که از پایداری سیستم در حالت نهایی اطمینان حاصل شود.



آ) $\alpha_L = 0.02, \alpha_R = -0.01, \omega_{L0} = 1, \omega_{R0} = 1$

ب) $\alpha_L = 0.01, \alpha_R = -0.01, \omega_{L0} = 1, \omega_{R0} = 1$

پ) $\alpha_L = 0.02, \alpha_R = -0.02, \omega_{L0} = 1, \omega_{R0} = 1$

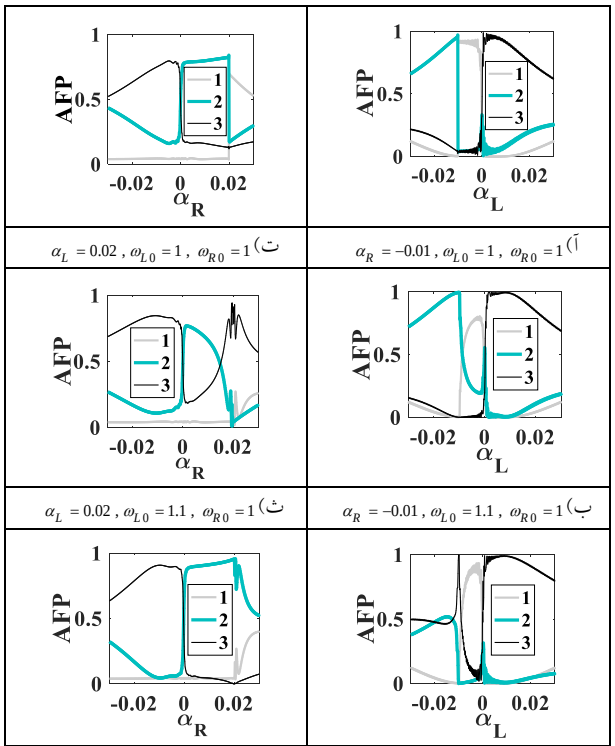
ت) $\alpha_L = 0.02, \alpha_R = -0.01, \omega_{L0} = 1.1, \omega_{R0} = 1$

ث) $\alpha_L = 0.02, \alpha_R = -0.01, \omega_{L0} = 1, \omega_{R0} = 1.1$

ه) $\alpha_L = 0.01, \alpha_R = -0.01, \omega_{L0} = 1.1, \omega_{R0} = 1.1$

شکل ۱ : نمودار بهنجار احتمال انتقال جمعیت بر حسب زمان

شکل ۱، نمودار احتمال گذار جمعیت در سامانه اسپینی سه ترازی تحت تأثیر لیزر جاروب شده خطی رسم شده است. در شکل ۱-آ همانطور که مشاهده می شود، جمعیت ابتدا در تراز پایه و با افزایش زمان و تابش لیزر جاروب شده ۷۵٪ جمعیت به تراز برانگیخته منتقل می شود و سپس به تعادل می رسد. در جدول ۱-ب با کاهش پارامتر جاروب لیزر پمپ به مقدار $\alpha_L =$ ۰/۰۱ احتمال گذار افزایش می یابد و جمعیت در تراز پایه به مقدار صفر می رسد. در شکل ۱-پ احتمال انتقال در برابر تغییر پارامتر جاروب لیزر استوکس در مقدار $\alpha_R =$ -۰/۰۲ و قرار دادن $\alpha_L =$ ۰/۰۲ کاهش می یابد و ۳۳٪ جمعیت در تراز میانی باقی می ماند. در شکل ۱-ت همانطور که دیده می شود با افزایش بسامد مرکزی لیزر پمپ به مقدار $\omega_{L0} =$ ۱/۱ احتمال حضور جمعیت در تراز برانگیخته افزایش یافته است و در حالت میانی یک رفتار نوسانی



آ) $\alpha_R = -0.01, \omega_{L0} = 1, \omega_{R0} = 1$

ت) $\alpha_L = 0.02, \omega_{L0} = 1, \omega_{R0} = 1$

ب) $\alpha_R = -0.01, \omega_{L0} = 1.1, \omega_{R0} = 1$

ث) $\alpha_L = 0.02, \omega_{L0} = 1.1, \omega_{R0} = 1$

پ) $\alpha_R = -0.01, \omega_{L0} = 1, \omega_{R0} = 1.1$

ه) $\alpha_L = 0.02, \omega_{L0} = 1, \omega_{R0} = 1.1$

شکل۲ : نمودار بهنجار AFP بر حسب پارامتر جاروب

مشاهده می شود. در شکل ۱-ث نمودار احتمال برای مقدار بسامد مرکزی لیزر استوکس $\omega_{R0} =$ ۱/۱ رسم شده است در اینجا ۹۰٪ جمعیت گذار و جمعیت حالت میانی کاهش و با رفتار نوسانی بیشتر نسبت به تراز پایه به یک مقدار یکسان رسیدند. در شکل ۱-ه احتمال گذار در حالت بهینه قرار دارد که نشان می دهد جمعیت به طور کامل به تراز برانگیخته منتقل شده و در حالت پایه و میانی به صفر رسیده است. در این نمودار هر دو پارامتر جاروب به مقدار $\alpha_L =$ ۰/۰۱ و $\alpha_R =$ -۰/۰۱ و بسامد مرکزی لیزر پمپ و استوکس به مقدار ۱/۱ افزایش یافته است که موجب گذار کامل و بعد پایداری آن شده است. شکل ۲ نمودار AFP بر حسب پارامتر جاروب در مقابل تغییر بسامد لیزر جاروب شده را نشان می دهد. در این شکل با ثابت نگه داشتن پارامتر جاروب میدان استوکس $\alpha_R =$ -۰/۰۱ در بازه ۰ ≤ α_L ≤ ۰/۰۱ احتمال انتقال جمعیت افزایش و در بازه -۰/۰۱ ≤ α_L ≤ ۰ احتمال انتقال کاهش می یابد. همچنین با ثابت نگه داشتن پارامتر جاروب میدان پمپ $\alpha_L =$ ۰/۰۲ در بازه -۰/۰۱ ≤ α_R ≤ ۰ بیشترین گذار و در بازه ۰ ≤ α_R ≤ ۰/۰۱ کمترین گذار جمعیت مشاهده می شود.

همانطور که در شکل۲ نشان داده شده است، با افزایش بسامد مرکزی میدان لیزر جاروب شده افت و خیز نمودار AFP افزایش می یابد، اما در بازه هایی که بیشترین گذار دیده شد نمودار پایدارتر و احتمال حضور جمعیت در حالت برانگیخته بیشتر می شود. شکل ۲ نمودار AFP بر حسب پارامتر جاروب در مقابل تغییر بسامد لیزر جاروب شده را نشان می دهد. در این شکل با ثابت نگه داشتن پارامتر جاروب میدان استوکس α_R =-۰/۰۱ در بازه ۰ ≤ α_L ≤ ۰/۰۱ احتمال انتقال جمعیت افزایش و در بازه ۰ ≤ α_L ≤ -۰/۰۱ احتمال انتقال کاهش می یابد. همچنین با ثابت نگه داشتن پارامتر جاروب میدان پمپ α_L =۰/۰۲ در بازه ۰ ≤ α_R ≤ -۰/۰۱ بیشترین گذار و در بازه ۰ ≤ α_R ≤ ۰/۰۱ کمترین گذار جمعیت مشاهده می شود. همانطور که در شکل۲ نشان داده شده است، با افزایش بسامد مرکزی میدان لیزر جاروب شده افت و خیز نمودار AFP افزایش می یابد، اما در بازه هایی که بیشترین گذار دیده شد نمودار پایدارتر و احتمال حضور جمعیت در حالت برانگیخته بیشتر می شود.

نتیجه گیری

در این مقاله انتقال جمعیت در سامانه اسپینی سه ترازی بوسیله جاروب میدان لیزری به صورت تمام کوانتمی مورد بررسی قرار گرفته است. در این کار تنها با تغییر پارامتر جاروب و بسامد مرکزی جمعیت سامانه کنترل شده است. نتایج عددی حاصل از نموادر احتمال انتقال جمعیت و نمودار AFP نشان می دهد، در جاروب شدگی های کم احتمال گذار جمعیت افزایش می یابد و همچنین افزایش بسامد مرکزی باعث افزایش حضور جمعیت و پایداری احتمال نهایی می شود.

مرجع‌ها

[۱] X. S. Wang, H. W. Zhang and X. R. Wang; "Topological magnonics: A paradigm for spin-wave manipulation and device design"; *Physical Review Applied* **9**, No. 2 (2018) 6-9.
[۲] P. Král, I. Thanopulos and M. Shapiro; "Colloquium: Coherently controlled adiabatic passage"; *Reviews of Modern Physics* **79**, No. 1 (2007) 53-59.
[۳] Xi. Chen and J. G. Muga; "Engineering of fast population transfer in three-level systems*"; Physical Review Applied* **86**, No. 3 (2012) 1-5.
[٤] N. V. Vitanov, T. Halfmann, B. W. Shore and K. Bergmann; "Laser-induced population transfer by adiabatic passage techniques"; *Annual Review of Physical Chemistry* **52**, No. 1 (2001). 763-787.
[٥] M. Saffman, T. G. Walker and K. Mølmer; "Quantum information with Rydberg atoms"; *Reviews of Modern Physics* **82** No. 3 (2010) 29-44.
[٦] A. Veps¨al¨ainen, S. Danilin, and G. S. Paraoanu; "Optimal superadiabatic population transfer and gates by dynamical phase corrections"; *Quantum Science and Technology* **3**, No. 2 (2018) 1-26.
[٧] M. Shapiro and P. Brumer; "Coherent control of molecular dynamics"; *Reports on Progress in Physics* **66**, No. 6 (2003) 859-942.
[٨] H. K. Xu. C. Song, W. Y. Liu, G. M. Xue, F. F. Su, H. Deng, Y. Tian, D. N. Zheng, S. Han, Y. P. Zhong, H. Wang, Y. Liu and S. P. Zhao ; "Coherent population transfer between uncoupled or weakly coupled states in ladder-type superconducting qutrits"; *Nature communications* **7**, No. 1 (2016) 1-5.
[٩] Korsunsky, Eugeny; "Laser cooling during velocity-selective adiabatic population transfer"; *Physical Review Applied* **54**, No. 3 (1996) 1-4.
[١٠] Y. Song, H. G. Lee, H. Kim, H. Jo and J. Ah; "Subpicosecond X rotations of atomic clock states"; *Physical Review Applied* **97**, No. 5 (2018) 1-8.
[١١] M. Weitz, B. C. Young and S. Chu; "Atomic interferometer based on adiabatic population transfer"; *Physical review letters* **73**, No. 19 (1994) 1-4.
[١٢] A. V. Pisliakov, T. Manal and Graham R. Fleming; "Two-dimensional optical three-pulse photon echo spectroscopy. II. Signatures of coherent electronic motion and exciton population transfer in dimer two-dimensional spectra"; *Chemical Physics* **124**, No. 23 (2006) 1-9.
[١٣] P. J. Ollitrault, G. Mazzola and I. Tavernelli; "Nonadiabatic molecular quantum dynamics with quantum computers"; *Physical Review Letters* **125**, No. 26 (2020) 1-12.
[١٤] Ying. Wu; "Effective Raman theory for a three-level atom in the Λ configuration"; *Physical Review Applied* **54**, No. 2 (1996) 1-7.
[١٥] G. Mariani, S. nomoto, S. Kashiwaya and S. nomura; "System for the remote control and imaging of MW fields for spin manipulation in NV centers in diamond "; *Scientific Reports* **10**, No. 1 (2020). 1-10.
[١٦] G.d P. Conangla, A. W. Schell, R. A. Rica and R. Quidant; "Motion control and optical interrogation of a levitating single nitrogen vacancy in vacuum" *Nano letters* **18**, No. 6 (2018) 1-4.
[١٧] B. J. Maertz, A. P. Wijnheijmer, G. D. Fuchs, M. E. Nowakowski and D. D. Awschalom; "Vector magnetic field microscopy using nitrogen vacancy centers in diamond"; *Applied Physics Letters* **96**, No. 9 (2010) 1-4.
[١٨] N. V. Vitanov, A. A. Rangelov, B. W. Shore and K. Bergmann; "Stimulated Raman adiabatic passage in physics, chemistry, and beyond"; *Reviews of Modern Physics* **89**, No. 1 (2017) 1-46.
[١٩] Y. B. Band and Y. Avishai; "Three-level Landau-Zener dynamics"; *Physical Review Applied* **99**, No.3 (2019) 1-5.
[٢٠] F. Sarreshtedari and M. Hosseini; "Tunable Landau-Zener transitions using continuous- and chirped-pulse-laser couplings";*Physical Review Applied* **95**, No. 3 (2017) 1-6.
[٢١] A. Niranjan, W. Li and R. Nath; "Landau-Zener transitions and adiabatic impulse approximation in an array of two Rydberg atoms with time-dependent detuning"; *Physical Review Applied* **101**, No. 6 (2020) 1-10.
[٢٢] F. Ahmadinouri, M. Hosseini, and F. Sarreshtedari ; "Investigation of robust population transfer using quadratically chirped laser interacting with a two-level system"; *Physica Scripta* **94**, No. 10 (2019) 1-18.
[٢٣] M. Alexanian and S. K. Bose; "Unitary transformation and the *dynamics of* a three-level atom interacting with two quantized field modes"; *Physical Review Applied* **52**, No. 3 (1995).
[٢٤] C. C. Gerry and J. H. Eberly; "Dynamics of a Raman coupled mode *interacting with two quantized cavity fields"; Physical Review Applied* **42**, No. 11 (1990) 1-11.

سنتز نانو کامپوزیت مغناطیسی $Ni_{0.5}Zn_{0.5}Fe_2O_4/BaFe_{12}O_{19}$ به روش سل-ژل احتراقی و مطالعه ساز و کار تبادل فنر

المنصوری، رافع طعمه [۱و۳]؛ عربی، هادی [۱و۲]؛ قربانی، شعبان رضا[۲]؛ بکاولی، هدی [۱]؛ کمیلی، مجتبی [۱]

[۱] آزمایشگاه تحقیقاتی انرژی‌های تجدیدپذیر، مغناطیسی و ابررسانایی، گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه فردوسی مشهد

[۲] گروه فیزیک، دانشگاه فردوسی مشهد، مشهد

[۳] گروه فیزیک لیزر، دانشکده علوم برای زنان،دانشگاه بابل، عراق

چکیده

در این پژوهش نانوکامپوزیت مغناطیسی $Ni_{0.5}Zn_{0.5}Fe_2O_4/BaFe_{12}O_{19}$ متشکل از دو فریت سخت/ نرم به روش سل ژل احتراقی سنتز و خاصیت تبادل فنر برای آن بررسی شد. آنالیز XRD حضور همزمان دو فاز فریت سخت و نرم را نشان می دهد. با افزایش دمای تکلیس تا ۹۰۰ °C ، اندازه کریستال‌ها افزایش و بعد از آن کاهش می‌یابد. تصاویر SEM ذرات هگزافریت باریم را به صورت شش ضلعی های بزرگ و ذرات فریت نیکل-روی را کروی و با ابعاد کوچک تر نشان می دهد. شکل کمر زنبوری در حلقه‌های پسماند در آنالیز VSM گویای خاصیت تبادل فنر در نمونه است. با افزایش دمای تکلیس از ۸۰۰ °C تا ۱۱۰۰ °C ابتدا شاهد افزایش مساحت حلقه و سپس کاهش آن هستیم. بیشترین محصول انرژی $(BH)_{max}$ برای کامپوزیت در دمای ۹۰۰ °C بدست آمد.

واژه های کلیدی: نانوکامپوزیت مغناطیسی، فریت سخت و نرم، سل-ژل، اسپینل، هگزاگونال، تبادل فنر، حلقه هیسترزیس

Synthesis of $Ni_{0.5}Zn_{0.5}Fe_2O_4$ / $BaFe_{12}O_{19}$ magnetic nanocomposite by sol gel combustion method and study of spring exchange mechanism

Almansouri, Rafe Tame [1,3]; Arabi, Hadi [1,2]; Ghorbani, Shaban Reza[2]; Bakavoli, Hoda[1]; Komeili, Mojtaba [1]

[1] Renewable energy, magnetic and superconducting research laboratory, Department of Physics, Faculty of science Ferdowsi University of Mashhad

[2] Department of Physics, Ferdowsi University of Mashhad, Mashhad, Iran

[3]Department laser physics, Faculty of Science for Women, University of Babylon, Iraq.

Abstract:

In this research, $Ni_{0.5}Zn_{0.5}Fe_2O_4/BaFe_{12}O_{19}$ magnetic nanocomposite consisting of two hard/soft ferrites was synthesized by combustion sol-gel method and its spring exchange property was investigated. XRD analysis showed both hard and soft ferrite phases simultaneously. As the calcination temperature increased to 900°C, the size of the crystals increased and then decreased. Barium hexaferrite particles, large and hexagonal, and smaller spherical nickel-zinc ferrite particles were observed by SEM analysis. The shape of the bee-waist in the hysteresis loop in the VSM analysis indicates the spring exchange property in the sample. By increasing the calcination temperature from 800 to 1100°C, we first see an increase in the loop area and then a decrease. The highest energy product $(BH)_{max}$ was obtained for the calcined composite at 900°C.

***Keywords**: Magnetic nanocomposites, Hard and soft ferrite, sol-gel, Spinel, Hexagonal, Spring exchange, hysteresis loop*

Corresponding author: Hadi Arabi, arabi-h@um.ac.ir

PACS No.

مقدمه

امروزه وسایل مغناطیسی بخش جدانشدنی از زندگی روزمره انسان‌ها شده‌اند. بهبود کارکرد این وسایل یکی از اهداف آزمایشگاه‌ها و پژوهشگران در حوزه مغناطیس است. استفاده از علم نانو و ترکیب آن با مغناطیس یکی از روش‌های افزایش بازده وسایل الکترونیکی است. نانو ذرات مغناطیسی کاربردهای بسیاری در زمینه‌های مختلف از جمله ذخیره داده‌های مغناطیسی، دستگاه‌های نوری مغناطیسی، کاربردهای زیست پزشکی و ... دارند. خواص فیزیکی نانو ذرات را با کنترل برخی ویژگی‌ها مانند اندازه ذرات و ساختار آن‌ها می‌توان کنترل کرد[1]. اخیرا نانوکامپوزیت‌های فریت تبادل فنر که از فریت‌های سخت و نرم تشکیل شده‌اند به دلیل محصول انرژی $(BH)_{max}$ قابل پیش‌بینی و بالاتر، توجهات زیادی به خود جلب کرده‌اند. همچنین فریت‌ها به علت قیمت ارزان و مقاومت بالا در برابر خوردگی مورد توجه‌اند[2]. فریت‌های نرم از مغناطش اشباع M_s بالا و فریت‌های سخت از نیروی وادارندگی H_c بالا برخوردارند. کنار هم قرار گرفتن فریت نرم و سخت، باعث افزایش محصول انرژی $(BH)_{max}$ و درنتیجه افزایش خاصیت مغناطیسی می‌شود. این مورد یکی از برتری‌های کامپوزیت‌ها نسبت به استفاده از فریت نرم و سخت به طور جداگانه است[3],[4]. هدف این پژوهش مطالعه آهنربای دائمی تبادل فنر است. دو مفهوم تبادل فنر و جفت تبادل مغناطیسی در نانوکامپوزیت های سخت/نرم وجود دارد مورد دوم از جفت شدگی مغناطیسی بین دو فاز نرم و سخت ساخته می شود به نحوی که منحنی پسماند نمونه بدون هر گونه اعوجاج است اما در تبادل فنر دو فاز مغناطیسی به وضوح در منحنی پسماند مشخص و به منحنی حاصل اصطلاحاً کمر-زنبوری گفته می‌شود. عامل تشکیل این دو شکل مغناطیسی به ابعاد فازهای نرم و سخت مغناطیسی مربوط می‌شود[5].

کارهای تجربی

در این پژوهش برای ساخت نانوکامپوزیت $Ni_{0.5}Zn_{0.5}Fe_2O_4/BaFe_{12}O_{19}$ ابتدا هرکدام از نانوذرات را به طور جداگانه به روش سل-ژل احتراقی سنتز کردیم و سپس با نسبت‌های معین در بال میل مخلوط و در دماهای مختلف حرارت دهی کردیم.

الف) سنتز نانو ذرات نیکل-روی

ابتدا پیش‌ماده‌های $Ni(NO_3)_2.6H_2O$، $Fe(NO_3)_3.9H_2O$، $Zn(NO_3)_2.6H_2O$ و اسید سیتریک به عنوان عامل کمپلکس‌ساز به نسبت ۱:۱ برای سنتز ۴ گرم از ماده نهایی توزین شدند و در آب دیونیزه حل شدند. سپس بشر حاوی نیترات نیکل در حمام آب ۸۰ درجه سانتی‌گراد گذاشته شد و روی همزن مغناطیسی قرار گرفت. بعد از آن نیترات آهن و نیترات روی نیز به آن اضافه شدند و پس از ۵ دقیقه اسیدسیتریک به محلول اضافه شد. با اضافه شدن اسید سیتریک PH محلول کاهش یافت ولی برای رسیدن PH به عدد ۷ از محلول آمونیاک ۳۰ درصد استفاده شد. پس از تبخیر آب، سل و ژل سبز رنگی به ترتیب مشاهده شدند. نمونه برای مدت ۱۲ ساعت در آون با دمای ۶۰ درجه سانتی‌گراد خشک شد و پس از آن دمای آون را بالا بردیم و شاهد سوختن نمونه در ۲۱۰ درجه سانتی‌گراد بودیم. سپس نمونه آسیاب شد و در سه دمای ۸۰۰، ۹۰۰ و ۱۰۰۰ درجه سانتی‌گراد تکلیس شد. آنالیز مغناطیسی نشان داد که بیشترین مغناطش اشباع M_s برای نمونه‌ی حرارت‌دهی شده در دمای ۱۰۰۰ درجه سانتی‌گراد است. لذا این دما برای ساخت نانوکامپوزیت استفاده شد.

ب) سنتز نانو ذرات هگزافریت باریم

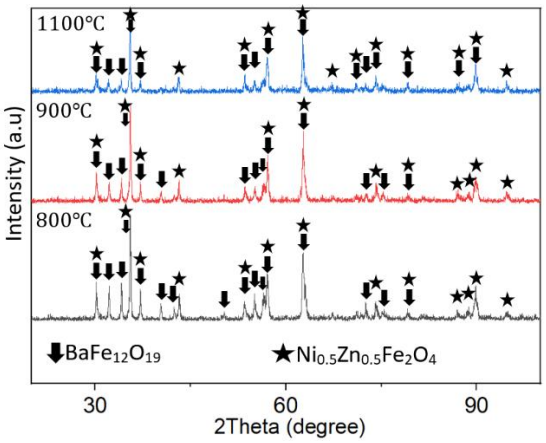
پس از توزین پیش‌ماده‌های اولیه یعنی $Ba(NO_3)_2.H_2O$ و $Fe(NO_3)_3.9H_2O$ و اسید سیتریک به عنوان عامل کمپلکس ساز، هگزافریت باریم کاملا مشابه با فریت نیکل-روی سنتز شد. پس از آسیاب، نمونه در سه دمای ۹۰۰ و ۱۰۰۰ و ۱۱۰۰ درجه سانتی‌گراد تکلیس شد. نمونه‌ی تکلیس شده در دمای ۹۰۰ درجه سانتی‌گراد بیشترین میدان وادارندگی H_c را داشت و برای ساخت نانوکامپوزیت استفاده شد.

ج) ساخت نانوکامپوزیت $Ni0_{.5}Zn_{0.5}Fe_2O_4/BaFe_{12}O_{19}$

ساخت نانوکامپوزیت با نسبت مولی ۱:۱ در دستگاه بالمیل برای مدت ۵ ساعت و با سرعت ۳۰۰ دور بر دقیقه در محیط پلی ونیل الکل انجام شد. مخلوط به دست آمده در نهایت به قرص تبدیل شد و در دماهای ۸۰۰، ۹۰۰ و ۱۱۰۰ حرارت‌دهی شد.

بررسی نتایج

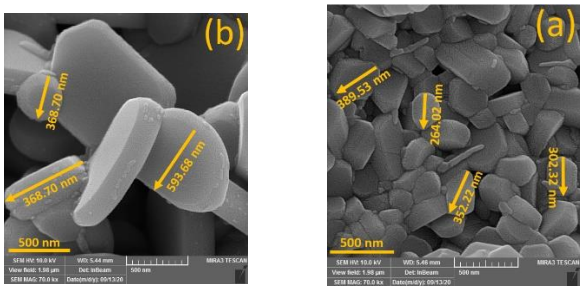
آنالیز XRD در شکل۱ مربوط به سه نمونه حرارت‌دهی شده در دمای ۸۰۰ و ۹۰۰ و ۱۱۰۰ است که با a و b و c مشخص شده است. در تمام نمونه‌ها حضور هم‌زمان پیک‌های مربوط به هگزافریت باریم (با شماره کارت ۹۶-۹۰۰-۸۶۴۲) و فریت نیکل-روی (با شماره کارت ۹۶-۹۰۰-۹۹۲۱) نمایانگر حضور هر دو فاز در نمونه است. در پژوهش‌های دیگران نیز حضور هم زمان هر دو فاز مشخص است[6]. بررسی‌های بیشتر نشان می‌دهد که حرارت-دهی فقط باعث تغییر در مقدار هر فاز می‌شود. این اندازه‌گیری‌ها که از مقایسه شدت پیک‌ها با پیک‌های استاندارد حاصل می‌شود، نشان داد که هیچ پیک اضافی از ناخالصی و فازهای ثانویه وجود ندارد. لذا شرایط سنتز نمونه به صورت ایده‌آل انجام شده است. اندازه تقریبی کریستالیت‌ها با کمک روش شرر (رابطه۱) نیز بدست آمد. این بررسی نشان داد با افزایش دما اندازه کریستالیت‌ها ابتدا افزایش و سپس کاهش می‌یابد. اندازه‌ی کریستالیت‌ها در دماهای ۸۰۰، ۹۰۰ و۱۱۰۰ درجه سانتی‌گراد به ترتیب ۶۰.۵، ۷۰.۶ و ۴۲.۴ نانومتر بدست آمد.



شکل۱: طیف XRD برای نانوکامپوزیت $Ni_{0.5}Zn_{0.5}Fe_2O_4/BaFe_{12}O_{19}$ تکلیس شده در دماهای مختلف

$$D = \frac{0.9 \times \lambda}{\beta \times Cos\theta} \quad (1)$$

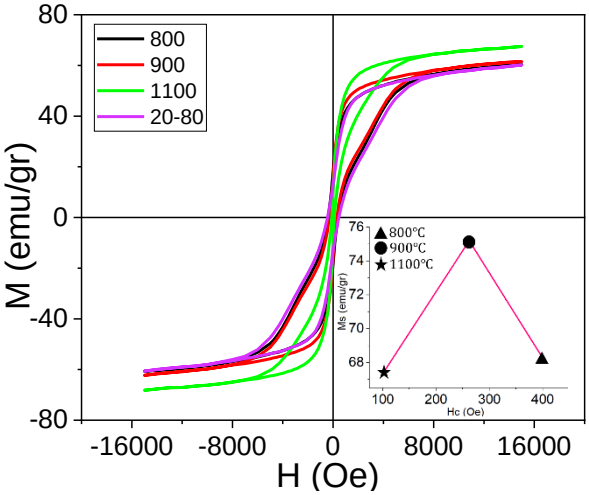
تصاویر میکروسکوپی برای نمونه‌های تکلیس شده در دمای ۹۰۰ و ۱۱۰۰ درجه سانتی‌گراد در شکل۲ نشان داده شده‌اند. در این تصاویر وجود هردو فاز کاملا مشخص است. ذرات شش‌ضلعی و بزرگ‌تر هگزافریت باریم و ذرات کروی و کوچک‌تر فریت نیکل-روی هستند. با افزایش دمای تکلیس بلورینگی هردو فاز نیز افزایش می-یابد. افزایش دما در ۱۱۰۰ درجه سانتی‌گراد فاز هگزاگونال را به شکل صفحه‌ای در آورده است. در هر دو دمای ۹۰۰ و ۱۱۰۰ درجه سانتی‌گراد اندازه ذرات با شرط ایجاد جفت تبادل مغناطیسی سازگار نیست، درنتیجه انتظار داریم خاصیت تبادل فنر در نمونه‌ها دیده شود. شرط ایجاد جفت تبادل مغناطیسی تقریبا دو برابر بودن میانگین اندازه ذرات فاز نرم نسبت به عرض دیواره دامنه فاز سخت است. از آنجا که عرض دیواره دامنه فاز سخت تقریبا ۹ نانومتر است، اندازه ذرات فاز نرم حداکثر باید ۱۸ نانومتر باشد. در حالیکه برای هردو دما این مقدار بین ۲۰۰ تا ۴۰۰ نانومتر بدست آمده است.



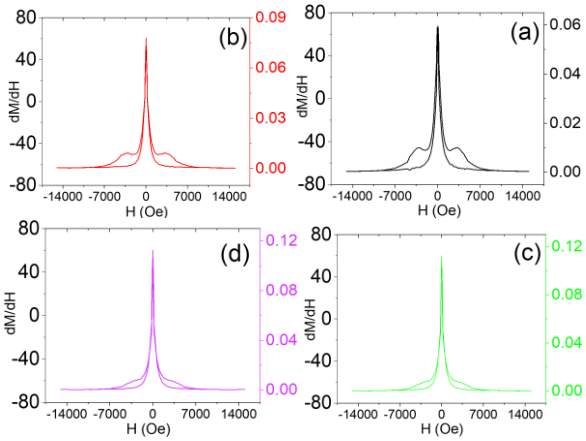
شکل۲: تصاویر SEM از نانوکامپوزیت هگزافریت باریم/فریت نیکل-روی در دماهای a) ۹۰۰ و b) ۱۱۰۰ درجه سانتی‌گراد در مقیاس ۵۰۰ نانومتر

در شکل۳ منحنی‌های پسماند نانوکامپوزیت نشان داده شده است. باریک شدن منحنی در میدان‌های کم و پهن‌تر شدن آن در میدان‌های بالا، نشان‌دهنده خاصیت تبادل فنر است. به عبارتی در میدان‌های کم فاز نرم مغناطیسی و در میدان‌های بالا فاز سخت مغناطیسی نقش غالب را دارند. با تغییر میدان این دو فاز مغناطیسی نتوانسته‌اند با یکدیگر جفت شوند و شاهد اعوجاج در منحنی هستیم. در شکل الحاقی۳ تغییرات M_s و H_c تصویر شده است. با افزایش دما میدان وادارندگی رو به کاهش است و مغناطش اشباع با افزایش دما تا ۹۰۰ درجه سانتی‌گراد افزایش یافته و پس از آن کاهش یافته است. همچنین تغییر نسبت مقدار فاز نرم به سخت نیز بررسی شده است. با کاهش مقدار فاز نرم شاهد جفت شدگی در نانوکامپوزیت هستیم. منحنی‌های dM/dH در شکل۴ رسم شده‌اند. همانطور که مشخص است، در H=0 دو قله کاملا بر هم منطبق‌اند اما وجود دوقله دیگر در میدان‌های بزرگ‌تر گویای وجود دوفاز به طور همزمان در نمونه

و ساز و کار تبادل فنر است. هرچه مقدار فاز نرم کمتر می‌شود قله‌هایی که در میدان‌های بالا وجود دارند محوتر می‌شوند.



شکل۳: حلقه‌های پسماند نانوکامپوزیت هگزافریت باریم/فریت نیکل-روی که در دماهای مختلف و نسبت فاز نرم:سخت متفاوت سینتر شده‌اند.



شکل۴: منحنی‌های dM/dH برای نانوکامپوزیت هگزافریت باریم/فریت نیکل-روی سینتر شده در دماهای a) ۸۰۰ b) ۹۰۰ و c) ۱۱۰۰ درجه سانتی‌گراد و d) نمونه سنتز شده با نسبت ۸۰:۲۰ فاز S:H

نتیجه‌گیری

در این پژوهش ترکیبی با خاصیت تبادل فنر با استفاده از نانوکامپوزیت $Ni_{0.5}Zn_{0.5}Fe_2O_4/BaFe_{12}O_{19}$ که با روش سل-ژل احتراقی در دو مرحله سنتز شد، مورد بررسی قرار گرفت. همچنین اثر دما در تشکیل نانوکامپوزیت نیز مطالعه شد. آنالیز پراش اشعه ایکس نشان داد هر دو فاز به صورت همزمان در نمونه وجود دارند. روش تقریبی شرر نشان داد اندازه کریستالیت‌ها تا دمای ۹۰۰ درجه سانتی‌گراد افزایش و سپس کاهش می‌یابد. آنالیز SEM افزایش اندازه نانوذرات را با افزایش دما نشان داد. میانگین اندازه ذرات در دو دمای ۹۰۰ و ۱۱۰۰ درجه سانتی‌گراد و مقدار تقریبی اندازه‌ی کریستالیت‌ها در آنالیز XRD نشان داد احتمال جفت شدگی مغناطیسی بین دو فاز نرم و سخت بسیار اندک است. میدان وادارندگی، H_c، نمونه با افزایش دما کاهش می‌یابد که به افزایش اندازه ذرات مربوط است. مغناطش اشباع نمونه نیز تا دمای ۹۰۰ درجه سانتی‌گراد افزایش و سپس کاهش می‌یابد. شکل کمر زنبوری منحنی‌های پسماند در این نمونه نمایانگر شکل‌گیری حالت تبادل فنر است. در هیچکدام از دماهای مورد بررسی در این پژوهش حالت جفت تبادل مغناطیسی مشاهده نشد. دلیل عدم مشاهده جفت تبادل مغناطیسی به اندازه ذرات فاز نرم و سخت مغناطیسی برمی‌گردد. بهترین حالت مغناطیسی (بیشترین مقدار $(BH)_{max}$) به نمونه تکلیس شده در دمای ۹۰۰ درجه سانتی‌گراد اختصاص دارد.

منابع و ماخذ

[1] M. Chithra, C. N. Anumol, B. Sahu, and S. C. Sahoo, “Exchange spring like magnetic behavior in cobalt ferrite nanoparticles,” *J. Magn. Magn. Mater.*, vol. 401, pp. 1–8, Mar. 2016, doi: 10.1016/j.jmmm.2015.10.007.

[2] M. A. Almessiere, Y. Slimani, and A. Baykal, “Exchange spring magnetic behavior of Sr0.3Ba0.4Pb0.3Fe12O19/(CuFe2O4)x nanocomposites fabricated by a one-pot citrate sol-gel combustion method,” *Journal of Alloys and Compounds*, vol. 762. pp. 389–397, 2018. doi: 10.1016/j.jallcom.2018.05.232.

[3] S. Manjura Hoque *et al.*, “Exchange-spring mechanism of soft and hard ferrite nanocomposites,” *Mater. Res. Bull.*, vol. 48, no. 8, pp. 2871–2877, 2013, doi: 10.1016/j.materresbull.2013.04.009.

[4] A. Poorbafrani, H. Salamati, and P. Kameli, “Exchange spring behavior in Co0.6Zn0.4Fe2O4/SrFe10.5O16.75 nanocomposites,” *Ceramics International*, vol. 41, no. 1. pp. 1603–1608, 2015. doi: 10.1016/j.ceramint.2014.09.097.

[5] R. Xiong, W. Li, C. Fei, Y. Liu, and J. Shi, “Nanocomposites Synthesized By a Combustion Method,” *Ceramics International*. pp. 1–5, 2016. [Online]. Available: http://dx.doi.org/10.1016/j.ceramint.2016.04.114

[6] A. R. Ahmad, N. M. Saiden, and M. S. Mamat, “Phase Distribution and Magnetic Properties of Mechanically Alloyed Hard/Soft Ferrite Nanocomposites,” *J. Supercond. Nov. Magn.*, vol. 30, no. 11, pp. 3097–3102, 2017, doi: 10.1007/s10948-017-4102-9.

مشخصه یابی ساختاری و مغناطیسی نانوکپسول Fe_3O_4 با سورفکتانت مغناطیسی $Co(AOT)_2$

رستم آبادی، ابراهیم[۱و۲]؛ قربانی، شعبان رضا [۱]؛ عربی، هادی [۱]

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

[۲] گروه فیزیک، دانشگاه پیام نور، تهران

چکیده

مایسل‌های مغناطیسی به عنوان ساختارهای جدید و قابل کنترل، خواص مغناطیسی قابل توجه نشان می دهند. در این پژوهش مایسل مغناطیسی $Co(AOT)_2$ و نانو ذره Fe_3O_4 با پوشش سیتریت به ترتیب به روش مایع یونی (ILs) و سولوترمال سنتز شد. مایسل‌ها به عنوان نانوکپسول سطحی خواص نانوذره Fe_3O_4 را تحت تاثیر قرار می دهند. میکروامولسیون، حاوی نانو ذرات درون نانوکپسول پایدار شد. این ساختار نانوکپسول ، خواص پارامغناطیسی از خود نشان می دهد.

واژه های کلیدی: ***نانوکپسول مغناطیسی ،سورفکتانت مغناطیسی، نانوذره*** *Fe_3O_4 و سوپرپارمغناطیس.*

Structural and magnetic characterization of Fe_3O_4 nano-encapsulations by $Co(AOT)_2$ magnetic surfactant

Rostamabadi Ebrahim[1,2]; Ghorbani Shaban Reza[1]; Arabi Hadi[1]

[1] Department of Physics, Faculty of Science, Ferdowsi University of Mashhad, Mashhad
[2] Department of Physics, Payame Noor University, Tehran

Abstract

Magnetic micelles, as a new and controllable structure, show significant magnetic properties. In this study, magnetic micelles of $Co(AOT)_2$ and citrate-coated Fe_3O_4 nanoparticles are synthesized by Ionic Liquids (ILs) and Solvothermal method, respectively. Micelles like a nano-capsules affect the magnetic properties of Fe_3O_4 nanoparticles. The microemulsion, containing nanoparticles inside the micelle, has been stabilized. This nano-capsule structure exhibits paramagnetic properties.

***Keywords**: nano-encapsulations, magnetic surfactant, Fe_3O_4 nanoparticle, superparamagnetic*

PACS No. 75-81

مقدمه

سورفکتانت‌های مغناطیسی، خوشه‌های کوچک اتمی (n = 10-1000 اتم)، دارای ویژگی های ترکیبی بین محدوده مولکولی و حالت جامد حجیم هستند[1]. خواص ابرپارامغناطیسی با پراکندگی ذرات کلوئیدی تک حوزه ای (فرو سیالات) در مایع منجر به کاربردهای زیست پزشکی زیادی شده است. اثرات اندازه را می توان در سیالات فاقد نانو ذرات از طریق طراحی میسلها و میکروامولسیونهای متشکل از سورفاکتانتهای مغناطیسی مشاهده کرد [2]. این سیستم ها فاصله بین نانومغناطیس های مولکولی (n <30) و نانوذرات مغناطیسی (MNPs n = 100-1000) را پر می کند و امکان کنترل دقیق بر روی خوشه n را فراهم می کنند[3]. میکروامولسیون های میسل دارای مزایای بیشماری نسبت به فروسیالات ذرات سنتی هستند، از جمله قابلیت تنظیم در جا از طریق ترکیب، ساخت آسان، پراکندگی یکنواخت، پایداری خوب و همچنین حل شدن افزودنی های آبگریز است.

با این حال ، همیشه تصور می شد که مراکز فلزی جدا گانه، فاقد برهم کنش های بلند برد و برهمکنش های لازم برای فعال شدن خواص مغناطیسی هستند، بنابراین مغناطیس ذاتی میکروامولسیون ها کمتر مورد بررسی قرار گرفته شده است. براون و همکاران خواص مغناطیسی میکروامولسیون با سورفکتانت آنیونی Aerosol-OT (AOT) و فلزات واسطه با اوربیتالهای d و f را مورد بررسی قرار دادند [4]. خواص مغناطیسی مایسل های معکوس (مایسل ایجاد شده از میکروامولسیون های آب در روغن) حاصل از سورفکتانت های مغناطیسی بسیار بیشتر از حالت خشک

این سورفکتانت ها گزارش شد. این مایسل ها در دمای اتاق خواص ابرپارامغناطیس از خود نشان می دهند.

با توجه به خواص مغناطیسی متفاوت این سورفکتانت ها در ساختار های مایسلی و میکروامولسیونی مطالعه در این زمینه می تواند اطلاعات بسیار مفیدی از نحوه خود آرایی و برهمکنش های موجود در سطح، در اختیار ما قرار دهد. مایسل معکوس ایجاد شده از سورفکتانت های مغناطیسی در واقع یک لایه سطحی از اتمهای مغناطیسی است. برای بررسی خواص این لایه سطحی، نانوکپسول (مایسل معکوس) شامل نانوذرات مغناطیسی مگنیت اکسید آهن III با پراکندگی بالا در آب مورد بررسی قرار گرفت. در این این کار مشخصه یابی ساختاری و مغناطیسی نانوکپسول مغناطیسی (پوسته) از سورفکتانت $Co(AOT)_2$ و نانوذره مغناطیسی (هسته) را بررسی کرده‌ایم.

سنتز و کار آزمایشگاهی

سنتز سورفکتانت مغناطیسی

مواد: سدیم بیس (۲-اتیل هگزیل) سولفوسوکسینات (AOT، ۹۹٪) سیگما ، کلرید کبالت – شش آبه، کلرید نیکل شش آبه و کلرید منگنز دوآبه همگی از شرکت مرک، آب دیونیزه ، دی کلرومتان (مجللی) و اتانول مطلق(پارس الکل) تهیه گردید.

سنتز: $Co(AOT)_2$ به روش مایع – یونی تهیه شد. کلرید فلز دو ظرفیتی در آب، و سورفکتانت NaAOT در اتانول با مولاریته یکسان حل شدند. به نسبت استوکیومتری فلز و AOT (فلز ۲:۱ AOT) با هم ترکیب و محلول به مدت ۳ ساعت هم زده شد. سپس سورفکتانت های مغناطیسی حاصل در دمای ۸۰ درجه سانتیگراد به مدت ۲ روز خشک شدند. در نهایت سورفکتانت در ۵ میلی لیتر دی کلرومتان خشک حل شد. با سانتریفیوژ مکرر ۸۰۰۰ دور در دقیقه، سورفکتانت خالص شدند و به مدت ۲ روز در در دمای ۸۰ درجه سانتیگراد خشک شد.

سنتز نانوذره Fe_3O_4 به روش سولوترمال

مواد: استات سدیم بی آب (*NaOAc*)، کلرید آهن بی آب ($FeCl_3$)، دی اتیلن گلیکول (DEG)، تری سدیم سیترات (Na_3Cit) همگی از شرکت مرک و اتانول مطلق (C_2H_5OH) شرکت پارس الکل تهیه گردید.

برای سنتز تک مرحله ای نانوذرات Fe_3O_4 ، ابتدا ۱۲۰ mL محلول ۱۰۰mM $FeCl_3$ در DEG تهیه شد. این محلول همزده شد تا به یک محلول شفاف تبدیل شود. سپس Na_3Cit را به محلول اضافه کرده تا به چگالی ۴۰mM برسیم. مخلوط در دمای ۶۰ درجه سانتیگراد همراه با هم زدن حرارت داده شد تا محلول شفافی تشکیل شود. سپس NaOAc به محلول تا چگالی ۳۰۰mM اضافه گردید. مخلوط به یک ظرف تفلون در داخل اتوکلاو فولاد منتقل، و درب آن در حضور هوا مهر و موم شد، سپس در دمای ۲۰۵ درجه سانتیگراد به مدت ۶ ساعت در آون نگهداری شد. پس از خنک شدن طبیعی تا دمای اتاق، محصولات سیاه رنگ با سانتریفیوژ (۸۰۰۰ دور در دقیقه، ۵۰ دقیقه) جمع آوری و سه بار با اتانول شسته شدند. سپس رسوب به دست آمده در دمای ۶۰ درجه سانتی گراد خشک شد.

سنتز میکروامولسیون

مواد: آب دیونیزه، n-heptane مرک به عنوان روغن، و سورفکتانت های مغناطیسی پایه AOT و NaAOT مرک

سنتز نمونه میکرامولسیونی: برای تهیه نمونه ها با ساختار مایسل معکوس از دو عامل کنترلی w و m_{fd} استفاده گردید. چون سورفکتانت می تواند حاوی مقادیر متفاوتی از آب باشد بنابراین:

$$w_{total} = w_{add} + \frac{n}{2} \qquad (۱)$$

$$w_{add} = \frac{[H_2O]_{add}}{[AOT]} \qquad (۲)$$

مقادیر با توجه به غلظت نصف AOT تعریف می شود. همچنین کسر جرمی مایسل معکوس نیز با وجود نانوذره به صورت زیر تعریف می شود:

$$m_{fd} = \frac{(m_{water}+m_{particle}) + m_{surfactant}}{m_{oil} + (m_{water}+m_{particle}) + m_{surfactant}} \qquad (۳)$$

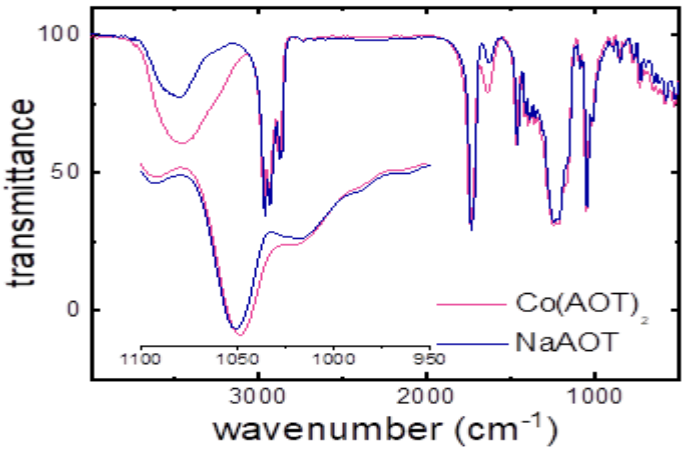
مشخصه یابی و تحلیل داده ها

به منظور بررسی پیوندهای سورفکتانت $Co(AOT)_2$ مشخصه یابی FTIR انجام شد. قله های بازه cm^{-1} ۳۰۵۰-۳۷۵۰ را می توان به کشش O-H آب در نمونه ها اختصاص داد. قله نشان دهنده میزان آب باقی مانده در فرآیند خشک کردن است. قله

هـای منطقـه cm^{-1} ۱۰۶۰-۱۰۳۰، بـه حالـت کشـش سـولفونات متقارن (سر قطبی سورفکتانت) اختصاص دارد [5]. تغییر این قلـه مربوط به تعامل سولفونات با گونه های شیمیایی مختلف اسـت. بـه همین دلیل ، این قله برای به دست آوردن اطلاعات کیفی در مـورد گـروه سـولفونات اسـتفاده مـی شـود. شـکل ۱ طیـف FTIR، $Co(AOT)_2$ و NaAOT را نشان می دهد. هر دو طیف مشـابه بـه نظر می رسند. بزرگنمایی از طیـف FTIR مربـوط بـه طـول مـوج پیوند فلز و سورفکتانت نشان داده شده است. نتایج محاسبه میـزان آب موجود در هر مولکول و جرم مولکولی هـر سـورفکتانت بدسـت آمد. سطح زیر نمـودار قلـه $A_i(a,u)$، مربـوط بـه منطقـه cm^{-1} ۳۷۵۰-۳۰۵۰ ، در نمودار جذب FTIR برای Co و Na مقـدار آب موجود در سورفکتانت ها AOT بدست آمد که نتایج آن در جـدول ۱ آمده است.

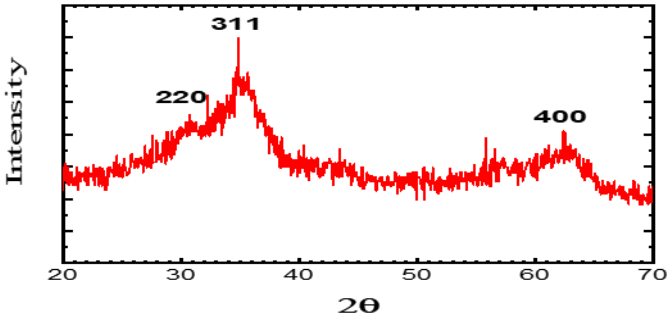
جدول ۱: نتایج محاسبه مقدار آب باقی باقیمانده به در سورفکتانت

سورفکتانت	$A_i(a,u)$	n	M_r(gr/mol)
NaAOT	۳۴.۸۲۹	۰.۵۱	۴۴۴.۵۶
$Co(AOT)_2$	۴۷.۸۹۸	۰.۷۱	۹۱۳.۳۲



شکل ۱ : طیف FTIR، $Co(AOT)_2$ و NaAOT . قسمت بزرگ نمایی شده مربوط به پیوند فلز و سورفکتانت را نشان می دهد.

نـانوذره Fe_3O_4 بـا روش سـولوترمال در دمـای ۲۰۵ درجـه سانتیگراد، زمان ۶ ساعت درجه سنتز گردید. بـرای تاییـد سـاختار تشکیل شده آنـالیز XRD انجـام شـد. نتیجـه XRD در شـکل ۲ نشان داده شده است. نتایج با گزارش هوا شـن و همکـاران توافـق خوبی با ذره به اندازه ۳٫۱ nm، را نشان مـی دهـد[6]. قلـه هـای تشکیل یافته درستی ساختار و پهن شدگی این قله ها هـم کوچـک بودن ذره را نشان می دهد. با استفاده از روش دبای- شـرر و نـرم افزار x-pert اندازه بلورک ها ۴ نانو متر بدست آمد.



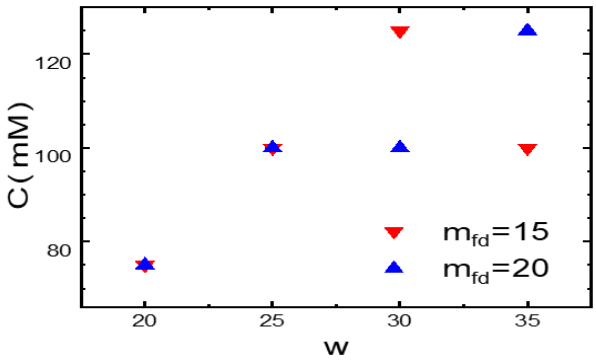
شکل۲: طیف XRD، نانوذره Fe_3O_4 پوشش داده شده با یون سیتریت

نتایج نشان داد که نـانوذره Fe_3O_4 پوشـش داده شـده بـا یـون سیتریت، توزیع بسیار پایداری در آب دیـونیزه (در حـدود ۳ مـاه) دارد.

قطر هیدرودینامیکی نانوذره در آب دیونیزه و میکروامولسیون آب در روغـن (n-heptan) بـا w=۲۵ ، از مشخصـه یـابی DLS بدست آمد. بر اسـاس نتـایج بدسـت آمـده از DLS، انـدازه قطـر هیدرودینامیکی نانو ذرات در آب دیونیزه حدود ۱۰-۱۶ نـانومتر و نمونه میکروامولسیون مایسلهایی با اندازه ۴۰-۶۵ نانومتر را نشـان مـی دهنـد. در هـر دو نمونـه بیشـترین تعـداد ذارت در محـدوده مشخصی است، به بیان دیگر هر دو نمونه دارای توزیع یکنـواختی از ذرات و مایسل ها هسـتند. بـه دلیـل پیـک هـای مشـخص در مشخصه یابی DLS شکل کروی ذرات و مایسل ها تایید گردیـد. نتایج بدست آمده از تعیین اندازه میکروامولسیون نشان می دهد که نانوذرات به صورت مجزا در نمونه وجود ندارد، به بیان دیگر تایید کننده قرار گرفتن نانوذرات در درون کپسول های مایسل معکـوس هستند.

برای بررسی پایداری از نمونـه نـانوذره توزیـع شـده در آب و میکروامولسـیون پایـدار (مشـاهده شـده بـا چشـم) (نمونـه میکروامولسیون با w=۲۵ و چگالی نانوذره ۱۰۰ mM) پتانسیل زتا گرفته شد.. پتانسیل زتا در pH= ۶٫۳ ، برای نـانوذره را ۳۰mV- و مایسل معکوس ۶۰ mV- را نشان می دهد. بطوریکه بار الکتریکی بیشتری در اطراف مایسل معکوس نسبت به نانو ذره مشاهده شـده است. که نتیجه کاهش نیروی سطحی ، توسط سورفکتانت باشد.

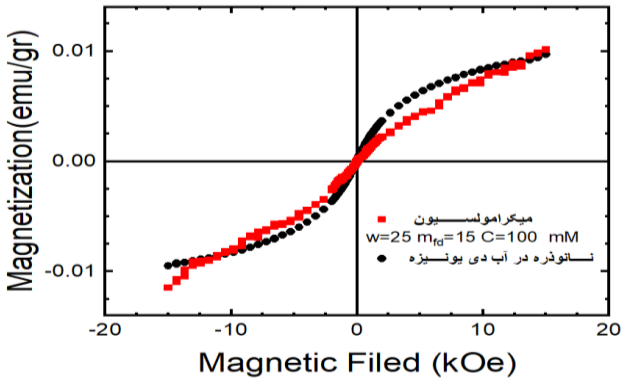
ساختارهای میکروامولسیون ، ساختارهای قابل کنترل در اندازه، شکل و تعداد هستند. بررسی پایدار ساختار نانوذره در نانوکپسول با تغییر پارامترهای موثر در میکروامولسیون w و m_{fd} انجام گرفت. مقادیر مربوط به w، به هویت یون فلز بستگی دارد. برای بررسی پایداری، w های مختلف در دو کسر جرمی ۱۵٪ و ۲۰٪ با تغییر غلظت نانو ذره مورد بررسی قرار گرفت و نتایج آن در شکل ۴ آورده شده است. با افزایش w میزان غلظت نانوذره نیز افزایش یافته است. در حالی که تغییر کسر جرمی تاثیر کمتری بر پایداری این ساختار دارد. خطا در نمونه با w= ۳۵ بدلیل وجود نم در نمونه است که میزان w در واقع بیشتر از مقدار محاسبه است.



شکل ۴ : تغییرات نمونه های پایدار با نمودار w-c

خواص مغناطیسی نمونه های مختلف نانو ذره توزیع شده در آب دیونیزه و میکروامولسیون تشکیل شده از سورفکتانت NaAOT و $Co(AOT)_2$ توسط مغناطیس سنجی ارتعاشی (*VSM*) اندازه گیری گردید. نتایج مغناطیسی نمونه ها در شکل ۵ نشان داده شده اند. همان طور که در شکل مشاهده می شود، نانوذره اکسید آهن تهیه شده از روش سولوترمال رفتار ابرپارامغناطیسی با مغناطش اشباع ۶٫۳۵ emu/gr از خود نشان می دهد. شکل ۵، نمونه نانوذره با غلظت ۱۵ mM توزیع شده در آب دیونیزه مورد بررسی قرار گرفت. نانو ذرات ضمن پایداری خوب در این غلظت رفتار ابرپارامغنطیسی با مغناطش اشباع برابر ۰٫۰۱ emu/gr از خود نشان می دهد.

ساختار میکروامولسیونی با هر دو سورفکتانت NaAOT و $Co(AOT)_2$ بررسی شد. نمونه با سورفکتانت غیر مغناطیسی، ناپایدار به طوریکه نانوذرات در آن ته نشین می شوند، اما رفتاری ابرپارامغناطیس ضعیف تر به نسبت جرم مغناطیسی نانوذره از خود نشان می دهد. شکل۵ نمودار H-M ، نانوکپسول حاوی نانوذره پایدار شده با w= ۲۵ ، m_{fd} =۱۵ و غلظت ۱۰۰ mM در بازه میدان اعمالی رفتار پارامغناطیسی که از تاثیر دو فاز ترکیب مغناطیسی مشاهده شد. در نمونه نانوکپسول مغناطش اشباح اندکی افزایش یافته، ۰٫۰۱۱ emu/gr، اما تغییر رفتار به پارامغناطیس (ابرپارامغناطیسی ضعیف) می تواند از فرونشانی خواص مغناطیسی ابرپارامغناطیسی نانو ذره توسط سطح نانوکپسول باشد.



شکل ۵: نمودار M-H نانو ذره توزیع شده در آب دیونیزه و نانوکپسول حاوی نانوذره

جمع بندی

نانوکپسول مغناطیسی حاوی نانو ذره دارای ساختاری پایدار در میکروامولسیون آب در روغن است. نانوکپسول به عنوان یک پوسته مغناطیسی نانوذره Fe_3O_4 را پوشش می دهد. پایدار این نانوکپسول به خواص الکتریکی یون Co و میزان یون در پوشش نانوذره بستگی دارد. در w بالاتر نانوکپسول ناپایدار تر می شود. فرونشانی خاصیت ابرپارامغناطیس متاثر از یون Co در سطح نانوکپسول است که با تغییر این یون می توان نتایج مفیدی بدست آورد.

مرجع‌ها

[1] V. Pillai, P. Kumar, M.J. Hou, P. Ayyub, D.O. Shah, Preparation of nanoparticles of silver halides, superconductors and magnetic materials using water-in-oil microemulsions as nano-reactors, Advances in Colloid and Interface Science. 55 (1995) 241–269. https://doi.org/10.1016/0001-8686(94)00227-4.

[2] P. Brown, A. Bushmelev, C.P. Butts, J. Cheng, J. Eastoe, I. Grillo, R.K. Heenan, A.M. Schmidt, Magnetic Control over Liquid Surface Properties with Responsive Surfactants, Angewandte Chemie International Edition. 51 (2012) 2414–2416. https://doi.org/10.1002/anie.201108010.

[3] D. Gatteschi, M. Fittipaldi, C. Sangregorio, L. Sorace, Erforschung des Niemandslandes zwischen molekularen Magneten und magnetischen Nanopartikeln, Angewandte Chemie. 124 (2012) 4876–4885. https://doi.org/10.1002/ange.201105428.

[4] P. Brown, C.P. Butts, J. Eastoe, S. Glatzel, I. Grillo, S.H. Hall, S. Rogers, K. Trickett, Microemulsions as tunable nanomagnets, Soft Matter. 8 (2012) 11609–11612. https://doi.org/10.1039/c2sm26827b.

[5] A.H. Morrish, S.P. Yu, Magnetic Measurements on Individual Microscopic Ferrite Particles Near the Single-Domain Size, Physical Review. 102 (1956) 670–673. https://doi.org/10.1103/PhysRev.102.670.

[6] L.H. Shen, J.F. Bao, D. Wang, Y.X. Wang, Z.W. Chen, L. Ren, X. Zhou, X. Bin Ke, M. Chen, A.Q. Yang, One-step synthesis of monodisperse, water-soluble ultra-small Fe 3O4 nanoparticles for potential bio-application, Nanoscale. 5 (2013) 2133–2141. https://doi.org/10.1039/c2nr33840h.

مطالعه‌ی عددی تخریب بافتهای سرطانی با استفاده از فرآیندگرمای‌القایی در دوبُعد

شکری، عبدالجبار[۱]؛ سعیدیان، شهریار[۱]؛ عزیزی، آرام[۱]؛ حیدری، حامد[۲]؛ گیلانی، زهره سیما[۱]

[۱] دانشکده علوم پایه، دانشگاه پیام نور، تهران

[۲] دبیرستان شهید محمد منتظری، اداره‌ی آموزش و پرورش شهرستان ورامین، تهران

چکیده

در این مقاله با استفاده از معادله‌ی گرمای زیستی پنس توزیع دما ناشی از نانو ذرات مغناطیسی تزریق شده در تومور، جهت تخریب بافت سرطانی برای چهار فرکانس ۱۵۰، ۳۰۰، ۴۵۰ و ۶۰۰ کیلوهرتز به روش عناصر متناهی و به کمک نرم افزار کامسول در دو بعد شبیه‌سازی شده است. نتایج نشان می‌دهد، در فرکانس ۱۵۰ کیلوهرتز میزان تخریب کامل بافت تومور نسبت به دیگر فرکانس‌ها کمتر است و در مقابل کمترین آسیب به بافت سالم وارد می‌شود. همچنین مشاهده شد که افزایش فرکانس باعث افزایش دما در مرز بافت سالم و تومور می‌شود بنابراین در فرکانس های بالاتر کسر بیشتری از بافت های سالم آسیب می بینند.

واژه های کلیدی: *گرما افزایی، مطالعه‌ی عددی، بافت سالم، بافت تومور.*

Numerical study of cancer tissue damage using induction heat process in two-dimensional

Shokri, AbdolJabbar[1]; Saeidian Shahriar[1]; Azizi, Aram[1]; Heidari, Hamed[2]; Gilani, Zohre Sima [1]

[1] *Department of science, University of Payamenoor, Tehran,Iran*

[2] *High school Shahid Mohammad Montazeri, Department of education, Varamin Branch, Tehran*

Abstract

In this paper, using the penne's bioheat equation of temperature distribution caused by magnetic nanoparticles injected into the tumor, to destroy cancerous tissue for four frequencies of 150, 300, 450 and 600 kHz by finite element method and with the help of Comsol Multiphysics software is simulated in two-dimensional. The results show that at a frequency of 150 kHz, the fraction of complete damage of tumor tissue is less than other frequencies, and in contrast, healthy tissue suffers the least damage. It was also observed that increasing the frequency increases the temperature at the boundary of healthy tissue and tumor, so at higher frequencies a greater fraction of healthy tissue is damaged.

Keywords: hyperthermia, numerical study, healthy tissue, tumor tissue

PACS No.87,

مقدمه

درحالت طبیعی سلول‌های جدید در بدن بطور منظم جایگزین سلول‌های پیر و فرسوده می‌شوند. اگر در این فرآیند جایگزینی، ناهنجاری اتفاق بیفتد، منجر به تومورهای سرطانی می‌گردد. روشهای مختلفی برای درمان سرطان وجود دارد که مرسوم ترین آنها عبارتند از: جراحی، شیمی درمانی و رادیوتراپی که هرکدام خطرات جانبی و محدودیت‌های خاص خود را دارند.

یکی دیگر ازروش‌های درمان سرطان که در حال حاضر کاربرد زیادی در درمان سرطان دارد، روش گرماافزایی(هایپرترمیا[۱]) است. در این روش از راه‌های متفاوتی دمای بافت آسیب دیده را با ایجاد حرارت مصنوعی بالا می‌برند، که در واقع گرماافزایی مغناطیسی یکی از بهترین راه‌ها برای افزایش موضعی گرما در بافت‌تومور و به حداقل رساندن آسیب به بافت‌های سالم می‌باشد.

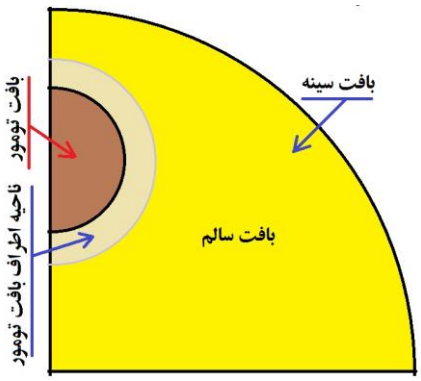
1. Hyperthermia

بنابراین گرما افزایی مغناطیسی یکی از روش‌های است که کاربرد زیادی در تخریب بافت سرطانی دارد. در این روش نانوذرات مغناطیسی مانند اکسید آهن به علت زیست سازگاری خوب به داخل تومور سرطانی تزریق می‌شود و با ایجاد یک میدان مغناطیسی متناوب با فرکانس بالا(چند صد کیلو هرتز) این نانوذرات از طریق القایی مغناطیسی به ارتعاش درآمده و گرما تولید می‌کنند، بنابراین باعث افزایش دمای بافت آسیب دیده می‌گردند [۱]. بنابراین، مزیت این روشن این است که با فعال‌سازی این نانوذرات به‌عنوان نانوگرم‌کننده‌ها، می‌توان دمای بافت سرطانی را با اعمال یا حذف میدان مغناطیسی متناوب خارجی کنترل کرد. یکی دیگر از کاربردهای گرما افزایی مغناطیسی داشتن عمق نفوذ کافی برای دسترسی بافتهای داخل بدن است. ویژگی این روش با حساسیت بالاتر سلول‌های تومور به افزایش دمای بالای ٤٢ درجه سانتی‌گراد به دست می‌آید، دمایی که در آن فرآیندهای آنزیمی طبیعی که سلول‌ها را زنده نگه می‌دارند از بین می‌روند، به طوری که امکان کشتن انتخابی آنها را فراهم می‌کند. با این حال، سادگی ظاهری این تکنیک مستلزم تحقق چندین راهکار برای به دست آوردن اثر درمانی مورد نظر است. برای کاربردهای زیست پزشکی، باید نانوذرات مغناطیسی انتخاب شوند که رفتار مغناطیسی فوق‌العاده‌ای از خود نشان دهند، به این معنی که با حذف میدان مغناطیسی اعمال‌شده، مغناطش بسرعت صفر شود[۲].

برای ایجاد میدان الکترومغناطیسی می‌توان از یک القاگر (پیچه) استفاده کرد[۳]. جریان الکتریکی متناوب درون این القاگر منجر به تولید میدان‌های مغناطیسی متغییر با زمان شده و باعث تولید گرما در نانوذرات تزریق شده در بافت تومور می‌گردد. با توجه به اینکه پیچه مورد نظرسه‌بُعدی و همچنین الگوی گرمای ایجاد شده در بافت های بدن به روش آزمون–خطا به لحاظ زمانی و اقتصادی مقرون به صرفه نیست، در نتیجه استفاده از شبیه‌سازی رایانه‌ای گزینه‌ای مناسب به‌نظر می‌رسد. در این مقاله یک توموسرطانی سینه که در عمق و با ابعاد مشخصی در نظر گرفته شده با استفاده از نرم افزار کامسول در دو بعد بررسی شده و بیشتر روی افزایش گرما در ناحیه تومور با استفاده از میدان مغناطیسی متناوب که باعث از بین رفتن بافتهای سرطانی می‌شود تمرکز شده است.

تعریف مسئله

برای حل مسئله فرض می‌شود که تومور کروی شکل و به شعاع ۱۰میلیمتر در عمق تقریبا ٦میلیمتر زیر لایه های درم، اپیدرم، هیپودرم و بافت مجاور پوست قرار دارد. در شکل۱ نمای از هندسه تومور در داخل بافت سینه انسان بصورت دوبعدی برای مدل سازی نشان داده شده است٤]. برای حل معادلات از روش عناصر متناهی و بسته‌ی نرم‌افزاری کامسول مولتی فیزیک، به دلیل توانای این نرم افزار در حل مسائل با فیزیک‌های مختلف از جمله معادله‌ی گرمای پنس، استفاده شده است. برای بدست آوردن نتایج بهتر فرض می‌شود که توزیع نانوذرات در بافت تومور یکنواخت است. همچنین برای تولید میدان مغناطیسی متناوب، از جریان۸۰۰ آمپری با چهارنوع فرکانس متفاوت(۱۵۰،۳۰۰،٤٥٠و٦٠٠ کیلوهرتز) استفاه شده است. جنس القاگر از مس، قطر تومور ۲۰ میلی‌متر و نانوذرات از جنس مگنتیک(Fe_2O_3) با قطر ۱۹ نانومتر می‌باشد.



شکل ۱: مدل سینه با تقارن محوری دو بعدی.

مدل ریاضی

معادله انتقال گرمایی زیستی پنس یک مدل حرارتی شناخته شده برای مطالعه دماهای گذرا در یک سیستم بیولوژیکی است. از این معادله برای مدل سازی انتقال گرما در بافت سینه استفاده شده است [٥]:

$$(\rho c)_t \frac{\partial T_t}{\partial t} = \nabla \cdot (k_t \nabla T_t) + Q_{perf} + Q_{met} + Q_{ext} \qquad (۱)$$

که در آن زیرنویس tبه بافت اشاره می‌کند. ρ چگالی، c ظرفیت گرمایی، kرسانندگی گرمایی، Tدما، tزمان، Q_{perf}پرفیوژن خون، Q_{met} منبع گرمای متابولیکی (برای بافت سالم برابر با W/m^3

۴۵۰ و برای بافت تومور $29000\,W/m^3$ و Q_{ext} منبع گرمای خارجی است. حرارت تولید شده در بافت تومور توسط نانوذرات مغناطیسی با رابطه زیر داده می‌شود[۶]:

$$p = \mu_0 \pi \chi_0 f H_0^2 \frac{2\pi f \tau}{1+(2\pi f \tau)^2} \qquad (۲)$$

که در آن μ_0 نفوذپذیری فضای آزاد، χ_0 پذیرفتار مغناطیسی، H و f دامنه و فرکانس میدان مغناطیسی متناوب و τ زمان واهلش مؤثر که با رابطه زیر داده می شود[۶]:

$$\tau^{-1} = \tau_N^{-1} + \tau_B^{-1} \qquad (۳)$$

که در آن τ_N و τ_B به ترتیب زمان واهلش نیل و زمان واهلش برونین بوده و به ترتیب دارای مقادیر $2.15\times10^{-6}s$ و $2\times10^{-2}s$ است. همچنین میزان تخریب بافت تومور از طریق انتگرال تخریب ($\Omega(t)$)، با استفاده از معادله آرنیوس مرتبه اول محاسبه شده است، که در آن رابطه بین مرگ بافت با دما و زمان درمان به صورت زیر داده می‌شود[۷]:

$$\Omega(t) = \int_0^t A e^{\frac{E_a}{RT}} dt \qquad (۴)$$

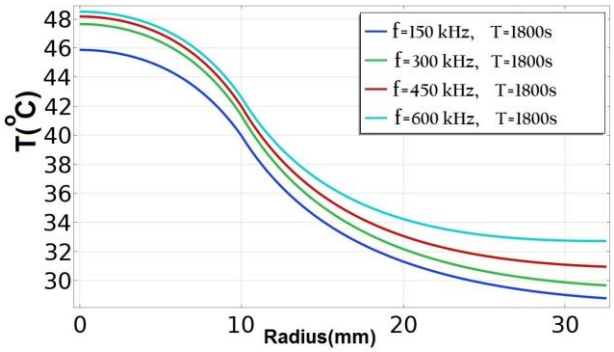
بطوری‌که $T(K)$ دمای محاسبه شده در داخل حوزه محاسباتی به دلیل گرمای RF، $t(s)$ زمان فرسایش، $A(s^{-1})$ فاکتور فرکانس($۱/۱۸\times۱۰^{۴۴}$)، $E_a(J/mol)$ انرژی فعال سازی برای واکنش تخریب($۳/۰۲\times۱۰^{۵}$) برگشت ناپذیر و R ثابت جهانی گازها(۸/۳۱۴۵) می‌باشد. سایر پارامترها در جدول ۱ نمایش یافته است.

جدول۱: مقادیر پارامترهای مورد استفاده.

بافت	گرمای ویژه(C) [J/kg.K])	چگالی(ρ) ([kg/m^3]	رسانندگی گرمایی (k) [W/m.K]
تومور	3500	1080	0.5107
سالم	3000	1080	0.4503

نتایج و بحث

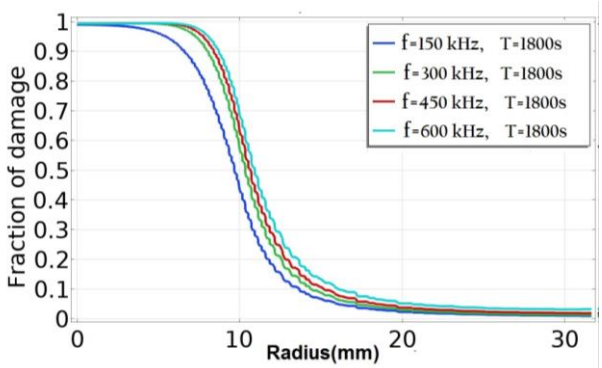
در شکل۲ نمودار توزیع تغییرات دمای در راستای شعاع برای چهار فرکانس مختلف نشان می‌دهد که به طور کلی دما در مرکز تومور در حالت بیشینه است و با فاصله گرفتن از مرکز تومور نمودار دمای به آرامی افت می‌کند و هرچه به مرز تومور و بافت سالم نزدیک می‌شویم، شیب افت دما بیشتر شده بطوری که در شعاع ۱۰ میلیمتری(مرز) این شیب شدیدتر می‌شود. همانطور که از شکل ملاحظه می‌شود با افزایش فرکانس دما افزایش پیدا می‌کند بطوریکه بیشترین دما در فرکانس ۶۰۰kHz اتفاق می‌افتد که مقدار این دما در حدود ۴۹ درجه سلسیوس می‌باشد. نکته‌ی قابل تأمل در این نمودار اختلاف بسیار کم مقدار گرمای بیشنه در فرکانسهای بالاتر از۱۵۰ کیلوهرتز می‌باشد. علاوه بر این نکته مهم، می‌توان مشاهده کرد که در فرکانس۱۵۰کیلوهرتز در مرز دما به زیر ۴۰درجه افت می‌کند بنابراین بافت سالم آسیب زیادی نمی‌بیند، اما در فرکانس‌های بالاتر، حتی در مرز دما بالای ۴۰درجه است و باعث می‌شود درصدی از بافت سالم هم تخریب شود.



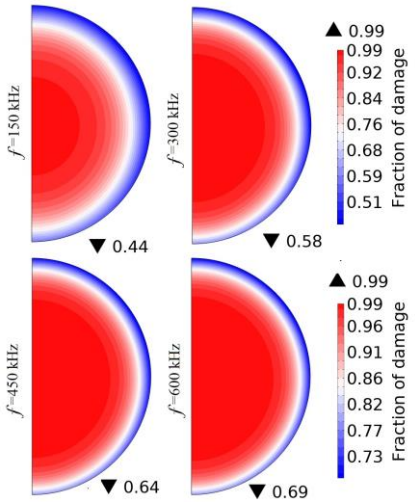
شکل ۲: نمودار تغییرات توزیع دمای در راستای شعاع تومور برای چهار فرکانس مختلف.

یکی از پارامترهای مهم در بررسی درمان تومورهای سرطانی درصد تخریب بافت معیوب می‌باشد (شکل‌های۳ و۴). در این قسمت پروفایل درصد تخریب بافت سرطانی از مرکز بافت به سمت خارج بر اساس شعاع برای چهار فرکانس متفاوت ترسیم شده است. لازم به ذکر است زمان اعمال میدان مغناطیسی به بافت ۳۰ دقیقه می‌باشد، به عبارتی دیگر، پروفایل درصد تخریب بافت بعداز۳۰ دقیقه استخراج شده است. شکل۳ نشان می‌دهد که هرچه فرکانس بیشتر شود احتمال اینکه بافتهای سالم هم آسیب ببینند در واقع بیشتر است. بنابراین در فرکانسهای پایینتر درصد تخریب در مرز کمتر می‌باشد. همچنین نتایج شکل۴ نشان می‌دهد الگوی تخریب در تومور بصورت متقارن نیست و در واقع میزان تخریب بافت به طرف مرز مشترک بافت سینه و بدن بیمار در حال جابجایی است. لازم به ذکر است در نزدیک مرز مشترک بافت

سالم و سرطانی کمترین کسر تخریب برای فرکانس ۱۵۰kHz بوده که برابر با ۰/٤٤ می‌باشد در حالی که این مقدار در فرکانس ٦۰۰kHz به میزان ۰/٦۹ می‌رسد.

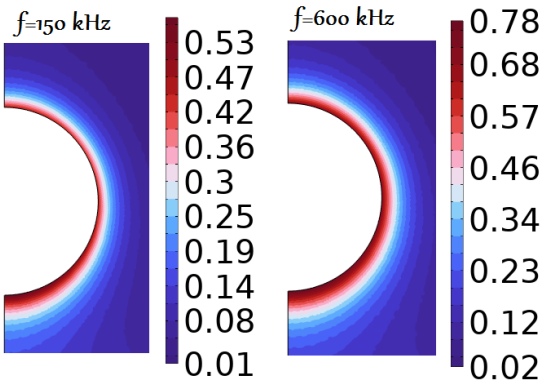


شکل ۳: درصد تخریب بافت تومور از مرکز به طرف خارج آن برای چهار فرکانس متفاوت.



شکل ٤: الگوی کسر تخریب تومور برای چهار فرکانس متفاوت دو بعدی.

یکی از موارد مهم در درمان تومورهای سرطانی با استفاده از نانوذارت مغناطیسی، جلوگیری از تخریب بافت سالم می‌باشد. بنابراین در شکل۵ میزان آسیب دیدگی در بافت سالم مجاور با تومور برای هر چهار فرکانس مورد بررسی قرار گرفت. نتایج نشان می‌دهد افزایش فرکانس می‌تواند بافت سالم را در معرض آسیب بیشتری قرار دهد. برای نمونه نسبت آسیب دیدگی بافت سالم برای فرکانس ٦۰۰kHz حدود ۲۵٪ بیشتر از فرکانس ۱۵۰kHz است.



شکل ۵: نمای از الگوی دمای بافت سینه ناحیه اطراف بافت تومور در فرکان های ٦۰۰kHzو ۱۵۰kHz .

نتیجه‌گیری

فرآیند گرما افزایی با استفاده از نانو ذرات مغناطیسی یک مکانیسم پیچیده است که دارای دو بخش الکترومغناطیس و توزیع دما می‌باشد. نتایج نشان می‌دهد اگرچه افزایش فرکانس میزان تخریب بافت سرطانی را بطور چشمگیری افزایش می‌دهد، بنابراین می‌تواند به بافت سالم نیز آسیب وارد کند. نتایج به دست آمده نشان می‌دهد که انتخاب فرکانس تأثیر مستقیمی در توزیع و مقدار دما در بافتهای سالم و سرطانی دارد. بنابراین استفاده از فرکانس پایینتر در کنار افزایش زمان برای بالابردن دمای مورد نظر در تومور می‌تواند گزینه‌ی مناسبی باشد.

مرجع‌ها

[1] M. B.López, A. Teijeiro, J. Rivas. Magnetic nanoparticle-based hyperthermia for cancer treatment. Oncology & Radiotherapy, (2013).
[2] M. H. Amtenbrink, B. rechnbeevg, H. Hofmann, Super paramagnetic nanoparticles for biomedical applications. Nano. Bio. App.2009.
[3] V. Rudnev, D. Loveless and R. L. Cook, Handbook of induction heating. CRC Press, (2017).
[4] T. Cao, T. Le, Y. Hadadian, J.Yoon, Theoretical Analysis for Using Pulsed Heating Power in Magnetic Hyperthermia Therapy of Breast Cancer. International Journal of Molecular Sciences. (2021).
[5] C. Tucci, M. Trujillo, E. Berjano, Pennes' bioheat equation vs. porous media approach in computer modeling of radiofrequency tumor ablation. Scientific reports, (2021).
[6] S. V. Spirou, M. Basini, A. Lascialfari, Magnetic Hyperthermia and Radiation Therapy: Radiobiological Principles and Current Practice, nanomaterials. (218)
[7] S. Singh, R. Repaka, Effect of different breast density compositions on thermal damage of breast tumor during radiofrequency ablation, Applied Thermal Engineering, (2017).

محاسبات ابتدا به ساکن نانولایه Nb_2C آلاییده با اتم F و Cl

محمدی ، مهناز* ; ضیغمی، محدثه

گروه فیزیک، دانشکده مکانیک، دانشگاه صنعتی قم، قم، ایران

چکیده

ترکیبات Nb-C کاندیدهای بالقوه برای بسیاری از کاربردها هستند. ابررسانایی وابسته به گروه پیوندی به سطح، اخیراً در Nb_2C-MXene کشف شده است. با این حال، در مورد ابررسانایی Nb_2C-MXene با برخی از گروه‌های عاملی، نتایج متناقضی در مطالعات تجربی و نظری وجود دارد. در این مقاله با استفاده از نظریه‌ی تابعی چگالی (DFT) اسپین قطبیده خواص الکترونی و مغناطیسی نانولایه Nb_2C مورد مطالعه قرار گرفته است. محاسبات با استفاده از کد کوانتوم اسپرسو و بر مبنای شبه پتانسیل انجام گرفت. نتایج ساختار الکترونی نشان داد که این ترکیب رسانا و با مغناطش $0.18\ \mu_B$ می‌باشد. تأثیر آلایش Cl و F بر خواص الکترونی و مغناطیسی بررسی شد. آلایش با اتم F و Cl موجب افزایش چگالی حالت‌ها بر روی سطح فرمی و تغییر خواص مغناطیسی می‌شود.

First principle study of Cl and F doped Nb_2C nanolayer

Mohammadi, Mahnaz :zeighami, mohadeseh

Department of Physics, Faculty of Mechanical Engineering, Qom University of Technology, Qom, Iran

Abstract

Nb–C compounds are potential candidates to many applications. The recently discovered surface-group-dependent superconductivity in Nb_2C-MXene. However, regarding the superconductivity of Nb2C-MXene with some functional groups, there were some conflicting results in experimental and theoretical studies

In this paper, the electronic and magnetic properties of Nb_2C monolayer have been studied using spin polarized density functional theory (DFT). Calculations were performed using the Quantum espresso code and based on pseudo potential. Our results show that Nb_2C is a metal with $0.18\mu_B$ magnetization. We investigated the influence of Cl and F on the electronic and magnetic properties of the Nb2C nanolayer. Our findings reveal that the F and Cl atoms increase the density of states at the Fermi level and change magnetic properties of Nb_2C.

PACS No ٦٥ ,٧٢ ,٧١

مقدمه

مکسین ها، MXenes، خانواده جدیدی از مواد دو بعدی هستند، که با تغییر ترکیب و آلایش خواص بسیار متفاوتی نمایش می‌دهند [۱، ۲]. خواص این مواد به طور گسترده در بسیاری از زمینه‌ها مورد بررسی قرار گرفته است[۳، ٤]. تنظیم تعداد الکترون‌های ظرفیت و افزایش آن‌ها و بنابراین تغییر عملکرد الکترونی این ترکیبات امکان پذیر است [٥].

مکسین‌ها دارای رابطه عمومی $M_{n+1}X_nT_x$ هستند که در آن M نشان دهنده فلز واسطه، X نشان دهنده کربن، نیتروژن یا بور، n = 1, 2, 3 و T هم F، OH، O، Cl و یا سایر گروه‌های عاملی فعال پیوندی با سطح هستند[٦].

از نظر ابررسانایی، بلور α-Mo_2C با دمای گذار (Tc) ٣/٦ K اولین کاربید فلز واسطه دو بعدی گزارش شده بود که ابررسانایی در آن مشاهده شد اگر چه که این ترکیب با مکسین‌ها متفاوت است[٧]. ابررسانایی در مکسین‌ها با دمای گذار پایین‌تر مانند Nb_2AlC (T_c ~ 0.44 K), Lu_2SnC (T_c ~ 5.2 K) و Nb_2InC (T_c ~ 7.5 K) نیز گزارش گردید[٨-٩].

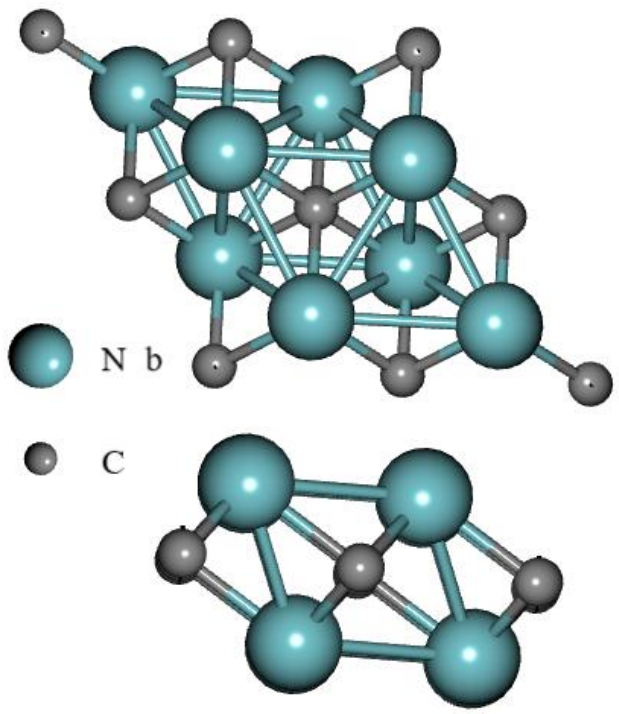
نتایج نشان می‌دهند که خواص ابررسانایی مانند دمای گذار و میدان بحرانی در لایه‌های دوبعدی Nb_2C به شدت وابسته به گروه‌های عاملی است که به سطح مکسین پیوند دارند[۱۰].
اندازه‌گیری‌های مغناطیسی نشان دادند که Nb_2C-MXene با گروه عاملی F (Nb_2CFx) اثر مایسنر را در 2.5 K نشان می‌دهد در حالی که مقاومت صفر در این نمونه مشاهده نشد [۱۱].
از سوی دیگر، محاسبات ابتدا به ساکن ابررسانایی در Nb_2C خالص را نشان نداد و دلیل ابررسانایی مشاهده شده در Nb_2CF_x را Nb_2CO_2 دانست[۱۲]. با توجه به گزارشات بعضاً متفاوت دراین زمینه، در این مقاله به بررسی تاثیر آلایش Nb_2C با گروههای Cl و F پرداخته و اثر آن‌ها را بر خواص الکتریکی و مغناطیسی این ترکیب بررسی خواهیم کرد.

روش و جزئیات محاسبه:

محاسبات با استفاده از کد محاسباتی PWscf در چارچوب نظریه‌ی تابعی چگالی (DFT) اسپین قطبیده، با روش موج تخت و شبه پتانسیل انجام شده است[۸]. برای محاسبه‌ی پتانسیل تبادلی -همبستگی از تقریب شیب تعمیم یافته GGA و تابع PBE استفاده شد[۱۳]. انرژی قطع تابع موج ۲۵۰Ry در نظر گرفته شد. مش‌بندی منطقه اول بریلوئن با استفاده از روش منخورست-پک با ۶*۶*۱ نقطه برای نانوصفحه انجام شد. در تمام محاسبات، شرط همگرایی انرژی کل 0.0001 Ry انتخاب شد.

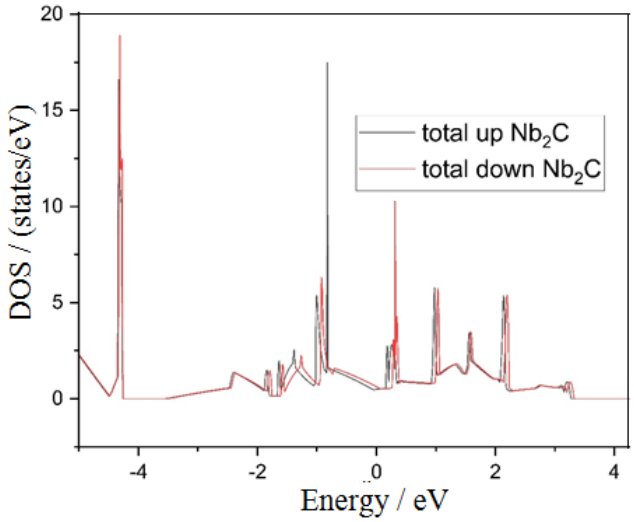
بحث و نتایج:

شکل ۱ ساختار Nb_2C پس از محاسبات بهینه را نشان می‌دهد.
پس از محاسبات بهینه ثابت شبکه حدود ۳/۱۵ Å بدست آمد(شکل ۱). همچنین طول پیوند مربوط به Nb-C، ۱/۴۳Å و ضخامت لایه (فاصله دو اتم Nb در لایه) ۲/۳۶ Å محاسبه شد.



شکل ۱: ابرسلول ۱*۲*۲ نانولایه Nb_2C. (بالا: نمای بالا و پایین: نما از کنار لایه)

محاسبات چگالی حالت‌ها و ساختار نواری نشان می‌دهد که این ساختار رسانا می‌باشد (شکل۲). برای بررسی خواص مغناطیسی این لایه محاسبات با نظم فرومغناطیس انجام شد که این لایه دارای مغناطش کل μ_B ۰/۱۸ می‌باشد.



شکل ۲: چگالی حالت نانولایه Nb_2C (سطح فرمی در صفر قرار دارد).

برای آلایش از ابرسلول ۱*۲*۲ استفاده شد و با توجه به تقارن لایه دو جایگاه متفاوت برای Cl و F در نظر گرفته شد. کلر Å ۱/۵ در بالای اتم Nb و C قرار داده شد. برای هر دو جایگاه محاسبات بهینه صورت گرفت و انرژی جذب طبق رابطه زیر محاسبه گردید.

$$E_b = E_T(Nb_2C+Cl) - E(Nb_2C) - E(Cl)$$

که در آن $E_T(Nb_2C+Cl)$ ، انرژی کل تک لایه‌های Nb_2C آلایش شده با اتم Cl، $E(Nb_2C)$، انرژی کل تک لایه Nb_2C و $E(Cl)$ انرژی یک اتم Cl منزوی است. همین محاسبات برای F نیز به همین صورت انجام شد. نتایج انرژی‌های جذب در جدول ۱ و ۲ خلاصه شده است. همانطور که مشاهده می‌شود در کلیه حالت‌ها انرژی پیوند منفی می‌باشد که حاکی از پایدار بودن موقعیت مربوطه می‌باشد. در کلیه حالت ها پایدارترین حالت زمانی است که اتم ناخالصی در بالای اتم C قرار می‌گیرد و اتم F دارای بیشترین انرژی جذب است. انرژی‌های جذب نیز از مرتبه پیوند شیمیایی می‌باشند.

در مورد هر دو جایگاه مشاهده شد که اتم ناخالصی در همان مکان باقی مانده است. در جایگاه بالای Nb اتم ناخالصی تنها با یک اتم Nb پیوند داده است درحالی که در جایگاه بالای C با سه اتم Nb پیوند داده است که این امر موجب بالاتر بودن انرژی جذب در حالت دوم شده است.

جدول ۱: انرژی جذب (eV) و مغناطش کل (μ_B) و طول پیوند Nb-Cl (Å) در $Nb_2C@Cl$

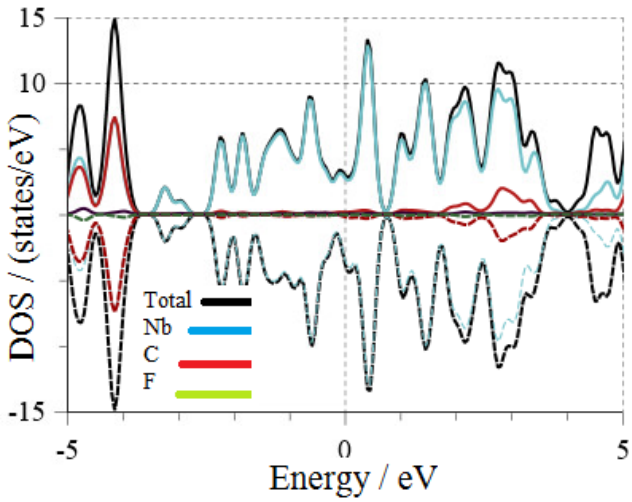
اتم ناخالصی	بالای Nb	بالای C
انرژی جذب	-2.43	-3.07
مغناطش کل	0.33	0.23
طول پیوند	2.62	2.24

جدول ۲: انرژی جذب (eV) و مغناطش کل (μ_B) و طول پیوند Nb-F (Å) در $Nb_2C@F$

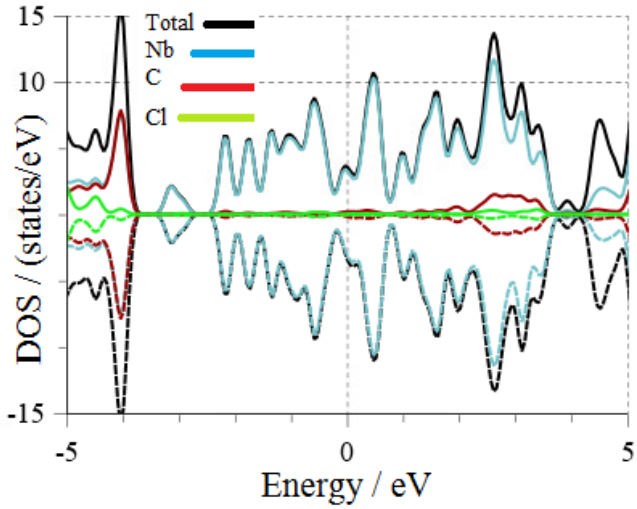
اتم ناخالصی	بالای Nb	بالای C
انرژی جذب	-3.94	-4.12
مغناطش کل	0.35	0.35
طول پیوند	2.02	1.52

در جدول ۱ و ۲ مغناطش کل پس از محاسبات بهینه نیز نشان داده شده است. اتم‌های Cl و F پس از جذب باعث افزایش مغناطش کل شده‌اند.

برای بررسی بیشتر در شکل ۳ و ٤ نمودار چگالی حالات جزیی رسم شده است. نتایج نشان می‌دهد افزودن ناخالصی F و Cl باعث تغییر خاصیت رسانایی نانولایه نمی‌شود. ولی چگالی حالت‌ها در سطح فرمی افزایش یافته است و حالت‌های جدیدی در نزدیکی سطح فرمی بوجود آمده‌اند. وجود این حالت‌های اضافه و تغییر چگالی حالت‌ها بر روی سطح فرمی می‌تواند نشانه‌ای از تغییر برهمکنش تبادلی و بنابراین خواص ابررسانایی این ترکیب باشد.



شکل ۳: چگالی حالات الکترونی نانولایه Nb_2C با ناخالصی F در جایگاه بالای اتم C (سطح فرمی در صفر قرار دارد).



شکل 4: چگالی حالات الکترونی نانولایه Nb_2C با ناخالصی Cl در جایگاه بالای اتم C (سطح فرمی در صفر قرار دارد).

نتیجه گیری

در این مقاله با استفاده از نظریه‌ی تابعی چگالی (DFT) اسپین قطبیده خواص الکترونی و مغناطیسی نانولایه Nb_2C مورد مطالعه قرار گرفته است. محاسبات با استفاده از کد کوانتوم اسپرسو و با تقریب GGA انجام گرفت. نتایج ساختار الکترونی نشان داد که این ترکیب رسانا و دارای مغناطش ۰/۱۸ μ_B می باشد. تأثیر آلایش Cl و F بر خواص الکترونی و مغناطیسی بررسی شد. در کلیه حالت‌ها انرژی جذب منفی می‌باشد که نشان می‌دهد سیستم پایدار است. آلایش با اتم F و Cl موجب افزایش مغناطش نانولایه می-شود. همچنین در ساختار الکترونی، چگالی حالت ها در سطح فرمی افزایش یافته که می‌تواند نشانه‌ای از تغییر برهمکنش تبادلی و بنابراین تغییر خواص ابررسانایی این نانولایه با حضور ناخالصی F و Cl باشد.

مرجع‌ها

[1] Naguib ; Mochalin,V ; Barsoum,N ; Gogotsi, W, M.Y; *Adv. Mater.(* 2014)26992-1005.
[2] Anasori,B ; Xie,Y ; Beidaghi,M ; Lu, J ; Hosler B.C ; Hultman,L ; Kent P. R ; Gogotsi Yand Barsoum M.W ; *ACS Nano (*2015) 99507-9516.
[3] Lei, JC; Zhang Xand Zhou,Z. *Front Phys.*10 (2015)276-286.
[4] Kumar,H ; Frey N C ; Dong,L ; Anasori,B; GogotsiYand Shenoy,V B . *ACS Nano (*2017) 117648-7655.
[5]Khazaei, M; Ranjbar,A; AraiM;Sasaki TandYunoki S ; *J.Mater.Chem.C*5 (2017) 2488.
[6] Naguib, M ; Kurtoglu, M; Presser, V; Lu, J; Niu,J; Heon ,M ; et al, Two-Dimensional Nanocrystals Produced by Exfoliation of Ti_3AlC_2; Adv.Mater. 23 (2011) 4248–4253.
[7] Xu,C ; Wang,L ; Liu,Z ; Chen,L ; Guo,J; Kang,N; et al, Large-area high-quality 2D ultrathin Mo_2C superconducting crystals, Nat.Mater. 14(2015) 1135-1141.
[8] Scabarozi,T.H ;Roche,J ;Rosenfeld,A ;Lim,S.H; Salamanca-Riba,L ; Yong,G ; et al; Synthesis and characterization of Nb_2AlC thin films, Thin Solid Films 517 (2009) 2920–2923.
[9] Kuchida,S ; Muranaka,T; Kawashima,K; Inoue,K; Yoshikawa,M ; Akimitsu,J. Superconductivity in Lu_2SnC, Phys. C 494 (2013) 77–79.
[10] Kamysbayev,V ; Filatov,A.S ; Hu,H; RuI,X; Lagunas,F ; Wang,D ; Klie,R.F; et al, Covalent surface modifications and superconductivity of two-dimensional metal carbide MXenes, Science 369 (2020) 979–983.
[11] Babar,Z.U.D ; Anwar,M.S; Mumtaz,M; Iqbal,M ; Zheng,R.K ; Akinwande,D; et al ;Peculiar magnetic behaviour and Meissner effect in two-dimensional layered; Nb_2C MXene, 2D Mater.7 (2020) 035012.
[12] Yang,Y; Ting,CS ; Electronic structures and electron–phonon superconductivity of Nb_2C-based MXenes, J. Phys. D: Appl. Phys. 53 (2020) 485301.
[13] Kohn, W.; Sham, L. J. Self –Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects. Phys. Rev. *A* 140(1965) 1133-1138.

طراحی و ساخت حسگر مغناطیس سنج دروازه شار

محمدی ، زهرا[1]؛ رفیعی، مهرداد[1]؛ نجات بخش، نوید [1] ؛ مکاریان، محمدحسین[1]

[1]شرکت دانش بنیان بهیار صنعت سپاهان، شهرک علمی تحقیقاتی اصفهان، اصفهان

چکیده

در این پژوهش یک سیستم اندازه گیری با حسگر مغناطیس سنج دروازه شار برای کاربردهای مغناطیس سنجی طراحی و ساخته شده است. سه نوع هسته در نظر گرفته می شود: استوانه، نوار و میکروسیم. فرآیند خوانش حسگر، مبتنی بر استفاده از اختلاف زمان اشباع مثبت و منفی(RTD) می باشد، که در آن اطلاعات میدان مغناطیسی DC از موقعیت‌های زمانی پیک‌های موج خروجی بدست می آید. نتایج به خوبی مناسب بودن استفاده از این مغناطیس سنج RTD Fluxgate برای تشخیص تغییرات میدان مغناطیسی زمین را نشان می دهد.

واژه های کلیدی: *حسگر مغناطیسی، حسگر دروازه شار ، ناوبری، میدان مغناطیسی زمین*

Design and construction of flux gate magnetometer sensor

Mohammadi, Zahra[1]; Rafiee, Mehrdad[1]; Nejatbakhsh, Navid [1]; Mokarian, Mohammad Hosein [1]

[1] *Behyaar Sanaat Sepahan Company, Isf Science & Technology Town, Isf University of Technology Blvd, Isfahan, Iran.*

Abstract

In this study a measurement system with the rod-type fluxgate sensor magnetometer is designed for sensing applications. Three core types are considered: cylindrical, ribbon and wire. The readout strategy is based on the use of the Residence Times Difference (RTD), where the DC magnetic field information is derived from the temporal positions of the output waveform peaks. The results show the suitability of using this RTD Fluxgate magnetometer to detect variations in the Earth's magnetic field.

.

***Keywords**: Magnetic sensor, Fluxgate sensor, Navigation, Earth's magnetic field*

PACS No. 85

مقدمه

پس از کشف میدان مغناطیسی و به دنبال آن پیشرفت صنعت باعث شد که از میدان مغناطیسی برای شناسایی ابزار و عملکردها در صنعت استفاه شود. این حسگر که به میدان مغناطیسی حساس می باشند در صنایع مختلف مورد استفاده قرار می گیرند که مهمترین آنها در راهیابی و ناوبری است .

در بحث جهت‌یابی، جهت‌یاب‌ها را می‌توان به دودسته کلی تفکیک کرد: سیستم‌های جهت‌یابی فعال (GPS) که مبتنی بر ماهواره‌ها هستند و سیستم‌های جهت‌یاب غیرفعال که با بهره‌گیری از حسگرهای اینرسی به اندازه‌گیری شتاب و بیان موقعیت می‌پردازند و در آن نیازی به استفاده از سیگنال خارجی نیست. در کاربردهای امروزی معمولاً از هردو روش فعال و غیرفعال جهت‌یابی برای دست‌یابی به نتایج بهتر استفاده می‌شود. GPS که

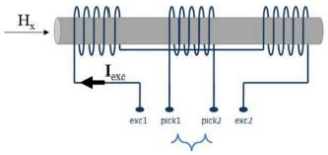
زمانی معجزه ناوبری نامیده می‌شد، اکنون به دلیل استفاده از سیگنال‌های فرکانس رادیویی ضعیف (RF) که از ماهواره‌های با فاصله دور دریافت می‌شوند؛ به سادگی در معرض تداخل عمدی یا غیرعمدی قرار می‌گیرد. به علاوه، سیگنال GPS در برخی مکان‌ها مانند زیر آب در دسترس نیست. بنابراین، در هدایت زیردریایی ها و اکتشافات در دریاها و اقیانوس‌ها، اکتشافات معادن و ... نمی‌توان بر GPS تکیه کرد. اما به دلیل این‌که درروش جهت‌یابی غیرفعال (مانند IMU) امکان انتقال اطلاعات به بیرون وجود ندارد، نسبت به روش فعال دارای امنیت بالاتری است و درنتیجه این نوع جهت‌یاب‌ها در فناوری‌های نظامی بسیار اهمیت می‌یابند.IMU ، حسگرهایی مانند شتاب سنج ها، ژیروسکوپ ها، و حسگرهای مغناطیسی را دربرمی‌گیرد. ناوبری براساس میدان مغناطیسی زمین می‌تواند نویدبخش یک ناوبری غیرفعال قوی‌تر در همه شرایط آب و هوایی و بدون وابستگی به زیرساخت‌های جدید را بدهد[1,2] .

حسگر دروازه شار مغناطیسی، حسگری است برداری که بزرگی و جهت میدان مغناطیسی را اندازه گیری می نماید. امروزه با توسعه حسگرهای کم هزینه این امکان را برای سیستم های ناوبری مبتنی برحسگر فراهم گردیده است. علی رغم تلاشهایی که در سایر حسگرها که با اصول متفاوت کار می کنند، انجام شده هنوز حسگرهای دروازه شار بدلیل خطی بودن، پایداری، تشخیص جهت با دقت بالا، قابلیت اعتماد، سادگی و کاربرد اقتصادی در بسیاری از حوزه ها به کار می رود. گسترهٔ حساسیت این حسگرها از $10^{-2}nT$ تا $10^{7}nT$ می باشد[3,4] .

در این مقاله به روش ساخت یک مدل جدید از حسگر دروازه شار بنام RTD Flux gat می پردازیم که مبتنی بر استفاده از اختلاف زمان اشباع مثبت و منفیRTD می باشد. لازم به ذکر است که علاوه بر کاربرد در زمینه اندازه گیری میدان مغناطیسی زمین و بحث ناوبری، حسگر RTD Flux gat در زمینه پزشکی کاربردها ی فراوانی دارد. بویژه یکی از کاربردهای جدید نوع خاص از حسگرساخته شده، در زمینه درمان بیماری های عصبی (با تشخیص میزان تجمع آهن در مغز) کاربرد دارد [5] .

بخش‌های اصلی دستگاه

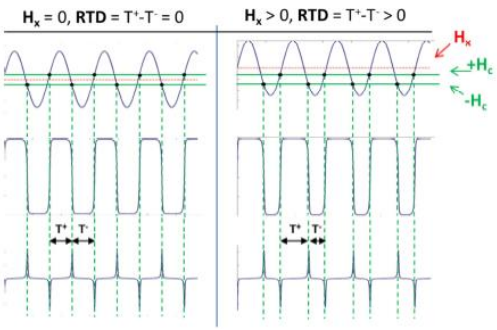
حسگرهای Fluxgate Magnetometer شامل یک هستهٔ فرومغناطیس هستند. دستگاهی متشکل از یک یا چند هسته آهنی نرم که هر یک توسط سیم پیچ های اولیه و ثانویه احاطه شده اند و برای تعیین ویژگی های یک میدان مغناطیسی خارجی از سیگنال های تولید شده در سیم پیچ های ثانویه استفاده می شود. در حضور میدان مغناطیسی خارجی، القای مغناطیسی هسته تغییر می‌کند. یک سیگنال راه‌انداز به سیم‌پیچ اولیه اعمال می‌شود و منجر به نوسان هسته حول نقاط اشباع می‌شود. سیم‌پیچ ثانویه سیگنالی را در خروجی ارائه می‌دهد. سیگنال خروجی متاثر از تغییرات تراوایی هسته است و به صورت تغییرات دامنه ظاهر می‌شود (شکل 1)[6].



شکل 1. ساختار حسگر RTD Fluxgate

اصول عملکرد حسگر RTD Fluxgate

اساس عملکرد این نوع از حسگرهایِ مقایسهٔ زمان مورد نیاز سیم پیچِ تحریک برای اشباع هسته، در دو جهت متضاد است. که اختلاف این دو اندازه گیری ناشی از میدا ن خارجی اعمال شده به هسته است (شکل 2) [6].



شکل2. از بالا به پایین: میدان تحریک، مغناطش هسته، ولتاژ در سیم پیچ تحریک.

جریان تحریک می تواند سینوسی یا مثلثی باشد. در حالتی که میدان تحریک یک موج سینوسی باشد:

$$RTD = \frac{2}{\omega}\left[\arcsin\left(\frac{H_c + H_x}{\hat{H}_e}\right) - \arcsin\left(\frac{H_c - H_x}{\hat{H}_e}\right)\right] \quad (1)$$

$\hat{H}_e$ و ω به ترتیب دامنه و فرکانس میدان تحریک هستند. و در این حالت حساسیت از رابطه زیر محاسبه می گردد:

$$S_{\sin} = \frac{\partial RTD}{\partial H_x} = \frac{2}{\omega}\left[\frac{\frac{1}{\hat{H}_e}}{\sqrt{1-\left(\frac{H_c + H_x}{\hat{H}_e}\right)^2}} + \frac{\frac{1}{\hat{H}_e}}{\sqrt{1-\left(\frac{H_c - H_x}{\hat{H}_e}\right)^2}}\right] \quad (2)$$

در صورتی که جریان تحریک یک موج مثلثی باشد:

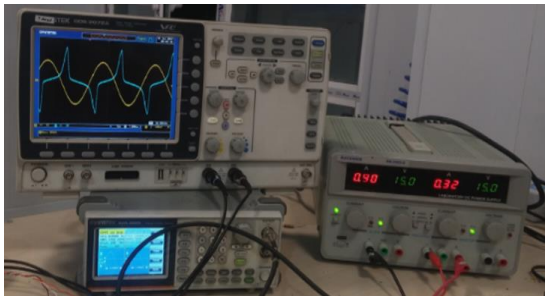
$$RTD = \frac{2\pi H_x}{\omega \hat{H}_e} \quad (3)$$

$$S_{Tria} = \frac{\partial RTD}{\partial H_x} = \frac{2\pi}{\omega \hat{H}_e} \quad (4)$$

مراحل ساخت حسگر

در ابتدا از یک هسته فریت استفاده شد $H_c = 320\, A/m$. در این مورد نیاز به یک مدار تقویت کننده بود تا هسته بتواند به اشباع برسد. همانطور که در شکل مشاهده می گردد، سیم پیچ خوانش در ناحیه میانی و سیم پیچ تحریک در طرفین آن بصورت هم جهت قرار گرفته است (شکل 3) و در ساختار دیگری سیم پیچ تحریک در کل ناحیه هسته با فاصله کمی از لبه ها قرار گرفته است. علی رغم مقدار بالای H_c برای این نوع هسته، خوشبختانه در هر دو مورد پاسخ حسگر به میدان مغناطیسی آهنربا مشاهده گردید و پاسخ های بدست آمده در فاصله های مختلف از حسگربا مقادیر داده شده توسط تسلا متر مطابقت بسیار خوبی داشت (شکل 4).

شکل 3. حسگر با هسته فریت

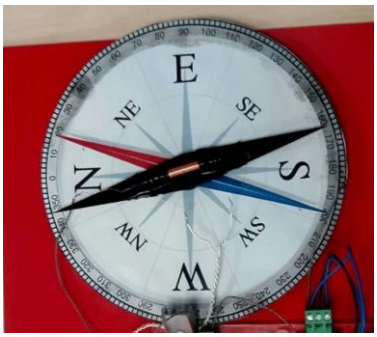


شکل 4. تست حسگر با هسته فریت

در ادامه از هسته های نوار آمورف با ترکیب $Co_{68.15}Fe_{4.35}Si_{12.5}B_{15}$ و $H_c = 0.67\, A/m$ استفاده گردید (شکل 5). در مورد این نوع هسته در مقایسه با هسته فریت، پیک های بسیار تیزتر و با حساسیت بالاتری در پاسخ به میدان مغناطیسی اعمالی (آهنربا) مشاهده گردید. اما در این مورد با چرخش حسگر، تغییرات میدان مغناطیسی زمین خیلی محسوس نبود به گونه ای که تغییر جهت حسگر از جهت میدان زمین تا عمود بر آن تغییر قابل ملاحظه ای در پاسخ حسگر مشاهده نمی شد و نتایج بهتری برای پاسخ سیستم مورد نظر بود.

شکل 5 . حسگر با هسته نوار آمورف با پهنای 2mm.

بنابراین از آنجایی که یکی از اهداف اصلی این پروژه استفاده برای ناوبری هست هسته دیگری استفاده گردید. یک نوع سیم آمورف با ضخامت حدود 30 میکرومتر با ترکیب $Co_{86.79}Fe_{5.39}Si_{7.82}$ مورد استفاده قرار گرفت (شکل 6).



شکل 6. حسگر با هسته میکرو سیم

کالیبراسیون

یکی از بهترین روش های تست و کالیبره حسگرهای مغناطیس سنج، استفاده از یک پیچه هلمهولتز می باشد[7] . کار ساخت

پیچه مورد نظر پس از شبیه سازی انجام گردید (شکل7). همانطور که مشاهده می گردد، برای داشتن یک میدان یکنواخت در وسط پیچه، این شرط باید در نظر گرفته شود که فاصله پیچه ها برابر با شعاع هرپیچه $48cm$ باشد. تعداد دور هر پیچه نیز 60 دور می باشد. هم چنین برای اعمال میدان تا دقت مورد نظر، یک منبع جریان با دقت کمتر از 10 میکروآمپر طراحی و ساخته شد.

شکل7. پیچه هلمهولتز

نتایج تجربی

پس از تست حسگرهای مختلف در نهایت پارامترهای بهینه برای بهترین حسگر بدست آمدند. همانطور که در (شکل 6) مشاهده می گردد، حسگر نهایی بر روی یک صفحه قطب نما مورد تست قرار گرفت. در این مورد حسگر بسیار عالی به میدان مغناطیسی زمین پاسخ می دهد و با چرخش کامل در یک صفحه، به خوبی تغییر در میدان مغناطیسی زمین در پاسخ حسگر قابل مشاهده بود. به عنوان مثال با تغییر جهت حسگر به اندازه 1 درجه روی صفحه، حسگر به خوبی این تغییر میدان را نشان می دهد که اندازه این تغییرات در حدود کمتر از $100nT$می باشد. نکته دیگر اینکه مقادیر میدان در جهت گیری های مختلف روی صفحه مقادیر مختلف تا حداکثر حدود $50\mu T$را نشان می دهد که با مقادیر اندازه گیری شده در همان نقاط با یک حسگر مرجع مطابقت بسیار خوبی دارد. البته این حسگر با دقت بالاتری، دقت نیم درجه تغییرات میدان (قدرت تفکیک حسگر در حدود $60nT$) را نشان می دهد. هم چنین برای این نوع هسته، تغییر دیگری در نوع سیم پیچی در نظر گرفته شد. به این صورت که ابتدا سیم پیچ اولیه و سپس سیم پیچ ثانویه مستقیما روی سیم پیچ اولیه قرار گرفت و با این تغییر، پاسخ بهتری از حسگر دریافت شد. بویژه مقدار دامنه پیک ولتاژ خروجی تا حدود $350mv$ افزایش یافت (شکل 8) .

شکل8. حسگر نهایی

پس از این مرحله مدار خوانش با هدف رسیدن به خروجی دیجیتال تکمیل گردید و مقادیر خروجی این حسگر بصورت دیجیتال با دقت بسیار بالایی بدست آمدند.

در گام بعدی این حسگر به یک نمونه سه بعدی ارتقا خواهد یافت [8].

سپاسگزاری

از حمایت ها و تشویق های دلسوزانه آقای مهندس نوید نجات بخش صمیمانه تشکر می‌کنیم. اینکار با پشتیبانی مادی و معنوی شرکت دانش بنیان بهیار صنعت سپاهان انجام شد.

مرجع‌ها

[1] Li, Wei, and Jinling Wang. "Magnetic sensors for navigation applications: an overview." *The Journal of navigation* 67, no. 2 (2014): 263-275.

[2] Wang, Jiabo, and Xi Chen. "A fluxgate magnetometer for navigation and sensing: Noise character and digital filtering." In 2015 IEEE SENSORS, pp. 1-4. IEEE, 2015.

[3] آشنایی با حسگر مغناطیس سنج دروازه شار روح اله رضوانی، جواد کرمدل، گروه مهندسی الکترونیک واحد تهران جنوب دانشگاه آزاد اسلامی تهران ایران.

[4] Lenz, James, and S. Edelstein. "Magnetic sensors and their applications." *IEEE Sensors journal* 6, no. 3 (2006): 631-649.

[5] Trigona, Carlo, Valentina Sinatra, Bruno Andò, Salvatore Baglio, and Adi Bulsara. "RTD-fluxgate magnetometers for detecting iron accumulation in the brain." IEEE Instrumentation & Measurement Magazine 23, no. 1 (2020): 7-13.

[6] Wei, Songrui, Xiaoqi Liao, Han Zhang, Jianhua Pang, and Yan Zhou. "Recent progress of fluxgate magnetic sensors: basic research and application." Sensors 21, no. 4 (2021): 1500.

[7] Hosseinzadeh, Ali, Alireza Khayatian, Paknoos Karimagahee, Omidreza Daneshmandi, and Behrooz Raeesi. "Three Axis Fluxgate Magnetometer Sensor Calibration." In *2019 27th Iranian Conference on Electrical Engineering (ICEE)*, pp. 431-436. IEEE, 2019.

[8]Shen, Xiaoyu, Yuntian Teng, and Xingxing Hu. "Design of a Low-Cost Small-Size Fluxgate Sensor." Sensors 21, no. 19 (2021): 6598.

تاثیر بازپخت لیزر پالسی بر ویژگی‌های ساختاری و مغناطیسی لایه‌های نازک فریت کبالت

اسکندری ، فاطمه ؛ کاملی، پرویز

گروه فیزیک، دانشگاه صنعتی اصفهان ، اصفهان

چکیده

در این مقاله لایه‌های نازک فریت کبالت به روش لایه‌نشانی لیزر پالسی بر روی زیرلایه‌ی (۰۰۱)MgO ساخته شد. پس از آن لایه‌ها تحت بازپخت لیزر پالسی با چگالی انرژی‌های مختلف ۷۵-۱۵۰ mJ/cm^2 قرار گرفتند. طیف XRD نمونه‌ها شکل‌گیری ساختار تک بلوری در راستای (۰۰۸) برای نمونه‌های بازپخت شده با لیزر را نشان داد. طیف‌های رامان نمونه‌ها نشان‌دهنده افزایش تنش وارد شده به لایه‌ها با افزایش انرژی لیزر تا ۱۲۵ mJ/cm^2 و سپس کاهش تنش است. افزایش مغناطش اشباع لایه‌ها با افزایش انرژی لیزر تا ۱۲۵ mJ/cm^2 و پس از آن کاهش مغناطش اشباع، می‌تواند ناشی از تغییر توزیع یون‌ها در جایگاه‌های اتمی باشد.

واژه های کلیدی: *فریت کبالت، لایه‌نشانی لیزر پالسی، بازپخت لیزر پالسی، رامان.*

The Influence of Pulsed Laser Annealing on Magnetic and Structural Properties of Cobalt Ferrite Thin Films

Eskandari, Fateme; Kameli, Parviz

Department of Physics, Isfahan University of Technology, Isfahan

Abstract

In this paper cobalt ferrite thin films were deposited on MgO (001) substrates by pulsed laser deposition method. Then the films were irradiated with pulsed laser with different laser fluence 72-150 mJ/cm^2. XRD patterns of samples showed the formation of single crystal structure along (008) direction for laser irradiated samples. Raman spectra of samples show increasing stress with increase in laser fluence to 125 mJ/cm^2 and then it decrease.

***Keywords**: Cobalt ferrite, Pulsed laser deposition, Pulsed laser annealing, Raman*

PACS No. ۷۵، ۷۸

مقدمه

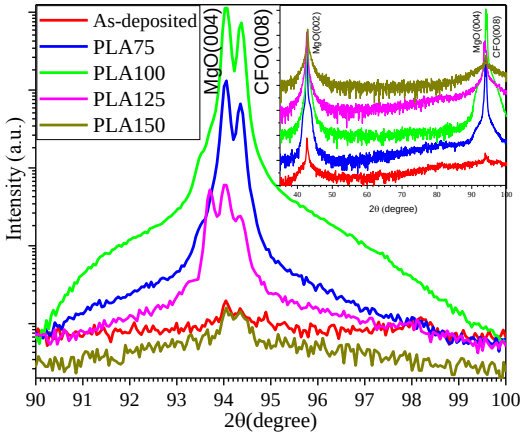
لایه‌نازک فریت کبالت ($CoFe_2O_4$:CFO) به علت ناهمسانگردی مغناطیسی و مغناطش اشباع نسبتا بالا و پایداری شیمیایی مطلوب، می‌تواند به عنوان یک گزینه‌ی مناسب برای کاربرد در حافظه‌های مغناطیسی، فیلترهای اسپینی، ابزارهای مغناطونوری و میکروموج مطرح باشد. CFO ساختار اسپینلی مکعبی با زیرشبکه معکبی مرکز سطحی برای توزیع آنیون‌های اکسیژن وجود دارد. هر یاخته واحد در ساختار اسپینلی، ٦٤ جایگاه چهاروجهی [A] ۳۲ جایگاه هشت وجهی {B} دارد. ۸ تا از جایگاه‌های [A] و ١٦ تا از جایگاه‌های {B} توسط کایون‌های فلزی Fe3+ و Co2+ اشغال شده‌اند. [1]. روش و شرایط ساخت و آماده سازی لایه‌های نازک، تاثیر زیادی بر ویژگی‌های مختلف آن دارد. از جمله‌ی این شرایط نوع بازپخت لایه‌ها بعد از لایه-نشانی است.بازپخت لیزری نوعی از بازپخت سریع است که به علت کاهش زمان، قابلیت کنترل تقاط بازپخت، عدم آسیب به زیرلایه حتی در دمای بالا و ... مورد توجه است [2].

جزئیات آزمایشگاهی

لایه‌های نازک CFO به روش لایه نشانی لیزر پالسی بر روی زیرلایه تک بلوری MgO(۰۰۱) در دمای اتاق و فشار اکسیژن ۲۰ mTorr لایه نشانی شدند. ابتدا محفظه تا فشار زمینه حدود ۶×۱۰^{-۶} Torr خلاء و سپس گاز اکسیژن وارد محفظه شد. پرتوی لیزر اگزایمر (KrF) با طول موج ۲۴۸ nm و انرژی حدود ۲۰۰ mJ/pulse بر روی هدف درون محفظه متمرکز شد. تعداد پالس لیزر ۶۰۰۰ و فاصله هدف تا زیرلایه حدود ۶/۵ cm بود. لایه نشانی با فرکانس ۱۰ Hz انجام شد. پس از لایه‌نشانی نمونه‌ها تحت تابش تک پالس لیزر KrF با انرژی‌های ۷۵، ۱۰۰، ۱۲۵ و ۱۵۰ mJ/cm^2 قرار گرفتند و در این مقاله نمونه‌های بازپخت شده به اختصار، به ترتیب PLA75، PLA100، PLA125 و PLA150 نامیده شدند.

نتایج و بحث

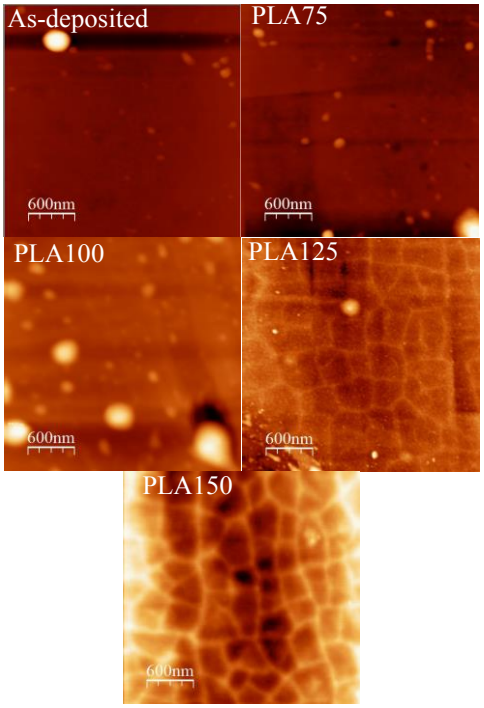
برای بررسی تاثیر شار انرژی لیزر بعد از بازپخت لیزری بر ساختار بلوری لایه‌های نازک CFO از طیف XRD استفاده شد (شکل۱). با توجه با ساختار زیرلایه‌ی MgO (001) که مکعبی با پارامتر شبکه‌ی A ۴/۴۲۴ نزدیک به دو برابر پارامتر شبکه‌ی CFO است انتظار می‌رود لایه‌ها به صورت تک بلوری بر روی زیرلایه رشد کنند. همانطور که در شکل۱ دیده می‌شود لایه‌ی CFO قبل از بازپخت لیزری به قله‌ی (۰۰۸) ساختار اسپینلی را به طور ضعیفی نشان می‌دهد و می‌توان گفت که ساختار لایه بیشتر به صورت آمورف است. این موضوع به دلیل لایه‌نشانی در دمای اتاق منطقی و بدیهی به نظر می‌رسد. بعد از بازپخت لیزری با چگالی انرژی ۷۵ J/cm^{-2} قله‌ی (۰۰۸) ساختار اسپینلی به طور واضحی ظاهر شده است. با افزایش چگالی انرژی لیزر به ۱۰۰ J/cm^{-2} و ۱۲۵ رشد لایه در راستای (۰۰۸) افزایش یافته و شدت قله‌ی مربوط به آن بیشتر شده است. در نمونه‌ی PLA150، شدت قله‌ی (۰۰۸) کاهش یافته است (شکل۱). تابش فوتون‌های لیزر به سطح نمونه باعث گرمادهی به سطح و رشد ساختار بلوری لایه در جهت ارجح می‌شود اما با افزایش انرژی لیزر به ۱۵۰ J/cm^{-2} به نظر می‌رسد ساختار بلوری ضعیف‌تر شده است . این موضوع می‌تواند به علت تخریب ساختار بلوری با افزایش انرژی لیزر و یا کاهش جذب فوتون‌های لیزر توسط سطح لایه‌ی CFO باشد.



شکل۱ : طیف XRD لایه‌های CFO قبل و بعد از بازپخت لیزر با چگالی‌های انرژی مختلف. طیف XRD در بازه‌ی بزرگ‌تر در داخل تصویر است.

تاثیر بازپخت با چگالی‌های مختلف انرژی لیزر بر مورفولوژی لایه‌های CFO توسط تصاویر AFM بررسی شد (شکل۲). تصویر AFM نمونه‌ی CFO قبل از بازپخت، صاف و یکنواخت و بدون ویژگی خاصی است. تابش پرتو لیزر با انرژی J/cm^{-2} به سطح لایه، سطح لایه تفاوت خاصی ایجاد نمی‌کند و به نظر می‌رسد فوتون‌های لیزر انرژی کافی برای تغییر زیاد و آشکار سطح لایه‌ی CFO را ندارند. با افزایش چگالی انرژی لیزر به ۲۰۰ و ۲۵۰ J/cm^{-2} شکاف‌هایی روی سطح یکنواخت لایه دیده‌می‌شود. این شکاف‌ها در مورد نمونه‌ی PLA300 با تعداد بیشتری دیده‌می‌شود. می‌توان تصور کرد، ذرات سطح لایه با کسب انرژی از فوتون‌های فرودی لیزر به طور سطحی ذوب شده‌اند و با نفوذ اتم‌ها در یکدیگر دانه‌ها بزرگ‌تر شداند. همچنین می‌توان گفت برخورد پرتو لیزر با سطح لایه، منجر به ذوب مرزدانه‌ها پیوستن دانه‌های ریز سطح به هم و در نهایت دانه‌بندی بزرگ‌تر روی سطح و ایجاد شکاف‌هایی روی سطح شده‌اند.

ارتعاشات شبکه‌ای لایه‌های نازک CFO قبل و بعد از بازپخت لیزری به وسیله‌ی طیف‌های رامان بررسی شد. شکل۳ طیف رامان نمونه‌های CFO قبل از بازپخت لیزری و بعد از بازپخت لیزری با انرژی‌های مختلف لیزر ۷۵–۱۵۰ mJ/cm^2 را نشان می‌دهد.



شکل۲ : تصاویر AFM لایه‌های نازک CFO قبل و بعد از بازپخت لیزری با انرژی‌های مختلف.

همان‌طور که در مقدمه گفته شد، کاتیون‌های فلزی در ساختار اسپینلی می‌توانند دو جایگاه هشت‌وجهی و چهاروجهی را اشغال کنند. نظریه‌ی گروه ٤٩ مد ارتعاشی که ۳ تای آنها مد صوتی و ۳۹ تای آنها مد اپتیکی است را برای ساختاراسپینلی به صورت زیر پیش‌بینی می‌کند:

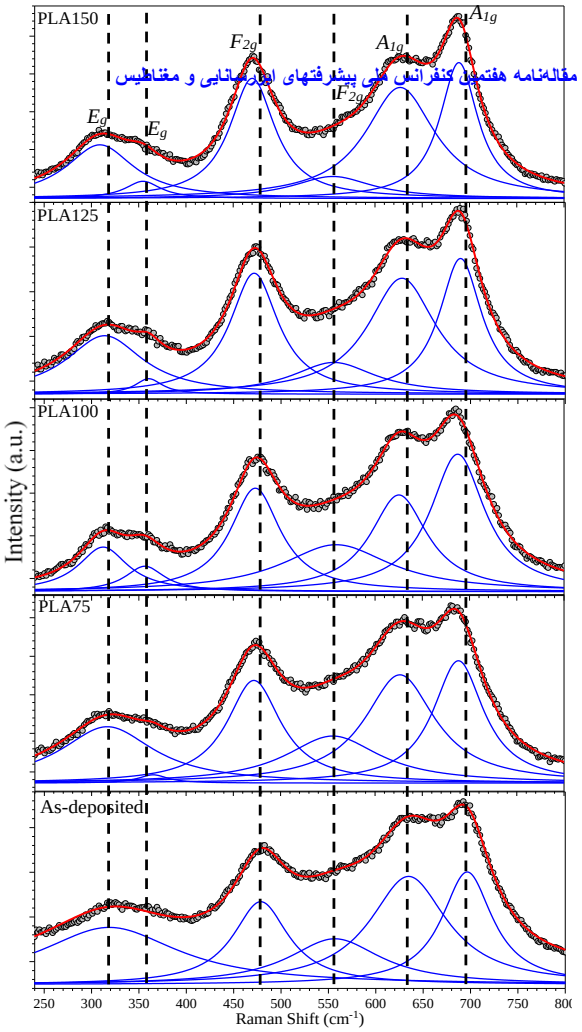
$$A_{1g}(R)+E_g(R)+T_{1g}+3T_{2g}(R)+2A_{2u}+2E_u+4T_{1u}(IR)+2T_{2g}$$

در رابطه‌ی فوق (R) مدهای ارتعاشی فعال رامان و (IR) مدهای ارتعاشی فعال فرو سرخ را نشان می‌دهد. مدهای باقیمانده، مدهای خاموش هستند. مدهای $E_{g,u}$ و $F_{1g,2g,1u,2u}$ به ترتیب تبهگنی دوگانه و سه‌گانه دارند. سه مد صوتی متعلق به گونه‌های F_{1u} است. برازش طیف رامان لایه‌های نازک CFO با منحنی‌های لورنتز، بیش از پنج مد فعال رامان مورد انتظار برای ساختارهای اسپینلی را نشان می‌دهد (شکل۳). قله‌های طیف رامان به مرکزیت فرکانس‌های ۳۱۹، ٤٧٩، ٥٥٧، ٦٣٥ و ٦٩٦ cm^{-1} مدهای فونونی فعال رامان برای نمونه‌ی CFO قبل از بازپخت لیزری است (شکل۳). مد فعال رامان در فرکانس ٦٩٦ cm^{-1} را به کشش متقارن یون‌های اکسیژن نسبت به یون‌های فلز موجود در جایگاه‌های چهار وجهی (Tet) نسبت داده و با A_{1g} نمایش می‌دهند. در ساختار اسپینلی کاملا معکوس، جایگاه‌های چهاروجهی فقط توسط یون‌های Fe اشغال شده‌اند و مد فعال رامان A_{1g} تنها یک قله را نشان می‌دهد در حالی که به علت این‌که CFO ساختار اسپینلی کاملا معکوس ندارد، وقتی تعدادی از یون‌های Fe^{3+} با یون‌های Co^{2+} در جایگاه‌های چهاروجهی جایگزین می‌شوند و در نتیجه مد رامان A_{1g} به دو قله شکافته می‌شود و یک شانه در فرکانس cm^{-1} ٦٣٥ به وجود می‌آید. به علت اختلاف جرم بین کاتیون‌های (u ٥٨/٩٣) Co و (u ٥٥/٨٤) Fe، مد رامان (2) A_{1g} در فرکانس cm^{-1} ٦٩٦ به کشش $(F^{3+}\text{-}O)_{Tet}$ و مد رامان (1)A_{1g} در ٦٣٥ cm^{-1} به کشش $(Co\text{-}O)_{Tet}$ نسبت داده می‌شود. مدهای مرتبط با فرکانس‌های پایین‌تر به پیوندهای متقارن و نامتقارن یون‌های اکسیژن با یون‌های فلز (Co, Fe-O) در جایگاه هشت وجهی نسبت داده می‌شود. این مدها را E_{1g} و F_{2g} نامگذاری می‌کنند. تغییر در فرکانس مدهای رامان نشان‌دهنده‌ی تنش (σ) وارد بر لایه است که توسط فرمول زیر محاسبه می‌شود[3]:

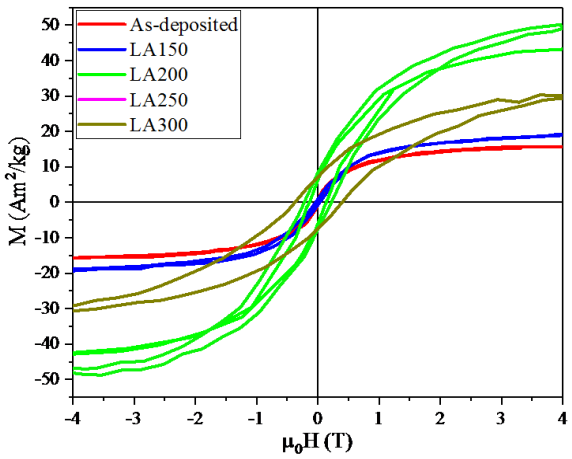
$$\sigma(mPa) = -0.25(\omega_f - \omega_t)$$

که در این رابطه ω_f و ω_t نشان‌دهنده‌ی فرکانس رامان برای لایه و قرص هدف بر حسب cm^{-1} هستند.طیف رامان برای قرص هدف در مقاله [4] آورده شده است. با توجه به رابطه‌ی بالا، لایه‌ی CFO قبل از بازپخت لیزر تحت تنش کمی قرار دارد اما با بازپخت لیزری و افزایش چگالی انرژی لیزر تنش وارد بر لایه افزایش می‌یابد. تابش پرتو لیزر باعث شده است که لایه با زیرلایه تطابق پیدا کند. محاسبه‌ی شدت نسبی قله‌ی A_{1g} به F_{2g} نشان می‌دهد که با افزایش انرژی پالس لیزر مقادیری از یون کبالت از جایگاه چهار وجهی به جایگاه هشت‌وجهی مهاجرت کرده است.

ویژگی‌های مغناطیسی لایه‌های نازک CFO به ساختار بلوری، تنش وارد بر لایه و توزیع کاتیونی وابسته است. بنابراین تغییر چگالی انرژی لیزر می‌تواند بر ویژگی‌های مغناطیسی نمونه‌ها تاثیرگذار باشد. شکل٤ منحنی پسماند مغناطیسی اندازه‌گیری شده در میدان خارجی عمود بر سطح لایه برای لایه‌های CFO قبل و بعد از بازپخت لیزری با چگالی انرژی های مختلف mJ/cm^2 ۷۵–۱۵۰ را نشان می‌دهد.



شکل۳ : طیف رامان لایه‌های CFO قبل و بعد از بازپخت لیزر با چگالی‌های انرژی مختلف.



شکل٤ : منحنی مغناطش لایه‌های CFO قبل و بعد از بازپخت لیزر با چگالی-های انرژی مختلف.

همان‌طور که در شکل٤ دیده می‌شود مغناطش اشباع لایه‌ی CFO قبل از تابش لیزر ١٦ Am2/kg است که این مقدار با مغناطش اشباع به‌دست آمده برای قرص هدف ٨٦ Am^2/kg (μB/formula) متفاوت است. در مورد علت این اختلاف در کارهای پیشین بحث شده است. مغناطش اشباع نمونه‌های تحت تابش پرتو لیزر قرار گرفته به مقادیر ١٩، ٤٣ و ٥٠ Am^2/kg به ترتیب برای نمونه‌های PLA75، PLA100 و PLA125 افزایش می‌یابد. اگرچه با افزایش چگالی انرژی لیزر به ١٥٠mJ/cm^2، M_s به ٣٠ Am^2/kg که تقریبا دو برابر M_s قبل از بازپخت لیزر است، کاهش می‌یابد.

نتیجه گیری

لایه‌های نازک فریت کبالت به روش PLD بر زیرلایه MgO در ساخته شدند و تحت تابش لیزر با انرژی‌های مختلف قرار گرفتند. طیف XRD بهبود ساختار بلوری با افزایش انرژی لیزر را نشان داد. با توجه به طیف رامان توزیع کاتیونی و استرس وارد بر لایه بعد از تابش لیزر و افزایش انرژی آن در راستای افزایش مغناطش اشباع نمونه‌ها است. با توجه به منحنی پسماند نمونه‌ها نتیجه گیری شد که جهت محور آسان در نمونه‌ها به شرایط رشد وابسته است.

مرجع‌ها

[1] F. Eskandari, S. B. Porter, M. Venkatesan, P. Kameli, K. Rode, and J. M. D. Coey, “Magnetization and anisotropy of cobalt ferrite thin films,” *Phys. Rev. Mater.*, vol. **1**, no. 7, p. 74413, Dec. 2017.

[2] T. Nakajima, K. Shinoda, and T. Tsuchiya, “A universal value of effective annealing time for rapid oxide nucleation and growth under pulsed ultraviolet laser irradiation,” *Phys. Chem. Chem. Phys.*, vol. **15**, no. 34, pp. 14384–14389, 2013.

[3] J. P. Singh, R. C. Srivastava, H. M. Agrawal, and R. Kumar, “Micro-Raman investigation of nanosized zinc ferrite: Effect of crystallite size and fluence of irradiation,” *J. Raman Spectrosc.*, vol. **42**, no. 7, pp. 1510–1517, 2011.

[4] F. Eskandari, P. Kameli, and H. Salamati, “Effect of laser pulse repetition rate on morphology and magnetic properties of cobalt ferrite films grown by pulsed laser deposition,” *Appl. Surf. Sci.*, vol. **466**, pp. 215–223, 2019.

ضریب سیبک اتصال نرمال- فرومغناطیس- نرمال بر پایه فسفرین

دوست خواه هروان، لیلا[۱] ؛ عبداللهی پور، بابک[۲]

۱ گروه فیزیک ماده چگال، دانشکده علوم پایه دانشگاه شهید مدنی آذربایجان، تبریز

۲ گروه فیزیک ماده چگال، دانشکده فیزیک، دانشگاه تبریز، تبریز

چکیده

فسفرین یک تک لایه از فسفر سیاه است که ماده‌ای دو بعدی بوده و دارای طیف انرژی ناهمسانگرد است. در این مقاله ضریب سیبک اتصال نرمال-فرومغناطیس-نرمال بر پایه فسفرین برای پتانسیل‌ها و مغناطش‌های متفاوت سد پتانسیل فرومغناطیسی مورد بررسی قرار می‌گیرد. نتایج حاصل نشان می‌دهند که میدان تبادلی تاثیر قابل ملاحظه‌ای بر ضریب سیبک دارد. همچنین ملاحظه می‌شود که با تنظیم شدت سد پتانسیل و اندازه میدان تبادلی می‌توان به مقادیر قابل ملاحظه‌ای از ضریب سیبک دست یافت.

واژه های کلیدی: *فسفرین، سد پتانسیل فرومغناطیسی، رسانایی ترموالکتریکی، ضریب سیبک*

Seebeck coefficient in normal-ferromagnet-normal junction of single layer phosphorene

Doustkhah Heravan, Leila [1]; Abdollahipour, Babak [2]

[1] *Department of Physics, Shahid Madani Azarbaijan University, Tabriz*
[2] *Faculty of Physics, University of Tabriz, Tabriz*

Abstract

Phosphorene is a single layer of black phosphorus and is a two-dimensional material that has an anisotropic energy spectrum. In this paper, we study the Seebeck coefficient of phosphorene-based normal-ferromagnet-normal junctions for different values of the potential and magnetization of the ferromagnetic barrier. The results show that exchange energy in the ferromagnetic region has an essential effect on the Seebeck coefficient. Moreover, we observe that by adjusting the values of the barrier strength and exchange energy in the ferromagnetic barrier we can obtain considerable values for the Seebeck coefficient.
***Keywords**: Phosphorene, ferromagnetic potential barrier, thermoelectric conductance, Seebeck coefficient*

PACS No. 68,72,75

مقدمه

فسفرین، تک لایه‌ای از فسفرسیاه است که در سال ۲۰۱٤ توسط لیو و همکارانش از بلور لایه‌ای فسفر سیاه[۱] با استفاده از تکنیک لایه برداری مکانیکی به روش چسب نواری استخراج شد. منشاء بسیاری از خواص فیزیکی و مکانیکی متفاوت فسفرین نسبت به دیگر مواد دو بعدی، تفاوت در نوع پیوندها در امتدادهای صندلی و زیگزاگ است. چرا که در امتداد صندلی ساختار چروکیده شده‌ای دارد اما در امتداد زیگزاگ به صورت دو لایه ظاهر می‌شود. این تفاوت در ساختار در جهت‌های مختلف منجر به یک ناهمسانگردی طبیعی در ساختار نواری فسفرین می‌شود که آن را از سایر مواد دو بعدی متمایز می‌کند[۱].

اخیرا مطالعه خواص ترموالکتریکی مواد و اتصالات مختلف به منظور تبدیل گرمای تلف شده به انرژی قابل استفاده و افزایش بازده مبدل‌های ترموالکتریکی اهمیت بسزایی یافته است. در این راستا

[۱] Black Phosphorus

مشخص شده است که ساختارهای نانو می‌توانند اثرات ترموالکتریکی قابل ملاحظه‌تری نسبت به مواد توده‌ای از خود نشان دهند[۲]. بر این اساس در این مطالعه خواص ترموالکتریکی یک اتصال نرمال–فرومغناطیس–نرمال بر پایه فسفرین بازای پتانسیل‌ها و مغناطش‌های متفاوت سد پتانسیل فرومغناطیسی مورد بررسی قرار می‌گیرد.

معادلات اساسی

هامیلتونی دو نواری فسفرین در انرژی‌های کم به شکل زیر نوشته می‌شود[۳]:

$$H_0 = f_k I + g_{1k_x}\tau_x + g_{2k_x}\tau_y$$
$$g_{1k_x} = m + \alpha k_x^2 + \beta k_y^2 \text{ ، } g_{2k_x} = \gamma k_x$$
$$f_k = t_4\left(4 - 3k_x^2/2 - k_y^2/2\right) \text{،} m = 0.76\ eV$$
$$\gamma = 2.29\ eV \text{،} \alpha = -0.045\ eV \text{،} \beta = 0.36\ eV \qquad (۱)$$

$\tau_{x,y}$ ماتریس‌های پائولی در پایه نوارهای انرژی هستند و I ماتریس واحد در این پایه است. در حضور میدان تبادلی فرومغناطیسی هامیلتونی فسفرین در فضای نوارهای انرژی و اسپین بصورت زیر نوشته می‌شود:

$$H = H_0 \otimes \sigma_0 + \tau_0 \otimes \vec{h}.\vec{\sigma} + U(r)\tau_0 \otimes \sigma_0 \qquad (۲)$$

در اینجا $\vec{h} = h(\cos\varphi \text{ ،} \sin\varphi)$ اندرکنش تبادلی در ناحیه فرومغناطیسی و $U(r)$ پتانسیل الکترواستاتیک در این ناحیه است، $\vec{\sigma} = (\sigma_x \text{،} \sigma_y)$ ماتریس‌های پائولی در فضای اسپینی، σ_0 و τ_0 به ترتیب ماتریس‌های واحد در فضای اسپینی و نواری را نشان می‌دهند.

برای بررسی ترابرد الکترونی در اتصال نرمال– سد پتانسیل فرومغناطیسی با پهنای d– نرمال در امتداد محور x جهت سهولت در انجام محاسبات و بدست آوردن ماتریس ضرایب از روش ماتریس انتقال استفاده می‌کنیم. ماتریس انتقال کل برای این اتصال بصورت زیر داده می‌شود:

$$M = [P_1.Q_1(0)]^{-1}.[P_2.Q_2(0)].[P_2.Q_2(d)]^{-1}.[P_1.Q_1(d)] \qquad (۳)$$

و ماتریس‌های $p_{1,2}$ و $Q_{1,2}$ بصورت زیر تعریف می‌شوند:

$$P_1 = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ \lambda_1 e^{i\theta_1} & \lambda_1 e^{-i\theta_1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & \lambda_1 e^{i\theta_1} & \lambda_1 e^{-i\theta_1} \end{pmatrix}$$

$$P_2 = \begin{pmatrix} \lambda_{up} e^{-i(\phi+\theta_{up})} & \lambda_{up} e^{-i(\phi-\theta_{up})} & -\lambda_{down} e^{-i(\phi+\theta_{down})} & -\lambda_{down} e^{-i(\phi-\theta_{down})} \\ e^{-i\phi} & e^{-i\phi} & -e^{-i\phi} & -e^{-i\phi} \\ \lambda_{up} e^{-i\theta_{up}} & \lambda_{up} e^{i\theta_{up}} & \lambda_{down} e^{-i\theta_{down}} & \lambda_{down} e^{i\theta_{down}} \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

$$Q_{1,2}(x) = \begin{pmatrix} e^{ik_{1,2}x} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-ik_{1,2}x} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{ik'_{1,2}x} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-ik'_{1,2}x} \end{pmatrix} \qquad (٤)$$

$k_{1,2}$ و $k'_{1,2}$ به ترتیب از حل عددی روابط ویژه مقداری در نواحی نرمال و فرومغناطیس به دست می‌آیند. ماتریس M بدست آمده یک ماتریس ٤*٤ خواهد بود. اگر اسپین الکترون فرودی، اسپین بالا باشد ضرایب عبوری بصورت زیر بدست می‌آیند:

$$t^{\uparrow\uparrow} = \frac{-M_{33}}{M_{13}M_{31} - M_{11}M_{33}} \text{ ، } t^{\uparrow\downarrow} = \frac{M_{31}}{M_{13}M_{31} - M_{11}M_{33}} \qquad (۵)$$

و اگر اسپین الکترون فرودی، اسپین پایین باشد برای ضرایب عبوری خواهیم داشت:

$$t^{\downarrow\uparrow} = \frac{-M_{13}}{M_{33}M_{11} - M_{13}M_{31}} \text{ ، } t^{\downarrow\downarrow} = \frac{M_{11}}{M_{33}M_{11} - M_{13}M_{31}} \qquad (٦)$$

در نتیجه ماتریس ضرایب عبور یک ماتریس ۲*۲ بصورت زیر است که مولفه‌های آن توسط روابط بالا مشخص شده‌اند.

$$t = \begin{pmatrix} t^{\uparrow\uparrow} & t^{\uparrow\downarrow} \\ t^{\downarrow\uparrow} & t^{\downarrow\downarrow} \end{pmatrix} \qquad (۷)$$

رسانایی برابر است با رد ماتریس احتمال عبور ($T = tt^{\dagger}$) که بر روی مدهای عرضی مختلف انتگرال‌گیری می‌شود:

$$G = G_0 \int \frac{dk_y}{2\pi}\left(|t^{\uparrow\uparrow}|^2 + |t^{\downarrow\downarrow}|^2\right) \qquad (۸)$$

که G_0 حداکثر رسانایی اتصال است.

در این تحقیق ضریب سیبک فسفرین را محاسبه می‌کنیم. ابتدا ضریب رسانایی ترموالکتریک فسفرین را پیدا می‌کنیم و سپس با

استفاده از بکارگیری آن در فرمول ضریب سیبک، ضریب سیبک اتصال مورد نظر را محاسبه می‌کنیم. ضریب رسانایی ترموالکتریکی اتصال بر پایه فسفرین با استفاده از تقریب زومرفلد بصورت رابطه زیر محاسبه می‌شود:

$$L = L_0 \int_0^{\frac{\pi}{2}} \left(\frac{\partial k}{\partial E} T + k \frac{\partial T}{\partial E}\right) cos\theta_1 \, d\theta_1 \qquad (۹)$$

L_0 حداکثر مقدار ضریب رسانایی ترموالکتریک است. با پیدا کردن L می‌توان با استفاده از فرمول زیر ضریب سیبک فسفرین را بدست آورد:

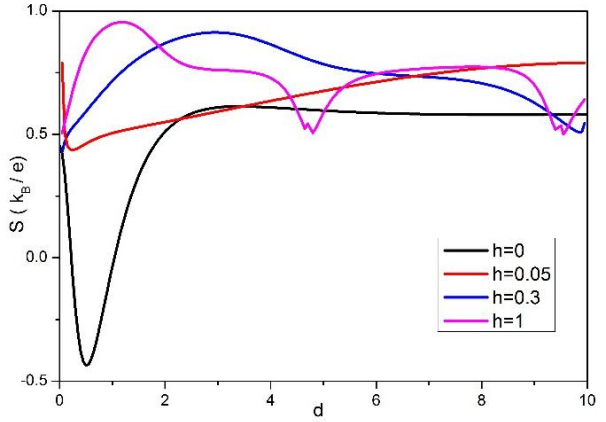
$$S = \frac{\pi^2 k_B}{3e} (k_B T) \frac{L}{G} \qquad (۱۰)$$

T پارامتر دما است که آن را در حد دماهای پایین و در حدود ۱۰ درجه کلوین درنظر می‌گیریم تا بتوانیم از تقریب زومرفلد برای پیدا کردن ضریب رسانایی ترموالکتریک (L) و همچنین ضریب سیبک (S) اتصال بهره ببریم. ضریب سیبک را بر حسب واحد $\frac{k_B}{e}$ بدست می‌آوریم.

بررسی نتایج

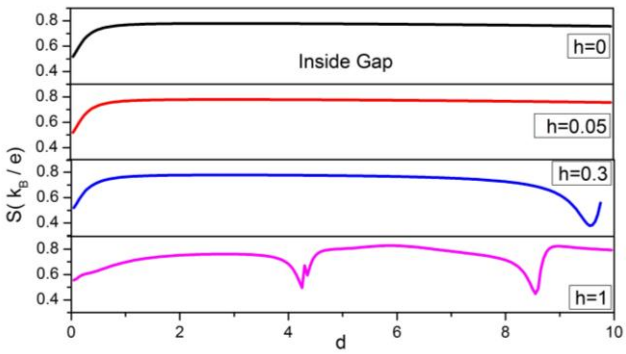
در ادامه ضریب سیبک فسفرین تک لایه شامل تک سد پتانسیل فرومغناطیسی را در انرژی $E/2m = 0.01$ که دارای بیشترین مقدار ضریب سیبک است، برای سه حالت متفاوت با مغناطش‌های مختلف مورد بررسی قرار می‌دهیم. سه حالت متفاوت بازای سه مقدار متفاوت انرژی سد پتانسیل که در بازه‌های انرژی $\mathrm{E} + 2m < U$، $\mathrm{E} \leq U \leq \mathrm{E} + 2m$ و $U < E$ قرار می‌گیرند و به ترتیب نشان دهنده قرار گرفتن انرژی الکترون‌های فرودی در نوار ظرفیت، داخل گاف نواری و نوار رسانش در ناحیه سد پتانسیل فرومغناطیسی است حاصل می‌شوند.

در شکل (۱) ضریب سیبک نوار رسانش بازای $h = 0, h = 0.05,$ $h = 0.3, h = 1$ با انرژی سد پتانسیل فرومغناطیسی $U/2m =$ 0.005 به صورت تابعی از پهنای سد پتانسیل رسم شده است. مشاهده می‌شود که مقدار ضریب سیبک در ابتدا در مغناطش صفر در کمترین مقدار خود قرار دارد با افزایش مغناطش ضریب سیبک نیز افزایش پیدا می‌کند و رفته رفته مقدار قابل ملاحظه‌ای پیدا می‌کند.



شکل۱: ضریب سیبک فسفرین تک لایه با تک سد پتانسیل فرومغناطیسی در نوار رسانش، بازای $E/2m = 0.01$ و $U/2m = 0.005$، بازای مغناطش 0 (منحنی سیاه رنگ)، مغناطش 0.05 (منحنی قرمز رنگ)، مغناطش 0.3 (منحنی آبی رنگ) و مغناطش 1 (منحنی صورتی رنگ).

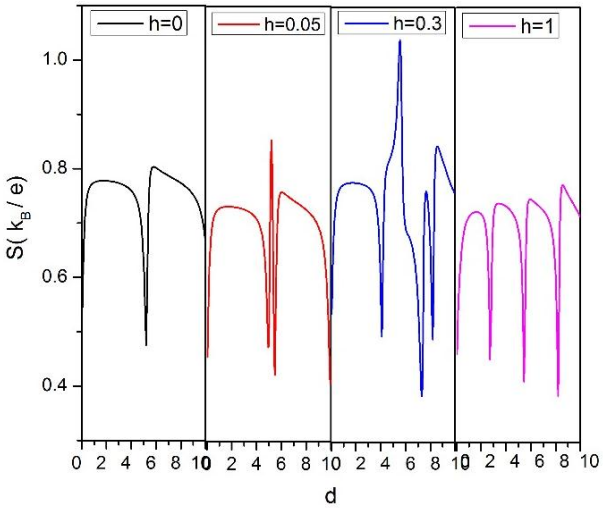
در شکل (۲) ضریب سیبک برای داخل گاف بازای مقدار انرژی $E/2m = 0.01$ و مقدار انرژی سد پتانسیل فرومغناطیسی $U/2m = 1$ بر حسب پهنای سد پتانسیل برای مغناطش‌های مختلف رسم شده است. در رسانایی داخل گاف برای این مقدار از انرژی‌ها مشاهده می‌کنیم که زمانی که مغناطش صفر است، رسانایی از مقدار ۱ شروع به کم شدن می‌کند و با افزایش پهنای سد پتانسیل به مقدار صفر می‌رسد. با افزایش مقدار مغناطش، در رسانایی شاهد پیک‌هایی هستیم که هر چه مقدار مغناطش بیشتر می‌شود تعداد این پیک‌ها نیز افزایش پیدا می‌کنند. ضریب سیبک نیز رفتار مشابهی دارد و با افزایش مغناطش فرورفتگی‌هایی در آن پدیدار می‌شوند و تعداد آنها رفته رفته بیشتر می‌شوند. همچنین با افزایش پهنای سد پتانسیل فرومغناطیسی اندازه فرورفتگی‌ها افزایش پیدا می‌کنند.



شکل۲: ضریب سیبک فسفرین تک لایه با تک سد پتانسیل فرومغناطیسی در گاف نواری، بازای $E/2m = 0.01$ و $U/2m = 1$، بازای مغناطش 0 (منحنی سیاه

رنگ)، مغناطش 0.05 (منحنی قرمز رنگ)، مغناطش 0.3 (منحنی آبی رنگ) و مغناطش 1 (منحنی صورتی رنگ).

در شکل (۳) ضریب سیبک برای نوار ظرفیت بازای مقدار انرژی $E/2m = 0.01$ و مقدار انرژی سد پتانسیل فرومغناطیسی $U/2m = 1.5$ بر حسب پهنای سد پتانسیل برای مغناطش‌های مختلف رسم شده است. مشاهده می‌شود در مقادیری از پهنای سد پتانسیل با افزایش مغناطش، تعداد این پیک های تشدیدی بیشتر و به هم نزدیک تر می شوند. در مغناطش های بالاتر $h = 1$ و پایین تر $h = 0$ که یک حالت ثابتی در سیستم برقرار است تقریبا شدت ضریب سیبک از روند یکسانی تبعیت می‌کند و افزایش چندانی مشاهده نمی‌شود اما در مغناطش های $h = 0.05$ و $h = 0.3$ که سیستم در حال تغییر و رسیدن به یک حالت یکنواخت است در ضریب سیبک شاهد پیک هایی با شدت قابل ملاحظه‌ای هستیم.



شکل۳: ضریب سیبک فسفرین تک لایه با تک سد پتانسیل فرومغناطیسی در نوار ظرفیت، بازای $E/2m = 0.01$ و $U/2m = 1.5$، بازای مغناطش 0 (منحنی سیاه رنگ)، مغناطش 0.05 (منحنی قرمز رنگ)، مغناطش 0.3 (منحنی آبی رنگ) و مغناطش 1 (منحنی صورتی رنگ).

نتیجه‌گیری

با بررسی نتایج بدست آمده از محاسبات مربوط به ضریب سیبک اتصال فسفرینی شامل تک سد پتانسیل فرومغناطیسی نتیجه می‌گیریم که انرژی تبادلی تاثیر قابل ملاحظه‌ای بر ضریب سیبک دارد و می‌توان با تنظیم شدت سد پتانسیل و انرژی تبادلی بازای پهناهای مشخصی از سد پتانسیل فرومغناطیسی به مقادیر قابل ملاحظه‌ای از ضریب سیبک دست یافت.

مرجع‌ها

[1] A. Brown, S. Rundqvist, *"Refinement of the crystal structure of the black phosphorus"*, Acta. Cryst. **19**, (1965) 684-685.
[2] D. Suszalski, G. Rut, and A. Rycerz *"Lifshitz transition and thermoelectric properties of bilayer graphene"*, Phys. Rev. B **97**, (2018) 125403.
[3] 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.

فازهای کلاسیکی مدل $\Gamma-\Gamma'$ شبکه لانه زنبوری

احمدی‌یزدی، مجتبی [1]؛ زارع ، محمدحسین [2]؛ فضیله، فرهاد [1]

[1] دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان

[2] دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی قم، قم

چکیده

در این مقاله علاقه‌مند هستیم سیمای فاز کلاسیکی مدل ناهمسانگرد $\Gamma-\Gamma'$ شبکه لانه زنبوری که برای توصیف $\alpha-RuCl_3$ *که تحت تاثیر پیچش هشت وجهی قرار گرفته است، مورد مطالعه قرار دهیم. نتایج به‌دست آمده با استفاده از روش کلاسیکی پی در پی بیان‌گر این است که این سیمای فاز، شامل فازهای آیزینگی پادفرومغناطیس، نظم های* 120° *و فرومغناطیس است.*

کلید واژه ها: *مدل ناهمسانگرد* $\Gamma-\Gamma'$ شبکه لانه زنبوری، *روش پی در پی، سیمای فاز کلاسیکی.*

Classical phases of the honeycomb $\Gamma-\Gamma'$ model

Ahmadi-Yazdi, Mojtaba [1]; Zare, Mohammad-Hossein [2]; Fazileh, Farhad [1]

[1] *Department of Physics, Isfahan University of Technology, Isfahan,*

[2] *Department of Physics, Qom University of Technology, Qom*

Abstract

The honeycomb $\Gamma-\Gamma'$ *model is a suitable model to describe the magnetism in the* $\alpha-RuCl_3$ that affected by the inclusion of oxygen octahedral distortion. *In this paper, using iteration method, we obtained the classical phase diagram includes antiferromagnetic state,* 120° orders and ferromagnetism state.

key words: *honeycomb* $\Gamma-\Gamma'$ *model, iteration method, classical phase diagram.*

مقدمه

مطالعه‌ی فاز اسپین مایع کوانتومی از جنبه‌های متفاوتی، قابل اهمیت است. در فاز مایع اسپینی کوانتومی، درهم‌تنیدگی بلندبردی بین اسپین‌ها وجود دارد. این درهم‌تنیدگی بلندبرد بین اسپین‌ها، اهمیت زیادی در ساخت کامپیوترهای کوانتومی که یکی از مؤلفه-های مهم در آن ارتباطات کوانتومی است، به حساب می‌آید [1]. بارزترین ویژگی فاز مایع اسپین کوانتومی با درهم‌تنیدگی‌های بلند-برد، وجود برانگیختگی‌های اسپینی کسری است که به عنوان مایوران‌های فرمیونی شناخته می‌شوند. مطالعات اخیر نشان می‌دهد که مواد کیتائو می‌توانند کاندیداهای مناسبی برای مشاهده این نوع برانگیختگی‌های کسری، همان مایوران‌های فرمیونی که همانند آنیون‌ها از آمار غیرآبلی پیروی می‌کنند، باشند. اهیمت مایوران‌های فرمیونی در محاسبات کوانتومی توپولوژیک است[2-3] . مواد تجربی که به عنوان گزینه‌های احتمال وجود مایع اسپینی کوانتومی مطرح شده‌اند، بیشتر از نوع عایق‌های مات اسپین–مدار هستند که اثر متقابل برهم‌کنش کولنی و جفت‌شدگی اسپین–مدار، نقش مهمی در مشاهده رفتار عایق مات‌گونه در این گونه سامانه‌ها دارد. موادی نظیر عناصر فلزات واسطه که اوربیتال‌های 4d و 5d آن‌ها در حال پر شدن است [4-5]، گزینه‌های جدی برای مشاهده فاز مایع اسپین کوانتومی کیتائو مطرح هستند. موادی که تاکنون برای تشخیص فاز مایع اسپین کوانتومی مطرح شده‌اند عبارتند

از A_2IrO_3 (A=Li, Na) [6-8] و $\alpha-RuCl_3$ [9-10]. در $\alpha-RuCl_3$ برهم‌کنش‌ها اسپینی به چینش لایه‌ای و هم‌چنین پیچش هشت وجهی اکسیژن حول هر اتم Ru حساس است که می‌توان با دست‌کاری، برهم‌کنش‌های ناهمسانگرد $\Gamma-\Gamma'$ نسبت به برهمکنش‌های کیتائو و هایزنبرگ غالب شوند[11-12].

در این مقاله علاقه‌مند هستیم که سیمای فاز کلاسیکی *مدل ناهمسانگرد* $\Gamma-\Gamma'$ شبکه لانه زنبوری را با استفاده از روش کمینه‌سازی پی‌درپی بررسی کنیم.

مدل و روش

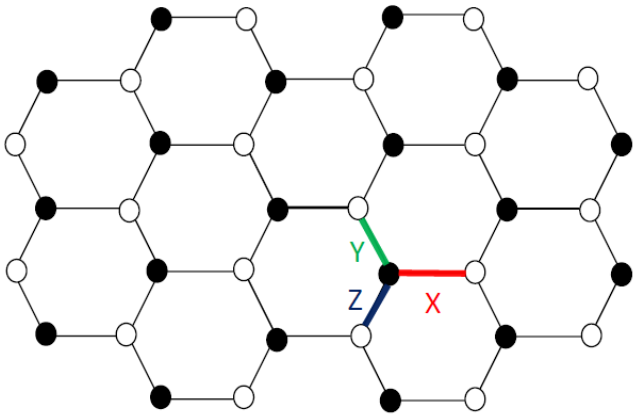
در مواد مغناطیسی $\Gamma-\Gamma'$ برهمکنش‌های اسپینی غیرقطری نسبت به سایر برهمکنش‌ها، یعنی کیتائو و هایزنبرگ، غالب هستند. مدل $\Gamma-\Gamma'$ شبکه لانه زنبوری به صورت زیر داده می‌شود:

$$H=\sum_{<ij>\|\gamma}\Gamma(S_i^{\alpha}S_j^{\beta}+S_i^{\beta}S_j^{\alpha})+\sum_{<ij>\|\gamma}\Gamma'[(S_i^{\alpha}+S_i^{\beta})S_j^{\gamma}+S_i^{\gamma}(S_j^{\alpha}+S_j^{\beta})] \quad (1)$$

در این رابطه، $S_i^{\gamma}\ (\gamma=x,y,z)$ مولفه ی γ عملگر اسپین 1/2 روی جایگاه iام است. روی پیوندهای z، $(\alpha,\beta,\gamma)=(x,y,z)$ و با جایگشت، می توان برای سایر پیوندهای x و y به دست آورد که در شکل (1) نشان داده شده است. همچنین، Γ و Γ' شدت برهم کنش‌های تبادلی غیرقطری وابسته به نوع پیوند را نشان می‌دهند. در محاسبات، ثابت های جفت‌شدگی در این مدل به صورت زیر بر حسب $\varphi\in[0,2\pi]$ به صورت زیر پارامتری شده اند:

$$\Gamma=\cos\varphi,\Gamma'=\sin\varphi \quad (2)$$

همان‌طور که از این رابطه مشخص است که هر دو نوع برهم‌کنش با انتخاب φهای متفاوت می‌تواند از هر دو نوع فرومغناطیس و پادفرومغناطیس باشند.



شکل (1): شبکه لانه زنبوری، که هر یاخته واحد آن شامل دو جایگاه است که به دایره های سفید و سیاه نمایش داده شده است..

قابل ذکر است که سیمای فاز کلاسیکی، نقش مهمی در کاهش محاسبات عددی برای به‌دست آوردن سیمای فازکوانتومی دارد. در این مقاله، برای محاسبه‌ی سیمای فاز کلاسیکی، از روش کمینه سازی پی‌درپی [13] استفاده کرده‌ایم. برتری این روش نسبت به روش لاتینجر-تیزا این است که در این روش، قید قوی، یعنی بزرگی هر اسپین در هر جایگاه برابر با واحد باشد، برقرار است. در این روش، از یک حالت اولیه‌ی شروع می‌کنیم که اسپین‌ها به صورت کاملاً تصادفی روی جایگاه‌های مختلف شبکه جهت‌گیری کرده‌اند. در این روش، برای پیدا کردن حالتی با کمترین انرژی، اثر برهم‌کنش هر اسپین با اسپین‌های همسایه‌اش را به صورت یک میدان میانگینی در نظر می گیریم. برای کمینه‌سازی انرژی هر اسپین، هر اسپین باید با میدان موضعی که توسط همسایگانش احساس می‌کند، به صورت پادموازی قرار گیرد. برای مدل $\Gamma-\Gamma'$ شبکه لانه زنبوری، میدان موضعی که اسپین در جایگاه iام احساس می‌کند از رابطه زیر به‌دست می‌آید:

$$
\begin{aligned}
M_i = [& \sum_{<ij>\|x} \Gamma'(S_j^y + S_j^z) + \sum_{<ij>\|y} (\Gamma S_j^z + \Gamma' S_j^y) \\
& + \sum_{<ij>\|z} (\Gamma S_j^y + \Gamma' S_j^z)]\hat{i} \\
& + [\sum_{<ij>\|x} (\Gamma S_j^z + \Gamma' S_j^x) + \sum_{<ij>\|y} \Gamma'(S_j^x + S_j^z) \\
& + \sum_{<ij>\|z} \Gamma S_j^x + \Gamma' S_j^z]\hat{j} \\
& + [\sum_{<ij>\|x} \Gamma S_j^y + \Gamma' S_j^x + \sum_{<ij>\|y} (\Gamma S_j^x + \Gamma' S_j^y) \\
& + \sum_{<ij>\|z} \Gamma'(S_j^x + S_j^y)]\hat{k}
\end{aligned}
\qquad (3)
$$

بنابراین هامیلتونی موثر اسپینی در تقریب میدان میانگین، می توان به صورت زیر بازنویسی کرد:

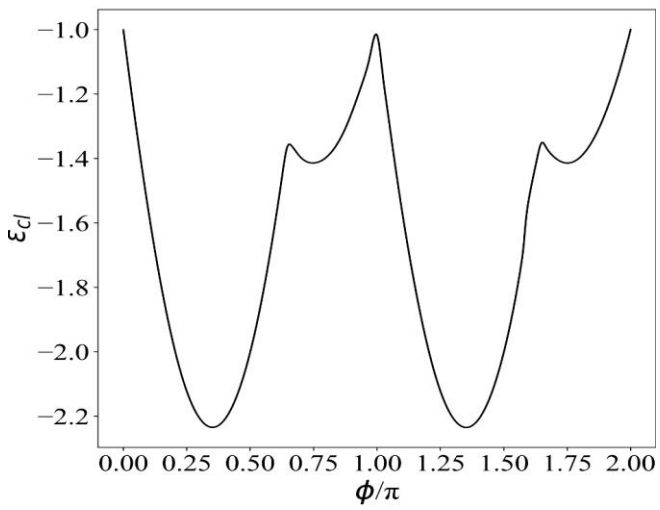
$$H_{MF} = \sum_i \vec{S_i}.\vec{M_i} \qquad (4)$$

همان‌طور که از این رابطه واضح است به ازای ثابت‌های جفت شدگی مختلف، هر آرایش اسپینی که در آن هر اسپین در جهت خلاف میدان موضعی‌اش باشد، می‌توان به عنوان حالت پایه مغناطیسی در نظر گرفت.

نتایج

در محاسبات، از شبکه لانه زنبوری که شامل دو زیرشبکه مثلثی با شکل های متوازی الاضلاع با شرایط مرزی دوره ای به اندازه‌های 8×8، 12×12 و 16×16 که در کل شامل N_s جایگاه به ترتیب 128، 288 و 512 است شروع کرده‌ایم. حلقه بزرگی شامل تعداد نامشخص تکرار اجرا می‌کنیم که در هر تکرار از حلقه، ما N_l اسپین را به صورت تصادفی انتخاب می‌کنیم. جهت N_l اسپین، به منظور کمینه شدن انرژی سیستم، طوری انتخاب می‌شوند که در خلاف جهت میدان موضعی‌شان قرار گیرد. این حلقه، زمانی متوقف می‌شود که اختلاف انرژی میان سیستم پیکربندی اسپینی جدید و سیستم مرحله قبل، از مقدار مشخصی کمتر شود.

در این مقاله، برای این‌که مطمئن شویم که سیستم به ازای ثابت‌های جفت‌شدگی متفاوت در هامیلتونی، در کمینه‌ی کلی‌اش قرار گرفته، از روش کمینه‌سازی پی در پی استفاده کرده‌ایم. هم‌چنین برای فهم حالت پایدار مغناطیسی به ازای هر نقطه از

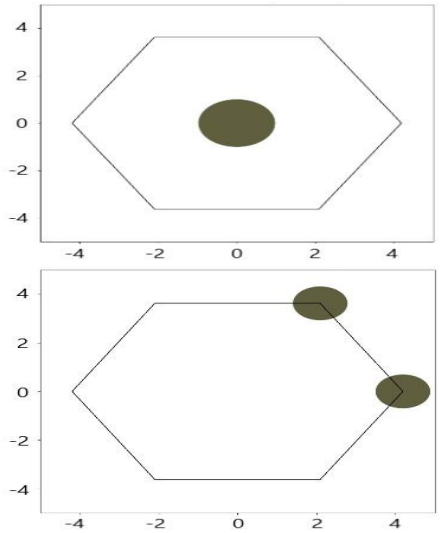


شکل(2): انرژی حالت پایه مدل $\Gamma-\Gamma'$ شبکه لانه زنبوری

سیمای فاز کلاسیکی، آرایش اولیه‌ی که اسپین‌ها انتخاب می‌کنند را متنوع در نظر گرفته‌ایم که از آرایش اسپینی نهایی با انرژی کمتر، اطمینان حاصل گردد.

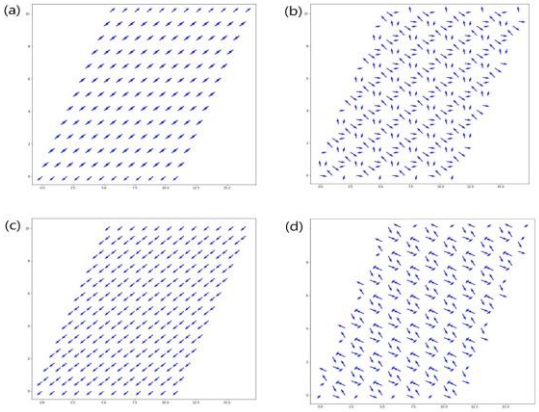
در نهایت با محاسبه‌ی تبدیل فوریه از آرایش اسپینی به‌دست آمده، می‌توان تصوری از آرایش اسپینی متصور شد. این روش برای مطالعه‌ی هر دو حالت مغناطیسی با بردار موج‌های جور و ناجور مناسب است. بعد از محاسبه‌ی تبدیلات فوریه از مؤلفه‌های اسپین، می‌توان توزیع بزرگی فوریه مؤلفه‌های اسپین را در منطقه اول بریلوئن رسم کنیم. با رسم این کمیت در منطقه‌ی اول بریلوئن، یک یا چند قله مشاهده می‌شود. بردار موج متناظر با این قله‌ها، مؤلفه‌های بردار موج مربوط به آن حالت را می‌دهد.

شکل (2)، انرژی کلاسیکی این مدل بر حسب پارامتر φ را نشان می‌دهد. همانطور که مشخص است به ازای $\varphi = 0.67, 1, 1.67$ تکینگی‌هایی در نمودار انرژی وجود دارد که بیان‌گر گذار فازهای است. برای تبیین فازهای مغناطیسی مدل مورد نظر، نیاز است که کمیت عامل ساختار را محاسبه کنیم. شکل (3)، عامل ساختار را نشان می‌دهد که نتایج به‌دست آمده بیان‌گر این است که به ازای $0<\varphi<0.67$ و $1<\varphi<1.67$، عامل ساختار در نقطه Γ از منطقه اول بریلوئن، مقدار بیشینه اش را دارد که این نشان می‌دهد که به ازای این پارامترها نظم‌های فرومغناطیس و پادفرومغناطیس می‌تواند پایدار باشند. در ضمن، $0.67<\varphi<1$ و



شکل (3): ردیف بالا، عامل ساختار مربوط به فازهای مغناطیسی فرومغناطیس و پادفرومغناطیس را نشان می‌دهد و ردیف پایین، عامل ساختار مربوط به فاز 120° است.

$1.67<\varphi<2$ قله‌های عامل ساختار در گوشه‌های منطقه اول بریلوئن قرار دارند که بیان‌گر پایداری نظم 120° است، شکل (3) را ببینید. همان‌طور که در شکل (3) نشان داده شده است از آنجا که عامل ساختار برای فازهای فرومغناطیس و پادفرومغناطیس یکسان است، نیاز است که برای تشخیص دقیق فازهای مغناطیسی، از پیکربندی اسپینی در فضای واقعی استفاده کنیم. آرایش اسپینی در فضای واقعی به ازای φهای در شکل (4) نمایش داده شده‌اند. نتایج به دست آمده بیان‌گر این است که برای $0<\varphi<0.67$ نظم پادفرومغناطیس، $0.67<\varphi<1$ نظم 120°، $1<\varphi<1.67$ نظم فرومغناطیس و به ازای $1.67<\varphi<2$ نظم 120° پایدار هستند. همان‌طور که مبرم است تفاوت مابین دو نظم 120° از آرایش متفاوت دو اسپین به ازای هر یاخته واحد شبکه لانه زنبوری، ناشی می‌شود. این نتایج با نتایجی که قبلاً در مرجع [11] با استفاده از روش لاتینجر-تیزا به‌دست آمده، هم‌خوانی کامل دارد. در کارهای آینده، علاقه‌مند هستیم که اثر جهت‌گیری‌های متفاوت میدان مغناطیسی خارجی در پایداری نظم‌های کلاسیکی مورد مطالعه قرار دهیم.



شکل4: آرایش اسپینی در فضای واقعی به ازای φهای متفاوت. (a) $0<\varphi<0.67$، (b) $0.67<\varphi<1$، (c) $1<\varphi<1.67$ و (d) $1.67<\varphi<2$.

نتیجه گیری

مواد مغناطیسی $\Gamma-\Gamma'$ برهمکنش‌های اسپینی غیرقطری نسبت به سایر برهمکنش‌ها، یعنی کیتائو و هایزنبرگ، غالب هستند. در این مقاله، مدل $\Gamma-\Gamma'$ شبکه لانه زنبوری را با استفاده از روش پی‌درپی مورد مطالعه قررا دادیم. اثر متقابل برهمکنش‌های Γ و Γ' باعث پایداری فازهای مغناطیسی پادفرومغناطیس، فرومغناطیس و نظم 120° روی شبکه لانه‌زنبوری شده‌اند.

مرجع‌ها

[1] A. Kitaev and J. Preskill, *Phys. Rev. Lett.* **96**, (2006) 110404.
[2] A.Y. Kitaev, *Annals of Phys.* **303** (2003) 2.
[3] A. Y. Kitaev, *Annals of Phys.* **321** (2006) 2.
[4] G. Jackeli and G. Khaliullin, *Phys. Rev. Lett.* **102** (2009) 017205.
[5] J. Chaloupka, G. Jackeli, and G. Khaliullin, *Phys. Rev. Lett.* **105** (2010) 027204.
[6] W. Witczak-Krempa, G. Chen, Y. B. Kim, and L. Balents, *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* **5** (2014) 57.
[7] Singh, Y. et al. *Phys. Rev. Lett.* **108** (2012) 127203.
[8] K. W. Plumb, *Phys. Rev.* B **90** (2014) 041112.
[9] L. J. Sandilands, Y. Tian, K. W. Plumb, Y.-J. Kim, and K. S. Burch, *Phys. Rev. Lett.* **114** (2015) 147201.
[10] H.-S. Kim, V. V. Shankar, A. Catuneanu, and H.-Y Kee. *Phys. Rev. B* **91** (2015) 241110.
[11] Qiang Luo and Hae-Young Kee, Phys. Rev. B **105** (2022) 174435.
[12] U. Kumar, S. Banerjee, and S.-Z. Lin, arXiv:2111.01316.
[13] G. G. Johnson, *Proc. Amer. Math. Soc.* **34** (1972) 193.

بررسی تغییرات خواص جذب مایکروویو با دمای سنتز در نانولوله‌های کربنی پرشده با آهن

پوربافرانی، احمد

دانشکده الکتروسرام و مهندسی برق، دانشگاه صنعتی مالک اشتر، انتهای خیابان فردوسی، شاهین شهر

چکیده

در این تحقیق؛ نانولوله‌های کربنی پرشده با آهن به روش رسوب شیمیایی بخار، سنتز شده و خواص جذب مایکروویو این نانولوله‌ها با تغییر پارامترهای سنتز بررسی شده است. آنالیز پراش پرتو X از نمونه های سنتز شده در دماهای مختلف، شکل گیری فازهای متفاوت در نمونه‌ها را نشان می دهند. تصاویر FESEM و TEM از نمونه‌ها، نشان دهنده همگنی و یکنواختی قطر نانولوله‌های کربنی در محدوده‌ی زیر ۱۰۰ nm است. گذردهی الکتریکی و تراوایی مغناطیسی نانولوله‌ها برای بررسی قابلیت‌های جذب مایکروویو آنها اندازه‌گیری شد. نتایج اندازه‌گیری نشان می‌دهد که نانولوله‌های پرشده با آهن، دارای گذردهی الکتریکی بزرگی هستند و با پهنای فرکانسی ۵ GHz جذب خوبی از خود نشان می‌دهند.

واژه های کلیدی: *نانولوله‌های کربنی پرشده با آهن، دمای سنتز، گذردهی الکتریکی، اتلاف بازتابی*

Investigation of changes in microwave absorption properties with synthesis temperature in iron-filled carbon nanotubes

Pourbafrani, Ahmad

Department of Electroceramics and Electrical Engineering, Malek Ashtar University of Technology, Shahin Shahr

Abstract

In this study; Iron-filled carbon nanotubes have been synthesized by chemical vapor deposition and the microwave absorption properties of these nanotubes have been investigated by changing the synthesis parameters. X-ray diffraction analysis of the synthesized samples at different temperatures shows the formation of different phases in the samples. FESEM and TEM images of the samples show the homogeneity and uniformity of the diameter of carbon nanotubes in the range below 100 nm. The electrical permittivity and magnetic permeability of the nanotubes were measured to evaluate their microwave absorption capabilities. The measurement results show that iron-filled nanotubes have a large electrical conductivity and show good absorption with a frequency band of 5 GHz.

***Keywords**: Iron-filled carbon nanotubes, Synthesis temperature, Electrical permittivity, Reflection loss*

PACS No. 70

مقدمه

مواد جاذب امواج مایکروویو دارای کاربردهای روزافزونی در مخابرات و صنایع نظامی هستند. این مواد باید داری وزن و ضخامت کمی باشند و در عین حال توانایی جذب امواج مایکروویو در آنها زیاد باشد. قابلیت جذب مواد مختلف بسیار مورد بررسی قرار گرفته‌اند که مهم‌ترین این مواد شامل فریت‌ها، آلیاژهای مغناطیسی، مواد بر پایه‌ی کربن نظیر نانولوله‌های کربنی و ... است. در این میان نانولوله‌های کربنی پرشده با آهن به دلیل ضخامت پایین، دانسیته کم، جذب قوی، چسبندگی به سطح و پایداری در گستره‌ی دمایی مناسب، نامزد ایده‌آلی به‌عنوان فیلر در

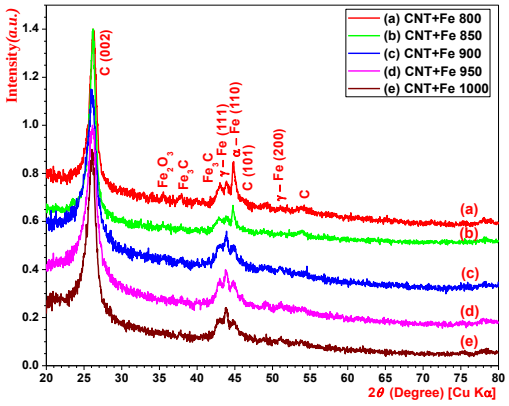
کامپوزیت‌های جاذب است [۱]. از آنجایی که حصول تمام این ویژگی‌ها با کاربرد یک ماده به تنهایی امکان‌پذیر نیست، از این رو محققین به سمت توسعه‌ی مواد کامپوزیتی یا مواد هتروساختار[۱] برای رسیدن به اتلاف مغناطیسی و دی‌الکتریکی به طور هم‌زمان، روی آورده‌اند [۱-۵]. علاوه بر این سه عامل مهم باعث تضعیف موج الکترومغناطیس و افزایش جذب مایکروویو در نانولوله‌های کربنی پرشده با آهن می‌شود: اولاً به دلیل نسبت طول به عرض بالای نانولوله‌ها، ناهمسانگردی شکل افزایش یافته و فاکتور مغناطیس‌زدایی کاهش می‌یابد. ثانیاً مجزا بودن مواد مغناطیسی کپسوله‌شده درون نانولوله‌های کربنی موجب کاهش جفت‌شدگی مغناطیسی بین آن‌ها می‌شود و ثالثاً سازوکارهای پلاریزاسیون فصل مشترک نیز بر روی نانولوله‌ها فعال می‌شود. هدف از این پژوهش بررسی خواص جذب مایکروویو در نانولوله‌های کربنی پرشده با آهن (Fe-CNTs) با تغییر پارامترهای سنتز است.

تهیه‌ی نمونه‌ها

یکی از متداول‌ترین روش‌های ساخت نانولوله‌های کربنی پرشده با ذرات فلزی، روش رسوب شیمیایی بخار[۲] (CVD) در حالت درجا (کاتالیست شناور) و از نوع منبع مایع می‌باشد، به طوری که منبع هیدروکربنی به درون محفظه‌ی واکنش تزریق شده و پس از تجزیه شدن دردمای بالا، بر روی ذرات کاتالیست فلزی موجود در محفظه و یا دیواره‌ی داخلی محفظه به صورت نانولوله رسوب می‌کند. در این پژوهش از حلال سیکلوهگزان به عنوان منبع کربنی و از فروسین به عنوان کاتالسیت شناور استفاده شده است. محلول سیکلوهگزان حاوی فروسین با غلظت ۲۰g/L و با نرخ میانگین مشخص به صورت دستی و با استفاده از سرنگ وارد محفظه‌ی کوره‌ی پیشگرم (آون) با دمای ۲۰۰ °C شده و پس از تجزیه وارد کوره تیوبی با دمای بالاتر در محدوده‌ی ۸۰۰-۱۰۰۰°C می‌شود. پس از رسیدن آون و کوره‌ی تیوبی به دماهای موردنظر، گاز آرگون با نرخ میانگین ۶۵۰ mL/min وارد محفظه‌ی لوله‌ی کوارتز می‌شود. آزمایش در دماهای مختلف برای کوره تیوبی و با نرخ‌های تزریق مختلف محلول تکرار شد تا نانولوله‌های کربنی پرشده با آهن به صورت پودر تولید شوند. برای تهیه کامپوزیت نسبت وزنی مناسب پودر به پارافین را با تولوئن مخلوط کرده و آن را به مدت ۲۰ دقیقه سونیکیت می‌کنیم. سپس نمونه‌ها را در آون قرار می‌دهیم تا تولوئن حذف گردد و بعد از خروج از آون مجدداً نمونه‌ها را مخلوط می‌کنیم. برای اندازه‌گیری‌های مایکروویو، پودرهای CNT با ۲/۵ درصد وزنی به همراه پارافین ترکیب شده و در داخل نمونه‌های سیلندری با قطر داخلی ۳ و قطر خارجی۷ میلیمتر ریخته و با فشار مناسب و به کمک پرس هیدرولیک، شکل‌دهی می‌کنیم. ساختار فازی نمونه‌ها به وسیله‌ی دستگاه پراش اشعه X (XRD Philips X'Pert Pro) و مورفولوژی آن‌ها توسط دستگاه میکروسکوپ الکترونی روبشی مدل Hitachi S-4800 و میکروسکوپ الکترونی عبوری مدل EM-900 ساخت شرکت Zeiss تعیین شد. همچنین خواص جذب مایکروویو نمونه‌های تهیه شده، توسط دستگاه تحلیل‌گر برداری شبکه (VNA) مدل Agilent/HP 8722ES اندازه‌گیری شد.

نتایج و بحث

بر طبق شکل ۱ به کمک آنالیزهای XRD پیک مربوط به زوایای ۲θ=۲۶/۰۳ و ۴۵/۸۷ درجه مربوط به صفحات (۰۰۲) و (۱۰۱) از ساختار گرافیتی است. تقارن و باریک بودن پیک (۰۰۲) در طیف XRD بیان‌گر درجه بلوری بالا در این ساختارهاست.



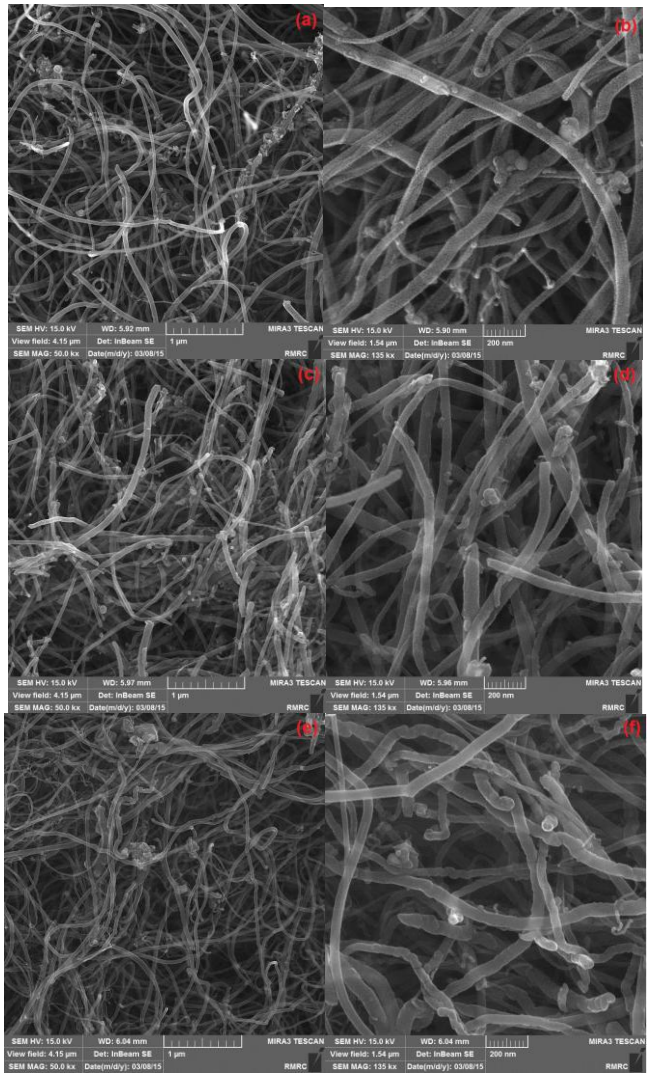
شکل ۱ : پراش پرتو X نمونه‌های Fe-CNT سنتز شده در دماهای مختلف.

سایر پیک‌های موجود در طیف‌ها مربوط به چهار فاز مختلف از آهن یعنی α-Fe، γ-Fe، Fe_2O_3 و Fe_3C هستند که در درون ساختار مورد نظر شکل گرفته‌اند. فاز Fe_2O_3 احتمالاً به دلیل

[۱] Heterostructure
[۲] Chemical Vapor Deposition

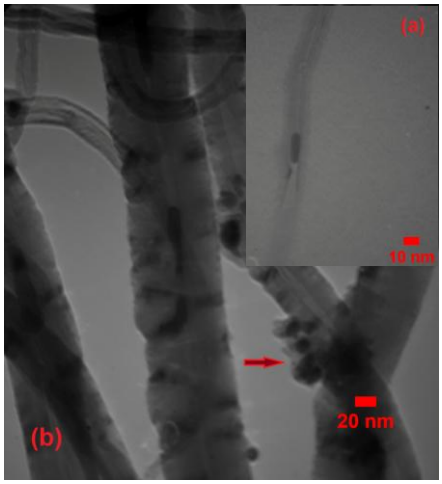
اکسید شدن نانوذرات آهن بر روی سطح نانولولههای پرشده با آهن شکل میگیرد. شکلگیری این فازها توسط تحقیقات انجام شده در این زمینه نیز تایید میشود [۲-۴].

شکل ۲ و ۳ تصاویر FESEM و TEM مربوط به نمونههای سنتزشده در دماهای مختلف در محدودهی ۸۰۰-۹۵۰°C هستند. طبق تصاویر، نانولولههای کربنی با طول چندین میکرومتر و قطر کمتر از ۷۰ nm شکل گرفته و ساختارهای درهمتنیدهای از این نانولولهها در دماهای سنتز متفاوت به وجود آمدهاند. بنابراین سنتز کاملاً موفقی را از این ساختارها را با روش CVD شاهد هستیم.

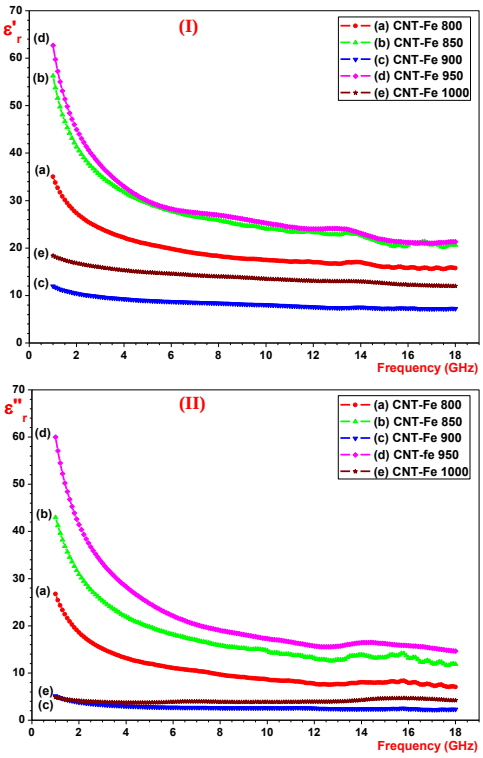


شکل ۲ : تصاویر FESEM مربوط به نمونههای Fe-CNT سنتز شده در دماهای (a, b) ۸۰۰ °C (c, d) ۸۵۰ °C و (e, f) ۹۰۰ °C.

شکل و ساختار کلی نانولولهها در دماهای سنتز ۸۰۰ و ۹۰۰°C کاملاً منظم بوده در حالیکه در دماهای بالاتر به دلیل تنشهای وارد شده بر جدارهی نانولولهها در طول فرآیند سنتز، ساختار کلی این نانولولهها دفورمه شده و تغییر شکل یافتهاند. بر اساس تصاویر FESEM طول نانولولههای سنتز شده در دماهای ۸۰۰ و ۹۰۰°C بلندتر از طول نانولولههای سنتز شده در دماهای بالاتر هستند. طول نانولولهها در دمای ۱۰۰۰°C حداکثر به ۵ µm میرسند در حالی که در نمونههای سنتز شده در دماهای ۸۰۰ و ۹۰۰°C طول نانولولهها به بیشتر از ۱۰ µm نیز میرسند.

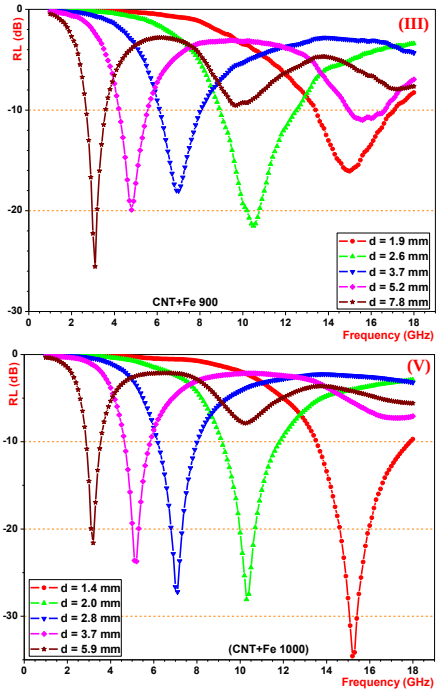


شکل ۳ : تصاویر TEM مربوط به نمونههای Fe-CNT سنتز شده در دماهای (a) ۸۵۰ °C (b) ۹۵۰ °C.



شکل ۴: قسمتهای حقیقی و موهومی گذردهی الکتریکی نمونههای Fe-CNT.

شکل ۴ قسمت‌های حقیقی و موهومی گذردهی الکتریکی نانولوله‌های کربنی پرشده با آهن که در دماهای مختلف سنتز شده‌اند را نشان می‌دهد. قسمت‌های موهومی گذردهی الکتریکی نمونه‌ها، در محدوده‌ی ۷۰-۰ تغییر می‌کنند و در بازه‌ی فرکانسی ۱۸-۱ GHz به‌صورت نمایی کاهش یافته و به سمت مقدار صفر که مربوط به ماده‌ی غیرمغناطیسی است، میل می‌کنند. بالاترین گذردهی مربوط به نمونه‌ی سنتز شده در ۹۵۰°C و کمترین مقدار مربوط به نمونه‌ی سنتز شده در ۹۰۰°C هستند که مربوط به شرایط سنتز نمونه‌هاست. قسمت‌های موهومی تراوایی مغناطیسی در دماهای سنتز مختلف، مقدار کوچکی داشته و بنابراین قسمت عمده جذب مربوط به قسمت دی‌الکتریکی نمونه‌ها بوده و قسمت مغناطیسی به دلیل کوچک بودن تراوایی نقش چندانی ندارد.



شکل ۵ : منحنی‌های اتلاف بازتابی نمونه‌های Fe-CNT در ۹۰۰ و ۸۰۰ °C .

طیف اتلاف بازتابی نانولوله‌های کربنی پرشده با آهن در دماهای سنتز بهینه‌ی ۹۰۰ و ۱۰۰۰°C در شکل ۵ نشان داده شده است. با استفاده از شبیه‌سازی انجام شده، ضخامت‌های بهینه که مقدار جذب را در فرکانس‌های مختلف و در هر ضخامت، بیشینه می‌کند، محاسبه شده است. با افزایش ضخامت نمونه‌ها در هر دما، قله‌های مربوط به فرکانس‌های بالاتر که در خارج از محدوده‌ی فرکانسی مورد نظر قرار دارند به داخل این محدوده جابجا شده و طیف از حالت تک قله‌ای، شکل دو قله‌ای به خود می‌گیرد؛ به‌طوری‌که در ضخامت‌های بالاتر، رفتار چند قله‌ای به وجود آمده و طیف پیچیده‌تر می‌شود. بنابراین قسمت عمده جذب را قسمت‌های موهومی گذردهی الکتریکی نانولوله‌ها در محدوده‌ی فرکانسی ۱۸-۱ GHz عهده‌دار هستند و قسمت‌های موهومی تراوایی مغناطیسی نقش ناچیزی را بر عهده دارند. این دسته از مواد، پهنای جذبی تا حدود ۵ GHz در اتلاف پایین‌تر از ۱۰- dB از خود نشان می‌دهند و می‌توانند گزینه مناسبی برای مواد جاذب امواج رادار به خصوص در ساختارهای چندلایه‌ای باشند.

نتیجه گیری

در این تحقیق با تحلیل رفتار گذردهی الکتریکی و تراوایی مغناطیسی نانولوله‌های کربنی پرشده با آهن، در محدوده‌ی فرکانسی ۱۸-۱ GHz، میزان اتلاف بازتابی و چگونگی جذب امواج مایکروویو مورد بررسی قرار گرفت. این بررسی‌ها نشان می‌دهند که با انتخاب بهینه‌ی دمای سنتز و ضخامت در این نمونه‌ها، میزان اتلاف در ناحیه‌ی مورد نظر بهبود می‌یابد و پاسخ جذبی خوبی در باندهای فرکانسی C ، X و Ku مشاهده می‌شود. رفتار جذب امواج در این کامپوزیت‌ها بیشتر ناشی از قسمت‌های موهومی گذردهی الکتریکی نانولوله‌ها است.

مرجع‌ها

[۱] F. Qin, C. Brosseau; "A review and analysis of microwave absorption in polymer composites filled with carbonaceous particles"; *Journal of Applied Physics* **111** (2012) 061301.

[۲] H. Lin, H. Zhu, H. Guo, L. Yu; "Investigation of the microwave-absorbing properties of Fe-filled carbon nanotubes"; *Materials Letters* **61** (2007) 3547-3550.

[۳] C.P. Deck, K. Vecchio; "Growth mechanism of vapor phase CVD-grown multi-walled carbon nanotubes"; *Carbon* **43** (2005) 2608-2617.

[۴] R. Xiang, G. Luo, W. Qian, Q. Zhang, Y. Wang, F. Wei and et al.; "Encapsulation, Compensation, and Substitution of Catalyst Particles during Continuous Growth of Carbon Nanotubes"; *Advanced Materials* **19** (2007) 2360-2363.

[۵] J. Bao, Q. Zhou, J. Hong, Z. Xu; "Synthesis and magnetic behavior of an array of nickel-filled carbon nanotubes"; *Applied Physics Letters* **81** (2002) 4592-4594.

[۶] S. Hampel, A. Leonhardt, D. Selbmann, K. Biedermann, D. Elefant, C. Muller and et al.; "Growth and characterization of filled carbon nanotubes with ferromagnetic properties"; *Carbon* **44** (2006) 2316-2322.

[۷] A. A. El-Gendy, E. M. M. Ibrahim, V. O. Khavrus, Y. Krupskaya and et al.; "The synthesis of carbon coated Fe, Co and Ni nanoparticles and an examination of their magnetic properties"; *Carbon* **47** (2009) 2821-2828.

بهینه‌سازی خواص دی‌الکتریکی سرامیک فورسترایت با ساختار Mg_2SiO_4

پوربافرانی ، احمد[۱]؛ شمس، محمد حسین[۲]

[۱و۲] دانشکده الکتروسرام و مهندسی برق، دانشگاه صنعتی مالک اشتر، انتهای خیابان فردوسی ، شاهین شهر

چکیده

هدف از این پژوهش ساخت قطعات سرامیکی فورسترایت با خواص بهینه، به شکل استوانه‌های با ابعاد مشخص است. ترکیب مورد نظر برای این منظور، ساختار فورسترایت با فرمول شیمیایی Mg_2SiO_4 بوده که به روش حالت جامد با استفاده از آسیاب سیاره‌ای سنتز شده است. در سنتز پودرهای این ترکیب، عامل استوکیومتری یعنی نسبت وزنی MgO/SiO_2 مقدار ۲/۰۵ در نظر گرفته شد. برای کنترل رشد دانه‌ها در ساختار نمونه‌ها از افزودنی TiO_2 با فاز روتایل استفاده کردیم. سپس خواص ساختاری و دی‌الکتریکی نمونه‌ها بررسی شده و نتایج با یکدیگر مقایسه شدند. برای بررسی خواص ساختاری در ترکیب، از پراش پرتو X استفاده شد و جهت بررسی ریزساختار نمونه‌ها نظیر اندازه‌ی دانه‌ها، از تصاویر FESEM کمک گرفته شد. برای بررسی خواص دی‌الکتریک نمونه‌ها در ناحیه‌ی مایکروویو در فرکانس ۸/۴۵۷ GHz از تحلیل‌گر برداری شبکه (VNA) کمک گرفته شد.

واژه های کلیدی: *فورسترایت، خواص دی‌الکتریک، تانژانت تلفات، گذردهی الکتریکی*

Optimization of dielectric properties of Forrestrate ceramic with Mg_2SiO_4 structure

Pourbafrani, Ahmad[1]; Shams, Mohammad Hossein[2]

[1,2] Department of Electroceramics and Electrical Engineering, Malek Ashtar University of Technology, Shahin Shahr

Abstract

The purpose of this study is to synthesis Forsterite ceramic with optimal properties in the form of cylinders with specific dimensions. The composition for this purpose is the structure of Forsterite with the formula Mg_2SiO_4, which is synthesized by solid state method using a planetary mill. In the synthesis of powders of this compound, the stoichiometric factor, ie the MgO / SiO_2 ratio was considered to be 2.05. To control grain growth in the structure of the samples, we used TiO_2 additive with rutile phase. Then the structural and dielectric properties of the samples were investigated and the results were compared with each other. X-ray diffraction was used to investigate the structural properties of the composition, and FESEM images were used to investigate the microstructure of the samples, such as grain size. A network vector analyzer (VNA) was used to investigate the dielectric properties of the samples in the microwave region at 8.457 GHz.

***Keywords**: Forsterite, dielectric properties, loss tangent, electrical permittivity*

PACS No. 70

مقدمه

اخیراً رشد سریع سامانه‌های بی‌سیم منجر به افزایش تقاضا برای تشدیدگرها، فیلترها و آنتن‌هایی با فرکانس بالا در مقیاس کوچک با قابلیت کار در محدوده‌ی گیگاهرتز شده است که در این بین سرامیک‌های دی‌الکتریک مایکروویو توانسته‌اند به علت تلفات دی‌الکتریک کم و هزینه‌ی پایین برای کار در دستگاه‌های مایکروویو موردتوجه واقع شوند [۱]. سه کمیت اصلی وجود دارد که نوع کاربرد سرامیک‌های دی‌الکتریک بر اساس آن‌ها مشخص می‌شود که عبارت‌اند از: ثابت دی‌الکتریک (ε_r)، فاکتور کیفیت ($Q = \frac{1}{\tan\delta}$) و ضریب دمایی فرکانس تشدید (τ_f). از مهم‌ترین

عواملی که روی تانژانت تلفات دی‌الکتریک مایکروویو سرامیک‌ها می‌تواند اثرگذار باشد، می‌توان به تخلخل، دانه‌بندی، مرز دانه‌ها و حضور فاز ثانویه در ساختار اشاره کرد [۲].

روش‌های متفاوتی از قبیل فرآیند حالت جامد، هم‌رسوبی گرمایی، هیدروترمال، مکانوشیمیایی و سل-ژل برای سنتز پودر نانوبلور فورستریت استفاده شده است. محققان جهت کنترل سرعت رشد دانه‌های نانوپودر فورستریت از فرآیند سینتر دو مرحله‌ای (TSS) استفاده کرده‌اند. در سنتز ترکیب فورستریت، انتخاب درصد مواد اولیه به منظور دست‌یابی به خواص دی-الکتریکی بهتر، اهمیت ویژه‌ای دارد. بدین منظور در انتخاب مواد اولیه، مستقل از روش ساخت، باید درصد بیشتری از منیزیم نسبت به استوکیومتری واقعی ترکیب، در نظر گرفت. در این مواد نسبت اکسید منیزیم به اکسید سیلیسیم را به عنوان عامل استوکیومتری تعریف می‌کنیم و با n نمایش می‌دهیم ($n=MgO/SiO_2$). تحقیقاتی که بر روی ترکیب فورستریت انجام شده، نشان می‌دهد که بهترین خواص دی‌الکتریکی (به عنوان مثال گذردهی الکتریکی بیشتر) به ازای n به مقدار ۲/۰۵ ، یعنی افزایش منیزیم با درصد بیشتر در مقایسه با استوکیومتری کامل (n=۲) به دست می‌آید و این نتیجه مستقل از روش ساخت، برای روش‌های حالت جامد (پودری)، هم رسوبی شیمیایی، بلوری کردن شیشه و سل - ژل، یکسان است [۳, ۴]. بر اساس این تحقیقات، بیشینه گذردهی الکتریکی و فاکتور تلفات در روش حالت جامد به ازای n= ۲/۰۵ به دست می‌آید.

از آنجایی که در فرآیند ساخت و سنتز فورستریت، تغییر اندازه‌ی دانه‌ها، تأثیر بسیار زیادی برخواص ریز ساختاری و دی-الکتریکی آنها دارد، بنابراین لازم است تا با افزودن درصد کمی از ناخالصیها، ضمن بهبود خواص دی‌الکتریکی و مایکروویو، کیفیت محصول را نیز افزایش داد. مواد افزودنی که در سنتز ترکیب فورستریت استفاده می‌شوند، شامل اکسیدهایی نظیر Al_2O_3، Bi_2O_3 ، B_2O_3 و TiO_2 هستند که قبل از فرآیند آسیاب مجدد به کلوخه‌های حاصل از تفجوشی مقدماتی اضافه می‌شوند.

تهیه نمونه‌ها

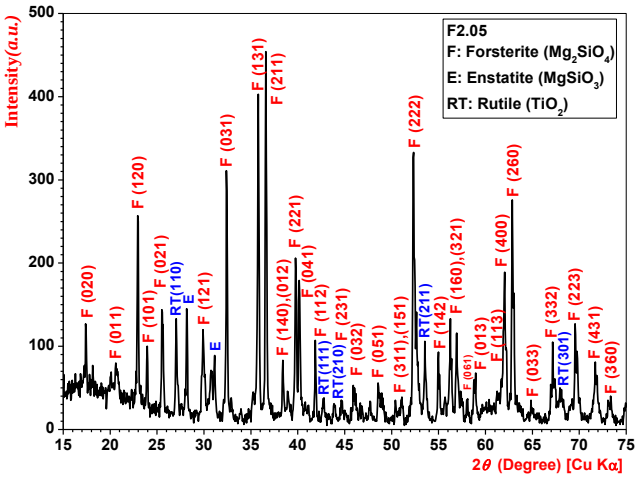
به منظور ساخت قطعات در مقیاس آزمایشگاهی، ابتدا مواد اولیه مورد نظر بر طبق استوکیومتری مشخص توزین شده و همراه مقدار مشخصی آب مقطر و گلوله‌های زیرکونیوم با قطرهای ۵ و ۱۰ mm در داخل کاپ کوچک از جنس تفلون ریخته می-شوند. آسیاب مورد استفاده در مقیاس آزمایشگاهی، آسیاب سیاره-ای است که دارای ۴ کاپ تفلونی است و هر کاپ این آسیاب ظرفیت حدود ۱۰ گرم پودر را دارد. مواد اولیه به مدت زمان حداقل ۱۲ ساعت آسیاب اولیه می‌شوند و سپس دوغاب مورد نظر تخلیه و داخل آون با دمای ۱۱۰ درجه سانتیگراد خشک می‌شود. کلوخه‌های خشک شده پس از آسیاب به مدت نیم ساعت، به شکل پودر درآمده و به منظور کلسینه داخل کوره در دمای ۱۲۰۰ درجه سانتیگراد، به مدت ۳ ساعت قرار می‌گیرند. این پودرها پس از کلسینه مجدداً به همراه مقادیر مشخص آب مقطر و گلوله‌های زیرکونیوم به همراه مواد افزودنی، در داخل کاپ تفلون ریخته شده و به مدت ۱۲ ساعت مجدداً آسیاب می‌شود. پس از آسیاب ثانویه، دوغاب در داخل آون خشک شده و مجدداً کلوخه های ثانویه به مدت یک ساعت آسیاب می‌شود. پودر حاصل به کمک الک با مش در حدود ۱۰۰ الک می‌شود. این پودر آماده شکل‌دهی است که می‌تواند با استفاده از پرس هیدرولیک دستی، شکل‌دهی شود. پس از شکل‌دهی قطعات، آخرین کاری که باید روی آنها انجام شود، تهیه‌ی پولک‌هایی به شکل استوانه‌ی نازک با قطر ۶ میلیمتر و ضخامت ۰/۴ میلیمتر به منظور اندازه‌گیری خواص مایکروویو است.

پودرها در مراحل مختلف باید توسط آنالیزهای ساختاری مشخصی نظیر XRD ، FESEM و ... مورد بررسی قرار گیرند و خصوصیات الکترومغناطیسی آنها نظیر گذردهی الکتریکی نسبی و تانژانت تلفات دی‌الکتریک اندازه‌گیری شوند. در این پژوهش، طیف‌های XRD و تصاویر FESEM تهیه شده، شکل‌گیری فاز، توزیع و اندازه‌ی ذرات را در درون ساختار ماده‌ی مورد نظر تایید می‌کنند. خصوصیات الکترومغناطیسی اندازه‌گیری شده بر روی نمونه‌های سرامیکی نشان‌دهنده‌ی پایین بودن تانژانت تلفات دی‌الکتریک ($tan\delta_E = \frac{\varepsilon''}{\varepsilon'}$) مواد تولیدی است و گذردهی الکتریکی مورد نظر برای این ماده را تایید می‌کند. این دسته از مواد سرامیکی باید تانژانت تلفات دی‌الکتریک کمتر از 5×10^{-4} و

گذردهی الکتریکی نسبی در حدود ۶/۸ داشته باشند تا بتوانند گزینه مناسبی برای کاربردهای مورد نظر باشند.

نتایج و بحث

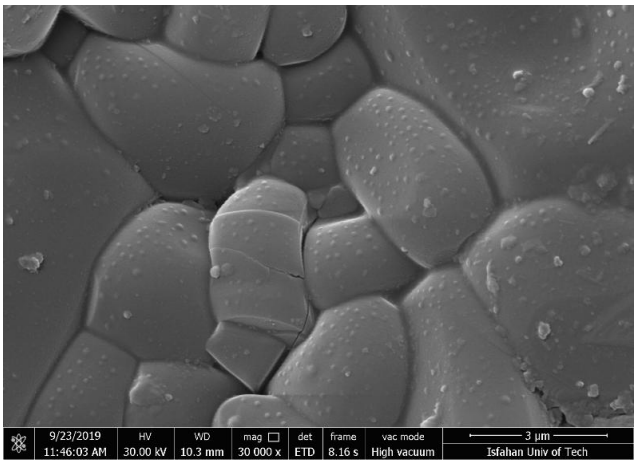
به منظور بررسی فاز ساختاری نمونه‌ها، طیف پراش پرتو X تهیه شد. در شکل ۱ طیف XRD از نمونه‌های با درصد TiO_2 به مقدار ۵ درصد وزنی پودر، که در دمای ۱۴۰۰ °C سنتز شده‌اند، نشان داده شده است. از مقایسه‌ی داده‌های مربوط به طیف‌ها با کارت‌های استاندارد، پیک‌های مختلف مربوط به بازتاب‌های براگ پرتوهای X از صفحات متفاوت اندیس‌گذاری شده است. بر طبق این بررسی‌ها فازهای موجود در این گروه از نمونه‌ها مرتبط با دو فاز ساختاری مختلف مربوط به مواد اولیه یعنی Mg_2SiO_4 و $MgSiO_3$ و فاز TiO_2 مربوط به ماده‌ی افزودنی در این ساختار می‌باشد که در پژوهش‌های انجام شده در این زمینه نیز گزارش شده است. بنابراین نانوساختار فورستریت در ساختارهای سنتز شده تایید می‌شود [۵].



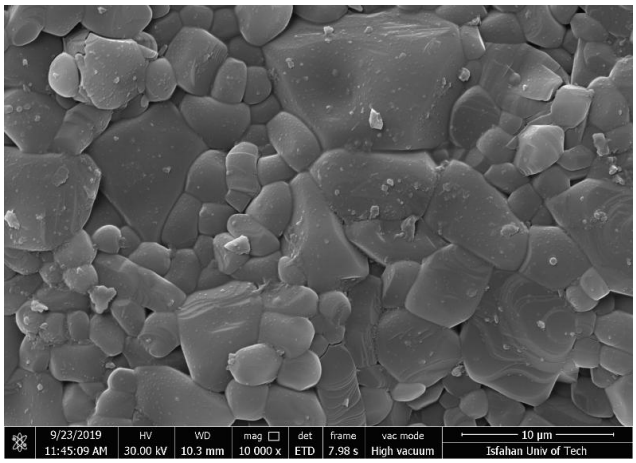
شکل ۱ : طیف پراش پرتو X نمونه‌ی فورستریت.

بر طبق شکل ۱ و به کمک آنالیزهای XRD پیک مربوط به زوایای ۲۸ ° و ۳۱ ° مربوط به صفحات (۴۲۰) و (۶۱۰) از ساختار انستیتایت است. سایر پیک‌های موجود در طیف‌ها مربوط به فاز اصلی فورستریت یعنی Mg_2SiO_4 هستند که در درون ساختار مورد نظر با درصد زیادی شکل گرفته‌اند. پنج پیک اصلی فاز TiO_2 که ناشی از اضافه کردن ماده‌ی افزودنی هنگام آسیاب ثانویه است نیز در طیف مشاهده می‌شود. شکل‌گیری این فازها توسط تحقیقات انجام شده در این زمینه نیز تایید می‌شود [۶, ۷].

شکل ۲ تصویر FESEM از سطح نمونه‌ی F2.05 را در بزرگ‌نمایی زیاد نشان می‌دهد. مطابق این تصاویر، دانه‌ها به شکل نامنظم با اندازه‌های متفاوت شکل گرفته‌اند. اندازه این دانه‌ها از ۱ μm تا ۱۰ μm متغیر است و جهت‌گیری دانه‌ها به طور کاتوره‌ای و تصادفی می‌باشد.



شکل۲ : تصویر FESEM از نمونه‌ی فورستریت در مقیاس کوچک.



شکل۳ : تصویر FESEM از نمونه‌ی فورستریت در مقیاس بزرگ.

در تصویر ۲ مرزدانه‌ها که در فرآیند اچ کردن خورده شده‌اند، رنگ تیره پیدا کرده است. این نقاط محل تجمع مواد افزودنی TiO_2 هنگام تفجوشی نهایی است که سبب رشد بعضی از دانه‌ها تا حد ۱۰ μm نیز شده‌اند. در شکل ۳ با بزرگ‌نمایی کمتر، می‌توان جهت‌گیری کاتوره‌ای دانه‌ها و راستاهای مختلف آن‌ها را مشاهده کرد.

خواص الکترومغناطیسی و چگونگی پاسخ‌دهی نمونه‌های فورستریت به میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی موج الکترومغناطیسی مورد بررسی قرار گرفت. جدول ۱، برخی از

پارامترهای سنتز و خواص مایکروویو نمونه‌های مختلف سنتز شده در شرایط متفاوت را نشان می‌دهد. این خواص شامل گذردهی الکتریکی و تانژانت تلفات دی‌الکتریکی هستند و مهم‌ترین پارامترهای موثر بر این خواص که شامل نوع و درجه‌ی خلوص مواد اولیه، استوکیومتری ترکیب، درصد افزودنی TiO_2، مدت زمان آسیاب اولیه و ثانویه، فشار پرس در شکل‌دهی نمونه، دمای کلسینه و دمای سینتر را مورد بررسی قرار دادیم.

جدول۱ : پارامترهای سنتز و خواص دی‌الکتریکی نمونه‌های فورستریت.

نام نمونه	درصد TiO_2	دمای سینتر	ε_r	tan δ ($\times 10^{-4}$)
F2.07	۰	۱۴۰۰	۵/۷	۵/۲۰
F2.07	۰	۱۴۵۰	۵/۸	۳/۰۰
F2.07	۰	۱۴۵۰	۶/۱	۲/۵۰
F2.07	۲/۵	۱۳۵۰	۶/۶۴	۲/۷۰
F2.02	۰	۱۴۵۰	۶/۴۵	۳/۰۰
F2.05#1	۵/۰	۱۴۰۰	۶/۷۰	۵/۰۰
F2.05#2	**۵/۰**	**۱۴۰۰**	**۶/۷۸**	**۴/۰۰**
F2.05#3	۵/۰	۱۴۰۰	۶/۴۵	۶/۰۰
F2.05#4	۵/۰	۱۴۰۰	۶/۳۰	۴/۰۰
F2.02	**۲/۵**	**۱۳۵۰**	**۶/۷۵**	**۴/۶۰**
F2.05	۰	۱۴۵۰	۶/۶۰	۴/۰۰
F2.02	**۲/۵**	**۱۳۵۰**	**۶/۸۰**	**۴/۵۰**
F2.02	۱/۰	۱۳۲۵	۶/۶۵	۲/۳۰
F2.05	۵/۰	۱۴۰۰	۶/۱۵	۸/۵۰
F2.02	**۳/۵**	**۱۴۰۰**	**۶/۸۲**	**۲/۵۰**
F2.05	۵/۰	۱۴۰۰	۶/۱۰	۷/۰۰
F2.02	۵/۰	۱۴۰۰	۶/۹۸	۶/۰۰
F2.02	۵/۰	۱۴۵۰	۶/۴۰	۶/۸۰
F2.05	۵/۰	۱۴۰۰	۶/۲۵	۷/۰۰
F2.05	۵/۰	۱۴۰۰ (TSS)	۶/۴۵	۱۰/۰
F2.05	**۲/۵**	**۱۳۵۰**	**۶/۷۵**	**۳/۸۰**
F2.05	۲/۵	۱۳۵۰	۶/۷۰	۳/۶۰
F2.05	۱/۰	۱۳۲۵	۶/۶۵	۲/۰۰
F2.05	**۵/۰**	**۱۴۰۰**	**۶/۷۸**	**۵/۰۰**
F2.05	**۳/۵**	**۱۴۰۰**	**۶/۷۶**	**۲/۵۰**
F2.05	۵/۰	۱۴۵۰	۶/۲۰	۷/۸۰
F2.05#1	۵/۰	**۱۴۰۰ (TSS)**	۶/۹۰	۲/۱۰

از آن‌جایی که برای هدف ما در این تحقیق، گذردهی الکتریکی نزدیک به ۷/۰ و تانژانت تلفات پایین‌تر از ۰/۰۰۰۵ مورد نظر ماست، بنابراین بهترین حالت بر حسب پارامترهای مورد بررسی می‌تواند چندین حالت باشد که در جدول ۱ نشان داده شده است.

نتیجه گیری

طیف‌های XRD و تصاویر FESEM، شکل‌گیری فاز، چگونگی توزیع ذرات و اندازه‌ی آن‌ها را در درون ساختار فورستریت تایید می‌کنند. اندازه‌گیری خواص مایکروویو بر روی نمونه‌های مختلف نشان داد که شرایط بهینه برای سنتز فورستریت؛ دمای کلسینه ۱۲۰۰°C، زمان‌های آسیاب اولیه و ثانویه ۱۲ ساعت، نسبت وزنی MgO/SiO_2 مقدار ۲/۰۵، افزودنی TiO_2 از نوع روتایل و به مقدار ۱ درصد وزنی هستند. خواص اندازه‌گیری شده بر روی نمونه‌های سرامیکی، نشان‌دهنده‌ی پایین بودن تانژانت تلفات دی‌الکتریک (Tanδ) در مواد تولیدی است و گذردهی الکتریکی مورد نظر برای این ماده را تایید می‌کند. این دسته از مواد در حالت بهینه، تانژانت تلفات دی‌الکتریک کمتر از ۵×۱۰^{-۴} و گذردهی الکتریکی نسبی در حدود ۶/۸ دارند.

مرجع‌ها

[۱] P. Choudhary, R. Kumar and N. Gupta; "Dielectric material selection of microstrip patch antenna for wireless communication applications using Ashby's approach"; *International Journal of Microwave and Wireless Technologies* **7**, No. 5 (2015) 579-587.

[۲] S. B. Narang, and S. Bahel; "Low loss dielectric ceramics for microwave applications: a review"; *Ceram Process Res.* **11**, No. 3 (2010) 316-321.

[۳] A. Douy; "Aqueous Syntheses of Forsterite (Mg_2SiO_4) and Enstatite ($MgSiO_3$)"; *J. Sol–Gel Sci. Tech.* **24** (2002) 221-228.

[۴] T. Sugiyama, T. Tsunooka, K. Kakimoto and H. Ohsato; "Microwave Dielectric Properties of Forsterite Based Solid Solutions"; *J. Eur. Ceram .Soc.* **26** (2006) 2097-2100.

[۵] H. Barzegar T.S. Sasikala, et al.; "Forsterite-based ceramic–glass composites for substrate applications in microwave and millimeter wave communications"; *Journal of Alloys and Compounds* **461** (2008) 555-559.

[۶] H. Barzegar Bafrooei and et al.; "Microwave synthesis and sintering of forsterite nanopowder produced by high energy ball milling"; *Ceramics International* **4** (2014) 2869-2876.

[۷] Y. M. Tan, C. Y. Tan and et al.; "Study on the effects of milling time and sintering temperature on the sinterability of forsterite (Mg_2SiO_4)"; *Journal of the Ceramic Society of Japan* **123** (2015) 1032-1037.

ارزیابی اثر زمان آندایز مرحله اول بر ساخت آرایه نانوسیم‌های مغناطیسی کبالت

افسر، محمود؛ قاسمی، علی؛ پایمزد، ابراهیم؛ نصر اصفهانی، محمدرضا؛ علی‌چراغی، لیلا

دانشکده مهندسی مواد، دانشگاه صنعتی مالک اشتر ، شاهین شهر، اصفهان

چکیده

تلاش برای رسیدن به آرایه نانوسیم با خواص مغناطیسی بهینه، هدف بسیاری از پژوهش‌های جدید می‌باشد. در پژوهش حاضر، آرایه نانوسیم‌های کبالت از طریق الکتروانباشت پالسی AC، درون قالب‌های AAO ساخته شدند. تأثیر زمان‌های مختلف آندایز مرحله اول شامل ۳، ۶، ۱۸ و ۳۰ ساعت بر ساخت قالب‌های AAO مورد بررسی قرار گرفت. خواص مورفولوژیکی و مغناطیسی نمونه‌ها به‌ترتیب با میکروسکوپ الکترونی روبشی نشر میدانی و مغناطیس‌سنج نمونه ارتعاشی (VSM) مجهز به منحنی‌های بازگشتی مرتبه اول (FORC) ارزیابی شده است. نتایج نشان داد که با افزایش زمان آندایز مرحله اول به ۱۸ ساعت، باعث افزایش وادارندگی آرایه نانوسیم‌های کبالت به حدود ۱۴۹۰ اورستد می‌شود، درحالی که برای زمان آندایز ۳۰ ساعت، وادارندگی به ۱۴۵۹ اورستد کاهش می‌یابد. توزیع میدان وادارندگی دیاگرام‌های FORC، تشکیل فازهای نرم و سخت مغناطیسی را نشان می‌دهد. شکل‌گیری این فازها به جوانه‌زنی صفحات بلوری؛ ترمودینامیکی (۰۰۲) و سینتیکی (۱۰۰) کبالت hcp مربوط بوده که به پیش‌بافت باقیمانده از آندایز مرحله اول وابسته است.

واژه‌های کلیدی: *زمان آندایز مرحله اول، آندایز دومرحله‌ای، آرایه نانوسیم کبالت، فاز نرم و سخت مغناطیسی*

Evaluation of the effect of the first step anodizing time on the fabrication of cobalt magnetic nanowires arrays

Afsar, Mahmoud; Ghasemi, Ali; Paimozd, Ebrahim; Nasr Esfahani, Mohammad Reza; Alicheraghi, Leila

Department of Materials Engineering, Malek Ashtar University of Technology, Shahin Shahr, Esfahan

Abstract

The attempt to approach the optimum of magnetic properties of nanowire array is increasingly becoming the subject of new investigations. In the present study, the cobalt nanowires array were prepared into AAO template by AC pulsed electrodeposition. The effect of first step anodization time including 3, 6, 18 and 30 hours was investigated on the fabrication of AAO templates. Morphological and magnetic properties samples were evaluated by field emission scanning electron microscope and vibration sample magnetometer (VSM) equipped with first order reversal curves (FORC), respectively. The results showed, with increasing of the first step anodization time up to 18 hours, the coercivity of the cobalt nanowire array to about 1490 Orested increases, whereas for anodization time of 30 hours, the coercivity decreases to 1459 Orested. The coercivity field distribution of FORC diagrams indicates the formation of soft and hard magnetic phases. The creation of these phases depends on the nucleation of the thermodynamic and kinetic crystallographic planes in which relate to residual pre-texture from the first step anodization.

***Keywords**: First step anodization time, Two step anodization, Cobalt nanowires array, Soft and hard magnetic phase*

PACS No. 81

مقدمه

در بین نانوسیم‌های مغناطیسی مختلف، نانوسیم کبالت به‌دلیل ناهمسانگردی مغناطوبلوری بزرگی که دارد، مورد توجه بسیاری از محققین قرار گرفته است [۱]. برای تهیه آرایه نانوسیم‌های مغناطیسی، از اکسید آلومینیوم آندی به‌عنوان قالب استفاده می‌شود. به کمک این قالب‌ها می‌توان به نظم بالای حفره‌ها، کنترل طول و قطر حفره‌ها و خواص شیمیایی و مکانیکی مطلوبی دست یافت. نظم نانوحفره‌ها به‌وسیله عکس‌العمل دافعه بین حفره‌های مجاور توضیح داده می‌شود.

منشأ این نیروهای بین حفره‌ای، تنش مکانیکی است که به مقدار انبساط حین تشکیل اکسید در فصل مشترک وابسته است. نظم حفره‌ها از طریق آندایز مجدد و افزایش زمان آندایز، بهبود می‌یابد [۵-۲].

پس از انجام آندایز مرحله اول در اسید اگزالیک و حذف لایه اکسیدی، سطوح مقعر (پیش‌بافت) بر روی زیرلایه آلومینیومی باقی می‌ماند. تشکیل پیش‌بافت متقارن می‌تواند سطوح بهتری را برای رشد حفره طی آندایز مرحله دوم فراهم کند. همچنین پیش‌بافت متقارن منجر به ایجاد یک میدان الکتریکی یکنواخت حین فرآیند آندایز شده و درنهایت آرایه نانوحفره‌ای منظمی تشکیل می‌شود. بنابراین افزایش زمان آندایز مرحله اول، یک آرایش منظم و متقارن را در نانوحفره‌ها ایجاد خواهد کرد [۶و۴].

انرژی مورد نیاز برای چرخش گشتاور مغناطیسی از محور بلوری آسان به یک محور بلوری سخت تحت عنوان ناهمسانگردی مغناطوبلوری شناخته می‌شود. از طرفی ناهمسانگردی شکل سبب جهت‌گیری بردار مغناطش در امتداد جهت موازی با محور نانوسیم می‌شود. در این مورد، برای نانوسیم‌های کبالت رقابت مستقیمی بین ناهمسان‌گردی مغناطوبلوری و ناهمسانگردی شکل وجود دارد. رقابت بین ناهمسانگردی مغناطوبلوری و شکل در نانوسیم‌های کبالت به شکل‌گیری فازهای بلوری منجر می‌شود. حضور این دو ناهمسانگردی در کنار برهم‌کنش بین نانوسیم‌ها و برهم‌کنش بین فازها، خواص نانوسیم‌ها را تعیین می‌کند [۸و۷].

در تحقیق حاضر، به بررسی تأثیر افزایش زمان آندایز مرحله اول که تأثیر بسزایی در میزان نظم آرایه نانوحفره‌ها و به تبع آن، برهم‌کنش مغناطیسی این آرایه‌ها دارد، پرداخته شده است. همچنین برای بررسی خواص مغناطیسی نانوسیم‌ها، از حلقه پسماند مغناطیسی و منحنی‌های بازگشتی مرتبهٔ اول برای بررسی جزئیات دقیق از برهم‌کنش‌های مغناطیسی نانوسیم‌ها استفاده می‌شود.

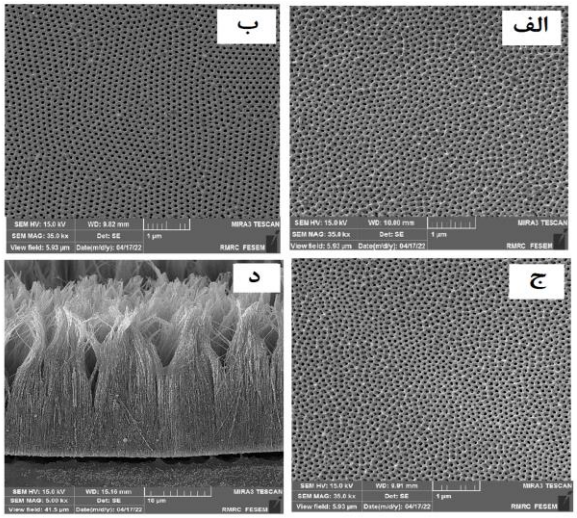
روش انجام آزمایش

ابتدا ورق آلومینیومی با خلوص ۹۹/۹۹۷ درصد و ضخامت ۰/۳ میلی‌متر به‌صورت دیسک‌هایی با قطر ۱ سانتی‌متر تهیه شد. برای ساخت قالب‌های AAO، نمونه‌ها با استفاده از اسید اگزالیک ۰/۳ مولار در دمای ۱۷ درجه سانتی‌گراد برای مدت زمان‌های ۳، ۶، ۱۸ و ۳۰ ساعت، تحت فرآیند آندایز مرحله اول با ولتاژ ۴۰ ولت قرار گرفتند. سپس لایه اکسیدی با استفاده از محلول اسید کرومیک ۰/۲ مولار و اسید فسفریک ۰/۳ مولار، تحت دمای ۶۰ درجه سانتی‌گراد حذف شد. در ادامه آندایز مرحله دوم با شرایط یکسان با آندایز مرحله اول انجام شد. پس از آندایز مرحله دوم، کاهش ولتاژ از ۴۰ به ۱۰ ولت با نرخ ۰/۰۰۱ ولت بر ثانیه، منجر به نازک شدن لایه سدی و ایجاد ساختار دندریتی (شاخه‌ای) شد. قالب‌های ساخته شده با بهره‌گیری از فرآیند الکتروانباشت پالسی AC و استفاده از محلول الکترولیت ۰/۳ مولار مس و ۰/۳ مولار کبالت پر شدند. از مس برای پرشدگی بهتر و جلوگیری از برهم‌کنش مغناطواستاتیک ساختارهای دندریتی استفاده شد.

پس از تهیهٔ قالب‌های AAO و انباشت آرایه نانوسیم‌های کبالت، برای بررسی خواص مورفولوژیکی و مغناطیسی آن‌ها، به‌ترتیب از میکروسکوپ الکترونی روبشی نشر میدانی (FESEM) و مغناطیس-سنج نمونه ارتعاشی (VSM) مجهز به سخت افزار و نرم افزار منحنی‌های بازگشتی مرتبه اول استفاده شد.

نتایج و بحث

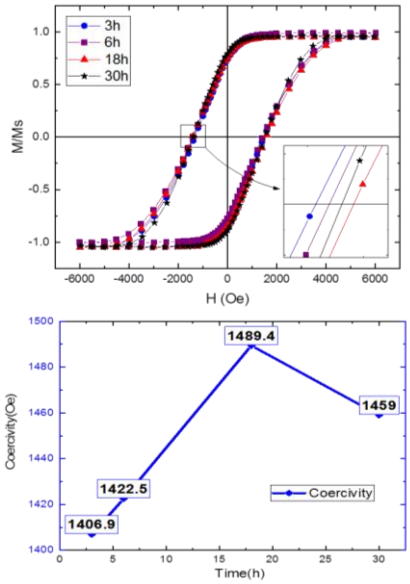
تصاویر میکروسکوپی الکترونی روبشی نشر میدانی از قالب‌های اکسید آلومینیوم آندی و آرایه نانوسیم‌های کبالت در شکل ۱ نشان داده شده است. همانطور که درشکل ۱-الف به‌وضوح مشخص است، در قالب ساخته شده با زمان آندایز اول ۳ ساعت، آرایه نانوحفره‌های شکل گرفته از نظم کمی برخوردار هستند، این درحالی است که با افزایش زمان آندایز مرحله اول به ۱۸ ساعت، آرایه نانوحفره‌های بسیار منظم‌تری مطابق شکل ۱-ب تشکیل شده است [۹و۶و۴]. از طرفی با افزایش زمان آندایز مرحله اول به ۳۰ ساعت، همانطور که در شکل ۱-ج مشاهده می‌شود، نظم آرایه‌ای حفره‌ها کاهش می‌یابد که به نظر می‌رسد به‌دلیل از بین رفتن پیش‌بافت منظم و ایجاد پیش‌بافت نامتقارن بر روی سطح قالب AAO بعد از حذف لایه اکسیدی اولیه است. این را می‌توان بر اثر افزایش مقاومت الکتریکی لایه سدی به هنگام انجام فرآیند آندایز طولانی دانست [۵]. شکل ۱-د آرایه نانوسیم‌های کبالت که به‌صورت جزئی آزادسازی شده‌اند را نشان می‌دهد.



شکل۱ : تصاویر میکروسکوپی الکترونی روبشی نشر میدانی از قالب‌های AAO ساخته شده با زمان آندایز مرحله اول : (الف) ۳ ساعت، (ب) ۱۸ ساعت، (ج) ۳۰ ساعت و (د) آرایه نانوسیم‌های کبالت انباشت شده

حلقه‌های پسماند مغناطیسی اندازه‌گیری شده تحت میدان اعمالی موازی با محور نانوسیم، مطابق شکل۲-الف نشان داده شده است. شکل۲-ب تغییرات وادارندگی نانوسیم‌های کبالت را نسبت به افزایش زمان آندایز مرحله اول نشان می‌دهد. مشاهده می‌شود که با افزایش زمان آندایز مرحله اول از ۳ ساعت به ۱۸ ساعت، وادارندگی نانوسیم‌های کبالت تا حدود ۱۴۹۰ اورستد افزایش یافته است. درحالی که با افزایش زمان آندایز مرحله اول به ۳۰ ساعت، افت وادارندگی به ۱۴۵۹ اورستد مشاهده شد. این کاهش وادارندگی در نانوسیم‌های کبالت را می‌توان به تغییرات ایجاد شده در پیش‌بافت نانوحفره‌ها (میزان تقعر و تقارن آن‌ها) پس از انجام آندایز مرحله اول نسبت داد. بنابراین پیش‌بافت باقی‌مانده از حذف لایه اکسیدی، می‌تواند در جوانه‌زنی و رشد نانوسیم‌ها اثرگذار باشد. در ادامه برای بررسی جزئیات بیشتر و دقیق‌تر خواص مغناطیسی، از تحلیل و بررسی دیاگرام FORC استفاده شده است.

شکل۳، دیاگرام‌های FORC نانوسیم‌های کبالت انباشت شده در قالب‌های AAO با زمان‌های آندایز مرحله اول مختلف را نشان می‌دهد. وجود برهم‌کنش و توزیع میدان وادارندگی، یک شکل جناغی (ناحیه ۳) در نمودار FORC آرایه نانوسیم‌های کبالت ایجاد می‌کند. از طرفی توزیع گسترده در امتداد محور H_C، وجود همزمان فازهای نرم (ناحیه۱ و ۲) و سخت (ناحیه۴) را نشان می‌دهد [۱۰].

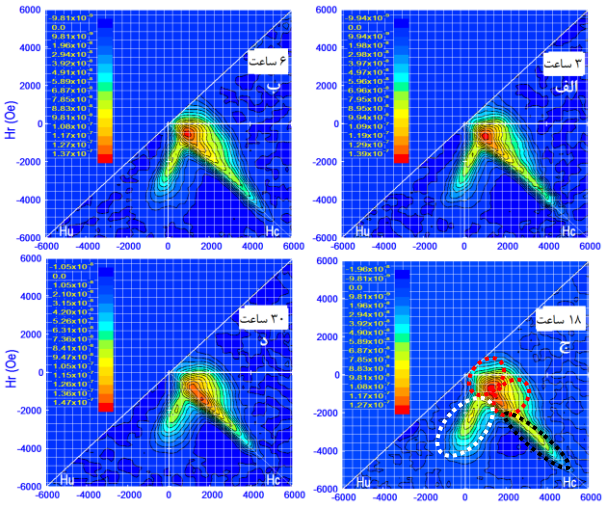


شکل۲ : (الف) حلقه‌های پسماند و (ب) تغییرات وادارندگی نسبت به زمان آندایز مرحله اول مربوط به نانوسیم‌های کبالت انباشت شده.

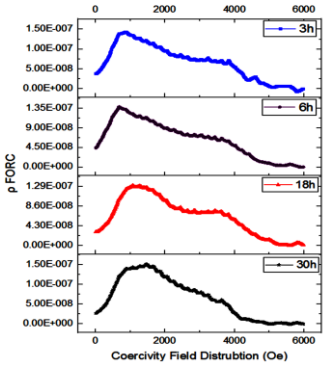
شکل۴، توزیع میدان وادارندگی نانوسیم‌های کبالت انباشت شده را نشان می‌دهد. با توجه به این شکل می‌توان دریافت که با افزایش زمان آندایز مرحله اول به ۱۸ ساعت، فاز مغناطیسی سخت‌تری در حدود ۳۰۰۰ الی ۴۰۰۰ اورستد (ناحیه۴) تشکیل شده است و درنتیجه برهم‌کنش بین فازهای مغناطیسی نرم و سخت (ناحیه۳ در شکل۳) بیشتر شده است [۱۱]. با توجه به دیاگرام‌های FORC تحقیقات انجام شده، فازهای سخت مغناطیسی کبالت، صفحات (۰۰۲) و (۱۰۱) hcp که به‌ترتیب موازی و تقریباً موازی بر محور c نانوسیم‌ها و فازهای نرم مغناطیسی کبالت، صفحات (۱۰۰) و (۱۱۰) hcp که به‌ترتیب عمود و تقریباً عمود بر محور c نانوسیم‌ها هستند [۱۰و۱]. با درک این موضوع، می‌توان دریافت که در پژوهش حاضر، فازهای نرم و سخت مغناطیسی در آرایه نانوسیم‌های کبالت شکل گرفته که مطابق با دیگر تحقیقات انجام شده می‌باشد. بنابراین تشکیل این فازها منجر به پیدایش وادارندگی‌های متفاوت نسبت به آن‌ها شده که به نظم قالب AAO مربوط است [۱۱].

طبق نتایج حاصل از تحلیل و بررسی‌های FORC، برای نانوسیم‌های کبالت انباشت شده در قالب AAO با زمان آندایز مرحله اول ۱۸ ساعت، شکل‌گیری فاز (۰۰۲) hcp، می‌تواند به‌دلیل افزایش تشکیل صفحات بلوری ترمودینامیکی در اثر ایجاد پیش‌بافت

متقارن‌تر و آرایه نانوحفره منظم‌تر باشد. در ادامه با افزایش زمان آندایز اول به ۳۰ ساعت، مقاومت لایه سدی و درنتیجه مقاومت الکتریکی طی فرآیند آندایز طولانی افزایش یافته و منجر به تشکیل پیش‌بافت نامتقارن شده و از این طریق شرایط برای تشکیل صفحات بلوری سینتیکی مانند صفحه (۱۰۰) hcp کبالت فراهم می‌شود. درنتیجه همانطور که در شکل۳ و ۴ مشاهده می‌شود، آرایه نانوسیم‌های کبالت انباشت شده در قالب AAO با ۳۰ ساعت زمان آندایز مرحله اول، تقریباً دارای بافت مغناطیسی نرم هستند [۱۲]. بنابراین به‌دلیل تفاوت در میزان جوانه‌زنی فازهای بلوری، وادارندگی نانوسیم‌های کبالت انباشت شده در قالب AAO با ۳۰ ساعت زمان آندایز مرحله اول، نسبت به قالب AAO با ۱۸ ساعت زمان آندایز مرحله اول، کمتر شده است.



شکل۳: نمودارهای FORC مربوط به نانوسیم‌های کبالت با (الف) ۳ ساعت، (ب) ۶ ساعت، (ج) ۱۸ ساعت و (د) ۳۰ ساعت زمان آندایز مرحله اول.



شکل۴: توزیع میدان وادارندگی نانوسیم‌های کبالت انباشت شده در قالب AAO با زمان آندایز مرحله اول مختلف.

نتیجه‌گیری

نانوسیم‌های کبالت از طریق روش الکتروانباشت پالسی AC، درون قالب‌های AAO با زمان آندایز مرحله اول ۳، ۶، ۱۸ و ۳۰ ساعت ساخته شدند. بررسی مورفولوژی قالب‌ها و حلقه‌های پسماند مغناـ طیسی نشان داد که افزایش زمان آندایز مرحله اول تا ۱۸ ساعت، به‌دلیل شکل‌گیری پیش‌بافت متقارن، باعث افزایش وادارندگی به ۱۴۹۰ اورستد می‌شود. افزایش بیشتر زمان آندایز مرحله اول تا ۳۰ ساعت، منجر به افزایش مقاومت الکتریکی لایه سدی در حین فرآیند آندایز و از بین رفتن پیش‌بافت متقارن گردید. در این راستا، کاهش وادارندگی آرایه نانوسیم‌های کبالت به ۱۴۵۹ اورستد اتفاق افتاد. توزیع میدان وادارندگی نمودارهای FORC نانوسیم‌های کبالت نشان داد که میزان تشکیل فاز نرم و سخت مغناطیسی به جوانه‌زنی صفحات بلوری ترمودینامیکی و سینتیکی وابسته است.

مرجع‌ها

[۱] A.Ramazani, M.A.Kashi, G.Seyedi, Crystallinity and magnetic properties of electrodeposition Co nanwires in porous alumina, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, **324** 2012 1826-1831.
[۲] W.Lee, S.J.Park, Porous anodic aluminum oxide: anodization and template synthesis of functional nanostructures, Chemical reviews, **114** 2014 7487-7556.
[۳] Z.Guo, L.Tan, Fundamentals and applications of nanomaterials, Artech House, 2009.
[۴] F.Nasirpouri, M.Abdollahzadeh, M.Almasi, N.Parvini-Ahmadi, A comprasion between self-ordering of nanopores in aluminium oxide achieved by two-and three-step anodic oxidation, current applied physucs, **9** 2009..
[۵] G.E.J.Pionern, N.Ali, D.Fawcett, Progress in nan-engineered anodic aluminum oxide membrane development, Materials, **4** 2011 487-526.
[۶] N.Verma, K.C.Singh, B.Mari, J,Jindal, Influence of anodization parameters of first step on structural, features of porous anodic alumina (PAA) finally formed in phosphoric acid, Journal of the Indian Chemical Society, **92** 2015.
[۷] A.Montazer, A.Ramazani, M.A.Kashi, J.Zavasnik, Angular dependent ma-gnetism in Co (001) single-crysal nanowires: capturing the vortex nucleation fields, Journal of Materials Chemistry C, **4** 2016.
[۸] G.Han, N.Zong, P.Luo, Y.Wu, Amgular dependence of the coercivity and remanence of oerromagnetic nanowire arrays, Journal of Applied physis, **93** 2003 9202-9207.
[۹] Y.C.Wu, J.W.Cui, Y.Wang, G.Q.Xu, X.Y.Zhang, Effects of pretreatment and the first anodization time on morphology of anodic aluminium oxide templates, Advanced Materials Research, Trans Tech Publ, **181** 2011.
[۱۰] M.ALmasi-Kashi, A.Ramazani, S.Izadi, E.Jafari-Khamse, Correlation between microstructure and first-order-reversal-curve of Co nanowire arrays, Physica Scripta, **90** 2015 085803.
[۱۱] Montazer, A. H., A. Ramazani, M. Almasi Kashi, and J. Zavašnik. "Developing high coercivity in large diameter cobalt nanowire arrays." *Journal of Physics D: Applied Physics* 49, no. 44 (2016): 445001.
[۱۲] H.Zhang, W.Jia, H.Sun, L.Guo, J.Sun, Growth mechanism and magnetic properties of Co nanowire arrays by AC electrodeposition,Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 468 2018 188-192.

توضیحات

با سلام و احترام

ضمن تشکر از انجمن فیزیک ایران، نکات ذکر شـده داوران محتـرم رعایت شد و فایل اصلاح شده به پیوست تقدیم گردید.

۱. **متن چکیده (بخصوص) و متن مقاله از نظر قواعد نگارش بررسی و باز ویرایش شوند.**

پاسخ : مقاله به‌صورت کامل مورد بازنگری قرار گرفت و نکات ذکر شده رعایت شد.

۲. **چکیده انگلیسی از نظر قواعد گرامری بررسی و باز ویرایش شوند.**

پاسخ : چکیده انگلیسی مورد بررسی و بازنویسی قرار گرفت.

۳. **در صورت امکان الگوی XRD یک نمونه گزارش شود.**

پاسخ : با تشکر از دقت نظر داور محترم، متاسفانه به‌دلیل خاص بودن نحوه انجام آزمایش XRD (با توجه به ابعاد نمونه)، این آنالیز تنها در یک یا دو محل در کشور قابل انجام است و همچنین به‌دلیل کمبود وقت امکان بررسی آنالیز مورد نظر نداشت

۴. **به نظر مقادیر وادارندگی گزارش شده با شکل در توافق نیست لطفا دوباره این موضوع کنترل شود.**

پاسخ : تصویر حلقه پسماند گزارش شده تغییر یافت و تغییرات وادارندگی به‌صورت تصویری بزرگنمایی شده نشان داده شد.

۵. **به نتایج مشابه دیگران در قسمت نتایج به اختصار اشاره شود.**

پاسخ : نتایج به‌دست آمده تحقیقات انجام شده، در صفحه۳ ستون دوم، به اختصار اشاره شد.

تولید و مطالعهٔ ویژگی‌های الکترومغناطیسی فریت لیتیم آلاییده با تیتانیم، روی و منگنز

خانی، امید؛ عباسی، مهدی

دانشکدهٔ الکتروسرام و مهندسی برق، دانشگاه صنعتی مالک‌اشتر، تهران، ایران

چکیده

در این پژوهش، فریت لیتیم آلاییده با مقادیر مختلفی از تیتانیم، روی و منگنز به روش سرامیکی مرسوم تولید شد. آنالیز پراش پرتو ایکس (XRD) نمونه‌ها نشان داد که نمونه‌های تولید شده دارای فاز اسپینلی خالص هستند. اندازه‌گیری حلقه هیسترزیس نمونه‌ها در میدان ۵۰۰ آمپر بر متر، حاکی از آن است که مغناطش اشباع فریت‌های تولید شده، در محدوده ۱۷۰۰ تا ۳۶۰۰ G و نیروی وادارندگی نمونه‌ها در بازه ۱۰ تا ۴۸ A/m متغیر است. بررسی ویژگی‌های الکترومغناطیسی، نشان داد که گذردهی الکتریکی نمونه‌ها در حدود ۱۴ و اتلاف دی‌الکتریک بعضی از آن‌ها تا محدوده 10^{-4} پایین است. نتایج به‌دست آمده حاکی از آن است که برخی از فریت‌های تولید شده در این پژوهش قابلیت استفاده در کاربردهای مایکروویو به‌ویژه انتقال دهنده‌های فاز را دارند.

واژه های کلیدی: فریت لیتیم، انتقال دهنده فاز ، تانژانت اتلاف، ویژگی‌های مایکروویو.

Synthesis and Study of the Electromagnetic Properties of Ti, Zn and Mn Doped Lithium Ferrite

Khani, Omid; Abbasi, Mehdi

Department of Electroceramics and Electrical Engineering, Malek-Ashtar University of Technology, Tehran, Iran.

Abstract

In this study, lithium ferrite doped with different amounts of Titanium, Zinc and Manganese was produced by conventional ceramic method. X-ray diffraction (XRD) analysis of the samples showed that the produced samples contained pure spinel phase. Measurement of the hysteresis ring of the samples in the field of 500 A/m indicates that the saturation magnetization of the produced ferrites varies in the range of 1700 to 3600 G and the coercive force of the samples varies in the range of 10 to 48 A/m. Examination of the electromagnetic properties of the samples showed that the electrical conductivity of the samples is about 14 and some samples have the dielectric loss in the range of 10^{-4}. The results indicate that some of the ferrites produced in this study can be used in microwave applications, especially in phase shifters.

***Keywords**: Lithium ferrite, Phase shifter, Loss tangent, Microwave properties.*

PACS No. 75

مقدمه

در ابتدای توسعهٔ تجهیزات مایکروویو، اغلب از فریت منگنز-منیزیم و فریت نیکل استفاده می‌شد. از طریق جایگزینی عناصر غیرمغناطیسی مانند آلومینیوم در این فریت‌ها، طیف گسترده‌ای از مغناطش اشباع (حدود ۵۰۰ G-۵۰۰۰) برای پوشش بخش بزرگی از طیف فرکانس مایکروویو ساخته شد [۱-۳]. فریت منگنز-منیزیم علی‌رغم خصوصیات هیسترزیس مربعی عالی، دمای کوری پایینی دارد. از طرفی فریت نیکل عملکرد دمایی مناسبی داشته، اما عموما اتلاف مغناطیسی بالایی دارد [۲, ۳]. با کشف گارنت‌های مغناطیسی، این مواد جایگزین فریت‌های منگنز-منیزیم و نیکل شدند. دمای کوری و مغناطش گارنت‌ها به ترتیب کمتر از ۲۸۰°C و ۲۰۰۰ G است. با این وجود، جایگزینی یون‌های خاکی کمیاب مانند گادولینیوم به جای ایتریم، ویژگی‌های دمایی بهبود یافته‌ای را فراهم می‌کند، اما با افزایش اتلاف مغناطیسی همراه است [۲]. هزینه بالای تهیه مواد اولیهٔ تولید گارنت (به عنوان مثال، اکسید ایتریم و اکسیدهای خاکی کمیاب) منجر به تلاش‌هایی برای تکامل سیستم‌هایی با هزینه پایین‌تر شده که یکی از این تلاش‌ها، توسعه ترکیبات فریت لیتیم مایکروویو بوده است [۱].

خصوصیات حلقه هیسترزیس عالی، نسبت‌های مربعی و وادارندگی بالا و پایداری دمایی مناسب (فریت لیتیم خالص $Li_{0.5}Fe_{2.5}O_4$، دارای دمای کوری ٦٧٠ °C است که بالاترین دمای کوری در میان اکسیدهای فری مغناطیسی است [٤, ٣]) و حساسیت به تنش پائین، امکان استفاده از فریت لیتیم را در تجهیزات مایکروویو فراهم کرده است. از طرفی برخلاف گارنت‌ها، فریت لیتیم حاوی مواد گران قیمت نیست و به‌کارگیری آن، امکان کاهش قابل توجه در هزینه ساخت تجهیزات مایکروویو را فراهم می‌کند [٢, ٣].

طبق گزارش آقای باب و همکارانش، برای استفاده از فریت‌ها در کاربردهای مایکروویو مانند تغییردهنده‌های فاز علاوه بر خصوصیات مغناطیسی مناسب باید اتلاف دی‌الکتریک از مرتبهٔ 10^{-3} باشد [٢]. خواص الکتریکی و مغناطیسی فریت‌ها به شدت به روش تولید، ترکیب و ریزساختار آنها وابسته است [٥]. انواع فریت‌ها و از جمله فریت لیتیم به روش‌های مختلفی چون سل‌ژل، هیدروترمال و روش مرسوم تولید سرامیک‌ها در حالت جامد تهیه می‌شوند. در روش‌های سل-ژل و هیدروترمال به دلیل کنترل دقیق استوکیومتری خواص مناسب‌تری نسبت به روش حالت جامد بدست می‌آید. اما به‌دلیل هزینه بالا و میزان تولید در مقیاس آزمایشگاهی، روش تولید سرامیک‌ها در حالت جامد با قابلیت تولید مواد در مقیاس صنعتی مورد توجه قرار گرفته است. از طرفی در فریت‌های لیتیم با افزایش دمای تف‌جوشی، تعداد یون‌های Fe^{2+} در ساختار افزایش یافته و به دلیل افزایش جهش الکترونی بین یون‌های Fe^{2+} و Fe^{3+} هدایت الکتریکی و اتلاف الکتریکی افزایش می‌یابد [٢, ٦]. همچنین در دماهای پائین تف‌جوشی، وجود تخلخل‌ها از طریق جذب ناخالصی و رطوبت باعث افزایش اتلاف الکتریکی می‌شود[٧]. به منظور افزایش چگالی در دماهای پایین تف‌جوشی و دست‌یابی به خصوصیات الکترومغناطیسی مناسب، روش‌های مختلفی از جمله: اعمال حرارت و فشار به طور همزمان، تف جوشی با امواج مایکروویو و یا پلاسما، جایگزینی عناصر مغناطیسی و غیرمغناطیسی در ترکیب فریت و استفاده از کمک سینترها به کار می‌رود. از میان روش‌های فوق دو روش اول به دلیل هزینه بالا، صرفه اقتصادی ندارند و لذا روش استفاده از کمک سینتر، بیش از پیش مورد توجه قرارگرفت. کمک سینترها بوسیله تشکیل فاز مذاب، امکان تف‌جوشی کامل و رسیدن به دانسیته بیشتر را در دماهای پایین‌تر تف‌جوشی فراهم می‌کنند [٨].

روش تحقیق

در این پژوهش فریت لیتیم، مطابق با استوکیومتری ذکر شده در رابطه ۱ و بر اساس ضرایب جدول ۱، به روش سرامیکی مرسوم و در یک آسیای سیاره‌ای با کاپ و ساچمه‌های فلزی تولید شد.

$$Li_{0.5(1+t-z)}Zn_zMn_{0.035}Fe_{2.5(1-0.2z-0.6t-0.074)}Ti_tO_4 \quad (۱)$$

جدول۱- ضرایب استوکیومتری نمونه‌های مختلف.

کد نمونه	Li	z	Fe	t
N-1	۰/۲۷۵	۰/۵	۱/۹۹	۰/۰۵
N-2	۰/۲۷۵	۰/٦	۱/۹۹	۰/۰۵
N-3	۰/۲۲۵	۰/٦	۱/۹٤	۰/۰۵
N-4	۰/۲۵	۰/٦	۱/۸٦	۰/۱
N-5	۰/۳	۰/٦	۱/۷۲	۰/۲

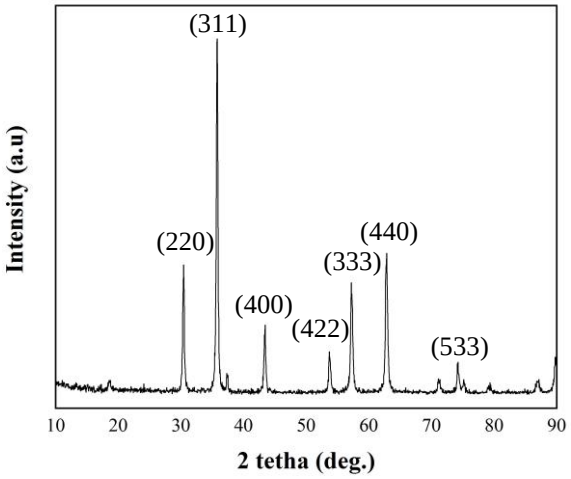
اکسید آهن و کربنات منگنز مورد استفاده، به ترتیب دارای خلوص۹۸/۵٪ و ۹۳٪ و همچنین اکسید روی، کربنات لیتیم و اکسید تیتانیم دارای خلوص ۹۹٪ می‌باشند. مواد اولیه براساس نسبت‌های استوکیومتری مدنظر به‌مدت ۲ ساعت در آسیای سیاره‌ای با یکدیگر مخلوط شدند. محیط آسیا، آب و نسبت پودر به ساچمه ۱ به ۵ درنظر گرفته شد. مخلوط حاصل پس از خشک شدن در دمای ۷۰۰ °C به مدت ۳ ساعت کلسینه شد. به مواد حاصل، میزان دو هزارم درصد وزنی، اکسید بیسموت شرکت سیگما آلدریچ اضافه و مجدداً مواد به مدت ۲ساعت آسیای ثانویه شدند. محصول، بعد از خشک سازی، در فشار کمتر از ۲۰ Bar به شکل رینگ‌هایی با قطر خارجی۲۰، قطر داخلی۱۰ و ارتفاع ٦ میلی‌متر شکل‌دهی و در دمای ۹۷۵ درجه سانتیگراد به مدت ۱۰ ساعت سینتر شد. به‌منظور بررسی فاز بلوری محصول، آنالیز پراش پرتو ایکس (XRD) انجام شد. حلقه هیسترزیس نمونه‌ها با دستگاه هسیتوگراف ساخت شرکت Brockhaus Messtechnik مدل MPG100D اندازه‌گیری شد. اتلاف دی‌الکتریک و گذردهی الکتریکی نمونه‌ها با استفاده از نمونه‌های پولک شکل و به روش

تشـــدید کـــاواک، توسط آنالیـــزگر شبکـــه برداری مدل PNA Network Analyzer NP222A ســـاخت شرکـــت Agilent Technologies اندازه‌گیری شد.

نتایج و بحث

آنالیز XRD

الگوی پراش نمونه N-5 به‌طور نوعی در شکل ۱ نشـان داده شـده است. بررسی الگـوی پـراش نشـان داد کـه در الگـوی نمونـه‌های کلسینه‌شده در دمای ۷۰۰ °C، به‌طور خـالص فـاز فریـت اسـپینلی دیده می‌شود و هـیچ بیشـینه‌ای ناشـی از فازهـای ناخالصـی در آن دیده نمی‌شود. الگوی پراش نمونـه‌ها بـا کـارت اسـتاندارد شـمارهٔ ۱۰۸۶-۲۲ مطابقت دارد.



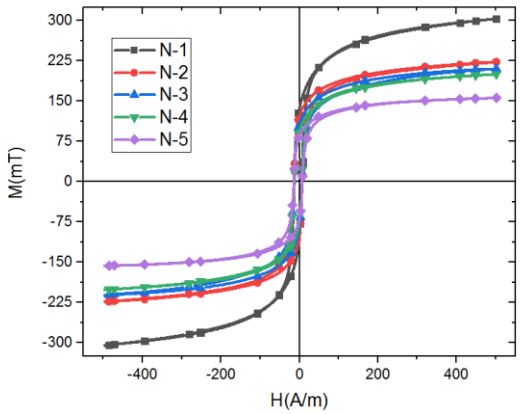
شکل ۱:الگوی پراش اشعه ایکس نمونه N-5.

خصوصیات الکترومغناطیسی

هر یک از یون‌های مختلف که بـه سیسـتم فریـت لیتـیم اضـافه می‌شوند، یک یا دو خصوصیت را اصلاح می‌کنند و در عـین حـال بر دیگر خصوصیات نیز ممکن است، اثر مخربی داشـته باشـند. بـا این حال برای کاربرد مورد نظر خصوصیات نهایی در کنار یکدیگر ملاک انتخاب قرار خواهند گرفت[۲, ۳].

در شکل۲ و جدول ۲ به ترتیب نمودار هیسترزیس و مشخصات الکترومغناطیسی نمونه‌های تولیدی آورده شده است. بر اساس این داده‌ها، مشخص است که نیروی وادارندگی(Hc) تمامی نمونه‌ها کمتر از یک اورستد است که یکی از ویژگی‌های مورد نظر فریت لیتیم برای کاربردهای مایکروویو و انتقال‌دهنده فاز می‌باشد [۲].

همچنین مغناطش اشباع در محدوده ۱۷۰۰ تا ۳۶۰۰ G متغیر است. از طرفی اتلاف دی الکتریک تمامی نمونه‌ها به جز نمونه N-1، کمتر از $۱۰^{-۳}$ است که بر اساس منابع، مناسب کاربردهای کاربردهای مایکروویو و انتقال‌دهنده فاز می‌باشد [۲].



شکل ۲: نمودار هیسترزیس نمونه‌ها در میدان ۵۰۰A/m.

اما با مقایسه دو به دو نمونه‌های N-1 و N-2، مشخص شد که با افزایش میزان روی در ترکیب به میزان یک دهم، مغناطش اشباع حدود هزار واحد و مقدار Hc حدود ۲۰A/m، کاهش پیدا کرده است. همچنین تانژانت اتلاف کاهش محسوسی پیدا کرده است. علت این کاهش جانشینی روی در مکان‌های هشت وجهی به جای آهن می‌باشد که منجر به کاهش مغناطش می‌شود و از طرفی عنصر روی موجب تراکم و رشد دانه‌ها شده و لذا در کاهش نیروی وادارندگی موثر است [۲].

همچنین با مقایسه نمونه‌های N-2 و N-3، باکاهش ضرایب استوکیومتری لیتیم و آهن به میزان پنج صدم، مغناطش اشباع به میزان ۳۵۰G کاهش پیدا کرده، در حالی که مقادیر Hc تغییر چندانی نداشته است. این درحالی است که تانژانت اتلاف افزایش قابل توجهی پیدا کرده است. کاهش مغناطش اشباع می‌تواند ناشی از کاهش یون مغناطیسی آهن باشد. افزایش اتلاف می‌تواند به جبران نشدن تیتانیم چهار ظرفیتی با کاهش لیتیم و درنتیجه افزایش آهن دو ظرفیتی، مربوط شود [۲].

با مقایسه نمونـه‌های N-4 و N-3، افـزایش ضـرایب اسـتوکیومتری لیتیم و تیتانیم به ترتیب بـه میـزان ۰٫۲۵ و ۰٫۰۵ و کـاهش ضـریب آهن به میزان ۰٫۰۸، مقادیر مغناطش اشباع و نیروی وادارنـدگی بـه

ترتیب بـه میـزان ۱۵۰ °C و ۱۶٫۵ A/m کـاهش پیـدا کـرده اسـت. همچنین اتلاف دی الکتریـک کـاهش محسوسـی را داشـته اسـت. افزایش تیتانیم چهارظرفیتی منجر به تولید آهن دو ظرفیتی می‌شـود که منجر به افزایش اتلاف دی الکتریـک می‌شـود، امـا بـا افـزایش مقدار لیتیم در ساختار، ظرفیت اضافی تیانیوم جبران شده و اتـلاف دی الکتریک کاهش می‌یابد [۲].

در نهایـت بـا مقایسـه نمونـه‌های N-4 و N-5، افـزایش ضـرایب استوکیومتری لیتیم و تیتانیم به ترتیب به میزان ۰٫۵ و ۰٫۱ و کـاهش ضـریب آهـن بـه میـزان ۰٫۱۴، مقـادیر مغنـاطش اشـباع و نیـروی وادارندگی به ترتیب به میزان ۵۰۰ G و ۶ A/m کـاهش پیـدا کـرده است. این در حالی است کـه ε و تانژانـت اتـلاف تغییـر چنـدانی نکـرده اسـت. کـاهش مغنـاطش اشـباع بـه کـاهش مقـدار عنصـر مغناطیسی آهن و افزایش عناصـر غیـر مغناطیسـی تیتـانیم و لیتـیم نسبت داده می‌شود [۲].

جدول۲- خصوصیات الکترومغناطیسی نمونه‌های تولیدی.

کد نمونه	Ms (G)	Hc (A/m)	ε	tanδ
N-1	۳۶۰۰	۴۸	۱۳٫۴۵	۰٫۰۲
N-2	۲۶۲۰	۳۲	۱۴٫۶	$۶٫۲\times۱۰^{-۴}$
N-3	۲۳۷۰	۳۳	۱۴٫۲۶	۱×۱۰^{-۳}
N-4	۲۲۲۵	۱۶٫۵	۱۴٫۸	$۷٫۵\times۱۰^{-۴}$
N-5	۱۷۰۰	۱۰٫۵	۱۴٫۴۵	$۵٫۴\times۱۰^{-۴}$

به طور کلی می‌توان گفت که افزودن کمک زینتر، اکسید بیسموت به مقدار دو هزارم وزنی به همراه افزودن منگنز به مقدار ۰٫۰۳۵ در واحد فرمول موجب شده است که اکثر نمونه‌های تولیدی، اتلاف و نیروی وادارندگی پائینی را با انجام تف‌جوشی در دمای کمتر از ۱۰۰۰°C داشته باشند. اکسید بیسموت بالای ۸۲۵ °C مایع است و یوتکتیک با دمای ذوب پائین را در انواع سیستم های اکسیدی تشکیل می دهد. از طرفی منگنز سه ظرفیتی علاوه بر انجام یک واکنش بافری که منجر به کاهش آهن دو ظرفیتی ساختار شده که در کاهش اتلاف موثر است به عنوان یک کمک زینتر نیز عمل می‌کند. لذا افزودن مقادیر مناسب منگنز و اکسید بیسموت به ایجاد خصوصیات مناسب منجر می‌شود [۲, ۳].

نتیجه گیری

می‌توان با افزودن صحیح عناصر مغناطیسی و غیر مغناطیسی همانند تیتانیم، روی و منگنز و نیز اکسید بیسموت به فریت لیتیم، در دماهای پائین تف‌جوشی(کمتر از ۱۰۰۰ °C)، خصوصیات مایکرویوی و هیسترزیسی مناسبی را در این مواد ایجاد کرد. به طوری که بدون نگرانی از ایجاد آهن دو ظرفیتی در ساختار و یا افزایش هزینه تف‌جوشی در دماهای بالاتر و در محیط گاز اکسیژن، فریتی با اتلاف دی الکتریک کمتر از $۱۰^{-۴}$ و نیروی وادارندگی کمتر از ۱ Oe تولید کرد.

مرجع‌ها

[1]Jefferson, C. F. and R. G. West. "Ferrite System for Application at Lower Microwave Frequencies." *Journal of Applied Physics* **32**(3): (1961)390-392.
[2]Baba, P., et al. "Fabrication and properties of microwave lithium ferrites." *IEEE Transactions on Magnetics* **8**(1): (1972)83-94.
[3]Wohlfarth, E. P. Handbook of magnetic materials, Elsevier,(1986)
[4]Argentina, G. M. and P. D. Baba. "Microwave Lithium Ferrites: An Overview." *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques* **22**(6): (1974)652-658.
[5]George, M., et al. "Structural, magnetic and electrical properties of the sol-gel prepared $Li_{0.5}Fe_{2.5}O_4$fine particles." *Journal of Physics D: Applied Physics* **39**(5): (2006)900-910.
[6]Fan, F. and F. Sale. "Influence of B_2O_3 on the Production of Pure, Gel-Processed Mn-Zn Ferrites." *Journal de Physique IV Proceedings* **07**(C1): (1997)81-82.
[7]Teo, M. L. S., et al. "Development of magneto-dielectric materials based on Li-ferrite ceramics. I. Densification behavior and microstructure development." *Journal of Alloys and Compounds* **459**: (2008)557-566.
[8]Shokrollahi, H. and K. Janghorban. "Influence of additives on the magnetic properties, microstructure and densification of Mn–Zn soft ferrites." *Materials Science and Engineering: B* **141**: (2007)91-107.

بهینه سازی ویژگی‌های الکترومغناطیسی فریت لیتیم

بهرامی ، زهرا [۱]؛ کیانی ، اسماعیل [۲] و شمس ، محمد حسین [۳]
[۱] دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی مالک اشتر، انتهای خیابان فردوسی ، شاهین شهر
[۲،۳] گروه الکتروسرام و مهندسی برق، دانشگاه صنعتی مالک اشتر شاهین شهر

چکیده – *در این پژوهش، فریت لیتیم جانشانی شده با (Al ،Ti) با ترکیب شیمیایی* $Li_{0.873}Ti_{1.086-x}Al_{1.333x}Fe_{0.782}Mn_{0.067}Zn_{0.151}O$ *با استفاده از فرآیند روش حالت جامد سنتز شد. نقش شرایط مختلف تفجوشی همانند دما، اتمسفر تفجوشی، مدت زمان تفجوشی و افزودن اکسید بیسموت بر روی دمای کوری و تلفات الکترومغناطیسی نمونه‌ها مورد بررسی قرار گرفت. با بهینه سازی تفت جوشی فریت لیتیوم، دمای کوری فریت از ۱۷°C به -35°C و ضریب اتلاف دی‌الکتریک از* $1/2\,e^{-3}$ *به* $3.3.e^{-4}$ *و ثابت دی‌الکتریک از ۱۷/۱۰ به ۱۴/۱ کاهش پیدا کرد.*

Optimization of electromagnetic properties of lithium paramagnetic

Bahrami,Zahra[1]; kiani,esmail[2]; shams,mohammad hossein[3]
1Department of physics, university of malek Ashtar, shahin shahr
2,3 Department of Electroserum and Electrical Engineering,university of Malek Ashtar ,Shahinshahr

Abstract
In this study, lithium ferrite ($Li_{0.873}Ti_{1.086-x}Al_{1.333x}Fe_{0.782}Mn_{0.067}Zn_{0.151}O_4$) substituted with (Al, Ti) was synthesized by using the solid state method. The role of different annealing conditions such as the temperature, atmosphere, time of annealing, bismuth additive and electromagnetic losses of the samples were investigated. By optimizing the annealing condition of paramagnetic lithium ferrite, the curry temperature reduced from -17 to -35 °C and the constant dielectric decreased from 17/10 to 14/1.

۱- مقدمه

فریت ها به دلیل مقاومت زیاد و تلفات دی الکتریک کم گزینه بسیار مناسبی برای قطعات الکتریکی می‌باشد. فریت لیتیم به عنوان یک فریت اسپینل معکوس ترکیب فری مغناطیس و با فرمول استوکیومتری $(Li_{0.5}Fe_{2.5}O_4)$ شناخته شده است [۱]. خانواده فریت لیتیم دارای دمای کوری بزرگ و خواص مغناطیسی مطلوبی هستند. زمانی که افزودنی‌های مغناطیسی یا دیامغناطیسی به فریت لیتیم اضافه شود، خواص مغناطیسی و دی الکتریک این فریت تغییر چشمگیری می‌کند. از میان این جانشینی‌ها، Ti و Al بر روی ثابت ناهمسانگردی و مغناطش این فریت بسیار تأثیر گذار هستند [۲]. خانواده‌ی فریت لیتیم - تیتانیوم دارای دمای کوری کمتری نسبت به فریت لیتیم است. با تغییر درصد هرکدام از این عناصر، می توان ویژگی های الکترومغناطیسی این فریت را تغییر داد. فریت های مغناطیسی نرم معمولاً با روش حالت جامد به دلیل آسانی فرآیند، تولید می‌شوند. در پژوهش حاضر، فریت لیتیم با جانشانی کاتیون‌های (Ti، Al، Zn و Mn) با ترکیب شیمیایی $Li_{0.873}Ti_{1.086-x}Al_{1.333x}Fe_{0.782}Mn_{0.067}Zn_{0.151}O_4$ تهیه شده و خواص مغناطیسی و الکتریکی فریت در محدوده فرکانس ماکروویو ۹ گیگا هرتز با توجه به جانشانی کاتیون‌های Ti^{4+} و Al^{3+} مورد بررسی قرار گرفته است. به منظور بهینه کردن خواص مغناطیسی و الکتریکی فریت لیتیوم تحت شرایط مختلف همانند اثر تف جوشی، زمان تف جوشی، اتمسفر تف جوشی، دما تف جوشی، افزودن اکسید بیسموت مورد بررسی قرار گرفت.

۲- روش آزمایش

پودرفریت لیتیم جانشانی شده با کاتیون‌های (Ti، Al، Zn و Mn) با ترکیب شیمیایی $Li_{0.873}Ti_{1.086-x}Al_{1.333x}Fe_{0.782}Mn_{0.067}Zn_{0.151}O_4$ در مقادیر مختلف x از(۰/۵، ۰/۴، ۰/۳، ۰/۲، ۰/۱ = x) به روش حالت

جامد تهیه شـــد. پس از محاســـبه مقادیر وزن لازم از مواد اولیه، تمامی پودرها به مدت ۲ ســاعت درون آســیاب سیاره‌ای قرار گرفت. سـپس به منظور تشـــکیل فازهای مورد نظر، مواد درون کوره الکتریکی به مدت ۵ ســاعت در دمای ۱۰۹۰ درجه ســانتی گراد کلســینه شــدند. پس از فرایند کلسینه، قرص‌هایی با قطر ۹ میلیمتر و ارتفاع ۱ سانتی متر در فشار ۲ بار شکل دهی شد. سپس نمونه‌ها در دمای ۱۰۹۰ درجه سانتی گراد به مدت ۸ ساعت تف جوشی شد. دمای کوری با استفاده از ترازوی فارادی اندازه گیری شـــد و ثابت دی الکتریک، گذردهی و ضـــریب اتلاف نمونه ها با اسـتفاده از دسـتگاه پردازشـگر شـبکه برداری و روش محفظه تشـدید در فرکانس ۹ گیگاهرتز اندازه گیری شد.

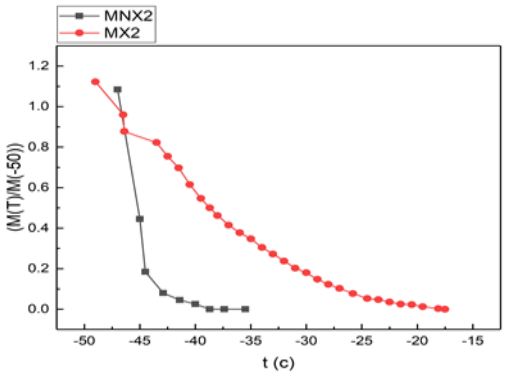
۳- نتایج و بحث

به منظور بهینه سازی خواص مغناطیسی و الکتریکی نمونه جانشانی شده با مقدار x=۰/۲، خصوصیات دمایی تفجوشی و همچنین اثر اضافه کردن مقدار بیسموت با اندازه ۶٪ وزنی به عنوان کمک ذوب بررسی شد. جدول ۱ شرایط تف جوشی به منظور بهینه سازی نمونه x=0.2 را نشان می‌دهد.

جدول ۱: شرایط تف جوشی به منظور بهینه سازی نمونه x=0.2

نمونه	اکســـیـــد بیسموت	شرایط تف جوشی	دمای تف جوشی °C	زمان تـــف جوشی h
X2=۰/۲	۰/۶%wt	افزودن اکسید بیسموت	۱۰۹۰	۸
X3=۰/۲	۰/۴%wt	اتمسفراکسیژن	۱۰۹۰	۱۲
X4=۰/۲	۰/۴%wt	–	۱۰۹۰	۱۶
X5=۰/۲	۰/۴%wt	–	۱۰۹۰	۱۲
X6=۰/۲	۰/۴%wt	–	۱۰۴۰	۱۶

به طور کلی جانشـانی تیتانیم و آلومینیوم، خواص مغناطیسـی و الکتریکی مطلوبی در پی داشـــت. ترکیب شـــیمیایی و محل قرارگیری کاتیون ها در ســـاختار بلوری از مهم ترین عواملی هســـتند که بر مغناطش و خواص مغناطیســـی نمونه تأثیر میگذارند. عملکرد اصـــلی Ti^{4+}، کاهش مغناطش اشباع می‌باشد. با جانشانی یون تیتانیم در مکان هشت وجهی به جای آهن ســـبب کاهش برهم کنش تبادلی در زیر شـــبکه میگردد. همچنین Al^{3+} تمایل زیادی به جانشـــانی در مکان هشـــت وجهی دارد و از آنجایی که مغناطش در مکان هشـــت وجهی کاهش یافته موجب کاهش برهم کنش ابرتبادلی و مغناطش کل می‌گردد. در نتیجه ممان‌های مغناطیسی نمی‌توانند جهت گیری منظمی پیدا کنند لذا وارد فاز پارا مغناطیس می شوند [۳]. به منظور بهینه سازی نمونه جانشانی شده با تیتانیوم و آلومینیوم، مقدار اکسید بی سموت به ۱/۵ برابر افزایش داده شد. اکسید بی سموت به عنوان کمک ذوب در فرآیند تفجوشـــی اســـتفاده می گردد. همانطور که در شـــکل ۱ مشاهده می شود افزودن اکسید بی سموت سبب کاهش مغناطش اشباع می‌گردد و افزایش اکسید بیسموت باعث ایجاد فاز $BiFe_2O_3$ در مرزدانه می‌شـود که دارای خواص مغناطیسـی ضـعیف می‌باشـند، بنابراین باعث کاهش ناهمســـانگردی و مغناطش اشـــباع و درنتیجه کاهش دمای کوری می‌گردد [۴].



شکل ۱ : منحنی تغییرات مغناطش بر حسب دما نمونه x=۰/۲.

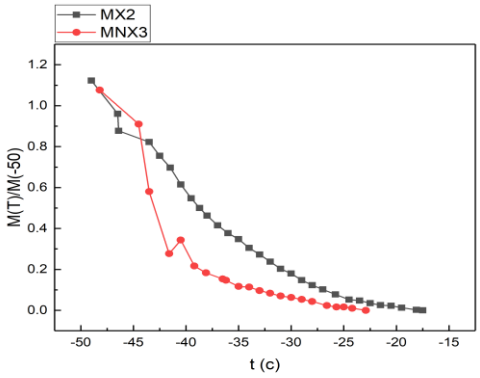
فریت لیتیم دارای دمای تفجوشـــی بالا می باشـــد. از این رو دماهای بالا موجب از دست دادن لیتیم و اکسیژن و افزایش تولید یون Fe^{2+} می‌شود. لذا ثابت دی‌الکتریک و ضـریب اتلاف دی‌الکتریک دی‌الکتریک در ماده افزایش می یابد. افزایش اکســـید بیســـموت باعث ایجاد فاز ناخالصـــی $BiFe_2O_3$ می شـــود که موجب افزایش مقاومت ودر نتیجه کاهش تلفات دی‌الکتریک و ضریب اتلاف دی‌الکتریک می شود. جدول ۲ مقایســـه ثابت دی‌الکتریک و ضـــریب تلفات دی‌الکتریک مقایســـه نمونه x=۰/۲ با مقدار اکســـید بیســـموت ۰/۴٪w و با مقدار اکســـید افزوده‌ی بیسموت ۰/۶٪w را نشان می‌دهد.

جدول ۲: مقایسه ثابت دی‌الکتریک و ضریب اتلاف دی‌الکتریک نمونه x=۰/۲ با مقدار اکسید بیسموت ۰/۴٪w با افزایش مقدار اکسید بیسموت ۰/۶٪w

نمونه	ثابت دی‌الکتریک(ε)	ضـــریـــب اتـــلاف دی‌الکتریک(tanδ)
x=۰/۲	۱۷/۱۰	$۱/۲e^{-3}$
MNX2	۱۶/۴	$۵/۵e^{-4}$

همانطور که در جدول ۲ مشاهده می‌شود افزایش مقدار جانشانی بیسموت موجب کاهش مقدار ثابت دی الکتریک و ضـــریب اتلاف دی الکتریک نسـبت به نمونه x=۰/۲ خالص شـده اسـت. دمای تفجوشـی بالای فریت لیتیم و کاهش اکســـیژن جوی، باعث از دســـت دادن اکســـیژن و لیتیم و

همچنین سبب رشد دانه می‌شود. در نتیجه‌ی افزایش یون Fe^{2+} تلفات افزایش می‌یابد. از این رو نمونه در حضور اتمسفر اکسیژن تفجوشی شد. اتمسفر اکسیژن سبب کاهش از دست دادن اکسیژن در فریت لیتیم می‌شود. همچنین به دلیل تأخیر در فرآیند تشکیل و تراکم، به مدت زمان بیشتری برای تفجوشی نیازمند است. به همین دلیل دمای تفجوشی به ۱۲ ساعت افزایش یافت. نمونه‌ی فوق به مدت ۱۲ ساعت در دمای ۱۰۹۰ درجه سانتی گراد تفجوشی شد. شکل ۲ دمای کوری نمونه تفجوشی شده در حضور اتمسفر و نمونه‌ی x=0.2 را نشان می‌دهد.



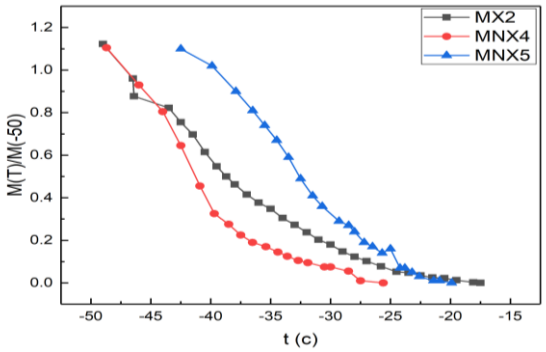
شکل۲: منحنی تغییرات مغناطش بر حسب دما نمونه x=۰٫۲.

همانطور که در شکل ۲ مشاهده می شود در ساختار بلوری، تعدادی بار منفی به سمت اکسیژن کشیده می‌شود. زمانی که اکسیژن از ساختار خارج می‌شود، الکترون را که به سمت خود کشیده است را وارد ساختار می‌کند. اتمسفر اکسیژن باعث کاهش نسبت Fe^{3+}/Fe^{2+} در مکان هشت وجهی می‌شود. مکان هشت وجهی مسئول هدایت الکتریکی است. از این رو پرش الکترونی کاهش یافته و در نتیجه ثابت دی الکتریک و ضریب اتلاف دی الکتریک کاهش می‌یابد. جدول ۳ مقایسه بین ثابت دی الکتریک و ضریب اتلاف دی‌الکتریک بین نمونه x=.٫۲ خالص و تفجوشی شده در حضور اتمسفر اکسیژن را نشان می‌دهد.

جدول ۳: مقایسه ثابت دی الکتریک و ضریب اتلاف دی‌الکتریک نمونه x=۰٫۲ و تفجوشی شده در حضور اتمسفر

نمونه	مدت زمان تفجوشی (h)	اتمسفر اکسیژن cc/min	ثابت دی‌الکتریک (ε)	ضریب اتلاف دی‌الکتریک (tanδ)
X=۲/۰	۸	–	۱۷/۱۰	۱/۲e^{-3}
MNX3	۱۲	۰٫۱	۱۵/۸	۶/۷۰e^{-4}

همانطور که در جدول مشاهده می شود حضور اتمسفر اکسیژن باعث کاهش ثابت دی‌الکتریک و ضریب اتلاف دی‌الکتریک نسبت به نمونه خالص شده است. دما و مدت زمان تفجوشی دو پارامتر مهم هستند که بر روی خواص ساختاری و الکتریکی ماده تأثیر می گذارند. افزایش مدت زمان تفجوشی موجب افزایش اندازه دانه می‌شود [۵] . اندازه دانه تأثیر بسزایی در تبادل الکترون در دی‌الکریک ماده دارد.با کاهش مرز دانه، جهش الکترون بین یون های Fe^{2+} و Fe^{3+} افزایش پیدا می کند. افزایش جهش الکترون موجب افزایش نسبت یون های Fe^{3+}/Fe^{2+} در مکان هشت وجهی می گردد و در نتیجه باعث افزایش ثابت دی الکتریک و ضریب اتلاف دی‌الکتریک می گردد. کاهش مدت زمان تفجوشی باعث کاهش اندازه دانه و در نتیجه اندازه مرز دانه افزایش پیدا می‌کند. مرزدانه‌ها به عنوان عایق در مادهی دی الکتریک می باشد و کار انتقال الکترون را مختل می کند. زمانی که انتقال الکترون و جهش الکترونی در مکان هشت وجهی کاهش یابد، نسبت یون‌های Fe^{3+}/Fe^{2+} کاهش می‌یابد و در نتیجه باعث کاهش ثابت دی الکتریک و ضریب اتلاف دی‌الکتریک می شود. شکل ۳ دمای کوری نمونه x=۰٫۲ تفجوشی شده در دمای ۱۰۹۰ درجه سانتی گراد در مدت زمان ۱۶ و ۱۲ ساعت و نمونه X=0.2 تفجوشی شده در مدت زمان ۱۸ساعت را نشان می‌دهد



شکل ۳: منحنی تغییرات مغناطش بر حسب دما نمونه x=۰٫۲.

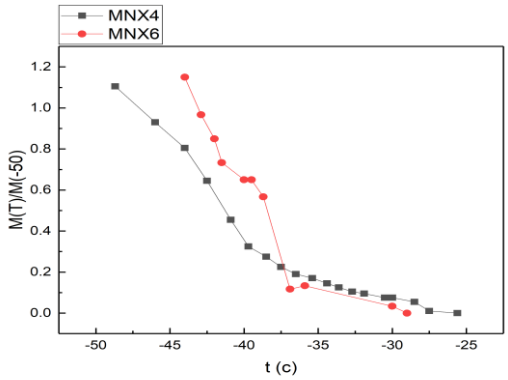
مشاهده می شود که ماده در دمای ۱۹٫۹ °C- وارد فاز پارامغناطیس شده است و مغناطش خود را از دست داده اند. بنابراین می توان به این نتیجه گرفت که افزایش مدت زمان تفجوشی و بزرگ شدن دانه موجب کوچکتر شدن دمای کوری شده است. جدول ۴ مقایسه ثابت دی‌الکتریک و ضریب اتلاف دی‌الکتریک نمونه x=۰٫۲ نمونه خالص و تفجوشی شده در مدت زمان ۱۶ و ۱۲ ساعت را نشان داده است. مشاهده می شود کاهش مدت زمان تفجوشی موجب کاهش ثابت دی الکتریک و ضریب اتلاف دی‌الکتریک شده است. بنابراین می توان نتیجه گرفت در شرایط دمایی تفجوشی یکسان و مدت زمان ۱۲ و ۱۶ ساعت کاهش مدت زمان تفجوشی باعث کاهش اندازه دانه می شود و در نتیجه اندازه مرز دانه افزایش پیدا می کند. نمونه MNX5 دارای بهترین ثابت دی الکتریک می‌باشد. بنابراین می‌توان به این نتیجه دست یافت که مدت زمان ۸ ساعت و ۱۶ ساعت، مدت زمان تفجوشی مناسبی نبوده است و درنهایت مدت

زمان ۱۲ ساعت بهترین مدت زمان برای تفجوشی است و باعث بهبود ثابت دی‌الکتریک می‌شود.

جدول۴: مقایسه نمونه x=۰/۲ خالص با نمونه تفجوشی در دمای پایین

نمونه	دمای تفجوشی °C	مدت زمان تفجوشی (h)	ثابت دی الکتریک (ε)	ضریب اتلاف دی الکتریک (tanδ)
MNX4	۱۰۹۰	۱۶	۱۵/۱	۶/۴۰e^{-4}
MNX6	۱۰۴۰	۱۶	۱۴/۸	۳/۳۰e^{-4}

شکل ۴ دمای کوری نمونه تفجوشی شده در دمای ۱۰۴۰ °C به مدت ۱۶ ساعت و نمونه MNX4 تفجوشی شده به مدت ۱۶ ساعت را نشان می‌دهد.



شکل ۴ :منحنی تغییرات مغناطش بر حسب دما نمونه x=۰/۲

جدول ۵ مقایسه بین نمونه MNX4 با نمونه تفجوشی در دمای پایین را نشان می‌دهد. مشاهده می شود که نمونه MNX6 دارای بهترین ضریب اتلاف دی‌الکتریک می‌باشد.

جدول۵: مقایسه نمونه x=۰/۲ خالص با نمونه تفجوشی در مدت زمان ۱۲ و ۱۶ ساعت

نمونه	دمای تفجوشی °C	مدت زمان تفجوشی (h)	ثابت دی‌الکتریک (ε)	ضریب اتلاف دی‌الکتریک (tanδ)
MNX2	۱۰۹۰	–	۱۷/۱۰	۱/۲e-3
MNX5	۱۰۹۰	۱۲	۱۴/۴	۵/۹۰e-4
MNX4	۱۰۹۰	۱۶	۱۵/۱	۶/۴۰e-4

نتیجه گیری

به منظور بهبود خواص مغناطیسی و الکتریکی فریت لیتیم نمونه x=۰/۲ شرایط تف جوشی همانند مدت زمان، دما و اتمسفر اکسیژن بر روی خواص دی‌الکتریک و دمای کوری مورد بررسی قرار گرفت. افزایش مقدار اکسید بیسموت تاثیر بسزایی در کاهش دمای کوری داشت و باعث گذار فاز پارا مغناطیس در دمای ۳۵/۲ °C- گردید. کمترین ضریب اتلاف دی الکتریک به مقدار 3.3e $^{-4}$ در دمای تف جوشی ۱۰۴۰ °C به مدت ۱۶ ساعت حاصل شد. همچنین ثابت دی الکتریک به مقدار ۱۴/۴ در دمای تف جوشی ۱۰۹۰ °C به مدت ۱۲ ساعت حاصل شد.

مراجع

[۱] K. Song, X. Chen, and X. Fan "Effects of Mg/Si ratio on microwave dielectric characteristics of forsterite ceramics", Journal of the American Ceramic Society 90 (2007) pp 1808-1811.
[۲] V. Murthy, S. Sundaram, and B. Viswanathan, Microwave materials, Springer,1994.
[۳] R. Guo, Z. Yu, Y. Yang, X. Jiang, K. Sun, C. Wu, Z. Xu, and Z. Lan Effects of Bi2O3 on FMR linewidth and microwave dielectric properties of LiZnMn ferrite, Journal of alloys and compounds 589 (2014) 1-4.
[۴] A. Goldman, Modern ferrite technology, Springer Science & Business Media, 2006.
[۵] H. Widatallah, C. Johnson, F. Berry, E. Jartych, A. Gismelseed, M. Pekala, and J. Grabski On the synthesis and cation distribution of aluminum-substituted spinel-related lithium ferrite, Materials Letters 59 (2005) 1105-1109.

توضیحات: سلام و احترام. سپاس از حسن توجه داوران گرامی. بیان کلی مقاله ارایه شده برر سی عوامل معرفی شده و تاثیر هر یک ازآنها بر روی بهبود فریت لیتیوم میباشد.توضیحات کامل در مورد ساختار و خواص مغناطیسی و الکتریک فریت در مقاله مربوط به بیست و هفتمین گردهمایی ماده چگال زنجان ارایه داده شده است و از اوردن جملات تکراری پرهیز شده است و تنها به برسی عوامل تف جوشی و تاثیر انها جهت بهینه کردن خواص مغناطیسی و الکتریکی بیان شده است.

بررسی اثر مگنتوکالریک در منگنایت $La_{0.95}Sr_{0.05}MnO_3$

رفیعی، سلیمه؛ رستم نژادی، علی؛ قلی زاده، حجت

دانشکده الکتروسرام و مهندسی برق، دانشگاه صنعتی مالک اشتر، ایران

چکیده

در این تحقیق خواص مغناطیسی و اثر مگنتوکالریک در نمونه پودری منگنایت $La_{0.95}Sr_{0.05}MnO_3$ با اندازه‌گیری مغناطش بر حسب میدان اعمالی و در دماهای مختلف بررسی شده است. منحنی های آروت این ترکیب نشان دهنده گذار فاز مغناطیسی مرتبه دوم در دمای حدود ۱۷۰ کلوین است. بشترین مقدار اثر مگنتوکالریک در اطراف دمای گذار فاز پارامغناطیس-فرومغناطیس دیده می‌شود. میزان تغییر آنتروپی مغناطیسی با افزایش میدان مغناطیسی اعمالی افزایش می‌یابد و در میدان‌های مغناطیسی ۰٫۵، ۱، ۲، ۳، ۴ و ۵ تسلا به ترتیب به ۰/۶۲-، ۱/۱۹-، ۲/۱۲-، ۲/۹۰-، ۳/۶۰- و ۴٫۳۲ J/kgK- می‌رسد. نتایج به دست آمده نشان می‌دهد که این ترکیب گزینه مناسبی برای سرد سازی مغناطیسی در دماهای کمتر از ۲۰۰ کلوین است.

واژه های کلیدی: *اثر مگنتوکالریک، منگنایت، تغییر آنتروپی مغناطیسی، منحنی‌های آروت.*

Study of magnetocaloric effect on $La_{0.95}Sr_{0.05}MnO_3$ manganite

Rafiei, Salime; Rostamnejadi, Ali; Gholizade, Hojjat

Department of Electroceramics and Electrical Engineering, Malek Ashtar University of Technology, Iran.

Abstract

In this research, the magnetic properties and magnetocaloric effect in $La_{0.95}Sr_{0.05}MnO_3$ manganite powder sample is investigated by measuring the magnetization versus applied field and at different temperatures. The Arrott plot curves of the sample represent a second-order magnetic phase transition at a temperature of about 170 Kelvin. The maximum magnetic entropy change is observed around the paramagnetic-ferromagnetic phase transition temperature. The change of magnetic entropy increases with applied magnetic field and reaches the values of -0.62, -1.19, -2.12 -2.90, -3.60 and -4.32 J / kgK, for 0.5, 1, 2, 3, 4 and 5 Tesla, respectively. The obtained results show that this compound is a good candidate for magnetic cooling at temperatures below 200 Kelvin.

Keywords: Magnetocaloric effect, Manganite, Change of magnetic entropy, Arrott plot curves.

PACS No. 75

مقدمه

اعمال میدان مغناطیسی به مواد مغناطیسی باعث تغییر آنتروپی آنها می‌شود. اگر اعمال و یا برداشتن میدان مغناطیسی بصورت بی‌دررو باشد، دمای آنها تغییر می‌کند که به آن اثر مگنتوکالریک گفته می‌شود و اساس کار سرد کننده‌های مغناطیسی است[۱]. فناوری سردسازی مغناطیسی به دلیل برتری بالقوه آن از نظر سازگاری با محیط زیست و صرفه جویی در مصرف انرژی نسبت به سردسازی چرخه‌های تراکم گازی توجه زیادی را به خود جلب کرده است. این فناوری از انتشار گازهای گلخانه‌ای تا حد زیادی جلوگیری خواهد کرد. در مواد مغناطیسی با گذار مرتبه اول و دوم، تغییر زیاد مغناطش باعث تغییر آنتروپی مغناطیسی قابل توجه در اطراف دمای گذار فاز می‌شود. هنگامی که یک نمونه در معرض میدان مغناطیسی قرار می‌گیرد، حالت مغناطیسی نمونه و همچنین نظم ساختاری آن تغییر می‌کند که موجب تغییر آنتروپی مغناطیسی

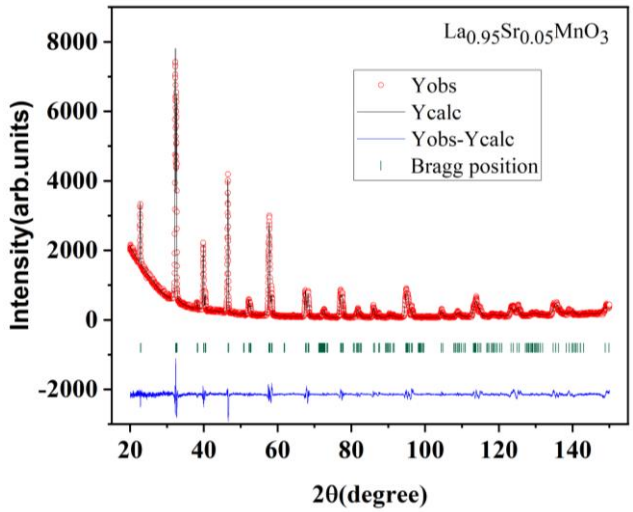
می‌شود [۱]. منگنایت‌ها گزینه‌ی خوبی برای سردکننده‌های مغناطیسی در دماهای مختلف هستند[۲-۴]. اثر مگنتوکالریک در منگنایت‌ها در دمای گذارشان قابل رقابت با مقدار آن در سایر مواد مغناطیسی مثل فلز گادولونیوم است. همچنین پایداری شیمیایی بالا، سهولت در تنظیم دمای کوری، روش‌های آماده سازی ساده، هزینه‌ی کم و پسماند گرمایی و مغناطیسی ناچیز از مزایای منگنایت‌ها برای سردسازی است[۵]. در این تحقیق از اندازه‌گیری مغناطش dc برای مطالعه‌ی اثر مگنتوکالریک نمونه‌ی پودری منگنایت $La_{0.95}Sr_{0.05}MnO_3$ استفاده شده است که در اطراف دمای گذار فاز مرتبه دوم تغییر آنتروپی بزرگ مشاهده می‌شود.

آزمایش

نمونه‌های پودری ترکیب $La_{0.95}Sr_{0.05}MnO_3$ با استفاده از روش سل ژل تهیه شده است. ابتدا مقادیر مناسب از مواد اولیه $La(NO_3)_3.6H_2O$ $Mn(NO_3)_2.4H_2O$، $Sr(NO_3)$، اتیلن گلیکول و اسید سیتریک با نسبت مولی۱:۴:۳ در آب حل شدند. با حرارت دهی و هم زدن محلول در دمای حدود ۸۰ ºC ژل تشکیل و سپس خشک شد. پودر حاصل در دمای ۱۰۰۰ ºC به مدت ۵ ساعت حرارت دهی شد. ویژگی‌های ساختاری نمونه با پراش اشعه ایکس با استفاده از پراش سنج اشعه ایکس مدل Philips X'Pert PRO مجهز به منبع پرتوی Cu-Ka با طول موج (λ=۱٫۵۴۰۶Å) مورد بررسی قرار گرفته است. اندازه‌گیری مغناطش بر حسب میدان مغناطیسی و در دماهای مختلف با استفاده از مغناطیس سنج SQUID انجام شده است.

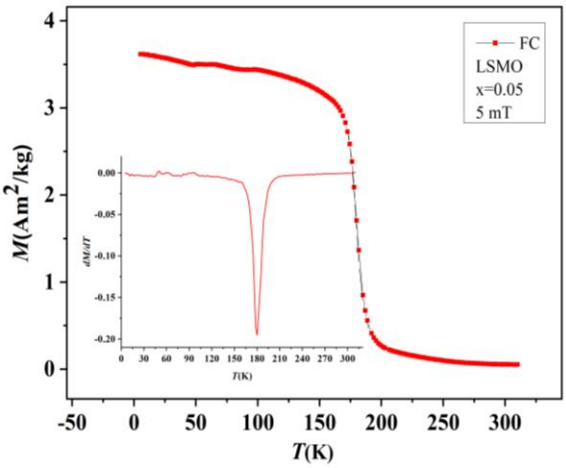
نتایج و تحلیل آن‌ها

طرح پراش اشعه ایکس نمونه همراه با تحلیل ریتولد آن با استفاده از نرم افزارFULLPROF در شکل۱ نمایش داده شده است. از این شکل دیده می‌شود که نمونه در دمای اتاق به صورت تک فاز و بدون فاز ثانویه با ساختار بلوری رومبوهدرال و گروه فضایی R-3C و پارامترهای شبکه a=۵٫۵۴۰۵Å و c=۱۳٫۳۸۷۹Å تشکیل شده است. شکل۲ مغناطش نمونه برحسب دما را در میدان مغناطیسی ثابت ۵ mT را نشان می‌دهد. در این شکل گذار فاز پارامغناطیس به فرومغناطیس نمونه در دمای ۱۷۸ K مشاهده می‌شود. نمودار داخلی شکل ۲ مشتق دمایی مغناطش را نمایش می‌دهد. محدوده‌ای که در آن کمینه رخ می‌دهد دمای گذار را نشان می‌دهد.به منظور ارزیابی ویژگی‌های مگنتوکالریک منحنی‌های مغناطش نمونه در محدوده‌ی میدان مغناطیسی T ۵-۰ در دماهای مختلف اندازه‌گیری شده است.



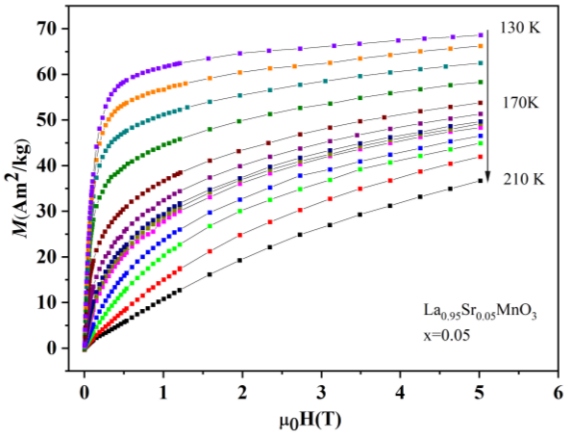
شکل۱: الگوی پراش پرتوی ایکس به همراه تحلیل ریتولد $La_{0.95}Sr_{0.05}MnO_3$.

شکل۳ مغناطش نمونه بر حسب میدان مغناطیسی در دماهای مختلف را نشان می‌دهد. از این شکل دیده می‌شود که مغناطش در دماهای کمتر از دمای کوری، با افزایش میدان مغناطیسی اعمالی تا ۵ تسلا به سمت اشباع شدن پیش می‌رود.



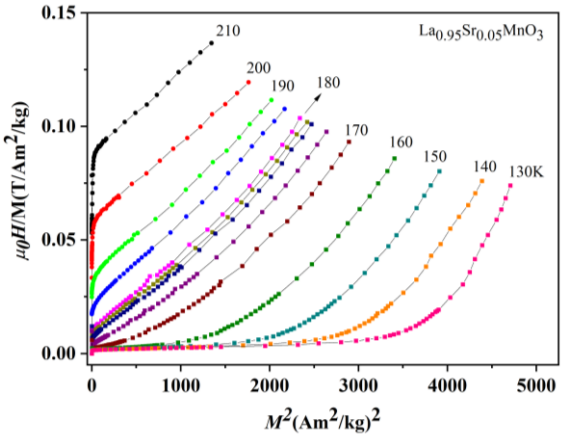
شکل۲: مغناطشFC نمونه بر حسب دما و مشتق دمایی آن.

شکل۴ منحنی‌های آروت نمونه (μ_0H/M -M^2) را نشان می‌دهد. مطابق با معیار بانرجی، شیب این منحنی‌ها مرتبه‌ی گذار فاز مغناطیسی نمونه را نشان می‌دهد[۶]. شیب مثبت در اطراف دمای گذار فاز نشان دهنده گذار فاز مرتبه دوم و شیب منفی نشان دهنده‌ی گذار فاز مرتبه اول است. بنابراین شیب مثبت مشاهده شده در شکل ۴ گذار فاز مرتبه دوم فرومغناطیس- پارامغناطیس در نمونه را نشان می‌دهد. همچنین خطی و موازی بودن منحنی های آروت در دماهای نزدیک به گذار فاز و در ناحیه‌ی میدان بالا خطی نشان دهنده پیروی رفتار مغناطیسی از مدل میدان میانگین است[۶].



شکل۳ : مغناطش نمونه بر حسب میدان مغناطیسی در دماهای مختلف.

با توجه به شکل۴ می‌توان مشاهده کرد که منحنی‌های آروت این نمونه خطی و موازی نیستند و این مدل نمی‌تواند در مورد این نمونه به کار برده شود.

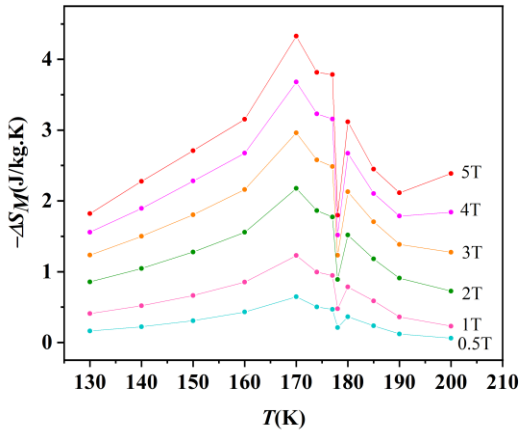


شکل۴: منحنی آروت (μ_0H/M -M^2) نمونه در دماهای مختلف.

اثر مگنتوکالریک را می‌توان به چند روش مستقیم و غیر مستقیم بدست آورد. روش کالریمتری[۷] و گرماسنجی[۸] که به ترتیب منجر به تعیین مستقیم تغییر دمای بی‌دررو و تغییر آنتروپی مغناطیسی می‌شود. در روش غیر مستقیم از ظرفیت گرمایی به عنوان تابعی از دما که در میدان‌های مغناطیسی و فشار ثابت اندازه گیری شده، استفاده می‌شود و سپس می‌توان تغییر دمای بی‌دررو و تغییر آنتروپی مغناطیسی را از آن استخراج کرد[۹]. در یک روش غیر مستقیم دیگر می‌توان با اندازه‌گیری مغناطش و استفاده از روابط ترمودینامیکی ماکسول به بررسی اثر مگنتوکالریک و تعیین دمای بی‌دررو و تغییر آنتروپی پرداخت[۳]. با رابطه زیر می‌توان تغییر آنتروپی مغناطیسی را تعیین کرد:

$$\Delta S_M(T,\Delta H) = \int_0^H \mu_0 \frac{\partial M(T,H)}{\partial T} dH \qquad (۱)$$

در این رابطه μ_0 نفوذپذیری مغناطیسی خلأ و $\Delta H = H - H_0$ است که در محاسبه $H_0 = 0$ قرار می‌دهیم و M(T,H) مغناطش در دما و میدان اعمالی است. شکل ۵ نمودار تغییر آنتروپی مغناطیسی نمونه بر حسب دما در میدان‌های مختلف مغناطیسی را نشان می‌دهد. مقدار بیشینه‌ی تغییر آنتروپی نمونه برای تغییر میدان مغناطیسی به ترتیب ۰٫۵، ۱، ۲، ۳، ۴ و ۵ تسلا به ترتیب ۰٫۶۲-، ۱٫۱۹-، ۲٫۱۲-، ۲٫۹۰-، ۳٫۶۰- و ۴٫۳۲ J/kg.K- است. همانطور که انتظار می‌رود مقدار بیشینه‌ی تغییر آنتروپی دراطراف دمای گذار فرومغناطیس- پارامغناطیس رخ می‌دهد و با افزایش میدان، تغییر آنتروپی مغناطیسی شدت می‌یابد.



شکل ۵: تغییر آنتروپی مغناطیسی نمونه بر حسب دما در میدان‌های مختلف.

همانطور که در نمودار شکل ۵ مشخص است شاهد دو بیشینه‌ی تغییر آنتروپی مغناطیسی هستیم که یکی از بیشینه‌ها در محدوده دمای کوری نمونه است. این می‌تواند نشان از دو فاز بودن نمونه در دماهای پایین‌تر از دمای اتاق باشد. در جدول۱ مقایسه‌ی مختصری بین ترکیب $La_{0.95}Sr_{0.05}MnO_3$ و منگنایت‌های نزدیک به این ترکیب انجام شده است. این جدول نشان می‌دهد ترکیب مورد مطالعه، تغییر آنتروپی بزرگتری نسبت به دو ترکیب دیگر از خود نشان می‌دهد. بطور کلی تغییر آنتروپی بزرگ در منگنایت‌های پروسکایتی عمدتاً ناشی از تغییر شدید مغناطش در دماهای نزدیک به دمای گذار است. وجود یون‌های Mn^{3+} و Mn^{4+} در ساختار پروسکایتی باعث بوجود آمدن برهمکنش تبادلی دوگانه و ایجاد نظم فرومغناطیسی در آنها می شود. علاوه بر این برهمکنش اسپین- شبکه نیز در فرایند نظم مغناطیسی مؤثر است که می‌تواند تغییر آنتروپی مغناطیسی را افزایش دهد.

جدول:۱ مقایسه‌ی ویژگی‌های مگنتوکالریک ترکیب $La_{0.95}Sr_{0.05}MnO_3$ با چند ترکیب منگنایتی.

ترکیب	T_C(K)	$\lvert-\Delta S_M\rvert$(J/kg.K)	$\mu_0\Delta H$(T)	مرجع
$La_{0.95}Sr_{0.05}MnO_3$	۱۷۸	۴٫۳۲	۵	این مقاله
$La_{0.9}Sr_{0.1}MnO_3$	۱۱۸	۲٫۱۶	۷	[۱۰]
$La_{0.9}Sr_{0.1}MnO_3$	۲۱۰	۳٫۷	۵	[۱۱]

نتیجه گیری

نتایج این بررسی نشان می‌دهد که ترکیب $La_{0.95}Sr_{0.05}MnO_3$ دارای گذار فاز مرتبه‌ی دو پارامغناطیس-فرومغناطیس در دمای حدود ۱۷۸ K است. در محدوده دمای گذار تغییر آنتروپی بزرگی مشاهده می‌شود که قابل رقابت با منگنایت‌های دیگر است. علاوه بر این، پایداری شیمیایی، آماده‌سازی ساده، هزینه کم، مقاومت الکتریکی بالا و دمای گذار فاز قابل تنظیم، پارامترهای مهم دیگری هستند که نشان می‌دهند $La_{0.95}Sr_{0.05}MnO_3$ می‌تواند به عنوان یک کاندیدای خوب برای سردسازی مغناطیسی در دماهای کمتر از ۲۰۰ کلوین و در میدان‌های مغناطیسی میانی در نظر گرفته شود.

سپاسگزاری

از آقای پروفسور مایکل کویی و همکارانش در دانشگاه ترینیتی کالج دوبلین ایرلند برای استفاده از امکانات آزمایشگاهی و کمک به انجام این پژوهش صمیمانه تشکر می‌شود.

مراجع

[۱] V. Korolev, A. Romanov, and I. Aref'ev, "Magnetocaloric effect and heat capacity of ferrimagnetic nanosystems: Magnetite-based magnetic liquids and suspensions", *Russian journal of physical chemistry*, vol. 80, no. 3, pp. 464-466, 2006.
[۲] A. M. Tishin and Y. I. Spichkin, *The magnetocaloric effect and its applications*. CRC Press, 2016.
[۳] K. A. GschneidnerJr, V. Pecharsky, and A. Tsokol, "Recent developments in magnetocaloric materials", *Reports on progress in physics*, vol. 68, no. 6, p. 1479, 2005.
[۴] M.-H. Phan and S.-C. Yu, "Review of the magnetocaloric effect in manganite materials", *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, vol. 308, no. 2, pp. 325-340, 2007.
[۵] S. Y. Dan'Kov, A. Tishin, V. Pecharsky, and K. Gschneidner, "Magnetic phase transitions and the magnetothermal properties of gadolinium", *Physical Review B*, vol. 57, no. 6, p. 3478, 1998.
[۶] J. Mira, J. Rivas, F. Rivadulla, C. Vázquez-Vázquez, and M. López-Quintela ",Change from first-to second-order magnetic phase transition in La 3/2 (C a, S r) 1/3 MnO 3 perovskites," *Physical Review B*, vol. 60, no. 5, p. 2998, 1999.
[۷] E. Palacios, G. Wang, R. Burriel, V. Provenzano, and R. D. Shull, "Direct measurement of the magnetocaloric effect in Gd5Si2Ge1. 9Ga0. 1", in *Journal of Physics :Conference Series*, 2010, vol. 200, no. 9: IOP Publishing, p. 092011 .
[۸] M. Balli *et al.*, "Direct measurement of the magnetocaloric effect on La (Fe 13− x− y Co y) Si x compounds near room temperature", *Journal of Applied Physics*, vol. 106, no. 2, p. 02 ,3902,2009.
[۹] V. Pecharsky and K. Gschneidner Jr, "Magnetocaloric effect from indirect measurements: Magnetization and heat capacity", *Journal of Applied Physics*, vol. 86, no. 1, pp. 565-575, 1999.
[۱۰]X. Jin *et al.*, "Magnetic properties and magnetic entropy changes of Eu-doped La0. 9Sr0. 1MnO3 perovskite manganese oxides", *Journal of Low Temperature Physics*, vol. 195, no. 5, pp. 403-418, 2019.
[۱۱]H. Baaziz, A. Tozri, E. Dhahri, and E. Hlil, "Effect of particle size reduction on the magnetic phase transition and the magnetocaloric properties in ferromagnetic insulator La0. 9Sr0. 1MnO3 nanoparticles", *Chemical Physics Letters*, vol. 625, pp. 168-173, 2015.

بررسی ویژگی‌های ساختاری و مغناطیسی نانوذرات فریت نیکل-آلومینیوم تهیه شده به روش سل-ژل خوداحتراقی

حدادی، حسین؛ سرحدی، رضا؛ حضرتی سعدآبادی، مرضیه

گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه بیرجند، بیرجند

چکیده

در این پژوهش نانوذرات فریت نیکل-آلومینیوم $NiFe_{2-x}Al_xO_4$ (۱، ۰/۷۵، ۰/۵، ۰/۲۵، ۰ = x) با استفاده از روش سل-ژل خود احتراقی تهیه و توسط پراش‌سنج پرتو ایکس (XRD)، میکروسکوپ الکترونی روبشی انتشار میدانی (FESEM) و مغناطیس سنج نمونه نوسانی (VSM) مشخصه‌یابی شده‌اند. نتایج آنالیز XRD، شکل‌گیری فاز اسپینل مکعبی با گروه فضایی Fd3m را برای تمامی نمونه‌ها نشان می‌دهد. پارامتر شبکه و اندازه بلورک با افزایش مقدار آلومینیوم به ترتیب از ۸/۳۴ به ۸/۲۰ آنگستروم و از ۷۱ به ۵۲ نانومتر کاهش می‌یابد. مشخصه‌یابی مغناطیسی نشان می‌دهد که با افزایش مقدار یون آلومینیوم، مقدار مغناطش اشباع (M_s) به طور پیوسته کاهش و میدان وارندگی (H_c) افزایش می‌یابد.

واژه های کلیدی: *فریت نیکل-آلومینیوم، سل-ژل، مغناطش اشباع*

Investigation of structural and magnetic properties of nickel-aluminum ferrite nanoparticles synthesized by sol-gel auto-combustion method

Haddadi, Hossein; Sarhaddi, Reza; Hazrati Saadabadi, Marzieh

Department of Physics, Faculty of Sciences, University of Birjand, Birjand

Abstract

In this research, nickel-aluminum ferrite nanoparticles $NiFe_{2-x}Al_xO_4$ (x = 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1) ferrite were synthesized by the sol–gel auto-combustion method and have been identified by X-ray diffractometer (XRD), Field-emission Scanning Electron Microscope (FESEM), and vibrating sample magnetometer (VSM). The results of XRD analysis show the formation of a cubic spinel phase with the space group Fd3m for all samples. The lattice parameter and crystallite size decrease with increasing nickel content from 8.34 to 8.20 Å and 71 to 52 nm, respectively. Magnetic characterization shows that with increase in Al^{3+} content x, saturation magnetization monotonously decreases and coercivity field increases.

***Keywords**: Nickel-aluminum ferrite, Sol-gel, Saturation magnetization*

PACS No. 75, 81

مقدمه

در سال‌های اخیر، نانوذرات فریت اسپینلی به واسطه خواص الکتریکی و مغناطیسی منحصر به فرد، مورد توجه ویژه پژوهشگران و دانشمندان قرار گرفته است [۱]. در بین فریت‌های اسپینل، فریت نیکل با فرمول استکیومتری $NiFe_2O_4$ از جمله اکسیدهای مغناطیسی است که به دلیل مقاومت الکتریکی بالا و تلفات مغناطیسی کم، کاربردهای فراوانی در حوزه‌های الکترونیک و پزشکی از جمله قطعات مایکروویو، ادوات ضبط مغناطیسی، حسگرهای گازی، داروسازی هدفمند و سیالات مغناطیسی، پیدا کرده است [۲,۳]. افزودن آلومینیوم به فریت نیکل، باعث افزایش مقاومت الکتریکی و در نتیجه کاهش اتلاف دی الکتریکی و همچنین کاهش میزان اشباع مغناطیسی آن می‌شود. در این پژوهش،

از روش سل-ژل خوداحتراقی برای تهیه نانوذرات فریت نیکل-آلومینیوم ($NiFe_{2-x}Al_xO_4$, x=0, 0.25, 0.5, 0.75, 1) استفاده شده است.

روش ساخت

برای تهیه نانوذرات فریت نیکل آلائیده شده با آلومینیوم، در ابتدا مقادیر لازم از نیترات آهن ($Fe(NO_3)_3.9H_2O$)، نیترات نیکل ($Ni(NO_3)_2.6H_2O$) و نیترات آلومینیوم ($Al(NO_3)_3.9H_2O$) در آب دیونیزه حل شد. سپس، اسید سیتریک با نسبت مولی ۳ برابر مجموع نیترات‌های فلزی به محلول اضافه شد. در ادامه و با هدف خنثی شدن محلول (pH=۷)، آمونیاک به صورت قطره قطره به محلول اضافه شد. محلول در دمای ۸۰ °C حرارت‌دهی شده تا به ژل چسبناکی تبدیل شود. در ادامه جهت خشک شدن و سوختن ژل، آنرا داخل آون در دمای ۲۲۰ °C قرار می‌دهیم. در نهایت، ژل خشک شده داخل هاون آسیاب شده و جهت کلسینه شدن به مدت ۲ ساعت داخل کوره در دمای ۸۰۰°C، حرارت داده شد.

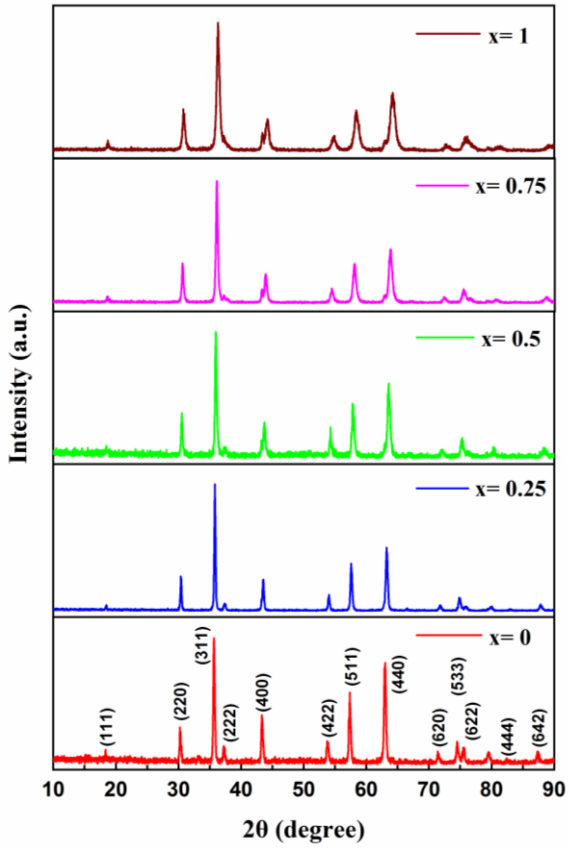
نتایج و بحث

در شکل ۱، الگوی پراش اشعه ایکس نانوذرات فریت نیکل-آلومینیوم ($NiFe_{2-x}Al_xO_4$, x=0, 0.25, 0.5, 0.75, 1) نشان داده شده است. تحلیل قله‌های ظاهر شده در الگوی پراش نمونه‌ها با استفاده از نرم افزار X-Pert Plus، تطابق الگوی شکل‌گرفته را با کارت استاندارد شماره ۰۳۲۵-۱۰ نشان می‌دهد. بر این اساس، ساختار بلوری نانوذرات، اسپینل مکعبی بوده و دارای گروه فضایی Fd3m (شماره گروه فضایی ۲۲۷) می‌باشد. برای مقادیر x بیشتر از ۰/۵، دو قله ضعیف در نزدیکی قله‌های (۴۰۰) و (۴۴۰)، ظاهر شده که مربوط به اکسید نیکل (شماره کارت ۱۰۴۹-۴۷) می‌باشند. ضمناً با افزایش ناخالصی آلومینیوم، از یک طرف پهنای قله‌ها پهن-تر شده و تعدادی از قله‌های ضعیف‌تر از بین می‌روند و از طرف دیگر، مکان قله‌ها به سمت زوایای بزرگ‌تر، شیفت پیدا می‌کند. با توجه به قله با بیشینه شدت (قله ارجح (۳۱۱))، پارامترهای ساختاری شامل ثابت شبکه (a)، حجم سلول واحد (V)، اندازه بلورک (D) و چگالی اشعه ایکس (ρ_x) محاسبه شد (جدول ۱).

برای برآورد اندازه بلورک (D)، از رابطه شرر ($D=0.94\lambda/\beta\cos\theta$) استفاده شده است که در این رابطه، λ طول موج اشعه ایکس، θ زاویه پراش و β پهنای پیک ماکزیمم در نصف ارتفاع می‌باشد. چگالی اشعه ایکس نیز با استفاده از رابطه ۱ محاسبه شده است:

$$\rho_x = \frac{8M}{N_a a^3} \qquad (۱)$$

که در آن M جرم مولی، N_a عدد آووگادرو و a^3 حجم سلول واحد است. عدد ۸ در صورت کسر، تعداد مولکول‌ها در سلول واحد ساختار اسپینلی مکعبی است.



شکل ۱: الگوی XRD نانوذرات $NiFe_{2-x}Al_xO_4$ (۱، ۰/۷۵، ۰/۵، ۰/۲۵، ۰ = x)

جدول ۱: ثابت شبکه، حجم سلول واحد، اندازه بلورک و چگالی اشعه ایکس نانوذرات $NiFe_{2-x}Al_xO_4$ (۱، ۰/۷۵، ۰/۵، ۰/۲۵، ۰ = x)

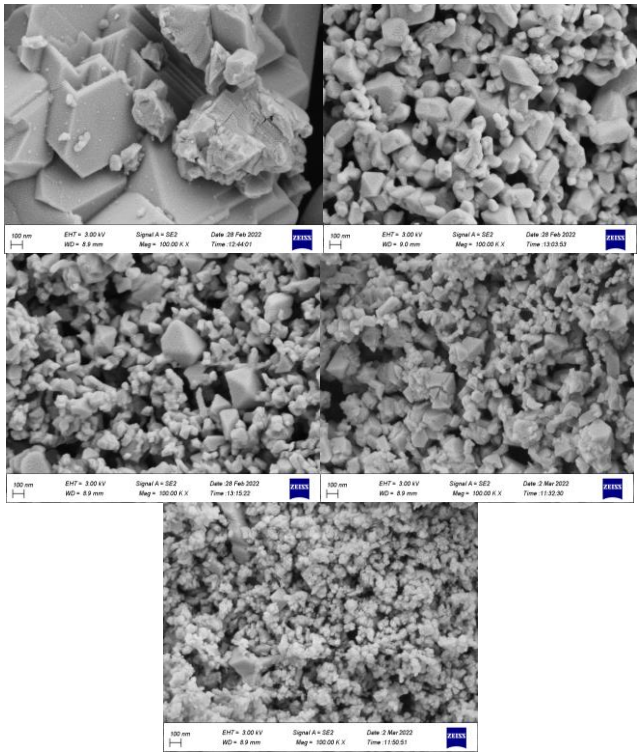
x	a (Å)	V (Å^3)	D (nm)	ρ_x (g/cm^3)
۰	۸/۳۴	۵۸۰/۸۷	۷۱/۰۲	۵/۳۶
۰/۲۵	۸/۳۱	۵۷۴/۷۴	۶۹/۴۰	۵/۲۵
۰/۵	۸/۲۸	۵۶۷/۴۰	۶۷/۱۲	۵/۱۵
۰/۷۵	۸/۲۴	۵۶۰/۰۳	۵۷/۳۹	۵/۰۵
۱	۸/۲۰	۵۵۱/۷۶	۵۲/۳۳	۴/۹۵

با افزایش مقدار آلومینیوم، ثابت شبکه و حجم سلول واحد فریت نیکل به طور پیوسته کاهش می‌یابد که به علت کوچکتر بودن شعاع یونی یون‌های آلومینیوم (۰/۵۶ آنگستروم) نسبت به یون‌های آهن (۰/۶۷ آنگستروم) می‌باشد. در واقع، جایگزینی یون‌های آلومینیوم به جای یون‌های آهن، باعث انقباض شبکه شده و ثابت شبکه کریستالی را کاهش می‌دهد.

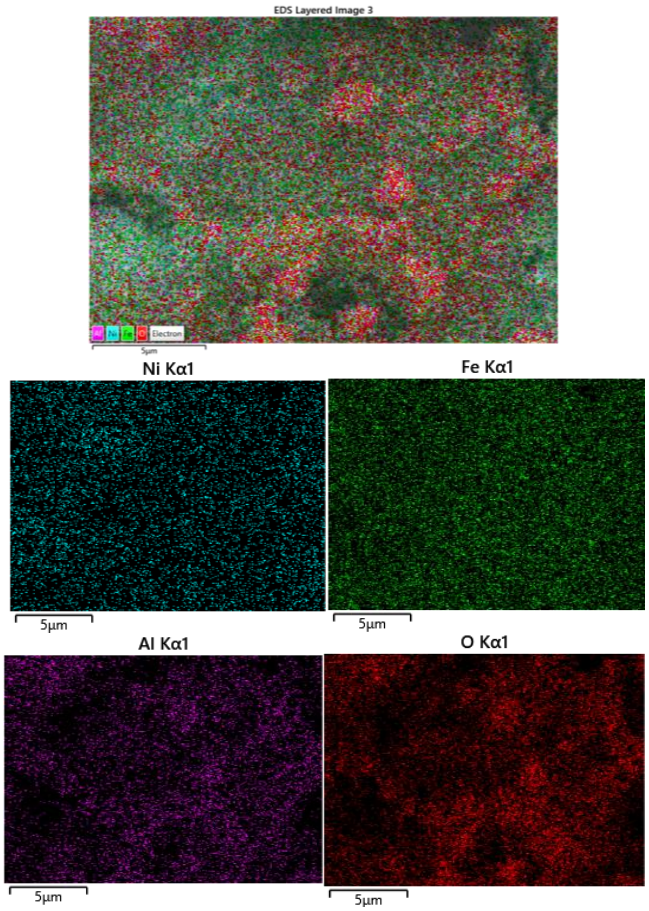
همچنین با افزایش مقدار آلومینیوم، اندازه بلورک و چگالی اشعه ایکس نانوذرات نیز کاهش می‌یابد. با افزایش یون Al^{3+}، شدت قله ارجح (۳۱۱) کاهش و پهنای آن افزایش می‌یابد که نتیجه آن، کاهش اندازه بلورک در نمونه‌ها است. از طرف دیگر، هر دو پارامتر حجم شبکه و جرم مولکولی نیز با افزایش مقدار آلومینیوم، کاهش می‌یابد. اما با توجه به اینکه اثر کاهش جرم مولکولی بر کاهش ثابت شبکه غلبه می‌کند، مقدار چگالی اشعه ایکس نمونه‌ها کاهش می‌یابد.

تصاویر FESEM نانوذرات فریت نیکل-آلومینیوم، در شکل ۲ نشان داده شده است. محدوده اندازه نانوذرات در بازه ۵۵۰-۲۰ نانومتر می‌باشد. ضمناً همانطور که مشاهده می‌شود با افزایش مقدار Al^{3+}، اندازه ذرات کاهش پیدا کرده که در توافق با روند تغییرات اندازه بلورک‌ها است. برای نمونه فریت نیکل (x = ۰)، ذرات شکل چند وجهی دارند در حالیکه با افزایش مقدار آلومینیوم، ذرات تغییر شکل داده و از نظر اندازه، همگن‌تر می‌شوند.

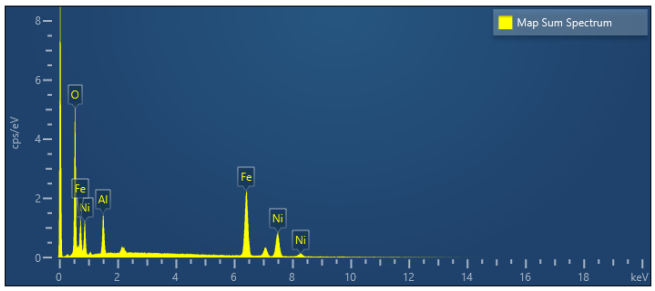
توزیع فراوانی عناصر تشکیل دهنده فریت نیکل-آلومینیوم نیز با استفاده از آنالیز EDX-MAP بدست آمد. به عنوان مثال، نتایج طیف EDX و فراوانی عناصر برای نمونه x = ۰/۵، به ترتیب در شکل‌های ۳ و ٤ نشان داده شده است. تصاویر شکل ٤، وجود عناصر آهن، نیکل، آلومینیوم و اکسیژن را در نمونه نشان می‌دهند که به طور یکنواخت، پراکنده شده‌اند. ضمناً بر اساس مقادیر کمی بدست آمده توسط آنالیز EDX، فرمول استکیومتری تجربی نمونه x = ۰/۵، به صورت $Ni_{1.05}Fe_{1.67}Al_{0.4}O_{3.88}$ بدست آمد که به فرمول استکیومتری اسمی $NiFe_{1.5}Al_{0.5}O_4$ نزدیک است.



شکل ۲: تصاویر FESEM نانوذرات $NiFe_{2-x}Al_xO_4$



شکل ۳: توزیع عناصر در نمونه $NiFe_{1.5}Al_{0.5}O_4$

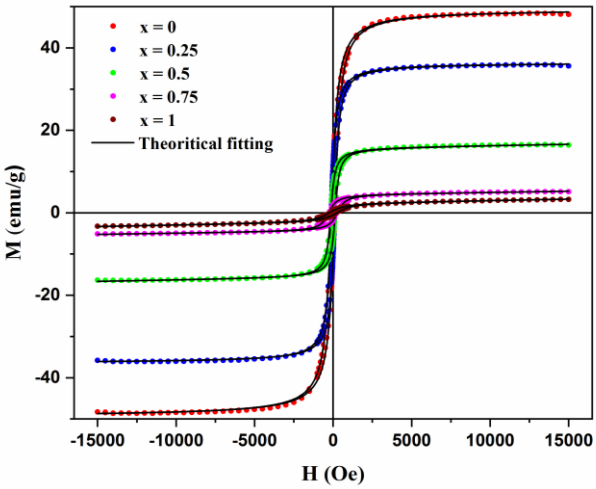


شکل ٤: طیف EDX نمونه $NiFe_{1.5}Al_{0.5}O_4$

در شکل ۵، منحنی‌های پسماند مغناطیسی نانوذرات فریت نیکل-آلومینیوم نشان داده شده است. برای تعیین پارامترهای مغناطیسی (مغناطش اشباع (M_s)، مغناطش باقی‌مانده (M_r)، میدان وادارندگی (H_c)) از تابع برازش زیر استفاده شد [٤]:

$$M(H) = 2\frac{M_s}{\pi}\tan^{-1}\left[\frac{H \pm H_c}{H_c}\tan\left\{\frac{\pi M_r}{2M_s}\right\}\right] + \chi H \qquad (۲)$$

پارامترهای مغناطیسی بدست آمده در جدول ۲ آورده شده است.



شکل۵: منحنی پسماند مغناطیسی نانوذرات $NiFe_{2-x}Al_xO_4$

جدول ۲: کمیت‌های مغناطیسی نانوذرات $NiFe_{2-x}Al_xO_4$

M_r/M_s	H_c (Oe)	M_r (emu/g)	M_s (emu/g)	x
۰/۲۰٦۷	۱۰۲/۳۵	۱۰/۱٤	٤۹/۰۷	۰
۰/۲۹۲۸	۱۰٤/۷۹	۱۰/۵۹	۳٦/۱۷	۰/۲۵
۰/۳۹۵۹	۱۳۹/۷٤	٦/۲۸	۱۵/۸۷	۰/۵
۰/٤۰۵۷	۲۷۷/٤۰	۱/۸٤	٤/۵۵	۰/۷۵
۰/۲۲۳۳	۲۵۹/٤۹	۰/۵٤	۲/٤۳	۱

همانطور که مشاهده می‌شود با افزایش مقدار آلومینیوم، مغناطش اشباع نانوذرات به طور پیوسته کاهش می‌یابد که به دلیل کاهش برهم‌کنش ابرتبادلی ناشی از جایگزینی یون‌های Al^{3+} (یون دیامغناطیس) به جای یون‌های Fe^{3+} در مکان‌های هشت‌وجهی ساختار اسپینلی است [۵]. مقادیر نسبت مربعی M_r/M_s نانوذرات کمتر از ۰/۵ بدست آمده است. این مقادیر از یک طرف، نشان می‌دهد برهمکنش‌های ذرات مغناطیسی در نانوذرات فریت نیکل-آلومینیوم، از نوع مغناطواستاتیکی است و از طرف دیگر، موید ساختارهای مغناطیسی چندحوزه‌ای نانوذرات است [۵]. از طرفی، میدان وادارندگی نانوذرات با افزایش آلومینیوم، افزایش می‌یابد. دلیل این تغییرات را می‌توان با رابطه ۳ توجیه کرد. بر اساس این رابطه، میدان وادارندگی، رابطه عکس با مغناطش اشباع دارد.

$$H_c = \frac{0.96\,K}{M_s} \qquad (۳)$$

در این رابطه، H_c میدان وادارندگی، M_s مغناطش اشباع و K ثابت ناهمسانگردی مغناطیسی است.

نتیجه‌گیری

در این تحقیق نانوذرات فریت نیکل-آلومینیوم به روش سل-ژل خود احتراقی سنتز شد. نتایج XRD، شکل‌گیری ساختار تک فاز اسپینل مکعبی را برای همه نمونه‌ها نشان می‌دهد و مقادیر پارامتر شبکه، اندازه بلورک، چگالی پرتو ایکس با افزایش آلومینیوم، کاهش می‌یابد. با افزایش یون Al، مقادیر مغناطش اشباع کاهش و وادارندگی نانوذرات افزایش می‌یابد.

مرجع‌ها

[۱] Xian, G., Kong, S., Li, Q., Zhang, G., Zhou, N., Du, H., & Niu, L. (2020). Synthesis of spinel ferrite Mfe2O4 (M= Co, Cu, Mn, and Zn) for persulfate activation to remove aqueous organics: effects of m-site metal and synthetic method. Frontiers in chemistry, 8, 177.

[۲] Narang, S. B., & Pubby, K. (2021). Nickel spinel ferrites: a review. Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 519, 167163.

[۳] Nejati, K., & Zabihi, R. (2012). Preparation and magnetic properties of nano size nickel ferrite particles using hydrothermal method. Chemistry Central Journal, 6(1), 1-6.

[٤] Shah, L. R., Zhu, H., Wang, W. G., Ali, B., Zhu, T., Fan, X., & Xiao, J. Q. (2010). Effect of Zn interstitials on the magnetic and transport properties of bulk Co-doped ZnO. Journal of Physics D: Applied Physics, 43(3), 035002.

[۵] Shah, L. R., Zhu, H., Wang, W. G., Ali, B., Zhu, T., Fan, X., & Xiao, J. Q. (2010). Effect of Zn interstitials on the magnetic and transport properties of bulk Co-doped ZnO. Journal of Physics D: Applied Physics, 43(3), 035002.